

(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12月14日(14.12.2023)



(10) 国際公開番号

WO 2023/238525 A1

(51) 国際特許分類:
G16C 60/00 (2019.01)

(21) 国際出願番号: PCT/JP2023/016025

(22) 国際出願日: 2023年4月21日(21.04.2023)

(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 2022-094726 2022年6月10日(10.06.2022) JP

(71) 出願人: 日本碍子株式会社(NGK INSULATORS, LTD.) [JP/JP]; 〒4678530 愛知県名古屋市瑞穂区須田町 2 番 5 6 号 Aichi (JP).

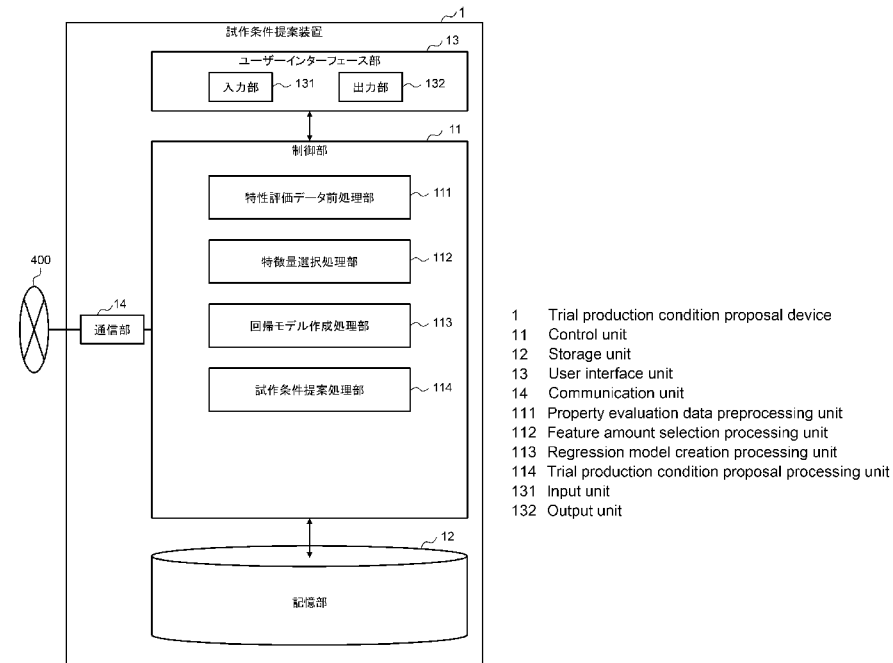
(72) 発明者: 橋本 岡 柚希(HASHIMOTO OKA Yuki); 〒4678530 愛知県名古屋市瑞穂区須田町 2 番 5 6 号 日本碍子株式会社内 Aichi (JP). 樋口 福永(HIGUCHI, Fukunaga); 〒4678530 愛知県名古屋市瑞穂区須田町 2 番 5 6 号 日本碍子株式会社内 Aichi (JP). 惣川 真吾(SOKAWA, Shingo); 〒4678530 愛知県名古屋市瑞穂区須田町 2 番 5 6 号 日本碍子株式会社内 Aichi (JP).

(74) 代理人: 弁理士法人サンネクスト国際特許事務所(SUNNEXT INTERNATIONAL PATENT OFFICE); 〒1400002 東京都品川区東品川二丁目 3 番 1 2 号 シーフォートスクエア センタービルディング 1 6 階 Tokyo (JP).

(54) Title: TRIAL PRODUCTION CONDITION PROPOSAL SYSTEM AND TRIAL PRODUCTION CONDITION PROPOSAL METHOD

(54) 発明の名称: 試作条件提案システム、試作条件提案方法

[図2]



(57) Abstract: The present invention provides technology that makes it possible to automatically perform preprocessing of property evaluation data when inferring trial production conditions of a material on the basis of the property evaluation data. A trial production condition proposal system 1 comprises a property evaluation data preprocessing unit 111, a feature amount selection processing unit 112, a regression model creation processing unit 113, and a trial production condition proposal processing unit 114. The property evaluation data preprocessing unit 111 performs preprocessing with

(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, LR, LS, LU, LY, MA, MD, MG, MK, MN, MU, 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, CV, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SC, 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, ME, 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))

respect to property evaluation data that represents the evaluation results of a property of a material. The feature amount selection processing unit 112 performs feature amount selection processing for the preprocessed property evaluation data. The regression model creation processing unit 113 performs regression model creation processing for the preprocessed property evaluation data, on the basis of the results of the feature amount selection processing. The trial production condition proposal processing unit 114 performs trial production condition proposal processing for the preprocessed property evaluation data, on the basis of a regression model created by the regression model creation processing unit 113.

(57) 要約: 特性評価データを基に材料の試作条件を推定する際に、当該特性評価データの前処理を自動的に実行することが可能な技術を提供する。試作条件提案システム1は、特性評価データ前処理部111と、特徴量選択処理部112と、回帰モデル作成処理部113と、試作条件提案処理部114とを備える。特性評価データ前処理部111は、材料の特性の評価結果を表す特性評価データに対して前処理を施す。特徴量選択処理部112は、前処理が施された特性評価データについて特徴量選択処理を実行する。回帰モデル作成処理部113は、特徴量選択処理の結果を基に、前処理が施された特性評価データについて回帰モデル作成処理を実行する。試作条件提案処理部114は、前処理が施された特性評価データについて、回帰モデル作成処理部113が作成した回帰モデルに基づいて試作条件提案処理を実行する。

明 細 書

発明の名称： 試作条件提案システム、試作条件提案方法

技術分野

[0001] 本発明は、材料開発者に材料の試作条件を提案するシステムおよび方法に関する。

背景技術

[0002] 材料（Materials）の研究開発を行う材料科学の分野では、今日、統計解析や機械学習等の情報技術（Informatics）を利用して材料の物性や構造等を効率よく予測する、マテリアルズ・インフォマティクス（Materials Informatics; MI）と呼ばれる手法が広く用いられている。このマテリアルズ・インフォマティクスを用いた材料の研究開発に関して、例えば特許文献1の技術が知られている。特許文献1には、試料とされる複数の物質それぞれの作製条件と、各物質の物性や構造を表す物質情報とを含むデータセットから、最適な物性や構造を有する物質の作製条件を推定するシステムが開示されている。

先行技術文献

特許文献

[0003] 特許文献1：国際公開第2021／044913号明細書

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0004] マテリアルズ・インフォマティクスを用いた材料開発の現場では、通例、開発対象の材料の特性を評価する各種の評価試験を実施し、この評価試験の結果を表すデータ（以下、「特性評価データ」と称する）を基に、当該材料が良好な特性を備えることとなる作製条件を推定する処理をコンピュータに実行させる。ここで、特性評価データは、評価試験の結果が記録された直後のいわゆる生データの状態では、データの分布にばらつきがあったり、特徴量の尺度が不揃いであったりすることが少なくない。そこで、然様な場合に

は、その後の処理を正常に実行可能にするために、事前に生データの状態の特性評価データに含まれる説明変数（以下、「材料設計変数」とも称する）および目的変数を適宜に整える処理（以下、「前処理」と称する）を実施する必要がある。

[0005] しかしながら、一般に、材料開発の現場で前処理の実施対象になる特性評価データの量は相当数に上り、かつ、その種類もきわめて多岐にわたる。そして、特許文献 1 に記載のシステムは、生データの状態の特性評価データに対して前処理を実施することができない。そのため、特許文献 1 に記載の技術を使用して材料の試作を行う場合、その作製条件（以下、「試作条件」と称する）を推定するために、非常に複雑な前処理を事前に人手により実施する必要がある、試作条件を効率よく推定できないおそれがある。

[0006] 本発明は、上記の課題に鑑みて、特性評価データを基に材料の試作条件を提案する際に、当該特性評価データの前処理を自動的に実行可能な技術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

[0007] 本発明による試作条件提案システムは、材料開発者に材料の試作条件を提案するものであって、特性評価データ前処理部と、特徴量選択処理部と、回帰モデル作成処理部と、試作条件提案処理部とを備える。特性評価データ前処理部は、材料の特性の評価結果を表す特性評価データに対して前処理を施す。特徴量選択処理部は、前処理が施された特性評価データについて特徴量選択処理を実行する。回帰モデル作成処理部は、特徴量選択処理の結果を基に、前処理が施された特性評価データについて回帰モデル作成処理を実行する。試作条件提案処理部は、前処理が施された特性評価データについて、回帰モデル作成処理部が作成した回帰モデルに基づいて試作条件提案処理を実行する。

本発明による試作条件提案方法は、材料開発者に材料の試作条件を提案する方法であって、材料の特性の評価結果を表す特性評価データに対する前処理と、前処理が施された特性評価データについて行う特徴量選択処理と、特

微量選択処理の結果を基に、前処理が施された特性評価データについて行う回帰モデル作成処理と、前処理が施された特性評価データについて、回帰モデル作成処理で作成した回帰モデルに基づいて行う試作条件提案処理とをコンピュータに実行させる。

[0008] その他、本願が開示する課題とその解決方法は、発明を実施するための形態の欄、および図面の記載によって明らかにされる。

発明の効果

[0009] 本発明によれば、特性評価データを基に材料の試作条件を提案する際に、当該特性評価データの前処理を自動的に行うことができる。

図面の簡単な説明

[0010] [図1]本発明の一実施形態に係る試作条件提案システムの概要を示す模式図。

[図2]本発明の一実施形態に係る試作条件提案システムの機能ブロックを示す図。

[図3]本発明の一実施形態に係る試作条件提案システムの処理全体の流れを示すフローチャート。

[図4]特性評価データ前処理の詳細を示すフローチャート。

[図5]Box-Cox変換処理の概要を示す図。

[図6]標準化処理の概要を示す図。

[図7]特微量選択処理の詳細を示すフローチャート。

[図8]回帰モデル作成処理の詳細を示すフローチャート。

[図9]試作条件提案処理の詳細を示すフローチャート。

発明を実施するための形態

[0011] 以下、本実施形態を詳細に説明する。図1は、本発明の一実施形態に係る試作条件提案システムの概要を示す模式図である。図1に示す試作条件提案システム1は、材料の組成や焼成条件等といった、材料を試作する際に考慮すべき種々の試作条件をそれぞれ最適化し、その結果を本システムのユーザーである材料開発者に提案するものである。この試作条件の最適化は、当該材料の特性の評価結果を表す特性評価データを基に、各種の機械学習アル

ゴリズムを用いて行われる。また、このとき、予測モデルには、例えば、ガウス過程回帰（Gaussian Process Regression; G P R）や線形回帰（Linear Regression）、回帰木（Regression Tree; アンサンブル法による場合を含む）、ニューラルネットワークによる回帰（Neural Network Regression）、サポートベクター回帰（Support Vector Regression; S V R）、ロジスティック回帰（Logistic Regression）、L A S S O回帰（Least Absolute Shrinkage and Selection Operator Regression）等の各種の回帰モデルが使用される。

[0012] 図1に示したように、試作条件提案システム1のユーザーが、試作条件提案システム1から提案された試作条件で材料の試作を行い、その成果物である材料の特性の評価を行うと、この成果物の特性の評価値を表すデータが新たに生成される。このデータを新たな特性評価データとして試作条件提案システム1に学習させると、試作条件提案システム1は、より最適化された試作条件をユーザーに提案する。本実施形態の試作条件提案システム1は、ユーザーがこのサイクルを繰り返す度に、特性の予測値がより好ましい試作条件を提案することができる。なお、試作条件提案システムが、材料を試作する機能や、試作対象の材料の特性を評価する機能を含んでいたり、これらの機能と一体的に構成されていたりしてもよい。

[0013] 本実施形態の試作条件提案システム1は、図1に示したように、一台の汎用コンピュータ装置によって実現される。以下の説明は、試作条件提案システム1が、一つ以上のプロセッサデバイス、一つ以上の記憶装置、一つ以上の入出力装置、およびそれらを連結する有線または無線の通信線（いずれも不図示）を備える一台の汎用コンピュータ装置により実現されているものとして行う。

[0014] このコンピュータ装置は、例えば実験室の内部に端末として設置され、当該実験室の内外に設置されている他の各種端末や、各ユーザーが保有するラップトップPCやタブレット、スマートフォン等の各種端末（以下、「ユーザー端末」と称する）、サーバ装置等の他の機器と、インターネット400

や専用線等の通信ネットワークを介して接続される。なお、当該コンピュータ装置とインターネット４００とは、周知の通信用機器（不図示）を介して有線で接続されるが、無線で接続されてもよい。

[0015] 次に、試作条件提案システム１が備える各種機能について、図２を参照して説明する。図２は、本発明の一実施形態に係る試作条件提案システムの機能ブロックを示す図である。なお、以下に説明する各ブロックは、ハードウェア単位の構成ではなく、機能単位のブロックを示している。本実施形態の試作条件提案システム１は、図２に示すように、制御部１１、記憶部１２、ユーザーインターフェース部１３、および通信部１４を備えて構成される。

[0016] 制御部１１は、ユーザーインターフェース部１３が検出したユーザーの操作入力、通信部１４により取得されたデータ、および記憶部１２が記憶しているプログラムやデータに基づいて各種データ処理を実行する。制御部１１は、ユーザーインターフェース部１３、通信部１４および記憶部１２のインターフェースとしても機能する。

[0017] 制御部１１は、特性評価データ前処理部１１１、特徴量選択処理部１１２、回帰モデル作成処理部１１３および試作条件提案処理部１１４の各機能ブロックを有する。制御部１１は、例えばＣＰＵ（Central Processing Unit）および各種コプロセッサ（Co-processor）等のプロセッサデバイス（以下、単に「プロセッサ」とも称する）を用いて構成され、所定のプログラムを実行することによって、これらの機能ブロックを実現することができる。なお、プロセッサの代わりに、例えばＦＰＧＡ（Field Programmable Gate Array）等の論理回路を用いて制御部１１を構成してもよい。また、プロセッサと論理回路との組合せによって制御部１１を構成してもよい。

[0018] 制御部１１が実行するプログラムは、プログラムソースからインストールされてもよい。プログラムソースは、例えばプログラム配布計算機や計算機が読み取り可能な記録媒体等であってもよい。また、制御部１１が実行するプログラムは、デバイスドライバ、オペレーティングシステム、それらの上位層に位置する各種アプリケーションプログラム、また、これらのプログラ

ムに共通機能を提供するライブラリによって構成されてもよい。さらに、二つ以上のプログラムが一つのプログラムとして実現されてもよいし、一つのプログラムが二つ以上のプログラムとして実現されてもよい。

[0019] 特性評価データ前処理部 111 は、記録直後のいわゆる生データの状態の特性評価データに対して前処理を施す。特性評価データ前処理部 111 が行うこの処理を、特性評価データ前処理と称する。

[0020] 特徴量選択処理部 112 は、前処理が施された特性評価データについて、説明変数に関する特徴量を選択する処理を実行する。特徴量選択処理部 112 が実行するこの処理を、特徴量選択処理と称する。

[0021] 回帰モデル作成処理部 113 は、特徴量選択処理の結果を基に、前処理が施された特性評価データについて回帰モデルを作成する処理を実行する。回帰モデル作成処理部 113 が実行するこの処理を、回帰モデル作成処理と称する。

[0022] 試作条件提案処理部 114 は、前処理が施された特性評価データについて、回帰モデル作成処理部 113 が作成した回帰モデルに基づいて材料の試作条件をユーザーに提案する処理を実行する。試作条件提案処理部 114 が実行するこの処理を、試作条件提案処理と称する。

[0023] なお、これらの処理の具体的な内容については後述する。

[0024] 記憶部 12 は、例えば RAM やフラッシュメモリ等の記憶装置を用いて構成されており、制御部 11 に各種処理命令を供給するプログラム、および制御部 11 が実行する処理において用いられる各種情報を表すデータを記憶する。例えば、特性評価データ前処理部 111 により前処理が施された特性評価データ（以下、「前処理実施済データ」と称する）や、回帰モデル作成処理部 113 により作成された回帰モデルを表すデータ等が記憶部 12 に記憶される。制御部 11 は、これらの情報を記憶部 12 に読み書きすることで、前述の特性評価データ前処理部 111、特徴量選択処理部 112、回帰モデル作成処理部 113 および試作条件提案処理部 114 の各機能ブロックを実現することができる。

- [0025] ユーザーインターフェース部13は、ユーザーからの入力操作を受け付けるほか、画像表示や音声出力等、ユーザーインターフェースに関する処理を担当する。ユーザーインターフェース部13は、入力部131および出力部132の各機能ブロックを有する。入力部131は、ユーザーからの各種操作を検出する。入力部131は、例えばキーボードやポインティングデバイス、タッチパネル等を用いて構成される。出力部132は、ユーザーに対して画面表示や音声出力等を実行する。出力部132は、例えば液晶ディスプレイやタッチスクリーン等を用いて構成される。
- [0026] 通信部14は、インターネット400を介して行われる、各ユーザーが保有するユーザー端末や、サーバ装置等の他の機器との通信処理を担当する。通信部14は、例えばNIC (Network Interface Card) やHBA (Host Bus Adapter) 等を用いて構成される。
- [0027] 本実施形態では、試作条件提案システム1の各機能が一台のコンピュータ装置により一体的に実現されているものとして説明した。しかしながら、これらの各機能は相互に接続された複数台のコンピュータ装置またはサーバ装置によって実現されてもよい。また、試作条件提案システム1は、ラップトップPC等の汎用コンピュータ装置と、これにインストールされたウェブブラウザとを含む構成であってもよいし、ウェブサーバや各種携帯機器を含む構成であってもよい。
- [0028] また、各機能の説明は一例であり、複数の機能が一つの機能にまとめられたり、一つの機能が複数の機能に分割されたりしてもよい。
- [0029] 次に、試作条件提案システム1の処理全体の流れについて、図3を参照して説明する。図3は、本発明の一実施形態に係る試作条件提案システムの処理全体の流れを示すフローチャートである。なお、以下の説明では、前述の各機能またはプログラムを主語として処理を説明する場合があるが、機能またはプログラムを主語として説明した処理は、プロセッサ、あるいはそのプロセッサを有する装置が行う処理としてもよい。
- [0030] ステップS310において、制御部11は、特性評価データ前処理部11

1により、特性評価データ前処理を実行する。これにより、特性評価データに前処理が施されて前処理実施済データとなり、以後の各処理を正常に実行することが可能になる。なお、ステップS310で行われる特性評価データ前処理の詳細は、後で図4のフローチャートを参照して説明する。制御部11は、特性評価データ前処理が完了すると、ステップS320に進む。

[0031] ステップS320において、制御部11は、特徴量選択処理部112により、特徴量選択処理を実行する。これにより、前処理実施済データに含まれる説明変数についての特徴量が、以後の各処理を実行するうえで好ましく選択される。なお、ステップS320で行われる特徴量選択処理の詳細は、後で図7のフローチャートを参照して説明する。制御部11は、特徴量選択処理が完了すると、ステップS330に進む。

[0032] ステップS330において、制御部11は、回帰モデル作成処理部113により、回帰モデル作成処理を実行する。これにより、特徴量が選択された前処理実施済データについて、回帰モデルが作成される。なお、ステップS330で行われる回帰モデル作成処理の詳細は、後で図8のフローチャートを参照して説明する。制御部11は、回帰モデル作成処理が完了すると、ステップS340に進む。

[0033] ステップS340において、制御部11は、回帰モデル評価処理を実行する。この回帰モデル評価処理では、ステップS330までの各処理の結果作成された複数の回帰モデルの各々について、回帰モデルの予測精度を表す指標である汎化性能を評価する。この評価は、例えば、他の回帰モデルとの間で交差検証（Cross Validation）を行うことで行う。評価の結果は、例えば散布図や箱ひげ図等のグラフによって可視化される。これにより、ユーザーは、汎化性能が良好な回帰モデルに基づく試作条件の提案を受けることができる。制御部11は、回帰モデル評価処理が完了すると、ステップS350に進む。

[0034] ステップS350において、制御部11は、試作条件提案処理部114により、試作条件提案処理を実行する。この試作条件提案処理では、試作条件

提案システム 1 のユーザーが、試作条件提案システム 1 が提案した材料の試作条件を、さらに好ましいものとするために、適宜に修正することができる。制御部 11 は、ユーザーにより修正された試作条件で試作した場合の材料の特性の予測値を、選択した回帰モデルに当てはめることによって求め、ユーザーに提示する。すなわち、ユーザーは、この試作条件の修正作業を、当該予測値を確認しながら対話的に行うことができる。このように、試作条件提案システム 1 は、ユーザーに提案する材料の試作条件に、当該材料の開発者であるユーザーの知見を盛り込むことが可能なシステムとなっている。なお、ステップ S 350 で行われる試作条件提案処理の詳細については、後で図 9 のフローチャートを参照して説明する。制御部 11 は、試作条件提案処理が完了すると、図 3 のフローチャートに示す処理を一旦終了する。

[0035] 本実施形態の試作条件提案システム 1 は、図 3 のステップ S 310～S 350 の各処理を実行して、良好な試作条件をユーザーに提案する。すなわち、本実施形態の試作条件提案システム 1 では、ステップ S 310 において、生データの状態の特性評価データに対して必要な前処理が自動的に施される。そのため、特性評価データに対して繁雑な前処理を人手により行うことなく、ステップ S 320～S 350 の各処理を実行することができる。また、本実施形態の試作条件提案システム 1 では、ユーザーは、汎化性能が良好な回帰モデルを選択することができる。そのため、試作条件提案システム 1 は、ユーザーに対して、予測される特性値が良好な試作条件を提案することができる。

[0036] なお、図 1 に関連して前述したように、試作条件提案システム 1 のユーザーは、試作条件提案システム 1 が提案した試作条件で材料の試作を行ってその成果物の特性を評価し、評価結果を表すデータを新たな特性評価データとして試作条件提案システム 1 に学習させたうえで、再度、試作条件提案システム 1 に図 3 のステップ S 310～S 350 の各処理を実行させることができる。この場合、試作条件提案システム 1 は、より最適化された試作条件をユーザーに提案することができる。すなわち、本実施形態の試作条件提案シ

ステム 1 は、同一の試作対象について図 3 のステップ S 3 1 0 ~ S 3 5 0 の各処理を繰り返す度に、特性の予測値がより良好な試作条件を提案することができる。

[0037] 図 4 は、特性評価データ前処理の詳細を示すフローチャートである。

[0038] ステップ S 4 0 1 において、制御部 1 1 は、特性評価データ前処理部 1 1 1 により、ユーザーからの特性評価データの入力を、入力部 1 3 1 または通信部 1 4 を介して受け付ける。試作条件提案システム 1 に入力する特性評価データは、例えばカテゴリデータであってもよいし、連続データであってもよいし、離散データであってもよい。また、試作条件提案システム 1 に入力する特性評価データの具体的なデータ形式は、適宜に決定することができる。制御部 1 1 は、ステップ S 4 0 1 における処理が完了すると、ステップ S 4 0 2 に進む。

[0039] ステップ S 4 0 2 において、制御部 1 1 は、特性評価データ前処理部 1 1 1 により、ステップ S 4 0 1 でユーザーから入力を受け付けた特性評価データについて、変数の種類を設定する。ここでは、説明変数および目的変数のいずれかが一つが設定される。説明変数とは、特性の予測値を求める基となる変数のことである。本実施形態においては、試作条件を構成する材料の組成や焼成条件等が説明変数に該当する。また、目的変数とは、予測の対象となる、試作する材料の特性値を表す変数のことである。ステップ S 4 0 2 における具体的な処理の例としては、説明変数がデフォルトで設定されており、目的変数に変更したいユーザーから設定操作を受け付けるとしてもよい。制御部 1 1 は、ステップ S 4 0 2 における処理が完了すると、ステップ S 4 0 3 に進む。

[0040] ステップ S 4 0 3 において、制御部 1 1 は、特性評価データ前処理部 1 1 1 により、ステップ S 4 0 2 で設定された変数が目的変数か否かを判定する。目的変数でない場合（ステップ S 4 0 3 : N）は、ステップ S 4 0 2 で設定された変数が説明変数であると判定してステップ S 4 0 4 に進み、目的変数であると判定した場合（ステップ S 4 0 3 : Y）は、ステップ S 4 1 1 に

進む。

- [0041] ステップS 4 0 4において、制御部 1 1は、特性評価データ前処理部 1 1 1により、ステップS 4 0 2で説明変数が設定された特性評価データについて、外れ値があるか否かを判定する。この外れ値の有無の判定処理は、例えば、特性評価データをヒストグラムに表し、平均値 $\pm 2\sigma$ の範囲外の値の有無を判定することにより行う。外れ値があると判定した場合（ステップS 4 0 4：Y）は、この外れ値が異常値であるか否かを判定するためにステップS 4 0 5に進み、外れ値がないと判定した場合（ステップS 4 0 4：N）は、そのままステップS 4 0 7に進む。
- [0042] ステップS 4 0 5において、制御部 1 1は、特性評価データ前処理部 1 1 1により、ステップS 4 0 4で外れ値があると判定された、説明変数が設定されている特性評価データについて、この外れ値が異常値であるか否かを判定する。この異常値か否かの判定処理は、例えば、当該特性評価データの生成時における、データ入力ミスの有無や、評価試験機の故障の有無等を判定することにより行う。異常値であると判定した場合（ステップS 4 0 5：Y）は、当該異常値を欠損値とするためにステップS 4 0 6に進み、異常値でないと判定した場合（ステップS 4 0 5：N）は、そのままステップS 4 0 7に進む。
- [0043] ステップS 4 0 6において、制御部 1 1は、特性評価データ前処理部 1 1 1により、ステップS 4 0 5で外れ値が異常値であると判定された特性評価データについて、この異常値を欠損値にする。制御部 1 1は、ステップS 4 0 6における処理が完了すると、ステップS 4 0 7に進む。
- [0044] ステップS 4 0 7において、制御部 1 1は、特性評価データ前処理部 1 1 1により、特性評価データについて、欠損値があるか否かを判定する。欠損値があると判定した場合（ステップS 4 0 7：Y）は、当該欠損値を補完するためにステップS 4 0 8に進み、欠損値がないと判定した場合（ステップS 4 0 7：N）は、そのままステップS 4 0 9に進む。
- [0045] ステップS 4 0 8において、制御部 1 1は、特性評価データ前処理部 1 1

1により、ステップS407で欠損値があると判定された特性評価データについて、当該欠損値を補完する。欠損値の補完処理は、例えば、外れ値を除いた特性評価データの平均値や中央値、最小値、最大値などを、欠損値を補完する値として用いることにより行う。また、線形補間 (Linear Interpolation) により欠損値の補完を行ってもよい。さらに、説明変数が連続値でなくカテゴリ値である場合には、欠損値を任意の文字列で補完してもよい。なお、特性評価データ前処理部111は、例えば、ステップS408において欠損値を補完した場合に、補完した値を識別しやすくするために、赤字で表示してもよい。また、特性評価データ前処理部111は、例えば、ステップS408において、当該欠損値を補完せずに水準自体を削除してもよい。さらに、本実施形態の試作条件提案システム1では、特性評価データ前処理部111は、説明変数の欠損割合が多い場合、例えばデータ数の5割以上が欠損している場合には、当該説明変数自体を削除することもできる。制御部11は、ステップS408における処理が完了すると、ステップS409に進む。

[0046] ステップS409において、制御部11は、特性評価データ前処理部111により、特性評価データをヒストグラムに表して、当該特性評価データの裾 (ヒストグラムにおける当該特性評価データの全サンプルの特性値の分布範囲) のうち、いずれか一方の裾が基準値よりも長いかな否かを判定する。ヒストグラムに表した特性評価データの裾のいずれか一方のみが基準値よりも長いと判定した場合 (ステップS409: Y) は、当該特性評価データのばらつきが大きいのでステップS410に進み、ヒストグラムに表した特性評価データの裾が基準値よりも短いと判定した場合 (ステップS409: N) は、当該特性評価データのばらつきがその後の各処理を実行するうえで十分に小さいのでそのままステップS420に進む。また、ヒストグラムに表した特性評価データの裾の両方が基準値よりも長いと判定した場合 (ステップS409: N) も、左右対称に近い分布形状であれば対数変換などの処理が必要ないのでそのままステップS420に進む。なお、特性評価データ前処

理部 111 は、ステップ S 410 において対数変換を行うか否かを判定するステップ S 409 の処理を、例えば、歪度を指標として用いて実行してもよい。

[0047] ステップ S 410 において、制御部 11 は、特性評価データ前処理部 111 により、ヒストグラムに表したときにその裾が基準値よりも長いとステップ S 409 で判定された特性評価データについて、当該特性評価データの各サンプルの特性値を対数変換する。この対数変換処理は、例えば、図 5 に概要を示した Box-Cox 変換処理等の方法によって行う。これにより、当該特性評価データの分布が正規分布に近づくため、機械学習における回帰精度を向上させることができる。なお、本実施形態の試作条件提案システム 1 において、特性評価データ前処理部 111 は、対数変換処理を施す説明変数を自動的に選択する。しかしながら、試作条件提案システムは、対数変換処理の対象となる説明変数を、ユーザーが手動で選択可能に構成されていてもよい。また、特性評価データ前処理部 111 は、例えば、ステップ S 410 で特性評価データに対して対数変換処理を施した後、対数変換処理の前後の当該特性評価データをヒストグラムに表して、当該特性評価データのばらつきの度合を可視化してもよい。制御部 11 は、ステップ S 410 における処理が完了すると、ステップ S 420 に進む。

[0048] ステップ S 411 において、制御部 11 は、特性評価データ前処理部 111 により、ステップ S 402 で目的変数が設定された特性評価データについて、外れ値があるか否かを判定する。この外れ値の有無の判定処理は、ステップ S 404 と同様に、例えば、特性評価データをヒストグラムに表すことにより行う。外れ値があると判定した場合（ステップ S 411：Y）は、この外れ値が異常値であるか否かを判定するためにステップ S 412 に進み、外れ値がないと判定した場合（ステップ S 411：N）は、そのままステップ S 414 に進む。

[0049] ステップ S 412 において、制御部 11 は、特性評価データ前処理部 111 により、ステップ S 411 で外れ値があると判定された、目的変数が設定

されている特性評価データについて、この外れ値が異常値であるか否かを判定する。異常値の具体例としては、説明変数が完全に重複していて特性が異なる水準がある場合における、一方の説明変数が挙げられる。異常値であると判定した場合（ステップS 4 1 2 : Y）は、当該異常値に係るサンプルを削除するためにステップS 4 1 3に進む。然様な、説明変数の全てが重複していて特性の異なる水準を異常値として扱う場合入力ミスなどに起因する説明変数の1か所が異常値である場合と異なり、当該水準自体を削除する必要があるためである。他方、異常値でないと判定した場合（ステップS 4 1 2 : N）は、そのままステップS 4 1 4に進む。

[0050] ステップS 4 1 3において、制御部11は、特性評価データ前処理部111により、ステップS 4 1 2で外れ値が異常値であると判定された特性評価データについて、この異常値に係るサンプルを削除する。なお、上述した、説明変数の全てが重複していて特性の異なる水準があるような場合に、重複に意味があるとして、どちらの説明変数も残したいことがある。然様な場合、本実施形態の試作条件提案システム1では、ステップS 4 1 2～S 4 1 3における処理を省略することができる。制御部11は、ステップS 4 1 3における処理が完了すると、ステップS 4 1 4に進む。

[0051] ステップS 4 1 4において、制御部11は、特性評価データ前処理部111により、特性評価データについて、欠損値があるか否かを判定する。当該特性評価データが予め欠損値を含む場合があるためである。欠損値があると判定した場合（ステップS 4 1 4 : Y）は、当該欠損値に係るサンプルを削除するためにステップS 4 1 5に進み、欠損値がないと判定した場合（ステップS 4 1 4 : N）は、そのままステップS 4 1 6に進む。

[0052] ステップS 4 1 5において、制御部11は、特性評価データ前処理部111により、ステップS 4 1 4で欠損値があると判定された特性評価データについて、この欠損値に係るサンプルを削除する。制御部11は、ステップS 4 1 5における処理が完了すると、ステップS 4 1 6に進む。

[0053] ステップS 4 1 6において、制御部11は、特性評価データ前処理部111

1により、特性評価データをヒストグラムに表して、当該特性評価データの裾のうち、いずれか一方の裾が基準値よりも長いかなかを判定する。ヒストグラムに表した特性評価データの裾のいずれか一方のみが基準値よりも長いと判定した場合（ステップS 4 1 6 : Y）は、当該特性評価データのばらつきが大きいのでステップS 4 1 7に進み、ヒストグラムに表した特性評価データの裾が基準値よりも短いと判定した場合（ステップS 4 1 6 : N）は、当該特性評価データのばらつきがその後の各処理を実行するうえで十分に小さいのでそのままステップS 4 1 8に進む。また、ヒストグラムに表した特性評価データの裾の両方が基準値よりも長いと判定した場合（ステップS 4 1 6 : N）も、左右対称に近い分布形状であれば対数変換などの処理が必要ないのでそのままステップS 4 1 8に進む。なお、特性評価データ前処理部1 1 1は、ステップS 4 1 7において対数変換を行うかなかを判定するステップS 4 1 6の処理を、例えば、歪度を指標として用いて実行してもよい。

[0054] ステップS 4 1 7において、制御部1 1は、特性評価データ前処理部1 1 1により、ステップS 4 1 6でヒストグラムに表したときに片側の裾が基準値よりも長いと判定された特性評価データについて、上述したBox-Cox変換処理等の方法によって対数変換する。これにより、当該特性評価データの分布が正規分布に近づくため、機械学習における回帰精度を向上させることができる。制御部1 1は、ステップS 4 1 7における処理が完了すると、ステップS 4 1 8に進む。

[0055] ステップS 4 1 8において、制御部1 1は、特性評価データ前処理部1 1 1により、特性評価データに設定されている目的変数の数が二つ以上であるかなかを判定する。設定されている目的変数の数が二つ以上であると判定した場合（ステップS 4 1 8 : Y）は、設定されている全ての目的変数を一つに合成するため、ステップS 4 1 9に進む。他方、設定されている目的変数の数が二つ以上でないと判定した場合（ステップS 4 1 8 : N）は、すなわち設定されている目的変数の数が一つである。この場合は、目的変数の合成処理を行う必要がないため、そのままステップS 4 2 0に進む。なお、本実

施形態の試作条件提案システム 1 では、特性評価データ前処理部 111 は、二つ以上の目的変数が設定されたいわゆる多目的の特性評価データについても、ステップ S 420～S 422 の各処理を実行することができる。そのため、然様な多目的の特性評価データについて以降の各処理を実行する場合には、特性評価データ前処理部 111 は、ステップ S 418 における判定処理を省略することができる。

[0056] ステップ S 419 において、制御部 11 は、特性評価データ前処理部 111 により、当該特性評価データに設定されている全ての目的変数を一つに合成する。この目的変数の合成処理は、例えば、当該特性評価データに設定されている全ての目的変数を加重平均することにより行う。これにより、当該特性評価データに設定されている目的変数の数が一つになり、その後に行う試作条件の最適化処理をいわゆる単目的最適化として実行できるようになる。なお、例えば、最適化処理をベイズ最適化により行う場合には、複数の目的変数が設定されていても最適化処理を実行することができる。そこで、斯様な場合は、設定されている目的変数の数が二つ以上であるとステップ S 418 で判定された特性評価データに対して、ステップ S 419 において目的変数の合成処理を施さずに、目的変数の数が二つ以上のままその後の最適化処理を多目的最適化として行ってもよい。制御部 11 は、ステップ S 419 における処理が完了すると、ステップ S 420 に進む。

[0057] ステップ S 420 において、制御部 11 は、特性評価データ前処理部 111 により、必要に応じて特性評価データに対して標準化処理を施す。この標準化処理は、図 6 に概要を例示したように、特性評価データのスケールを、平均 = 0、標準偏差（分散） = 1 となるように変換するものである。制御部 11 は、ステップ S 420 における処理が完了すると、ステップ S 421 に進む。なお、ステップ S 421 で特性評価データに対して正規化処理を施す場合には、S 420 における標準化処理を省略して、そのままステップ S 421 に進んでもよい。

[0058] ステップ S 421 において、制御部 11 は、特性評価データ前処理部 111

1により、必要に応じて特性評価データに対して正規化処理を施す。この正規化処理は、スケールの異なる説明変数間を比較しやすくする目的で行うものである。なお、ステップS420で特性評価データに対して標準化処理を施した場合は、S421において正規化処理を施さずに、その後の各処理を実行してもよい。制御部11は、ステップS421における処理が完了すると、ステップS422に進む。

[0059] ステップS422において、制御部11は、特性評価データ前処理部111により、特性評価データについて上下限值を設定する。本実施形態の試作条件提案システム1では、特性評価データ前処理部111は、既存データから上下限值を自動的に抽出して設定する。また、試作条件提案システム1のユーザーは、特性評価データ前処理部111が自動的に設定した上下限值を、必要に応じて手動で修正することができる。制御部11は、ステップS422における処理が完了すると、図4のステップS401～S422により前処理が施された特性評価データである前処理実施済データを記憶部12に格納して、図4のフローチャートに示す特性評価データ前処理を終了する。

[0060] 図7は、特徴量選択処理の詳細を示すフローチャートである。

[0061] ステップS710において、制御部11は、特徴量選択処理部112により、記憶部12から前処理実施済データを取得し、当該前処理実施済データに冗長な説明変数が含まれているか否かを判定する。この判定は、相関係数が所定の数以上、例えば0.8以上となる説明変数の組合せを抽出できるか否かを基準に行う。当該前処理実施済データに冗長な説明変数が含まれていると判定した場合、制御部11は、冗長な説明変数の一方を削除してステップS720に進む。なお、本実施形態の試作条件提案システム1では、相関係数が0.8以上となる説明変数の組合せが出力部132を通じてユーザーに可視化され、ユーザーは、削除する説明変数を、入力部131を通じて選択することができる。他方、当該前処理実施済データに冗長な説明変数が含まれていないと判定した場合、制御部11は、そのままステップS720に進む。

[0062] なお、ステップS 7 2 0として、制御部 1 1 は、特徴量選択処理部 1 1 2 により、ステップS 7 1 0の処理を経た前処理実施済データについて決定木分析 (Decision Tree Analysis) を行い、出力部 1 3 2 を通じて分析結果をユーザーに可視化する処理を実行してもよい。これにより、ユーザーは、可視化された決定木に基づいて、ステップS 7 1 0における判定処理や、冗長な説明変数の一方を削除する処理の結果の妥当性を検証することができる。制御部 1 1 は、ステップS 7 2 0における処理が完了すると、ステップS 7 3 0に進む。

[0063] ステップS 7 3 0において、制御部 1 1 は、特徴量選択処理部 1 1 2 により、前処理実施済データに含まれている複数の説明変数の各々について特性評価データに対する重要度を評価し、評価結果を基に、ステップS 3 3 0で行われる回帰モデル作成処理において回帰モデルの説明変数とされる特徴量を自動的に選択する処理を行う。本実施形態の試作条件提案システム 1 は、説明変数の重要度の評価と特徴量の選択とを行うこの処理を、R F E (Recursive Feature Elimination) と呼ばれる、ランダムフォレスト回帰木をアルゴリズムに用いる方法によって行う。この方法は、前処理実施済データに含まれている説明変数を重要度の低いものから順に一つずつ取り除いていき、残った説明変数から得られる特性値の予測精度が閾値以下に低下する直前に当該前処理実施済データに含まれていた説明変数を、重要変数として評価するものである。この方法は、複数の決定木を組み合わせる重要度を算出するランダムフォレスト回帰木をアルゴリズムに用いることにより、ロバストな特徴量を選択でき、過学習しにくいモデルを作成できる利点を有する。そのため、本実施形態の試作条件提案システム 1 は、特性評価データがサンプル数に対して説明変数が多いという特徴を備え、全説明変数で特性予測モデルを構築すると過学習する恐れがあるような場合にも、この方法により特徴量を自動選択することで、予測精度の高いモデルを構築することができる。また、本実施形態の試作条件提案システム 1 は、当該処理を行う際に、目的変数との相関を考慮することができる。制御部 1 1 は、ステップS 7 3 0にお

ける処理が完了すると、ステップS 7 4 0に進む。

[0064] ステップS 7 4 0において、制御部1 1は、特徴量選択処理部1 1 2により、ステップS 7 3 0で説明変数の重要度の評価と特徴量の選択とを行った前処理実施済データについて、説明変数の数を減らしても汎化性能が向上しないか否かを判定する。説明変数の数を減らしても汎化性能は向上しないと判定した場合（ステップS 7 4 0：Y）は、説明変数の組合せを決定するためにステップS 7 6 0に進み、説明変数の数を減らした場合に汎化性能が向上すると判定した場合（ステップS 7 4 0：N）は、汎化性能が向上する数の説明変数に限定するためにステップS 7 5 0に進む。

[0065] ステップS 7 5 0において、制御部1 1は、特徴量選択処理部1 1 2により、説明変数の数を減らした場合に汎化性能が向上するとステップS 7 4 0で判定された前処理実施済データについて、汎化性能が向上する数の説明変数に絞り込む処理を行う。本実施形態の試作条件提案システム1において、この処理は、当該前処理実施済データに含まれる説明変数のうち、汎化性能の向上に影響を及ぼす説明変数を特徴量選択処理部1 1 2が自動的に選択することによって行われる。制御部1 1は、ステップS 7 5 0における処理が完了すると、図7のフローチャートに示す特徴量選択処理を終了する。

[0066] ステップS 7 6 0において、制御部1 1は、特徴量選択処理部1 1 2により、ステップS 7 4 0で説明変数の数を減らしても汎化性能は向上しないと判定された前処理実施済データについて、説明変数の数を決定する処理を行う。本実施形態の試作条件提案システム1では、ユーザーが説明変数の数を決定することができる。特徴量選択処理部1 1 2は、入力部1 3 1または通信部1 4を介してユーザーから入力を受け付けた説明変数の数に決定する。制御部1 1は、ステップS 7 6 0における処理が完了すると、図7のフローチャートに示す特徴量選択処理を終了する。

[0067] 図8は、回帰モデル作成処理の詳細を示すフローチャートである。

[0068] ステップS 8 1 0において、制御部1 1は、回帰モデル作成処理部1 1 3により、特徴量選択処理が施された前処理実施済データについて、説明変数

間の制約条件を設定する。本実施形態の試作条件提案システム 1 では、例えば、ユーザーが三種類の原料 A、B、C について、重量パーセント濃度（wt %）の合計が 100 %（ $A + B + C = 100$ ）となるような制約を与えたい場合に、斯様な条件を説明変数間の制約条件として指定することができる。回帰モデル作成処理部 113 は、入力部 131 または通信部 14 を介してユーザーから指定を受け付けた説明変数間の制約条件を設定する。これにより、ちぐはぐで現実離れした試作条件が提案されることを防止できる。制御部 11 は、ステップ S 810 における処理が完了すると、ステップ S 820 に進む。

[0069] ステップ S 820 において、制御部 11 は、回帰モデル作成処理部 113 により、作成する回帰モデルの評価のための交差検証の実施条件を選択する。なお、本実施形態の試作条件提案システム 1 は、K - 分割交差検証（K-fold Cross Validation）によって回帰モデル毎の評価を行う。また、その実施条件として、 $K = 10$ がデフォルト値に設定されている。この場合、試作条件提案システム 1 は、10 分割交差検証によって回帰モデルの評価を行う。なお、本実施形態の試作条件提案システム 1 では、ユーザーが交差検証の実施条件を選択することもできる。すなわち、回帰モデル作成処理部 113 は、入力部 131 または通信部 14 を介してユーザーから交差検証の実施条件を受け付けることができる。制御部 11 は、ステップ S 820 における処理が完了すると、ステップ S 830 に進む。

[0070] ステップ S 830 において、制御部 11 は、回帰モデル作成処理部 113 により、試作条件の探索に予測モデルとして用いる回帰モデルの候補を選択する。このとき、回帰モデル作成処理部 113 は、入力部 131 または通信部 14 を介してユーザーから選択処理を受け付けた回帰モデルを候補として選択する。本実施形態の試作条件提案システム 1 では、ユーザーは、ガウス過程回帰と、前述した線形回帰、回帰木（アンサンブル法による場合を含む）、ニューラルネットワークによる回帰、サポートベクター回帰、ロジスティック回帰および LASSO 回帰等の各種の回帰モデルとから複数の回帰モ

デルを候補として選択することができる。制御部 11 は、ステップ S 830 における処理が完了すると、ステップ S 840 に進む。

[0071] ステップ S 840 において、制御部 11 は、回帰モデル作成処理部 113 により、ステップ S 830 で候補として選択された各種回帰モデルのそれぞれについて、最適なハイパーパラメータ (Hyperparameter) を探索して設定する。本実施形態の試作条件提案システム 1 では、回帰モデル毎に、回帰モデル作成処理部 113 が全てのパラメータを自動的に探索し、回帰モデルの作成時にハイパーパラメータとして設定したときにその回帰モデルの汎化性能を最も良くするものを自動的に設定する。制御部 11 は、ステップ S 840 における処理が完了すると、ステップ S 850 に進む。

[0072] ステップ S 850 において、制御部 11 は、回帰モデル作成処理部 113 により、それぞれ最適なハイパーパラメータが設定された各種回帰モデルから、最も汎化性能が高い回帰モデルを選定する処理を行う。制御部 11 は、ステップ S 850 における処理が完了すると、ステップ S 860 に進む。

[0073] ステップ S 860 において、制御部 11 は、回帰モデル作成処理部 113 により、最終的な回帰モデルを決定する処理を行う。制御部 11 は、ステップ S 860 における処理が完了すると、図 8 のフローチャートに示す回帰モデル作成処理を終了する。

[0074] 図 9 は、試作条件提案処理の詳細を示すフローチャートである。

[0075] ステップ S 910 において、制御部 11 は、試作条件提案処理部 114 により、図 8 のステップ S 850 で作成した回帰モデルに基づいて試作条件の探索処理を行う。試作条件提案処理部 114 は、この処理を最適化処理により実行する。なお、本実施形態の試作条件提案システム 1 は、数理最適化 (Mathematical Optimization; MO)、ベイズ最適化 (Bayesian Optimization; BO)、遺伝的アルゴリズム (Genetic Algorithm; GA)、ニュートン法 (Newton's Method; NM) および単体法 (Simplex Method; SM) といった各種の最適化処理の手法を使用可能に構成されている。その結果、目的変数である特性の予測値が最良となるときの各説明変数が、当該探索処理の結

果を表す仮試作条件としてユーザーに提案される。また、このとき、試作条件提案処理部 114 は、当該仮試作条件について感度解析を行って、当該仮試作条件を構成している各説明変数の重要度を評価し、評価結果を合わせて提示する。なお、本実施形態の試作条件提案システム 1 では、使用した回帰モデルがガウス過程回帰の場合には、獲得関数が最大になる試作条件を選択することもできる。制御部 11 は、ステップ S 910 における処理が完了すると、ステップ S 920 に進む。

[0076] ステップ S 920 において、制御部 11 は、試作条件提案処理部 114 により、ステップ S 910 でユーザーに提案した仮試作条件に対する修正を、ユーザーから受け付ける。試作条件提案処理部 114 は、仮試作条件を構成している各説明変数の値の修正に係る入力操作を入力部 131 または通信部 14 を介してユーザーから受け付けると、修正内容に応じて仮試作条件を修正する。制御部 11 は、ステップ S 920 における処理が完了すると、ステップ S 930 に進む。

[0077] ステップ S 930 において、制御部 11 は、試作条件提案処理部 114 により、回帰モデルを使用して、修正後の仮試作条件で試作した場合の材料の特性の予測値を求め、計算結果をユーザーに提示する。また、このとき、試作条件提案処理部 114 は、ステップ S 910 と同様に、修正後の仮試作条件についても感度解析を行って、当該修正後の仮試作条件を構成している説明変数の重要度を評価し、評価結果を合わせて提示する。なお、この評価結果は、ユーザーが仮試作条件を修正する度に更新されて、常に最新の評価結果がユーザーに提示される。制御部 11 は、ステップ S 930 における処理が完了すると、ステップ S 940 に進む。

[0078] ステップ S 940 において、制御部 11 は、試作条件提案処理部 114 により、修正後の仮試作条件について、ステップ S 930 で求めた特性の予測値が、試作対象の材料の特性値として不十分か否かを判定する。この判定は、例えば、使用する回帰モデルがガウス過程回帰の場合には、試作条件毎の、当該試作条件で試作した場合に材料の特性が改善される期待値を表す獲得

関数 (Acquisition Function) を修正後の仮試作条件について求め、当該獲得関数の値と、獲得関数の最大値との差が所定の範囲内にあるか否かを判定することによって行う。なお、獲得関数は、任意の試作条件で試作した場合の材料の特性の予測値 μ と、当該予測値のばらつきを表す標準偏差 σ とを基に計算される。予測される特性値が不十分であると判定した場合（ステップ S 9 4 0 : Y）は、ステップ S 9 2 0 に戻って再びユーザーから試作条件に対する修正指示を受け付け、予測される特性値が不十分でないとして判定した場合（ステップ S 9 4 0 : N）は、当該修正後の仮試作条件で試作する場合の材料の特性の予測値は十分であるため、ステップ S 9 5 0 に進む。すなわち、ステップ S 9 4 0 におけるこの処理は、仮試作条件に係る材料の特性の予測値が不十分でないとして判定されるまで繰り返し行われる。

[0079] ステップ S 9 5 0 において、制御部 1 1 は、試作条件提案処理部 1 1 4 により、試作条件提案処理部 1 1 4 は、ステップ S 9 4 0 で予測される特性値が不十分でないとして判定された仮試作条件を確定させ、試作条件が確定したものとしてユーザーに提案する。制御部 1 1 は、ステップ S 9 5 0 における処理が完了すると、図 9 のフローチャートに示す試作条件提案処理を終了する。

[0080] なお、前述したように、本実施形態の試作条件提案システム 1 は、図 9 のステップ S 9 5 0 で提案した試作条件に基づいてユーザーが材料の試作を行い、その成果物の特性の評価結果を表すデータが新たな特性評価データとして入力されると、当該新たに入力された特性評価データを基に、より最適化された試作条件をユーザーに提案する。この場合に、試作条件提案システム 1 の制御部 1 1 は、新たに入力された特性評価データに欠損値が含まれているか否かを判定する。欠損値が含まれていると判定した場合（Y）は、この欠損値を適宜に処理する必要がある。そのため、この欠損値が説明変数に係るものである場合には図 4 のステップ S 4 0 4 から処理を開始させる形で、この欠損値が目的変数に係るものである場合には図 4 のステップ S 4 1 1 から処理を開始させる形で、当該新たに入力された特性評価データに対して特

性評価データ前処理を施す。他方、欠損値が含まれていないと判定した場合（N）は、当該新たに入力された特性評価データに対する特性評価データ前処理の実施は不要である。そのため、斯様な場合には、制御部11は、回帰モデルの更新の要否を判定する。回帰モデルの更新が必要と判定された場合、制御部11は、改めて回帰モデルを作成するため、図4のステップS420から処理を開始させる形で、当該新たに入力された特性評価データについて特徴量選択処理を実行する。他方、回帰モデルの更新が不要と判定された場合、制御部11は、特徴量選択処理、回帰モデル作成処理および回帰モデル評価処理を省略し、前回作成した回帰モデルを使用して、図9のステップS910から処理を開始させる形で、当該新たに入力された特性評価データについて試作条件提案処理を行う。なお、新たに入力された特性評価データに欠損値が含まれている場合にも、回帰モデルの更新が不要な場合には、制御部11は、同様に、特徴量選択処理、回帰モデル作成処理および回帰モデル評価処理を省略する。

[0081] 以上説明した本発明の実施形態によれば、以下のような作用効果を奏する。

[0082] （1）試作条件提案システム1は、材料開発者に材料の試作条件を提案するシステムであって、特性評価データ前処理部111と、特徴量選択処理部112と、回帰モデル作成処理部113と、試作条件提案処理部114とを備える。特性評価データ前処理部111は、材料の特性の評価結果を表す特性評価データに対して前処理を施す（ステップS310）。特徴量選択処理部112は、前処理が施された特性評価データについて特徴量選択処理を実行する（ステップS320）。回帰モデル作成処理部113は、特徴量選択処理の結果を基に、前処理が施された特性評価データについて回帰モデル作成処理を実行する（ステップS330）。試作条件提案処理部114は、前処理が施された特性評価データについて、回帰モデル作成処理部113が作成した回帰モデルに基づいて試作条件提案処理を実行する（ステップS350）。このようにしたので、生データの状態の特性評価データに対して必要な

前処理が自動的に施されるため、特性評価データに対して複雑な前処理を人手により行うことなく、その後の各処理を実行することができる。また、汎化性能が良好な回帰モデルを使用して、予測される特性値が良好な試作条件をユーザーである材料開発者に提案することができる。すなわち、本実施形態の試作条件提案システム 1 によれば、いわゆる生データの状態の特性評価データに基づいて、考慮すべき特徴量の種類の多さゆえにきわめて広範に渡る試作条件から良好な試作条件を導出して、材料開発者に提案することができる。

[0083] (2) 特性評価データ前処理部 111 が実行する前記前処理は、欠損値の補完処理（ステップ S 408）、外れ値および異常値の処理（ステップ S 404～S 406 およびステップ S 411～S 413）、標準化処理（ステップ S 420）ならびに正規化処理（ステップ S 421）の少なくともいずれか一つを含む。このようにしたので、生データの状態の特性評価データに対して必要な前処理が自動的に施されて前処理実施済データとなり、その後の各処理を正常に実行することができるようになる。

[0084] (3) 特性評価データ前処理部 111 が実行する対数変換処理（ステップ S 410）は、Box-Cox 変換処理（図 5）である。このようにしたので、特性評価データの分布を正規分布に近づけることができるため、機械学習における回帰精度を向上させることができる。

[0085] (4) 特徴量選択処理部 112 は、特性評価データ前処理部 111 が前処理を施した特性評価データに含まれる複数の説明変数の重要度を、任意の機械学習アルゴリズムを用いて評価し、評価結果を基に複数の説明変数から回帰モデルの説明変数を選択する処理（ステップ S 730）を実行する。このようにしたので、汎化性能を低下させることなく、説明変数の数を最小限に減らして制御部 11 の処理負荷を低減することができる。また、このようにしたので、過学習を抑制することが可能となり、少数データに対しても回帰精度の高いモデルを作成することができる。さらに、このようにしたので、重要な説明変数をユーザーが見落とした場合であっても、当該説明変数を自動

的に拾い上げることができる。

[0086] (5) 上記の機械学習アルゴリズムは、複数の決定木を組み合わせて重要度を算出するランダムフォレストである。このようにしたので、ロバストな特徴量を選択でき、過学習しにくい回帰モデルを作成することができる。

[0087] (6) 回帰モデル作成処理部 113 は、交差検証の結果に基づいて、汎化性能が最良の回帰モデルを選択する処理を実行する（ステップ S850）。このようにしたので、特性評価データの内容に応じて適切な回帰モデルを選択することができる。

[0088] (7) 回帰モデル作成処理部 113 は、作成する回帰モデルの各々に最適なハイパーパラメータを設定する（ステップ S840）。このようにしたので、回帰モデル毎に、当該回帰モデルに最適なハイパーパラメータが自動的に設定される。

[0089] (8) 試作条件提案処理部 114 は、材料開発者に提案した材料の試作条件に対する当該材料開発者の修正操作を受け付ける処理を実行する（ステップ S920）。このようにしたので、試作条件提案システム 1 のユーザーである材料開発者は、試作条件の修正作業を、修正前の試作条件で試作した場合の材料の特性の予測値を確認しながら対話的に行うことにより、修正後の試作条件に自らの知見を盛り込むことができる。

[0090] (9) 試作条件提案処理は、最適化処理を含む。このようにしたので、特性の予測値が最良となる試作条件をユーザーに提案することができる。

[0091] なお、本発明は上記実施形態に限定されるものではなく、その要旨を逸脱しない範囲内で、任意の構成要素を用いて実施可能である。

[0092] 上記の実施形態や変形例はあくまで一例であり、発明の特徴が損なわれないう限り、本発明はこれらの内容に限定されるものではない。また、上記では種々の実施形態や変形例を説明したが、本発明はこれらの内容に限定されるものではない。本発明の技術的思想の範囲内で考えられるその他の態様も本発明の範囲内に含まれる。

符号の説明

- [0093] 1 : 試作条件提案システム
- 1 1 : 制御部
 - 1 2 : 記憶部
 - 1 3 : ユーザーインターフェース部
 - 1 4 : 通信部
 - 1 1 1 : 特性評価データ前処理部
 - 1 1 2 : 特徴量選択処理部
 - 1 1 3 : 回帰モデル作成処理部
 - 1 1 4 : 試作条件提案処理部
 - 1 3 1 : 入力部
 - 1 3 2 : 出力部
 - 4 0 0 : インターネット

請求の範囲

- [請求項1] 材料開発者に材料の試作条件を提案する試作条件提案システムであって、
前記材料の特性の評価結果を表す特性評価データに対して前処理を施す特性評価データ前処理部と、
前記前処理が施された特性評価データについて特徴量選択処理を実行する特徴量選択処理部と、
前記特徴量選択処理の結果を基に、前記前処理が施された特性評価データについて回帰モデル作成処理を実行する回帰モデル作成処理部と、
前記前処理が施された特性評価データについて、前記回帰モデル作成処理部が作成した回帰モデルに基づいて試作条件提案処理を実行する試作条件提案処理部と
を備える試作条件提案システム。
- [請求項2] 請求項1に記載の試作条件提案システムにおいて、
前記特性評価データ前処理部が実行する前記前処理は、欠損値の補完処理、外れ値および異常値の処理、標準化処理ならびに正規化処理の少なくともいずれか一つを含む試作条件提案システム。
- [請求項3] 請求項2に記載の試作条件提案システムにおいて、
前記特性評価データ前処理部が実行する対数変換処理は、 $\log$ 変換処理である試作条件提案システム。
- [請求項4] 請求項1に記載の試作条件提案システムにおいて、
前記特徴量選択処理部は、前記特性評価データ前処理部が前処理を施した特性評価データに含まれる複数の説明変数の重要度を、任意の機械学習アルゴリズムを用いて評価し、評価結果を基に前記複数の説明変数から前記回帰モデルの説明変数を選択する処理を実行する試作条件提案システム。
- [請求項5] 請求項4に記載の試作条件提案システムにおいて、

前記機械学習アルゴリズムは、ランダムフォレストである試作条件提案システム。

[請求項6] 請求項1に記載の試作条件提案システムにおいて、
前記回帰モデル作成処理部は、交差検証の結果に基づいて、汎化性能が最良の回帰モデルを選択する処理を実行する試作条件提案システム。

[請求項7] 請求項1に記載の試作条件提案システムにおいて、
前記回帰モデル作成処理部は、作成する回帰モデルの各々に最適なハイパーパラメータを設定する試作条件提案システム。

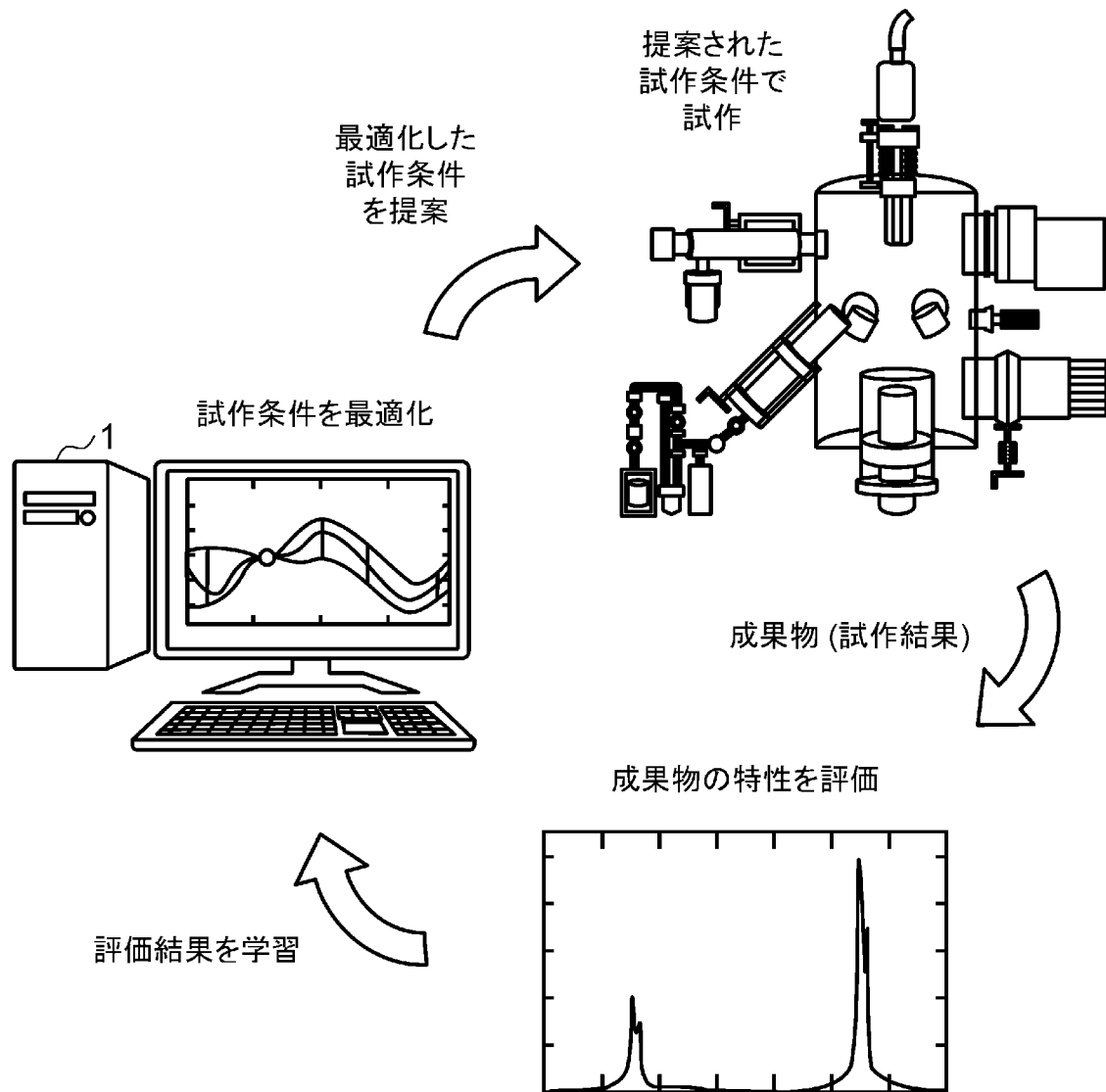
[請求項8] 請求項1に記載の試作条件提案システムにおいて、
前記試作条件提案処理部は、前記材料開発者に提案した前記材料の前記試作条件に対する当該材料開発者の修正操作を受け付ける処理を実行する試作条件提案システム。

[請求項9] 請求項1に記載の試作条件提案システムにおいて、
前記試作条件提案処理は、最適化処理を含む試作条件提案システム。

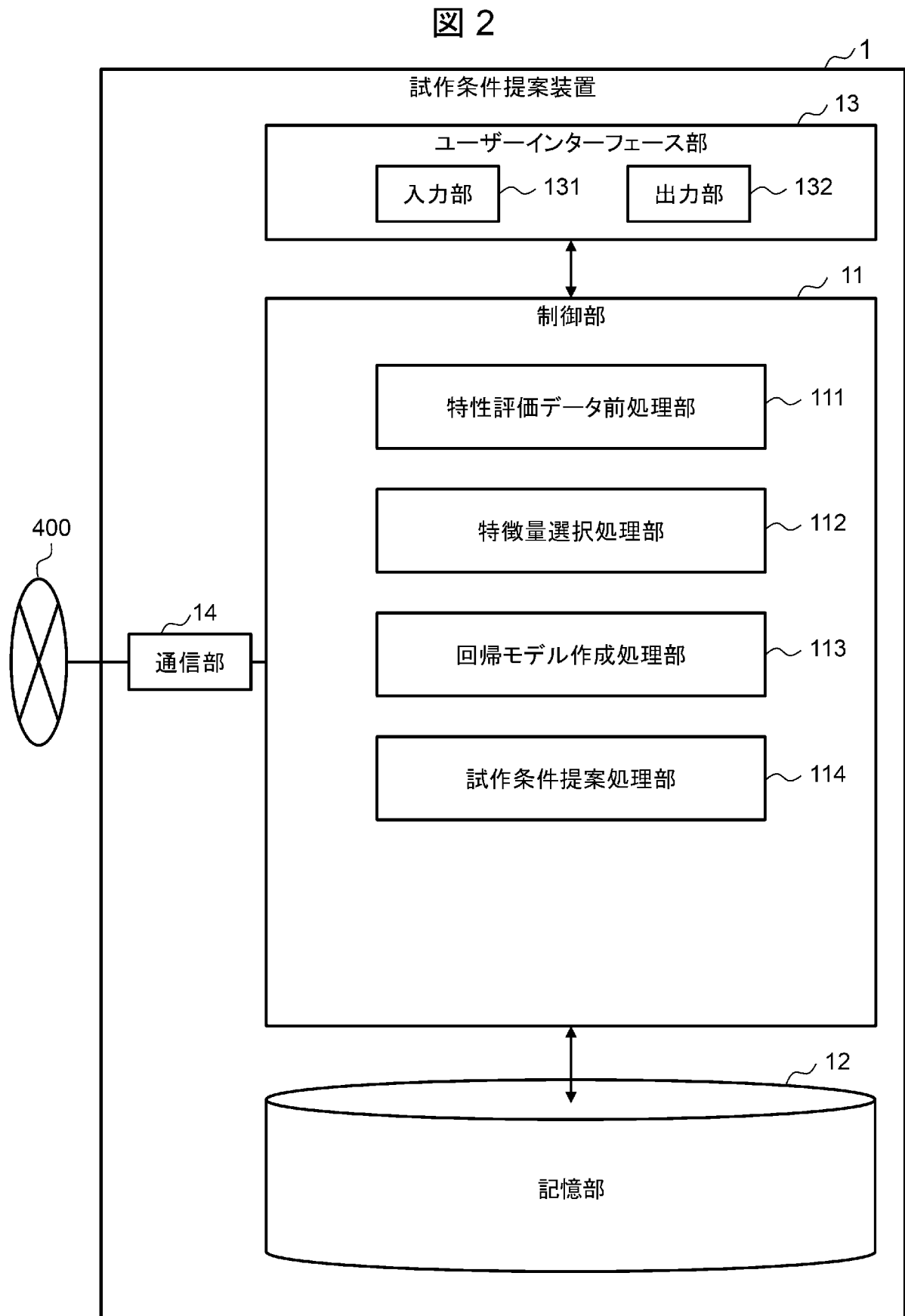
[請求項10] 材料開発者に材料の試作条件を提案する試作条件提案方法であって、
、
前記材料の特性の評価結果を表す特性評価データに対する前処理と、
、
前記前処理が施された特性評価データについて行う特徴量選択処理と、
前記特徴量選択処理の結果を基に、前記前処理が施された特性評価データについて行う回帰モデル作成処理と、
前記前処理が施された特性評価データについて、前記回帰モデル作成処理で作成した回帰モデルに基づいて行う試作条件提案処理とをコンピュータに実行させる、試作条件提案方法。

[図1]

図 1

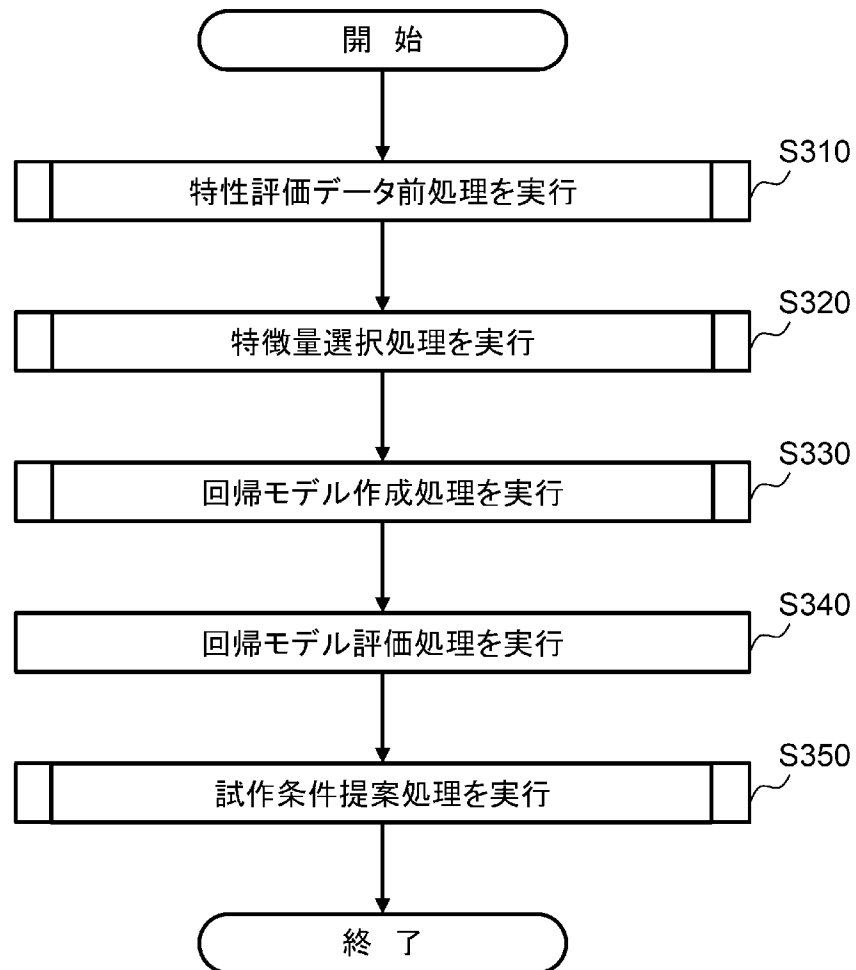


[図2]



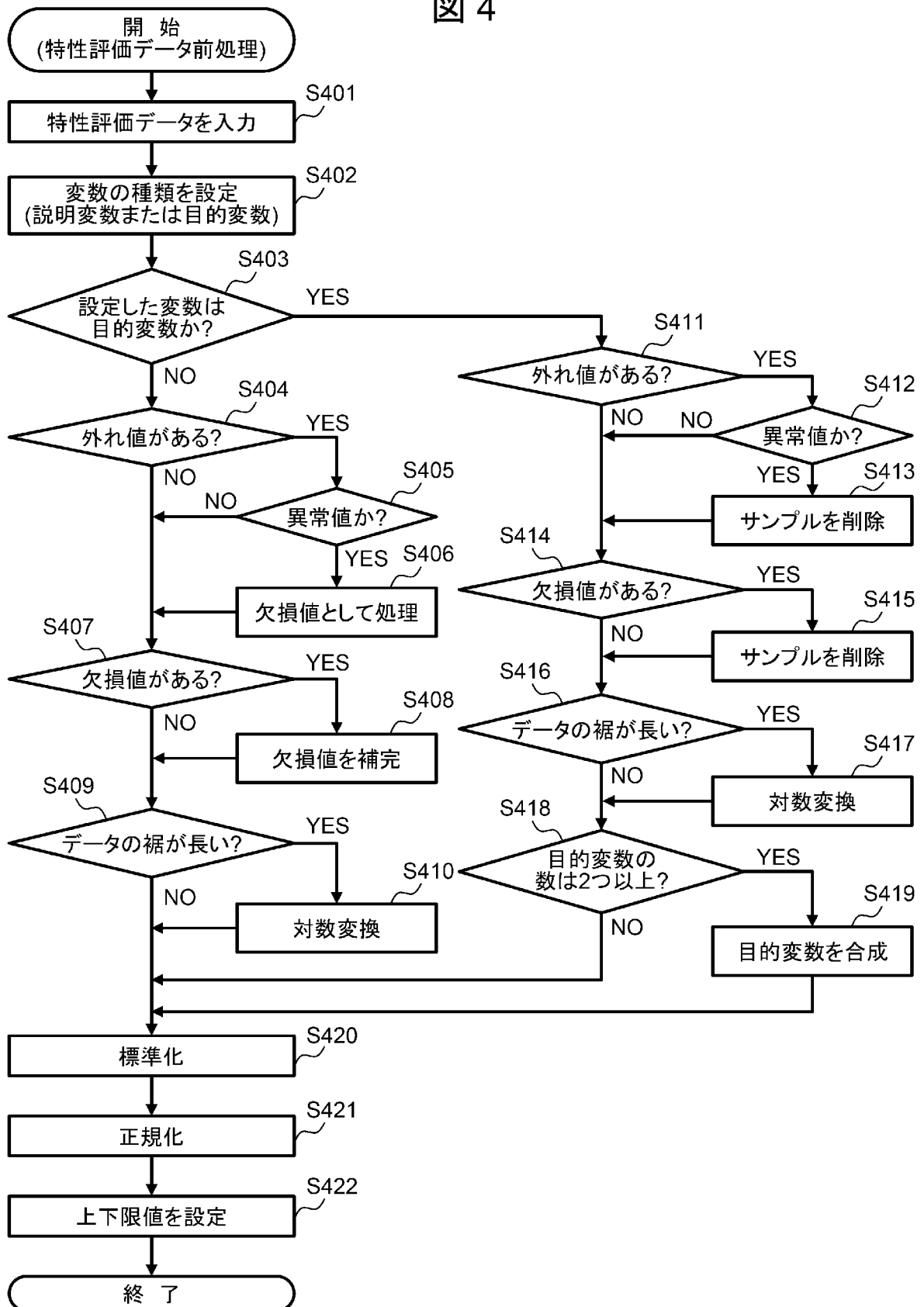
[図3]

図 3



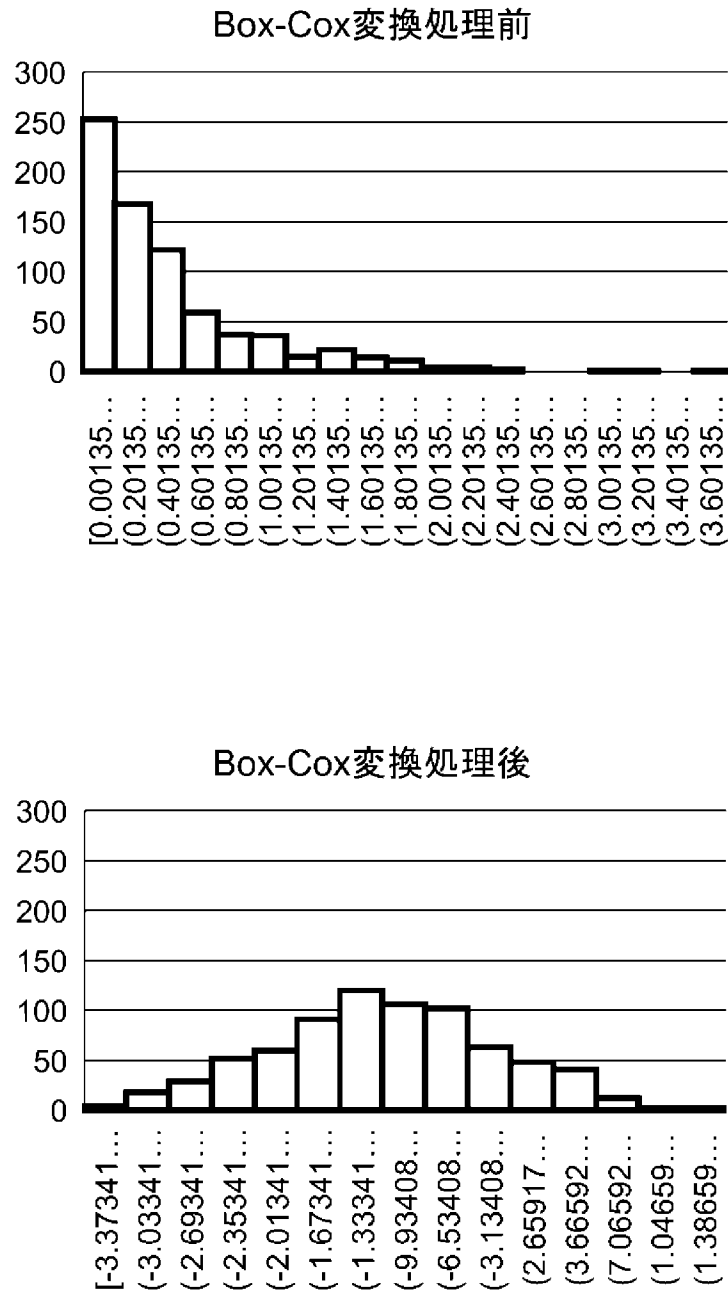
[図4]

図 4



[図5]

図 5



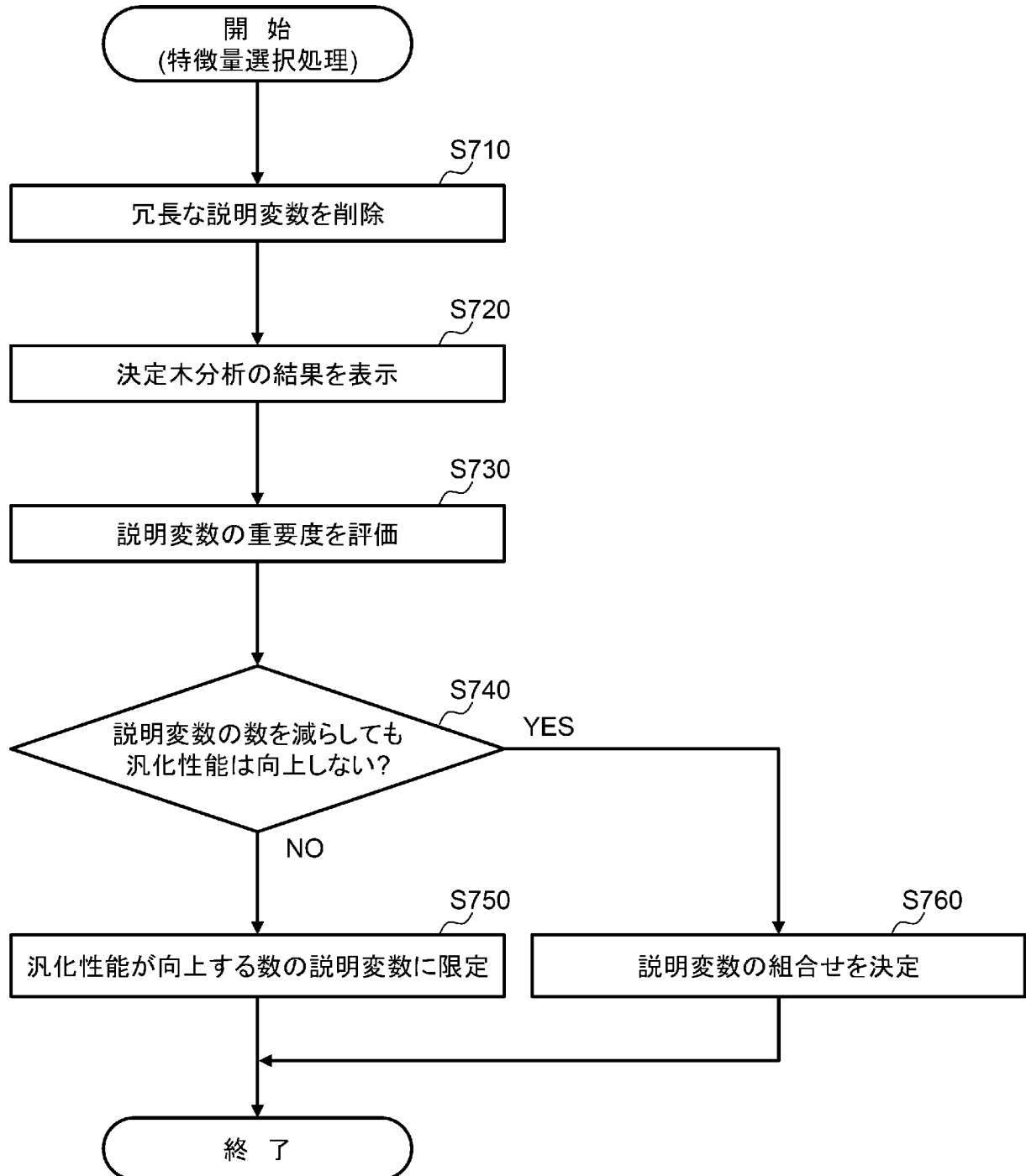
[図6]

図 6

	標準化処理前	標準化処理後
平 均	0.501162104	-4.1892E-16
分 散	0.518653175	1.000667334

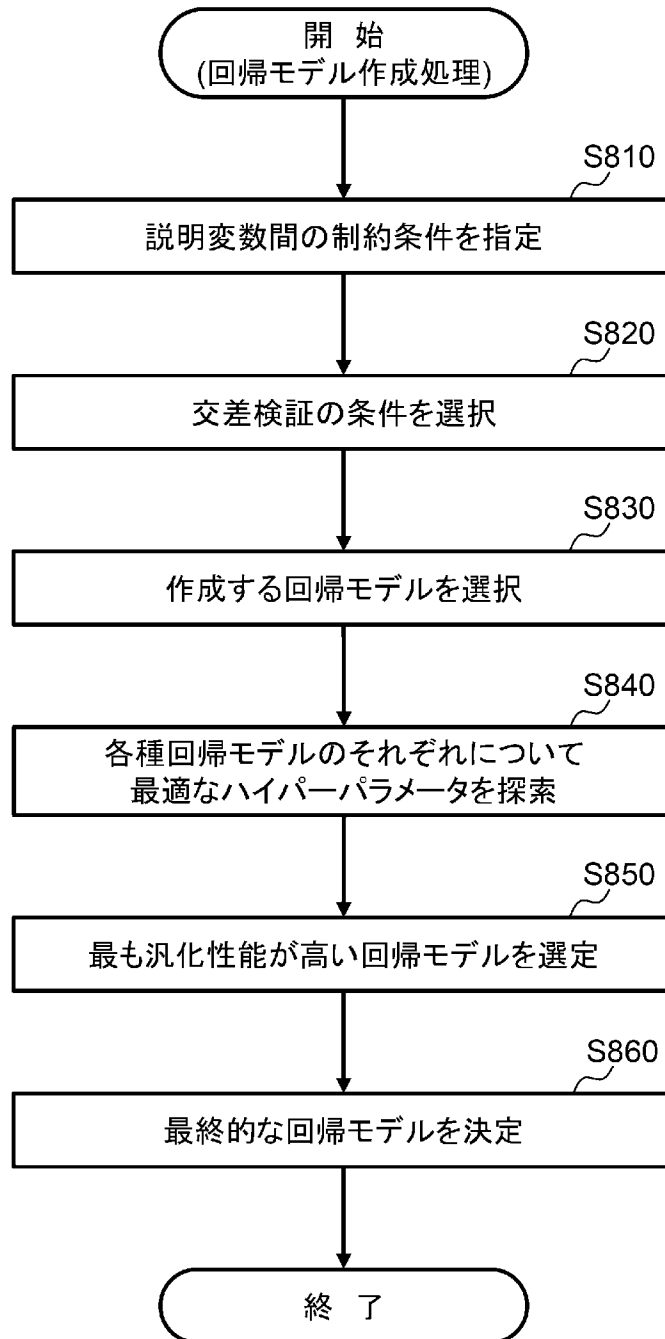
[図7]

図 7



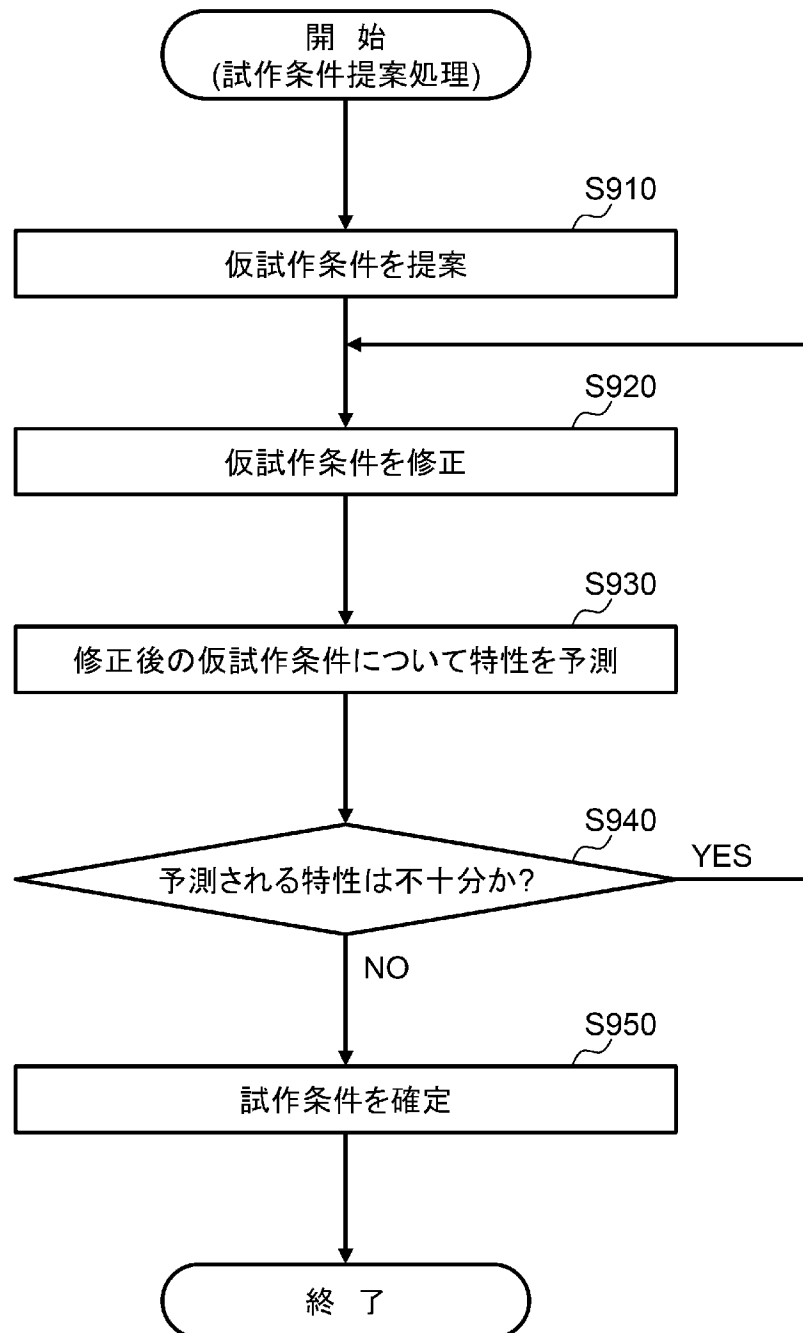
[図8]

図 8



[図9]

図 9



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2023/016025

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER**G16C 60/00**(2019.01)i

FI: G16C60/00

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

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 1971-2023

Registered utility model specifications of Japan 1996-2023

Published registered utility model applications of Japan 1994-2023

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.
X	WO 2021/015134 A1 (SHOWA DENKO K.K.) 28 January 2021 (2021-01-28) paragraphs [0009]-[0019], [0022]-[0052]	1-10
A	JP 2022-081474 A (JFE STEEL CORP.) 31 May 2022 (2022-05-31) entire text, all drawings	1-10
A	WO 2018/168580 A1 (NEC CORP.) 20 September 2018 (2018-09-20) entire text, all drawings	1-10



Further documents are listed in the continuation of Box C.



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

30 June 2023

Date of mailing of the international search report

11 July 2023

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/JP2023/016025

Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)	Publication date (day/month/year)
WO	2021/015134	A1	28 January 2021	US 2022/0261510 A1 paragraphs [0009]-[0018], [0041]-[0075] EP 4006764 A1 CN 114144788 A	
JP	2022-081474	A	31 May 2022	(Family: none)	
WO	2018/168580	A1	20 September 2018	US 2020/0034367 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 FI: G16C60/00														
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 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 <table border="0"> <tr> <td>日本国実用新案公報</td> <td>1922 - 1996年</td> </tr> <tr> <td>日本国公開実用新案公報</td> <td>1971 - 2023年</td> </tr> <tr> <td>日本国実用新案登録公報</td> <td>1996 - 2023年</td> </tr> <tr> <td>日本国登録実用新案公報</td> <td>1994 - 2023年</td> </tr> </table> 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）			日本国実用新案公報	1922 - 1996年	日本国公開実用新案公報	1971 - 2023年	日本国実用新案登録公報	1996 - 2023年	日本国登録実用新案公報	1994 - 2023年				
日本国実用新案公報	1922 - 1996年													
日本国公開実用新案公報	1971 - 2023年													
日本国実用新案登録公報	1996 - 2023年													
日本国登録実用新案公報	1994 - 2023年													
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												
X	WO 2021/015134 A1（昭和電工株式会社）28.01.2021（2021 - 01 - 28） 段落0009 - 0019、0022 - 0052	1-10												
A	JP 2022-081474 A（JFEスチール株式会社）31.05.2022（2022 - 05 - 31） 全文、全図	1-10												
A	WO 2018/168580 A1（日本電気株式会社）20.09.2018（2018 - 09 - 20） 全文、全図	1-10												
☐ C欄の続きにも文献が列挙されている。 ☒ パテントファミリーに関する別紙を参照。														
<table border="0"> <tr> <td>* 引用文献のカテゴリー</td> <td>“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</td> </tr> <tr> <td>“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</td> <td>“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</td> </tr> <tr> <td>“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</td> <td>“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</td> </tr> <tr> <td>“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）</td> <td>“&” 同一パテントファミリー文献</td> </tr> <tr> <td>“O” 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献</td> <td></td> </tr> <tr> <td>“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</td> <td></td> </tr> </table>			* 引用文献のカテゴリー	“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	“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	“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	“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	“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	“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）	“&” 同一パテントファミリー文献	“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	
* 引用文献のカテゴリー	“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													
“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	“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													
“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	“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													
“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）	“&” 同一パテントファミリー文献													
“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														
国際調査を完了した日 30.06.2023	国際調査報告の発送日 11.07.2023													
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） 塩田 徳彦 5R 4533 電話番号 03-3581-1101 内線 3562													

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/JP2023/016025

引用文献			公表日	パテントファミリー文献			公表日
WO	2021/015134	A1	28.01.2021	US	2022/0261510	A1	
				[0009]-[0018], [0041]-[0075]			
				EP	4006764	A1	
				CN	114144788	A	
JP	2022-081474	A	31.05.2022	(ファミリーなし)			
WO	2018/168580	A1	20.09.2018	US	2020/0034367	A1	
				全文、全図			