

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2023年4月13日(13.04.2023)



(10) 国際公開番号
WO 2023/058519 A1

- (51) 国際特許分類:
G16C 60/00 (2019.01) *G06N 20/00* (2019.01)
- (21) 国際出願番号: PCT/JP2022/036163
- (22) 国際出願日: 2022年9月28日(28.09.2022)
- (25) 国際出願の言語: 日本語
- (26) 国際公開の言語: 日本語
- (30) 優先権データ:
特願 2021-163338 2021年10月4日(04.10.2021) JP
- (71) 出願人: 株式会社レゾナック (**RESONAC CORPORATION**) [JP/JP]; 〒1058518 東京都港区芝大門1丁目13番9号 Tokyo (JP).
- (72) 発明者: 李 海仁 (**LEE, Haicin**); 〒1058518 東京都港区芝大門1丁目13番9号 昭和電工株式会社内 Tokyo (JP). 南 拓也 (**MINAMI,**

Takuya); 〒1058518 東京都港区芝大門1丁目13番9号 昭和電工株式会社内 Tokyo (JP). 奥野 好成 (**OKUNO, Yoshishige**); 〒1058518 東京都港区芝大門1丁目13番9号 昭和電工株式会社内 Tokyo (JP).

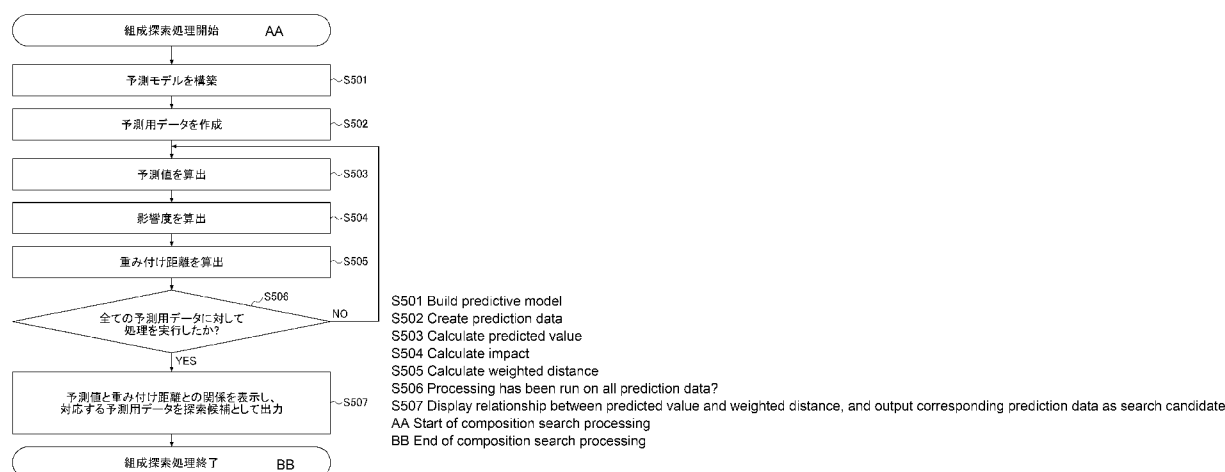
(74) 代理人: 伊東 忠重, 外 (**ITO, Tadashige et al.**); 〒1000005 東京都千代田区丸の内二丁目1番1号 丸の内 M Y P L A Z A (明治安田生命ビル) 16階 Tokyo (JP).

(81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CV, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IQ, IR, IS, IT, JM, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK,

(54) Title: COMPOSITION SEARCH METHOD

(54) 発明の名称: 組成探索方法

[図5]



(57) Abstract: The present invention enables more efficient searching for compositions which are for obtaining a target physical property value. This material composition search method comprises: a step for building a predictive model by training with learning data in which the explanatory variables are information pertaining to compositions of materials and the objective variables are physical property values of the materials; a step for calculating a predicted value of a physical property by inputting, to the predictive model, prediction data for searching anew for a composition; a step for using the learning data and the predictive model to calculate the impacts of each of the explanatory variables on prediction; a step for using the impacts to calculate a weighted distance of the prediction data with respect to the learning data; and a step for displaying a relationship between the predicted value and the weighted distance and also outputting corresponding prediction data as a search candidate.

WO 2023/058519 A1

LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW,
MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE,
PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD,
SE, SG, SK, SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT,
TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.

- (84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類：

一 国際調査報告 (条約第21条(3))

(57) 要約：目標の物性値を得るための組成をより効率的に探索する。材料の組成探索方法は、材料の組成に関する情報を説明変数とし、材料の物性値を目的変数とした学習用データを学習させて予測モデルを構築するステップと、新たに組成を探索するための予測用データを前記予測モデルに入力することで物性の予測値を算出するステップと、前記学習用データと前記予測モデルとを用いて各説明変数が予測に及ぼす影響度を算出するステップと、前記影響度を用いて、前記予測用データの前記学習用データに対する重み付け距離を算出するステップと、前記予測値と前記重み付け距離との関係を表示するとともに、対応する予測用データを探索候補として出力するステップと、を有する。

明 細 書

発明の名称：組成探索方法

技術分野

[0001] 本発明は、組成探索方法に関する。

背景技術

[0002] 材料設計においては、目的とする材料の物性値を得るためのパラメータ（組成又は組成比率、およびコストや製造条件などの制約条件）を求めることが必要である。従来は、経験的又は試行錯誤的に実験者がパラメータを求めることが多かった。しかし、パラメータの数が多い複雑な材料設計の場合には、目標の物性値を得るために多くの時間を要し、困難を極める。

[0003] このような従来の材料設計を改善すべく、近年、前述したパラメータと既知の物性値とが紐付けられた蓄積データを用いて機械学習を行うことで、最適なパラメータを求める技術が提案されている。

[0004] 一例として、下記特許文献1では、目的物質に関する物性値として最適値を与える複数のパラメータの値の組合せを探索するベイズモデルを生成し、探索空間においてベイズモデルを用いた組合せの探索を実行する最適化方法が提案されている。

[0005] また、下記非特許文献1では、予測モデルを用いた逐次的探索方法の一つであって、予測値と学習データとの距離を用いて次の候補点を決定し、モデルのハイパーパラメータを最適化する技術が提案されている。当該手法によれば、パラメータの探索において予測手法が限定されない。

[0006] また、他の一例として、下記特許文献2では、金属材料の設計パラメータから物性値を予測する予測モデルを用いて、所望の物性が得られるパラメータを探索する際、異なる複数の学習データセットに基づく複数の予測値のばらつきが低減するように設計条件を探索すること、及び、パラメータと過去の実績データにおけるパラメータとの差が増加するように、過去の実績データとは異なる新たな領域を含めてパラメータを探索すること、等が提案され

ている。

先行技術文献

特許文献

[0007] 特許文献1：特開2020-187642号公報

特許文献2：国際公開2010-152993号

非特許文献

[0008] 非特許文献1：DOI：arxiv-2101.02289

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0009] しかしながら、特許文献1開示の発明は、ベイズモデルが使用されており、最適化手法がガウス過程回帰に限定される。そのため、予測性能が高いと期待される他の予測手法（例えば、勾配ブースティング、ニューラルネットワークなど）を柔軟に用いることができず、予測手法が限定されるという問題がある。

[0010] 一方、非特許文献1記載の技術は、パラメータの探索において予測手法が限定されることはない。また、非特許文献1記載の技術の場合、予測モデルの精度を考慮しながら過去のパラメータと離れたパラメータを探索できるよう、学習データとの距離の項に過去のパラメータで検証した予測精度が重み付けされる。しかし、非特許文献1記載の技術の場合、重み付けは全パラメータに対して一律に行われ、目的変数と関係性が小さいパラメータも含めて一律に探索が行われる。そのため、最適なパラメータに到達するまでに時間がかかるという問題がある。

[0011] また、特許文献2開示の発明は、過去の実績データにおけるパラメータとの差が増加するよう、パラメータごとに重みをかけるように構成されているが、前記重みはユーザが判断して決めており、任意性があるため、探索が適切に行われるとは限られないという問題がある。

[0012] 本発明は、目標の物性値を得るための組成をより効率的に探索する組成探

索方法を提供することを目的とする。

課題を解決するための手段

[0013] 本発明は、以下に示す構成を備える。

[0014] [1] 材料の組成探索方法であって、材料の組成に関する情報を説明変数とし、材料の物性値を目的変数とした学習用データを学習させて予測モデルを構築するステップと、新たに組成を探索するための予測用データを前記予測モデルに入力することで物性の予測値を算出するステップと、前記学習用データと前記予測モデルとを用いて各説明変数が予測に及ぼす影響度を算出するステップと、前記影響度を用いて、前記予測用データの前記学習用データに対する重み付け距離を算出するステップと、前記予測値と前記重み付け距離との関係を表示するとともに、対応する予測用データを探索候補として出力するステップと、を有する組成探索方法。

[0015] [2] 前記重み付け距離を算出するステップにおいて、前記重み付け距離は0から1の間の値になるようにスケーリングされることを特徴とする、[1]に記載の組成探索方法。

[0016] [3] 前記予測用データは、予め設定した刻み幅や組成比の制約条件に従って網羅的に作成された、組成に関する情報の組み合わせであり、物性の予測値を算出するステップから重み付け距離を算出するステップまでを繰り返すことにより、前記予測値と前記重み付け距離との関係を表示するステップにおいて、算出された予測値と前記重み付け距離との関係を複数表示することを特徴とする、[1]または[2]に記載の組成探索方法。

[0017] [4] さらに、前記重み付け距離によって前記予測値をグループ分けするステップを有し、前記予測値と前記重み付け距離との関係を表示するステップにおいて、前記予測用データをグループに分けて出力する、[3]に記載の組成探索方法。

[0018] [5] 前記予測値と前記重み付け距離との関係を表示するステップにおいて、グループごとに、前記予測値の高い順に、対応する予測用データを探索候補として出力する、[4]に記載の組成探索方法。

[0019] [6] 前記グループ分けするステップにおいて、前記重み付け距離を0から1の間の所定の値で等分することでグループ分けする、[4]または[5]に記載の組成探索方法。

[0020] [7] 前記グループ分けするステップにおいて、分割後のグループ内の予測値の数が同じになるように、前記重み付け距離を0から1の間で分割することでグループ分けする、[4]または[5]に記載の組成探索方法。

[0021] [8] 前記予測値と前記重み付け距離との関係を表示するステップにおいて、

探索候補として出力する予測用データの数ユーザが設定する、[3]から[6]のいずれかに記載の組成探索方法。

[0022] [9] さらに、前記予測用データから計算された予測値と重み付け距離に対して、下記式(1)を用いて獲得関数 $Acq(X_i)$ を算出するステップを有し、

算出された獲得関数が高い順に、対応する予測用データを探索候補として出力するステップと、を有する[4]に記載の組成探索方法。

[0023] [数1]

$$Acq(X_i) = (1 - s_g) * f(X_i) + s_g * D_i \quad (0 \leq s_g \leq 1) \quad (1)$$

ここで、 X_i はi番目の予測用データ、 $f(X_i)$ は、0から1の間の値になるようにスケーリングされた、 X_i の予測値、 s_g はg番目のグループにおける重み係数、 D_i は X_i の重み付け距離である。

[0024] [10] 前記出力するステップにおいて探索候補として出力された予測用データの組成に関する情報に基づいて実験を行い、物性値を得るステップと、

得られた物性値と対応する組成に関する情報を前記学習用データに追加するステップとを、さらに有し、前記予測モデルを構築するステップにおいて、データが追加された学習用データを用いて予測モデルを構築する処理から

、前記物性値を得るステップにおいて、前記物性値を得るまでの処理を、得られる物性値が所定の目標値に到達するまで繰り返す、[3]に記載の組成探索方法。

発明の効果

[0025] 本開示によれば、目標の物性値を得るための組成をより効率的に探索することができる。

図面の簡単な説明

[0026] [図1]図1は、組成探索システムのシステム構成の一例を示す第1の図である。

[図2]図2は、学習装置及び予測装置のハードウェア構成の一例を示す図である。

[図3]図3は、学習用データ及び予測用データの一例を示す図である。

[図4]図4は、予測値と重み付け距離との関係を表示したグラフの一例を示す第1の図である。

[図5]図5は、組成探索処理の流れを示す第1のフローチャートである。

[図6]図6は、組成探索システムのシステム構成の一例を示す第2の図である。

[図7]図7は、予測値と重み付け距離との関係を表示したグラフの一例を示す第2の図である。

[図8]図8は、予測値と重み付け距離との関係を表示したグラフの一例を示す第3の図である。

[図9]図9は、組成探索処理の流れを示す第2のフローチャートである。

[図10]図10は、組成探索システムのシステム構成の一例を示す第3の図である。

[図11]図11は、組成探索処理の流れを示す第3のフローチャートである。

[図12]図12は、実施例と比較例の探索終了回数を示す図である。

発明を実施するための形態

[0027] 以下、各実施形態について添付の図面を参照しながら説明する。説明の理

解を容易にするため、各図面において同一の構成要素に対しては可能な限り同一の符号を付して、重複する説明は省略する。

[0028] [第1の実施形態]

第1の実施形態に係る組成探索方法は、材料の組成に関する情報を説明変数とし、材料の物性値を目的変数とした学習用データを学習させて予測モデルを構築するステップと、新たに組成を探索するための予測用データを前記予測モデルに入力することで物性の予測値を算出するステップと、前記学習用データと前記予測モデルとを用いて各説明変数が予測に及ぼす影響度を算出するステップと、前記影響度を用いて、前記予測用データの前記学習用データに対する重み付け距離を算出するステップと、前記予測値と前記重み付け距離との関係を表示するとともに、対応する予測用データを探索候補として出力するステップと、を有する。

[0029] なお、本明細書において、組成は、合金材料を構成する元素であってもよいし、有機材料や複合材料を構成する様々な原材料でもよい。また、本明細書では、組成に関する情報である原材料の種類・調製比率、特徴量などを原材料のパラメータともいう。以下、図1～図5を用いて、第1の実施形態に係る組成探索方法の詳細を説明する。

[0030] <組成探索システムのシステム構成>

はじめに、第1の実施形態に係る組成探索方法を実現する組成探索システムのシステム構成について、図3及び図4を参照しながら、図1を用いて説明する。図1は、組成探索システムのシステム構成の一例を示す第1の図である。図3は、学習用データ及び予測用データの一例を示す図である。図4は、予測値と重み付け距離との関係を表示したグラフの一例を示す第1の図である。

[0031] 図1に示すように、組成探索システム100は、学習装置110と予測装置120とを有する。

[0032] 学習装置110には、学習プログラムがインストールされており、当該プログラムが実行されることで、学習装置110は学習部112として機能す

る。

- [0033] 学習部 1 1 2 は、学習用データ格納部 1 1 1 に格納された学習用データを用いて、予測モデル（学習済みモデル）を構築する。本実施形態において、学習部 1 1 2 が予測モデルを構築する際に用いる学習用データには、複数の実験サンプルに対しての原材料のパラメータ（種類・調製比率、特徴量）と、測定された物性値との組が含まれる（図 3（A）参照）。
- [0034] また、本実施形態において、学習部 1 1 2 によって学習されるモデルには、ランダムフォレスト、ガウス過程回帰、ニューラルネットワーク、複数の手法を組み合わせたアンサンブル学習モデルなど、任意の手法が含まれる。
- [0035] なお、学習部 1 1 2 により構築された予測モデル（学習済みモデル）は、予測装置 1 2 0 の予測部 1 2 2 に設定される。
- [0036] 予測装置 1 2 0 には、予測プログラムがインストールされており、当該プログラムが実行されることで、予測装置 1 2 0 は、予測用データ生成部 1 2 1、予測部 1 2 2、表示部 1 2 3、影響度算出部 1 2 4、重み付け距離算出部 1 2 5 として機能する。
- [0037] 予測用データ生成部 1 2 1 は、予測用データを作成する。予測用データは、組成比率の上下限と刻み幅、同時に使用できない原材料同士などが規定された制約条件に従って網羅的に作成された組成の組み合わせ、又は、組成に関する特徴量のデータにより構成される（図 3（B）参照）。なお、予測用データ生成部 1 2 1 は、生成した予測用データを予測部 1 2 2 に入力するとともに、重み付け距離算出部 1 2 5 に通知する。
- [0038] 予測部 1 2 2 は、予測モデルを用いて、予測用データから予測値を算出する。また、予測部 1 2 2 は、算出した予測値を表示部 1 2 3 に通知する。
- [0039] 影響度算出部 1 2 4 は、学習用データ格納部 1 1 1 に格納された学習用データと、予測モデルとを用いて、各説明変数が予測に及ぼす影響度を算出する。具体的には、影響度算出部 1 2 4 は、各種 Python ライブラリに格納された各種アルゴリズムを用いて影響度を算出する。
- [0040] 例えば、予測モデルが線形モデルの場合、影響度算出部 1 2 4 では、各変

数の係数を用いて影響度を算出する。また、予測モデルが決定木をベースとするモデルの場合、影響度算出部124では、Permutation importanceまたはGini importanceなどの影響度を算出する。あるいは、影響度算出部124では、任意の手法において影響度を計算できるPythonライブラリのSAGE又はSHAPのアルゴリズムを用いて影響度を算出してもよい。

[0041] 重み付け距離算出部125は、影響度算出部124により算出された影響度を用いて、予測用データの学習用データに対する重み付け距離を算出する。具体的には、重み付け距離算出部125では、以下の式(2)と式(3)とを用いて、重み付け距離を算出する。

[0042] [数2]

$$d_n = \sqrt{\sum_{t=1}^k w_t \times (X_{nt} - x_{nt})^2} \quad (2)$$

[0043] [数3]

$$D_i = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N d_n \quad (3)$$

ここで、 d_n は、重み付けした、 n 番目の予測用データと学習用データとの平均距離であって、 N は、測定を行った実験の総数、 k は説明変数（原材料のパラメータ）の総数、 X_{nt} は n 番目の学習用データにおける t 番目の説明変数、 x_{nt} は n 番目の予測用データにおける t 番目の説明変数、 w_t は影響度である。重み付け距離 D_i は、算出された d_n を0から1の間の値になるようにスケールした値である。

[0044] 表示部123は、予測部122により算出された予測値と、重み付け距離算出部125により算出された重み付け距離との関係を複数表示する。例え

ば、表示部123は、横軸を重み付け距離、縦軸を予測値とする2次元グラフを用いて、予測値と重み付け距離との関係を複数表示する（図4参照）。また、表示部123は、対応する予測用データを探索候補として出力する。

[0045] <学習装置及び予測装置のハードウェア構成>

次に、組成探索システム100が有する学習装置110及び予測装置120のハードウェア構成について説明する。なお、本実施形態において、学習装置110のハードウェア構成と予測装置120のハードウェア構成とは概ね同じであるため、ここでは、図2を用いて、まとめて説明する。図2は、学習装置及び予測装置のハードウェア構成の一例を示す図である。

[0046] 図2に示すように、学習装置110、予測装置120は、プロセッサ201、メモリ202、補助記憶装置203、I/F (Interface) 装置204、通信装置205、ドライブ装置206を有する。なお、学習装置110及び予測装置120の各ハードウェアは、バス207を介して相互に接続されている。

[0047] プロセッサ201は、CPU (Central Processing Unit)、GPU (Graphics Processing Unit) 等の各種演算デバイスを有する。プロセッサ201は、各種プログラム（例えば、学習プログラム、予測プログラム等）をメモリ202上に読み出して実行する。

[0048] メモリ202は、ROM (Read Only Memory)、RAM (Random Access Memory) 等の主記憶デバイスを有する。プロセッサ201とメモリ202とは、いわゆるコンピュータを形成し、プロセッサ201が、メモリ202上に読み出した各種プログラムを実行することで、当該コンピュータは各種機能を実現する。

[0049] 補助記憶装置203は、各種プログラムや、各種プログラムがプロセッサ201によって実行される際に用いられる各種データを格納する。例えば、学習用データ格納部111は、補助記憶装置203において実現される。

[0050] I/F装置204は、ユーザインタフェース装置の一例である操作装置211、表示装置212と接続する接続デバイスである。通信装置205は、

ネットワークを介して外部装置（不図示）と通信するための通信デバイスである。

[0051] ドライブ装置206は記録媒体213をセットするためのデバイスである。ここでいう記録媒体213には、CD-ROM、フレキシブルディスク、光磁気ディスク等のように情報を光学的、電気的あるいは磁氣的に記録する媒体が含まれる。また、記録媒体213には、ROM、フラッシュメモリ等のように情報を電気的に記録する半導体メモリ等が含まれていてもよい。

[0052] なお、補助記憶装置203にインストールされる各種プログラムは、例えば、配布された記録媒体213がドライブ装置206にセットされ、該記録媒体213に記録された各種プログラムがドライブ装置206により読み出されることでインストールされる。あるいは、補助記憶装置203にインストールされる各種プログラムは、通信装置205を介してネットワークからダウンロードされることで、インストールされてもよい。

[0053] <組成探索システムにおける組成探索処理の流れ>

次に、組成探索システム100における組成探索処理の流れについて説明する。図5は、組成探索処理の流れを示す第1のフローチャートである。

[0054] ステップS501において、学習装置110は予測モデルを構築する。上述したように、本実施形態において、学習装置110が予測モデルを構築する際に用いる学習用データには、複数の実験サンプルに対しての原材料のパラメータ（種類・調製比率、特徴量）と、測定された物性値との組が含まれる（図3（A）参照）。

[0055] また、上述したように、学習装置110が構築する予測モデルは、学習用データの原材料のパラメータを説明変数とし、測定された物性値を目的変数とする前記学習用データを用いて機械学習を行うことで得られる学習済みモデルである。

[0056] ステップS502において、予測装置120は予測用データを作成する。上述したように、本実施形態において予測装置120が作成する予測用データは、組成比率の上下限と刻み幅、同時に使用できない原材料同士などが規

定された制約条件に従って網羅的に作成された組成の組み合わせ又は組成に関する特徴量のデータにより構成される（図3（B）参照）。

[0057] ステップS503において、予測装置120は、ステップS501で構築された予測モデルを用いて、予測用データから予測値を算出する。

[0058] ステップS504において、予測装置120は、学習用データと予測モデルとを用いて、各説明変数が予測に及ぼす影響度を算出する。

[0059] ステップS505において、予測装置120は、ステップS504において算出した影響度を用いて、予測用データの学習用データに対する重み付け距離を算出する。

[0060] ステップS506において、予測装置120は、全ての予測用データについて、予測値の算出及び重み付け距離の算出が行われたか否かを確認する。全ての予測用データについて予測値の算出及び重み付け距離の算出が行われた場合には（ステップS506においてYESの場合には）、ステップS507に進む。一方、予測値の算出及び重み付け距離の算出が行われていない予測用データがある場合には（ステップS506においてNOの場合には）、ステップS503に戻る。

[0061] ステップS507において、予測装置120は、予測値と重み付け距離との関係を複数表示し、対応する予測用データを探索候補として出力する。上述したように、予測値と重み付け距離との関係を複数表示する場合、予測装置120は、横軸を重み付け距離、縦軸を予測値とする2次元グラフに予測値をプロットして表示する（図4参照）。

[0062] <第1の実施形態に係る組成探索方法の効果>

次に、第1の実施形態に係る組成探索方法の効果について説明する。第1の実施形態に係る組成探索方法の場合、ユーザは予測値及び予測用データの学習用データに対する重み付け距離を考慮して探索候補を選択することができる。

[0063] そもそも、物性値の予測において、組成に関する情報のうち重要なパラメータの差が大きいと、実際の物性値が大きく異なる可能性が高い。一方で、

重要なパラメータの差が大きいと、予測装置 120 によって予測される予測値の信頼性が低くなる。

[0064] ここで、重み付けされていない距離は、重要なパラメータが組成に関する情報に埋もれて均一に取り扱われてしまい、予測値に対する信頼性の指標として用いるのに適切でない。つまり、第 1 の実施形態で用いる重み付け距離は、重み付けされていない距離よりも、予測値の信頼性が高いかチャレンジングであるかを示す指標として適切であるということが出来る。この結果、第 1 の実施形態によれば、例えば、重み付け距離の遠い組成を選択することで、ユーザは、重要なパラメータが重点的に探索されたチャレンジングな探索候補を得ることが出来る。

[0065] 以上のとおり、第 1 の実施形態によれば、予測値の信頼性の高さと、チャレンジ性の高さとのバランスを取りながら探索候補を選択することができるため、目標の物性値を得るための組成をより効率的に探索することができる。

[0066] [第 2 の実施形態]

続いて、第 2 の実施形態に係る組成探索方法について、上記第 1 の実施形態との相違点を中心に説明する。

[0067] <組成探索システムのシステム構成>

はじめに、第 2 の実施形態に係る組成探索方法を実現する組成探索システムのシステム構成について図 7 及び図 8 を参照しながら、図 6 を用いて説明する。図 6 は、組成探索システムのシステム構成の一例を示す第 2 の図である。図 7 及び図 8 は、予測値と重み付け距離との関係を表示したグラフの一例を示す第 2 及び第 3 の図である。

[0068] 上記第 1 の実施形態において、図 1 を用いて説明したシステム構成との相違点は、図 6 に示すシステム構成の場合、予測装置 120 が、分類部 601 を有している点、及び、表示部 602 の機能が、表示部 123 の機能と異なる点である。

[0069] 分類部 601 は、予測部 122 により算出された予測値を、予測用データ

の学習用データに対する重み付け距離に基づいてグループ分けする。また、分類部601は、グループ分けした結果を、表示部602に通知する。なお、分類部601によるグループ分けの方法は任意であり、例えば、重み付け距離を0から1の間の所定の値で等分する方法、または分割後の各グループ内のデータ数が同じになるように分割する方法のいずれかを選んでもよい。また、グループの数は事前に設定しておいた数にしても良いし、ユーザが設定した数にしても良い。

[0070] また、分類部601は、予測用データが探索候補か否かを判定する際の基準となる獲得関数を算出し、表示部602に通知する。具体的には、分類部601は、例えば、下記式(4)を用いて獲得関数を算出する。

[0071] [数4]

$$Acq(X_i) = (1 - s_g) * f(X_i) + s_g * D_i \quad (0 \leq s_g \leq 1) \quad (4)$$

ここで、 X_i は*i*番目の予測用データ、 $Acq(X_i)$ は*i*番目の予測用データの獲得関数、 $f(X_i)$ は*i*番目の予測用データの予測値を0から1の間の値になるようにスケーリングした値、 s_g は*g*番目のグループにおける重み係数、 D_i は*i*番目の予測用データの学習用データに対する重み付け距離である。 s_g は全グループにおいてすべて0にしても良い。その場合、獲得関数 $Acq(X_i)$ は予測値 $f(X_i)$ と等しくなる。 s_g はユーザが設定することもでき、すべてのグループにおいて s_g が0でない場合、グループ内でさらに学習用データに対する重み付け距離(D_i)を考慮した候補選択が可能になる。

[0072] 表示部602は、予測値と重み付け距離との関係を複数表示し、グループごとに、獲得関数が高い順に、対応する予測用データを探索候補として出力する。具体的には、各グループから獲得関数の高い順に予測用データ(組成に関する情報)を選択し、探索候補として出力する。

[0073] なお、各グループから出力される探索候補の数は、グループごとに適宜に設定することができ、ユーザが実験環境を考慮して設定することができる。

例えば、ユーザは、各グループにおいて、探索候補が均等に出力されるように設定してもよい。あるいは、ユーザは、重み付け距離の遠いグループから出力される探索候補の数が多くなるように設定してもよい。この場合、学習用データに対する重み付け距離が遠い組成を重視した探索を行うことができる。

[0074] 図7の例は、予測値と重み付け距離との関係を複数表示する際、横軸を重み付け距離、縦軸を予測値とする2次元グラフに、予測値をプロットした上で、獲得関数が高い予測値をナンバリングして表示するとともに、対応する予測用データを探索候補として出力した様子を示している。

[0075] なお、上記説明では、分類部601が予測値をグループ分けしたうえで獲得関数を算出し、表示部602がグループごとに、獲得関数の高い予測値をナンバリングして表示するとともに、対応する予測用データを探索候補として出力するものとして説明した。

[0076] しかしながら、分類部601及び表示部602の機能はこれに限定されず、例えば、分類部601は予測値をグループ分けすることなく獲得関数を算出し、表示部602は獲得関数の高い予測値をナンバリングして表示するとともに、対応する予測用データを探索候補として出力するように構成してもよい。

[0077] この場合、分類部601は、例えば、下記式(5)または式(6)を用いて算出した獲得関数に基づいて予測用データを選択し、探索候補として出力してもよい。

[0078] [数5]

$$Acq(X_i) = (1 - \alpha) * f(X_i) + \alpha * D_i \quad (0 \leq \alpha \leq 1) \quad (5)$$

[0079]

[数6]

$$Acq(X_i) = (1 - \alpha) * f(X_i) + \alpha * (1 - D_i) \quad (0 \leq \alpha \leq 1) \quad (6)$$

ここで、 X_i は*i*番目の予測用データ、 $Acq(X_i)$ は*i*番目の予測用データの獲得関数、 $f(X_i)$ は*i*番目の予測用データの予測値を0から1の間の値になるようにスケーリングした値、 D_i は*i*番目の予測用データの学習用データに対する重み付け距離、 α は D_i における重み係数である。

[0080] かかる分類部601によれば、獲得関数に含まれる重み係数 α を適宜設定することで、ユーザは予測値 $f(X_i)$ と重み付け距離 D_i 又は $1 - D_i$ のうち、どちらの項をより重視するかを調整することができる。例えば、式(5)の場合、 α を大きくすれば、学習用データに対する重み付け距離が遠い組成を重視しながら、高い予測値 $f(X_i)$ を探索することができる。逆に、式(6)の場合、 α を小さくすれば、学習用データに対する重み付け距離が近く、かつ予測値の信頼性が高い組成を重視しながら、高い予測値 $f(X_i)$ を探索することができる。

[0081] また、上記分類部601の場合、表示部602は、獲得関数の高い順に予測用データを選択し、探索候補として出力する(図8参照)。なお、表示部602では、獲得関数として、上記式(5)と式(6)のいずれかを用いることができ、また両方を併せて用いることもできる。両方の式を用いる際には、探索候補として出力する総数を考慮し、それぞれの式で出力する探索候補の数を適宜設定してもよい。

[0082] <組成探索システムにおける組成探索処理の流れ>

次に、組成探索システム100における組成探索処理の流れについて説明する。図9は、組成探索処理の流れを示す第2のフローチャートである。

[0083] なお、図9において、ステップS501からS506までの処理は第1の実施形態において図5を用いて説明した処理と同様の処理であるため、ここでは説明を省略する。

[0084] 続くステップS901において、予測装置120は、予測値を重み付け距離によってグループ分けする。

[0085] ステップS902において、予測装置120は、予測値と重み付け距離との関係を表示し、グループごとに、獲得関数が高い順に、対応する予測用データを探索候補として出力する。予測装置120では、予測値と重み付け距離との関係を表示する際、図7に示したように、横軸を重み付け距離、縦軸を予測値とする2次元グラフに、予測値をプロットした上で、獲得関数が高い予測値をナンバリングして表示するとともに、対応する予測用データを探索候補として出力する。

[0086] <まとめ>

以上の説明から明らかなように、第2の実施形態に係る組成探索方法では、重み付け距離により予測値をグループ分けして、予測値と重み付け距離との関係を表示する。これにより、第2の実施形態に係る組成探索方法によれば、それぞれのグループのチャレンジ性の高さにおいて、予測値の高い予測用データを選択し、探索候補として出力することができる。

[0087] また、第2の実施形態に係る組成探索方法では、予測用データの獲得関数を算出し、算出した獲得関数が高い予測値に対応する予測用データを探索候補として出力する。これにより、第2の実施形態に係る組成探索方法によれば、予測値の信頼性の高さと、チャレンジ性の高さとのバランスを取りながら探索候補を出力させることができる。

[0088] [第3の実施形態]

続いて、第3の実施形態に係る組成探索方法について、上記第1及び第2の実施形態との相違点を中心に説明する。

[0089] <組成探索システムのシステム構成>

はじめに、第3の実施形態に係る組成探索方法を実現する組成探索システムのシステム構成について図10を用いて説明する。図8は、組成探索システムのシステム構成の一例を示す第3の図である。

[0090] 上記第2の実施形態において、図6を用いて説明したシステム構成との相

違点は、図10に示すシステム構成の場合、実験装置1010を有する点である。

[0091] 実験装置1010は、出力された探索候補の組成に対して、実験者1011が物性の評価を行う際に用いる装置である。実験者1011は、実験装置1010を用いて物性の評価を行うことで得た物性値について、目標値に到達しているか否かを確認し、目標値に到達していれば、組成の探索を終了する。一方、目標値に到達していなければ、実験者1011は、実験を行った探索候補の組成に関する情報と、得られた物性値との組を学習用データに追加し、学習用データ格納部111に格納する。

[0092] <組成探索システムにおける組成探索処理の流れ>

次に、組成探索システム100における組成探索処理の流れについて説明する。図11は、組成探索処理の流れを示す第3のフローチャートである。

[0093] なお、図11において、ステップS501からS902までの処理は第2の実施形態において図9を用いて説明した処理と同様の処理であるため、ここでは説明を省略する。

[0094] 続くステップS1101において、実験者1011は実験装置1010を用いて、ステップS902で出力された探索候補の組成に対して、実験装置1010を用いて物性の評価を行い、物性値を得る。

[0095] ステップS1102において、実験者1011は、ステップS1101において得た物性値について、目標値に到達しているか否かを確認する。目標値に到達している場合は（ステップS1102においてYESの場合は）、組成の探索を終了する。一方、目標値に到達していない場合は（ステップS1102においてNOの場合は）、ステップS1103に進む。

[0096] ステップS1103において、実験者1011は、ステップS1101で実験を行った探索候補の組成に関する情報と、得られた物性値との組を学習用データに追加した後、ステップS501に戻る。組成探索システム100では、更新された学習用データを用い、ステップS1102において物性値が目標値に到達するまで上記のステップS501～S1103の各ステップ

を繰り返す。

[0097] <まとめ>

以上の説明から明らかなように、第3の実施形態に係る組成探索方法では、探索候補の組成に対して、物性の評価を行い、物性値が目標値に到達しなかった場合に、探索候補の組成に関する情報と、得られた物性値との組を学習用データに追加する。

[0098] このように、予測値の信頼性の高さやチャレンジ性の高さとのバランスが取れた探索候補について、実験により物性の評価を行う構成とすることで、物性値が目標値に到達するまでの実験回数を減らすことができる。

[0099] なお、上記記載では、物性値が目標値に到達した場合の処理について言及しなかったが、物性値が目標値に到達した場合には、例えば、対応する探索候補に基づいて材料の設計及び製造が行われるものとする。これにより、目標とする物性値を有する材料を設計及び製造することができる。

実施例

[0100] 以下、上記各実施形態のうち、第3の実施形態に係る組成探索方法について、具体的な実施例を説明する。

[0101] 本実施例においては、学習用データ及び予測用データとして金属化合物の組成と当該組成と関係する特徴量と物性値とが記載されているTurab Lookmanらの論文 (<https://www.nature.com/articles/s41598-018-21936-3#Sec12>) のデータセットを用いた。当該データセットは、223個の M_2AX 化合物組成 (M: 遷移金属、A: pブロック元素、X: 窒素 (N) または炭素 (C)) に対する弾性率データセットであって、表1にその一部を示す。表1の2列目から8列目までに、元素サイト (M、A、X) における各元素のp、d、s軌道半径 (Orbital radii) が記載されており、これらを学習用データ及び予測用データの説明変数として用いる。また、9列目のヤング率 (Young's modulus) を学習用データの目的変数として用いる。

[0102]

[表1]

	M-atom p- orbital radii	M-atom d- orbital radii	M-atom s- orbital radii	A-atom s- orbital radii	A-atom p- orbital radii	X-atom s- orbital radii	X-atom p- orbital radii	Young's modulus
1	0.5	0.539	1.57	0.445	1.184	0.62	0.596	92
2	0.5	0.539	1.57	1.06	1.319	0.62	0.596	135
3	0.5	0.539	1.57	1.093	1.382	0.62	0.596	135
4	0.5	0.539	1.57	1.01	1.215	0.62	0.596	142
5	0.5	0.539	1.57	1.044	1.312	0.62	0.596	140
6	0.5	0.539	1.57	0.96	1.254	0.62	0.596	133
7	0.5	0.539	1.57	0.445	1.184	0.521	0.4875	106
8	0.5	0.539	1.57	1.027	1.24	0.62	0.596	154
9	0.5	0.539	1.57	1.01	1.215	0.521	0.4875	165

223	0.599	0.784	1.413	0.803	0.9175	0.521	0.4875	315

探索候補の出力（選択及び提案）と実験による物性の評価（測定）を繰り返して最適な組成を探索することを、上記のデータセットを用い、実施例1、比較例1、2によって再現した。具体的には、データセットの中でヤング率が一番高い組成が見つかるまでの回数を比較する。この回数が少ないほど効率的に最適な組成を探索できる方法であるといえる。

[0103] 実施例1は、第3の実施形態に係る組成探索方法である図11のフローチャートに従って組成の探索を行った場合を示している。比較例1は、重み付けすることの効果と比較するために、図11のフローチャートのうち、ステップS504及びS505の処理を行うことなく組成の探索を行った場合を示している。また、比較例2は、学習用データとの距離を考慮せず、単純に予測値が高い順に、対応する予測用データを探索候補として出力する組成探索方法により組成の探索を行った。

[0104] 以下、実施例1の手順を具体的に説明する。

[0105] ステップS501及びS502において、学習装置110は、最初に用い

る学習用データとして、データセットに含まれる223個の化合物組成のうち、ヤング率の低い24個の各元素の軌道半径とヤング率との組合せを抽出する。また、学習装置110は、データセットに含まれる残り199個の化合物組成を、予測用データの説明変数（各元素の軌道半径）とする。そして、学習装置110は、予測モデルの手法としてscikit-learnのランダムフォレスト回帰モデルを用いて学習を行うことで予測モデルを構築する。

[0106] ステップS503において、予測装置120は、ステップS501で構築された予測モデルを用いて、予測用データから予測値を算出する。

[0107] ステップS504において、予測装置120は、scikit-learnに内蔵されているGini importanceを影響度として算出する。

[0108] ステップS505において、予測装置120は、ステップS504において算出された影響度を用いて重み付け距離を算出する。予測装置120は、ステップS503～S506の各ステップを繰り返すことで、全ての予測用データについて、予測値と重み付け距離とを算出した後に、ステップS901に進む。

[0109] ステップS901において、予測装置120は、重み付け距離によって予測用データをグループ分けする。ここでは、重み付け距離を一定の数値で分割する方法によって3つのグループに分ける。

[0110] ステップS902において、予測装置120は、各グループから1つの組成を探索候補として出力する。具体的には、予測装置120は、獲得関数として前述した式(4)を用い、 s_g を全グループにおいて0とし、各グループにおいて獲得関数が高い順に、対応する予測用データを探索候補として出力する。

[0111] ステップS1101において、実験者1011は、出力された探索候補に対して、実験と測定を行うことに代えて、データセットから、出力された探索候補（＝予測用データ）に対応するヤング率を取得する。

[0112] ステップS1102において、実験者1011は、ステップS1101で

取得したヤング率が目標値（データセットの中一番高い値）に到達しているかを確認した。到達している場合、探索を終了し、探索終了回数を取得した。到達していない場合は、次のステップS 1 1 0 3に進む。

- [0113] ステップS 1 1 0 3において、実験者1 0 1 1は、出力された探索候補の組成に関する情報と、取得した物性値との組を学習用データに追加して更新し、予測モデルを構築するステップS 5 0 1に戻る。実験者1 0 1 1は、ステップS 1 1 0 2でヤング率が目標値に到達するまで上記のステップを繰り返した。すなわち、探索候補を各グループから1つ採用することで、3つのグループ全体として予測用データが3つずつ減少し、予測用データであった各元素の軌道半径と、対応するヤング率とを学習用データに追加した。
- [0114] なお、実施例1で用いたランダムフォレスト回帰モデルには、探索のランダム性があり、偶然にヤング率の最も高い探索候補を初回に見つけてしまう場合が考えられる。そこで、探索終了までの回数を適切に比較するため、実施例1、比較例1及び比較例2において、上記のステップS 1 1 0 2で目標値に到達するまでの手順をそれぞれ1 0 0回繰り返すことで1 0 0個の探索終了回数を取得し、その平均値と標準偏差を算出して比較した。
- [0115] 比較例1の手順における、上記実施例1との相違点を具体的に説明する。
- [0116] 比較例1では、実施例1のステップS 5 0 3に該当する処理は行わず、ステップS 5 0 4において、上記式(2)の説明変数の影響度 w_t をすべて1とすることで、重み付けされていない距離を算出する。また、ステップS 9 0 1においては、重み付け距離でなく、重み付けされていない距離を用いる。その他の手順は実施例1と同様に行う。
- [0117] 比較例2の手順における、上記実施例1との相違点を具体的に説明する。
- [0118] 比較例2では、実施例1のステップS 5 0 3、S 5 0 4、S 9 0 1、S 1 1 0 1に該当する処理は行わず、ステップS 5 0 2で得た予測値が高い順に、対応する3つの予測用データを探索候補として出力した後、ステップS 1 1 0 1を行う。その他の手順は実施例1と同様に行う。
- [0119] 表2と図12に以上の結果を示す。平均探索終了回数は、実施例1が5.

2回、比較例1が7.7回、比較例2が26.0回であり、実施例1が最も少ない回数を示した。表2に探索終了回数の平均値と標準偏差とを併せて記す。図12に実施例1と比較例1、2における平均探索終了回数をプロットし、標準偏差をエラーバーとして示した。

[0120] 比較例2は明確に平均探索終了回数の値が大きいため、実施例1と比較例1より非効率であると言える。実施例1と比較例1の結果の差について、二つの群に差がない場合に無に帰するとする仮説である帰無仮説で検定した。帰無仮説は2群間の平均値に差がないこととなる。具体的な統計的手法としてスチューデントt検定を行った。検定を行った結果、p値が有意水準0.01以下となって帰無仮説が棄却され、実施例1と比較例1の探索終了回数には有意水準1%での有意な差があると判定できた。このことにより、第3の実施形態に係る組成探索方法は効率的に組成を探索することができる方法であることが確認できた。

[0121] [表2]

	平均探索終了回数 (標準偏差)
実施例1	5.2 (±1.4)
比較例1	7.7 (±2.4)
比較例2	26.0 (±14.5)

本出願は、2021年10月4日に出願された日本国特許出願第2021-163338号に基づきその優先権を主張するものであり、同日本国特許出願の全内容を参照することにより本願に援用する。

産業上の利用可能性

[0122] 本発明の組成探索方法は、合金材料や有機材料、複合材料などにおける材料設計に用いることができる。

請求の範囲

- [請求項1] 材料の組成探索方法であって、
材料の組成に関する情報を説明変数とし、材料の物性値を目的変数とした学習用データを学習させて予測モデルを構築するステップと、
新たに組成を探索するための予測用データを前記予測モデルに入力することで物性の予測値を算出するステップと、
前記学習用データと前記予測モデルとを用いて各説明変数が予測に及ぼす影響度を算出するステップと、
前記影響度を用いて、前記予測用データの前記学習用データに対する重み付け距離を算出するステップと、
前記予測値と前記重み付け距離との関係を表示するとともに、対応する予測用データを探索候補として出力するステップと、を有する組成探索方法。
- [請求項2] 前記重み付け距離を算出するステップにおいて、前記重み付け距離は0から1の間の値になるようにスケーリングされることを特徴とする、請求項1に記載の組成探索方法。
- [請求項3] 前記予測用データは、予め設定した刻み幅や組成比の制約条件に従って網羅的に作成された、組成に関する情報の組み合わせであり、
物性の予測値を算出するステップから重み付け距離を算出するステップまでを繰り返すことにより、
前記予測値と前記重み付け距離との関係を表示するステップにおいて、算出された予測値と前記重み付け距離との関係を複数表示することを特徴とする、請求項1に記載の組成探索方法。
- [請求項4] さらに、前記重み付け距離によって前記予測値をグループ分けするステップを有し、
前記予測値と前記重み付け距離との関係を表示するステップにおいて、前記予測用データをグループに分けて出力する、請求項3に記載の組成探索方法。

[請求項5] 前記予測値と前記重み付け距離との関係を表示するステップにおいて、

グループごとに、前記予測値の高い順に、対応する予測用データを探索候補として出力する、請求項4に記載の組成探索方法。

[請求項6] 前記グループ分けするステップにおいて、前記重み付け距離を0から1の間の所定の値で等分することでグループ分けする、請求項4に記載の組成探索方法。

[請求項7] 前記グループ分けするステップにおいて、分割後のグループ内の予測値の数が同じになるように、前記重み付け距離を0から1の間で分割することでグループ分けする、請求項4に記載の組成探索方法。

[請求項8] 前記予測値と前記重み付け距離との関係を表示するステップにおいて、

探索候補として出力する予測用データの数をユーザが設定する、請求項3に記載の組成探索方法。

[請求項9] さらに、前記予測用データから計算された予測値と重み付け距離に対して、下記式(1)を用いて獲得関数 $Acq(X_i)$ を算出するステップを有し、

算出された獲得関数が高い順に、対応する予測用データを探索候補として出力するステップと、を有する請求項4に記載の組成探索方法。

[数1]

$$Acq(X_i) = (1 - s_g) * f(X_i) + s_g * D_i \quad (0 \leq s_g \leq 1) \quad (1)$$

ここで、 X_i は i 番目の予測用データ、 $f(X_i)$ は、0から1の間の値になるようにスケールされた、 X_i の予測値、 s_g は g 番目のグループにおける重み係数、 D_i は X_i の重み付け距離である。

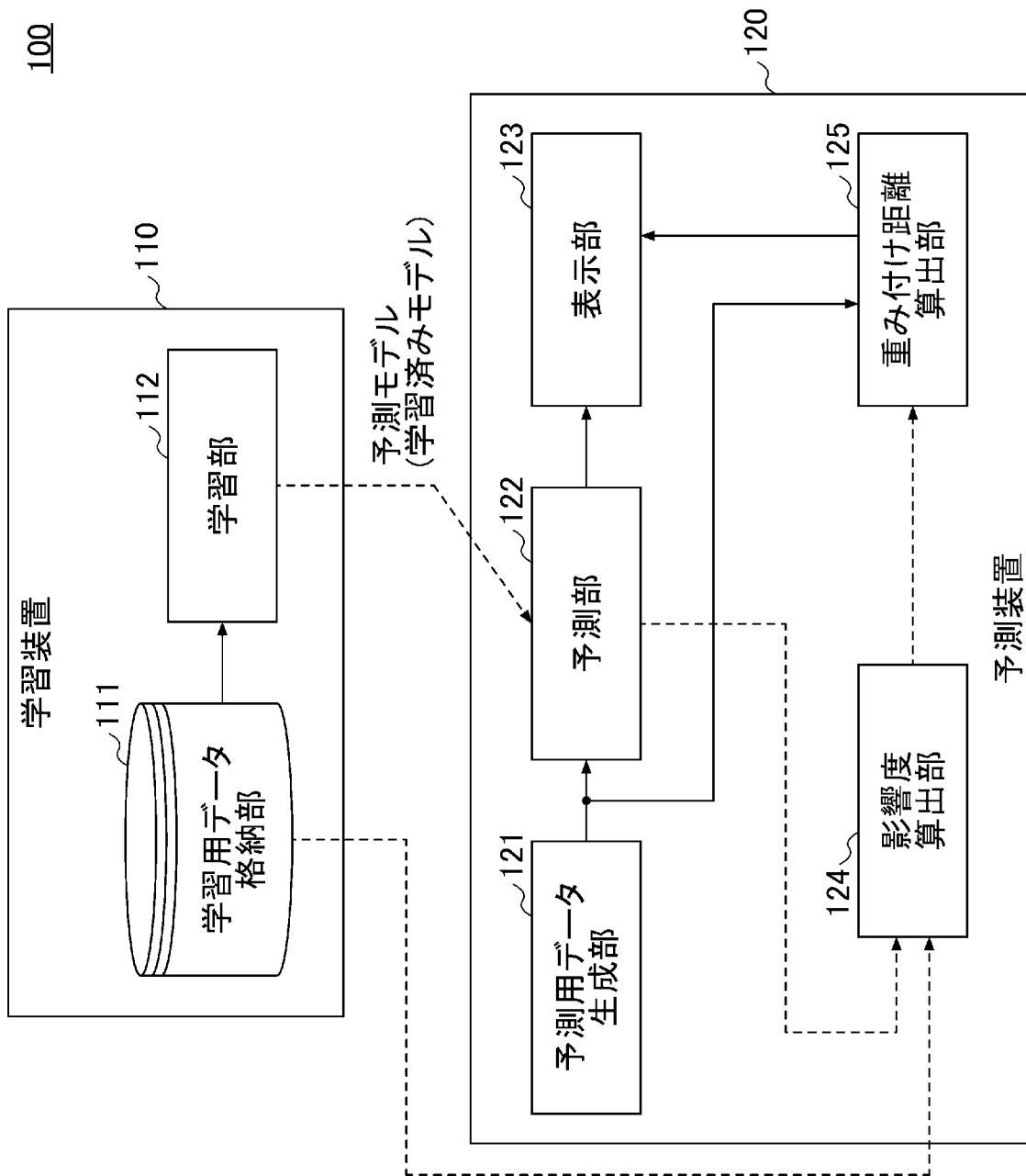
[請求項10] 前記出力するステップにおいて探索候補として出力された予測用デ

ータの組成に関する情報に基づいて実験を行い、物性値を得るステップと、

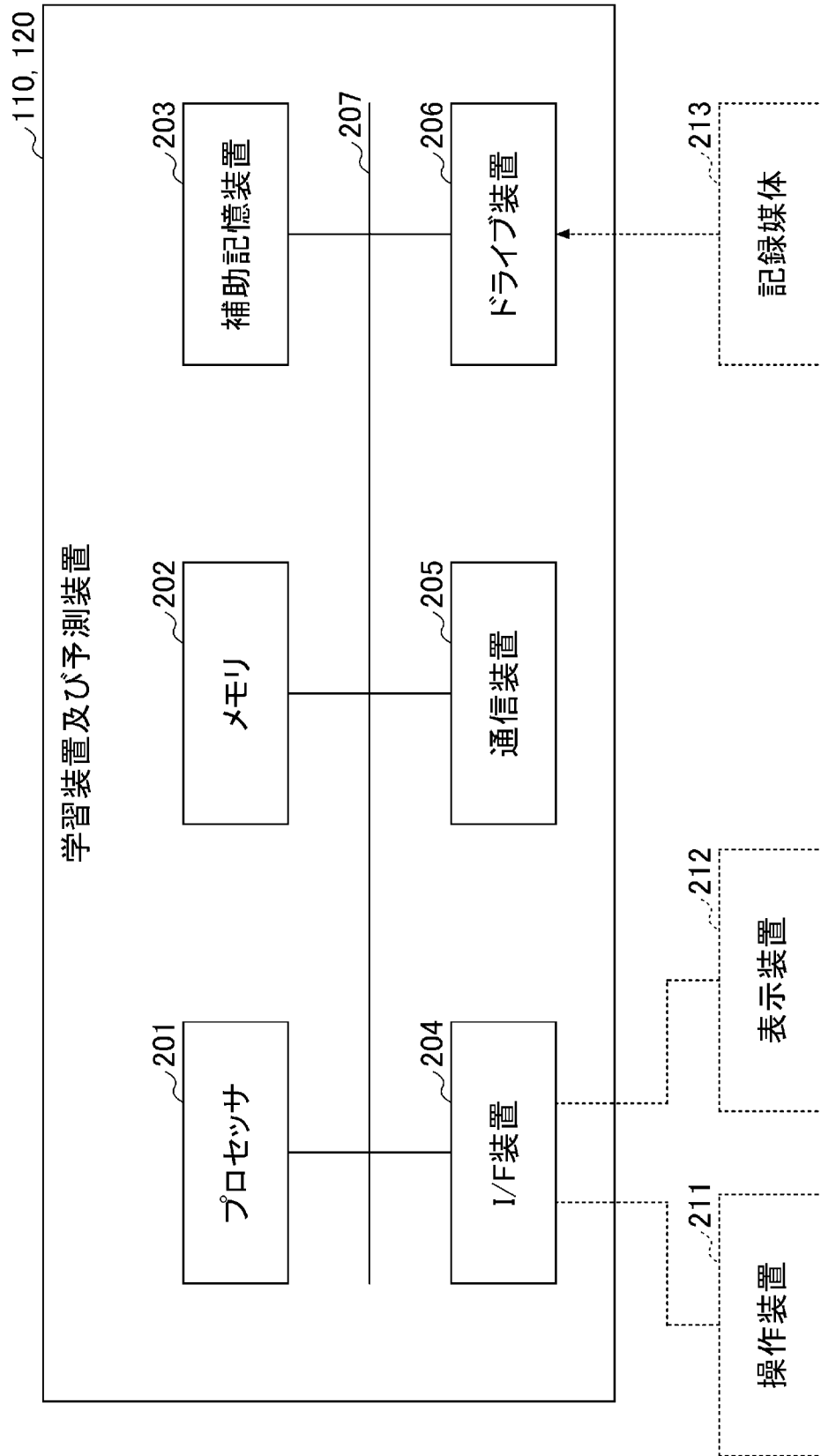
得られた物性値と対応する組成に関する情報を前記学習用データに追加するステップとを、さらに有し、

前記予測モデルを構築するステップにおいて、データが追加された学習用データを用いて予測モデルを構築する処理から、前記物性値を得るステップにおいて、前記物性値を得るまでの処理を、得られる物性値が所定の目標値に到達するまで繰り返す、請求項3に記載の組成探索方法。

[図1]



[図2]



[図3]

(A)

	主原料A	主原料B	主原料C	...	添加剤A	添加剤B	...	物性値
試料1	70	0	20	...	10	5	...	2.0
試料2	75	10	0	...	0	5	...	1.4
...								
試料N	70	15	0	...	5	0	...	3.2

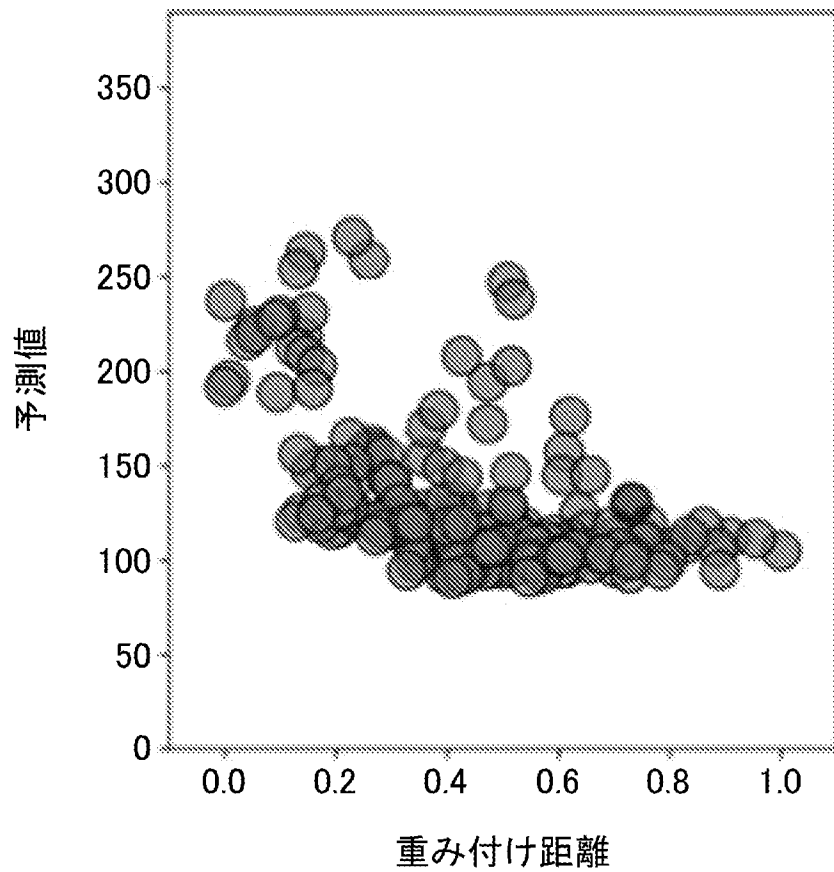
N個の学習用データ

(B)

	主原料A	主原料B	主原料C	...	添加剤A	添加剤B	...	物性値
試料1	60	0	20	...	10	0
試料2	60	5	15	...	8	2
試料3	65	10	10	...	6	4
試料4	65	15	5	...	10	6
...								
試料M	80	0	20	...	0	10

M個の予測用データ

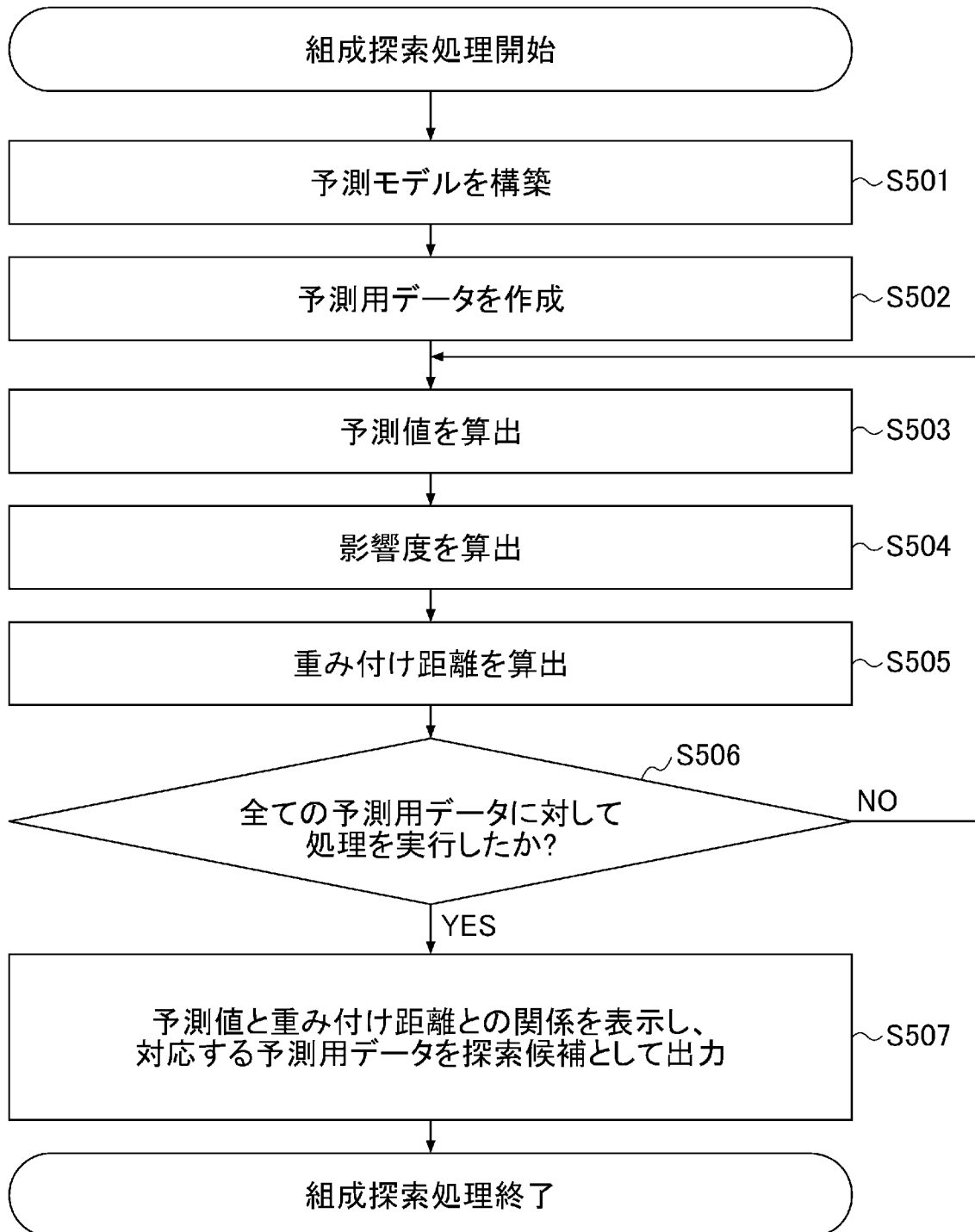
[図4]



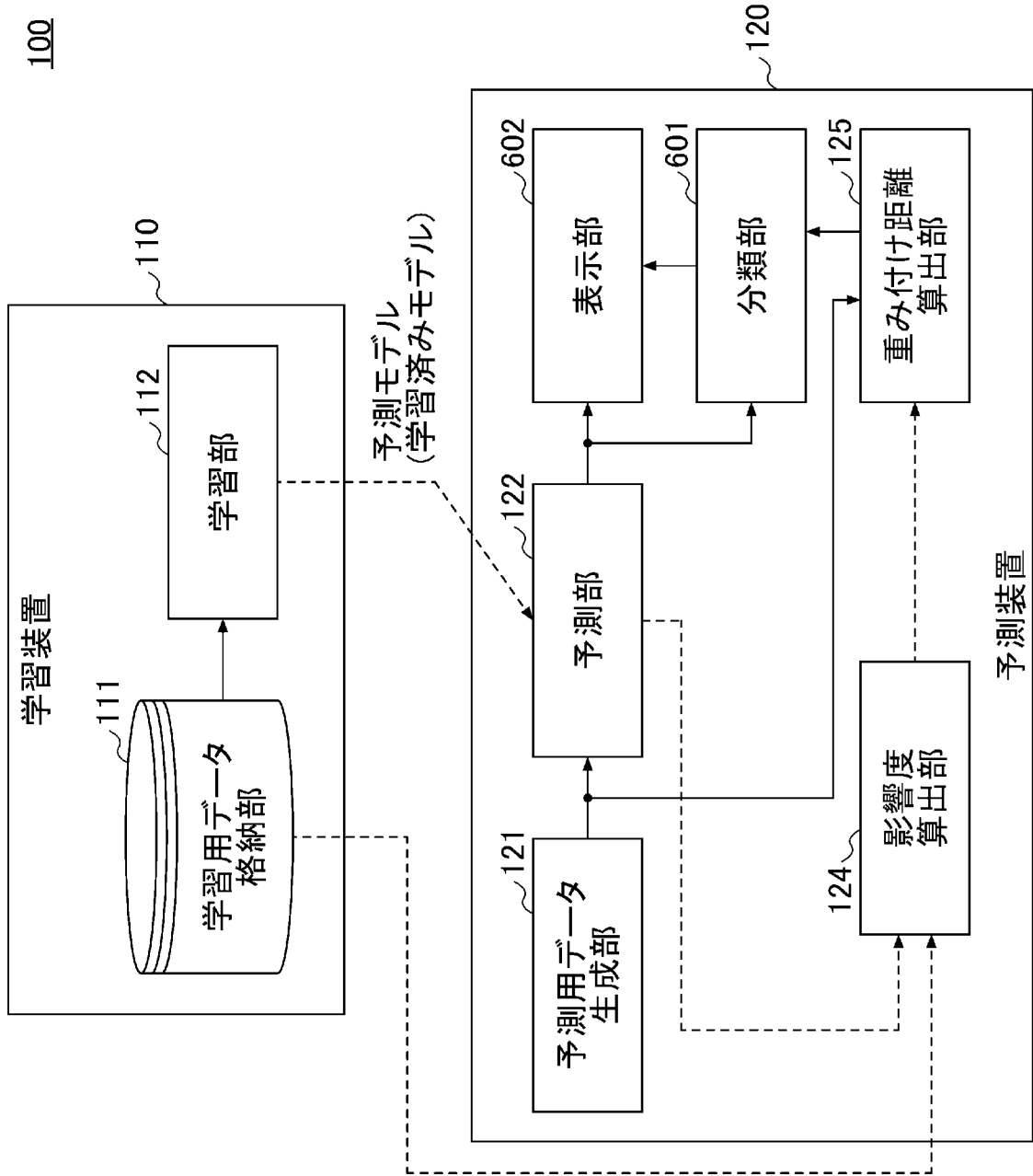
予測用データ1、予測値1、重み付け距離1
予測用データ2、予測値2、重み付け距離2
予測用データ3、予測値3、重み付け距離3

⋮
⋮
⋮

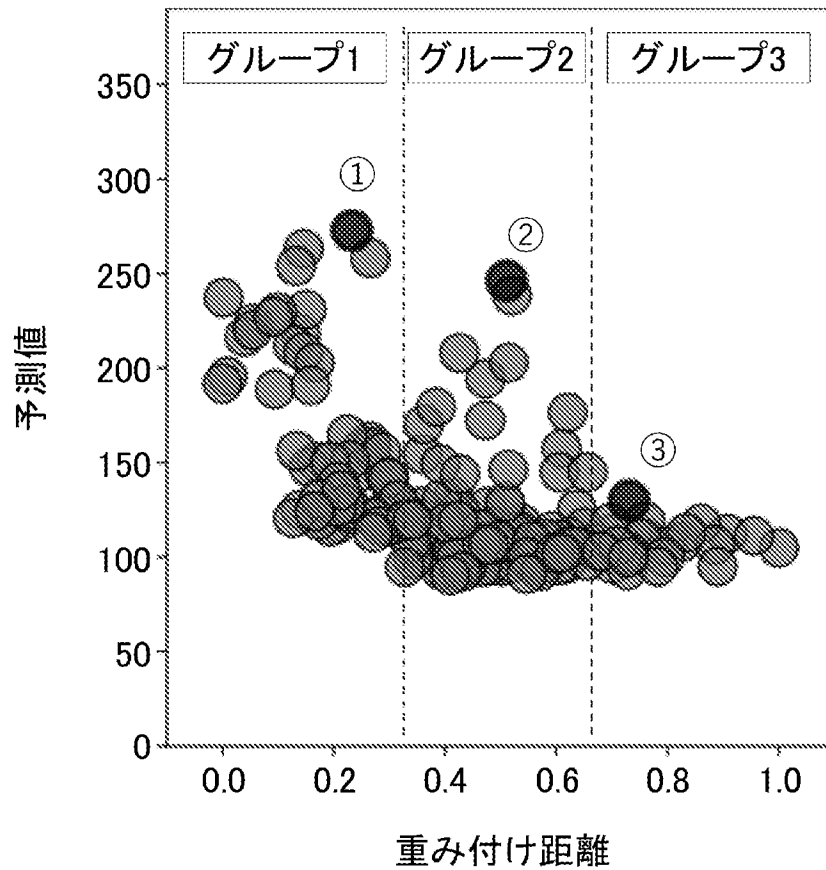
[図5]



[図6]



[図7]



グループ1

①予測用データ1、予測値1、重み付け距離1

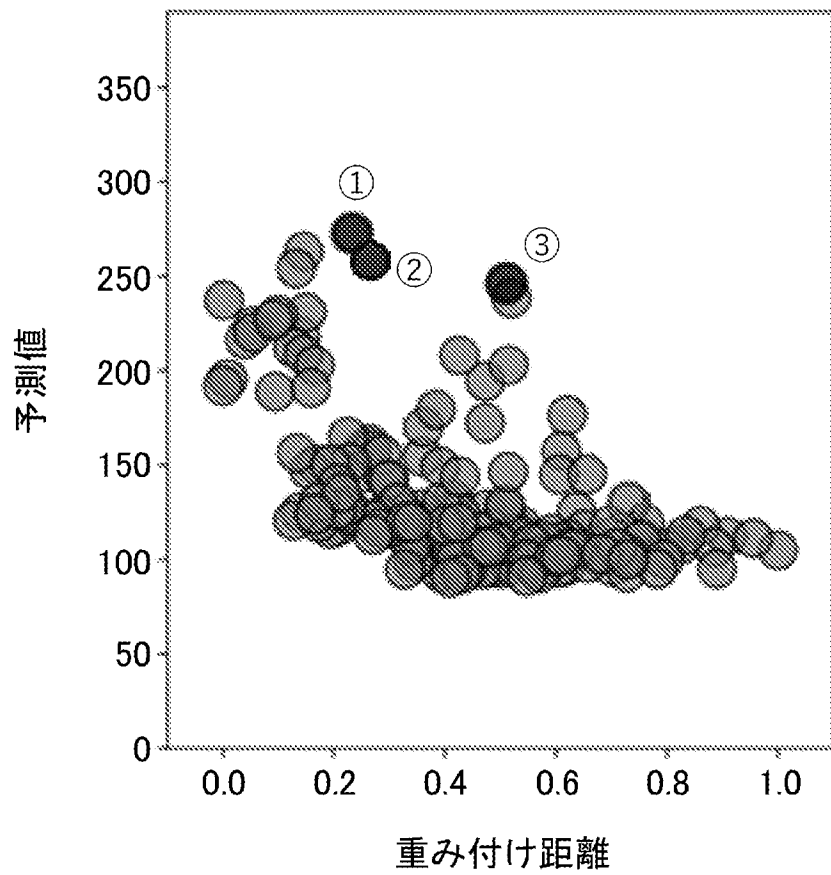
グループ2

②予測用データ23、予測値23、重み付け距離23

グループ3

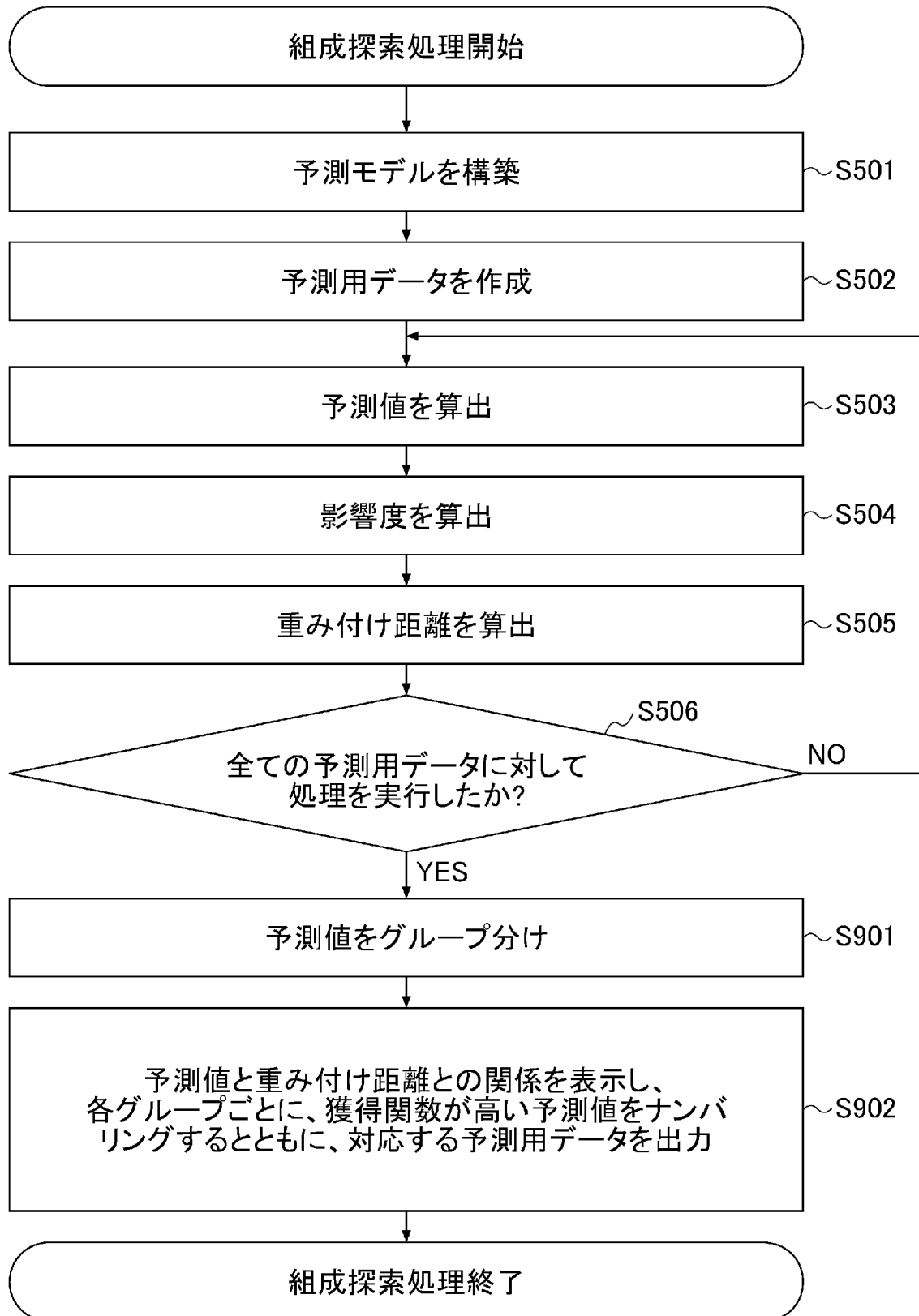
③予測用データ67、予測値67、重み付け距離67

[図8]

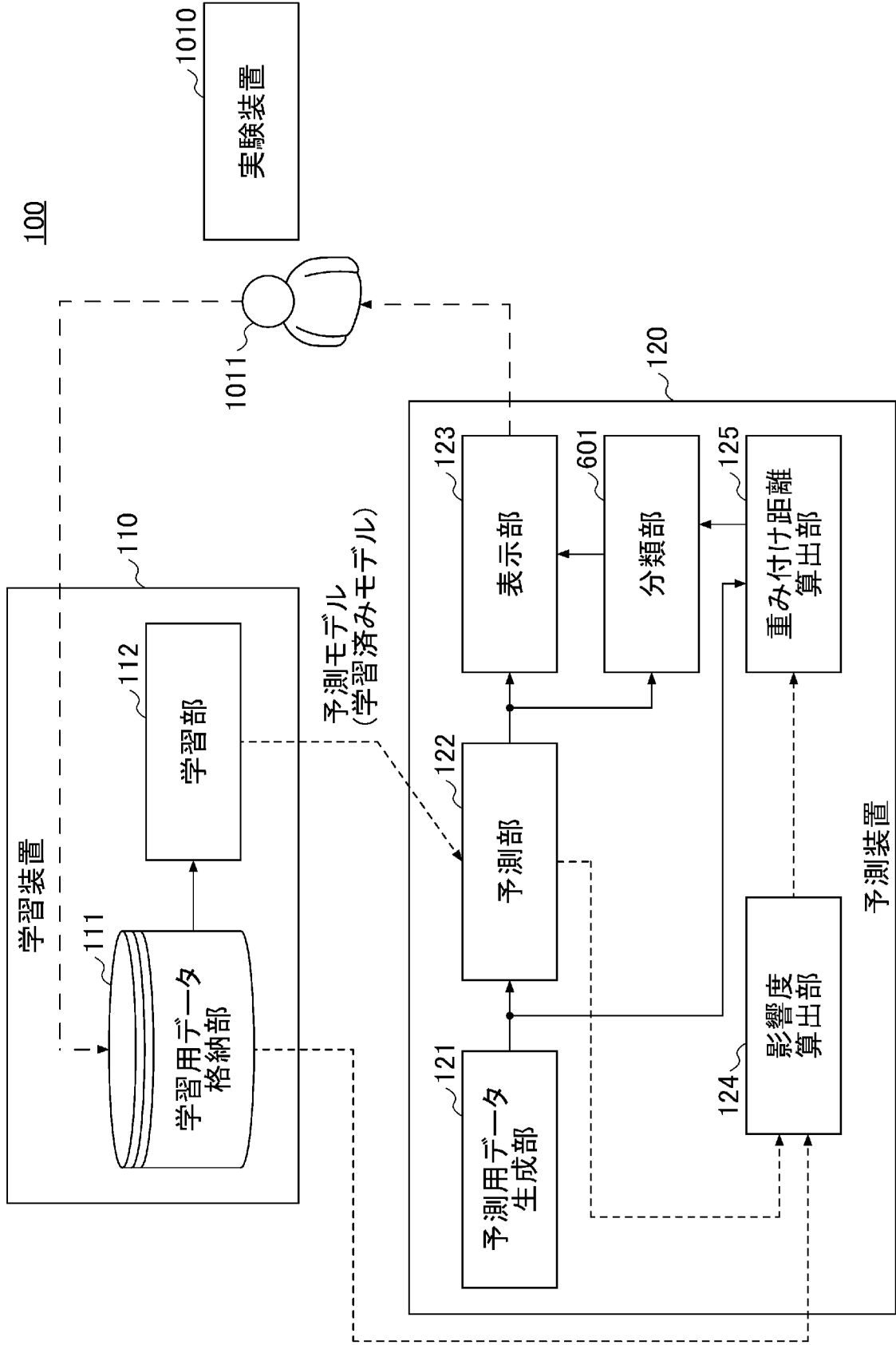


- ① 予測用データ1、予測値1、重み付け距離1
- ② 予測用データ4、予測値4、重み付け距離4
- ③ 予測用データ23、予測値23、重み付け距離23

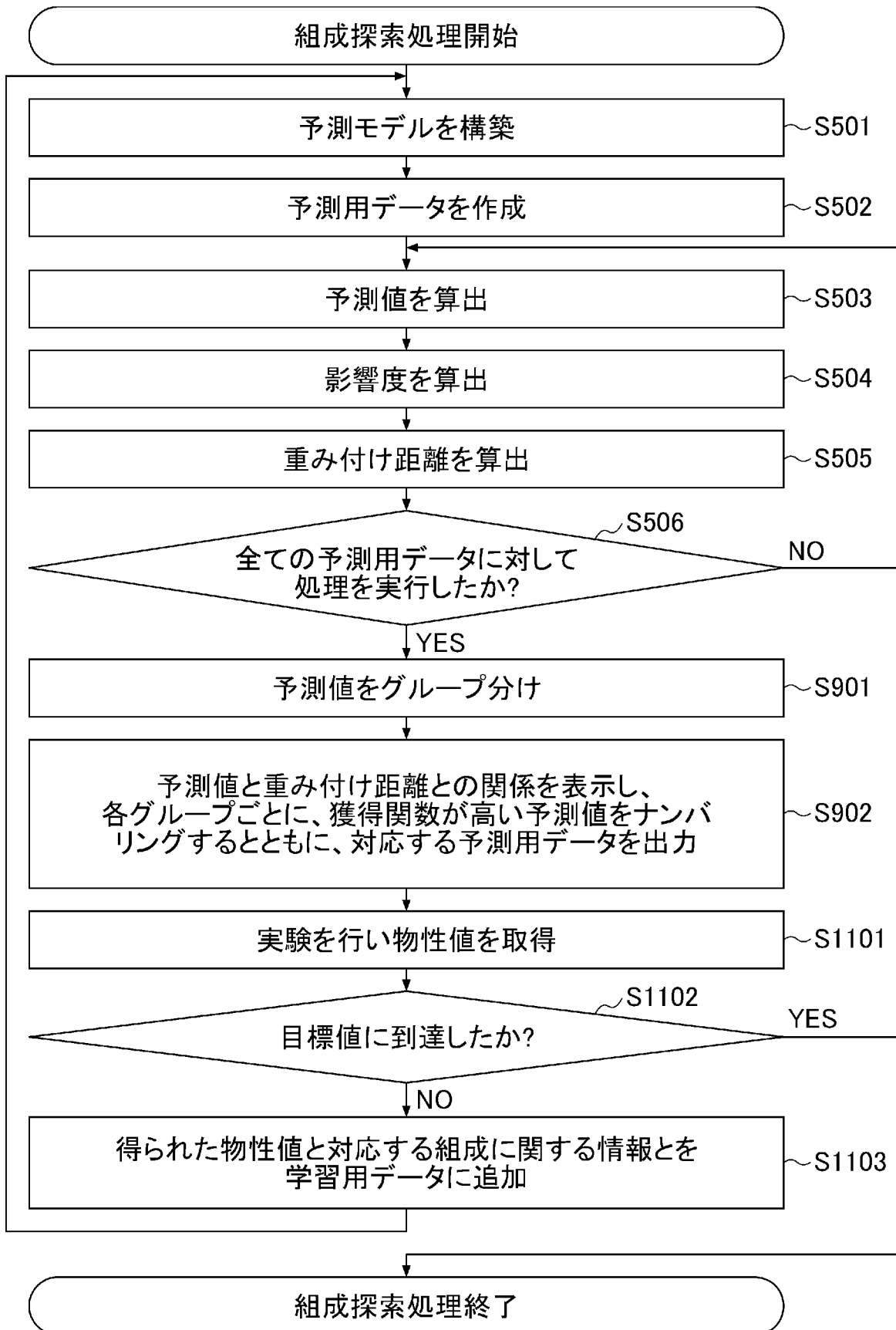
[図9]



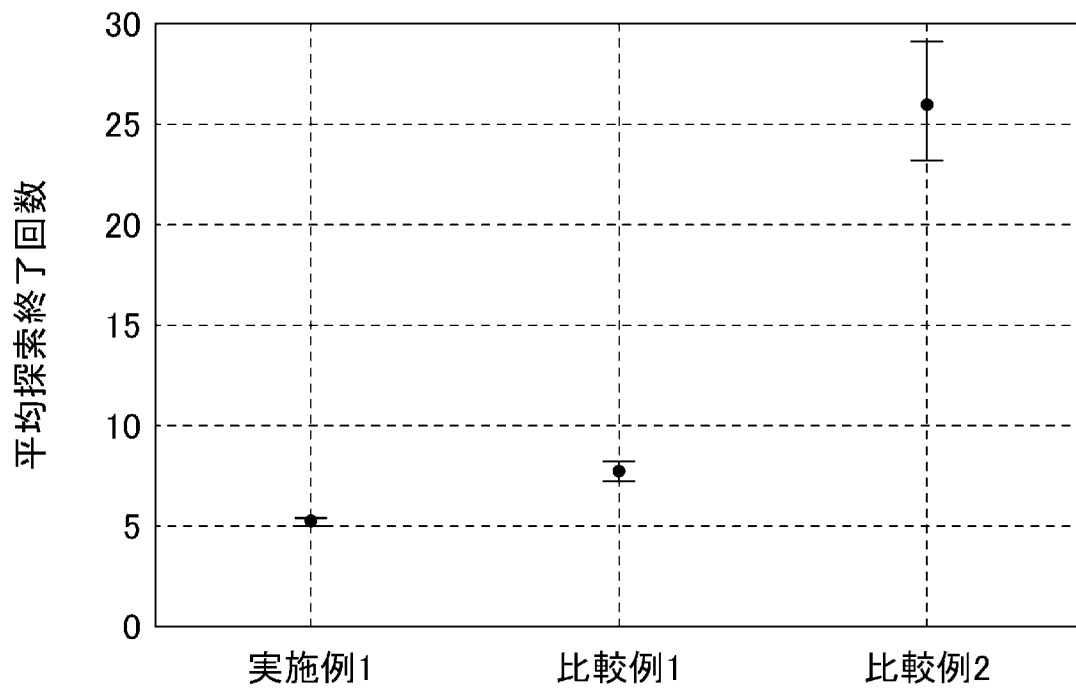
[図10]



[図11]



[図12]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2022/036163

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER		
<i>G16C 60/00</i> (2019.01)i; <i>G06N 20/00</i> (2019.01)i FI: G16C60/00; G06N20/00		
According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC		
B. FIELDS SEARCHED		
Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) G16C60/00; G06N20/00		
Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched Published examined utility model applications of Japan 1922-1996 Published unexamined utility model applications of Japan 1971-2022 Registered utility model specifications of Japan 1996-2022 Published registered utility model applications of Japan 1994-2022		
Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)		
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	IKEDA, Yoko et al. Materials Informatics Approach to Predictive Models for Elastic Modulus of Polypropylene Composites Reinforced by Fillers and Additives. Journal of Computer Chemistry. Japan-International Edition [online]. 11 June 2021, vol. 7, pp. 1-8, [retrieval date 14 October 2022], <URL:https://doi.org/10.2477/jccjie.2020-0007> entire text, all drawings	1-10
A	JP 2020-187417 A (HITACHI LTD) 19 November 2020 (2020-11-19) entire text, all drawings	1-10
A	JP 2020-128962 A (HITACHI LTD) 27 August 2020 (2020-08-27) entire text, all drawings	1-10
<input type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C. <input checked="" type="checkbox"/> See patent family annex.		
* Special categories of cited documents: "A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance "E" earlier application or patent but published on or after the international filing date "L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means "P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed "T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention "X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone "Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art "&" document member of the same patent family		
Date of the actual completion of the international search 14 October 2022		Date of mailing of the international search report 01 November 2022
Name and mailing address of the ISA/JP Japan Patent Office (ISA/JP) 3-4-3 Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915 Japan		Authorized officer Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/JP2022/036163

Patent document cited in search report	Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)	Publication date (day/month/year)
JP 2020-187417 A	19 November 2020	(Family: none)	
JP 2020-128962 A	27 August 2020	WO 2020/166299 A1 entire text, all drawings	

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC）） G16C 60/00(2019.01)i; G06N 20/00(2019.01)i FI: G16C60/00; G06N20/00		
B. 調査を行った分野 調査を行った最小限資料（国際特許分類（IPC）） G16C60/00; G06N20/00 最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの 日本国実用新案公報 1922-1996年 日本国公開実用新案公報 1971-2022年 日本国実用新案登録公報 1996-2022年 日本国登録実用新案公報 1994-2022年		
国際調査で使用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語）		
C. 関連すると認められる文献		
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号
A	IKEDA Yoko, et al., Materials Informatics Approach to Predictive Models for Elastic Modulus of Polypropylene Composites Reinforced by Fillers and Additives, Journal of Computer Chemistry, Japan-International Edition [online], 2021.06.11, Volume 7, pages 1-8, [検索日: 2022年10月14日], <URL:https://doi.org/10.2477/jccjie.2020-0007> 全文、全図	1-10
A	JP 2020-187417 A (株式会社日立製作所) 19.11.2020 (2020-11-19) 全文、全図	1-10
A	JP 2020-128962 A (株式会社日立製作所) 27.08.2020 (2020-08-27) 全文、全図	1-10
<input type="checkbox"/> C欄の続きにも文献が列挙されている。 <input checked="" type="checkbox"/> パテントファミリーに関する別紙を参照。		
* 引用文献のカテゴリー “A” 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの “E” 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの “L” 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す） “O” 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献 “P” 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献 “T” 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの “X” 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの “Y” 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの “&” 同一パテントファミリー文献		
国際調査を完了した日	14.10.2022	国際調査報告の発送日 01.11.2022
名称及びあて先 日本国特許庁(ISA/JP) 〒100-8915 日本国 東京都千代田区霞が関三丁目4番3号	権限のある職員（特許庁審査官） 岡北 有平 5R 4677 電話番号 03-3581-1101 内線 3502	

国際調査報告
パテントファミリーに関する情報

国際出願番号

PCT/JP2022/036163

引用文献	公表日	パテントファミリー文献	公表日
JP 2020-187417 A	19.11.2020	(ファミリーなし)	
JP 2020-128962 A	27.08.2020	WO 2020/166299 A1 全文、全図	