ウェーブレット解析を用いたバッチプロセス操作プロファイルの最適化

藤原 幸一*・加納 学*

長谷部 伸治*・大野 弘**

Operation Profile Optimization for Batch Process by Using Wavelet Analysis

Koichi FUJIWARA*, Manabu KANO*,
Shinji HASEBE* and Hiromu OHNO**

In the present work, a new regression method based on wavelet analysis and multivariate analysis is proposed. Referred to as wavelet coefficient regression (WCR), the proposed method can build a statistical model that relates operation profiles with product quality in a batch process. In WCR, selected wavelet coefficients of operation profiles are used as input variables of a statistical model, and thus time-related information such as timing of manipulation can be successfully modeled. In addition, by integrating multivariate analysis and wavelet analysis, WCR can cope with correlation of input variables. As a result, WCR enables us to build an accurate statistical model of a batch process. On the basis of WCR, a data-driven method for improving product quality in a batch process is also proposed. The proposed method can determine operation profiles that can achieve the desired product quality and optimize the operation profiles under a given performance index and various constraints. The usefulness of the proposed WCR and quality improvement method is demonstrated through a case study of lysine production based on a semi-batch fermentation process.

Key Words: wavelet analysis, multivariate analysis, batch process, operation profile optimization, quality improvement

1. 緒 言

今日、製品のライフサイクルが短くなるにつれ、いかに短時間で製品品質や歩留りを改善できるかが、さまざまな産業界で重要な課題となってきた。今後も、高付加価値製品の多品種少量生産へと産業界が軸足を移していく中で、バッチプロセスの重要性がますます高まっていくことが予想される。バッチプロセスの特徴は、非定常操作が行なわれること、すなわちあらかじめ設定された操作プロファイルに従ってプロセスが運転されることにある。このため、品質や歩留りの改善を目的とした操作プロファイルの最適化が、高い競争力を実現するために不可欠な技術となる。

製品品質を改善するためには、品質と運転条件とを関連付けなければならないため、運転条件から品質を予測する品質モデルが重要な役割を果たす。これまでに、主成分回帰(PCR; Principal Component Regression)や部分的最小二

乗法(PLS; Partial Least Squares)などの多変量解析に基づく品質モデル構築および運転条件最適化の方法が提案されている^{1)~3)}。ところが、バッチプロセスを対象とする場合には、操作プロファイルと品質を関連付ける必要があるため、一般にそのモデル化は難しい。これまでに、操作プロファイルを入力とする統計的モデル構築手法として、主成分分析(PCA; Principal Component Analysis)に基づく Multiway PCA や PLS に基づく Multiway PLS などが提案されている^{4), 5)}。しかし、これらの手法では、異なる時刻に測定された変数をすべて入力変数として扱うため、入力変数の数が増大し、モデルの推定精度が低下する恐れがある。また、バッチプロセスでは操作のタイミングが品質に強く影響するが、多変量解析では時間情報をうまく抽出できないため、操作プロファイルを入力とする統計的モデルの構築は困難である場合が多い。

そこで本研究では、バッチプロセスにおける品質改善を実現するために、操作プロファイルを入力、製品品質を出力とする、新しい統計的モデル構築手法を提案する。提案法は、ウェーブレット解析と多変量解析を組み合わせ、操作プロファイルのウェーブレット係数を入力とする統計的モデルを構築する方法であり、これをウェーブレット係数回帰(WCR; Wavelet Coefficient Regression)と呼ぶことにする。ウェーブレット解析によって、操作のタイミングなどの時間情報を変数の大小関係に置き換えることができるため、予測性能の高い統計

* 京都大学大学院工学研究科化学工学専攻
京都市西京区京都大学桂

** 神戸大学大学院自然科学研究科応用化学専攻
神戸市灘区六甲台町 1-1

* Dept. of Chemical Engineering, Kyoto University

** Dept. of Chemical Science and Engineering, Kobe University

(Received April 24, 2006)

的モデルを構築できる。さらに、提案する WCR を用いて構築した統計的モデルに基づいて、バッチプロセスの操作プロファイルを最適化し、品質や歩留りの改善を実現する方法を提案する。

2. 多変量解析によるモデル構築

これまで、プロセス制御やプロセス管理の分野において、多変量解析は非常に重要な役割を担ってきた。プロセス制御分野では、オンラインで測定できない製品品質などを測定変数から推定するソフトセンサーを構築するために、PLS などの手法が広く利用されている^{6)~10)}。また、プロセス管理分野では、PCA に基づく多変量統計のプロセス管理 (MSPC; Multivariate Statistical Process Control) が広く利用されている^{11)~15)}。

通常、バッチプロセスはあらかじめ指定されたプロファイルに従って操作される。バッチプロセスの運転データはバッチごとに時系列として与えられるため、測定データは (バッチ × 測定変数 × サンプル点) のように 3 次元配列として表現される。各サンプル点での測定変数をおのおの異なる変数として扱い、(測定変数 × サンプル点) 個の新たな変数に対して PCA や PLS を適用し、次元圧縮を行なうことで、測定データを少数の主成分や潜在変数で表現する手法を Multiway PCA や Multiway PLS と呼ぶ^{4), 5)}。いま、プロセスの第 m 番目の測定変数を $x_{m,t}$ ($m = 1, 2, \dots, M; t = 1, 2, \dots, T$) とする。ただし、 t はサンプル点を表わす。第 n バッチで測定されたすべてのデータを 1 つのベクトルに並べ、

$$\mathbf{x}_n = [x_{1,1} \cdots x_{1,T} \cdots x_{M,1} \cdots x_{M,T}]^T \quad (1)$$

と表わす。Multiway PCA や Multiway PLS では、 $\mathbf{x}_n$ ($n = 1, 2, \dots, N$) を行に並べた行列 $\mathbf{X}$ に PCA や PLS を適用する。

Multiway PCA や Multiway PLS では、各サンプル点での測定変数をおのおの異なった変数として扱うため、利用可能なサンプル数に対して入力変数の数が増大し、構築する統計的モデルの推定精度が低下するという問題がある。このため、測定されたすべてのサンプル点のデータを用いるのではなく、いくつかのサンプル点のデータを間引いた上で入力として用いることがある。しかし、データを間引いた場合、対応する時刻での情報が失われてしまう。また、PCA や PLS などの多変量解析は変数間の相関関係を利用する手法であるが、バッチプロセスにおいて製品品質に強く影響する操作タイミングを変数間の相関関係としてモデル化することは容易ではない。

3. ウェーブレット係数回帰 (WCR)

本研究では、上述の Multiway PCA や Multiway PLS の欠点を補い、操作プロファイルと製品品質の関係を的確に捉えることのできる統計的モデルを構築するために、ウェーブレット解析と多変量解析を併用する新しいアプローチを提案

する。提案法の特徴は、操作プロファイルのウェーブレット係数を入力とする統計的モデルを構築することであるため、このモデル構築手法をウェーブレット係数回帰 (WCR) と呼ぶことにする。本節では、ウェーブレット解析の概要を述べた後、提案する WCR について説明し、その有効性を数値例を通して示す。

3.1 ウェーブレット解析

ウェーブレット解析は信号を時間・周波数の両面から捉えることのできる手法で、これを時間周波数解析という¹⁶⁾。いま、 $a, b \in \mathbb{R}$ として、関数空間 $\{\psi((x-b)/a)\}_{a,b}$ を考える。 a は関数 ψ のスケール変換を、 b は平行移動 (トランスレート) を表わす。このような関数空間の元をウェーブレットという。信号 f のウェーブレット変換 $W_f(b, a)$ は、次式で定義される。

$$W_f(b, a) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{|a|}} \psi\left(\frac{x-b}{a}\right) f(x) dx \quad (2)$$

a, b を変化させることで、ある時間、ある周波数での信号の強度 (ウェーブレットと信号の相関) を求めることができる。

本報ではウェーブレットを離散化した 2 進ウェーブレット変換を用いる。これは、スケールとトランスレートの組 (b, a) を $(2^j k, 2^j)$ ($j, k \in \mathbb{Z}$) と離散化するウェーブレット変換である。ここで離散化パラメータ j のことをレベルといい、レベルは周波数に対応する。離散ウェーブレット変換における基底関数であるスケーリング関数 ϕ およびウェーブレット ψ は、つぎのトゥー・スケール関係を満たす。

$$\phi(x) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} p_k \phi(2x - k) \quad (3)$$

$$\psi(x) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} q_k \phi(2x - k) \quad (4)$$

ここで、 $\{p_k\}, \{q_k\}$ はトゥー・スケール数列と呼ばれ、スケーリング関数およびウェーブレットを決定する数列である。

スケーリング関数 ϕ が与えられると、各レベル j について $\{\phi(2^{-j}x - k)\}$ の張る空間 V_j が決まる。よって、任意の関数 $f_j \in V_j$ は、係数 $\{a_k^{(j)}\}$ を用いて

$$f_j(x) = \sum_k a_k^{(j)} \phi(2^{-j}x - k) \quad (5)$$

と表わすことができる。なお、トゥー・スケール関係から $V_{j+1} \subset V_j$ である。また、 ϕ に対応する ψ が与えられると、 $\{\psi(2^{-j}x - k)\}$ の張る空間 W_j が決まる。したがって、任意の関数 $g_j \in W_j$ は、係数 $\{d_k^{(j)}\}$ を用いてつぎのように表わされる。

$$g_j(x) = \sum_k d_k^{(j)} \psi(2^{-j}x - k) \quad (6)$$

さらに、 $V_j = V_{j+1} \oplus W_{j+1}$ が成り立つので、 f_j はつぎのように一意に分解される。

$$f_j = f_{j+1} + g_{j+1} \quad (7)$$

ここで、 f_{j+1} は f_j の低周波成分、 g_{j+1} は高周波成分であり、そ

れぞれ Approximation, Detail という。また, $a_j = \{a_k^{(j)}\}$, $d_j = \{d_k^{(j)}\}$ をそれぞれレベル j の Approximation 係数, Detail 係数といい, これらを併せてウェーブレット係数と呼ぶ。ウェーブレットによる分解とは, ウェーブレット係数 a_j , d_j を決定することにほかならない。

ウェーブレット係数はウェーブレットと信号の内積で得られる。たとえば, レベル j の Approximation 係数 a_j は, スケーリング関数 ϕ と信号 f_j の内積

$$a_k^{(j)} = 2^{-j} \sum_{x=-\infty}^{\infty} \phi(2^{-j}x - k) f_j(x) \quad (8)$$

で求められる。ただし, スケーリング関数は

$$\sum_{x=-\infty}^{\infty} \phi(x) = 1 \quad (9)$$

と正規化されている。なお, この分解によって, 信号の解像度は $1/2$ に, つまり得られた信号のサンプリング周波数は元の信号のサンプリング周波数の $1/2$ となる。

3.2 信号の復元

ウェーブレット解析は, 信号の特徴抽出に利用されるだけでなく, 信号の圧縮と復元にも利用されている。実際, 適当なウェーブレットを用いて信号を分解すれば, ほとんどすべての信号はウェーブレット係数の絶対値の大きな点だけで, ほぼ完全に復元できることが知られている¹⁷⁾。このウェーブレット解析の信号復元能力は, 数学的に厳密に証明されているわけではなく, 反例も見つかっているが, 実用上は問題ないとされる。絶対値の小さな係数を多く間引いても元の信号の概形を復元できるというウェーブレットの性質は, Multiway 手法では明確でなかった変数を間引く際の方針を与える。つまり, 絶対値がある閾値以下であるウェーブレット係数, または特定のレベルのウェーブレット係数を間引けばよいことになる。さらに, 後述する希望品質を満たすバッチプロセスの操作プロファイルを導出する際にも, この性質は重要な役割を果たす。

3.3 ウェーブレット係数回帰 (WCR)

バッチプロセスの操作変数のうち, 操作プロファイルをもつ変数が I 個あるとして, 各変数の操作プロファイルをサンプリングした系列を u_i ($i = 1, 2, \dots, I$) とする。また, 操作プロファイルをもたない操作変数を $s \in \mathbb{R}^L$, 品質変数を $y \in \mathbb{R}^Q$ とする。

まず, 操作プロファイル u_i にウェーブレット変換を適用してレベル J_i の分解を行ない, ウェーブレット係数 $a_{J_i,i}, d_{j,i}$ ($i = 1, 2, \dots, I; j = 1, 2, \dots, J_i$) を求める。また, これらをまとめて

$$c_i = \begin{bmatrix} a_{J_i,i}^T & d_{1,i}^T & \dots & d_{J_i,i}^T \end{bmatrix}^T \quad (10)$$

と表わす。このとき用いるウェーブレットおよび分解のレベル J_i は任意である。 I 個のウェーブレット係数 c_i を並べ,

$$c = \begin{bmatrix} c_1^T & c_2^T & \dots & c_I^T \end{bmatrix}^T \quad (11)$$

とする。さらに s, c, y を行として N バッチ分並べた行列をそれぞれ $S \in \mathbb{R}^{N \times L}, C \in \mathbb{R}^{N \times P}, Y \in \mathbb{R}^{N \times Q}$ とする。

行列 C から, 絶対値がある閾値以下であるウェーブレット係数の列や特定レベルのウェーブレット係数の列など重要性が低いと判断された列を間引き, これを改めて $C \in \mathbb{R}^{N \times M}$ とする。最終的に, S, C, Y の各列を平均 0 分散 1 に標準化した上で, S, C を入力, Y を出力とする線形モデルを構築する。構築した線形モデルは

$$y = K^T \begin{bmatrix} s \\ c \end{bmatrix} + e \quad (12)$$

と表わされる。ここで, $K \in \mathbb{R}^{(L+M) \times Q}$ は回帰係数行列, $e \in \mathbb{R}^Q$ は残差である。また, 線形モデル構築手法は任意であるが, 入力変数間の多重共線性を考慮するため, PCR または PLS を用いるものとする。

本報では, WCR の基本概念を簡潔に示すため, 線形回帰手法を利用する場合についてのみ説明している。しかし, PCR や PLS などの線形回帰手法に代えて, サポートベクター回帰などの非線形回帰手法を利用することもできる。

3.4 数値例

数値例を示す。つぎの線形システムに, 操作プロファイル u として入力時間と幅が一様分布に従ってランダムに変化する高さ 1 の矩形波を 2 回入力し, 最終時刻 $T_f = 63$ における出力 y_f を測定した。

$$\dot{x} = -0.01x + 2u \quad (13)$$

$$y = 0.1x \quad (14)$$

ここで x は線形システムの状態変数であり, $x(0) = 0$ とする。 u を周期 1 でサンプリングした系列 u を入力, y_f を出力とする線形モデルを Multiway PCR (MPCR) および WCR によって構築した。WCR では, まず Daubechies のウェーブレット ($N = 2$) でレベル 5 の分解を行ない, ウェーブレット係数を求めた。ここで N はウェーブレットのモーメントの条件である。例として, 入力時間の異なる 2 バッチの操作プロファイルをウェーブレット変換によって分解した結果を Fig. 1 に示す。入力 u は 64 次元であったが, ウェーブレット変換によって 75 次元に写像されている。つぎに, Approximation 係数および低周波側のレベル 5 の Detail 係数のみを入力として PCR でモデルを構築した。採用する主成分の数を 5 としたため, WCR の入力変数の次元は 5 である。なお, モデル構築用データは 10 バッチであり, 別の検証用データ 10 バッチを用いて予測性能の検証を行なった。MPCR によるモデル構築結果を Fig. 2 に, WCR によるモデル構築結果を Fig. 3 に示す。図中, グラフの横軸が真値, 縦軸が予測値を示し, 上段がモデル構築用データ, 下段が検証用データに対する予測結果である。また, RMSE は根平均二乗誤差, R は真値と予測値との相関係数, PCs は PCR で採用した主成分数を表わしている。ここでは比較のため, 主成分数はともに 5 としてある。これらの結果より, MPCR では検証用

Fig. 1 Original inputs (top) and their decomposition via wavelet decomposition with Daubechies's wavelet ($N = 2$).

Fig. 2 Model construction results by MPCR. Validation of estimation accuracy using modeling data (top) and validation data (bottom).

Fig. 3 Model construction results by WCR. Validation of estimation accuracy using modeling data (top) and validation data (bottom).

データの前測がまったくできていないのに対して、WCRでは構築用データおよび検証用データのいずれに対しても良い予測性能が実現されており、MPCRと比較して大幅に予測性

能が改善できていることがわかる。

このように、WCRによって予測性能が大きく改善したのは、ウェーブレット解析によって時間情報をモデル構築に活用できたためである。Fig. 1より、入力時間のずれが、たとえば Approximation 係数の 2, 3 番目の係数の大小で表現されており、ウェーブレット係数が操作プロファイルの時間に関する特徴をうまく抽出できていることがわかる。ただし、このように時間情報をうまく捉えるには、適切なウェーブレットを選択しなければならない。この例ではたとえば Haar のウェーブレットを用いると、うまく時間情報を捉えることができない。

本数値例では簡単のために、入力される矩形波の大きさはすべて 1 とした。大きさの異なる矩形波を対象にウェーブレット変換を行なうと、ウェーブレット係数の大きさは元の信号の大きさに比例するため、低周波側の 1 つのウェーブレット係数では入力時間のずれと信号の大きさの違いが区別できない。しかし、このような場合でも、高周波側も含めて複数のウェーブレット係数を入力として用いることで、精度の良いモデルが構築できる。

4. バッチプロセス品質改善

これまでに著者らは、プロセスの運転データを入力、品質データを出力とする品質モデルを構築し、そのモデルに基づいて希望品質を実現できる運転条件を決定する DDQI (Data-Driven Quality Improvement) と呼ぶ品質改善手法を開発してきた^{2), 3), 18)}。DDQI では、予測性能の高い品質モデルを構築することが必要とされるが、バッチプロセスを対象としても、WCRによって予測性能の高いモデルが構築できれば、DDQIによって希望品質を実現できる運転条件を決定できる。そこで本節では、DDQIとWCRに基づいたバッチプロセス品質改善手法を提案する。なお、WCRにおける線形モデル構築には PCR を用いるものとする。

WCRで構築されたバッチプロセスの品質モデルは次式で

表わされる.

$$\begin{aligned} y &= K^T t \\ &= K^T V_R^T z \end{aligned} \quad (15)$$

ここで $y \in \mathbb{R}^Q$ は品質変数, $z = [s^T \ c^T]^T \in \mathbb{R}^{(L+M)}$ であり, $s \in \mathbb{R}^L$ はバッチプロセスにおいて操作プロファイルをもたない操作変数, $c \in \mathbb{R}^M$ はWCRで入力として用いたウェーブレット係数である. y, z の各変数は平均0分散1に標準化しておくものとする. また, $K \in \mathbb{R}^{R \times Q}$ はPCRの回帰係数行列, $t \in \mathbb{R}^R$ は主成分得点ベクトル, $V_R \in \mathbb{R}^{(L+M) \times R}$ はローディング行列, R は採用した主成分の数とする.

いま, 希望品質 $\tilde{y} \in \mathbb{R}^Q$ が与えられたとする. $R > Q$ のとき, $\tilde{y}$ を与える望ましい主成分得点 $\tilde{t}$ は次式で与えられる.

$$\tilde{t} = (K^T)^+ \tilde{y} + \text{null}(K^T) \quad (16)$$

なお, A^+ は行列 A の擬似逆行列を, $\text{null}(A)$ は A の零空間 (カーネル) を表わし, $\dim(\text{null}(K^T)) = R - Q$ である. 解 $\tilde{t}$ は無数に存在するが, ここでは最適化などによって解を一意に決定するものとし, これを z の空間に戻す.

$$\tilde{z} = V_R \tilde{t} \quad (17)$$

得られた $\tilde{z}$ をモデル構築用データの標準偏差を用いてスケールリングし, これに平均を加え, 改めて $\tilde{z} = [\tilde{s}^T \ \tilde{c}^T]^T$ とする. ここで, $\tilde{c}$ を対象に, モデル構築時に間引いた係数の部分に0を挿入し, i 番目の操作プロファイルに相当するウェーブレット係数 $\tilde{c}_i$ を取り出す. ウェーブレット解析では, 絶対値が大きい係数だけで元の信号の概形を復元できるため, $\tilde{c}_i$ をウェーブレット逆変換することで, 望ましい操作プロファイル $\tilde{u}_i$ を得ることができる. 最終的に, $\tilde{s}, \tilde{u}_i$ ($i = 1, 2, \dots, I$) をバッチプロセスの操作とすればよい.

5. ケーススタディ

提案するWCRおよびバッチプロセス品質改善手法の有効性を, ケーススタディを通じて検証した. 本ケーススタディで対象とするプロセスは半回分発酵系であるリジン発酵プロセスである¹⁹⁾. リジンは菌体が増殖する際に生産される2次代謝物であり, 操作プロファイルとして基質供給速度が与えられる. 本ケーススタディの目的は, 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ことである. なお, シミュレーションに用いたモデルの詳細は付録Aに示す.

プロセスをさまざまな操作プロファイルを用いて運転し, バッチ終了時間 $T_f = 40$ hでのリジン生産量 y を測定した. 操作プロファイルを周期20 minでサンプリングした時系列を u とし, u を入力, y を出力とする品質モデルをMultiway PCR (MPCR) およびWCRを用いて構築した. WCRでは, Daubechiesのウェーブレット ($N = 8$) を用いてレベル5の分解を実施し, 得られたApproximation係数をモデル入力として採用した. 入力 u は121次元であり, ウェーブレ

Fig. 4 Model construction results by MPCR. Validation of estimation accuracy using modeling data (top) and validation data (bottom).

Fig. 5 Model construction results by WCR. Validation of estimation accuracy using modeling data (top) and validation data (bottom).

ト変換によって194次元に写像されたが, Approximation係数のみを入力変数に選択した結果, WCRの入力変数の次元は18となった. 続いて, Approximation係数を入力として, PCRを用いてモデルを構築した. なお, モデル構築用サンプル数と検証用サンプル数は共に10バッチである. MPCRによるモデル構築結果をFig. 4に, WCRによるモデル構築結果をFig. 5に示す. 比較のため, いずれの場合も主成分数は5としている. これらの結果より, MPCRに比べてWCRの検証用データに対する予測性能が劇的に改善していることがわかる.

WCRで構築した品質モデルを用いて, 希望生産量 $\tilde{y} = 20, 25, 30$ を実現する操作プロファイルを導出した. 品質モデルの入力変数の数が品質変数の数よりも多いため, 解は一意に決定できない. そこで, ここでは(16)式において $\text{null}(K^T) = 0$ とした最小ノルム解となる操作プロファイルを導出した. 結果をFig. 6に示す. 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.

つぎに, $\tilde{y} = 30$ とした場合の基質供給量最小化 (Case 1),

Fig. 6 Derived operation profiles for realizing the desired production $\bar{y} = 20, 25, 30$.

およびバッチ終了時間 T_f でのリジン生産量最大化 (Case 2) を目的とした操作プロファイルの最適化を実施した。制約条件として、1) タンク内液体積はタンク体積 $V_{max} = 1000$ kL を超えない、2) 基質供給速度は負にならない、3) 解はモデル構築用データの内挿である、という3条件を導入した。解がモデル構築用データの内挿であることを保証するには、次式で定義されるモデル構築用データの T^2 統計量がその管理限界を超えなければよい²⁰⁾。

$$T^2 = \sum_{r=1}^R \frac{t_r^2}{\sigma_{t_r}^2} \quad (18)$$

ここで、 t_r は第 r 主成分得点、 $\sigma_{t_r}^2$ は t_r の分散であり、 R は採用する主成分の数である。なお、本ケーススタディでは、WCR の入力変数である Approximation 係数の T^2 統計量に対する制約条件を用いる代わりに、主成分得点がモデル構築用データの主成分得点の最大値と最小値によって定義される上下限を超えないという制約を用いることで、最適化計算を容易にすると共に、解がモデル構築用データの内挿であることを保証した。最適化結果を Fig. 7 に示す。この最適化により、Case 1 では基質供給量が最小ノルム解の 892 から 782 に減少した。また、実現したリジン生産量は 30.2 であり、希望値と良く合致した。Case 2 では得られたリジン生産量は 35.7 となり、バッチ終了時のタンク内液体積はタンク体積 V_{max} と一致した。

以上より、提案する WCR および品質改善手法の有効性が示された。

6. 結 言

本報では、バッチプロセス品質改善のため、ウェーブレット解析と多変量解析を組み合わせた統計的モデル構築手法を提案し、数値例を用いてその有効性を示した。従来の多変量解析手法では、バッチプロセスの品質に大きく影響する操作のタイミングなどの時間情報を捉えるのは困難な場合があったが、提案するウェーブレット係数回帰 (WCR) では、ウェーブレット解析を用いることで時間情報を適切に用いたモデル構築を行なうことができ、予測性能を改善させることができる。さらに、提案する WCR に基づいて、バッチプロセスの

Fig. 7 Optimal operation profiles for realizing $\bar{y} = 30$ with minimum operation cost (Case 1) and for maximizing y (Case 2).

品質改善手法を提案し、半回分発酵系であるリジン生産プロセスのケーススタディを通じてその有効性を示した。本報では、線形回帰手法を利用する WCR についてのみ述べたが、PCR や PLS などの線形回帰手法に代えて、サポートベクター回帰などの非線形回帰手法を利用することも可能である。

謝辞 本研究の一部は財団法人 JFE21 世紀財団の補助を受けて行なわれた。ここに記して謝意を表す。

参 考 文 献

- 1) C. M. Jaeckle and J. F. MacGregor: Product Design through Multivariate Statistical Analysis of Process Data, *AIChE J.*, **44**, 1105/1118 (1998)
- 2) M. Kano, K. Fujiwara, S. Hasebe and H. Ohno: Data-Driven Quality Improvement: Handling Qualitative Variables, *IFAC Symp. on Dynamics and Control of Process Systems (DYCOPS)*, CD-ROM, Cambridge, July 5-7 (2004)
- 3) 加納, 藤原, 長谷部, 大野: 運転データに基づく品質改善のための定性的品質情報の定量化, 計測自動制御学会論文集, **42-8**, 902/908 (2006)
- 4) P. Nomikos and J. F. MacGregor: Monitoring Batch Processes Using Multiway Principal Component Analysis, *AIChE J.*, **40**, 1361/1375 (1994)
- 5) P. Nomikos and J. F. MacGregor: Multiway Partial Least Squares in Monitoring Batch Processes, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **30**, 97/109 (1995)
- 6) T. Mejdell and S. Skogestad: Estimation of Distillation Compositions from Multiple Temperature Measurements Using Partial-Least-Squares Regression, *Ind. Eng. Chem. Res.*, **30**, 2543/2555 (1991)
- 7) T. Mejdell and S. Skogestad: Composition Estimator in a Pilot-plant Distillation Column Using Multiple Temperatures, *Ind. Eng. Chem. Res.*, **30**, 2555/2564 (1991)
- 8) M. Kano, K. Miyazaki, S. Hasebe and I. Hashimoto: Inferential Control System of Distillation Compositions Using Dynamic Partial Least Squares regression, *J. Proc. Cont.*, **10**, 157/166 (2000)
- 9) M. Kano, N. Showchaiya, S. Hasebe and I. Hashimoto: Inferential Control of Distillation Compositions: Selection of Model and Control Configuration, *Cont. Eng. Prac.*, **11**, 927/933 (2003)
- 10) H. Kamohara, A. Takinami, M. Takeda, M. Kano, S. Hasebe and I. Hashimoto: Product Quality Estimation and Operating Condition Monitoring for Industrial Ethylene Fractionator, *J. Chem. Eng. Japan*, **37**, 422/428

- (2004)
- 11) J. E. Jackson: Quality Control Methods for Several Related Variables, *Technometrics*, **1**, 359/377 (1959)
 - 12) J. E. Jackson and G. S. Mudholkar: Control Procedures for Residuals Associated with Principal Component Analysis, *Technometrics*, **21**, 341/349 (1979)
 - 13) T. Kourti and J. F. MacGregor: Process Analysis, Monitoring and Diagnosis, Using Multivariate Projection Methods, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **28**, 3/21 (1995)
 - 14) M. Kano, K. Nagao, H. Ohno, S. Hasebe, I. Hashimoto, R. Strauss and B. R. Bakshi: Comparison of Multivariate Statistical Process Monitoring Methods with Applications to the Eastman Challenge Problem, *Comput. Chem. Engng*, **26**, 161/174 (2002)
 - 15) 加納 学: プロセスケモメトリクスによる統計的プロセス管理, システム/制御/情報, **48**, 165/170 (2004)
 - 16) G. Strang: Wavelet and dilation equations: A brief introduction, *SIAM Review*, **31**, 614/627 (1989)
 - 17) S. Mallat and S. Zhong: Characterization of Signals from Multiscale Edges, *IEEE Transaction on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, **14**, 710/732 (1992)
 - 18) 藤原, 加納, 長谷部, 大野: 運転データに基づく階層型品質改善システムの開発—品質制御のための操作変数選択—, 計測自動制御学会論文集, **42-8**, 909/915 (2006)
 - 19) H. Ohno and E. Nakanishi: Optimal Operating Mode for a Class of Fermentation, *Biotechnology & Bioengineering*, **20**, 625/636 (1978)
 - 20) J. E. Jackson and G. S. Mudholkar: Control Procedures for Residuals Associated with Principal Component Analysis, *Technometrics*, **21**, 341/349 (1979)

《付 録》

A. リジン生産プロセス¹⁹⁾

ケーススタディに用いたリジン生産プロセスのモデルを示す.

$$\frac{dX}{dt} = \mu(S)X - \frac{Xu}{V} \quad (\text{A.1})$$

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{\mu(S)X}{0.135} + \frac{(S_0 - S)u}{V} \quad (\text{A.2})$$

$$\frac{dP}{dt} = Q(\mu)X - \frac{Pu}{V} \quad (\text{A.3})$$

$$\frac{dV}{dt} = u \quad (\text{A.4})$$

$$\mu(S) = 0.125S \quad (\text{A.5})$$

$$Q(\mu) = -384.0\mu^2 + 134.0\mu \quad (\text{A.6})$$

ただし, X は菌体濃度 [$\Delta\text{OD}/100$], S は基質濃度 [kg/L], S_0 はフィードの基質濃度 [kg/L], P はリジン濃度 [g/L], u は基質供給速度 [L/hr], V はタンク内液体積 [L] である. また, タンク体積 $V_{\max} = 1000 \text{ kL}$ とする.

シミュレーションにおける初期値は $X(0) = 0.035$, $S(0) = 2.52$, $P(0) = 0$, $V(0) = 60$ であり, フィードの基質濃度は $S_0 = 2.52$ とした.

〔著 者 紹 介〕

藤 原 幸 一 (学生会員)

2004年京都大学工学部工業化学学科卒業. 同年京都大学大学院工学研究科化学工学専攻修士課程入学. 現在に至る. 統計的プロセス運転監視および品質改善に関する研究に従事.

加 納 学 (正会員)

1992年京都大学工学部化学工学科卒業. 94年京都大学大学院工学研究科化学工学専攻修士課程修了. 同年同助手. 2004年同助教授. 現在に至る. プロセス・ケモメトリクス, プロセス制御, マイクロ化学プロセスに関する研究に従事. 平成12年度化学工学会奨励賞内藤雅喜記念賞, 2005年度計測自動制御学会論文賞武田賞などを受賞. 博士(工学).

長谷部 伸 治 (正会員)

1976年京都大学工学部化学工学科卒業. 81年京都大学大学院工学研究科化学工学専攻博士課程修了. 同年京都大学工学部化学工学教室助手. 89年同講師. 93年同助教授. 2003年同教授. 現在に至る. 環境調和型プロセスの最適設計, マイクロ化学プロセスに関する研究に従事 (工学博士).

大 野 弘 (正会員)

1967年京都大学工学部衛生工学科卒業. 69年京都大学大学院工学研究科衛生工学専攻修士課程終了. 同年協和醗酵工業入社. 72年神戸大学工学部化学工学科助手. 80年同助教授. 現在に至る. 化学プロセスのデータ解析と制御に関する研究に従事 (工学博士).