

1

## バッチプロセスのモデル化と最適化

**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

## 背景

- 製品ライフサイクルの短縮
- 国際競争の激化

いかに短期間で製品品質や歩留りを改善し、生産効率を向上できるかが重要な課題である

- 高付加価値製品の多品種少量生産

バッチプロセスが重要となる

操作プロファイルの最適化が必要

3

## 品質・歩留り改善：例1

Example: **Steel Process**

**- Mission -**  
Minimize defects on the steel surface, and improve product yield.



4

## 品質・歩留り改善：例2

Example: **Wafer Process**

**- Mission -**  
Improve product qualities such as flatness.




5

## 品質・歩留り改善：例3

Example: **LCD Process**

**- Mission -**  
Reduce CD errors.



6

## プロセス・ケモメトリクスの活用例

- **ソフトセンサー／推定制御**
  - オンラインで測定されていない品質などの重要な変数をオンライン測定されている変数から推定する
  - PLS, Dynamic PLSが最も一般的
- **多変量統計的プロセス管理(Multivariate SPC)**
  - 変数の相関関係を考慮して異常検出を行う
  - 連続プロセス: PCAが一般的
  - バッチプロセス: Multiway PCAが一般的
- **製品設計／品質改善**
  - 原料・運転条件から製品特性を推定するモデルを構築し、希望特性を実現できる運転条件を求める
  - 連続プロセス: PLSが一般的
  - バッチプロセス: Multiway PLSが一般的

**PSE KYOTO** Multiway PLS / Multiway PCR 7

出力変数  
入力変数1  
入力変数2  
入力変数N

入力変数の数が膨大となり、推定精度が低下する

**PSE KYOTO** 新しいモデル化技術 8

必要な技術

過去の運転実績に基づいて、バッチプロセスの操作プロファイルを最適化する方法

解決すべき課題

どのようにして入力変数の数を劇的に削減するか

解決への発想

- ウェーブレット解析による次元圧縮
- 多変量解析による次元圧縮

**PSE KYOTO** ウェーブレット解析の活用 9

操作プロファイル

高周波成分  
低周波成分

ウェーブレット解析により、操作プロファイルを複数の周波数成分に分解できる。逆に、分解された周波数成分から操作プロファイルを再構成することもできる。

ウェーブレット係数の大小が、操作タイミングの前後関係を捉えている。

**PSE KYOTO** バッチ長さの統一 10

- 多変量SPC分野での研究が先行
- **Dynamic Time Warping**
  - 音声認識の分野で開発・利用
  - 特徴を一致させることで、個体差をなくす方法
  - バッチ毎の差異をうまく捉えることができない
- **Indicator Variable Technique**
  - バッチの進行度合いを示す変数(IV)を時間の代用として、バッチ長さを統一する
  - 例) 毎回30°Cから70°Cに単調上昇する温度
  - WCRとの併用可能

**PSE KYOTO** 系統的な係数選択：提案法 11

- 出力推定精度と入力再構築精度を同時に向上させる
  - 出力推定精度 : RMSEy
  - 入力再構築精度 : RMSEu
  - Approximation係数はすべて採用する
  - ウェーブレット係数の絶対値の和が大きな列から順に採用する
  - 分解レベルと採用する列数を最適化する

Batch 1  
2  
:  
N

ウェーブレット係数行列

RMSEu

RMSEy

**PSE KYOTO** ウェーブレット係数回帰(WCR) 12

<手順>

1. IVTIによってバッチ長さを統一する。
2. 操作プロファイルをもつ変数にウェーブレット変換を適用し、ウェーブレット係数を求める。
3. 系統的係数選択法によって、最適な分解レベルとウェーブレット係数を選択する。
4. 必要に応じて、標準化する。
5. PLS/PCR等を用いて、ウェーブレット係数を入力、製品品質を出力とするモデルを構築する。

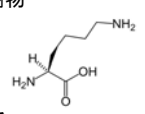
**操作プロファイル最適化** 13

<手順>

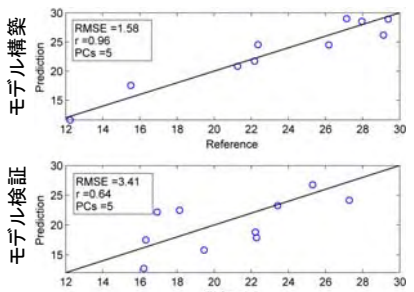
1. **ウェーブレット係数回帰**を実行し、モデルを構築する。
2. 与えられた評価関数と、希望品質を実現する等の制約条件の下で、**最適化**問題を解く。
3. **ウェーブレット逆変換**を適用し、最適な操作プロファイルを導出する。

**リジン生産プロセスへの適用** 14

- **リジン**
  - 必須アミノ酸の一種(サプリメントとして高い需要)
  - 菌体が増殖する際に生産される二次代謝物
- **リジン生産プロセス**
  - 半回分発酵プロセス
  - 基質供給速度が操作プロファイルを持つ。
  - バッチ終了時のリジン生産量を出力とする。
  - 運転時間は38~42時間
- **ケーススタディの目的**
  - 希望するリジン生産量、あるいは最大のリジン生産量を得る最適な操作プロファイルを導出する。
  - Multiway PCRとWCRの比較を行う。



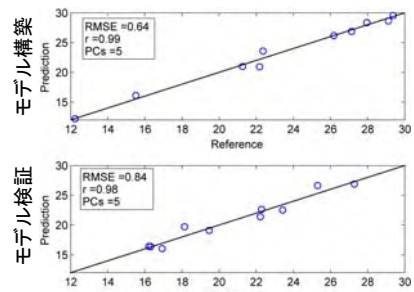
**Multiway PCR 適用結果** 15



- 構築&検証: 各10バッチ
- 主成分数:5 (121→5)

検証用データに対する推定精度が著しく低下する  
重相関係数 0.96 → 0.64

**WCR 適用結果** 16



- 構築&検証: 各10バッチ
- Daubechies (N=8)
- 分解レベル:5
- Approx係数のみを採用 (121→18)
- 主成分数:5 (18→5)

検証用データに対しても推定精度は極めて高い  
重相関係数 0.99 → 0.98

**MPCR vs. WCR** 17

	MPCR	WCR
ウェーブレット解析による次元圧縮	N/A	121 → 18
主成分分析による次元圧縮	121 → 5	18 → 5
RMSE (根平均二乗誤差)	3.41	0.84
重相関係数	0.64	0.98

圧倒的に、MPCRよりもWCRが優れている。

**最小ノルム解の導出** 18

- 入力変数が品質変数よりも多く、解が一意に決定できないため、最小ノルム解となる操作プロファイルを導出した。
- 実現された生産量は21.8, 26.6, 31.5であり、希望値と良い一致をみた。

