

基于自适应高效递推规范变量分析的多模过程软传感器建模

商亮亮[†], 刘建昌, 谭树彬, 王国柱, 于 淼

(东北大学 信息科学与工程学院, 辽宁 沈阳 110819; 东北大学 流程工业综合自动化国家重点实验室, 辽宁 沈阳 110819)

摘要: 由于多模过程中各模式间的均值和协方差发生了改变, 多变量单模高斯分布的基本假设不再成立. 基于递推方法的多模过程软传感器建模存在两点问题: 其一, 递推建模方法不能及时的跟踪多模过程的变化; 其二, 递推建模方法的在线计算负荷非常高. 为了解决上述问题, 本文提出了一种基于自适应高效递推规范变量分析的多模过程软传感器建模方法. 首先, 采用指数权重滑动平均来更新过去观测矢量的协方差矩阵; 然后, 利用基于模型输出误差范数的可变遗忘因子来跟踪多模过程的动态变化; 最后, 通过引入一阶干扰理论(first order perturbation, FOP)来实现递推奇异值分解, 与常规奇异值分解相比递推奇异值算法的计算负荷显著降低. 将提出的方法用于田纳西伊斯曼(tennessee eastman, TE)化工过程进行仿真验证, 其结果表明了该方法的可行性和精确性.

关键词: 一阶干扰理论; 多模过程; 规范变量分析; 可变遗忘因子; 软传感器

中图分类号: TP273 文献标识码: A

Soft sensor modeling for multimode process based on adaptive efficient recursive canonical variate analysis

SHANG Liang-liang[†], LIU Jian-chang, TAN Shu-bin, WANG Guo-zhu, YU Miao

(College of Information Science and Engineering, Northeastern University, Shenyang Liaoning 110819, China;
State Key Laboratory of Synthetical Automation for Process Industries, Northeastern University, Shenyang Liaoning 110819, China)

Abstract: Because of the mean shift and covariance changes between process modes, the basic assumption of Gaussian distribution for the multivariate unimode processes does not hold for the complex multimode processes. Disadvantages of soft sensor based on recursive modeling approach for multimode processes include the following two points: first, recursive methods have difficulty in timely tracking with the changes of multimode processes; second, the online computational cost of recursive modeling becomes much more expensive. To solve these problems, we propose a soft sensor for multimode processes on the basis of the adaptive efficient recursive canonical variate analysis (AERCVA) modeling approach. First, the exponential weighted moving average is adopted to update the covariance of past observation vectors. Then, the variable forgetting factor based on the norm of output residuals is used to track the changes of the multimode process. Finally, the first order perturbation (FOP) is introduced to realize recursive singular value decomposition (RSVD), the computation cost of RSVD is significantly reduced in comparison with the conventional singular value decomposition. The proposed method is validated in the Tennessee Eastman benchmark process. Simulation results demonstrate the feasibility and accuracy of the proposed method.

Key words: first order perturbation theory; multimode process; canonical variate analysis; variable forgetting factor; soft sensor

1 引言(Introduction)

监控和控制工业过程的运行很大程度上依赖于精确可靠的测量值^[1]. 许多关键的质量变量或过程变量, 如蒸馏塔中的生产物浓度和化工反应器中的反应物料浓度都难以在线测量^[2]. 由于高成本、低可靠性和

传感器的硬件限制等原因, 难以测量的变量值通常由一定时间滞后的实验室分析确定. 软传感器一般可以分为两种类型: 数据驱动和模型驱动软传感器^[3]. 数据驱动软传感器的方法有基于多变量统计技术的主成分分析(principal component analysis, PCA)、偏最

收稿日期: 2015-06-29; 录用日期: 2015-10-26.

[†]通信作者. E-mail: sll-15@163.com; Tel.: +86-024-83678396.

本文责任编辑: 李少远.

国家自然科学基金(61374137), 流程工业综合自动化国家重点实验室基础科研业务费(2013ZCX02-03)资助.

Supported by National Natural Science Foundation of China (61374137) and State Key Laboratory of Integrated Automation of Process Industry Technology and Research Center of National Metallurgical Automation Fundamental Research Funds (2013ZCX02-03).

小二乘(partial least square, PLS)和独立成分分析(independent component analysis, ICA)等方法, 以及基于机器学习的人工神经网络(artificial neural network, ANN)和支持向量机(support vector machine, SVM)方法; 模型驱动软传感器建模方法可分为3类: 白箱建模、黑箱建模以及灰箱建模^[4]. 白箱建模需要过程的基本原理, 缺点是需要许多不容易获取的过程专家知识. 由于难以获取精确的过程原理, 开发基于机理模型的软传感模型是非常有挑战性的^[5]. 黑箱建模则不考虑系统机理, 完全从系统的输入输出数据出发, 利用辨识的方法建立系统模型. 灰箱建模是已知系统的部分机理, 但有些参数需要通过输入输出数据确定, 比如基于状态空间模型的子空间辨识方法. 灰箱建模的优点是建模过程中可以充分利用系统的先验知识或验后知识.

在过去的二十几年里, 子空间辨识方法不仅在理论上而且在实践上已经取得了巨大进展. 子空间辨识方法具有数值简单和需要较少的先验知识的优点. 常规的子空间辨识方法包括: 规范变量分析(canonical variate analysis, CVA)、子空间状态空间系统辨识的数值算法(numerical algorithms for subspace state space system identification, N4SID)、多变量输出误差状态空间(multivariable output-error state space, MOESP). 基于子空间辨识的软传感器建模是利用输入输出数据建立状态空间模型, 并且通过考虑过程动态可以很大程度上提高软传感器的性能. Amirthalingam和Lee^[6]采用N4SID对连续的纸浆消化池进行推理预测控制, 通过在模型降阶适当缩放输出变量来获取更多的过程动态, 但没有考虑模型阶数的最优化. Dorsey等人^[7]建立了基于子空间辨识的间歇过程推理模型, 结合以前批次和在线信息预测最终的质量变量, 唯一的限制是要求批次运行时间统一. Chokshi^[8]提出基于MOESP的软传感器建模方法来预测输出变量, 采用SVD估计子空间并将该方法用于地下水处理厂.

尽管各种类型的软传感器建模技术已经被广泛应用, 但是大多数是基于来自单一操作模式并遵循高斯分布的过程数据. 对于复杂的多模过程, 过程模式间的均值和协方差发生了改变, 多变量单模高斯分布的基本假设不再成立. 最近, Yuan等人^[1]构建了高斯混合递归模型来进行多模过程软传感器建模, 该方法将操作模式辨识和变量递归集成在同一模型, 因此在操作模式进行改变时无需切换模型. Ge等人^[9]提出了局部主元递归模型的概率组合形式, 更适合具有噪声的过程数据建模, 并将该方法用于多操作模式的化工

过程质量预报. 除此之外, 每个模式的动态行为也应该被考虑. CVA有处理离线数据动态的能力. 因此, 本文采用递推规范变量分析作为基本方法来进行多模过程软传感器建模.

递推子空间辨识方法可以被分成两类: 一类是避免使用奇异值分解, 从而降低算法的计算负荷. Gustafsson^[10]原创性的开发了基于投影近似子空间追踪(projection approximation subspace tracking, PAST)的递推子空间辨识方法来估计可扩展观测矩阵, 具有相对低的计算负荷并能够处理相互关联的有色噪声. Oku和Kimura^[11]提出了使用梯度类型子空间追踪的递推4SID算法, 能够直接估计扩展可观测矩阵的列矢量空间不需要进行奇异值分解. Mercere和Lecoeuche等人^[12]提出了两种递推子空间模型辨识算法, 利用无约束优化来求解扩展可观测子空间. 杨华等人^[13]提出了一种新的基于遗忘因子的递推子空间辨识算法, 利用梯度法更新广义能观测矩阵. Li等人^[14]提出用递推子空间方法来实现闭环在线辨识, 该算法基于闭环predictor的子空间辨识最优化版本和投影近似子空间跟踪(PAST)算法, 避免了奇异值运算. Houtzager和Verhaegen等人^[15]提出了递推辨识和基于predictor的跟踪子空间方法可用于开环和闭环, 利用阵列算法求解主要线性问题来降低计算负荷.

另一类是降低奇异值计算负荷或直接使用SVD或特征值分解来计算. 赵建远等人^[16]提出递推正交分解闭环子空间辨识方法, 利用GIVENS变换实现投影向量的递推QR分解来减少子空间辨识算法中QR分解和SVD分解的计算量. Choi等人^[17]提出自适应监控方法通过基于奇异值分解的CVA方法来更新状态空间模型. Ding等人^[18]提出了基于观测器和等价空间设计的故障检测和隔离系统, 其优点是可以直接利用测试数据辨识观测器但仍然采用了奇异值分解. Pan和Sheng等人^[19]提出了一种基于递推CVA的自适应虚拟量测模型应用于工业溅射过程, 采用特征值分解来计算相关变量. Naik和Yin等人^[20]设计了两种递推算法来实现基于等价空间和诊断观测器的残差产生器, 分别利用基于正定矩阵一阶干扰理论和正交迭代来避免完整的奇异值运算.

多模过程递推软传感器建模的两个缺点之一由参考文献[21]指出. 一方面, 递推方法逐渐的进入新的运行模式, 难以跟踪多模过程两个模式之间的突然改变. 另一方面, 在线计算负荷太高. 为了解决这两个问题, 首先, 采用基于输出误差范数的可变遗忘因子自适应策略. 然后, 引入主要用于信号子空间追踪的一阶干扰理论来实现递推奇异值分解, 显著的降低了计算负荷. 最后, 提出了基于自适应高效递推规范变量分析的多模过程软传感器建模方法.

2 规范变量分析(Canonical variate analysis)

随机线性系统可以写成3种不同的形式,它们是过程形式、新息形式和预测形式^[22].新息形式的多变量状态空间模型为

$$\begin{cases} x_{(k+1)} = Ax_{(k)} + Bu_{(k)} + Ke_{(k)}, \\ y_{(k)} = Cx_{(k)} + Du_{(k)} + e_{(k)}, \end{cases} \quad (1)$$

其中: $x_{(k)} \in \mathbb{R}^n$, $u_{(k)} \in \mathbb{R}^{m_u}$ 和 $y_{(k)} \in \mathbb{R}^{m_y}$ 是 k 采样时刻的状态、输入和输出矢量; $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $B \in \mathbb{R}^{n \times m_u}$, $C \in \mathbb{R}^{m_y \times n}$, $D \in \mathbb{R}^{m_y \times m_u}$ 和 $K \in \mathbb{R}^n$ 分别是状态矩阵、输入矩阵、输出矩阵、直接馈通矩阵和卡尔曼增益矩阵; $e_{(k)}$ 是随机干扰,假定是零均值正态分布白噪声.在CVA方法中,测量矢量由过去和未来的测量值扩展而成,分别形成过去和扩展的过去矢量 $z_{p(r)}$, $z_{p(r)}^+$, 其中 r 表示一类序数.

$$z_{p(r)} = \begin{bmatrix} y_{(r-1)} \\ u_{(r-1)} \\ y_{(r-2)} \\ u_{(r-2)} \\ \vdots \\ y_{(r-p)} \\ u_{(r-p)} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(m_u+m_y)p}, \quad (2)$$

$$z_{p(r)}^+ = \begin{bmatrix} y_{(r-1)} \\ u_{(r-1)} \\ y_{(r-2)} \\ u_{(r-2)} \\ \vdots \\ y_{(r-p-1)} \\ u_{(r-p-1)} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(m_u+m_y)(p+1)}, \quad (3)$$

其中 p 和 f 分别代表过去和未来观测值的最大个数. 一般情况, $n/m_y \leq f \leq p$ ^[14]. 相似地, 可以构建未来观测矢量 $z_{f(r)} \in \mathbb{R}^{(m_u+m_y)f}$. 设置 $r = p+1, p+2, \dots, p+N$, 过去和未来Hankel矩阵 $Z_p \in \mathbb{R}^{(m_u+m_y)p \times N}$ 和 $Y_f \in \mathbb{R}^{(m_u+m_y)f \times N}$ 定义如下:

$$Z_p = [z_{p(p+1)} \ z_{p(p+2)} \ \cdots \ z_{p(p+N)}], \quad (4)$$

$$Y_f = [z_{f(f+1)} \ z_{f(f+2)} \ \cdots \ z_{f(f+N)}]. \quad (5)$$

一组由 l 个观测值组成的变量 $z_{p(p+1)}$, 最后的两个元素是 $y_{(1)}$, $u_{(1)}$, 然而, 最后的元素是 $y_{(l)}$. 因此, 这些Hankel矩阵的最大列数是 $N = l - p - f + 1$. 过去和未来观测值的协方差和互方差矩阵可以使用如下公式计算:

$$\Sigma_{pp} = Z_p Z_p^T / (N - 1), \quad (6)$$

$$\Sigma_{ff} = Y_f Y_f^T / (N - 1), \quad (7)$$

$$\Sigma_{fp} = Y_f Z_p^T / (N - 1). \quad (8)$$

规范变量分析法试图找到 $a^T z_{f(r)}$, $a \in \mathbb{R}^{(m_u+m_y)f}$ 和 $b^T z_{p(r)}$, $b \in \mathbb{R}^{(m_u+m_y)p}$ 之间的最优线性组合, 使得过去和未来观测值之间的相关关系最大化.

$$\rho_{fp}(a, b) = \frac{a^T \Sigma_{fp} b}{(a^T \Sigma_{ff} a)^{1/2} (b^T \Sigma_{pp} b)^{1/2}}. \quad (9)$$

定义 $u_1 = \Sigma_{ff}^{-1/2} a$ 和 $u_2 = \Sigma_{pp}^{-1/2} b$, 确定 u_1 和 u_2 的最优化程序可以表达如下:

$$\begin{aligned} \max_{u_1, u_2} & u_1^T (\Sigma_{ff}^{-1/2} \Sigma_{fp} \Sigma_{pp}^{-1/2}) u_2, \\ \text{s.t.} & u_1^T u_1 = 1, \quad u_2^T u_2 = 1. \end{aligned} \quad (10)$$

该最优化问题的解决方案可由Hankel矩阵 H 的奇异值分解求得:

$$H := \Sigma_{ff}^{-1/2} \Sigma_{fp} \Sigma_{pp}^{-1/2} = U \Sigma V^T. \quad (11)$$

对式(11)进行SVD, 规范变量 $z_{(r)}$ 可基于过去测量值求得:

$$\begin{aligned} z_{(r)} = \begin{bmatrix} b_1^T \\ b_2^T \\ \vdots \\ b_{m_y p}^T \end{bmatrix} z_{p(r)} = \begin{bmatrix} v_1^T \\ v_2^T \\ \vdots \\ v_{m_y p}^T \end{bmatrix} \Sigma_{pp}^{-1/2} z_{p(r)} = \\ V^T \Sigma_{pp}^{-1/2} z_{p(r)} = J z_{p(r)}, \end{aligned} \quad (12)$$

其中 $J = V^T \Sigma_{pp}^{-1/2}$ 是转换矩阵转换过去测量值到规范变量空间. 规范变量空间可以被分成两个部分: 主空间和残差空间, 他们的维数由奇异值的维数确定. 前 n 个主要奇异值确定主空间 $x_{(r)} \in \mathbb{R}^n$ 并且剩余的奇异值确定残差空间 $r_{(r)} \in \mathbb{R}^{(m_u+m_y)f-n}$, 其中 $n < (m_u + m_y)f$. 奇异值个数 n 应预先给出. 因此, 规范变量可以写成

$$z_{(r)} = J z_{p(r)} = [[J_x z_{p(r)}]^T \ r_{(r)}^T]^T = [x_{(r)}^T \ r_{(r)}^T]^T, \quad (13)$$

其中 $J_x = V_x^T \Sigma_{pp}^{-1/2}$, V_x 包含 V 的前 n 列. 状态变量不仅是估计的规范变量的子集, 也是过去观测矢量的线性组合. 因此, 像规范变量一样状态变量定义为过去观测矢量的线性组合. 在系统状态被确定之后, 矩阵 A, B, C, D 和 K 可以通过线性最小二乘递归来估计. 最后, 可以重新计算系统的输出.

3 自适应高效递推规范变量分析(Adaptive efficient recursive canonical variate analysis)

对多模过程每个模式有不同的特性, 例如变量之间均值、方差和相关关系结构的改变导致主要状态变量个数的改变. 每次采集到新的测量变量时, 均值和协方差需要随着模型结构改变程度进行更新. 本文中, 采用指数权重滑动平均^[23]不需要回调过去的训练数据. 过去观测矢量的协方差矩阵可以通过指数权重滑

动平均来估计.

$$\Sigma_{pp(r)} = (1 - \beta)z_{p(r)}z_{p(r)}^T + \beta\Sigma_{pp(r-1)}, \quad (14)$$

其中: β 是遗忘因子, r 表示每次迭代数.

3.1 基于一阶干扰理论更新状态矢量(Updating state vectors based on first order perturbation theory)

一阶干扰理论主要用于信号子空间跟踪, 其基本原理详见参考文献[20]. 基于干扰更新奇异值和奇异值矢量的根源可以追溯到文献[24]中提到的结果. 本文中, 奇异值和奇异值矢量的初始集来自离线辨识. 在线更新状态矢量开始于当前测量值. 表示 z_k 为

$$z_k = (z_{f(r)}z_{f(r)}^T)z_{f(r)}, \quad (15)$$

其中 $z_{f(r)}$ 是包含当前和未来测量值的列矢量. 相似地, 增补变量矢量 z_r 可以利用以前的测量值构建

$$z_r = (z_{p(r)}z_{p(r)}^T)z_{p(r)}. \quad (16)$$

接下来, 需要定义过渡变量 $\bar{z}_r = \sqrt{(1 - \beta)}U_{r-1}^T z_r \in \mathbb{R}^q$, $\bar{z}_\tau = \sqrt{(1 - \beta)}V_{r-1}^T z_\tau \in \mathbb{R}^q$ 和 $p_{u,0} = \sqrt{(1 - \beta)}z_r \in \mathbb{R}^q$, $q_{u,0} = [0 \ \cdots \ 0] \in \mathbb{R}^q$. 首先, 如下公式更新左奇异值矢量:

$$p_{u,i} = p_{u,i-1} - \bar{z}_{r,i}U_{i,r-1}, \quad (17)$$

$$q_{u,i} = q_{u,i-1} + \sigma_i^{-1}\bar{z}_{\tau,i}U_{i,r-1}, \quad (18)$$

$$\bar{U}_{i,r} = U_{i,r-1} + \sigma_i^{-1}\bar{z}_{\tau,i}p_{u,i} - \bar{z}_{r,i}q_{u,i}, \quad (19)$$

下标 $1 \leq i \leq q$ 代表矩阵列和矢量的第 i th元素. 然后, 更新右奇异值矢量, 也需要定义两个过渡变量: $p_{v,0} = \sqrt{(1 - \beta)}z_r \in \mathbb{R}^q$, $q_{v,0} = [0 \ \cdots \ 0] \in \mathbb{R}^q$. 右奇异值矢量可计算如下:

$$p_{v,i} = p_{v,i-1} - \bar{z}_{r,i}V_{i,r-1}, \quad (20)$$

$$q_{v,i} = q_{v,i-1} + \sigma_i^{-1}\bar{z}_{r,i}V_{i,r-1}, \quad (21)$$

$$\bar{V}_{i,r} = V_{i,r-1} + \sigma_i^{-1}\bar{z}_{r,i}p_{v,i} - \bar{z}_{\tau,i}q_{v,i}. \quad (22)$$

最后, 奇异值矢量更新如下:

$$\bar{\Sigma}_{i,r} = \beta \Sigma_{i,r-1} + (1 - \beta) U_{i,r-1}^T z_r z_r^T V_{i,r-1}. \quad (23)$$

标准化公式如下:

$$U_{i,r} = \frac{\bar{U}_{i,r}}{\|\bar{U}_{i,r}\|}, \quad \Sigma_{i,r} = |\bar{\Sigma}_{i,r}|, \quad V_{i,r} = \frac{\bar{V}_{i,r}}{\|\bar{V}_{i,r}\|}. \quad (24)$$

更新奇异值矢量后, 可以求得新的规范变量. 递推模型的阶数应该预先给出. 计算状态矢量的方程如下:

$$\hat{x}(r) = V_x^T \Sigma_{pp}^{-1/2} z_{p(r)}, \quad (25)$$

其中: $\hat{x}(r)$ 是在采样时刻 r 的状态矢量, V_x 包含 V_r 在采样时刻 r 的前 n 列, $z_{p(r)}$ 是递推建模过程中新的过去观测矢量. 仅对 $\Phi_z \in \mathbb{R}^{q \times q}$ 的完整更新进行复杂度和计

算成本计算. 假定要估计的子空间的秩为 l , 通常 $l \ll q$. 几种常见算法的复杂度总结在表1中. 与常规SVD相比, 基于一阶干扰理论的递推SVD的计算成本大大减小.

表1 几种常见算法的复杂度比较

Table 1 Complexity comparison of several common algorithm

算法	每秒浮点运算次数	复杂度
SVD	$22q^3 + 4q^2$	$O(q^3)$
迭代秩1更新	$2/3q^3l + 2q^2l + 5ql + l$	$O(q^3l)$
PAST	$2q^3 + 9q^2 + 4q + 1$	$O(q^3)$
RSVD	$7/2q^2 + 6ql + 4l^2$	$O(q^2)$
	$14q^2 + 7q$	$O(q^2)$

文献[25]中, 采用100组独立通道数据来测试基于一阶干扰理论的递推奇异值分解的收敛性. 与基于最小二乘法的递推奇异值分解相比, 该方法在10 dB信噪比的时候能得到与其一致的标准化的均方误差; 并给出该方法在 $\beta = 0.99$ 的时候可以很好的收敛性.

3.2 更新系统矩阵(Updating system matrices)

在获得状态空间矢量之后, 系数矩阵可以使用递推最小二乘法^[26]更新. 估计系统矩阵的两个线性最小二乘问题如下:

$$y(r) = \Theta_{(r)}^y \phi(r) + e(r), \quad (26)$$

$$\hat{x}_{(r+1)} = \Theta_{(r)}^x \psi(r), \quad (27)$$

其中: $\phi(r) = [\hat{x}_{(r)}^T \ u_{(r)}^T]^T$, $\psi(r) = [\hat{x}_{(r)}^T \ u_{(r)}^T \ e_{(r)}^T]^T$, $\Theta_{(r)}^y = [C(r) \ D(r)]$, $\Theta_{(r)}^x = [A(r) \ B(r) \ K(r)]$. $\Theta_{(r)}^y$ 和 $\Theta_{(r)}^x$ 表示相应状态空间方程状态空间参数的集合. $\Theta_{(r)}^y$ 可通过递推最小二乘法计算求得.

$$P_{(r)} = \frac{1}{\beta} (P_{(r-1)} - \frac{P_{(r-1)} \phi(r) \phi(r)^T P_{(r-1)}}{\beta + \phi(r)^T P_{(r-1)} \phi(r)}), \quad (28)$$

$$\Theta_{(r)}^y = \Theta_{(r-1)}^y + (y(r) - \Theta_{(r-1)}^y \phi(r)) \phi(r)^T P_{(r)}. \quad (29)$$

然后, 新息噪声序列可以通过第一线性问题的解决方案获得:

$$e(r) = y(r) - \Theta_{(r)}^y \phi(r). \quad (30)$$

最后, $\Theta_{(r)}^x$ 也可通过递推最小二乘更新:

$$Q_{(r)} = \frac{1}{\beta} (Q_{(r-1)} - \frac{Q_{(r-1)} \psi(r) \psi(r)^T Q_{(r-1)}}{\beta + \psi(r)^T Q_{(r-1)} \psi(r)}), \quad (31)$$

$$\Theta_{(r)}^x = \Theta_{(r-1)}^x + (\hat{x}_{(r+1)} - \Theta_{(r-1)}^x \psi(r)) \psi(r)^T Q_{(r)}. \quad (32)$$

在辨识出状态空间模型后, 可重新计算模型的输出.

3.3 基于模型输出残差范数的可变遗忘因子(Variable forgetting factor based on the norm of output residuals)

当过程发生较大或突然的改变时, 常数遗忘因子的模型不能够及时跟踪过程的动态变化. 遗忘因子的值应该随着过程改变的程度发生变化. 当过程快速改变的时候, 遗忘因子应该减小以便降低过去测量值对当前模型的影响. 本文采用基于输出残差范数的可变遗忘因子^[26]. 遗忘因子 β 是唯一的整定参数. 当 β 等于1时, 所有数据的权重相等. 小的 β 值给当前测量值更多的权重. 对大的 β 值, 模型参数改变对干扰是缓慢和不灵敏的.

$$\beta_{2(r)} = e^{-\left(\frac{\|e_{(r-1)}\|}{\rho_1}\right)}, \quad (33)$$

$$\beta_{(r)} = \beta_1 \beta_{2(r)}, \quad (34)$$

其中: β_1 是常数遗忘因子值, 可以通过经验参数选择程序获得, 典型的范围是从0.90到0.9999; ρ_1 是调整系数可以调整 $\beta_{2(r)}$ 的改变灵敏度.

4 应用到多模过程(Application in multimode process)

田纳西伊斯曼化工过程已经被广泛的用来评估关于过程建模、监控和控制的的不同算法^[27]. 过程包括5个操作单元: 反应堆、产品冷凝器、气液分离器、循环压缩机和汽提塔. 过程有41个过程变量和12个操纵变量. 41个之中的22个变量是容易测量的, 然而剩余的19个是难以测量的并且需要通过分析器来确定当前元素的测量值. 本文中, 产品流中的E和F成分被选为质量变量. 更详细的TE过程信息可在参考文献[27]中找到, 最新的TE过程仿真代码可通过如下网址获得<http://depts.washington.edu/control/LARRY/TE/download.html>. 表2中给出了在模式1基础上强加的修改参数.

表2 修改的参数

模式编号	G/H质量比	汽提塔底流
1	50/50	22.89
2	70/30	19.45
3	40/60	19.45

为了预测成分变量, 表3中给出了总共22个容易测量的过程变量作为输入. 仿真程序运行150h, 采样时间间隔为0.05h.

采集3种稳定过程操作模式的数据作为建模数据, 每个模式采集1000组数据. 质量变量的多模特性展示于图1中.

表3 选择的输入变量
Table 3 Selected variables as inputs

序号	变量名
1	物料A流量
2	物料D流量
3	物料E流量
4	总进料流量
5	压缩机返回物料流量
6	反应器给料流量
7	反应器压力
8	反应器液位
9	反应器温度
10	排空物料流量
11	汽/液分离器温度
12	汽/液分离器液
13	汽/液分离器压力
14	汽/液分离器出口流量
15	汽提塔液位
16	汽提塔压力
17	汽提塔出口流量
18	汽提塔温度
19	汽提塔蒸汽流量
20	压缩机功率
21	反应器冷却水出口温度
22	分离器冷却水出口温度

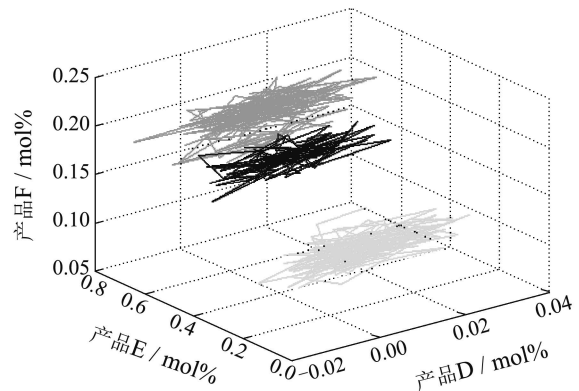


图1 不同操作模式的三维数据特性

Fig. 1 Three-dimensional data characteristic of different operation modes

为了评估提出方法的性能, 采用均方根误差和 R^2 指标, 其计算公式分别如下:

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{m_y} \sum_{i=1}^{m_y} (y_i - \hat{y}_i)^2}, \quad (35)$$

其中: \hat{y}_i 是模型的预测输出, m_y 是数据长度;

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{m_y} (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^{m_y} (y_i - \bar{y})^2}, \quad (36)$$

其中 \bar{y} 是测量输出变量的均值. 为了性能比较不仅采用传统的递推最小二乘法算法, 并且还采用常规的递推规范变量分析. 表4中列出了每种算法的预测指标结果. 理论上, 通过引入一阶干扰理论(FOP)可以增加算法的计算速度, 但是会牺牲算法的计算精度. 从预测结果可以得出, 产品E的最好预测结果由递推规范变量分析(RCVA)获得. 然而, 产品F的最佳预测结果由提出的自适应高效递推规范变量分析获得. 仿真结果表明, 递推奇异值不但提高了算法的执行效率, 而且能得到与普通奇异值分解相一致的精度.

表4 TE过程测试数据的RMSE和 R^2
Table 4 RMSE and R^2 on the testing set of the TE process

算法	产品	RPLS	RCVA	AERCVA
RMSE	E	0.0134	0.0058	0.0067
	F	0.0152	0.0054	0.0053
R^2	E	0.9760	0.9990	0.9987
	F	0.9632	0.9827	0.9828

产品E和F的仿真预测结果分别在图2和3中给出, 其中: 黑线是实际输出值, 灰线代表提出软传感器模型的预测输出值. 从图中可以看出, 模型输出可以很好的跟踪实际的测量值.

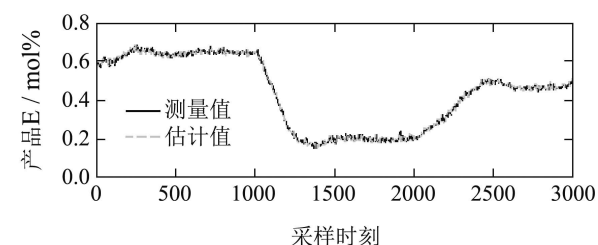


图2 产品E的模型输出与误差
Fig. 2 Output and error of product E

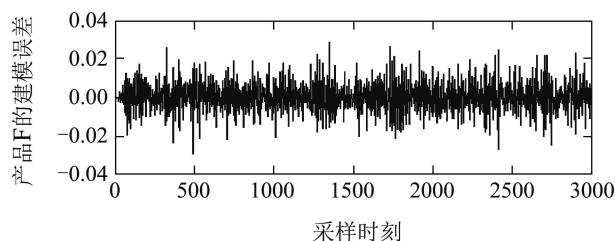
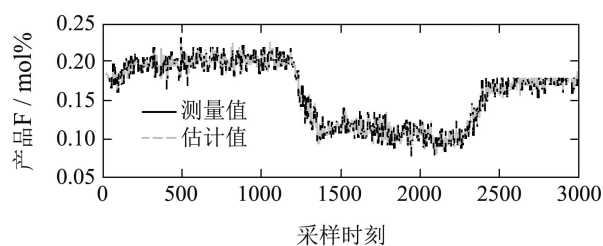


图3 产品F的模型输出与误差
Fig. 3 Output and error of product F

5 结论(Conclusions)

将提出方法用于田纳西伊斯曼化工过程, 验证了算法的有效性和精确性. 仿真分析得出如下结论: 1) 递推奇异值不但提高了算法的执行效率, 而且能得到与普通奇异值分解相一致的精度; 2) 均方根误差和 R^2 指标对比表明, 提出的软传感器建模方法精度明显优于传统的递推最小二乘法算法, 略微高于常规的递推规范变量分析的精度.

参考文献(References):

- [1] YUAN X F, GE Z Q, SONG Z H. Soft sensor model development in multiphase/multimode processes based on gaussian mixture regression [J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2014, 138: 97 – 109.
- [2] GE Z Q, SONG Z H, WANG P L. Probabilistic combination of local independent component regression model for multimode quality prediction in chemical processes [J]. *Chemical Engineering Research and Design*, 2014, 92(3): 509 – 521.
- [3] KADLEC P, GABRYS B, STRANDT S. Data-driven soft sensors in the process industry [J]. *Computers & Chemical Engineering*, 2009, 33(4): 795 – 814.
- [4] ZHONG Lusheng. *System identification of state-space models* [D]. Changsha: Central South University, 2011. (衷路生. 状态空间模型辨识方法研究 [D]. 长沙: 中南大学, 2011.)
- [5] YIN S, WANG G, YANG X. Robust pls approach for kpi-related prediction and diagnosis against outliers and missing data [J]. *International Journal of Systems Science*, 2014, 45(7): 1375 – 1382.
- [6] AMIRTHALINGAM R, LEE J H. Subspace identification based inferential control applied to a continuous pulp digester [J]. *Journal of Process Control*, 1999, 9(5): 397 – 406.
- [7] DORSEY A W, LEE J H. Building inferential prediction models of batch processes using subspace identification [J]. *Journal of Process Control*, 2003, 13(5): 397 – 406.
- [8] CHOKSHI N K. *Soft sensors development for model based control of groundwater treatment plants* [D]. TU Delft, Holland: Delft University of Technology, 2012.
- [9] GE Z Q, GAO F R, SONG Z H. Mixture probabilistic pcr model for soft sensing of multimode processes [J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2011, 105(1): 91 – 105.
- [10] GUSTAFSSON T. Recursive system identification using instrumental variable subspace tracking [C] // *Proceedings of the 11th IFAC Symposium on System Identification (SYSID 1997)*. Fukuoka, Japan: Cite-seer, 1997.
- [11] OKU H, KIMURA H. Recursive 4sid algorithms using gradient type subspace tracking [J]. *Automatica*, 2002, 38(6): 1035 – 1043.

- [12] MERCERE G, BAKO L, LECOUCHE S. Propagator-based methods for recursive subspace model identification [J]. *Signal Processing*, 2008, 88(3): 468 – 491.
- [13] YANG Hua, LI Shaoyuan. A novel recursive MOESP subspace identification algorithm based on forgetting factor [J]. *Control Theory & Applications*, 2009, 26(1): 69 – 72.
(杨华, 李少远. 一种新的基于遗忘因子的递推子空间辨识算法 [J]. 控制理论与应用, 2009, 26(1): 69 – 72.)
- [14] LI Y F, XIE L, SU H Y, et al. Recursive closed-loop subspace identification based on predictor markov parameters [C] // *The 3rd International Congress on Image and Signal Processing (CISP)*. Yantai, China: IEEE, 2010, 8: 3655 – 3659.
- [15] HOUTZAGER I, WINGERDEN J V, VERHAEGEN M. Recursive predictor-based subspace identification with application to the real-time closed-loop tracking of flutter [J]. *IEEE Transactions on Control Systems Technology*, 2012, 20(4): 934 – 949.
- [16] ZHAO Jianyuan, LI Xingfei, TIAN Lingzi. Recursive closed-loop subspace identification based on orthogonal decomposition [J]. *Control and Decision*, 2015, 30(03): 490 – 494.
(赵建远, 李醒飞, 田凌子. 基于正交分解的递推子空间闭环辨识方法 [J]. 控制与决策, 2015, 30(3): 490 – 494.)
- [17] CHOI S W, MARTIN E B, MORRIS A J, et al. Adaptive multivariate statistical process control for monitoring time-varying processes [J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2006, 45(9): 3108 – 3118.
- [18] DING S X, ZHANG P, NAIK A, et al. Subspace method aided data-driven design of fault detection and isolation systems [J]. *Journal of Process Control*, 2009, 19(9): 1496 – 1510.
- [19] PAN T H, SHENG B Q, WONG D S H, et al. A virtual metrology model based on recursive canonical variate analysis with applications to sputtering process [J]. *Journal of Process Control*, 2011, 21(6): 830 – 839.
- [20] NAIK A S, YIN S, DING S X, et al. Recursive identification algorithms to design fault detection systems [J]. *Journal of Process Control*, 2010, 20(8): 957 – 965.
- [21] LIU Y, CHEN J H. Integrated soft sensor using just-in-time support vector regression and probabilistic analysis for quality prediction of multi-grade processes [J]. *Journal of Process Control*, 2013, 23(6): 793 – 804.
- [22] QIN S J. An overview of subspace identification [J]. *Computers & Chemical Engineering*, 2006, 30(10): 1502 – 1513.
- [23] LEE C, LEE I B. Adaptive monitoring statistics with state space model updating based on canonical variate analysis [J]. *Korean Journal of Chemical Engineering*, 2008, 25(2): 203 – 208.
- [24] STEWART G W. *Matrix Perturbation Theory* [M]. New York: Academic Press, 1990.
- [25] WILLINK T J. Efficient Adaptive SVD Algorithm for MIMO Applications [J]. *IEEE Transactions on Signal Processing*, 2008, 56(2): 615 – 622.
- [26] SHANG L L, LIU J C, TURKSON K, et al. Stable recursive canonical variate state space modeling for time-varying processes [J]. *Control Engineering Practice*, 2015, 36: 113 – 119.
- [27] DOWNS J J, VOGEL E F. A plant-wide industrial process control problem [J]. *Computers & Chemical Engineering*, 1993, 17(3): 245 – 255.

作者简介:

商亮亮 (1981–), 男, 博士研究生, 目前研究方向复杂工业过程建模、故障检测与诊断, E-mail: sll-15@163.com;

刘建昌 (1960–), 男, 教授, 博士生导师, 目前研究方向为智能控制理论与应用、复杂过程建模、控制与优化、故障诊断等等, E-mail: liujianchang@ise.neu.edu.cn;

谭树彬 (1974–), 男, 副教授, 目前研究方向为复杂工业过程控制与优化, E-mail: tanshubin@ise.neu.edu.cn;

王国柱 (1984–), 男, 博士研究生, 目前研究方向为复杂工业过程故障检测与诊断, E-mail: wang.guo.zhu@163.com;

于淼 (1986–), 女, 博士研究生, 目前研究方向为复杂工业过程建模与优化, E-mail: yumiaofly@126.com.