

化学プラントシミュレータのための深層学習モデル

Deep Neural Networks for a Chemical Plant Simulator

木村 大地^{*1}
Daichi Kimura

島田 健一郎^{*1}
Kenichiro Shimada

泉谷 知範^{*1}
Tomonori Izumitani

^{*1} NTT コミュニケーションズ 株式会社
NTT Communications Corporation

At present, automatic control techniques such as PID control are used in many manufacturing processes. Although it is necessary to set appropriate control parameters by trial and error for automatic control, it is very expensive to use real environment because of problems such as production schedule and plant stability. Therefore, a highly accurate simulator reflecting the plant condition is required for further upgrading of the manufacturing process. In order to reproduce the plant condition, it is necessary to model the reaction inside the real plant using differential equations. However, in the actual plant, there are many cases in which the accurate numerical model preparation is difficult due to the complexity of the phenomenon. On the other hand, the utilization of IoT data has attracted attention in recent years due to the improvement of edge devices, sensors, and networks. In this paper, we deal with the problem of creating a simulation model from the collected process data using the deep learning method. To verify the proposed method, we constructed a simulator based on a numerical model of a vinyl acetate plant and confirmed reproducibility using the process data output from the simulator.

1. はじめに

多くの製造業において制御や予測などの観点から、製造プロセスの高精度なシミュレーションが重要視されている。一般的にプラントをモデル化するためには、物質収支やエネルギー収支を考慮した微分方程式で記述する必要がある。しかしながら、数式に関する高度な専門知識を要するため、このようなモデル化は実際の研究開発の現場での簡便な活用が困難である。さらに、その物性値や反応過程に多くの近似を導入する必要があり、現実のプロセスを反映することができない場面が多く存在する。

このような状況において、プラントにおけるデータの収集、可視化、シミュレータを網羅的に行い、計算機上に仮想的なプラントを構築することで、生産管理、異常検知、予防保全、プラントの安定化等を図る Digital Twin [Uhlemann 2017] が注目されている。特に、高精度なプラントのシミュレーション環境を構築できれば、現実のプラントを使わずに様々な状態を再現することで、異常の予測や適切な制御手法、制御パラメータの探索を計算機上で低コストに行うことが可能となる。

製造業をターゲットとし、プロセスデータの値を予測する研究としては、ソフトセンサ技術がある [Izumitani 2017]。一般に、多変量時系列データとして表現されるプロセスデータに、移動窓を適用し、窓内の値から目的のプロセスデータを推定する回帰問題として扱われる。PLS や SVR に基づく手法や、とくに近年では、多層パーセプトロンや LSTM などの深層学習手法がソフトセンサや類似の問題に対して使われている。いずれの手法においても、精度の高い推定を行うためには、広い幅の窓を取り、必要に応じて窓を区間分割して平均を取るなどの特徴抽出が行われているが、最適な特徴抽出法の探索が必要になったり、移動窓をシフトしながら特徴抽出を行い学習データを収集しなくてはならない等の問題があり、大規模データを用いたシミュレーション環境構築の支障となっていた。特に、高精度なプラントのシミュレーション環境を構築できれば、現実のプラントを使わずに様々な状態を再現することで、異常の予測や適切な制御手法、制御パラメータの探索を計算機上で自動的に行うことが可能となる。

そこで本研究では、移動窓を明示的に指定せずに、プロセスにおいて得られる各センサに基づきシミュレーション環境を構築することを目的とした。このため、Causal 1D Dilated Convolution [Van Den Oord 2016] を用いた多層のニューラルネットワークによるプロセスデータの予測技術を提案する。

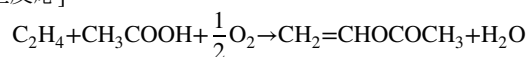
2. 手法

今回対象とするような製造業の実プロセスデータを多数取得することは困難である。そのため、古くから研究が行われている、酢酸ビニル製造プラントシミュレータの反応器を対象として、提案手法の有効性の検証を行った。この製造プラントは非線形性や時間遅れを持つ大規模な系であり、制御工学の分野においてベンチマークとして広く用いられている。この数値シミュレーションによって生成したデータに基づき、提案手法のモデルを学習、その結果の評価を行った。

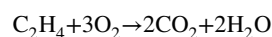
2.1 酢酸ビニル製造プラント

Luyben ら [Luyben 1998] によって提案されたものと同等のものを実装し解析対象のデータを生成した。反応器において、エチレン (C_2H_4)、酢酸 (CH_3COOH)、酸素 (O_2) を原料として、以下の反応式で示される発熱反応が生じる。

[主反応]



[副反応]



主生成物として酢酸ビニル ($CH_2=CHOCOCH_3$) を、副生成物として水蒸気 (H_2O) と二酸化炭素 (CO_2) を生じる。また、不活性不純物としてエタン (C_2H_6) が C_2H_4 に混合されている。いずれの成分も気体である。

反応器における物質、エネルギー収支式はそれぞれ、

[物質収支]

$$\epsilon \frac{\partial C_i}{\partial t} = -\frac{\partial(C_i v)}{\partial z} + \phi \rho (\theta_{1i} r_{1i} + \theta_{2i} r_{2i})$$

連絡先: 木村大地, NTT Communications, d.kimura@ntt.com

[エネルギー収支]

$$\left(\varepsilon \sum_i C_i C_{p_i} + \rho C_{p_b} \right) \frac{\partial T}{\partial t} = - \frac{\partial (v \sum_i (C_i C_{p_i}) T)}{\partial z} - \phi \rho (E_1 r_{1i} + E_2 r_{2i}) - Q$$

の微分方程式で与えられる。 C_i はそれぞれの成分の濃度 (mol/m³)、 v は体積流量 (m³/min)、 ε は触媒多孔率、 ϕ は触媒活性率、 ρ は触媒密度 (kg/m³)、 θ_{1i} 、 θ_{2i} はそれぞれの成分における主反応・副反応の化学量論数、 C_{p_i} はそれぞれの成分の熱容量 (kcal/kg/°C)、 C_{p_b} は触媒熱容量 (kcal/kg/°C)、 T は温度、 E_1 、 E_2 は主反応・副反応の反応熱、 Q は外部からの単位体積あたりの熱流束である。それぞれの反応は発熱反応であるため、反応器外殻から冷却されており、この温度は PI コントローラで制御されている。

この条件のもと作成したシミュレータに対し、入力値として反応器入り口温度・入り口圧力・入り口流量・外殻温度を与え、出力値として出口温度を得た。これを 1 秒間隔で 4 日分生成し、解析のためのデータセットとした。このうち、最初の 90 時間分を学習データ、残りを検証データとして用いた。またそれぞれのセンサ値には 1% の測定誤差が存在すると仮定した。

2.2 ニューラルネットワークモデル

本研究でもちいた Causal 1D Dilated Convolution にもとづく多層ニューラルネットワークの構造の概略を Fig.1 に示す。まず入力データに対し列方向に畳み込み演算を行い、センサデータ間の依存関係の特徴抽出する。その後、1D Dilated Convolution によって時間方向に対して演算することで、移動窓と同様に、時系列を考慮しながら予測することが可能である。また、学習の効率化のため Skip Connection を導入している。

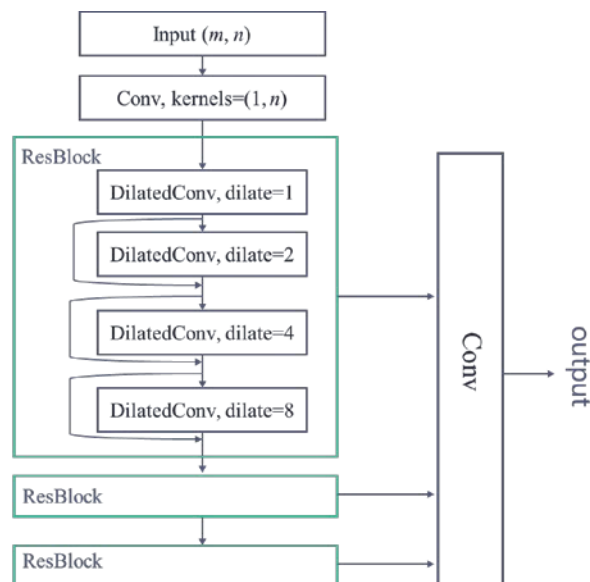


Fig.1 提案手法におけるネットワーク構造

3. 結果

今回提案するモデルによる予測結果を Fig.2 に示す。横軸はシミュレーション時間、縦軸は出口温度である。本モデルの予測値を青線、酢酸ビニルプラントシミュレーションの実測値を赤線で示している。本モデルの結果は、酢酸ビニルプラントシミュレ

ーションの結果をよく追従しており、RMSE において 0.268 であった。従って、今回提案したモデルは、センサデータの時系列変化を伴う酢酸ビニルプラントの状態を、精度良くモデル化可能であった。

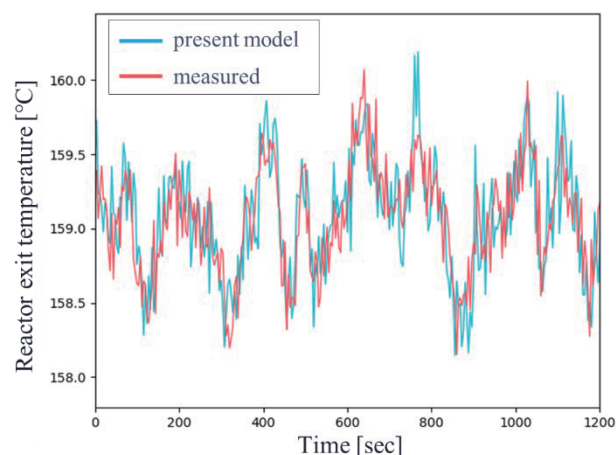


Fig.2 提案手法による予測結果とシミュレーションによる出口温度の結果

4. 終わりに

本研究では、酢酸ビニル反応器を対象として、Causal 1D Dilated Convolution にもとづくシミュレーションモデルを提案した。その結果、酢酸ビニルプラントの状態を精度良く再現可能であった。

今後の課題として、Digital Twin 実現のため今回示した深層学習をもちいたモデリングと PID 制御機とを組み合わせ、より現実に近い大規模かつ汎用性の高いモデルを提案する必要がある。そのもとで、制御安定化のためのパラメータを導き出すことが課題となっている。

参考文献

- [Izumitani 2017] Izumitani, T., Kiritoshi, K., Shimada, K. and Koji, I.: Predicting Quality of Gas Product Using Neural Networks, *The 31st Annual Conference of the Japanese Society for Artificial Intelligence*, (2017).
- [Uhlemann 2017] Uhlemann, T., Lehmann, C. and Steinhilper, R.: The Digital Twin: Realizing the Cyber-Physical Production System for Industry 4.0, *Procedia CIRP*, Vol. 61, pp. 335-340, (2017).
- [Van Den Oord 2016] Van Den Oord, A., Dieleman, S., Zen, H., Simonyan, K., Vinyals, O., Garves, A., Kalchbrenner, N., Senior, A. and Kavukcuogul, K., WaveNet: A Generative Model for Raw Audio, *arXiv preprint, arXiv:1609.03499* (2016).
- [Luyben 1998] Luben, M. and Tyreus, B.: An industrial design/control study for the vinyl acetate monomer process, *Computers Chem. Engng*, Vol. 22, No. 7-8, pp. 867-877, (1998).