(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
2020年9月17日(17.09.2020)

WIPO | PCT

(10) 国際公開番号
WO 2020/184240 A1

(51) 国際特許分類:
B01J 19/00 (2006.01) *G06N 3/08* (2006.01)
G05B 13/02 (2006.01)

(21) 国際出願番号： PCT/JP2020/008589

(22) 国際出願日： 2020年3月2日(02.03.2020)

(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 2019-042363 2019年3月8日(08.03.2019) 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２６番３０号 Tokyo (JP).

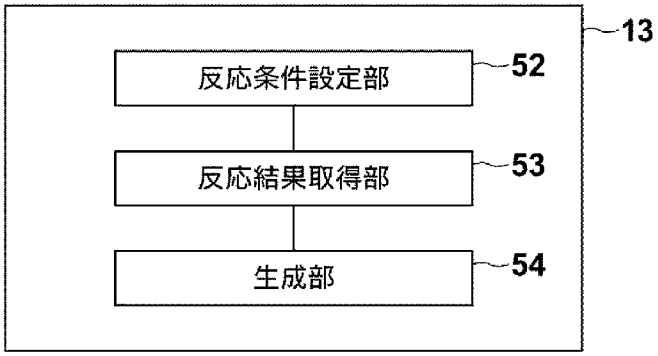
(72) 発明者: 長谷川 昌孝 (**HASEGAWA Masataka**); 〒2500193 神奈川県南足柄市中沼２１０番地 富士フイルム株式会社内 Kanagawa (JP).

(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 ＦＦＴＰＭ０棟６Ｆ 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:** DATA GENERATION DEVICE, DATA GENERATION METHOD, LEARNING DEVICE, AND LEARNING METHOD

(54) 発明の名称： データ生成装置および方法、並びに学習装置および方法



52 Reaction condition setting unit
53 Reaction result acquisition unit
54 Generation unit

(57) **Abstract:** This data generation device, this data generation method, this learning device, and this learning method of the present invention enable appropriate condition setting of a production process. The data generation device generates a data set comprising a plurality of learning data items for learning of a neural network that, in a process for producing product materials, outputs production results corresponding to process conditions upon inputting of the process conditions and that is formed by connecting a plurality of layers by using connection weights. In this case, when the total number of connection weights of the neural network is defined as M0, 2 × M0 pieces of process conditions are set. In addition, production results corresponding to the respective process conditions, which are derived from production of product materials under the respective process conditions, are acquired. A plurality of learning data items comprising the process conditions and the production results are generated as a data set.

WO 2020/184240 A1

［続葉有］

QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.

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

添付公開書類:

一 国際調査報告(条約第21条(3))

(57) 要約:データ生成装置および方法、並びに学習装置および方法において、産生プロセスの条件設定を適切に行うことができるようにする。 データ生成装置は、生成物を産生するためのプロセスにおいて、プロセス条件が入力されるとプロセス条件に対応する産生結果を出力する、複数の層が複数の結合重みにより結合されてなるニューラルネットワークを学習するための複数の学習データからなるデータセットを生成する。この際、ニューラルネットワークの結合重みの総数をＭ０としたときに、２×Ｍ０個以上の複数のプロセス条件が設定される。また、複数のプロセス条件のそれぞれにより生成物を産生することにより導出される、複数のプロセス条件のそれぞれに対応する産生結果が取得される。複数のプロセス条件および産生結果からなる複数の学習データがデータセットとして生成される。

明　細　書

発明の名称 ：

データ生成装置および方法、並びに学習装置および方法

技術分野

[0001] 本開示は、データ生成装置および方法、並びに学習装置および方法に関するものである。

背景技術

[0002] 反応物を含有する原料を反応させる手法には、原料を容器中に収容した状態で反応させるいわゆるバッチ式と、原料を流しながら反応させる連続式とがある。連続式の反応は、原料を流しながら反応させることからフロー反応と呼ばれる。フロー反応処理は、反応を連続的に実施することから生成物が均一な性状で得られやすい。また、フロー反応処理は、生産性がバッチ式に比べて高いという利点がある。

[0003] ところで、化学反応処理に、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する手法が提案されている。例えば、特許文献１では、化学反応装置の各計測器の異常状態下におけるデータをプログラム中に予め学習記憶させたニューラルネットワークによって演算させている。そして、この演算値が設定された正常許容帯値と乖離した場合には、異常信号をニューロコントローラに出力し、化学反応装置の各部に是正制御信号を送ることにより異常反応を制御している。これにより、化学反応装置の異常状態を早急に検出して、迅速かつ的確な制御を行っている。

[0004] 特許文献２には、化合物の物性予測の手法として、作成した予測モデルを未知サンプルに適用して予測項目を計算する技術が記載されている。この技術は、未知サンプルと個々の学習サンプルとについて取得した複数のパラメータ値に基づいて未知サンプルと個々の学習サンプルとの類似度を算出し、予め設定した閾値以上の類似度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成している。そしてサブサンプルセットの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サンプルに適用して予測項目を計算している。また、特許文献３においては、遺伝的アルゴリズムを用いてフロー反応を制御しており、これにより目的とする生成物を産生している。

先行技術文献

特許文献

[0005] 特許文献1：特開２００２－３０１３５９号公報

特許文献2：国際公開第２００９／０２５０４５号

特許文献3：特表２０１５－５２０６７４号公報

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0006] フロー反応処理は、原料を流しながら反応させることから、最適な反応条件を見つけ出すことがバッチ式反応処理に比べて通常は難しい。流速あるいは流量等、フロー反応ならではの条件パラメータがフロー反応にはあるからである。

[0007] このように条件パラメータが多いフロー反応は、新たな反応処理を開始するまでに、条件設定に関して多くの試行および時間を要し、特に新たな反応系での条件探索においては顕著である。また、なんらかの理由で例えば複数の条件パラメータのうちのひとつを変更せざるを得ない場合でも、他の条件パラメータのいずれをどう変更するかを決定することは簡単とはいえない。このため、反応結果が既知のデータを学習データとして用いてニューラルネットワークの学習を行うことにより、より好ましい条件設定を行うことが考えられる。

[0008] 一方、ニューラルネットワークを学習する場合、学習データが多いほど、学習の精度が向上する。しかしながら、フロー反応処理のような生成物を産生するための産生プロセスにおいては、多くの学習データを用意するためには、多くの原材料が必要となる。また、学習データを用意する間、生産設備が学習データの用意のために占有されてしまうこととなる。また、反応処理

には長時間を要するものもある。このように、フロー反応処理のような産生プロセスにおいては、原材料、設備および反応処理の制約があるため、多くの学習データを用意することは困難である。その一方で、ある程度の数の学習データを用意しないと、ニューラルネットワークの学習を精度よく行うことができない。ニューラルネットワークの学習を精度よく行うことができないと、産生プロセスの条件設定を適切に行うことができない。

[0009] 本開示は上記事情に鑑みなされたものであり、産生プロセスの条件設定を適切に行うことが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

[0010] 本開示によるデータ生成装置は、生成物を産生するためのプロセスにおいて、プロセス条件が入力されるとプロセス条件に対応する産生結果を出力する、複数の層が複数の結合重みにより結合されてなるニューラルネットワークを学習するための複数の学習データからなるデータセットを生成するデータ生成装置であって、

ニューラルネットワークの結合重みの総数をＭ０としたときに、２×Ｍ０個以上の複数のプロセス条件を設定するプロセス条件設定部と、

複数のプロセス条件のそれぞれにより生成物を産生することにより導出される、複数のプロセス条件のそれぞれに対応する産生結果を取得する産生結果取得部と、

複数のプロセス条件のそれぞれとそれぞれのプロセス条件に対応する産生結果からなる複数の学習データを、データセットとして生成する生成部とを備える。

[0011] なお、本開示によるデータ生成装置においては、プロセス条件設定部は、２×Ｍ０個以上、１０×Ｍ０個以下の複数のプロセス条件を設定するものであってもよい。

[0012] また、本開示によるデータ生成装置においては、プロセス条件設定部は、プロセス条件の上限および下限を設定するものであってもよい。

[0013] また、本開示によるデータ生成装置においては、プロセスは、原料を流し

ながら原料を反応させて生成物を産生するフロー反応処理であってもよい。

[0014] 本開示による第１の学習装置は、生成物を産生するためのプロセスにおいて、プロセス条件が入力されるとプロセス条件に対応する産生結果を出力する、複数の層が複数の結合重みにより結合されてなるニューラルネットワークを学習する学習装置であって、

本開示のデータ生成装置により生成されたデータセットを用いて、ニューラルネットワークの結合重みを導出する第１の演算を行う第１の演算部と、

結合重みが演算されたニューラルネットワークを用いて、産生結果が未知である複数のプロセス条件を有する条件データセットのプロセス条件毎に予測結果を算出することにより、プロセス条件と予測結果を関連付けた予測データセットを生成し、得られた複数の予測結果のうち、予め設定した目標結果に最も近い予測結果を特定し、特定した予測結果に関連付けられたプロセス条件を抽出プロセス条件として抽出する第２の演算を行う第２の演算部と、

データセットの数をＮｊ、ニューラルネットワークの結合重みの数をＭｊとしたときに、抽出プロセス条件で生産物を産生した場合の産生結果と、抽出プロセス条件に関連付けられた予測結果との相違度が予め設定した許容範囲であるか否かの判定を行い、判定が否定された場合には、抽出プロセス条件と抽出プロセス条件で産生させた場合の産生結果とを関連付けた産生情報を学習データとしてデータセットに加えることによりデータセットの数Ｎｊを更新し、ニューラルネットワークの新たな結合重みの数Ｍｊを、Ｍｊ－１≦Ｍｊ＜Ｎｊ／２となるように更新し、判定が肯定された場合には、抽出プロセス条件をプロセスに用いるプロセス条件に決定する判定部とを備え、

判定が肯定されるまで、更新されたデータセットおよび結合重みが更新されたニューラルネットワークに基づいて、第１の演算、第２の演算および判定を繰り返す。

[0015] 本開示による第２の学習装置は、生成物を産生するためのプロセスにおいて、プロセス条件が入力されるとプロセス条件に対応する産生結果を出力す

る、複数の層が複数の結合重みにより結合されてなるニューラルネットワークを学習する学習装置であって、

複数のプロセス条件のそれぞれとそれぞれのプロセス条件に対応する産生結果とからなる複数の学習データからなるデータセットを用いて、ニューラルネットワークの結合重みを導出する第１の演算を行う第１の演算部と、

結合重みが演算されたニューラルネットワークを用いて、産生結果が未知である複数のプロセス条件を有する条件データセットのプロセス条件毎に予測結果を算出することにより、プロセス条件と予測結果を関連付けた予測データセットを生成し、得られた複数の予測結果のうち、予め設定した目標結果に最も近い予測結果を特定し、特定した予測結果に関連付けられたプロセス条件を抽出プロセス条件として抽出する第２の演算を行う第２の演算部と、

データセットの数をＮｊ、ニューラルネットワークの結合重みの数をＭｊとしたときに、抽出プロセス条件で生産物を産生した場合の産生結果と、抽出プロセス条件に関連付けられた予測結果との相違度が予め設定した許容範囲であるか否かの判定を行い、判定が否定された場合には、抽出プロセス条件と抽出プロセス条件で産生させた場合の産生結果とを関連付けた産生情報を学習データとしてデータセットに加えることによりデータセットの数Ｎｊを更新し、ニューラルネットワークの新たな結合重みの数Ｍｊを、Ｍｊ－１≦Ｍｊ＜Ｎｊ／２となるように更新し、判定が肯定された場合には、抽出プロセス条件をプロセスに用いるプロセス条件に決定する判定部とを備え、

判定が肯定されるまで、更新されたデータセットおよび結合重みが更新されたニューラルネットワークに基づいて、第１の演算、第２の演算および判定を繰り返す。

[0016] なお、本開示による第１または第２の学習装置においては、プロセスは、原料を流しながら原料を反応させて生成物を産生するフロー反応処理であってもよい。

[0017] 本開示によるデータ生成方法は、生成物を産生するためのプロセスにおい

て、プロセス条件が入力されるとプロセス条件に対応する産生結果を出力する、複数の層が複数の結合重みにより結合されてなるニューラルネットワークを学習するための複数の学習データからなるデータセットを生成するデータ生成方法であって、

ニューラルネットワークの結合重みの総数をＭ０としたときに、２×Ｍ０個以上の複数のプロセス条件を設定し、

複数のプロセス条件のそれぞれにより生成物を産生することにより導出される、複数のプロセス条件のそれぞれに対応する産生結果を取得し、

複数のプロセス条件のそれぞれとそれぞれのプロセス条件に対応する産生結果からなる複数の学習データを、データセットとして生成する。

[0018] 本開示による第１の学習方法は、生成物を産生するためのプロセスにおいて、プロセス条件が入力されるとプロセス条件に対応する産生結果を出力する、複数の層が複数の結合重みにより結合されてなるニューラルネットワークを学習する学習方法であって、

本開示のデータ生成方法により生成されたデータセットを用いて、ニューラルネットワークの結合重みを導出する第１の演算を行い、

結合重みが演算されたニューラルネットワークを用いて、産生結果が未知である複数のプロセス条件を有する条件データセットのプロセス条件毎に予測結果を算出することにより、プロセス条件と予測結果を関連付けた予測データセットを生成し、得られた複数の予測結果のうち、予め設定した目標結果に最も近い予測結果を特定し、特定した予測結果に関連付けられたプロセス条件を抽出プロセス条件として抽出する第２の演算を行い、

データセットの数をＮｊ、ニューラルネットワークの結合重みの数をＭｊとしたときに、抽出プロセス条件で生産物を産生した場合の産生結果と、抽出プロセス条件に関連付けられた予測結果との相違度が予め設定した許容範囲であるか否かの判定を行い、判定が否定された場合には、抽出プロセス条件と抽出プロセス条件で産生させた場合の産生結果とを関連付けた産生情報を学習データとしてデータセットに加えることによりデータセットの数Ｎｊ

を更新し、ニューラルネットワークの新たな結合重みの数Ｍｊを、Ｍｊ－１≦Ｍｊ＜Ｎｊ／２となるように更新し、判定が肯定された場合には、抽出プロセス条件をプロセスに用いるプロセス条件に決定し、

判定が肯定されるまで、更新されたデータセットおよび結合重みが更新されたニューラルネットワークに基づいて、第１の演算、第２の演算および判定を繰り返す。

[0019] 本開示による第２の学習方法は、生成物を産生するためのプロセスにおいて、プロセス条件が入力されるとプロセス条件に対応する産生結果を出力する、複数の層が複数の結合重みにより結合されてなるニューラルネットワークを学習する学習方法であって、

複数のプロセス条件のそれぞれとそれぞれのプロセス条件に対応する産生結果とからなる複数の学習データからなるデータセットを用いて、ニューラルネットワークの結合重みを導出する第１の演算を行い、

結合重みが演算されたニューラルネットワークを用いて、産生結果が未知である複数のプロセス条件を有する条件データセットのプロセス条件毎に予測結果を算出することにより、プロセス条件と予測結果を関連付けた予測データセットを生成し、得られた複数の予測結果のうち、予め設定した目標結果に最も近い予測結果を特定し、特定した予測結果に関連付けられたプロセス条件を抽出プロセス条件として抽出する第２の演算を行い、

データセットの数をＮｊ、ニューラルネットワークの結合重みの数をＭｊとしたときに、抽出プロセス条件で生産物を産生した場合の産生結果と、抽出プロセス条件に関連付けられた予測結果との相違度が予め設定した許容範囲であるか否かの判定を行い、判定が否定された場合には、抽出プロセス条件と抽出プロセス条件で産生させた場合の産生結果とを関連付けた産生情報を学習データとしてデータセットに加えることによりデータセットの数Ｎｊを更新し、ニューラルネットワークの新たな結合重みの数Ｍｊを、Ｍｊ－１≦Ｍｊ＜Ｎｊ／２となるように更新し、判定が肯定された場合には、抽出プロセス条件をプロセスに用いるプロセス条件に決定し、

判定が肯定されるまで、更新されたデータセットおよび結合重みが更新されたニューラルネットワークに基づいて、第１の演算、第２の演算および判定を繰り返す。

発明の効果

[0020] 本開示によれば、産生プロセスの条件設定を適切に行うことができる。

図面の簡単な説明

[0021] [図1]フロー反応処理設備の概略図

[図2]別のフロー反応装置の概略図

[図3]データ生成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]初期のデータセットの説明図

[図6]フロー反応支援装置の構成を示すブロック図

[図7]条件データセットの説明図

[図8]予測データセットの説明図

[図9]対比データの説明図

[図10]本実施形態において行われる処理を示すフローチャート

[図11]本実施形態において行われるデータ生成処理のフローチャート

[図12]本実施形態におけるニューラルネットワークの学習精度の検証結果を示す図

[図13]本実施形態におけるデータセットに含まれる学習データの数と、ニューラルネットワークの結合数との関係を示す図

発明を実施するための形態

[0022] 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データ生成装置および学習装置を適用した産生プロセスの設備の一態様であるフロー反応設備を示す図である。図１に示すように、フロー反応設備１０は、フロー反応装置１１、フロー反応支援装置（以下、単に「支援装置」と称する）１２、データ生成装置１３、システムコントローラ１５、設定部１６、および検出部１７等を備える。フロー反応装置１１は

、フロー反応処理を行い、生成物を得るための装置である。

[0023] フロー反応装置１１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。

[0024] フロー反応装置１１は、第１供給部２１、第２供給部２２、反応セクション２３および回収セクション２６を備える。第１供給部２１および第２供給部２２はそれぞれ反応セクション２３の上流側端部に配管で接続されており、回収セクション２６は反応セクション２３の下流側端部に配管で接続されている。

[0025] 第１供給部２１は、フロー反応の第１原料を反応セクション２３へ供給するためのものである。本実施形態の第１原料は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。本実施形態においては、第１供給部２１は、ポルスチリルリチウムを溶媒に溶解した第１液を、反応セクション２３へ供給している。溶媒にはテトラヒドロフラン（以下、ＴＨＦと称する）を用いており、トルエンおよびヘキサンが第１液には少量混じっている。このようにフロー反応の原料は反応物と他の物質との混合物であってもよいし、あるいは反応物のみで構成されていてもよい。第１供給部２１は、ポンプ（図示無し）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２３への第１原料の流量が調節される。

[0026] 第２供給部２２は、フロー反応の第２原料を、反応セクション２３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２２も第１供給部２１と同様にポンプ（図示無し）

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２３へのメタノールの流量が調節される。第１供給部２１および第２供給部２２は本実施形態では液体を反応セクション２３へ供給しているが、供給物は液体に限定されず、固体または気体であってもよい。

[0027] 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、および温調部３３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。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、案内されてきた第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。

[0028] 反応部３２は、複数の管状部材を長さ方向に繋げた管である。管状部材の本数および用いる個々の管状部材の長さの少なくとも一方を変えることにより、反応部３２の長さＬ３２は変更される。また、管状部材を内径が異なる他の管状部材に変えることにより、反応部３２の内径である反応路径Ｄ３２は変更される。

[0029] 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。合流部３１の第３管部３１ｃにおいても反応が若干は進むが、反応部３２の長さＬ３２（本実施形態では８ｍ）に対して合流部３１の第３管部３１ｃの長さは非常に短く、本実施形態の第３管部３１ｃの長さは概ね０．０３ｍとしている。そのため、第３管部３１ｃの長さは無視し、反応部３２の長さＬ３２を、フロー反応を行う場の長さ（以下、反応路長と称する）と見なしている。以下、反応路長に符号Ｌ３２を用いる。同様に、反応部３２の内径Ｄ３２を、フロー反応を行う場の径（以下、反応路径と称する）と見なし、反応路径に符号Ｄ３２を用いる。

[0030] 温調部３３は、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。設定部１６によって設定した反応温度（以下、設定温度と称する）と、温調部３３によって温調された混合原料の温度とが同じである場合には、設定温度を反応温度とみなしてよく、本実施形態でもそのようにしている。なお、設定温度と、混合原料の温度との差が大きい場合等には、例えば反応部３２内等に温度を検出する温度検出器を設け、この温度検出器の検出結果を反応温度とすればよい。

[0031] 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、いずれも不図示の析出部、採取部および乾燥部等で構成されている。析出部は、生成物であるポリスチレンを析出させるためのものである。本実施形態においては、攪拌機を備えた容器を析出部として用いている。容器にメタノールを収容し、攪拌されているメタノール中に、反応セクションから案内されてきたポリスチレン溶液を入れることにより、ポリスチレンを析出させている。

[0032] 採取部は、析出したポリスチレンをメタノールとＴＨＦ等との混合液から採取するためのものである。本実施形態ではろ過器を採取部として用いている。

[0033] 乾燥部は、採取されたポリスチレンを乾燥するためのものである。本実施形態では、乾燥部として、減圧機能をもつ恒温槽を用いている。恒温槽内部を減圧状態にした状態で加熱することによりポリスチレンが得られる。

[0034] 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。

[0035] 検出部１７は、回収セクション２６および支援装置１２と接続されており、フロー反応の処理結果である反応結果を検出し、支援装置１２の判定部５

６（図６参照）へ出力する。反応結果が、本開示の産生結果に対応する。反応結果となるパラメータ（以下、結果パラメータと称する）としては、生成物の純度、分子量、または分子量分散度（以下、単に分散度と称する）等の生成物の性状の他、収率等が挙げられる。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）も結果パラメータとして検出してよい。なお、検出部１７は、生成物のこれら各種性状に加えて、副生成物の収率あるいは純度等の各種性状を結果パラメータとして検出してもよい。反応結果を構成する結果パラメータは複数であってもよい。

[0036] 本実施形態では、回収セクション２６で得られたポリスチレンの分子量および分散度を検出部１７により検出している。すなわち、本実施形態での結果パラメータは分子量および分散度の２つである。検出している分子量は数平均分子量（Ｍｎ）である。分子量および分散度は、ポリスチレンをＴＨＦに溶解することによりポリスチレン溶液をつくり、このポリスチレン溶液を用いてゲルパーミエーションクロマトグラフィ（以下、ＧＰＣと称する，ＧＰＣはGel Permeation Chromatographyの略）により求めている。なお、分散度は、重量平均分子量（Ｍｗ）を数平均分子量で除したＭｗ／Ｍｎである。結果パラメータの検出は、ＧＰＣに限られない。例えば、赤外分光法（ＩＲ，infrared spectroscopy）、核磁気共鳴分光法（ＮＭＲ，Nuclear Magnetic Resonance spectroscopy）、高速液体クロマトグラフィ（ＨＰＬＣ，High Performance Liquid Chromatography）、またはガスクロマトグラフィ（ＧＣ，Gas Chromatography）等、各種の手法で検出してもよい。

[0037] ＧＰＣは、下記の条件で測定している。

装置：ＨＬＣ－８２２０ＧＰＣ（東ソー（株）製）

検出器：示差屈折計（ＲＩ（Ｒｅｆｒａｃｔｉｖｅ　Ｉｎｄｅｘ）検出器）

プレカラム：ＴＳＫＧＵＡＲＤＣＯＬＵＭＮ　ＨＸＬ－Ｌ　６ｍｍ×４０ｍｍ（東ソー（株）製）

サンプル側カラム：以下（１）～（３）の３本を順に直結（全て東ソー（株）製）

（１）ＴＳＫ－ＧＥＬ　ＧＭＨＸＬ　７．８ｍｍ×３００ｍｍ

（２）ＴＳＫ－ＧＥＬ　Ｇ４０００ＨＸＬ　７．８ｍｍ×３００ｍｍ

（３）ＴＳＫ－ＧＥＬ　Ｇ２０００ＨＸＬ　７．８ｍｍ×３００ｍｍ

リファレンス側カラム：ＴＳＫ－ＧＥＬ　Ｇ１０００ＨＸＬ　７．８ｍｍ×３００ｍｍ

恒温槽温度：４０℃

移動層：ＴＨＦ

サンプル側移動層流量：１．０ｍＬ／分

リファレンス側移動層流量：１．０ｍＬ／分

試料濃度：０．１質量％

試料注入量：１００μＬ

データ採取時間：試料注入後５分～４５分

サンプリングピッチ：３００ｍｓｅｃ

[0038] システムコントローラ１５は、フロー反応装置１１を統括的に制御する。システムコントローラ１５は、第１供給部２１および第２供給部２２の各ポンプ、および温調部３３のそれぞれと接続されている。システムコントローラ１５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し、これにより、反応セクション２３へ向かう第１原料および第２原料の各流速を制御する。なお、第１原料の流速は、第１供給部２１から反応セクション２３へ送り出す第１原料の流量をＸ１（単位はm^3／秒）とし、第１供給部２１と反応セクション２３との間の配管の断面積をＸ２（単位はm^2）とするときに、Ｘ１／Ｘ２で求められる。第２原料の流速も同様に、第２供給部２２から反応セクション２３へ送り出す第２原料の流量をＸ１とし、第２供給部２２と反応セクション２３との間の配管の断面積をＸ２（単位はm^2）とし、Ｘ１／Ｘ２で求められる。なお、第１原料および第２原料の各流量は本実施形態

では市販品である各ポンプのカタログデータに基づいて回転数から求めている。また、システムコントローラ１５は、温調部３３の調節により、混合原料の温度を制御する。このように、システムコントローラ１５はフロー反応装置１１の各部を調節することにより、フロー反応装置１１を統括的に制御する。

[0039] 設定部１６は、フロー反応装置１１におけるフロー反応処理の処理条件（以下、反応条件と称する）を設定するためのものである。なお、反応条件が本開示のプロセス条件に対応する。反応条件は、複数の条件パラメータの組み合わせである。設定部１６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反応条件を設定し、これによりシステムコントローラ１５を介してフロー反応装置１１を設定された反応条件に制御する。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反応条件が設定される。設定部１６は支援装置１２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、または代わりに、支援装置１２の後述の第３記憶部５１ｃから読み出した後述の決定反応条件ＣＳに反応条件を設定し、これによりシステムコントローラ１５を介してフロー反応装置１１を予め定められた反応条件に制御する。なお、本実施形態の設定部１６は、支援装置１２に対しても後述のように入力信号を与えることができる。

[0040] 設定部１６で設定する条件パラメータは、実施するフロー反応処理の種類によって決定すればよく、特に限定されない。例えば、第１原料および第２原料等の原料の流量、流速、反応セクション２３へ送り込む原料の温度、反応温度、および反応時間等の少なくとも１つが挙げられる。本実施形態では、条件パラメータを、第１原料の流量、第２原料の流量、合流部の形状、反応路径Ｄ３２、反応路長Ｌ３２および反応温度としている。

[0041] フロー反応処理の条件パラメータには、予め決定した一定の値に固定する条件パラメータ（以下、固定パラメータと称する）があってもよい。本実施形態の固定パラメータは、第１原料および第２原料における反応物の濃度、

並びに反応路長Ｌ３２である。第１原料および第２原料における反応物の濃度、並びに反応路長Ｌ３２は、本実施形態では予め決定しており、システムコントローラ１５を介した制御（例えば、濃度をより高く変更する、より低く変更する等の制御）は行っていない。このように、フロー反応には、システムコントローラ１５による制御を行わず、例えば原料の調製工程およびフロー反応装置１１の組み立て工程等において変更を行う条件パラメータがあってもよい。

[0042] なお、フロー反応設備１０において、フロー反応装置１１を他のフロー反応装置に置き換えることができる。例えば本実施形態では、図２に示すフロー反応装置４１を図２に示すフロー反応装置１１に置き換えることができる。フロー反応装置４１は、合流部３１を合流部４２に置き換えた反応セクション４３を備える。なお、図２において、図１と同じ部材については図１と同じ符号を付し、説明を略す。

[0043] 合流部４２は、十字(cross)に分岐した管、すなわち十字管(cross tube)である。合流部４２の第１管部４２ａは第２供給部２２に、第１管部４２ａと交差する第２管部４２ｂおよび第３管部４２ｃは第１供給部２１に、残る第４管部４２ｄは反応部３２に、それぞれ接続されている。これにより、案内されてきた第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。

[0044] 支援装置１２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、反応条件となる複数の条件パラメータを迅速に決定するための支援を行う。支援装置１２の詳細は、後述する。

[0045] データ生成装置１３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、反応条件が入力されると反応条件に対応する反応結果を出力する、複数の層が複数の結合重みにより結合されてなるニューラルネットワークを学習するための複数の学習データからなるデータセットを生成する。

[0046] 図３はデータ生成装置の構成を示す概略ブロック図である。図３に示すように、データ生成装置１３は、反応条件設定部５２、反応結果取得部５３お

よび生成部５４を備える。

反応条件設定部５２および反応結果取得部５３が、それぞれ本開示のプロセス条件設定部および産生結果取得部に対応する。

[0047] 反応条件設定部５２は、ニューラルネットワークの結合重みの総数をＭ０としたときに、２×Ｍ０個以上の複数の反応条件を設定する。なお、反応条件設定部５２は、反応条件に含まれる各条件パラメータの上限および下限も設定する。図４は、本実施形態において使用するニューラルネットワークの層構造の概念図である。図４に示すように、ニューラルネットワーク７０は、入力層Ｌ１、中間層（隠れ層）Ｌ２および出力層Ｌ３の３層構造を有する。入力層Ｌ１は、説明変数である条件パラメータの値ｘｉで構成される。本実施形態においては、条件パラメータは、第１原料の流量、第２原料の流量、合流部の形状、反応路径Ｄ３２、反応路長Ｌ３２および反応温度であるため、ｉ＝１～５である。隠れ層Ｌ２は、３つのノードｕ１～ｕ３で構成され、本実施形態では１層となっている。出力層Ｌ３は目的変数である結果パラメータの値ｙｍで構成される。本実施形態においては、結果パラメータは分子量および分散度であるため、ｍ＝１，２である。なお、ニューラルネットワーク７０の詳細な構成については後述する。

[0048] 図４に示すようなニューラルネットワーク７０を使用する場合、ニューラルネットワークの結合の重みの総数Ｍ０は、５×３＋３×２＝２１個となる。このため、反応条件設定部５２は、２×２１＝４２個以上の反応条件を設定する。また、反応条件の数の上限としては、本実施形態においては、１０×Ｍ０を用いる。本実施形態においては、反応条件設定部５２が結合の重みの総数Ｍ０に基づいて設定した反応条件を初期反応条件として用いる。

[0049] なお、条件パラメータとしての第１原料の流量および第２原料の流量の上限は、第１供給部２１および第２供給部が備えるポンプの能力に基づいて決定すればよい。一方、流量の下限は、配管に原料が充満される速度とすればよい。流速が過度に低くなると配管に原料が充満しなくなり、配管内にエアが混入し、反応ムラが生じてしまう。このため、配管に原料が充填される速

度とは、配管にエアが混入しないように原料を供給することが可能な最低の速度を意味する。ここで、フロー反応装置のように反応路径が小さい場合、流体体積あたりの面積（比表面積）が大きいため、配管に原料が充満していないと反応ムラが顕著に発生してしまう。上記のように、第１原料の流量および第２原料の流量の下限を配管に原料が充満される速度に決定することにより、反応ムラの発生を防止することができる。

[0050] 一方、連続的な学習データを収集するにあたり、収集する学習データの質が重要となる。すなわち、学習データに含まれる条件パラメータの上限および下限が、学習データの中で均等にばらついている学習データを収集することが重要となる。学習データを収集する際の条件パラメータの振り方によっては、学習データに偏りが生じてしまい、その結果、質の悪い学習データしか得られない可能性がある。このため、学習データを収集するに際して、特にフロー反応プロセスにおいては、フロー反応のマイクロスケールまたはミリスケールで強く発現する物理量を利用して条件パラメータを振ることが有効である。すなわち、マイクロスケールまたはミリスケールの流路での混合では、流れが緻密な層流であるため、まず流体の分割および混合によって微小で規則的な流体塊を生成し、必要であれば衝突等の強制的な対流混合を利用しつつ、最終的に分子拡散によって混合が完了する。このため、マクロサイズにみられるような乱流によるランダムな混合状態にはならず、全体に亘って均一な混合操作が可能となる。対流混合の促進には流量が大きく依存する。

[0051] したがって、学習データに含まれる条件パラメータとして、流量にばらつきを持たせるために、まず流量の上限および下限に対して５０％の値を中間値として導出する。そして、流量の下限以上中間値未満の第１の範囲内で流量を振る。次いで、流量の中間値以上上限以下の第２の範囲内で流量を振るようにする。なお、第１の範囲と第２の範囲とにおいては学習データの数は同一とすることが好ましいが、少なくとも３０％の数の学習データが第１の範囲内または第２の範囲内にあればよい。これにより、流量の上限および下

限の範囲内において、偏りのない学習データを連続的に収集することが可能となる。このような方法を用いることにより、条件パラメータがばらつきを持った、良質な学習データを生成することが可能である。また、先に第２の範囲内で流量を振り、次いで、第１の範囲内で流量を振るようにしてもよい。

[0052] 反応結果取得部５３は、反応条件設定部５２が設定した複数の反応条件のそれぞれにより、フロー反応装置１１にフロー反応処理を行わせることにより導出される反応結果を取得する。すなわち、設定された反応条件のそれぞれについて、反応結果、すなわち結果パラメータが取得される。この際、個々の反応条件と反応結果とが関連付けられて１つの反応情報が生成される。この１つの反応情報が学習データとなる。

[0053] 生成部５４は、反応条件と反応結果との組み合わせからなる４２個の反応情報、すなわち学習データをデータセットとして生成する。生成されたデータセットは、支援装置１２に入力される。

[0054] 図５はデータセットを示す図である。図５に示すように、データセットは４２個の学習データからなる。各学習データは、第１原料の流量、第２原料の流量、合流部の形状、反応部における反応路径、および反応温度を含む反応条件と、生成物の分散度および分子量を含む反応結果とが対応づけられている。

[0055] 図６は支援装置１２の構成を示す概略ブロック図である。図６に示すように、支援装置１２は、演算セクション５０、第１記憶部５１ａ～第３記憶部５１ｃ、および判定部５６等から構成されている。本実施形態においては第１記憶部５１ａ～第３記憶部５１ｃは、演算セクション５０とは別に構成されているが、演算セクション５０の一部として構成されていてもよい。なお、演算セクション５０および判定部５６が、本開示の学習装置を構成する。

[0056] 第１記憶部５１ａは、データ生成装置１３が生成した複数の学習データからなるデータセットが記憶される。また、データセットにはない反応条件により、フロー反応装置１１において反応結果が取得されると、その反応条件

と反応結果とからなる反応情報が新たな学習データとして記憶される。第１記憶部５１ａは、反応情報のうち反応条件のみで読み込み可能な状態に記憶する。例えば第１記憶部５１ａは、学習データに含まれる反応条件および反応結果を互いに異なるフィールドに記憶し、かつ反応条件および反応結果の関連付け情報を記憶する。または、反応条件および既知の反応結果をともに記憶しておくフィールドと、反応条件のみを記憶しておくフィールドとを設けてもよい。

[0057] 初期の学習時には、データ生成装置１３が生成したデータセットに含まれる反応情報が学習データとして学習に使用される。本実施形態においては、初期状態において図５に示す４２個の学習データからなるデータセットが第１記憶部５１ａに記憶される。

[0058] なお、図５に示すように、第１記憶部５１ａに記憶されるデータセットは、本実施形態では複数の学習データを表構造で記憶している。具体的には、学習データの種別を縦欄に並んだ状態に配し、学習データの種別と反応条件と反応結果とを横欄に並んだ状態に配してある。但し、縦欄と横欄とは逆でもよい。第１記憶部５１ａにおけるデータセットの記憶態様は表構造に限られず、反応条件と反応結果とが関連付けられていればよい。したがって、例えば反応条件と反応結果とのそれぞれのフィールドを設けて記憶すればよい。

[0059] 演算セクション５０は、学習モードおよび算出モードを有し、モードに応じて目的とする演算処理を行う。演算セクション５０は、第１演算部６１～第３演算部６３を備え、第１演算部６１は、学習モードでは演算処理を行い、算出モードでは後述のように演算を休止した休止状態と第１記憶部５１ａを読み込む状態とを繰り返している。第２演算部６２および第３演算部６３は、学習モードでは休止状態となっており、算出モードでは演算処理を行う。

[0060] 第１演算部６１は、第１記憶部５１ａに記憶されているデータセットを読み出し、読み出したデータセットに含まれる学習データを用いて反応条件と

反応結果との関連性を学習する。そして、第１演算部６１は、学習により、反応条件と反応結果とを関連付けた関数を生成し、生成した関数を第２記憶部５１ｂに書き込む。反応条件を構成する複数の条件パラメータと反応結果を構成する結果パラメータとのそれぞれは関数における変数であり、条件パラメータおよび結果パラメータを既に決めてある場合には、関数の生成とは、関数における係数の生成を意味する。

[0061] 本実施形態では、第１演算部６１は、反応条件の各条件パラメータを説明変数とし、反応結果の結果パラメータを目的変数として学習を行うことにより、ニューラルネットワークの結合重みを表す重み係数を導出し、１回目の学習を終えた学習済みのニューラルネットワークを構築する。なお、説明変数は入力変数に相当し、目的変数は出力変数に相当する。第１演算部６１において構築されたニューラルネットワークによって、本実施形態では、例えば以下の関数（１Ａ）および（１Ｂ）が生成される。

[0062] $$y1=w_{u1y1}/[1+\exp\{-(w_{x1u1}\times x1+w_{x2u1}\times x2+\cdots+w_{x5u1}\times x5)\}]+w_{u2y1}/[1+\exp\{-(w_{x1u2}\times x1+w_{x2u2}\times x2+\cdots+w_{x5u2}\times x5)\}]+w_{u3y1}/[1+\exp\{-(w_{x1u3}\times x1+w_{x2u3}\times x2+\cdots+w_{x5u3}\times x5)\}] \quad \cdots(1A)$$

$$y2=w_{u1y2}/[1+\exp\{-(w_{x1u1}\times x1+w_{x2u1}\times x2+\cdots+w_{x5u1}\times x5)\}]+w_{u2y2}/[1+\exp\{-(w_{x1u2}\times x1+w_{x2u2}\times x2+\cdots+w_{x5u2}\times x5)\}]+w_{u3y2}/[1+\exp\{-(w_{x1u3}\times x1+w_{x2u3}\times x2+\cdots+w_{x5u3}\times x5)\}] \quad \cdots(1B)$$

[0063] 上記関数（１Ａ）および（１Ｂ）において、ｘｉ（ｉは自然数）は条件パラメータの値であり、ｉの最大値は条件パラメータの個数である。本実施形態においては、図４に示す構造のニューラルネットワークを使用するため、本実施形態ではｉは５である。ｙｍ（ｍは自然数）は結果パラメータの値であり、ｍの最大値は結果パラメータの個数である。したがって、本実施形態ではｍは２である。ｕｌ（ｌは自然数）は隠れ層Ｌ２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は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。具体的には以下である。下記の流量に関し、１ｍＬ（ミリリットル）／ｍｉｎは、１×１０⁻

^{6}×（１／６０）m^{3}／秒として換算できる。

[0064] ｙ１；ポリスチレンの分子量

ｙ２；ポリスチレンの分散度

ｘ１（単位はｍＬ／ｍｉｎ）；第１原料の流量（最小値０．５ｍＬ／ｍｉｎ、最大値１００ｍＬ／ｍｉｎ）

ｘ５（単位はｍＬ／ｍｉｎ）；第２原料の流量（最小値０．５ｍＬ／ｍｉｎ、最大値１００ｍＬ／ｍｉｎ）

ｘ３（無次元の値である）；合流部の形状がＴ字の場合を「１」、十字の場合を「２」と定義

ｘ４（単位はｍｍ）；反応路径（最小値１ｍｍ、最大値１０ｍｍ）

ｘ５（単位は℃）；反応温度（最小値０℃、最大値１０℃）

ｕｌ；ノード

w_{xiul}；ｘｉとｕｌとの間の重み係数

ｙｍ；結果パラメータの値

w_{ulym}；ｕｌとｙｍとの間の重み係数

[0065] ニューラルネットワークは、市販のニューラルネットワークフィッティングアプリケーションを用いて構築できる。例えば本実施形態では、ＭａｔｈＷｏｒｋｓ社製のＭａｔｌａｂ Ｎｅｕｒａｌ Ｆｉｔｔｉｎｇ ｔｏｏｌを用いてニューラルネットワークを構築している。ニューラルネットワークフィッティングアプリケーションは、上記に限定されず、例えばＲ言語上で動作可能なＲＳｔｕｄｉｏ社製のｋｅｒａｓパッケージ等を用いることもできる。

[0066] ニューラルネットワークは、上述した図４に示すように入力層Ｌ１と隠れ層Ｌ２と出力層Ｌ３との３層構造を有する。入力層Ｌ１は、説明変数である条件パラメータの値ｘ１～ｘ５で構成される。隠れ層Ｌ２は、３つのノードｕ１～ｕ３で構成され、本実施形態では１層となっている。ノードｕ１～ｕ３のそれぞれは、ｘ１～ｘ５をｘ１～ｘ５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は目的変数である結果パラメータ

の値ｙ１，ｙ２で構成される。結果パラメータの値ｙ１，ｙ２のそれぞれは、ノードｕ１～ｕ３を用いて、ノードｕ１～ｕ３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。なお、ニューラルネットワークの層構造は本実施形態に限定されない。

[0067] 演算セクション５０は、第１演算部６１によって第２記憶部５１ｂに関数が書き込まれた場合には、学習モードを算出モードに切り替える。第２演算部６２は、算出モードにおいて、第１記憶部５１ａから学習データの反応条件を読み出し、読み出した反応条件に基づいて、反応結果が未知である複数の反応条件を含む条件データセットを生成し、第２記憶部５１ｂに書き込む。条件データセットは、読み出した反応結果が既知である反応条件を含んでいてもよく、本実施形態でもそのようにしている。

[0068] 第２演算部６２は、反応条件を成す複数の条件パラメータのうち、少なくとも１つの条件パラメータの値を振り、反応結果が未知の反応条件を生成することにより、条件データセットを生成する。例えば、複数の条件パラメータのうち第１原料の流量について、データ生成装置１３が生成した学習データにおける反応条件内の第１原料の流量が１ｍＬ／ｍｉｎ，１０ｍＬ／ｍｉｎ，１１ｍＬ／ｍｉｎ，２０ｍＬ／ｍｉｎ，１００ｍＬ／ｍｉｎを含む場合には、例えば２ｍＬ／ｍｉｎ，５ｍＬ／ｍｉｎ，６ｍＬ／ｍｉｎ等の値である場合の反応結果は未知であるから、これらの値についての反応条件を生成する。

[0069] 反応結果が未知の反応条件となる状態に生成する条件パラメータの値は、第１記憶部５１ａから読み出した反応条件の条件パラメータにおける最小値と最大値との間の値とし、これらに加えて最小値および最大値を含んでいてもよい。例えば上記の例においては第１原料の流量の最小値は１ｍＬ／ｍｉｎ、最大値は１００ｍＬ／ｍｉｎであるから、これら両値の間で条件パラメータの値を複数生成する。本実施形態ではこれらに加えて最小値の１ｍＬ／ｍｉｎと最大値の１００ｍＬ／ｍｉｎも含んでいてもよい。さらに、最大値

と最小値との間の複数の値は、最大値と最小値との間を等間隔に刻んだ値とすることが好ましく、本実施形態では、上記の第１原料の流量については後述のように１ｍＬ／ｍｉｎ間隔の値としている（図７参照）。

[0070] 反応条件を成す複数の条件パラメータのうち、値を振る条件パラメータは、フロー反応装置１１において変更してもよいと判断できる条件パラメータとする。本実施形態においては、第１原料の流量、第２原料の流量、合流部のタイプ（合流部３１と合流部４２）、反応路径Ｄ３２、および反応温度のそれぞれについて値を振った複数の反応条件を生成している（図７参照）。

[0071] 第２記憶部５１ｂは、第１演算部６１から出力された関数と、図７に示す第２演算部６２から出力された条件データセットとを記憶する。なお、本実施形態においては、第２演算部６２が条件データセットを生成しているが、条件データセットは他の演算機器、例えばパーソナルコンピュータ等を用いて生成してもよい。また、図７に示すように、第２演算部６２が生成する条件データセットも、本実施形態では表構造としており、したがって、第２記憶部５１ｂには表構造の条件データセットが記憶されている。具体的には、異なる反応条件を縦欄に並んだ状態に配し、条件パラメータを横欄に並んだ状態に配してある。但し、縦欄と横欄とは逆でもよい。また、条件データセットも学習データと同様に表構造に限られず、反応条件毎に個別に読み出し可能に生成し、第２記憶部５１ｂに記憶させていればよい。

[0072] 図７に示すように、条件データセットにおいては、上述したように、最大値および最小値、並びに最大値と最小値との間を等間隔に刻んだ値としている。例えば、第１原料の流量については最小値である１ｍＬ／ｍｉｎから最大値である１００ｍＬ／ｍｉｎまでを１ｍＬ／ｍｉｎ間隔で刻んだ値であり、第２原料の流量については最小値である０．６ｍＬ／ｍｉｎから最大値である５５．０ｍＬ／ｍｉｎまでを０．１ｍＬ／ｍｉｎ間隔で刻んだ値である。また、合流部については、合流部３１と合流部４２との２通りの形状にしている。反応路径Ｄ３２については最小値である１ｍｍから最大値である１０ｍｍまでを１ｍｍ間隔で刻んだ値であり、反応温度は最小値（最低値）で

ある１℃から最大値（最高値）である１０℃までを１℃間隔で刻んだ値としている。但し、値を等間隔で刻む場合の間隔は、これに限られない。

[0073] 第３演算部６３は、第２記憶部５１ｂから関数および条件データセットを読み出し、予測データセットを生成し、生成した予測データセットを第３記憶部５１ｃに書き込む。予測データセットは、複数の予測情報で構成される。予測情報は、条件データセットの反応条件毎に反応結果を予測し、求めた予測結果を反応条件に関連付けた予測データである。したがって、予測情報の数は、条件データセットにおける反応条件の数に等しい。予測は、読み出した関数を用いて行う演算処理である。

[0074] 第３演算部６３は、複数の予測情報の中から、最もよい予測結果を示す予測情報を特定し、抽出する。そして、第３演算部６３は、抽出した予測情報の反応条件を抽出反応条件ＣＰとして第３記憶部５１ｃに書き込み、かつ、抽出した予測情報の予測結果ＲＰを抽出反応条件ＣＰに関連付けた状態で第３記憶部５１ｃに書き込む。

[0075] 第３演算部６３には、目標とする反応結果（以下、目標結果と称する）ＲＡが、例えば本実施形態では設定部１６の操作部での入力により操作信号で予め入力されている。第３演算部６３は、目標結果ＲＡと、予測データセットの各予測情報の予測結果とを対比し、複数の予測結果の中から目標結果ＲＡに最も近い（目標結果ＲＡとの差が最も小さい）予測結果を上記の「最もよい予測結果」として特定する。目標結果ＲＡと同じ予測結果がある場合には、その予測結果を「最もよい予測結果」として特定する。

[0076] また、目標結果ＲＡに最も近い予測結果が複数ある場合には、第１記憶部５１ａから学習データを読み出し、反応結果が最も目標結果ＲＡに近い学習データの反応条件を参照し、以下のプロセスで「最もよい予測結果」を特定する。まず、予測データセットの各予測情報の条件パラメータをｘ１～ｘ５とし、結果パラメータをｙ１とし、ｙ１に対する寄与度をａ１～ａ５とし、ａ１～ａ５を以下の式（１Ｃ）～（１Ｇ）で定義する。

[0077] $a1=w_{x1u}1\times w_{u1y1}+w_{x1u2}\times w_{u2y1}+w_{x1u3}\times w_{u3y1}+\cdots+w_{x1ul}\times w_{uly1}$ …（１Ｃ）

$$a2=w_{x2u1}\times w_{u1y1}+w_{x2u2}\times w_{u2y1}+w_{x2u3}\times w_{u3y1}+\cdots+w_{x2ul}\times w_{uly1} \quad \cdots (1D)$$

$$a3=w_{x3u1}\times w_{u1y1}+w_{x3u2}\times w_{u2y1}+w_{x3u3}\times w_{u3y1}+\cdots+w_{x3ul}\times w_{uly1} \quad \cdots (1E)$$

$$a4=w_{x4u1}\times w_{u1y1}+w_{x4u2}\times w_{u2y1}+w_{x4u3}\times w_{u3y1}+\cdots+w_{x4ul}\times w_{uly1} \quad \cdots (1F)$$

$$a5=w_{x5u1}\times w_{u1y1}+w_{x5u2}\times w_{u2y1}+w_{x5u3}\times w_{u3y1}+\cdots+w_{x5ul}\times w_{uly1} \quad \cdots (1G)$$

[0078] ここでａ１～ａ５をそれぞれ求めた場合の符号が正であれば予測結果に対して正の寄与度をもっており、符号が負であれば予測結果に対して負の寄与度をもっており、絶対値が大きいほど予測結果に対して寄与度が高いことを意味する。

[0079] 続いて、学習データの中から目標結果ＲＡに最も近い反応結果と反応条件とを選択し、その反応結果をｙ１ｎとし、ｙ１ｎと目標結果ＲＡとの差の絶対値を式｜ＲＡ－ｙ１ｎ｜／ＲＡの算出式で求める。次に、ａ１～ａ５の絶対値の大きさに着目する。例えばａ１～ａ５の各絶対値の中でａ１の絶対値が最も大きかった場合においては、以下の＜Ａ＞～＜Ｄ＞の４つの場合分けで「最も良い予測結果」が特定される。

[0080] ＜Ａ＞ｙ１ｎとＲＡとの差と、ｙ１ＲＡ－ｙ１ｎ／ｙ１ＲＡとがともに正であり、かつ、ａ１が正であった場合

ｙ１ｎを正方向に大きくした場合にｙ１ｎはＲＡに近づく。そのため、学習データの最も目標結果ＲＡに近い反応条件のａ１の条件パラメータの値よりも正方向に最も大きい値をもつ条件パラメータを有する予測結果を、「最も良い予測結果」として特定する。

[0081] ＜Ｂ＞ｙ１ｎとＲＡとの差と、ｙ１ＲＡ－ｙ１ｎ／ｙ１ＲＡとがともに正であり、かつ、ａ１が負であった場合

ｙ１ｎを正方向に大きくした場合にｙ１ｎはＲＡに近づく。そのため、学習データの最も目標結果ＲＡに近い反応条件のａ１の条件パラメータの値よりも負方向に最も大きい値をもつ条件パラメータを有する予測結果を、「最も良い予測結果」として特定する。

[0082] ＜Ｃ＞ｙ１ｎとＲＡとの差と、ｙ１ＲＡ－ｙ１ｎ／ｙ１ＲＡとがともに負であり、かつ、ａ１が正であった場合

ｙ１ｎを負方向に大きくした場合にｙ１ｎはＲＡに近づく。そのため、学習データの最も目標結果ＲＡに近い反応条件のａ１の条件パラメータの値よりも負方向に最も大きい値をもつ条件パラメータを有する予測結果を、「最も良い予測結果」として特定する。

[0083] ＜Ｄ＞ｙ１ｎとＲＡとの差と、ｙ１ＲＡ－ｙ１ｎ／ｙ１ＲＡとがともに負であり、かつ、ａ１が負であった場合

ｙ１ｎを負方向に大きくした場合にｙ１ｎはＲＡに近づく。そのため、学習データの最も目標結果ＲＡに近い反応条件のａ１の条件パラメータの値よりも正方向に最も大きい値をもつ条件パラメータを有する予測結果を、「最も良い予測結果」として特定する。

[0084] 反応結果の結果パラメータが複数ある場合には、複数の結果パラメータに重み付けをした状態で目標結果ＲＡが入力されており、第３演算部６３は、重み付けに基づいて「最もよい予測結果」を特定する。重み付けに基づいた特定は、例えば、重み付けが最も大きい結果パラメータのみで特定する第１の手法でもよいし、重み付けが最も大きい結果パラメータで目標結果ＲＡに最も近い予測結果から例えば複数の候補を絞りこみ、絞り込んだ予測結果の中から重み付けの順位が低い結果パラメータにおいて目標結果ＲＡに最も近い予測結果を「最もよい予測結果」として特定する第２の手法でもよい。本実施形態では第２の手法で特定している。なお、本実施形態での目標結果ＲＡは、分子量が２５２００の±１％以内であり、分散度が１．０３以内としている。

[0085] 第３記憶部５１ｃは、第３演算部６３から出力された予測データセットと、抽出反応条件ＣＰと、抽出反応条件ＣＰに関連付けられた予測結果ＲＰとを記憶する。これらの予測データセットと抽出反応条件ＣＰと予測結果ＲＰとは、個別に読み出し可能な状態に記憶されている。

[0086] 図８は、第３演算部６３が生成する予測データセットを示す図である。図８に示すように、第３演算部６３が生成する予測データセットも、本実施形態では表構造としており、したがって、第３記憶部５１ｃには表構造の予測

データセットが記憶されている。具体的には、予測情報の種別を縦欄に並んだ状態に配し、反応条件の条件パラメータと予測結果である結果パラメータとを横欄に並んだ状態に配してある。但し、縦欄と横欄とは逆でもよい。予測データセットも学習データと同様に表構造に限られず、反応条件と予測結果とが関連付けられており、かつ、少なくとも抽出反応条件ＣＰが読み出し可能に生成し、第３記憶部５１ｃに記憶させていればよい。

[0087] 図８には、図７の条件データセットに基づき生成した予測データセットを示している。

本実施形態では２つの結果パラメータに前述の重み付けをしており、分子量の重み付けを分散度よりも大きくしている。本実施形態においては、図８に示すように、重み付けが大きい分子量について、予測情報番号（以下、予測情報Ｎｏ．と記載する）６０５０と予測情報Ｎｏ．８０００との分子量が２４８７０となっており、他の予測情報Ｎｏ．と比べてもっとも目標結果ＲＡに近く、互いに同値となっている。そして、予測情報Ｎｏ．６０５０と予測情報Ｎｏ．８０００とのうち、予測情報Ｎｏ．６０５０の方が、重み付けが分子量よりも低い分散度について目標結果ＲＡに近い。したがって第３演算部６３は、予測情報Ｎｏ．６０５０の予測結果を前述の「最もよい予測結果」として特定し、予測情報Ｎｏ．６０５０の反応条件を抽出反応条件ＣＰとして特定する。そして、第３演算部６３は、予測情報Ｎｏ．６０５０の反応条件に、抽出反応条件ＣＰであることの記録をした状態（表６においては説明の便宜上、予測情報Ｎｏ．の横に「＊」を付してある）で、抽出反応条件ＣＰとこの抽出反応条件に関連付けた予測結果とを第３記憶部５１ｃに記憶させている。

[0088] 設定部１６は、第３記憶部５１ｃから抽出反応条件ＣＰを読み出す。このように第３記憶部５１ｃを介して演算セクション５０の第３演算部６３から入力された抽出反応条件ＣＰを入力信号として、抽出反応条件ＣＰをフロー反応装置１１での反応条件として設定する。検出部１７は、抽出反応条件ＣＰで行ったフロー反応処理の反応結果（以下、実測結果と称する）ＲＲを前

述の通り判定部５６へ出力する。

[0089] 判定部５６は、第３記憶部５１ｃから、抽出反応条件ＣＰに関連付けられた予測結果ＲＰを読み出し、予測結果ＲＰと検出部１７から入力された実測結果ＲＲとを対比し、予測結果ＲＰと実測結果ＲＲとの相違度ＤＲを求める。本実施形態では、｜ＲＰ－ＲＲ｜／ＲＲの算出式により相違度ＤＲを求めているが、予測結果ＲＰの確からしさの指標として用いることができる値が求められれば相違度ＤＲの求め方は特に限定されない。

[0090] 判定部５６は、予測結果ＲＰと実測結果ＲＲとの対比演算行う場合に、対比データを生成している。そして、判定部５６は対比データを記憶する対比データ記憶部（不図示）を有している。図９には、対比演算を行う場合の対比データを示している。対比データは、予測結果ＲＰの結果パラメータと実測結果ＲＲとの結果パラメータとを並べた状態の表構造に生成している。本実施形態においては、予測結果ＲＰと実測結果ＲＲとを縦欄に並べて状態で、かつ、分散度と分子量との２つの結果パラメータを横欄に並べた状態にしているが、縦欄と横欄とは逆でもよい。また、実測結果ＲＰと実測結果ＲＲとの同じ結果パラメータ同士を読み出し可能な状態で対比データ記憶部に記憶していれば、記憶の態様は表構造でなくてもよい。

[0091] 判定部５６は、この対比データを用いて、分子量の相違度ＤＲと、分散度の相違度ＤＲとを前述の算出式によりそれぞれ求めている。例えば図９に示す対比データを用いた場合には、分子量の相違度ＤＲは９．９８９１、分散度の相違度ＤＲは、３．５１０７として算出される。

[0092] 判定部５６には、相違度の許容範囲ＤＴが、例えば本実施形態では設定部１６の操作部での入力により操作信号として予め入力されている。判定部５６は、相違度ＤＲが許容範囲ＤＴであるか否かを判定する。なお、本実施形態では許容範囲ＤＴを１％と設定しているが、許容範囲は結果パラメータの種類等に応じて適宜設定できる。許容範囲ＤＴ（単位は％）は、（｜ＲＰ－ＲＲ｜／ＲＲ）×１００の算出式で求めることができる。

[0093] 判定部５６は、相違度ＤＲが許容範囲ＤＴであると判定した場合には、第

３記憶部５１ｃに記憶されている予測データセットの反応条件群のうち抽出反応条件ＣＰを、フロー反応装置１１で行う以降のフロー反応処理の反応条件（以下、決定反応条件と称する）ＣＳにし、第３記憶部５１に書き込む。抽出反応条件ＣＰを決定反応条件ＣＳとすることを含め、第３記憶部５１ｃに記憶されている予測データセットの反応条件群をフロー反応装置１１のフロー反応処理に用いる反応データセットとして第３記憶部５１ｃに書き込んでもよく、本実施形態でもそのようにしている。

[0094] 本実施形態においては、判定部５６は、第３記憶部５１ｃに、反応データセットを反応条件毎に読み出し可能な状態に記憶させている。本実施形態においては、第３記憶部５１ｃは予測データセットを記憶する領域および反応情報データセットを記憶する領域をもつが、反応データセットにおいて反応条件毎に読み出し可能な状態で記憶させていれば、判定部５６は予測データセットの反応条件群を反応データセットに書き換えてもよい。その場合には、第３演算部６３は第３記憶部５１ｃに、予測データセットを、反応条件毎に読み出し可能な状態で予め記憶させる。また、本実施形態においては反応条件データセットを第３記憶部５１ｃに記憶させているが、第４記憶部（不図示）をさらに設け、この第４記憶部に記憶させてもよい。

[0095] 判定部５６は、相違度ＤＲが許容範囲ＤＴでないと判定した場合には、抽出反応条件ＣＰを第３記憶部５１ｃから読み出し、抽出反応条件ＣＰと実測結果ＲＲとを関連付けた反応情報を生成する。そして、生成した反応情報を、新たな学習データとして第１記憶部５１ａに書き込む。この書き込みにより、第１記憶部５１ａに記憶されたデータセットは書き換えられ、データセットに含まれる学習データの数は変化する。本実施形態においては、第１記憶部５１ａに記憶された初期のデータセットには４２個の学習データが含まれており、判定部５６の１回の書き込みによりひとつの反応情報が学習データとして追加されることにより、データセットに含まれる学習データの数が４３個に更新される。

[0096] また、判定部５６は、データセットの数が更新されると、ニューラルネッ

トワーク７０の結合重みの数を更新する。ここで、更新されたデータセットの数をＮｊ、更新前後のニューラルネットワーク７０の結合重みの数を、それぞれＭｊ－１、Ｍｊとすると、判定部５６は、ニューラルネットワークの新たな結合重みの数Ｍｊを、Ｍｊ－１≦Ｍｊ＜Ｎｊ／２となるように更新する。例えば、データセットの数が４３個に更新された場合、更新前のニューラルネットワークの結合重みの数Ｍｊ－１は２１であるため、更新された結合重みの数Ｍｊは２１が維持される。

[0097] なお、ニューラルネットワーク７０の結合重みの数は、隠れ層の数または隠れ層Ｌ２におけるノードｕｌの数を増加させることにより、増加させることができる。ここで、隠れ層Ｌ２のノードの数を１つ増やして４個にすると、結合重みの総数は５×４＋４×２＝２８個となる。Ｍｊ＝２８となるように上述したＭｊ－１≦Ｍｊ＜Ｎｊ／２の関係を満足するためのデータセットの数Ｎｊの最小値は５７となる。このため、ニューラルネットワーク７０の結合重みの数は、データセットの数が５７となるまでは２１が維持され、データセットの数が５７となると、隠れ層Ｌ２のノードを１つ追加することにより、２８個に更新されることとなる。

[0098] 第１演算部６１は、本実施形態においては前述の通り、算出モードにおいては休止状態と第１記憶部５１ａの読み込みと繰り返している。具体的には、第１演算部６１は予め設定した時間間隔で第１記憶部５１ａの学習データを読み込んでおり、前回読み込んだデータセットが新たな学習データを含むデータセットに書き換えられているか否かを判定している。

[0099] 第１演算部６１が第１記憶部５１ａに記憶されたデータセットが書き換えられていないと判定した場合には、演算セクション５０は算出モードを継続させる。書き換えられていると判定した場合には、演算セクション５０は算出モードを学習モードに切り替え、第１演算部６１は、書き換えられたデータセットに含まれる新たな学習データを用いて次回の学習を行い、新たな関数を生成し、第２記憶部５１ｂに記憶されている関数を新たな関数に書き換える。なお、新たな関数の生成、および新たな関数の書き換えとは、関数に

おける新たな重み係数の導出、および関数における重み係数の書き換えを意味する。例えば、前述の（１Ａ）および（１Ｂ）の関数は、重み係数w_{xiul}が$w2_{xiul}$に書き換えられる。これにより、下記（２Ａ）および（２Ｂ）の関数が生成される。

[0100] $$y1=w2_{u1y1}/[1+\exp\{-(w2_{x1u1}\times x1+w2_{x2u1}\times x2+\cdots+w2_{x5u1}\times x5)\}]$$
$$+w2_{u2y1}/[1+\exp\{-(w2_{x1u2}\times x1+w2_{x2u2}\times x2+\cdots+w2_{x5u2}\times x5)\}]$$
$$+w2_{u3y1}/[1+\exp\{-(w2_{x1u3}\times x1+w2_{x2u3}\times x2+\cdots+w2_{x5u3}\times x5)\}] \quad \cdots（２Ａ）$$

$$y2=w2_{u1y2}/[1+\exp\{-(w2_{x1u1}\times x1+w2_{x2u1}\times x2+\cdots+w2_{x5u1}\times x5)\}]$$
$$+w2_{u2y2}/[1+\exp\{-(w2_{x1u2}\times x1+w2_{x2u2}\times x2+\cdots+w2_{x5u2}\times x5)\}]$$
$$+w2_{u3y2}/[1+\exp\{-(w2_{x1u3}\times x1+w2_{x2u3}\times x2+\cdots+w2_{x5u3}\times x5)\}] \quad \cdots（２Ｂ）$$

[0101] また、第２演算部６２は、新たな学習データが生成された場合も同様に、条件データセットを新たに生成する。

[0102] 以下、ニューラルネットワーク７０の結合重みの総数をＭ０としたときに、反応条件の数を２×Ｍ０個以上とすることの意義について説明する。ニューラルネットワークを学習するためには、学習データの数は多いほど良いと言われるが、必ずしもそうとは限らず、明確な定義はない。しかしながら、対象の現象の特徴を表現できる程度に、ニューラルネットワークが充分に学習される程度の数の学習データが必要である。

[0103] 画像認識およびコンピュータ囲碁等に用いられているニューラルネットワークにおいては、正答率を高めるためにニューラルネットワークの構造を複雑にし、多数の学習データを使用して学習を行っている。例えば、ある顔認識のニューラルネットワークにおいては、結合重みの総数が１．２億個であり、４００万個の学習データを用いて学習を行っている。また、あるコンピュータ囲碁のニューラルネットワークにおいては、結合重みの総数が３００万個であり、３０００万局面の囲碁盤面のデータを学習データとして用いて学習を行っている。

[0104] 一方、本開示が対象とする生産プロセスにおいては、このような非常に多くの学習データを生成することは難しく、また、画像認識およびコンピュータ囲碁で使うニューラルネットワークほど、ニューラルネットワークの構造を複雑にする必要もない。

[0105] 本開示の発明者は、波形データのサンプリング定理に着目して、本開示に想到するに至ったものである。ここで、サンプリング定理とは、アナログ信号をデジタル信号に変換する際に最低限必要になる周波数のことである。連続したアナログ信号をデジタル信号に変換する場合、アナログ信号に含まれる２倍以上の周波数でサンプリングを行ってデジタル信号を生成すれば、完全に元のアナログ信号の形（周波数）を再現できる。一方、サンプリングの周波数がアナログ信号に含まれる周波数の２倍未満である場合、元のアナログ信号に偽信号が現れて歪んで再現される。この現象はエイリアス効果と呼ばれる。このように、アナログ信号に含まれる２倍以上の周波数でサンプリングを行えば、アナログ信号を精度よくデジタル信号に変換することができる。

[0106] 一方、ニューラルネットワークにおいて、結合重みを用いて表現される入力層（説明変数）と出力層（目的変数）との関係を表す関数は、上記式（１Ａ），（１Ｂ）のように表すことができる。この関数は、サイン波形のような波形関数と類似している。このため、本開示の発明者は、サンプリング定理を用いることにより、ニューラルネットワークによって対象データの特徴を表現するためには、結合重みの総数Ｍ０の２倍以上の学習データを用意するという本開示に想到するに至ったものである。

[0107] 一方、フロー反応処理においては、１つの反応に要する時間が１時間であるとすると、結合重みの数の１０倍程度であれば、実測により学習データを用意することが可能である。例えば、結合重みの数が２１個であれば、２１０個の学習データを用意するために要する時間は２１０時間（約１０日）となり、充分に許容できる時間である。このため、本実施形態においては、学習データの数の上限を結合重みの総数Ｍ０の１０倍としたものである。

[0108] 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１０は、本実施形態において行われる処理を示すフローチャートである。まず、本実施形態においては、目標結果ＲＡが設定される（ステップＳＴ１）。本実施形態の目標結果ＲＡは、上述したように、分散度が１．０３以内、分子量が２５２００の±１％以内としている。次に、複数の学習データを含むデータセットが生成される（ステップＳＴ２）。目標結果ＲＡの設定および学習データの生成の順序は逆であってもよい。

[0109] 図１１は本実施形態において行われる学習データの生成処理を示すフローチャートである。まず、データ生成装置１３の反応条件設定部５２が、ニューラルネットワーク７０の結合重みの総数をＭ０としたときに、２×Ｍ０個以上の複数の反応条件を設定する（ステップＳＴ２１）。そして、反応結果取得部５３が、反応条件設定部５２が設定した数の反応条件のそれぞれにより、フロー反応装置１１にフロー反応処理を行わせることにより導出される反応結果を取得する（ステップＳＴ２２）。さらに、生成部５４が、反応条件と反応結果との組み合わせからなる４２個の反応情報、すなわち学習データをデータセットとして生成し（ステップＳＴ２３）、学習データの生成処理を終了する。なお、データセットは、第１記憶部５１ａに記憶される。

[0110] 支援装置１２は、モードを学習モードに設定し、これにより第１演算部６１は第１記憶部５１ａから１回目の学習データのデータセットを読み出す。なお、第１記憶部５１ａを設けず（介在させず）に、データ生成装置１３から第１演算部６１へデータセットを出力してもよい。このようにして１回目のデータセットが入力された第１演算部６１は、１回目の学習データのデータセットに基づいて反応条件と反応結果との関連性を学習する演算を行う。そして、第１演算部６１は条件パラメータと結果パラメータとの関数を生成し、生成した関数を第２記憶部５１ｂに書き込む（学習；ステップＳＴ３）。

[0111] 関数が第２記憶部５１ｂに書き込まれた後に、支援装置１２は学習モードから算出モードにモードを切り替え、これにより、第２演算部６２は、第１

記憶部５１ａから学習データのデータセットを読み出す。第２演算部６２は、データセットに含まれる学習データの反応条件に基づき、具体的には各条件パラメータの値に基づいて条件パラメータの値を振り、異なる複数の反応条件で構成された条件データセットを生成する（ステップＳＴ４）。生成した条件データセットは、反応条件毎に読み出し可能な状態に、第２記憶部５１ｂに書き込まれる。

[0112] 本実施形態においては前述の通り、最大値および最小値、並びに最大値と最小値との間を等間隔に刻んだ値に刻んだ条件パラメータで条件データセットを生成している。第１原料の流量については１００通り、第２原料の流量については５４５通り、合流部の形状は２通り、反応路径Ｄ３２については１０通り、反応温度は１１通りであるから、条件データセットの反応条件の個数は、１００×５４５×２×１０×１１の全１１９９０００個である。

[0113] なお、支援装置１２が、学習と算出とを併行することができる場合には、第１演算部６１での学習（すなわちステップＳＴ３）の処理と、第２演算部６２での条件データセットの生成（すなわちステップＳＴ４）の処理とを同時に行ってもよい。

[0114] 関数および条件データセットが第２記憶部５１ｂに書き込まれた後に、第３演算部６３が第２記憶部５１ｂからこれら関数および条件データセットを読み出す。なお、第２記憶部５１ｂを設けず（介在させず）に、第１演算部６１から第３演算部６３へ関数を出力し、第２演算部６２から第３演算部６３へ条件データセットを出力してもよい。このようにして関数と条件データセットが入力された第３演算部６３は、読み出した条件データセットの反応条件毎に、関数を用いて予測結果を算出する。そして、反応条件と予測結果とを関連付けた複数の予測情報で構成された予測データセットを生成する（ステップＳＴ５）。第３演算部６３は、生成された予測データセットを第３記憶部５１ｃに書き込む。

[0115] 予測結果は、条件データセットの反応条件毎に算出されるから、生成される予測データセットの予測情報の個数は条件データセットの反応条件の個数

と同じく、本実施形態では１１９９００００個である。

[0116] 第３演算部６３は、予め入力されている目標結果ＲＡと、予測データセットの各予測情報の予測結果との対比により「最もよい予測結果」を示す予測情報を特定する（ステップＳＴ６）。特定された予測情報の反応条件は抽出反応条件ＣＰとして抽出され（ステップＳＴ７）、抽出反応条件ＣＰと抽出反応条件ＣＰに対応する予測結果ＲＰとからなる予測情報が、予測データセットにおいて抽出反応条件ＣＰと抽出反応条件ＣＰに関連付けられた予測結果ＲＰとして第３記憶部５１ｃに書き込まれる。

[0117] 抽出反応条件ＣＰが第３記憶部５１ｃに書き込まれた後に、設定部１６は、第３記憶部５１ｃから抽出反応条件ＣＰを読み出す。なお、第３記憶部５１ｃを設けず（介在させず）に、第３演算部６３から設定部１６へ抽出反応条件ＣＰを出力してもよい。このようにして抽出反応条件ＣＰが入力された設定部１６は、抽出反応条件ＣＰでのフロー反応処理をフロー反応装置１１，４１に試行させる（ステップＳＴ８）。そして、試行の反応結果である実測結果ＲＲが検出部１７により判定部５６へ出力される。

[0118] 第３記憶部５１ｃに書き込まれている抽出反応条件ＣＰに関連付けられた予測結果ＲＰは、判定部５６により読み出される。なお、第３記憶部５１ｃを介在させずに、第３演算部６３から判定部５６へ予測結果ＲＰを出力してもよい。このようにして予測結果ＲＰが入力された判定部５６により、予測結果ＲＰと実測結果ＲＲとが対比され（ステップＳＴ９）、相違度ＤＲが求められる。

[0119] 次いで、判定部５６により、設定部１６から予め入力されている相違度の許容範囲ＤＴ（本実施形態では１％）に基づいて、相違度ＤＲが許容範囲ＤＴであるか否かが判定される（ステップＳＴ１０）。相違度ＤＲが許容範囲ＤＴであると判定された場合には（ステップＳＴ１０；ＹＥＳ）、判定部５６は抽出反応条件ＣＰを決定反応条件ＣＳとして、第３記憶部５１ｃに書き込み、本実施形態の判定部５６はさらに、第３記憶部５１ｃに記憶されている予測データセットの反応条件群をフロー反応装置１１のフロー反応処理に

用いる反応データセットとして第３記憶部５１ｃに書き込む（ステップＳＴ１１）。

[0120] 抽出反応条件ＣＰが決定反応条件ＣＳとして書き込まれた後に、設定部１６はフロー反応装置１１での反応条件を決定反応条件ＣＳに設定し、フロー反応装置１１でフロー反応を行う（ステップＳＴ１２）。決定反応条件ＣＳは、既に実測結果ＲＲに極めて近い反応結果が得られると判定されている反応条件であるため、生成物は目的とする分子量および分散度で得られる。また、決定反応条件ＣＳは、本実施形態での例えば１１９９００００個という膨大な数の反応条件から演算を用いて求めており、フロー反応処理の試行および時間が従来に比べて大きく短縮されている。

[0121] 一方、相違度ＤＲが許容範囲ＤＴでないと判定された場合には（ステップＳＴ１０；ＮＯ）、判定部５６は抽出反応条件ＣＰを第３記憶部５１ｃから読み出し、抽出反応条件ＣＰと実測結果ＲＲとを関連付けた反応情報を生成する。生成された反応情報は学習データとして第１記憶部５１ａに記憶されたデータセットに含められ（ステップＳＴ１３）、第１記憶部５１ａの学習データのデータセットは第２回目のデータセットに書き換えられる。この書き換えにより、第１記憶部５１ａには、学習データの数が、前回のデータセットよりも１つ多いデータセットが記憶される。また、判定部５６は、ニューラルネットワーク７０の結合重みの数をＭｊ－１≦Ｍｊ＜Ｎｊ／２となるように更新する（ステップＳＴ１４）。そして、ステップＳＴ１０が肯定されるまで、ステップＳＴ３～ステップＳＴ１０の処理が繰り返される。

[0122] 図１２は、本実施形態におけるニューラルネットワークの学習精度の検証結果を示す図である。図１２においては、図４に示す結合重みの総数が２１のニューラルネットワークを用いた場合において、データセットに含まれる学習データの数を２５０、１００、４２とした場合の学習精度の指標が、実施例１～３として示されている。また、データセットに含まれる学習データの数を１０とした場合の学習精度の指標が、比較例として示されている。学習精度の指標としては、各例のデータセットに含まれる学習データによりニ

ューラルネットワークにより得られる反応結果の分散度および分子量のそれぞれと、学習データの反応条件により得られる実測の反応結果の分散度および分子量のそれぞれの相関を表す決定係数R^2を用いた。本実施形態においては、決定係数R^2が０．８以上を合格とした。図１２に示すように、比較例は、分散度および分子量のいずれの決定係数も不合格であった。一方、実施例１～３は、分散度および分子量のいずれの決定係数も合格であった。したがって、図１２により、学習データの数を、ニューラルネットワークの結合重みの総数Ｍ０の２倍以上とすれば、ニューラルネットワークの学習を精度よく行うことができることが分かる。

[0123] 図１３は、本実施形態におけるデータセットに含まれる学習データの数と、ニューラルネットワークの結合数との関係を示す図である。図１３において、ｊは学習の回数であり、０は初期のデータセットによる学習を示す。図１３に示すように、本実施形態においては、１４回目の学習の終了後にデータセットに含まれる学習データの数が５７に更新され、かつニューラルネットワークの隠れ層のノード数が４に更新される。１４回目以降も学習が続けられ、７０回目の学習時に、相違度ＤＲが許容範囲ＤＴ内になり、この第７０回目での抽出反応条件で、フロー反応処理が行われた。

[0124] このように、本実施形態においては、ニューラルネットワークの結合重みの総数Ｍ０を適切に設定することにより、適切な数の学習データを生成することができる。したがって、本実施形態によれば、生成されたデータセットを用いることにより、未知の反応条件が入力されると、それに応じた反応結果を出力するニューラルネットワークを効率よく学習させることができる。よって、本実施形態によれば、フロー反応処理の条件設定を適切に行うことができる。

[0125] また、本実施形態においては、条件パラメータが多いフロー反応において条件設定が簡便に行えるから、反応処理をより迅速に開始できたり、なんらかの理由で複数の条件パラメータのうちのひとつを変更せざるを得ない場合でも迅速に新たな反応処理を行うことができる。

[0126] なお、上記実施形態においては、原料として第１原料と第２原料との２つを用いているが、これに限定されるものではない。原料は３種以上であってもよい。この場合、原料の数に応じた流量、原料の数に応じた合流部の形状が条件パラメータとして反応条件に加えられる。このため、ニューラルネットワーク７０の結合重みの総数およびデータセットに含まれる学習データの数も変更される。例えば、３つの原料を使用した場合、合流部は２つとなり、そのそれぞれについてＴ字および十字に分岐した管が用いられる。また、反応管も２種類使用される。このため、ニューラルネットワーク７０の入力層のノード数は、３（原料数）＋２×２（合流部の数×Ｔ字、十字）＋２（反応路径）＋１（反応温度）＝１０となる。隠れ層のノード数が３、出力層のノード数が２であれば、ニューラルネットワークの結合重みの総数は、１０×３＋３×２＝３６となる。この場合、初期のデータセットに含められる学習データの数は、３６×２＝７２以上、３６×１０＝３６０以下に設定される。

[0127] また、上記実施形態においては、ニューラルネットワークの結合重みの総数をＭ０としたときに、２×Ｍ０個以上の学習データを含むデータセットを生成してニューラルネットワークの学習を行っているが、これに限定されるものではない。任意の数の学習データを含むデータセットを生成して、ニューラルネットワークの学習を行うようにしてもよい。

[0128] また、上記実施形態においては、本開示をフロー反応処理に適用しているが、これに限定されるものではない。本開示は、生産物の産生を行う各種産生プロセスに適用可能である。具体的には、特開２０１３－１２９５４０号公報に記載されたフイルム搬送プロセス、特開２００７－５２０４９号に記載された光学補償シートの製造プロセスにおける光学異方性層の塗布プロセス、および特開２０１１－００６７８８号公報に記載されたガスバリアフィルムの製造プロセスにおける真空成膜プロセス等に本開示を適用できる。

[0129] 例えば、フイルム搬送プロセスにはフイルム巻取り工程があり、フロー反応処理における反応条件に対応するプロセス条件として、（１）フィルムの

巻き取りテンション、（２）巻き取り時のテンション変更タイミング、（３）巻き取り速度、および（４）エアプレス圧を使用し、反応結果に対応する産生結果として（１）巻きズレ量、および（２）黒帯を使用することができる。この場合、ニューラルネットワークの構成としては、入力層のノード数が４、出力層のノード数が２となる。隠れ層を１層とし、かつ３つのノードを有するものとした場合、ニューラルネットワークの結合重みの総数は、４×３＋３×２＝１８となるため、初期のデータセットに含まれる学習データの数は３６以上、１８０以下となる。

[0130] また、光学補償シートの製造プロセスにおける光学異方性層の塗布プロセスにおいては、プロセス条件として、（１）設定塗布膜厚（ライン速度、ワイヤーバー番手）、（２）ラビング回転速度、（３）加熱ゾーン温度、（４）紫外線照射出力、および（５）紫外線照射時のフィルム表面温度を使用し、産生結果として（１）レターデーションのばらつきを使用することができる。この場合、ニューラルネットワークの構成としては、入力層のノード数が５、出力層のノード数が１となる。隠れ層を１層とし、かつ３つのノードを有するものとした場合、ニューラルネットワークの結合重みの総数は、５×３＋３×１＝１８となるため、初期のデータセットに含まれる学習データの数は３６以上、１８０以下となる。

[0131] また、ガスバリアフィルムの製造プロセスにおける真空成膜プロセスにおいては、プロセス条件として、（１）原料ガス供給流量、（２）印加電力、および（３）成膜圧力を使用し、産生結果として（１）水蒸気透過率を使用することができる。この場合、ニューラルネットワークの構成としては、入力層のノード数が３、出力層のノード数が１となる。

隠れ層を１層とし、かつ３つのノードを有するものとした場合、ニューラルネットワークの結合重みの総数は、３×３＋３×１＝１２となるため、初期のデータセットに含まれる学習データの数は２４以上、１２０以下となる。

[0132] 上述の各実施形態において、演算セクション５０の第１演算部６１～第３演算部６３、並びに支援装置１２、データ生成装置１３、及びシステムコン

トローラ１５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は、次に示すような各種のプロセッサ（processor）である。各種のプロセッサには、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（Central Processing Unit）、ＦＰＧＡ（Field Programmable Gate Array）など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）など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などが含まれる。

[0133] １つの処理部は、これら各種のプロセッサのうちの１つで構成されていてもよいし、同種または異種の２つ以上のプロセッサ（例えば、複数のＦＰＧＡ、あるいはＣＰＵとＦＰＧＡ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。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、クライアントやサーバなどのコンピュータに代表されるように、１つ以上のＣＰＵとソフトウェアの組合せで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）など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を１つ以上用いて構成される。

[0134] 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は、より具体的には、半導体素子などの回路素子を組み合わせた電気回路（circuitry）である。

符号の説明

[0135] １０　フロー反応設備

１１，４１　フロー反応装置

１２　支援装置

１３　　データ生成装置

１５　　システムコントローラ

１６　　設定部

１７　　検出部

２１　　第１供給部

２２　　第２供給部

２３，４３　　反応セクション

２６　　回収セクション

３１，４２　　合流部

３１ａ～３１ｃ　第１管部～第３管部

３２　反応部

３３　　温調部

５０　　演算セクション

５１ａ～５１ｃ　第１記憶部～第３記憶部

５２　　反応条件設定部

５３　　反応結果取得部

５４　　生成部

５６　　判定部

６１～６３　第１演算部～第３演算部

７０　　ニューラルネットワーク

ＣＰ　　抽出反応条件

ＣＳ　　決定反応条件

ＤＴ　　許容範囲

ＤＲ　　相違度

Ｌ１　　入力層

Ｌ２　　中間層

Ｌ３　　出力層

ｘｉ，ｘ１～ｘ５　条件パラメータの値

ｕｌ、ｕ１～ｕ３　ノード値

ｙｍ，ｙ１～ｙ２　結果パラメータの値

w_{xiul}，w_{x1u1}～w_{x5u3}，w_{ulym}，w_{u1y1}～w_{u3y2}　重み係数

ＲＡ　　目標結果

ＲＰ　　予測結果

ＲＲ　　実測結果

請求の範囲

[請求項1] 生成物を産生するためのプロセスにおいて、プロセス条件が入力されると該プロセス条件に対応する産生結果を出力する、複数の層が複数の結合重みにより結合されてなるニューラルネットワークを学習するための複数の学習データからなるデータセットを生成するデータ生成装置であって、

前記ニューラルネットワークの結合重みの総数をＭ０としたときに、２×Ｍ０個以上の複数のプロセス条件を設定するプロセス条件設定部と、

前記複数のプロセス条件のそれぞれにより前記生成物を産生することにより導出される、前記複数のプロセス条件のそれぞれに対応する産生結果を取得する産生結果取得部と、

前記複数のプロセス条件のそれぞれと該それぞれのプロセス条件に対応する前記産生結果からなる複数の学習データを、前記データセットとして生成する生成部とを備えたデータ生成装置。

[請求項2] 前記プロセス条件設定部は、２×Ｍ０個以上、１０×Ｍ０個以下の複数の前記プロセス条件を設定する請求項１に記載のデータ生成装置。

[請求項3] 前記プロセス条件設定部は、前記プロセス条件の上限および下限を設定する請求項１または２に記載のデータ生成装置。

[請求項4] 前記プロセスは、原料を流しながら該原料を反応させて前記生成物を産生するフロー反応処理である請求項１から３のいずれか１項に記載のデータ生成装置。

[請求項5] 生成物を産生するためのプロセスにおいて、プロセス条件が入力されると該プロセス条件に対応する産生結果を出力する、複数の層が複数の結合重みにより結合されてなるニューラルネットワークを学習する学習装置であって、

請求項１に記載のデータ生成装置により生成された前記データセッ

トを用いて、前記ニューラルネットワークの結合重みを導出する第１の演算を行う第１の演算部と、

前記結合重みが演算されたニューラルネットワークを用いて、産生結果が未知である複数のプロセス条件を有する条件データセットの前記プロセス条件毎に予測結果を算出することにより、前記プロセス条件と前記予測結果を関連付けた予測データセットを生成し、得られた複数の前記予測結果のうち、予め設定した目標結果に最も近い前記予測結果を特定し、特定した前記予測結果に関連付けられたプロセス条件を抽出プロセス条件として抽出する第２の演算を行う第２の演算部と、

前記データセットの数をＮｊ、前記ニューラルネットワークの結合重みの数をＭｊとしたときに、前記抽出プロセス条件で生産物を産生した場合の産生結果と、前記抽出プロセス条件に関連付けられた前記予測結果との相違度が予め設定した許容範囲であるか否かの判定を行い、該判定が否定された場合には、前記抽出プロセス条件と前記抽出プロセス条件で産生させた場合の産生結果とを関連付けた産生情報を前記学習データとして前記データセットに加えることにより該データセットの数Ｎｊを更新し、前記ニューラルネットワークの新たな結合重みの数Ｍｊを、Ｍｊ－１≦Ｍｊ＜Ｎｊ／２となるように更新し、前記判定が肯定された場合には、前記抽出プロセス条件を前記プロセスに用いるプロセス条件に決定する判定部とを備え、

前記判定が肯定されるまで、更新された前記データセットおよび前記結合重みが更新された前記ニューラルネットワークに基づいて、前記第１の演算、前記第２の演算および前記判定を繰り返す学習装置。

[請求項6] 生成物を産生するためのプロセスにおいて、プロセス条件が入力されると該プロセス条件に対応する産生結果を出力する、複数の層が複数の結合重みにより結合されてなるニューラルネットワークを学習する学習装置であって、

複数のプロセス条件のそれぞれと該それぞれのプロセス条件に対応する前記産生結果とからなる複数の学習データからなるデータセットを用いて、前記ニューラルネットワークの結合重みを導出する第１の演算を行う第１の演算部と、

前記結合重みが演算されたニューラルネットワークを用いて、産生結果が未知である複数のプロセス条件を有する条件データセットの前記プロセス条件毎に予測結果を算出することにより、前記プロセス条件と前記予測結果を関連付けた予測データセットを生成し、得られた複数の前記予測結果のうち、予め設定した目標結果に最も近い前記予測結果を特定し、特定した前記予測結果に関連付けられたプロセス条件を抽出プロセス条件として抽出する第２の演算を行う第２の演算部と、

前記データセットの数をＮｊ、前記ニューラルネットワークの結合重みの数をＭｊとしたときに、前記抽出プロセス条件で生産物を産生した場合の産生結果と、前記抽出プロセス条件に関連付けられた前記予測結果との相違度が予め設定した許容範囲であるか否かの判定を行い、該判定が否定された場合には、前記抽出プロセス条件と前記抽出プロセス条件で産生させた場合の産生結果とを関連付けた産生情報を前記学習データとして前記データセットに加えることにより該データセットの数Ｎｊを更新し、前記ニューラルネットワークの新たな結合重みの数Ｍｊを、Ｍｊ－１≦Ｍｊ＜Ｎｊ／２となるように更新し、前記判定が肯定された場合には、前記抽出プロセス条件を前記プロセスに用いるプロセス条件に決定する判定部とを備え、

前記判定が肯定されるまで、更新された前記データセットおよび前記結合重みが更新された前記ニューラルネットワークに基づいて、前記第１の演算、前記第２の演算および前記判定を繰り返す学習装置。

[請求項7] 前記プロセスは、原料を流しながら該原料を反応させて前記生成物を産生するフロー反応処理である請求項５または６に記載の学習装置

。

[請求項8] 生成物を産生するためのプロセスにおいて、プロセス条件が入力されると該プロセス条件に対応する産生結果を出力する、複数の層が複数の結合重みにより結合されてなるニューラルネットワークを学習するための複数の学習データからなるデータセットを生成するデータ生成方法であって、

前記ニューラルネットワークの結合重みの総数をＭ０としたときに、２×Ｍ０個以上の複数のプロセス条件を設定し、

前記複数のプロセス条件のそれぞれにより前記生成物を産生することにより導出される、前記複数のプロセス条件のそれぞれに対応する産生結果を取得し、

前記複数のプロセス条件のそれぞれと該それぞれのプロセス条件に対応する前記産生結果からなる複数の学習データを、前記データセットとして生成するデータ生成方法。

[請求項9] 生成物を産生するためのプロセスにおいて、プロセス条件が入力されると該プロセス条件に対応する産生結果を出力する、複数の層が複数の結合重みにより結合されてなるニューラルネットワークを学習する学習方法であって、

請求項８に記載のデータ生成方法により生成された前記データセットを用いて、前記ニューラルネットワークの結合重みを導出する第１の演算を行い、

前記結合重みが演算されたニューラルネットワークを用いて、産生結果が未知である複数のプロセス条件を有する条件データセットの前記プロセス条件毎に予測結果を算出することにより、前記プロセス条件と前記予測結果を関連付けた予測データセットを生成し、

得られた複数の前記予測結果のうち、予め設定した目標結果に最も近い前記予測結果を特定し、特定した前記予測結果に関連付けられたプロセス条件を抽出プロセス条件として抽出する第２の演算を行い、

前記データセットの数をＮｊ、前記ニューラルネットワークの結合重みの数をＭｊとしたときに、前記抽出プロセス条件で生産物を産生した場合の産生結果と、前記抽出プロセス条件に関連付けられた前記予測結果との相違度が予め設定した許容範囲であるか否かの判定を行い、該判定が否定された場合には、前記抽出プロセス条件と前記抽出プロセス条件で産生させた場合の産生結果とを関連付けた産生情報を前記学習データとして前記データセットに加えることにより該データセットの数Ｎｊを更新し、前記ニューラルネットワークの新たな結合重みの数Ｍｊを、Ｍｊ－１≦Ｍｊ＜Ｎｊ／２となるように更新し、前記判定が肯定された場合には、前記抽出プロセス条件を前記プロセスに用いるプロセス条件に決定し、

前記判定が肯定されるまで、更新された前記データセットおよび前記結合重みが更新された前記ニューラルネットワークに基づいて、前記第１の演算、前記第２の演算および前記判定を繰り返す学習方法。

[請求項10] 生成物を産生するためのプロセスにおいて、プロセス条件が入力されると該プロセス条件に対応する産生結果を出力する、複数の層が複数の結合重みにより結合されてなるニューラルネットワークを学習する学習方法であって、

複数のプロセス条件のそれぞれと該それぞれのプロセス条件に対応する前記産生結果とからなる複数の学習データからなるデータセットを用いて、前記ニューラルネットワークの結合重みを導出する第１の演算を行い、

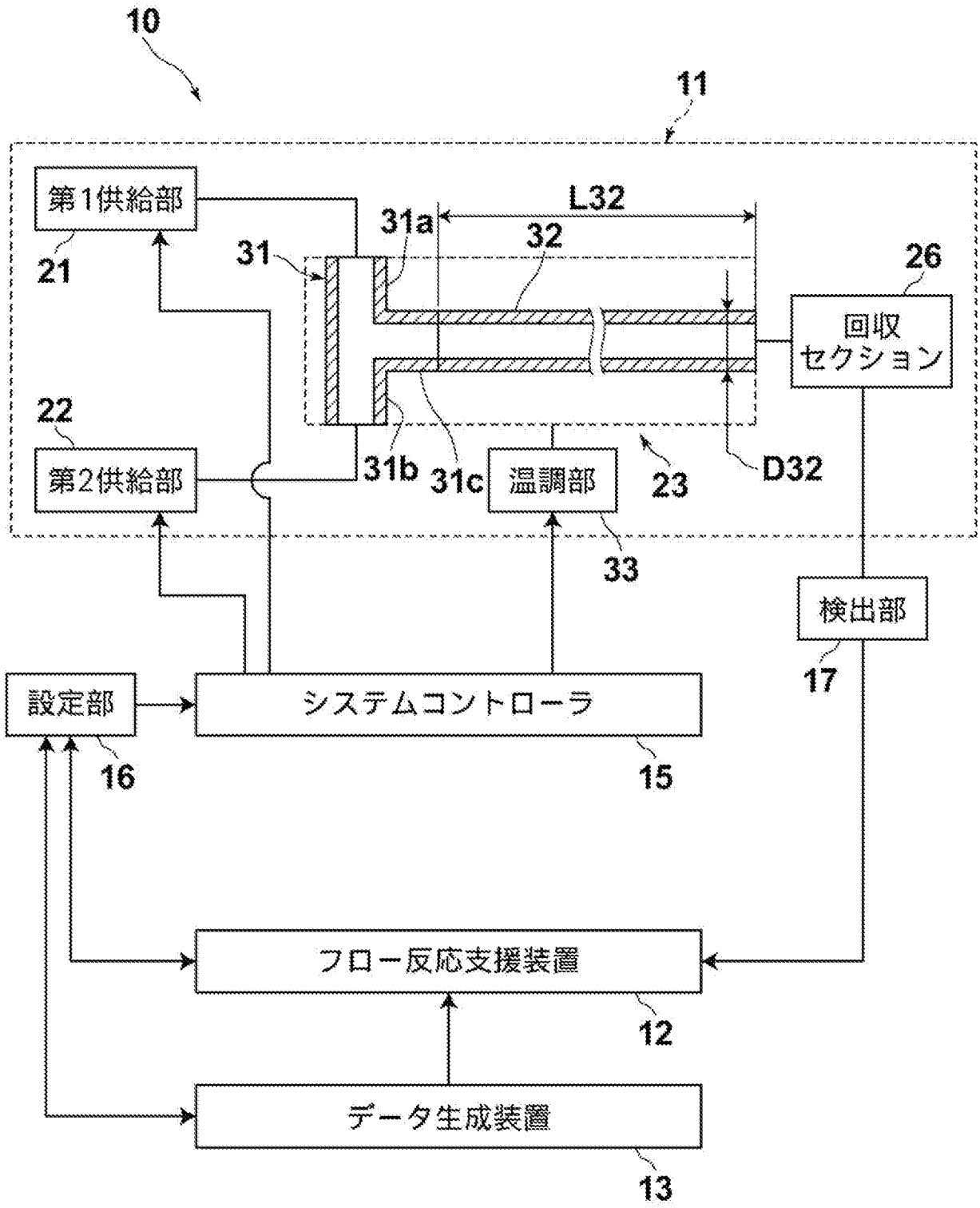
前記結合重みが演算されたニューラルネットワークを用いて、産生結果が未知である複数のプロセス条件を有する条件データセットの前記プロセス条件毎に予測結果を算出することにより、前記プロセス条件と前記予測結果を関連付けた予測データセットを生成し、得られた複数の前記予測結果のうち、予め設定した目標結果に最も近い前記予測結果を特定し、特定した前記予測結果に関連付けられたプロセス条

件を抽出プロセス条件として抽出する第２の演算を行い、

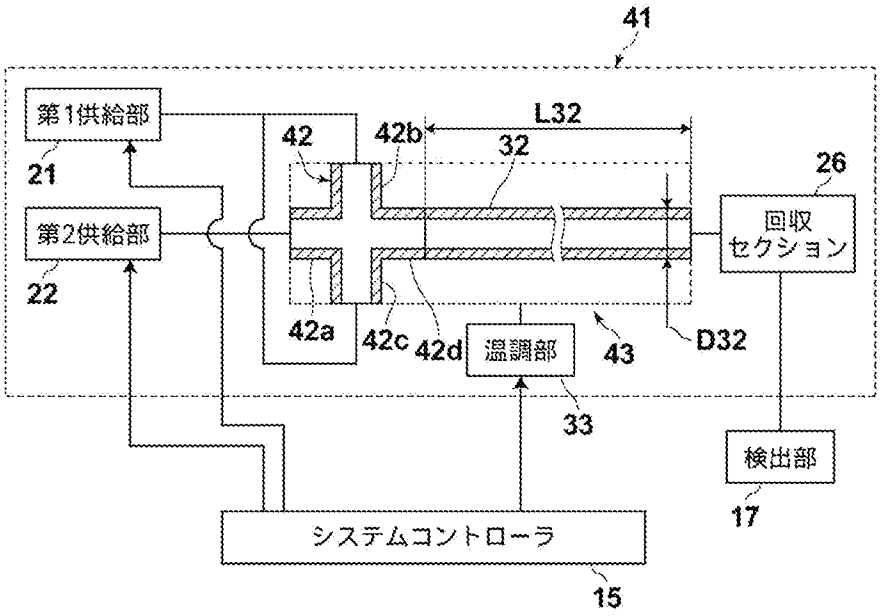
前記データセットの数をＮｊ、前記ニューラルネットワークの結合重みの数をＭｊとしたときに、前記抽出プロセス条件で生産物を産生した場合の産生結果と、前記抽出プロセス条件に関連付けられた前記予測結果との相違度が予め設定した許容範囲であるか否かの判定を行い、該判定が否定された場合には、前記抽出プロセス条件と前記抽出プロセス条件で産生させた場合の産生結果とを関連付けた産生情報を前記学習データとして前記データセットに加えることにより該データセットの数Ｎｊを更新し、前記ニューラルネットワークの新たな結合重みの数Ｍｊを、Ｍｊ－１≦Ｍｊ＜Ｎｊ／２となるように更新し、前記判定が肯定された場合には、前記抽出プロセス条件を前記プロセスに用いるプロセス条件に決定し、

前記判定が肯定されるまで、更新された前記データセットおよび前記結合重みが更新された前記ニューラルネットワークに基づいて、前記第１の演算、前記第２の演算および前記判定を繰り返す学習方法。

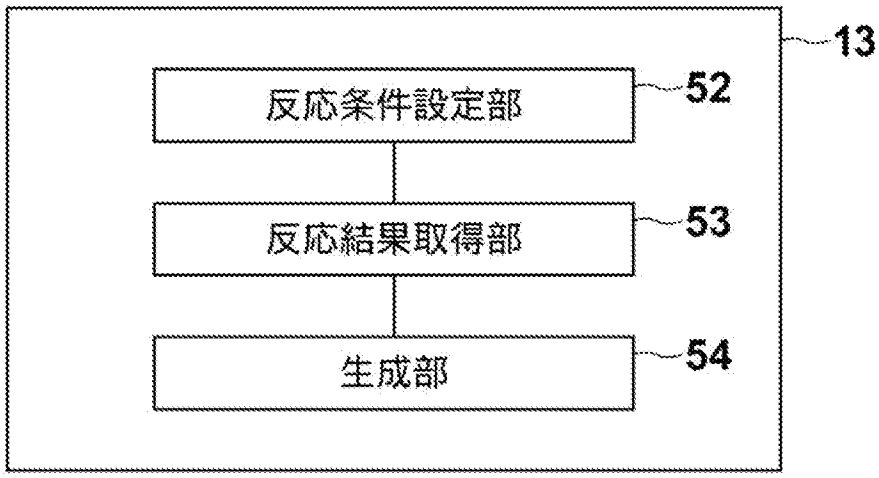
[図1]


10
11
第1供給部
21
31
31a
L32
32
26
回収
セクション
22
第2供給部
31b
31c
温調部
23
D32
33
検出部
17
設定部
16
システムコントローラ
15
フロー反応支援装置
12
データ生成装置
13

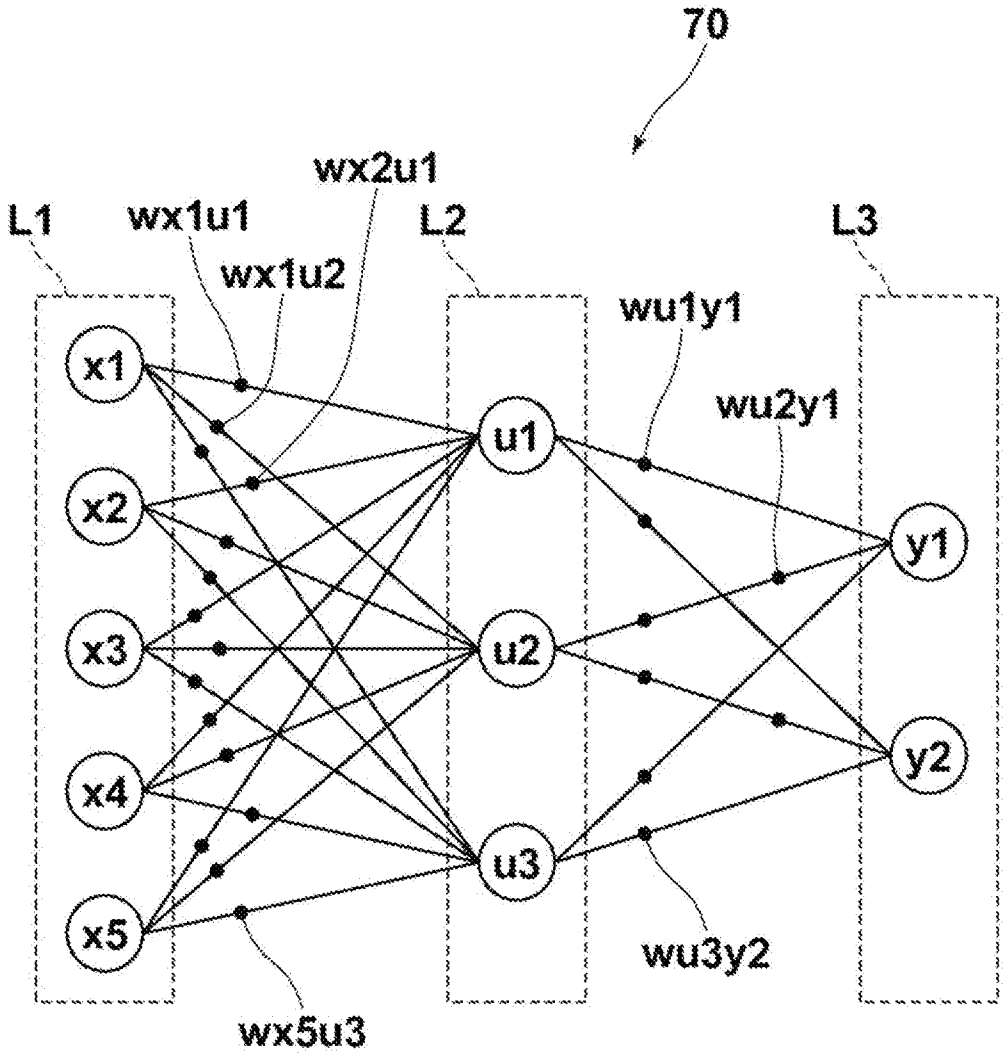
[図2]


41
第1供給部
21
第2供給部
22
42
42b
L32
32
26
回収
セクション
42a
42c
42d
温調部
43
D32
33
検出部
17
システムコントローラ
15

[図3]


13
反応条件設定部
52
反応結果取得部
53
生成部
54

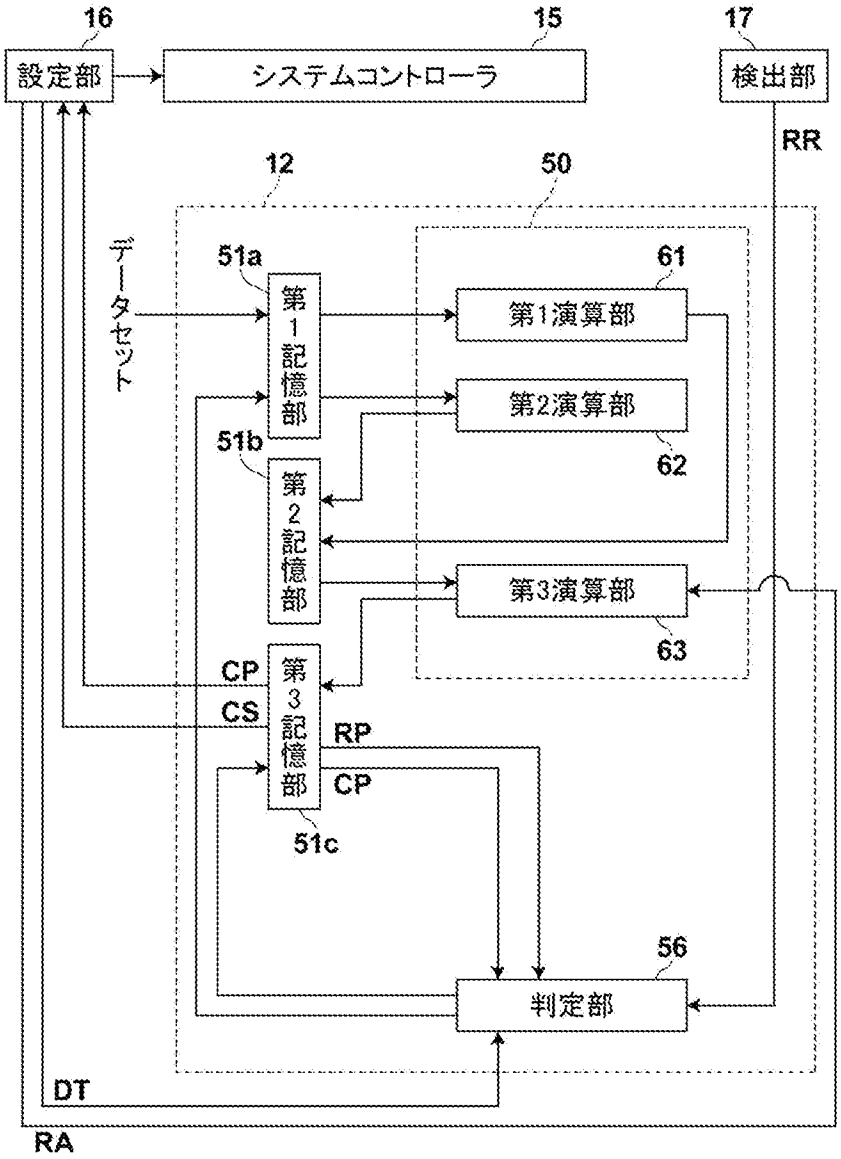
[図4]



[図5]

学習データNo.	反応条件					反応結果	
	第1原料	第2原料	合流部	反応部	反応温度(℃)	生成物	
	流量(mL/min)	流量(mL/min)	形状	反応路径(mm)		分散度	分子量
1	10	5.5	T字	1	0	1.0422	27000
2	20	11	T字	1	10	1.1334	21340
3	100	55	T字	10	10	1.0575	22000
4	11	5.6	T字	5	10	1.0560	25200
5	20	11	T字	5	10	1.0631	28300
6	20	11	T字	1	10	1.0655	18000
7	20	20	十字	2	0	1.1164	22300
8	20	20	T字	2	0	1.2328	14900
9	20	20	T字	4	0	1.0845	23500
10	1	0.6	T字	1	0	1.0431	11560
⋮							
42	20	20	十字	2	2	1.1164	23300

[図6]


16
15
17
設定部
システムコントローラ
検出部
RR
12
50
データセット
51a
第1記憶部
61
第1演算部
第2演算部
62
51b
第2記憶部
第3演算部
63
CP
CS
第3記憶部
RP
CP
51c
56
判定部
DT
RA

[図7]

反応条件				
第1原料	第2原料	合流部	反応部	反応温度(℃)
流量(mL/min)	流量(mL/min)	形状	反応路径(mm)	
1	0.6	T字	1	0
2	0.6	T字	1	0
3	0.6	T字	1	0
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
100	0.6	T字	1	0
1	0.7	T字	1	0
1	0.8	T字	1	0
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
1	55.0	T字	1	0
1	0.6	十字	1	0
2	0.6	十字	1	0
3	0.6	十字	1	0
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

[図8]

予測情報No.	反応条件					反応結果	
	第1原料	第2原料	合流部	反応部	反応温度(℃)	生成物	
	流量(mL/min)	流量(mL/min)	形状	反応路径(mm)		分散度	分子量
1	1	0.6	T字	1	0	1.07453	29876
2	2	0.6	T字	1	0	1.07488	29654
3	3	0.6	T字	1	0	1.07323	29403
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
100	100	0.6	T字	1	0	1.09234	29560
101	1	0.7	T字	1	0	1.06832	28338
102	1	0.8	T字	1	0	1.06555	28762
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
	3	10.2	十字	2	0	1.05743	27835
	3	10.3	十字	2	0	1.05464	27856
	3	10.4	十字	2	0	1.05382	27832
	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
6050 *	8	3.2	T字	6	0	1.0389	24870
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
8000	10	3.2	T字	6	0	1.05702	24870
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

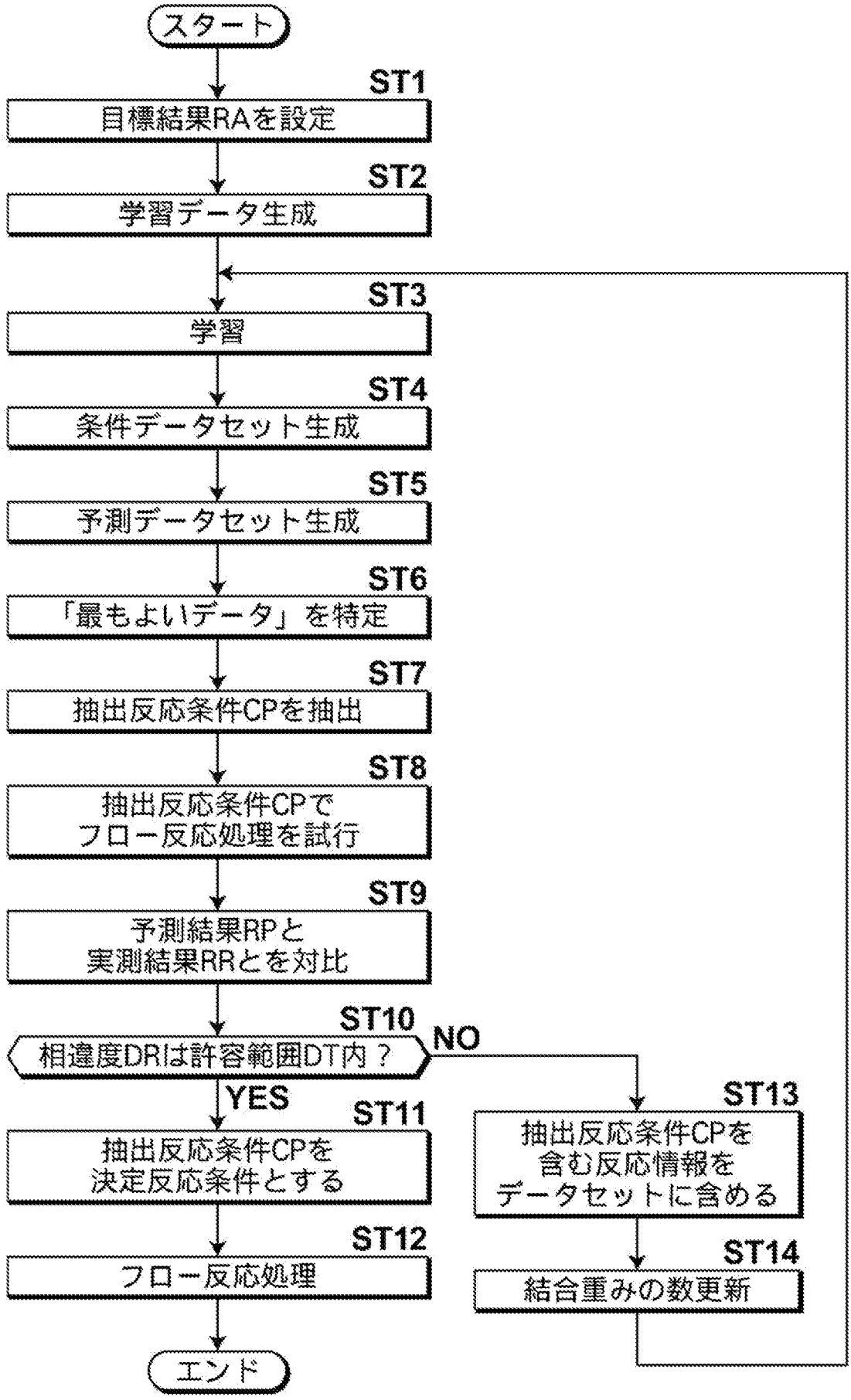
[図9]

予測情報No.	反応条件					反応結果	
	第1原料	第2原料	合流部	反応部	反応温度(℃)	生成物	
	流量(mL/min)	流量(mL/min)	形状	反応路径(mm)		分散度	分子量
予測結果RP	8	3.2	T字	6	0	1.0389	24870
実測結果RP	8	3.2	T字	6	0	1.0767	27630

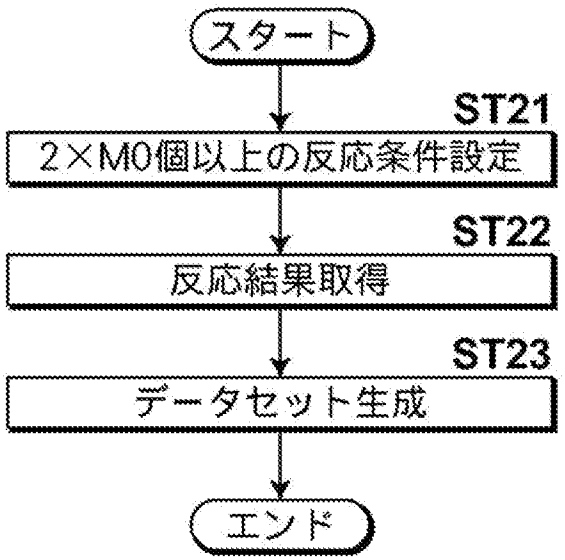
相違度DR = 3.5107

相違度DR = 9.9891

[図10]


スタート
ST1
目標結果RAを設定
ST2
学習データ生成
ST3
学習
ST4
条件データセット生成
ST5
予測データセット生成
ST6
「最もよいデータ」を特定
ST7
抽出反応条件CPを抽出
ST8
抽出反応条件CPで
フロー反応処理を試行
ST9
予測結果RPと
実測結果RRとを対比
ST10
相違度DRは許容範囲DT内？
NO
YES
ST11
抽出反応条件CPを
決定反応条件とする
ST12
フロー反応処理
エンド
ST13
抽出反応条件CPを
含む反応情報を
データセットに含める
ST14
結合重みの数更新

[図11]



[図12]

	学習データ数	決定係数R^2（分散度）	決定係数R^2（分子量）	判定
実施例1	250	0.85	0.89	合格
実施例2	100	0.83	0.85	合格
実施例3	42	0.82	0.83	合格
比較例	10	0.23	0.32	不合格

[図13]

	ニューラルネット構成					データ数		
j	入力層ノード数	隠れ層ノード数	出力層ノード数	Mj−1	Mj	Nj/2	Nj−1	Nj
0	5	3	2	—	21	21	—	42
1	5	3	2	21	21	21.5	42	43
2	5	3	2	21	21	22	43	44
3	5	3	2	21	21	22.5	44	45
4	5	3	2	21	21	23	45	46
5	5	3	2	21	21	23.5	46	47
6	5	3	2	21	21	24	47	48
7	5	3	2	21	21	24.5	48	49
8	5	3	2	21	21	25	49	50
9	5	3	2	21	21	25.5	50	51
10	5	3	2	21	21	26	51	52
11	5	3	2	21	21	26.5	52	53
12	5	3	2	21	21	27	53	54
13	5	3	2	21	21	27.5	54	55
14	5	3	2	21	21	28	55	56
15	5	4	2	21	28	28.5	56	57
16	5	4	2	28	28	29	57	58
17	5	4	2	28	28	29.5	58	59
18	5	4	2	28	28	30	59	60
19	5	4	2	28	28	30.5	60	61
20	5	4	2	28	28	31	61	62
21	5	4	2	28	28	31.5	62	63
22	5	4	2	28	28	32	63	64
23	5	4	2	28	28	32.5	64	65
50	5	6	2	42	42	46	91	92
51	5	6	2	42	42	46.5	92	93
52	5	6	2	42	42	47	93	94
53	5	6	2	42	42	47.5	94	95
54	5	6	2	42	42	48	95	96
55	5	6	2	42	42	48.5	96	97
56	5	6	2	42	42	49	97	98
57	5	7	2	42	49	49.5	98	99
58	5	7	2	49	49	50	99	100
59	5	7	2	49	49	50.5	100	101
60	5	7	2	49	49	51	101	102
61	5	7	2	49	49	51.5	102	103
62	5	7	2	49	49	52	103	104
63	5	7	2	49	49	52.5	104	105
64	5	7	2	49	49	53	105	106
65	5	7	2	49	49	53.5	106	107
66	5	7	2	49	49	54	107	108
67	5	7	2	49	49	54.5	108	109
68	5	7	2	49	49	55	109	110
69	5	7	2	49	49	55.5	110	111
70	5	7	2	49	49	56	111	112

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/JP2020/008985

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER
B01J 19/00(2006.01)i; C05B 13/02(2006.01)i; C06N 3/08(2006.01)i
FI: C06N3/08; B01J19/00 321; C05B13/02 M

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)
B01J19/00; C05B13/02; C06N3/08

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)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	磯 俊樹 ほか, 目の分類を行うニューラルネットの検討, 電子情報通信学会技術研究報告, 14 December 1990, pp. 65-72, in particular, "3 3 Examination when changing the number of intermediate units", "4. Generalization of eye classification using neural networks", pp. 65-72, (ISO, Toshiki et al., "Neural Network for Classification of Eye's Shape", IEICE technical report)	1-4,8
A	JP 2013-161298 A (NIPPON STEEL & SUMITOMO METAL CORPORATION) 19.08.2013 (2013-08-19)	1-4,8
A	JP 2018-148367 A (CANON INC.) 20.09.2018 (2018-09-20)	5-7,9-10

☐ 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 29 May 2020 (29.05.2020)	Date of mailing of the international search report 09 June 2020 (09.06.2020)
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/JP2020/008985

Patent Documents referred in the Report	Publication Date	Patent Family	Publication Date
JP 2013-161298 A	19 Aug. 2013	(Family: none)	
JP 2018-148367 A	20 Sep. 2018	US 2018/0253629 A1	
		CN 108537112 A	

国際調査報告

国際出願番号
PCT/JP2020/008589

A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（ＩＰＣ））

B01J 19/00(2006.01)i; G05B 13/02(2006.01)i; G06N 3/08(2006.01)i
FI: G06N3/08; B01J19/00 321; G05B13/02 M

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））

B01J19/00; G05B13/02; G06N3/08

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	磯 俊樹　ほか，目の分類を行うニューラルネットの検討，電子情報通信学会技術研究報告，1990.12.14，pp.65-72，特に，「３．３中間ユニット数を変えた場合の検討」と「４．ニューラルネットを用いた目の分類の汎化性」　第６５－７２頁	1-4,8
A	JP 2013-161298 A（新日鐵住金株式会社）19.08.2013（2013-08-19）	1-4,8
A	JP 2018-148367 A（キヤノン株式会社）20.09.2018（2018-09-20）	5-7,9-10

☐ 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。

* 引用文献のカテゴリー
“A” 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの
“E” 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの
“L” 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す）
“O” 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献
“P” 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献
“T” 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの
“X” 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの
“Y” 特に関連のある文献であって、当該文献と他の１以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの
“&” 同一パテントファミリー文献

国際調査を完了した日	国際調査報告の発送日
29.05.2020	09.06.2020

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）
塚田　肇 5B 3652
電話番号 03-3581-1101 内線 3545

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/JP2020/008589

引用文献	公表日	パテントファミリー文献	公表日
JP 2013-161298 A	19.08.2013	（ファミリーなし）	
JP 2018-148367 A	20.09.2018	US 2018/0253629 A1	
		CN 108537112 A	