

## 08. 多変量統計的プロセス管理 (MSPC)

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

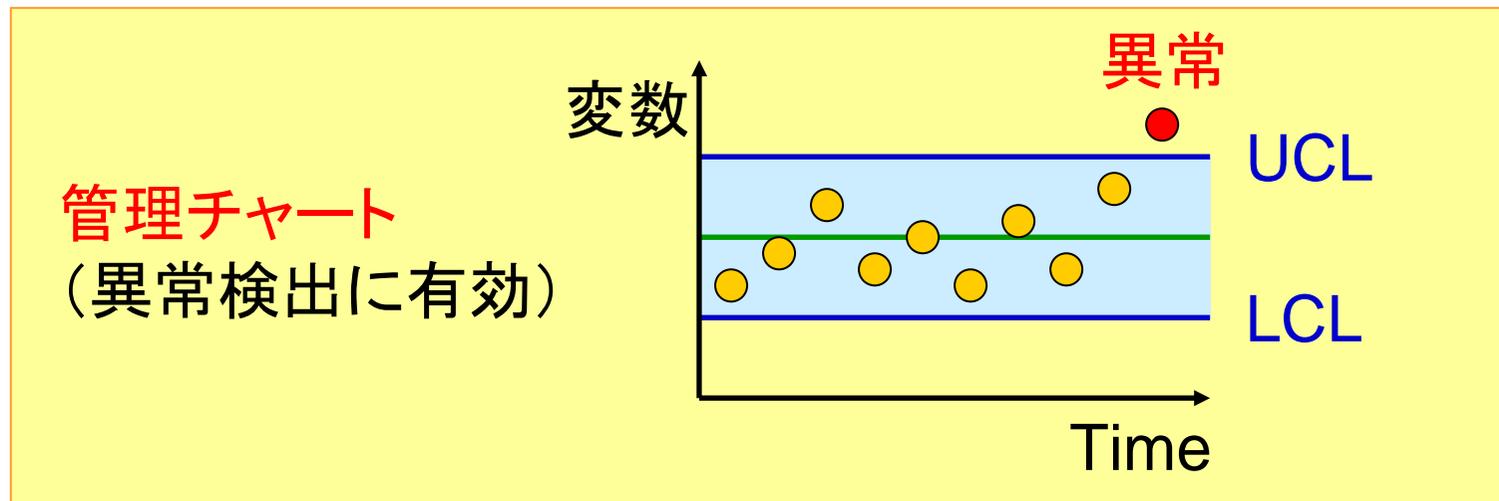
<http://www-pse.cheme.kyoto-u.ac.jp/~kano/>

1. 多変量統計的プロセス管理(MSPC)の基礎
  - ✓ SPCとは
  - ✓ 主成分分析(PCA)によるMSPC
  - ✓ バッチプロセスへの適用
2. Dofasco社での実施例
  - ✓ 連続鑄造プラント向けシステム開発
3. MSPCと外部分析の併用(三菱化学)
  - ✓ 運転条件の変動への対応策
4. ソフトセンサーとMSPCの統合(昭和電工)
  - ✓ ソフトセンサーの精度保証と分析機器故障診断
5. 独立成分分析(ICA)によるMSPC
  - ✓ さらなる性能向上に向けて

## 統計的プロセス管理(統計的工程管理)

製品品質の監視によって、不良品を見付けることはできても、不良品の生産を防ぐことはできない。製品品質は生産プロセスの運転の結果であるから、**プロセスの運転状態が品質を決める要因**となっているはずである。

したがって、**生産性を向上させるためには、品質のみならず、運転状態を監視する必要がある。**



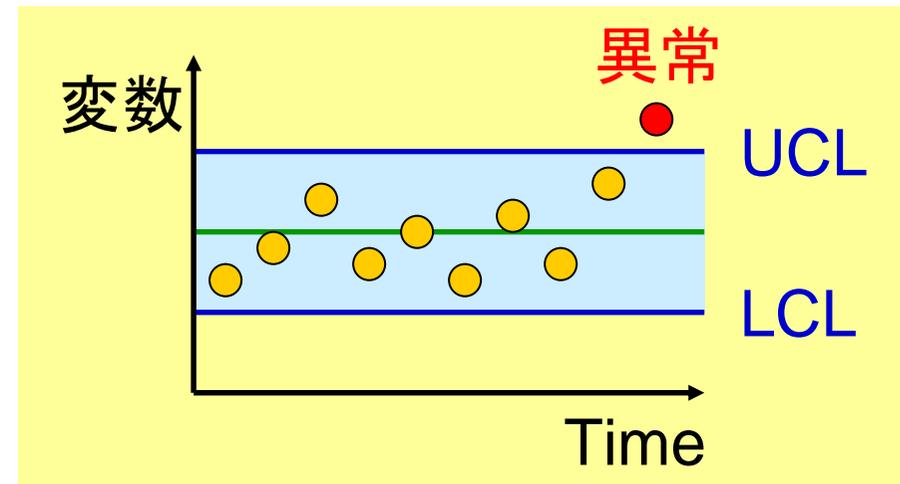
## Univariate SPC

1924 Shewhart  
**Shewhart** control chart



1954 Page  
**CUSUM** control chart  
(cumulative-sum)

1959 Roberts  
**EWMA** control chart  
(exponentially weighted moving-average)



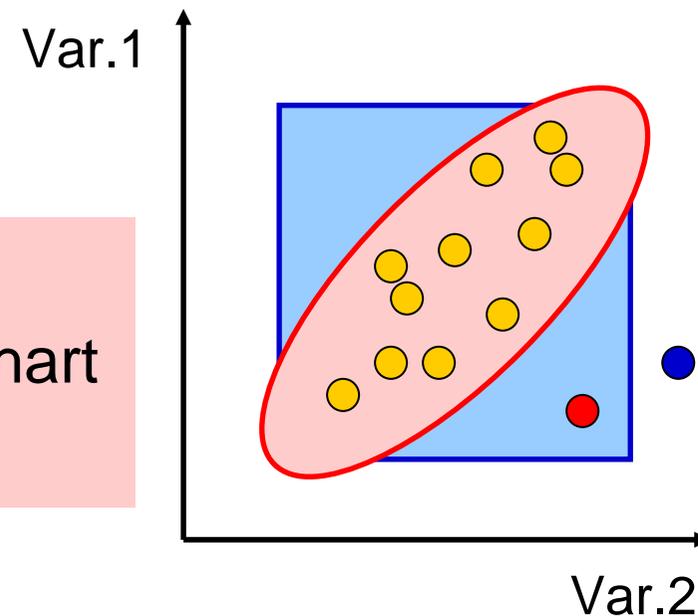
## Univariate SPC

1. 数多くの変数を独立に監視するため、  
フォルスアラームが増加する。
2. 変数間の相関関係を考慮しないため、  
異常検出性能が良くない。

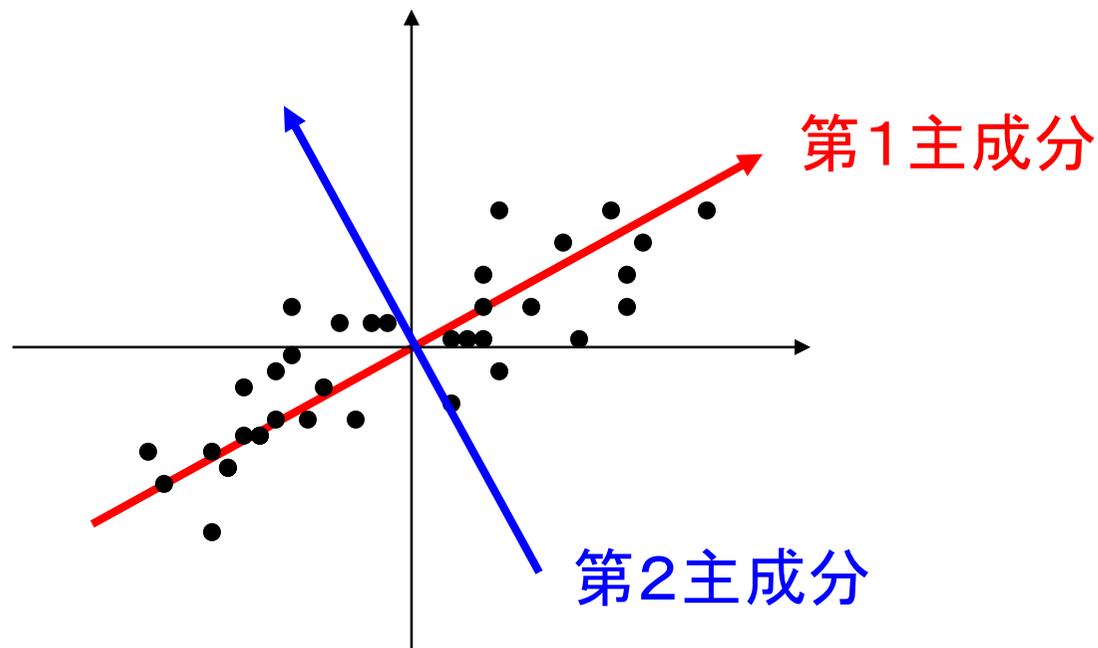


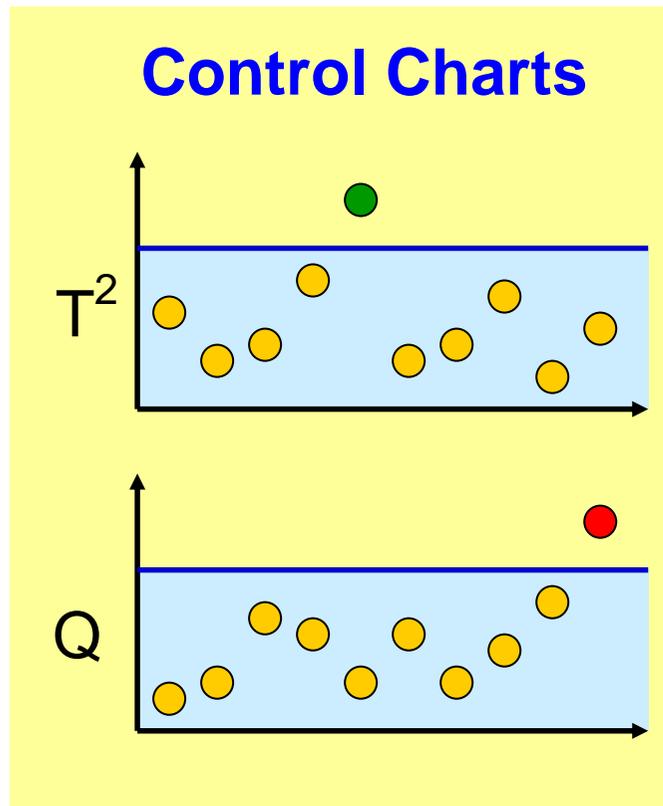
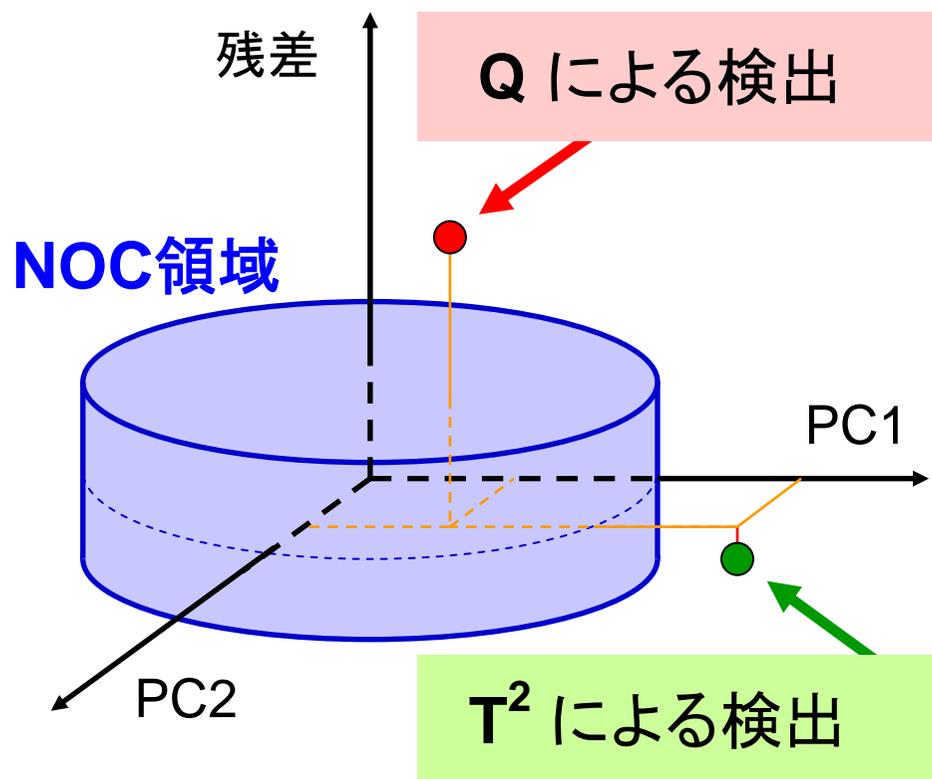
## Multivariate SPC

例 Hotelling T2 control chart  
PCA を用いた MSPC



測定データを最もよく表現する軸を新たに作成する。新しい変数(主成分)は, 入力変数の線形結合として, その分散が最大となるように決定される。また, 各主成分は互いに直交するように決定される。





T<sup>2</sup> 規格化された主成分得点の二乗和  
 Q 残差の二乗和

(Jackson and Mudholkar, 1979)

Reconstructed data

$$\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x}PP^T$$

Q statistic

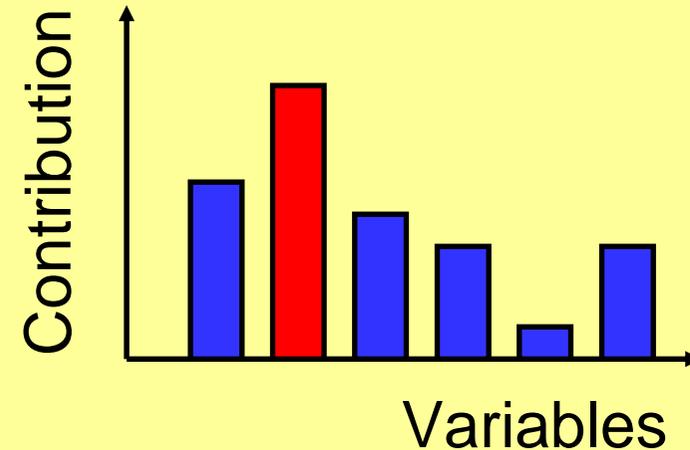
$$Q = \sum_{k=1}^P (\mathbf{x}_k - \hat{\mathbf{x}}_k)^2$$



**Contribution to Q**

$$cont_k = (\mathbf{x}_k - \hat{\mathbf{x}}_k)^2$$

### Contribution Plot



<例>

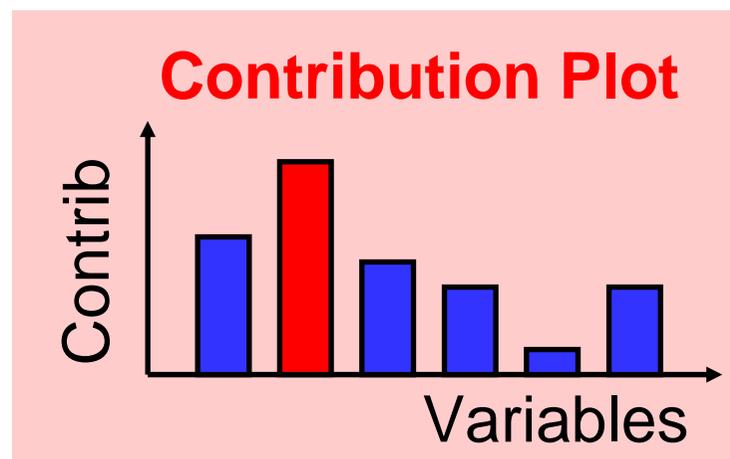
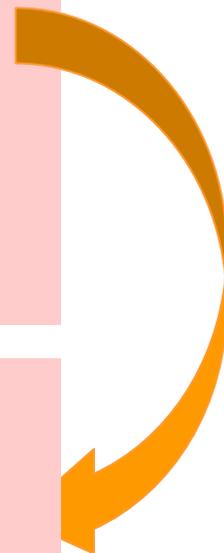
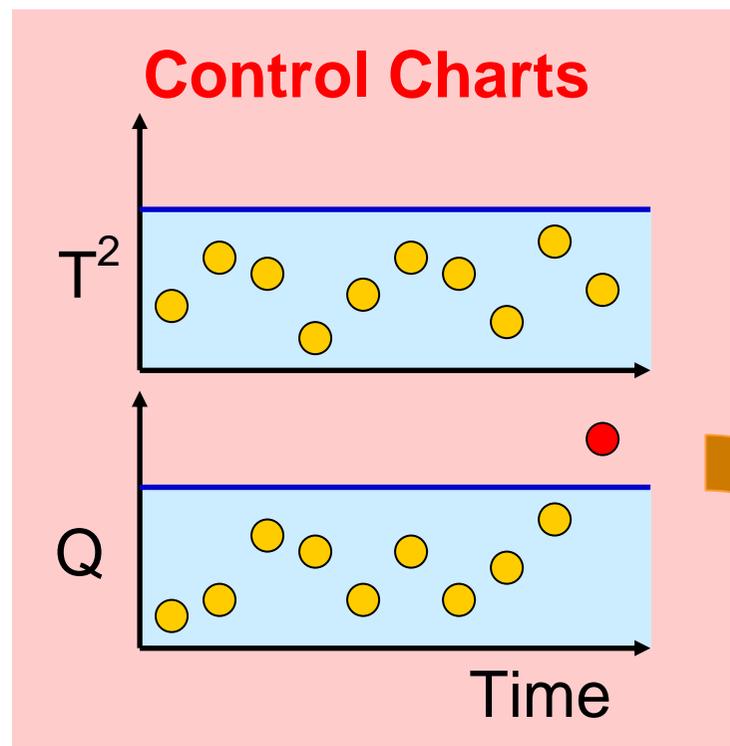
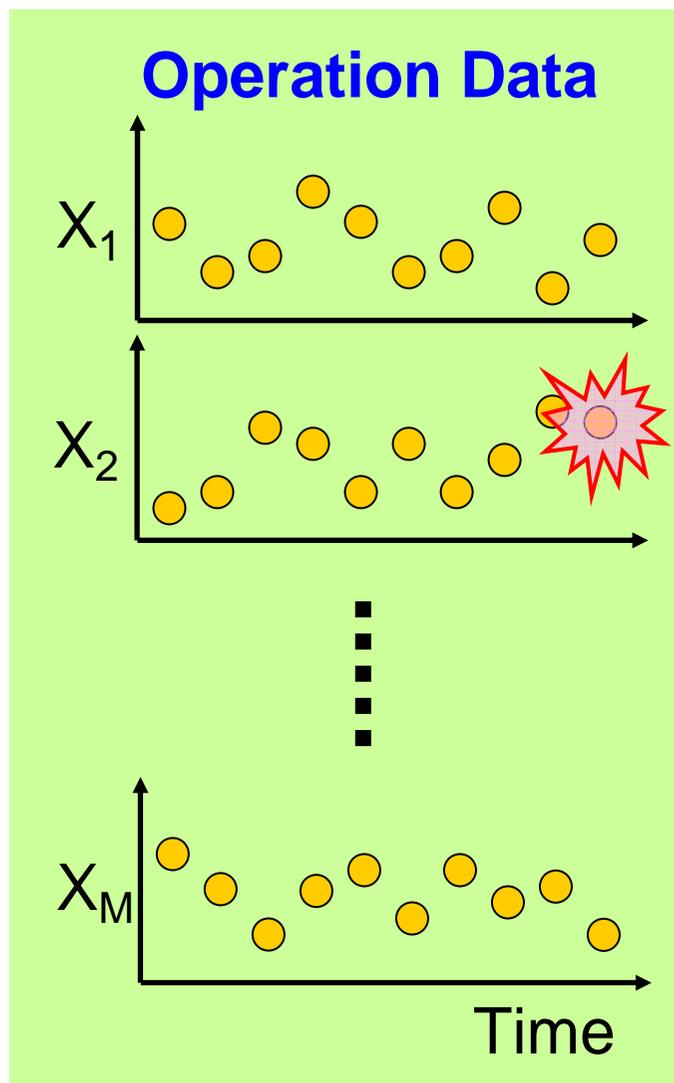
Qで異常検出！



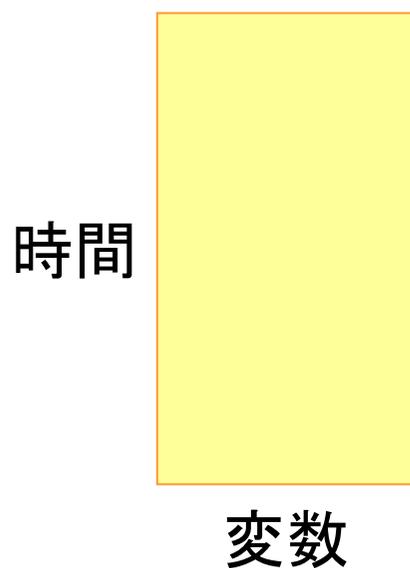
寄与プロットによると、  
#2熱電対での温度異常が原因



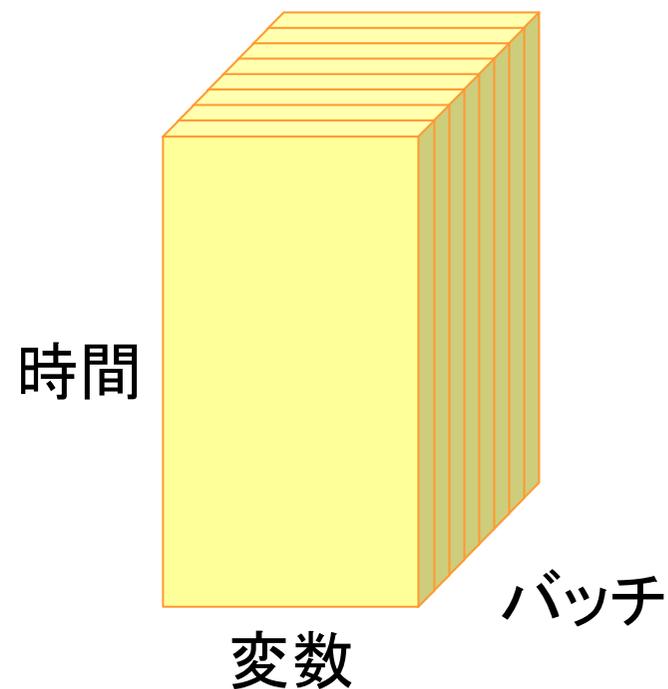
冷却装置の故障を確認・対応



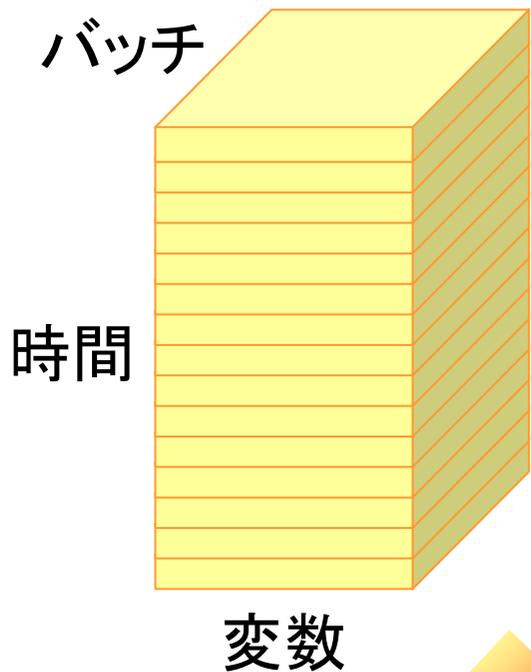
連続プロセス



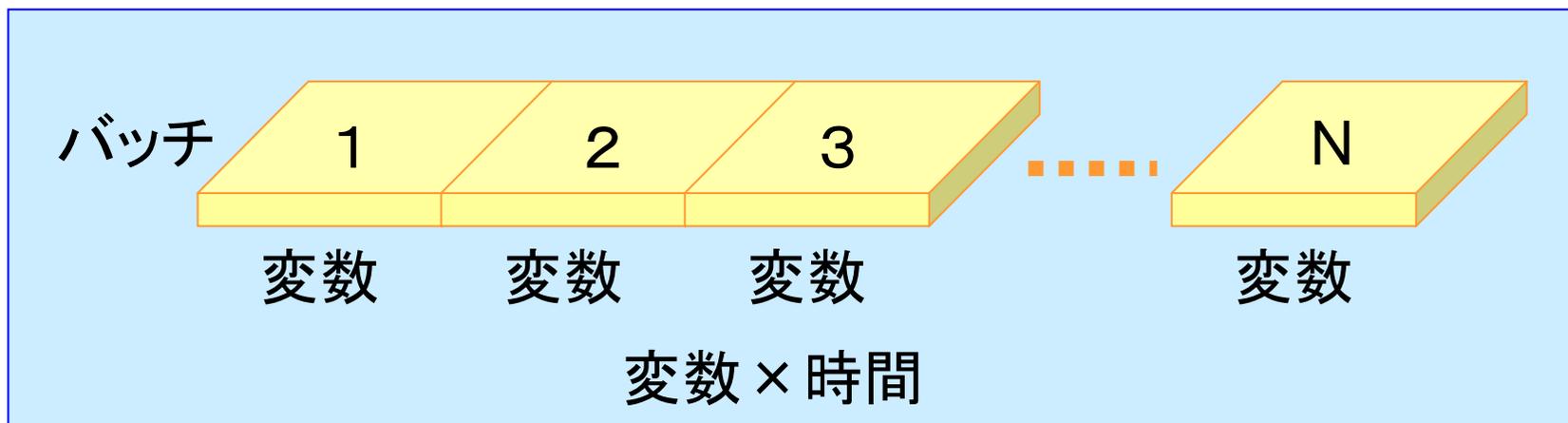
バッチプロセス



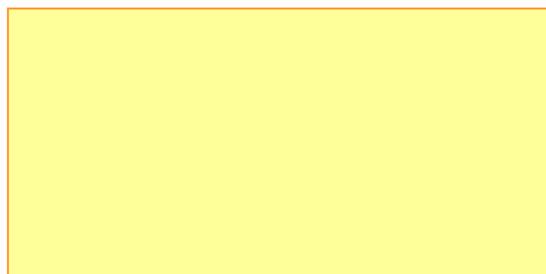
バッチプロセスの運転データは3次元配列である。  
どのようにして、PCAを適用すれば良いのか？



3次元データを2次元データに変換



バッチ

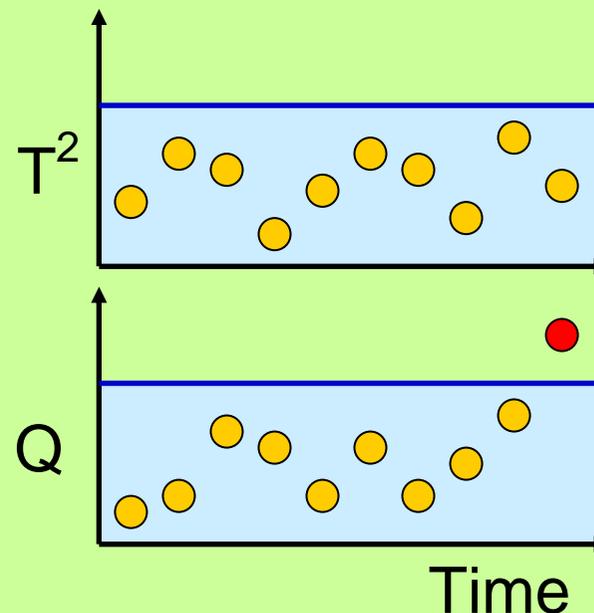


PCA



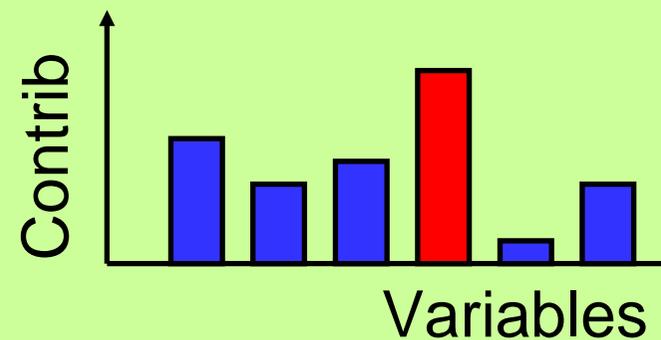
変数 × 時間

## Control Charts



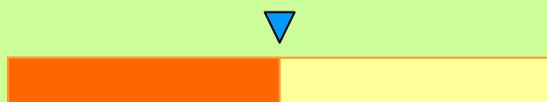
連続プロセスと同様に  
バッチプロセスも管理できる。

## Contribution Plot



未来のデータが存在しない

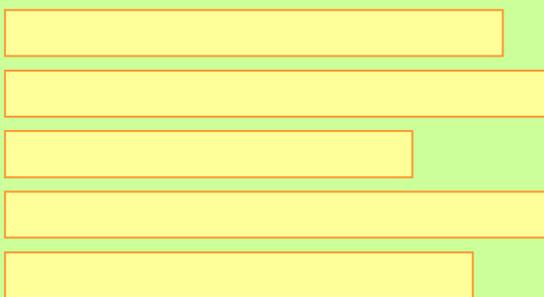
過去 現在 未来



変数 × 時間

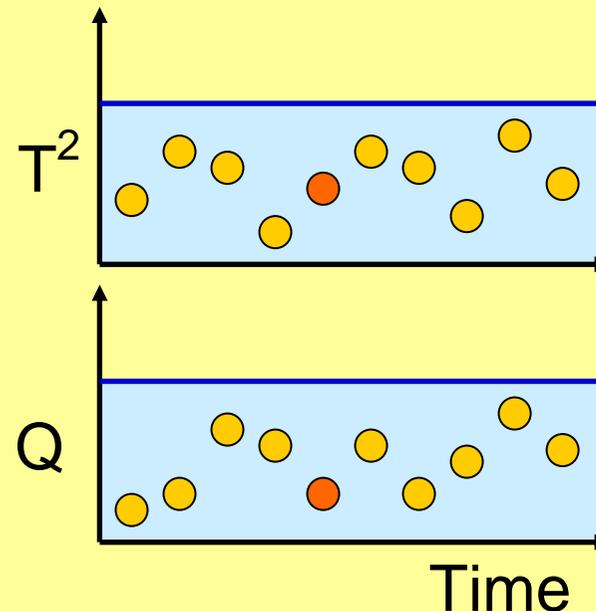
予測値を利用する

バッチの長さが同じでない



時間以外の変数を利用する

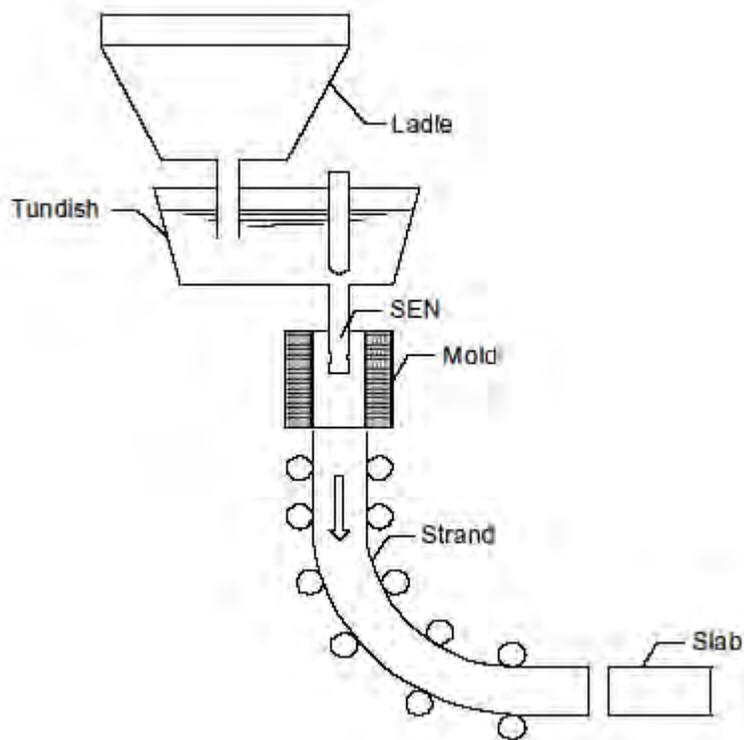
## Control Charts



	Linear	Nonlinear
correlation	PCA	ANN / NL-PCA
quality / output	PCR, PLS	ANN / NL-PLS / SVR
	Continuous	Batch
static	original	-
dynamic	dynamic	multiway

Even a continuous process has various features, e.g., startup, static operation, grade-transition, and shutdown. Therefore, several MSPC methods need to be used in a unified framework.

1. 多変量統計的プロセス管理(MSPC)の基礎
  - ✓ SPCとは
  - ✓ 主成分分析(PCA)によるMSPC
  - ✓ バッチプロセスへの適用
2. Dofasco社での実施例
  - ✓ 連続鑄造プラント向けシステム開発
3. MSPCと外部分析の併用(三菱化学)
  - ✓ 運転条件の変動への対応策
4. ソフトセンサーとMSPCの統合(昭和電工)
  - ✓ ソフトセンサーの精度保証と分析機器故障診断
5. 独立成分分析(ICA)によるMSPC
  - ✓ さらなる性能向上に向けて



連続鋳造プロセス

## &lt; 運転モード &gt;

- Start-up operation
- Run-time operation
  - Process transition
- Shutdown operation

## &lt; 目的 &gt;

ブレイクアウトの発生を阻止する！

ブレイクアウトの兆候を早期に検出できれば、鋳造速度を低くすることでブレイクアウトは避けられる。

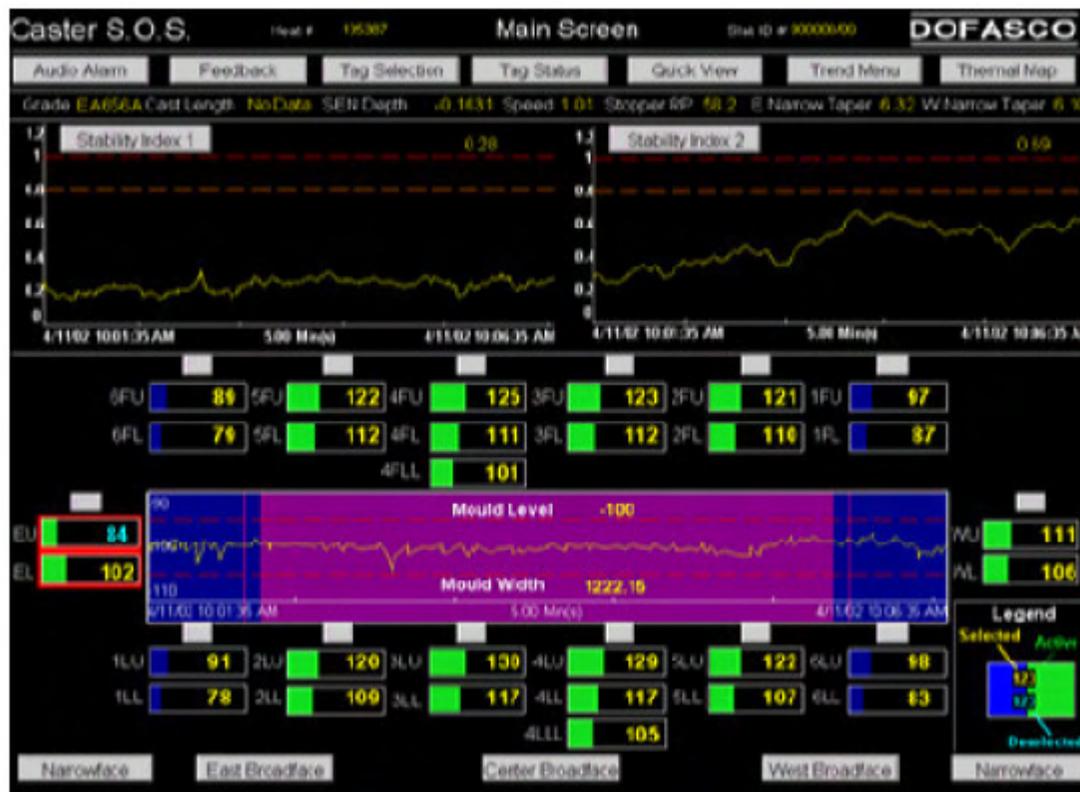
Run-time operation は連続操作であるため、PCAによるモデル化が可能である。

- 半年以上の正常運転データを利用して、PCAモデルを構築する
- 323入力変数を10主成分で表現する
- すべての運転シナリオをカバーするためには、6種類のPCAモデルが必要である
- 6種類のPCAモデルは自動的に選択される

Start-up operation はバッチ操作であるため,  
Multiway PCAによるモデル化が可能である.  
Process transitionも同様

- 147バッチ, 60プロセス変数, 800以上の測  
定点(時刻)を利用して, Multiway PCAモデル  
を構築する
- Start-upの期間は異なるので, 期間を揃えるた  
めの"indicator variable"として"strand length"  
を利用する

General casting information  
(heat number, steel grade, casting speed, etc.)



SPE and HT control charts



Graphical representation of mould and its surrounding thermocouples

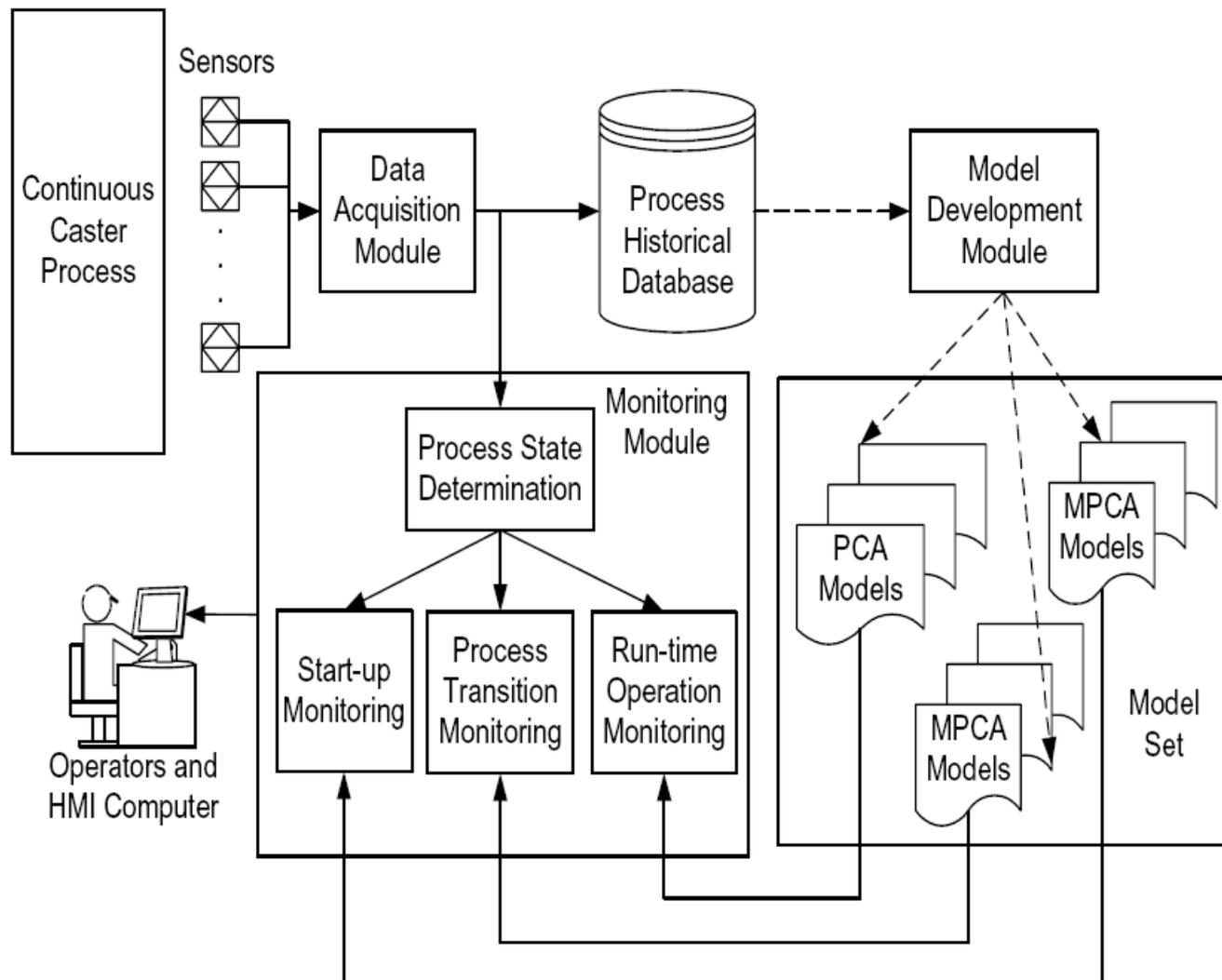
(Dudzic and Zhang, *IFAC Symp. DYCOPS*, 2004)



← Contribution plot

監視システムの役割は、寄与プロットの表示まで。  
寄与プロットを利用して異常原因を特定し、適切な  
対策を施すのはオペレータの役目である。

(Dudzic and Zhang, *IFAC Symp. DYCOPS*, 2004)



(Dudzic and Zhang, *IFAC Symp. DYCOPS*, 2004)

1. 多変量統計的プロセス管理(MSPC)の基礎
  - ✓ SPCとは
  - ✓ 主成分分析(PCA)によるMSPC
  - ✓ バッチプロセスへの適用
2. Dofasco社での実施例
  - ✓ 連続鑄造プラント向けシステム開発
3. MSPCと外部分析の併用(三菱化学)
  - ✓ 運転条件の変動への対応策
4. ソフトセンサーとMSPCの統合(昭和電工)
  - ✓ ソフトセンサーの精度保証と分析機器故障診断
5. 独立成分分析(ICA)によるMSPC
  - ✓ さらなる性能向上に向けて

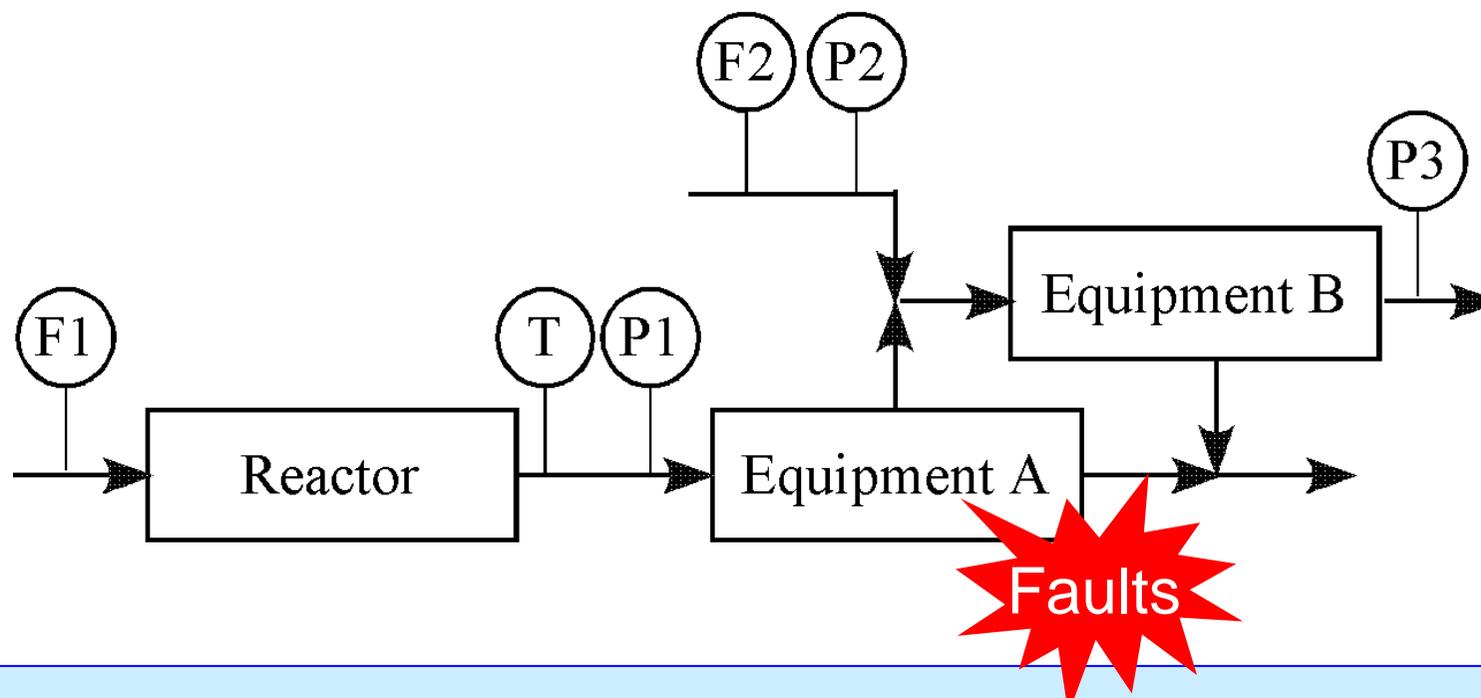
## 三菱化学との共同研究プロジェクト

### モノマープラントにおけるポリマー閉塞の早期発見

運転状態（ロード変動）にかかわらず，ポリマーによる装置の部分的閉塞を早期に検出できるシステムを開発する.

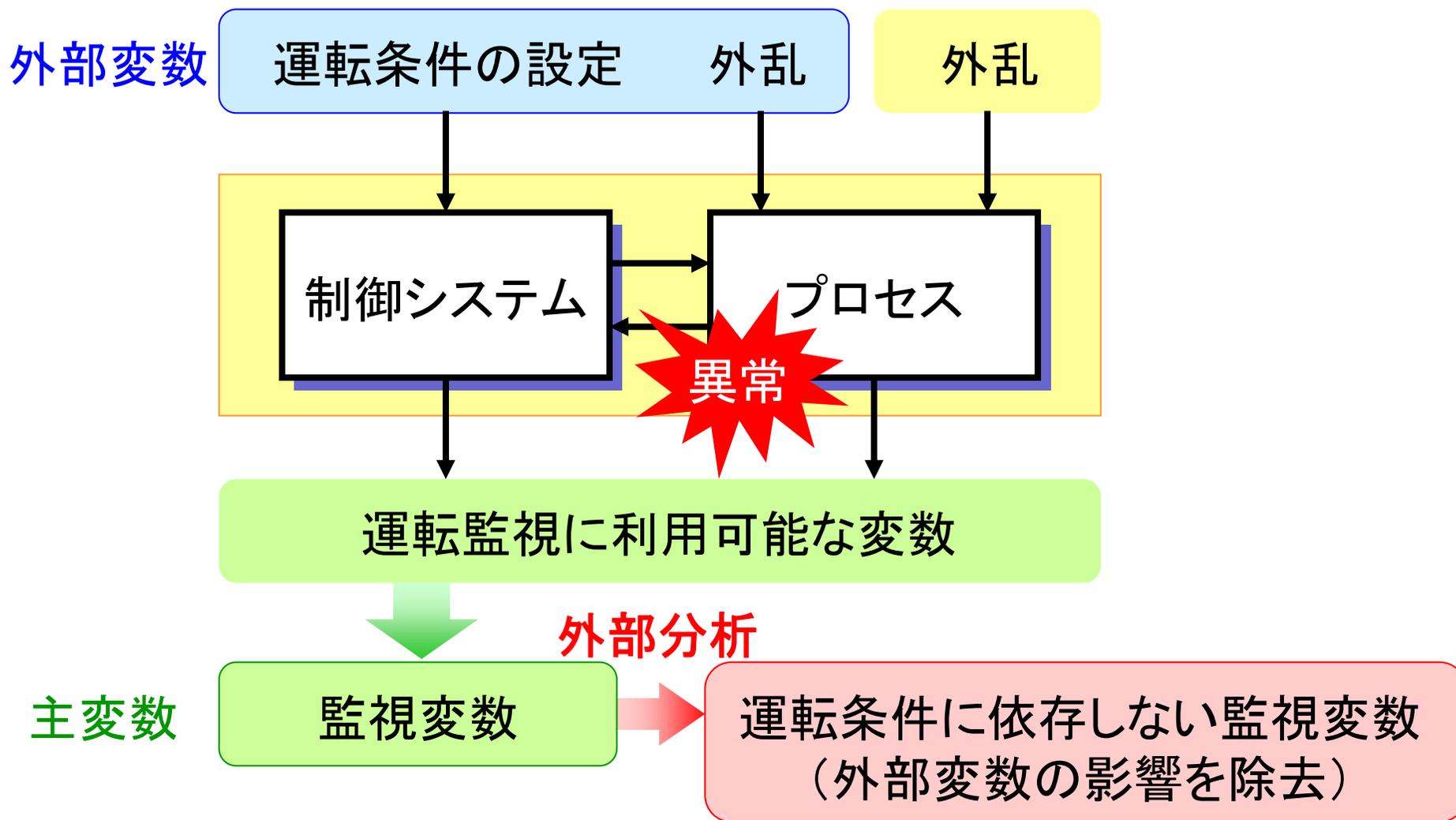
"Application of Statistical Process Monitoring with External Analysis to an Industrial Monomer Plant"  
*ADCHEM* (2004)

冷却装置A内部におけるポリマーの堆積を検出する。  
この堆積ポリマーによって、装置が閉塞してしまいますと、  
シャットダウン・メンテナンスを余儀なくされる。



差圧 P1-P2 を監視することによって、ポリマーによる閉塞を検出できると考えられる。しかし、差圧は原料流量 F1, F2 の影響を受けるため、誤検出する可能性が高い。

監視変数から運転条件変更の影響を除去する手法



主変数  $H$

$$H = \begin{bmatrix} h_1(1) & \cdots & h_h(1) \\ h_1(2) & \cdots & h_h(2) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ h_1(k) & \cdots & h_h(k) \end{bmatrix}$$

外部変数  $G$

$$G = \begin{bmatrix} g_1(1) & \cdots & g_g(1) \\ g_1(2) & \cdots & g_g(2) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ g_1(k) & \cdots & g_g(k) \end{bmatrix}$$

||

外部変数で表現できる部分

$$GC$$

+

外部変数で表現できない部分

$$E = H - GC$$

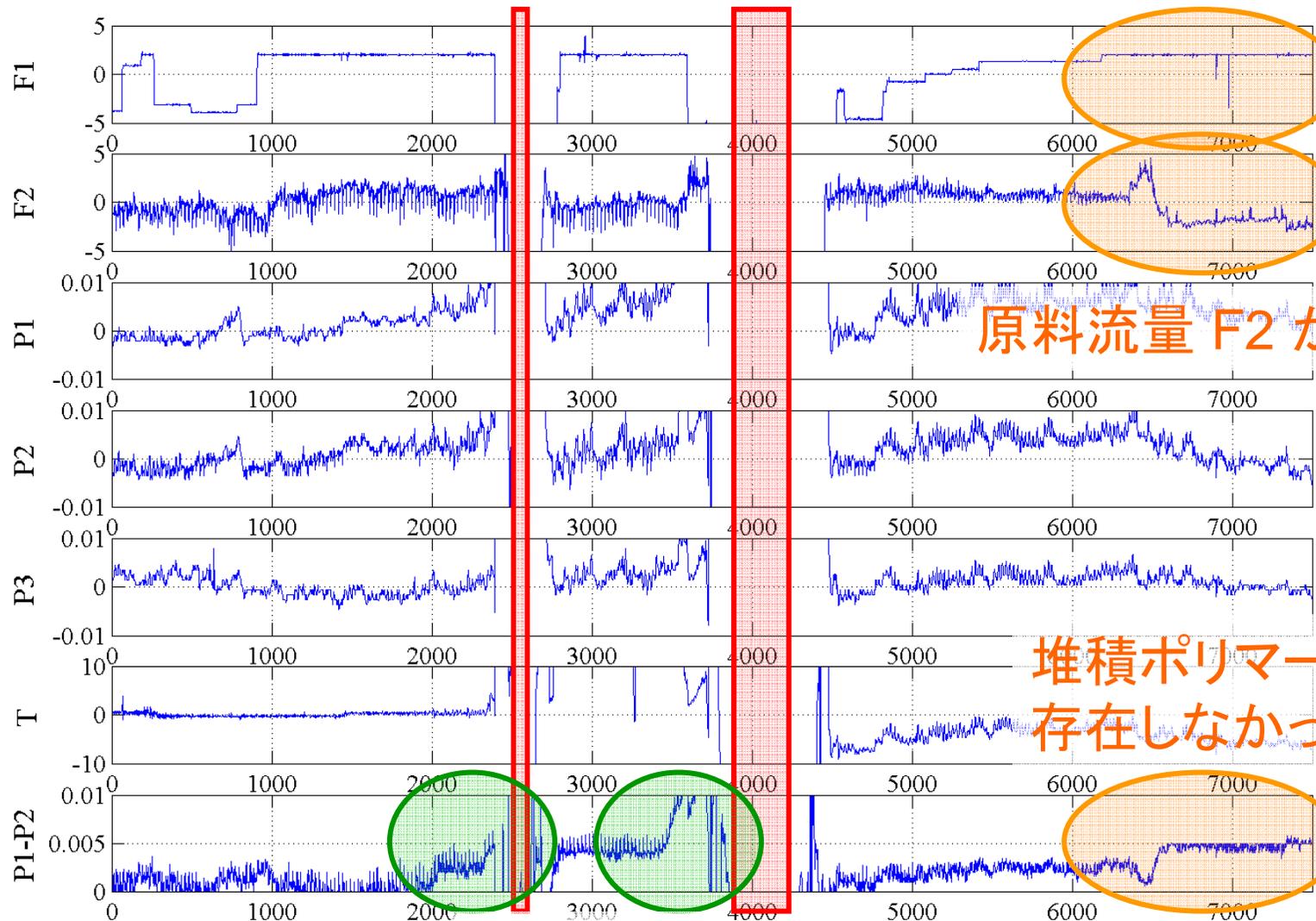
最小二乗法による計算

$$C = (G^T G)^{-1} G^T H$$

PLSなども利用可能

← 監視変数

## シャットダウン・メンテナンス



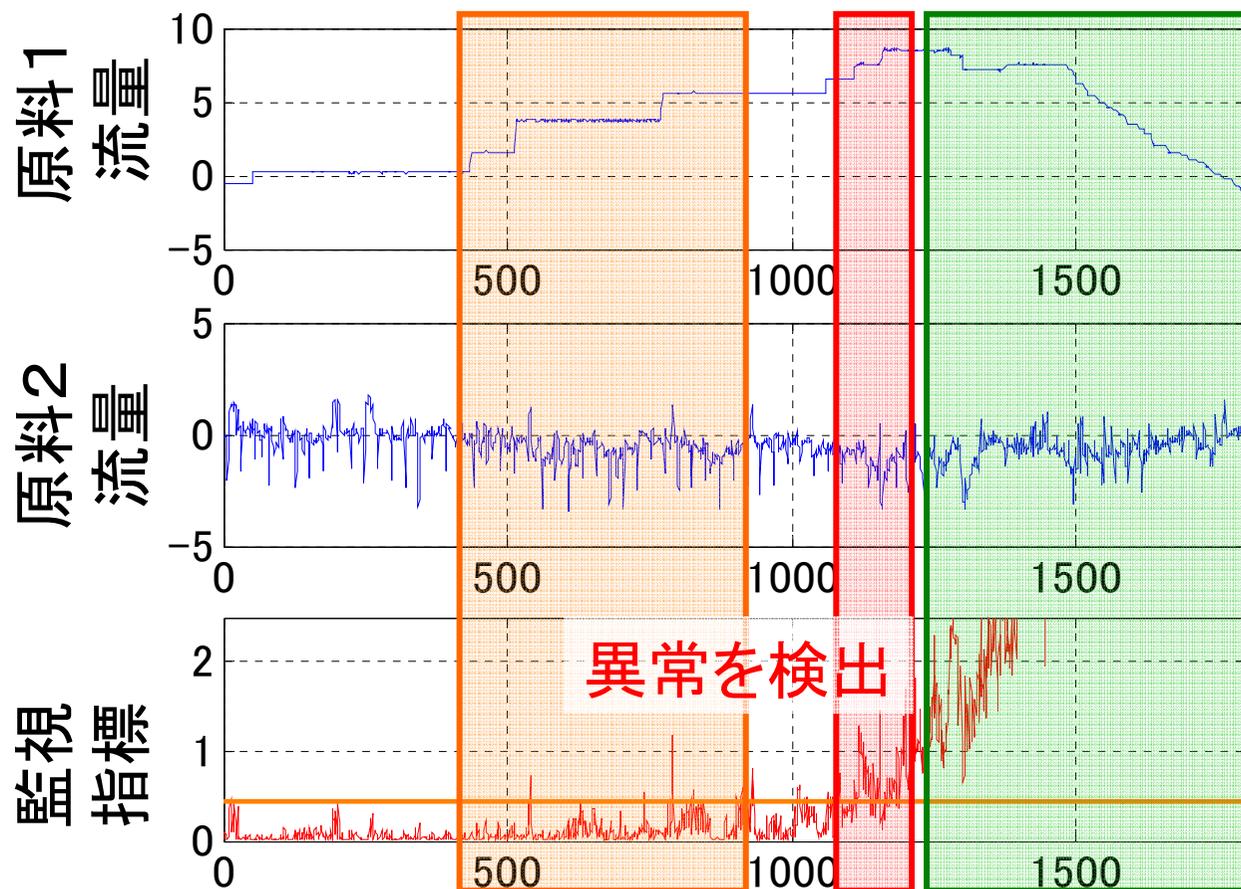
原料流量 F2 が変化

堆積ポリマーは  
存在しなかった

差圧上昇 time [hour]

処理量は変化しているが、  
異常とは見なされていない。

オペレータがポリマー堆積を  
確認し、処理量を減少させた。



運転状態の変動に対してロバストな異常検出を実現！

プロセスが動特性を有する場合には、  
動的モデルを構築しなければならない。

$$\text{インパルス応答モデル } h_i(t) = \sum_{j=1}^g \sum_{n=0}^{s-1} \phi_{jn} g_j(t-n)$$

主変数  $H$

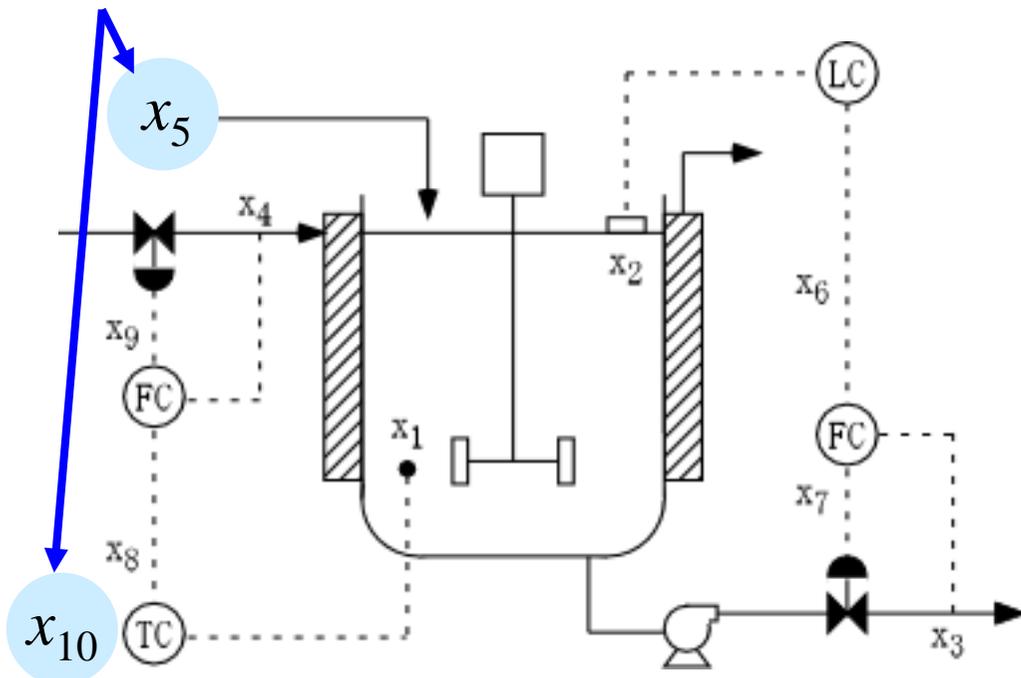
$$H = \begin{bmatrix} h_1(1) & \cdots & h_h(1) \\ h_1(2) & \cdots & h_h(2) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ h_1(k) & \cdots & h_h(k) \end{bmatrix}$$

外部変数  $G$

$$G = \begin{bmatrix} g_1(1) & \cdots & g_g(1) \\ g_1(2) & \cdots & g_g(2) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ g_1(k) & \cdots & g_g(k) \end{bmatrix}$$

次数  $s$  は相互相関関数を利用して決定する。

## 外部変数

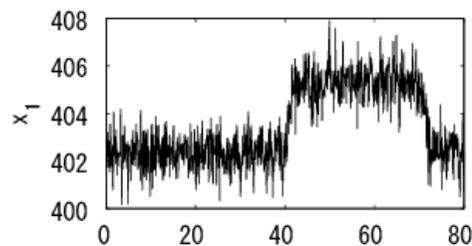


$x_1$	reactor temperature
$x_2$	reactor level
$x_3$	reactor outlet flow rate
$x_4$	coolant flow rate
$x_5$	reactor feed flow rate
$x_6$	MV of level controller
$x_7$	MV of outlet flow controller
$x_8$	MV of temperature controller
$x_9$	MV of coolant flow controller
$x_{10}$	SV of temperature controller

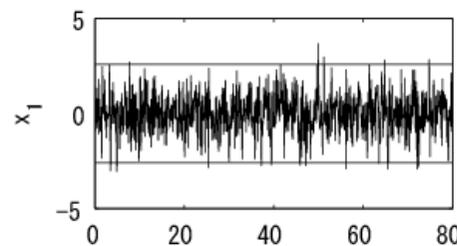
サンプリング間隔： 5秒

正常および各異常状態について100回のシミュレーションを実施

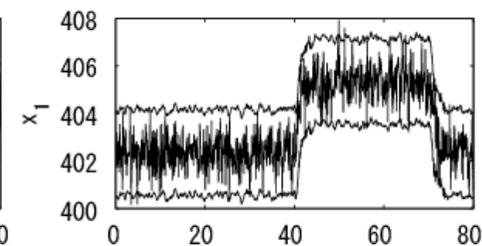
反応器内温度



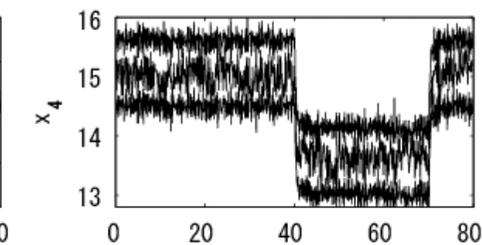
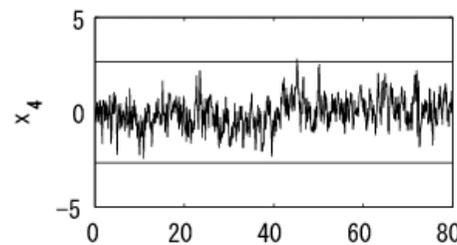
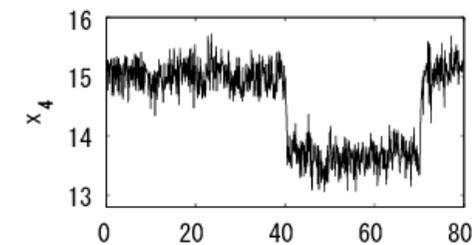
外部分析結果



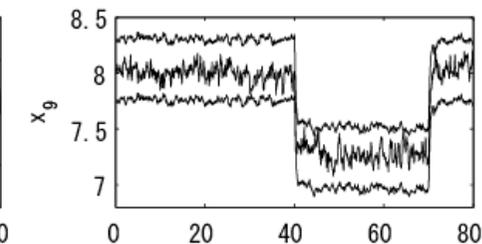
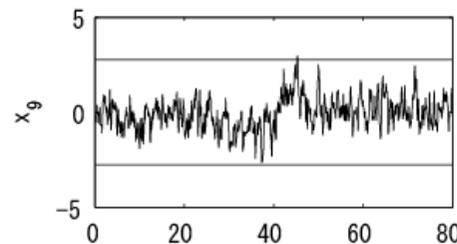
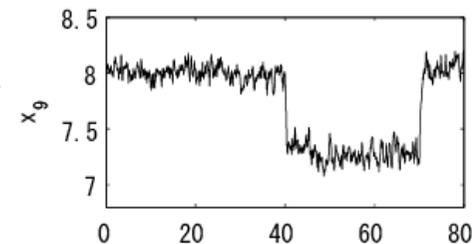
時変管理限界



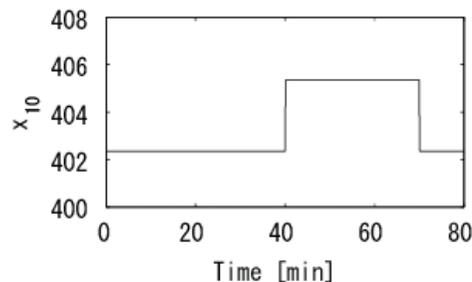
冷却水流量



冷却水流量MV



温度設定値



動的外部分析の適用により、測定変数から温度設定値変更の影響が除去できている。

動的外部分析に51ステップのデータを利用

1. 多変量統計的プロセス管理(MSPC)の基礎
  - ✓ SPCとは
  - ✓ 主成分分析(PCA)によるMSPC
  - ✓ バッチプロセスへの適用
2. Dofasco社での実施例
  - ✓ 連続鑄造プラント向けシステム開発
3. MSPCと外部分析の併用(三菱化学)
  - ✓ 運転条件の変動への対応策
4. ソフトセンサーとMSPCの統合(昭和電工)
  - ✓ ソフトセンサーの精度保証と分析機器故障診断
5. 独立成分分析(ICA)によるMSPC
  - ✓ さらなる性能向上に向けて

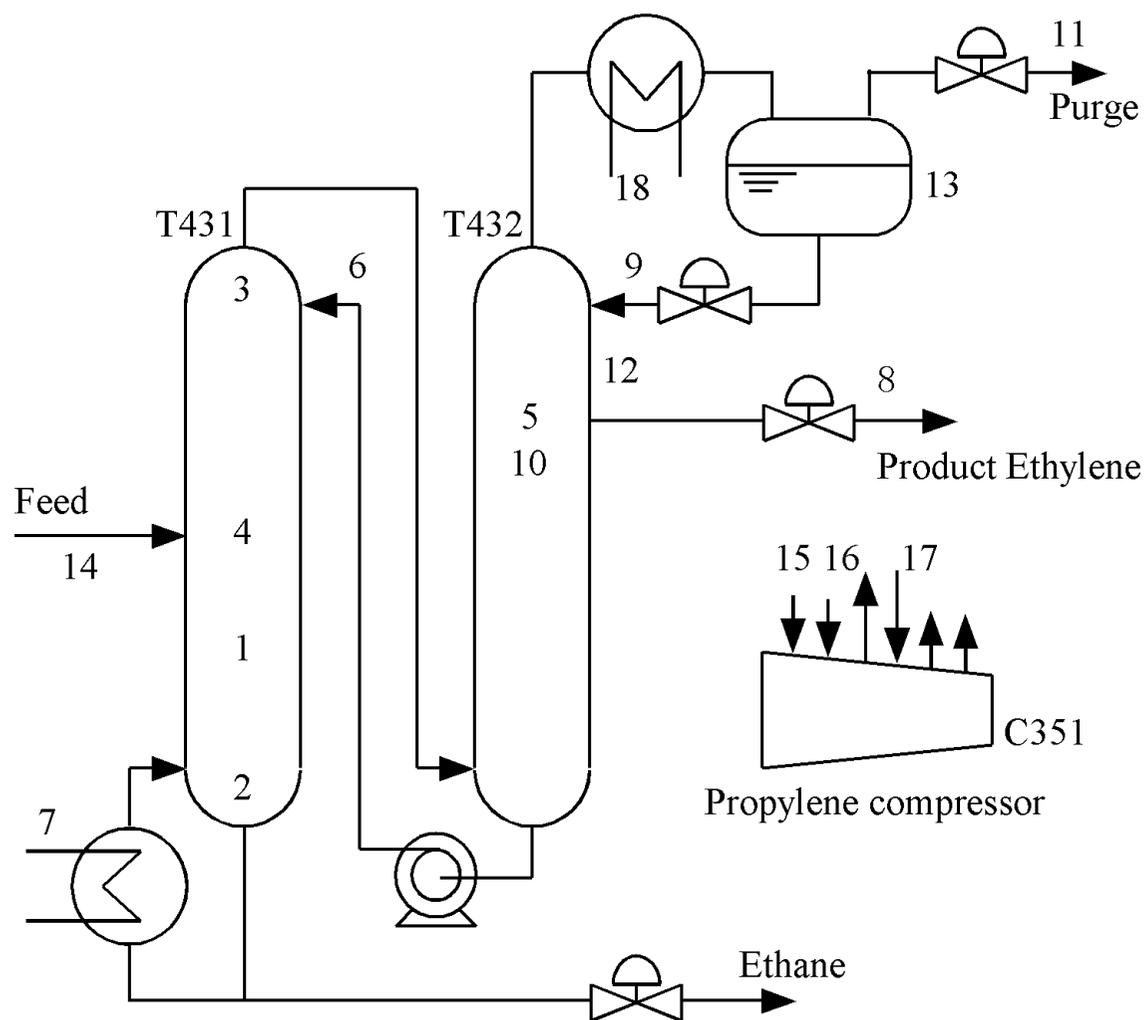
## 昭和電工との共同研究プロジェクト

### エチレン精留塔における製品中不純物濃度の推定

品質推定値の信頼性を評価し、オプティマイザおよびモデル予測制御システムにおける品質推定値の利用の是非を判断できるシステムを開発する。

"Product Quality Estimation and Operating Condition Monitoring for Industrial Ethylene Fractionator"  
J. Chem. Eng. Japan, Vol.37, No.3, pp.422-428 (2004)





1. T431 tray #29 temp.
2. T431 bottom temp.
3. T431 top temp.
4. T431 tray #37 temp.
5. T432 tray #129 temp.
6. Flow rate from T432 to T431
7. T431 reboiler flow rate
8. Product ethylene flow rate
9. T432 reflux flow rate
10. T432 internal reflux flow rate
11. T432 purge flow rate
12. T432 reflux ratio
13. T432 top pres.
14. T431 feed ethane conc.
15. C351 #2 discharge pres.
16. C351 #2 discharge temp.
17. C351 #4 suction pres.
18. V359 level (cooling propylene)

製品エチレン中の不純物エタン濃度を推定する

### 1. 多重共線性

入力変数の多くは強い相関(相互相関)を持つ。

### 2. 動特性

プロセスの動特性を考慮する必要がある。

自己相関によって、新たな多重共線性が発生する。



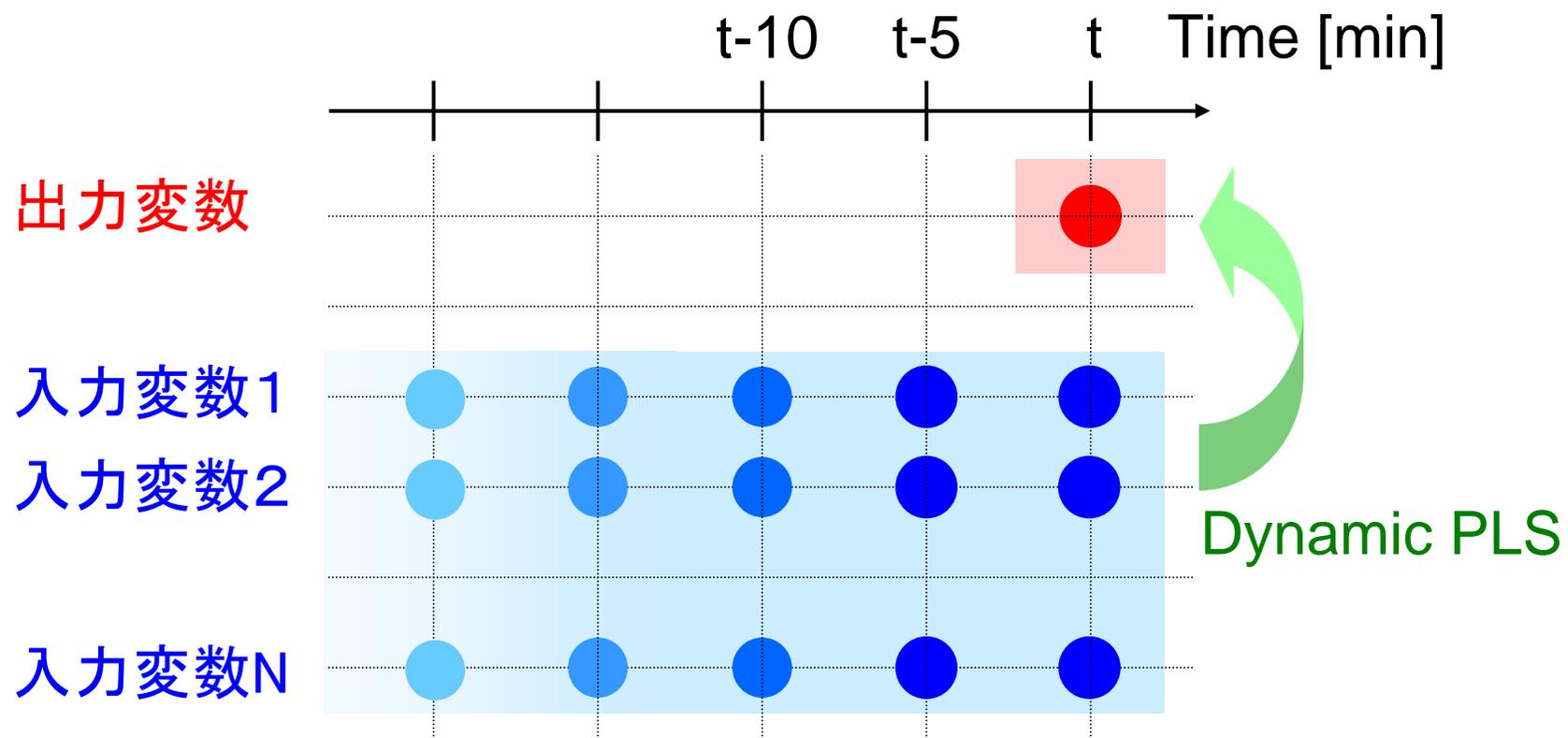
## Dynamic PLS

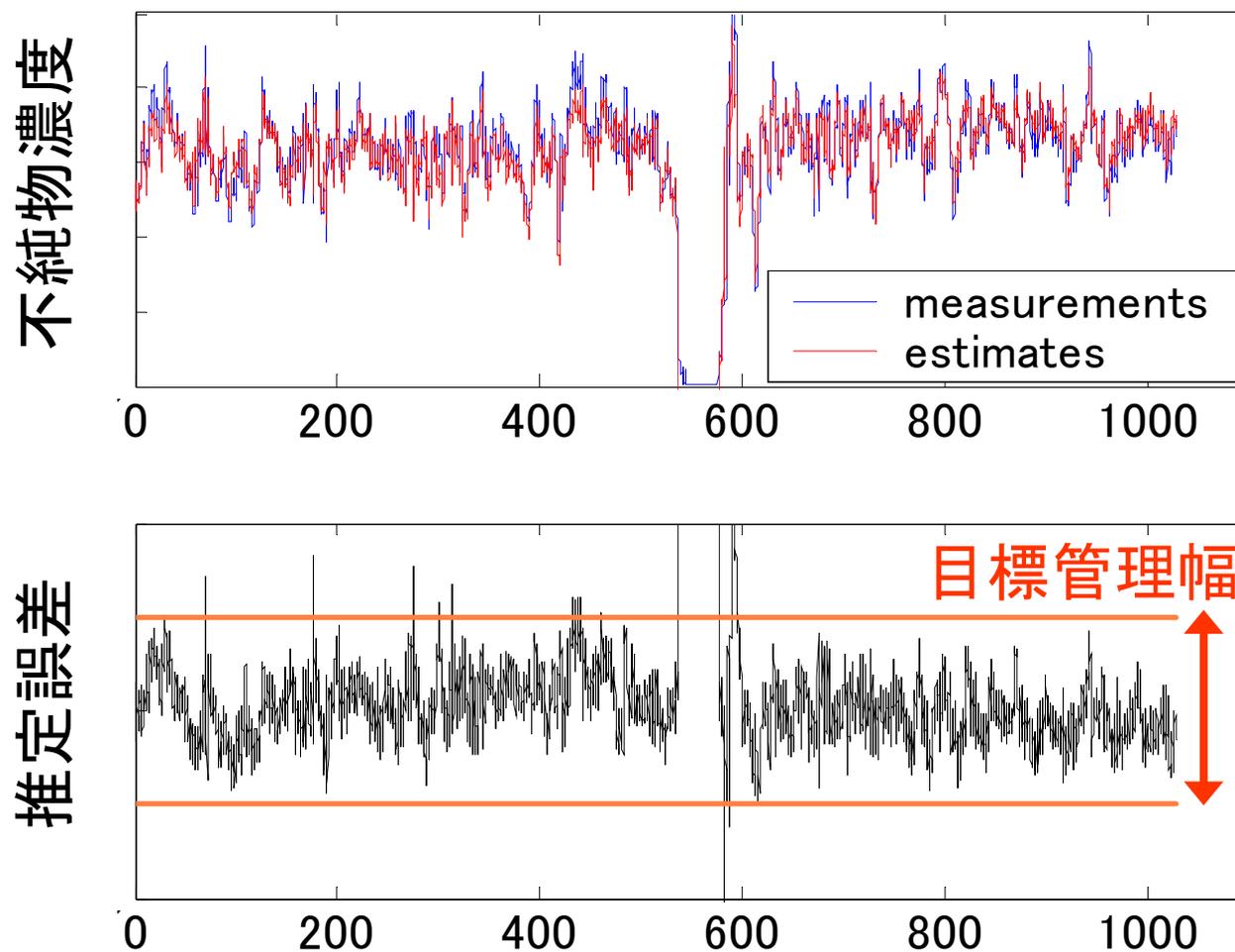
1. 温度や圧力以外の操作変数も入力変数とする。

2. 動特性を考慮するために、動的モデルを構築する。

この結果、推定精度および制御性能を向上させられる。

(Kano et al., *J. Proc. Cont.*, 2000)





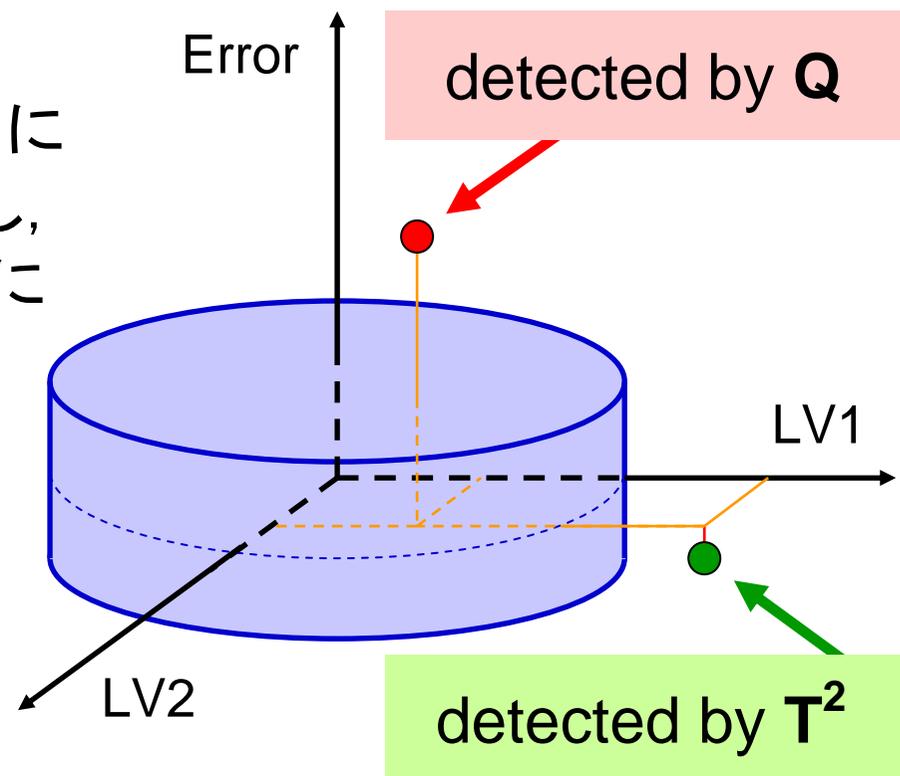
極めて高い推定精度を実現！

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。

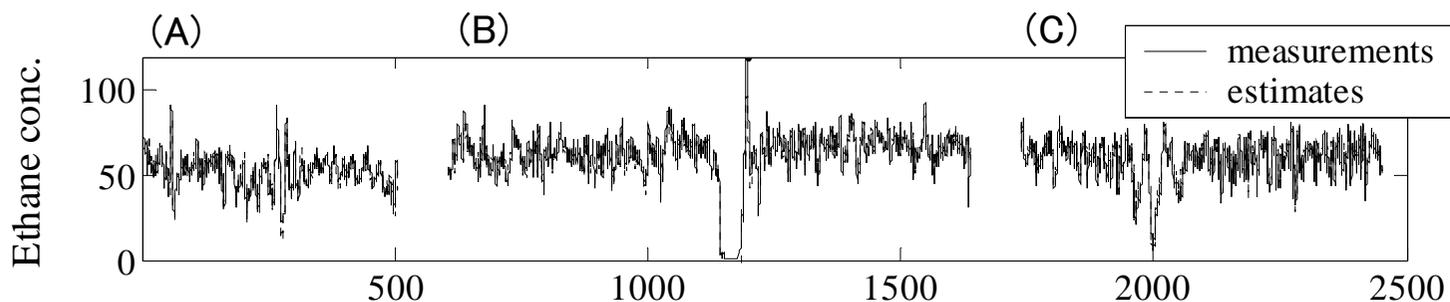


現在の運転状態が**部分空間内**にあるかどうかをオンライン監視し、なければ推定値を制御目的等にご利用しない。

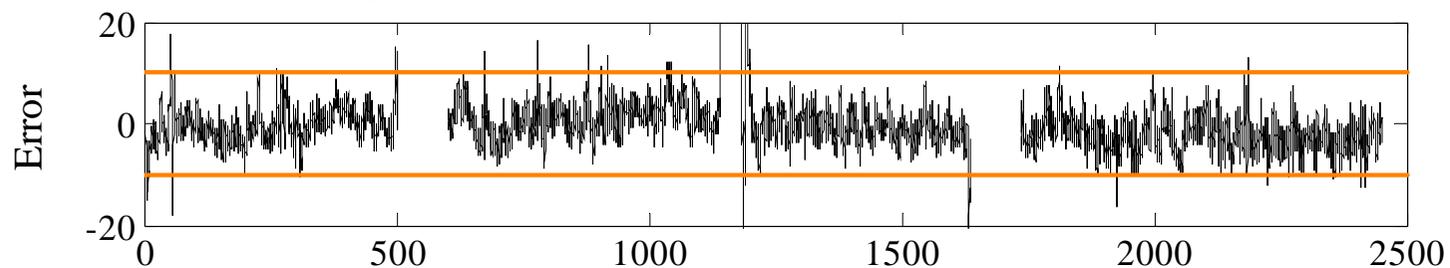
PLS-based SPC



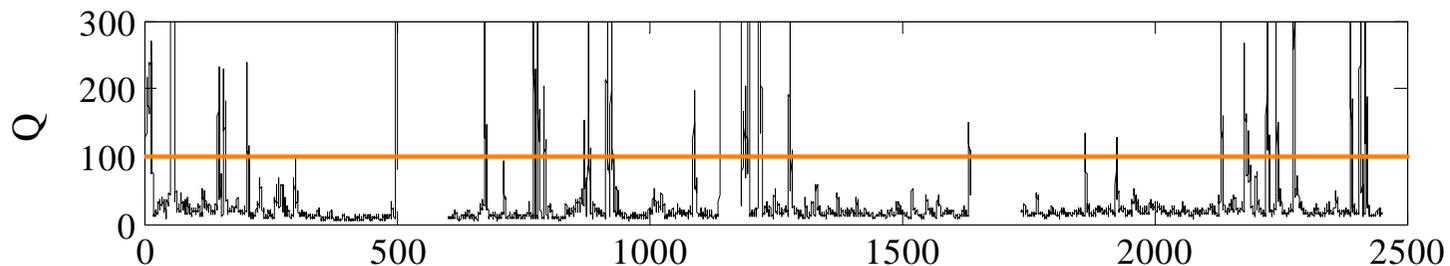
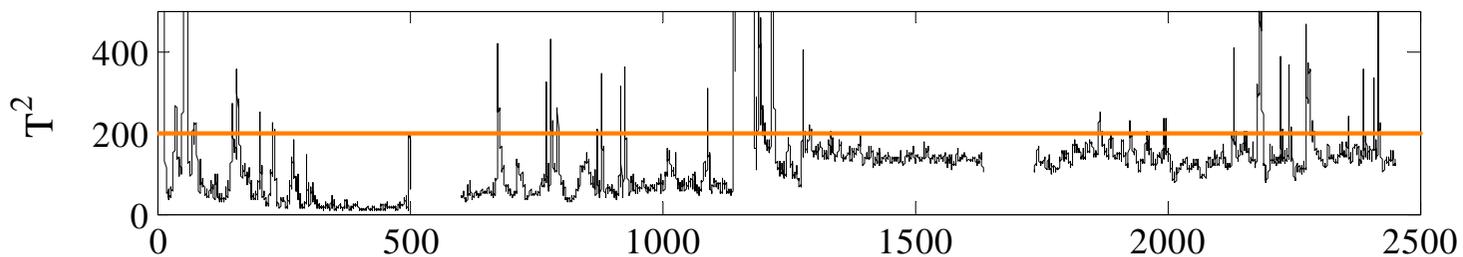
濃度



誤差



監視指標



推定値の信頼性を評価できるシステムを実現！

1. 多変量統計的プロセス管理(MSPC)の基礎
  - ✓ SPCとは
  - ✓ 主成分分析(PCA)によるMSPC
  - ✓ バッチプロセスへの適用
2. Dofasco社での実施例
  - ✓ 連続鑄造プラント向けシステム開発
3. MSPCと外部分析の併用(三菱化学)
  - ✓ 運転条件の変動への対応策
4. ソフトセンサーとMSPCの統合(昭和電工)
  - ✓ ソフトセンサーの精度保証と分析機器故障診断
5. 独立成分分析(ICA)によるMSPC
  - ✓ さらなる性能向上に向けて

PCA-based MSPC was revisited by Kresta et al. (1991)



**Multiway PCA / PLS** ( Nomikos and MacGregor, 1994 )

**Multiblock PCA / PLS** ( MacGregor et al., 1994 )

**Dynamic PCA** ( Ku et al., 1995 )

**Multiscale PCA** ( Bakshi, 1998 )

**Recursive PCA** ( Qin et al., 1999 )

**Model-based PCA** ( Rotem et al., 2000 )

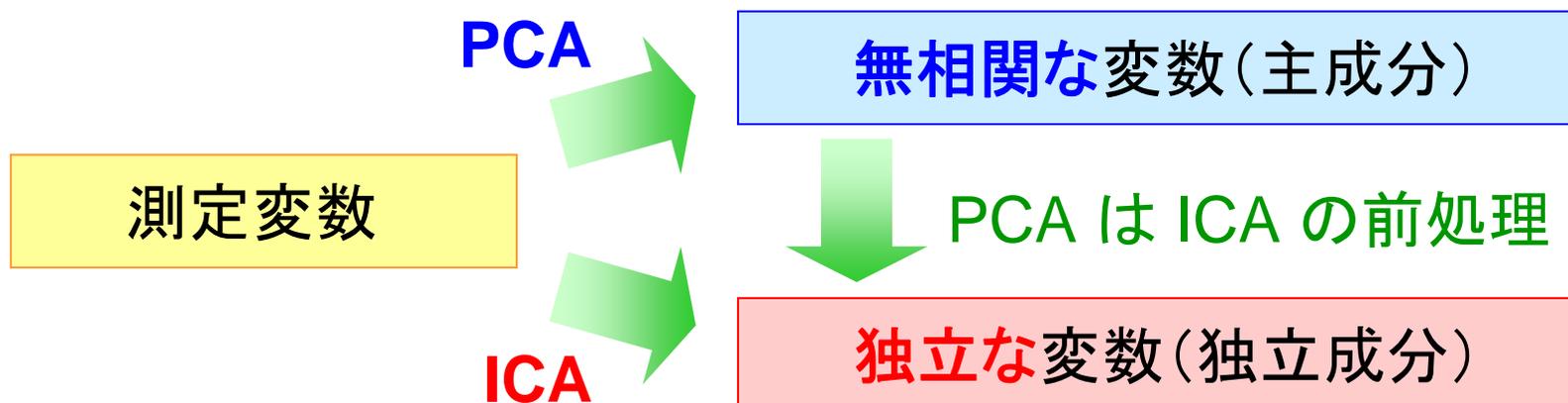
**Moving PCA** ( Kano et al., 2000 )

**DISSIM** ( Kano et al., 2000 )

**Lifted PCA** ( Shah and Tangirala, 2002 )

And so on...

独立成分分析 (ICA) とは、複数の測定変数を統計的に独立な変数 (独立成分) の線形結合として表現する手法である。



独立は無相関よりも強い性質である。

膨大な運転データが存在する.

データから何を知ることができるのか？

Observed 1



Observed 2



Observed 3



Observed 4



Observed information  
(運転データ)

運転データから有用な情報を抽出したい.

でも, どうやって？

そんなことを実現できる方法があるのだろうか？

## Independent Component Analysis (ICA)

の可能性...

Observed 1



Observed 2



Observed 3



Observed 4



Observed information  
(**運転データ**)

ICA 1A



ICA 2A



ICA 3A



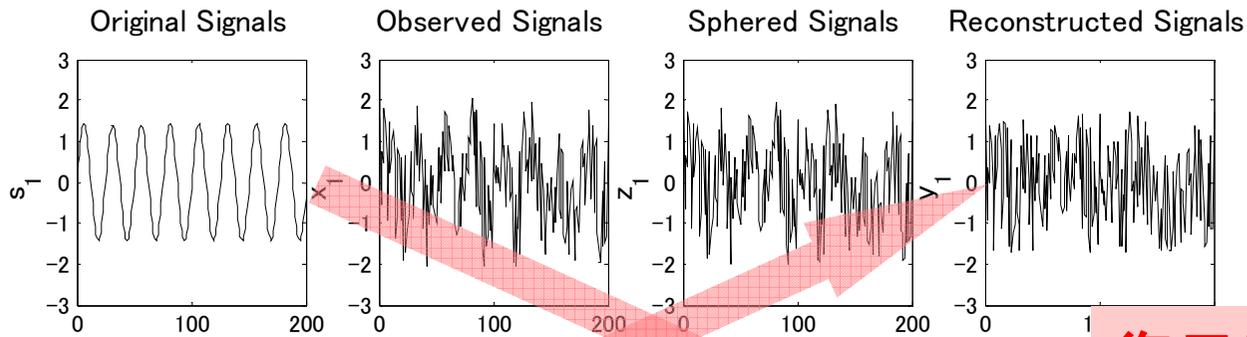
ICA 4A



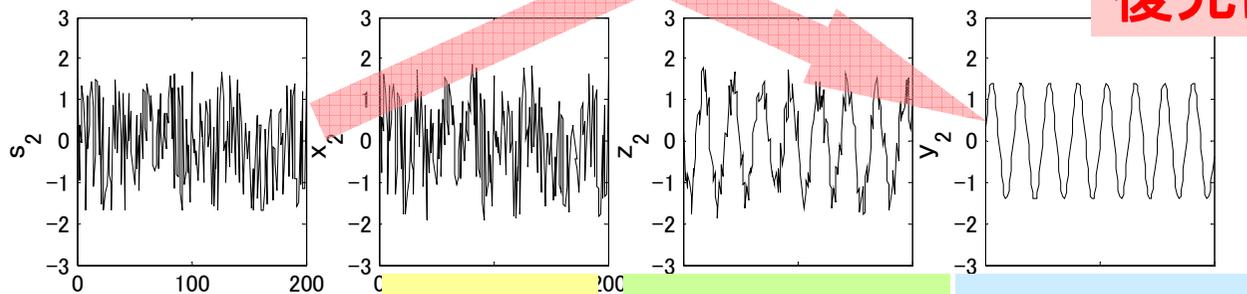
Essential information  
(**プロセスを特徴づける  
本質的な要因**)

ルノワールの絵画

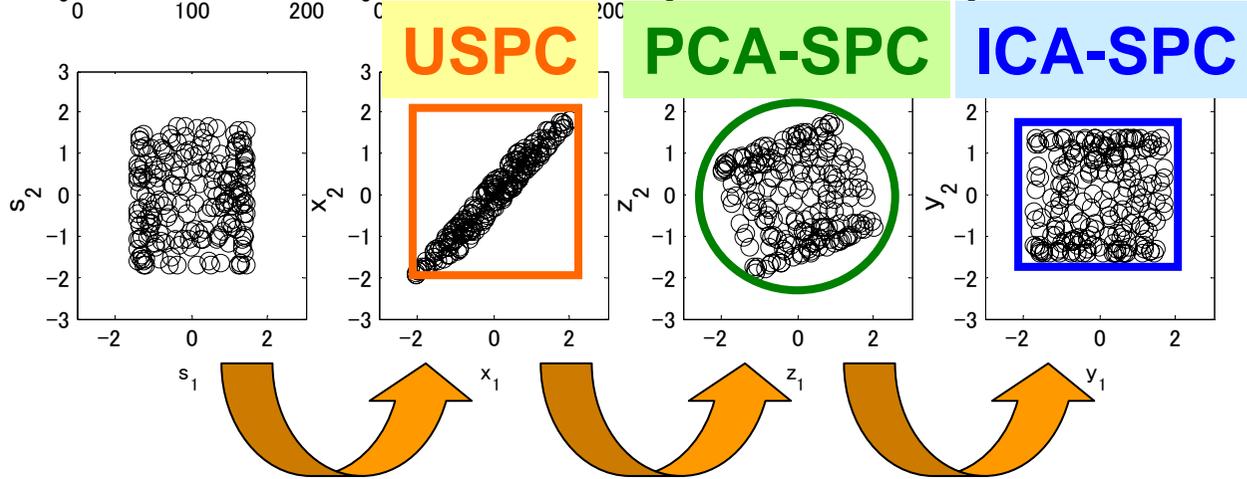
変数1



変数2



復元に成功

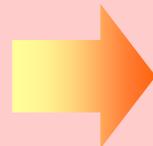


混合 無相関化(PCA) ICA

ICA-SPC が常に PCA-SPC よりも優れているわけではない。

Variables	Method
Gaussian	PCA-SPC
Non-Gaussian	ICA-SPC
Mixture	?

ICA-SPC と PCA-SPC を統合することにより、さらなる運転監視性能の向上を実現できる新しいMSPC手法を提案する。



**Combined MSPC (CMSPC)**

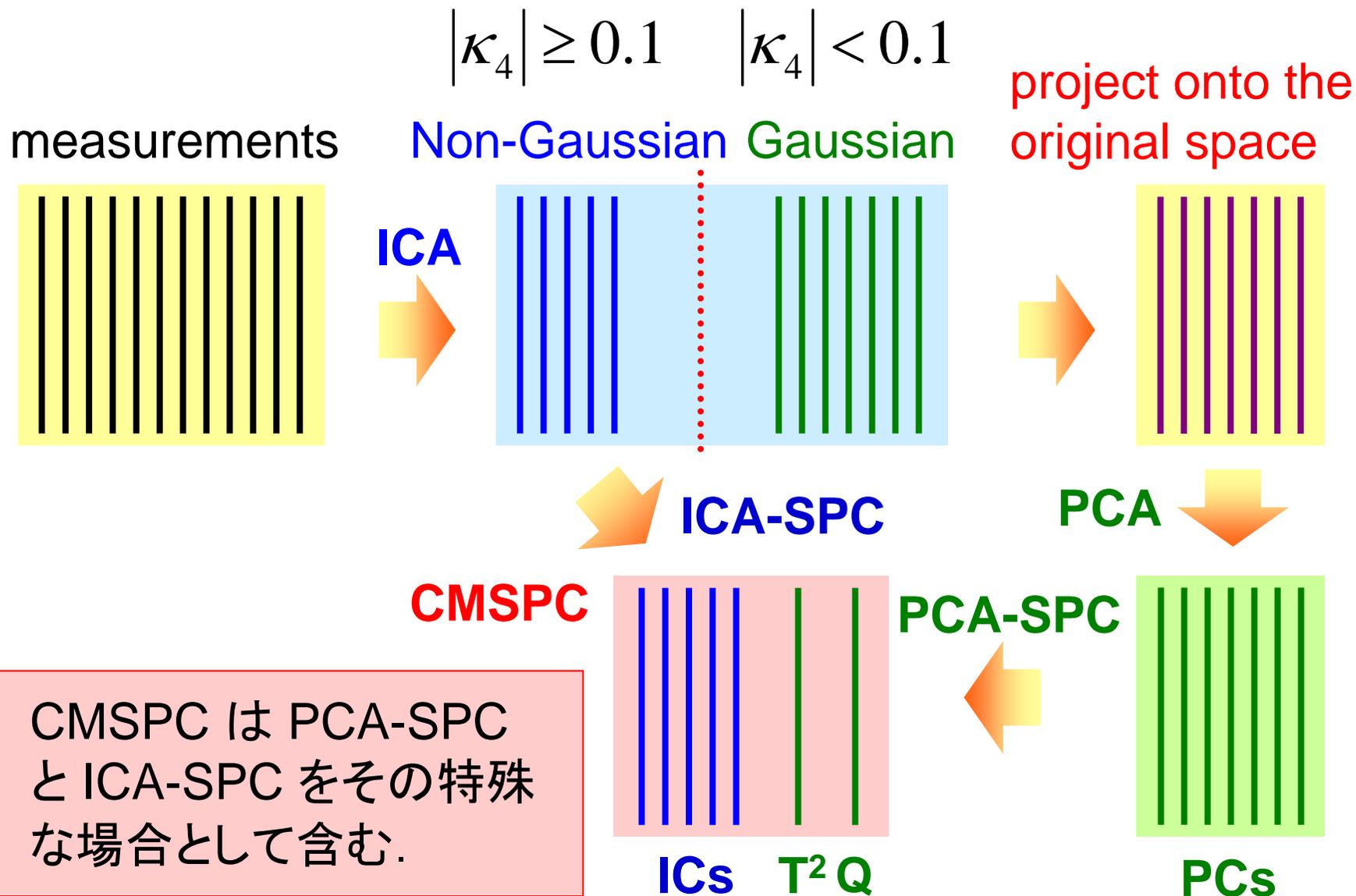
正規分布に従う変数と従わない変数を  
区別する必要がある。



4次キュムラント(尖度)を非正規性指標とする。

$$\kappa_4(y) = E[y^4] - 3E[y^2]^2$$

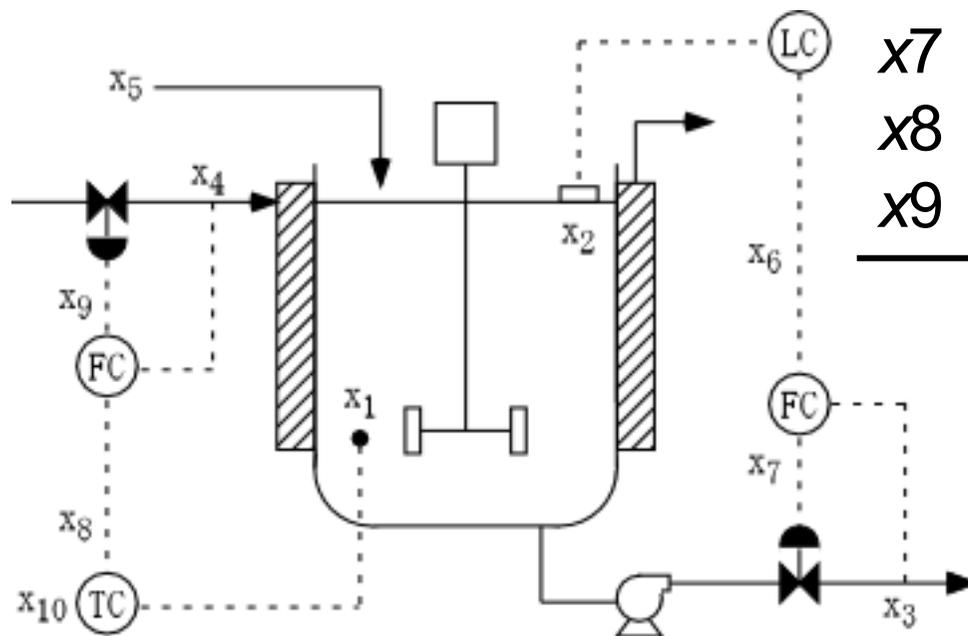




CMSPC は PCA-SPC と ICA-SPC をその特殊な場合として含む。

測定周期： 5秒

各ケースについて  
10,000セットのデータを用  
いてARLを計算



### Monitored Variables

x1	reactor temperature
x2	reactor level
x3	reactor outlet flow rate
x4	coolant flow rate
x5	reactor feed flow rate
x6	MV of level controller
x7	MV of outlet flow controller
x8	MV of temperature controller
x9	MV of coolant flow controller

(Johannesmeyer and Seborg, 1999)

	USPC	PCA-SPC	ICA-SPC	CMSPC	fault / disturbance
N	94.7	115	96.6	95.4	normal operation
F1	1.0	1.4	1.1	1.1	dead coolant flow meas.
F2	7.9	8.7	8.8	8.8	bias in temp. meas.
F3	7.0	2.6	1.4	1.4	coolant valve stiction
<b>F4</b>	<b>49.5</b>	<b>23.1</b>	<b>1.0</b>	<b>1.0</b>	feed flow rate - step
F5	52.4	60.1	57.6	57.6	feed concentration - ramp
F6	60.0	61.8	55.8	55.8	coolant feed temp. - ramp
<b>F7</b>	<b>79.3</b>	<b>86.2</b>	<b>2.5</b>	<b>2.5</b>	upstr. pres. in coolant line - step
F8	61.7	6.6	1.0	1.0	downstr. pres. in outlet line - step