

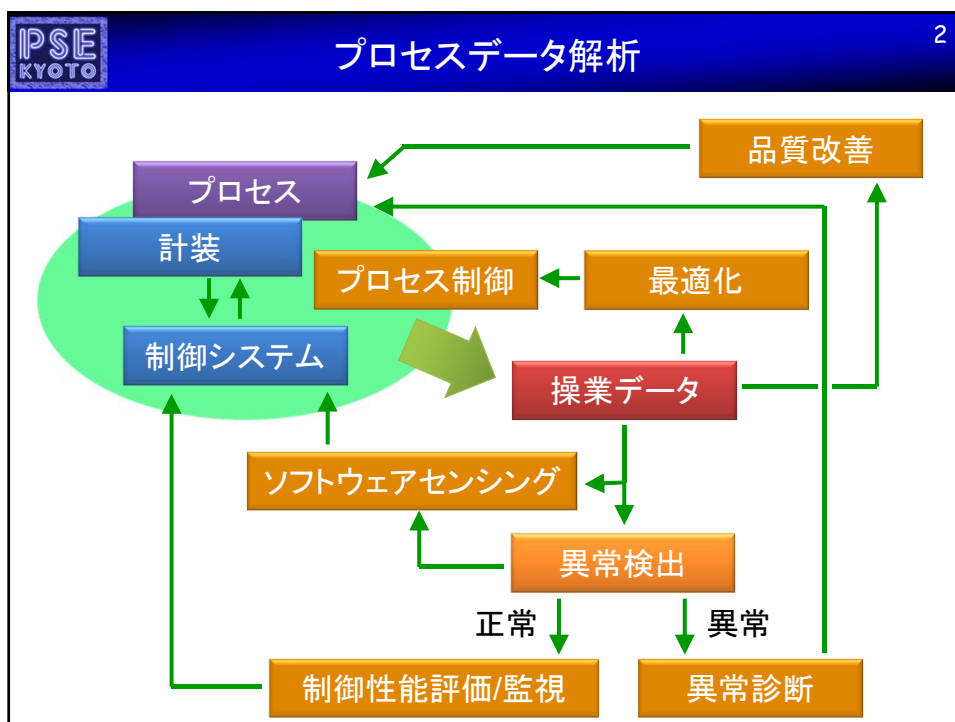
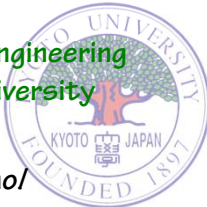
PSE KYOTO

データ解析応用

京都大学 加納 学

Division of Process Control & Process Systems Engineering
Department of Chemical Engineering, Kyoto University

manabu@cheme.kyoto-u.ac.jp
<http://www-pse.cheme.kyoto-u.ac.jp/~kano/>





様々な技術があるが、何がKEYなのか？

3

状態推定(ソフトセンサー)
オンラインで測定されていない製品品質を推定する

プロセス制御
製品品質や運転状態を希望通りに操る

運転管理(異常検出)
早期に異常を検出する

制御性能監視
制御系が満足のいく性能を発揮しているか監視する

異常診断
異常の原因を究明する

最適化
最適な運転条件を求める

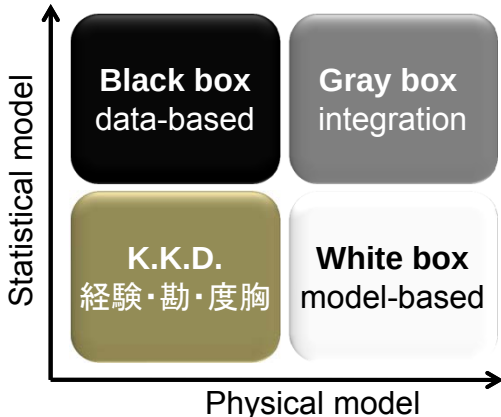
品質改善
製品品質や歩留りを改善する





統計的モデル vs. 物理モデル

4





ソクラテス:
「およそ理論を無視したものなら、
そのようなものを技術とは呼ばないよ」
(プラトン, 「ゴルギアス」)



産業応用事例

5

- ソフトセンサー(仮想計測)
 - 蒸留プロセスの製品組成推定と信頼性評価.
昭和電工
 - 相関型Just-in-Timeモデリング.
昭和電工

- 品質改善
 - 鉄鋼製品の歩留り改善.
住友金属
 - 樹脂コンパウンド製品の歩留り改善.
東京インキ



産業界での現状

6

process	methodology							total
	Phys	MRA	PLS	O.L.	ANN	JIT	Gray	
distillation	20	256	41	6	0	5	3	331
reaction	5	32	43	0	0	5	1	86
polymerization	0	4	8	0	3	0	5	20
others	0	1	1	0	0	0	0	2
total	25	293	93	6	3	10	9	439

Phys: physical model

MRA: multiple regression analysis

PLS: partial least squares regression

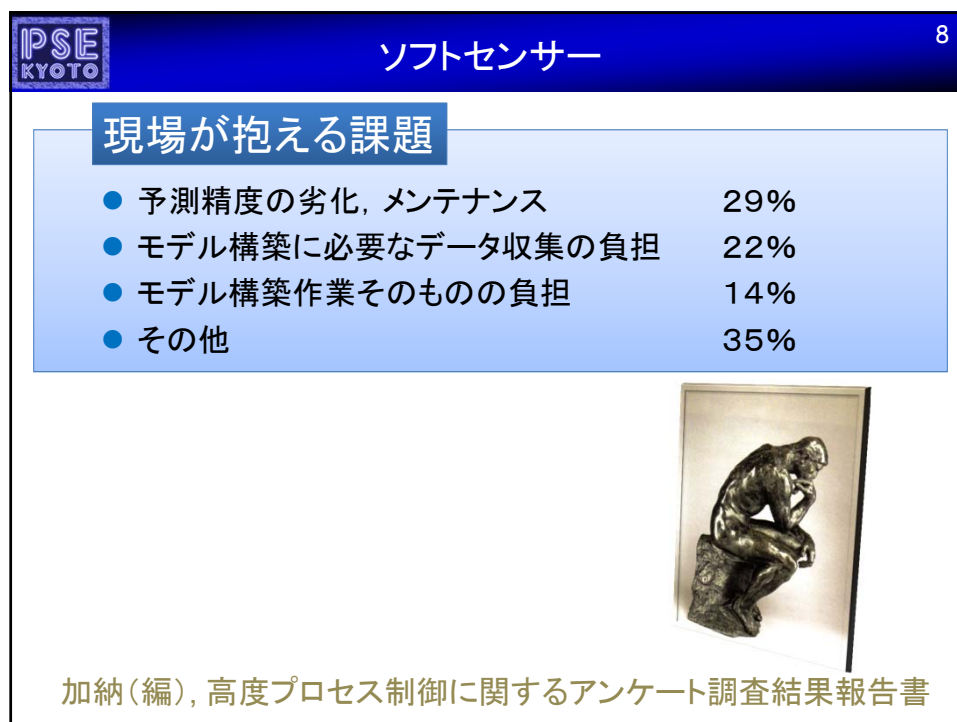
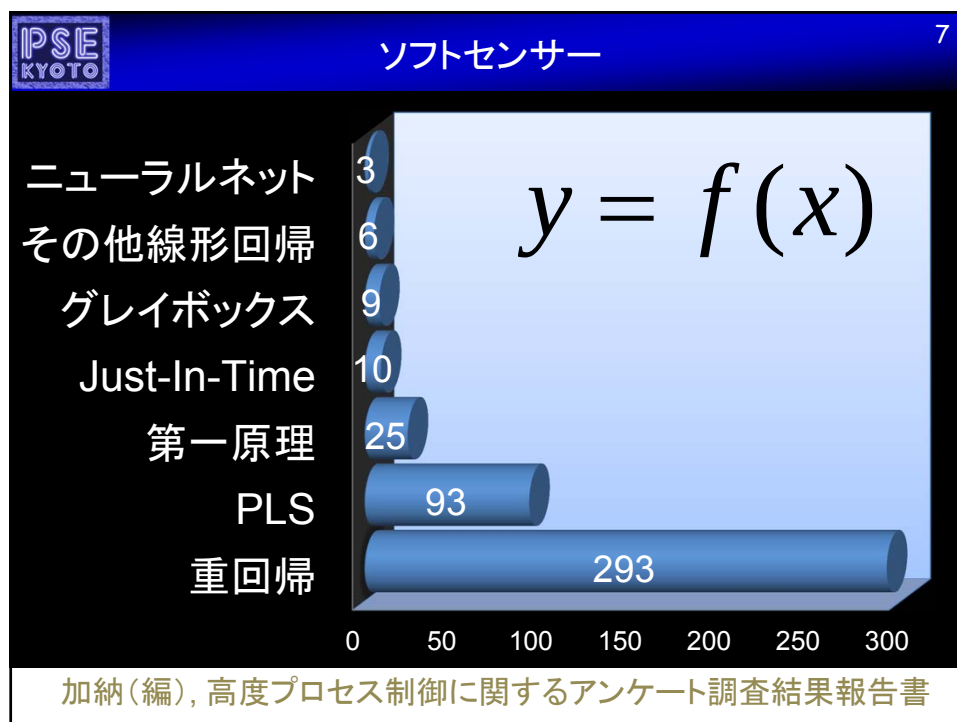
O.L.: other linear regression

ANN: artificial neural network

JIT: just-in-time model

Gray: gray-box model or hybrid model between physical model and statistical model

加納学(編), 日本学術振興会プロセスシステム工学第143委員会ワークショップNo.27
「高度プロセス制御に関するアンケート調査結果報告書」, 2009



多重共線性

9

	Data "A"			Data "B"		
y	x1	x2	x3	x1	x2	x3
241	15.9	34.6	64.8	16.1	34.7	65.1
321	37.0	16.1	72.1	36.9	16.3	72.0
82	61.1	83.0	28.6	60.6	82.8	28.9
156	86.0	65.9	33.9	85.9	65.9	34.2
係数	1.36	-0.80	5.01	-4.28	-18.9	-26.0

入力変数が厳密に線形従属でなくても、入力変数間に強い相関関係が存在する場合には、係数推定値の分散が大きくなり、推定結果の信頼性が低下してしまう。

Partial Least Squares

10

出力変数と潜在変数(入力変数の線形結合)との内積が最大となるように、潜在変数を決定する。

OLS

$$r_{y\hat{y}} = \frac{\sigma_{y\hat{y}}^2}{\sigma_y \sigma_{\hat{y}}} = \frac{y^T \hat{y}}{\|y\| \|\hat{y}\|} = \cos \theta$$

PCR

$$\sigma_z^2 = \frac{1}{N-1} \|z\|^2$$

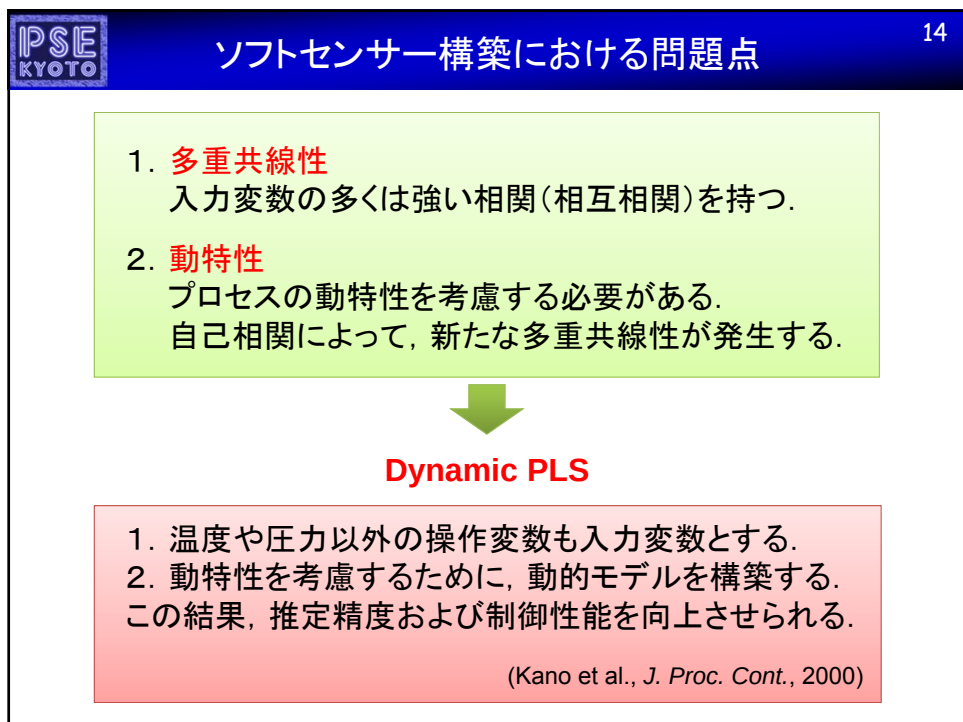
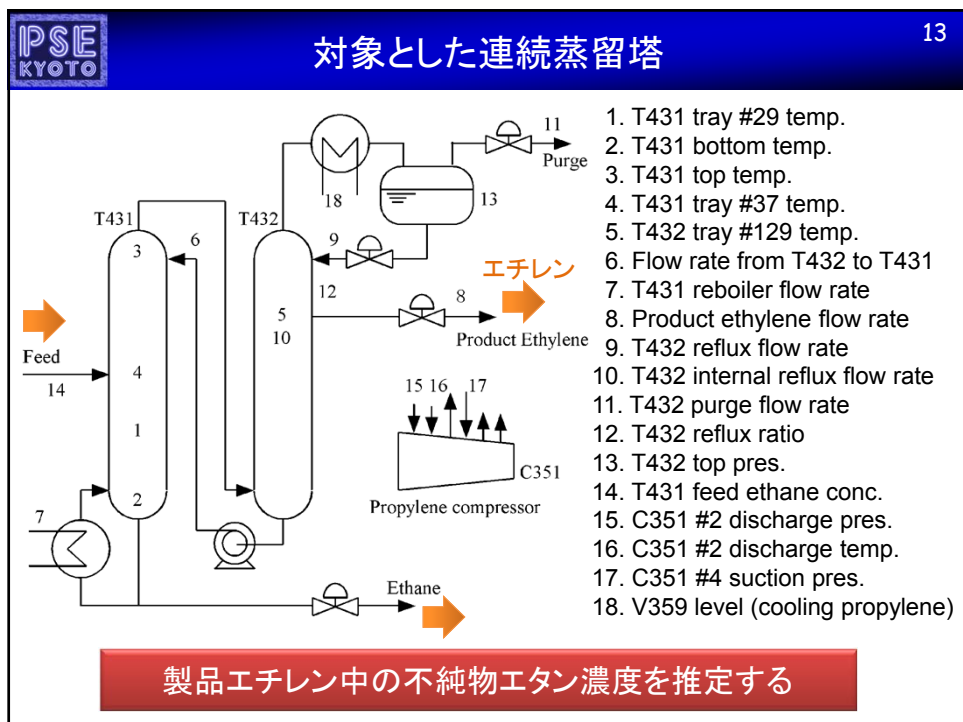
PLS

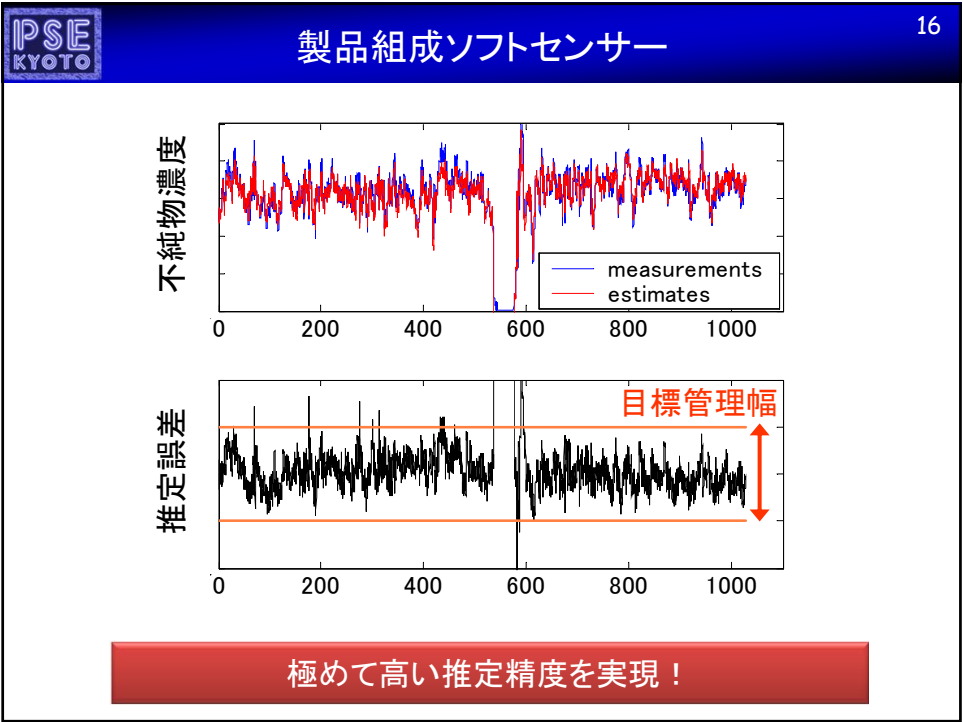
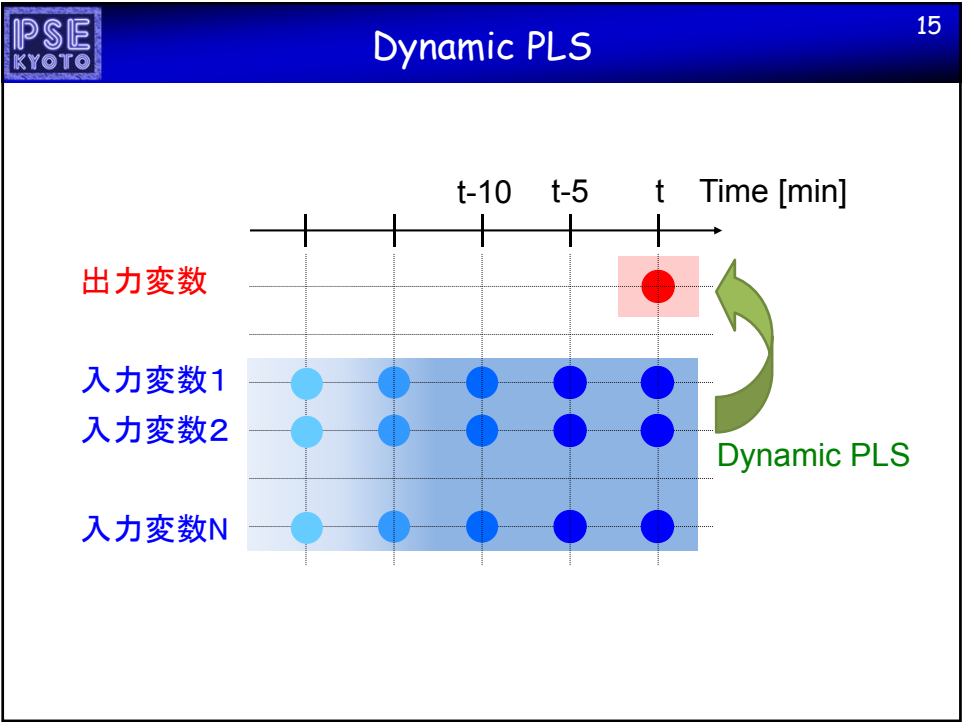
$$\langle y, z \rangle = \|y\| \|z\| \cos \theta$$

PLSはOLSとPCRの中間的な性質を持つ。
出力変数との相関および入力変数間の相関を同時に考慮して、適切な潜在変数を決定する。

PSE KYOTO OLS vs. PLS 11									
Data "A"				Data "B"					
y	x1	x2	x3	x1	x2	x3			
241	15.9	34.6	64.8	16.1	34.7	65.1			
321	37.0	16.1	72.1	36.9	16.3	72.0			
82	61.1	83.0	28.6	60.6	82.8	28.9			
156	86.0	65.9	33.9	85.9	65.9	34.2			
OLS	1.36	-0.80	5.01	-4.28	-18.9	-26.0			
PLS (1)	-1.00	-1.59	1.11	-1.00	-1.60	1.12	安定		
(2)	0.73	-2.84	1.53	0.74	-2.86	1.54			
(3)	1.36	-0.80	5.01	-4.28	-18.9	-26.0			

PSE KYOTO 産業応用事例 12									
● ソフトセンサー(仮想計測)									
■ 蒸留プロセスの製品組成推定と信頼性評価. 昭和電工									
■ 相関型Just-in-Timeモデリング. 昭和電工									
● 品質改善									
■ 鉄鋼製品の歩留り改善. 住友金属									
■ 樹脂コンパウンド製品の歩留り改善. 東京インキ									







推定誤差の原因

17

推定誤差 = 測定値 - 推定値

- 原因はソフトセンサーか、それとも分析機器か？
 - 分析機器
 - ◆ サンプリングラインの閉塞等のトラブル
 - ソフトセンサー
 - ◆ 入力変数選択の失敗
 - ◆ 運転条件の変動
 - ◆ 触媒劣化や装置汚れなど、プロセスの経時変化

推定誤差の原因を突き止めることはできるか？



PLSを利用したSPC

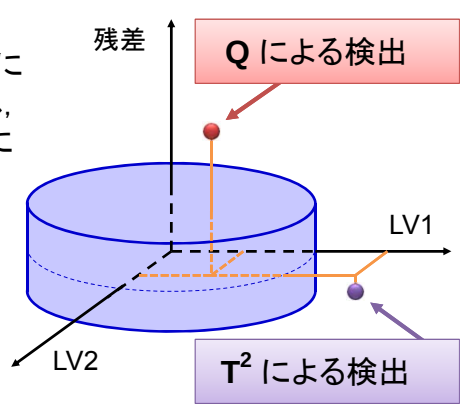
18

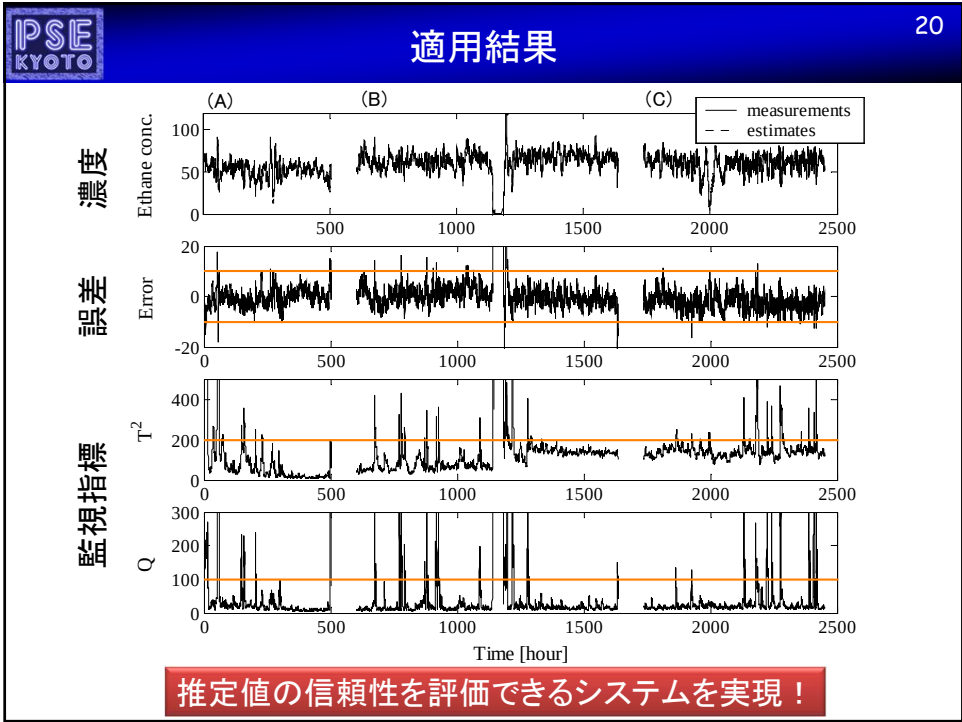
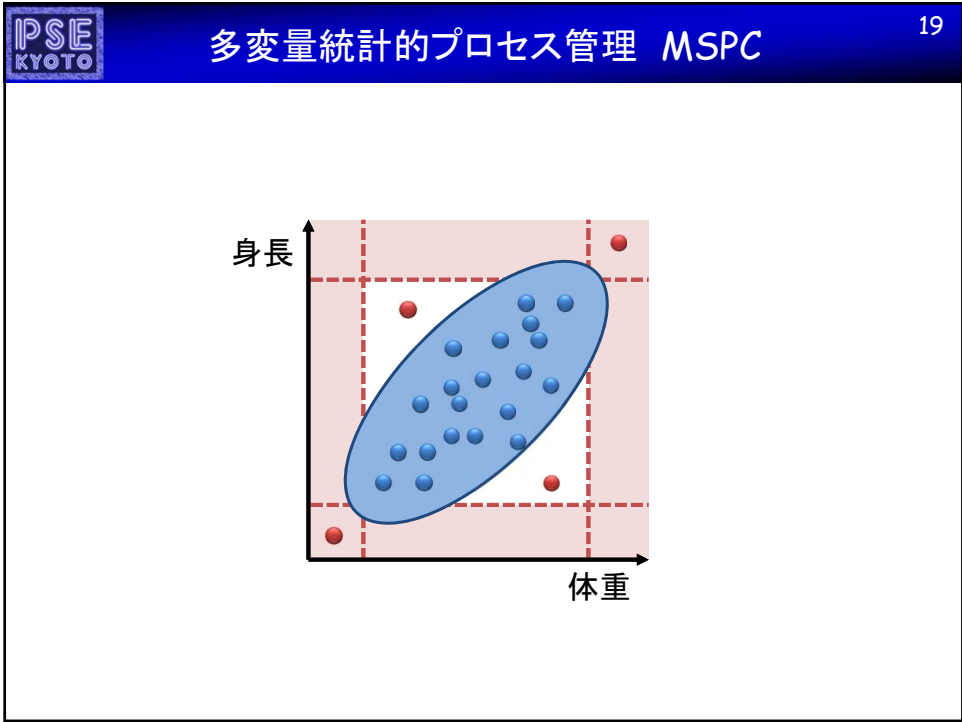
入力変数が張る多次元空間において、モデル構築に利用した運転データが存在する部分空間内でのみ、推定モデルおよびその推定値を信頼できる。



現在の運転状態が部分空間内にあるかどうかをオンライン監視し、なければ推定値を制御目的等にご利用しない。

PLS-based SPC






産業応用事例

21

- ソフトセンサー(仮想計測)
 - 蒸留プロセスの製品組成推定と信頼性評価.
昭和電工
 - 相関型Just-in-Timeモデリング.
昭和電工

- 品質改善
 - 鉄鋼製品の歩留り改善.
住友金属
 - 樹脂コンパウンド製品の歩留り改善.
東京インキ


保守負荷の低減を目指して

22

- Dynamic PLS
- 部分空間同定・二段階部分空間同定
- ニューラルネットワーク
 - 十分な精度のモデルを構築することができたとして、その精度を維持できるかが産業応用上の深刻な問題.
 - 技術者不足もあり、モデルの再構築は事実上困難.

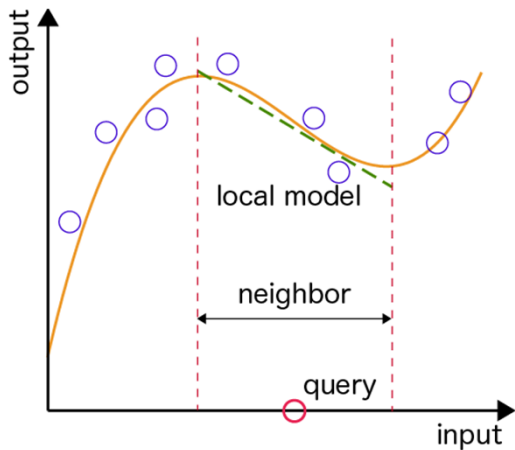


- Recursive PLS
 - 逐次的にモデルを更新するため、直近の運転状態に過度に適応してしまう.
- Just-In-Timeモデル
 - 測定値が得られる毎にデータベースを更新し、データベースに基づいて、局所的なモデルを構築する.



Just-In-Timeモデルの概念

23

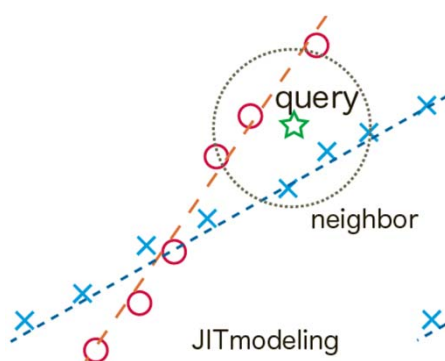


- Just-In-Timeモデル
 - Query点近傍のデータを集め、それらのデータのみを用いて、局所的な(線形)モデルを構築する。

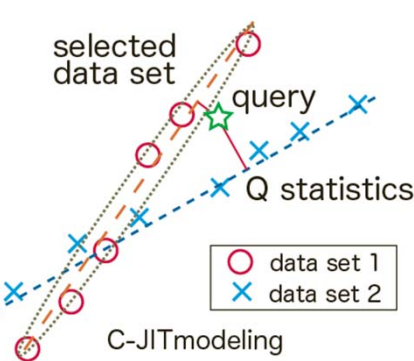


相関型JITモデルへ

24



JIT modeling



C-JIT modeling

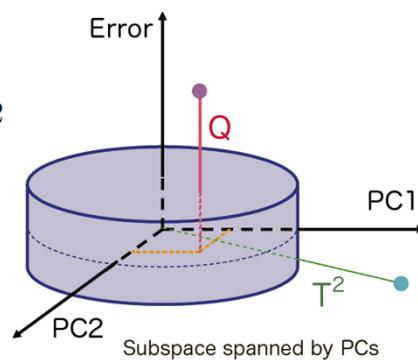
- 相関型Just-In-Time (CoJIT) モデル
 - 従来のJITモデルでは、「距離」のみに基づいて近傍が決定されるため、相関関係は一切考慮されない。
 - 相関関係を考慮すれば、より優れたモデルが構築できる。

(藤原ら, SICE論文集, 2008)

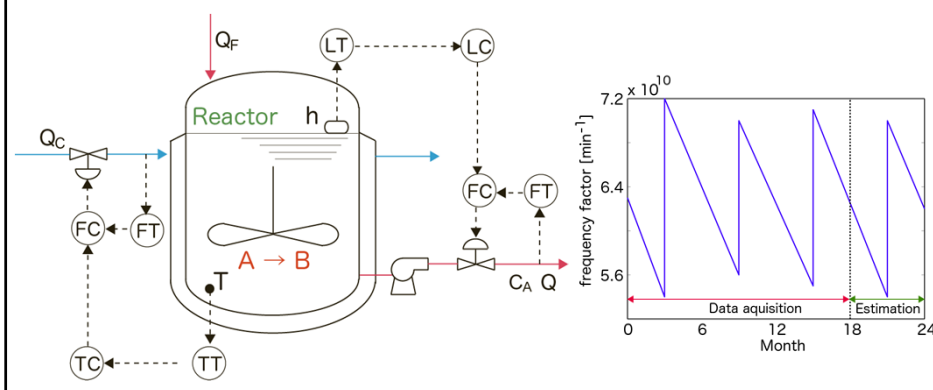
- 新たな入出力データをデータベースに保存する.
- データベースより, $k(1 \sim K)$ 番目のデータセットを取り出し, 各データセットに対する評価指標 J を計算する.
- J が最小となるデータセットを選択する.
- 選択したデータセットに基づいて, モデルを構築する.
- この手続きを繰り返す.

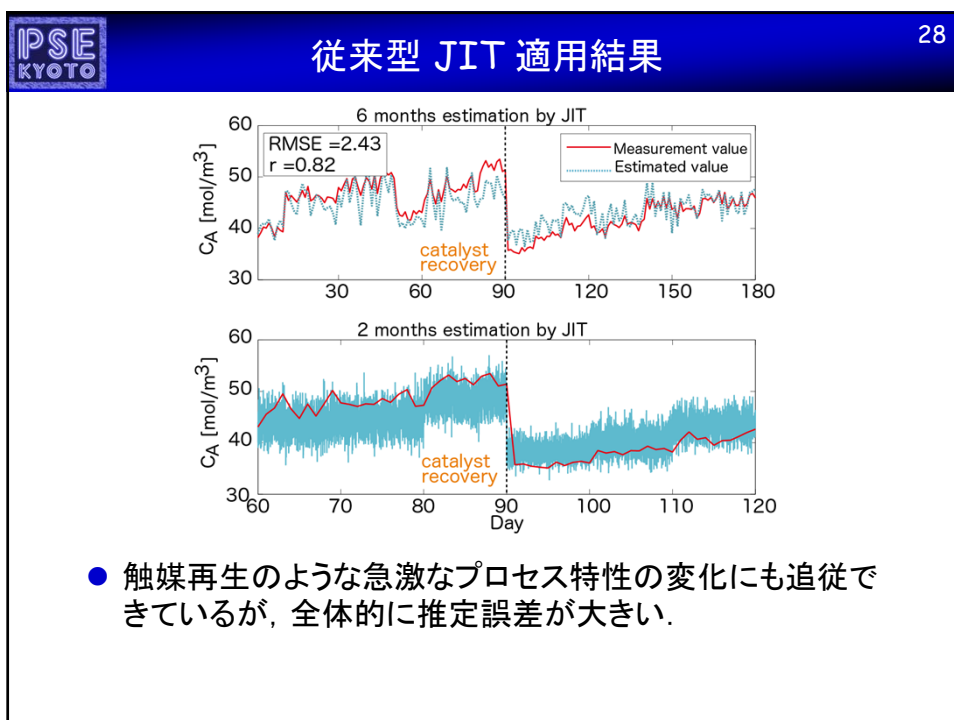
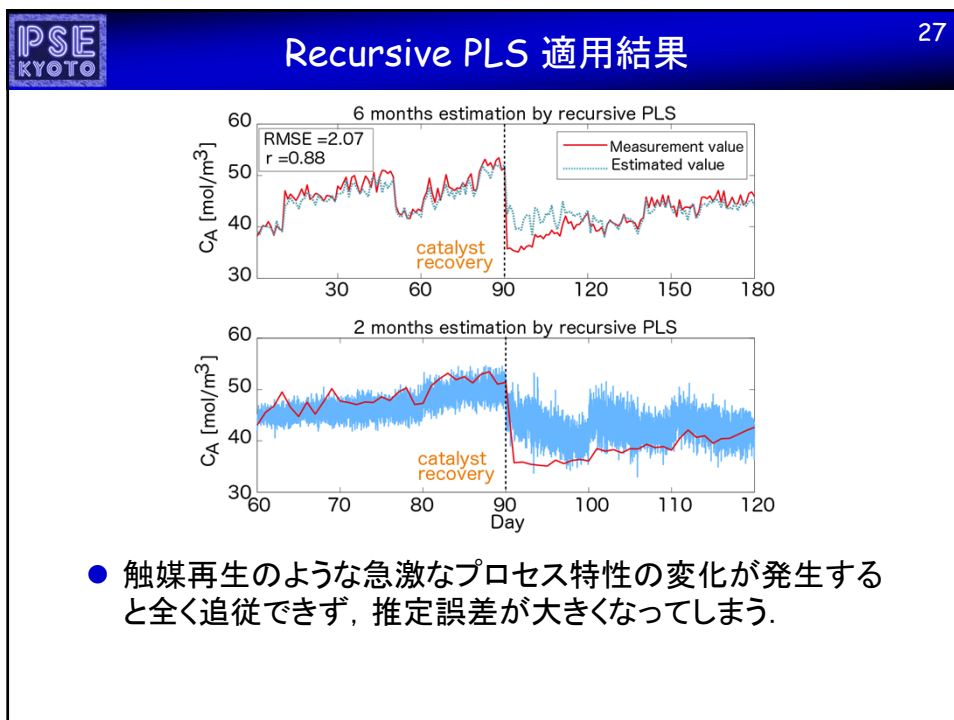
$$J = \lambda Q + (1 - \lambda)T^2$$

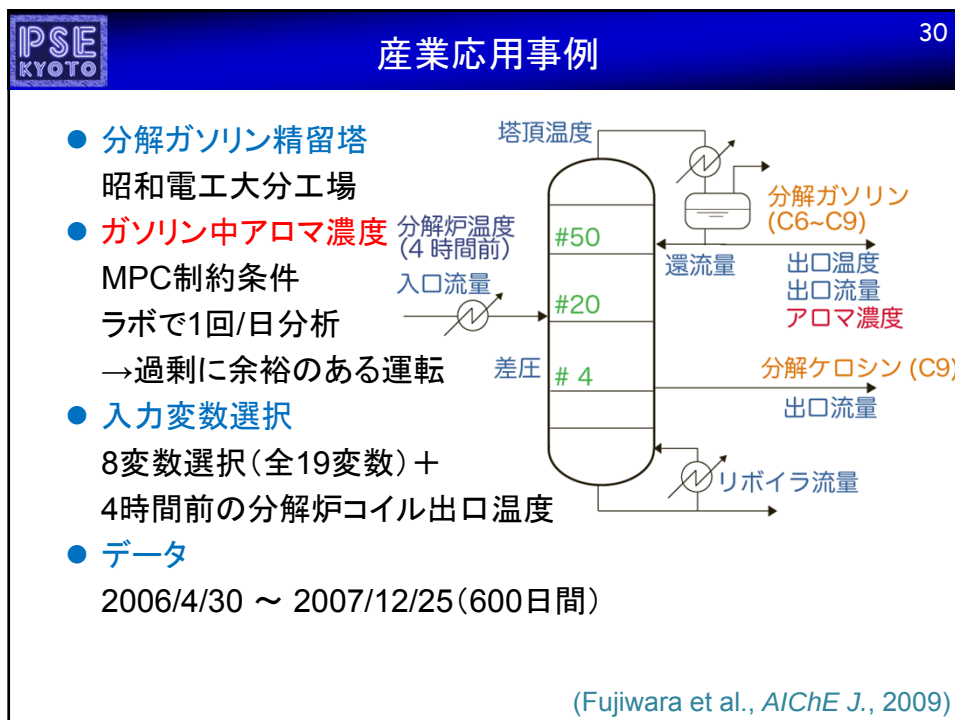
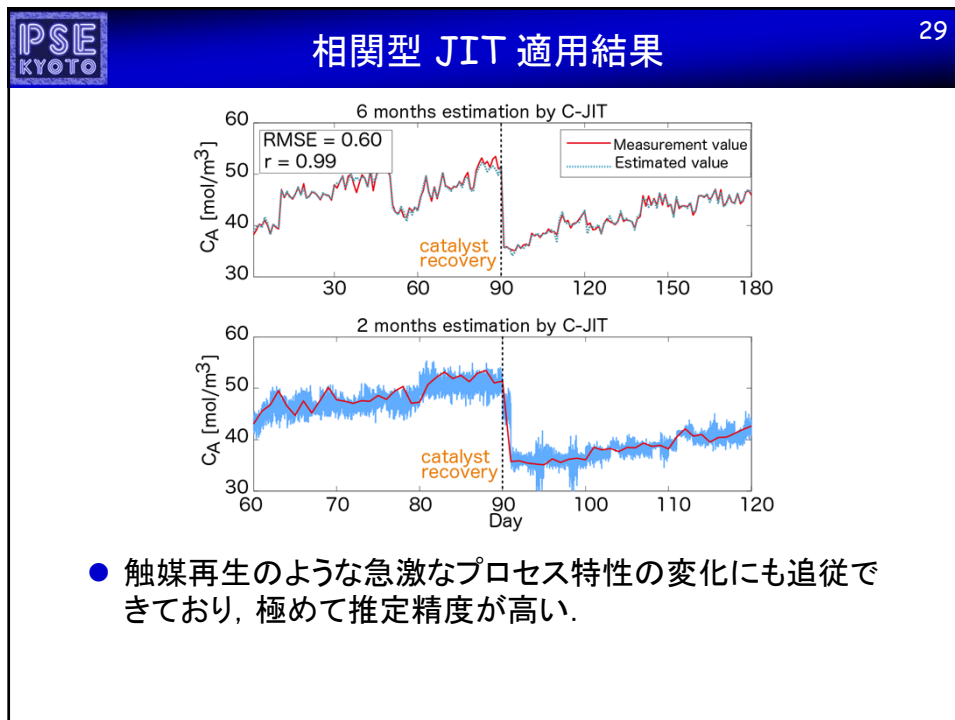
$$0 \leq \lambda \leq 1$$

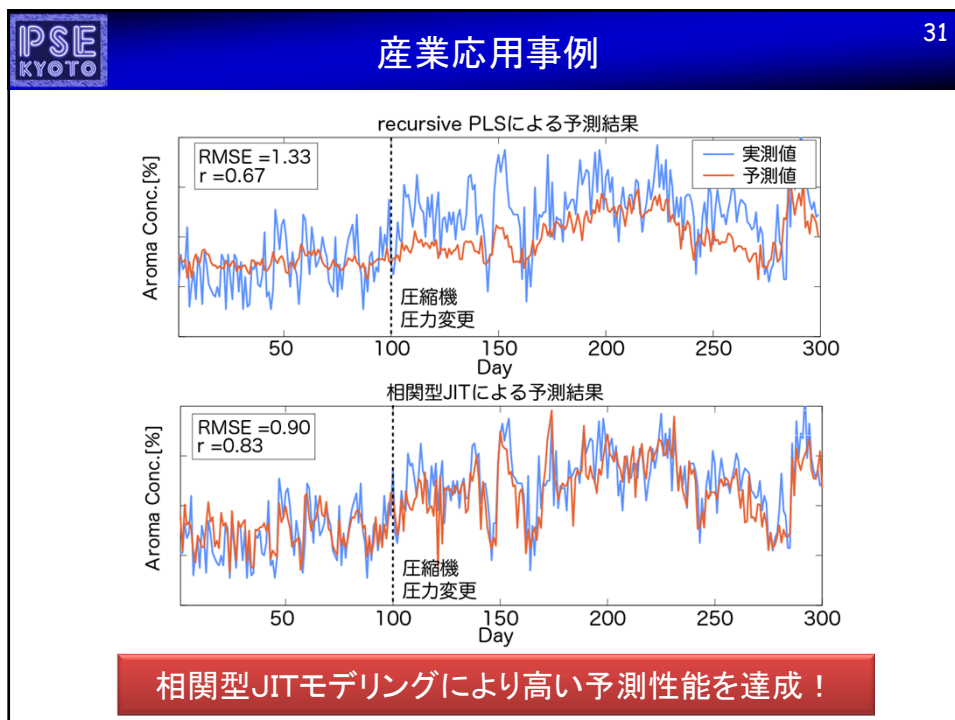


- 冷却ジャケット付き連続攪拌槽型反応器を対象とする.
- 反応器内温度が冷媒流量で, 液レベルが製品流量でカスケード制御されている.
- 触媒の劣化と再生の影響について検討する. モデルでは, 反応速度係数を変化させている.









- 32
- 産業応用事例
- ソフトセンサー（仮想計測）
 - 蒸留プロセスの製品組成推定と信頼性評価.
昭和電工
 - 相関型Just-in-Timeモデリング.
昭和電工
 - 品質改善
 - 鉄鋼製品の歩留り改善.
住友金属
 - 樹脂コンパウンド製品の歩留り改善.
東京インキ



34

品質・歩留り改善へのアプローチ

必要な機能

- 運転条件と品質を結びつける統計的モデルの構築
- 指定された評価関数に基づく運転条件の最適化
- ✓ 運転員やスタッフを納得させられること

問題点

- 運転条件変数が非常に多く、かつ強い相関を有する。
- 多品種少量生産で、品質がオフライン分析されるため、サンプル数が極めて少ない。
- 品質が定量的に測定されているとは限らない。

解決策は？



定性的品質情報の定量化

35

従来の定量化

例えば、良・不良の判定結果であれば、
良=1, 不良=0とすればモデル構築は可能

問題点

“0.5”という品質は何を意味するのか？
“0.8”という品質には満足できるのか？



課題

どうすれば、意味のある形で、品質を定量化し、
運転条件と品質の関係をモデル化できるか。



定性的品質情報の定量化

36

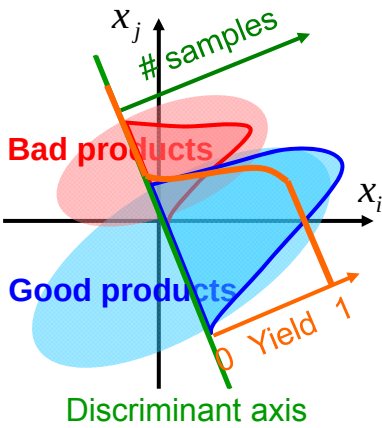
1. 線形判別分析の適用

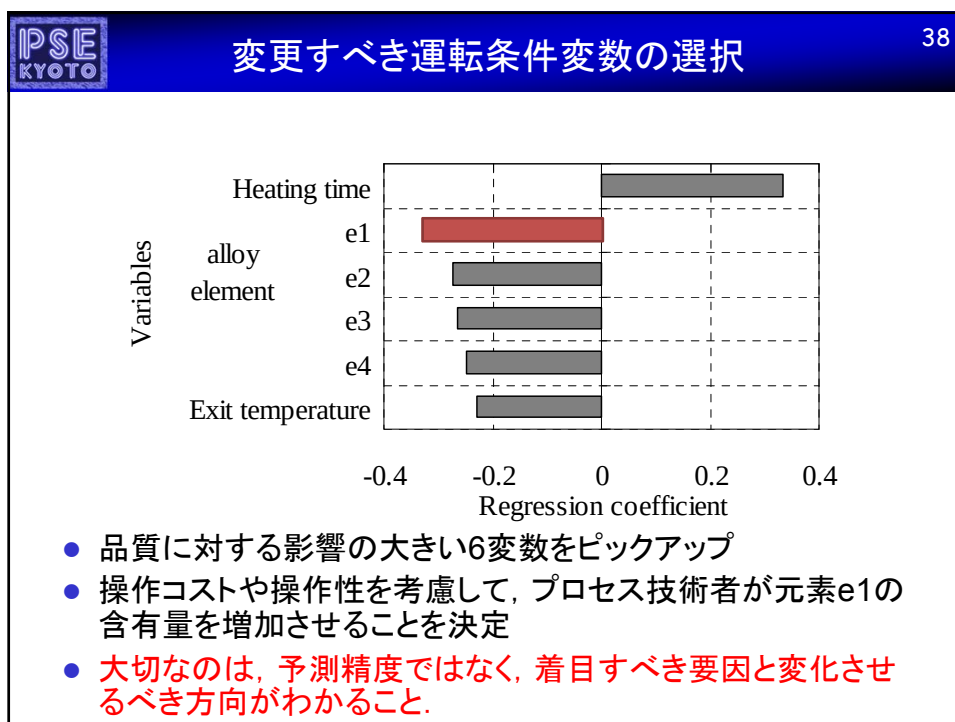
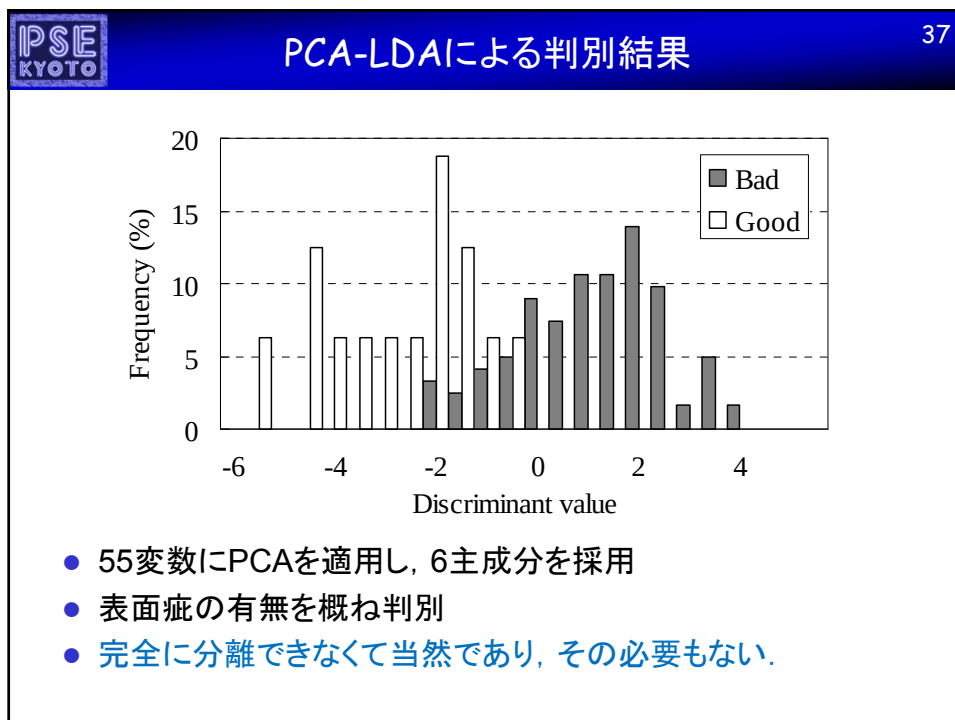
運転条件を表す多次元空間において、良品と不良品を最も良く判別する判別軸を求める。

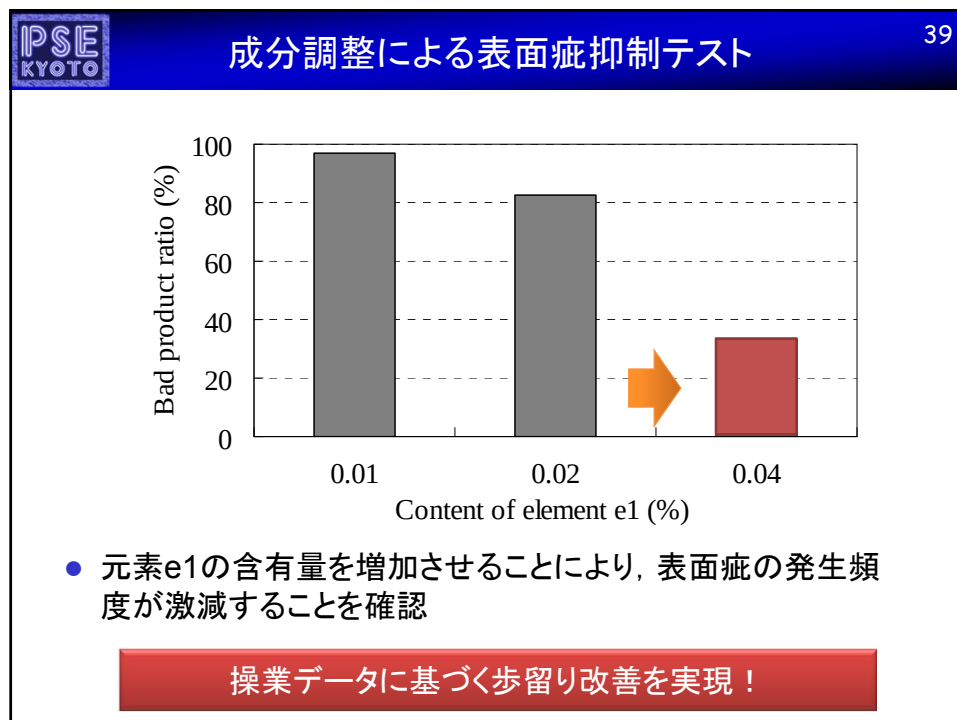
2. ヒストグラムによる歩留りの定義

求めた判別軸に対して、良品と不良品のヒストグラムを作成し、製品歩留りを定義する。

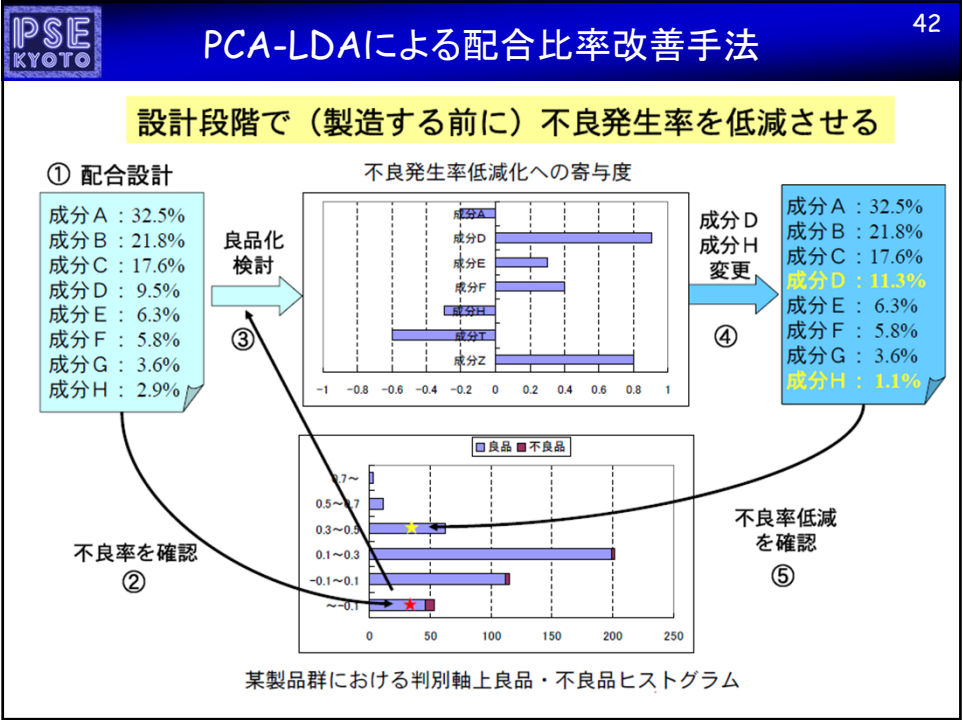
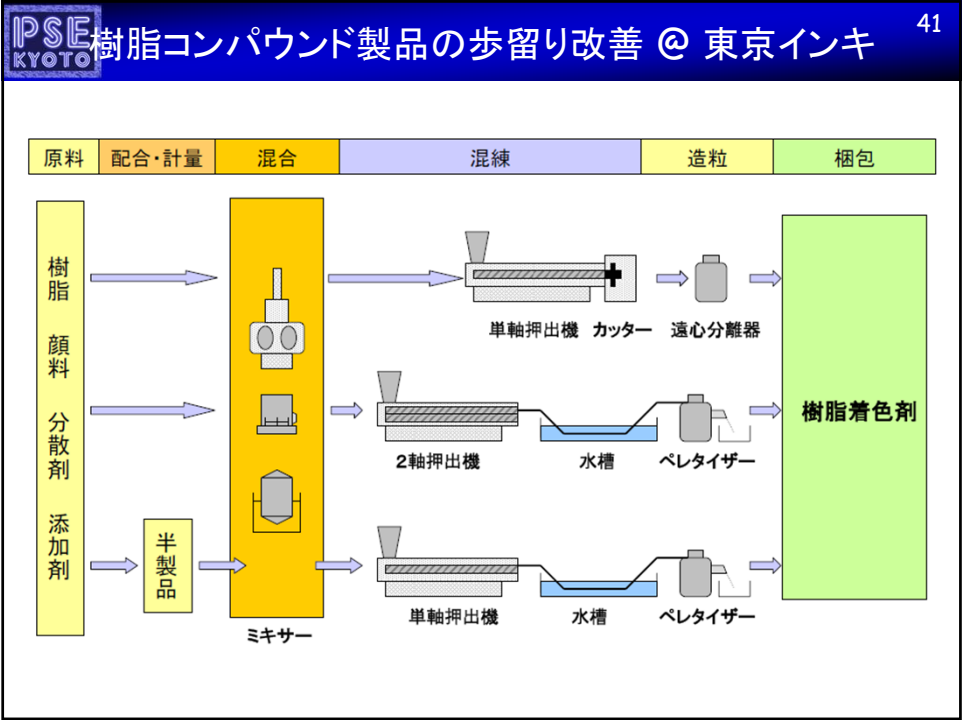
定性的な品質情報が定量化され、歩留りと運転条件を定量的に関連づけることができる。







- PSE KYOTO** 産業応用事例 40
- ソフトセンサー(仮想計測)
 - 蒸留プロセスの製品組成推定と信頼性評価.
昭和電工
 - 相関型Just-in-Timeモデリング.
昭和電工
 - 品質改善
 - 鉄鋼製品の歩留り改善.
住友金属
 - 樹脂コンパウンド製品の歩留り改善.
東京インキ



43

配合比率改善例

Bad recipe code : NG5Y060 ⇒ Good recipe code : 5Y244

 改善
 悪化

Component	Contribution	Content ratio %		Standardizaion value		Discrimination value		Improvement
		NG5Y060	5Y244	NG5Y060	5Y244	NG5Y060	5Y244	
A	0.210	0.000	0.000	-0.634	-0.634	-0.133	-0.133	0.000
B	-0.172	0.000	0.000	-0.339	-0.339	0.058	0.058	0.000
C	0.159	15.000	41.550	-0.689	0.617	-0.109	0.098	0.207
D	-0.134	10.000	0.000	8.505	-0.144	-1.142	0.019	1.162
E	-0.118	0.000	0.000	-0.287	-0.287	0.034	0.034	0.000
F	-0.102	0.000	0.000	-0.302	-0.302	0.031	0.031	0.000
G	0.079	0.000	0.000	-0.776	-0.776	-0.061	-0.061	0.000
H	-0.076	0.000	0.000	-0.560	-0.560	0.043	0.043	0.000
I	-0.074	32.064	15.514	2.614	0.942	-0.192	-0.069	0.123
J	0.067	0.000	0.000	-0.790	-0.790	-0.053	-0.053	0.000
K	-0.062	0.000	0.000	-0.309	-0.309	0.019	0.019	0.000
L	0.047	0.000	0.000	-0.116	-0.116	-0.005	-0.005	0.000
M	0.036	0.000	0.000	-0.134	-0.134	-0.005	-0.005	0.000
N	-0.032	0.000	0.000	-0.118	-0.118	0.004	0.004	0.000
O	-0.030	0.000	0.000	-0.460	-0.460	0.014	0.014	0.000
P	-0.024	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
Other		42.936	42.936			0.708	0.041	-0.667
Total		100.000	100.000			-0.791	0.034	0.825
				Bad ratio %		28.600	3.000	

 改善
 悪化

Other → その他成分