

論文

時系列データを活用したデータ駆動型モデルによる
アルミニウム溶解プロセスの最適化*

蓬田 翔平**, 小林 佐保***, 山本 佑樹****

Optimization of Aluminum Melting Process by Data-Driven Model
Using Time Series Data*

Shohei Yomogida**, Saho Kobayashi*** and Yuki Yamamoto****

Improving the melting efficiency in aluminum melting furnaces has significant cost and environmental benefits. A large amount of data, including time-series data, have been accumulated from the use of aluminum melting furnaces, but no effective method has been established to utilize these data. In this study, a data-driven model was constructed by combining two machine learning methods: variational autoencoder (VAE) and artificial neural network (ANN). VAE was applied as a model to quantify time series data into 18 latent variables, while ANN was constructed as a model to predict fuel gas consumption from latent variables and other characteristics. In addition, we attempted to optimize aluminum melting process by simulation using the data-driven model.

Although the aluminum melting process was complicated, we were able to construct a highly accurate prediction model ($R^2 = 0.69$). Furthermore, the characteristics of the fuel gas flow rate in the case of high melting efficiency were determined by simulation. In fact, the results of modifying the operating conditions of melting furnace based on the knowledge obtained confirmed a significant improvement in melting efficiency. These results indicate that the data analysis method used in this study is effective for process optimization.

Keywords: variational autoencoder, time series data, process modelling, machine learning

1. 緒言

アルミニウムの溶解工程では電気やガス等のエネルギーを多量に使用するため、燃料コストが高くCO₂排出量も多い工程である。したがって、溶解操作条件を最適化することは、コスト面、環境面で大きな効果を持つ。本研究では、アルミニウムDC鋳造ラインにおける溶解工程の最適化の検討を行った。

アルミニウムDC鋳造ラインにおける溶解工程は、

複数の変動因子を含む複雑な工程である。例えば装入原料の形状や装入量、合金系等が変化することで溶解効率（燃料原単位や溶解速度等）は変動する。また、除滓や溶湯の攪拌などの定常作業に加えて、定期整備等の非定常な作業も存在する。更に、溶解から鋳造までを一連で行うDC鋳造ラインでは、下工程で発生したトラブルの影響を受けることもある。以上のように、工程が複雑であるために溶解操作条件の最適化は困難である。

* 本稿の主要部分は、鋳造工学, **95** (2023), 539-545 に掲載。

The main part of this paper has been published in Journal of Japan Foundry Engineering Society, **95** (2023), 539-545.

** (株) UACJ マーケティング・技術本部 R&D センター プロセス研究部

Process Technology Research Department, Research & Development Center, Marketing & Technology Division, UACJ Corporation

*** (株) テクノプロ テクノプロ・IT 社 (元)(株) UACJ R&D センター 第二研究部

TechnoPro IT Company, TechnoPro, Inc. Formerly, Research Department II, Research & Development Division, UACJ Corporation

**** (株) UACJ マーケティング・技術本部 R&D センター プロセス研究部, 博士 (工学)

Process Technology Research Department, Research & Development Center, Marketing & Technology Division, UACJ Corporation, Ph. D.(Eng.)

複雑な現象の最適化には、モデル化とシミュレーションが有効である。従来は、数理モデルを用いた物理シミュレーションが行われてきた^{1)~5)}。しかしながら、複雑な工程において最適な操作条件を見出すためには、多数の条件を変量してシミュレーションを行う必要があり、多大な時間を要することになる。そこで、本研究では操業時に得られたビッグデータを活用したデータ駆動型モデルを用いたシミュレーションを提案する。データ駆動型モデルは入力データと出力データとの関係を高度に機械学習したモデルであり、これを用いたシミュレーションによって入力データの最適設定値を探索することができる^{6),7)}。したがって、溶解炉の実操業データを用いたデータ駆動型モデルを構築し、溶解効率の変動をシミュレーションすることで最適な操作条件を導出することが期待できる。

溶解工程に限らず、製造現場でセンシングされるデータの多くは時系列データである。これは、常時データ測定を行うことが最も作業負荷を低減させるためである。従来は、高次元の時系列データから人間が考え得る低次元の特徴量（工程を代表する値）を抽出して蓄積していたが、近年ではデータ記録媒体の小型化、低価格化に伴い、時系列データ全てを記録することも可能である。しかしながら、データ駆動型モデルの構築において、このような時系列データの取り扱いは課題となる。先述のような特徴量を抽出してモデリングする方法では、次元の大幅な削減によってモデル精度が上がらないことが考えられる。また、特徴量を決定する人間の先入観等によって偏った解析結果を生む場合もある。一方で、蓄積された時系列データ全てを解析に用いることは、不要なデータによるモデル精度の低下や計算コストの増大に繋がる。したがって、高次元の時系列データから効果的に低次元の特徴量を抽出する手法が求められている。

本研究では、変分自己符号化器 (Variational Auto-Encoder: VAE) と階層型ニューラルネットワーク (Artificial Neural Network: ANN) を組み合わせたデータ駆動型モデルを提案する。VAEは高次元データから効果的な特徴量を得るアルゴリズムとして提案されている⁸⁾。また、ANNは機械学習モデルとして幅広く適用可能なモデルの一つである。これらを組み合わせることで時系列データの特徴を考慮したデータ駆動型モデルの構築が期待される。更に、得られたモデルを用いたシミュレーションについても併せて実施し、溶解効率を向上させるための操作条件の検討を行った。

2. 実験方法

2.1 使用データ

本モデルで使用したデータをTable 1に、各データのセンシング位置をFig. 1に示す。説明変数に用いたデータは1秒間隔でサンプリングされた時系列データであるプロセスデータと、溶解チャージ毎のデータである代表値データに分類される。ここではプロセスデータ4種、代表値データ2種の合計6種のデータを使用した。目的変数には溶解チャージにおける燃料使用量を用いた。これらの説明変数、目的変数において、全てのデータに異常値がない2,331チャージ分のデータを使用してモデル構築を行った。

プロセスデータにVAEを適用するために、データの次元を統一する必要がある。溶解1チャージにかかる時間が主に10,000秒から30,000秒の範囲に分布していることより、プロセスデータの次元数を30,000次元に成形して使用した。この際、30,000次元を超えるプロセスデータについては30,000次元以降のデータを切り捨てとし、30,000次元に満たないプロセスデータについては不足データ分をゼロ埋めした。

2.2 モデル構築

モデル構築のフローをFig. 2に示す。取り扱うデータの分布が大きく異なっている場合、機械学習の適用が難しい。そこで、プロセスデータは、最小が0、最大が1となるデータに、代表値及び目的変数は、平均が0、分散が1となるデータに標準化した後に使用した。燃料使用量を予測するまでのプロセスにおいて、VAEと

Table 1 List of data used in analysis.

Data Types		Data
Explanatory Variable	Process Data	Combustion Air Flow Rate Fuel Gas Flow Rate Exhaust Gas Flow Rate Furnace Pressure
		Raw Material Amount Time Taken in Melting
	Objective Variable	Fuel Gas Consumption

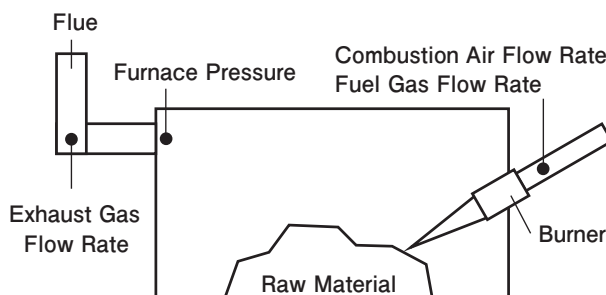


Fig. 1 Schematic diagram of melting furnace.

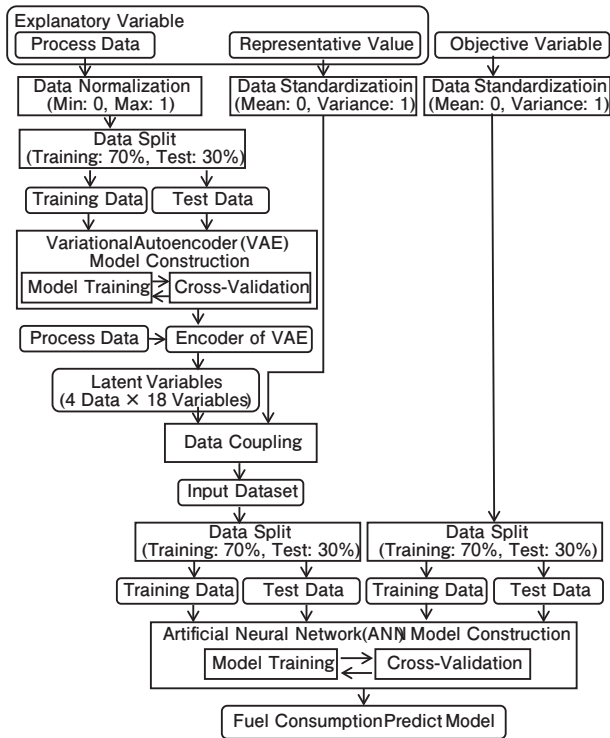


Fig. 2 Construction flow of fuel consumption prediction model.

ANNの2つの機械学習モデルを利用している。以下でそれぞれの内容について説明する。

2.3 VAEによる特徴量抽出

VAEは自己符号化器 (Autoencoder, AE) の一種であり、入力データと出力データが一致するようにネットワークの重みを学習する教師無し機械学習アルゴリズムの一つである⁸⁾。VAEの概念図をFig. 3に示す。VAEは符号化器 (Encoder) と復号化器 (Decoder) の2つのニューラルネットワークからなり、入力層、中間層、出力層で構成される。ここで、 i 個のユニットで構成される中間層の値は入力データの特徴を反映する変数であり、潜在変数 (Z_i) と呼ぶ。したがって、VAEやAEでは潜在変数の次元数を入力層の次元数よりも少なくすることで、高次元入力データを低次元の潜在変数に変換することができる。VAEの特徴は、潜在変数に正規分布のゆらぎを持たせている点である。通常のAEでは既知の入力データについては潜在変数を正しく対応させることができるが、入力データが既知のパターンから外れた場合、潜在変数を対応させることができない。VAEは潜在変数にゆらぎを持たせることでこの欠点を克服している。

本研究で検討したVAEのモデル構造をFig. 4に示す。なお、ここではVAEの中間層における処理に関わる構造は省略している。深層学習における層の数や各

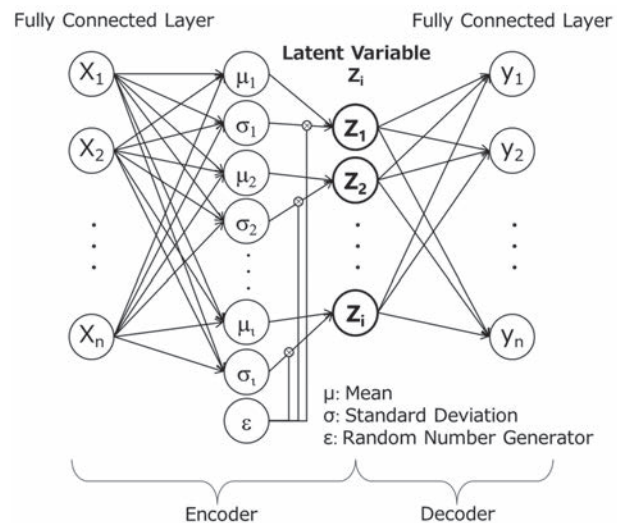


Fig. 3 Conceptual diagram of VAE.

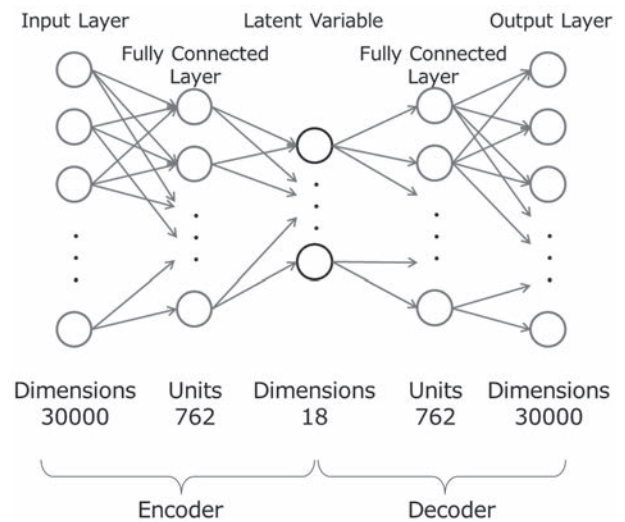


Fig. 4 Structure of constructed VAE model.

層のユニット数、潜在変数の次元数はモデル精度に大きく影響する。ここでは、エンコーダ3層 (入力層、全結合層、潜在変数)、デコーダ3層 (潜在変数、全結合層、出力層) の合計5層のモデルとした。これは、非線形性を考慮したニューラルネットワークモデルとしては最小構成であり、計算コストの抑制を目的としている。また、潜在変数の次元数を増やすとモデル精度が向上するが、一方でモデルが複雑になりすぎて過適合を引き起こす。本検討では、潜在変数の次元数を最適化するために、全結合層のユニット数を200と仮定した状態で潜在変数の次元数を2-100まで変量してモデル学習を行い、赤池情報量基準 (AIC) を用いて適合度を評価した⁹⁾。AICは、現象のモデル推定においてできるだけ少ないパラメータで正確に表現 (推定量に対する誤差を最小化) するための基準として用いられるものである。AICを評価した結果がFig. 5である。潜在変数の次元数が40程度まではAICが低減し、その後次元数が

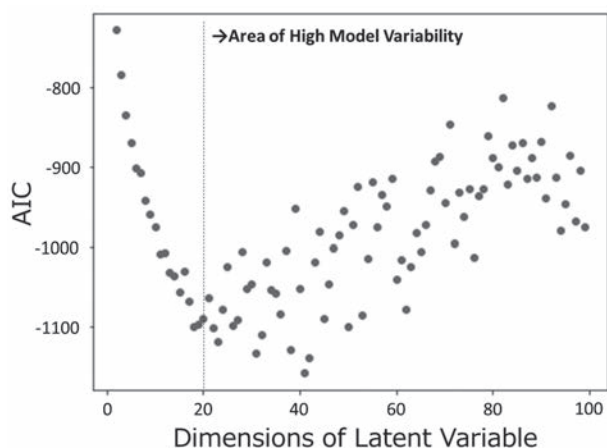


Fig. 5 Variation of AIC with number of dimensions of latent variable.

増加するにつれてAICも増大した。また、潜在変数が20を超える範囲ではAICの変動が大きくなることがわかった。これは、潜在変数の増大に伴い構築されるモデルに変動が生じることを意味する。したがって、本検討では潜在変数が20を超えない範囲で最もAICが小さくなった18次元を潜在変数の次元数として選定した。最後に、エンコーダ及びデコーダの全結合層のユニット数をベイズ最適化により決定した¹⁰⁾。ベイズ最適化は、ハイパーパラメータの最適化に用いられる手法の1つで、アルゴリズムとしてはガウス過程、Tree-Structured Parzen Estimator (TPE) を利用したものなどがある¹¹⁾。ここではTPEを用いたベイズ最適化を実施し、全結合層のユニット数762を決定した。

モデル学習では交差検証を行った。これは、全データの一部を学習データとしてモデル学習に使用し、残ったデータをテストデータとしてモデル評価に使用する手法である。本手法によってモデルの過学習を抑制し、汎化性を維持したモデル構築を行った。

以上で構築したモデルより、得られた入力データと出力データの間関係をFig. 6に示す。入力データには細かいデータの変動が存在するが、出力データではこの変動が小さくなり、マクロなデータ変動を再現していることが確認される。VAEではFig. 4のとおり潜在変数18次元の中間層を経てデータが出力されるため、ここで示した出力データは18次元の潜在変数から生成されたものであると言える。したがって、VAEで得られた18次元の潜在変数が30,000次元の入力データの特徴を良く反映した特徴量であると判断できる。ここで得られた潜在変数を以降で構築する燃料使用量予測モデルの入力データとして使用することで時系列データの特徴を反映したデータ駆動型モデルの構築を行った。

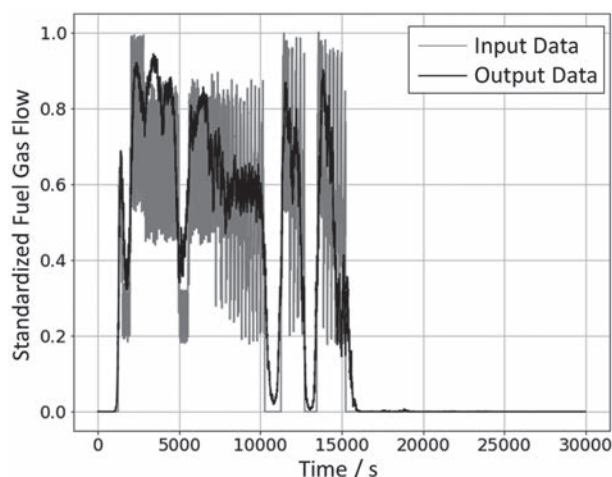


Fig. 6 Input and output data for VAE.

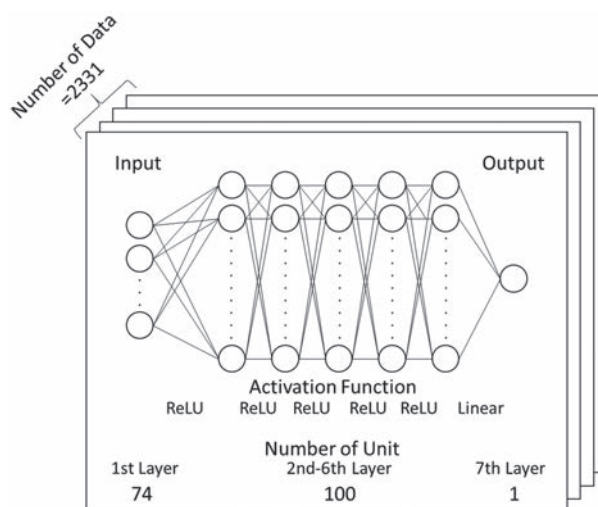


Fig. 7 Model structure of ANN.

2.4 ANNによる燃料使用量予測

VAEより得られた潜在変数(4種×18次元)と代表値データ(2種×1次元)を結合して入力データとし、ANNにより燃料使用量を予測する機械学習モデルを構築した。ANNのモデル構造をFig. 7に示す。本モデルでは、入力層のユニット数を74、中間層を5層、中間層のユニット数をそれぞれ100、出力ユニット数を1とし、活性化関数にReLU (Rectified Linear Unit) 及び線形関数を用いて学習を行った。ANNによる機械学習では、出力データが教師データに近い値になるように繰り返し学習を行う。ここでは教師データとして燃料使用量を与え、出力データが燃料使用量に近くなるようにモデル内のパラメータを学習している。学習時には過学習対策として前項と同様に交差検証を行い、テストデータに対する予測精度が最も高くなるモデルを最適な予測モデルとした。

3. 結果と考察

3.1 予測モデルの評価

構築したモデルより得られた燃料使用量の予測値と実際の燃料使用量の関係をFig. 8に示す。決定係数(R^2)は0.69であり、複雑な工程を対象としたモデルとしては予測精度が高いと言える。更に予測精度を向上させるためには、モデル構造や機械学習で設定されるハイパーパラメータの最適化、入力データの追加等が有効である。ここでは入力データにVAEより得られた潜在変数を用いているため、各時系列データの特徴、つまり溶解開始から30,000秒間の各測定値の推移が燃料使用量の増減に与える影響を考慮したモデルであると言える。したがって、得られたモデルを解析することで燃料使用量を低減させるための操業条件を導出することが期待される。なお、本モデルのVAEではFig. 6のとおり時系列データの微小な変動を軽視した特徴量化を行っている。これらの微小な変動による影響を考慮する場合にはVAEモデルの改良が必要である。

3.2 データ駆動型モデルを用いたプロセス最適化

構築したモデルを用いてシミュレーションを行うことで溶解プロセスを解析した。シミュレーション方法をFig. 9に示す。ここでは、溶解工程への影響度が最も大きいと考えられる燃料ガス流量を対象に解析を行った例を示す。シミュレーションはデータセットの作成とモデルを用いた燃料使用量予測を繰り返すことで実施した。データセットの作成では、対象とする1つの潜在変数を最小値から最大値の範囲において20水準で変量し、対象としない潜在変数やその他の入力データは全て中央値とした。その後、作成したデータセットを燃料使用量予測モデルに入力し、燃料使用量の予測を行った。燃料ガス流量の全ての潜在変数に対して評価した結果をFig. 10に示す。これより、それぞれの潜在変数は燃料使用量に対して様々な影響を有することが確認される。次に、各潜在変数について中央値 $\pm$ 標準偏差の範囲において予測される燃料使用量が低くなる(溶解効率が向上する)条件と予測される燃料使用量が高くなる(溶解効率が低下する)条件を求めた(Table 2)。最後に、燃料ガス流量の潜在変数をTable 2のとおりにしたデータセットをVAEのデコーダモデルに入力することで、溶解効率が低い場合と高い場合に代表的な時系列データを生成し、解析を行った。

溶解効率が低い若しくは低いと予測される燃料ガス流量の推移をFig. 11に示す。グラフの縦軸は、燃料ガ

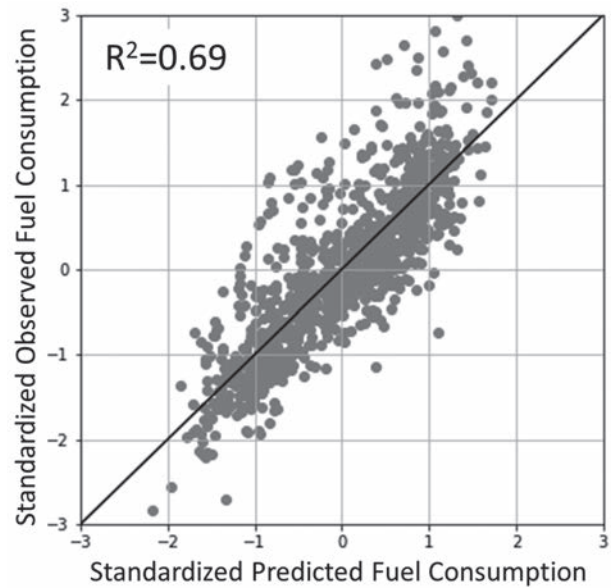


Fig. 8 Relationship between predicted and observed fuel consumption.

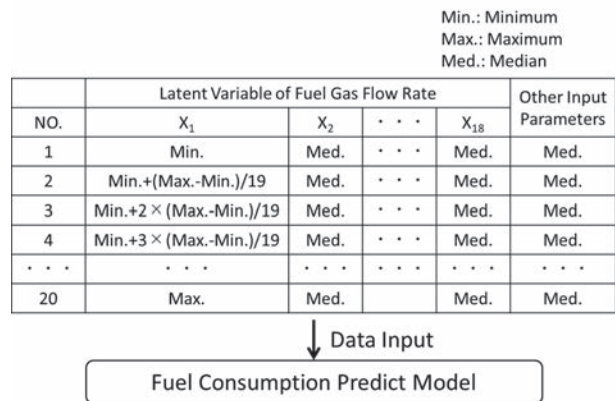


Fig. 9 Simulation method for changes in fuel consumption due to latent variables.

ス流量の最小値を0、最大値を1に標準化した値である。これより、溶解効率が低い場合は0-15,000秒の範囲で溶解が完了するチャージであることがわかった。一方で、溶解効率が低い場合は、溶解開始から17,000秒程度で一旦燃料ガス流量が低下し、その後20,000-30,000秒の範囲で再度ピークが現れる特徴が見られた。これは、溶解時間が不十分でバーナを複数回にわたり稼働させたチャージや、 casting trouble等で保持時間が長くなったチャージの特徴を表していると考えられる。これらの結果については、何れも従来の知見と矛盾しない結果であった。

0-10,000秒の間を装入原料が溶け落ちるまでの段階と捉え、燃料ガス流量の比較を行う。溶解効率が低い場合には、0-7,500秒の燃料ガス流量が高いことが確認された。炉内で原料が固体である時は、バーナからの

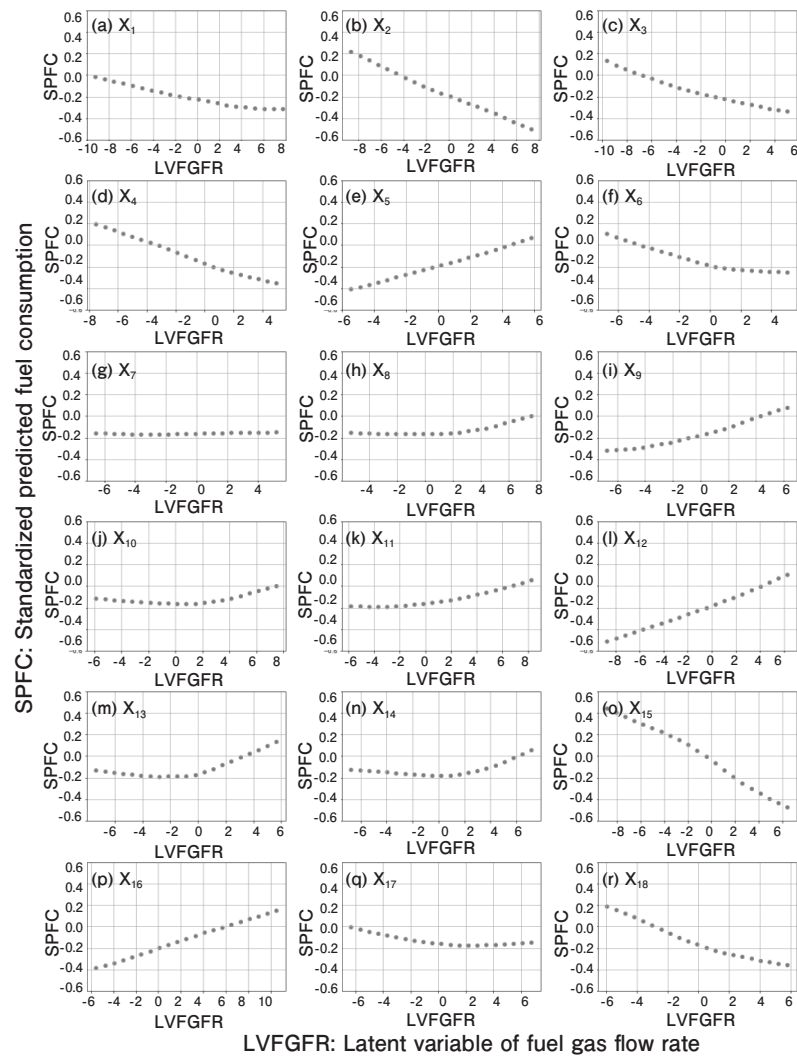


Fig. 10 Relationship between predicted fuel consumption and latent variable of fuel gas flow rate.

Table 2 Dataset used for simulation.

Latent Variable	Med.: Median Std.: Standard Deviation	
	High Fuel Consumption	Low Fuel Consumption
X1	Med. - Std.	Med. + Std.
X2	Med. - Std.	Med. + Std.
X3	Med. - Std.	Med. + Std.
X4	Med. - Std.	Med. + Std.
X5	Med. + Std.	Med. - Std.
X6	Med. - Std.	Med. + Std.
X7	Med.	Med.
X8	Med. + Std.	0
X9	Med. + Std.	Med. - Std.
X10	Med. + Std.	0
X11	Med. + Std.	Med. - Std.
X12	Med. + Std.	Med. - Std.
X13	Med. + Std.	-2
X14	Med. + Std.	0
X15	Med. - Std.	Med. + Std.
X16	Med. + Std.	Med. - Std.
X17	Med. - Std.	2
X18	Med. - Std.	Med. + Std.

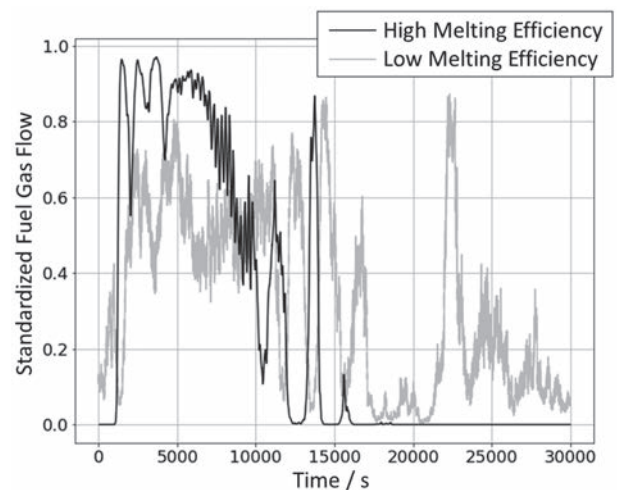
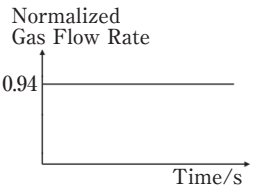
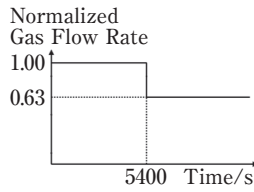


Fig. 11 Time series data generated by VAE when high/low melting efficiencies are expected.

火炎の噴射による対流伝熱の効果を高めることが有効であり、炉体が十分に加熱された溶解中期以降は輻射熱による入熱が支配的になることが知られている。したがって、シミュレーションで得られた溶解初期のガ

Table 3 Conditions for melting experiment.

Parameter	Condition 1	Condition 2
Gas Flow Rate Settings		
Weight of Raw Materials / t	10–50	
Number of Chrges	1000	

ス流量の差は、対流伝熱を高めることが効果的であることを反映した結果であると考えられる。以上のとおり、時系列データを活用したデータ駆動型モデルを用いてシミュレーションを行うことによって、溶解効率に影響を与える操業パラメータの特徴を時系列上で解析することが可能であった。

3.3 実験による解析結果の妥当性確認

解析結果の妥当性を確認するため、溶解炉を用いた実験を行った。使用した溶解炉は容量50tonの円型炉である。**Table 3**に実験条件を示す。実際の溶解操作の中で燃料ガス流量をTable 3に示す2条件で設定し、燃料使用量の変化を比較した。実験期間内の全溶解チャージより、特殊な作業を行っているチャージやデータ上の外れ値を除いた後に、ランダムに1,000チャージずつを抽出して評価を行った。なお、本実験期間中に燃料ガス流量のパターン以外の操業条件を固定するようなことはしていない。つまり、実操業における変動因子を多分に含んだ状態で行った実験である点に注意が必要である。

Fig. 12に各操業条件において得られた燃料原単位(=燃料使用量/原料装入量)を箱ひげ図として示す。なお、データは全て平均値が0、分散が1となるように標準化しており、箱部に分布するデータ数を50%、最長ひげ長さを箱長さの1.5倍、外れ値は除外してグラフ化した。これより、条件2では条件1よりも燃料原単位が若干低減していることが示唆された。次に、両データの差が有意なものであるかを確認するためにt検定を実施した。各統計量とt検定の結果を**Table 4**に示す。両データ群間においてp値が小さいことが確認され、操業条件間の燃料原単位には有意な差があることが確認された。したがって、条件2における燃料原単位は条件1よりも低く、平均値で標準偏差の0.16倍程度の差があると結論付けられる。以上より、データ駆動型モデルを用いたシミュレーションによる溶解炉操業条件の最適化が有効な手法であることが確認された。

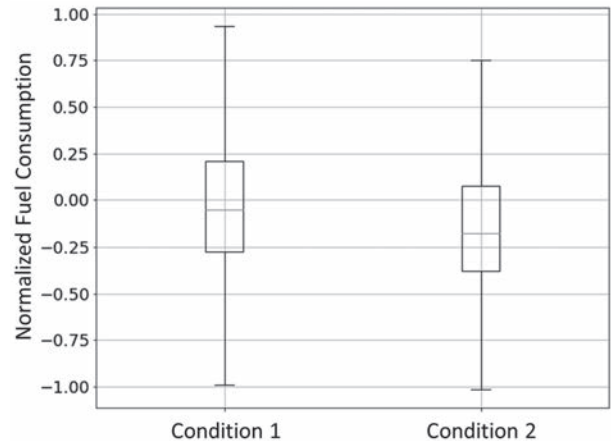


Fig. 12 Variation of fuel consumption distribution by melting operation conditions.

Table 4 Statistics and t-test results for each condition.

Condition	N	Mean	Standard Deviation	t	p
Condition 1	1000	0.08	1.32	3.36	<0.001
Condition 2	1000	-0.08	0.50		

4. 結 言

本研究では、時系列データにVAEを適用して特徴量を抽出し、他のデータと組み合わせて燃料使用量を予測する機械学習モデルを構築した。また、モデルを用いたシミュレーションによって溶解炉操業条件の最適化を検討した。本手法によって、操業条件における改善点を効果的に抽出するとともに、改善すべき内容を明確にすることが出来た。本検討におけるシミュレーションでは、変数間の相関や複雑な非線形性を無視している。更なる精度向上のためには、より複雑なシミュレーション手法によってプロセスの再現を行う必要があると考えられる。

参考文献

- 1) K. Takahashi and N. Ishikawa: Furukawa-Sky Review, 3 (2007), 31-36

- 2) M. Hassan and A. Brimmo: Light Metals (2015), 915-920
- 3) J. Furu and A. Buchholz: Light Metals (2015), 895-900
- 4) C. Belt: JOM, **67** (2015), 11, 2690-2695
- 5) L. Qiu, Y. Feng, Z. Chen, Y. Li, X. Zhang: Applied Thermal Engineering, **145** (2018), 315-327
- 6) K. Akiyama, I. Kang, T. Kanno, N. Uchida: Mater. Trans. **62** (2021), 461-467
- 7) M. Shirai, H. Yamada: J. JFS, **92** (2020), 423-427
- 8) D.P. Kingma and M. Welling: arXiv: 1312.6114, v10 (2014)
- 9) H. Akaike: Proc. the Second Int. Symp. Information Theory, Budapest (Akadémiai Kiado) (1973) 267-281
- 10) T. Akiba, S. Sano, T. Yanase, T. Ohta and M. Koyama: arXiv: 1907. 10902, V1 (2019)
- 11) J. Bergstra, R. Bardenet, Y. Bengio and B. Kégl: Advances in Neural Information Processing Systems **24** (2011), 2546-2554



蓬田 翔平 (Shohei Yomogida)
(株) UACJ マーケティング・技術本部
R&D センター プロセス研究部



小林 佐保 (Saho Kobayashi)
(株) テクノプロ テクノプロ・IT 社
(元) (株) UACJ R&D センター 第二研究部



山本 佑樹 (Yuki Yamamoto)
(株) UACJ マーケティング・技術本部
R&D センター プロセス研究部, 博士 (工学)