

●ソフトセンサーによる反応率の管理

Management of Chemical Reaction Using Soft Sensors

石川 京平^{a)}、橋本 直樹^{b)}
 Kyouhei Ishikawa, Naoki Hashimoto

Key Word : Soft Sensor, Machine Learning, Process Management

1 緒言

化学プラントのバッチ反応を目標反応率で停止するためには、反応液の採取、分析および分析結果を受けてのアクションが必要である(図1)。反応率が低い場合は反応を継続した後、一連の作業を繰り返すため人手と時間がかかる。

また、適切なタイミングで反応を停止できなかった場合、製品品質がばらつき、規格から外れるリスクが高まる。

この問題の解決策として、反応率と相関する分析計を新たに設置し、反応率の代替として連続的にモニターすることも行われている。しかし、設置コストや反応液の性状、法規制などの観点から分析計の設置が難しいケースもある。

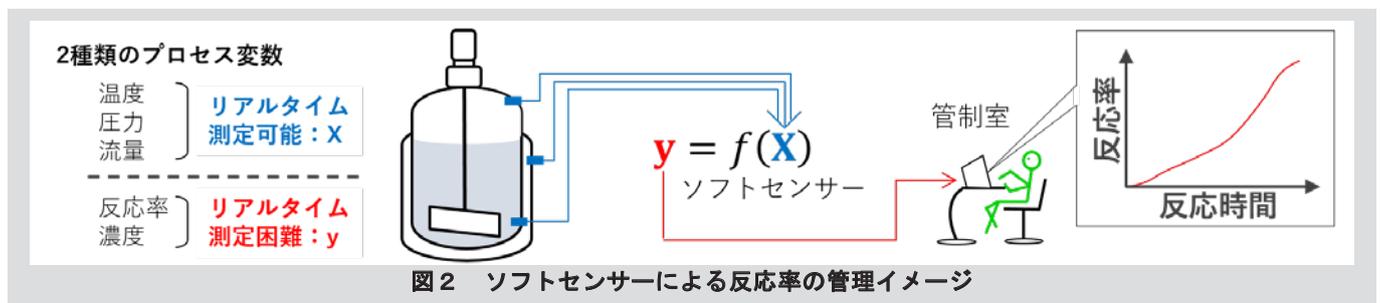
もう一つの解決策として、ソフトセンサーの利用が考えられる。ソフトセンサーとは、リアルタイムで測定可能な温度などのプロセス変数の値を用いて、反応率などのリアルタイムで測定困難なプロセス変数の値を予測するセンサーであり、検出部等の物理的な部品をもたないセンサーである(図2)。既設計器の値からソフトセンサーが構築できれば、新たに分

析計を設置する必要はない。ソフトセンサーを活用することで反応停止判断のための分析回数を削減できるため、作業負荷を軽減できる。また、分析の場合と異なり反応率が分かるまでに時間遅れが無いため、最適なタイミングで反応停止判断ができる。その結果、製品品質の安定化が期待できる。

本稿では、ソフトセンサーについて簡単に紹介したのち、アクリル酸エステル合成反応におけるソフトセンサーの有効性を検討した結果を報告する。

2 ソフトセンサー

物理的な計器によってプロセス変数を直接測定するセンサーをハードセンサーとよぶ。温度計や流量計などがこれに該当する。これに対して、ハードセンサーの測定値を入力して、目的のプロセス変数を計算で予測するセンサーをソフトセンサーとよぶ。物理的な計器ではなく、ソフトウェアとしてのセンサーであることからソフトセンサーとよばれており、様々な化学プロセスで活用されている^{1) 2)}。



* 東亜合成株式会社 R&D総合センター 基盤技術研究所
 Base Technology Laboratory, General Center of R&D, Toagosei Co., Ltd.
 ** 東亜合成株式会社 R&D総合センター 生産技術研究所
 Productive Technology Laboratory, General Center of R&D, Toagosei Co., Ltd.

統計学では、予測の対象となる変数を目的変数 y 、目的変数の予測に用いる変数を説明変数 X とよんでいる。ソフトセンサーは、説明変数 X と目的変数 y との間で構築された関数 $y = f(X)$ と考えることができる。ここで、説明変数 X は温度や圧力などリアルタイムで測定可能な値、目的変数 y は反応率などリアルタイムで測定困難な値である。ソフトセンサーを用いることで、反応率などの値をあたかもリアルタイムで測定しているかのように取得することができる。

ソフトセンサーは、過去に測定された目的変数 y と説明変数 X の間で回帰分析を行うことによって構築される。構築されたソフトセンサーによって目的変数 y をリアルタイムで予測できるが、あくまでも予測値であるため、実測値との誤差が十分に小さいことを確認する必要がある。

3 ソフトセンサーの有効性検討

当社のアクリル酸エステル合成プロセスのデータを用いて、ソフトセンサーの有効性を検討した。このプロセスはバッチプロセスであり、目標反応率である 77.8~80.0%に到達した時点で反応を停止させる。目標反応率に到達しているかどうかは、過去の反応時間の実績を目安にして分析を行い確認している。1バッチあたり2、3回の分析が必要になるケースもあり、手間と時間がかかる作業である。そこでソフトセンサーによって分析の回数を減らすことが可能かという視点で検討を行った。具体的には、目標反応率が $78.9 \pm 1.1\%$ であることから 1.1%以下の誤差で予測することが可能かどうか検討した。また、最適なタイミングでの反応制御が可能であるか確認するため、1バッチの反応中に反応率をリアルタイムで予測できるか検討した。

3.1 検討に用いたデータと手法

検討には過去 32 バッチ分のデータを使用した。ハードセンサーの測定値は1分毎に自動取得されており、バッチ毎に保存されている。このような時系列データの中から、反応液をサンプリングした時点のデータを抜き出して1つの表に集約し、反応率の分析値を加えて検討データとした(図3)。分析によって得られた反応率を目的変数 y とし、反応時間と計器の値を説明変数 X とした。

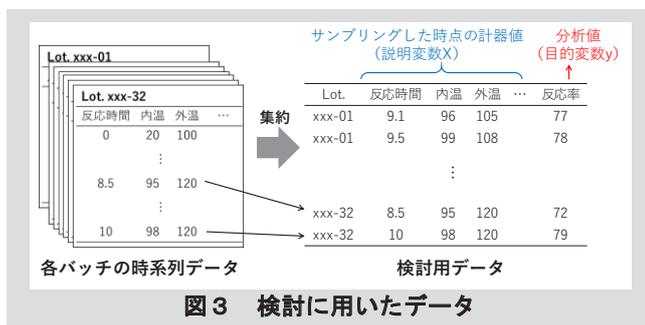


図3 検討に用いたデータ

ソフトセンサーの構築には、線形回帰手法の一つである Partial Least Squares (PLS) 法³⁾を用いた。PLS法は目的変数 y との共分散が最大になるように主成分を抽出してから最小二乗法によってモデルを構築する手法である。多重共線性を回避できるといったメリットがあることから、ソフトセンサーの構築によく利用される手法である。

本検討においては、説明変数 X のほとんどが反応の進行に伴って線形的に変化することから線形回帰手法が適していると判断した。また、説明変数 X にはノイズが含まれることから、ノイズの影響を受けにくい線形回帰手法である PLS 法を採用した。

ソフトセンサーの予測精度評価には、Leave-one-out (LOO) 法を用いた。LOO法による予測精度の評価手順を以下に示す(図4)。

- ①全データのうち1つをテストデータ、残りを学習データとして分割する
- ②学習データを PLS 法でフィッティングしてテストデータで誤差を計算する
- ③全データが1回ずつテストデータになるように①と②を繰り返し、それらを集計して総合的な予測精度とする

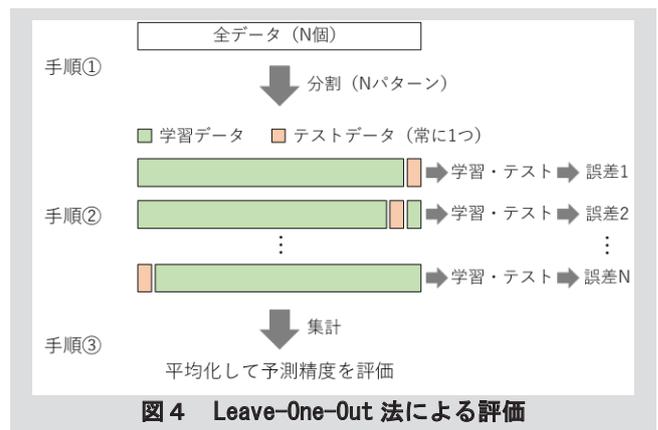


図4 Leave-One-Out 法による評価

3.2 ソフトセンサーの予測誤差

ソフトセンサーを構築する前に、反応時間と反応率にどのような関係があるか確認した(図5)。反応時間が長くなると反応率は高くなる傾向があり、高い相関を示していることがわかる。しかし、目標反応率の範囲に着目すると、同じような反応時間でも目標反応率範囲に入る場合と入らない場合がある。つまり、毎バッチ同じ時間で反応停止をすることは困難であると考えられる。

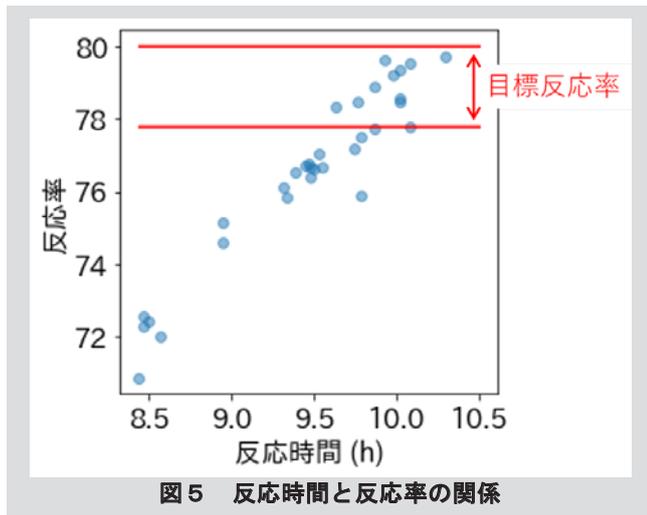


図5 反応時間と反応率の関係

反応時間から反応率を予測した場合の予測誤差と、ソフトセンサーで反応率を予測した場合の予測誤差を比較した結果を表1に示す。いずれの場合も平均誤差は十分に小さい結果となった。しかし、最大誤差に着目すると、反応時間による予測では目標である誤差 1.1%以下を達成できていない。それに対し、ソフトセンサーによる予測では目標反応率の範囲で誤差 1.1%以下を達成できることが分かった。したがって、反応停止判断のための分析回数を削減することが可能だと考えられる。具体的には、現状1バッチあたり2、3回の分析を行っているところ、確認のための1回の分析に減らすことは十分に可能だと考えられる。

表1 目標反応率*での予測誤差

	平均誤差	最大誤差
反応時間で予測	0.64	1.20
ソフトセンサーで予測	0.36	0.71

* 77.8~80.0%

3.3 ソフトセンサーによる反応率のリアルタイム予測

前項で、今回構築したソフトセンサーの誤差が十分に小さいことを示した。このソフトセンサーを利用してリアルタイムで反応率を予測した結果を図6に示す。ソフトセンサーの構築に使用したデータが目標反応率近くに偏っているため、反応初期の予測値は信頼できない。一方で、目標反応率近くでは実測値に近い値を予測できていることが確認できる。

表1でみたように、本検討では目標反応率の範囲はソフトセンサーが有効な範囲であるといえる。ソフトセンサーによる予測値が約79%となった時点で反応停止すれば、目標反応率である77.8~80.0%の範囲内に収めることが可能だと考えられる。このようにソフトセンサーが有効な範囲を適切に設定すれば、任意の反応時間における反応率を取得できる。したがって、ソフトセンサーが有効な範囲内において、最適なタイミングで反応停止判断を行うことが可能だと考えられる。

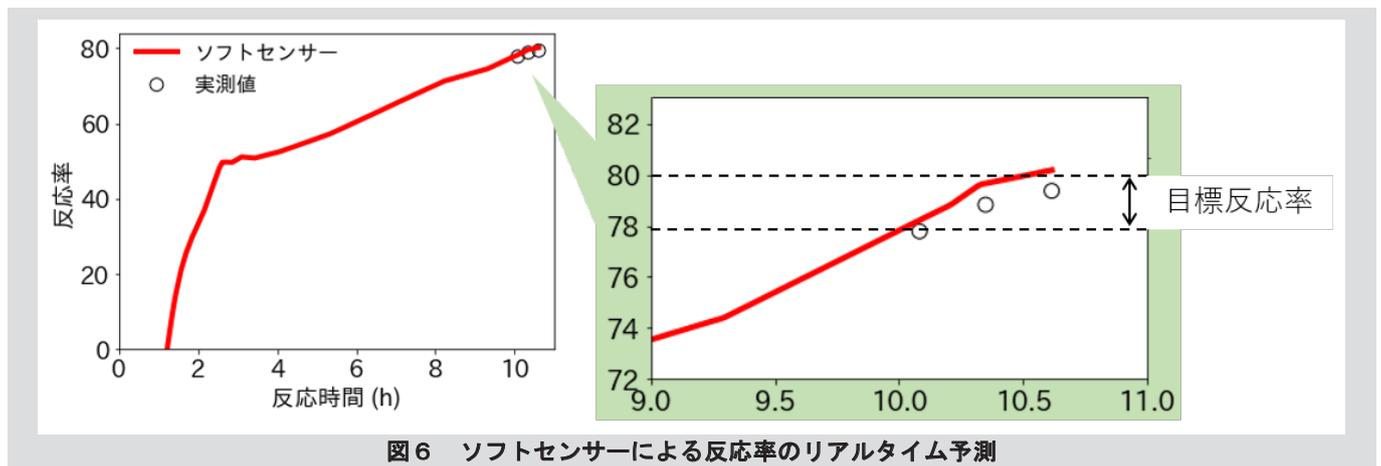


図6 ソフトセンサーによる反応率のリアルタイム予測

4 結論

アクリル酸エステル合成プロセスにおいて、ソフトセンサーの有効性を検討した結果、実際の反応率を小さい誤差で予測できることが確認できた。データ数を増やすことで更に誤差の小さいソフトセンサーを構築することも可能である。分析値の代わりにソフトセンサーの予測値を利用することで、分析回数の削減や最適なタイミングでの反応制御が可能になる。本稿では触れなかったが、ソフトセンサーを実運用してく際には、ソフトセンサーの劣化*などの問題も存在する。今後は、これらの課題に対する検討や他のプロセスに対する有効性の検討を行い、操業の省力化・品質の安定化に取り組んでいく。

*：ソフトセンサーの説明変数となっているハードセンサーの劣化や異常によって正しい予測値が得られないこと。

引用文献

- 1) H. Kaneko, K. Funatsu, *Ind. Eng. Chem. Res.*, **54**, 700 (2015).
- 2) H. Kaneko, K. Funatsu, *AIChE J.*, **62**, 717 (2016).
- 3) S. Wond, M. Sjöström, L. Eriksson, *Chemom. Intell. Lab. Syst.*, **58**, 109 (2001).