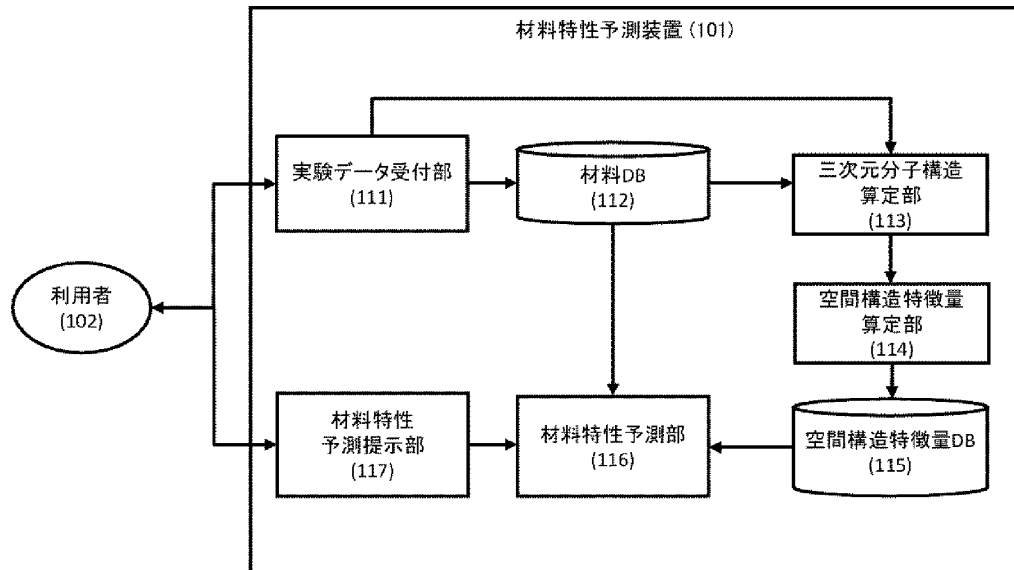


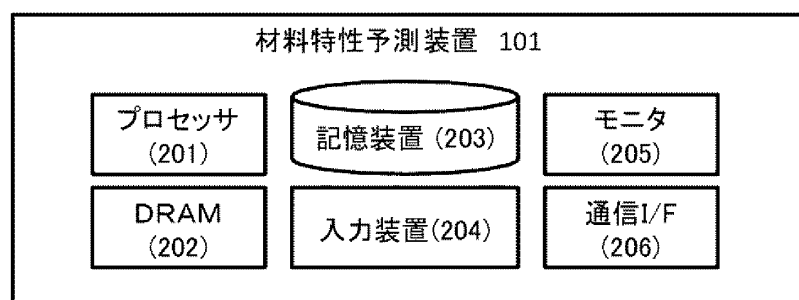
[図1]

図 1



[図2]

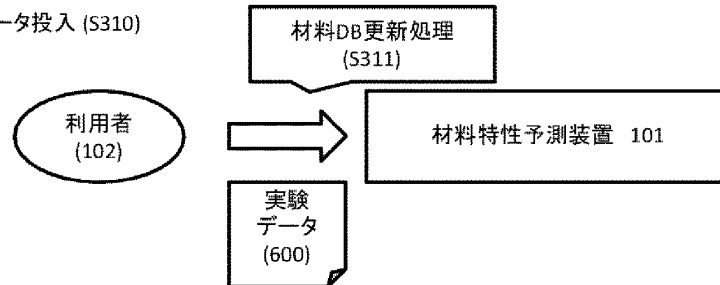
図 2



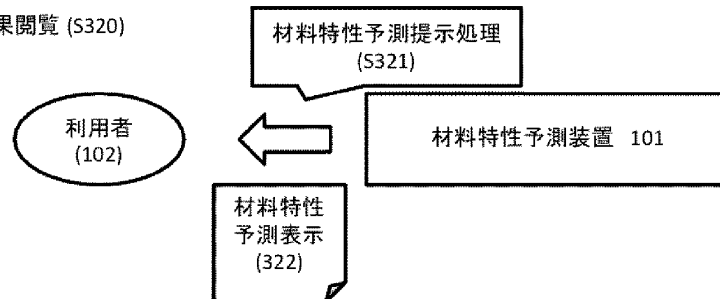
[図3]

図3

1. 材料データ投入 (S310)



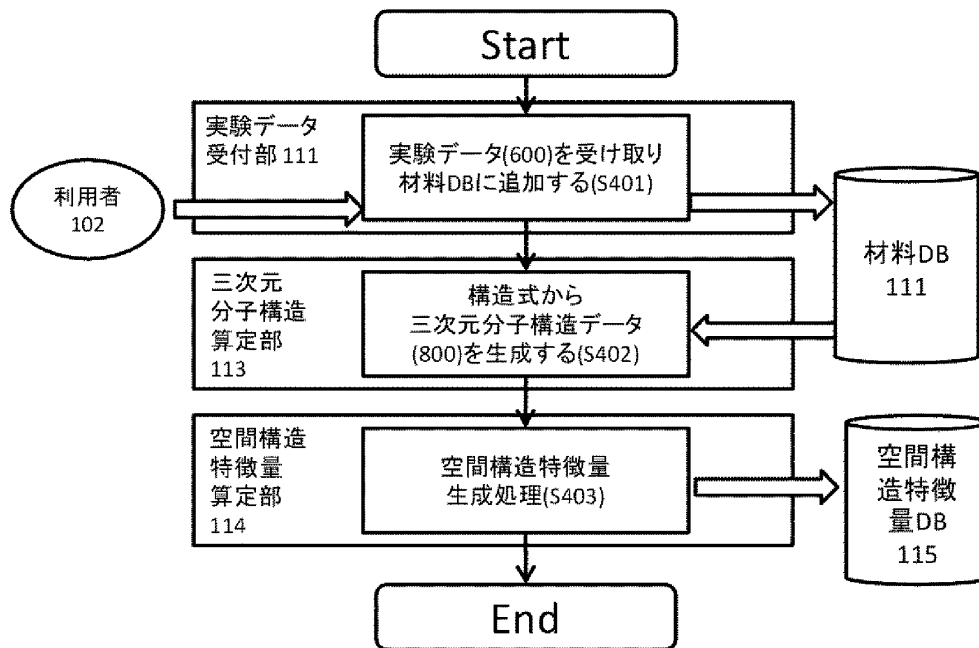
2. 予測結果閲覧 (S320)



[図4]

図4

材料DB更新処理(S311)



[図5]

図5

実験データ受付の画面表示

データ入力

C:\work\hoge\hoge\data.csv 参照 アップロード

| ID | Temp  | SOL  | SMILES           |
|----|-------|------|------------------|
| 10 | 98.1  | 11.2 | CCCN             |
| 11 | 89.1  | 22.1 | COOC=C           |
| 12 | 120.2 | 32.0 | CNCNCC(OC)       |
| 13 | 84.1  |      | OC(CCCCC)CCN     |
| 15 | 75.0  | 17.5 | (CCCCC)O(CCCC)NC |
| 18 | 100.2 | 26.7 | CC               |

テーブル名: hogedata 保存 キャンセル

[図6]

図6

実験データ(600)

| 項目名        | 内容                   |
|------------|----------------------|
| 材料特性(601)  | 材料の特性を示す数値。未実測のものは空白 |
| 材料構造式(602) | 材料の構造式を表す文字列         |
| 実験条件(603)  | 材料の構造式以外の条件数値        |

[図7]

図7

材料DB(112)の実験データテーブル

| 項目名        | 内容                   |
|------------|----------------------|
| 実験ID(701)  | 実験を一意に識別する識別番号       |
| 材料特性(702)  | 材料の特性を示す数値。未実測のものは空白 |
| 材料構造式(703) | 材料の構造式を表す文字列         |
| 実験条件(704)  | 材料の構造式以外の条件数値        |

[図8]

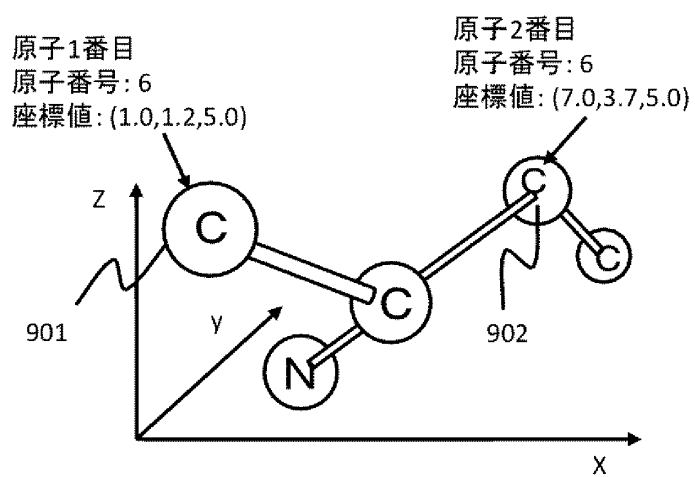
図8

三次元分子構造データ(800)の1分子分の情報

| 項目名         | 内容             |
|-------------|----------------|
| 実験ID(701)   | 実験を一意に識別する識別番号 |
| 1番目の原子の原子番号 | 第1の原子の原子番号     |
| 1番目の原子のx座標  | 第1の原子の相対X座標    |
| 1番目の原子のy座標  | 第1の原子の相対Y座標    |
| 1番目の原子のz座標  | 第1の原子の相対Z座標    |
| ...         | ...            |
| N番目の原子の原子番号 | 第Nの原子の原子番号     |
| N番目の原子のx座標  | 第Nの原子の相対X座標    |
| N番目の原子のy座標  | 第Nの原子の相対Y座標    |
| N番目の原子のz座標  | 第Nの原子の相対Z座標    |

[図9]

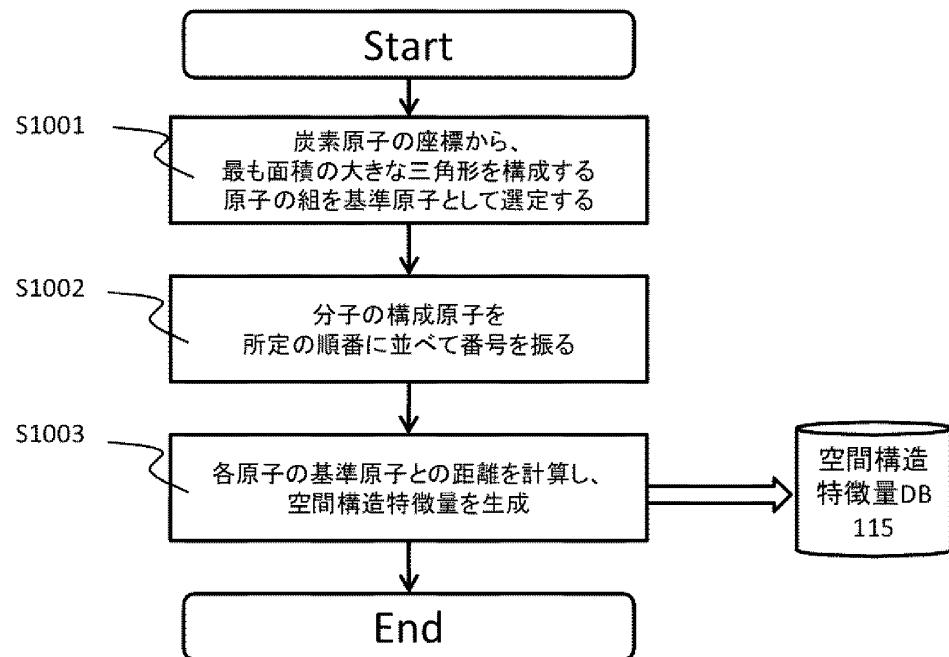
図9



[図10]

図10

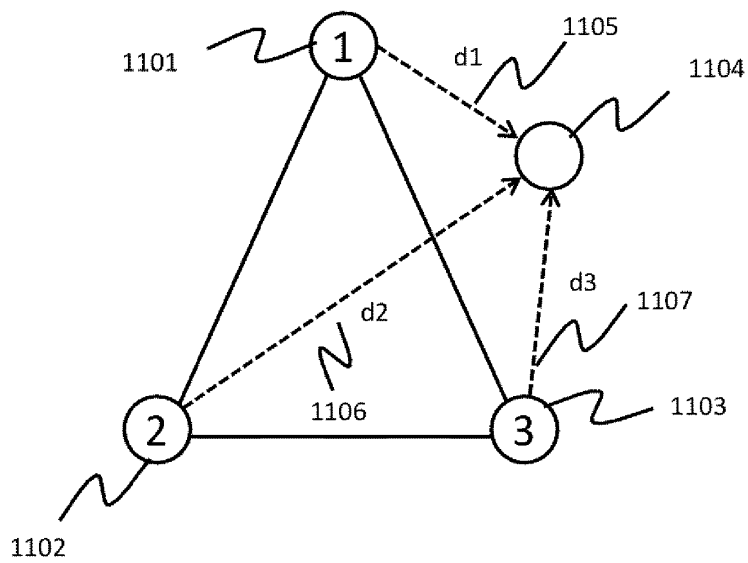
空間構造特徴量計算処理(S403)



[図11]

図11

空間構造特徴量の計算モデル



[図12]

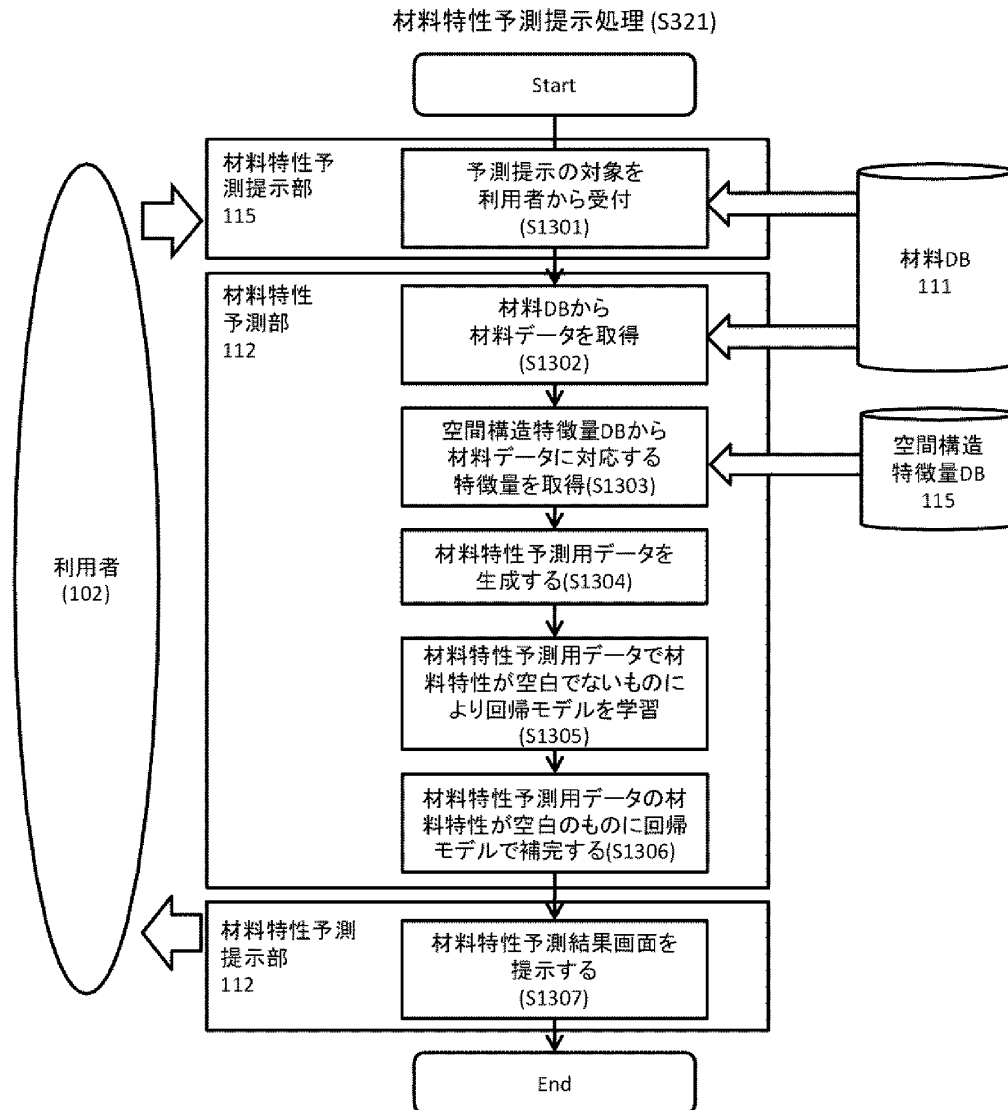
図12

空間構造特徴量のテーブル(1200)

| 項目名                       | 内容                                             |
|---------------------------|------------------------------------------------|
| 実験ID(701)                 | 材料を一意に識別する識別番号                                 |
| 基準原子1情報(1201)             | 基準原子1の原子番号                                     |
| 基準原子2情報(1202)             | 基準原子2の原子番号                                     |
| 基準原子3情報(1203)             | 基準原子3の原子番号                                     |
| 基準原子1と2の距離<br>(1204)      | 基準原子1と2のユークリッド距離。                              |
| 基準原子2と3の距離<br>(1205)      | 基準原子2と3のユークリッド距離。                              |
| 基準原子1と3の距離<br>(1206)      | 基準原子1と3のユークリッド距離。                              |
| 原子1の基準原子1との<br>距離d1(1207) | 1番目の原子と基準原子1のユークリッド距離。<br>分子の構成原子数がNより小さいときは、0 |
| 原子1の基準原子2との<br>距離(1208)   | 1番目の原子と基準原子2のユークリッド距離。<br>分子の構成原子数がNより小さいときは、0 |
| 原子1の基準原子3との<br>距離(1209)   | 1番目の原子と基準原子3のユークリッド距離。<br>分子の構成原子数がNより小さいときは、0 |
| ...                       | ...                                            |
| 原子Nの基準原子1との<br>距離         | N番目の原子と基準原子1のユークリッド距離。<br>分子の構成原子数がNより小さいときは、0 |
| 原子Nの基準原子2との<br>距離         | N番目の原子と基準原子2のユークリッド距離。<br>分子の構成原子数がNより小さいときは、0 |
| 原子Nの基準原子3との<br>距離         | N番目の原子と基準原子3のユークリッド距離。<br>分子の構成原子数がNより小さいときは、0 |

[図13]

図13



[図14]

図14

データ入力

材料データテーブル

tbl1

予測値更新

| ID | SMILES | T    | 材料特性       |
|----|--------|------|------------|
| 1  | C3O    | 10.2 | 10.2       |
| 2  | C2OO   | 7.8  | <u>7.8</u> |
| 3  | C2NO   | 10.2 | 10.2       |
| 4  | COCOC  | 5.5  | <u>5.5</u> |
| 5  | NCCI   | 10.1 | 10.1       |
| 6  | CCOC   | 17.2 | 17.2       |
| 7  | CICCI  | 8.7  | 8.7        |

1401

1402

1403

[図15]

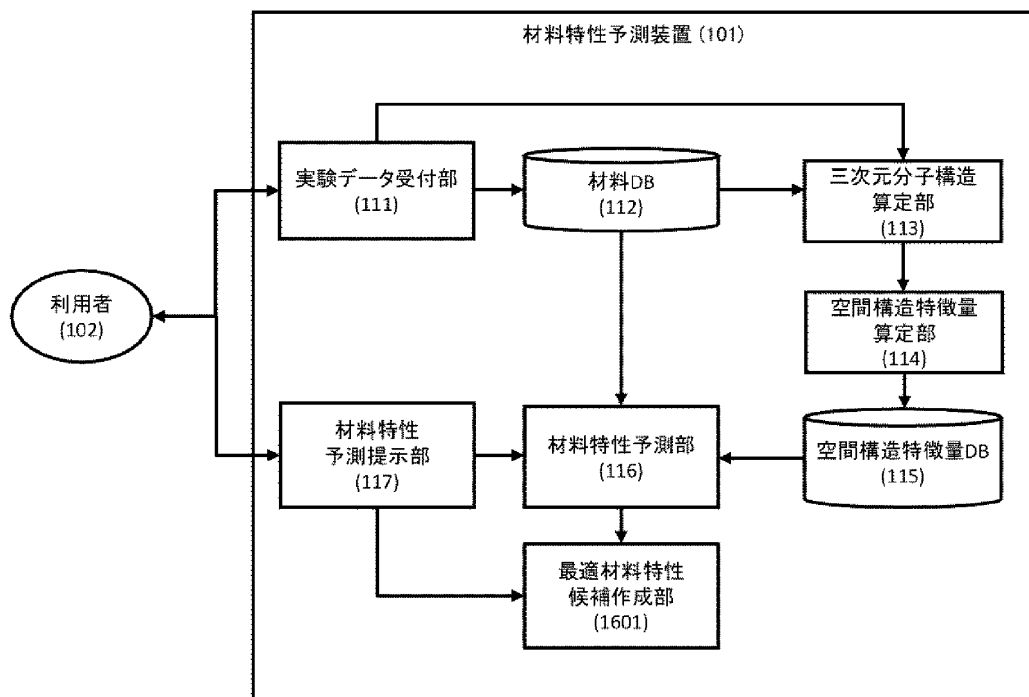
図15

材料特性予測用データの1レコード(1500)

| 項目名                       | 内容                                             |
|---------------------------|------------------------------------------------|
| 実験ID(701)                 | 材料を一意に識別する識別番号                                 |
| 材料特性(702)                 | 材料の特性を示す数値。未実測のものは空白                           |
| 実験条件(704)                 | 材料の構造式以外の条件数値                                  |
| 基準原子1情報(1201)             | 基準原子1の原子番号                                     |
| 基準原子2情報(1202)             | 基準原子2の原子番号                                     |
| 基準原子3情報(1203)             | 基準原子3の原子番号                                     |
| 基準原子1と2の距離<br>(1204)      | 基準原子1と2のユークリッド距離。                              |
| 基準原子2と3の距離<br>(1205)      | 基準原子2と3のユークリッド距離。                              |
| 基準原子1と3の距離<br>(1206)      | 基準原子1と3のユークリッド距離。                              |
| 原子1の基準原子1との<br>距離d1(1207) | 1番目の原子と基準原子1のユークリッド距離。<br>分子の構成原子数がNより小さいときは、0 |
| 原子1の基準原子2との<br>距離(1208)   | 1番目の原子と基準原子2のユークリッド距離。<br>分子の構成原子数がNより小さいときは、0 |
| 原子1の基準原子3との<br>距離(1209)   | 1番目の原子と基準原子3のユークリッド距離。<br>分子の構成原子数がNより小さいときは、0 |
| ...                       | ...                                            |
| 原子Nの基準原子1との<br>距離         | N番目の原子と基準原子1のユークリッド距離。<br>分子の構成原子数がNより小さいときは、0 |
| 原子Nの基準原子2との<br>距離         | N番目の原子と基準原子2のユークリッド距離。<br>分子の構成原子数がNより小さいときは、0 |
| 原子Nの基準原子3との<br>距離         | N番目の原子と基準原子3のユークリッド距離。<br>分子の構成原子数がNより小さいときは、0 |

[図16]

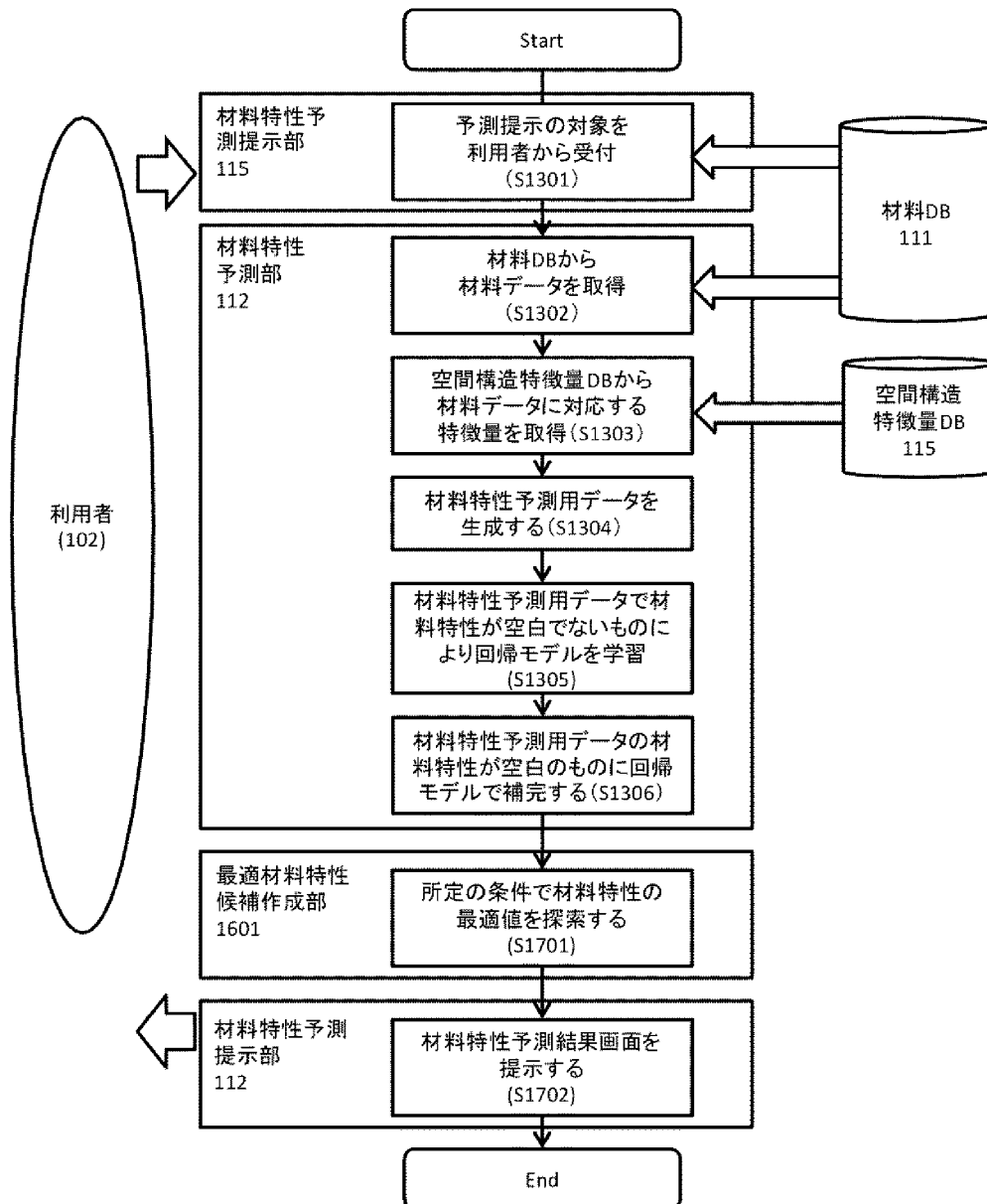
図 16



[図17]

図17

実施例2の材料特性予測処理 (S1700)



[図18]

図18

