

1

ソフトセンサー — 基本と産業応用事例 —

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/


2

ケモメトリクスとは？

Chemometrics is the science of relating measurements made on a chemical system or process to the state of the system via application of mathematical or statistical methods.

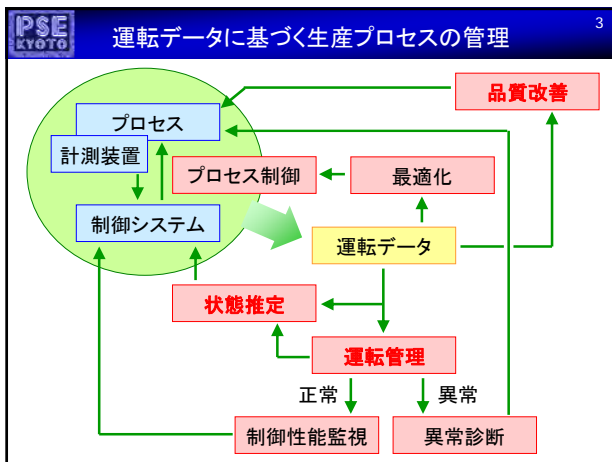
International Chemometrics Society (ICS)

Chemometrics = Chemistry + Metrics
 計量化学 化学 計量



- ✓ データに関連するものは何でも含む
- ✓ 適用対象を化学に限定する理由はない

Process Chemometrics
 統計的手法を化学プロセスデータに適用する際の総称



4

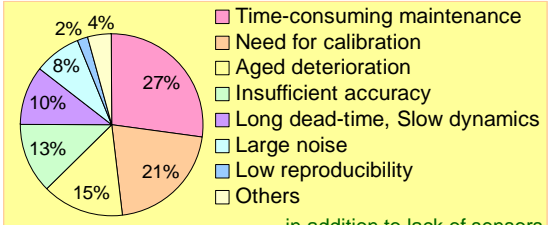
様々な技術があるが、何がKEYなのか？

- 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

対象のモデル化

5

What is your hardware sensor problem?



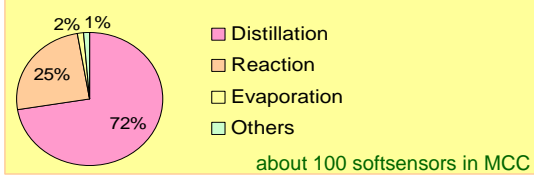
in addition to lack of sensors

“Soft-sensor is a remedy?”
 “Yes, 21 of 26 companies had used soft-sensors.”

Questionnaire to 26 companies (JSPS PSE 143 committee, 2003)

6

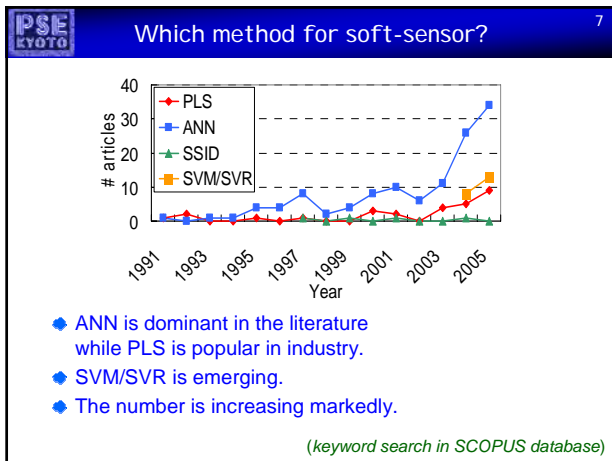
Where do you use soft-sensors?



about 100 softsensors in MCC

- ◆ Distillation is the main application object of soft-sensors.
 - ▶ Many distillation columns in plants.
 - ▶ Easy to model.
- ◆ Most soft-sensors were developed through Partial Least Squares (PLS).

Ookita (C/SCSJ Bulletin, 2006)



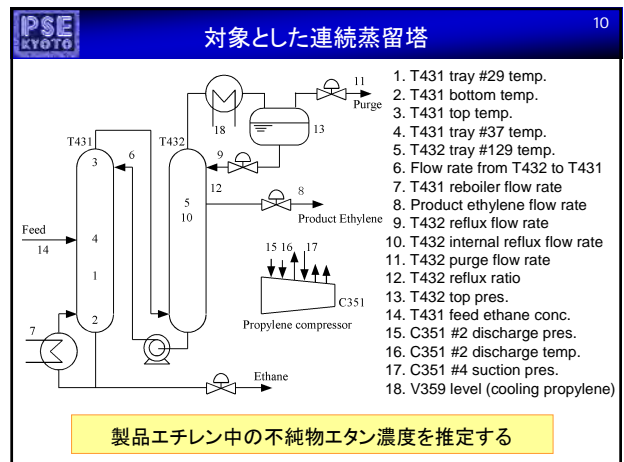
ソフトセンサーの適用事例

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

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。

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



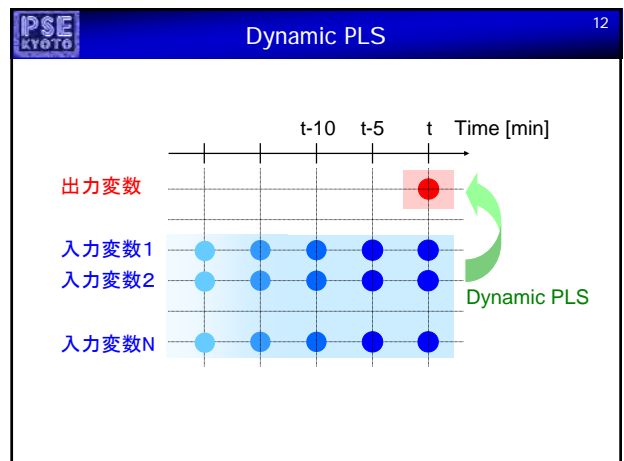
ソフトセンサー構築における問題点

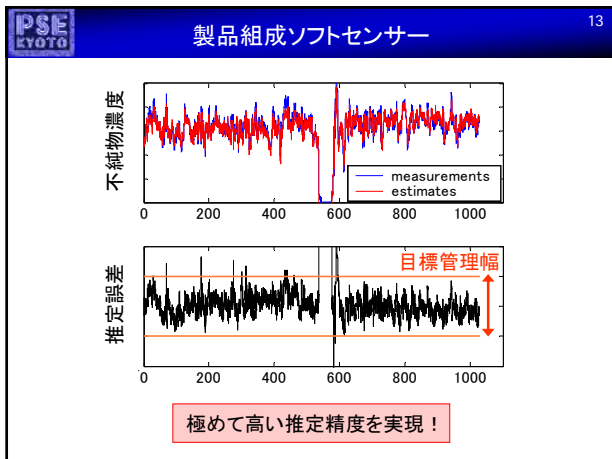
- 多重共線性**
入力変数の多くは強い相関(相互相関)を持つ。
- 動特性**
プロセスの動特性を考慮する必要がある。
自己相関によって、新たな多重共線性が発生する。

Dynamic PLS

- 温度や圧力以外の操作変数も入力変数とする。
- 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)





推定誤差の原因 14

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？

ソフトセンサーとSPCの統合 15

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、最適化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)

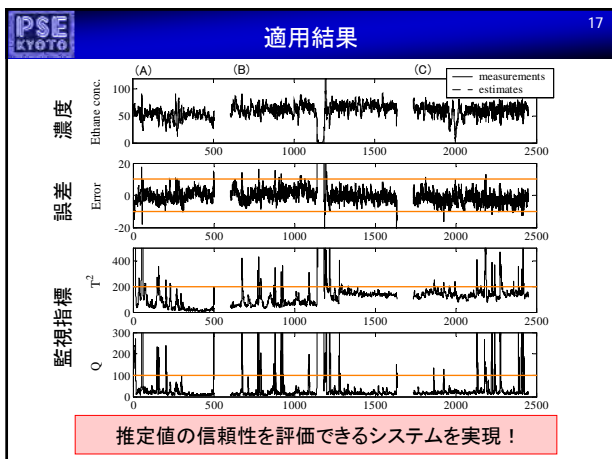
PLSを利用したSPC 16

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利用しない。

分析機器の異常も検出可能。

PLS-based SPC



推定精度の向上を目指して 18

- 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
 - 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を提案する。

Just-In-Timeモデルの概念 25

output

input

local model

neighbor

query

- **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 26

selected data set

query

neighbor

Q statistics

○ data set 1

× data set 2

JIT modeling

C-JIT modeling

- **相関型Just-In-Time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。

相関型JITモデリングの手順 27

- 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。

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

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

Subspace spanned by PCs

ケーススタディ: 対象プロセス 28

- 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。

Reactor

$A \rightarrow B$

Frequency factor [min^{-1}]

0 6 12 18 24

Month

Recursive PLS 適用結果 29

6 months estimation by recursive PLS

RMSE = 2.07

$r = 0.88$

2 months estimation by recursive PLS

CA [mol/m^3]

Day

catalyst recovery

- 触媒再生のような急激なプロセス特性の変化が発生すると全く追従できず、推定誤差が大きくなってしまふ。

従来型 JIT 適用結果 30

6 months estimation by JIT

RMSE = 2.43

$r = 0.82$

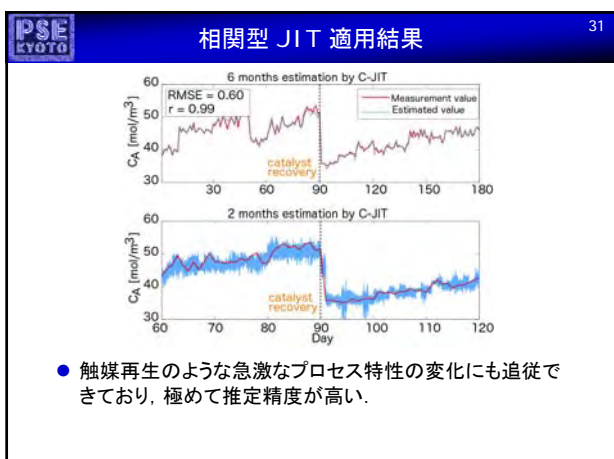
2 months estimation by JIT

CA [mol/m^3]

Day

catalyst recovery

- 触媒再生のような急激なプロセス特性の変化にも追従できているが、全体的に推定誤差が大きい。



- PSE KYOTO 32 まとめと課題
- **長所**
 - プロセス特性の変化に追従してモデルを更新できる。
 - 推定精度はDynamic PLSなど従来法よりも高い。
 - **短所**
 - モデルが自動更新される。ただし、更新頻度は調整可能。
 - **課題**
 - データベースに保存すべきデータと保存すべきでないデータの見極めが重要。どうするか？

- PSE KYOTO 33 課題
- ◆ **モデル構築**
 - ▶ モデル構築そのものではなく、その準備が本当の問題。
 - ▶ データの選択、入力変数の選択
 - ▶ データの前処理
 - ◆ **モデル保全**
 - ▶ 構築したシステムを活用し続けるための仕組みが必要。
 - ▶ モデル更新
 - ▶ モデル再構築
 - ◆ **エンジニア&オペレータ教育**
 - ▶ 人材が乏しい。大学でも教育していない。
 - ▶ 統計的手法、解釈、保全

PSE KYOTO 34 おわり