

软测量技术及其 在石油化工中的应用

俞金寿 刘爱伦 张克进 编著

化学工业出版社

工业装备与信息工程出版中心



软测量技术及其在石油 化工中的应用

俞金寿 刘爱伦 张克进 编著

化 学 工 业 出 版 社
工业装备与信息工程出版中心
· 北 京 ·

(京)新登字 039 号

图书在版编目(CIP)数据

软测量技术及其在石油化工中的应用/俞金寿,刘爱
伦,张克进编著. —北京:化学工业出版社,2000.6
ISBN 7-5025-2845-8

I. 软… I. ①俞… ②刘… ③张… III. 石油化
工-过程控制-测量方法 N. TE65

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2000) 第 21619 号

软测量技术及其在石油化工中的应用

俞金寿 刘爱伦 张克进 编著

责任编辑:刘 哲 李玉晖

责任校对:李 丽 郑 捷

封面设计:郑小红

*

化 学 工 业 出 版 社 出版发行
工业装备与信息工程出版中心

(北京市朝阳区惠新里 3 号 邮政编码 100029)

<http://www.cip.com.cn>

*

新华书店北京发行所经销

北京市彩桥印刷厂印刷

北京市彩桥印刷厂装订

开本 787×1092 毫米 1/16 印张 8½ 字数 196 千字

2000 年 6 月第 1 版 2000 年 6 月北京第 1 次印刷

印 数:1—3000

ISBN 7-5025-2845-8/TP·267

定 价:18.00 元

版权所有 违者必究

该书如有缺页、倒页、脱页者,本社发行部负责退换

前言

众所周知,产品质量是企业在竞争激烈的市场经济中赖以生存和发展的关键。在工业过程中,为了保证产品的质量和生产操作的连续平稳,需要对与品质密切相关的过程变量进行实时监视和控制。然而在实际过程中存在一大类变量无法或难以用传感器直接检测,只能通过采样离线人工化验的方法得到,如蒸馏塔产品组分浓度、粗汽油干点,化学反应器中反应物浓度和产品分布,生物发酵罐中的生物量参数,高炉铁水的含碳量等。这些参数直接或间接地反映了生产过程的状态和产品质量,是工业生产过程中必须加以严格监视和控制的参数。

为了解决这类变量的测量和控制问题,现有两种方法:

① 间接质量指标控制方法。利用这种方法必须熟悉工业对象机理,精度不高,而且存在较大的局限性。

② 直接测量法。利用在线分析仪直接测量所需参数。目前在线分析仪由于设备投资大、维护困难以及分析周期长、测量滞后大、准确性不高等原因,使用率低,也难以提供实时质量信息作为质量控制的反馈信号。

针对以上矛盾,提出了软测量技术,这是一门有着广阔发展前景的新兴工业技术。基于20世纪70年代Brosilow提出的推断控制,软测量技术将工艺机理和控制理论有机地结合起来,能够连续计算那些不可测或难以检测的参数,一定程度上可以取代在线分析仪,实现生产装置操作的实时检测和自动化,提高装置产量和产品质量。目前软测量技术已成为自动检测和过程优化的有力工具,并被McAvoy教授列为未来控制领域需要重点研究的几大方向之一。近年来软测量在理论研究和工业应用方面都取得了较大的进展,理论研究已经历了从线性到非线性、从静态到动态、从无校正到有校正功能的过程。

软测量技术工业应用成功实例不少。国外有不少公司以商品化软件的形式推出各种软测量仪表,已广泛应用于实际生产过程,取得了明显的经济效益。我国部分企业引进了这项技术,但这些软件价格昂贵。国内在软测量的理论研究和工业应用上也进行了大量工作,并取得了较好的效果。

本书是在总结国内外研究成果及工业应用实例基础上,结合作者多年来在软测量技术方面研究成果编写而成的。由于作者水平有限,缺点和不足之处在所难免,恳请读者批评指正。

本书由俞金寿主编,参加编写有刘爱伦、张克进、仲蔚、徐敏、桑林刚等。还有作者的研究生为本书的编写付出了辛勤的劳动,在此表示感谢!

本书受到高等学校博士学科点专项科研基金资助(97025109)。

作者
于上海华东理工大学
2000年4月

内 容 提 要

本书主要阐述了软测量技术中常用的回归分析和神经网络模型及软测量工程设计,介绍软测量技术在催化裂化装置、加氢裂化装置、裂解炉、延迟焦化装置、常压塔上的应用以及精馏塔和反应器产品质量软测量。本书深入浅出,理论联系实际,力图使读者掌握软测量设计方法和工程应用技术。

本书适合从事过程控制的工程技术人员及有关高校自动化专业的师生阅读和参考。

目 录

第 1 章 概述	1
1.1 软测量技术的数学描述和结构	1
1.1.1 软测量的数学描述	1
1.1.2 软测量的结构	2
1.2 软测量技术	2
1.2.1 影响软测量性能的因素	2
1.2.2 软测量模型	4
1.2.3 软测量模型的在线校正	7
第 2 章 软测量建模方法研究——回归分析	8
2.1 多元线性和逐步回归	8
2.1.1 多元线性回归(MLR)	8
2.1.2 多元逐步回归(MSR)	9
2.2 主元分析和主元回归(PCA、PCR)	9
2.3 部分最小二乘法(PLS)	11
2.4 仿真结果	12
2.5 小结	16
第 3 章 软测量建模方法研究——人工神经网络	17
3.1 引言	17
3.2 BP 网络	18
3.2.1 BP 网络的基本结构和算法	18
3.2.2 BP 网络的改进算法	20
3.3 RBF 网络	24
3.3.1 RBF 网络的结构和算法	24
3.3.2 RBF 网络的改进算法	29
3.4 遗传算法与神经网络的结合	30
3.4.1 遗传算法简介	30
3.4.2 GA-BP 算法	32
3.4.3 GA-RBF 算法	36
3.5 回归方法与 ANN 结合的混合方法	37
3.6 小结	40
第 4 章 软测量工程设计	41
4.1 软测量的设计步骤	41
4.2 过程数据预处理	42
4.2.1 异常数据的剔除	42
4.2.2 数据的平滑	43
4.2.3 平滑数据的建模	43
4.3 数据校正	46

4.3.1	过程测量模型	47
4.3.2	数据协调技术	47
4.3.3	显著误差的检测	48
4.3.4	动态过程数据校正	49
4.4	基于神经网络的数据校正技术及应用	50
4.4.1	基于神经网络的数据校正技术	50
4.4.2	工业应用	51
4.5	模型校正	54
第5章	软测量在催化裂化分馏塔的应用	56
5.1	工艺流程简介	56
5.2	粗汽油干点的软测量	57
5.3	分馏塔的质量控制	60
5.3.1	粗汽油干点控制基本方法	60
5.3.2	基于软测量模型的粗汽油干点控制	61
5.4	轻柴油凝固点的软测量及控制	62
第6章	软测量在加氢裂化分馏塔的应用	64
6.1	工艺简介	64
6.2	航煤干点软测量	65
6.2.1	输入变量选择及数据处理	65
6.2.2	航煤干点 BP 网络模型	66
6.2.3	航煤干点 RBF 网络模型	67
6.2.4	航煤干点 PLS 算法模型	69
6.2.5	仿真结果比较	69
6.2.6	航煤干点的软测量工程实施	71
6.3	柴油倾点软测量	72
6.3.1	输入变量选择及数据处理	72
6.3.2	柴油倾点软测量模型	72
6.3.3	柴油倾点软测量工程实施	73
6.4	第一分馏塔多变量系统的软测量	74
第7章	软测量在乙烯装置裂解炉的应用	78
7.1	工艺简介	78
7.2	裂解炉的炉管外壁最高温度的软测量	79
7.2.1	训练样本集的获取	79
7.2.2	基于模糊神经网络的软测量模型	80
7.3	裂解炉出口乙烯产品和丙烯产品收率软测量	82
7.3.1	训练样本集的获取	82
7.3.2	基于模糊神经网络的软测量模型	82
7.4	基于软测量的逆模推断控制系统设计	84
7.4.1	逆模推断理论	84
7.4.2	裂解炉的裂解深度逆模推断控制	86

第 8 章 软测量在常压塔的应用	89
8.1 柴油凝固点的软测量	89
8.1.1 数据处理	89
8.1.2 软测量回归模型	90
8.2 筛料干点的软测量	93
8.2.1 数据处理	93
8.2.2 软测量模型	94
8.3 常一线干点、常三线 90% 点软测量	96
8.3.1 软测量原理框图	96
8.3.2 软测量的实施	97
8.4 基于软测量的柴油凝固点的控制	99
第 9 章 软测量在延迟焦化装置的应用	101
9.1 工艺简介	101
9.2 粗汽油干点软测量	101
9.2.1 基于 PLS 的粗汽油干点软测量模型	102
9.2.2 基于 RBFN 的粗汽油干点软测量模型	102
9.2.3 基于 PLS-RBFN 的粗汽油干点软测量混合模型	103
9.3 基于 RBF 神经网络的延迟焦化液体收率模型	104
9.3.1 问题描述	104
9.3.2 基于 RBFN 的延迟焦化液体产品收率模型	104
第 10 章 精馏塔与反应器产品质量的软测量和控制	107
10.1 丙烯丙烷精馏塔丙烯浓度的软测量及控制	107
10.1.1 辅助变量的选择	107
10.1.2 估计模型建立	108
10.1.3 在线校正	108
10.1.4 推断控制方案	109
10.2 丁二烯装置萃取塔反丁烯-2 的软测量	110
10.3 乙烯精馏塔塔底乙烯浓度的软测量	111
10.3.1 基于最小化二乘法的估计模型	112
10.3.2 基于神经网络的估计模型	112
10.3.3 实例仿真结果比较	113
10.4 氯化氢的软测量及控制	114
10.5 烃类转化反应器出口气体中 CH_4 的软测量	115
10.6 酯化釜中酯化率软测量及控制	117
10.7 聚丙烯腈粘度的软测量	119
10.7.1 辅助变量的选择	119
10.7.2 模型结构的确定	119
10.7.3 模型的在线校正	120
10.7.4 软测量系统的实施	120
参考文献	122

第 1 章 概 述

一切工业生产的目的是为了获得合格的产品，于是质量控制成为所有控制的核心。为了实现良好的质量控制，就必须对产品质量或与产品质量密切相关的重要过程变量进行严格控制。然而，由于在线分析仪表（传感器）不仅价格昂贵，维护保养复杂，而且由于分析仪表滞后大，最终将导致控制系统的性能下降，难以满足生产要求。这在工业生产中实例很多，例如石油化工生产过程中的精（分）馏塔产品成分、塔板效率、干点、倾点、闪点，反应器中反应物浓度、转化率、催化剂活性，高炉铁水中的含硅量，生物发酵罐中的生物量参数等。近年来，为解决这类变量的测量问题，软测量技术得到了很大发展。

软测量的基本思想是把自动控制理论与生产工艺过程知识有机结合起来，应用计算机技术，对于一些难于测量或暂时不能测量的重要变量（称之为主导变量），选择另外一些容易测量的变量（称之为辅助变量或二次变量），通过构成某种数学关系来推断和估计，以软件来代替硬件（传感器）功能。这类方法具有响应迅速，连续给出主导变量信息，且投资低、维护保养简单等优点。

本书介绍的重点是软测量的方法和工业应用。首先简单回顾软测量技术的数学形式和结构以及影响因素，比较统计回归分析和人工神经网络用于软测量建模的优缺点，在前人研究的基础上提出几种改进算法，以克服现有方法的局限性。然后根据实际工业对象，将软测量技术应用于催化裂化装置、加氢裂化装置、常减压装置、延迟焦化装置、乙烯裂解炉、精馏塔和反应器等工业过程，实现了基于软测量的质量控制系统。仿真研究和实际应用都显示了软测量技术的可行性和先进性。我们相信随着软测量技术在理论研究和实际应用中的不断发展和完善，它将成为工业控制舞台上的一个重要角色，并取得令人满意的经济和社会效益。

1.1 软测量技术的数学描述和结构

软测量技术的理论根源是 20 世纪 70 年代 Brosilow 提出的推断控制。推断控制的基本思想是采集过程中比较容易测量的辅助变量 (Secondary Variable)，通过构造推断估计器来估计并克服扰动和测量噪声对过程主导变量 (Primary Variable) 的影响^[3]。推断控制策略包括估计器和控制器的设计，两部分的设计可以独立进行，给设计带来极大的便利。控制器的设计可采用传统或先进控制方法。估计器的设计是根据某种最优准则，选择一组既与主导变量有密切联系，又容易测量的辅助变量，通过构造某种数学关系，实现对主导变量的在线估计^[3]。软测量技术正体现了估计器的特点。在以软测量的估计值作为反馈信号的控制系统中，软测量仪表除了能“测量”主导变量，还可估计一些反映过程特性的工艺参数，如精馏塔的塔板效率、反应速率和催化剂的活性等，为实现产品质量的实时检测与控制奠定基础。

1.1.1 软测量的数学描述

图 1.1 表示过程的输入输出关系。

软测量的目的就是利用所有可以获得的信息求取主导变量的最佳估计值，即构造从可测信息集 θ 到 $\hat{y}$ 的映射^[7]。可测信息集 θ 包括所有的可测主导变量 y (y 可能部分可测)、辅助变量 θ 、控制变量 u 和可测扰动 d_1 。

$$\hat{y} = f(d_1, u, \theta) \quad (1-1)$$

$f(\cdot)$ 为估计函数关系,即软测量模型。在实际生产中,工况处于平稳操作状态时,式(1-1)所示的软测量模型可以简化为式(1-2)表示的稳态模型

$$\hat{y} = K\theta \quad (1-2)$$

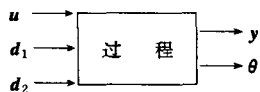


图 1.1 过程的输入输出关系
 y —主导变量; θ —可测的辅助变量;
 d_1 —可测扰动; d_2 —不可测扰动;
 u —控制变量

在这样的框架结构下,软测量的性能主要取决于过程的描述、噪声和扰动的特性、辅助变量的选取以及最优准则。显然实现软测量的基本方法是构造一个数学模型,但软测量模型不同于一般意义下的数学模型,它强调的是通过辅助变量 θ 获得对主导变量 y 的最佳估计,而一般的数学模型主要反映 y 与 u 或 d 之间的动态或稳态关系。

1.1.2 软测量的结构

软测量技术的核心是建立工业对象的精确可靠的模型。初始软测量模型是对过程变量的历史数据进行辨识而来的。在现场测量数据中可能含有随机误差甚至显著误差,必须经过数据变换和数据校正等预处理,将真实信号从含噪声的混合信号中分离出来,才能用于软测量建模或作为软测量模型的输入。软测量模型的输出就是软测量对象的实时估计值。在应用过程中,软测量模型的参数和结构并不是一成不变的,随时间迁移工况和操作点可能发生改变,需要对其进行在线或离线修正,以得到更适合当前状况的软测量模型,提高模型的适合范围。本文提出如图 1.2 所示的软测量结构,用以表明在软测量中各模块之间的关系。

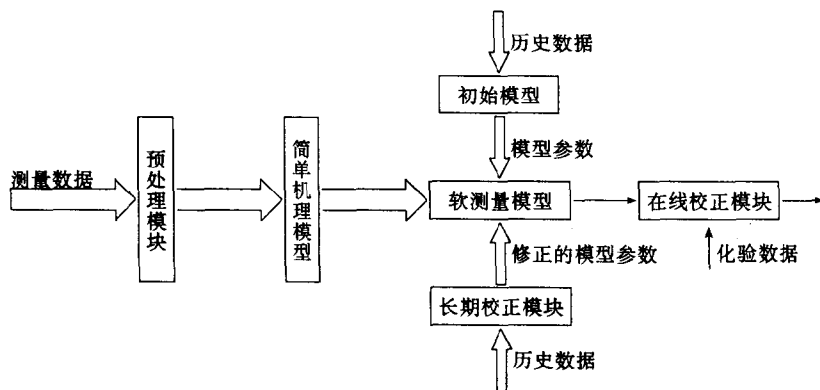


图 1.2 软测量结构

1.2 软测量技术

1.2.1 影响软测量性能的因素

1.2.1.1 辅助变量的选择

辅助变量的选择确定了软测量的输入信息矩阵,因而直接决定了软测量模型的结构和输出。辅助变量的选择包括变量类型、变量数量和检测点位置的选择。这三个方面是互相关联、互相影响的,不但由过程特性决定,还受设备价格和可靠性、安装和维护的难易程度等外部因素制约。

(1) 变量类型的选择 可以根据以下原则选择辅助变量^[8]。

- ① 灵敏性: 能对过程输出或不可测扰动作出快速反应;
- ② 特异性: 对过程输出或不可测扰动之外的干扰不敏感;

- ③ 过程适用性：工程上易于获得并能达到一定的测量精度；
- ④ 精确性：构成的软测量估计器满足精度要求；
- ⑤ 鲁棒性：构成的软测量估计器对模型误差不敏感。

辅助变量的选择范围是对象的可测变量集。遗憾的是以上选择原则难以用定量的形式表示，而现代工业某些对象具有数百个检测变量，面对如此庞大的可测变量集，若采用定性分析的方法对每个变量逐一进行判断，工作量非常大，简直不可能实现。现在主要根据工业对象的机理、工艺流程以及专家经验来选择辅助变量。这样确定的辅助变量仍可能不少，并且相关程度差异大，如果将它们全用来作为软测量的输入变量，模型势必十分复杂，不但不能提高软测量的精度，而且重要信息仍有可能被遗漏。知识发现^[15,16] (Knowledge Discovery on Database) 和数据融合^[17,18] (Data Fusion) 技术是两种十分诱人的方法，能帮助我们 from 浩瀚无边的数据海洋中自动挑选出合适的信息。

(2) 变量数目的选择 显然辅助变量可选数目的下限是被估计的变量数。而最佳数目则与过程的自由度、测量噪声以及模型的不确定性有关。Brosilow 根据投影误差最小和过程增量矩阵的条件数最小的原则，认为辅助变量过多会增加估计器对模型误差的灵敏度，但如果模型结构合理，辅助变量的数量的增加将有助于克服测量噪声的影响^[3]。Lee 等将该方法推广到一般结构模型和动态情形^[19]。Morari 讨论了线性与非线性软测量极小化估计值对测量噪声和不可测干扰灵敏度的最佳变量数目选择方法^[20]，但这类方法对过程模型和过程不确定性作了不合现实的假设，只能用于简单情况。罗荣富等认为：应从系统的自由度出发，确定辅助变量的最小数目，结合具体过程的特点适当增加，以更好地处理动态性等问题^[21]。

(3) 检测点位置的选择 检测点位置的选择方案十分灵活。Brosilow 根据投影误差最小原则，用试差法选择精馏塔特性温度的检测点位置^[3]，但对于大型精馏塔就不适用该法了。奇异值分解 (SVD, Singular Value Decomposition) 方法通过对过程静态增益矩阵进行奇异值分解，根据奇异值与输出旋转矩阵元素的对应关系来选择检测点。罗荣富认为用 SVD 原理选择精馏塔检测点位置的方法具有定量和精确的特点，能适应操作点的变化^[22]。Moore 等根据 SVD 原理提出了一系列确定检测点位置的经验准则^[23]，但 Lee 等认为这些准则受到模型不确定性、系统动态性、不可测扰动以及控制结构的限制^[19]，他将 SSV (Structured Singular Value) 理论^[19,24]用于精馏塔和反应器的检测点的确定。此外还有 Multiple Gauss-Jordan 方法^[25]以及 Yaqoob 等提出的 SENNET 算法^[26]和 GSENNET 算法^[27]。刘良宏等证明最佳测量位置主要由过程的动态特性决定，系统噪声和测量噪声对之影响很小^[28]。他以一个最小化的空间域上积分函数表达最佳测点位置的目标函数，用非线性约束优化方法求解系统具有一个或多个测点时的最佳测点位置。

1.2.1.2 数据预处理

随着计算机技术的发展，数据的采集量大大增加。准确的测量数据直接反映了生产状况，为过程监控、优化、计划调度以及决策分析提供了坚实的基础。测量数据通过安装在现场的传感器、变送器等仪表获得，受到仪表精度、测量原理和测量方法、生产环境的影响，测量数据都不可避免含有误差，甚至有严重的显著误差。如果将这些数据直接用于软测量，不但得不到正确的主导变量估计值，还可能误导操作，引起生产波动，导致系统整体性能下降，甚至整个生产过程失败。因此对原始工业数据进行预处理（数据校正和数据变换）以得到精确可靠的数据是软测量成败的关键，具有十分重要的意义。

(1) 数据校正

① 随机误差的处理 为了尽可能消除测量中的随机噪声,保留真实信号,常采用数字滤波方法,即利用信号与噪声随自变量改变的频率不同将真实信号与噪声分离。常用滤波方法有高通滤波、低通滤波、数据平滑等,现已形成各种算法软件包。随着系统精度要求提高,近年又提出了数据协调(Data Reconciliation)技术^[29~31]。其基本思想是:根据由物料平衡和能量平衡等方程建立起来的精确的数学模型,以估计值与测量值的方差最小为优化目标,构造一个估计模型,为测量数据提供一个最优估计,以及时准确地检测误差的存在,进而剔除或补偿其影响。数据协调实质上是一个在等式或不等式约束下的线性或非线性优化问题^[31,32]。

② 显著误差的处理 显著误差出现的几率虽很小,但它的存在会严重恶化数据的品质,从而影响软测量模型的正确性和可靠性。因此及时侦破、剔除和校正这类数据是误差处理的首要任务。检测显著误差的主要方法有:

- a. 从理论上分析所有可能导致显著误差的因素并进行相应处理;
- b. 借助各种测量手段对同一过程变量进行测量,然后通过结果比较来识别显著误差,即硬件冗余法;
- c. 根据测量数据的统计特性进行检验。

目前常用方法是基于统计假设检验法,如残差分析法(Analysis of Residuals)^[32]、校正量分析法(Analysis of Adjustments)等^[33],广义似然比法^[34,35]、贝叶斯法和主元分析法^[36~39]等。李华生分析了统计假设检验法的不足,认为广义似然比法能够检验各种可用数学模型表示的显著误差^[40];贝叶斯法可利用历史错误数据改进显著误差。虽然这两种方法在理论上可行,但离应用还有较大差距。

人工神经网络技术是数据校正的一种新方法^[41~44]。Thomas 等比较了RNN、EKF 和NLP (Nonlinear Programming Techniques)三种方法在动态数据校正中的应用^[42,43],认为后两种方法的实现需要精确的过程模型,而RNN法可用来校正包括Gaussian噪声在内的过程测量数据。对于特别重要的过程参数还可采用硬件冗余的方法以提高安全性,如可用相似的检测元件或采用不同的检测原理对同一数据进行检测^[26,27]。

(2) 数据变换 数据变换包括标度(Scaling)、转换和权函数三个方面。数据变换影响着过程模型的精度和非线性映射能力以及数值优化算法的运行结果。对工业过程中出现的工程单位不同或数值上相差几个数量级的测量数据,利用合适的因子进行标度,不致因为机器字长而丢失有用的信息或引起算法的不稳定性。转换包括直接转换和寻找新变量代替原变量两方面。通过转换可有效地降低原对象的非线性特性(如进行对数转换^[45])。权函数可实现对变量动态特性的补偿,使稳态模型实现对过程的动态估计成为可能。

1.2.2 软测量模型

软测量模型是软测量技术的核心。它不同于一般意义下的数学模型,强调的是通过辅助变量来获得对主导变量的最佳估计。

1.2.2.1 机理方法

机理模型通常由代数方程组或微分方程组组成。在对工业对象的物理化学过程获得了全面清晰的认识后,通过列写对象的平衡方程(如物料平衡、能量平衡、动量平衡、相平衡等)和反映流体传热传质等基本规律的动力学方程、物性参数方程和设备特性方程等,确定不可测主导变量和可测辅助变量的数学关系,建立估计主导变量的精确数学模型^[46~48]。机理建模的应用受模型准确程度的影响,而且由于要求解方程组,计算量大,收敛慢,难以满足在线实时估计的要求,对模型进行简化必然会降低模型的精度。计算时间和计算精度的矛盾

制约了机理建模的应用。由于大多数实际过程，尤其是化工过程存在着严重的非线性和不确定性，难以单独采用机理方法，但可以借助已知的对象特性确定经验模型的结构或辅助变量，再利用经验方法确定模型的具体参数。这种方法目前应用最广泛。

1.2.2.2 经验方法

经验模型是根据测量对象的外特性来描述其动态行为的模型。由测量数据直接求取模型的方法称为系统辨识；根据既定模型结构由测量数据确定参数的方法称为参数估计。

(1) 基于自适应推理模型方法 该方法将状态估计、参数估计和自适应控制原理用于获得软测量模型。设计方法可分为基于状态空间模型和基于过程输入输出模型两种方法。

① 基于状态估计的方法 假定已知对象的状态空间模型为^[49,50]

$$\dot{x} = Ax + Bu + Ev \quad (1-3)$$

$$y = Cx \quad (1-4)$$

$$\theta = C_\theta x + w \quad (1-5)$$

Kalman 滤波器的解为

$$\hat{y} = C (I - A + k_t C_\theta)^{-1} (k_t \theta + Bu) \quad (1-6)$$

其中 x 是状态向量， y 和 θ 分别表示主导变量和辅助变量， v 、 w 表示白噪声。 k_t 为 Kalman 滤波器的增益： $k_t = X C_\theta^T w^{-1}$ 。

基于状态估计的软测量就是在建立以上生产过程的动态数学模型（包括广义动态数学模型）时，将不可测主导变量 y 看作状态变量，把可测的辅助变量 θ 看作输出变量，这样对主导变量的软测量就转化为控制理论中典型的状态观测或状态估计命题，进而可采用 Luenberger 观测器^[51]和 Kalman 滤波器或自适应 Kalman 滤波器 (AKF)、扩展 Kalman 滤波器 (EKF) 方法^[52~54]得到状态的估计值。Kalman 滤波器虽然是处理含噪音过程数据的有效工具，但它需要事先知道过程噪音和测量噪音的协方差矩阵，这对于许多实际工业过程来说难以实现。而且采用这种方法，基于系统工作在操作点附近时可用线性模型近似表示的假设，对于非线性严重的对象会产生很大的估计偏差，甚至出现算法发散的现象。

② 基于输入输出估计^[55] 假定已知对象输入输出关系如下

$$y = G_u u + G_d d \quad (1-7)$$

$$\theta = F_u u + F_d d \quad (1-8)$$

通过 Brosilow 估计器来构造^[3]

$$\hat{y} = K_B \theta + (G_u - K_B F_u) u \quad (1-9)$$

其中 $K_B = G_d F_d^+$ ， F_d^+ 是 F_d 的伪逆。当可测扰动 d 为 0 时，该问题简化为投影估计器^[56]。对于动态模型，可以转化为基于 ARMAX 模型的递推估计问题进行求解^[57]或采用自适应输入输出估计方法在线辨识过程参数。Ronald 介绍了非线性输入输出模型的 Hammerstein 和 Wiener 结构以及 NARMAX 的辨识过程^[58]。

这种方法同样需要一个准确的对象模型，而我们得到的控制模型通常是简化的数学模型，过程噪声与理想白噪声相差甚远，因此这种方法的应用实例并不多。

(2) 基于回归分析方法 回归分析方法是一种经典的建模方法，不需建立复杂的数学模型，只要收集大量过程参数和质量分析数据，运用统计方法将这些数据中隐含的对象信息进行浓缩和提取，从而建立主导变量和辅助变量之间的数学模型。

根据采用的数学方法的不同，可以将回归分析方法分为线性回归和非线性回归。线性回归方法的实质是对象函数关系在操作点附近的一阶泰勒展开式，算法简单，物理意义明确，但

对测量误差比较敏感。当对象的非线性特性比较显著或操作点变动范围较大时,泰勒展开式中的高阶项就不能忽略了,此时用线性回归方法建立的模型精度就会明显下降,应考虑选用非线性回归方法。线性回归中最经典的方法是最小二乘法,在此基础上又发展了主元回归法^[59]和部分最小二乘法^[60],特别适合辅助变量多且变量间相关性强的系统。对于线性系统,采用 PCR(主元回归)和 PLS(部分最小二乘法)的效果完全一样;对于非线性系统,后者效果稍好。

尽管用机理分析确定模型结构、用历史测量数据估计模型参数的混合方法得到了广泛的应用,回归分析方法仍存在几个缺陷难以解决:模型准确性受样本真实性的影响,适用范围受样本容量的制约。因此只有当长期的生产过程可以提供大量正确的样本时,该方法才能得到正确可靠的实施。

(3) 基于人工智能的方法

① 人工神经网络(ANN, Artificial Neural Networks) ANN 是利用计算机模拟人脑的结构和功能的一门新学科,它具备优良的信息处理特性:应用 ANN 无需具备对象的先验知识,而根据对象的输入输出数据直接建模;独特的非传统的表达方式和固有的学习能力,使之在解决高度非线性和严重不确定性系统控制方面具有巨大的潜力。目前 ANN 已成功地用于复杂工业过程的动态建模、系统辨识和控制、数据分析、故障诊断等方面,显现出强大的生命力^[61~64]。ANN 是软测量的一种十分便利和有效的方法:将过程易测量的辅助变量作为神经网络的输入,将软测量对象作为 ANN 的输出,通过网络的自学习能力完成软测量对象的估计。此外使用 ANN 进行软测量可以抑制辅助变量的测量噪声干扰。

在软测量中常用的 ANN 结构有反向传播网络(BPN, Backpropagation Neural Networks)^[65~69]、径向基函数神经网络(RBFN, Radial Basis Function Neural Networks)^[70~72]、回流网络(RNN, Recurrent Neural Networks)^[73~76]等。但 ANN 并不是完美无缺的,在结构和算法方面还存在许多问题,如 ANN 拓扑结构只能凭经验加试算进行选择;训练样本的空间分布和训练方法对 ANN 的性能有极大的影响;ANN 学习和预测算法有待改进;ANN 训练数据集的正交性和完备性问题;ANN 的知识推理等问题。因此,进一步研究基于 ANN 的软测量技术具有很大的学术意义和应用价值。

针对以上问题人们进行了大量的工作,提出各种各样的改进算法。文献[77、78]提出将先验知识和 ANN 结合的混合模型,利用过程的已知机理特性和过程变量之间的关系指导 ANN 的结构选择,补偿 ANN 的不可解释性,提高 ANN 的学习效率,避免有限次学习引起数据不稳定;同时 ANN 也可以补偿先验模型的不确定性和不完整性。Michael 还给出了混合模型的串行结构和并行结构^[77]。将 ANN 与其他人工智能方法相结合的方法正受到越来越多的关注,如专家系统神经网络^[79~81]、模糊神经网络^[82~84]和小波神经网络^[85~87]等。

对于大规模复杂过程,只用一个网络来映射全部的初始样本空间,必然导致网络神经元数目较大,网络的运算和学习速度变慢,给模型的在线运算带来不利的影响,而且不同样本间的学习过程往往互相干扰。针对此问题提出了局部训练^[88,89]的方法,用不同的 ANN 表示不同工况对应的过程模型的方法^[90]以及将用多个网络的逻辑组合或线性组合^[91,92]建立复杂对象模型的方法。

② 模糊技术 模糊技术模仿人脑的逻辑思维,用于处理模型未知或不精确的控制问题,在软测量中也得到大量的应用^[93~96]。将神经网络和模糊技术有机结合起来,取长补短,形成了神经模糊技术^[97~101]。目前主要体现在三方面:基于神经元网络的模糊控制,让 ANN 学习

已有的经验规则，也可采用学习或聚类的方法从输入输出数据中得到控制规则，然后用控制性能指标作指导，对控制规则进行细化和调整；模糊神经网络既可以处理模糊信息，完成模糊推理功能，又具有并行处理特性；用模糊逻辑增强的神经网络，可以提高 ANN 的学习速度或设计特殊结构的 ANN。Chen 等提出了将 ANN、随机搜索、模糊分类、信息论等结合起来的混合方法^[102]，解决特别复杂的问题。

1.2.3 软测量模型的在线校正

由于软测量对象的时变性、非线性以及模型的不完整性等因素，必须考虑模型的在线校正，才能适应新工况。软测量模型的在线校正可表示为模型结构和模型参数的优化过程，具体方法有自适应法、增量法和多时标法。对模型结构的修正往往需要大量的样本数据和较长的计算时间，难以在线进行。为解决模型结构修正耗时长和在线校正的矛盾，提出了短期学习和长期学习的校正方法。短期学习由于算法简单、学习速度快，便于实时应用。长期学习是当软测量仪表在线运行一段时间积累了足够的新样本模式后，重新建立软测量模型。

软测量在线校正必须注意的问题是过程测量数据与质量分析数据在时序上的匹配^[103]。对于配备在线成分分析仪的装置，系统主导变量的真值可以连续得到（滞后一段时间），在校正时只要相应地顺延相同的时间即可。对于主导变量真值依靠人工化验的情况，从过程数据反映的产品质量状态到取样位置需要一定的流动时间，而从取样后到产品质量数据返回现场又要耗费很长的时间，因此利用分析值和过程数据进行软测量模型校正时，应特别注意保持两者在时间上的对应关系，否则在线校正不但达不到目的，反而可能引起软测量精度的下降，甚至完全失败。

第2章 软测量建模方法研究——回归分析

回归分析是一种最常用的经验建模方法,为寻找多个变量之间的函数关系或相关关系提供了有效的手段。经典的回归分析方法是最小二乘法^[104](LS, Least Squares),为了避免矩阵求逆运算可以采用递推最小二乘法(RLS),为了防止数据饱和还可采用带遗忘因子的最小二乘法。在最小二乘法的基础上又提出了许多改进算法,如逐步回归等。近年来比较流行的方法是主元分析(PCA, Principal Componet Analysis)和主元回归(PCR, Principal Componet Regression)以及部分最小二乘法(PLS, Partial Least Square)。PCR可以解决共线性问题,PLS同时考虑了输入输出数据集。本章将简单介绍这几种方法的基本原理,并通过仿真比较这些方法的优点和局限性。

2.1 多元线性和逐步回归

2.1.1 多元线性回归(MLR)

多元线性回归基于最小二乘法。假设有因变量 y 和 m 个自变量 $x_1, x_2, \dots, x_m$, MLR的目标是建立一个从 m 个不相关变量 x_i 到估计量 $\hat{y}$ 的线性映射

$$\hat{y} = b_1 x_1 + b_2 x_2 + \dots + b_m x_m + b_0 \quad (2-1)$$

式中 $\hat{y}$ ——估计量;

x_i ——互不相关变量($i=1, 2, 3, \dots, m$);

b_i ——回归系数;

b_0 ——偏置常数。

用矩阵表示可写为

$$Y = XB + b_0 \quad (2-2)$$

$X = [x_1, x_2, \dots, x_m]$: $n \times m$ 维过程输入数据矩阵(n —测量次数; m —自变量数);

$Y = [y_1, y_2, \dots, y_n]^T$: $n \times 1$ 维的过程输出数据矩阵;

$B = [b_1, b_2, \dots, b_m]^T$: $m \times 1$ 维系数矩阵。

如果 $n > m$, 则式(2-2)的解为

$$B = (X^T X)^{-1} X^T Y \quad (2-3)$$

显然 MLR 问题是否有解取决于 $(X^T X)^{-1}$ 是否存在。当 X 中存在线性相关的变量时, X 为病态矩阵,此时不能采用 LS 方法,只能采用 PCR 或 PLS 算法。多元非线性回归问题^[105]可以转化为多元线性问题来解决,也可采用正交多项式等方法。

为了衡量回归方程的拟合品质,定义复相关系数 R ($0 \leq R \leq 1$), R 越接近1,表明方程拟合越好。令,

$$q_i = b_0 + b_1 x_{1,i} + \dots + b_m x_{m,i}, \bar{y} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i$$
$$R = \sqrt{1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - q_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}} \quad (2-4)$$

定义偏相关系数 V_j 来评价 x_j 对于 y 的作用, V_j 越大,说明 x_j 对于 y 的作用越显著,该

变量不能剔除

$$V_j = \sqrt{1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - q_i)^2}{\sum_{i=1}^n [y_i - (b_0 + \sum_{\substack{k=1, \\ k \neq j}}^m b_k x_{k,i})]^2}} \quad (2-5)$$

为了评价经验模型的拟合和预测效果,定义了以下误差形式

$$\text{误差平方和} \quad SSE = (Y - \tilde{Y})^T (Y - Y) \quad (2-6)$$

$$\text{均方误差} \quad MSE = SSE/n \quad (2-7)$$

2.1.2 多元逐步回归 (MSR)

多元逐步回归的基本思想是^[106]将变量逐一引入回归方程。在引入新变量后用偏回归平方和检验其显著性,若显著才能将该变量加到方程中;方程加入了新变量后,要对原有的变量重新用偏回归平方和进行检验,若某个变量变得不显著时,要把它从方程中删除。重复以上步骤,直到所有的老变量均不能剔除,新变量也不能加入时回归过程才结束。该算法综合了对各输入变量的贡献程度进行检测的过程,可以剔除输入信息中的不重要部分。

令 $X' = [x_1, x_2, \dots, x_m, y]$, 算法步骤如下。

步骤 1: 将 X' 按列标准化。

步骤 2: 求初始相关系数矩阵 R

$$r_{ij} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_{ti} - \bar{x}_i)(x_{tj} - \bar{x}_j)}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_{ti} - \bar{x}_i)^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_{tj} - \bar{x}_j)^2}} \quad (i, j=1, 2, \dots, m+1)$$

其中

$$\bar{x}_i = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_{ti}, \bar{y} \quad (i=1, 2, \dots, m+1)$$

步骤 3: 逐步考察引入的自变量的偏回归平方和

$$V_i = \frac{r_{i,m+1} r_{m+1,i}}{r_{i,i}} \quad (i=1, 2, \dots, m)$$

若 $V_i < 0$, 则对应的 x_i 是选入回归方程的因子。从所有 $V_i < 0$ 的 V_i 中选出 $V_{\min} = \min |V_i|$, 其对应的因子为 $x_{\min}$ 。检验 $x_{\min}$ 的显著性, 若 $\frac{\phi V_{\min}}{r_{m+1,m+1}} < F_2$, 则剔除因子 $x_{\min}$, 并对系数相关矩阵 R 进行该因子的消元变换。

若 $V_i > 0$, 则对应的 x_i 是待选入回归方程的因子。从所有 $V_i < 0$ 的 V_i 中选出 $V_{\max} = \max |V_i|$, 其对应的因子为 $x_{\max}$ 。检验 $x_{\max}$ 的显著性, 若 $\frac{(\phi-1) V_{\max}}{r_{m+1,m+1} - V_{\max}} \geq F_1$, 则说明因子 $x_{\max}$ 应被选入, 并对系数相关矩阵 R 进行该因子的消元变换。

步骤 4: 重复步骤 3, 直到无因子可剔除或选入为止。

2.2 主元分析和主元回归 (PCA、PCR)

在研究工业过程时, 为了全面了解和分析问题, 通常记录了许多与之有关的变量。这些变量虽然不同程度地反映了过程的部分信息, 但某些变量之间可能存在相关性, 在 2.1 节中已经提到当 X 中存在线性相关的变量时, $(X^T X)^{-1}$ 不存在, 不能采用 MLR 方法; 若 X 的变量接近线性关系, 则 MLR 方法计算不稳定。为了解决线性回归时由于数据共线性而导致病态协方差矩阵不可逆问题, 以及在尽可能保持原有信息的基础上减少变量个数, 简化建模, 可