

# 品質問題を解く技術

合目的的データ解析で現場の問題に挑む

京都大学 加納 学



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

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

## 関連する共同研究(対外発表した成果のみ)

2

- ナフサ分解炉スキン温度推定  
東洋エンジニアリング, 大阪石油化学 (1996, 1997)  
学位取得, 海外滞在, ソフトセンサー・多変量SPCに関する研究を実施
- モノマープラント閉塞検出  
三菱化学 (2004)
- 蒸留塔製品組成推定  
昭和電工 (2004, 2004)
- 鉄鋼製品品質改善  
住友金属工業 (2006, 2006, 2007, 2008, 2008)
- 半導体製品品質推定と異常解析  
東芝 (2007)
- 製剤プロセス混合終点予測  
第一三共 (2008)
- 蒸留塔製品組成推定  
昭和電工 (2009)

## 鉄鋼製品品質改善

3

住友金属工業との共同研究プロジェクト

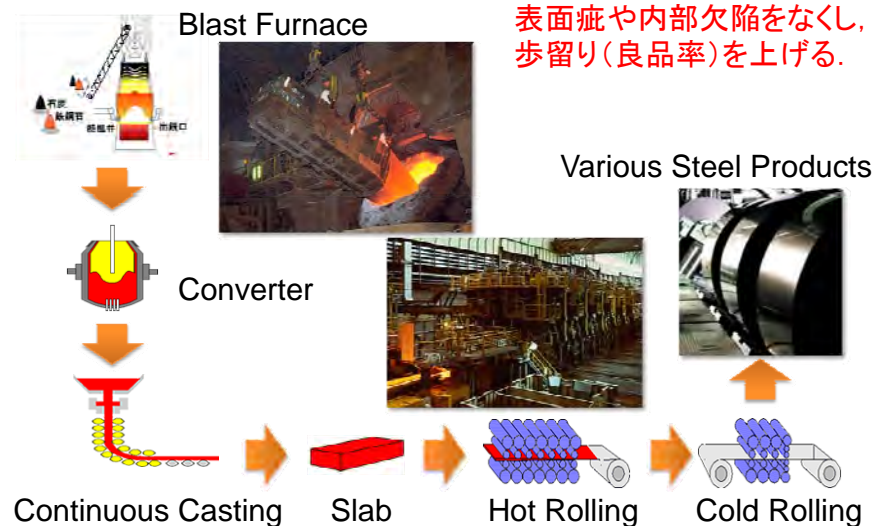
鉄鋼製品の歩留り向上

製品品質と操業条件を結び付ける統計モデルを構築し、表面疵や内部欠陥を抑制し、製品歩留りを改善できる操業条件を導出できるシステムを開発する。

*Comput. Chem. Engng*, 32, 12-24 (2008)  
日本設備管理学会誌, 19, 220-227 (2008)  
計測自動制御学会論文集, 42, 909-915 (2006)  
計測自動制御学会論文集, 42, 902-908 (2006)

## 鉄鋼プロセスでの品質改善

4



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？

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

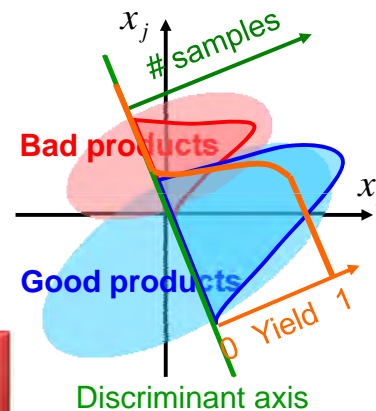
どうすれば、意味のある形で、品質を定量化し、  
運転条件と品質の関係をモデル化できるか。

1. 線形判別分析の適用

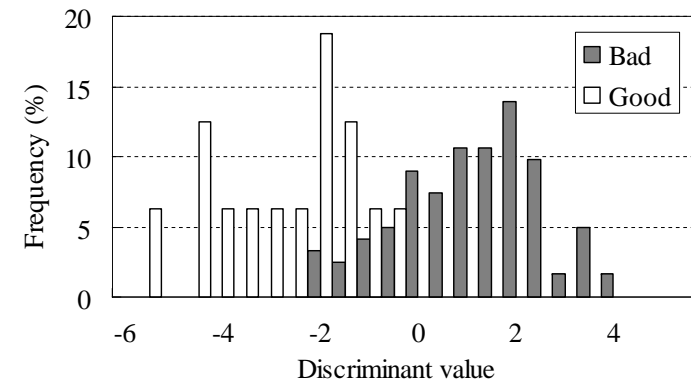
運転条件を表す多次元空間において、良品と不良品を最も良く判別する判別軸を求める。

2. ヒストグラムによる歩留りの定義

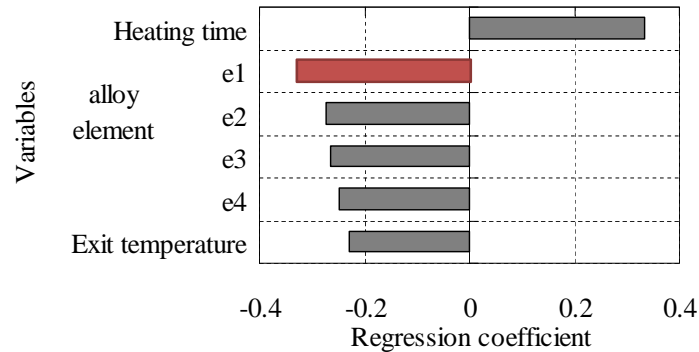
求めた判別軸に対して、良品と不良品のヒストグラムを作成し、製品歩留りを定義する。



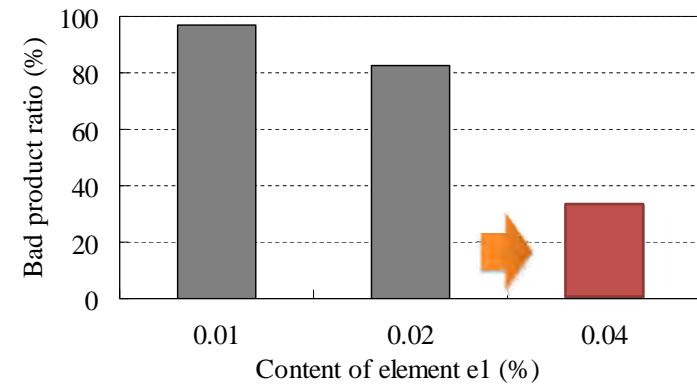
定性的な品質情報が定量化され、  
歩留りと運転条件を定量的に関連づけることができる。



- 55変数にPCAを適用し、6主成分を採用
- 表面疵の有無を概ね判別
- 完全に分離できなくて当然であり、その必要もない。



- 品質に対する影響の大きい6変数をピックアップ
- 操作コストや操作性を考慮して、プロセス技術者が元素e1の含有量を増加させることを決定
- 大切なのは、予測精度ではなく、着目すべき要因と変化させるべき方向がわかること。



- 元素e1の含有量を増加させることにより、表面疵の発生頻度が激減することを確認

作業データに基づく歩留り改善を実現！

- 対象は、多工程・複雑・非線形・動的プロセスの疵や欠陥。
- 成果をあげたのは、とても単純な線形モデル。
- 「プロセスは複雑で非線形性が強いので...」  
これは思考停止の典型例で、全く論理的でない。
  - モデリングしたい領域で本当に非線形性は強いのか。
  - 目的を達成するために線形手法ではダメなのか。
- モデル精度も同様。本当に必要な精度を見極めているか。
  - 多くの品質問題では、要因と方向が示せば十分。
- 単純な方法に徹底的にこだわる。
- 目的を明確にして、目的達成に相応しい方法を利用する。



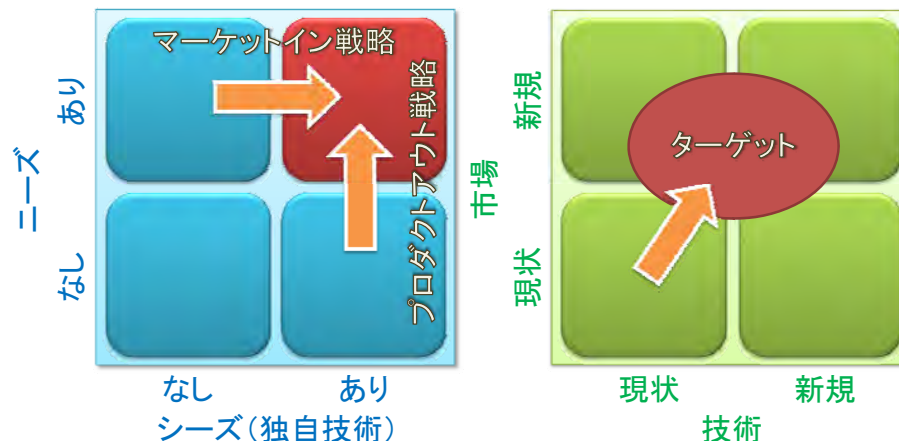
徹底的に応用研究にこだわることに決めた。  
つまり、役に立つ研究をするに決めた。

- **基礎研究**とは**ブレークスルーを生み出す研究**である。ブレークスルーの対立概念はインクリメンタルである。これを「非基礎」といおう。
- **応用研究**とは、人類の持つ知見を人類にとって**有用な知見に変換する研究**である。応用の対立概念はしたがって「非応用」である。当然のことながら、応用研究の中にも基礎研究は存在し、逆も真である。
- 我々は**第IV象限の研究を行わないこと**としよう。

「国立環境研究所のこれから」, 市川惇信, 1992



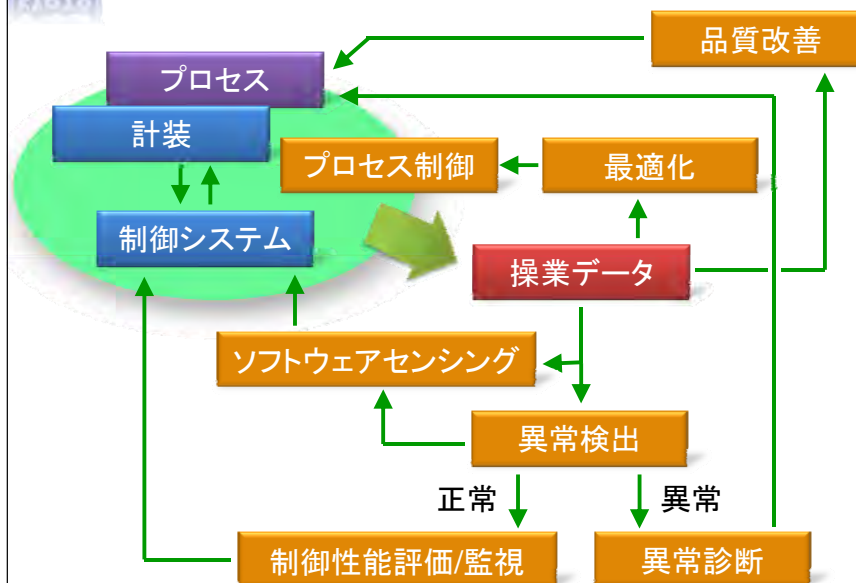
技術と成果に相乗効果を持たせながら発展させていく



参考:「MOT[技術経営]入門」, 延岡健太郎, 2006

1. **何に自分の時間がとられているかを知る**ことである。残されたわずかな時間を体系的に管理することである。
2. **外の世界に対する貢献に焦点を合わせる**ことである。仕事ではなく成果に精力を向けることである。「期待されている成果は何か」からスタートすることである。
3. **強みを基盤にする**ことである。自らの強み、上司、同僚、部下の強みの上に築くことである。弱みを基盤にしてはならない。すなわちできないことからスタートしてはならない。
4. **優れた仕事が際立った成果をあげる領域に力を集中する**ことである。優先順位を決めそれを守るよう自らを強制することである。
5. **成果をあげるよう意思決定を行う**ことである。必要なものは、ごくわずかの基本的な意思決定である。あれこれの戦術ではなく一つの正しい戦略である。

「経営者の条件」, P.F. Drucker



## 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

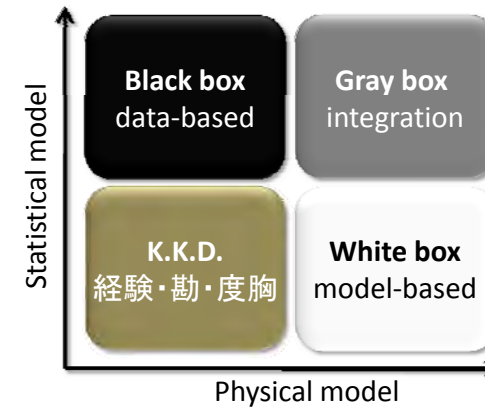
最適な運転条件を求める

## 品質改善

製品品質や歩留りを改善する



- 対立するものではない。
- 必要に応じて、組み合わせて利用する。
- 製造プロセスを対象とするかぎり、物理モデルが王道。



- 忍耐力
  - 「どうせ数字遊びだろ？」との批判に耐え忍ぶ。
- 自制心
  - 便利なツールが溢れているが、間違った使い方をしない。
- 線形代数
  - 固有値, 恐るべし!
- 確率・統計



天正大判(天正年間・1573年～1591年)  
豊臣秀吉がつくった世界最大の金貨  
三菱東京UFJ銀行貨幣資料館

- 隣家には子供が2人いるのだが、あなたはその性別を知らない。次の2つの場合について、もう1人も女の子(2人とも女の子)である確率はいくらか。
1. 隣家の奥さんに「女の子はいますか」と聞いたところ、答えは「はい」であった。
  2. 隣家の奥さんが女の子を1人連れているのを見た。



## 昭和電工との共同研究プロジェクト

## 蒸留塔における製品濃度の推定

製品品質をオンラインで推定できるソフトセンサーを開発し、プロセスの限界運転を実現する。推定値はオペティマイザおよびモデル予測制御システムで利用する。

*AIChE J.*, in press

*J. Proc. Cont.*, 19, 179-186 (2009)

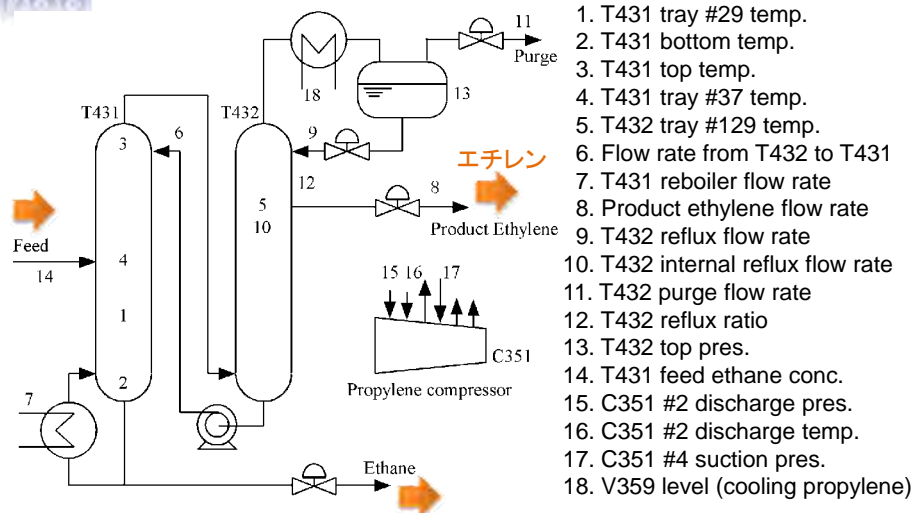
計測自動制御学会論文集, 44, 317-324 (2008)

計測自動制御学会論文集, 43, 869-876 (2007)

*J. Chem. Eng. Japan*, 37, 422-428 (2004)



## 対象とした連続蒸留塔



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

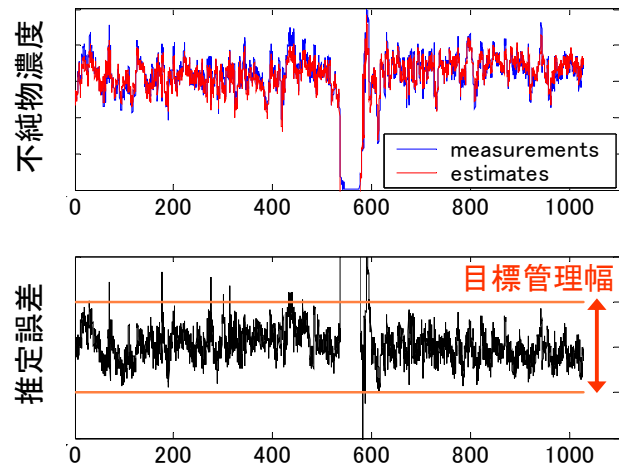
## ソフトセンサー構築における問題点

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！

$$\text{推定誤差} = \text{測定値} - \text{推定値}$$

- 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？

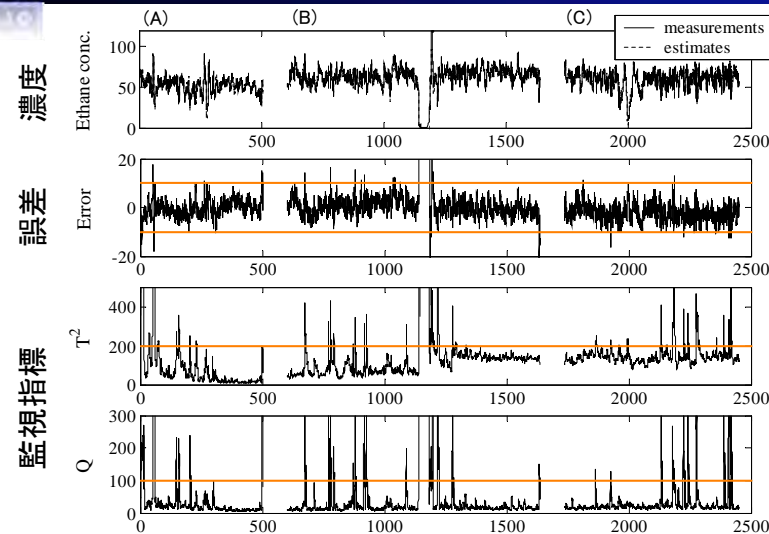
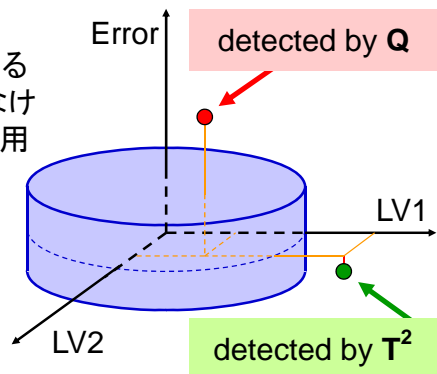
入力変数が張る多次元空間において、モデル構築に利用した運転データが存在する領域内でのみ、推定モデルおよびその推定値を信頼できる。



現在の運転状態が領域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。

分析機器の異常も検出可能。

PLS-based MSPC



推定値の信頼性を評価できるシステムを実現！

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

正しい解析結果を求めている自信はありますか？

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。

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**  
 (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**

PLSによって高精度なモデルを安定して構築できるが、真の影響度は求められない。(解決策の詳細は省略)

- Dynamic PLS
  - 実績のある手法だが、入力変数の数が膨大となり、効率的なモデル構築手法とは言い難い。
- 部分空間同定 (Amirthalingam and Lee, *J. Proc. Cont.*, 1999)
  - 多変数プロセスの動特性を効率的にモデル化できるが、非観測外乱の特性変化に対応できず、測定データが持つ情報を活用しきれていない。



- 二段階部分空間同定法
  - 非観測外乱の影響を考慮して、その特性変化に対応でき、かつ高い推定精度を実現できるソフトセンサー設計法。



PSE KYOTO 33

## 二段階部分空間同定法

**第一同定** 観測された入出力データを用いて状態空間モデルを構築する。

**外乱推定** 残差から非観測外乱を推定する。

**第二同定** 入力変数と外乱推定値を入力として、品質変数を推定する状態空間モデルを構築する。

(Lee et al., SICE論文集, 2007)

PSE KYOTO 34

## 蒸留塔への適用結果

推定精度評価結果

		(a)	(b)
Dynamic PLS	R	0.75	0.74
	RMSE	5.34	4.18
部分空間同定	R	0.88	0.85
	RMSE	6.79	3.69
<b>二段階部分空間同定</b>	R	<b>0.90</b>	<b>0.88</b>
	RMSE	<b>4.28</b>	<b>2.97</b>

**推定精度の大幅な改善に成功!**

モデル構築: Jan. 1 ~ Feb. 20, 2002      状態変数の数(第一モデル) 10  
 モデル検証: (a) Dec. 9 ~ Dec. 16, 2001      状態変数の数(第二モデル) 6  
 (b) Dec. 21 ~ Dec. 31, 2001      非観測外乱の数 4

(Kano et al., J. Proc. Cont., 2009)

PSE KYOTO 35

## 保守負荷の低減を目指して

- 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。

PSE KYOTO 36

## Just-In-Timeモデルの概念

- 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。

PSE KYOTO 37

## 相関型JITモデルへ

selected data set

query

neighbor

Q statistics

○ data set 1

× data set 2

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)

PSE KYOTO 38

## 相関型JITの産業応用事例

- 分解ガソリン精留塔  
昭和電工大分工場
- ガソリン中アロマ濃度  
MPC制約条件  
ラボで1回/日分析  
→ 過剰に余裕のある運転
- 入力変数選択  
8変数選択(全19変数) +  
4時間前の分解炉コイル出口温度
- データ  
2006/4/30 ~ 2007/12/25 (600日間)

塔頂温度

分解炉温度 (4時間前)

入口流量

差圧

還流量

分解ガソリン (C6~C9)

出口温度

出口流量

アロマ濃度

分解ケロシン (C9)

出口流量

リボイラ流量

(Fujiwara et al., *AIChE J.*, in press)

PSE KYOTO 39

## 相関型JITの産業応用事例

recursive PLSによる予測結果

RMSE = 1.33  
r = 0.67

— 実測値  
— 予測値

圧縮機 圧力変更

相関型JITによる予測結果

RMSE = 0.90  
r = 0.83

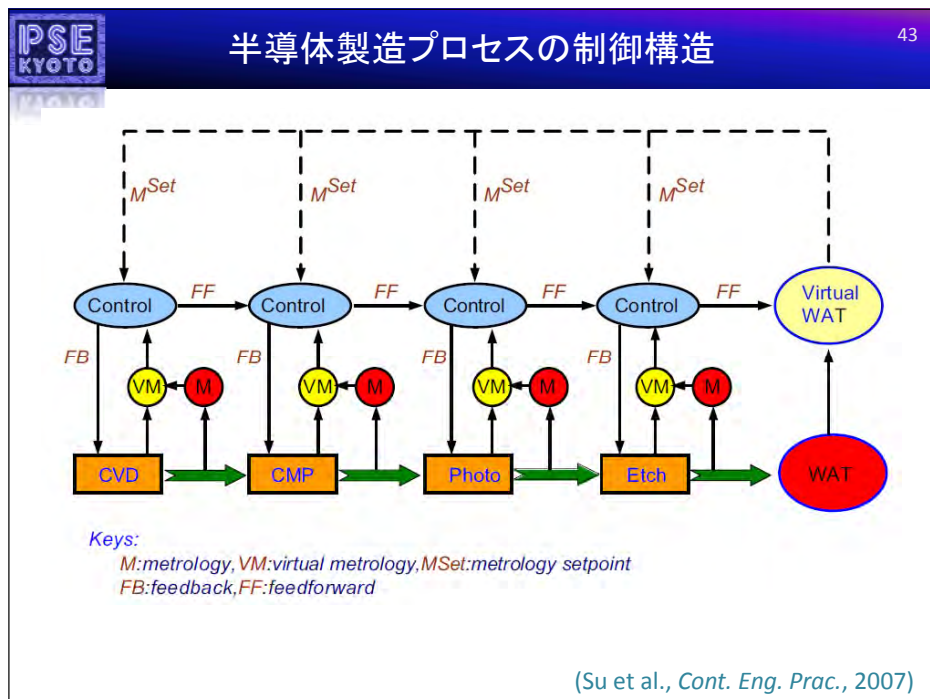
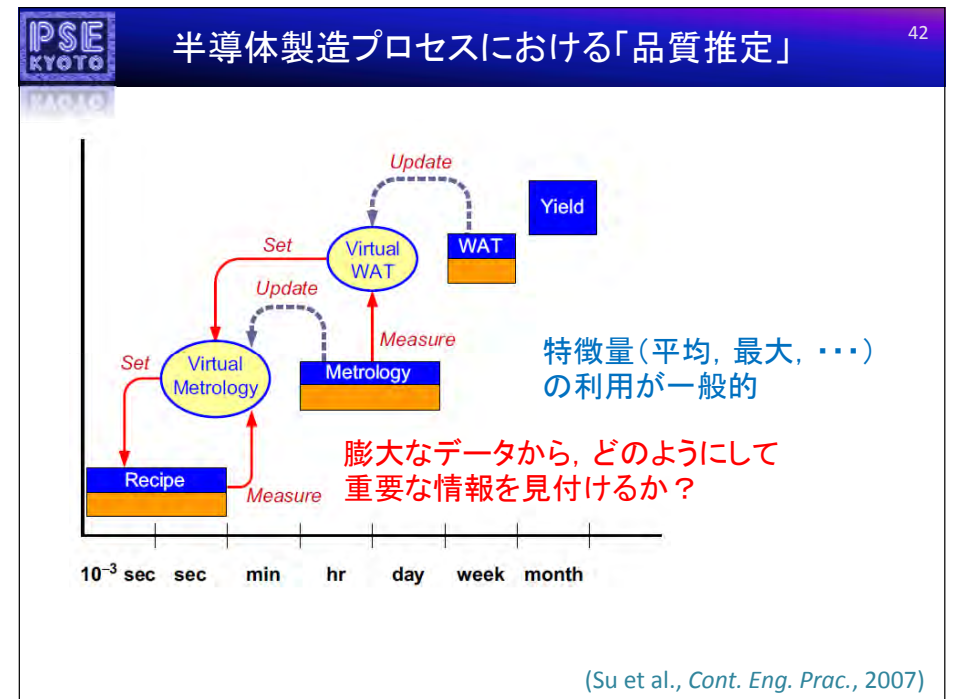
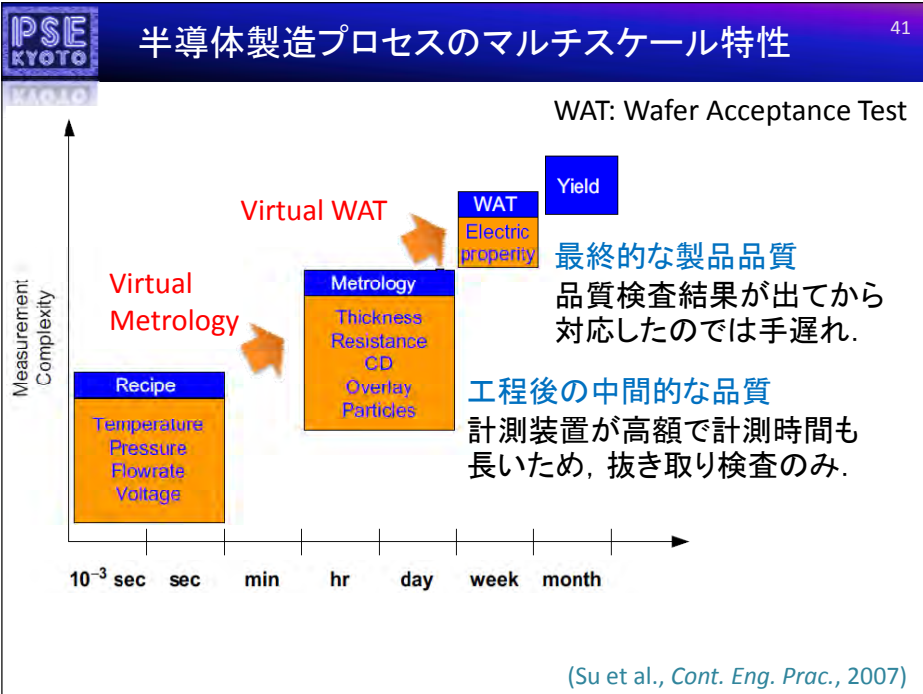
圧縮機 圧力変更

相関型JITモデリングにより高い予測性能を達成!

PSE KYOTO 40

## データ解析で成果を出すために

- 問題の確認
  - 現場で教えてもらう。研究室に引き籠もってはいけません。
- 目標の確認
  - 何をどうしたいのか。誰もが一致した認識を持てるまで、具体化する必要がある。徹底的に議論すべき。
- バウンダリーの設定
  - 製品品質に影響する工程全体を対象とする必要がある。しかし、対象を広げると解析が難しくなるのも事実。
- 情報・データの収集, 前処理
  - データをプロットして自分の目で見るのが大切。
- モデル構築と検証
  - 手法の特徴, 長所と短所を認識しておく必要がある。
  - 合目的なモデルであるか。



PSE KYOTO Quality by Design 45

- 現状
  - 膨大な試験に基づく品質保証
    - 受入試験, 工程管理試験, 最終製品試験
  - 課題
    - 製品リードタイムの短縮
    - 製品廃棄リスクの低減
- 新しいパラダイム
  - Quality by Design (QbD)
    - ICH(日米EU医薬品規制調和国際会議)が提唱
    - 設計段階における品質の作りこみ
    - 科学的根拠に基づいた効果的な製造及び品質管理

PSE KYOTO 品質管理のパラダイムシフト 46

- Merck の成功 (The Gold Sheet, February, 2008)
  - Real-Time Releaseにより, 1バッチあたりの検査時間が11.2時間から0.3時間へ(97%削減).

PSE KYOTO Design Space 47

中間製品品質 最終製品品質

Control Space Design Space Operating Space

小スケール検討で明確化可能

実験数 多

小スケール

パイロットスケール

商用スケール

商用生産

実験数 少

いかに商用生産スケールの Design Spaceを設定するか

PSE KYOTO まとめ 48

- 製造プロセスの外観は異なっても, 品質実現力強化の観点から見れば, 抱えている課題は類似している.
  - 異業種交流の促進が有効である.
- 時間的に変化するプロセス特性(生産量変更, 原料変更, メンテナンスによる急変もある)へ対応しなければならない.
  - やたら複雑な手法で性能を改善したと主張する論文が多いが, 現実の問題を見ていない.
- 合目的データ解析で現場の問題に挑もう!
  - 個々の問題解決は通過点に過ぎない.
  - 品質問題解決のためのデータ解析技術の体系化.

- 知識ある者は理解されるよう努力する責任がある。
- 素人は専門家を理解するために努力すべきである、あるいは専門家は専門家と通じれば十分であるなどとするのは、野卑な傲慢である。
- 大学や研究所の内部においてさえ、残念ながら今日珍しくないそのような風潮は、**彼ら専門家自身を無益な存在とし、彼らの知識を学識から卑しむべき術学に貶めるものである。貢献に責任をもつためには、自らの産出物すなわち知識の有用性に強い関心をもたなければならない。**

「経営者の条件」, P.F. Drucker

- 英語の辞書でエンジニア「engineer」を引くと、ご承知のように「技術者」という訳がでている。この訳語の中にある「術」という字だが、この字をよく見ると、「行」の間に「求」がはいっている。「行動」が要求されているのが「術」なのではあるまいか。  
(中略)

「技術」も(剣術と)同様に、行動が要求される。実際にやるに限るのである。「述」もジュツと読む。最近では「技術者」ならぬ「技述者」のほうが多いのではないか。気になることである。

「トヨタ生産方式—脱規模の経営をめざして」, 大野耐一, 1978

- 品質問題を解くために
  - 問題を正確に把握する
  - 目的を明確にする
  - 合目的なデータ解析技術を利用する
    - 基本を習得する
    - 他業界, 他分野の技術を知る
- 研究&技術に関わるものとして
  - 非基礎・非応用研究には手を出さない。
  - 社会貢献に焦点をあわせる。
  - 自分の強みを生かす。

- 迷宮を探検しているあなたに怪物が言った。  
『箱が3つある。1つは財宝入り, 他の2つは空だ。  
1つ箱を選べ。財宝入りの箱を選べば, くれてやる。  
だが, 空の箱を選べば, おまえは死ぬ。』  
あなたが箱を1つ選ぶと, 中身を知っている怪物が空の宝箱を開けながら言った。  
『その箱でいいか? 変えてもいいぞ。』
- このとき, 最初に選んだ箱のままにすべきか, それとも別の箱にすべきか。



*Thank you for your kind attention.*

Σ ΠΡΟΣΕΣΣΙΣ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ ΕΡΕΥΝΑΣ ΚΑΙ ΕΦΑΡΜΟΓΩΝ

謝辞

京都大学プロセスシステム工学研究室のメンバーと卒業生

紹介させていただいた研究成果や産業応用事例は、共同研究等を通して支援をいただいた数多くの企業の方々のご尽力の賜物です。その支援に深く感謝いたします。

## 基本は、数えあげること

1. 隣家の奥さんに「女の子はいますか」と聞いたところ、答えは「はい」であった。
2. 隣家の奥さんが女の子を1人連れてきているのを見た。

1/3

2/4

