

(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  
2021年1月7日(07.01.2021)

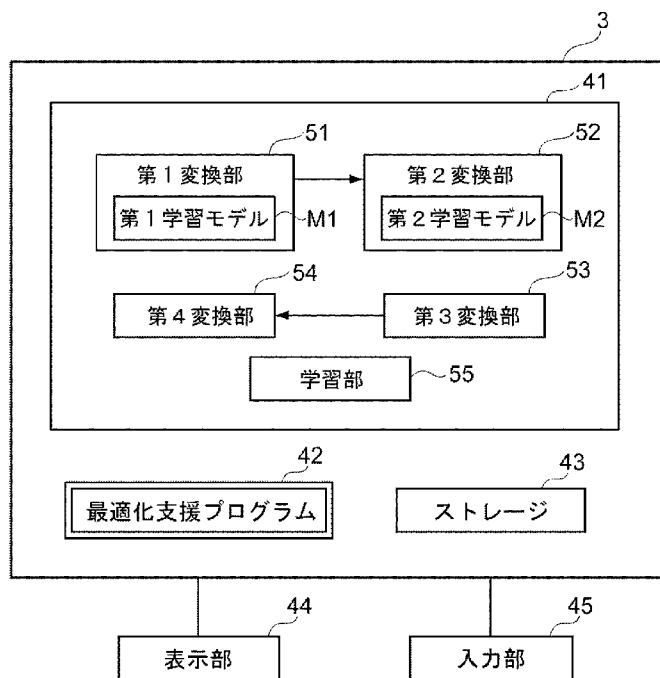


(10) 国際公開番号  
**WO 2021/002108 A1**

- (51) 国際特許分類:  
*G05B 19/418* (2006.01) *G05B 13/02* (2006.01)  
*G05B 11/36* (2006.01)
- (21) 国際出願番号: PCT/JP2020/019773
- (22) 国際出願日: 2020年5月19日(19.05.2020)
- (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 2019-124421 2019年7月3日(03.07.2019) JP
- (71) 出願人: 富士フイルム株式会社 (FUJIFILM CORPORATION) [JP/JP]; 〒1068620 東京都港区西麻布2丁目2番30号 Tokyo (JP).
- (72) 発明者: 長谷川 昌孝 (HASEGAWA Masataka); 〒2500193 神奈川県南足柄市中沼210番地 富士フイルム株式会社内 Kanagawa (JP).
- (74) 代理人: 中島 順子, 外 (NAKASHIMA Junko et al.); 〒2500111 神奈川県南足柄市竹松1250番地 F F T P M O 棟 6 F Kanagawa (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, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, 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,

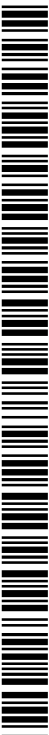
(54) Title: OPTIMIZATION SUPPORT DEVICE, METHOD, AND PROGRAM

(54) 発明の名称: 最適化支援装置、方法およびプログラム



- 42 Optimization support program
- 43 Storage
- 44 Display unit
- 45 Input unit
- 51 First conversion unit
- 52 Second conversion unit
- 53 Third conversion unit
- 54 Fourth conversion unit
- 55 Learning unit
- M1 First learning model
- M2 Second learning model

(57) Abstract: In an optimization support device, method, and program, various conditions and the like in a production process of a product can be accurately predicted. The optimization support device comprises: a first conversion unit that converts an operation condition parameter, which expresses an operation condition of a process for producing a product, into a state parameter, which expresses a state of the process; and a second conversion unit that converts the state parameter into a quality parameter expressing a quality of the product.



WO 2021/002108 A1

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 :

- 国際調査報告 (条約第21条(3))

---

(57) 要約 : 最適化支援装置、方法およびプログラムにおいて、生成物の生産プロセスにおける各種条件等を精度よく予測できるようにする。最適化支援装置は、生成物を生産するためのプロセスの運転条件を表す運転条件パラメータを、プロセスの状態を表す状態パラメータに変換する第1変換部と、状態パラメータを生成物の品質を表す品質パラメータに変換する第2変換部とを備える。

## 明 細 書

発明の名称：最適化支援装置、方法およびプログラム

### 技術分野

[0001] 本開示は、生成物の生産プロセスにおける各種パラメータの最適化を支援する最適化支援装置、方法およびプログラムに関する。

### 背景技術

[0002] 生成物を生産するプロセスにおいて、例えばニューラルネットワークを用いた各種演算を利用して、プロセスの運転条件等を特定するプロセス条件パラメータと、生成物の品質のパラメータとを関連付けて、プロセス条件パラメータから品質パラメータを順問題として予測したり、品質パラメータからプロセス条件パラメータの最適解を逆問題で予測したりする手法が提案されている。

[0003] 例えば、特許文献1には、製品の生産プロセスを分割して複数の予測モデルを定義し、製品の生産計画を最適化するために、原料から製品を生産する流れとは逆の順序で、生産計画の最適解を導出する手法が提案されている。特許文献1に記載の手法は、プロセス条件パラメータと品質パラメータとの相関を学習することにより、生成物の品質パラメータから、プロセス条件パラメータを逆問題で予測する手法に相当する。また、特許文献2には、生産プロセスを、操作変数、状態変数および品質変数によってモデル化し、生成物の品質を改善するために、最適な操作変数を導出する手法が提案されている。特許文献2に記載の手法は、プロセス条件のパラメータから品質パラメータを順問題として予測する手法に相当する。

### 先行技術文献

#### 特許文献

[0004] 特許文献1：特開2003-345416号公報  
特許文献2：特開2006-323523号公報

### 発明の概要

## 発明が解決しようとする課題

- [0005] ところで、生成物を生産するプロセスにおいては、プロセスの運転条件等を特定するプロセス条件パラメータはかなりの数となる。このような多くの条件パラメータを予測モデルに入力して生成物の品質パラメータを予測する場合、正確な予測ができなくなる可能性がある。とくに、予測モデルがニューラルネットワークの場合、プロセス条件パラメータの数が多いとニューラルネットワークが過学習されてしまう。このようにニューラルネットワークが過学習されてしまうと、教師データ以外のプロセス条件パラメータが入力された場合、正確な品質パラメータを予測ができなくなってしまう。また、予測モデルに代えて、関数またはテーブルを用いて、プロセス条件パラメータから品質パラメータを取得することも考えられる。しかしながら、このような場合であっても、プロセス条件パラメータの数が多いと、関数またはテーブルの構成が複雑となるため、適切な関数またはテーブルを作成することが困難となり、その結果、正確な予測ができなくなる可能性がある。
- [0006] 本発明は上記事情に鑑みなされたものであり、生成物の生産プロセスにおける各種条件等を精度よく予測できるようにすることを目的とする。

## 課題を解決するための手段

- [0007] 本開示による第1の最適化支援装置は、生成物を生産するためのプロセスの運転条件を表す運転条件パラメータを、プロセスの状態を表す状態パラメータに変換する第1変換部と、  
状態パラメータを生成物の品質を表す品質パラメータに変換する第2変換部とを備える。
- [0008] なお、本開示による第1の最適化支援装置においては、第1変換部は、運転条件パラメータの入力により状態パラメータを出力する学習がなされた第1学習モデルを有し、  
第2変換部は、状態パラメータの入力により品質パラメータを出力する学習がなされた第2学習モデルを有するものであってもよい。
- [0009] また、本開示による第1の最適化支援装置においては、品質パラメータを

状態パラメータに変換する第3変換部と、

状態パラメータを運転条件パラメータに変換する第4変換部とをさらに備えるものであってもよい。

[0010] また、本開示による第1の最適化支援装置においては、第3変換部は、第2学習モデルの制御パラメータに基づいて、品質パラメータを状態パラメータに変換し、

第4変換部は、第1学習モデルの制御パラメータに基づいて、状態パラメータを運転条件パラメータに変換するものであってもよい。

[0011] 本開示による第2の最適化支援装置は、生成物を生産するためのプロセスにおいて生成される生成物の品質を表す品質パラメータを、プロセスの状態を表す状態パラメータに変換する第3変換部と、

状態パラメータを、プロセスの運転条件を表す運転条件パラメータに変換する第4変換部とを備える。

[0012] なお、本開示による第2の最適化支援装置においては、第3変換部は、状態パラメータの入力により品質パラメータを出力する学習がなされた学習モデルの制御パラメータに基づいて、品質パラメータを状態パラメータに変換するものであってもよい。

[0013] この場合、状態パラメータの入力により品質パラメータを出力する学習がなされた学習モデルを有し、状態パラメータを生成物の品質を表す品質パラメータに変換する第2変換部をさらに備えるものであってもよい。

[0014] また、本開示による第2の最適化支援装置においては、第4変換部は、運転条件パラメータの入力により状態パラメータを出力する学習がなされた学習モデルの制御パラメータに基づいて、状態パラメータを運転条件パラメータに変換するものであってもよい。

[0015] この場合、運転条件パラメータの入力により状態パラメータを出力する学習がなされた学習モデルを有し、運転条件パラメータを状態パラメータに変換する第1変換部をさらに備えるものであってもよい。

[0016] また、本開示による第1および第2の最適化支援装置においては、プロセ

スは、フロー合成プロセスであってもよく、細胞培養プロセスであってもよく、真空成膜プロセスであってもよく、塗布プロセスであってもよい。

[0017] 本開示による第1の最適化支援方法は、生成物を生産するためのプロセスの運転条件を表す運転条件パラメータを、プロセスの状態を表す状態パラメータに変換し、

状態パラメータを生成物の品質を表す品質パラメータに変換する。

[0018] 本開示による第2の最適化支援方法は、生成物を生産するためのプロセスにおいて生成される生成物の品質を表す品質パラメータを、プロセスの状態を表す状態パラメータに変換し、

状態パラメータを、プロセスの運転条件を表す運転条件パラメータに変換する。

[0019] なお、本開示による第1および第2の最適化支援方法を、コンピュータに実行させるプログラムとして提供してもよい。

[0020] 本開示による第3の最適化支援装置は、コンピュータに実行させるための命令を記憶するメモリと、

記憶された命令を実行するよう構成されたプロセッサとを備え、プロセッサは、

生成物を生産するためのプロセスの運転条件を表す運転条件パラメータを、プロセスの状態を表す状態パラメータに変換し、

状態パラメータを生成物の品質を表す品質パラメータに変換する処理を実行する。

[0021] 本開示による第4の最適化支援装置は、コンピュータに実行させるための命令を記憶するメモリと、

記憶された命令を実行するよう構成されたプロセッサとを備え、プロセッサは、

生成物を生産するためのプロセスにおいて生成される生成物の品質を表す品質パラメータを、プロセスの状態を表す状態パラメータに変換し、

状態パラメータを、プロセスの運転条件を表す運転条件パラメータに変換

する処理を実行する。

## 発明の効果

[0022] 本開示によれば、生成物の生産プロセスにおける各種条件を精度よく予測できる。

## 図面の簡単な説明

[0023] [図1]本実施形態による最適化支援装置を適用した生産設備の構成を示す概略ブロック図

[図2]フロー反応装置を含む生産設備の構成を示す概略ブロック図

[図3]本実施形態による最適化支援装置の構成を示す概略ブロック図

[図4]ニューラルネットワークの層構造の概念図

[図5]ニューラルネットワークの層構造の概念図

[図6]教師データのデータセットの説明図

[図7]本実施形態において行われる処理の概念図

[図8]本実施形態において第1変換部の第1学習モデルおよび第2変換部の第2学習モデルの生成時に行われる処理を示すフローチャート

[図9]目標品質パラメータから運転条件パラメータを導出する際の処理を示すフローチャート

[図10]他の実施形態による最適化支援装置の構成を示す概略ブロック図

[図11]さらに他の実施形態による最適化支援装置の構成を示す概略ブロック図

## 発明を実施するための形態

[0024] 以下、図面を参照して本開示の実施形態について説明する。図1は本開示の実施形態による最適化支援装置を適用した生産設備の構成を示す概略ブロック図である。図1に示すように、本実施形態による生産設備1は、生産装置2および本実施形態による最適化支援装置3を備える。

[0025] 本実施形態においては、生産装置2としてフロー反応装置を含むものとする。フロー反応装置は、原料を流しながら連続的に反応させるフロー反応処理を行うことにより、生成物を得るための装置である。図2はフロー反応装

置を含む生産設備 1 の構成を示す概略ブロック図である。図 2 に示すように、生産装置 2 は、フロー反応装置 1 1 およびコントローラ 1 2 を備える。フロー反応装置 1 1 は、第 1 供給部 2 1、第 2 供給部 2 2、反応セクション 2 3 および回収セクション 2 6 を備える。フロー反応装置 1 1 の各部の動作は、コントローラ 1 2 により制御される。コントローラ 1 2 は最適化支援装置 3 と接続されている。

[0026] フロー反応装置 1 1 において、第 1 供給部 2 1 および第 2 供給部 2 2 はそれぞれ反応セクション 2 3 の上流側端部に配管で接続されており、回収セクション 2 6 は反応セクション 2 3 の下流側端部に配管で接続されている。

[0027] フロー反応装置 1 1 で行うフロー反応は、例えばモノマーである化合物を合成する合成反応、モノマー同士を反応させることにより重合体を生成させる重合反応の他、例えばアニオン重合反応等の開始反応および停止反応等の素反応であってもよい。したがって、フロー反応の対象となる反応物は、例えば停止反応の対象となる生長（成長）段階の化合物であってもよい。本実施形態では、ポリスチリルリチウムの生長（成長）をメタノールで停止させる停止反応をフロー反応で行っている。

[0028] 第 1 供給部 2 1 は、フロー反応の第 1 原料を反応セクション 2 3 へ供給するためのものである。本実施形態の第 1 原料は、例えばポリスチリルリチウムを溶媒に溶解した第 1 液であり、ポリスチリルリチウムはフロー反応処理の反応物の一例である。第 1 供給部 2 1 は、不図示のポンプを備えており、ポンプの回転数を調節することにより、反応セクション 2 3 への第 1 原料の流量が調節される。

[0029] 第 2 供給部 2 2 は、フロー反応の第 2 原料を、反応セクション 2 3 へ供給するためのものである。本実施形態の第 2 原料はメタノールと水との混合物、すなわちメタノール水溶液であり、メタノールを停止反応の停止剤として用いている。第 2 供給部 2 2 も第 1 供給部 2 1 と同様に、不図示のポンプを備えており、ポンプの回転数を調節することにより、反応セクション 2 3 への第 2 原料の流量が調節される。

- [0030] 反応セクション23は、フロー反応としての停止反応を行うためのものであり、合流部31、反応部32、温調部33、照射部34および第1検出部35を備える。合流部31はT字に分岐した管、すなわちT字管である。なお、T字管に代えて十字管を用いてもよい。合流部31の第1管部31aは第1供給部21に、第2管部31bは第2供給部22に、第3管部31cは反応部32に、それぞれ接続されている。これにより、反応セクション23に案内された第1原料と第2原料とが合流し、混合した状態で反応部32へ送られる。反応部32は予め定められた反応路長および反応経路を有する。反応路長および反応経路は、反応部32を構成する管状部材を変更することにより変更可能である。
- [0031] 反応部32は内部が第1原料と第2原料との混合物（以下、混合原料と称する）の流路とされ、管内の中空部を反応の場として画定している。混合原料は、反応部32を通過しながらアニオン重合の停止反応が進められ、ポリスチレンが生成される。
- [0032] 温調部33は、例えばヒータ等からなり、フロー反応の温度（以下、反応温度と称する）を調節するためのものである。温調部33は、合流部31および反応部32を介して、これらの中を流れる混合原料の温度（反応温度）を調節する。
- [0033] 照射部34は、例えば紫外線等の光を出射する光源を有し、フロー反応として光反応を行う際に、反応部32に紫外線等の光を照射するためのものである。
- [0034] 第1検出部35は、反応セクション23における混合原料の状態を検出して、最適化支援装置3に出力する。混合原料の状態を表すパラメータ（以下、状態パラメータとする）とは、入力された運転条件パラメータにより混合原料を反応させた場合に得られる混合原料の物性および反応セクションにおける環境を表すパラメータである。状態パラメータとしては、例えば、混合原料の反応温度、色、pH、溶存酸素量、反応セクション23の圧力および生産物の物理特性を表わすスペクトルの形（赤外吸収スペクトル、ラマン分

光波形および核磁気共鳴波形)等のうちの少なくとも1つが挙げられる。このために、第1検出部35は、いずれも不図示の温度センサ、撮像部、pHセンサ、溶存酸素量センサ、および分光計等を備える。

[0035] 回収セクション26は、フロー反応の生成物であるポリスチレンを回収するためのものである。回収セクション26は、反応セクションから案内されたポリスチレン溶液からポリスチレンを析出し、析出したポリスチレンを混合液から採取し、採取されたポリスチレンを乾燥することにより、ポリスチレンを取得する。

[0036] また、回収セクション26は第2検出部36を備える。第2検出部36は、フロー反応の処理結果である生成物の品質を検出して、最適化支援装置3に出力する。生成物の品質を表すパラメータ(以下、品質パラメータとする)とは、反応の結果得られる生成物が適切な品質を有するか否かの判断の尺度となるパラメータである。具体的には、品質パラメータとしては、生成物濃度および不純物濃度等の少なくとも一方が挙げられるが、これ以外にも、生成物の純度、分子量、分子量分散度、および収率等のうちの少なくとも1つを用いてもよい。また、回収セクション26において生成物が例えば溶媒に溶けている溶液状態で得られる場合には、溶液における生成物の濃度(モル濃度等)も品質パラメータとして検出してもよい。

[0037] なお、反応セクションおよび回収セクションは、上記の例に限られず、フロー反応の種類および生成物の種類等の少なくとも1つに応じて適宜変更される。例えば、回収セクション26に代えて容器を設け、この容器に、反応セクション23から案内されてきたポリスチレン溶液を一旦貯留してもよい。この場合には、貯留したポリスチレン溶液を、回収セクション26に案内し、ポリスチレンを析出、採取、および乾燥させることにより得るとよい。

[0038] コントローラ12は、フロー反応装置11を統括的に制御する。コントローラ12は、第1供給部21および第2供給部22の各ポンプ、温調部33、照射部34、第1検出部35、並びに第2検出部36と接続されている。コントローラ12は、第1供給部21および第2供給部22の各ポンプの回

転数を調節することによって第1原料および第2原料のそれぞれの流量を調節する。また、コントローラ12は、温調部33の調節により、混合原料の温度を制御する。また、コントローラ12は、照射部34に指示を行うことにより、反応セクション23への紫外線等の光を照射を制御する。また、コントローラ12は、第1検出部35および第2検出部36に指示を行うことにより、状態パラメータおよび品質パラメータを検出する。

[0039] また、コントローラ12は、フロー反応装置11の運転条件も設定する。運転条件を表すパラメータ（以下、運転条件パラメータとする）は、フロー反応処理の処理条件である反応条件を設定するためのものであり、適切な品質の生成物を生産すべく、フロー反応装置11の各部を駆動するためのパラメータである。運転条件パラメータとしては、例えば、第1原料の流量、第2原料の流量、反応時間、反応温度、混合比、UV照度、流路深さ、および試薬を用いる場合の試薬当量等のうちの少なくとも1つが挙げられる。コントローラ12は、不図示の操作部を有し、操作部からの操作信号の入力によって運転条件パラメータを設定し、これによりフロー反応装置11を設定された運転条件に制御する。例えば、操作部のマウスでのクリックあるいは選択、および／またはキーボードでの文字の入力等により運転条件パラメータが設定される。

[0040] また、コントローラ12は最適化支援装置3と接続されており、上記の操作部からの操作信号に加えて、またはこれに代えて、最適化支援装置3が出力した目標運転条件に運転条件を設定し、これによりフロー反応装置11を予め定められた運転条件に制御する。

[0041] 最適化支援装置3は、フロー反応装置11によって行うフロー反応処理について、目標とする運転条件パラメータを精度よく決定するための支援を行う。最適化支援装置3は、例えば1台のコンピュータに、本実施形態の最適化支援プログラムがインストールされてなる。最適化支援プログラムは、ネットワークに接続されたサーバコンピュータの記憶装置、もしくはネットワークストレージに、外部からアクセス可能な状態で記憶され、操作者の要求

に応じてコンピュータにダウンロードされ、インストールされる。または、DVD (Digital Versatile Disc) あるいはCD-ROM (Compact Disc Read Only Memory) 等の記録媒体に記録されて配布され、その記録媒体からコンピュータにインストールされる。

[0042] 図3は、コンピュータに最適化支援プログラムをインストールすることにより実現される最適化支援装置の構成を示す概略ブロック図である。図2に示すように、最適化支援装置3は、標準的なコンピュータの構成として、CPU (Central Processing Unit) 41、メモリ42およびストレージ43を備えている。また、最適化支援装置3には、液晶ディスプレイ等の表示部44、並びにキーボードおよびマウス等の入力部45が接続されている。

[0043] ストレージ43はハードディスクドライブ等からなり、最適化支援の処理に必要な情報を含む各種情報が記憶されている。

[0044] また、メモリ42には、最適化支援プログラムが記憶されている。最適化支援プログラムは、CPU41に実行させる処理として、生成物を生産するためのプロセスの運転条件を表す運転条件パラメータを、プロセスの状態を表す状態パラメータに変換する第1変換処理、状態パラメータを生成物の品質を表す品質パラメータに変換する第2変換処理、品質パラメータを状態パラメータに変換する第3変換処理、状態パラメータを運転条件パラメータに変換する第4変換処理、および後述するニューラルネットワークを学習するための学習処理を規定する。

[0045] そして、CPU41がプログラムに従いこれらの処理を実行することで、コンピュータは、第1変換部51、第2変換部52、第3変換部53、第4変換部54および学習部55として機能する。

[0046] 第1変換部51は、生成物を生産するためのプロセス（本実施形態においてはフロー反応）の運転条件を表す運転条件パラメータを、プロセスの状態を表す状態パラメータに変換することにより、状態パラメータを導出する。このために、第1変換部51は、運転条件パラメータの入力により状態パラメータを出力する学習がなされた第1学習モデルM1を有する。第1学習モ

デルM1は、学習部55が後述するようにニューラルネットワーク等を学習することにより構築される。

[0047] 第2変換部52は、状態パラメータを生成物（本実施形態においてはポリスチレン）の品質を表す品質パラメータに変換することにより、品質パラメータを導出する。このために、第2変換部52は、状態パラメータの入力により品質パラメータを出力する学習がなされた第2学習モデルM2を有する。第2学習モデルM2は、学習部55が後述するようにニューラルネットワーク等を学習することにより構築される。

[0048] 第3変換部53は、生成物の品質を表す品質パラメータを、プロセスの状態を表す状態パラメータに変換することにより、状態パラメータを導出する。本実施形態においては、第3変換部53は、第2変換部52における第2学習モデルM2の制御パラメータに基づいて、品質パラメータを状態パラメータに変換する。

[0049] 第4変換部54は、プロセスの状態を表す状態パラメータを、プロセスの運転条件を表す運転条件パラメータに変換することにより、運転条件パラメータを導出する。本実施形態においては、第4変換部54は、第1変換部51における第1学習モデルM1の制御パラメータに基づいて、状態パラメータを運転条件パラメータに変換する。

[0050] ここで、第1学習モデルM1に使用されるモデルは、運転条件パラメータの入力により状態パラメータを予測する予測モデルである。第2学習モデルM2に使用されるモデルも、状態パラメータの入力により品質パラメータを予測する予測モデルである。予測モデルとしては、機械学習モデルが利用できる。機械学習モデルとしては、線形回帰、ガウス過程回帰、サポートベクター回帰、決定木、アンサンブル法、バギング法、ブースティング法および勾配ブースティング法等が挙げられる。また、機械学習モデルの一例として、ニューラルネットワークモデルが挙げられる。ニューラルネットワークモデルとしては、単純パーセプトロン、多層パーセプトロン、ディープニューラルネットワーク、畳み込みニューラルネットワーク、ディープビリーフネ

ットワーク、リカレントニューラルネットワーク、および確率的ニューラルネットワーク等が挙げられる。

[0051] また、機械学習モデルのアンサンブル法としてランダムフォレストが挙げられる。ランダムフォレストは、ランダムにサンプリングされたトレーニングデータとランダムに選択された説明変数を用いることにより、相関の低い決定木群を複数作成し、それらの予測結果を統合および平均させることで、予測精度の向上を図った学習モデルである。なお、ランダムフォレストのモデルの制御パラメータとしては、説明変数の数および決定木の分岐数が挙げられる。

[0052] また、ニューラルネットワークモデルは、ディープニューラルネットワークが挙げられる。ディープニューラルネットワークは、ニューラルネットワーク以外の機械学習モデルと比べるとモデルの制御パラメータ数が多く、柔軟な組み合わせも可能であるため、多様なデータ構成に対して高い性能を発揮することができる。ディープニューラルネットワークの制御パラメータとしては、ネットワークのレイヤー数、ノード数、活性化関数の種類、ドロップアウトの割合、ミニバッチサイズ、エポック数および学習率等が挙げられる。これらのモデルは実行フレームワークが複数存在し、その中から適宜選択することができる。例えば、実行フレームワークとしては、Tensorflow、CNTK、Theano、Caffe、mxnet、Keras、PyTorch、Chainer、Scikit-learn、Caret、およびMatlab（登録商標）等から選択することができる。なお、本実施形態においては、予測モデルとしてニューラルネットワークを用いるものとする。

[0053] 学習部55は、予測モデルとしてのニューラルネットワークの学習を行って、第1学習モデルM1および第2学習モデルM2を構築する。まず、第1変換部51の第1学習モデルM1について説明する。学習部55は、運転条件パラメータを説明変数とし、状態パラメータを目的変数としてニューラルネットワークの学習を行って、運転条件パラメータと状態パラメータとの関連性を表す関数を導出することにより、第1学習モデルM1を構築する。本

実施形態においては、学習部 55 により、運転条件パラメータと状態パラメータとの関連性を表す、以下の関数 (1 A)、(1 B) および (1 C) が生成される。

$$\begin{aligned}
 [0054] \quad y1 &= w_{u1y1} / [1 + \exp\{-(w_{x1u1} \times x1 + w_{x2u1} \times x2 + \dots + w_{x5u1} \times x5)\}] \\
 &\quad + w_{u2y1} / [1 + \exp\{-(w_{x1u2} \times x1 + w_{x2u2} \times x2 + \dots + w_{x5u2} \times x5)\}] \\
 &\quad + w_{u3y1} / [1 + \exp\{-(w_{x1u3} \times x1 + w_{x2u3} \times x2 + \dots + w_{x5u3} \times x5)\}] \quad \dots (1 A) \\
 y2 &= w_{u1y2} / [1 + \exp\{-(w_{x1u1} \times x1 + w_{x2u1} \times x2 + \dots + w_{x5u1} \times x5)\}] \\
 &\quad + w_{u2y2} / [1 + \exp\{-(w_{x1u2} \times x1 + w_{x2u2} \times x2 + \dots + w_{x5u2} \times x5)\}] \\
 &\quad + w_{u3y2} / [1 + \exp\{-(w_{x1u3} \times x1 + w_{x2u3} \times x2 + \dots + w_{x5u3} \times x5)\}] \quad \dots (1 B) \\
 y3 &= w_{u1y3} / [1 + \exp\{-(w_{x1u1} \times x1 + w_{x2u1} \times x2 + \dots + w_{x5u1} \times x5)\}] \\
 &\quad + w_{u2y3} / [1 + \exp\{-(w_{x1u2} \times x1 + w_{x2u2} \times x2 + \dots + w_{x5u2} \times x5)\}] \\
 &\quad + w_{u3y3} / [1 + \exp\{-(w_{x1u3} \times x1 + w_{x2u3} \times x2 + \dots + w_{x5u3} \times x5)\}] \quad \dots (1 C)
 \end{aligned}$$

[0055] 上記関数 (1 A) ~ (1 C) において、 $x_i$  ( $i$  は自然数) は運転条件パラメータの値であり、 $i$  の最大値は運転条件パラメータの個数である。本実施形態において、運転条件パラメータとして、例えば第 1 原料の流量、第 2 原料の流量、反応時間、反応温度および混合比の 5 つのパラメータを使用するとした場合、 $i = 5$  である。 $y_m$  ( $m$  は自然数) は状態パラメータの値であり、 $m$  の最大値は状態パラメータの個数である。本実施形態において、状態パラメータとして、例えば混合原料の色、圧力および pH を使用するとした場合、 $m = 3$  である。 $u_l$  ( $l$  は自然数) は後述するニューラルネットワークにおける隠れ層 L 2 のノードであり、 $l$  の最大値はノードの個数である。本実施形態では  $l = 3$  である。 $w_{xiul}$ 、 $w_{ulym}$  はニューラルネットワークの結合重みを表す重み係数である。具体的には、 $w_{xiul}$  は  $x_i$  と  $u_l$  との間の重み係数であり、 $w_{ulym}$  は  $u_l$  と  $y_m$  との間の重み係数である。

[0056] 図 4 は本実施形態における第 1 学習モデル M 1 を構築するためのニューラルネットワークの層構造を説明するための図である。図 4 に示すように、ニューラルネットワーク 60 は、入力層 L 1、隠れ層 L 2 および出力層 L 3 の 3 層構造を有する。入力層 L 1 は、説明変数である運転条件パラメータの値

$x_1 \sim x_5$ で構成される。隠れ層L2は、3つのノード $u_1 \sim u_3$ で構成され、本実施形態では1層となっている。ノード $u_1 \sim u_3$ のそれぞれは、 $x_1 \sim x_5$ を $x_1 \sim x_5$ の各々に対応する重み係数 $w_{xiul}$ で重み付けした値の総和である。出力層L3は目的変数である状態パラメータの値 $y_1 \sim y_3$ で構成される。状態パラメータの値 $y_1 \sim y_3$ のそれぞれは、ノード $u_1 \sim u_3$ を用いて、ノード $u_1 \sim u_3$ の各々に対応する重み係数 $w_{ulym}$ で重み付けし、求めた値である。図4における黒丸「●」は、重み係数 $w_{xiul}$ 、 $w_{ulym}$ を示している。重み係数 $w_{xiul}$ 、 $w_{ulym}$ は、教師データを用いたニューラルネットワーク60の学習により導出される。なお、ニューラルネットワーク60の層構造は、図4に示すものに限定されない。

[0057] 次に、第2変換部52の第2学習モデルM2について説明する。学習部55は、状態パラメータを説明変数とし、品質パラメータを目的変数としてニューラルネットワークの学習を行って、状態パラメータと品質パラメータとの関連性を表す関数を導出することにより、第2学習モデルM2を構築する。本実施形態においては、学習部55により、運転条件パラメータと状態パラメータとの関連性を表す以下の関数(2A)および(2B)が生成される。

$$\begin{aligned}
 [0058] \quad z_1 &= w_{u_1z_1} / [1 + \exp\{-(w_{y_1u_{11}} \times y_1 + w_{y_2u_{11}} \times y_2 + w_{y_3u_{11}} \times y_3)\}] \\
 &\quad + w_{u_2z_1} / [1 + \exp\{-(w_{y_1u_{12}} \times y_1 + w_{y_2u_{12}} \times y_2 + w_{y_3u_{12}} \times y_3)\}] \\
 &\quad + w_{u_3z_1} / [1 + \exp\{-(w_{y_1u_{13}} \times y_1 + w_{y_2u_{13}} \times y_2 + w_{y_3u_{13}} \times y_3)\}] \quad \dots (2A) \\
 z_2 &= w_{u_1z_2} / [1 + \exp\{-(w_{y_1u_{11}} \times y_1 + w_{y_2u_{11}} \times y_2 + w_{y_3u_{11}} \times y_3)\}] \\
 &\quad + w_{u_2z_2} / [1 + \exp\{-(w_{y_1u_{12}} \times y_1 + w_{y_2u_{12}} \times y_2 + w_{y_3u_{12}} \times y_3)\}] \\
 &\quad + w_{u_3z_2} / [1 + \exp\{-(w_{y_1u_{13}} \times y_1 + w_{y_2u_{13}} \times y_2 + w_{y_3u_{13}} \times y_3)\}] \quad \dots (2B)
 \end{aligned}$$

[0059] 上記関数(2A)および(2B)において、 $y_m$  ( $m$ は自然数)は状態パラメータの値である。本実施形態において、状態パラメータとして、上述したように例えば混合原料の反応温度、色およびpHを使用するとした場合、 $m=3$ である。 $z_k$  ( $k$ は自然数)は品質パラメータの値であり、 $k$ の最大値は品質パラメータの個数である。本実施形態において、品質パラメータと

して、例えば生成物濃度および不純物濃度とした場合、 $k = 2$ である。 $u_{1l}$  ( $l$ は自然数)は後述するニューラルネットワークにおける隠れ層 $L_{12}$ のノードであり、 $l$ の最大値はノードの個数である。本実施形態では $l = 3$ である。 $w_{ymul}$ 、 $w_{ulzk}$ はニューラルネットワークの結合重みを表す重み係数である。具体的には、 $w_{ymul}$ は $y_m$ と $u_{1l}$ との間の重み係数であり、 $w_{ulzk}$ は $u_{1l}$ と $z_k$ との間の重み係数である。

[0060] 図5は本実施形態における第2学習モデル $M_2$ を構築するためのニューラルネットワークの層構造を説明するための図である。図5に示すように、ニューラルネットワーク70は、入力層 $L_{11}$ 、隠れ層 $L_{12}$ および出力層 $L_{13}$ の3層構造を有する。入力層 $L_{11}$ は、説明変数である状態パラメータの値 $y_1 \sim y_3$ で構成される。隠れ層 $L_{12}$ は、3つのノード $u_{11} \sim u_{13}$ で構成され、本実施形態では1層となっている。ノード $u_{11} \sim u_{13}$ のそれぞれは、 $y_1 \sim y_3$ を $y_1 \sim y_3$ の各々に対応する重み係数 $w_{ymul}$ で重み付けした値の総和である。出力層 $L_{13}$ は目的変数である品質パラメータの値 $z_1, z_2$ で構成される。品質パラメータの値 $z_1, z_2$ のそれぞれは、ノード $u_1 \sim u_3$ を用いて、ノード $u_1 \sim u_3$ の各々に対応する重み係数 $w_{ulzk}$ で重み付けし、求めた値である。図5における黒丸「●」は、重み係数 $w_{ymul}$ 、 $w_{ulzk}$ を示している。重み係数 $w_{ymul}$ 、 $w_{ulzkym}$ は、教師データを用いたニューラルネットワーク70の学習により導出される。なお、ニューラルネットワーク70の層構造は、図4に示すものに限定されない。

[0061] 学習部55は、予め生成された複数の教師データを用いて、ニューラルネットワーク60、70を学習して第1学習モデル $M_1$ および第2学習モデル $M_2$ を構築する。ここで、教師データは、好ましい品質の生成物が得られた際の運転条件パラメータ、状態パラメータおよび品質パラメータを含む。教師データは複数用意されてストレージ43に記憶される。図6は教師データの例を示す図である。図6に示すように、教師データは運転条件パラメータ、状態パラメータおよび品質パラメータを含む。また、運転条件パラメータは、第1原料の流量、第2原料の流量、反応時間、反応温度および混合比の

5つのパラメータを含む。状態パラメータは、混合原料の色、圧力およびpHの3つのパラメータを含む。また、品質パラメータは、生成物濃度および不純物濃度の2つのパラメータを含む。

[0062] 学習の際には、学習部55がストレージ43に記憶された教師データを用いて、例えば誤差逆伝搬法に従って、ニューラルネットワーク60、70を学習させる。具体的には、ニューラルネットワーク60に対しては、学習部55は、教師データセットのうちの1つに含まれる運転条件パラメータをニューラルネットワーク60に入力し、ニューラルネットワーク60から状態パラメータを出力させる。そして、学習部55は、ニューラルネットワーク60に出力させた状態パラメータと、教師データに含まれる状態パラメータとの差が最小となるように重み係数 $w_{xiul}$ 、 $w_{ulym}$ を導出することにより、ニューラルネットワーク60を学習させる。

[0063] また、ニューラルネットワーク70に対しては、学習部55は、教師データセットのうちの1つに含まれる状態パラメータをニューラルネットワーク70に入力し、ニューラルネットワーク70から品質パラメータを出力させる。そして、学習部55は、ニューラルネットワーク70に出力させた品質パラメータと、教師データに含まれる品質パラメータとの差が最小となるように重み係数 $w_{ymul}$ 、 $w_{ulzk}$ を導出することにより、ニューラルネットワーク70を学習させる。

[0064] 学習が完了して第1学習モデルM1および第2学習モデルM2が構築されると、学習部55は、第1学習モデルM1および第2学習モデルM2により表される関数をストレージ43に記憶する。

[0065] 本実施形態においては、第3変換部53および第4変換部54により、目標とする未知の品質パラメータ（以下、目標品質パラメータとする）から、その目標品質パラメータを得るための運転条件パラメータを導出する。このために、第3変換部53は、第2変換部52が有する第2学習モデルM2の制御パラメータに基づいて、目標品質パラメータを状態パラメータに変換する。目標品質パラメータを変換することにより得られる状態パラメータを目

標状態パラメータと称する。制御パラメータは、第2学習モデルM2に基づいて得られる関数における重み係数 $w_{y_{mu1l}}$ 、 $w_{u1lzk}$ である。本実施形態においては、第3変換部53は、目標状態パラメータの生成のために、以下の関数G21、G22を導出する。

$$[0066] \quad G21 = zt1 - [w_{u1z1} / [1 + \exp\{-(w_{y1u11} \times y1 + w_{y2u11} \times y2 + w_{y3u11} \times y3)\}]] + w_{u2z1} / [1 + \exp\{-(w_{y1u12} \times y1 + w_{y2u12} \times y2 + w_{y3u12} \times y3)\}] + w_{u3z1} / [1 + \exp\{-(w_{y1u13} \times y1 + w_{y2u13} \times y2 + w_{y3u13} \times y3)\}] \quad \dots (3A)$$

$$G22 = zt2 - [w_{u1z2} / [1 + \exp\{-(w_{y1u11} \times y1 + w_{y2u11} \times y2 + w_{y3u11} \times y3)\}]] + w_{u2z2} / [1 + \exp\{-(w_{y1u12} \times y1 + w_{y2u12} \times y2 + w_{y3u12} \times y3)\}] + w_{u3z2} / [1 + \exp\{-(w_{y1u13} \times y1 + w_{y2u13} \times y2 + w_{y3u13} \times y3)\}] \quad \dots (3B)$$

[0067] 関数G21、G22において、zt1、zt2はそれぞれ目標品質パラメータである。第3変換部53は、関数G21、G22の絶対値を最小にするための状態パラメータ $y_m$ を目標状態パラメータ $y_{tm}$ として導出する。具体的には、目標品質パラメータzt1、zt2を説明変数とし、目標状態パラメータ $y_{tm}$ を目的変数として、重回帰分析および主成分分析等の多変量解析、または遺伝的アルゴリズム、多目的粒子群最適化およびベイズ最適化等の多目的最適化を行うことにより、目標状態パラメータ $y_{tm}$ を導出する。

[0068] 第4変換部54は、第1変換部51が有する第1学習モデルM1の制御パラメータに基づいて、目標状態パラメータを運転条件パラメータに変換する。目標状態パラメータを変換することにより得られる運転条件パラメータを目標運転条件パラメータとする。制御パラメータは、第1学習モデルM1により表される関数における重み係数 $w_{xiul}$ 、 $w_{ulym}$ である。本実施形態においては、第4変換部54は、目標運転条件パラメータの生成のために、以下の関数G11、G12、G13を生成する。

$$[0069] \quad G11 = yt1 - [w_{u1y1} / [1 + \exp\{-(w_{x1u1} \times x1 + w_{x2u1} \times x2 + \dots + w_{x5u1} \times x5)\}]] + w_{u2y1} / [1 + \exp\{-(w_{x1u2} \times x1 + w_{x2u2} \times x2 + \dots + w_{x5u2} \times x5)\}] + w_{u3y1} / [1 + \exp\{-(w_{x1u3} \times x1 + w_{x2u3} \times x2 + \dots + w_{x5u3} \times x5)\}] \quad \dots (4A)$$

$$G12 = y_{t2} - \left[ \frac{w_{u1y2}}{1 + \exp\{-(w_{x1u1} \times x1 + w_{x2u1} \times x2 + \dots + w_{x5u1} \times x5)\}} \right] + \frac{w_{u2y2}}{1 + \exp\{-(w_{x1u2} \times x1 + w_{x2u2} \times x2 + \dots + w_{x5u2} \times x5)\}} \quad \dots (4B)$$

$$+ \frac{w_{u3y2}}{1 + \exp\{-(w_{x1u3} \times x1 + w_{x2u3} \times x2 + \dots + w_{x5u3} \times x5)\}} \quad \dots (4B)$$

$$G13 = y_{t3} - \left[ \frac{w_{u1y3}}{1 + \exp\{-(w_{x1u1} \times x1 + w_{x2u1} \times x2 + \dots + w_{x5u1} \times x5)\}} \right]$$

$$+ \frac{w_{u2y3}}{1 + \exp\{-(w_{x1u2} \times x1 + w_{x2u2} \times x2 + \dots + w_{x5u2} \times x5)\}} \quad \dots (4C)$$

$$+ \frac{w_{u3y3}}{1 + \exp\{-(w_{x1u3} \times x1 + w_{x2u3} \times x2 + \dots + w_{x5u3} \times x5)\}} \quad \dots (4C)$$

[0070] 関数G11～G13において、 $y_{t1}$ 、 $y_{t2}$ 、 $y_{t3}$ はそれぞれ目標状態パラメータである。第4変換部54は、関数G11～G13の絶対値を最小にするための運転条件パラメータ $x_i$ を目標運転条件パラメータ $x_{ti}$ として導出する。具体的には、目標状態パラメータ $y_{t1}$ 、 $y_{t2}$ 、 $y_{t3}$ を説明変数とし、目標運転条件パラメータ $x_{ti}$ を目的変数として、重回帰分析および主成分分析等の多変量解析、または遺伝的アルゴリズム、多目的粒子群最適化およびベイズ最適化等の多目的最適化を行うことにより、目標運転条件パラメータ $x_{ti}$ を導出する。

[0071] 上述した第1変換部51、第2変換部52、第3変換部53および第4変換部54が行う処理を、図7を用いて概念的に説明する。第1変換部51は、運転条件パラメータから状態パラメータを順問題として予測するものとなる。第2変換部52は、状態パラメータから品質パラメータを順問題として予測するものとなる。第3変換部53は、品質パラメータから状態パラメータを逆問題として予測するものとなる。第4変換部54は、状態パラメータから運転条件パラメータを逆問題として予測するものとなる。なお、図7において、白抜き矢印が順問題を、黒く塗りつぶした矢印が逆問題をそれぞれ表すものとする。

[0072] 図7に示すように、本実施形態においては、運転条件パラメータから状態パラメータを経る2段階の処理により、品質パラメータが導出されることとなる。また、品質パラメータから状態パラメータを経る2段階の処理により、運転条件パラメータが導出されることとなる。

[0073] 最適化支援装置3は、目標運転条件パラメータ $x_{ti}$ をコントローラ12

に出力する。コントローラ 12 は、目標運転条件パラメータ  $x_{ti}$  にしたがって、フロー反応装置 11 の動作を制御する。これにより、目標とする品質を有する生成物が生産されることとなる。

[0074] 次いで、本実施形態において行われる処理について説明する。図 8 は、本実施形態において第 1 変換部 51 の第 1 学習モデル M1 および第 2 変換部 52 の第 2 学習モデル M2 の構築時に行われる処理を示すフローチャートである。学習部 55 がストレージ 43 に記憶された複数の教師データから 1 つの教師データを読み出し（ステップ S T 1）、第 1 変換部 51 のニューラルネットワークに対して、運転条件パラメータと状態パラメータとの関連性を学習させる（第 1 の学習；ステップ S T 2）。次いで、学習部 55 は、第 2 変換部 52 のニューラルネットワークに対して、状態パラメータと品質パラメータとの関連性を学習させる（第 2 の学習；ステップ S T 3）。そして、ステップ S T 1 にリターンし、次の教師データを読み出して、ステップ S T 2 およびステップ S T 3 の処理を繰り返す。これにより、第 1 学習モデル M1 および第 2 学習モデル M2 が構築される。

[0075] なお、学習部 55 は、第 1 変換部 51 により生成される状態パラメータと教師データの状態パラメータとの差、および第 2 変換部 52 により生成される品質パラメータと教師データの品質パラメータとの差が、予め定められたしきい値以下となるまで学習を繰り返す。繰返し回数は予め定められた回数であってもよい。

[0076] 次いで、本実施形態において、未知の目標品質パラメータから運転条件パラメータを導出する際の処理について説明する。図 9 は、目標品質パラメータから運転条件パラメータを導出する際の処理を示すフローチャートである。入力部 15 から目標品質パラメータが最適化支援装置 3 に入力されると（ステップ S T 1 1）、第 3 変換部 53 が、第 2 学習モデル M2 の制御パラメータに基づいて、目標品質パラメータを目標状態パラメータに変換する（ステップ S T 1 2）。次いで、第 4 変換部 54 が、目標状態パラメータを目標運転パラメータに変換し（ステップ S T 1 3）、処理を終了する。

[0077] このように、本実施形態においては、従来ではプロセス条件パラメータから品質パラメータを導出していたところ、プロセス条件パラメータを運転条件パラメータと状態パラメータとに分け、第1変換部51により運転条件パラメータを状態パラメータに変換し、第2変換部52により状態パラメータを品質パラメータに変換するという2段階の処理により、品質パラメータを導出するようにした。このため、運転条件パラメータと状態パラメータとを区別せずに、プロセス条件パラメータとして用いて品質パラメータを求める従来処理と比較して、第1変換部51および第2変換部52がそれぞれ行う処理において、入力されるパラメータの数を低減することができる。これにより、とくにニューラルネットワーク等の学習により構築された学習モデルを変換に用いる場合、過学習を防止することができる。したがって、本実施形態によれば、生成物の生産プロセスにおける各種条件を精度よく予測できる。

[0078] また、本実施形態においては、目標品質パラメータから目標運転条件パラメータを導出する処理を、第3変換部53および第4変換部54のそれぞれにおいて行うことにより、2つの処理に分けるようにした。このため、運転条件パラメータと状態パラメータとを区別せずに、品質パラメータからプロセス条件パラメータを求める従来処理と比較して、第3変換部53および第4変換部54がそれぞれ行う処理において、入力されるパラメータの数を低減することができる。これにより、本実施形態によれば、目標品質パラメータから目標運転条件パラメータを精度よく予測できる。

[0079] また、本実施形態においては、目標品質パラメータの目標状態パラメータへの変換を、第2学習モデルM2の制御パラメータを用いて行い、目標状態パラメータから目標運転条件パラメータへの変換を第1学習モデルM1の制御パラメータを用いるようにした。ここで、第1学習モデルM1および第2学習モデルM2の制御パラメータは、生成物の生産プロセスにおける各種条件を精度よく予測できるものとなっている。このため、本実施形態によれば、目標品質パラメータから精度よく目標運転条件パラメータを導出すること

ができる。したがって、目標運転条件パラメータを用いて生成物を生産することにより、目標とする品質を有する生成物を得ることができる。

[0080] また、上記特許文献1に記載された手法のように、プロセス条件パラメータと品質パラメータとの相関を学習することにより、品質パラメータからプロセス条件パラメータを予測した場合、本実施形態のように、運転条件パラメータと状態パラメータとの相関は何ら学習していないものとなる。このため、予測されたプロセス条件パラメータにより生産プロセスを行っても、目標とする品質を有する生産物が生産されない場合がある。すなわち、プロセス条件パラメータと品質パラメータとの相関を学習することにより、品質パラメータからプロセス条件パラメータを予測する場合、運転条件パラメータにより状態パラメータが実現できることを前提となる。しかしながら、その前提はほとんどの場合成立しない。このため、従来のように、品質パラメータからプロセス条件パラメータを予測する手法によっては、目標となる品質パラメータを達成できるプロセス条件パラメータを精度よく予測することができない。

[0081] 本実施形態においては、プロセス条件パラメータを運転条件パラメータと状態パラメータとに分け、品質パラメータから状態パラメータを予測し、状態パラメータから運転条件パラメータを予測したり、運転条件パラメータから状態パラメータを予測し、状態パラメータから品質パラメータを予測したりするようにした。このため、プロセス条件パラメータに含まれる運転条件パラメータにより状態パラメータが実現できるという前提が成立した状況で、運転条件パラメータ、状態パラメータおよび品質パラメータを予測することができる。したがって、本実施形態によれば、生成物の生産プロセスにおける各種条件を精度よく予測できる。

[0082] なお、上記実施形態においては、第1変換部51において、ニューラルネットワーク60を学習することによって構築される第1学習モデルM1を用いることにより、運転条件パラメータを状態パラメータに変換しているが、これに限定されるものではない。例えば、運転条件パラメータを状態パラメ

ータに変換するための数式、または運転条件パラメータと状態パラメータとを対応づけたテーブル等により、運転条件パラメータを状態パラメータに変換するようにしてもよい。

[0083] この場合、第4変換部54は、状態パラメータを運転条件パラメータに変換するための数式、または状態パラメータと運転条件パラメータとを対応づけたテーブル等により、状態パラメータを運転条件パラメータに変換するものとしてもよい。

[0084] また、上記実施形態においては、第2変換部52において、ニューラルネットワーク70を学習することによって構築される第2学習モデルM2を用いることにより、状態パラメータを品質パラメータに変換しているが、これに限定されるものではない。例えば、状態パラメータを品質パラメータに変換するための数式、または状態パラメータと品質パラメータとを対応づけたテーブル等により、状態パラメータを品質パラメータに変換するようにしてもよい。

[0085] この場合、第3変換部53は、品質パラメータを状態パラメータに変換するための数式、または品質パラメータと状態パラメータとを対応づけたテーブル等により、品質パラメータを状態パラメータに変換するものとしてもよい。

[0086] また、上記実施形態においては、最適化支援装置3が第1変換部51、第2変換部52、第3変換部53および第4変換部54を備えたものとしているが、これに限定されるものでない。図10に示すように、第1変換部51および第2変換部52のみを有するものであってもよい。この場合、第1変換部51は第1学習モデルM1により、運転条件パラメータを状態パラメータに変換するものであってもよく、数式またはテーブル等により運転条件パラメータを状態パラメータに変換するものであってもよい。また、第2変換部52は第2学習モデルM2により、状態パラメータを品質パラメータに変換するものであってもよく、数式またはテーブル等により状態パラメータを品質パラメータに変換するものであってもよい。

[0087] また、最適化支援装置3を、図11に示すように、第3変換部53および第4変換部54のみを有するものとしてもよい。この場合、第3変換部53は、最適化支援装置3とは別個の装置により構築された第2学習モデルM2の制御パラメータを用いて、品質パラメータを状態パラメータに変換するものであってもよく、数式またはテーブル等により品質パラメータを状態パラメータに変換するものであってもよい。また、第4変換部54は、最適化支援装置3とは別個の装置により構築された第1学習モデルM1の制御パラメータを用いて、状態パラメータを運転条件パラメータに変換するものであってもよく、数式またはテーブル等により状態パラメータを運転条件パラメータに変換するものであってもよい。

[0088] また、上記実施形態においては、生成物を生産するプロセスとしてフロー合成プロセスを用いているが、これに限定されるものではない。生成物を生産するプロセスとして、細胞培養プロセスを用いてもよい。細胞培養プロセスにおいては、生成物は細胞および細胞が生み出す抗体であり、細胞の培養条件を運転条件パラメータとして使用し、細胞および細胞が生み出す抗体の品質を品質パラメータとして使用する。また、図1に示す生産装置2は、細胞培養装置となる。例えば、細胞培養プロセスが抗体細胞培養プロセスである場合、運転条件パラメータとしては、例えば、灌流比、定常期細胞数、培養槽中の液体の攪拌速度、下面空気量、下面酸素量、下面窒素量、上面二酸化炭素量、上面空気量、消泡剤量および界面活性剤量等を用いることができる。状態パラメータとしては、例えば、pH、 $pO_2$ （酸素分圧）、 $pCO_2$ （二酸化炭素分圧）、Gln（グルタミン濃度）、Glu（グルタミン酸濃度）、Gluc（グルコース濃度）、Lac（乳酸濃度）、 $NH_4^+$ （アンモニウムイオン濃度）、 $Na^+$ （ナトリウムイオン濃度）、 $K^+$ （カリウムイオン濃度）、Osmol（浸透圧）および $Kla$ （酸素移動量係数）等を用いることができる。品質パラメータとしては、抗体濃度、副生成物濃度および生細胞数（生きている細胞の数）等を用いることができる。

[0089] また、生成物を生産するプロセスとして、真空成膜プロセスを用いてもよ

い。真空成膜プロセスにおいては、生成物は、ガラス、樹脂および金属等の基板の表面に形成される膜である。また、図1に示す生産装置2は、真空成膜装置となる。また、真空成膜の条件を運転パラメータとして使用し、成膜の品質を品質パラメータとして使用する。運転条件パラメータとしては、例えば、真空圧、印加電圧、バイアス電圧、基板温度、成膜時間、ガス流量、ガス濃度およびライン速度等を用いることができる。状態パラメータはプラズマの状態であり、プラズマ安定度、プラズマ発色、ICP-OES/ICP-AES（プラズマ発光分析）波形スペクトル、プラズマ密度、防着板デポ厚みおよび装置電位差等を用いることができる。品質パラメータとしては、膜質およびバリア性能等を用いることができる。

[0090] また、生成物を生産するプロセスとして、ロール・ツー・ロールの塗布プロセスを用いてもよい。塗布プロセスにおいては、生成物はTAC（トリアセチルセルロース）、PET（ポリエチレンテレフタレート）、およびCOP（シクロオレフィンポリマー）等の、基板となる樹脂の表面に塗布膜が形成された液晶位相差フィルムおよび防眩性フィルム等である。また、図1に示す生産装置2は、塗布装置となる。また、塗布の条件を運転条件パラメータとして使用し、塗布膜の品質を品質パラメータとして使用する。運転条件パラメータとしては、例えば、塗布流量、液温度、乾燥温度、ライン速度および搬送ロール温度等を用いることができる。状態パラメータとしては、液の脈動、乾燥風速の変動、乾燥中の揮発量および基板への液染み込み量等を用いることができる。品質パラメータとしては、膜質、塗布膜の膜厚分布および塗布膜と基板との密着力等を用いることができる。

[0091] また、上記実施形態において、例えば、第1変換部51、第2変換部52、第3変換部53、第4変換部54および学習部55といった各種の処理を実行する処理部（Processing Unit）のハードウェア的な構造としては、次に示す各種のプロセッサ（Processor）を用いることができる。上記各種のプロセッサには、上述したように、ソフトウェア（プログラム）を実行して各種の処理部として機能する汎用的なプロセッサであるCPUに加えて、FPG

A (Field Programmable Gate Array) 等の製造後に回路構成を変更可能なプロセッサであるプログラマブルロジックデバイス (Programmable Logic Device :PLD)、ASIC (Application Specific Integrated Circuit) 等の特定の処理を実行させるために専用に設計された回路構成を有するプロセッサである専用電気回路等が含まれる。

[0092] 1つの処理部は、これらの各種のプロセッサのうちの1つで構成されてもよいし、同種または異種の2つ以上のプロセッサの組み合わせ（例えば、複数のFPGAの組み合わせまたはCPUとFPGAとの組み合わせ）で構成されてもよい。また、複数の処理部を1つのプロセッサで構成してもよい。

[0093] 複数の処理部を1つのプロセッサで構成する例としては、第1に、クライアントおよびサーバ等のコンピュータに代表されるように、1つ以上のCPUとソフトウェアとの組み合わせで1つのプロセッサを構成し、このプロセッサが複数の処理部として機能する形態がある。第2に、システムオンチップ (System On Chip:SoC) 等に代表されるように、複数の処理部を含むシステム全体の機能を1つのIC (Integrated Circuit) チップで実現するプロセッサを使用する形態がある。このように、各種の処理部は、ハードウェア的な構造として、上記各種のプロセッサの1つ以上を用いて構成される。

[0094] さらに、これらの各種のプロセッサのハードウェア的な構造としては、より具体的には、半導体素子等の回路素子を組み合わせた電気回路 (Circuitry) を用いることができる。

## 符号の説明

- [0095]
- 1 生産設備
  - 2 生産装置
  - 3 最適化支援装置
  - 1 1 フロー反応装置
  - 1 2 コントローラ
  - 2 1 第1供給部
  - 2 2 第2供給部

- 2 3 反応セクション
- 2 6 回収セクション
- 3 1 合流部
- 3 1 a ~ 3 1 c 第 1 管部 ~ 第 3 管部
- 3 2 反応部
- 3 3 温調部
- 3 4 照射部
- 3 5 第 1 検出部
- 3 6 第 2 検出部
- 4 1 CPU
- 4 2 メモリ
- 4 3 ストレージ
- 4 4 表示部
- 4 5 入力部
- 5 1 第 1 変換部
- 5 2 第 2 変換部
- 5 3 第 3 変換部
- 5 4 第 4 変換部
- 5 5 学習部
- 6 0, 7 0 ニューラルネットワーク
- L 1, L 1 1 入力層
- L 2, L 1 2 中間層
- L 3, L 1 3 出力層
- x i 運転条件パラメータの値
- u l、u 1 l ノード値
- y m 状態パラメータの値
- z k 品質パラメータの値

## 請求の範囲

- [請求項1] 生成物を生産するためのプロセスの運転条件を表す運転条件パラメータを、前記プロセスの状態を表す状態パラメータに変換する第1変換部と、  
前記状態パラメータを前記生成物の品質を表す品質パラメータに変換する第2変換部とを備えた最適化支援装置。
- [請求項2] 前記第1変換部は、前記運転条件パラメータの入力により前記状態パラメータを出力する学習がなされた第1学習モデルを有し、  
前記第2変換部は、前記状態パラメータの入力により前記品質パラメータを出力する学習がなされた第2学習モデルを有する請求項1に記載の最適化支援装置。
- [請求項3] 前記品質パラメータを前記状態パラメータに変換する第3変換部と、  
前記状態パラメータを運転条件パラメータに変換する第4変換部とをさらに備えた請求項1に記載の最適化支援装置。
- [請求項4] 前記品質パラメータを前記状態パラメータに変換する第3変換部と、  
前記状態パラメータを運転条件パラメータに変換する第4変換部とをさらに備えた請求項2に記載の最適化支援装置。
- [請求項5] 前記第3変換部は、前記第2学習モデルの制御パラメータに基づいて、前記品質パラメータを前記状態パラメータに変換し、  
前記第4変換部は、前記第1学習モデルの制御パラメータに基づいて、前記状態パラメータを前記運転条件パラメータに変換する請求項4に記載の最適化支援装置。
- [請求項6] 生成物を生産するためのプロセスにおいて生成される前記生成物の品質を表す品質パラメータを、前記プロセスの状態を表す状態パラメータに変換する第3変換部と、  
前記状態パラメータを、前記プロセスの運転条件を表す運転条件パ

ラメータに変換する第4変換部とを備えた最適化支援装置。

[請求項7] 前記第3変換部は、前記状態パラメータの入力により前記品質パラメータを出力する学習がなされた学習モデルの制御パラメータに基づいて、前記品質パラメータを前記状態パラメータに変換する請求項6に記載の最適化支援装置。

[請求項8] 前記状態パラメータの入力により前記品質パラメータを出力する学習がなされた学習モデルを有し、前記状態パラメータを前記生成物の品質を表す品質パラメータに変換する第2変換部をさらに備えた請求項7に記載の最適化支援装置。

[請求項9] 前記第4変換部は、前記運転条件パラメータの入力により前記状態パラメータを出力する学習がなされた学習モデルの制御パラメータに基づいて、前記状態パラメータを前記運転条件パラメータに変換する請求項6から8のいずれか1項に記載の最適化支援装置。

[請求項10] 前記運転条件パラメータの入力により前記状態パラメータを出力する学習がなされた学習モデルを有し、前記運転条件パラメータを前記状態パラメータに変換する第1変換部をさらに備えた請求項9に記載の最適化支援装置。

[請求項11] 前記プロセスは、フロー合成プロセスである請求項1から10のいずれか1項に記載の最適化支援装置。

[請求項12] 前記プロセスは、細胞培養プロセスである請求項1から10のいずれか1項に記載の最適化支援装置。

[請求項13] 前記プロセスは、真空成膜プロセスである請求項1から10のいずれか1項に記載の最適化支援装置。

[請求項14] 前記プロセスは、塗布プロセスである請求項1から10のいずれか1項に記載の最適化支援装置。

[請求項15] 生成物を生産するためのプロセスの運転条件を表す運転条件パラメータを、前記プロセスの状態を表す状態パラメータに変換し、  
前記状態パラメータを前記生成物の品質を表す品質パラメータに変

換する最適化支援方法。

[請求項16]

生成物を生産するためのプロセスにおいて生成される前記生成物の品質を表す品質パラメータを、前記プロセスの状態を表す状態パラメータに変換し、

前記状態パラメータを、前記プロセスの運転条件を表す運転条件パラメータに変換する最適化支援方法。

[請求項17]

生成物を生産するためのプロセスの運転条件を表す運転条件パラメータを、前記プロセスの状態を表す状態パラメータに変換する手順と、

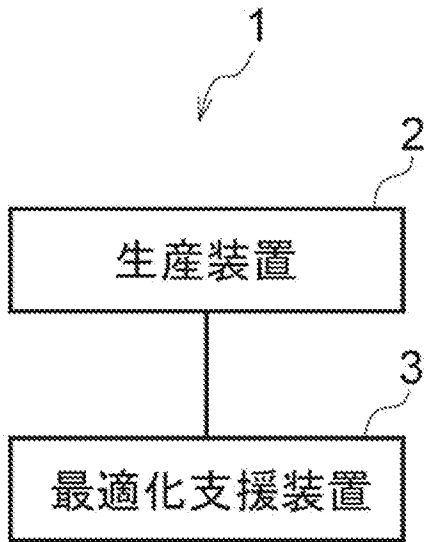
前記状態パラメータを前記生成物の品質を表す品質パラメータに変換する手順とをコンピュータに実行させる最適化支援プログラム。

[請求項18]

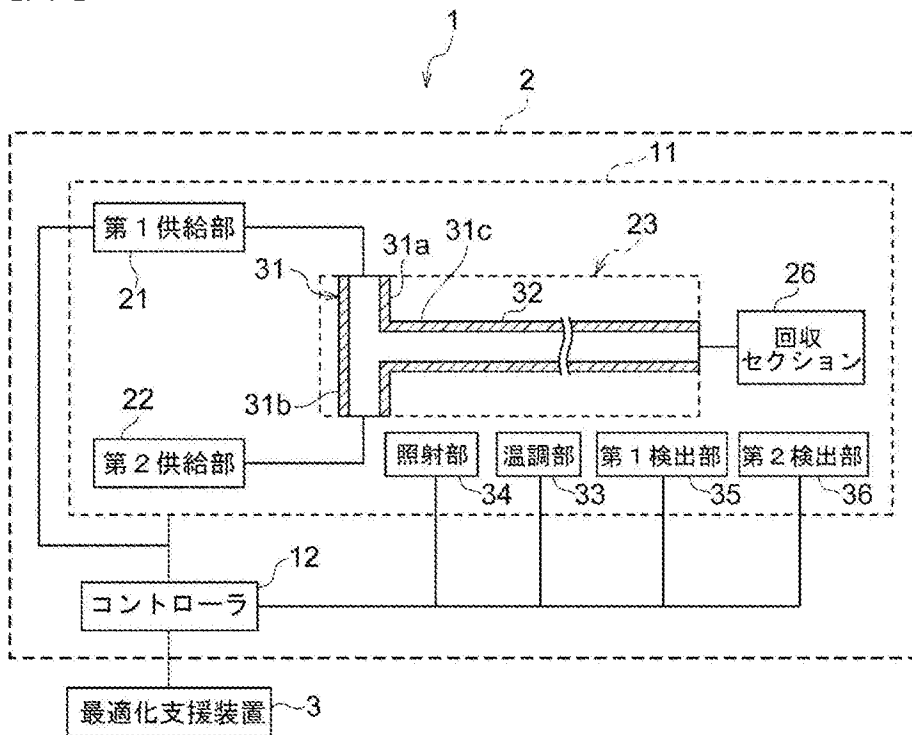
生成物を生産するためのプロセスにおいて生成される前記生成物の品質を表す品質パラメータを、前記プロセスの状態を表す状態パラメータに変換する手順と、

前記状態パラメータを、前記プロセスの運転条件を表す運転条件パラメータに変換する手順とをコンピュータに実行させる最適化支援プログラム。

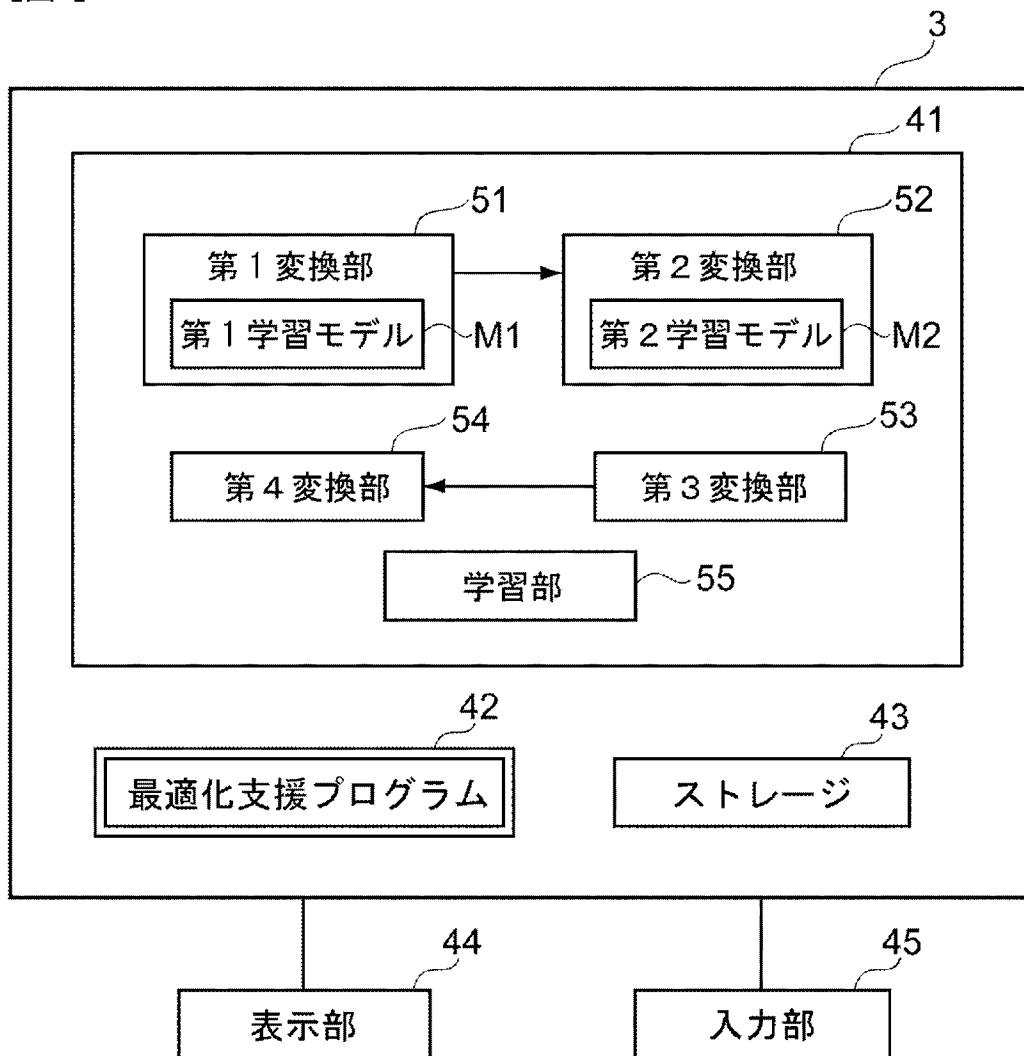
[図1]



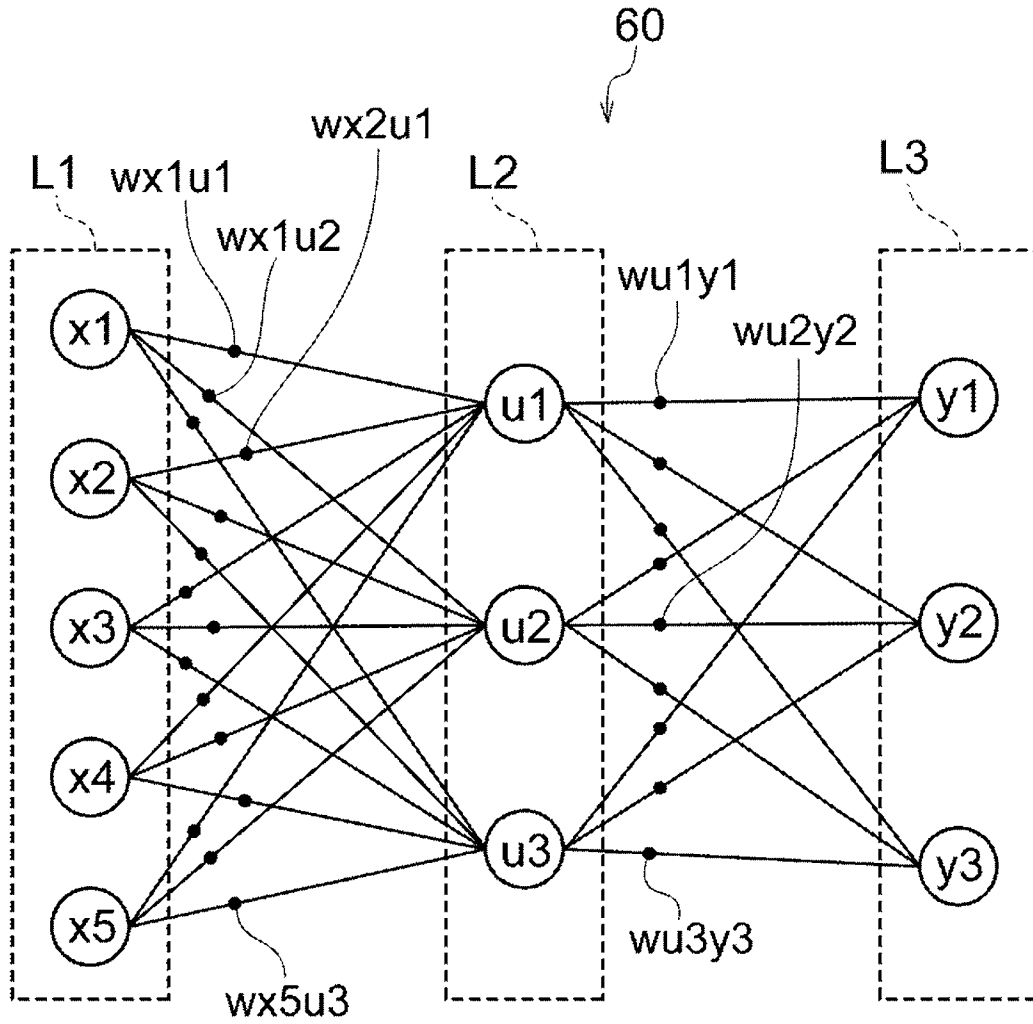
[図2]



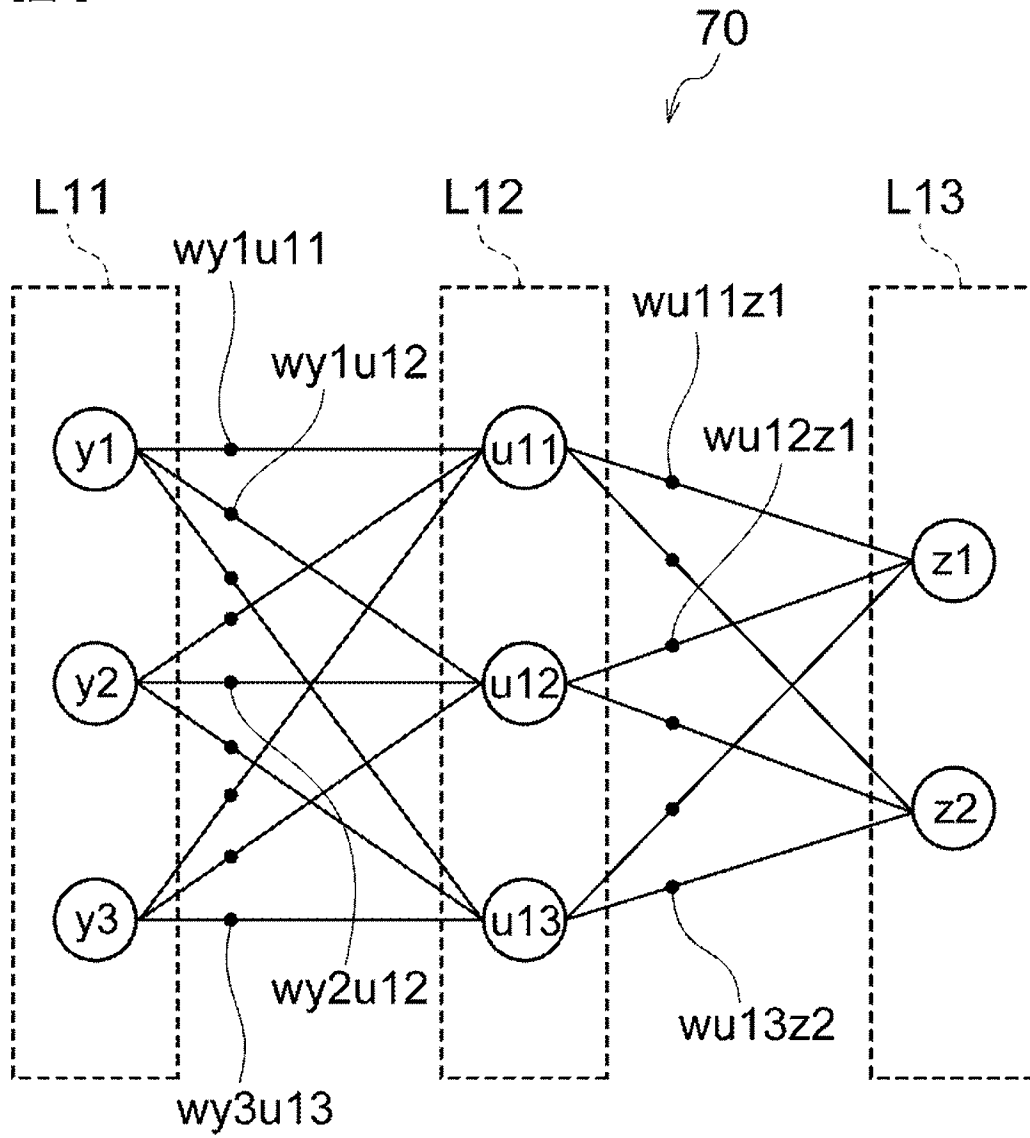
[図3]



[図4]



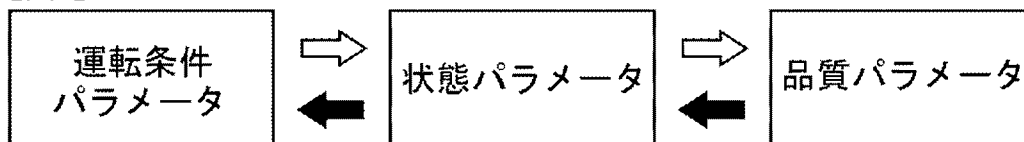
[図5]



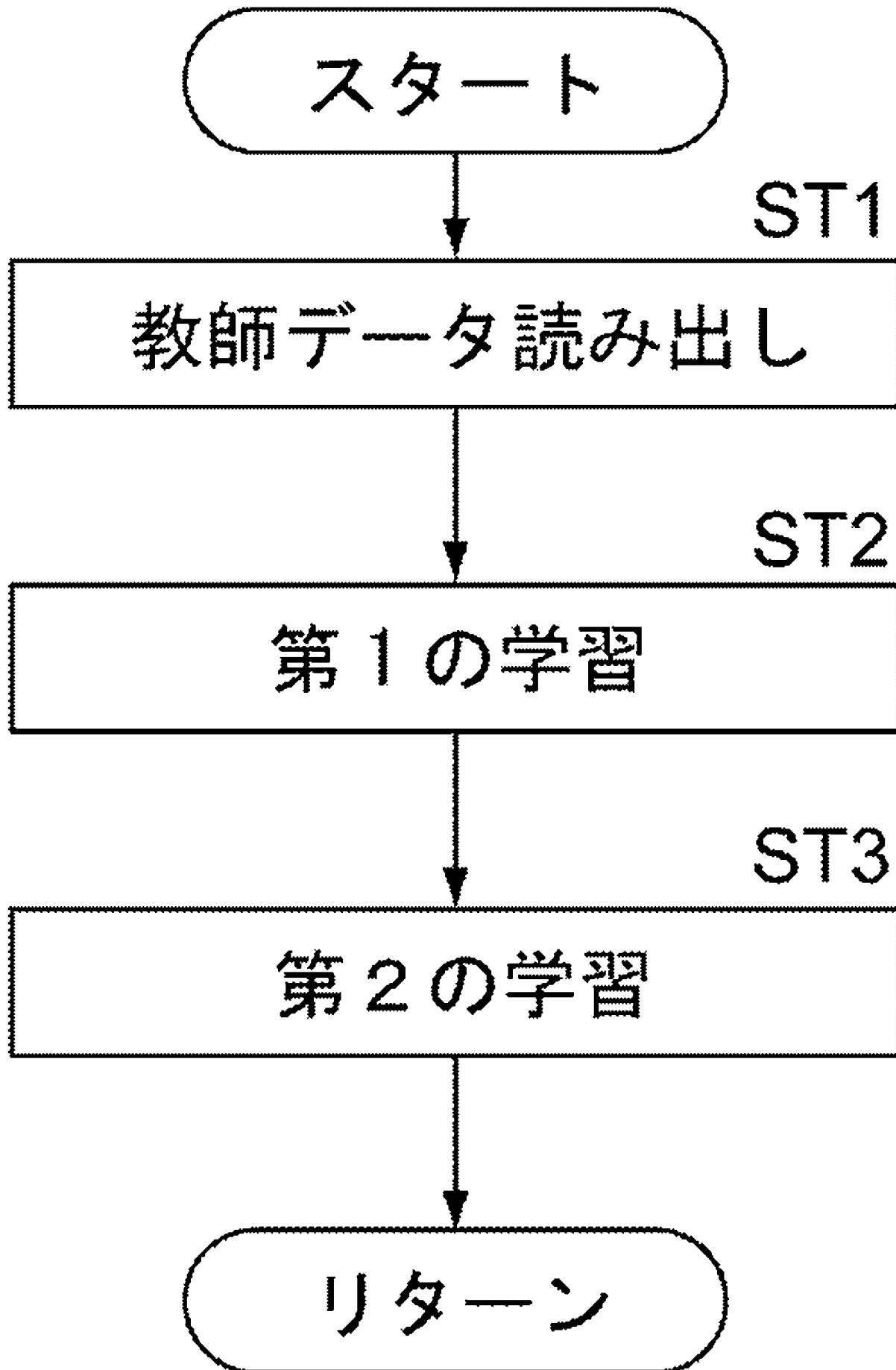
[図6]

学習データ	運転条件パラメータ				状態パラメータ			品質パラメータ		
	第1原料流量 (mL/min)	第2原料流量 (mL/min)	反応時間 (min)	反応温度 (°C)	混合比	色	圧力 Pa	pH	生成物濃度 (%)	不純物濃度 (%)
1	10	5.5	3	0	1:1	透明	1.0	7	99	1
2	20	11	2	10	1:1	透明	2.0	7	98	2
3	100	55	3	10	2:1	透明	1.5	8	99	1
4	11	5.6	3	10	2:1	不透明	1.0	7	99	1
5	20	11	4	0	1:1	透明	1.0	7	97	3
6	20	11	5	10	1:1	透明	1.0	6	99	1
7	20	20	3	10	1:1	透明	1.0	7	99	1

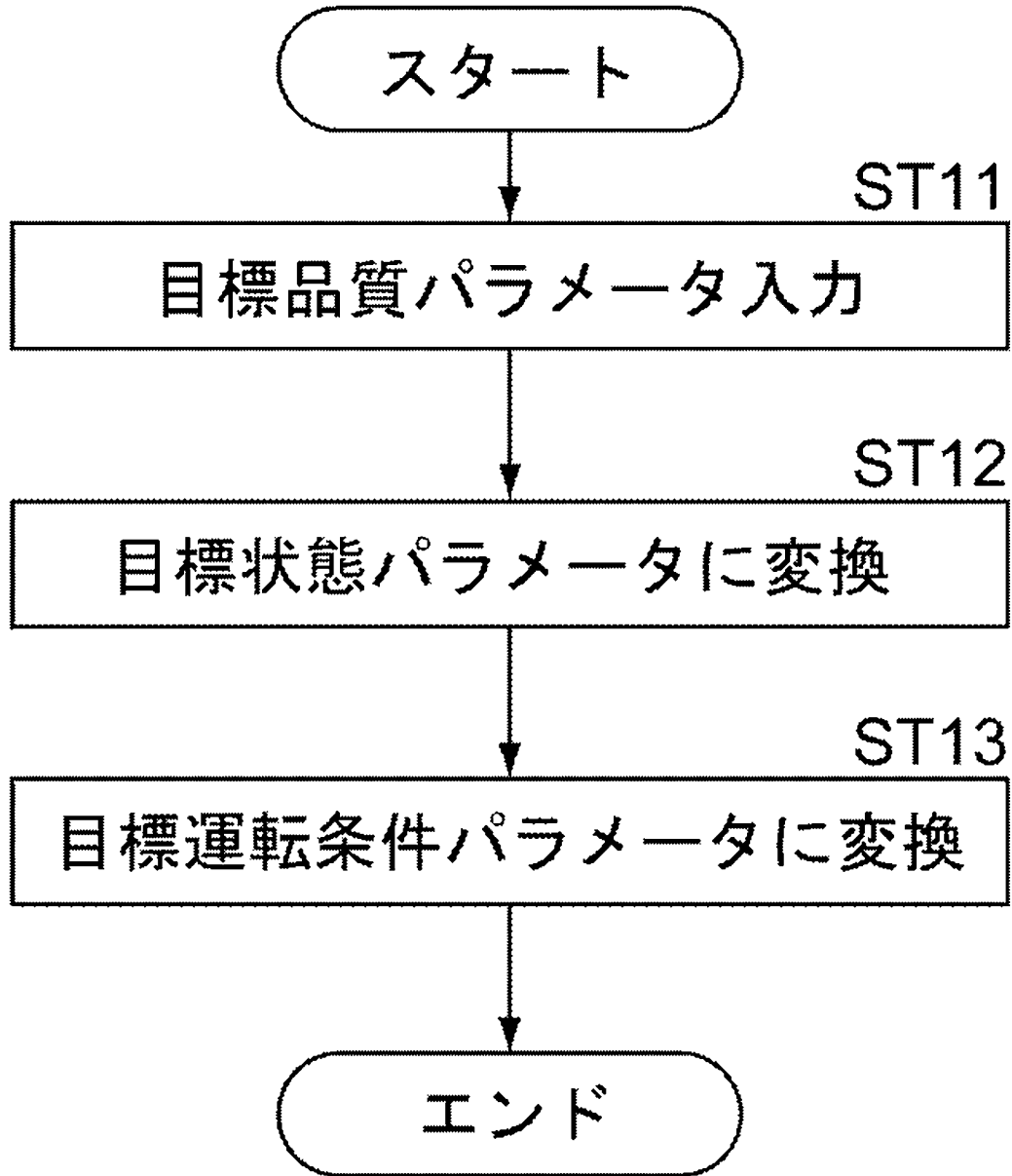
[図7]



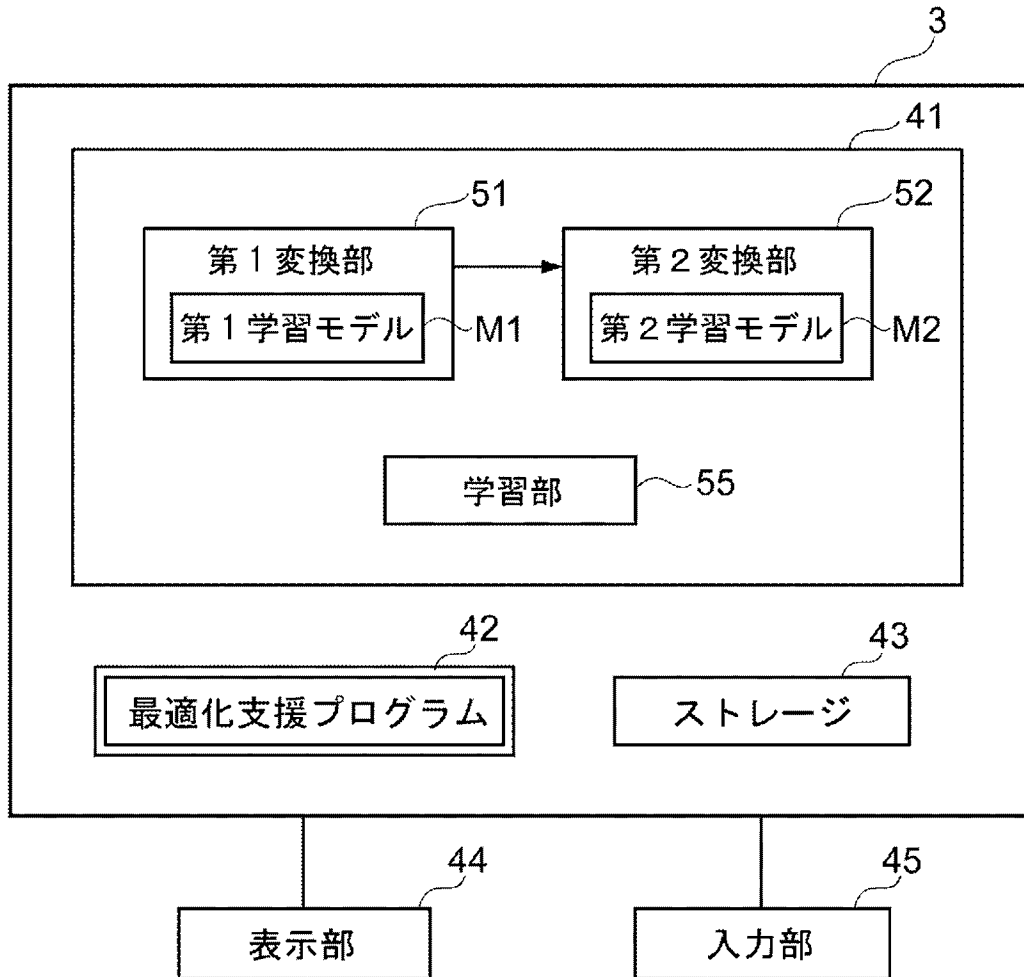
[図8]



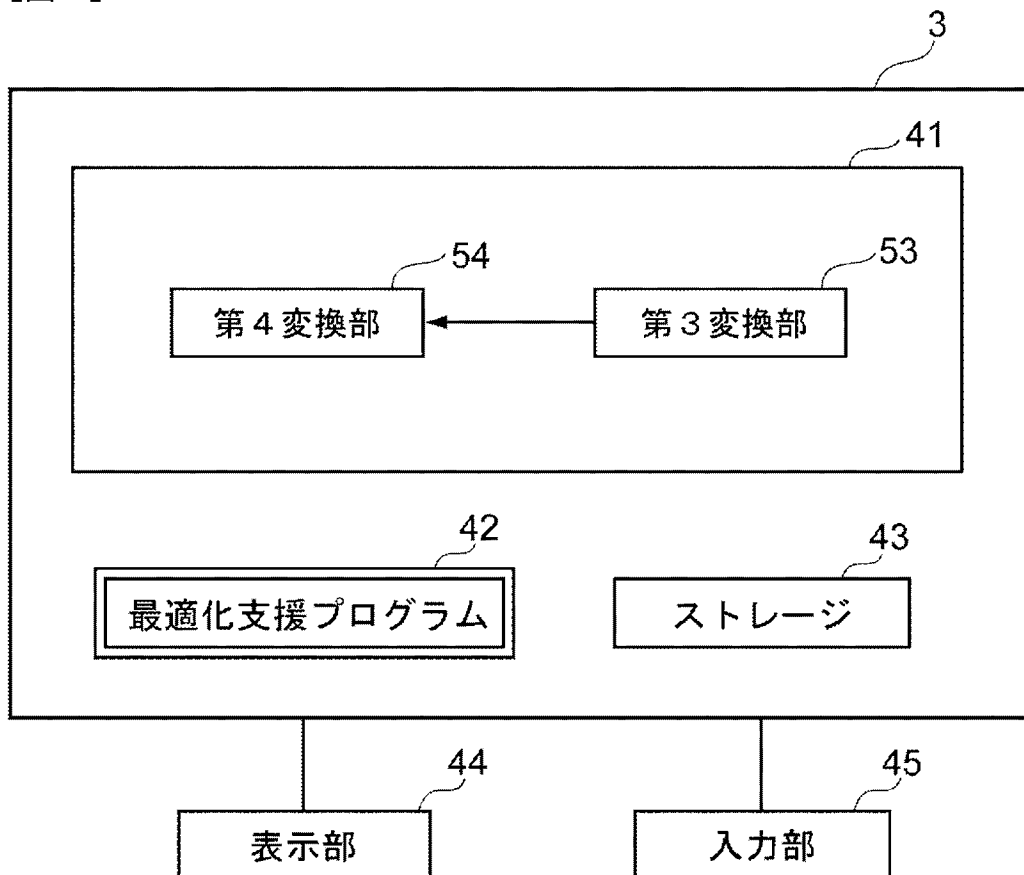
[図9]



[図10]



[図11]



## INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2020/019773

<b>A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER</b>		
Int.Cl. G05B19/418(2006.01)i, G05B11/36(2006.01)i, G05B13/02(2006.01)i FI: G05B19/418Z, G05B11/36J, G05B13/02L According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC		
<b>B. FIELDS SEARCHED</b>		
Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) Int.Cl. G05B19/418, G05B11/36, G05B13/02		
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		1971-2020
Registered utility model specifications of Japan		1996-2020
Published registered utility model applications of Japan		1994-2020
Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)		
<b>C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT</b>		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X Y	WO 2018/072773 A2 (REIFENHAUSER GMBH & CO. KG MASCHINENFABRIK) 26.04.2018 (2018-04-26), page 28, lines 11-27	1, 3, 6, 15-18 2, 4-5, 7-14
Y	WO 2019/106963 A1 (YASKAWA ELECTRIC CORPORATION) 06.06.2019 (2019-06-06), paragraphs [0052], [0053], fig. 7	2, 4-5, 7-10
Y	JP 2015-172025 A (TOKYO CHEMICAL INDUSTRY CO., LTD.) 01.10.2015 (2015-10-01), paragraph [0017], fig. 1	11
Y	JP 2015-223175 A (FUJIFILM CORPORATION) 14.12.2015 (2015-12-14), paragraph [0027], fig. 1	12
Y	JP 2011-194728 A (FUJIFILM CORPORATION) 06.10.2011 (2011-10-06), paragraph [0039], fig. 2B	13
Y	JP 2015-223550 A (SAT KK) 14.12.2015 (2015-12-14), paragraph [0037]	14
<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	"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
"E"	earlier application or patent but published on or after the international filing date	"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
"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)	"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
"O"	document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means	"&" document member of the same patent family
"P"	document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed	
Date of the actual completion of the international search 28.07.2020		Date of mailing of the international search report 11.08.2020
Name and mailing address of the ISA/ Japan Patent Office 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/JP2020/019773

WO 2018/072773 A2	26.04.2018	US 2020/0047391 A1 paragraph [0141] JP 2019-537783 A paragraph [0142] CN 109195769 A KR 10-2019-0070914 A EA 201990942 A1 MX 2019004433 A
WO 2019/106963 A1	06.06.2019	JP 6621059 B2 CN 111164520 A
JP 2015-172025 A	01.10.2015	(Family: none)
JP 2015-223175 A	14.12.2015	US 2017/0061618 A1 paragraph [0041], fig. 1 WO 2015/182396 A1 EP 3150694 A1
JP 2011-194728 A	06.10.2011	US 2011/0177254 A1 paragraph [0064], fig. 2B
JP 2015-223550 A	14.12.2015	WO 2015/181918 A1 TW 201544905 A

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC）） G05B 19/418(2006.01)i; G05B 11/36(2006.01)i; G05B 13/02(2006.01)i FI: G05B19/418 Z; G05B11/36 J; G05B13/02 L		
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）） G05B19/418; G05B11/36; G05B13/02 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 1971-2020年 日本国実用新案登録公報 1996-2020年 日本国登録実用新案公報 1994-2020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
X	WO 2018/072773 A2 (REIFENHAUSER GMBH & CO. KG MASCHINENFABRIK) 26.04.2018 (2018-04-26) 第28ページ第11行-第27行	1, 3, 6, 15-18
Y		2, 4-5, 7-14
Y	WO 2019/106963 A1 (株式会社安川電機) 06.06.2019 (2019-06-06) 段落 [0052] - [0053], 図7	2, 4-5, 7-10
Y	JP 2015-172025 A (東京化成工業株式会社) 01.10.2015 (2015-10-01) 段落 [0017], 図1	11
Y	JP 2015-223175 A (富士フイルム株式会社) 14.12.2015 (2015-12-14) 段落 [0027], 図1	12
Y	JP 2011-194728 A (富士フイルム株式会社) 06.10.2011 (2011-10-06) 段落 [0039], 図2B	13
Y	JP 2015-223550 A (株式会社SAT) 14.12.2015 (2015-12-14) 段落 [0037]	14
<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、一般的な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 28.07.2020	国際調査報告の発送日 11.08.2020	
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） 稲垣 浩司 3U 9556 電話番号 03-3581-1101 内線 3364	

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/JP2020/019773

引用文献			公表日	パテントファミリー文献			公表日
WO	2018/072773	A2	26.04.2018	US	2020/0047391	A1	
				段落 [ 0 1 4 1 ]			
				JP	2019-537783	A	
				段落 [ 0 1 4 2 ]			
				CN	109195769	A	
				KR	10-2019-0070914	A	
				EA	201990942	A1	
				MX	2019004433	A	
WO	2019/106963	A1	06.06.2019	JP	6621059	B2	
				CN	111164520	A	
JP	2015-172025	A	01.10.2015	(ファミリーなし)			
JP	2015-223175	A	14.12.2015	US	2017/0061618	A1	
				段落 [ 0 0 4 1 ] , 図 1			
				WO	2015/182396	A1	
				EP	3150694	A1	
JP	2011-194728	A	06.10.2011	US	2011/0177254	A1	
				段落 [ 0 0 6 4 ] , 図 2 B			
JP	2015-223550	A	14.12.2015	WO	2015/181918	A1	
				TW	201544905	A	