

特集

仮想計測技術の最前線

産業プラントにおいて、オンラインで測定できない品質などの重要変数をオンラインで測定可能な変数から推定する方法として仮想計測技術がある。この仮想計測技術は、化学・石油産業や鉄鋼産業ではソフトセンサー、半導体産業ではバーチャルメトロロジー、製薬産業では Process Analytical Technology (PAT) と呼ばれており、近年、製品品質管理や安定運転を目的として、研究開発が進められ、実用化されている。本特集では、仮想計測技術の現状や課題に触れ、それらの解決のための研究例、各産業での実装例を紹介する。

SIS 部会からの特集となる。

(編集担当：内藤清嗣・橋爪 進)†

仮想計測技術の現状と課題

船津 公人

1. ソフトセンサーとは

化学プラントの安定運転と製品品質管理を目的として、仮想計測技術（通称ソフトセンサー）に高い関心が寄せられている。日本学術振興会第143委員会（プロセスシステム工学）ではこれに応えるために、2010年5月から約2年に亘り私が代表世話人となってワークショップNo.29「ソフトセンサー」が企画・運営された。このワークショップは化学関連企業研究者を主体に若干の大学研究者が加わり構成されたが、そこではソフトセンサーへの期待を自らの手で現実のものとしようとの強い意欲と使命感に支えられながら、様々な課題が詳細かつ真剣に議論された。その過程で、正にソフトセンサーが今後化学プラントの安定運転と製品品質管理にとってコスト削減を伴う確かな武器となることを確信した次第である。

化学・産業プラント等の安全で安定した運転のためには、その運転状態を監視し、温度・圧力・流量・濃度などのプロセス変数を適切に制御する必要がある。管理すべきプロセス変数の値を頻繁かつリアルタイムに測定できれば

問題はないが、現実には頻繁な測定が困難、あるいは測定に時間がかかるプロセス変数も存在する。その理由として、技術的に困難であること、分析結果が得られるまでに多くの時間を要すること、分析機器の設置経費の制約などが挙げられる。したがって、このようなプロセス変数をリアルタイムに制御することは難しく、制御に時間遅れが生じることになる。

このような背景から、リアルタイムに実測が困難なプロセス変数の値をリアルタイムに推定する手法としてソフトセンサーが考案され利用されている。ソフトセンサーとは、オンラインで測定容易な複数の変数 X と測定困難な変数 y との間で数値モデル f を構築し、目的とした変数の値を推定する手法である（図1）。 X のプロセス変数のことを説明変数あるいは入力変数、 y のプロセス変数のことを目的変数あるいは出力変数と呼ぶ。リアルタイムに測定される X の値をソフトセンサーモデル f に入力することで、リアルタイムに y の値を推定することが可能となる。製品品質の安定化およびプラント運転の効率化などを目的として、ソフトセンサーを実プロセスへ適用する意識は一般的なものとなっている。

対象を直接測定するハードセンサー（温度計・圧力計・流量計など）に対して、ソフトセンサーではハードセンサーなどからの測定値をコンピュータに入力することで間接的に y



Current Status and Challenge on Soft Sensor
Kimito FUNATSU (正会員)
1983年 九州大学大学院理学研究科化学専攻博士課程
現在 東京大学工学系研究科化学システム工学専攻 教授
連絡先：〒113-8656 東京都文京区本郷7-3-1
E-mail funatsu@chemsys.t.u-tokyo.ac.jp

2016年8月22日受理

† Naito, K. 平成27, 28年度化工誌編集委員(12号特集主査)
三井化学(株)生産技術研究所 プロセス基盤技術グループ

Hashizume, S. 同上 名古屋大学大学院工学研究科化学・生物学専攻

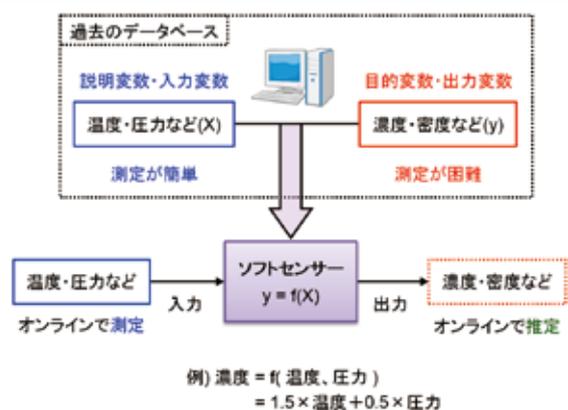


図1 ソフトセンサーの概念図

の値を推定する(図1)。このようにソフトセンサーとは、コンピュータシステム上で何らかの処理をおこなうプログラムや手続きを意味するソフトウェア的なセンサーである。これがソフトセンサーと呼ばれる所以である。ただ、ソフトセンサーの他にも、産業界によっては仮想計測技術、ソフトセンシング技術、ヴァーチャルメトロロジー(virtual metrology)、Process Analytical Technology (PAT) といった呼び方もされる。

2. ソフトセンサーの適用先

化学・産業プロセスではソフトセンサーの利用が一般的になりつつあるのは、管理すべき製品品質の中にはリアルタイムな測定や頻繁な測定が難しいものが多いためである。製品品質として、製品における様々な成分の濃度、90%留出温度、ポリマーの密度・melt flow rate (MFR) などの値をソフトセンサーによりリアルタイムに予測することで、その予測値を使用して迅速かつ効率的なプロセス管理と大きなコスト削減が達成される。

一つの例として、ポリマー重合プラントにおけるソフトセンサーの活用例を示す。ポリマー重合プロセスでは、一つのプラントで多種多様な銘柄のポリマーを製造することが多い。銘柄ごとに密度・MFRの上限管理限界と下限管理限界を設定し、その規格内のポリマーのみが製品となる。一つのプラントで多くの銘柄のポリマーを製造することから、製造コストの削減を目的として銘柄の切り替え(トランジション)の際に切り替え後の銘柄における規格外のポリマーの判定が重要となっている。図2にトランジションの概念図を示す。銘柄Aから銘柄Bのポリマーに切り替える際の密度の時間プロットを示す。初めは銘柄Aが生産され、次に銘柄切り替え、つまりトランジションが起こり、その後に銘柄Bが生産されている。このトランジション中のポリマーは両銘柄にとっても規格外のポリマーとなるため製品にはならない。なるべく早く銘柄Bの規格(図2にお

ける密度の上限・下限)を満たすポリマーに切り替えることはもちろんのこと、そのようなポリマーが実際に生産されていることを早く確認する、つまりトランジション終了を早く判定することが重要となる。密度・MFRといったポリマー物性を連続的にオンラインで測定することは一般的に困難であり、実際には図2のように数時間ごとに飛び飛びの分析値しか得られない。さらに、各分析値を得るにも数時間の時間遅れが生じてしまう。このように分析値を用いたトランジション監視の場合は、②の時間の密度分析値が得られて初めて生産されているポリマーが銘柄Bの規格内であることが分かる。この場合、②のデータも数時間後にしか得られないため、多くのポリマーは実際には規格内にもかかわらず規格外とされ無駄になる。

一方、精度の高いソフトセンサーを使用した場合を見てみよう。図2の黒線がソフトセンサー予測値であり、連続的に密度の値を予測できていることが分かる。さらに各予測値はリアルタイムに計算されるため、①の時間にトランジションが終了したと判定できる。無駄となるポリマー量を大きく削減できるのである。このようにソフトセンサーを活用することで効率的なプロセス管理が可能となる。

表1は、上述した日本學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.29「ソフトセンサー」において実施されたアンケート調査の中で、実際に使用してい

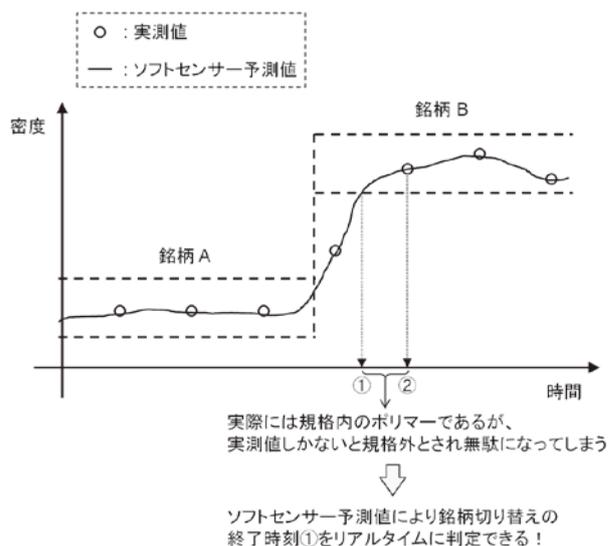


図2 ポリマーの銘柄切り替え

表1 実際に使用しているソフトセンサーの個数に関するアンケート調査結果(21の回答の合計)

ソフトセンサー導入対象	個数	割合(%)
蒸留	201	63.0
反応	43	13.5
蒸留+反応	58	18.2
蒸発	1	0.3
その他	16	5.0

るソフトセンサーの内訳を集計した結果を掲載した¹⁾。蒸留が60%以上、蒸留・反応を合わせると80%以上になり、蒸留の割合が最も大きい。この理由として、蒸留は反応を伴わないため、予測したい変数とその他のプロセス変数との関係が単純に表わされる場合が多いことが挙げられる。蒸留塔や精油所を対象としたソフトセンサーに関する研究は古くからおこなわれており、多くの成果を挙げている。一方で反応を伴う複雑な系へのソフトセンサーの適用を望む声も多く、盛んに研究がおこなわれている。

医薬品プロセスにおけるプロセス管理にも強い関心が寄せられている。製造工程終了後の品質チェックにおいて規格外とされてしまった錠剤はすべて廃棄されることになり、多大な損失につながるからである。そこでReal Time Release Testing (RTRT) というシステムが注目されている。RTRTとは、粉碎・混合・造粒・乾燥・整粒・打錠・コーティングなどの工程ごとに医薬品中の有効成分(Active Pharmaceutical Ingredient, API)の含有量・APIの混合均一性・水分量・粒子コーティング含量・コーティング性能等の品質を監視し、その結果に応じて各工程で適切な操作をおこなう方法である。つまり、安定した品質の錠剤をプロセスで作り込むのである。リアルタイムに品質を監視する技術として、非破壊で迅速な分析技術であるNear Infrared Spectroscopy (NIR)が着目されている。例えば、NIRスペクトルとAPI含有量の間でソフトセンサーモデルを構築し、それを実際のプロセスで使用することで、NIRスペクトルから非破壊かつリアルタイムにAPI含有量を推定することができる。高精度ソフトセンサーを使用することで、オンラインで非破壊による錠剤の品質検査が達成され、信頼性の高いRTRTが実現する図3にRTRTの例を示す。ソフトセンサーにより各工程における重要品質を監視することでリアルタイムに適切な制御をおこなうことが可能となる。この分野では最終製品の品質を厳格に保証することが目的であり、品質の設計、つまり管理限界の設定および各工程での品質の作り込みのことをQuality by Design(QbD)、各工程において原材料・

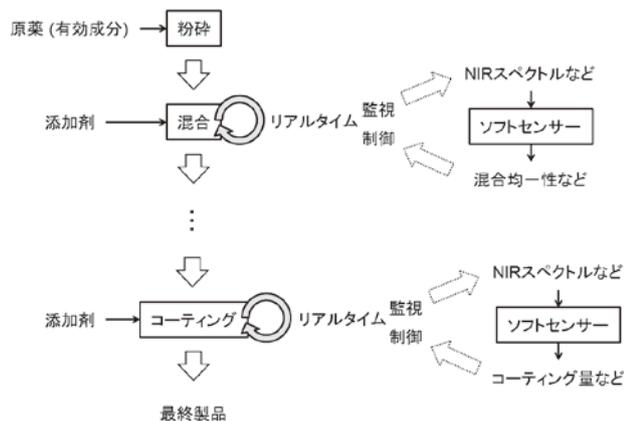


図3 RTRTの例

中間製品・中間体の重要品質および性能特性を適時に計測・監視して適切に管理をおこなうことをProcess Analytical Technology (PAT)と呼び、国内外で急速に利用が進んでいる。

このほか、製鉄プロセスにおけるend point、粉体の平均粒子径、半導体デバイスの製造工程などにも用いられており、今後もソフトセンサーが対象とする分野の範囲はさらに広がると予想される。

3. ソフトセンサーの役割

前述したようにソフトセンサーは様々な産業の分野で活躍している。そのソフトセンサーの役割は大きく分けて以下の3つに分類される。

- ①分析計の代替
- ②分析計の異常検出
- ③効率的なプロセス制御

①分析計の代替

最も基本的な役割として、ソフトセンサーの予測値を分析計の実測値の代わりに用いること、つまりソフトセンサーを分析計の代替として使用することが挙げられる。分析計は測定に時間遅れを伴い、また次の測定まである程度の時間間隔が必要となる。一方ソフトセンサーを使用することで、オンラインで連続的に対象の値を推定できる。このようにソフトセンサー予測値を実測値の代替としてプロセス管理へ応用することにより、迅速な制御を連続でおこなうことが可能となる²⁾。さらに、ソフトセンサーの信頼性が向上して分析計で測定する頻度を低減できれば大きなコスト削減につながる³⁾。

②分析計の異常検出

ソフトセンサーの予測値とその後測定された分析計の実測値を比較することで、分析計の異常検出をおこなうことが可能となる(図4)^{4,6)}。分析計による実測値と高精度なソフトセンサーによる予測値とが大きく離れている場合、分析計からのデータは異常、つまり分析計が故障したと考えられる。ソフトセンサーの予測誤差にあらかじめ閾値を設定しておくことで、予測誤差がその閾値を超えた際に分析計故障と診断できる。分析計故障を迅速に検出できるだけでなく、その指示値を制御に用いるミスを回避できる。

③効率的なプロセス制御

効率的なプロセス制御をおこなうため、ソフトセンサーに将来の操作変数の値を入力して出力の将来予測をおこなうことで、ソフトセンサーのモデル予測制御への応用も可能となる。つまりモデル予測制御において、ソフトセンサーを用いて将来の出力の値を予測し、その予測値が目標値に近づくように操作を決定する。ただ、操作変数と出力変数

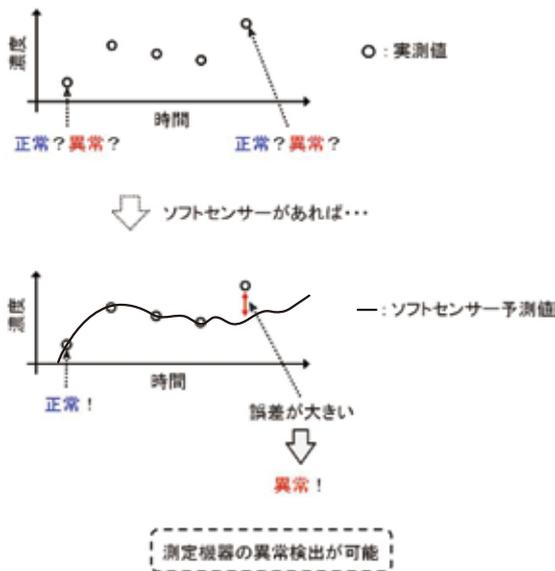


図4 ソフトセンサーを用いた分析計の異常検出

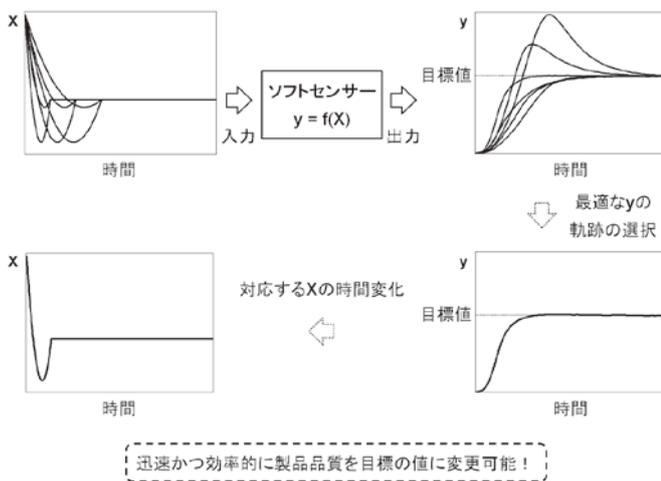


図5 ソフトセンサーを活用したプロセス制御

の因果関係やソフトセンサーモデルの適用範囲などを考慮しなければならず、注意が必要である。

また、ソフトセンサーを用いてyの目標範囲を実現するXの値を効率的に探索することも可能である⁷⁾。製品の銘柄切り替え時など、yの設定値変更をおこなう際にXの値をどのように動かせば迅速かつ効率的にyの目標値に到達できるかを把握できることは重要である。Xとyの間に良好なソフトセンサーモデルがすでに構築されている場合を考えよう。Xの時間変化の候補を多数用意し、それらをソフトセンサーモデルに入力することで、yの予測値の時間変化が得られる(図5)。その中から望ましいyの時間変化を選択することで、それに対応するXの時間変化が選択される。この時間変化のようにXを操作することで、迅速かつ効率的に製品品質を目的の値に近づけることが可能になる。

実際に、ソフトセンサーによって連続的に製品品質を推定し、品質を安定させることをソフトセンサー導入目的と

したケースが最も多く、これにより製品の規格付近で連続的に制御することが可能となり、用役・原料使用量の削減が達成される。

一方で、化学分析の頻度削減や分析計導入削減への対応事例がまだ少ない。ソフトセンサーモデルの予測精度や信頼性がさらに向上することで、それらも今後次第に達成できると考えられ、実際にそのような分析計削減の検討をしている企業も存在する。

4. ソフトセンサーの運用までの流れ

これまでソフトセンサーの有用性を中心に述べてきたが、実装にあたってはその運用までの手続きが課題となる。図6にソフトセンサー運用までの流れを示す。

まず、ソフトセンサーの目的に応じて使用するデータを収集する。予測能力の高いソフトセンサーモデル構築のためには適切な運転データが必要となる。例えば、yの幅広い範囲を予測したい場合は、その範囲に分布しているデータを収集しなければならない。ただし、yの範囲を満たしていてもXの範囲を満たしているとは限らない。ソフトセンサーを構築する目的によって追求する精度や予測したいデータ範囲は異なるため、その目的に合う多様性のあるデータがデータベースに格納されるような自動メンテナンス法が開発されている⁸⁾。

データを取得した後に、そのデータに対して適切な前処理をおこなう必要がある。実際のデータにはノイズが含まれており、データに含まれるノイズの割合が大きい場合に

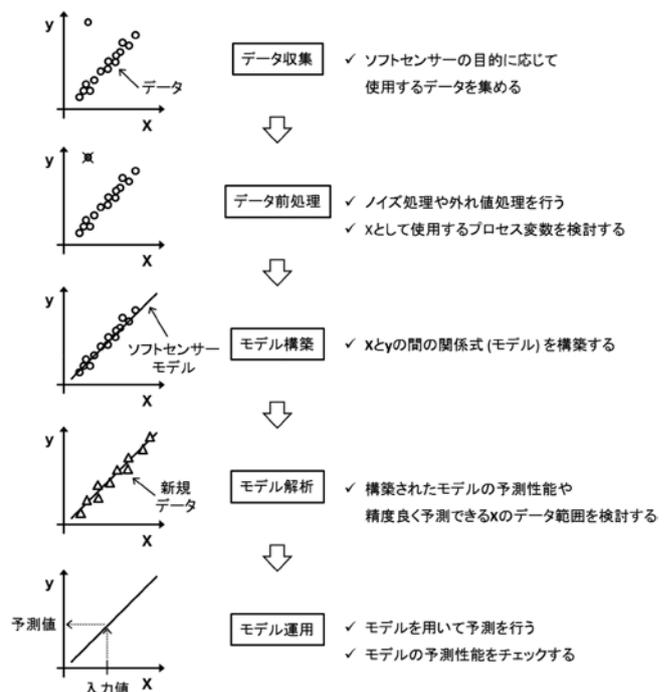


図6 ソフトセンサー運用までの流れ

は、精度の良いモデル構築が困難となる。これは、モデル構築用データのノイズにも適合するようなモデルが作成されるオーバーフィッティングの問題として知られており、過適合（オーバーフィット）したモデルを用いて予測された新しいデータの予測誤差は非常に大きくなってしまふ。このような場合の有効なノイズ処理の手法として、移動平均⁹⁾およびSavitzky-Goley法^{10,11)}などのスムージング法やPrincipal Component Analysis (PCA)法を用いることが多い。また、次のステップであるモデル構築時に、Partial Least Squares (PLS)法やSupport Vector Regression (SVR)法などのノイズに対して頑健な回帰分析手法を使用してノイズに対応することもできる。

データの中に外れ値が混入していると、適切なモデル構築は困難になってしまう。そのため正確に外れ値を除去するか、除去した後に他のデータに基づいて補間する必要がある。また、プロセスの背景知識を踏まえたXとyの変換およびXとして使用する変数の選択も重要といえる。例えばMcAuley and MacGregorはポリマー重合プラントにおいて製品のMFRを予測する際に、対数変換（エネルギー次元への変換）後のMFRの値をyとした¹²⁾。このように物理的・化学的な知識やプロセス知識を適切にモデルに取り入れることで、オーバーフィッティングの防止やモデルの精度向上が達成される。

続いて、処理されたデータを用いてソフトセンサーモデルを構築する。統計手法を用いる際に、データの特徴から適切な回帰分析手法を選択できれば問題ないが、実際は事前に回帰分析手法を選択することは困難である。複数の手法を用いてモデルを構築し、各モデルの予測性能等を踏まえて使用するモデルを選ぶことになる。この際に変数選択ならびに動特性を考慮することになる¹³⁾。動特性については、各変数にさらに時間を遡った値を用いることで考慮できる。各変数についてどの時間の影響が大きいかは変数選択と併せて時間選択をおこなうことで可能となる。

モデルを運用する前にそのモデルが実装可能かどうかを検証することになる。モデルの検証法として、モデル構築用データとは別のモデル検証用データを準備し、モデルが

どの程度の子測能力を持っているか、Xの各変数のどの範囲であれば安定した予測が可能であるか、などを確認することが挙げられる。このような検討を可能とするためのオフラインシミュレータの開発がソフトセンサーの実装と普及に欠かせない。こうして得られたモデルを実装して対象の子測をおこなうことになる。

5. ソフトセンサーの課題と今後

これまで述べたようにソフトセンサーは大変に有用な手法であるが、その実装にあたっては、多くの課題も存在する。その大きな課題の一つは、ソフトセンサーの効果的な活用にあたって必ず直面する、データ収集、異常値除去・変数選択などのデータの前処理、そのデータを用いたソフトセンサーモデルの構築、解析、そして運用までの各ステップで生じる諸問題と課題に対する確実で体系的な対処法、つまり標準仕様が必ずしも確立されていないということである。同様のことは海外の研究および運用事例でも垣間見えた。今後生産プロセスにソフトセンサーを定着させるには体系的な標準化、ソフトセンサー構築のためのデータの多様性などの質の確保、ソフトセンサーの自動更新あるいはメンテナンス・フリーの運用などがカギとなる。すでにこうした実装への取り組みは着実に成果を挙げつつあり¹⁴⁾、¹⁵⁾、ソフトセンサーが生産性向上のための必須技術となる時代はもうそこまで来ているといえる。

参考文献

- 1) 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.29「ソフトセンサー」2010年6月アンケート調査結果
- 2) Kano, M., N. Showchaiya, S. Hasebe and I. Hashimoto: *Control Eng. Practice*, **11**, 927-933 (2003)
- 3) 加藤正朗, 金子弘昌, 船津公人: 目的変数間の関係を活用したモデル劣化低減手法の開発, 化学工学会第44回秋季大会 (2012)
- 4) Kaneko, H., M. Arakawa and K. Funatsu: *AIChE J.*, **55**, 87-98 (2009)
- 5) 金子弘昌, 荒川正幹, 船津公人: 化学工学論文集, **35**, 382-389 (2009)
- 6) Kaneko, H., M. Arakawa and K. Funatsu: *AIChE J.*, **57**, 1506-1513 (2011)
- 7) 木村一平, 金子弘昌, 船津公人: 化学工学論文集, **41** (1), 29-37 (2015)
- 8) Kaneko, H. and K. Funatsu: *AIChE J.*, **60**, 160-169 (2014)
- 9) 岩本睦夫, 河野澄夫, 魚住純: 近赤外分光法入門, 幸書房 (2007)
- 10) Savitzky, A. and M.J.E. Golay: *Anal. Chem.*, **36** (8), 1627-1639 (1964)
- 11) 吉村季織, 高柳正夫: *J. Comput. Chem., Jpn.*, **11** (3), 149-158 (2012)
- 12) McAuley, K. B. and J. F. MacGregor: *AIChE J.*, **37**, 825-835 (1991)
- 13) Kaneko, H. and K. Funatsu: *AIChE J.*, **58** (6), 1829-1840 (2012)
- 14) Kaneko, H. and K. Funatsu: *Chemom. Intell. Lab. Syst.*, **137**, 57-66 (2014)
- 15) 船津公人, 金子弘昌: ソフトセンサー入門, 基礎から実用的研究例まで, コロナ社 (2015)