

(19)日本国特許庁(JP)

(12)特許公報(B2)

(11)特許番号
特許第7640378号
(P7640378)

(45)発行日 令和7年3月5日(2025.3.5)

(24)登録日 令和7年2月25日(2025.2.25)

(51)国際特許分類	F I			
G 0 6 Q 10/04 (2023.01)	G 0 6 Q 10/04			
G 0 6 N 20/00 (2019.01)	G 0 6 N 20/00	1 3 0		
G 0 6 Q 50/04 (2012.01)	G 0 6 Q 50/04			
G 0 5 B 19/418(2006.01)	G 0 5 B 19/418		Z	
請求項の数 11 (全36頁)				

(21)出願番号	特願2021-101863(P2021-101863)	(73)特許権者	306037311 富士フイルム株式会社 東京都港区西麻布2丁目2番30号
(22)出願日	令和3年6月18日(2021.6.18)	(74)代理人	110001519 弁理士法人太陽国際特許事務所
(65)公開番号	特開2023-828(P2023-828A)	(72)発明者	児美川 拓実 神奈川県南足柄市中沼210番地 富士フイルム株式会社内
(43)公開日	令和5年1月4日(2023.1.4)	(72)発明者	長谷川 昌孝 神奈川県南足柄市中沼210番地 富士フイルム株式会社内
審査請求日	令和6年3月7日(2024.3.7)	審査官	宮地 匡人
		最終頁に続く	

(54)【発明の名称】 情報処理装置、情報処理方法及びプログラム

(57)【特許請求の範囲】

【請求項1】

1つ以上の処理を含むプロセスにより得られる生産物の品質を予測する情報処理装置であって、

少なくとも1つのプロセッサを含み、前記プロセッサは、

前記プロセスの少なくとも1つの処理において、前記処理前と前記処理後との間の処理時間の経過の異なる2点で、被処理物と処理物の化学的情報及び物理的情報の少なくとも1つの情報の取得を行い、

前記情報から得られる数値の前記2点間の差分の算出値の取得を行い、

前記差分を説明変数、前記生産物の品質を目的変数とし、前記説明変数と前記目的変数との既知データセットに基づいて機械学習した学習済みモデルを用いて、前記算出値に基づいて前記生産物の品質の予測を行い、

前記情報の取得において、前記プロセスの少なくとも1つの処理における前記化学的情報として、分光スペクトルの取得を行い、

前記算出値の取得において、前記少なくとも1つの前記処理により変化する前記分光スペクトル中の特徴的な波数又は波数領域について、前記波数における強度又は前記波数領域における積分強度の前記算出値の取得を行う、

情報処理装置。

【請求項2】

前記プロセッサは、前記プロセスの少なくとも1つの処理に対する処理条件の条件値の

10

20

取得を行い、

前記説明変数が、前記差分に加えて前記処理条件を含み、

前記生産物の品質の予測において、前記算出値及び前記条件値に基づいて、前記生産物の品質の予測を行う、請求項 1 に記載の情報処理装置。

【請求項 3】

前記プロセッサは、前記波数又は前記波数領域を、量子化学計算に基づいて決定する、請求項 1 又は請求項 2 に記載の情報処理装置。

【請求項 4】

前記特徴的な波数又は波数領域は、副生成物に由来する波数又は波数領域を含む、請求項 1 ～ 請求項 3 のいずれか 1 項に記載の情報処理装置。

10

【請求項 5】

前記プロセスの少なくとも 1 つの処理は、流路を用いたフロー処理であり、

前記プロセッサは、前記情報の取得において、前記フロー処理の前記物理的情報として、流れ場の状態量の取得を行う、請求項 1 ～ 請求項 4 のいずれか 1 項に記載の情報処理装置。

【請求項 6】

1 つ以上の処理を含むプロセスにより得られる生産物の品質を予測する情報処理装置であって、

少なくとも 1 つのプロセッサを含み、前記プロセッサは、

前記プロセスの少なくとも 1 つの処理において、前記処理前と前記処理後との間の処理時間の経過の異なる 2 点で、被処理物と処理物の化学的情報及び物理的情報の少なくとも 1 つの情報の取得を行い、

20

前記情報から得られる数値の前記 2 点間の差分の算出値の取得を行い、

前記差分を説明変数、前記生産物の品質を目的変数とし、前記説明変数と前記目的変数との既知データセットに基づいて機械学習した学習済みモデルを用いて、前記算出値に基づいて前記生産物の品質の予測を行い、

前記プロセスの少なくとも 1 つの処理は、流路を用いたフロー処理であり、

前記プロセッサは、前記情報の取得において、前記フロー処理の前記物理的情報として、流れ場の状態量の取得を行う、

情報処理装置。

30

【請求項 7】

前記プロセッサは、前記プロセスの少なくとも 1 つの処理に対する処理条件の条件値の取得を行い、

前記説明変数が、前記差分に加えて前記処理条件を含み、

前記生産物の品質の予測において、前記算出値及び前記条件値に基づいて、前記生産物の品質の予測を行う、請求項 6 に記載の情報処理装置。

【請求項 8】

情報処理装置が備えるプロセッサが、1 つ以上の処理を含むプロセスにより得られる生産物の品質を予測する情報処理方法であって、

前記プロセッサが、

40

前記プロセスの少なくとも 1 つの処理において、前記処理前と前記処理後との間の処理時間の経過の異なる 2 点で、被処理物と処理物の化学的情報及び物理的情報の少なくとも 1 つの情報の取得を行うこと、

前記情報から得られる数値の前記 2 点間の差分の算出値の取得を行うこと、及び

前記差分を説明変数、前記生産物の品質を目的変数とし、前記説明変数と前記目的変数との既知データセットに基づいて機械学習した学習済みモデルを用いて、前記算出値に基づいて前記生産物の品質の予測を行うこと、

を実行することを含み、

前記プロセッサは、

前記情報の取得において、前記プロセスの少なくとも 1 つの処理における前記化学的情報

50

として、分光スペクトルの取得を行い、

前記算出値の取得において、前記少なくとも 1 つの前記処理により変化する前記分光スペクトル中の特徴的な波数又は波数領域について、前記波数における強度又は前記波数領域における積分強度の前記算出値の取得を行う、

情報処理方法。

【請求項 9】

情報処理装置が備えるプロセッサが、1 つ以上の処理を含むプロセスにより得られる生産物の品質を予測する情報処理方法であって、

前記プロセッサが、

前記プロセスの少なくとも 1 つの処理において、前記処理前と前記処理後との間の処理時間の経過の異なる 2 点で、被処理物と処理物の化学的情報及び物理的情報の少なくとも 1 つの情報の取得を行うこと、

前記情報から得られる数値の前記 2 点間の差分の算出値の取得を行うこと、及び

前記差分を説明変数、前記生産物の品質を目的変数とし、前記説明変数と前記目的変数との既知データセットに基づいて機械学習した学習済みモデルを用いて、前記算出値に基づいて前記生産物の品質の予測を行うこと、

を実行することを含み、

前記プロセスの少なくとも 1 つの処理は、流路を用いたフロー処理であり、

前記プロセッサは、前記情報の取得において、前記フロー処理の前記物理的情報として、流れ場の状態量の取得を行う、

情報処理方法。

【請求項 10】

1 つ以上の処理を含むプロセスにより得られる生産物の品質を予測する情報処理をコンピュータに実行させるためのプログラムであって、

前記プロセスの少なくとも 1 つの処理において、前記処理前と前記処理後との間の処理時間の経過の異なる 2 点で、被処理物と処理物の化学的情報及び物理的情報の少なくとも 1 つの情報の取得を行うこと、

前記情報から得られる数値の前記 2 点間の差分の算出値の取得を行うこと、及び

前記差分を説明変数、前記生産物の品質を目的変数とし、前記説明変数と前記目的変数との既知データセットに基づいて機械学習した学習済みモデルを用いて、前記算出値に基づいて前記生産物の品質の予測を行うこと、

を含み、

前記情報の取得において、前記プロセスの少なくとも 1 つの処理における前記化学的情報として、分光スペクトルの取得を行い、

前記算出値の取得において、前記少なくとも 1 つの前記処理により変化する前記分光スペクトル中の特徴的な波数又は波数領域について、前記波数における強度又は前記波数領域における積分強度の前記算出値の取得を行う、

情報処理をコンピュータに実行させるためのプログラム。

【請求項 11】

1 つ以上の処理を含むプロセスにより得られる生産物の品質を予測する情報処理をコンピュータに実行させるためのプログラムであって、

前記プロセスの少なくとも 1 つの処理において、前記処理前と前記処理後との間の処理時間の経過の異なる 2 点で、被処理物と処理物の化学的情報及び物理的情報の少なくとも 1 つの情報の取得を行うこと、

前記情報から得られる数値の前記 2 点間の差分の算出値の取得を行うこと、及び

前記差分を説明変数、前記生産物の品質を目的変数とし、前記説明変数と前記目的変数との既知データセットに基づいて機械学習した学習済みモデルを用いて、前記算出値に基づいて前記生産物の品質の予測を行うこと、

を含み、

前記プロセスの少なくとも 1 つの処理は、流路を用いたフロー処理であり、

前記情報の取得において、前記フロー処理の前記物理的情報として、流れ場の状態量の取得を行う、

情報処理をコンピュータに実行させるためのプログラム。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本開示は、情報処理装置、情報処理方法及びプログラムに関する。

【背景技術】

【0002】

生産物の品質を、機械学習モデルを用いて予測することが行われている。例えば、特許文献1には、予測の精度を高めるために、生産物の物性を表す物性データから導出された物性関連データを学習用入力データとして学習する機械学習モデルが提案されている。

10

【先行技術文献】

【特許文献】

【0003】

【文献】特開2018-018354号公報

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

【0004】

特許文献1等を始めとして、様々な技術が従来から検討されているが、生産物の品質の予測精度が十分でないのが現状である。

20

【0005】

本開示は、このような状況を鑑みてなされたものであり、本開示の一実施形態が解決しようとする課題は、1つ以上の処理を含むプロセスにより得られる生産物の品質を高精度で予測する情報処理装置を提供することである。

本開示の他の実施形態が解決しようとする課題は、1つ以上の処理を含むプロセスにより得られる生産物の品質を高精度で予測する情報処理方法を提供することである。

本開示の他の実施形態が解決しようとする課題は、1つ以上の処理を含むプロセスにより得られる生産物の品質を高精度で予測する情報処理をコンピュータに実行させるためのプログラムを提供することである。

30

【課題を解決するための手段】

【0006】

本開示は、以下の態様を含む。

<1> 1つ以上の処理を含むプロセスにより得られる生産物の品質を予測する情報処理装置であって、

少なくとも1つのプロセッサを含み、プロセッサは、

プロセスの少なくとも1つの処理において、処理前と処理後との間の処理時間の経過の異なる2点で、被処理物と処理物の化学的情報及び物理的情報の少なくとも1つの情報の取得を行い、

上記情報から得られる数値の上記2点間の差分の算出値の取得を行い、

40

上記差分を説明変数、生産物の品質を目的変数とし、説明変数と目的変数との既知データセットに基づいて機械学習した学習済みモデルを用いて、上記算出値に基づいて生産物の品質の予測を行う、

情報処理装置。

<2> プロセッサは、プロセスの少なくとも1つの処理に対する処理条件の条件値の取得を行い、

説明変数が、上記差分に加えて処理条件を含み、

生産物の品質の予測において、上記算出値及び条件値に基づいて、生産物の品質の予測を行う、<1>に記載の情報処理装置。

<3> プロセッサは、上記情報の取得において、プロセスの少なくとも1つの処理にお

50

ける化学的情報として、分光スペクトルの取得を行う、＜１＞又は＜２＞に記載の情報処理装置。

＜４＞ プロセッサは、上記算出値の取得において、少なくとも１つの処理により変化する分光スペクトル中の特徴的な波数又は波数領域について、上記波数における強度又は上記波数領域における積分強度の算出値の取得を行う、＜３＞に記載の情報処理装置。

＜５＞ プロセッサは、上記波数又は上記波数領域を、量子化学計算に基づいて決定する、＜４＞に記載の情報処理装置。

＜６＞ 上記特徴的な波数又は波数領域は、副生成物に由来する波数又は波数領域を含む、＜４＞又は＜５＞に記載の情報処理装置。

＜７＞ プロセスの少なくとも１つの処理は、流路を用いたフロー処理であり、

10

プロセッサは、上記情報の取得において、フロー処理の物理的情報として、流れ場の状態量の取得を行う、＜１＞～＜６＞のいずれか１つに記載の情報処理装置。

＜８＞ プロセッサは、情報の取得において、数値流体解析により流れ場の状態量の取得を行う、＜７＞に記載の情報処理装置。

＜９＞ フロー処理が、複数の流体を混合する処理であり、

流れ場の状態量は、数値流体解析に基づいて算出した流体の混合率である、＜８＞に記載の情報処理装置。

＜１０＞ １つ以上の処理を含むプロセスにより得られる生産物の品質を予測する情報処理方法であって、

プロセスの少なくとも１つの処理において、処理前と処理後との間の処理時間の経過の異なる２点で、被処理物と処理物の化学的情報及び物理的情報の少なくとも１つの情報の取得を行うこと、

20

上記情報から得られる数値の上記２点間の差分の算出値の取得を行うこと、及び

上記差分を説明変数、生産物の品質を目的変数とし、説明変数と目的変数との既知データセットに基づいて機械学習した学習済みモデルを用いて、上記算出値に基づいて生産物の品質の予測を行うこと、

を含む、情報処理方法。

＜１１＞ １つ以上の処理を含むプロセスにより得られる生産物の品質を予測する情報処理をコンピュータに実行させるためのプログラムであって、

プロセスの少なくとも１つの処理において、処理前と処理後との間の処理時間の経過の異なる２点で、被処理物と処理物の化学的情報及び物理的情報の少なくとも１つの情報の取得を行うこと、

30

上記情報から得られる数値の上記２点間の差分の算出値の取得を行うこと、及び

上記差分を説明変数、生産物の品質を目的変数とし、説明変数と目的変数との既知データセットに基づいて機械学習した学習済みモデルを用いて、上記算出値に基づいて生産物の品質の予測を行うこと、

を含む、情報処理をコンピュータに実行させるためのプログラム。

【発明の効果】

【０００７】

本開示の一実施形態によれば、１つ以上の処理を含むプロセスにより得られる生産物の品質を高精度で予測する情報処理装置が提供される。

40

本開示の他の実施形態によれば、１つ以上の処理を含むプロセスにより得られる生産物の品質を高精度で予測する情報処理方法が提供される。

本開示の他の実施形態によれば、１つ以上の処理を含むプロセスにより得られる生産物の品質を高精度で予測する情報処理をコンピュータに実行させるためのプログラムが提供される。

【図面の簡単な説明】

【０００８】

【図１】図１は、１つの処理を含むプロセスを説明する図である。

【図２】図２は、複数の処理を含むプロセスを説明する図である。

50

【図 3】図 3 は、赤外分光スペクトルの一例を示す図である。

【図 4】図 4 は、数値流体解析により得られた流体の混合状態の一例を示す図である。

【図 5】図 5 は、数値流体解析により得られた流体の混合状態の一例を示す図である。

【図 6】図 6 は、情報処理装置、学習装置、フロー処理装置、情報取得装置、及び品質評価装置を例示する図である。

【図 7】図 7 は、フロー処理装置、情報取得装置、及び品質評価装置における処理の概要を例示する図である。

【図 8】図 8 は、情報処理装置及び学習装置における処理の概要を例示する図である。

【図 9】図 9 は、情報データ、算出値データ、及び品質データが共通の ID で関連付けられていることを例示する図である。

10

【図 10】図 10 は、T 字形状の合流部をもつ処理セクションを有するフロー処理装置を例示する図である。

【図 11】図 11 は、情報処理装置及び学習装置を構成するコンピュータを例示するブロック図である。

【図 12】図 12 は、学習装置の CPU の処理部を例示するブロック図である。

【図 13】図 13 は、学習部の詳細を例示する図である。

【図 14】図 14 は、情報処理装置の CPU の処理部を示すブロック図である。

【図 15】図 15 は、フロー処理装置と情報取得装置と品質評価装置における処理の概要を例示する図である。

【図 16】図 16 は、情報処理装置及び学習装置における処理の概要を例示する図である。

20

【図 17】図 17 は、情報データ、算出値データ、処理条件データ、及び品質データが共通の ID で関連付けられていることを例示する図である。

【図 18】図 18 は、学習装置の CPU の処理部を例示するブロック図である。

【図 19】図 19 は、学習部の詳細を例示する図である。

【図 20】図 20 は、情報処理装置の CPU の処理部を示すブロック図である。

【図 21】図 21 は、十字形状の合流部をもつ処理セクションを有するフロー処理装置を例示する図である。

【図 22】図 22 は、赤外分光スペクトルの情報データを示す表である。

【図 23】図 23 は、赤外分光スペクトルの情報データに基づいて取得した算出値データを示す表である。

30

【図 24】図 24 は、流れ場の状態量の情報データ及びそれに基づいて取得した算出値データを示す表である。

【図 25】図 25 は、処理条件データを示す表である。

【図 26】図 26 は、決定係数を示す表である。

【発明を実施するための形態】

【0009】

以下、本開示に係る情報処理装置、情報処理方法及びプログラムの詳細を説明する。

【0010】

本開示において、「A 及び / 又は B」は、「A 及び B のうちの少なくとも 1 つ」と同義である。つまり、「A 及び / 又は B」は、A だけであってもよいし、B だけであってもよいし、A 及び B の組み合わせであってもよい、という意味である。また、本明細書において、3 つ以上の事柄を「及び / 又は」で結び付けて表現する場合も、「A 及び / 又は B」と同様の考え方が適用される。

40

【0011】

以下の説明において参照する図面は、例示的、かつ、概略的に示されたものであり、本開示は、これらの図面に限定されない。同じ符号は、同じ構成要素を示す。また、図面の符号は省略することがある。

【0012】

< 情報処理装置 >

本開示に係る情報処理装置は、

50

1つ以上の処理を含むプロセスにより得られる生産物の品質を予測する情報処理装置であって、

少なくとも1つのプロセッサを含み、プロセッサは、

プロセスの少なくとも1つの処理において、処理前と処理後との間の処理時間の経過の異なる2点で、被処理物と処理物の化学的情報及び物理的情報の少なくとも1つの情報の取得（以下、単に「情報の取得」と呼ぶことがある）を行い、

上記情報から得られる数値の上記2点間の差分の算出値の取得（以下、単に「算出値の取得」と呼ぶことがある）を行い、

上記差分を説明変数、生産物の品質を目的変数とし、説明変数と目的変数との既知データセットに基づいて機械学習した学習済みモデルを用いて、上記算出値に基づいて生産物の品質の予測（以下、単に「品質の予測」と呼ぶことがある）を行う。

10

【0013】

特許文献1では、生産物の品質の予測のために、生産物から得られる分光スペクトルデータ等の物性データと、生産物の品質とに基づいて機械学習した学習済みモデルを用いている。しかし、このような手法では、生産物の品質の予測精度が低いことが懸念される。

【0014】

これに対して、本開示に係る情報処理装置は、生産物を生産するプロセス中の処理において、その処理の前後の処理時間の経過の異なる2点で、被処理物と処理物から化学的情報及び物理的情報の少なくとも1つを取得する。そして、本開示に係る情報処理装置は、取得した情報から得られた算出値と、生産物の品質とに基づいて機械学習した学習済みモデルを用いて、生産物の品質の予測を行う。これにより、生産物の品質を高精度で予測することができる。

20

【0015】

〔1つ以上の処理を含むプロセス〕

情報処理装置は、少なくとも1つのプロセッサを含み、1つ以上の処理を含むプロセスにより得られる生産物の品質を予測する。

【0016】

プロセスとしては、例えば、図1に示すように、出発物に1つの処理を施すことにより、生産物を得るものが挙げられる。また、図2に示すように、出発物に、第1処理から第n処理（nは、2以上の整数）を順次施して、生産物を得るプロセスが挙げられる。

30

出発物として、例えば、生産物の原料、生産物の中間体等が挙げられる。

【0017】

図2に示すようなプロセスは、各処理が連続して行われる連続プロセスであってよく、また、バッチ処理を含むものであってもよい。連続プロセスは、インラインで生産物の品質を予測しつつ、生産物の生産を行うことができるため、例えば、生産スピードを向上させ、かつ、品質管理も同時に行うことができるため好ましい。

【0018】

「処理」とは、処理に供した物に対して、化学的变化又は物理的变化のいずれか1つ以上を施す操作を意味する。

【0019】

処理として、化学的操作及び物理的操作が挙げられ、例えば、化学反応、加熱、冷却、混合、分離、生成、脱泡、圧縮、濃縮、除去、吸着、脱着、電気分解、還流、延伸、塗布、乾燥、膨潤、蒸発、凝縮、融解、凝固、昇華、溶解、再結晶、プラズマ処理、クロマトグラフィー等が挙げられる。

40

【0020】

複数の処理を同時に行うことで、これらの処理を1つの処理として扱ってよい。また、1つの処理が、実質的に複数の処理を伴うものであってよい。

【0021】

処理は、化学的操作及び物理的操作の一方に分類され得るが、例えば、加熱は、処理に供した物に対して熱を与えて物理的变化を施すと同時に、化学反応を進行させて化学的変

50

化を施す処理であり得る。そのため、処理については、必ずしも、化学的操作又は物理的操作の一方に分類することを要せずに、化学的操作及び物理的操作の両方に該当するものとして扱ってよい。また、処理により施される変化を、必ずしも、化学的变化及び物理的变化の一方に分類することも要せず、化学的变化及び物理的变化の両方に該当するものとして扱ってよい。

【 0 0 2 2 】

生産物は、1つであってよく、複数であってもよい。例えば、化学反応により複数の化合物が得られる場合、1つの化合物を生産物として品質を予測してよく、複数の化合物を生産物として品質を予測してもよい。

また、生産物の品質のうち、1つの品質を予測してよく、複数の品質を予測してもよい。

10

【 0 0 2 3 】

プロセスの具体例として、例えば、フロー処理を含むプロセスが挙げられる。より具体的には、複数の原料を混合する第1フロー処理と、混合した原料を加熱して重合させる第2フロー処理とを含むプロセス（以下、「ポリマー合成プロセス」と呼ぶことがある）が挙げられる。これにより、生産物として、ポリマーを得ることができる。

生産物（すなわち、ポリマー）の品質として、例えば、数平均分子量、重量平均分子量、分子量分散度、収率、純度、組成、表面官能基の割合等が挙げられる。

【 0 0 2 4 】

また、フロー処理を含むプロセスとして、例えば、タンパク質の精製（濃縮）が挙げられる。より具体的には、タンパク質を含むバッファー溶液をカラムに供給してクロマトグラフィーを行うフロー処理を含むプロセス（以下、「タンパク質精製プロセス」と呼ぶことがある）が挙げられる。これにより、生産物として、精製されたタンパク質を得ることができる。

20

生産物（すなわち、精製されたタンパク質）の品質として、例えば、タンパク質自体の濃度及純度、並びに精製されたタンパク質に含まれる凝集体、DNA、不純物等の濃度が挙げられる。

【 0 0 2 5 】

また、プロセスの具体例として、例えば、ロール to ロールでフィルムを巻き取りながら、フィルムに連続的処理を施す処理を含むプロセスが挙げられる。より具体的には、層形成材料をフィルムに塗布する処理を含むプロセス（以下、「層形成プロセス」と呼ぶことがある）が挙げられ、生産物として、層が形成されたフィルムを得ることができる。また、フィルムにプラズマ処理を施す処理を含むプロセス（以下、「表面改質プロセス」と呼ぶことがある）が挙げられ、生産物として、表面が改質されたフィルムを得ることができる。

30

生産物の品質（すなわち、層が形成されたフィルム、表面が改質されたフィルム）として、例えば、光学特性、表面粗さ、シワ、結晶度等が挙げられる。

また、層が形成されたフィルムの品質として、更に、例えば、塗布スジ、塗布ムラ、層の厚さ等が挙げられる。

【 0 0 2 6 】

プロセッサについては、詳細を後述する。

40

【 0 0 2 7 】

[情報の取得]

プロセッサは、プロセスの少なくとも1つの処理において、処理前と処理後との間の処理時間の経過の異なる2点で、被処理物と処理物の化学的情報及び物理的情報の少なくとも1つの情報（以下、「特定情報」と呼ぶことある）の取得を行う。

【 0 0 2 8 】

例えば、図1に示されるプロセスの処理では、処理前と処理後との間の処理時間の経過の異なる2点として、以下の4つのパターンが考えられる。a₁点→b₁点→c₁点→d₁点の時間順で処理が進行する。

（1）処理前のa₁点と、処理後のd₁点

50

- (2) 処理前の a_1 点と、処理中の b_1 点又は c_1 点
 - (3) 処理中の b_1 点と、処理中の c_1 点、
 - (4) 処理中の b_1 点又は c_1 点と、処理後の d_1 点
- 【 0 0 2 9 】

特定情報を取得するパターンは、1つであってよく、複数であってよい。また、1つのパターンにおいて、1つの特定情報を取得してよく、複数の特定情報を取得してもよい。

【 0 0 3 0 】

例えば、図 2 に示されるようにプロセスが複数の処理を含む場合、処理前と処理後との間の処理時間の経過の異なる 2 点は、各処理について、図 1 について上述したものと同様のパターンが考えられる。

【 0 0 3 1 】

処理に供する物について、処理が施されていないものを「被処理物」、処理が施されたものを「処理物」と呼ぶ。処理物が生産物であってよい。また、出発物が被処理物であってよい。

【 0 0 3 2 】

処理前の a_1 点、 a_2 点、 $\dots$ 、 a_n 点では、被処理物のみが存在する。

処理中の b_1 点、 b_2 点、 $\dots$ 、 b_n 点、及び処理中の c_1 点、 c_2 点、 $\dots$ 、 c_n 点では、被処理物と処理物とが混在し得る。

処理後の d_1 点、 d_2 点、 $\dots$ 、 d_n 点では、処理物が存在する。処理の進行の程度によつては、被処理物が残存し得る。

【 0 0 3 3 】

化学的情報として、例えば、分光スペクトル（例えば、赤外分光スペクトル、ラマン分光スペクトル、核磁気共鳴スペクトル等）、 pH 、濃度等が挙げられる。

【 0 0 3 4 】

物理的情報として、例えば、複数の流体の混合の度合い、導電率、温度、透過率、屈折率、濁度、画像、色、粘度、接触角、張力、流れ場の状態量等が挙げられる。

【 0 0 3 5 】

化学的情報及び物理的情報は、実測することにより取得してよく、シミュレーションすることにより取得してもよい。例えば、化学的情報である分光スペクトルについて、実測することにより取得してよく、量子化学計算により取得してよい。例えば、ポリスチレンについて、図 3 に示すような赤外分光スペクトルを得ることができる。また、シミュレーションにより得られる物理的情報としては、例えば、後述する流れ場の状態量が挙げられる。

【 0 0 3 6 】

プロセッサは、情報の取得において、プロセスの少なくとも 1 つの処理における化学的情報として、分光スペクトルの取得を行ってよい。分光スペクトルは、赤外分光分析、フーリエ変換赤外分光分析、ラマン分光分析、核磁気共鳴分光分析等で取得してよい。

【 0 0 3 7 】

プロセスの少なくとも 1 つの処理が、流路を用いたフロー処理である場合、プロセッサは、情報の取得において、フロー処理の物理的情報として、流れ場の状態量の取得を行ってよい。「流れ場の状態量」とは、流れ場内部の物質の性質によらずに、流れ場の状態を示す指標である。

【 0 0 3 8 】

流れ場の状態量として、例えば、混合状態（例えば、混合率、成分比、均一さ）、流速分布、滞留時間分布、レイノルズ数、乱流エネルギー、温度分布、圧力分布等が挙げられる。

【 0 0 3 9 】

プロセッサは、情報の取得において、数値流体解析により流れ場の状態量の取得を行ってよい。

【 0 0 4 0 】

10

20

30

40

50

フロー処理が、複数の流体を混合する処理である場合、流れ場の状態量は、数値流体解析に基づいて算出した流体の混合率であってよい。

ここでいう「混合率」は、複数の流体の体積基準での混合の程度を意味する。数値流体解析により、複数の流体の混合状態をシミュレーションし、各流体が混合せずに存在する領域と、少なくとも2つの流体が混合している領域（混合領域）とを画像化する。全領域の面積（すなわち、総面積）に対する、混合領域の面積の割合を混合率とする。

【0041】

例えば、2つの流体（流体1、流体2）の混合率について、数値流体解析により、これらの流体の混合状態をシミュレーションし、2つの流体が混合せずに存在する領域と、2つの流体が混合している領域（混合領域）とを画像化する。流体1を白色で表示し、流体2を黒色で表示し、更に、2つの流体が混合している領域（混合領域）を灰色で表示することにより、例えば、図4に示すように混合状態を画像化することができる。そして、全領域の面積に対する混合領域の面積から混合率を求めることができる。

10

また、図4に示される混合状態よりも更に混合が進行した状態をシミュレーションすると、例えば、図5に示されるような混合状態を画像化することができる。図5に示される混合状態では、流体1及び流体2は完全に混合しており、混合率は1である。

【0042】

数値流体解析は、一般的なシミュレーションソフト（オープンソース、市販ソフト等）を用いて行ってよい。解析条件としては、流体の流速、流体の流量、流体の圧力（解析領域の入口及び出口における境界条件として規定）、流体の濃度（流体の混合等の計算の際に、解析領域の入口での濃度を規定）、解析領域の形状（例えば、流体が流通する管の径、長さ等に相当）、流体の物性情報（粘度、動粘性係数、密度、拡散係数）、ポンプの圧力等が挙げられる。

20

【0043】

[算出値の取得]

プロセッサは、上記情報から得られる数値（以下、「情報値」と呼ぶことがある）の上記2点間の差分（以下、単に「差分」と呼ぶことがある）の算出値の取得を行う。以下、差分の算出値を単に「算出値」と呼ぶことがある。

【0044】

情報値として、例えば、分光スペクトルから得られる強度及び積分強度（例えば、ピーク強度及びピークにおける積分強度）、色度、画像の解析値（明度等）、その他、化学的情報及び物理的情報について上述した物性値が挙げられる。

30

【0045】

プロセッサは、算出値の取得において、少なくとも1つの処理により変化する分光スペクトル中の特徴的な波数又は波数領域について、上記波数における強度又は上記波数領域における積分強度の算出値の取得を行ってよい。

この態様において、プロセッサは、波数又は波数領域を、量子化学計算に基づいて決定してよい。これにより、目的とする波数を決定することができる。

【0046】

また、量子化学計算に基づいて波数又は波数領域を決定する場合、反応に関与すると考えられる波数又は波数領域を抽出することが容易である。そのため、反応への寄与が小さい（あるいは、無い）にも関わらず目的変数と相関している波数又は波数領域が、機械学習モデルに考慮される可能性を小さくすることができ、より高い精度で品質の予測を行うことが可能となり得る。

40

【0047】

上記のように特徴的な波数又は波数領域について、上記波数における強度又は上記波数領域における積分強度の算出値の取得を行う態様において、スパースモデリングにより、複数の波数の中から、予測精度への寄与率が高い波数を抽出してよい。

【0048】

上記態様において、特徴的な波数又は波数領域は、副生成物に由来する波数又は波数領

50

域を含んでよい。副生成物の生成及び生成量が特徴的な化学反応の場合、副生成物に由来する波数又は波数領域を特徴的な波数又は波数領域として選択することにより、より高い精度で品質の予測を行うことが可能となり得る。

【 0 0 4 9 】

例えば、図 3 に示されるポリスチレンの赤外分光スペクトルにおいて、特徴的な波数を量子化学計算により決定し、決定した波数に対応するピーク A ～ピーク N のピーク強度を求めることができる。ピーク A ～ピーク C は芳香環 C - H 伸縮、ピーク D 及びピーク E は脂肪族 C - H 伸縮、ピーク F ～ピーク I は芳香環モノ置換体、ピーク J 及びピーク K は芳香環 C = C 伸縮、ピーク L は C - H 変角、ピーク M は C - H 面外変角、ピーク N は芳香環変角に由来する。また、各ピークは、生成物であるポリスチレンに加えて、副生成物、及び未反応の反応物に由来するピーク成分も含み得る。

10

【 0 0 5 0 】

[品質の予測]

プロセッサは、差分を説明変数、生産物の品質を目的変数とし、説明変数と目的変数との既知データセットに基づいて機械学習した学習済みモデルを用いて、上記算出値に基づいて生産物の品質の予測を行う。

【 0 0 5 1 】

学習済みモデルについては、詳細を後述する。

【 0 0 5 2 】

[条件値の取得]

20

プロセッサは、プロセスの少なくとも 1 つの処理に対する処理条件の条件値の取得（以下、単に「条件値の取得」と呼ぶことがある）を行ってよい。この態様において、説明変数は、差分に加えて処理条件を含み、品質の予測において、算出値及び条件値に基づいて、生産物の品質の予測を行う。これにより、より高い精度で品質の予測を行うことが可能となり得る。

【 0 0 5 3 】

条件値として、例えば、フロー処理の場合、流体の流速、流体の濃度、流体が流通する管の径及び長さ、反応温度、流体の粘度、ポンプの圧力等が挙げられる。

【 0 0 5 4 】

条件値は、実測値であってよく、設定値であってもよい。

30

【 0 0 5 5 】

[ポリマー合成プロセスの例]

上記のポリマー合成プロセスを例にして説明する。複数の原料を混合する第 1 フロー処理において、処理前の a₁ 点では、複数の原料（被処理物）が存在する。

第 1 フロー処理中の b₁ 点及び c₁ 点において、複数の原料の一部が混合している。すなわち、混合していない原料（被処理物）と、混合した原料（処理物）とが混在している。b₁ 点及び c₁ 点において、混合率は異なり得る。

第 1 フロー処理後の d₁ 点において、混合した原料（処理物）が存在する。

【 0 0 5 6 】

例えば、第 1 フロー処理中の b₁ 点、及び第 1 フロー処理中の c₁ 点で、混合率を取得してよい（情報の取得）。混合率から得られる数値、例えば、混合率そのものから、上記 2 点間の差分の算出値の取得を行う（算出値の取得）。

40

【 0 0 5 7 】

混合した原料を加熱して重合させる第 2 フロー処理において、処理前の a₂ 点では、混合した原料（被処理物）が存在する。

第 2 フロー処理中の b₂ 点、及び第 2 フロー処理中の c₂ 点において、混合した原料（被処理物）の一部が重合して、ポリマー（処理物、かつ、生産物）が生成する。b₂ 点及び c₂ 点において、重合の進行の程度は異なり得る。

第 2 フロー処理後の d₂ 点において、ポリマー（処理物、かつ、生産物）が存在する。

【 0 0 5 8 】

50

例えば、第2フロー処理前の a_2 点、及び第2フロー処理後の d_2 点で、赤外分光スペクトルを取得してよい（情報の取得）。赤外分光スペクトルから得られる数値、例えば、ピークにおける積分強度から、上記2点間の差分の算出値の取得を行う（算出値の取得）。

【0059】

例えば、生産物（ポリマー）の品質として、数平均分子量を選択してよい。

【0060】

混合率から得られた差分、及びピークにおける積分強度から得られた差分の少なくとも1つを説明変数、数平均分子量を目的変数として、説明変数と目的変数との既知データセットに基づいて機械学習した学習済みモデルを構築する。学習済みモデルを用いて、算出値に基づいて、ポリマーの数平均分子量の予測を行う（品質の予測）。

10

【0061】

第1フロー処理の処理条件として、例えば、原料の流速、原料の濃度、流体が流通する管の径及び長さが挙げられ、第2フロー処理の処理条件として、反応温度が挙げられる。これらを処理条件の条件値として取得してよい（条件値の取得）。

【0062】

処理条件の条件値を取得した場合、上記差分の少なくとも1つと処理条件とを説明変数、数平均分子量を目的変数として、説明変数と目的変数との既知データセットに基づいて機械学習した学習済みモデルを構築する。学習済みモデルを用いて、算出値及び条件値に基づいて、ポリマーの数平均分子量の予測を行う（品質の予測）。

【0063】

20

[タンパク質精製プロセスの例]

上記のタンパク質精製プロセスを例にして説明する。タンパク質を含むバッファー溶液をカラムに供給してクロマトグラフィーを行うフロー処理において、処理前の a_1 点では、未処理のバッファー溶液（被処理物）が存在する。

フロー処理中の b_1 点、及びフロー処理中の c_1 点において、バッファー溶液の一部から不純物が分離する。

フロー処理後の d_1 点において、不純物が少ない精製されたタンパク質を含むバッファー溶液（処理物）が存在する。

【0064】

例えば、フロー処理前の a_1 点、及びフロー処理後の d_1 点で、分光スペクトルを取得してよい（情報の取得）。分光スペクトルから得られる数値、例えば、ピークにおける積分強度から、上記2点間の差分の算出値の取得を行う（算出値の取得）。

30

【0065】

例えば、生産物（精製されたタンパク質）の品質として、純度を選択してよい。

【0066】

差分を説明変数、純度を目的変数として、説明変数と目的変数との既知データセットに基づいて機械学習した学習済みモデルを構築する。学習済みモデルを用いて、算出値に基づいて、精製されたタンパク質の純度の予測を行う（品質の予測）。

【0067】

フロー処理の処理条件として、例えば、ポンプの圧力が挙げられる。これを処理条件の条件値として取得してよい（条件値の取得）。

40

【0068】

処理条件の条件値を取得した場合、差分及び処理条件を説明変数、純度を目的変数として、説明変数と目的変数との既知データセットに基づいて機械学習した学習済みモデルを構築する。学習済みモデルを用いて、算出値及び条件値に基づいて、精製されたタンパク質の純度の予測を行う（品質の予測）。

【0069】

[層形成プロセス]

上記の層形成プロセスを例にして説明する。層形成材料をフィルムに塗布する処理において、処理前の a_1 点では、層形成材料が未塗布のフィルム（被処理物）が存在する。

50

処理中の b_1 点、及び処理中の c_1 点において、フィルムの一部に層が形成されている。
処理後の d_1 点において、全体に層が形成されたフィルム（処理物）が存在する。

【0070】

例えば、処理中の b_1 点、及び処理中の c_1 点で、透過率を取得してよい（情報の取得）。透過率から得られる数値、例えば、透過率そのものから、上記2点間の差分の算出値の取得を行う（算出値の取得）。この場合、例えば、生産物（層が形成されたフィルム）の品質として、層の厚さを選択してよい。

【0071】

差分を説明変数、層の厚さを目的変数として、説明変数と目的変数との既知データセットに基づいて機械学習した学習済みモデルを構築する。学習済みモデルを用いて、算出値に基づいて、層が形成されたフィルムにおける層の厚さの予測を行う（品質の予測）。

10

【0072】

また、例えば、処理中の b_1 点、及び処理中の c_1 点で、フィルムの張力を取得してよい（情報の取得）。張力から得られる数値、例えば、張力そのものから、上記2点間の差分の算出値の取得を行う（算出値の取得）。この場合、例えば、生産物（層が形成されたフィルム）の品質として、シワの有無を選択してよい。

【0073】

差分を説明変数、シワの有無を目的変数として、説明変数と目的変数との既知データセットに基づいて機械学習した学習済みモデルを構築する。学習済みモデルを用いて、算出値に基づいて、層が形成されたフィルムのシワの有無の予測を行う（品質の予測）。

20

【0074】

[表面改質プロセス]

表面改質プロセスを例にして説明する。フィルムにプラズマ処理を施す処理において、処理前の a_1 点では、プラズマ処理が施されていないフィルム（被処理物）が存在する。

処理中の b_1 点、及び処理中の c_1 点において、フィルムの一部にプラズマ処理が施されている。

処理後の d_1 点において、全体にプラズマ処理が施されたフィルム（処理物）が存在する。

【0075】

例えば、処理中の b_1 点、及び処理中の c_1 点で、温度を取得してよい（情報の取得）。温度から得られる数値、例えば、温度そのものから、上記2点間の差分の算出値の取得を行う（算出値の取得）。

30

【0076】

例えば、生産物（プラズマ処理が施されたフィルム）の品質として、接触角を選択してよい。

【0077】

差分を説明変数、接触角を目的変数として、説明変数と目的変数との既知データセットに基づいて機械学習した学習済みモデルを構築する。学習済みモデルを用いて、算出値に基づいて、プラズマ処理が施されたフィルムの接触角の予測を行う（品質の予測）。

【0078】

40

以下、ポリマー合成プロセスを例とし、第1実施形態及び第2実施形態を挙げて、本開示に係る情報処理装置についてより詳細に説明する。

【0079】

[第1実施形態]

図6において、情報処理装置11は、学習済みモデルを構築する学習装置10と、ネットワーク12を介して相互に通信可能に接続されている。学習装置10及び情報処理装置11は、例えばデスクトップ型のパーソナルコンピュータである。ネットワーク12は、例えば、LAN (Local Area Network)、又はインターネット、公衆通信網等のWAN (Wide Area Network) である。ネットワーク12には、フロー処理装置13、情報取得装置14、及び品質評価装置15も接続されている。

50

【 0 0 8 0 】

図 7 において、フロー処理装置 1 3 は、フロー処理を含むプロセスにより、処理条件データ P C D にしたがって、原料 R M から生産物 P R を生産する。情報取得装置 1 4 は、プロセスの少なくとも 1 つの処理において、処理前と処理後との間の処理時間の経過の異なる 2 点で、特定情報を取得し、取得した情報データ I F D を出力する。品質評価装置 1 5 は、生産物 P R の品質を評価し、その評価結果である品質データ Q D を出力する。情報取得装置 1 4 から情報データ I F D が、品質評価装置 1 5 から品質データ Q D が、それぞれ学習装置 1 0 に送信される。

【 0 0 8 1 】

図 8 において、学習装置 1 0 は、情報取得装置 1 4 からの情報データ I F D、及び品質評価装置 1 5 からの品質データ Q D を取得する。学習装置 1 0 は、情報データ I F D から差分の算出値データ（以下、算出値データと略す）C D を導出する。算出値データ C D を学習用入力データ I D L とする。情報データ I F D、情報データ I F D から導出された算出値データ C D、及び品質データ Q D は、図 9 に示すように、1 つの生産物 P R に対して付された共通の I D (I d e n t i f i c a t i o n D a t a) で関連付けられている。算出値データ C D、及び品質データ Q D は、既知データセットを構成する。

10

【 0 0 8 2 】

学習装置 1 0 は機械学習モデル M を有する。機械学習モデル M は、生産物 P R の品質を予測するためのモデルである。機械学習モデル M は、学習用入力データ I D L に応じた学習用出力データ O D L を出力する。

20

【 0 0 8 3 】

機械学習モデル M 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、回帰木、アンサンブル法、バギング法、ブースティング法、勾配ブースティング法等を用いたものがある。また、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、確率的ニューラルネットワーク等を用いたものがある。上記で例示したうちのいずれの機械学習モデル M を用いるかは特に制限はなく、任意の手法の機械学習モデル M を選択することができる。

【 0 0 8 4 】

アンサンブル法としては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、周知のように、ランダムサンプリングされた学習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及び平均させることで予測の精度の向上を図る。この場合の機械学習モデル M の制御パラメータとしては、選択する説明変数の数や決定木の分岐数がある。

30

【 0 0 8 5 】

ディープニューラルネットワークは、比較的制御パラメータの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予測性能を発揮することができる。制御パラメータとしては、ネットワークのレイヤー数やノード数、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、学習率等がある。

【 0 0 8 6 】

こうした機械学習モデル M 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、Tensorflow、CNTK (C o g n i t i v e T o o l k i t)、Theano、Caffe、mxnet、Keras、PyTorch、Chainer、Scikit-learn、Caret、MATLAB 等から選択することができる。

40

【 0 0 8 7 】

品質データ Q D は、学習用出力データ O D L とのいわば答え合わせを行うためのデータである。機械学習モデル M の予測の精度が高いほど、品質データ Q D と学習用出力データ O D L との差異は小さくなる。このため、学習装置 1 0 は、学習用出力データ O D L と、学習用入力データ I D L と同じ I D が付された品質データ Q D とを比較し、機械学習モデ

50

ルMの予測の精度を評価する。そして、この評価結果に応じて、機械学習モデルMを更新する。学習装置10は、学習用入力データIDLの機械学習モデルMへの入力と学習用出力データODLの機械学習モデルMからの出力、機械学習モデルMの予測の精度の評価、及び機械学習モデルMの更新を、学習用入力データIDL及び品質データQDを変更しつつ行う。そして、これら一連の処理を、機械学習モデルMの予測の精度が予め設定されたレベルとなるまで繰り返す。学習装置10は、予測の精度が予め設定されたレベルとなった機械学習モデルMを、実際の運用に供する学習済みモデルTMとして情報処理装置11に送信する。

【0088】

情報処理装置11は、学習装置10からの学習済みモデルTMを受信する。情報処理装置11は、品質が未知の生産物PRの算出値データである予測用算出値データCDFを学習済みモデルTMに与える。予測用算出値データCDFは、算出値データCDと同様にして、品質が未知の生産物PRの情報データIFDである予測用情報データIFDFから導出したデータである。学習済みモデルTMは、予測用算出値データCDFに応じた品質予測データQFDを出力する。

【0089】

第1実施形態においては、フロー処理装置13は、生産物PRであるポリスチレンのアニオン重合反応を、流路を用いた2つのフロー処理（第1フロー処理、第2フロー処理）を含むプロセスにより行う。

【0090】

第1フロー処理は、第1原料RM1（ポリスチリルリチウムを溶媒に溶解した溶液）と、第2原料RM2（メタノール水溶液）とを混合する処理であり、第1原料RM1と第2原料RM2との混合物（以下、「原料混合物」と呼ぶことがある）を得る。第2フロー処理は、原料混合物をアニオン重合反応させる処理であり、生産物PRであるポリスチレンを得る。

【0091】

ポリスチリルリチウムは、アニオン重合反応により生産物PRであるポリスチレンを生成する。溶媒にはテトラヒドロフランが用いられる。また、溶液にはトルエン及びヘキサンが少量混合されている。なお、フロー処理の原料は、第1原料RM1のようにポリスチリルリチウム等の反応物と他の物質との混合物であってもよいし、反応物のみで構成されていてもよい。

また、メタノールはアニオン重合反応の停止剤として用いられる。

【0092】

図10において、フロー処理装置13は、第1原料供給部20、第2原料供給部21、処理セクション22、温度調節部23、回収廃棄セクション24、設定部25、システムコントローラ26等を備えている。

【0093】

第1原料供給部20は、処理セクション22の上流側端部と、図示しない配管で接続されている。第1原料供給部20は、第1原料RM1を処理セクション22に供給する。第1原料供給部20は、第1原料RM1を処理セクション22に送り出すためのポンプを有している。このポンプの回転数を制御することにより、第1原料供給部20から処理セクション22に送り出される第1原料RM1の流量が調節される。

【0094】

第2原料供給部21は、第1原料供給部20と同じく、処理セクション22の上流側端部と、図示しない配管で接続されている。第2原料供給部21は、第2原料RM2を処理セクション22に供給する。第2原料供給部21も、第1原料供給部20と同じく、第2原料RM2を処理セクション22に送り出すためのポンプを有している。このポンプの回転数を制御することにより、第2原料供給部21から処理セクション22に送り出される第2原料RM2の流量が調節される。

【0095】

10

20

30

40

50

処理セクション 22 は、第 1 フロー処理（混合する処理）、及び第 2 フロー処理（アニオン重合反応させる処理）を行うためのセクションである。処理セクション 22 は、合流部 30 と反応部 31 とを有する。第 1 フロー処理は、合流部 30 で行われ、また、第 2 フロー処理は、反応部 31 で行われる。

【0096】

合流部 30 は、第 1 管部 32、第 2 管部 33、及び第 3 管部 34 で構成される。第 1 管部 32 と第 2 管部 33 は直線状に繋がっており、第 3 管部 34 は第 1 管部 32 及び第 2 管部 33 と直角に交差している。すなわち合流部 30 は T 字形状をしている。

【0097】

第 1 管部 32 は第 1 原料供給部 20 に、第 2 管部 33 は第 2 原料供給部 21 に、それぞれ接続されている。また、第 3 管部 34 は、反応部 31 に接続されている。第 1 管部 32 には第 1 原料供給部 20 から第 1 原料 RM1 が、第 2 管部 33 には第 2 原料供給部 21 から第 2 原料 RM2 が、それぞれ供給される。そして、第 1 原料 RM1 及び第 2 原料 RM2 は、第 3 管部 34 において合流し、混合された状態で反応部 31 に送り出される。

10

【0098】

第 1 管部 32 には、第 1 管部 32 を通過する第 1 原料 RM1 の流速を検出する第 1 流速センサ 35 が設けられている。また、第 2 管部 33 には、第 2 管部 33 を通過する第 2 原料 RM2 の流速を検出する第 2 流速センサ 36 が設けられている。更に、第 3 管部 34 には、第 3 管部 34 を通過する原料混合物の流速を検出する第 3 流速センサ 37 が設けられている。

20

【0099】

反応部 31 は、複数本の同じ内径の直管を直線状に繋げた細長い管である。反応部 31 は、繋げる直管の本数及び / 又は直管の長さを変えることで、長さ L を変更可能である。また、反応部 31 は、繋げる直管の内径を変えることで、内径 ϕ を変更可能である。

【0100】

反応部 31 の内部は、原料混合物が流れる流路であり、第 2 フロー処理を行う場である。原料混合物が反応部 31 を通過することで、アニオン重合反応が進行し、ポリスチレン溶液が得られる。合流部 30 の第 3 管部 34 においても第 2 フロー処理は若干進行し得るが、反応部 31 の長さ L に対して第 3 管部 34 の長さは非常に短い。このため、第 3 管部 34 は無視し、反応部 31 の長さ L を、第 2 フロー処理を行う場の長さである反応路長と見なす。同様に、反応部 31 の内径 ϕ を、第 2 フロー処理を行う場の径である反応路径と見なす。

30

【0101】

温度調節部 23 は、加熱器及び / 又は冷却器を含み、反応部 31 の内部の温度（以下、反応温度という）を調節する。反応部 31 の下流側端部には、反応温度を検出する温度センサ 38 が設けられている。

【0102】

回収廃棄セクション 24 は、生産物 PR であるポリスチレンを回収し、かつ反応が失敗した廃棄物を廃棄するセクションである。回収廃棄セクション 24 は、回収部 40 と廃棄部 41 とを有する。回収部 40 と廃棄部 41 とは、反応部 31 の下流側端部と三方弁 42 で接続されている。この三方弁 42 により、反応部 31 と回収部 40 とを接続する回収ラインと、反応部 31 と廃棄部 41 とを接続する廃棄ラインとの切り替えが可能である。

40

【0103】

回収部 40 は、ポリスチレン溶液からポリスチレンを析出させる。回収部 40 は、析出させたポリスチレンを溶液からろ過して採取する。そして、採取したポリスチレンを乾燥させる。より詳しくは、回収部 40 は、攪拌機を備えた容器を有し、上記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ポリスチレン溶液を混入することで、ポリスチレンを析出させる。また、回収部 40 は、減圧機能付きの恒温槽をもち、恒温槽内部を減圧状態にして加熱することで、メタノールを乾燥させる。

【0104】

50

廃棄部 4 1 は、廃棄物を貯留するタンクである。ここで廃棄物とは、第 1 原料 R M 1 の流速、第 2 原料 R M 2 の流速、原料混合物の流速、反応温度等が何らかの要因で乱され、当初予定していた処理条件にて生産できなかった場合に、反応部 3 1 から送り出されたものである。

【 0 1 0 5 】

設定部 2 5 は、フロー処理装置 1 3 のオペレータによる生産物 P R の処理条件の設定を受け付ける。この設定部 2 5 で受け付けられた処理条件が、処理条件データ P C D としてシステムコントローラ 2 6 に登録される。

【 0 1 0 6 】

システムコントローラ 2 6 は、フロー処理装置 1 3 の全体の動作を統括的に制御する。システムコントローラ 2 6 は、第 1 原料供給部 2 0、第 2 原料供給部 2 1、温度調節部 2 3、第 1 流速センサ 3 5、第 2 流速センサ 3 6、第 3 流速センサ 3 7、温度センサ 3 8、及び三方弁 4 2 と接続されている。

10

【 0 1 0 7 】

システムコントローラ 2 6 は、第 1 流速センサ 3 5 が検出した第 1 原料 R M 1 の流速に応じて、第 1 原料供給部 2 0 のポンプの回転数を制御し、第 1 原料 R M 1 の流量を調節する。同様に、システムコントローラ 2 6 は、第 2 流速センサ 3 6 が検出した第 2 原料 R M 2 の流速に応じて、第 2 原料供給部 2 1 のポンプの回転数を制御し、第 2 原料 R M 2 の流量を調節する。また、システムコントローラ 2 6 は、温度センサ 3 8 が検出した反応温度に応じて、温度調節部 2 3 を駆動させる。更に、システムコントローラ 2 6 は、三方弁 4 2 を制御して、前述の回収ラインと廃棄ラインとを切り替える。

20

【 0 1 0 8 】

処理条件データ P C D として、例えば、第 1 原料 R M 1 の濃度（単位：m o l / l ）及び流速（単位：m l / m i n ）、第 2 原料 R M 2 の濃度（単位：m o l / l ）及び流速（単位：m l / m i n ）、反応経路 ϕ （単位：m m ）、反応路長 L（単位：m ）、及び反応温度（単位： ）が挙げられる。

【 0 1 0 9 】

システムコントローラ 2 6 は、例えば、第 1 流速センサ 3 5 が検出した第 1 原料 R M 1 の流速が、処理条件データ P C D に登録された第 1 原料 R M 1 の流速と一致するよう、第 1 原料供給部 2 0 のポンプの回転数を制御して第 1 原料 R M 1 の流量を調節する。同様に、システムコントローラ 2 6 は、例えば、第 2 流速センサ 3 6 が検出した第 2 原料 R M 2 の流速が、処理条件データ P C D に登録された第 2 原料 R M 2 の流速と一致するよう、第 2 原料供給部 2 1 のポンプの回転数を制御して第 2 原料 R M 2 の流量を調節する。

30

【 0 1 1 0 】

また、システムコントローラ 2 6 は、温度センサ 3 8 が検出した反応温度が、処理条件データ P C D に登録された反応温度と一致するよう、温度調節部 2 3 を駆動させる。

【 0 1 1 1 】

システムコントローラ 2 6 は、第 1 流速センサ 3 5、第 2 流速センサ 3 6、及び温度センサ 3 8（また、後述する第 1 流速センサ 5 1、第 2 流速センサ 5 2、及び第 3 温度センサ 5 3）で検出した各値と、処理条件データ P C D に登録された各値との乖離が、予め設定された範囲を超えた場合、三方弁 4 2 を制御して廃棄ラインに切り替え、廃棄物を廃棄部 4 1 に導く。なお、反応が失敗して廃棄物が出た場合は、当然ながら情報データ I F D 及び品質データ Q D は出力されない。このため、廃棄物が出た場合の処理条件データ P C D は、学習装置 1 0 には送信されずに破棄される。

40

【 0 1 1 2 】

情報取得装置 1 4 は、第 1 フロー処理及び第 2 フロー処理の少なくとも 1 つの処理において、処理前と処理後との間の処理時間の経過の異なる 2 点で、特定情報（すなわち、被処理物と処理物の化学的情報及び物理的情報の少なくとも 1 つの情報）を取得し、取得した情報データ I F D を出力する。

【 0 1 1 3 】

50

また、情報取得装置 14 は、例えば、第 1 フロー処理において、処理前と処理後との間の処理時間の経過の異なる 2 点、すなわち、図 10 に示される第 1 管部 32 の b_1 点及び第 3 管部 34 の d_1 点で、特定情報を取得してよい。特定情報は、例えば、流れ場の状態量（物理的情報）であってよい。

【0114】

情報取得装置 14 は、例えば、第 2 フロー処理において、処理前と処理後との間の処理時間の経過の異なる 2 点、すなわち、図 10 に示される反応部 31 の a_2 点及び d_2 点で、特定情報を取得してよい。特定情報は、例えば、赤外分光スペクトル（化学的情報）であってよい。

【0115】

品質評価装置 15 は、品質データ QD として、例えば、生産物 PR の数平均分子量を出力してよい。

【0116】

図 11 において、学習装置 10 及び情報処理装置 11（以下、これらを合わせて「情報処理装置等」と呼ぶことがある）を構成するコンピュータは、基本的な構成は同じであり、ストレージデバイス 60、メモリ 61、CPU（Central Processing Unit、プロセッサ）62、通信部 63、ディスプレイ 64、及び入力デバイス 65 を備えている。これらはバスライン 66 を介して相互接続されている。

【0117】

ストレージデバイス 60 は、情報処理装置 11 等を構成するコンピュータに内蔵、又はケーブル、ネットワークを通じて接続されたハードディスクドライブである。又はストレージデバイス 60 は、ハードディスクドライブを複数台連装したディスクアレイである。ストレージデバイス 60 には、オペレーティングシステム等の制御プログラム、各種アプリケーションプログラム、及びこれらのプログラムに付随する各種データ等が記憶されている。なお、ハードディスクドライブに代えて、あるいは加えて、ソリッドステートドライブを用いてもよい。

【0118】

メモリ 61 は、CPU 62 が処理を実行するためのワークメモリである。CPU 62 は、ストレージデバイス 60 に記憶されたプログラムをメモリ 61 へロードして、プログラムにしたがった処理を実行することにより、コンピュータの各部を統括的に制御する。

【0119】

通信部 63 は、ネットワーク 12 を介した各種情報の伝送制御を行うネットワークインターフェースである。ディスプレイ 64 は各種画面を表示する。学習装置 10 等を構成するコンピュータは、各種画面を通じて、入力デバイス 65 からの操作指示の入力を受け付ける。入力デバイス 65 は、キーボード、マウス、タッチパネル等である。

【0120】

なお、以下の説明では、学習装置 10 の各部に添え字の「A」を、情報処理装置 11 の各部に添え字の「B」を、それぞれ付して区別する。

【0121】

図 12 において、学習装置 10 のストレージデバイス 60 A には、第 1 作動プログラム 70 が記憶されている。第 1 作動プログラム 70 は、コンピュータを学習装置 10 として機能させるためのアプリケーションプログラムである。

【0122】

ストレージデバイス 60 A には、情報取得装置 14 からの情報データ IFD、及び品質評価装置 15 からの品質データ QD も記憶される。情報データ IFD から導出された算出値データ CD、及び機械学習モデル M も記憶される。情報データ IFD、算出値データ CD、及び品質データ QD のセットは、複数記憶されている。

【0123】

第 1 作動プログラム 70 が起動されると、学習装置 10 を構成するコンピュータの CPU 62 A は、メモリ 61 等と協働して、第 1 リードライト（以下、RW（Read Wr

10

20

30

40

50

i t e) と略す) 制御部 75、第1導出部 76、学習部 77、及び送信制御部 78として機能する。

【0124】

第1RW制御部 75は、ストレージデバイス 60A内の各種データの読み出し、及びストレージデバイス 60Aへの各種データの記憶を制御する。第1RW制御部 75は、ストレージデバイス 60Aから情報データ I F Dを読み出し、情報データ I F Dを第1導出部 76に出力する。また、第1RW制御部 75は、第1導出部 76からの算出値データ C Dをストレージデバイス 60Aに記憶する。情報データ I F Dが分光スペクトルである場合、第1導出部 76は、ピークの波数又は波数領域を量子化学計算に基づいて決定してよい。その際、スパースモデリングにより、複数の波数の中から、予測精度への寄与率が高い波数を抽出してよい。

10

【0125】

第1RW制御部 75は、ストレージデバイス 60Aから算出値データ C D、及び品質データ Q Dを読み出し、これらを学習部 77に出力する。また、第1RW制御部 75は、ストレージデバイス 60Aから機械学習モデル Mを読み出し、機械学習モデル Mを学習部 77及び送信制御部 78のいずれかに出力する。また、第1RW制御部 75は、学習部 77からの機械学習モデル Mをストレージデバイス 60Aに記憶する。

【0126】

第1導出部 76は、第1RW制御部 75からの情報データ I F Dを受け取る。第1導出部 76は、情報データ I F Dから算出値データ C Dを導出する。第1導出部 76は、導出した算出値データ C Dに情報データ I F Dと同じ I Dを付し、算出値データ C Dを第1RW制御部 75に出力する。第1導出部 76は、情報取得装置 14から新たな情報データ I F Dが送信される度に、算出値データ C Dの導出を行う。

20

【0127】

学習部 77は、第1RW制御部 75からの学習用入力データ I D L、品質データ Q D、及び機械学習モデル Mを受け取る。学習部 77は、学習用入力データ I D Lを機械学習モデル Mに与えて学習させ、学習済みモデル T Mを出力する。

【0128】

送信制御部 78は、第1RW制御部 75からの機械学習モデル Mを受け取る。送信制御部 78が第1RW制御部 75から受け取る機械学習モデル Mは、学習済みモデル T Mである。送信制御部 78は、学習済みモデル T Mを情報処理装置 11に送信する制御を行う。

30

【0129】

図 13に示すように、学習部 77は、第1処理部 85、評価部 86、及び更新部 87を有する。第1処理部 85は、学習用入力データ I D L (算出値データ C D)を機械学習モデル Mに与えて、機械学習モデル Mから学習用出力データ O D Lを出力させる。学習用出力データ O D Lは、品質データ Q Dと同じく、例えば、数平均分子量である。第1処理部 85は、学習用出力データ O D Lを評価部 86に出力する。

【0130】

評価部 86は、第1処理部 85からの学習用出力データ O D Lを受け取る。評価部 86は、学習用出力データ O D Lと品質データ Q Dとを比較し、機械学習モデル Mの予測の精度を評価する。評価部 86は、評価結果を更新部 87に出力する。

40

【0131】

評価部 86は、例えば、損失関数を用いて機械学習モデル Mの予測の精度を評価する。損失関数は、学習用出力データ O D Lと品質データ Q Dとの差異の程度を表す関数である。損失関数の算出値が 0に近いほど、機械学習モデル Mの予測の精度が高いことを示す。

【0132】

更新部 87は、評価部 86からの評価結果に応じて、機械学習モデル Mを更新する。例えば、更新部 87は、学習係数を伴う確率的勾配降下法等により、機械学習モデル Mの各種パラメータの値を変化させる。学習係数は、機械学習モデル Mの各種パラメータの値の変化幅を示す。すなわち、学習係数が比較的大きい値であるほど、各種パラメータの値の

50

変化幅は大きくなり、機械学習モデルMの更新度合いも大きくなる。

【0133】

これら第1処理部85による機械学習モデルMへの学習用入力データIDLの入力と評価部86への学習用出力データODLの出力、評価部86による予測の精度の評価、及び更新部87による機械学習モデルMの更新は、予測の精度が予め設定されたレベルとなるまで、繰り返し続けられる。予測の精度が予め設定されたレベルに達した機械学習モデルMは、学習済みモデルTMとして、第1RW制御部75によりストレージデバイス60Aに記憶される。

【0134】

図14において、情報処理装置11のストレージデバイス60Bには、第2作動プログラム110が記憶されている。第2作動プログラム110は、コンピュータを情報処理装置11として機能させるためのアプリケーションプログラムである。

【0135】

ストレージデバイス60Bには、学習装置10からの学習済みモデルTM、情報取得装置14からの予測用情報データIFDFも記憶される。また、ストレージデバイス60Bには、予測用情報データIFDFは、品質が未知で、これから学習済みモデルTMを用いて品質を予測する生産物PRの情報データである。

【0136】

また、ストレージデバイス60Bには、予測用情報データIFDFから導出された予測用算出値データCDFも記憶される。

【0137】

第2作動プログラム110が起動されると、情報処理装置11を構成するコンピュータのCPU62Bは、メモリ61等と協働して、第2RW制御部115、第2導出部116、第2処理部117、及び表示制御部118として機能する。

【0138】

第2RW制御部115は、学習装置10の第1RW制御部75と同様、ストレージデバイス60B内の各種データの読み出し、及びストレージデバイス60Bへの各種データの記憶を制御する。第2RW制御部115は、ストレージデバイス60Bから予測用情報データIFDFを読み出し（情報の取得）、予測用情報データIFDFを第2導出部116に出力する。また、第2RW制御部115は、第2導出部116からの予測用算出値データCDFをストレージデバイス60Bに記憶する。予測用情報データIFDFが分光スペクトルである場合、第2導出部116は、ピークの波数を量子化学計算に基づいて決定してよい。その際、スパースモデリングにより、複数のピークの中から、予測精度への寄与率が高いピークを抽出してよい。

【0139】

第2RW制御部115は、ストレージデバイス60Bから学習済みモデルTMを読み出し、学習済みモデルTMを第2処理部117に出力する。第2RW制御部115は、学習済みモデルTMをストレージデバイス60Bから読み出すことで、学習済みモデルTMを取得していることになる。

【0140】

第2RW制御部115は、ストレージデバイス60Bから予測用算出値データCDFを読み出し（算出値の取得）、これらを第2処理部117に出力する。第2RW制御部115は、予測用算出値データCDFをストレージデバイス60Bから読み出すことで、予測用算出値データCDを取得していることになる。

【0141】

第2導出部116は、第2RW制御部115からの予測用情報データIFDFを受け取る。第2導出部116は、予測用情報データIFDFから予測用算出値データCDFを導出する。

【0142】

第2処理部117は、第2RW制御部115からの予測用算出値データCDF、及び学

10

20

30

40

50

習済みモデル T M を受け取る。第 2 処理部 1 1 7 は、学習済みモデル T M に予測用算出値データ C D F を与えて品質を予測させる（品質の予測）。第 2 処理部 1 1 7 は、学習済みモデル T M による品質の予測結果である品質予測データ Q F D を表示制御部 1 1 8 に出力する。品質予測データ Q F D は、品質データ Q D と同じく、例えば、数平均分子量である。
【 0 1 4 3 】

表示制御部 1 1 8 は、品質予測データ Q F D 等をディスプレイ 6 4 B に表示する制御を行う。

【 0 1 4 4 】

以上のようにして、1 つ以上の処理を含むプロセスにより得られる生産物の品質を予測することができる。

10

覧に供される。

【 0 1 4 5 】

[第 2 実施形態]

第 2 実施形態では、算出値データに加えて、処理条件データを用いて生産物の品質の予測を行う。以下、第 2 実施形態について具体的に説明するが、それ以外の部分については、第 1 実施形態について説明したものと同様である。また、第 2 実施形態におけるフロー処理装置、情報取得装置及び品質評価装置は、第 1 実施形態におけるものと同じである。

【 0 1 4 6 】

図 1 5 において、フロー処理装置 1 3 は、フロー処理を含むプロセスにより、処理条件データ P C D にしたがって、原料 R M から生産物 P R を生産する。情報取得装置 1 4 は、プロセスの少なくとも 1 つの処理において、処理前と処理後との間の処理時間の経過の異なる 2 点で、特定情報を取得し、取得した情報データ I F D を出力する。品質評価装置 1 5 は、生産物 P R の品質を評価し、その評価結果である品質データ Q D を出力する。フロー処理装置 1 3 から処理条件データ P C D が、情報取得装置 1 4 から情報データ I F D が、品質評価装置 1 5 から品質データ Q D が、それぞれ学習装置 1 0 C に送信される。

20

【 0 1 4 7 】

図 1 6 において、学習装置 1 0 C は、フロー処理装置 1 3 からの処理条件データ P C D 、情報取得装置 1 4 からの情報データ I F D 、及び品質評価装置 1 5 からの品質データ Q D を取得する。学習装置 1 0 C は、情報データ I F D から差分の算出値データ C D を導出する。処理条件データ P C D 及びこの算出値データ C D を学習用入力データ I D L とする。処理条件データ P C D 、情報データ I F D 、情報データ I F D から導出された算出値データ C D 、及び品質データ Q D は、図 1 7 に示すように、1 つの生産物 P R に対して付された共通の I D で関連付けられている。処理条件データ P C D 、算出値データ C D 、及び品質データ Q D は、既知データセットを構成する。

30

【 0 1 4 8 】

情報処理装置 1 1 C は、学習装置 1 0 C からの学習済みモデル T M を受信する。情報処理装置 1 1 C は、品質が未知の生産物 P R の処理条件データである予測用処理条件データ P C D F 、及び品質が未知の生産物 P R の算出値データである予測用算出値データ C D F を学習済みモデル T M に与える。予測用算出値データ C D F は、算出値データ C D と同様に、品質が未知の生産物 P R の情報データ I F D である予測用情報データ I F D F から導出したデータである。学習済みモデル T M は、予測用処理条件データ P C D F 及び予測用算出値データ C D F に応じた品質予測データ Q F D を出力する。

40

【 0 1 4 9 】

図 1 8 において、学習装置 1 0 C のストレージデバイス 6 0 A C には、フロー処理装置 1 3 からの処理条件データ P C D 、情報取得装置 1 4 からの情報データ I F D 、及び品質評価装置 1 5 からの品質データ Q D が記憶される。情報データ I F D から導出された算出値データ C D 、及び機械学習モデル M も記憶される。処理条件データ P C D 、情報データ I F D 、算出値データ C D 、及び品質データ Q D のセットは、複数記憶されている。

【 0 1 5 0 】

第 1 R W 制御部 7 5 C は、ストレージデバイス 6 0 A C から算出値データ C D 、処理条

50

件データPCD、及び品質データQDを読み出し、これらを学習部77Cに出力する。また、第1RW制御部75Cは、ストレージデバイス60ACから機械学習モデルMを読み出し、機械学習モデルMを学習部77C及び送信制御部78Cのいずれかに出力する。また、第1RW制御部75Cは、学習部77Cからの機械学習モデルMをストレージデバイス60ACに記憶する。

【0151】

図19に示すように、学習部77Cは、第1処理部85C、評価部86C、及び更新部87Cを有する。第1処理部85Cは、学習用入力データIDL（処理条件データPCD、算出値データCD）を機械学習モデルMに与えて、機械学習モデルMから学習用出力データODLを出力させる。学習用出力データODLは、品質データQDと同じく、例えば、数平均分子量である。第1処理部85Cは、学習用出力データODLを評価部86Cに出力する。予測の精度が予め設定されたレベルに達した機械学習モデルMは、学習済みモデルTMとして、第1RW制御部75Cによりストレージデバイス60ACに記憶される。

10

【0152】

図20において、情報処理装置11Cのストレージデバイス60BCには、学習装置10Cからの学習済みモデルTM、情報取得装置14からの予測用情報データIFDFが記憶される。また、ストレージデバイス60BCには、予測用処理条件データPCDFも記憶される。予測用処理条件データPCDFは、入力デバイス65Bを介してオペレータにより入力されてもよい。より詳しくは、予測用処理条件データPCDFの各項目の入力ボックスが用意された入力画面がディスプレイ64Bに表示され、入力画面を通じて予測用処理条件データPCDFが入力されてよい。予測用処理条件データPCDF及び予測用情報データIFDFは、品質が未知で、これから学習済みモデルTMを用いて品質を予測する生産物PRの処理条件データ及び情報データである。

20

【0153】

また、ストレージデバイス60BCには、予測用情報データIFDFから導出された予測用算出値データCDFも記憶される。

【0154】

第2作動プログラム110Cが起動されると、情報処理装置11Cを構成するコンピュータのCPU62BCは、メモリ61等と協働して、第2RW制御部115C、第2導出部116C、第2処理部117C、及び表示制御部118Cとして機能する。

30

【0155】

第2RW制御部115Cは、学習装置10Cの第1RW制御部75Cと同様、ストレージデバイス60BC内の各種データの読み出し、及びストレージデバイス60BCへの各種データの記憶を制御する。第2RW制御部115Cは、ストレージデバイス60BCから予測用情報データIFDFを読み出し（情報の取得）、予測用情報データIFDFを第2導出部116Cに出力する。また、第2RW制御部115Cは、第2導出部116Cからの予測用算出値データCDFをストレージデバイス60BCに記憶する。ストレージデバイス60BCには、オートエンコードも記憶されていてよく、オートエンコードを用いて、画像等の情報データから算出値データを導出してよい。

【0156】

40

第2RW制御部115Cは、ストレージデバイス60BCから学習済みモデルTMを読み出し、学習済みモデルTMを第2処理部117Cに出力する。第2RW制御部115Cは、学習済みモデルTMをストレージデバイス60BCから読み出すことで、学習済みモデルTMを取得していることになる。

【0157】

第2RW制御部115Cは、ストレージデバイス60BCから予測用算出値データCDF及び予測用処理条件データPCDFを読み出し（算出値の取得、条件値の取得）、これらを第2処理部117Cに出力する。第2RW制御部115Cは、予測用算出値データCDF及び予測用処理条件データPCDFをストレージデバイス60BCから読み出すことで、予測用算出値データCDF及び予測用処理条件データPCDFを取得していることに

50

なる。

【 0 1 5 8 】

第 2 導出部 1 1 6 C は、第 2 R W 制御部 1 1 5 C からの予測用情報データ I F D F を受け取る。第 2 導出部 1 1 6 C は、予測用情報データ I F D F から予測用算出値データ C D F を導出する。

【 0 1 5 9 】

第 2 処理部 1 1 7 C は、第 2 R W 制御部 1 1 5 C からの予測用処理条件データ P C D F 、予測用算出値データ C D F 、及び学習済みモデル T M を受け取る。第 2 処理部 1 1 7 C は、学習済みモデル T M に予測用処理条件データ P C D F 及び予測用算出値データ C D F を与えて品質を予測させる（品質の予測）。第 2 処理部 1 1 7 C は、学習済みモデル T M による品質の予測結果である品質予測データ Q F D を表示制御部 1 1 8 C に出力する。品質予測データ Q F D は、品質データ Q D と同じく、例えば、数平均分子量である。

10

【 0 1 6 0 】

以上のようにして、1 つ以上の処理を含むプロセスにより得られる生産物の品質を予測することができる。また、第 2 実施形態では、算出値データに加えて、処理条件データを用いて生産物の品質の予測を行っているため、第 1 実施形態と比較して、より高い精度で品質の予測を行うことが可能となり得る。

【 0 1 6 1 】

上記各実施形態では、フロー処理装置 1 3 の設定部 2 5 で受け付けられた処理条件を、処理条件データ P C D としているが、これに限らない。第 1 流速センサ 3 5 、第 2 流速センサ 3 6 、第 3 流速センサ 3 7 、及び温度センサ 3 8 で検出した実測値を、処理条件データ P C D としてもよい。

20

【 0 1 6 2 】

上記各実施形態では、品質予測データ Q F D の出力形態として、品質予測表示画面 1 2 0 を例示したが、これに限らない。品質予測表示画面 1 2 0 に代えて、あるいは加えて、品質予測データ Q F D を紙媒体に印刷出力する形態、品質予測データ Q F D をデータファイルとして出力する形態を採用してもよい。

【 0 1 6 3 】

学習装置 1 0 及び 1 0 C 、並びに情報処理装置 1 1 及び 1 1 C を構成するコンピュータのハードウェア構成は種々の変形が可能である。

30

例えば、学習装置 1 0 と情報処理装置 1 1 とを統合して、1 台のコンピュータで構成してもよい。また、学習装置 1 0 及び情報処理装置 1 1 のうちの少なくともいずれかを、処理能力及び信頼性の向上を目的として、ハードウェアとして分離された複数台のコンピュータで構成することも可能である。例えば、学習装置 1 0 の第 1 導出部 7 6 の機能と、学習部 7 7 の機能とを、2 台のコンピュータに分散して担わせる。この場合は 2 台のコンピュータで学習装置 1 0 を構成する。以上のことは、学習装置 1 0 C 及び情報処理装置 1 1 C についても同様である。

【 0 1 6 4 】

このように、学習装置 1 0 及び 1 0 C 、並びに情報処理装置 1 1 及び 1 1 C のコンピュータのハードウェア構成は、処理能力、安全性、信頼性等の要求される性能に応じて適宜変更することができる。更に、ハードウェアに限らず、第 1 作動プログラム 7 0 及び 7 0 C 、第 2 作動プログラム 1 1 0 及び 1 1 0 C 等のアプリケーションプログラムについても、安全性及び信頼性の確保を目的として、二重化したり、あるいは、複数のストレージデバイスに分散して格納することももちろん可能である。

40

【 0 1 6 5 】

上記各実施形態において、例えば、第 1 R W 制御部 7 5 及び 7 5 C 、第 1 導出部 7 6 及び 7 6 C 、学習部 7 7 及び 7 7 C 、送信制御部 7 8 及び 7 8 C 、第 2 R W 制御部 1 1 5 及び 1 1 5 C 、第 2 導出部 1 1 6 及び 1 1 6 C 、第 2 処理部 1 1 7 及び 1 1 7 C 、並びに表示制御部 1 1 8 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）

50

を用いることができる。各種のプロセッサには、上述したように、ソフトウェア（第1作動プログラム70及び70C、第2作動プログラム110及び110C）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CPU62A、62AC、62B及び62BCに加えて、FPGA（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。

【0166】

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、同種又は異種の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、及び/又は、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。

【0167】

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、クライアント及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。

【0168】

更に、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。

【0169】

また、情報処理装置による品質の予測は、予測結果に基づいて所望の品質が得られるように処理条件を探索するように構成された探索装置にも好適に用いることができる。

【0170】

[変形例]

処理セクション22に代えて、図21に示す処理セクション45を用いてもよい。なお、図21において、図10と同じ構成には同じ符号を付し、説明を省略する。

【0171】

図21に示す処理セクション45の合流部46は、第1管部47、第2管部48、第3管部49、及び第4管部50で構成される。第1管部47と第2管部48は直線状に繋がっている。同じく、第3管部49と第4管部50は直線状に繋がっている。そして、第1管部47および第2管部48は、第3管部49及び第4管部50と直角に交差している。すなわち合流部46は十字形状をしている。

【0172】

第1管部47および第2管部48は第1原料供給部20に、第3管部49は第2原料供給部21に、それぞれ接続されている。また、第4管部50は、反応部31に接続されている。第1管部47及び第2管部48には第1原料供給部20から第1原料RM1が、第3管部49には第2原料供給部21から第2原料RM2が、それぞれ供給される。そして、第1原料RM1および第2原料RM2は、第4管部50において合流し、混合された状態で反応部31に送り出される。

【0173】

第1管部47及び第2管部48には、第1管部47及び第2管部48を通過する第1原料RM1の流速を検出する第1流速センサ51及び第2流速センサ52が設けられている

10

20

30

40

50

。また、第3管部49には、第3管部49を通過する第2原料RM2の流速を検出する第3流速センサ53が設けられている。更に、第4管部50には、第4管部50を通過する原料混合物の流速を検出する第4流速センサ54が設けられている。

【0174】

この場合、システムコントローラ26は、第1流速センサ51が検出した第1原料RM1の流速と、第2流速センサ52が検出した第1原料RM1の流速との平均値に応じて、第1原料供給部20のポンプの回転数を制御し、第1原料RM1の流量を調節する。また、システムコントローラ26は、第3流速センサ53が検出した第2原料RM2の流速に応じて、第2原料供給部21のポンプの回転数を制御し、第2原料RM2の流量を調節する。

10

【0175】

処理セクション45を用いた場合、システムコントローラ26は、第1流速センサ51が検出した第1原料RM1の流速と、第2流速センサ52が検出した第1原料RM1の流速の平均値が、処理条件データPCDに登録された第1原料RM1の流速と一致するように、第1原料供給部20のポンプの回転数を制御して第1原料RM1の流量を調節する。同様に、システムコントローラ26は、第3流速センサ53が検出した第2原料RM2の流速が、処理条件データPCDに登録された第2原料RM2の流速と一致するように、第2原料供給部21のポンプの回転数を制御して第2原料RM2の流量を調節する。

【0176】

< 情報処理方法 >

20

本開示に係る情報処理方法は、

1つ以上の処理を含むプロセスにより得られる生産物の品質を予測する情報処理方法であって、

プロセスの少なくとも1つの処理において、処理前と処理後との間の処理時間の経過の異なる2点で、被処理物と処理物の化学的情報及び物理的情報の少なくとも1つの情報の取得を行うこと、

上記情報から得られる数値の上記2点間の差分の算出値の取得を行うこと、及び

上記差分を説明変数、生産物の品質を目的変数とし、説明変数と目的変数との既知データセットに基づいて機械学習した学習済みモデルを用いて、上記算出値に基づいて生産物の品質の予測を行うこと、

30

を含む。

【0177】

情報処理方法の各構成は、情報処理装置において上述した構成から導かれる。

【0178】

< プログラム >

本開示に係るプログラムは、

1つ以上の処理を含むプロセスにより得られる生産物の品質を予測する情報処理をコンピュータに実行させるためのプログラムであって、

プロセスの少なくとも1つの処理において、処理前と処理後との間の処理時間の経過の異なる2点で、被処理物と処理物の化学的情報及び物理的情報の少なくとも1つの情報の取得を行うこと、

40

上記情報から得られる数値の上記2点間の差分の算出値の取得を行うこと、及び

上記差分を説明変数、生産物の品質を目的変数とし、説明変数と目的変数との既知データセットに基づいて機械学習した学習済みモデルを用いて、上記算出値に基づいて生産物の品質の予測を行うこと、

を含む。

【0179】

情報処理方法の各構成は、情報処理装置において上述した構成から導かれる。

【実施例】

【0180】

50

以下、実施例を挙げて本開示をより具体的に説明する。但し、本開示は、これらの実施例に限定されない。

【0181】

本開示に係る情報処理による品質の予測精度の高さを実証するため、比較例も交えて、図10に示されるフロー処理装置13を用いたポリマー合成プロセスを想定し、ポリスチレン（生産物）の数平均分子量（品質）の予測を行った。品質の予測に用いたデータについて、以下の（1）～（3）に説明する。

【0182】

（1）赤外分光スペクトル

第2フロー処理前のa₂点、及び第2フロー処理後のd₂点における化学的情報として、図3に示すような赤外分光スペクトルを取得した。赤外分光スペクトルの取得は、図22に示すように、水準番号1～水準番号10で行い、各水準は、図25に示すように処理条件が異なる。赤外分光スペクトルから得られる数値である、ピークにおける積分強度（以下、単に「積分強度」と呼ぶことがある）の差分を説明変数とし、図23に示すように、差分の算出値データを取得した。その際、量子化学計算により、本反応における特徴的な波数を決定し、決定した波数に対応する赤外分光スペクトル中のピークA～ピークNを特定した。また、これらの波数は、副生成物に由来する波数を含んでおり、すなわち、これらのピークは、副生成物に由来するピークを含んでいた。ピークA～ピークCは芳香環C-H伸縮、ピークD及びピークEは脂肪族C-H伸縮、ピークF～ピークIは芳香環モノ置換体、ピークJ及びピークKは芳香環C=C伸縮、ピークLはC-H変角、ピークMはC-H面外変角、ピークNは芳香環変角に由来するものであった。なお、図22及び図23において、ピークD～ピークMに関するデータは省略した。

【0183】

（2）混合率（流れ場の状態量）

第1フロー処理中のb₁点、及び第1フロー処理後のd₁点で、物理的情報として、混合率（流れ場の状態量）の取得を行った。混合率から得られる数値、ここでは混合率そのものの差分を説明変数とし、図24に示すように、差分の算出値データを取得した。図24に記載の水準番号は、図22及び図23に記載の水準番号と対応している。

【0184】

混合率は、数値流体解析により、第1原料RM1（ポリスチリルリチウムを溶媒に溶解した溶液）、及び第2原料RM2（メタノール）の混合状態をシミュレーションして得た。具体的には、2つの原料（第1原料RM1、第2原料RM2）が混合せずに存在する領域と、2つの原料が混合している領域（混合領域）とを画像化した。第1原料RM1を白色で表示し、第2原料RM2を黒色で表示し、更に、混合領域を灰色で表示することにより、混合状態を画像化した。そして、全領域の面積に対する混合領域の面積から混合率を求めた。

【0185】

（3）処理条件

図25に示すように、図22及び図23に記載の水準番号1～水準番号10と対応する処理条件を準備した。

【0186】

[実施例1]

第1実施形態で説明した情報処理装置11を用いて、ポリマー合成プロセスで得られるポリスチレン（生産物）の数平均分子量（品質）の予測を行った。学習装置10及びフロー処理装置13、その他の構成についても、第1実施形態に記載の通りである。機械学習のアルゴリズムとしては、pythonにおけるscikit-learnライブラリの勾配ブースティング回帰木（Gradient Boosting Regressor）を用いた。

【0187】

図23に示される水準番号2～水準番号10の差分を説明変数、数平均分子量を目的変

10

20

30

40

50

数とし、説明変数と目的変数との既知データセットに基づいて機械学習した学習済みモデルTMを用いて、水準番号1に記載の算出値に基づいて、水準番号1のポリスチレンの数平均分子量を予測した。

水準番号2について、水準番号2以外の水準から得られる既知のデータセットに基づいて、上記と同様にして、ポリスチレンの数平均分子量を予測した。同様の操作を繰り返し、水準番号3～水準番号10のポリスチレンの数平均分子量を予測した。

【0188】

水準番号1～水準番号10の数平均分子量の予測値、及び図23に記載の数平均分子量の値から、決定係数を求めた。結果を図26に示す。

【0189】

[比較例1]

説明変数として、差分の代わりに、図22に示されるd₂点の積分強度を用いたこと以外は、実施例1と同様にして、水準番号1～水準番号10の数平均分子量を予測し、決定係数を求めた。結果を図26に示す。

【0190】

[実施例2]

第2実施形態で説明した情報処理装置11Cを用いて、ポリマー合成プロセスで得られるポリスチレン(生産物)の数平均分子量(品質)の予測を行った。学習装置10C及びフロー処理装置13、その他の構成についても、第2実施形態に記載の通りである。機械学習のアルゴリズムは、実施例1と同じである。

【0191】

図23に示される水準番号2～水準番号10の差分と、図25に示される水準番号2～水準10の処理条件とを説明変数、数平均分子量を目的変数とし、説明変数と目的変数との既知データセットに基づいて機械学習した学習済みモデルTMを用いて、水準番号1に記載の算出値及び条件値に基づいて、水準番号1のポリスチレンの数平均分子量を予測した。

水準番号2について、水準番号2以外の水準から得られる既知のデータセットに基づいて、上記と同様にして、ポリスチレンの数平均分子量を予測した。同様の操作を繰り返し、水準番号3～水準番号10のポリスチレンの数平均分子量を予測した。

【0192】

水準番号1～水準番号10の数平均分子量の予測値、及び図23に記載の数平均分子量の値から、決定係数を求めた。結果を図26に示す。

【0193】

[比較例2]

説明変数として、差分の代わりに、図22に示されるd₂点の積分強度を用いたこと以外は、実施例2と同様にして、水準番号1～水準番号10の数平均分子量を予測し、決定係数を求めた。結果を図26に示す。

【0194】

[実施例3]

第2実施形態で説明した情報処理装置11Cを用いて、ポリマー合成プロセスで得られるポリスチレン(生産物)の数平均分子量(品質)の予測を行った。学習装置10C及びフロー処理装置13、その他の構成についても、第2実施形態に記載の通りである。機械学習のアルゴリズムは、実施例1と同じである。

【0195】

図24に示される水準番号2～水準番号10の差分と、図25に示される水準番号2～水準10の処理条件とを説明変数、数平均分子量を目的変数とし、説明変数と目的変数との既知データセットに基づいて機械学習した学習済みモデルTMを用いて、水準番号1に記載の算出値及び条件値に基づいて、水準番号1のポリスチレンの数平均分子量を予測した。

水準番号2について、水準番号2以外の水準から得られる既知のデータセットに基づい

10

20

30

40

50

て、上記と同様にして、ポリスチレンの数平均分子量を予測した。同様の操作を繰り返し、水準番号 3 ~ 水準番号 10 のポリスチレンの数平均分子量を予測した。

【0196】

水準番号 1 ~ 水準番号 10 の数平均分子量の予測値、及び図 24 に記載の数平均分子量の値から、決定係数を求めた。結果を図 26 に示す。

【0197】

[比較例 3]

説明変数として、差分の代わりに、図 24 に示される b_1 点の混合率を用いたこと以外は、実施例 3 と同様にして、水準番号 1 ~ 水準番号 10 の数平均分子量を予測し、決定係数を求めた。結果を図 26 に示す。

【0198】

実施例 1 及び比較例 1 から分かるように、積分強度の差分の算出値を説明変数とした実施例 1 は、積分強度そのものを説明変数とした比較例 1 と比較して、決定係数が高く、品質の予測精度が高かった。実施例 2 と比較例 2 との比較、実施例 3 と比較例 3 との比較についても同様であり、実施例 2 及び実施例 3 は、高い予測精度を有している。

【0199】

また、実施例 1 及び実施例 2 から分かるように、積分強度の差分の算出値に加えて、処理条件を説明変数とした実施例 2 は、実施例 1 と比較して決定係数が高く、品質の予測精度により優れていた。

【0200】

本開示の技術は、上述の種々の実施形態と種々の変形例を適宜組み合わせることも可能である。また、上記各実施形態に限らず、要旨を逸脱しない限り種々の構成を採用し得ることはもちろんである。更に、本開示の技術は、プログラムに加えて、プログラムを非一時的に記憶する記憶媒体にもおよぶ。

【0201】

以上を示した記載内容及び図示内容は、本開示の技術に係る部分についての詳細な説明であり、本開示の技術の一例に過ぎない。例えば、上記の構成、機能、作用、及び効果に関する説明は、本開示の技術に係る部分の構成、機能、作用、及び効果の一例に関する説明である。よって、本開示の技術の主旨を逸脱しない範囲内において、以上を示した記載内容及び図示内容に対して、不要な部分を削除したり、新たな要素を追加したり、置き換えたりしてもよいことはいふまでもない。また、錯綜を回避し、本開示の技術に係る部分の理解を容易にするために、以上を示した記載内容及び図示内容では、本開示の技術の実施を可能にする上で特に説明を要しない技術常識等に関する説明は省略されている。

【符号の説明】

【0202】

10、10C 学習装置

11、11C 情報処理装置

12 ネットワーク

13 フロー処理装置

14 情報取得装置

15 品質評価装置

20 第 1 原料供給部

21 第 2 原料供給部

22、45 反応セクション

23 温度調節部

24 回収廃棄セクション

25 設定部

26 システムコントローラ

30、46 合流部

31 反応部

10

20

30

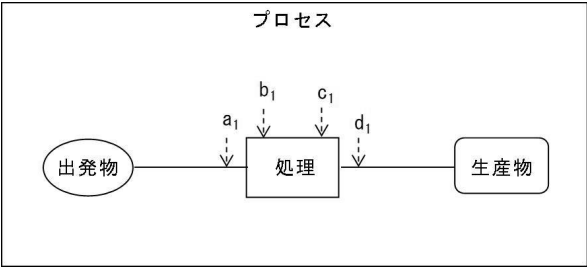
40

50

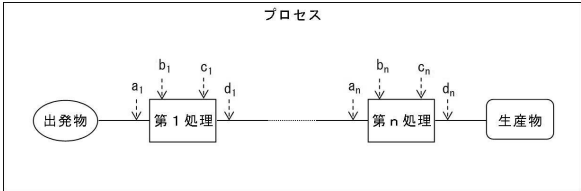
3 2 ~ 3 4	第 1 管部 ~ 第 3 管部	
3 5 ~ 3 7	第 1 流速センサ ~ 第 3 流速センサ	
3 8	温度センサ	
4 0	回収部	
4 1	廃棄部	
4 2	三方弁	
4 7 ~ 5 0	第 1 管部 ~ 第 4 管部	
5 1 ~ 5 4	第 1 流速センサ ~ 第 4 流速センサ	
6 0、6 0 A、6 0 A C、6 0 B、6 0 B C	ストレージデバイス	
6 1	メモリ	10
6 2、6 2 A、6 2 A C、6 2 B、6 2 B C	C P U	
6 3	通信部	
6 4、6 4 B	ディスプレイ	
6 5、6 5 B	入力デバイス	
6 6	バスライン	
7 0、7 0 C	第 1 作動プログラム (学習装置の作動プログラム)	
7 5、7 5 C	第 1 リードライト制御部 (第 1 R W 制御部)	
7 6、7 6 C	第 1 導出部	
7 7、7 7 C	学習部	
7 8、7 8 C	送信制御部	20
8 5、8 5 C	第 1 処理部	
8 6、8 6 C	評価部	
8 7、8 7 C	更新部	
1 1 0、1 1 0 C	第 2 作動プログラム	
1 1 5、1 1 5 C	第 2 リードライト制御部 (第 2 R W 制御部)	
1 1 6、1 1 6 C	第 2 導出部	
1 1 7、1 1 7 C	第 2 処理部	
1 1 8、1 1 8 C	表示制御部	
a 1、a n、b 1、b n、c 1、c n、d 1、d n	処理前と処理後との間の処理時間の経過の異なる点	30
C D	算出値データ (差分の算出値データ)	
C D F	予測用算出値データ (差分の予測用算出値データ)	
I D L	学習用入力データ	
I F D	情報データ	
I F D F	予測用情報データ	
L	反応路長	
M	機械学習モデル	
O D L	学習用出力データ	
P C D	処理条件データ	
P C D F	予測用処理条件データ	40
P R	生産物	
Q D	品質データ	
Q F D	品質予測データ	
R M	原料	
R M 1、R M 2	第 1 原料、第 2 原料	
T M	学習済みモデル	
Φ	反応路径	

【図面】

【図 1】

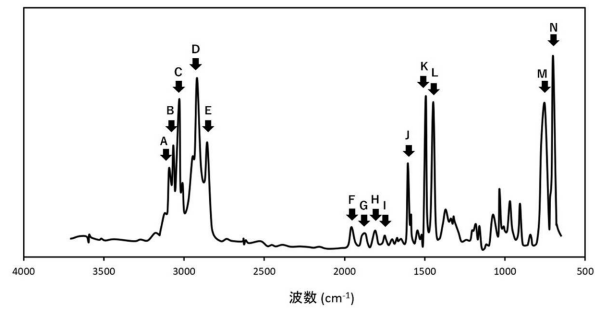


【図 2】

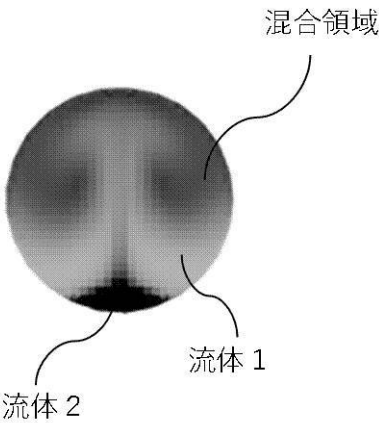


10

【図 3】

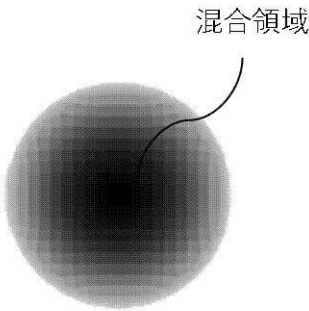


【図 4】

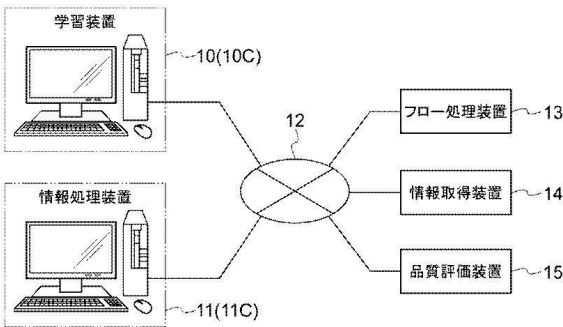


20

【図 5】



【図 6】

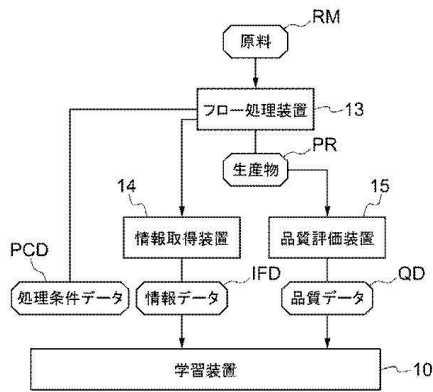


30

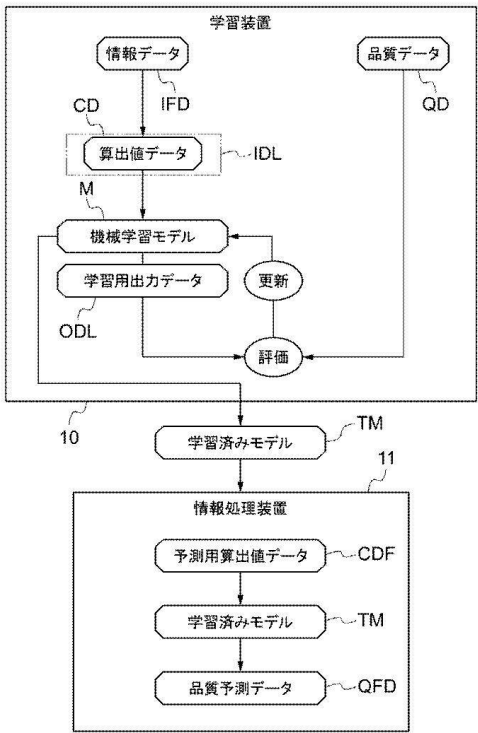
40

50

【図 7】



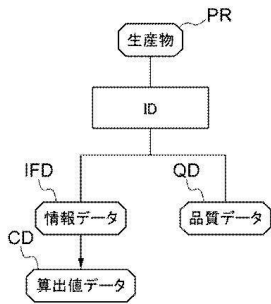
【図 8】



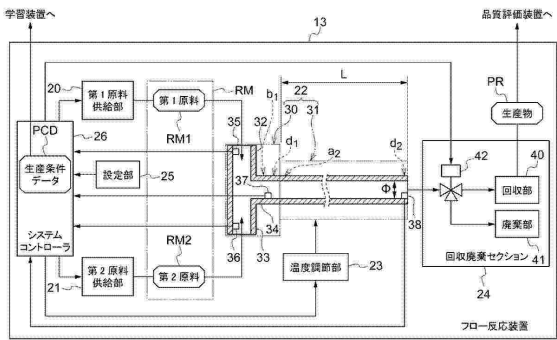
10

20

【図 9】



【図 10】

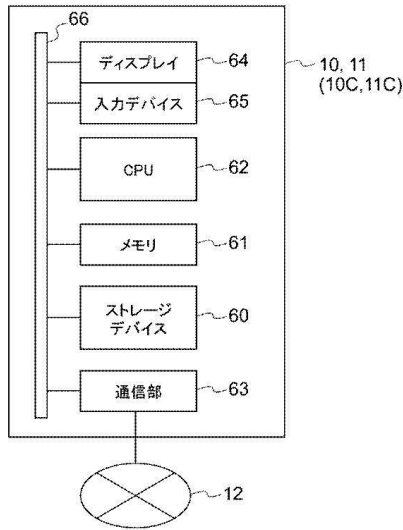


30

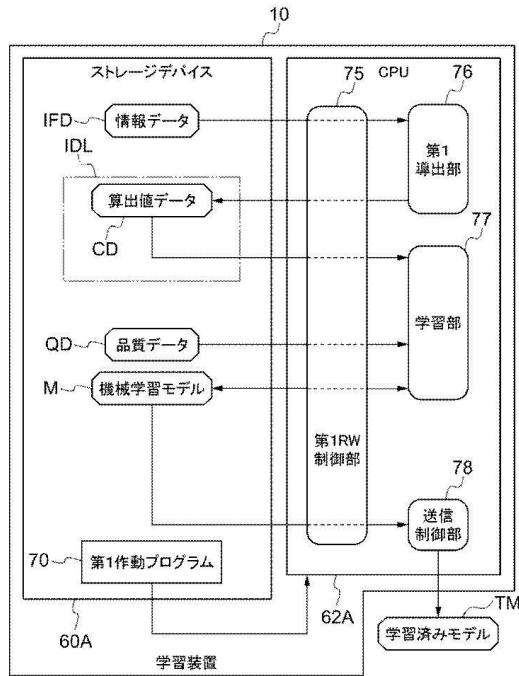
40

50

【図 1 1】



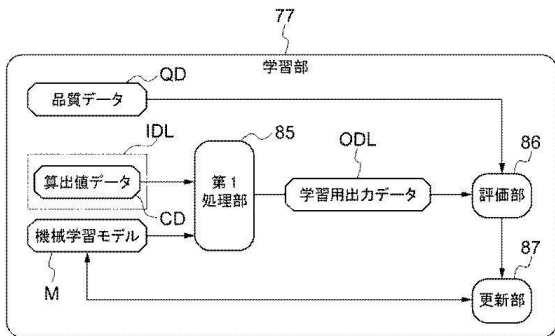
【図 1 2】



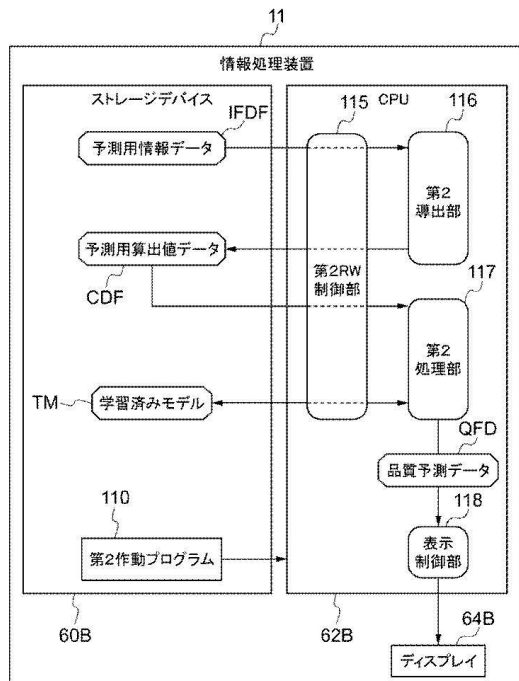
10

20

【図 1 3】



【図 1 4】

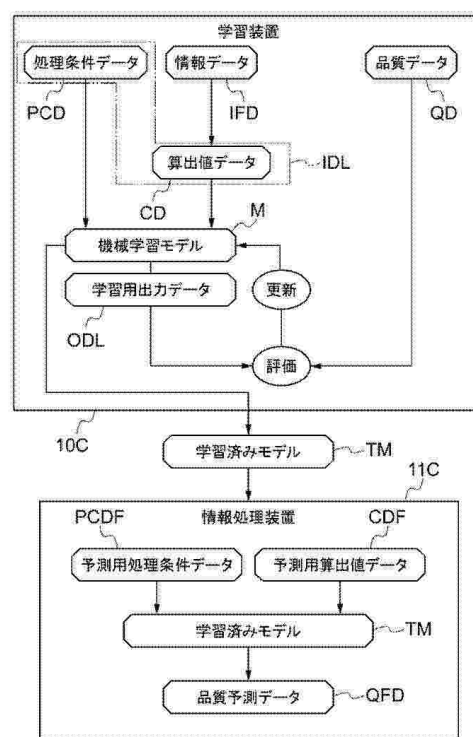


30

40

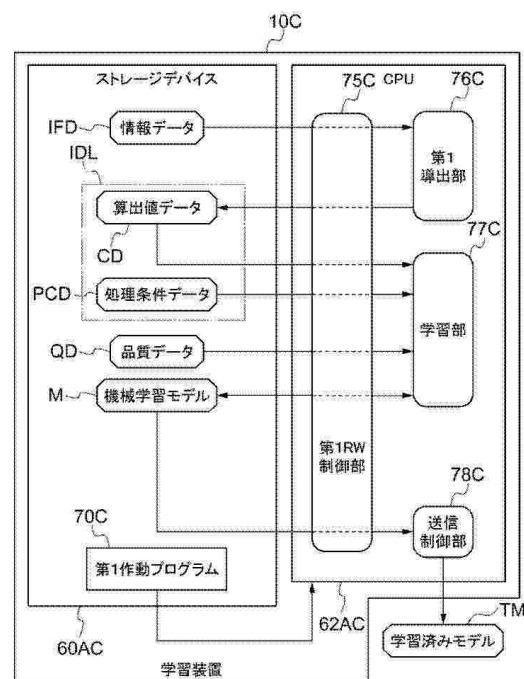
50

【 図 1 6 】



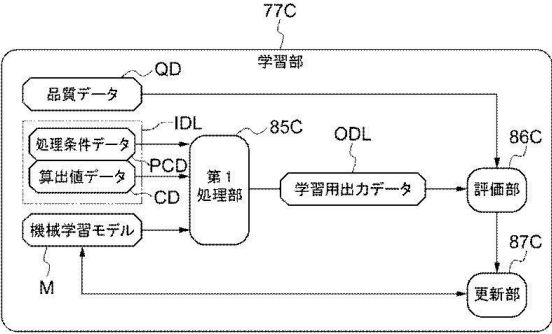
20

【圖 18】

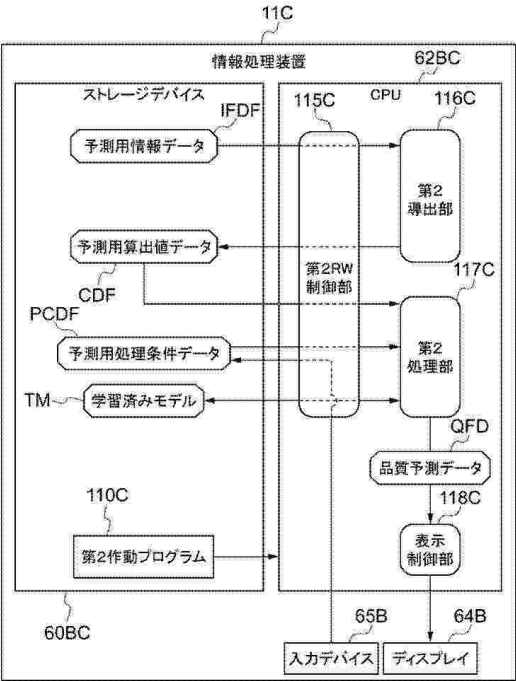


40

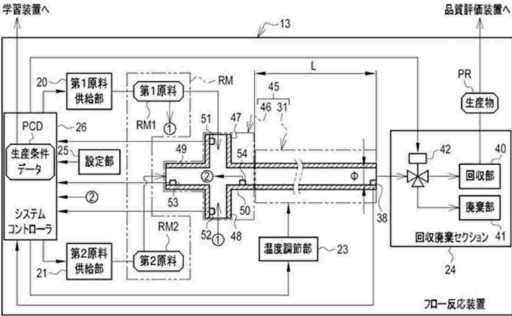
【図 19】



【図 20】



【図 21】



【図 22】

水準番号	情報データ 赤外分光スペクトル									
	θ_2 点					θ_2 点				
	ピークA	ピークB	ピークC	...	ピークN	ピークA	ピークB	ピークC	...	ピークN
1	0.059	1.843	0.912	...	0.033	0.721	2.314	1.286	...	2.793
2	0.084	1.665	0.867	...	0.052	0.451	3.198	1.627	...	1.318
3	0.195	1.110	0.638	...	0.089	1.079	3.109	2.053	...	1.414
4	0.074	1.735	0.318	...	0.005	0.753	0.856	1.125	...	1.556
5	0.092	0.489	0.862	...	0.098	1.438	1.865	1.335	...	1.333
6	0.091	0.906	0.527	...	0.105	1.126	1.258	1.456	...	2.512
7	0.105	1.210	0.608	...	0.135	1.456	1.556	0.963	...	1.385
8	0.351	0.556	0.379	...	0.096	1.221	1.325	0.854	...	2.109
9	0.062	0.742	0.816	...	0.176	1.663	2.257	0.254	...	1.835
10	0.295	1.092	0.638	...	0.054	0.837	1.416	1.051	...	2.945

10

20

30

40

50

【図 2 3】

水準番号	説明変数					目的変数
	差分の算出値データ					品質
	ピークA	ピークB	ピークC	…	ピークN	数平均分子量
1	0.662	0.471	0.374	…	2.760	27000
2	0.367	1.533	0.760	…	1.266	21340
3	0.884	1.999	1.415	…	1.325	22000
4	0.679	-0.879	0.807	…	1.551	24800
5	1.346	1.376	0.473	…	1.235	18500
6	1.035	0.352	0.929	…	2.407	23500
7	1.351	0.346	0.355	…	1.250	14600
8	0.870	0.769	0.475	…	2.013	23300
9	1.601	1.515	-0.562	…	1.659	25320
10	0.542	0.324	0.413	…	2.891	11560

【図 2 4】

水準番号	情報データ 混合率		説明変数	目的変数
	b ₁ 点	d ₁ 点	差分の 算出値データ	品質
	混合率	混合率		数平均分子量
1	0.38	1.00	0.62	27000
2	0.43	0.95	0.52	21340
3	0.09	0.96	0.87	22000
4	0.15	0.98	0.83	24800
5	0.35	0.99	0.64	18500
6	0.27	0.87	0.60	23500
7	0.25	0.79	0.54	14600
8	0.18	0.93	0.75	23300
9	0.23	0.88	0.65	25320
10	0.26	0.85	0.59	11560

10

【図 2 5】

水準番号	説明変数							目的変数
	処理条件データ							数平均分子量
	第1原料RM1		第2原料RM2		反応管径 Φ	反応管長 L	反応温度	
	濃度 mM	流速 mL/min	濃度 mM	流速 mL/min	mm	mm	℃	
1	20.0	1.0	20.0	0.6	1.0	800.0	0.0	27000
2	20.0	2.0	20.0	1.1	1.0	600.0	5.0	21340
3	20.0	10.0	20.0	5.5	2.0	700.0	10.0	22000
4	18.0	11.0	10.0	1.1	2.0	700.0	10.0	24800
5	20.0	0.5	20.0	1.1	2.0	700.0	10.0	18500
6	18.0	0.5	20.0	0.6	3.0	700.0	10.0	23500
7	18.0	0.5	20.0	2.0	1.0	600.0	10.0	14600
8	18.0	0.5	10.0	2.0	1.0	500.0	10.0	23300
9	18.0	20.0	20.0	2.0	1.0	500.0	10.0	25320
10	20.0	1.0	20.0	0.6	1.0	500.0	0.0	11560

【図 2 6】

	説明変数		決定係数
実施例1	差分の算出値データ (赤外分光スペクトル)	-	0.628
比較例1	d ₂ 点の積分強度	-	0.127
実施例2	差分の算出値データ (赤外分光スペクトル)	処理条件データ	0.773
比較例2	d ₂ 点の積分強度		0.657
実施例3	差分の算出値データ (数値流体解析)	処理条件データ	0.614
比較例3	a ₁ 点の混合率		0.491

20

30

40

50

フロントページの続き

- (56)参考文献 国際公開第 2 0 1 8 / 0 6 2 3 9 8 (W O , A 1)
 国際公開第 2 0 2 1 / 0 0 2 1 1 0 (W O , A 1)
 特開 2 0 0 9 - 0 4 4 9 7 4 (J P , A)
- (58)調査した分野 (Int.Cl., D B 名)
- G 0 6 Q 1 0 / 0 0 - 9 9 / 0 0
 G 0 6 N 2 0 / 0 0
 G 0 5 B 1 9 / 4 1 8