

(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号  
特許第7232122号  
(P7232122)

(45)発行日 令和5年3月2日(2023.3.2)

(24)登録日 令和5年2月21日(2023.2.21)

(51)国際特許分類 F I  
G 1 6 C 20/30 (2019.01) G 1 6 C 20/30  
G 1 6 C 20/70 (2019.01) G 1 6 C 20/70

請求項の数 15 (全23頁)

(21)出願番号	特願2019-89910(P2019-89910)	(73)特許権者	000005108
(22)出願日	令和1年5月10日(2019.5.10)		株式会社日立製作所
(65)公開番号	特開2020-187417(P2020-187417 A)	(74)代理人	110002365
(43)公開日	令和2年11月19日(2020.11.19)		弁理士法人サンネクスト国際特許事務所
審査請求日	令和3年11月25日(2021.11.25)	(72)発明者	但馬 慶行
			東京都千代田区丸の内一丁目6番6号
		(72)発明者	株式会社日立製作所内
		(72)発明者	奥村 綱雄
			東京都千代田区丸の内一丁目6番6号
		(72)発明者	株式会社日立製作所内
		(72)発明者	大嶺 智子
			東京都千代田区丸の内一丁目6番6号
		(72)発明者	株式会社日立製作所内
		(72)発明者	近藤 晃弘
			最終頁に続く

(54)【発明の名称】 物性予測装置及び物性予測方法

(57)【特許請求の範囲】

【請求項1】

物性予測に用いるモデルを学習するモデル学習部と、  
未知サンプルのデータとして入力された未知入力ベクトルに対して、前記モデル学習部で学習した前記モデルを用いた前記物性予測を行う物性予測部と、  
前記物性予測の結果を表示する表示部と、  
を備え、  
前記モデル学習部は、  
前記モデルの学習に用いる訓練データの入力集合をクラスタリングし、各クラスタにおける代表ベクトルを選定する代表ベクトル選定部と、  
各前記代表ベクトルの近傍にある第1所定数の前記訓練データを使って、物性値を予測するベースモデルを学習するベースモデル学習部と、  
各前記代表ベクトルの近傍にある第2所定数の前記訓練データを使って、前記ベースモデルごとに当該ベースモデルの残差の反数を予測する補正モデルを学習する補正モデル学習部と、  
を有し、  
前記物性予測部は、  
前記未知入力ベクトルに対して、当該未知入力ベクトルに近い前記代表ベクトルに関する前記ベースモデル及び前記補正モデルを検索するモデル検索部と、  
前記未知入力ベクトルに対する前記ベースモデルの予測値としてベースモデル予測値を

10

20

算出するベースモデル予測部と、

前記未知入力ベクトルに対する前記補正モデルの予測値として補正モデル予測値を算出する補正モデル予測部と、

前記ベースモデル予測値と前記補正モデル予測値に所定の定数を掛けた値との和によって、物性ごとに物性予測値を算出するとともに、前記補正モデル予測値に基づいて当該物性予測値のリスクを示す補正度を算出する予測結果決定部と、

を有し、

前記表示部は、少なくとも前記予測結果決定部によって算出された前記物性予測値及び前記補正度を表示する予測結果表示画面を提供する

ことを特徴とする物性予測装置。

10

【請求項 2】

前記表示部は、前記予測結果表示画面において、前記予測結果決定部が算出した前記物性予測値を、当該物性予測値に対応する前記補正度を関連付けた表示態様で表示する

ことを特徴とする請求項 1 に記載の物性予測装置。

【請求項 3】

前記予測結果表示画面では、前記物性予測値が、前記対応する前記補正度の度合いを示す補正度レベルに応じて異なる表示態様で表示され、

前記表示部は、前記予測結果表示画面における前記補正度レベルの分類基準または前記補正度レベルごとの表示態様を設定可能な補正度調整画面をさらに提供する

ことを特徴とする請求項 2 に記載の物性予測装置。

20

【請求項 4】

前記予測結果決定部は、前記物性ごとの前記物性予測値に対応する前記補正モデル予測値に基づいて、今回の前記物性予測全体における前記物性予測値のリスクを示すリスク値をさらに算出する

ことを特徴とする請求項 1 に記載の物性予測装置。

【請求項 5】

前記モデル学習部は、MLKR (Metric Learning for Kernel Regression) によってデータ空間の距離計量を学習する距離計量学習部をさらに有し、

前記代表ベクトルの近傍にある前記訓練データを使って行われる、前記ベースモデル学習部による前記ベースモデルの学習及び前記補正モデル学習部による前記補正モデルの学習において、前記近傍は、前記距離計量学習部で学習された前記距離計量を用いて判断される

ことを特徴とする請求項 1 に記載の物性予測装置。

30

【請求項 6】

前記補正モデル学習部は、前記補正モデルを前記学習する際、前記ベースモデルの残差の反数を予測する第 1 の補正モデルを作成し、前記ベースモデルの出力と前記第 1 の補正モデルの予測値を定数倍した値との残差の反数を予測する第 2 の補正モデルを作成し、当該作成の手順を繰り返すことによって第 N (N は 2 以上の自然数) の補正モデルまでを作成し、

前記物性予測部は、前記作成された前記第 1 から第 N の補正モデルを前記補正モデルとして用いて、前記物性予測を行う

ことを特徴とする請求項 1 に記載の物性予測装置。

40

【請求項 7】

前記モデル学習部は、前記訓練データの入力集合及び出力集合に対して推定される汎化誤差を最小化する定数を線形探索することによって、前記予測結果決定部による前記物性予測値の算出において前記補正モデル予測値に掛けられる前記所定の定数を、事前に設定する

ことを特徴とする請求項 1 に記載の物性予測装置。

【請求項 8】

前記代表ベクトルの近傍にある前記訓練データを使って行われる、前記ベースモデル学

50

習部による前記ベースモデルの学習及び前記補正モデル学習部による前記補正モデルの学習において、

前記近傍は、所定の距離計量、出力への寄与が所定程度以上に大きい1若しくは複数の次元に対して定義される計量、入力を主成分分析で提示の空間に圧縮した空間上で定義される計量、あるいはカーネル関数で定義される計量、のうちの何れかの計量を用いて判断される

ことを特徴とする請求項1に記載の物性予測装置。

【請求項9】

物性予測に用いるモデルを学習するモデル学習ステップと、  
未知サンプルのデータとして入力された未知入力ベクトルに対して、前記モデル学習ステップで学習した前記モデルを用いた前記物性予測を行う物性予測ステップと、

10

前記物性予測の結果を表示する表示ステップと、  
を備え、

前記モデル学習ステップは、

前記モデルの学習に用いる訓練データの入力集合をクラスタリングし、各クラスタにおける代表ベクトルを選定する代表ベクトル選定ステップと、

各前記代表ベクトルの近傍にある第1所定数の前記訓練データを使って、物性値を予測するベースモデルを学習するベースモデル学習ステップと、

各前記代表ベクトルの近傍にある第2所定数の前記訓練データを使って、前記ベースモデルごとに当該ベースモデルの残差の反数を予測する補正モデルを学習する補正モデル学習ステップと、

20

を有し、

前記物性予測ステップは、

前記未知入力ベクトルに対して、当該未知入力ベクトルに近い前記代表ベクトルに関する前記ベースモデル及び前記補正モデルを検索するモデル検索ステップと、

前記未知入力ベクトルに対する前記ベースモデルの予測値としてベースモデル予測値を算出するベースモデル予測ステップと、

前記未知入力ベクトルに対する前記補正モデルの予測値として補正モデル予測値を算出する補正モデル予測ステップと、

前記ベースモデル予測ステップで算出された前記ベースモデル予測値と、前記補正モデル予測ステップで算出された前記補正モデル予測値に所定の定数を掛けた値との和をとることによって、物性ごとに物性予測値を算出するとともに、前記補正モデル予測値に基づいて当該物性予測値のリスクを示す補正度を算出する予測結果決定ステップと、

30

を有し、

前記表示ステップでは、少なくとも前記予測結果決定ステップで算出された前記物性予測値及び前記補正度を表示する予測結果表示画面が提供される

ことを特徴とする物性予測方法。

【請求項10】

前記表示ステップでは、前記予測結果表示画面において、前記予測結果決定ステップで算出された前記物性予測値を、当該物性予測値に対応する前記補正度を関連付けた表示態様で表示する

40

ことを特徴とする請求項9に記載の物性予測方法。

【請求項11】

前記表示ステップでは、前記予測結果表示画面において、前記物性予測値が、前記対応する前記補正度の度合いを示す補正度レベルに応じて異なる表示態様で表示され、

前記モデル学習ステップは、

前記予測結果表示画面における前記補正度レベルの分類基準または前記補正度レベルごとの表示態様を設定可能な補正度調整画面を表示する第2表示ステップをさらに有する

ことを特徴とする請求項10に記載の物性予測方法。

【請求項12】

50

前記予測結果決定ステップでは、前記物性ごとの前記物性予測値に対応する前記補正モデル予測値に基づいて、今回の前記物性予測全体における前記物性予測値のリスクを示すリスク値をさらに算出する

ことを特徴とする請求項 9 に記載の物性予測方法。

【請求項 13】

前記モデル学習ステップは、MLKR (Metric Learning for Kernel Regression) によってデータ空間の距離計量を学習する距離計量学習ステップをさらに有し、

前記代表ベクトルの近傍にある前記訓練データを使って行われる、前記ベースモデル学習ステップにおける前記ベースモデルの学習及び前記補正モデル学習ステップにおける前記補正モデルの学習において、前記近傍は、前記距離計量学習ステップで学習された前記距離計量を用いて判断される

10

ことを特徴とする請求項 9 に記載の物性予測方法。

【請求項 14】

前記補正モデル学習ステップにおいて前記補正モデルを前記学習する際、前記ベースモデルの残差の反数を予測する第 1 の補正モデルを作成し、前記ベースモデルの出力と前記第 1 の補正モデルの予測値を定数倍した値との残差の反数を予測する第 2 の補正モデルを作成し、当該作成の手順を繰り返すことによって第 N (N は 2 以上の自然数) の補正モデルまでを作成し、

前記物性予測ステップでは、前記作成された前記第 1 から第 N の補正モデルを前記補正モデルとして用いて、前記物性予測が行われる

20

ことを特徴とする請求項 9 に記載の物性予測方法。

【請求項 15】

前記モデル学習ステップにおいて、前記訓練データの入力集合及び出力集合に対して推定される汎化誤差を最小化する定数を線形探索することによって、前記予測結果決定ステップの前記物性予測値の算出において前記補正モデル予測値に掛けられる前記所定の定数を、事前に設定する

ことを特徴とする請求項 9 に記載の物性予測方法。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

30

本発明は、物性予測装置及び物性予測方法に関し、マテリアルズインフォマティクスや製造条件の最適化等において、設計を支援するために物性を予測する物性予測装置及び物性予測方法に適用して好適なものである。

【背景技術】

【0002】

昨今、マテリアルズインフォマティクスや製造条件の最適化等において、情報技術 (IT) や人工知能 (AI) を活用することで、設計期間の短縮や新材料・新配合の発見が期待されている。このような IT や AI の活用の 1 つとして、機械学習ベースによる物性予測に大きな期待が寄せられている。

【0003】

40

例えば、特許文献 1 には、化合物の物性予測を行う物性予測装置が開示されている。特許文献 1 に開示された物性予測装置では、化学構造に関するパラメータ値と予測項目に対する値とが予め登録された学習サンプルについて、類似度が予め決定した閾値以上である学習サンプルを取り出してサブサンプルセットを構築し、サブサンプルセットにデータ解析を行って予測モデルを作成し、この予測モデルを未知のサンプルに適用して、予測項目の値 (予測値) を算出する。その際、サブサンプルセット中の学習サンプル数が最終パラメータセット中のパラメータ数に比べて少ない場合には、予測モデルの信頼性を高めるために、サブサンプルセットの構築に用いる類似度の閾値を変更することにより、サブサンプルセットに含まれる学習サンプルの数を増やすことが開示されている。

【先行技術文献】

50

## 【特許文献】

【0004】

【文献】特許第5083320号公報

## 【発明の概要】

## 【発明が解決しようとする課題】

【0005】

しかし、特許文献1に開示された物性予測装置の場合、上記類似度が閾値未満となった学習サンプル（訓練データ）の情報はサブサンプルセットに用いられないため、物性予測の汎化誤差が大きくなるおそれがあった。また、特許文献1の物性予測装置では、上記類似度を毎回計算する必要があるため、処理負荷の増加により処理能力が低下してしまうおそれがあった。また、特許文献1の物性予測装置では、予測における統計学的なリスクの度合い（ブレ具合）が分からないため、算出された予測値に対する信頼性を判断することが難しいという問題もあった。

10

【0006】

本発明は以上の点を考慮してなされたもので、物性予測において、予測の汎化誤差を抑制するとともに、予測のリスクを管理可能な物性予測装置及び物性予測方法を提案しようとするものである。

## 【課題を解決するための手段】

【0007】

かかる課題を解決するため本発明においては、物性予測に用いるモデルを学習するモデル学習部と、未知サンプルのデータとして入力された未知入力ベクトルに対して、前記モデル学習部で学習した前記モデルを用いた前記物性予測を行う物性予測部と、前記物性予測の結果を表示する表示部と、を備える物性予測装置が提供される。この物性予測装置において、前記モデル学習部は、前記モデルの学習に用いる訓練データの入力集合をクラスタリングし、各クラスタにおける代表ベクトルを選定する代表ベクトル選定部と、各前記代表ベクトルの近傍にある第1所定数の前記訓練データを使って、物性値を予測するベースモデルを学習するベースモデル学習部と、各前記代表ベクトルの近傍にある第2所定数の前記訓練データを使って、前記ベースモデルごとに当該ベースモデルの残差の反数を予測する補正モデルを学習する補正モデル学習部と、を有する。また、前記物性予測部は、前記未知入力ベクトルに対して、当該未知入力ベクトルに近い前記代表ベクトルに関する前記ベースモデル及び前記補正モデルを検索するモデル検索部と、前記未知入力ベクトルに対する前記ベースモデルの予測値としてベースモデル予測値を算出するベースモデル予測部と、前記未知入力ベクトルに対する前記補正モデルの予測値として補正モデル予測値を算出する補正モデル予測部と、前記ベースモデル予測値と前記補正モデル予測値に所定の定数を掛けた値との和によって、物性ごとに物性予測値を算出するとともに、前記補正モデル予測値に基づいて当該物性予測値のリスクを示す補正度を算出する予測結果決定部と、を有する。そして、前記表示部は、少なくとも前記予測結果決定部によって算出された前記物性予測値及び前記補正度を表示する予測結果表示画面を提供する。

20

30

【0008】

また、かかる課題を解決するため本発明においては、物性予測に用いるモデルを学習するモデル学習ステップと、未知サンプルのデータとして入力された未知入力ベクトルに対して、前記モデル学習ステップで学習した前記モデルを用いた前記物性予測を行う物性予測ステップと、前記物性予測の結果を表示する表示ステップと、を備える物性予測方法が提供される。この物性予測方法において、前記モデル学習ステップは、前記モデルの学習に用いる訓練データの入力集合をクラスタリングし、各クラスタにおける代表ベクトルを選定する代表ベクトル選定ステップと、各前記代表ベクトルの近傍にある第1所定数の前記訓練データを使って、物性値を予測するベースモデルを学習するベースモデル学習ステップと、各前記代表ベクトルの近傍にある第2所定数の前記訓練データを使って、前記ベースモデルごとに当該ベースモデルの残差の反数を予測する補正モデルを学習する補正モデル学習ステップと、を有する。また、前記物性予測ステップは、前記未知入力ベクトル

40

50

に対して、当該未知入力ベクトルに近い前記代表ベクトルに関する前記ベースモデル及び前記補正モデルを検索するモデル検索ステップと、前記未知入力ベクトルに対する前記ベースモデルの予測値としてベースモデル予測値を算出するベースモデル予測ステップと、前記未知入力ベクトルに対する前記補正モデルの予測値として補正モデル予測値を算出する補正モデル予測ステップと、前記ベースモデル予測ステップで算出された前記ベースモデル予測値と、前記補正モデル予測ステップで算出された前記補正モデル予測値に所定の定数を掛けた値との和をとることによって、物性ごとに物性予測値を算出するとともに、前記補正モデル予測値に基づいて当該物性予測値のリスクを示す補正度を算出する予測結果決定ステップと、を有する。そして、前記表示ステップでは、少なくとも前記予測結果決定ステップで算出された前記物性予測値及び前記補正度を表示する予測結果表示画面が提供される。

10

#### 【発明の効果】

##### 【0009】

本発明によれば、物性予測において、予測の汎用誤差を抑制するとともに、予測のリスクを管理することができる。

#### 【図面の簡単な説明】

##### 【0010】

【図1】本発明の一実施の形態に係る物性予測装置のシステム構成並びに機能構成を示す構成図である。

【図2】図1に示した物性予測装置のハードウェア構成を示す構成図である。

20

【図3】モデル学習処理の処理手順の概要を示すフローチャートである。

【図4】実験データの入力集合のデータ構成例を示す図である。

【図5】実験データの出力集合のデータ構成例を示す図である。

【図6】補正度調整画面の具体例を示す図である。

【図7】予測モデル学習処理の詳細な処理手順例を示すフローチャートである。

【図8】近傍定義処理の処理手順の一例を示すフローチャートである。

【図9】物性予測処理の処理手順の一例を示すフローチャートである。

【図10】未知入力ベクトルの入力集合のデータ構成例を示す図である。

【図11】予測結果データのデータ構成例を示す図である。

【図12】予測結果表示画面の具体例を示す図である。

30

【図13】基本形における物性予測値及びリスク値の算出過程を示すブロック線図である。

【図14】変形例における物性予測値及びリスク値の算出過程を示すブロック線図である。

#### 【発明を実施するための形態】

##### 【0011】

以下、図面を参照して、本発明の実施の形態を詳述する。

##### 【0012】

#### (1) 物性予測装置の構成

図1は、本発明の一実施の形態に係る物性予測装置のシステム構成並びに機能構成を示す構成図である。本実施の形態に係る物性予測装置1は、学習フェーズにおいて予測モデル(ベースモデル及び補正モデル)を学習し、運用フェーズにおいては、入力された未知サンプルのデータ(未知入力ベクトル)に基づいて検索した好適な予測モデルを用いて物性予測を行い、その予測結果を出力する装置であって、例えば一般的な計算サーバ(及びその周辺機器)等によって実現される。

40

##### 【0013】

図1に示すように、物性予測装置1は、ネットワーク3を介して、エンジニアが使用する端末2と通信可能に接続される。エンジニアとは、端末2の操作を介して物性予測装置1を利用するユーザを意味し、以降の説明ではエンジニアに統一して表記する。ネットワーク3は、例えばLAN(Local Area Network)であるが、特定のネットワークに限定されるものではなく、有線/無線を問わない。例えば、物性予測装置1と端末2との間は、WWW(World Wide Web)経由で接続されてもよい。

50

## 【 0 0 1 4 】

そして、詳細は後述するが、物性予測装置 1 は、モデル学習部 1 1、物性予測部 1 2、表示部 1 3、及びデータ管理部 1 4 を機能構成として備える。このうち、モデル学習部 1 1 は、代表ベクトル選定部 1 5、ベースモデル学習部 1 6、及び補正モデル学習部 1 7 を有し、物性予測部 1 2 は、モデル検索部 1 8、ベースモデル予測部 1 9、補正モデル予測部 2 0、及び予測結果決定部 2 1 を有するが、不図示の機能部をさらに有してもよい。

## 【 0 0 1 5 】

図 2 は、図 1 に示した物性予測装置のハードウェア構成を示す構成図である。図 2 に示したように、物性予測装置 1 は、CPU (Central Processing Unit) 1 0 1、ROM (Read Only Memory) 1 0 2、RAM (Random Access Memory) 1 0 3、外部記憶装置 1 0 4、通信 I / F 1 0 5、外部入力装置 1 0 6、及び外部出力装置 1 0 7 を備える。外部記憶装置 1 0 4 は、例えば HDD (Hard Disk Drive) や SSD (Solid State Drive) 等の記憶装置に相当し、外部入力装置 1 0 6 は、例えばキーボードやマウス等の入力装置に相当し、外部出力装置 1 0 7 は、例えばディスプレイやプリンタ等の出力装置に相当する。

10

## 【 0 0 1 6 】

物性予測装置 1 について、図 2 に示したハードウェア構成と図 1 に示した機能構成との関係を説明すると、データ管理部 1 4 は、CPU 1 0 1 が RAM 1 0 3 または外部記憶装置 1 0 4 に対してデータの読み書きを制御することによって実現される。

## 【 0 0 1 7 】

また、物性予測装置 1 におけるその他の機能構成は、CPU 1 0 1 が、ROM 1 0 2 あるいは外部記憶装置 1 0 4 に格納されたプログラムを RAM 1 0 3 に読み込み、必要に応じて ROM 1 0 2、RAM 1 0 3、または外部記憶装置 1 0 4 に記憶されたデータを参照しながら上記プログラムを実行し、通信 I / F 1 0 5、外部入力装置 1 0 6、または外部出力装置 1 0 7 を制御することによって実現される。

20

## 【 0 0 1 8 】

特に、表示部 1 3 は、CPU 1 0 1 の制御によって外部出力装置 1 0 7 に対して画面表示等の出力を可能とする他、ネットワーク 3 を経由して出力情報を所定の出力形式 (例えば GUI : Graphic User Interface) で外部 (例えば端末 2) に提供することもできる。このとき、エンジニアは、端末 2 を操作して出力情報にアクセスし、GUI 上で各種操作を行うことができ、物性予測装置 1 の CPU 1 0 1 は、その操作結果を受け付けてさらなる処理を実行することができる。また、以下の説明では「画像表示」について説明するが、本実施の形態は、画像表示以外の出力形態 (例えば、印刷やデータ出力) に置き換えることもできる。

30

## 【 0 0 1 9 】

なお、図 2 に示したハードウェア構成の一部 (具体的には、外部記憶装置 1 0 4、外部入力装置 1 0 6、または外部出力装置 1 0 7 等) は、必ずしも物性予測装置 1 の計算サーバ内になくてもよく、計算サーバに外部接続された周辺機器や装置等に置き換えてもよい。また、端末 2 のハードウェア構成は、物性予測装置 1 と同様と考えてよいため、詳細な説明を省略する。

40

## 【 0 0 2 0 】

図 1 に戻り、物性予測装置 1 の各機能構成について説明する。

## 【 0 0 2 1 】

物性予測装置 1 においてモデル学習部 1 1 は、学習フェーズにおける処理 (モデル学習処理) を実行することにより、予測モデル (ベースモデル及び補正モデル) を学習する、モデル学習機能を有する。

## 【 0 0 2 2 】

モデル学習部 1 1 に含まれる機能構成のうち、代表ベクトル選定部 1 5 は、モデル学習処理において学習する訓練データの入力集合をクラスタリングし、各クラスタの代表ベクトルを選定する機能を有する。なお、モデル学習処理で学習する訓練データは、データ管

50

理部 14 に蓄積された過去の実験データから選択される。

【 0023 】

また、ベースモデル学習部 16 は、代表ベクトルに基づいてベースモデルを学習する機能を有する。具体的にはベースモデル学習部 16 は、代表ベクトル選定部 15 によって選定された代表ベクトルごとに、当該代表ベクトルの近傍にある所定個数（本実施の形態では「K 個」とする）の訓練データ（ベースモデル訓練データ）を使って、物性値を予測するベースモデルを学習する。ベースモデル学習部 16 によって学習されたベースモデルは、データ管理部 14 に登録される。

【 0024 】

また、補正モデル学習部 17 は、補正モデルを学習する機能を有する。具体的には補正モデル学習部 17 は、代表ベクトル選定部 15 によって選定された代表ベクトルごとに、当該代表ベクトルの近傍にある所定個数（本実施の形態では「L 個」とする）の訓練データ（補正モデル訓練データ）を使って、ベースモデルごとに当該ベースモデルの残差の反数を予測する補正モデルを学習する。補正モデル学習部 17 によって学習された補正モデルは、データ管理部 14 に登録される。

10

【 0025 】

なお、上記したモデル学習部 11 の機能部は、モデル学習部 11 が有するモデル学習機能のうちの代表的な一部の機能を実現するための機能構成の一例であって、モデル学習部 11 は、モデル学習機能に含まれる「その他の機能（処理）」を実現するために、さらに不図示の機能部を有してもよい（あるいは、上記の機能部の何れかが代替してもよい）。「その他の処理」とは具体的には例えば、実験データを受け付ける処理（図 3 のステップ S11）、実験データから訓練データを選択する処理（図 3 のステップ S12）、訓練データの前処理を行う処理（図 3 のステップ S13）、及び、物性予測値の汎化誤差を最小化するための定数（汎化誤差最小化定数）を探索する処理（図 7 のステップ S24）等が相当し、それぞれの詳細は後述する。そして、以降の説明では、このような不図示の機能部による処理は、モデル学習部 11 を処理主体として表記する。

20

【 0026 】

物性予測装置 1 において物性予測部 12 は、運用フェーズにおける処理（物性予測処理）を実行することにより、未知入力ベクトルに基づいて検索した好適な予測モデルを用いて物性予測を行い、その予測結果を表示部 13 に出力する、物性予測機能を有する。

30

【 0027 】

物性予測部 12 に含まれる機能構成のうち、モデル検索部 18 は、未知入力ベクトルに対する物性予測に用いるモデルを検索する機能を有する。具体的にはモデル検索部 18 は、データ管理部 14 に登録されたベースモデル及び補正モデルのうちから、未知入力ベクトルに近い代表ベクトルに関するベースモデル（対応ベースモデル）及び補正モデル（対応補正モデル）を検索する。ここでの、「代表ベクトルに関する」モデルとは、学習フェーズにおいて、当該代表ベクトルに基づいて（当該代表ベクトルの近傍にある訓練データを使って）学習されたモデルであることを意味する。

【 0028 】

また、ベースモデル予測部 19 は、モデル検索部 18 が検索した対応ベースモデルを用いて、未知入力ベクトルに対する対応ベースモデルの予測値（ベースモデル予測値）を算出する機能を有する。

40

【 0029 】

また、補正モデル予測部 20 は、モデル検索部 18 が検索した対応補正モデルを用いて、未知入力ベクトルに対する対応補正モデルの予測値（補正モデル予測値）を算出する機能を有する。

【 0030 】

予測結果決定部 21 は、ベースモデル予測部 19 が算出したベースモデル予測値と補正モデル予測部 20 が算出した補正モデル予測値とに基づいて、未知入力ベクトルに対する物性予測の予測結果を決定する機能を有する。具体的にはまず、予測結果決定部 21 は、

50



ベースモデル予測値と補正モデル予測値に汎化誤差最小化定数を掛けた値との和から、未知入力ベクトルに対する物性ごとの予測値（物性予測値）を算出する。また、予測結果決定部 2 1 は、補正モデル予測値の絶対値からそれぞれの物性予測値の補正度を算出する。この物性予測値の補正度は、物性ごとの予測値の統計学的なリスクの度合い（ブレ具合）を示す値である。さらに、予測結果決定部 2 1 は、上記算出した各物性予測値の補正度に所定の演算処理を行うことにより、今回の物性予測全体における予測値のリスクの度合い（ブレ具合）を「リスク値」として算出する。

#### 【 0 0 3 1 】

なお、上記した物性予測部 1 2 の機能部は、物性予測部 1 2 が有する物性予測機能のうちの代表的な一部の機能を実現するための機能構成の一例であって、物性予測部 1 2 は、物性予測機能に含まれる「その他の機能（処理）」を実現するために、さらに不図示の機能部を有してもよい（あるいは、上記の機能部の何れかが代替してもよい）。「その他の処理」とは具体的には例えば、未知入力ベクトルを受け付ける処理（図 9 のステップ S 4 1）等が相当する。そして、以降の説明では、このような不図示の機能部による処理は、物性予測部 1 2 を処理主体として表記する。

10

#### 【 0 0 3 2 】

表示部 1 3 は、モデル学習部 1 1 または物性予測部 1 2 の出力指示に基づいて、指示された情報を表示する機能を有する。具体的には例えば、表示部 1 3 は、物性予測処理において、物性予測の結果を示す予測結果表示画面（図 1 3 参照）を表示したり、モデル学習処理において、予測結果表示画面における補正度レベルの分類基準等を調整可能な補正度調整画面（図 6 参照）を表示したりする。

20

#### 【 0 0 3 3 】

データ管理部 1 4 は、物性予測装置 1 で用いられる各種データを格納・管理する機能を有する。図 4 , 図 5 , 図 1 0 , 図 1 1 には、データ管理部 1 4 が格納・管理するデータの一例が示されている。

#### 【 0 0 3 4 】

##### ( 2 ) 学習フェーズ（モデル学習処理）

物性予測装置 1 の学習フェーズにおける処理手順を、図 3 等を参照しながら説明する。図 3 は、モデル学習処理の処理手順の概要を示すフローチャートである。前述したように、モデル学習処理は、主にモデル学習部 1 1 の各部によって実行される。

30

#### 【 0 0 3 5 】

図 3 によればまず、モデル学習部 1 1 は、エンジニアによって端末 2 から実験データが入力されると、これを受け付けてデータ管理部 1 4 に蓄積する（ステップ S 1 1）。ここで、実験データとは、過去に行った実験に関するデータであって、実験に用いた原料や条件等のデータを示す入力情報と、実験で計測された物性のデータを示す出力情報とに分類することができる。本実施の形態では、データ管理部 1 4 は、実験の入力情報と出力情報とを、それぞれ入力集合と出力集合とにまとめて管理する。

#### 【 0 0 3 6 】

図 4 は、実験データの入力集合のデータ構成例を示す図であり、図 5 は、実験データの出力集合のデータ構成例を示す図である。図 4 に示した入力集合 1 1 0 は、実験の識別子を示す実験番号 1 1 1 と、当該実験で用いた各原料の使用量（使用率等でもよい）を示す原料 1 1 2 , 1 1 3 と、当該実験における各条件を示す条件 1 1 4 , 1 1 5 と、を備えて構成される。図 5 に示した出力集合 1 2 0 は、図 4 の実験番号 1 1 1 と同様に実験の識別子を示す実験番号 1 2 1 と、当該実験で計測された各物性の値を示す物性 1 2 2 ~ 1 2 6 と、を備えて構成される。なお、図 4 , 図 5 に示したデータ構成は一例であって、本実施の形態における実験データの格納形態は上記例に限定されるものではない。

40

#### 【 0 0 3 7 】

ステップ S 1 1 の次に、モデル学習部 1 1 は、ステップ S 1 1 でデータ管理部 1 4 に蓄積された実験データから、モデル学習処理において学習する訓練データを選択する（ステップ S 1 2）。ステップ S 1 2 においてどのような訓練データを選択するかは任意であり

50

、例えばエンジニアによって選択可能であってもよい。また、訓練データは実験データから選択されるため、訓練データの入力集合のデータ構成は、図4に示した実験データの入力集合110と同様であると考えることができ、訓練データの出力集合のデータ構成は、図5に示した実験データの出力集合120と同様であると考えられる。

#### 【0038】

次に、モデル学習部11は、ステップS12で選択した訓練データの前処理を行う(ステップS13)。ステップS13で実行される前処理の種類は限定されないが、例えば、訓練データに含まれるカテゴリカルデータ(定性的データ)に対して、ワンホットベクトル化したり、正規化したりする処理が挙げられる。

#### 【0039】

次に、モデル学習部11は、ステップS13で前処理が行われた訓練データを用いて、予測モデル(ベースモデル及び補正モデル)を学習する予測モデル学習処理を実行する(ステップS14)。詳細は図7等を参照しながら後述するが、予測モデル学習処理では、代表ベクトルの選定、ベースモデルの学習、補正モデルの学習、及び、汎化誤差最小化定数(本例では「定数」とする)の線形探索が行われる。

#### 【0040】

次に、モデル学習部11は、ステップS14の予測モデル学習処理の処理結果に基づいて、代表ベクトル、学習後のベースモデルと補正モデル、及び汎化誤差最小化定数(定数)を、紐付けてデータ管理部14に登録する(ステップS15)。

#### 【0041】

そして最後に、モデル学習部11は、予測結果表示画面における補正度レベルの分類基準や表示態様を調整可能な補正度調整画面の表示出力を表示部13に指示し、当該画面に対するエンジニアによる操作があった場合は適宜調整を行い(ステップS16)、その後、モデル学習処理を終了する。

#### 【0042】

ここで、補正度調整画面について補足する。具体例は図13に示すが、本実施の形態に係る物性予測装置1は、運用フェーズで物性予測が行われたとき、その結果を表示する予測結果表示画面において、物性の予測値を、予測のリスクを示す補正度の度合い(補正度レベル)を認識可能な態様で表示することができる。そして、このような予測結果表示画面における「補正度」の表示態様をエンジニアが事前に設定できるようにするため、モデル学習処理のステップS16では、補正度調整画面が表示される。なお、本例では、予測結果表示画面において補正度レベルを認識可能な態様で物性の予測値を表示することについて詳しく後述するが、本実施の形態はこれに限らず、補正度自体を認識可能な態様で表示するものであってもよい。

#### 【0043】

図6は、補正度調整画面の具体例を示す図である。図6に示したように、補正度調整画面210には、平均補正度と残差の絶対値とを両軸に有する分布図が表示される。分布図におけるデータの表示態様は、凡例211に示すように、補正度レベル(「補正度小」、「補正度中」、「補正度大」)によって異なる。そして、補正度調整画面210には、補正度レベルの分類基準を移動可能なスライダー212, 213が設置されている。そこでエンジニアは、スライダー212, 213を操作することによって、補正度レベルの分類基準を自在に調整することができる。なお、本例では、補正度レベルによって異なる模様が表示されるとしているが、本実施の形態はこれに限定されるものではなく、補正度レベルを識別できるものであればよい。例えば、色や大きさを異ならせてもよいし、これらを組み合わせてもよい。さらに、どのような表示態様とするかを選択できるようにしてもよい。そして、補正度調整画面210で調整された設定情報はデータ管理部14に登録され、予測結果表示画面の表示設定に反映される(図12の予測結果表示画面220参照)。

#### 【0044】

(2-1) 予測モデル学習処理

10

20

30

40

50

図3のステップS14における予測モデル学習処理について詳しく説明する。図7は、予測モデル学習処理の詳細な処理手順例を示すフローチャートである。

【0045】

図7によればまず、モデル学習部11の代表ベクトル選定部15が、図3のステップS13で前処理が行われた訓練データの入力集合をクラスタリングし、各クラスタにおける代表ベクトルを選定する(ステップS21)。代表ベクトルの選定は特定の方法に限定されるものではないが、例えば、k-means法を使って、対象クラスタの重心や中心を示すベクトルを当該クラスタの代表ベクトルに選定することが考えられる。その他にも例えば、階層的クラスタリングやDBSCAN(Density-based Spatial Clustering of Applications with Noise)等の方法を使って、代表ベクトルを選定するようにしてもよい。

10

【0046】

次に、モデル学習部11のベースモデル学習部16が、ステップS21で選定された複数の代表ベクトルのそれぞれについて、当該代表ベクトルの近傍にある所定個数(K個)の訓練データ(ベースモデル訓練データ)を使って、物性値を予測するベースモデルを学習する(ステップS22)。

【0047】

ステップS22の詳細な処理手順例を説明する。第1に、ベースモデル学習部16は、ベースモデル訓練データを空集合に初期化する。第2に、ベースモデル学習部16は、代表ベクトルが属するクラスタに属する訓練データをベースモデル訓練データに追加する。第2手順では、上記クラスタに属する訓練データを、代表ベクトルの近傍にあるものから順にベースモデル訓練データに追加していき、所定個数のK個に達した段階で第2手順を終了して第4手順に進む。一方、第2手順の完了時にベースモデル訓練データに追加された訓練データの数がK個未満であった場合は、ベースモデル訓練データに訓練データをさらに追加するために第3手順に進む。第3手順では、ベースモデル学習部16は、代表ベクトルが属するクラスタに属するか否かを問わずに、代表ベクトルの近傍にある未追加の訓練データを、総計がK個に達するまでベースモデル訓練データに追加し、完了後は第4手順に進む。第4手順では、これまでの各手順を経て追加されたK個のベースモデル訓練データを使って、ベースモデルを学習する。以上のような処理を代表ベクトルごとに繰り返すことにより、ベースモデル学習部16は、各代表ベクトルに関する(対応する)ベースモデルを学習することができる。

20

30

【0048】

次に、モデル学習部11の補正モデル学習部17が、ステップS21で選定された複数の代表ベクトルのそれぞれについて、当該代表ベクトルの近傍にある所定個数(L個)の訓練データ(補正モデル訓練データ)を使って、当該代表ベクトルに関するベースモデルの残差の反数を予測する補正モデルを学習する(ステップS23)。ここで、ベースモデルの残差の反数を予測する補正モデルとは、言い換えれば、ベースモデルの真値の偏差を打ち消す補正モデルであり、このような補正モデルを学習するためには、補正モデル訓練データに含まれる訓練データの数「L個」が、ベースモデル訓練データに含まれる訓練データの数(K個)よりも多いことが好ましい。

40

【0049】

次に、モデル学習部11は、各代表ベクトルについて、物性予測値の汎化誤差を最小化する最適な汎化誤差最小化定数(定数)を線形探索する(ステップS24)。

【0050】

ステップS24について補足説明する。本実施の形態では、代表ベクトルの近傍にある訓練データを用いて学習した予測モデルによる予測値、すなわち、ベースモデルの予測値と補正モデルの予測値とに基づいて、物性予測値を算出する。このとき物性予測値は、ベースモデルの予測値と補正モデルの予測値に「定数」を掛けた値との和によって表される。そして、ステップS24では、このような物性予測値で推定される汎化誤差ができるだけ小さくなるように、線形探索(リニアサーチ)によって「定数」の値を「0」から

50

「1」の間で探索する。具体的には例えば、実験で計測された物性のデータを示す出力集合120（図5参照）のうち、ベースモデルや補正モデルの代表ベクトルに近い入力情報に対応する出力情報を参照しながらリニアサーチを行うことにより、推定汎化誤差を最小化する最適な定数を探索することができる。このようにして探索された定数を汎化誤差最小化定数と呼ぶ。

【0051】

そしてステップS24の処理が完了すると、モデル学習部11は予測モデル学習処理を終了する。

【0052】

(2-2) 近傍の定義

ところで、上述した予測モデル学習処理では、ステップS22, S23において、代表ベクトルの「近傍」にあることを基準として、モデル学習に用いる訓練データが選択される。本実施の形態に係る物性予測装置1では、この「近傍」をどのように判断するかを、既知のメトリックラーニングを活用する等、任意に定義することができる。

【0053】

具体的な方法として例えば、ユークリッド距離やマハラノビス距離等の距離計量、物性（出力）に大きく（所定程度以上に）寄与する1若しくは複数の変数（次元）に対して定義される計量、あるいは、カーネル関数等で定義される計量等を用いて、近傍を定めることができる。

【0054】

また、別の具体的な方法として例えば、MLKR（Metric Learning for Kernel Regression）に代表される距離計量学習によって得られる計量を用いて、近傍を定めることもできる。この方法によれば、「距離計量」を可変性を有するものとして扱い、「距離計量」自体を学習することができる。

【0055】

図8は、近傍定義処理の処理手順の一例を示すフローチャートである。図8に示した近傍決定処理は、距離計量学習を利用して近傍を定義するメトリックの一例である。図8に示した処理は、モデル学習部11（例えばベースモデル学習部16や補正モデル学習部17）によって、例えば図3のステップS13とステップS14との間に実行される。なお、モデル学習部11が距離計量学習を実行可能な新たな機能部（距離計量学習部）を有すると考えてもよい。

【0056】

図8によればまず、モデル学習部11は、決定木の変数重要度に基づいて、近傍を判断するデータ集合の次元を削減する（ステップS31）。具体的には例えば、訓練データの入力集合において、各訓練データの次元（原料や材料）を削減する。なお、決定木の変数重要度は、決定木における不順度の減少具合等によって与えられる。

【0057】

次に、モデル学習部11は、距離計量学習としてMLKRによるデータ変換を実施する（ステップS32）。MLKRは、カーネル線形回帰の観点で汎化誤差を最小化するマハラノビス距離の共分散行列を得ることができる。そしてステップS32では、この共分散行列を2つの行列に分解したうちの片方を使ってデータを変換することで、「変換された空間におけるユークリッド距離」が、「元のデータを共分散行列に倣ったマハラノビス距離で与えられる距離」に相当する。したがってモデル学習部11は、ステップS32の距離計量学習で得られる計量を用いて、すなわち、当該空間におけるユークリッド距離に基づいて近傍を判断することにより、マハラノビス距離に基づく近傍を判断することが可能となる。

【0058】

なお、ステップS31で「次元を削減する」際には、主成分分析（PCA：Principal Component Analysis）の手法を利用するようにしてもよい。あるいは、MLKRによって次元を削減するようにしてもよい。

10

20

30

40

50

## 【 0 0 5 9 】

また、別の例として、図 8 に示したステップ S 3 1 , S 3 2 の処理のうち、何れかだけを実施するようにしてもよい。

## 【 0 0 6 0 】

また、上記の他にも、他のメトリックやカーネル関数を定義し、その距離や内積を使って近傍を判断できるようにしてもよい。

## 【 0 0 6 1 】

## ( 3 ) 運用フェーズ ( 物性予測処理 )

物性予測装置 1 の運用フェーズにおける処理手順を、図 9 等を参照しながら説明する。図 9 は、物性予測処理の処理手順の一例を示すフローチャートである。前述したように、物性予測処理は、主に物性予測部 1 2 の各部によって実行される。

10

## 【 0 0 6 2 】

図 9 によればまず、物性予測部 1 2 は、エンジニアによって端末 2 から未知サンプルのデータとして未知入力ベクトルが入力されると、これを受け付ける ( ステップ S 4 1 ) 。本実施の形態では、データ管理部 1 4 は、入力された未知入力ベクトルを実験番号に紐付けてまとめた入力集合で管理する。なお、運用フェーズにおける「実験」は、未知入力ベクトルに対して物性予測を行う実験を意味し、学習フェーズで入力される実験データの実験とは異なるものである。

## 【 0 0 6 3 】

図 1 0 は、未知入力ベクトルの入力集合のデータ構成例を示す図である。図 1 0 に示した入力集合 1 3 0 は、実験の識別子を示す実験番号 1 3 1 と、当該実験で入力された未知サンプルの原料 1 3 2 , 1 3 3 及び条件 1 3 4 , 1 3 5 と、を備えて構成される。

20

## 【 0 0 6 4 】

ステップ S 4 1 の次に、物性予測部 1 2 のモデル検索部 1 8 が、ステップ S 4 1 で受け付けた未知入力ベクトル ( 以後、単に未知入力ベクトルと称する ) に対して、物性予測に用いるモデルを検索する ( ステップ S 4 2 ) 。具体的にはモデル検索部 1 8 は、データ管理部 1 4 を参照して、当該未知入力ベクトルに近い代表ベクトルを 1 つ検索し、該当する代表ベクトルに関するベースモデル ( 対応ベースモデル ) 及び補正モデル ( 対応補正モデル ) を検索する。

## 【 0 0 6 5 】

次に、物性予測部 1 2 のベースモデル予測部 1 9 が、ステップ S 4 2 で検索された対応ベースモデルを用いて、未知入力ベクトルに対するベースモデルの予測値 ( ベースモデル予測値 ) を算出する ( ステップ S 4 3 ) 。

30

## 【 0 0 6 6 】

次に、物性予測部 1 2 の補正モデル予測部 2 0 が、ステップ S 4 2 で検索された対応補正モデルを用いて、未知入力ベクトルに対する補正モデルの予測値 ( 補正モデル予測値 ) を算出する ( ステップ S 4 4 ) 。

## 【 0 0 6 7 】

次に、物性予測部 1 2 の予測結果決定部 2 1 が、ステップ S 4 3 で算出されたベースモデル予測値と、ステップ S 4 4 で算出された補正モデル予測値とに基づいて、未知入力ベクトルに対する物性ごとの予測値 ( 物性予測値 ) を算出する ( ステップ S 4 5 ) 。このとき、物性予測値は、ベースモデル予測値と補正モデル予測値に汎化誤差最小化定数 ( 定数 ) を掛けた値との和で示される。定数 は、学習フェーズにおいて探索されてデータ管理部 1 4 に登録されている ( 図 3 のステップ S 1 4 、図 7 のステップ S 2 4 参照 ) 。

40

## 【 0 0 6 8 】

次に、予測結果決定部 2 1 は、ステップ S 4 3 で算出された物性ごとの物性予測値に対する補正度を算出する ( ステップ S 4 6 ) 。具体的には、ステップ S 4 4 で算出されたそれぞれの補正モデル予測値について絶対値を算出し、これを対応する物性予測値の補正度とする。すなわち、ステップ S 4 6 の処理が行われることにより、物性ごと、すなわち多次元で、物性予測値とその補正度とが算出される。

50

## 【 0 0 6 9 】

そして次に、予測結果決定部 2 1 は、ステップ S 4 6 で算出した補正度の各次元の要素（すなわち、物性ごとの補正度）に基づいて、今回の物性予測の実験全体におけるリスク値を算出する（ステップ S 4 7）。具体的には例えば、補正度の各次元の要素を定数倍した値の和を算出し、これをリスク値とする。なお、上記算出時に各次元の要素に掛ける「定数」には、例えば、訓練データに対する各次元の補正度の標準偏差の逆数、等を設定することができる。あるいは、重要度の観点からエンジニアが設定できるようにしてもよく、さらに、定数に限定しなくてもよい。ステップ S 4 7 の処理が行われることにより、実験単位での予測値のリスクの度合いがリスク値として算出される。

## 【 0 0 7 0 】

そして、予測結果決定部 2 1 は、今回の物性予測の予測結果をデータ管理部 1 4 に登録して、予測結果データを蓄積させる。最後に、物性予測部 1 2 は、データ管理部 1 4 に登録された物性予測の予測結果等に基づいて、予測結果表示画面の表示出力を表示部 1 3 に指示し（ステップ S 4 8）、物性予測処理を終了する。

## 【 0 0 7 1 】

図 1 1 は、予測結果データのデータ構成例を示す図である。図 1 1 に示した予測結果データ 1 4 0 は、図 1 0 の実験番号 1 3 1 と対応して物性予測の実験の識別子を示す実験番号 1 4 1 と、当該実験で算出された物性単位の物性予測値及び補正度（予測値 1 4 2, 1 4 4、補正度 1 4 3, 1 4 5）と、実験単位のリスク値 1 4 6 と、を備えて構成される。なお、図 1 1 のデータ構成例は一例であって、これに限定されるものではない。

## 【 0 0 7 2 】

図 1 2 は、予測結果表示画面の具体例を示す図である。図 1 2 に示した予測結果表示画面 2 2 0 において、領域 2 2 3 の分布図には、物性予測処理で算出された各次元の物性予測値のうち、コンボボックス 2 2 1, 2 2 2 で指定された物性（次元）の予測値を示すデータが表示される。コンボボックス 2 2 1, 2 2 2 は、エンジニアの操作によって指定する物性を変更可能である。また、分布図にプロットされた点は、凡例 2 2 4 に従って補正度レベルに応じて異なる表示態様で表示されることにより、予測値のリスクを識別し易くなっている。そして、分布図において選択状態にある点（図中では破線で囲んで表示）について、予測結果表 2 2 5 には各物性の予測値及び補正度が表示され、リスク値表 2 2 6 にはリスク値が表示される。

## 【 0 0 7 3 】

なお、図 1 2 には示していないが、選択状態にある点にカーソルを合わせた場合に、物性予測に用いられた未知入力ベクトルがポップアップ等で表示されるようにしてもよい。

## 【 0 0 7 4 】

## ( 4 ) まとめ

以上に説明してきたように、本実施の形態に係る物性予測装置 1 によれば、未知入力ベクトルの近傍の所定個数（K 個）の訓練データを使ったベースモデルと、未知入力ベクトルの近傍の所定個数（L 個）の訓練データを使ってベースモデルの偏差を補正する補正モデルとを用いて、物性予測を行うことにより、汎化誤差を抑えた物性予測値を算出できるだけでなく、物性予測値のリスクを「補正度」や「リスク値」によって予測することができる。

## 【 0 0 7 5 】

詳細には、物性予測装置 1 は、物性予測値の算出において、学習フェーズで実績データ（訓練データ）を参照しながら探索した汎化誤差を最小化する最適な定数（汎化誤差最小化定数）を用い、ベースモデルの出力（ベースモデル予測値）と補正モデルの出力（補正モデル予測値）に汎化誤差最小化定数を掛けた値との和を物性予測値として算出することで、物性予測値の汎化誤差を大幅に低減することができる。

## 【 0 0 7 6 】

また、それぞれの予測モデルを学習する際に、近傍を基準とした訓練データを用いることも、予測値の汎化誤差を低減することに貢献する。

10

20

30

40

50

## 【 0 0 7 7 】

詳しく説明すると、本実施の形態に係る物性予測装置 1 では、モデル学習処理においてベースモデル訓練データや補正モデル訓練データを選ぶ際、物性（出力）に大きく寄与する 1 若しくは複数の変数（次元）、入力を主成分分析等で提示の空間に圧縮した空間上で定義される計量、あるいはカーネル関数などで定義される計量等を用いて「近傍」を定め、この「近傍」の定義に基づいて訓練データを選択して予測モデル（ベースモデルや補正モデル）を学習するため、運用フェーズにおいて上記予測モデルを用いて出力される物性予測の予測値の汎化誤差を低減することができる。また、図 8 を参照しながら説明したように、本実施の形態に係る物性予測装置 1 では、MLKR に代表される距離計量学習を活用し、距離計量自体を学習した結果を用いて「近傍」を定義するメトリックを採用することもできる。この結果、より精度の高い距離計量を用いて学習モデルの構築（学習）が可能になるため、物性予測の予測値の汎化誤差をさらに低減させる効果に期待できる。

10

## 【 0 0 7 8 】

そして、物性予測装置 1 によれば、物性単位の「補正度」または物性予測単位の「リスク値」で数値化し出力（表示）することで、物性予測で算出した物性予測値のリスクの度合い（ブレ具合）を可視化できるため、エンジニアが物性予測のリスクを管理できる。

## 【 0 0 7 9 】

なお、物性予測の結果表示に関しては、図 1 2 の予測結果表示画面 2 2 0 で領域 2 2 3 に示した分布図のように、物性予測値を補正度と関連付けて表示することにより、エンジニアが予測結果を視覚的に識別し易くなり、リスク管理の支援効果を高めることができる。また、上記した補正度の関連付け表示については、図 6 の補正度調整画面 2 1 0 の提供により、エンジニアの要望に応じた表示設定を調整可能にすることで、サービス性の向上に期待できる。

20

## 【 0 0 8 0 】

また、本実施の形態に係る物性予測装置 1 では、予測モデルを学習する学習フェーズと物性予測を行う運用フェーズとが分かれており、学習フェーズは実験データ（訓練データ）が更新されたときに実行すればよい。すなわち、本実施の形態に係る物性予測装置 1 によれば、物性予測を行うたびに予測モデルの学習を行う必要がないため、全体的な処理負荷の軽減や処理速度の向上を図ることができる。

## 【 0 0 8 1 】

また、本実施の形態に係る物性予測装置 1 では、学習フェーズで学習するモデルの数を、モデル学習に用いる実験データ（訓練データ）の総数よりも減らすことができるため、モデル学習の負荷を従来手法より低減することに期待できる。具体的には、モデル学習に用いる実験データ（訓練データ）の総数を  $N$  として、訓練データがクラスタリングされて生成されるクラスタの総数を  $M$  とすると、本実施の形態において学習するモデルの数は、ベースモデルと補正モデルをそれぞれ 1 種類とした場合に、高々  $2M$  に過ぎず、ほぼ確実に「 $N > 2M$ 」の関係が成立する。さらに言えば、クラスタリングでまとめる数が大きくなるほど、学習するモデルの数を抑制することができる。

30

## 【 0 0 8 2 】

## ( 5 ) 変形例（補正モデルの多段化）

本実施の形態に係る物性予測装置 1 の変形例について説明する。この変形例は、物性予測処理に用いる補正モデルを多段化構成とする点で、上述した本実施の形態の基本形と相違する。以下では、基本形と比較しながら変形例の特徴を説明する。

40

## 【 0 0 8 3 】

図 1 3 は、基本形における物性予測値及びリスク値の算出過程を示すブロック線図である。図 1 3 に示したように、未知入力ベクトル 3 1 0 に対する物性予測処理では、未知入力ベクトル 3 1 0 に近い代表ベクトルに関する対応ベースモデル（ベースモデル 3 2 0）と対応補正モデル（補正モデル 3 3 0）とが検索され、これらの両モデルを使って物性予測値や補正度、及びリスク値が算出される。なお、基本形の場合、補正モデル 3 3 0 は単体の 1 段で構成される。

50

## 【 0 0 8 4 】

図 1 3 の構成における物性予測値等の具体的な算出方法を説明すると、物性予測値は、未知入力ベクトル 3 1 0 を入力としてベースモデル 3 2 0 が出力したベースモデル予測値と、未知入力ベクトル 3 1 0 を入力として補正モデル 3 3 0 が出力した補正モデル予測値に汎化誤差最小化定数（定数）を掛けた値との和をとることによって算出される（図 9 のステップ S 4 5 参照）。また、補正度は、上記補正モデル予測値の絶対値をとることによって算出される（図 9 のステップ S 4 6 参照）。また、リスク値は、補正モデル予測値の各次元の要素に対して重み付けを行って和をとることによって算出される（図 9 のステップ S 4 7 参照）。

## 【 0 0 8 5 】

これに対して、本実施の形態の変形例では、補正モデル 3 3 0 を多段化構成とすることが考えられる。補正モデル 3 3 0 の多段化には、例えば機械学習のメタアルゴリズムとして知られているブースティングを活用することができる。

## 【 0 0 8 6 】

図 1 4 は、変形例における物性予測値及びリスク値の算出過程を示すブロック線図である。図 1 4 の場合、補正モデル 3 3 0 は、多段化された複数の補正モデル（第 1 補正モデル 3 3 1，第 2 補正モデル 3 3 2，第 3 補正モデル 3 3 3）で構成されている。

## 【 0 0 8 7 】

なお、補正モデル 3 3 0 を構成する多段の補正モデルを作成する方法は、特定のものに限定されない。例えば学習フェーズにおいて、ブースティングの要領で、第 1 補正モデル 3 3 1 から第 2 補正モデル 3 3 2、第 2 補正モデル 3 3 2 から第 3 補正モデル 3 3 3、と、いうように順次、各段の補正モデルを作っていくようにしてもよい。

## 【 0 0 8 8 】

さらに、学習フェーズにおいて、補正モデルの学習に使う訓練データの個数を、多段化に合わせて順次増やすようにしてもよい。例えば、基本形の場合、ベースモデル 3 2 0 の学習に用いる訓練データは K 個、補正モデルの学習に用いる訓練データは K 個よりも多い L 個としたが、本変形例の場合は、第 1 補正モデル 3 3 1 の学習に用いる訓練データを同様に L 個としたとき、L 個よりも多くの訓練データを第 2 補正モデル 3 3 2 の学習に用いるようにし、第 3 補正モデル 3 3 3 の学習にはさらに多くの訓練データを用いるようにすればよい。より具体的には、ベースモデル 3 2 0 の残差の反数を予測する補正モデルを第 1 補正モデル 3 3 1 として作成し、ベースモデル 3 2 0 の出力と第 1 補正モデル 3 3 1 の定数倍の予測値との残差の反数を予測する補正モデルを第 2 補正モデル 3 3 2 として作成し、ベースモデル 3 2 0 の出力と第 2 補正モデル 3 3 2 の定数倍の予測値との残差の反数を予測する補正モデルを第 3 補正モデル 3 3 3 として作成することができる。一般化すると、上記作成処理を繰り返して、第 N 補正モデルまで作成することができる（N：2 以上の自然数）。但し、一般に知られているように、学習に用いるデータが大きくなるほど、過学習しやすくなるため、多段化構成の各補正モデルから出力される予測値（補正モデル予測値）に対しては、補正モデルごとに所定の学習係数を掛けることが好ましい。

## 【 0 0 8 9 】

図 1 4 に示した変形例における物性予測値等の算出方法を具体的に詳しく説明する。

## 【 0 0 9 0 】

物性予測値は、未知入力ベクトル 3 1 0 を入力としてベースモデル 3 2 0 が出力したベースモデル予測値と、未知入力ベクトル 3 1 0 を入力として第 1 補正モデル 3 3 1 が出力した補正モデル予測値に定数 1 を掛けた値と、同じく第 2 補正モデル 3 3 2 が出力した補正モデル予測値に定数 2 を掛けた値と、同じく第 3 補正モデル 3 3 3 が出力した補正モデル予測値に定数 3 を掛けた値と、の和を取ることによって算出される。

## 【 0 0 9 1 】

ここで、定数 1，2，3 は、「汎化誤差最小化定数（定数）×学習係数」によって決定される定数であり、「0」～「1」の間の値をとる。なお、それぞれの補正モデルに対応する学習係数は、予測モデル全体での過学習を防止するように、「0」から「1

10

20

30

40

50



」までの間で所定の値が定められる。

【0092】

補正度は、各段補正モデル（第1補正モデル331～第3補正モデル333）で出力される補正モデル予測値の絶対値にそれぞれの学習係数を掛けた値の和をとることによって算出される。

【0093】

リスク値は、各段補正モデル（第1補正モデル331～第3補正モデル333）において、補正モデル予測値の各次元の要素に対して重み付けを行って和をとった値について、それらの総和をとることによって算出される。

【0094】

そして、以上のようにして算出された物性予測値、補正度、及びリスク値は、基本例の場合と同様に、図12のような予測結果表示画面を通じてエンジニアが確認することができる。

【0095】

なお、本変形例のさらなる派生例として、物性予測処理において多段化された複数の補正モデルを利用可能なとき、多段化構成のうちのどの補正モデルを用いて物性予測を行うかを様々に変更するようにしてもよい。

具体的には例えば、図14において第1補正モデル331だけを使用する場合、第1補正モデル331と第2補正モデル332を組み合わせて使用する場合、第1補正モデル331～第3補正モデル333を組み合わせて使用する場合で、それぞれ、物性予測値、補正度、及びリスク値を算出し、算出結果を表示するようにしてもよい。このように、様々な補正モデルの組み合わせに応じた算出結果を表示することで、補正モデルに使用されるデータ範囲を変えた結果が表示されるため、エンジニアは、どの程度近傍にある予測モデルを使って物性予測を行うべきか考察することができる。

【0096】

以上、本変形例では、多段化された補正モデルによる予測値を用いて物性予測値等を算出することにより、ベースモデルの偏差を補正する補正モデルを多段化構成とすることで、補正モデルに用いられるデータの範囲を変更することができるため、基本形の場合に得られる効果に加えて、よりも強い学習モデルを用いた物性予測に期待できる。また、これら多段化された補正モデルの補正值を合算するときに学習係数を掛けることで、過学習を防止することができる。また、補正モデルの組み合わせを変更可能とする場合には、予測のリスク（補正度）を調整・選択することができる。そしてこれらの結果、本変形例では、予測の汎化誤差をさらに抑制することに期待できる。

【0097】

なお、本発明は上記した実施の形態及び変形例に限定されるものではなく、他にも様々な変形例が含まれる。例えば、上記した実施の形態は本発明を分かりやすく説明するために詳細に説明したものであり、必ずしも説明した全ての構成を備えるものに限定されるものではない。また、実施の形態の構成の一部について、他の構成の追加・削除・置換をすることが可能である。

【0098】

また、上記の各構成、機能、処理部、処理手段等は、それらの一部又は全部を、例えば集積回路で設計する等によりハードウェアで実現してもよい。また、上記の各構成、機能等は、プロセッサがそれぞれの機能を実現するプログラムを解釈し、実行することによりソフトウェアで実現してもよい。各機能を実現するプログラム、テーブル、ファイル等の情報は、メモリや、ハードディスク、SSD等の記録装置、または、ICカード、SDカード、DVD等の記録媒体に置くことができる。

【0099】

また、制御線や情報線は説明上必要と考えられるものを示しており、製品上必ずしも全ての制御線や情報線を示しているとは限らない。実施には殆ど全ての構成が相互に接続されていると考えてもよい。

10

20

30

40

50

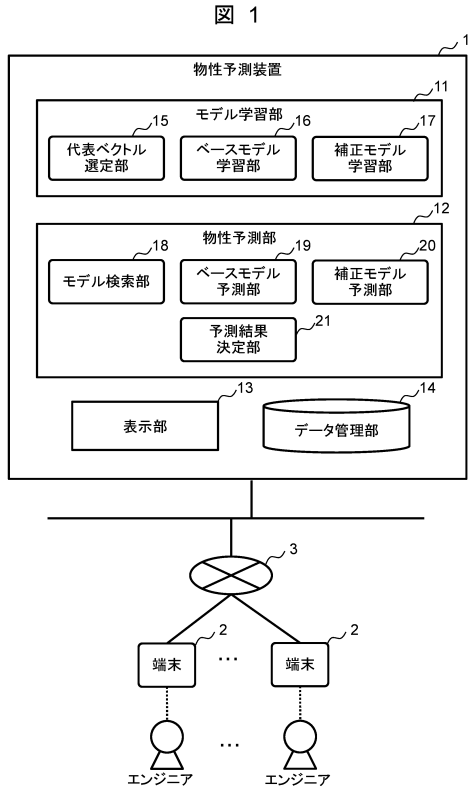
## 【符号の説明】

## 【0100】

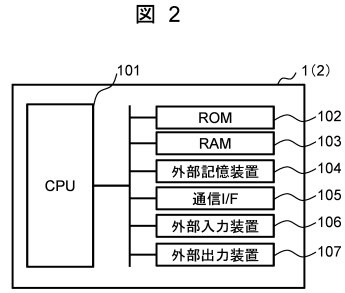
1	物性予測装置	
2	端末	
3	ネットワーク	
1 1	モデル学習部	
1 2	物性予測部	
1 3	表示部	
1 4	データ管理部	
1 5	代表ベクトル選定部	10
1 6	ベースモデル学習部	
1 7	補正モデル学習部	
1 8	モデル検索部	
1 9	ベースモデル予測部	
2 0	補正モデル予測部	
2 1	予測結果決定部	
1 0 1	C P U	
1 0 2	R O M	
1 0 3	R A M	
1 0 4	外部記憶装置	20
1 0 5	通信 I / F	
1 0 6	外部入力装置	
1 0 7	外部出力装置	
2 1 0	補正度調整画面	
2 2 0	予測結果表示画面	
3 1 0	未知入力ベクトル	
3 2 0	ベースモデル	
3 3 0	補正モデル	
3 3 1	第 1 補正モデル	
3 3 2	第 2 補正モデル	30
3 3 3	第 3 補正モデル	

【図面】

【図 1】



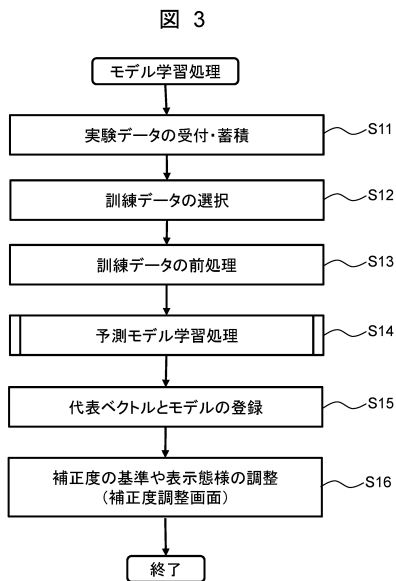
【図 2】



10

20

【図 3】



【図 4】

図 4

実験番号	原料1	原料2	...	条件1	条件2	...
1	14.43	9.29	...	C1	AA	...
2	12.34	10.01	...	C3	A	...
3	9.45	12.10	...	C2	B	...
...	...	...	...	...	...	...

30

40

50

【 図 5 】

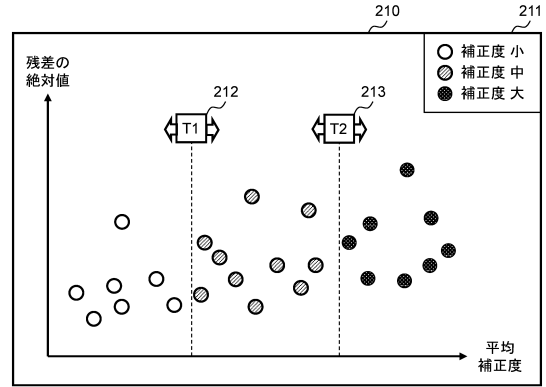
図 5

120

実験番号	物性1	物性2	物性3	物性4	物性5
1	13.1	14.5	120.2	3.3	21.2
2	12.3	16.6	90.9	2.4	50.2
3	13.4	14.3	97.5	4.1	30.7
...	...	...	...	...	...

【 図 6 】

図 6

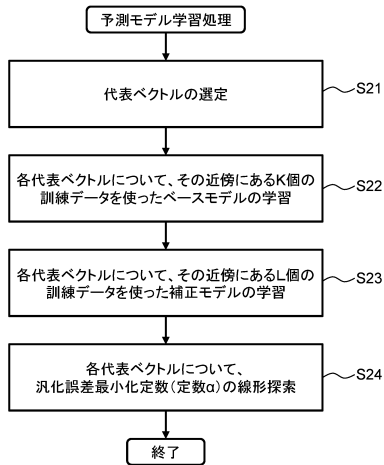


10

20

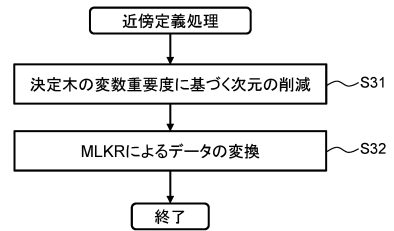
【 図 7 】

図 7



【 図 8 】

図 8

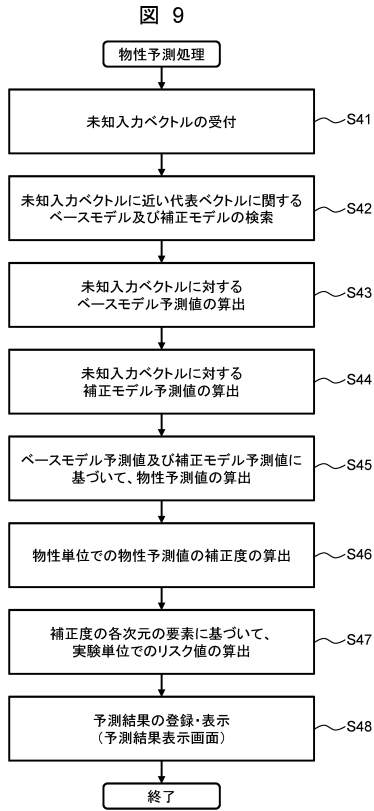


30

40

50

【 図 9 】



【 図 1 0 】

図 10

131 実験番号	132 原料1	133 原料2	...	134 条件1	135 条件2	...
1	10.23	6.10	...	C2	B	...
2	11.12	9.23	...	C1	C	...
3	10.01	4.12	...	C1	E	...
...	...	...	...	...	...	...

10

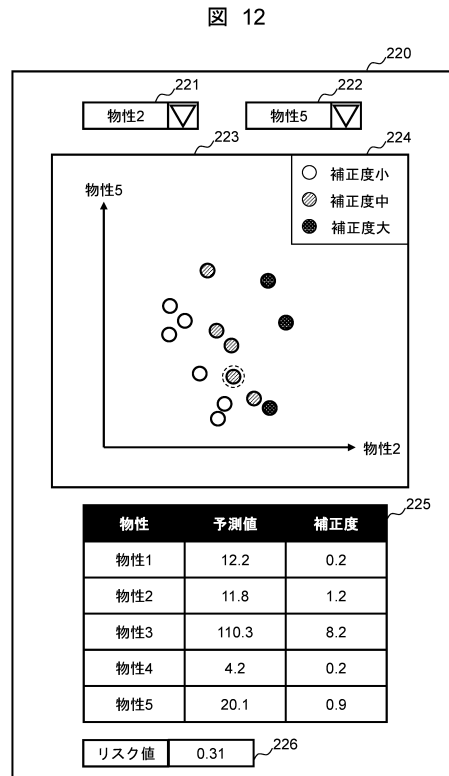
20

【 図 1 1 】

図 11

141 実験番号	142 物性1 予測値	143 物性1 補正度	144 物性2 予測値	145 物性2 補正度	...	146 リスク値
1	12.2	0.2	11.8	1.2	...	0.31
2	11.7	0.01	14.5	0.2	...	0.15
3	14.2	1.4	13.7	1.2	...	0.63
...	...	...	...	...	...	...

【 図 1 2 】

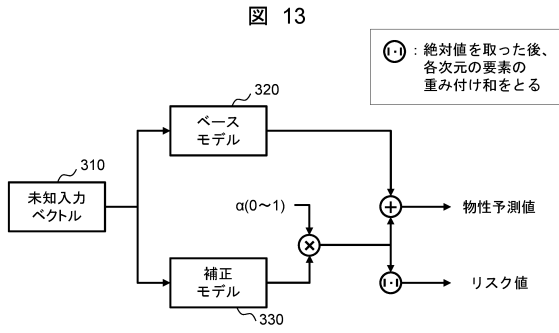


30

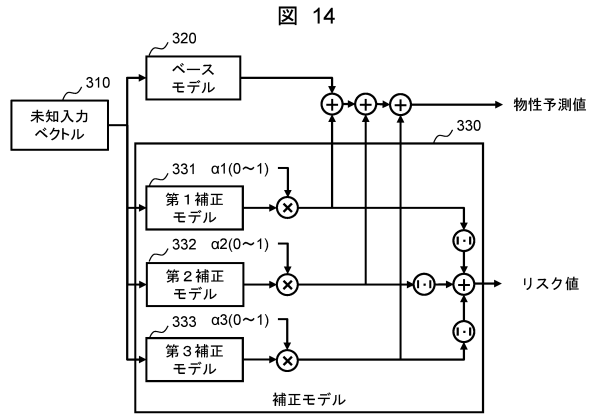
40

50

【 図 1 3 】



【 図 1 4 】



10

20

30

40

50

---

フロントページの続き

東京都千代田区丸の内一丁目6番6号 株式会社日立製作所内

審査官 岡北 有平

(56)参考文献 国際公開第2018/168580(WO, A1)

特表2015-525413(JP, A)

(58)調査した分野 (Int.Cl., DB名)

G16C 10/00-99/00