

仮想計測技術の変遷と課題

加納 学

1. はじめに

まだ仮想計測がどうのこうのと言っているのですか。ソフトセンサーなんて、データを集めてモデルを構築するだけですよね。今はAutoML (Automated Machine Learning) が使える時代ですよ。データがあれば、ソフトセンサーなんてちゃちゃっと作れるでしょう。あるいは、ソフトセンサーくらい人工知能(AI)に作らせれば良いでしょう。

そのような技術が確立され、ソフトセンサー構築の労苦から技術者が解放されることを願っているが、まだその段階には至っていない。少なくとも、本誌の読者が製造現場でソフトセンサーを活用したいと考えたとして、ちゃちゃっと作れるわけではない。いや、もちろん、ちゃちゃっと作れる場合もあるが、それが難しいことも多い。実際、ソフトセンサーを縦横無尽に活用している生産現場は思いのほか少ないとの印象を持っている。では、一体何がソフトセンサーの活用を妨げているのか。もちろん、人材の不足、資金の不足、保守的すぎる文化といった問題もあるだろうが、本稿では仮想計測技術を荒っぽく振り返りながら、いくつかの課題とその解決に向けた取り組みを紹介する。

2. 仮想計測

仮想計測とは、何か興味のある量や値を、何かしらのモデルを用いてリアルタイムに予測することとしておく。製造現場であれば、重要であるにもかかわらずリアルタイムに計測することができない変数(例えば製品特性)を、リアルタイムに計測できる変数(例えば温度や流量)から計算するこ

とは仮想計測である。この時、製品特性を目的変数(出力変数)、温度や流量を説明変数(入力変数)とするモデルを用いるのが一般的であり、このモデルをソフトセンサーと呼ぶことにする。

仮想計測のイメージを図1に示す。この生産設備では製品特性を抜き取り検査で確認しているが、検査に時間がかかるため、検査結果に基づいて製品特性をフィードバック制御するのでは間に合わない。そこで、仮想計測を採用している。仮想計測をおこなうためのコンピュータに、生産設備から温度や流量などのプロセス変数の測定データが送られる。コンピュータは、ソフトセンサーを用いて、プロセス変数から製品特性を予測する。この予測値に基づいて製品特性を監視することができるが、更に、予測値に基づいて製品特性を制御することもできる。このような制御は推定制御と呼ばれる。

仮想計測を監視目的に用いる場合、予測値を用いて製品特性を監視するだけでなく、ソフトセンサーの信頼性を評価し、必要に応じてモデルを再構築するといった判断もおこなわなければならない。もし予測値が実際の値と大きく異なるようであれば、不良品の発生を見逃してしまうかもしれない。あるいは逆に、過剰品質のために運転コストが過大になってしまうかもしれない。製品特性の推定制御をおこなう場合には、予測値の信頼性はとりわけ重要になる。この信頼性が疑わしいために、ソフトセンサーを構築しても推定制御の実施にまで辿り着けない生産現場は少なくない。このため、ソフトセンサーの信頼性評価は、仮想計測を実用化する上での重大な課題の一つである。

仮想計測はデジタルツインによって実現できる機能の一つである。デジタルツインとは、物理空間(現実世界)に実在しているもの(生産設備)を仮想空間(バーチャル世界)に再現したものであり、仮想計測だけでなく、異常検出や運転条件最適化など様々な機能が実現できる。実際、ソフトセンサーはデジタルツインの一種であり、生産設備の運転状態と製品特性との関係を表現できることから、仮想空間における製品特性の監視に利用できるだけでなく、望ましい製品品質を実現できる最適な運転状態の導出にも利用できる。2016年に本誌で「仮想計測技術の最前線」という特集



Evolution and Challenges of Virtual Sensing Technology
Manabu KANO(正会員)
1999年 博士(工学)
現 在 京都大学情報学研究科システム科学専攻 教授
連絡先: 〒606-8501 京都市左京区吉田本町
E-mail manabu@human.sys.i.kyoto-u.ac.jp

2023年1月4日受理

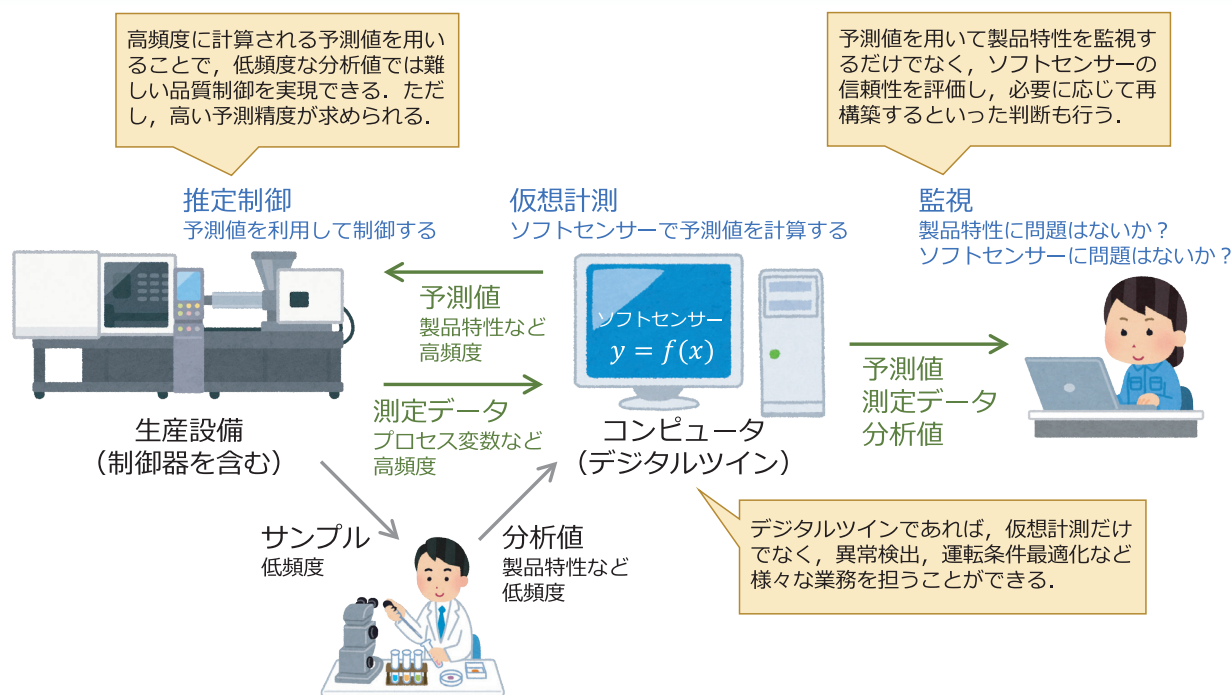


図1 仮想計測を用いた生産のイメージ

が組まれた。その中の記事「仮想計測技術の現状と課題」¹⁾において船津は、ソフトセンサーの役割を、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、に分類している。この③が推定制御や最適化に対応している。ソフトセンサーの用途は品質予測に限定されず、デジタルツインとして様々な活用できることを知っておいていただきたい。

3. 仮想計測技術の変遷と今注目の手法

2010年頃までの仮想計測技術については、レビュー論文^{2,3)}に詳述されている。

プロセス産業におけるソフトセンサーの草分け的存在がBrosilow推定器⁴⁾である。この推定器は、線形化したプロセスモデルを用いて、蒸留塔の温度と流量から製品組成を推定するものであった。1970から1980年代にかけて、蒸留塔の製品組成を制御する代わりに塔内温度を制御する方法が盛んに研究された。それと同時に、主に重回帰分析を用いて高精度なソフトセンサーを設計するために、変数選択についても精力的に研究がおこなわれた。

1990年代になると、PLS (partial least squares) をソフトセンサー構築に用いる研究が盛んになった⁵⁾。PLSの特長は多重共線性に対処できることである。つまり、相関の強い変数が存在しても、変数選択に頼らずに、ロバストなモデルを構築できる。これは重回帰分析に対する大きな利点であり、PLSは様々な分野で活用されている。当初は定常状態モデルが主であったが、現在に加えて過去の測定値もモデ

ルに入力するDynamic PLSが提案され、その有効性が示された⁶⁾。1990年代には、第二次人工知能ブームの影響で、PLSの活用と並行して、ニューラルネットワークをソフトセンサーとして使う研究が盛んになり、論文数で他を圧倒するようになった。当時、日本国内でもニューラルネットワークを導入する企業が多かった。しかし、2009年に実施されたアンケート調査で明らかになったように、ニューラルネットワークに基づくソフトセンサーは生産現場に根付かず、その多くが姿を消した^{7,8)}。その理由としては、良い製品を生産するためには限定された条件下で運転しなければならず、その範囲内であれば線形近似モデルで十分であることや、複雑な非線形モデルのメンテナンス(モデル再構築)が煩わしいことが挙げられる。

2000年代になると、機械学習、特にサポートベクトルマシンなどのカーネルに基づく方法がソフトセンサー構築にも用いられるようになった。カーネル法は、データを高次元空間に移すことで、変数間の複雑な非線形関係を線形なモデルで捉えられるようにする巧妙な手法である。更に2010年代には、ガウス過程回帰、勾配ブースティング、そして深層学習が盛んにソフトセンサー構築に用いられるようになった。以下、それぞれの手法を簡単に説明しておく。

ガウス過程回帰では、出力変数の予測値が正規分布(ガウス分布)に従うことを想定しているため、期待値と標準偏差が同時に算出される。予測に際して、測定値が近くにあるば標準偏差は小さくなり、測定値が近くなければ標準偏差は大きくなる。このため、標準偏差を用いて予測値の

信頼性を評価することができる。また、ガウス過程回帰に基づくベイズ最適化が、予測値の信頼性を巧妙に活用することで、少ない試行回数でそこそこの最適解を得る方法として脚光を浴びている。勉強されたい方には書籍⁹⁾をお勧めしたい。

勾配ブースティングは、複数のモデルを組み合わせることで性能向上を実現するアンサンブル学習の一種であるが、逐次的にモデルを構築し、各モデルはその前のモデルの予測誤差を予測する点に特徴がある。この勾配ブースティングと決定木を組み合わせた方法のうち、恐らく現時点で一番人気なのがLightGBM (Light Gradient Boosting Machine)¹⁰⁾である。連続値をそのまま使わずにヒストグラムを用いたり、複数の変数をひとまとめにして扱うなどの工夫により、計算負荷を大幅に低減しつつ、精度の高い予測を可能にしている。

深層学習は第三次人工知能ブームの立役者である。当初は画像解析への応用が主だったが、今では時系列データを扱える手法が数多く提案されている。とにかく深層学習を使いたいというユーザもいるが、複数のベンチマーク問題に対して、単純な機械学習の手法によって、様々な深層学習の手法と同程度かそれ以上の予測性能を達成できることを示した研究¹¹⁾があり、安易に深層学習を使うべきではないとの指摘もなされている。

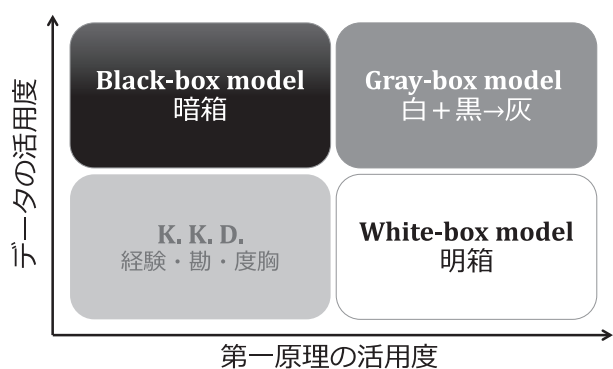


図2 第一原理とデータの活用度の違いによるモデルの分類

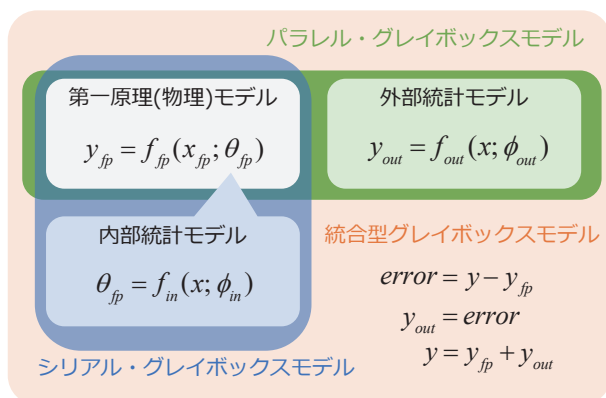


図3 グレイボックスモデルの種類

ここまでに触れた方法は主に統計モデル（データ）を用いる方法であるが、Brosilow 推定器のように物理モデル（第一原理）を用いる方法もある。更に、より高い性能の実現を目指して、物理モデルと統計モデルを併用するグレイボックスモデルを用いる方法もある。これらのモデルの分類を図2に示す。更に、図3に示すように、物理モデルと統計モデルの組み合わせ方に応じて、大別して3種類のグレイボックスモデルがある。物理モデルの予測誤差を予測する外部統計モデルを用いるのがパラレル・グレイボックスモデル、物理モデルに含まれるパラメータの最適値を出力する内部統計モデルを用いるのがシリアル・グレイボックスモデル、どちらも用いるのが統合型グレイボックスモデルである。グレイボックスモデルによるソフトセンサー構築についても数多くの研究があり、それらはレビュー論文¹²⁾にまとめられている。

4. 仮想計測の課題と解決に向けた取り組み

レビュー論文²⁾で指摘された課題は、1) プロセス特性や運転条件の変化、2) 装置の個体差、3) ソフトセンサーの信頼性、であった。また本誌記事¹⁾では、「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」と指摘されている。

プロセス特性や運転条件の変化への対応については、移動窓を使う方法、逐次的にモデル更新する方法、アンサンブルに基づく方法などがある¹³⁾。また、石油化学プラントにおいて、Just-In-Time型の局所PLSを用いることで、ソフトセンサーのメンテナンスフリー化を長期的に実現した事例が報告されている¹⁴⁾。なお、当時構築された複数のソフトセンサーが現在も稼働し続けている。その他の課題についても様々な解決策が提案されているが、それぞれに特徴があり、あらゆる場面で活用できる万能な方法が存在するわけではない。もちろん、局所PLSも万能ではなく、ソフトセンサーの実用化に際しては、対象に応じて適切な手法を選択する必要がある。手法の選択が試行錯誤的になってしまうことが仮想計測の課題の一つである。

その他の課題としては、モデル構築に利用できるデータが少ない時の対応がある。新設プラントに仮想計測技術を導入する場合が当てはまるが、それだけではない。既設プラントであっても、設備や製品や原料の変更によって、それまで使用していたソフトセンサーを継続して使えなくな

ることがある。そのような場合には、ソフトセンサーを再構築しなければならないが、新しい条件下でモデル再構築に十分なデータを収集するには相当な時間を要する。

このような課題への対応方法の一つに転移学習がある。転移学習は、ある分野（ソースドメイン）での知見を活かせば、それに近い分野（ターゲットドメイン）での学習を効率的におこなえるという発想に基づいている。転移学習を活用することで、設備や製品や原料の変更後のモデル再構築に要する期間を短縮することができる。小林らはケミカルトナーの品質予測に転移学習を用いることで、モデル再構築に要する期間を40日から10日にまで短縮した¹⁵⁾。設備の変更前後でセンサーの種類や数が変わるため、FEHDA (frustratingly easy heterogeneous domain adaption) という手法を新たに開発し、異質な転移学習を実現している。なお、ソフトセンサーの構築にはガウス過程回帰とバギングを用いている。バギングはアンサンブル学習の一種で、ブースティングとは異なり、少しずつ異なる複数のデータセットを用いて複数のモデルを構築し、それらを組み合わせることで予測性能を向上させる。ただし、このケミカルトナー品質予測の事例では、全てのモデルを採用するのではなく、ガウス過程回帰が出力する標準偏差を用いて、信頼性の高いモデルのみを採用することで、更なる精度向上を実現している。

同様の問題はスケールアップに際しても生じる。一般には、ラボ、パイロット、コマーシャルの順に装置サイズを巨大化しつつ、製造条件を確立させていく。各段階で用いる装置が異なるため、センサーの種類、数、位置も異なる。このため、商業生産時の製品品質予測に仮想計測技術を用いる場合、商用スケール設備の運転データを収集して、モデルを構築するのが普通である。しかし、大型の商用スケール設備での実験には時間も費用もかかるため、十分なデータを収集するのは容易でない。Yaginumaらは、流動層造粒プロセスでの水分含量予測を対象として、ラボとパイロットの実験データから商用スケールで利用可能なモデルが構築できることを示した¹⁶⁾。ラボとパイロットのデータを用いてPLSモデルを構築し、スケールに依存しない変数の重要度が高くなることを見出し、スケール非依存変数を入力変数とすることで、商用スケールで利用可能なソフトセンサーが構築できることを確認している。

このように、先進的な取り組みで成果が出ているものの、やはり万能な方法があるわけではない。モデル構築に利用可能なデータが限られているという致命的な課題への解決策を見出すための努力は引き続き必要である。

5. おわりに

本稿では、仮想計測の概要を紹介した後、その変遷と課題について述べた。石油・化学産業では、蒸留塔への適用件数が圧倒的に多く、モデル構築にはPLSをはじめとする線形回帰手法が多用されている。より複雑なプロセス、より困難な状況に対応するためには、更なる工夫が必要になる。近年、ガウス過程回帰やLightGBMの普及が目覚ましいが、それだけでは解決できない課題も多い。例えば、プロセス特性や運転条件の変化への対応である。逐次モデル更新だけでなく、Just-In-Time型の局所PLSが優れた成果をあげている。更に、データ量が少なくても高精度なソフトセンサーを構築するための方法として、転移学習とスケールフリーモデルの活用事例を紹介した。様々な課題を解決するために、これから新しい方法が開発されるだろう。ただし、製造DXの鍵となるデータ活用は、機械学習等による統計モデルの構築だけを意味するのではない。生産現場の課題解決には、製品や生産設備に関する専門知識が必要であり、データと知識を統合的に活用していくことが重要である。グレイボックスモデルはその一例であり、デジタルツインを実現するために重要な選択肢となる。仮想計測技術の更なる発展、特に産業界で成功事例が増えることを期待したい。

参考文献

- 1) 船津公人：化学工学, **80**(12), 764-768(2016)
- 2) Kano, M. and K. Fujiwara : *J. Chem. Eng. Japan*, **46**(1), 1-17(2013)
- 3) Kadlec, P. et al. : *Comput. Chem. Eng.*, **33**(4), 795-814(2009)
- 4) Weber, R. and C. Brosilow : *AIChE J.*, **18**, 614-623(1972)
- 5) Mejdell, T. and S. Skogestad : *Ind. Eng. Chem. Res.*, **30**(12), 2543-2555(1991)
- 6) Kano, M. et al. : *J. Proc. Cont.*, **10**(2-3), 57-166(2000)
- 7) Kano, M. and M. Ogawa : *J. Process Cont.*, **20**(9), 969-982(2010)
- 8) 加納学：計測と制御, **51**(9), 845-852(2012)
- 9) 持橋大地, 大羽成征：ガウス過程と機械学習, 講談社(2019)
- 10) LightGBM's documentation : <https://lightgbm.readthedocs.io/>
- 11) Elsayed, S. et al. : *arXiv:2101.02118* (2021)
- 12) Ahmad, I. et al. : *Processes*, **8**(2), 243(2020)
- 13) Kadlec, P. et al. : *Comput. Chem. Eng.*, **35**(1), 1-24(2011)
- 14) Kim, S. et al. : *Ind. Eng. Chem. Res.*, **52**(35), 12346-12356(2013)
- 15) 小林翔太ら：人工知能学会第35回全国大会, 4F1-GS-101-03(2021)
- 16) Yaginuma, K. et al. : *Chem. Pharm. Bull.*, **68**(9), 855-863(2020)