

科学研究費助成事業 研究成果報告書

平成 27 年 4 月 25 日現在

機関番号：14301

研究種目：基盤研究(C)

研究期間：2012～2014

課題番号：24560940

研究課題名(和文)原料や装置特性の変化および不確定性を考慮した仮想計測技術の開発

研究課題名(英文)Development of virtual sensing technology handling changes in feed and process characteristics and uncertainties

研究代表者

加納 学(KANO, MANABU)

京都大学・情報学研究科・教授

研究者番号：30263114

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 4,100,000円

研究成果の概要(和文)：リアルタイム計測が困難な製品品質のフィードバック制御を可能にし、生産効率を高めるためには、プロセスの運転状態から品質を推定する仮想計測技術(ソフトセンサー)が不可欠である。本研究では、原料や装置特性が変化する場合、およびそれらに不確定性が存在する場合でも、高精度な推定が行える仮想計測技術を開発し、石油化学、半導体、製剤、鉄鋼など多様なプロセスに適用し、その有効性を確認した。

研究成果の概要(英文)：To realize feedback control of product quality, which is difficult to measure in real time, and also to enhance the productivity, it is crucial to develop virtual sensing technology or soft-sensors that can estimate the product quality from process operating conditions. In this research, high-performance virtual sensing technology was developed and applied to various industrial processes such as petrochemical, semiconductor, pharmaceutical, and steel. The usefulness of the proposed methods was confirmed through these applications.

研究分野：プロセスシステム工学

キーワード：仮想計測技術 ソフトセンサー プロセスデータ解析 グレーボックスモデル 統計モデル 局所PLS
不確定性 産業応用

1. 研究開始当初の背景

リアルタイム計測が困難な製品品質のフィードバック制御を可能にし、生産効率を高めるためには、プロセスの運転状態から品質を推定する仮想計測技術が不可欠である。この認識は既に広く共有されており、石油・化学産業ではソフトセンサー、半導体産業ではバーチャルメトロロジー、製薬産業ではPAT (Process Analytical Technology) という名称で研究開発と実用化が進められている。

2009年に研究代表者らが実施したアンケート調査①によると、石油化学産業では線形モデルに基づくソフトセンサーが多く実装されているが、技術者の3割が「装置特性の時間的変化による予測精度の低下、モデルのメンテナンス」に技術的課題があると回答している。状況は他産業でも同様であり、推定精度を高く維持したままで仮想計測モデルの保守負荷をいかに低減するかが技術開発の焦点となっている。

2. 研究の目的

本研究では、原料や装置特性が変化する場合、およびそれらに不確実性が存在する場合でも、高精度な推定が行える仮想計測技術を開発することを目的とする。さらに、実際の操業データを用いてその有用性を実証する。

3. 研究の方法

(1) 原料や装置特性の変化への対応

研究代表者らが開発した局所 PLS (Locally Weighted Partial Least Squares; LW-PLS) ②は、Just-In-Time 型手法の一種であり、出力推定値が必要になった時点で、データベース内に格納してあるサンプルに、クエリ (入力変数測定値) との類似度に応じた重みを与えて、局所的な線形回帰モデルを構築する手法である。局所 PLS を対象として、非線形性の状態依存性、原料や装置特性の時間依存性に応じて、類似度を適切に決定する方法を開発する。また、原料特性や装置特性の変化が問題となる製造設備を対象として、局所 PLS の適用を検討し、その有用性を実証する。

(2) 不確実性への対応

原料特性や装置特性に測定できないバラツキがある場合、製品品質等の出力変数がどのような値を取り得るかということを確率的に表現できれば、リスクを適切に管理できるようになる。このような不確実性の取り扱いを可能にするために、確率密度関数を導入した実用的な仮想計測技術を開発する。

4. 研究成果

(1) 局所 PLS における適応的な類似度の設定
類似度を適応的に変化させるために、重み付きユークリッド距離 d_n に基づく類似度 ω_n を採用し、その重みをクエリ周辺サンプルの情報を用いて決定する方法を開発した。

$$\omega_n = \exp\left(\frac{\varphi d_n}{\sigma_d}\right)$$

$$d_n^2 = (x_n - x_q)^T \Theta (x_n - x_q)$$

ここで、 φ は局所化パラメータ σ_d は距離の標準偏差、 x_n はサンプル、 x_q はクエリ、 Θ は第 m 入力変数に対する重み θ_m を対角要素に持つ対角行列である。非線形性の状態依存性に応じて類似度を設定するためには、クエリ周辺での各入力変数の出力変数に対する非線形性の強さに応じて重みを決定すればよい。そこで、オフラインで、データベース内の全サンプルについて局所 PLS モデルを構築し、各入力変数に対する回帰係数の分散を求めておき、オンラインで、回帰係数の類似度重み付き分散を重み θ_m として利用する。具体的には、重み θ_m の初期値を 1 として類似度を求め、回帰係数の類似度重み付き分散を重み θ_m とする。この操作を重み θ_m が収束するまで繰り返し、最終的に、求めた重み θ_m を用いて類似度を定義して局所 PLS モデルを構築する。

提案法の有効性を検証するために、昭和電工大分事業所の分解ガソリン精留塔を対象として、製品である分解ガソリン中のアロマ濃度を推定するソフトセンサーを構築した。分解ガソリン精留塔の概要を図 1 に示す。アロマ濃度はモデル予測制御の制約条件であるが、およそ 1 日に 1 回の頻度でしか分析されていないため、生産性向上にはアロマ濃度の高精度な推定が必要とされている。入力変数として計 9 変数を選択し、2010 年 1 月から 2011 年 8 月までのデータをデータベースに格納し、それ以降のデータを用いてアロマ濃度推定を行った。ユークリッド距離を用いる従来法と、回帰係数の類似度重み付き分散を重みとする重み付きユークリッド距離を用いる提案法とを比較した結果、提案法により推定誤差を 11.3% 減少させることができた。

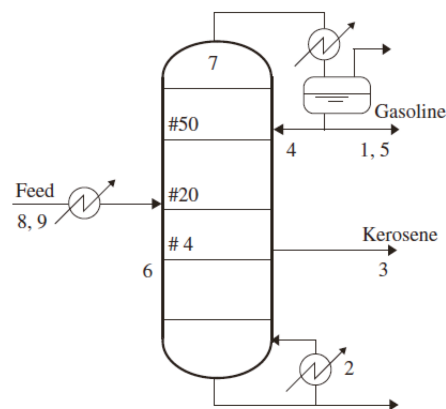


図 1 分解ガソリン精留塔

(2) 有機プラント精製プロセスへの適用

脱ガス塔と製品塔で有機製品を精製する有機プラント精製プロセスを対象とする。この昭和電工大分事業所の精製プロセスにはモデル予測制御が適用されており、操作変数は 3 変数、制御変数は 12 変数、外乱変数は 4 変数である。この精製プロセスは、製品中の不純物濃度が管理上限より小さくなるように運転されているが、不純物濃度は通常 1 日

1 回しか測定されておらず、安全余裕を見込んだ不経済な運転が行われていた。そこで、不純物濃度を管理上限に近づけ、スチーム使用量を削減し、運転コストの低減を実現するために、局所 PLS を用いて不純物濃度を推定できるソフトセンサーを構築すると共に、その推定値を利用する推定制御システムを開発した。推定制御システム導入前後における、製品中の不純物濃度の実測値とその推定値、管理上限と脱ガス塔におけるスチーム使用量を図 2 に示す。ただし、すべての変数はスケールされている。推定制御システム導入後は不純物濃度を管理上限付近に制御できており、スチーム使用量を削減できている。それに伴って、運転コストの大幅な削減が達成された。

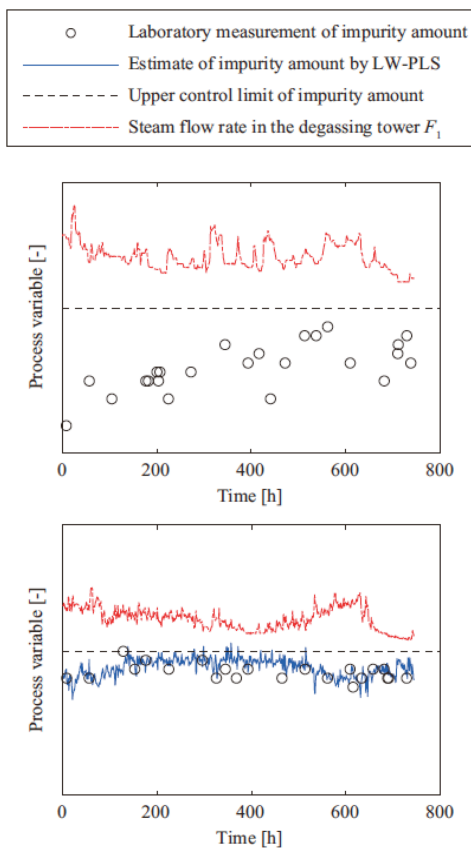


図 2 製品中アロマ濃度の推定制御
(上) 推定制御システム導入前
(下) 推定制御システム導入後

(3) 半導体ドライエッチング工程への適用

半導体製造プロセスでは、製品および中間製品の特性はサンプリング検査によって分析され、またその分析に時間がかかるため、製品特性を制御するためには、製品特性を高精度に推定できるバーチャルメトロロジーの構築が重要とされている。しかし、分解掃除や部品交換を伴う装置メンテナンスの前後で装置特性が急激に変化するという問題があり、バーチャルメトロロジーの安定運用は困難である。そこで、ソニーセミコンダクタのドライエッチング工程を対象として、局

所 PLS を用いて変換差を推定できるバーチャルメトロロジーの構築について検討した。従来法である逐次更新型モデル (SUM) と局所 PLS (LW-PLS) による変換差推定結果を図 3 に示す。図示した期間中に装置メンテナンスが 2 回実施されている。局所 PLS を適用することにより、従来法 SUM に比べて推定誤差を 45% 減少させることができた。

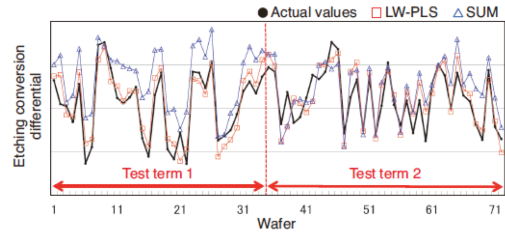


図 3 半導体ドライエッチング工程での変換差推定結果

(4) 不確定性への対応

不確定性を考慮することで、より有用な仮想計測技術を実現するために、既存の確定的なモデルにブートストラップフィルタを組み合わせる方法の有効性について検討した。対象としたのは、新日鐵住金の鉄鋼製造プロセスである。その安定操作を実現するために、溶鋼温度の推定および制御が非常に重要であるが、溶鋼の輸送に使用される取鍋の耐熱壁劣化による保温能力の低下などが原因で、転炉から連続鋳造機までの工程では十分に溶鋼温度の推定や制御が行われていない。そこで、連続鋳造機タンディッシュ内容鋼温度を推定できるモデルを構築した。

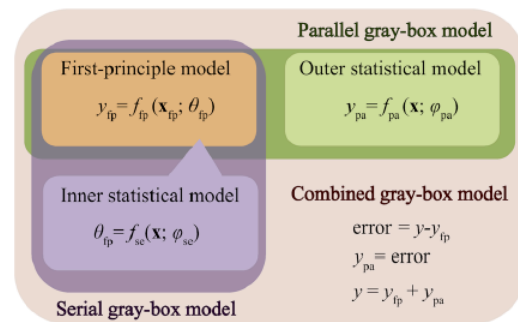


図 4 グレーボックスモデルの枠組み

まず、エンタルピー収支式に基づく物理モデルと、その物理モデルを補う統計モデルを構築した。物理モデルと統計モデルを統合したモデルをグレーボックスモデルと呼ぶが、本研究では、その一般的な枠組みを提示し、物理モデルを基盤として、物理モデルによる推定誤差を出力変数とする統計モデルを用いるパラレルグレーボックスモデル、物理モデル内のパラメータ最適値を出力変数とする統計モデルを用いるシリアルグレーボックスモデル、そして、それらを組み合わせたコンバインドグレーボックスモデルを構築した。推定精度を比較した結果、コンバイン

ドグレーボックスモデルを適用することにより、物理モデルに比べて推定誤差を43%減少させることができた。

次に、プロセスの不確定性を考慮し、タンディッシュ内容鋼温度の確率分布を推定するために、コンバインドグレーボックスモデルにブートストラップフィルタを組み合わせた。ブートストラップフィルタの適用に際しては、過去の運転実績から広い事前分布を設定し、合金投入後 T_1 、二次精錬前 T_2 、二次精錬後 T_3 の3地点で溶鋼温度実測値が得られるたびに事後分布を計算することで、最終的なタンディッシュ内容鋼温度の狭い分布を得た。3地点における溶鋼温度分布の推定結果を図5に示す。分布が徐々に狭くなっていることが確認できる。高い推定精度を実現するだけでなく、溶鋼温度の分布を推定することで、目標温度を実現できないリスクを定量的に把握できるようになった。この結果に基づいて、将来的には、リスクを低減できるフィードフォワード制御を実現できる。

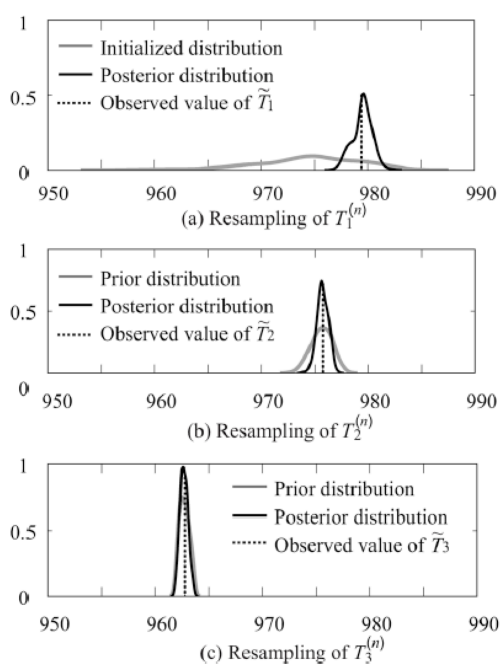


図5 ブートストラップフィルタを用いた溶鋼温度推定結果

(5) 入力変数選択

統計モデルを用いて仮想計測を実現する際には、出力変数の予測に寄与しない入力変数を取り除く必要がある。入力変数を1つずつ個別に評価する従来法よりも効率的に変数選択を行う方法として、入力変数をグループ化して、グループ単位で変数選択を行う方法がある。その1つがNCSC-VS (Nearest Correlation Spectral Clustering-based Variable Selection) であるが、NCSC-VSはパラメータ調整が難しく、計算負荷が高いという欠点がある。そこで、変数間の相関関係に基づくクラスタリング手法であるNCLM (Nearest Correlation Louvain Method) と、

NCLMを用いた入力変数選択手法NCLM-VSを開発した。LMはSCよりも速く隣接行列を分割でき、生成するグループ数を調整する必要がない。提案法の有効性を検証するため、アルカリ洗浄塔を対象として、複数の入力変数選択法を用いて、未反応NaOH濃度を推定するPLSモデルを構築した。NCSC-VSとNCLM-VSは従来法と比較すると大幅に推定精度を改善できた。さらにNCLM-VSはNCSC-VSの計算時間を大幅に改善することができ、全手法の中で最も計算時間が短かった。

<引用文献>

- ① 加納編：高度プロセス制御に関するアンケート調査結果報告書 (2010)
- ② S. Kim, M. Kano, H. Nakagawa, and S. Hasebe: Estimation of active pharmaceutical ingredients content using locally weighted partial least squares and statistical wavelength selection. Int. J. Pharm., Vol. 421, No. 2, pp. 269-274 (2011)

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計5件)

- ① Toshiya Hirai, Manabu Kano: Adaptive Virtual Metrology Design for Semiconductor Dry Etching Process through Locally Weighted Partial Least Squares. IEEE Transaction on Semiconductor Manufacturing (2015) 査読有
DOI: 10.1109/TSM.2015.2409299
- ② Iftikhar Ahmad, Manabu Kano, Shinji Hasebe, Hiroshi Kitada, Noboru Murata: Prediction of Molten Steel Temperature in Steel Making Process with Uncertainty by Integrating Gray-Box Model and Bootstrap Filter. Journal of Chemical Engineering of Japan, Vol. 47, No. 11, pp. 827-834 (2014) 査読有
DOI: 10.1252/jcej.14we067
- ③ Iftikhar Ahmad, Manabu Kano, Shinji Hasebe, Hiroshi Kitada, Noboru Murata: Gray-Box Modeling for Prediction and Control of Molten Steel Temperature in Tundish. Journal of Process Control, Vol. 24, Issue 4, pp. 375-382 (2014) 査読有
DOI: 10.1016/j.jprocont.2014.01.018
- ④ Sanghong Kim, Manabu Kano, Shinji Hasebe, Akitoshi Takinami, Takeshi Seki: Long-Term Industrial Applications of Inferential Control Based on Just-In-Time Soft-Sensors: Economical Impact and Challenges. Industrial & Engineering Chemistry

Research, Vol. 52, No. 35, pp. 12346-12356 (2013) 査読有
DOI: 10.1021/ie303488m

- ⑤ Sanghong Kim, Ryota Okajima, Manabu Kano, Shinji Hasebe: Development of Soft-sensor Using Locally Weighted PLS with Adaptive Similarity Measure. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, Vol. 124, pp. 43-49 (2013) 査読有
DOI: 10.1016/j.chemolab.2013.03.008

[学会発表] (計 14 件)

- ① Ryosuke Yoshizaki, Manabu Kano, Shuichi Tanabe, Takuya Miyano: Process Parameter Optimization based on LW-PLS in Pharmaceutical Granulation Process. *International Symposium on Advanced Control of Chemical Processes (ADCHEM)*, Whistler, Canada, June 7-10 (2015)
- ② Taku Uchimaru, Koji Hazama, Koichi Fujiwara, Manabu Kano: Nearest Correlation Louvain Method for Fast and Good Selection of Input Variables of Statistical Model. *International Symposium on Advanced Control of Chemical Processes (ADCHEM)*, Whistler, Canada, June 7-10 (2015)
- ③ Ryosuke Yoshizaki, Sanghong Kim, Manabu Kano: Optimization of Nonlinear Multi-Stage Process with Characteristic Changes through Locally-Weighted Partial Least Squares. *The 10th Asian Control Conference (ASCC)*, Kota Kinabalu, Malaysia, May 31-June 3 (2015)
- ④ Taku Uchimaru, Koji Hazama, Koichi Fujiwara, Manabu Kano: Efficient Wavenumber Selection Based on Nearest Correlation Louvain Method for NIR Calibration Modeling. *The 10th Asian Control Conference (ASCC)*, Kota Kinabalu, Malaysia, May 31-June 3 (2015)
- ⑤ Taku Uchimaru, Takuya Miyano, Koichi Fujiwara, Manabu Kano, Hideaki Tanabe, Hiroshi Nakagawa, Tomoyuki Watanabe, Naoki Wakiyama: Wavenumber Selection for NIR Calibration Modeling: Application to Water and Drug Content Estimation. *AIChE Annual Meeting*, Atlanta, US, Nov. 16-21 (2014)
- ⑥ Toshiya Hirai, Koji Hazama, Manabu Kano: Application of Locally Weighted Partial Least Squares to Design of Semiconductor Virtual Metrology. *IEEE Multi-conference on Systems and Control (MSC)*, Antibes, France, Oct. 8-10 (2014)
- ⑦ Iftikhar Ahmad, Manabu Kano, Shinji

Hasebe, Hiroshi Kitada, Noboru Murata: Design of Inner and Outer Gray-Box Models to Predict Molten Steel Temperature in Tundish. *The 10th IFAC International Symposium on Dynamics and Control of Process Systems (DYCOPS)*, Mumbai, India, Dec. 18-20 (2013)

- ⑧ Manabu Kano: State-of-the-art Practice of Virtual Sensing Technology in Process Industries. *The 9th World Congress of Chemical Engineering (WCCE9)*, Seoul, Korea, Aug. 18-23 (2013)
- ⑨ Toshiya Hirai, Manabu Kano, T. Tatsumi: Quality Control for Dry Process through APC/EES. *The 34th International Symposium on Dry Process (DPS)*, Tokyo, Japan, Nov. 15-16 (2012)

6. 研究組織

(1) 研究代表者

加納 学 (KANO, Manabu)

京都大学・大学院情報学研究科・教授

研究者番号：30263114