

# 基于潜变量模型的复杂过程生产设计方法

王小刚<sup>1</sup>, 沙毅<sup>1</sup>, 朱丽春<sup>2</sup>

(1. 东北大学 信息科学与工程学院, 辽宁 沈阳 110819; 2. 中国科学院 国家天文台, 北京 100012)

**摘 要:** 针对工业品生产过程控制中输入变量的确定及零空间问题求解等复杂过程的生产设计问题, 在现有的多元潜变量建模及生产设计等相关问题研究成果的基础上, 深入研究了主元回归方法的应用策略和生产设计问题, 提出了一种基于潜变量模型的复杂过程生产设计方法. 通过与基于标准回归模型生产设计方法对比, 展示了该方法的优越性. 该生产设计方法的操作条件不仅能够满足工业生产过程产品质量的要求, 而且与历史工况的关联结构和范围保持一致, 为零空间问题的解决提供了可行方案. 最后通过仿真验证了该方法求解含有零空间的生产设计问题的有效性.

**关 键 词:** 生产设计; 主元回归; 零空间; 多元潜变量; 模型

中图分类号: TP 302.1

文献标志码: A

文章编号: 1005-3026(2015)10-1408-04

## Production Design Method Based on Latent Variable Model for Industry Processes

WANG Xiao-gang<sup>1</sup>, SHA Yi<sup>1</sup>, ZHU Li-chun<sup>2</sup>

(1. School of Information Science & Engineering, Northeastern University, Shenyang 110819, China; 2. National Astronomical Observatories, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100012, China. Corresponding author: WANG Xiao-gang, E-mail: wangxiaogang@ise.neu.edu.cn)

**Abstract:** In view of determining the manipulated variables in the industrial control process and solving the null space problems during the production design of the complex industrial process, an in-depth study about the application strategy of the principal component regression was done on the basis of the existing multi-latent variable modeling methods. In addition, a production design strategy based on the latent variable was proposed. Compared with the standard regression model, the advantages of the multivariate latent variable method on solving production design problems were revealed. The proposed design method could not only satisfy the requirement of product quality, but also be consistent with the correlation structure of the historical condition and scope, which could be regarded as a feasible scheme to solve the null space problems. The simulation results showed the effectiveness of the designed method for solving production design problems of null space.

**Key words:** product design; principal component regression; null space; multivariate latent variable; model

在工业生产中, 为了达到一定的经济指标和产品质量要求, 经常需要对操作变量做相应的调整, 确定生产某种新的期望等级产品  $\mathbf{y}_{\text{des}}^T$  所需操作条件的过程称为生产设计<sup>[1-3]</sup>. 如果过程已经有大量的运行数据信息, 就可以利用合适的建模方法建立过程的确定性模型来反映过程的输入输出特性, 那么利用过程的确定性模型来求解生产

设计问题是一种可行方案<sup>[3-5]</sup>. 近年来, 生产设计技术受到人们的关注, 并取得了一些研究成果<sup>[6]</sup>, 其中, 文献[1]提出的零空间概念和潜变量建模方法对求解生产设计问题具有更重要的意义. 实际上零空间是模型输入潜变量空间的子空间<sup>[7-9]</sup>, 它代表了一个过程操作窗口, 对应于生产相同等级产品的一系列过程操作条件. 在此基础

收稿日期: 2014-09-09

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(11273001).

作者简介: 王小刚(1960-), 男, 辽宁沈阳人, 东北大学副教授.

上,文献[10]提出了单变量零空间分析方法,通过每对过程变量间的关系图来确定一个生物过程的运行区域. 文献[11-12]使用同样的方法,利用一个催化裂化(FCC)过程的历史数据确定过程的一个由 PCA 模型得分所定义的过程运行区域. 但是,实际工业过程中的变量数目通常非常大,而且运行数据的内部相关性需要加以考虑,因而这种方法的应用受到限制. 目前,潜变量建模及零空间特性的研究取得进展<sup>[13-14]</sup>,但用于多变量过程生产设计问题的相关研究鲜见报道. 本文从求解生产设计问题的标准回归模型的对比分析入手,深入研究了基于主元回归的潜变量模型的应用策略,并利用实际过程数据仿真分析了具有零空间特性的多变量复杂工业过程的生产设计问题.

## 1 基于标准回归模型的生产设计

标准回归分析方法是输入矩阵  $X$  和输出矩阵  $Y$  经过适当的变换,然后建立操作条件  $X$  和输出产品特性  $Y$  之间的关系:

$$Y = X \cdot \beta + E \quad (1)$$

式中:  $X$  和  $Y$  的每一行分别对应经过中心标准化处理的输入变量和输出变量值;回归系数  $\beta$  的估计值  $\hat{\beta} = (X^T X)^{-1} X^T Y$  可以通过最小二乘法(OLS)得到. 当  $X$  满足  $m > n$  时会导致对  $X^T X$  求逆出现困难,可使用更稳定的修正后的最小二乘法估计法,例如岭回归分析<sup>[15]</sup>.

假设已知  $\beta$  的估计值  $\hat{\beta}$ ,建立式(1)的标准回归模型,从期望输出  $y_{des}^T$  出发,估计与其对应的过程输入变量  $x_{new}^T$ :

$$y_{des}^T = x_{new}^T \cdot \hat{\beta} \quad (2)$$

由于式(1)的标准回归模型只定义了  $X$  和  $Y$  间的外部映射关系,没有考虑输入变量间的内部关联结构,因此不能保证新操作条件  $x_{new}^T$  与历史运行策略保持一致<sup>[16]</sup>.

## 2 基于主元回归模型的生产设计

主元回归是一种典型的潜变量建模方法. 主元回归方法将  $n \times m$  维的数据矩阵  $X$  线性变换为仅含有  $A$  个独立潜变量的得分矩阵  $T$ ,每个潜变量是原始输入变量的线性组合:

$$X = T \cdot V_A^T + E \quad (3)$$

式中,  $V_A$  为权系数矩阵. 对  $X$  进行奇异值分解:

$$X = U_A \cdot \Sigma_A \cdot V_A^T + E \quad (4)$$

式中,  $\Sigma_A$  是由  $X$  的  $A$  个奇异值组成的一个对角阵. 对比式(3)和式(4),可知

$$T = U_A \cdot \Sigma_A \quad (5)$$

虽然 OLS 和主元回归(PCR)方法建立的都是线性回归模型,但是 OLS 建立的是  $Y$  与  $X$  列向量之间的映射关系,而 PCR 方法建立的是  $Y$  与  $T$  的列向量之间的映射关系:

$$\begin{aligned} \hat{X} &= T \cdot V_A^T, \\ \hat{Y} &= T \cdot B \end{aligned} \quad (6)$$

式中,  $B = (T^T T)^{-1} T^T Y$ . 由式(5)和式(6)得

$$\begin{aligned} \hat{X} &= U_A \Sigma_A V_A^T, \\ \hat{Y} &= U_A \Sigma_A B \end{aligned} \quad (7)$$

式中,  $B = \Sigma_A^{-1} \cdot U_A^T \cdot Y$ .

在求解生产设计问题时,要求新的输出质量变量对应的操作条件  $x_{new}^T$  也能具有这种关联结构,为了满足这一要求,新的操作条件  $x_{new}^T$  可以表示为

$$x_{new}^T = u_{new}^T \cdot \Sigma_A \cdot V_A^T \quad (8)$$

$u_{new}^T$  可以通过求解方程式(9)得到:

$$y_{des}^T = u_{new}^T \cdot \Sigma_A \cdot B \quad (9)$$

根据  $k$  和  $A$  的大小关系,可以分为以下几种情况.

1) 当  $k > A$  时,对式(9)求逆可以通过 OLS 按式(10)求出唯一的最小范数解  $\hat{x}_{new}^T$ :

$$\begin{aligned} \hat{u}_{new}^T &= y_{des}^T \cdot B^T \cdot (B \cdot B^T)^{-1} \cdot \Sigma_A^{-1}, \\ \hat{x}_{new}^T &= \hat{u}_{new}^T \cdot \Sigma_A \cdot V_A^T = \\ y_{des}^T \cdot B^T \cdot (B \cdot B^T)^{-1} \cdot V_A^T. \end{aligned} \quad (10)$$

2) 当  $k = A$  时,对式(9)求逆可直接按式(11)求出唯一解  $\hat{x}_{new}^T$ :

$$\begin{aligned} \hat{u}_{new}^T &= y_{des}^T \cdot B^{-1} \cdot \Sigma_A^{-1}, \\ \hat{x}_{new}^T &= \hat{u}_{new}^T \cdot \Sigma_A \cdot V_A^T = y_{des}^T \cdot B^{-1} \cdot V_A^T. \end{aligned} \quad (11)$$

3) 当  $k < A$  时,对式(9)求逆存在无数个  $\hat{x}_{new}^T$ ,这是最常见也是最困难的一种. 参照式(3),对方程(11)求广义逆可得到新的得分矩阵  $\hat{u}_{new}^T$ :

$$u_{new}^T = y_{des}^T \cdot (B^T \cdot \Sigma_A^2 \cdot B)^{-1} \cdot B^T \cdot \Sigma_A \quad (12)$$

按照式(13)可以计算新的操作条件  $\hat{x}_{new}^T$ :

$$\hat{x}_{new}^T = \hat{u}_{new}^T \cdot \Sigma_A \cdot V_A^T = y_{des}^T \cdot M_{PCR}^T \quad (13)$$

式中,

$$\begin{aligned} M_{PCR}^T &= (B^T \Sigma_A^2 B)^{-1} B^T \Sigma_A^2 V_A^T = \\ &= (Y^T U_A U_A^T Y)^{-1} Y^T U_A U_A^T X \end{aligned} \quad (14)$$

需要注意的是:式(13)只求出新的操作条件中投影到  $M^T$  空间中的那一部分,输入过程变量

空间  $\mathbf{X}$  中还存在  $\mathbf{x}_{\text{null}}^T$ , 即零空间分量.  $\mathbf{x}_{\text{null}}^T$  虽然对输出质量没有直接影响, 但可能包含重要的过程操作特征. 零空间分量位于输入潜变量空间的  $A-k$  维子空间中, 这  $A-k$  维子空间与  $k$  维  $\mathbf{M}^T$  空间正交, 任何新的操作条件都可以写成两部分之和的形式(工艺条件窗口):

$$\mathbf{x}_{\text{pred}}^T = \hat{\mathbf{x}}_{\text{new}}^T + \hat{\mathbf{x}}_{\text{null}}^T. \quad (15)$$

通过在  $A-k$  维空间中选择一系列不同的  $\mathbf{x}_{\text{null}}^T$ , 并借鉴一些过程先验知识, 可以从工艺条件窗口中选择一组最合适的过程操作条件  $\mathbf{x}_{\text{pred}}^T$ . 以  $m=3, A=2$  和  $k=1$  为例, 此时  $\hat{\mathbf{x}}_{\text{new}}^T$  和  $\mathbf{x}_{\text{null}}^T$  分别所处的潜变量空间如图 1 所示.

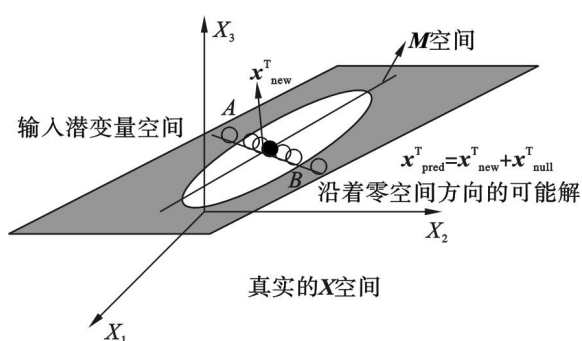


图 1 输入潜变量空间  
Fig. 1 Input latent space

图 1 中坐标轴  $X_1, X_2$  和  $X_3$  分别对应输入矩阵  $\mathbf{X}$  中的三个输入变量, 输入潜变量空间对应图 1 中的二维平面, 历史工况由该二维平面上的一个椭圆区域近似表示, 椭圆长轴和短轴的长度与  $\Sigma_A$  中两个奇异值的大小成正比. 在这个例子中,  $\mathbf{Y}$  矩阵只包含一个质量变量, 相应的  $\mathbf{M}^T$  空间也是一维的, 它定义了二维平面上不同期望等级  $\mathbf{y}_{\text{des}}^T$  求得的所有新工况  $\hat{\mathbf{x}}_{\text{new}}^T$  在潜变量空间中的轨迹. 为了确保工况  $\mathbf{x}_{\text{pred}}^T$  在历史工况所定义的椭圆区域范围内, 零分量  $\mathbf{x}_{\text{null}}^T$  必须受到输入潜变量空间和零空间交集(如图中线段  $AB$ )的限制.

### 3 仿真结果与分析

#### 3.1 工艺过程及数据

对于某生产低密度聚乙烯(LDPE)的高压管式反应器系统<sup>[16]</sup>, 这里只考虑此反应器中的两个区域, 其 5 个可测量质量变量为转化率(Conv)、数均分子量(MWn)、重均分子量(MWw)、长支链(LCB)和短支链(SCB). 6 个输入变量为进料口温度(Tin)、反应器内压力(P)、两区域的初始进料速率(Fi1, Fi2)和两区域的溶剂浓度(Cs1, Cs2). 现有 15 个不同等级的 LDPE 数据, 前 9 个

等级代表过去生产的产品等级, 作为用于建模的历史数据, 剩下的 6 个等级产品的数据用于生产设计结果好坏情况的比较标准. 另外, 描述生产过程的可测量质量变量通常都是高度相关的. 为了选择合适的产品质量变量组成输出矩阵  $\mathbf{Y}$ , 采用主元分析方法对包含所有可测量质量变量的输出矩阵进行预处理, 结果表明前 3 个主成分能够解释全部质量变量的变异信息, 解释数据变异信息能力的顺序为 MWw, MWn 和 Conv.

仿真实验分以下两种情况. 情况 1:  $\mathbf{Y}_3 = [\text{Conv MWn MWw}]$ , 考虑三个质量变量; 情况 2:  $\mathbf{Y}_2 = [\text{MWn MWw}]$ , 考虑两个质量变量. 仿真中建模所用的输入矩阵  $\mathbf{X}$  包含过去生产 9 个产品等级中的 6 个输入变量, 两种情况下的主元回归(PCR)模型的输入潜变量空间维数  $A=3$ .

#### 3.2 仿真实验

情况 1 此时  $A=k=3$ , 不存在零空间. 分别采用 PCR 和 OLS 求得 6 个新的期望等级对应过程的操作条件, 与实际操作条件比较结果如图 2 和图 3 所示.

图 2 中除第 13 个等级外, 与 OLS 模型方法相比, 通过 PCR 模型方法得出的过程操作条件离实际工况更接近.

情况 2 输入矩阵  $\mathbf{X}$  和输出矩阵  $\mathbf{Y}_2$ , 此时  $A-k=1$ , 存在 1 维零空间. 分别采用 PCR 模型和 OLS 模型求得 6 个新的期望等级对应的过程操作条件并与实际工况比较, 结果如图 4 所示.

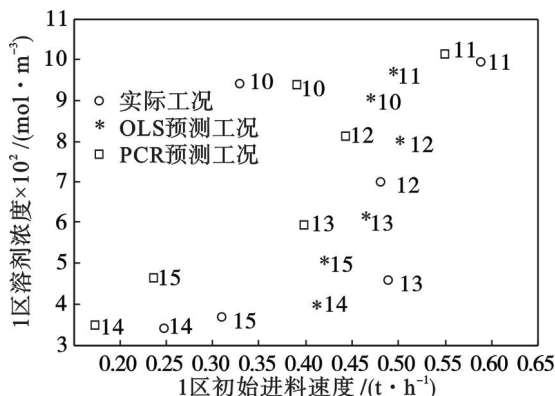


图 2 第一种情况下的 Fi1 和 Cs1  
Fig. 2 Fi1 and Cs1 in the first case

在图 4 中, 对应于同一等级的操作条件位于一条直线上, 而且对应 5 个期望等级工况的直线是相互平行的, 这也反映了对输出特性没有直接影响的零分量  $\mathbf{x}_{\text{null}}^T$  只能在  $A-k=1$  维零空间中移动. 图 4 中的直线代表一维零空间在  $\text{Cs1}-\text{Fi1}$  平面上的投影. 由此可见, 通过预测带零空间时的输入变量, 可确定零空间操作窗口的变量控制范围,

在要求的范围内调整零空间变量,可以帮助系统处于一个稳定状态,为生产一定质量要求的产品提供保障.

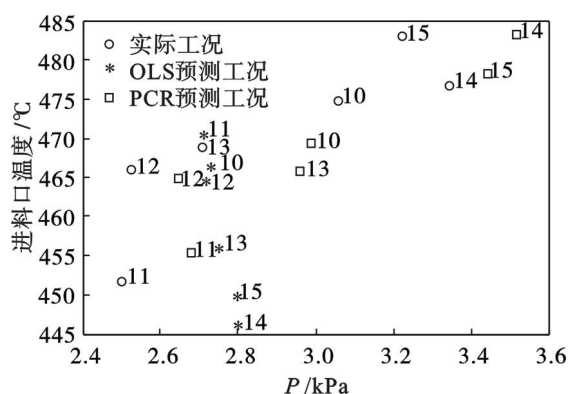


图3 第一种情况下的  $P$  和  $T_{in}$   
Fig. 3  $P$  and  $T_{in}$  in the first case

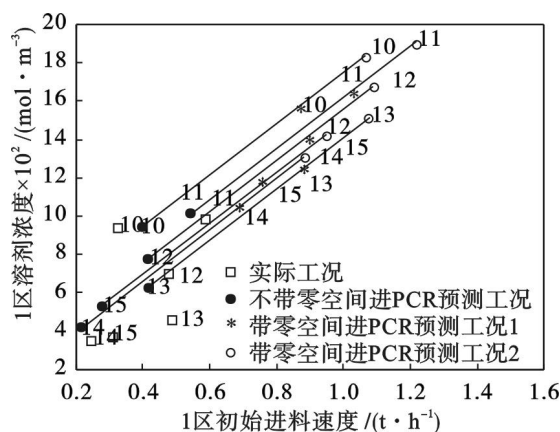


图4 第二情况下的  $F_{i1}$  和  $Cs1$   
Fig. 4  $F_{i1}$  and  $Cs1$  in the second case

## 4 结 论

对于具有零空间特性的复杂工业过程的生产设计问题,本文给出的基于隐变量模型的生产设计方法可以确保求得的过程操作条件能够生产出期望等级产品,在技术上具有可行性.这类基于隐变量模型的生产设计方法通过预测带零空间时的输入变量,可确定零空间操作窗口的变量控制范围,在要求的范围内调整零空间变量,为稳定生产和质量控制提供保障.在实际应用中,由生产设计方法得出的过程操作条件可以作为生产过程输入变量调试的初始工作点,有利于减少操作的盲目性,缩短生产调试周期.

### 参考文献:

[1] Jaeckle C M, MacGregor J F. Product design through multivariate statistical analysis of process data [J]. *AIChE*

*Journal*, 1998, 44(5): 1105 – 1118.

- [2] Chen Y D, Shi M H. Application research of knowledge management and engineering for production design organization [J]. *Electronic & Mechanical Engineering and Information Technology*, 2011, 12(8): 409 – 412.
- [3] Tomba E, Facco P. Latent variable modeling to assist the implementation of quality-by-design paradigms in pharmaceutical development and manufacturing: a review [J]. *International Journal of Pharmaceutics*, 2013, 74(8): 283 – 297.
- [4] Zhang Z H, Tegoshi Y. Representation on tacit knowledge in production design support systems [J]. *International Conference on Fuzzy Systems and Knowledge Discovery*, 2012, 7(10): 1546 – 1549.
- [5] Manolakis A, Noam Y. Interference due to null space mismatch in cooperative multipoint MIMO cellular networks [J]. *Wireless Communications Symposium*, 2014, 14(7): 5148 – 5153.
- [6] Lakshminarayanan S, Fujii H, Grosman B, et al. New product design via analysis of historical databases [J]. *Computers & Chemical Engineering*, 2000, 24(2): 671 – 676.
- [7] Jiang X W, Gao J B. Thin plate spline latent variable models for dimensionality reduction [J]. *World Congress on Computational Intelligence*, 2012, 47(6): 345 – 352.
- [8] Cho M Y, Xu W Y. New algorithms for verifying the null space conditions in compressed sensing [J]. *Asilomar*, 2013, 13(8): 1038 – 1042.
- [9] Yun S Y, Kim N J. The group latent variable approach to probity binary classifications [J]. *Transactions on Neural Networks and Learning Systems*, 2014, 25(7): 1277 – 1286.
- [10] Zhou Y H, Titchener-Hooker N J. Visualizing integrated bioprocess designs through “windows of operation” [J]. *Biotechnology and Bioengineering*, 1999, 65(5): 550 – 557.
- [11] Chen F Z, Wang X Z. Discovery of operational spaces from process data for production of multiple grades of products [J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2000, 39(7): 2378 – 2383.
- [12] Chen F Z, Wang X Z. Discovery of operational spaces from process data for production of multiple grades of products [J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2000, 39(7): 2378 – 2383.
- [13] Noam Y, Manolakis A. Null space learning with interference feedback for spatial division multiple access [J]. *Transactions on Wireless Communications*, 2014, 13(10): 5699 – 5715.
- [14] Bodesheim P, Freytag A. Kernel null space methods for novelty detection [C]// *Conference on Computer Vision and Pattern Recognition*. Portland, 2013: 3374 – 3381.
- [15] Draper N R, Smith H, Pownell E. Applied regression analysis [M]. New York: Wiley, 1966.
- [16] Kiparissides C, Verros G, Macgregor J F. Mathematical modeling, optimization, and quality control of high-pressure ethylene polymerization reactors [J]. *Journal of Macromolecular Science, Part C: Polymer Reviews*, 1993, 33(4): 437 – 527.