

令和 6 年 5 月 10 日現在

機関番号：12605

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2021～2023

課題番号：21K04766

研究課題名（和文）バッチプロセスの挙動予測のための機械学習手法

研究課題名（英文）Machine Learning to Estimate the Behavior of a Batch Process

研究代表者

山下 善之（Yamashita, Yoshiyuki）

東京農工大学・工学（系）研究科（研究院）・教授

研究者番号：60200698

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,200,000円

研究成果の概要（和文）：化学産業や製薬産業では、バッチプラントが広く使われています。バッチプラントの運転・操業においては、品質管理や効率化、最適化が重要ですが、そのために、近年ではデータ駆動型のモデル化技術の活用が進められています。データ駆動型のモデルを構築するためには大量のデータが必要ですが、バッチプラントは多品種少量生産が多いために蓄積しているデータの量が少なく、十分な精度のモデルを構築することが困難でした。そこで本研究では、異なる品種の生産も含めたさまざまなバッチのデータを最大限に活用することによって、学習データの量が少なくても高精度なモデルを構築することができるデータ駆動型手法を開発しました。

研究成果の学術的意義や社会的意義

この研究はデータ駆動型機械学習を発展し、学習データの不足という問題を解決する新たなアプローチを提案しています。この手法は、少量のデータからも高精度な予測モデルを構築可能とし、機械学習の理論と実践のギャップを埋める学術的意義の高いものです。

社会的には、この研究成果は化学産業や製薬産業におけるバッチプラントの生産性や効率、品質、安全性を向上させることに直接寄与します。エネルギー消費の削減や原料の使用効率を高め、環境負荷の軽減にも繋がります。また、作業員のリスクを減少させ、より持続可能な製造業の実現を支援します。

研究成果の概要（英文）：Batch plants are used in the chemical and pharmaceutical industries. They are important for quality control, efficiency improvement, and optimization. Recently, data-driven modeling techniques have been used to achieve these objectives. However, batch plants often produce many different products in small quantities, which makes it difficult to construct models with sufficient accuracy. We developed a data-driven method that can create highly accurate models with limited data. It uses data from different batches, including data from different products.

研究分野：プロセスシステム工学

キーワード：プロセスモニタリング バッチプロセス 化学プラント 機械学習 モデル化

様式 C - 19、F - 19 - 1 (共通)

1. 研究開始当初の背景

反応器や蒸留塔など、化学プラントにおける装置内の挙動を正確に予測することができれば、製品品質の安定化やエネルギー効率の改善などさまざまなメリットが期待できる。しかし、実プラントでは、装置が大きいために装置内で濃度や温度の分布がある分布定数系であり、物質収支や熱収支で物理モデルを立てたとしても解析解を実時間で求めることは困難であり、かつ、未測定な変数も多いため実用的ではない場合が多い。そこで、近年、機械学習などのデータ駆動型のモデルの活用が盛んに取り込まれるようになってきた。

データ駆動型のモデルを構築する場合には、当然のことながら、たくさんのデータが不可欠である。しかし、バッチプロセスにおいては、同じ装置でも異なる品種のさまざまな製品を製造するため、それぞれの品種ごとのデータはあまりたくさん得られない場合がほとんどであり、これまで、データ駆動型のアプローチによってモデル化することが困難であった。

2. 研究の目的

本研究では、バッチプロセスの挙動予測のためのモデルを、データ駆動型のアプローチで構築できるようにするための方法を開発しようとするものである。そのために、異なる品種を製造する際のデータを有効に活用する方法と、物理モデルを併用する方法の2つを検討する。前者については、機械学習分野で最近活発に研究されている転移学習やマルチタスク学習の考え方を適用する。後者については、物理モデルとデータ駆動型モデルをハイブリッドで活用するグレーボックスモデルを開発する。さらに、両者を組み合わせることによって、従来では十分な精度でモデル化できなかったバッチプロセスの高精度な挙動予測モデル構築手法を確立することを目的とする。

3. 研究の方法

本研究では、転移学習やマルチタスク学習の考え方を導入することによって、バッチプロセスの挙動予測モデルの作成においても、他の品種のデータも活用した学習したモデルを構築し、当該品種のデータでも高精度の予測が可能モデルを構築する手法を開発しようとするものであり、化学工学や反応工学の分野ではこれまで試みられてこなかった独自の手法である。さらに、その際、物質収支や熱収支といった物理モデルも併用することによって、不足するデータを補完する手法も開発・導入しようとする研究である。

シミュレーションで生成したバッチプロセスの運転データおよび実プラントの運転データに対して、転移学習やマルチタスク学習の考え方を導入した機械学習手法を適用し、モデルによる予測結果とデータセットの性質などについて検討を行い、比較的データ量の少ないバッチプロセスの挙動予測に適用可能なモデル化手法を明らかにする。

4. 研究成果

一般に、バッチプロセスのモデルをデータ駆動型のアプローチで構築しようとする、モデル構築に必要なデータ量を確保することが困難であり、結果として十分な精度のモデルを構築することができなかった。この課題を解決するために、本研究では、転移学習やマルチタスク学習の考え方を活用した手法を提案し、まずは簡単な数値例やシミュレーションデータによって検討した。具体的には、既往のスパースモデリングやマルチタスク学習、転移学習などの手法をベースとして、バッチプロセスへ適用する際の課題から考察して新たな手法の検討を進めた。また、データだけではなく、対象プロセスに対する物理的な知識を併用するグレーボックスアプローチについても検討した。その結果、評価関数を適切に工夫することなどによって、従来の手法では運転データが少なすぎて十分な精度のモデルを作成することが困難であった場合に対しても、運転状況の異なる他のバッチのデータをより効率よく活用することが出来る手法を開発することができた。

さらに、実際のバッチプラントの運転データに対して開発した手法を適用する検討も実施した。その結果、従来の手法と比べてより少ないデータ量でも高精度なモデルを構築できることが確認され、開発した手法の有効性を検証することができた。

この研究成果は、データ駆動型機械学習を発展し、学習データの不足という問題を解決する新たなアプローチを提案しており、少量のデータからも高精度な予測モデルを構築可能とし、機械学習の理論と実践のギャップを埋める学術的意義の高いものである。また社会的には、この技術は化学産業や製薬産業におけるバッチプラントの生産性や効率、品質、安全性を向上させることに直接寄与し、エネルギー消費の削減や原料の使用効率を高め、環境負荷の軽減にも繋がり、作業員のリスクを減少させ、より持続可能な製造業の実現を支援することが可能である。

以上述べてきたように、本研究によって、データ量が比較的少ないバッチプロセスにおいても、異なる品種の生産も含めたさまざまなバッチのデータを最大限に活用することによって、データ駆動型のアプローチで高精度なモデルを構築することが可能となった。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計4件（うち査読付論文 4件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 0件）

| | |
|---|----------------------|
| 1. 著者名 Takafumi Yamaguchi, Yoshiyuki Yamashita | 4. 巻 181 |
| 2. 論文標題 Multi-target regression via target combinations using principal component analysis | 5. 発行年 2024年 |
| 3. 雑誌名 Computers & Chemical Engineering | 6. 最初と最後の頁 108510 |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.compchemeng.2023.108510 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |

| | |
|---|---------------------|
| 1. 著者名 Xia Junqing, Yamashita Yoshiyuki | 4. 巻 55 |
| 2. 論文標題 Online Batch Process Monitoring with a Combination of Normal Operating History Data and Physical Knowledge | 5. 発行年 2022年 |
| 3. 雑誌名 JOURNAL OF CHEMICAL ENGINEERING OF JAPAN | 6. 最初と最後の頁 38～50 |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1252/jcej.20we158 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |

| | |
|---|----------------------|
| 1. 著者名 Takafumi Yamaguchi, Yoshiyuki Yamashita | 4. 巻 150 |
| 2. 論文標題 Quality prediction for multi-grade batch process using sparse flexible clustered multi-task learning | 5. 発行年 2021年 |
| 3. 雑誌名 Computers & Chemical Engineering | 6. 最初と最後の頁 107320 |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.compchemeng.2021.107320 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |

| | |
|---|---------------------|
| 1. 著者名 Junqing Xia, Yoshiyuki Yamashita | 4. 巻 55 |
| 2. 論文標題 Online Batch Process Monitoring with a Combination of Normal Operating History Data and Physical Knowledge | 5. 発行年 2022年 |
| 3. 雑誌名 Journal of Chemical Engineering of Japan | 6. 最初と最後の頁 38-50 |
| 掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1252/jcej.20we158 | 査読の有無 有 |
| オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難 | 国際共著 - |

〔学会発表〕 計10件（うち招待講演 8件 / うち国際学会 3件）

| |
|---------------------------------------|
| 1. 発表者名 山口貴史, 山下善之 |
| 2. 発表標題 バッチプロセスのsmallデータ環境での品質予測制御 |
| 3. 学会等名 化学工学会第89年会 |
| 4. 発表年 2024年 |

| |
|-------------------------------------|
| 1. 発表者名 山下善之 |
| 2. 発表標題 デジタル技術を駆使した 化学プラントの運転・保守 |
| 3. 学会等名 石油化学業界向けDX推進セミナー（招待講演） |
| 4. 発表年 2023年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 Yoshiyuki Yamashita |
| 2. 発表標題 Digitalization in chemical plant operation and maintenance |
| 3. 学会等名 SII 2023（招待講演）（国際学会） |
| 4. 発表年 2023年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 Yoshiyuki Yamashita |
| 2. 発表標題 Expectations Toward Next-Generation Chemical Process Manufacturing |
| 3. 学会等名 SICE 2022 Workshop（招待講演）（国際学会） |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 山下善之 |
| 2. 発表標題 化学工学とデータ科学の融合 ~AI・IoT・DXの視点から~ |
| 3. 学会等名 化学工学会第87年会（招待講演） |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|-------------------------------------|
| 1. 発表者名 山下善之 |
| 2. 発表標題 Smart Factory |
| 3. 学会等名 ISPE日本本部2022年度年次大会（招待講演） |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|---|
| 1. 発表者名 Junqing Xia and Yoshiyuki Yamashita, |
| 2. 発表標題 Physical-Principle Based Extended Attributes for Process Fault Detection |
| 3. 学会等名 化学工学会第52回秋季大会 |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 Yoshiyuki Yamashita |
| 2. 発表標題 Digital Transformation in the Chemical Industry |
| 3. 学会等名 iCo-CSET 2021（招待講演）（国際学会） |
| 4. 発表年 2021年 |

| |
|----------------------------------|
| 1. 発表者名 山下善之 |
| 2. 発表標題 化学産業のデジタルトランスフォーメーション |
| 3. 学会等名 化学工学会第87年会（招待講演） |
| 4. 発表年 2022年 |

| |
|--|
| 1. 発表者名 山下善之 |
| 2. 発表標題 化学プラントのDXの現状と提言 |
| 3. 学会等名 INCHEM Tokyo 2021 特別講演会（招待講演） |
| 4. 発表年 2021年 |

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

| 氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号) | 所属研究機関・部局・職 (機関番号) | 備考 |
|---------------------------|-----------------------|----|
| | | |

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

| 共同研究相手国 | 相手方研究機関 |
|---------|---------|
| | |