プロセスの動特性を考慮した非線型ソフトセンサー手法の開発

金子 弘 昌*・船 津 公 人*

Development of Nonlinear Soft Sensor Methods Considering Process Dynamics

Hiromasa KANEKO* and Kimito FUNATSU*

Soft sensors have been widely used for process control in industrial plants to estimate difficult-to-measure process variables online. A genetic algorithm-based process variables and dynamics selection (GAVDS) method is one method used to select important process variables and optimal time-delays of each variable simultaneously. However, the GAVDS method cannot handle a nonlinear relationship between $\mathbf{X}$ and an objective variable $\mathbf{y}$ because linear regression is used as a modeling technique. We therefore proposed a region selection method based on GAVDS and support vector regression (SVR), which is a nonlinear regression method. The proposed method is named GAVDS-SVR. We applied GAVDS-SVR to simulation data having high correlation between close pairs of $\mathbf{X}$ -variables and a nonlinear relationship between $\mathbf{X}$ and $\mathbf{y}$. The GAVDS-SVR method could select regions of $\mathbf{X}$ -variables appropriately by considering the nonlinearity and could construct predictive models with high accuracy. Through soft-sensor analysis of industrial polymer process data, we confirmed that predictive, easy-to-interpret, and appropriate models were constructed using the proposed method.

Key Words: soft sensor, process control, variable selection, time delay, support vector regression

1. 緒 言

化学プラントの安全で安定した運転のためには、プラント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制御する必要がある。そのため制御したい変数をオンラインで測定する必要があるが、必ずしも簡単に測定できるとは限らない。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、分析機器の設備費などが高いことが挙げられる。この問題を解決するため、化学プラントにおいてはソフトセンサー^{1),2)}が広く用いられている。ソフトセンサーとは、オンラインで測定可能な変数と測定困難な変数の間で数値モデルを構築し、目的とした変数の値を推定する手法である。Fig. 1がソフトセンサーの概念図である。ソフトセンサーを用いることで、オンラインで精度良く目的変数 $\mathbf{y}$ の値を推定できる。

ソフトセンサー推定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行なうことが可能となる。さらに、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行なうことで、ソフトセンサーをモデル予測制御へ応用可能である。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。製品品質の安定化や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ラントへ適用することが一般的となっている。

実際のプラントにおいて観測可能な変数（プロセス変数）は時間遅れを伴って $\mathbf{y}$ に影響を与える場合がある。 m をモデル構築用データ数、 n をプロセス変数中のソフトセンサーへ入力される変数（入力変数）の数、 t_i を i 番目の入力変数における最大の時間遅れとすると、 $\mathbf{y} \in R^{m \times 1}$ の線型回帰モデルは以下のように表現できる。

$$\mathbf{y} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=0}^{t_i} b(i, j) \mathbf{x}_i(j) + \mathbf{e} \quad (1)$$

ここで、 $\mathbf{x}_i(j) \in R^{m \times 1}$ は $\mathbf{y}$ に対してある時間 j だけ過去の i 番目の入力変数、 $b(i, j)$ は $\mathbf{x}_i(j)$ の回帰係数、 $\mathbf{e} \in R^{m \times 1}$ はモデル誤差である。実際は、説明変数 $\mathbf{X} \in R^{m \times n(t_i+1)}$ を Fig. 2 のような行列の形にして $\mathbf{y}$ との間で回帰を行なう。

一方、ソフトセンサーで扱うプロセスデータにおいては、 $\mathbf{X}$ の変数間に強い共線性があり、 $\mathbf{y}$ に最も影響度の大きい少数の変数の組を選択することが望まれている。金子らは時間遅れ変数はある幅をもって $\mathbf{y}$ と関係がある、つまり (1) 式において $\mathbf{x}_i(j)$ が $\mathbf{y}$ にとって重要な変数である場合に $\mathbf{x}_i(j-1)$ や $\mathbf{x}_i(j+1)$ など重要であると考え、プロセス変数とその連続的な時間遅れ変数を同時に選択することを目的として genetic algorithm-based wavelength selection (GAWLS) 法³⁾を改良した genetic algorithm-based process variables and dynamics selection (GAVDS) 法を提案した⁴⁾。GAVDS 法

* 東京大学大学院工学系研究科 東京都文京区本郷 7-3-1

* Department of Chemical System Engineering, The University of Tokyo, 7-3-1 Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo

(Received April 19, 2012)

(Revised July 27, 2012)

Fig. 1 Basic concept of a soft sensor

Fig. 2 A data representation considering process variables and dynamics. $t_1, t_2, \dots, t_n$ represent time and n is the number of process variables. The total number of $\mathbf{X}$ -variables is $(t_1 + 1) + (t_2 + 1) + \dots + (t_n + 1)$

とは、GA を用いてモデルの予測的説明分散 (q^2) の値を大きくする $\mathbf{X}$ の変数 (Fig. 2) の組を領域単位で選り出す変数選択法であり、変数領域とその組み合わせを同時に最適化できる。 q^2 については付録 A を参照されたい。実際の蒸留塔における運転データを用いたケーススタディにより、GAVDS 法を用いることで少ないプロセス変数における連続的な時間遅れ変数のみによりシンプルで理解しやすいソフトセンサーモデルを構築可能であることが確認された⁴⁾。

しかし、GAVDS 法におけるモデル構築手法として線型回帰分析手法の一つである partial least squares (PLS) 法が使用されており、 $\mathbf{X}$ と $\mathbf{y}$ の間の非線型関係を一つのモデルで表現することは困難である。このような変数間の非線型性はソフトセンサー解析においても報告されている^{5)~7)}。

そこで本研究では、変数間に非線型性が存在する場合においても適切な変数領域選択と予測精度の高いモデル構築を同時に達成することを目的として、GAVDS 法と非線型回帰分析手法の一つである support vector regression (SVR) 法⁸⁾を組み合わせた新規な変数領域選択手法を開発した。この提案手法を GAVDS-SVR 法と呼ぶ。GAVDS-SVR 法を用いることで、SVR 法による非線型性の抽出と GAVDS 法による領域単位の変数選択が同時に実現できると考えられる。な

お、GAWLS 法と GAVDS 法の関係と同様に、GAWLS 法を非線型に拡張した GAWLS-SVR 法⁹⁾と GAVDS-SVR 法⁹⁾の概念は同じである。

本手法の有効性を確認するため、変数間および時間遅れ変数間の相関の強い $\mathbf{X}$ と $\mathbf{y}$ の間に非線型関係が存在する場合を想定したシミュレーションデータを用いた解析を行ない、その後実際のプラントデータへ応用する。それぞれにおいて、PLS 法、GAVDS 法、SVR 法、GAVDS-SVR 法を用いて比較と検討を行なう。

なお本論文ではデータ形式として、Fig. 2 のようにプロセス変数ごとに時間遅れが大きくなるにつれて右に変数が並ぶ形式を使用する。システム同定の分野においては $\mathbf{y}$ の時間遅れも考慮した autoregressive exogenous (ARX) モデルが広く用いられている。しかしソフトセンサーでは実測値が得られるまでに多くの時間がかかり、また不定期にしか測定されない $\mathbf{y}$ を扱う場合が多いため、ARX モデルは適したモデルではない。Fig. 2 の形式でモデルが構築されれば、たとえば $\mathbf{y}$ の分析計故障時など過去の $\mathbf{y}$ の実測値が得られなくても $\mathbf{X}$ のみから $\mathbf{y}$ の値を推定可能である。ただし、Fig. 2 の $\mathbf{X}$ に $\mathbf{y}$ の時間遅れ変数を追加することで ARX モデルと同等の構造になる。

2. 手 法

2.1 GAVDS 法

Genetic algorithm (GA)¹⁰⁾とは、生物の遺伝のようすを模倣した最適化手法である。0と1で表現された染色体に対し、突然変異や交叉といった操作を行ない、新たな染色体を作り出す。そして各染色体について評価値を計算し、淘汰、選択を行なう。これによって、優れた個体の周辺の空間が優先的に探索され、結果として最適に近い解が効率良く発見可能である。

GAWLS法はGAを用いて最適なPLSモデルを与える $\mathbf{X}$ の変数の組を領域単位で選び出す変数選択法である。Fig. 3にGAWLS法におけるコーディング法を示す。GAWLS法では二つの実数値を用いて一つの変数領域を表現することで、モデル作成に重要な変数を領域単位で選択することができる。染色体の評価値は、染色体に表現された変数領域についてPLS解析を行なった後の q^2 値を用いる。これにより、予測精度の高いモデルを構築することのできる変数領域の組み合わせが得られる。

GAWLS法をプロセスデータに適用できるように改良した手法がGAVDS法である。GAVDS法においては複数のプロ

セス変数を超えて変数領域が選択されることはない。Fig. 2のようなデータ形式においては、変数間に互いに強い相関関係があるため、 $\mathbf{X}$ のある時間領域が $\mathbf{y}$ に影響を及ぼすことは妥当であると考えられる。したがって、モデルがデータに過適合するオーバーフィッティングを起こすことなく、 $\mathbf{y}$ にとって重要なプロセス変数とその時間遅れを同時に探索できる。

The first numbers of the selected variables.

The widths of the selected variables from the left variable numbers.

The $\mathbf{X}$ -variables whose numbers are 65 through 76, 657 through 681, and 890 through 903 are selected.

Fig. 3 Coding rule for GAWLS. This is the case that the number of regions is 3

Fig. 4 Basic concept of the GAVDS-SVR method. This is the case that the number of regions is 3

2.2 GAVDS-SVR 法

GAVDS-SVR 法とは, GAVDS 法における PLS を SVR とした手法である. SVR 法については付録 B を参照されたい. 染色体の適合度として, 染色体に表現された変数領域について SVR 解析を行なった後の q^2 値を用いることで, 予測性に優れた非線型モデルを構築できる変数領域の組が得られる.

しかし SVR 法においては, モデルを構築するデータ数に対して指数関数的に計算時間が増加するだけでなく, 最適化すべきパラメータが C , ν , γ の三つも存在する. そのため GAVDS における PLS 法と同様にクロスバリデーションによりパラメータを最適化した後に q^2 値を求めると, 多大な時間がかかってしまう. そこで SVR モデルのパラメータも GA の染色体に含めることにより計算時間の問題に対応する.

Fig. 4 に GAVDS-SVR 法の概念図を示す. GAVDS-SVR 法では染色体の前半で変数領域を表現し, 最後の三つの成分で SVR パラメータを表現する. これにより染色体の適合度である SVR モデルの q^2 値を計算する際に三つのパラメータを最適化する必要がなく, 計算時間を大幅に短縮可能である. 本手法を用いることで, $\mathbf{X}$ と $\mathbf{y}$ の変数間に非線型性が内在する場合においても, 変数領域の組と SVR モデルを同時に最適化することができる. なお, GAVDS 法と同様に GAVDS-SVR 法においては複数のプロセス変数を超えて変数領域が選択されることはない.

3. 結果と考察

提案手法の有用性を確認するため, シミュレーションデータとあるポリマー重合プラントにおいて実際に測定されたデータを用いた解析を行なった. PLS 法, GAVDS 法, SVR 法, GAVDS-SVR 法によるモデル構築と予測の結果, そして GAVDS 法と GAVDS-SVR 法の変数選択結果を比較, 検討した.

3.1 シミュレーションデータを用いた解析

プロセスデータにおいては $\mathbf{X}$ の入力変数間および時間遅れ変数間に相関が強く, ある時間幅をもって入力変数の時間遅れ変数と $\mathbf{y}$ との間に関係があるといわれている. そこで今回はそれを模倣してデータを作成した. $\mathbf{X}$ の入力変数の数は 7 であり ($n=7$), 入力変数は以下の式で表わされる時間変化をする.

$$\mathbf{x}\{t+1\} = \mathbf{x}\{t\}\mathbf{G} + 0.25\mathbf{w}\{t\} \quad (2)$$

ただし, $\mathbf{x}\{t\} \in R^{1 \times 7}$ は時間 t における七つの入力変数のベクトル, $\mathbf{G} \in R^{7 \times 7}$ は

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} 0.5 & 0.45 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0.5 & 0.45 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0.5 & 0.45 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.5 & 0.45 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0.5 & 0.45 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.5 & 0.45 \\ 0.45 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.5 \end{bmatrix} \quad (3)$$

で表わされる行列, $\mathbf{w}\{t\} \in R^{1 \times 7}$ は -1 から 1 までの一様分布の乱数のベクトルである. $\mathbf{x}\{0\} \in R^{1 \times 7}$ を -5 から 5 までの一様分布の乱数で初期化し, $t=1,000$ までデータを発生させた. t が 601 から 800 までをモデル構築用データ, t が 801 から 1,000 までのデータをモデル検証用データとした.

(2), (3) 式により, 変数番号の近いプロセス変数間および各プロセス変数における時間遅れが近い変数間の相関は高い. 本論文では時間遅れ変数について $t_1 = t_2 = \dots = t_7 = 20$ としたため, $\mathbf{X}$ の全変数の数は $147 (= 7 \times 21)$ となった. これは Fig. 2 において $\mathbf{x}_i$ ごとに $\mathbf{x}_i(0), \mathbf{x}_i(1), \dots, \mathbf{x}_i(20) \in R^{1,000 \times 1}$ が横に並ぶことに対応する.

$\mathbf{x}_i$ が動特性をもって $\mathbf{y}$ へ寄与することおよび $\mathbf{x}_i$ と $\mathbf{y}$ との非線型性を考慮するため, $\mathbf{y}$ を以下のように設定した.

$$\mathbf{y} = \sum_{s=0}^{20} [\mathbf{x}_2(s)c_2(s) + \{\mathbf{x}_3(s)\}^2 c_3(s) + \exp\{\mathbf{x}_5(s)\}c_5(s)] \quad (4)$$

ここで, $c_2(s), c_3(s), c_5(s)$ はそれぞれ $\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_5$ が時間 s だけ遅れた変数の重みであり, 以下のように表わされる.

$$c_2(s) = \frac{1}{2\pi} \exp\left(-\frac{(s-10)^2}{40}\right) \quad (5)$$

$$c_3(s) = \frac{3}{\pi} \exp\left(-\frac{(s-15)^2}{40}\right) \quad (6)$$

$$c_5(s) = \frac{1}{3\pi} \exp\left(-\frac{(s-5)^2}{60}\right) \quad (7)$$

(4) 式から $\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_5$ のみが $\mathbf{y}$ と関係しており, $\mathbf{x}_3$ および $\mathbf{x}_5$ と $\mathbf{y}$ との間には非線型関係があることがわかる. また (5), (6), (7) 式より $\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_5$ はそれぞれ 10, 15, 5 だけ遅れた変数の重みが最大であり, 時間幅をもって $\mathbf{y}$ と関係している. 最後に $\mathbf{X}$ と $\mathbf{y}$ に平均 0, 標準偏差 0.1 の正規分布の乱数をノイズとして加えた. Table 1, Table 2 にそれぞれモデル構築用データおよびモデル検証用データの $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4, \mathbf{x}_5, \mathbf{x}_6, \mathbf{x}_7, \mathbf{y}$ の各統計量を示す.

PLS 法, GAVDS 法, SVR 法, GAVDS-SVR 法によりモデル構築と予測を行なった結果を Table 3 に示す. root mean squared error (RMSE) などの各統計量については付録 A を参照されたい. GAVDS と GAVDS-SVR における GA の計算には genetic algorithm optimizing toolbox for MATLAB 5¹¹⁾を用いた. 染色体の評価値は 5-fold クロスバリデーションを行なった際の q^2 値とした. GA パラメータ

Table 1 Each statistic of $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4, \mathbf{x}_5, \mathbf{x}_6, \mathbf{x}_7$, and $\mathbf{y}$ for training data

	$\mathbf{x}_1$	$\mathbf{x}_2$	$\mathbf{x}_3$	$\mathbf{x}_4$	$\mathbf{x}_5$	$\mathbf{x}_6$	$\mathbf{x}_7$	$\mathbf{y}$
Max	0.538	0.705	0.574	0.574	0.662	0.653	0.653	37.6
Min	-0.755	-0.755	-0.767	-0.707	-0.707	-0.829	-0.829	13.4
Average	-0.023	-0.015	-0.009	-0.020	-0.012	0.008	0.0003	22.2
Standard deviation	0.272	0.277	0.259	0.261	0.272	0.276	0.280	5.63

Table 2 Each statistic of $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_4, \mathbf{x}_5, \mathbf{x}_6, \mathbf{x}_7$, and $\mathbf{y}$ for test data

	$\mathbf{x}_1$	$\mathbf{x}_2$	$\mathbf{x}_3$	$\mathbf{x}_4$	$\mathbf{x}_5$	$\mathbf{x}_6$	$\mathbf{x}_7$	$\mathbf{y}$
Max	0.640	0.640	0.779	0.779	0.779	0.661	0.661	36.4
Min	-0.679	-0.679	-0.678	-0.678	-0.678	-0.668	-0.668	13.6
Average	0.012	0.002	-0.011	-0.012	-0.020	0.023	0.026	21.5
Standard deviation	0.279	0.277	0.253	0.2584	0.246	0.260	0.261	5.05

Table 3 Modeling and prediction results for the simulation data

	r^2	$RMSE$	q^2	$RMSE_{CV}$	r_{pred}^2	$RMSE_p$
PLS	0.727	3.25	0.463	4.56	-0.248	6.05
GAVDS	0.572	4.06	0.512	4.34	0.008	5.38
SVR	0.999	0.002	0.892	2.04	0.482	3.90
GAVDS-SVR	0.999	0.025	0.947	1.42	0.814	2.32

は世代数 1,000, 染色体数 500 とし, 交叉や突然変異に関してはデフォルト値を用いた. なお GAVDS と GAVDS-SVR においては領域数を 3 に固定して 30 回のモデル構築と予測を行ない, 各統計量の平均を Table 3 に載せた.

PLS モデルにおける r^2 と q^2 の値がそれぞれ 0.727 と 0.463 であり GAVDS モデルにおけるそれらの値が 0.572 と 0.512 であることから, GAVDS 法による変数選択を実施した場合でも各統計量は依然として 1 と比較して低い値であることがわかる. **Fig. 5(a)** に GAVDS 法を用いた際の各変数の選択された回数を示す. Fig. 2 と同様に, 各 $\mathbf{x}_i$ について左から順に $\mathbf{x}_i(0), \mathbf{x}_i(1), \dots, \mathbf{x}_i(20)$ に対応する選択回数である. $\mathbf{y}$ への寄与のある $\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_5$ の中で $\mathbf{x}_3, \mathbf{x}_5$ に対応する変数は全く選択されず, $\mathbf{x}_6, \mathbf{x}_7$ といった $\mathbf{y}$ と無関係の変数が選択されてしまった. GAVDS 法では非線型性を考慮した適切な変数選択が達成されなかったことを確認した.

SVR 法によるモデリング結果より, r^2 と q^2 の値がそれぞれ 0.999 と 0.892 であり PLS モデルや GAVDS モデルと比較して精度と予測性の高いモデルが構築されたことがわかる. $\mathbf{X}$ と $\mathbf{y}$ の間の非線型性にある程度対応できたためと考えられる. さらに提案手法である GAVDS-SVR 法を用いることで, q^2 値が 0.947 となり SVR 法と比較して向上した. GAVDS-SVR 法を用いた際の各変数の選択された回数を Fig. 5(b) に示す. $\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_3, \mathbf{x}_5$ の時間遅れ変数の選択回数が大きくほかの変数は選択されなかったことから, $\mathbf{X}$ の変換が線型や単調増加関数のみならず極小値をもつ関数であっても適切に非線型性に対応し変数選択できたことがわかる. 提案手法を用いることで非線型性を考慮に入れた妥当な変数選

Fig. 5 Frequency of selection of each variable in the 30 models

Table 4 Modeling and prediction results for the MFR

	Number of regions	r^2	$RMSE$	q^2	$RMSE_{CV}$	r_{pred}^2	$RMSE_P$
PLS	-	0.978	0.120	0.976	0.126	0.951	0.173
GAVDS	5	0.961	0.163	0.960	0.165	0.940	0.189
GAVDS	10	0.968	0.147	0.967	0.149	0.943	0.185
GAVDS	15	0.971	0.139	0.970	0.142	0.946	0.180
SVR	-	1.000	0.016	0.990	0.082	0.958	0.159
GAVDS-SVR	5	0.992	0.072	0.990	0.084	0.957	0.159
GAVDS-SVR	10	0.995	0.059	0.992	0.075	0.972	0.130
GAVDS-SVR	15	0.996	0.055	0.992	0.072	0.968	0.137

Fig. 6 Frequency of selection of each variable in the 30 GAVDS-SVR models of the MFR

択が可能であることを確認した。

予測結果を確認すると、線型手法である PLS 法や GAVDS 法では r_{pred}^2 値がそれぞれ -0.247 と 0.008 であったが、非線型手法である SVR 法を用いることで 0.482 に向上した。さらに提案手法である GAVDS-SVR 法を用いることで 0.814 と最も高い r_{pred}^2 値であり、 $RMSE_P$ 値は Table 2 の y の変動範囲と比較して小さかった。GAVDS-SVR 法により X と y の間に非線型性が存在する場合であっても、適切な変数選択と予測性に優れた頑健なモデル構築ができることを確認した。

3.2 ポリマー重合プラントへの応用

提案手法の検証を行なうため、三井化学市原工場のポリマー重合プラントで実際に測定されたデータを用いた解析を行なった。対象としたプロセスにおいては、ポリマー物性とその他

のプロセス変数間の非線型性が原因の一つとなり、予測的なソフトセンサーモデルの構築は困難となっている。今回は、2006 年 5 月から 2007 年 4 月に測定されたデータをモデル構築用データ、2007 年 5 月から 2008 年 5 月に測定されたデータをモデル検証用データとし、melt flow rate (MFR) を反応器温度、モノマーおよびコモノマー濃度などの 20 のプロセス変数から推定するソフトセンサーモデルを構築した。今回はプロセスの動特性を考慮するため、Fig. 2 のように各プロセス変数がある時間まで遅らせた変数を追加して最終的な X とした。なお MFR には対数変換を行ない y とした。

各手法を用いた際の MFR のモデル構築と予測の結果を Table 4 に示す。今回は GAVDS 法および GAVDS-SVR 法について、領域数を 5, 10, 15 と振り検討を行なった。そ

れぞれ 30 回のモデル構築と予測を行ない、各統計量の平均を Table 4 に記載した。

PLS や GAVDS と比較して SVR や GAVDS-SVR のほうが r_{pred}^2 値が大きく、 $RMSEP$ 値が小さかった。 $\mathbf{X}$ の変数と MFR の間の関係は非線型であると考えられる。また、領域数が 10 または 15 の場合、SVR より GAVDS-SVR のほうが r_{pred}^2 値が大きく予測精度が向上した。MFR については、ある程度モノマーの濃度や温度と MFR の間に相関があることが物理的に確認されており^{12)~15)}、それらの変数が選択されることで予測精度が向上したと考えられる。

GAVDS 法および GAVDS-SVR 法における領域数を 5 とした際の、各変数の選択回数を Fig. 6 に示す。プロセス変数ごとに時間遅れが大きくなるにつれて上に変数が並んでいる。守秘義務契約のためすべてのプロセス変数名が記載されておらず、いくつかのプロセス変数は n をプロセス変数番号として XV_n で表現されている。選択された変数を見ると、GAVDS では最も MFR に影響のある変数の一つであるモノマー濃度の一方が選択されなかったのに対し、提案手法を用いることで両モノマー濃度が選択された。MFR とモノマー濃度との関係は非線型であるため、GAVDS-SVR 法により MFR と各モノマー間の非線型性が抽出できたと考えられる。

また、MFR と関係の深いと考えられている水素濃度や反応器温度^{12)~15)}も提案手法により選択されていることがわかる。提案手法を用いることで、プロセス変数間の非線型性を考慮に入れた妥当な変数および動特性の選択、そして予測性の高いモデル構築が可能になることを確認した。モデルの解釈および詳細なソフトセンサーモデルの検討が容易であり、メンテナンス負荷の小さいモデルが構築可能であった。

4. 結 言

本論文では、 $\mathbf{X}$ と $\mathbf{y}$ の間に非線型性が存在する場合においても適切なプロセス変数の選択および動特性の選択を行なうことを目的として、GAVDS 法と SVR 法を組み合わせた新規な変数領域選択手法を提案した。GAVDS 法における評価値を SVR モデルの q^2 値とすることで、変数間の非線型性の考慮と領域単位の変数選択が同時に可能となる。

シミュレーションデータを用いた解析の結果、 $\mathbf{X}$ と $\mathbf{y}$ の間に非線型性が存在する場合は GAVDS 法では対応できないことを確認した。このような場合に提案手法である GAVDS-SVR 法を用いることで、非線型性を考慮した適切な変数選択が達成され精度と予測性能の高いモデルが構築可能であった。

その後、ソフトセンサー解析に提案手法を応用した。提案手法を用いることで、他の手法と比較して予測精度の高いモデル構築が可能であった。プロセス変数間の非線型性と動特性を適切に考慮して変数領域を選択したためであると考えられる。

本手法により少数の $\mathbf{X}$ の変数のみでモデリングが行なわれることで、高い予測性能と解釈のしやすさを併せもつ実用的なモデルを得ることができると考えられる。

謝辞 データ提供の面で多大なご支援をいただいた三井化学株式会社に深く感謝致します。

参 考 文 献

- 1) M. Kano and Y. Nakagawa: Data-Based Process Monitoring, Process Control, and Quality Improvement: Recent Developments and Applications in Steel Industry, Comput. Chem. Eng., **32**-1,2, 12/24 (2008)
- 2) P. Kadlec, B. Gabrys and S. Strandt: Data-driven Soft Sensors in the Process Industry, Comput. Chem. Eng., **33**-4, 795/814 (2009)
- 3) M. Arakawa, Y. Yamashita and K. Funatsu: Genetic Algorithm-based Wavelength Selection Method for Spectral Calibration, J. Chemom., **25**-1, 10/19 (2011)
- 4) H. Kaneko and K. Funatsu: A New Process Variable and Dynamics Selection Method Based on Genetic Algorithm-based Wavelength Selection Method, AIChE J., **58**-6, 1829/1840 (2012)
- 5) W. Yan, H. Shao and X. Wang: Soft Sensing Modeling Based on Support Vector Machine and Bayesian Model Selection, Comput. Chem. Eng., **28**-8, 1489/1498 (2004)
- 6) H. Kaneko and K. Funatsu: Development of Soft Sensor Models Based on Time Difference of Process Variables with Accounting for Nonlinear Relationship, Ind. Eng. Chem. Res., **50**-18, 10643/10651 (2011)
- 7) P. Kadlec and B. Gabrys: Local Learning-Based Adaptive Soft Sensor for Catalyst Activation Prediction, AIChE J., **57**-5, 1288/1301 (2011)
- 8) C.M. Bishop: *Pattern Recognition and Machine Learning*, Springer, New York, USA (2006)
- 9) 金子, 船津: Genetic Algorithm-based WaveLength Selection と Support Vector Regression を組み合わせた変数領域選択手法の開発, J. Comput. Chem. Jpn., **10**-4, 122/130 (2011)
- 10) D. Whitley: A Genetic algorithm tutorial, Statistic and Computing, **4**-2, 65/85 (1994)
- 11) C.R. Houck, J.A. Joines and M.G. Kay: A Genetic Algorithm for Function Optimization: A Matlab Implementation, Technical Report, NCSU-IE TR 95-09, Meta-heuristic Research and Applications Group, North Carolina State University (1995)
- 12) K.B. McAuley and J.F. MacGregor: On-Line Inference of Polymer Properties in an Industrial Polyethylene Reactor, AIChE J., **37**-6, 825/835 (1991)
- 13) M. Ohshima and M. Tanigaki: Quality Control of Polymer Production Processes, J. Process Control, **10**-2-3, 135/148 (2000)
- 14) E.H. Lee, T.Y. Kim and Y.K. Yeo: Prediction of the Melt Index in a High-density Polyethylene Process, J. Chem. Eng. Japan, **40**-10, 840/846 (2007)
- 15) S.J. Oh, J. Lee and S. Park: Prediction of Pellet Properties for an Industrial Bimodal High-density Polyethylene Process with Ziegler-Natta Catalysts, Ind. Eng. Chem. Res., **44**-1, 8/20 (2005)

《付 録》

A. 各種統計量

回帰モデルの精度、予測能力の指標として、本論文では r^2 値、 q^2 値、 $RMSE$ 値、 $RMSE_{CV}$ 値を用いた。それぞれ以下のうに定義される。

$$r^2 = 1 - \frac{\sum (y_{\text{obs}} - y_{\text{calc}})^2}{\sum (y_{\text{obs}} - \bar{y})^2} \quad (\text{A.1})$$

$$q^2 = 1 - \frac{\sum (y_{\text{obs}} - y_{\text{pred}})^2}{\sum (y_{\text{obs}} - \bar{y})^2} \quad (\text{A.2})$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum (y_{\text{obs}} - y_{\text{calc}})^2}{n}} \quad (\text{A.3})$$

$$RMSE_{\text{CV}} = \sqrt{\frac{\sum (y_{\text{obs}} - y_{\text{pred}})^2}{n}} \quad (\text{A.4})$$

ここで, y_{obs} は $\mathbf{y}$ の実測値, y_{calc} は $\mathbf{y}$ の計算値, y_{pred} は leave-one-out 法によるクロスバリデーションや N-fold クロスバリデーションを行なった際の $\mathbf{y}$ の予測値, n はデータ数を表わす. r^2 値が 1 に近いほど, $RMSE$ 値が 0 に近いほどモデルの精度は高く, q^2 値が 1 に近いほど, $RMSE_{\text{CV}}$ 値が 0 に近いほどモデルの予測能力は高い.

回帰モデルの外部データに対する予測性の指標として, r_{pred}^2 値と $RMSE_{\text{P}}$ 値を用いた. r_{pred}^2 値はモデル検証用データを用いた際の r^2 値であり, $RMSE_{\text{P}}$ 値は r_{pred}^2 に対応する $RMSE$ 値である. r_{pred}^2 値が 1 に近いほど, $RMSE_{\text{P}}$ 値が 0 に近いほど外部データに対するモデルの予測性は高い.

B. SVR 法

SVR 法は support vector machine (SVM) ⁸⁾ を回帰分析へ応用した手法である. SVM と同様にカーネルトリックを用いることによって非線型なモデリングを行なうことが可能となっている. SVR 法においては, 下記の値を最小化するように学習が行なわれる.

$$\frac{1}{2} \|\mathbf{b}\|^2 + C \sum_i |y_i - f(\mathbf{x}_i)|_e \quad (\text{B.1})$$

ただし,

$$f(\mathbf{x}_i) = \phi(\mathbf{x}_i)\mathbf{b} + v \quad (\text{B.2})$$

$$|y_i - f(\mathbf{x}_i)|_e = \max(0, |y_i - f(\mathbf{x}_i)| - e) \quad (\text{B.3})$$

である. ここで y_i および $\mathbf{x}_i \in R^{1 \times n}$ は i 番目のモデル構築用データ, ϕ はある非線型関数, $\mathbf{b}$ は回帰係数ベクトル, v は定数項, e は誤差の閾値である. (B.1) 式を最小化することにより, モデル構築用データへの適応性と汎化能力のバランスのとれた非線型モデルが得られる. (B.1) 式の C は, 二つの項の間で重み付けを調整するための係数であり, 学習データの特徴に応じて最適化を行なう必要がある.

新しいデータ $\mathbf{x}_j \in R^{1 \times n}$ の予測値は以下のように表わされる.

$$f(\mathbf{x}_i) = \sum_{i=1}^m (\alpha_i - \beta_i) K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) + v \quad (\text{B.4})$$

ここで α_i, β_i は (B.1) 式の最小化によって得られるパラメータ, K はカーネル関数である. カーネル関数としては, 以下に示すガウシアンカーネルを使用した.

$$K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \phi(\mathbf{x}_i)\phi(\mathbf{x}_j)^T = \exp(-\gamma \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2) \quad (\text{B.5})$$

カーネル関数中の γ についても, 適用するデータに応じた最適化が必要である. なお今回は, e を指定する代わりに e を超える誤差をもつデータの割合に対する上限 ν を指定する ν -SVR 法 ⁸⁾ を用いた.

[著 者 紹 介]

金子 弘 昌 (正会員)

2011 年東京大学大学院工学系研究科化学システム工学専攻博士課程修了. 同年東京大学大学院化学システム工学専攻助教, 現在に至る. 推定制御, プロセス管理, ケモメトリックス, 膜分離活性汚泥法などに関する研究などに従事 (工学博士).

船 津 公 人

1983 年九州大学大学院理学研究科化学専攻博士課程修了. 84 年豊橋技術科学大学物質工学系助手, 92 年同上知識情報工学系助教授, 2004 年東京大学大学院工学系研究科化学システム工学専攻教授, 現在に至る. ケモインフォマティックス, 分子設計, 材料設計, 反応設計, 推定制御, プロセス管理などに関する研究などに従事 (理学博士).