



## (12)发明专利

(10)授权公告号 CN 106094568 B

(45)授权公告日 2019.04.02

(21)申请号 201610524746.1

(74)专利代理机构 永新专利商标代理有限公司

(22)申请日 2011.05.21

72002

(65)同一申请的已公布的文献号

代理人 曹雯

申请公布号 CN 106094568 A

(51)Int.CI.

(43)申请公布日 2016.11.09

G05B 17/02(2006.01)

(30)优先权数据

61/347,244 2010.05.21 US

(56)对比文件

(62)分案原申请数据

201180025148.5 2011.05.21

CN 1440543 A, 2003.09.03,  
US 2009287320 A1, 2009.11.19,  
WO 2004003671 A1, 2004.01.08,  
US 2003041042 A1, 2003.02.27,  
CN 1582432 A, 2005.02.16,

(73)专利权人 费希尔-罗斯蒙特系统公司

审查员 欧鑫磊

地址 美国德克萨斯州

(72)发明人 T · L · 布莱文斯

权利要求书1页 说明书19页 附图14页

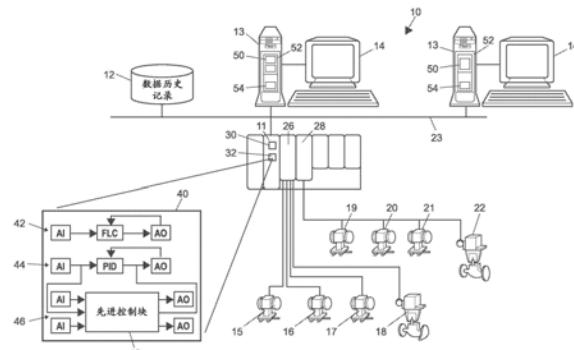
W · K · 沃杰茨尼斯 C · J · 沃里克  
M · 尼克松

## (54)发明名称

多阶段过程建模方法

## (57)摘要

通过将过程分解成包括第一过程阶段和第二过程阶段的多个过程阶段并开发多个模型来对过程进行建模，每个模型对应于所述多个过程阶段中的相应的一个，其中，对应于每个过程阶段的模型是使用来自该过程阶段的一次或多次运行的数据和关于该过程阶段的一次或多次运行的输出质量数据开发的，并且其中，对应于每个过程阶段的模型适合于产生与该过程阶段相关的输出质量预测，并且其中，由过程阶段中的第一个的模型产生的输出质量预测被用来开发过程阶段中的第二个的模型。



1.一种计算机设备,包括:

一个或多个处理器;以及

一个或多个非暂态存储器,其耦合至所述一个或多个处理器,

其中,所述一个或多个非暂态存储器包括存储在所述一个或多个非暂态存储器中的计算机可执行指令,当所述计算机可执行指令由所述一个或多个处理器执行时,使得所述一个或多个处理器:

开发多个模型,所述多个模型中的每一个模型对应于多个过程阶段中的相应的一个过程阶段,过程被分解成所述多个过程阶段,所述多个模型至少包括所述多个过程阶段中的第一过程阶段的第一模型和所述多个过程阶段中的第二过程阶段的第二模型,

其中,所述多个过程阶段中的所述第二过程阶段的所述第二模型使用由所述多个过程阶段中的所述第一过程阶段的所述第一模型产生的第一信息和由所述多个过程阶段中的所述第一过程阶段的所述第一模型产生的可靠性度量来产生第二信息,所述可靠性度量表示输出质量预测;以及

利用所述多个模型来预测所述过程的参数值。

2.一种过程控制系统,包括:

一个或多个现场设备;

过程控制器,其配置为控制所述一个或多个现场设备;

工作站,其耦合至所述过程控制器,所述工作站配置为:

使用对应于过程的多个运行的训练数据集来开发第一过程阶段的第一模型;

利用所述第一模型来产生所述第一过程阶段的第一输出质量预测,其中,所述第一模型基于所述训练数据集的第一部分来产生所述第一输出质量预测;

使用所述第一过程阶段的所述第一模型来产生可靠性度量,所述可靠性度量对应于所述第一输出质量预测并且所述可靠性度量表示所述第一输出质量预测的准确度;以及

使用所述训练数据集的至少第二部分、所述第一过程阶段的所述第一输出质量预测以及所述可靠性度量来开发第二过程阶段的第二模型。

## 多阶段过程建模方法

[0001] 本申请为分案申请，其原申请的申请日是2011年5月21日，申请号为201180025148.5，发明名称为“多阶段过程建模方法”。

### 技术领域

[0002] 本专利大体上涉及过程控制系统建模，并且更具体地涉及对被分解成多个过程阶段的批过程或连续过程进行建模的方法。

### 背景技术

[0003] 类似于在化学、石油或其他过程中使用的过程控制系统典型地包括一个或多个过程控制器和经由模拟、数字或组合的模拟/数字总线被通信耦合到至少一个主机或操作员工作站以及一个或多个现场设备的输入/输出(I/O)设备。现场设备可以是例如阀、阀定位器、开关和变送器(例如温度、压力和流速传感器)。现场设备在过程内执行过程控制功能，诸如打开和闭合阀并测量过程控制参数。过程控制器接收指示由现场设备进行的过程测量的信号，处理此信息以实现控制例程，并生成控制信号，其通过总线或其他通信线路被发送至现场设备以控制该过程的操作。以这种方式，过程控制器可以经由总线和/或其他通信链路使用现场设备来执行和协调控制策略。

[0004] 可以使得来自现场设备和控制器的过程信息可用于由操作员工作站(例如基于处理器的系统)执行的一个或多个应用程序(例如软件例程、程序等)以使得操作员能够执行相对于该过程的期望的功能，诸如查看过程的当前状态(例如经由图形用户界面)、评估该过程、修改过程的操作(例如经由视觉对象图)等。许多过程控制系统还包括一个或多个应用站(例如工作站)，其典型地是使用个人计算机、膝上型计算机等实现的，并且其经由局域网(LAN)被通信耦合至控制器、操作员工作站以及过程控制系统内的其他系统。每个应用站可以包括图形用户界面，其显示包括过程变量的值、与过程相关的质量参数的值、过程故障检测信息和/或过程状态信息的过程控制信息。

[0005] 典型地，在图形用户界面中显示过程信息局限于与过程相关联的每个过程变量的值的显示。另外，某些过程控制系统可以表征某些过程变量之间的简单关系以确定与过程相关联的质量度量。然而，在过程的最终产物不符合预定质量控制度量的情况下，只能在完成一批、一个过程和/或一组最终产品之后分析过程和/其他过程变量。虽然在过程完成时查看过程和/或质量变量使得能够对后续产品的制造或处理进行改善，但这些改善不能补救当前完成的不合规格的产品。

[0006] 这个问题在批过程中、亦即在实现批过程的批过程控制系统中非常严重。如所已知的，批过程典型地操作以通过经过多个阶段或步骤来处理一组普通原材料以生产产品。可以在同一设备中，诸如在储罐中执行一批过程的多个阶段或步骤，同时可以在另一设备中执行其他阶段或步骤。由于相同的原材料随着时间的推移在批过程的不同阶段或步骤中被不同地处理，所以在许多情况下，在共同的一台设备内，在批过程的任何阶段或步骤期间难以准确地确定该批内的材料是否正在以将可能导致具有期望或充分质量度量的最终产品

的产生的方式被处理。也就是说,由于正在被处理的材料的温度、压力、一致性、pH或其他参数在该批的操作期间随着时间的推移而变,所以在材料保持在同一位置的许多时间,难以确定该批过程在该批运行期间的任何特定时间是否正在以可能导致具有期望质量度量的最终产品的方式操作。

[0007] 确定当前操作的批次是否正在正常的进行或在期望的规格内(且因此可能导致具有期望质量度量的最终产品)的一个已知方法将在进行中批次的操作期间实现的各种过程变量测量与在“黄金批次”的操作期间进行的类似测量相比较。在这种情况下,黄金批次是被选择为表示该批次的正常或与其操作的批次运行的预定、先前运行批次,其导致具有期望质量度量的最终产品。然而,一个过程的批次运行典型地在时间长度方面改变,即在其完成该批次所花费的时间方面改变,使得难以知道在该黄金批次内哪个时间最适用于进行中批次的当前测量参数。然而,在许多情况下,批过程变量在批操作期间与所选黄金批次的那些相比可能在没有最终产品质量的显著退化的情况下大大地改变。结果,即使不是几乎不可能的,也常常难以识别能够在所有情况下被用作应将其他批次运行与之相比较的黄金批次的特定批次运行。

[0008] 克服了使用黄金批次的问题中的一个的分析进行中批过程的结果的方法涉及为该批次创建统计模型。这种技术涉及从批过程的许多不同批次运行收集用于一组过程变量(批次参数)中的每一个的数据或测量用于那些批次运行中的每一个的质量度量。其后,使用所收集的批次参数和质量数据来创建该批次的统计模型,该统计模型表示导致期望质量度量的该批次的“正常”操作。然后可以使用该批次的此统计模型来分析在特定批次运行旗舰进行的不同过程变量测量如何在统计上与被用来开发模型的批次运行内的相同测量相关。例如,此统计模型可以用来提供每个测量过程变量的平均值或中值以及在该批次运行期间的任何特定时间出与每个测量过程变量相关联的标准偏差,可以将当前测量过程变量与所述每个测量过程变量相比较。此外,此统计模型可以用来预测该批次的当前状态将如何实现在该批次结束时产生的批次产品的最终质量或与之相关。

[0009] 一般而言,此类批次建模要求从主任发射机、控制回路、分析器、虚拟传感器、计算块和手动输入的各种源收集大量的数据。大部分数据被存储在连续数据历史记录中。然而,相当数量的数据且特别是手动输入通常与过程管理系统相关联。必须将来自这两个类型的系统的数据提取合并以满足模型构建要求。此外,如上所述,从技术和建模观点出发,一批过程正常的经历多个明显不同的阶段、步骤或时期。因此,通常相对于各阶段对批过程进行细分,并且可以针对每个阶段构造模型。在这种情况下,将来自许多批次运行的用于同一时期或阶段的数据分组以开发用于该时期或阶段的统计模型。此类数据不知的目的是取出或减轻过程非线性性。基于阶段、时期等开发单独批次的另一原因是在批次的各种不同阶段,不同的过程参数是过程的且被用于建模。结果,可以用与每个特定阶段有关的特定的参数集来构造阶段模型以仅适应或考虑在每个批次阶段处有关的过程参数或将其考虑在内。例如,在某个阶段,可以向主批次负荷添加添加剂,并且在任何先前的批次阶段中不需要考虑关于那些添加剂的过程参数,但是其与添加该添加剂时的批次阶段有关。

[0010] 然而,在创建此统计批次模型时,仍需要应付这样的事实,即不同的批次运行典型地跨越不同的时间长度。此现象时基于许多因素,例如与操作员在该批次运行内采取手动动作相关联的不同等待时间、要求较长或较短的加热或其他处理时间的不同环境条件、导

致批次运行期间的较长或较短处理的原材料组成的变化等。事实上,用于特定过程变量的数据趋势在不同的批次运行中跨越不同的时间长度且因此不同批过程运行中的公共批次标志相互之间具有时移位置是正常的。然而,为了创建有效的统计模型,必须使来自一个批次的每个阶段、操作或时期的的数据与来自被用来创建模型的其他批次的相同阶段、操作或时期的可比数据对齐。因此,在使用在批过程的运行期间测量的数据来创建统计模型以供在对批过程进行建模和分析时使用之前,必须使来自该不同批次运行的批次数据对齐到公共时间帧。在2010年5月21日提交的题为“On-line alignment of a process analytical model with actual batch operation”的美国专利申请序号12/784,689中公开了用于执行批次数据的此类对齐的技术,该专利申请的公开被通过引用结合到本文中,如同其在本文中被完全阐述一样。一旦对齐,可以与诸如主成分分析(PCA)和到潜结构投影(PLS)的分析工具相结合地使用批次数据以开发可以用来对批过程的其他运行进行建模和分析的批过程模型。

[0011] 在许多情况下,诸如用于故障检测和质量参数预测的PCA和PLS技术的分析工具的在线使用局限于其中产生单个产品的连续过程。在此类情况下,常常将过程视为具有固定的一组测量和实验室分析的单个单元。这对这些类型的过程,可以在在线环境中开发和应用单个PCA或PLS模型。然而,为了解决其中使用一台或多台固定设备来产生多个产品的连续或批过程的要求,所述一台或多台固定设备每个具有其自己的一组仪表设备和质量参数,必须在离线地开发模型时和在其后应用在线分析是采取更一般的方法。

[0012] 将在线分析工具应用于连续和批过程涉及多个挑战。首先,在批操作环境中,可以使用可以串联地、并联地或以混合配置运行的许多台设备来生产产品,所述混合配置使某些设备串联地运行且某些并联地运行。在制造中使用的设备和关联的过程操作条件取决于所制造的产品。可以在制造过程中的各种点出将不同的实验室和现场测量用于制造产品的一个方式对比另一个,或者用于制造不同的产品,这使得模型开发变得复杂。同样的,连续操作环境还必须涉及以不同的配置不知的多台主要设备。与每台设备相关联的处理和关联的过程测量和控制在某些情况下可以改变,因为处理条件随着吞吐量或随着正在处理的产品而变。

[0013] 因此,被设计成用以支持在线分析以用于过程建模的工具必须考虑正在生产的产品、可以用来制造该产品的设备装置以及制造该产品所需的不同的操作条件及关联现场和实验室测量。在先建模方法将单个聚合模型用于不允许改变与采用多台设备或产生多个不同产品的建模过程相结合所需的操作条件及关联现场和实验室测量的过程。

## 发明内容

[0014] 可以通过将过程划分成产生特定产品所需的不同制造阶段来促进对批量或连续制造过程进行建模。在本文中,可以用处理所需的设备类型、监视或控制过程所需的现场和实验室测量、必须保持的过程操作条件以及对产生的最终产品的影响来表征制造“阶段”。阶段的概念可以在在线分析的开发和应用中应用于连续和批过程两者。一旦已经定义了与产品相关联的不同阶段,则可以逐个阶段地构造分析模型。开发分析模型所需的努力可能是较少的,因为可以将用于模型开发的离线分析工具设计成自动地利用阶段定义来从在线数据历史记录中提取数据。可以开发在线分析应用程序以基于被建模的处理的阶段自动地

选择适当的PCA和PLS模型以供在线使用。结果,可以灵活地将阶段模型配置成适应变化的制造的配置。

[0015] 对由过程控制系统实现的过程进行建模的方法包括将过程分解成多个过程阶段,所述多个过程阶段至少包括第一过程阶段和第二过程阶段并开发多个模型,每个模型对应于所述多个过程阶段中的相应的一个。所述多个模型至少包括第一过程阶段的模型和第二过程阶段的模型,并且对应于每个过程阶段的模型是使用来自该过程阶段的一次或多次运行的数据和关于该过程阶段的一次或多次运行的输出质量数据开发的。另外,对于每个过程阶段的模型适合于产生与该过程阶段相关联的输出质量预测,并且由第一过程阶段的模型产生的输出质量预测被用来开发第二过程阶段的模型。

[0016] 关于过程阶段的一次或多次运行的输出质量数据可以包括阶段结尾产品质量或批次结尾产品质量。对应于每个过程阶段的模型可以适合于产生输出质量预测,其包括对阶段结尾产品质量或批次结尾产品质量的预测。

[0017] 开发对应于批过程的多个过程阶段的多个模型包括在过程的用于产生多个批次的多次运行中的每一次运行期间收集数据,包括在过程的每次运行的每个过程阶段期间测量用于多个过程变量中的每一个的值。

[0018] 用于批过程的过程阶段的建模数据形成(是)三维数据阵列,包括在多个批次中的每一个批次的过程阶段期间针对多个变量中的每一个在多个时间段测量的多个值,并且可以将该三维数据阵列展开成二维数据阵列,其包括多个过程阶段期间的多个时间中的每一个处的针对多个批次的过程变量的值。因此,可以用变量、时间、多个批次来确定三维阵列的尺寸。

[0019] 由批过程的第一过程阶段的模型导出并被批过程的第二过程阶段使用的信息可以包括对由批过程产生的批次的质量预测,并且可以用作用于第二过程阶段的模型的初始条件。可以将遗忘因子(即过滤)应用于由第一过程阶段的模型导出且被第二过程阶段的模型使用的信息的至少一部分。

[0020] 当对连续过程进行建模时,开发对应于连续过程的多个过程阶段的多个模型可以包括在过程的实现期间的多个时间段中的每一个期间收集数据,并且收集数据可以包括在每个时间段期间测量多个过程变量中的每一个的值。针对连续过程的过程阶段测量的值可以包括三维数据阵列,其包括在过程的实现期间多个时间段中的每一个时间段的过程阶段期间针对多个变量中的每一个测量的多个值,并且可以将该三维数据阵列展开成二维数据阵列,其包括在连续过程的实现期间的多个时间段中的每一个时间段处的过程变量的值。开发多个模型包括构造过程阶段的潜结构投影或PLS模型。

[0021] 可以通过将过程分解成至少包括第一过程阶段和第二过程阶段的多个过程阶段来分析用过程控制系统实现(或由其操作)的批过程,并开发多个模型,每个模型对应于多个过程阶段中的相应的一个,所述多个模型至少包括第一过程阶段的模型和第二过程阶段的模型。第二过程阶段的模型使用由第一过程阶段的模型导出的信息,并且所述多个模型随后用来预测过程的参数的值。

[0022] 在一个实施例中,可以通过使用对应于过程的多次运行的培训数据集来开发第一过程阶段的模型、将培训数据集的至少第一部分作为输入应用于第一过程阶段的模型以产生第一过程阶段的输出质量预测以及使用培训数据集的至少第二部分和第一过程阶段的

输出质量预测来开发第二过程阶段的模型来对具有第一过程阶段和第二过程阶段的过程进行建模。第一过程阶段的模型还可以产生第一过程阶段的输出质量预测的可靠性的指示，并且可以将第一过程阶段的输出质量预测的可靠性的指示用于开发第二过程阶段的模型。优选地，针对每个过程阶段开发模型，将培训数据集的至少一部分作为输入应用于每个过程阶段的模型以产生该过程阶段的输出质量预测，并且将培训数据集的至少一部分和前一过程阶段的输出质量预测作为输入应用于在第一过程阶段之后的每个过程阶段的模型。

[0023] 可以通过将从多阶段过程的第一运行获得的第一数据集应用于第一过程阶段的模型以产生第一过程阶段的输出质量预测并将从多阶段过程的第二运行获得的第二数据集和第一过程阶段的输出质量预测应用于第二过程阶段的模型来使用此类模型。

## 附图说明

- [0024] 图1示出了具有可以用来实现批过程的控制器和现场设备的过程控制网络的图。
- [0025] 图2示出了包括可以实现在线批分析系统以便分析批过程的示例性操作管理系统的示例性过程控制系统的方框图。
- [0026] 图3示出了确定用于批过程的统计批模型的示例性方法的流程图。
- [0027] 图4示出了表示批过程的示例性批运行的数据结构的图，包括与该批过程运行相关联的过程变量测量结果和质量变量测量结果。
- [0028] 图5示出了批过程的许多不同批运行的批数据的数据结构的图，包括每次批运行的过程变量和相应的质量变量。
- [0029] 图6示出了批过程的许多不同批运行的批数据的、在来自批运行的数据已经在离线对齐过程中对齐之后的数据结构的图，包括过程变量和相应的质量变量。
- [0030] 图7示出了多阶段批过程的方框图。
- [0031] 图8示出了单个过程阶段的过程数据的分批展开的图。
- [0032] 图9示出了多个过程阶段的过程数据的分批展开的图。
- [0033] 图10示出了用于单块和多块PLS建模的数据结构的图。
- [0034] 图11示出了用于多阶段、多块建模的数据结构的图，其中，来自一个过程阶段的批次结尾质量和阶段结尾计算项被传递至后续过程阶段。
- [0035] 图12示出了用于多块、多阶段模型的两个替换建模程序的图。
- [0036] 图13示出了采用遗忘因子以便对三阶段过程进行建模的PLS模型的图。
- [0037] 图14示出了多阶段批过程的PLS模型的开发的图。
- [0038] 图15示出了如图14所示地开发的PLS模型的使用的图。

## 具体实施方式

- [0039] 图1图示示例性过程控制系统10，其包括过程控制器11，该过程控制器11被连接至数据历史记录12和一个或多个主机工作站或计算机13（其可以是任何类型的个人计算机、工作站等），每个具有显示屏14。控制器11还经由输入/输出（I/O）卡26和28被连接至现场设备15～22，并且可以运行以使用现场设备15～22来实现批过程的一次或多次批运行。数据历史记录12可以是任何期望类型的数据收集单元，其具有任何期望类型的存储器和任何期望或已知的软件、硬件或固件以便存储数据。数据历史记录12可以与工作站13中的一个分

离(如图1所示)或者是其一部分。举例来说,可以是由艾默生过程管理公司出售的DeltaV®控制器的控制器11经由例如以太网连接或任何其他的期望通信网络23被通信地连接至主机计算机13和数据历史记录12。控制器 11还使用例如与标准4-20ma设备和/或任何智能通信协议相关联的任何期望硬件和软件被通信连接至现场设备15~22,所述任何智能通信协议诸如FOUNDATION®现场总线协议、HART®协议、WirelessHART™协议等。

[0040] 现场设备15~22可以是任何类型的设备,诸如传感器、阀、变送器、定位器等,而I/O卡26和28可以是符合任何期望的通信或控制器协议的任何类型的I/O设备。在图1所示的实施例中,现场设备15~18是标准4-20ma 设备或HART设备,其通过模拟线路或组合的模拟和数字线路向I/O卡26进行通信,而现场设备19~22是诸如FOUNDATION®现场总线现场设备的智能设备,其使用现场总线通信协议通过数字总线向I/O卡28进行通信。当然,现场设备15~22可以符合任何其他期望的标准或协议,包括未来开发的任何标准或协议。

[0041] 控制器11包括处理器30,其实现或监督一个或多个过程控制例程(存储在存储器32中),其可以包括控制回路,并且与设备15~22、主机计算机 13和数据历史记录12通信以便以任何期望的方式来控制过程。应注意的是本文所述的任何控制例程或模块可以使其各部分被不同控制器或其他设备实现或执行,如果这样期望的话。同样地,将在过程控制系统10内实现的本文所述的控制例程或模块可以采取任何形式,包括软件、固件、硬件等。可以以任何期望的软件格式来实现控制例程,诸如使用面向对象编程、使用梯形逻辑、顺序功能图、功能方框图或使用任何其他软件编程语言或设计范例。同样地,可以将控制例程硬编码到例如一个或多个EPROM、EEPROM、专用集成电路(ASIC)或任何其他硬件或固件元件中。因此,可以将控制器11 配置成以任何期望的方式实现控制策略或控制例程。

[0042] 在某些实施例中,控制器11使用一般所谓的功能块来实现控制策略,其中,每个功能块是总控制例程的对象或其他部分(例如子例程),并且与其他功能块(经由称为链路的通信)相结合地操作以在过程控制系统10内实现过程控制回路。功能块典型地执行输入功能(诸如与变送器、传感器或其他过程参数测量设备相关联的输入功能)、控制功能(诸如与执行PID、模糊逻辑等控制的控制例程相关联的控制功能)或输出功能(控制诸如阀的某些设备的操作以在过程控制系统10内执行某些物理功能的输出功能)中的一个。当然,存在混合的和其他类型的功能块。可以将功能块存储在控制器11中并由控制器11来执行,当这些功能块被用于例如标准4-20ma设备或诸如HART 设备的某些类型的智能现场设备或与之相关联时情况通常如此,或者对于现场总线设备,情况能够是将功能块存储在现场设备本身中并由现场设备来执行。

[0043] 如图1的分解框40所示,控制器11可以包括被示为例程42和44的许多单回路控制例程,并且如果期望,其可以实现一个或多个先进控制回路,诸如被示为控制回路46的多/输入-多/输出控制例程。每个此类回路典型地称为控制模块。单回路控制例程42和44被示为分别使用单输入/单输出模糊逻辑控制块和单输入/单输出PID控制块来执行单回路控制,单输入/单输出模糊逻辑控制块和单输入/单输出PID控制块分别被连接至适当的模拟输入(AI) 和模拟输出(AO) 功能块,其可以与诸如阀的过程控制设备、与诸如温度和压力变送器的测量设备或与过程控制系统10内的任何其他设备相关联。先进控制回路46被示为包括被通信连接至一个或多个AI功能块的输入端和被通信连接至一个或多个AO功能块的输

出端,然而可以将先进控制块48的输入端和输出端连接至任何其他期望的功能块或控制元件以接收其他类型的输入并提供其他类型的控制输出。先进控制块48可以是任何类型的模型预测控制 (MPC) 块、神经网络建模或控制块、多变量模糊逻辑控制块、实时最优化器块等,或者可以是自适应调谐控制块等。应理解的是图1所示的功能块、包括先进控制块48可以由控制器11来执行,或者替换地,可以位于任何其他处理设备中并由任何其他处理设备来执行,其他处理设备诸如工作站13中的一个或者甚至现场设备19~22中的一个。

[0044] 此外,如图1所示,可以由过程控制系统10的各种设备来存储和执行一个或多个过程分析例程50。虽然过程分析例程50被示为被存储在一个或多个计算机可读存储器52中以在工作站13的处理器54上执行,但可以替代地在其他设备中存储和执行例程50。每个过程分析例程50被通信耦合至一个或多个控制例程,诸如控制例程42、44、46和/或至数据历史记录12以接收一个或多个测量的过程变量测量结果。每个过程分析例程50可以用来开发统计过程模型以基于该模型来分析进行中的或在线批过程。分析例程50还可以向用户、诸如批操作员显示关于在线或进行中的批次的信息,如由过程控制系统10实现的。

[0045] 图2示出了包括操作管理系统(OMS) 102(也称为过程监视和质量预测系统(PMS)) 的过程控制环境100的另一示例的方框图,操作管理系统(OMS) 102可以用来实现在线批过程建模和分析系统。OMS 102位于包括过程控制系统106的工厂104内,其可以包括例如图1的过程控制网络10的一部分或全部。示例性工厂104可以是任何类型的制造设施、处理设施、自动化设施和/或任何其他类型的过程控制结构或系统。在某些示例中,工厂104可以包括位于不同位置处的多个设施,并且虽然图2的工厂104被示为包括单个过程控制系统106,但工厂104可以包括附加过程控制系统。

[0046] 经由数据总线100被通信耦合至控制器108且作为该系统的一部分的过程控制系统106可以包括用于实现过程功能的任何数目的现场设备(例如输入和/或输出设备),诸如执行该过程内的物理功能或测量过程变量。现场设备可以包括任何类型的过程控制部件,其能够接收输入、生成输出和/或控制过程。例如,现场设备可以包括输入设备,诸如,例如阀、泵、风扇、加热器、冷却器和/或混合器以控制过程。另外,现场设备可以包括输出设备,诸如,例如温度计、压力计、浓度计、液位计、流量计和/或蒸汽传感器以测量过程的一部分内的过程变量。输入设备可以从控制器108接收指令以执行一个或多个指定命令并引起过程的变化。此外,输出设备测量过程数据、环境数据和/或输入设备数据并将测量数据作为过程控制信息发送至控制器108。此过程控制信息可以包括对应于来自每个现场设备的测量输出的变量(例如测量过程变量和/或测量质量变量)的值。

[0047] 在图2的所示示例中,控制器108可以经由数据总线110与过程控制系统106内的现场设备通信,其可以耦合至过程控制系统106内的中间通信部件。这些通信部件可以包括现场分线盒以将命令区域中的现场设备通信耦合至数据总线110。另外,通信部件可以包括信号编集柜以组织到现场设备和/或现场分线盒的通信路径。此外,通信部件可以包括I/O卡以从现场设备接收数据并将该数据转换到能够被示例性控制器108接收的通信介质。这些I/O 卡可以将来自控制器108的数据转换成能够被相应的现场设备处理的数据格式。在一个示例中,可以使用现场总线协议或其他类型的有线和/或无线通信协议(例如Profibus协议、HART协议等)来实现数据总线110。

[0048] 图2的控制器108(其可以是PC或任何其他类型的控制器)管理一个或多个控制例

程以管理过程控制系统106内的现场设备。控制例程可以包括过程监视应用程序、警报管理应用程序、过程趋势和/或历史应用程序、批处理和/或活动管理应用程序、统计应用程序、流式传输视频应用程序、先进控制应用程序等。此外，控制器108可以将过程控制信息转送至OMS 102。可以将控制例程实现为保证过程控制系统106产生在某个质量阈值内的指定数量的期望产品。例如，可以将过程控制系统106配置为在一批结束时产生产品的批系统。在其他示例中，过程控制系统106可以包括连续过程制造系统。

[0049] 来自控制器108的过程控制信息可以包括对应于源自于过程控制系统 106内的现场设备的测量的过程变量和/或质量变量的值。在其他示例中，OMS 102可以将过程控制信息内的值解析成相应的变量。可以使测量的过程变量与源自于测量过程的一部分和/或现场设备的特性的现场设备的过程控制信息相关联。可以使测量的质量变量与关于测量与完成产品的至少一部分相关联的过程的特性的过程控制信息相关联。

[0050] 例如，该过程可以在储罐中执行化学反应，其产生流体中一定浓度的化学制品。在本示例中，流体中的化学制品的浓度可以是质量变量。流体的温度和流体流入储罐的速率可以是过程变量。OMS 102可以经由过程控制建模和/或监视确定储罐中的流体的浓度取决于储罐中的流体的温度和到储罐中的流体流速(注意：大部分相同)。换言之，测量的过程参数对测量的质量变量的质量有所贡献或影响该质量。OMS 102可以使用统计处理来确定每个过程变量对质量变量所具有的影响和/或贡献的量。

[0051] 另外，OMS 102可以对与过程控制系统106相关联的测量的过程变量和/或质量变量之间的关系进行建模和/或确定。测量的过程变量和/或质量变量之间的这些关系使得创建一个或多个计算质量变量成为可能。计算的质量变量可以是一个或多个测量的过程变量、测量的质量变量和/或其他计算的质量变量的多元组合和/或线性代数组合。此外，OMS 102可以根据测量的过程变量、测量的质量变量和/或计算的质量变量的组合来确定总体质量变量。总体质量变量可以对应于整个过程的质量确定和/或可以对应于该过程的最终产品的预测质量。

[0052] 如图2所示，OMS 102可以包括分析处理器114，其利用描述性建模、预测建模和/或最优化来生成关于过程控制系统106的状态和/或质量的反馈。分析处理器114可以检测、识别和/或诊断过程操作故障并预测任何故障对与过程控制系统106的最终产品的质量相关联的质量变量和/或总体质量变量的影响。此外，分析处理器114可以通过在统计上和/或在逻辑上将质量变量和/或过程变量组合成与过程的总体质量相关联的总体质量变量来监视过程操作的质量。分析处理器114然后可以将针对总体质量变量计算的值和/或其他质量变量相关联的值与相应的阈值相比较。这些阈值可以基于过程内的不同时间的总体质量变量的预定质量极限。例如，如果与过程相关联的总体质量变量超过阈值达一定时间量，则最终产品的预测最终质量可能不满足与成品相关联的质量度量。

[0053] 如果总体质量变量和/或任何其他质量变量偏离相应的阈值，则分析处理器114可以在过程概图和/或过程变化图内生成故障指示，该过程概图和/或过程变化图示出与总体质量变量相关联的已解释和/或未解释偏差(或差异)和/或可以示出产生过程故障的变量。示例性分析处理器114管理分析以通过提供使得操作员能够生成过程质量图表的功能来确定一个或多个过程故障的原因，所述过程质量图表(例如组合图表、微型图、过程变化图、变量趋势图表、图形等)可以显示测量的过程变量、测量的质量变量和/或计算的质量变

量等的当前和/或过去值。此外,在某些情况下,分析处理器114在过程正在操作的同时生成这些图表,并且随着OMS 102接收到附加过程控制信息而连续地更新和/或重新计算与每个图表相关联的多元统计信息。

[0054] 为了针对批过程执行这些功能,OMS 102针对许多不同批运行中的每一个收集用于许多不同过程变量的批过程数据。可以从控制网络110内的控制器108或现场设备、从可能已收集并存储过程的不同批运行的过程数据的数据历史记录(例如图1的数据历史记录12)或从任何其他数据源收集此数据。OMS 102然后处理此数据以生成一个或多个统计批模型,并将统计批模型存储在例如存储器中,诸如OMS 102的计算机可读存储器,或者在图1的工作站13的存储器52中的一个中。然后可以根据需要来检索统计批模型以分析将来进行的或在线的批运行。特别地,OMS 102可以使用存储的批模型来分析或使得用户能够分析在特定批运行的在线或进行中操作期间收集的数据。

[0055] 然而,为了在该批次正在在线操作的同时分析来自批运行的数据,OMS 102必须首先确定该在线批次相对于批模型正在进行操作在哪个准确阶段。也就是说,OMS 102必须确定批模型的哪一点将与在线批数据相比较,以能够确定关于在线批次的其他因素,诸如在线批次的任何参数相对于批模型内的那些相同参数而言是否是异常或不合规格、该在线批次的输出是否将满足期望的质量度量等。事实上,使用该统计批模型的在线数据的任何分析必须首先确定统计批模型内最适用于在线数据的点。只有在在线数据与统计批模型相关联之后才能够执行进一步分析,诸如为操作员提供屏幕以图示在线批次如何与模型相比较、执行统计分析以确定该批次是否正在正常地或在界限内操作或者该批次是否正在异常地操作和/或该批次的输出是否被预测满足期望的质量度量,诸如期望的一致性、浓度等。

[0056] 作为一个示例,一旦将用于当前在线批次的数据与该批模型内的特定点对齐,则OMS 102的分析处理器114可以向用户提供一系列不同的图表或其他显示以使得用户能够确定在线批运行的当前操作阶段或耐久性。下面讨论这些图表或显示中的某些,应理解的是还可以附加地或替换地向用户(诸如操作员、维护人员等)提供其他显示、分析或信息。

[0057] 作为一个示例,分析处理器114可以通过计算过程变量和/或质量变量对总体质量变量或对已建模和未建模的过程变化的多元统计故障指示的贡献来生成贡献图表。可以将过程变量和/或质量变量的贡献显示为各变量的已建模和/或未建模的变化,显示为对与总体质量相关联的变化和/或与故障相关联的质量变量的贡献。

[0058] 此外,分析处理器114可以生成用于任何所选过程和/或质量变量的变量趋势图表以及定义的阈值。变量趋势图表可以相对于先前过程中的类似时间期间的变量的值(例如模型变量值)示出该过程的一段时间内的与变量相关联的值。通过生成贡献图表和/或变量趋势图表,分析处理器114还可以识别对过程的可能修正以调解在批过程中所检测的故障。该变量趋势图表可以通过提供批次的数据的历史图的叠层来帮助操作员确定过程故障的原因,所述叠层被用来创建具有关联变化(例如标准偏差)的批模型,其中,当前值被对齐至相同的时间标度。

[0059] 分析处理器114还可以生成质量预测图表以确定修正(如果实现了的话)对过程的总体质量的影响。如果该修正将总体质量保持在指定阈值内或将其改善至指定阈值内,则分析处理器114可以命令OMS 102实现修正。替换地,分析处理器114可以向控制器108发送指令以实现过程修正。

[0060] 此外,示例性分析处理器114可以在确定与总体质量变量和/或任何其他质量变量相关联的故障时生成微型图。微型图可以包括过程变量和/或质量变量在指定时间(例如与过程故障相关联的时间)的相对于由批模型预测的每个变量的平均值和/或标准偏差的值。另外,微型图可以包括火花线,其指示与与模型相关联的每个过程变量和/或质量变量相关联的先验值。根据该微型图,示例性分析处理器114可以使得操作员能够确定和/或选择对该过程的一个或多个修正动作和/或确定任何修正是否将改善过程,以使得总体质量变量被预测为在指定极限内。

[0061] OMS 102经由在线数据处理器116来管理对包括过程变化图表、贡献图表、变量趋势图表、质量预测图表和/或微型图的过程控制数据的访问和控制。另外,在线数据处理器116向过程控制操作员提供访问以查看过程控制数据、更改和/或修改过程控制数据和/或生成用于过程控制系统106内的现场设备的指令。

[0062] 为了提供对在线分析的访问,图2的工厂104被示为包括路由器120和本地工作站122,其被经由局域网124(LAN)通信耦合至在线数据处理器116。此外,路由器120可以将工厂104内的任何其他工作站(未示出)通信耦合至LAN 124和/或在线数据处理器116。可以被无线地和/或经由有线连接被通信耦合至其他工作站的路由器120可以包括任何类型的无线和/或有线路由器作为到LAN 124和/或在线数据处理器116的访问集线器。

[0063] 可以使用任何期望的通信介质和协议来实现LAN 124。例如,LAN 124可以基于硬接线或无线以太网通信方案。然而,可以使用任何其他适当的通信介质和协议。此外,虽然示出了单个LAN,但可以使用不止一个LAN和在工作站122内的适当通信硬件来提供工作站122与各类似工作站(未示出)之间的冗余通信路径。

[0064] LAN 124还被示为被通信耦合至防火墙128,其基于一个或多个规则来确定是否允许来自远程工作站130和/或132的通信进入工厂104。远程工作站130和132可以为不在工厂104内的操作员提供对工厂104内的资源的访问。远程工作站130和132经由广域网(WAN)134被通信耦合至防火墙128。

[0065] 可以将工作站122、130和132配置成基于由OMS 102执行的在线分析来查看、修改和/或修正过程控制系统106内的一个或多个过程,或者这些工作站可以直接实现本文所述的在线过程分析应用程序和方法。例如,工作站122、130和/或132可以包括安排和/或显示由OMS 102生成的过程控制信息的用户界面136。作为另一示例,用户界面136可以从OMS 102接收生成的图表和/或图,或者替换地接收用于生成过程控制图表和/或图的数据。当在各工作站122、130和/或132中接收到图表和/或图数据时,用户界面136可以生成对于操作员而言相对容易理解的图表和/或图138的显示。图2的示例性配置图示了具有分析用户界面136的工作站132。然而,工作站122和/或130可以包括两个分析用户界面136。

[0066] 另外,用户界面136可以向过程控制操作员报警由本文所述的在线分析确定的过程控制系统106内的和/或工厂104内的任何其他过程控制系统内的任何过程控制故障的发生。此外,用户界面136可以引导过程控制操作员完成分析过程以确定过程故障的来源并预测该过程故障对最终产品的质量的影响。用户界面136可以随着过程故障的发生而为操作员提供过程控制统计信息,从而使得操作员能够对过程进行任何调整以修正任何故障。通过在过程期间对故障进行修正,操作员可以保持最终产品的质量。

[0067] 另外,用户界面136经由示例性OMS 102可以显示检测、分析、修正动作和质量预测

信息。例如,用户界面136可以显示过程概图、过程变化图、微型图、贡献图表、变量趋势图表和/或质量预测图表(例如图表138)。在查看这些图表138时,操作员可以选择附加图表138以查看多元和/或统计过程信息以确定过程故障的原因。另外,用户界面136可以显示对过程故障的可能修正动作。用户界面136然后可以允许操作员选择(一个或多个)修正动作。在选择了修正时,用户界面136可以将该修正发送至OMS 102,其然后将向控制器108发送指令以在过程控制系统106中实现适当的修正。

[0068] 图2的工作站122、130和/或132可以包括任何计算设备,例如个人计算机、膝上型计算机、服务器、控制器、个人数字助理(PDA)、微型计算机等。可以使用任何适当的计算机系统或处理系统来实现工作站122、130和/或132。例如,可以使用单处理器个人计算机、单或多处理器工作站等来实现工作站122、130和/或132。

[0069] 提供图1的过程控制环境10和图2的100以图示在其内部可以有利地采用下面更详细地描述的示例性方法和设备的系统类型。然而,如果期望的话,可以有利地在比图1和2所示的示例性过程控制环境10和100和/或过程控制系统106和/或与过程控制活动、企业管理活动、通信活动等相结合地使用的系统更复杂的或没有其复杂的其他系统中采用本文所述的示例性方法和设备。

[0070] 当前,许多过程控制系统提供过程信息的分析和/或统计分析。然而,这些系统一般采用离线工具以确定可能影响最终产品的质量的过程故障的原因和潜在修正动作。这些离线工具可以包括过程研究、实验室研究、企业研究、故障排除、过程改善分析和/或六西格玛分析。虽然这些工具可以针对后续产品修正该过程,但该工具不能随着故障发生而补救和/或修正过程质量。因此,这些离线工具并不预防制造质量差的产品。

[0071] 另一方面,可以在过程控制系统内使用本文所述的示例性在线批过程控制系统分析以提供在过程的故障检测、分析和/或修正信息,其使得操作员能够在正在制造产品的同时修正过程故障。换言之,可以在故障发生时或基本上在故障发生之后立即响应于预测的故障来实现过程修正。虽然本文所述的示例性方法和设备可以用来预测和/或修正过程故障以改善批过程和/或连续过程的过程质量,但将特别地相对于批过程来对其进行描述。另外或替换地,示例性方法和设备可以用来通过预测产品质量并修正相应的过程故障和/或通过修正所检测的过程故障来修正产品质量。

[0072] 图3描述了可以由OMS 102(其可以运行图1的例程50)实现以开发用于批过程的统计批模型并随后使用该统计批模型来分析来自在线批过程运行的数据的方法的示例性流程图150。在方框152处,OMS 102收集用于特定批次的批数据。该批数据可以包括过程的特定批运行的许多不同过程变量的测量的、计算的或估计的过程变量值,包括例如输入变量(诸如用于该批次的原材料组成及其他初始条件)、进行中过程变量(诸如温度、流速、液位或其他过程变量测量结果)、估计过程变量、环境数据(诸如湿度、环境温度等)、包括在一个或多个实验室分析中离线测量或获得的任何数据的实验室数据等。此数据被数据历史记录(诸如图1的数据历史记录12)针对先前运行批次而收集。如果期望的话,用户或操作员可以选择其数据被存储在数据历史记录中的特定的批运行以在建模过程中使用。在方框154处,在已在方框152处为其收集数据的批运行完成之后和/或在该批次的不同的各种阶段、操作或时期结束时,OMS 102收集该批运行的质量测量结果或质量数据。该质量数据可以包括该批次的输出的、或该批次的一个阶段、操作或时期的输出的任何类型的测量结果或质量

指示,包括例如材料一致性、特定化学制品或元素的浓度、pH、材料组成或比和/或指示批运行在产生可接受或期望的输出方面的成功的任何其他质量数据。当然,要收集的特定质量数据将取决于正在制造的产品的类型,并且此质量数据可以在线测量,可以通过实验室分析来确定,可以通过目测检查来确定(并由用户输入),可以基于其他参数来计算,或者可以以任何其他已知方式来确定。此外,如果此质量数据被存储在批历史数据记录中,则可以从其中获得此数据,或者此质量数据可以经由在线过程或离线实验室分析来获得。

[0073] 图4表示用于示例性批运行(例如批#1)的数据结构200,包括测量的过程变量202和计算的或测量的或确定的质量变量204,其可以包括经由测量或观察在批运行结束时获得的一个或多个总体质量变量。批过程通常包括一个或多个过程阶段,每个阶段包括一个或多个操作且每个操作包括一个或多个时期。同样地,示例性的测量的过程变量202可以包括来自单个时期、操作或阶段的过程变量(也称为过程参数)或跨越批过程的多个时期、操作或阶段的过程变量。举例来说,图4所示的变量P1可以对应于流体流速(例如过程变量),而变量P2~P8可以对应于温度、压力、另一流速等。变量204可以对应于质量变量,诸如浓度等。而图4的批过被示为包括八个测量的过程变量202和两个质量变量204,在其他示例中,批过程可以包括更少或更多的过程变量和/或更多或更少的质量变量。另外,在沿着t轴(在图4中标记为“时间”)所示的时间段期间收集批过程数据。

[0074] 图4的数据图表200示出了某些过程变量202仅在批过程期间的某些时间内是相关的。例如,过程变量P1从批次开始至通过该批次的中间点是相关的(或为其收集了数据的批次的阶段、操作或时期)。因此,如果变量P1与流体流速相关联,则流体可能仅在从该批次开始至该批次的中点的批过程中流动。在此点之后,该批次可以不利用流体流速,因此变量P1在那时与批过程无关。相反,图4的变量P4在整个批过程中都是相关的。

[0075] 可以使示例性质量变量204与整个批过程相关联,或者可以使其与批过程的特定时期或阶段相关联。质量变量204可以是在测量的过程变量202和/或其他质量变量204之间的多元、统计和/或代数关系的结果,可以以任何已知方式来测量或确定,或者可以由用户输入。例如,质量变量Q1可以对应于由批过程得到的产品的组成质量。Q1是质量变量,即使其在过程控制系统106内可能不可直接测量。替代地,可以根据测量的变量202的多元组合对组成质量变量Q1进行建模和/或确定,或者可以在具有某个时间延迟的情况下通过实验室分析来对其进行确定。

[0076] 返回参考图3,OMS 102接下来在方框156处确定是否已收集了足够的过程批运行的批数据以创建用于该批次的适当的统计模型。如果没有,方框156使控制返回到方框152以收集批过程的另一运行的进一步过程变量数据。如果是这样,则方框158使来自存储的批模型的批数据对齐。

[0077] 为了说明这一点,图5表示与可以在图3的方框152~156中获得并在方框158开始时存储在存储器中的一组示例性批运行相关联的数据结构300。如所示,数据结构300包括许多批运行中的每一个批运行的过程变量302和相应的质量变量304。批运行(例如批1~N)显示此特定批过程包括按照连续顺序执行的四个阶段(例如阶段1~4)。例如,阶段1可以对应于批次中的化学制品的组合和混合,而阶段2可以对应于该批次中的那些混合的化学制品的烘烤。还可以将这些阶段再分成操作、时期和/或水平。另外,质量变量304可以对应于在每个批阶段、时期、操作或水平处的测量的过程变量302 和/或可以对应于该批次的结

束。

[0078] 图5所示的示例性数据结构说明每个单独批次在持续时间方面可以不同，批次的每个阶段的开始和结束时间在这些批次之间也不同。例如，批2比批1在更短的时间内完成，但是批3和4比批1在更长的时间内完成。此外，批1比批2要求更长的时间以完成阶段1。

[0079] 返回参考图3，方框158使图5的批数据对齐以使得能够创建批模型。在某些情况下，可以通过将每个变量（未示出）的相关持续时间表示为与相应阶段的时间长度成比例来使此数据对齐。因此，可以使用每个批次内的测量的过程变量302来分辨完成批次和/或阶段的变化的时间。在另一示例中，可以使用上文所讨论的众所周知的DTW方法来使批数据对齐至恒定或归一化时间帧，其可以是例如所有批次的中值时间帧、所有批次的平均时间帧或者与控制批次或所选批次相关联的某个其他时间帧。在对齐时，批数据将呈现为如图6的数据结构350，其中，每个批次的时间帧被归一化成完全相同，并且所有阶段相互对齐，每个批次内的实际数据点通过在时间方面被扩展或收缩而在时间方面倾斜，从而与将在批模型中使用的归一化时间帧匹配。当然，每个阶段（时期或操作）内的时间可以相对于用于该特定阶段（时期或操作）的归一化时间基于那些阶段（时期或操作）的时间不同地倾斜，从而使得所有阶段被单独地对齐。在任何情况下，可以使用诸如DTW方法的任何已知方法来在处理批数据或开发统计模型之前使来自不同批运行的批数据时间对齐。

[0080] 如将理解的，由于用以创建图6的数据结构的不同批运行内的时间帧的扩展和收缩，可以为每个批运行提供更多或更少的数据点或使其与归一化数据的每个不同阶段相关联。如果期望的话，可以将此数据转换成固定数量或固定集合的归一化数据点（例如使用线性或非线性内插），使得被用来创建批模型的每个批次具有相同数目的数据点，或者使得存在用于在批模型的归一化时间帧内的每个相同时间的数据点。当然，如上所述，可以使用直线内插或诸如非线性内插的任何其他期望内插通过多个点之间的内插来获得数据中的点的值。此外，将理解的是针对各种批运行收集的每个数据点可以是一组连续地收集的原始数据点的统计数据点，诸如平均值、中值等。因此，例如，可以将批运行的单个数据点创建为期望数目（例如10、100或任何其他数目）的原始数据点的统计组合（通常但不一定是平均值），以减小与模型处理相关联的模型尺寸和处理时间。当然，用来创建批运行中的任何特定统计数据点的原始数据点的数目可以基于原始数据相比于批次内的时间的总长度等的测量频率。

[0081] 一旦来自不同批运行的批数据已经对齐，如图6所示，则方框160（图3）根据对齐的数据创建由阶段模型组成的统计批模型，以从统计观点出发来定义批过程的正常或预期的操作，如在步骤152～156中根据不同批运行收集的数据定义的。创建统计批模型的一个方法为批运行的每个过程变量创建一个或多个模型过程变量轨迹，其中，每个此类模型过程变量轨迹标识或表示该过程变量与批操作相关的时间段内的过程变量的预期或正常的操作。此时间段可以是例如批次的整个长度、一个或多个批阶段、时期、操作、水平等。作为实例，可以将每个模型过程变量轨迹定义为过程变量的预期值，作为例如在模型的归一化时间帧期间的每个时间位置处的过程变量的平均值或中值（根据所收集的批数据计算）。另外，如果期望，每个模型过程变量轨迹可以包括与在任何特定时间的所收集批数据相关联的一个或多个标准偏差以指示在该特定时间处的该变量的批数据的典型变化。

[0082] 再次参考图3，方框160还可以或替换地开发其他统计模型，诸如PCA（主成分分

析) 模型或PLS(潜结构投影)模型。如已知的,PCA建模技术开发了用于批建模数据和PCA模型矩阵的一组主要成分,其然后可以用来分析其他批数据,诸如来自在线批的数据。更进一步地,PLS建模技术执行PLS计算以使针对批运行收集或确定的过程变量数据与针对在模型中使用的批运行所测量的、计算的或确定的质量变量相关联。然后可以使用PLS模型基于测量批次内的变量的统计值来预测未来批次的质量变量。PCA和PLS建模技术是众所周知的,因此将不会在本文中详细地描述。当然,如果期望的话,可以根据图6的对齐的批数据来创建其他类型的统计批模型。在任何情况下,在创建一个或多个统计批模型之后,方框162将这些模型存储在计算机可读存储器中(诸如在图1的存储器52中)以供稍后使用。

[0083] 图7示出了示例性处理设施,其中可以实现示例性多阶段批(或连续)过程且与之相结合地执行多阶段建模。所示示例性处理设施400包括多个装料或储存罐401/402/403和404、反应器A 406、反应器B 508、过滤单元410以及储罐412。如图7中的箭头414所指示的,针对所示的示例性批过程,从装料罐401和402向反应器A 406装载原材料过程输入,并且从装料罐402 和404向反应器B 408装载原材料过程输入。这些材料在反应器A 406和反应器B 408中被处理,并且最终产品被传递至过滤单元410,在那里,其被过滤以产生已过滤产品,该已过滤产品随后被装载到储罐412中并储存在其中,以供后续的进一步处理或使用。

[0084] 为了促进建模,并且为了允许更准确的建模,可以将可以伴随有任何数目的操作或步骤(例如装载、反应、过滤、储存等)的本示例性批过程分解成多个过程时期或阶段,每个可以涵盖一个或多个操作或步骤。例如,第一过程阶段(阶段1)可以包括将原材料引导到反应器A 406和反应器B 408 中并且然后处理那些原材料以产生反应产物。第二过程阶段(阶段2)可以包括将那些反应产物引导到过滤单元410中。第三过程阶段(阶段3)可以包括在过滤单元410内执行以便产生期望的已过滤产物的一系列过滤操作,并且第四过程阶段(阶段4)可以包括另一操作系列以将已过滤产物传递至储罐412。

[0085] 通常,可以通过开发对应于每个过程阶段的单独模型来开发整个批过程的模型。在图7所示的示例性过程中,可以针对阶段1~4中的每一个开发模型。可以通过从由批过程产生的多个批次中的每一个收集数据来开发对应于每个阶段的模型。为了区别与单独批次相结合地收集的数据,可以将唯一的批次ID 416分配至所产生的每个批次并将其与所收集并存储在诸如数据历史记录中的所有数据相关联,与导致产生该批次的过程的批运行相结合。

[0086] 图8以图形方式描述了用于单过程阶段的过程数据的分批展开。可以从许多批运行获得过程数据,其可以用作的培训数据集,以用于开发批过程的分析模型或者在多阶段过程的情况下开发批过程的每个阶段的分析模型。

[0087] 如所示,用来存储批数据的数据文件420包括用于工业批过程的I个批次或批运行中的每一个的三维数据阵列,其具有J个变量和K个扫描时段。数据文件420存储在批运行中使用的J个变量中的每一个的值。可以在I个批次中的每一个的K个扫描时段中的全部或某些期间获得并存储J个变量中的全部或某些的值。针对简单的单阶段批过程,此类展开是令人满意的。然而,针对多阶段批次,应如图9所示且如下面更详细地描述的那样针对每个阶段单独地展开数据。

[0088] 在开发过程的分析模型之前,将数据文件420展开成如图8所示的尺寸为I×KJ的二维阵列422。K个扫描时段中的每一个被表示为尺寸为I×J的二维阵列424,其可以包括用

于I个批次中的某些或全部的J个变量中的某些或全部的变量。在展开数据文件420时，并排地布置数据的K个二维阵列424（即K个扫描时段中的每一个扫描时段一个二维阵列）以形成如所示的二维阵列422。

[0089] 如图9所示，针对多阶段批过程可以采用类似的数据展开方案。如所示，最初可以将每个过程阶段的数据存储在三维阵列430中，类似于图10所示的三维阵列420。三维阵列430具有尺寸 $I_i \times J_i \times K_i$ ，其中， $1 \leq i \leq S$ ，其中，S是构成整个批过程的阶段的总数。因此，在S个三维阵列430中表示数据，每个阵列430存储I个批次的J个变量在1和S之间的特定过程阶段i的K个扫描时段的数据。每个三维阵列 $i$  430中的数据被展开成尺寸为 $I_i \times K_i J_i$ 的二维阵列432，其中，再一次并排地布置尺寸 $I_i \times J_i$ 的 $K_i$ 个二维阵列434。

[0090] 图10图示可以用于多阶段工业过程的PLS建模的多个单块和多块数据结构。最简单数据结构（在图10的左上部分中示出）将单个块X用于被用来开发过程的模型的所有数据，并将块Y用于批次结尾产品质量指示，其可以针对被用来产生块X的数据的批次计算或测量。在此单块、单阶段数据结构中，将批次视为一个阶段，并且如上所述地展开用于所有阶段的所有数据并使其同步，并且然后针对该批次开发一个PLS模型，如同该过程是单级过程一样。由于大多数过程或过程阶段在批次结尾或阶段结尾产品质量方面显著地受到在过程或过程阶段运行之前存在的条件的影响，所以常常采用从批次或阶段开始直至当前时间的所有数据以便进行质量预测。在过程建模中称为“初始条件”的这些条件主要包括在过程中使用的原始或预处理材料的质量或状态的指示，其在阶段开始时是已知的，并且影响阶段结尾或批次结尾产品质量。

[0091] 图10的右上部分中所示的另一数据结构分别将块 $X_1, X_2, \dots, X_i$ 用于被用来开发单独过程阶段1、2、...、i的数据。可以将此数据组合在单个块中并连同如图10的右上部分所示的相关联的批次结尾产品质量指示Y一起用来构造过程的PLS模型，或者可以采用单独的阶段结尾质量指示 $Y_1, Y_2, \dots, Y_i$ ，如图10的左下部分所示，以构造过程的PLS模型。如果阶段结尾质量指示符是不可用的，则可以替代地在阶段结束时计算批次结尾质量预测并使用，或者如果其可用的话可以除阶段结尾质量指示之外另外使用。

[0092] 作为使用阶段数据块 $X_1, X_2, \dots, X_i$ 和阶段结尾产品质量预测 $Y_1, Y_2, \dots, Y_i$ 来构造过程的PLS模型的替代，可以使用i个阶段中的每一个的分数矩阵或潜结构分数 $T_1, T_2, \dots, T_i$ 连同阶段数据块 $X_1, X_2, \dots, X_i$ 一起来构造PLS模型，如图10的右下部分所示。可以将分数矩阵或潜结构分数 $T_1, T_2, \dots, T_i$ 组合以形成潜结构TS，其又可以转而用来形成如所示的批次结尾产品质量预测Y，以供在构造多阶段过程的PLS模型时使用。替换地，或者除这些潜结构分数之外，可以在阶段结束时形成阶段结尾质量或批次结尾质量预测。

[0093] 图11是表示用于多阶段、多块建模的数据结构的图，其中，在一个过程阶段中开发批次结尾质量或阶段结尾质量计算项值并传递至下一个过程阶段。如所示，用于多块批模型（图11的左侧部分中所示）的数据结构A包括数据块 $X_1, X_2$ 等，分别用于在过程阶段1、2等的运行期间获得的阶段数据。另外，数据结构A还包括用于每个阶段的关于该阶段的初始条件的附加块 $I_1, I_2$ 等。针对在第一阶段之后的阶段，这些附加块还可以包括批次结尾质量预测Y或阶段结尾计算项或来自直接在前面的阶段的其他参数预测信息。因此，用于对应于第二过程阶段的数据块 $X_2$ 的附加块可以包括初始条件12 以及由用于第一过程阶段的模型开发的批次结尾产品质量预测Y。

[0094] 图11的右侧部分所示的替换数据结构B类似于数据结构A,不同的是除如上所述在数据结构A中使用的阶段结尾产品质量预测之外或作为其替换,用于在第一阶段之后的阶段的附加块包括质量计算项(分数分子-分母)和可能的来自前一阶段的置信区间计算项T。

[0095] 可以用比例因数 $\lambda$ 对批次结尾产品质量预测Y或更具体地与平均值的质量计算偏差进行重新缩放,其中 $0 < \lambda < 1$ ,以便相对于来自当前阶段的信息的影响减少来自前一阶段的信息对批次结尾质量预测的影响。并且,可以使用主成分,并且可以经由如上所述的附加块将从阶段数据导出的置信区间计算项作为另外的附加参数传递至后续阶段。

[0096] 图12是图示用于多阶段过程的多块建模的两个替换建模的图。在所示的实例中,多次运行多阶段批过程以获得过程数据和批次结尾质量数据以供在构造模型时使用。如上所述,数据块X1、X2等存储从多阶段批过程的每个阶段获得的数据。质量预测块Y存储多阶段批过程的每次运行的关于批次结尾产品质量的数据。一旦收集了全部的此数据,并且如上所述地对齐,则举例来说可以使用图12所示的两个程序中的一个来构造过程的PLS模型。

[0097] 图12的左侧部分所示的程序(1)涉及分别用于多阶段批过程的n个阶段的一系列模型M1、M2、...、Mn的构造。用于多阶段批过程的第一阶段的PLS模型M1由从阶段1获得的过程数据的数据块XI、包含指示与多阶段批过程的阶段1有关的初始条件的数据的初始条件块II以及包含在多阶段批过程的多次运行期间获得的指示批次结尾产品质量的数据的批次结尾产品质量数据块Y构成,从所述多阶段批过程的所述多次运行获得了用来构造PLS模型的数据。一旦针对阶段1构造了PLS模型M1,则使用阶段1数据块XI和阶段1初始条件块II来运行PLS模型M1以产生阶段1的预测批次结尾产品质量指示Yp并可选地产生相应的置信区间CI,其是预测批次结尾产品质量指示Yp的准确度的众所周知的统计度量。置信区间CI提供相对于模型多好地预测过程的结果和实际的批数据有多紧密地与在开发模型时使用的培训数据匹配(即噪声或其他不准确是否使得批数据完全不同于模型所预期的数据)两者来测量模型的预测能力准确度的方式。然后将预测批次结尾产品质量指示Yp和置信区间CI(如果期望的话)包括在初始条件块I2中以在构造多阶段批过程的第二阶段的PLS模型M2时使用。

[0098] PLS模型M2又由阶段2数据块X2、阶段2初始条件块I2(包括从阶段1的PLS模型M1和关联置信区间CI获得的预测批次结尾产品质量指示Yp)和批次结尾产品质量数据块Y构成。同样地,一旦构造了,则使用阶段2数据块X2和阶段2初始条件块I2(包括由模型M1产生的Yp和CI)来运行PLS模型M2以产生阶段2的预测批次结尾产品质量指示Yp,并计算相应的置信区间CI。再次地,可以在初始条件块I3中包括来自阶段2的预测批次结尾产品质量Yp和置信区间CI以在构造多阶段批过程的第三阶段的PLS模型M3时使用。针对多阶段批过程的每个阶段重复此过程,初始条件块Ii被用于阶段i的模型,包括来自前一阶段的预测批次结尾产品质量指示Yp和置信区间CI。同样地,每个阶段的初始条件Ii还可以包括每个先前阶段的初始条件。

[0099] 在图12的右侧部分所示的用于多阶段批过程的多块建模的程序(2)类似于程序(1),不同的是模型M1是使用多阶段批过程的全部n个阶段的数据块X1、X2、...、Xn而不仅仅是包含来自阶段1的数据的数据块X1构成的。然而,程序(2)以类似于(1)的方式前进,因为PLS模型M1由数据块X1、X2、...、Xn、批次结尾产品质量数据块Y以及初始条件数据块I1构成。然后使用数据块XI和初始条件数据块II作为输入来运行所构造的PLS模型M1以产生预

测批次结尾产品质量指示 $Y_p$ 和关联置信区间,其又被包括在初始条件数据块I2中,该初始条件数据块I2被用来基于数据块X2、X3、...、Xn 而不是数据块X1以及批次结尾产品质量数据块Y和初始条件数据块I2来构造第二过程阶段的PLS模型M2。如在程序(1)中,在程序(2)中针对多阶段批过程的n个阶段中的每一个重复此过程以构造整个多阶段批过程的PLS模型。

[0100] 图13是图示采用遗忘因子以便对三阶段过程进行建模的PLS模型的图。所谓的“遗忘因子”是用来减少在过程中的早期阶段中获得的过程数据对例如在过程的稍后阶段中进行的批次结尾产品质量预测的影响的比例因子。采用遗忘因子的基本原理是虽然过程的每个阶段可能对由整个过程最终产生的产品的质量有影响,但每个处理阶段的影响在该阶段期间和直接在该阶段之后是最显著的,并且随着过程前进至稍后的阶段而减少。

[0101] 在图13所示的示例性三阶段批过程中,可以使用包含在过程的多次运行的阶段1期间产生的数据的数据块X1和包含在阶段2和3期间产生的那些运行的相应的数据的数据块X2和X3以及包含与在那些运行期间产生的产品的批次结尾质量有关的数据的批次结尾产品质量数据块Y来开发PLS 模型。作为对阶段1、2和3的数据块X1、X2和X3同样地加权的替代,向每个数据块连续地应用遗忘因子以对来自过程的稍后阶段的过程数据比来自过程的较早阶段的过程数据更重地加权。

[0102] 在所示的示例中,在构造阶段1的模型时,对数据块X1应用1的遗忘因子(实际上,无遗忘)。在构造阶段2的模型时,对数据块X2应用1的遗忘因子,但是对数据块X1应用1/2的遗忘因子。在构造阶段3的模型时,对数据块X3应用1的遗忘因子,对数据块X2应用2/3的遗忘因子,并对数据块X1应用1/3的遗忘因子。这样,来自每个阶段的过程数据与来自多阶段过程的较早阶段的过程数据相比对与该过程阶段相关联的批次结尾质量预测作出更显著的贡献。可以遍及过程模型的阶段连续地应用遗忘因子。

[0103] 图14图示用以根据从多阶段批过程的多次运行收集(或如上文所解释的那样从包含来自先前批运行的数据的数据历史记录提取)的培训数据来开发多阶段批过程的PLS模型的一个示例性方法。一旦开发,可以例如在执行图 12所示的两个示例性过程建模程序中的任何一个时使用多阶段批过程的此类 PLSS模型。

[0104] 如图14所示,收集(或者如果期望的话从数据历史记录提取)包括初始条件数据II、过程变量数据XI(针对过程的第一阶段收集的)以及批次结尾输出质量Y1的用于阶段1的培训数据集。然后对该培训数据集执行PLS建模计算或程序以产生多阶段批过程的第一阶段的PLS批模型M1。然后用被作为输入应用于PLS模型M1的初始条件数据II和过程变量数据X1来运行阶段1PLS模型M1以产生批次结尾质量预测 $Y_{p1}$ 。PLS模型M1可以另外提供预测 $Y_{p1}$ 的可靠性或准确度的估计,诸如置信区间CI1,或者如本领域的技术人员众所周知的,可以单独地计算可靠性或准确性的此类估计。然后在开发如图14所示的批过程的阶段2的PLS模型M2时使用批次结尾质量预测  $Y_{p1}$ 和/或置信区间CI1作为初始输入。以类似方式,一旦创建了PLS模型 M2(使用由阶段1的PLS模型M1开发的质量预测 $Y_{p1}$ 和/或置信区间CI1 作为输入以及阶段2数据X2和批输出质量测量Y),然后用包括批过程的阶段2的初始条件数据I2 和过程变量数据X2并且还包括由批过程的阶段1的模型M1(使用培训数据作为输入开发)输出的批次结尾质量预测 $Y_{p1}$ 和相应置信区间CI1的输入来运行PLS模型M2以开发模型的第二阶段的批次结尾质量预测 $Y_{p2}$ 和相应的置信区间CI2。如所示,使用来自模型M2的批次结尾

质量预测 $Y_{p2}$ 和置信区间 $CI_2$ 对阶段3重复此过程,对于多阶段批过程的每个后续阶段亦然。因此,例如使用包括先前阶段模型的预测性和/或置信输出的先前阶段模型的输出来创建每个阶段模型。当然,虽然图14图示了使用在图12的右侧所示的方法(1)的模型开发,但还可以使用在图12的左侧的方法(2)来开发阶段模型 $M_1$ 、 $M_2$ 、 $M_3$ ,使得使用来自过程的所有后续阶段的培训数据 $X_1$ 、 $X_2$ 等来开发第一阶段模型 $M_1$ ,使用来自过程的所有后续阶段的培训数据 $X_2$ 、 $X_3$ 、 $X_4$ 等来开发第二阶段模型 $M_2$ ,以此类推。

[0105] 一旦如上文参考图14所述开发了用于多阶段批过程的n个阶段的模型 $M_1$ 、 $M_2$ 、 $\dots$ 、 $M_n$ ,则可以使用多阶段模型来对批过程进行建模以便例如随着批次的产生而预测该批次的输出质量,从而进行关于是继续还是放弃批过程的运行的判定或调节到后续阶段的输入以尝试矫正通过对批过程的先前阶段进行建模所预测的批次结尾产品质量方面的任何缺陷。图15图示多阶段批过程的示例性使用。

[0106] 如图15所示,将从批过程的阶段1的实际运行测量或获得的初始条件数据 $I_1$ 和过程变量数据 $X_1$ 应用于阶段1的PLS模型 $M_1$ 。可以在线捕捉此数据,或者可以从数据历史记录获得,如果这样期望的话。使用此数据运行阶段1的PLS模型 $M_1$ 的产生输出质量预测 $Y_{p1}$ 和相应的置信区间 $CI_1$ 。然后可以使用输出质量预测 $Y_{p1}$ 和置信区间 $CI_1$ 基于该批次的此阶段的运行来估计批运行的最终质量,并且可以基于该批次的第一阶段的实际运行来进行关于继续运行该批次、停止该批次还是在后续阶段对批次程序进行修改以便增加该批次的质量的判定。

[0107] 同样地,随后可以将PLS模型 $M_1$ 的输出连同在完成该批次的阶段2之后从该批次的阶段2测量的初始条件数据 $I_2$ 和过程变量数据 $X_2$ 一起作为输入应用于阶段2的PLS模型 $M_2$ 。模型 $M_2$ 产生批次结尾质量预测 $Y_{p2}$ 和置信区间 $CI_2$ ,其又被应用于批过程的下一个连续阶段的PLS模型,以此类推,直至已经对多阶段批过程的所有阶段均已建模,每个模型利用由前一阶段的PLS模型产生的批次结尾质量预测和置信区间。

[0108] 当然,本文所述的多阶段模型可以在批运行期间的任何时间运行(例如在该批次在线的同时),使得在线批运行的所有先前阶段被用来预测该批次的当前阶段或操作点处的批运行的最终输出质量。同样地,可以在运行一个批次之后运行在本文中开发和运行的多阶段模型以确定对该批次的未来运行的潜在修改以在该批次的输出处获得更好的质量。当然,本文所述的多阶段建模开发和执行技术可以在任何情况下用于任何期望目的,并且可以适用于批过程以及连续过程。

[0109] 如上所述,可以用在计算机处理器上运行的一个或多个软件和/或固件程序来实现上述示例性方法和/或设备中的至少某些。然而,可以同样地将包括但不限于专用集成电路、可编程序逻辑阵列及其他硬件器件的专用硬件实施方式构造成完全或部分地实现本文所述的示例性方法和/或设备中的某些或全部。此外,还可以将包括但不限于分布式处理或元件/对象分布式处理、并行处理或虚拟机处理的替换软件实施方式构造成实现本文所述的示例性方法和/或系统。

[0110] 还应注意的是本文所述的示例性软件和/或固件实施方式被存储在有形存储介质上,诸如磁介质(例如磁盘或磁带)、诸如光盘的磁光或光学介质或固态介质,诸如存储卡或其他封装,其容纳一个或多个只读(非易失性)存储器、随机存取存储器或其他可重写(易失性)存储器。因此,可以将本文所述的示例性软件和/或固件存储在有形存储介质上,诸如上

文所述的那些或继承存储介质。在以上说明书参考特定标准和协议来描述示例性部件和功能的程度上，应理解的是本专利的范围不限于此类标准和协议。例如，用于因特网及其他分组交换网络传输（例如传输控制协议的每个标准（TCP/网际协议（IP）、用户数据包协议（UDP）/IP、超文本标记语言（HTML）、超文本传输协议（HTTP））表示现有技术的示例。此类标准周期性地被具有相同一般功能的更快或更高效的等价物所取代。因此，具有相同功能的替换标准和协议时等价的，这是本专利预期的，并且其意图被包括在所附权利要求的范围内。

[0111] 另外，虽然本专利公开了包括在硬件上执行的软件或固件的示例性方法和设备，但应注意的是此类系统仅仅是示例性的且不应将其视为限制性的。例如，可以预期的是可以专有地用硬件、专有地用软件、专有地用固件或用硬件、固件和/或软件的某些组合来体现任何和所有这些硬件和软件部件。因此，虽然上述说明书描述了示例性方法、系统和/或机器可访问介质，但示例并不是实现此类系统、方法和机器可访问介质的唯一方式。因此，虽然在本文中已描述了某些示例性方法、系统和机器可访问介质，但本专利的覆盖范围不限于此。

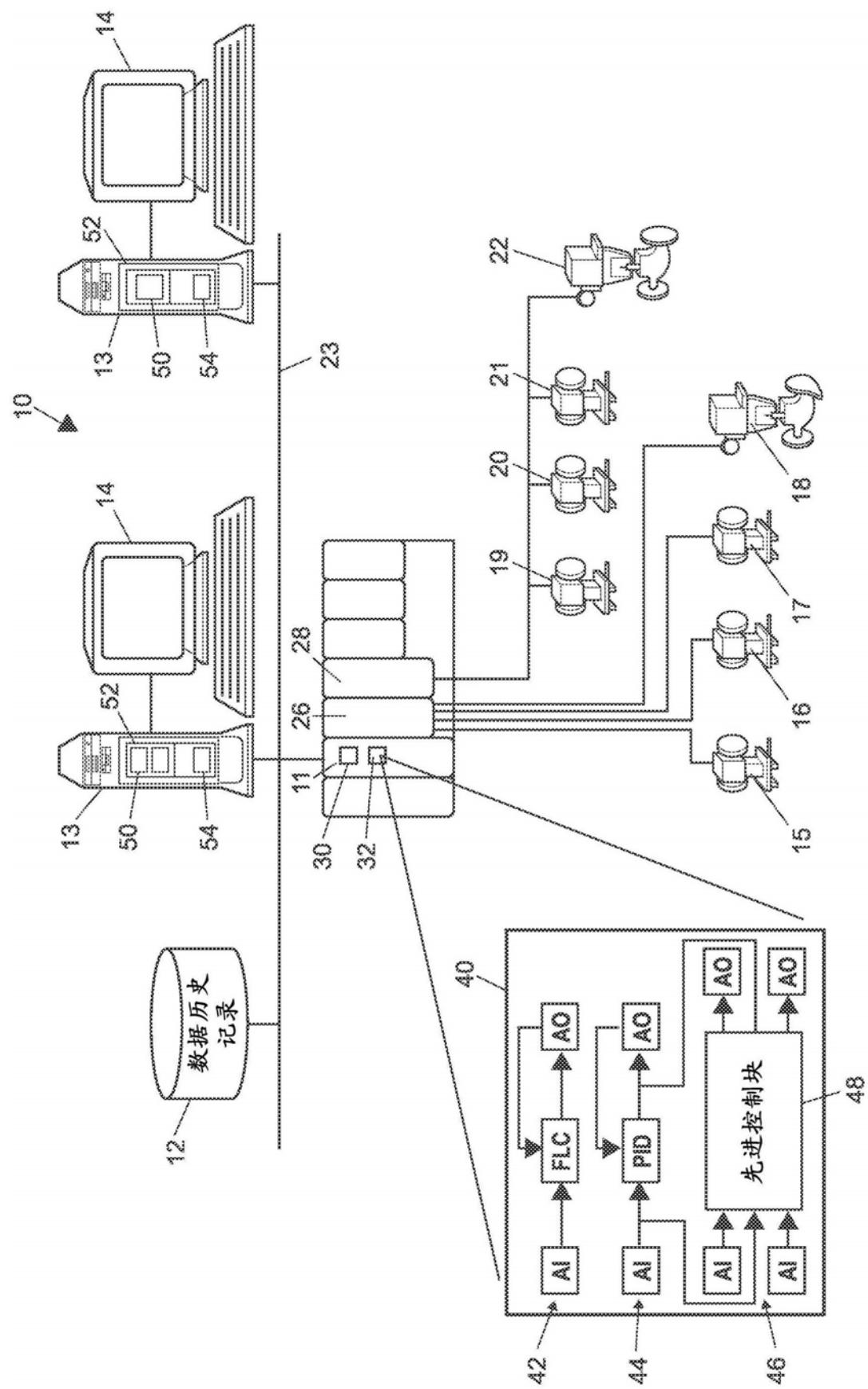


图1

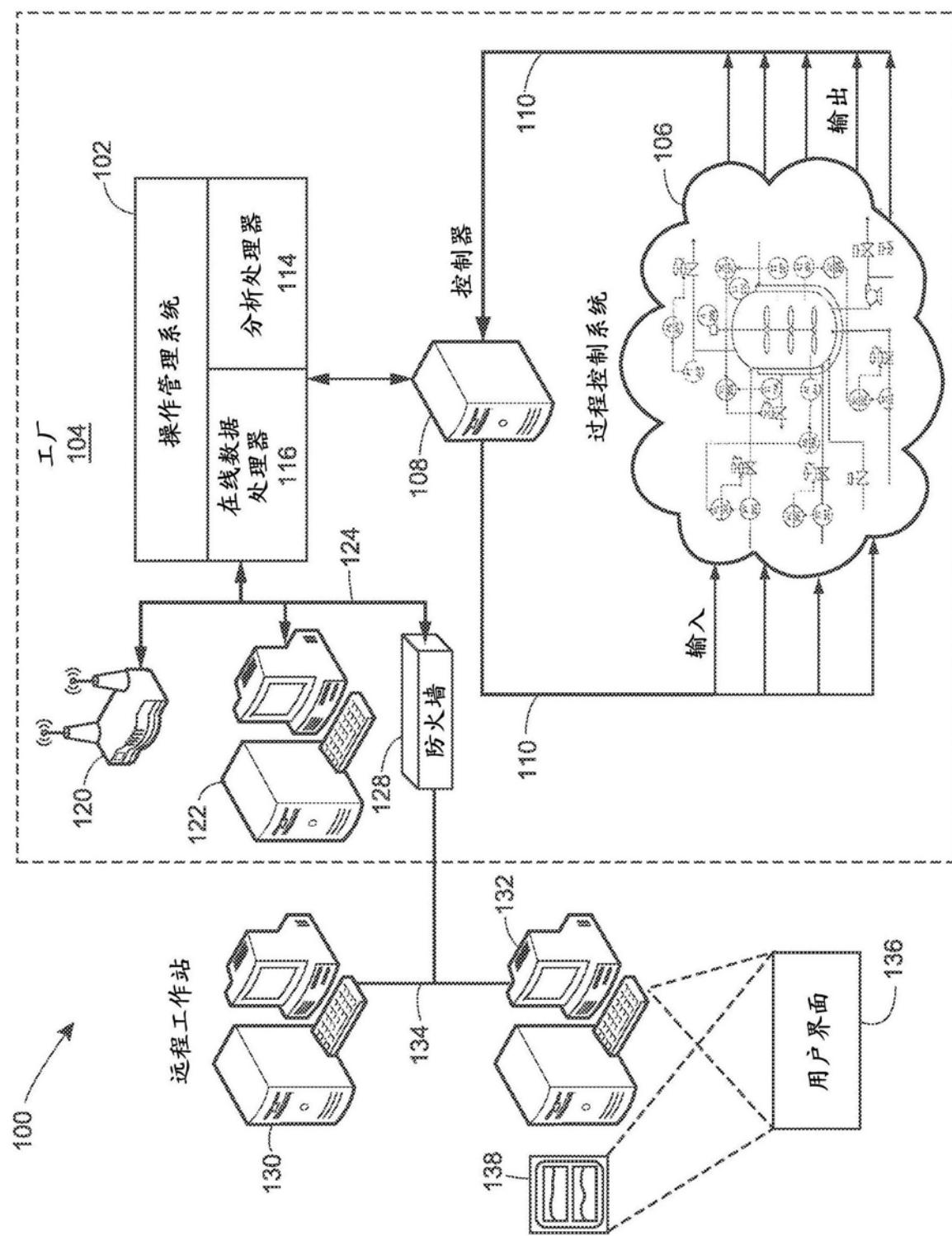


图2

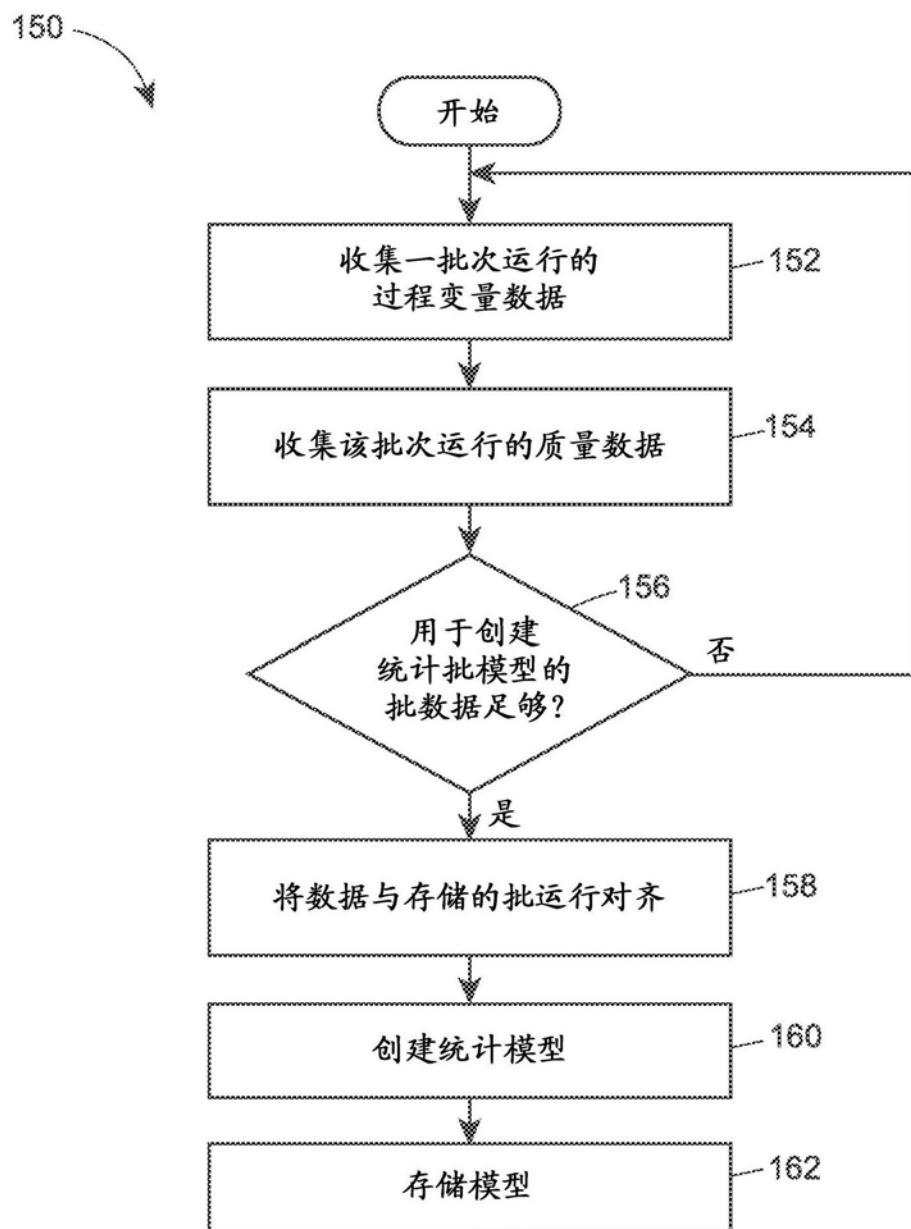


图3

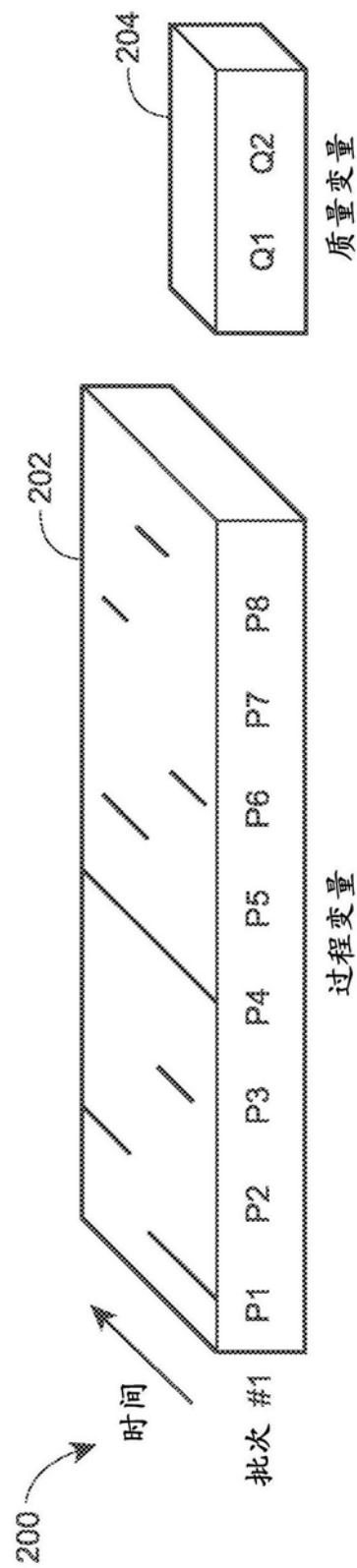


图4

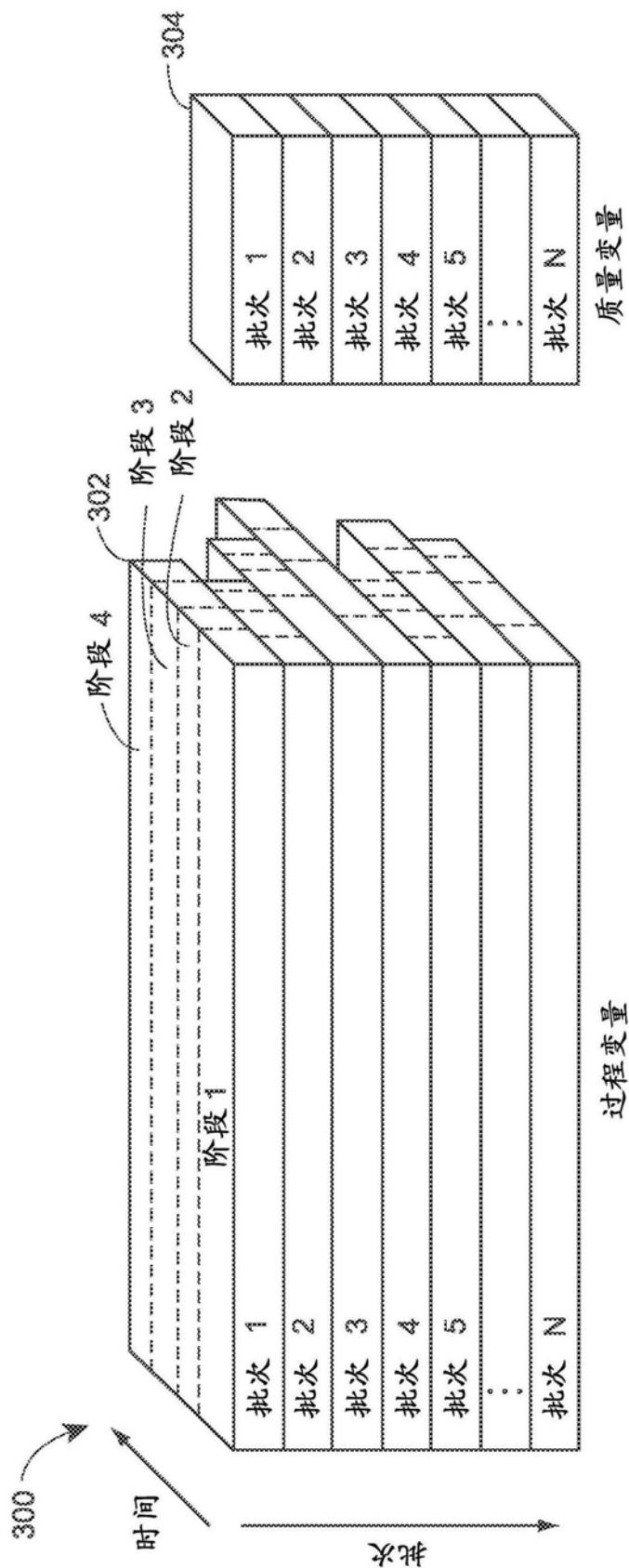


图5

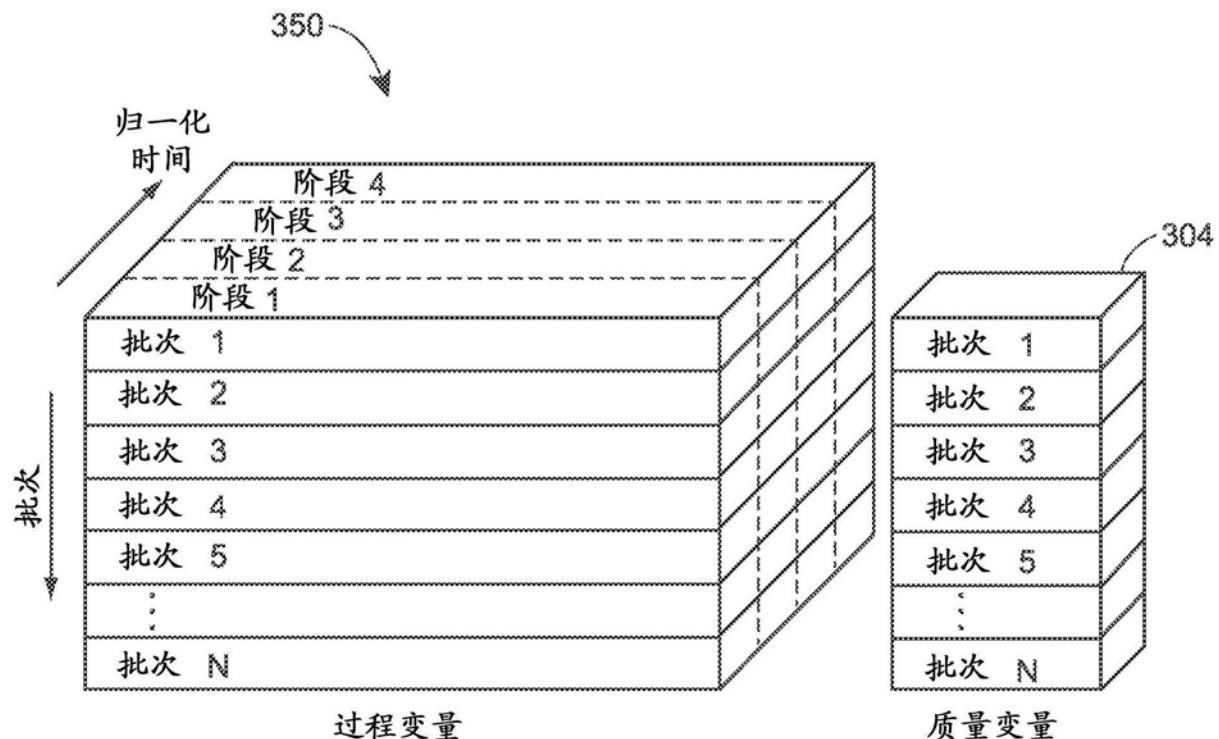


图6

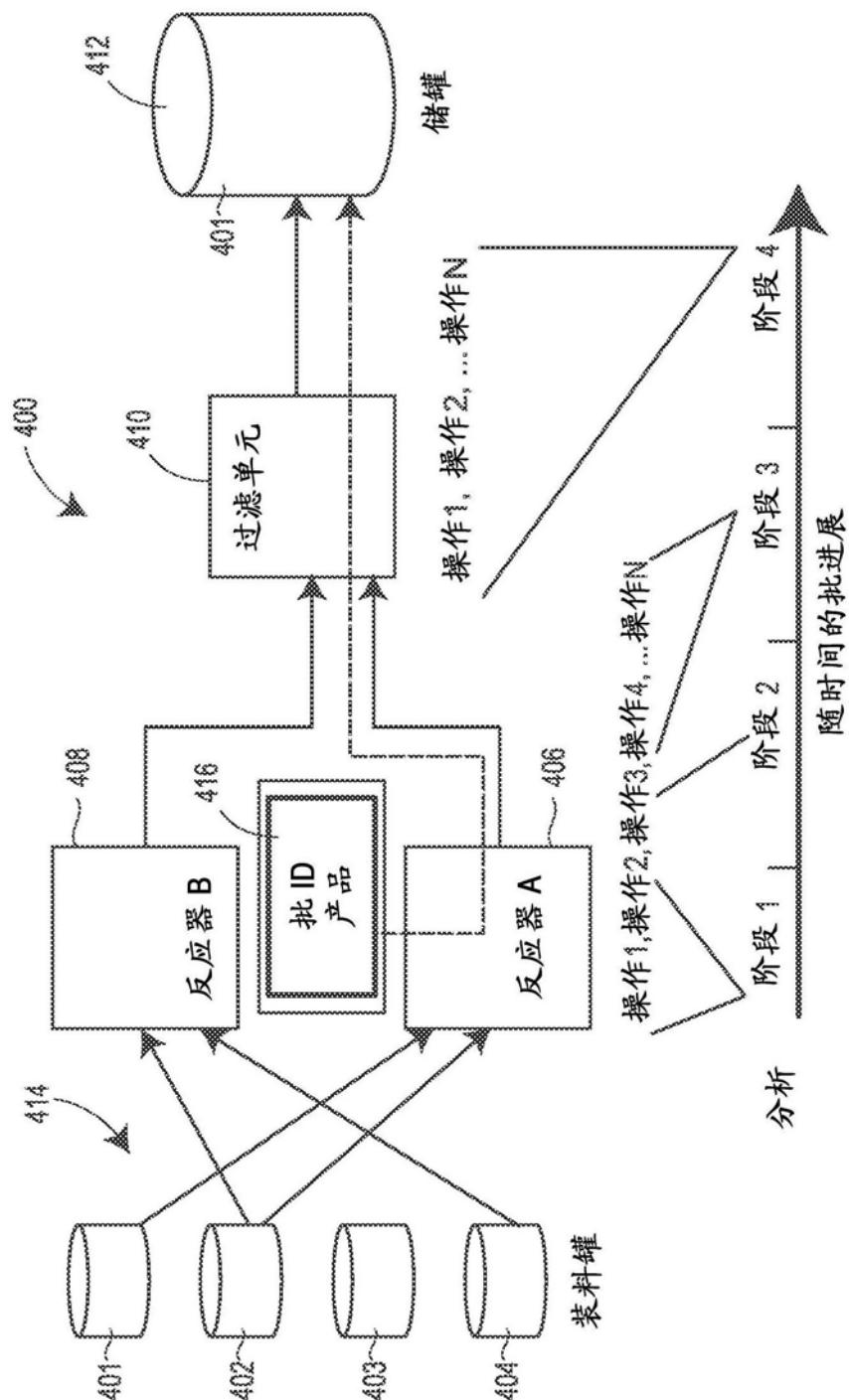


图 7

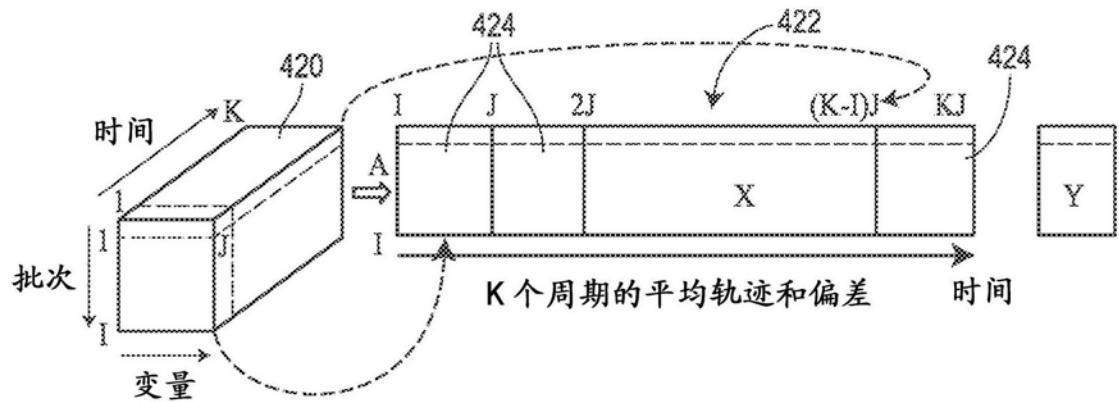


图8

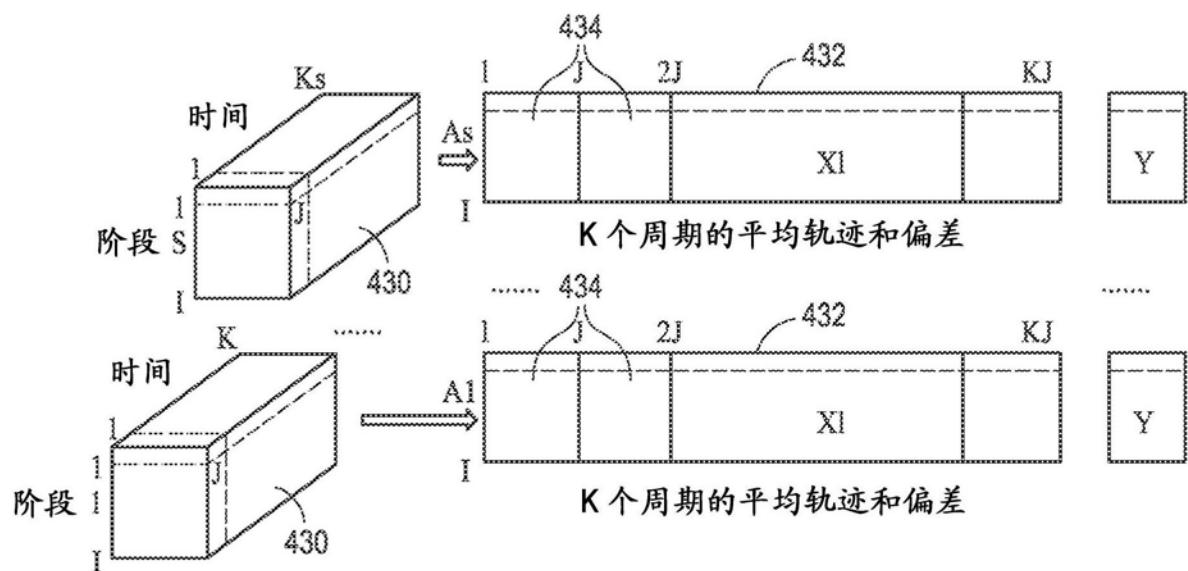


图9

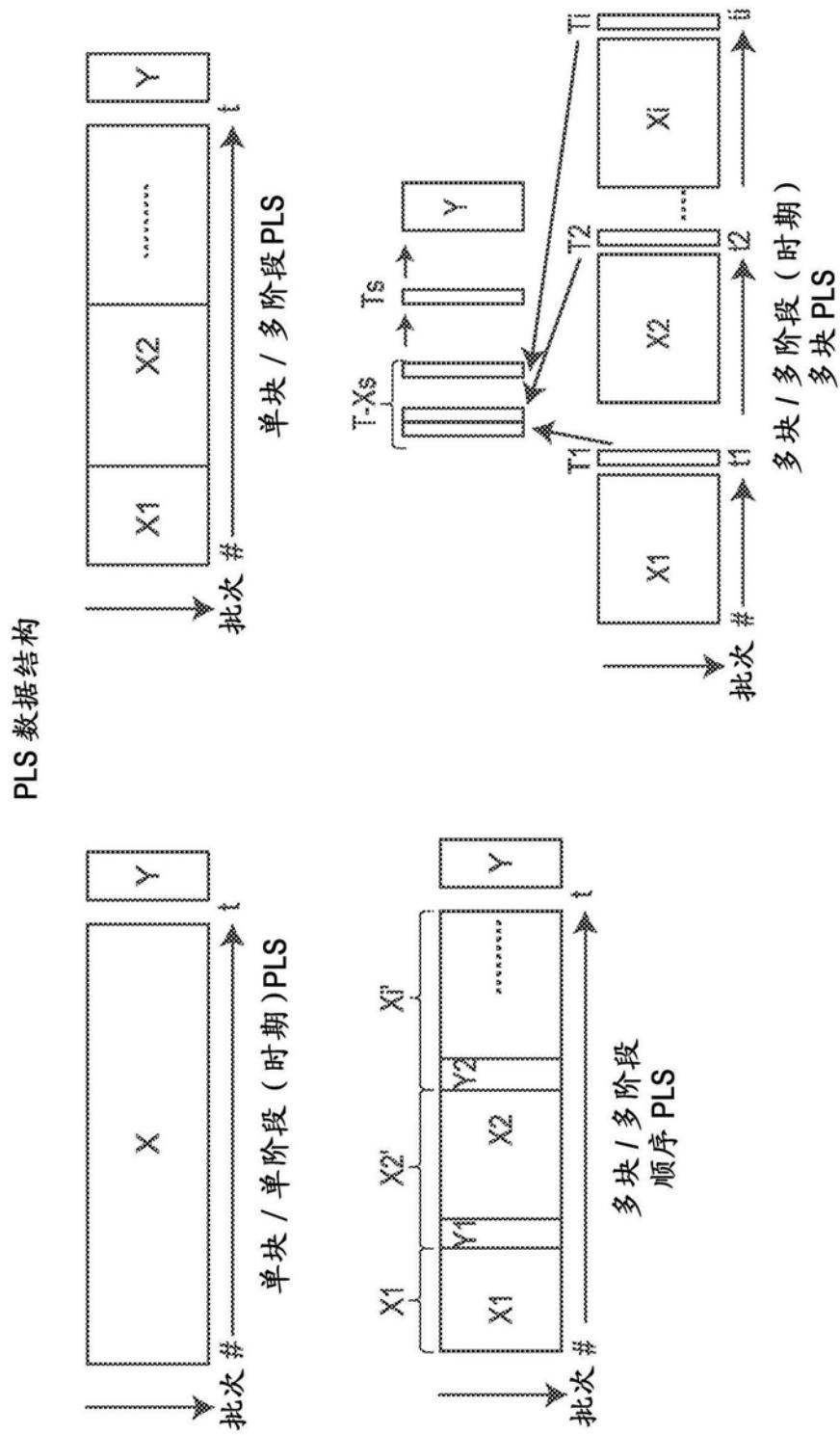


图10

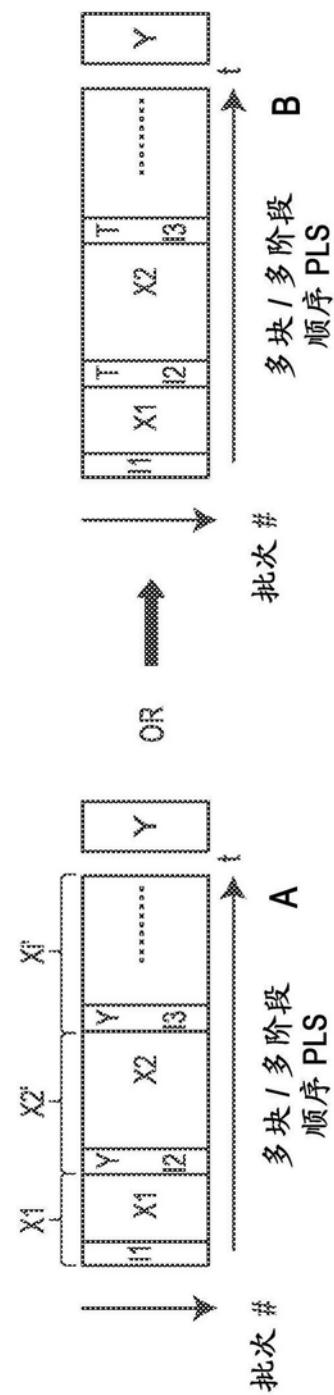


图11

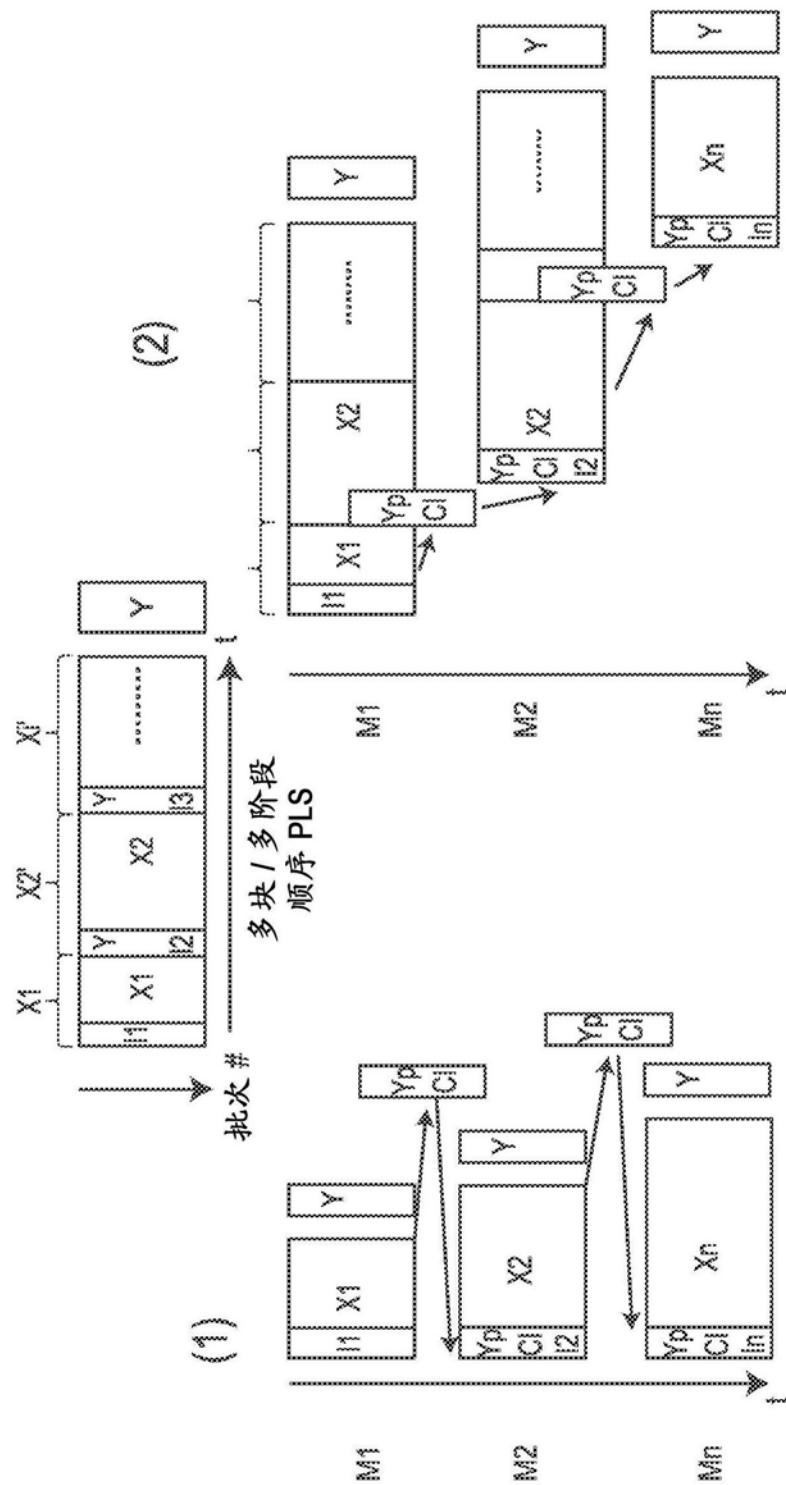


图12

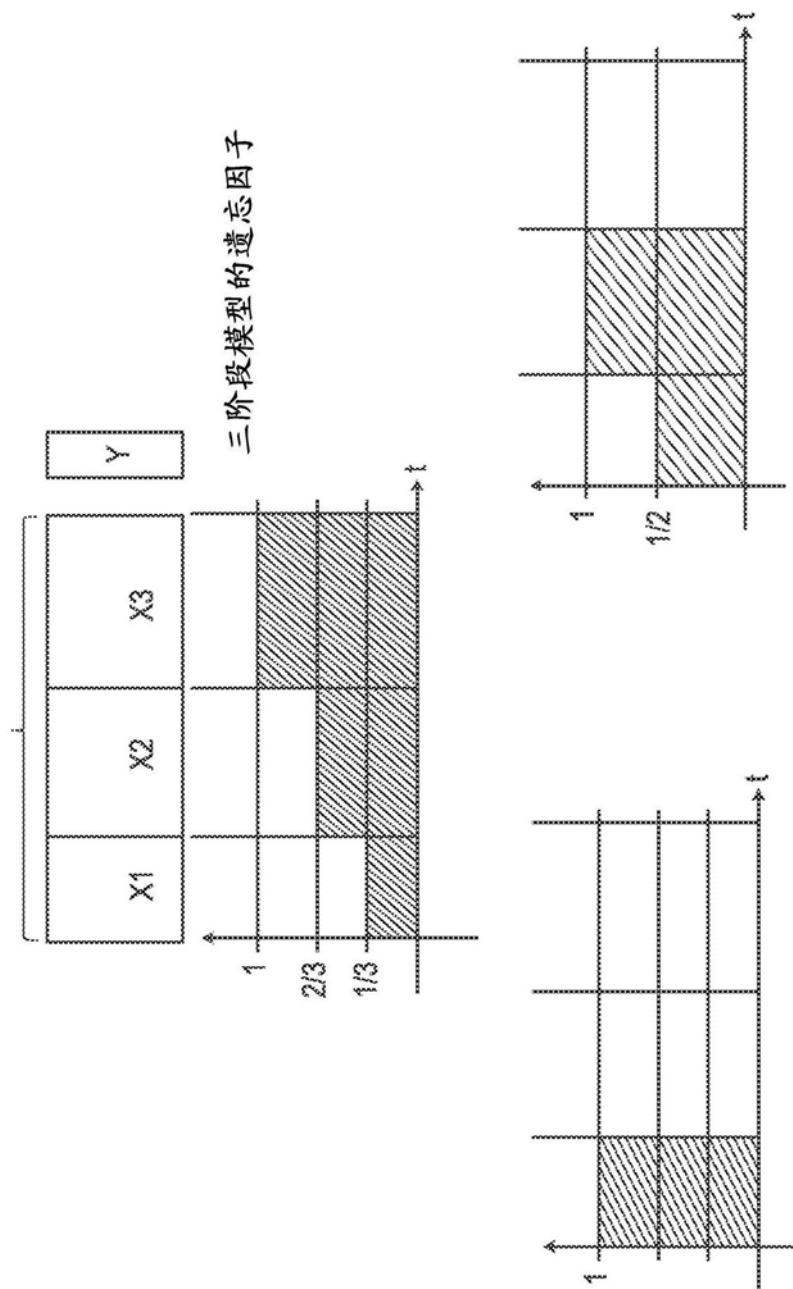


图13

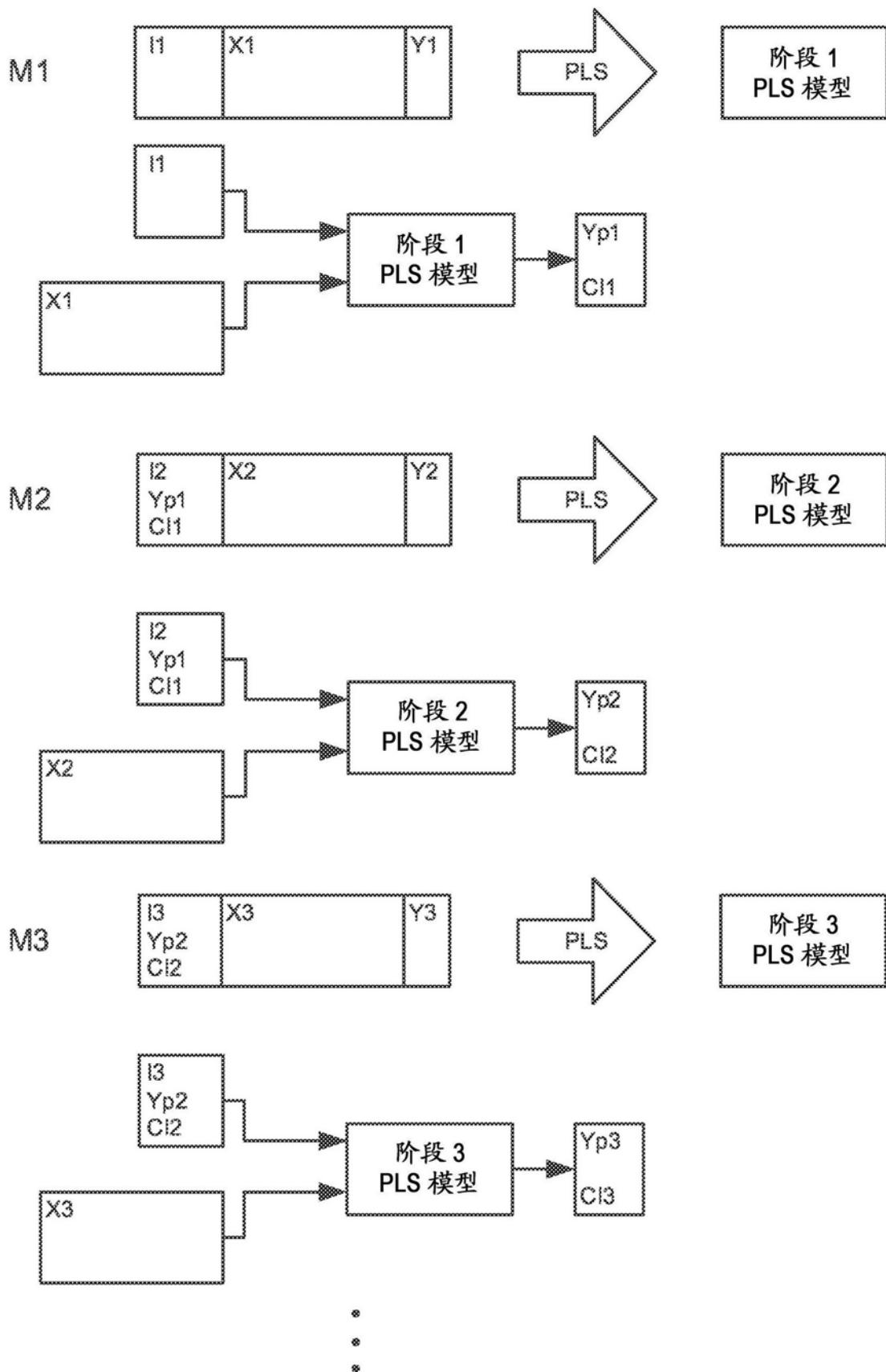


图14

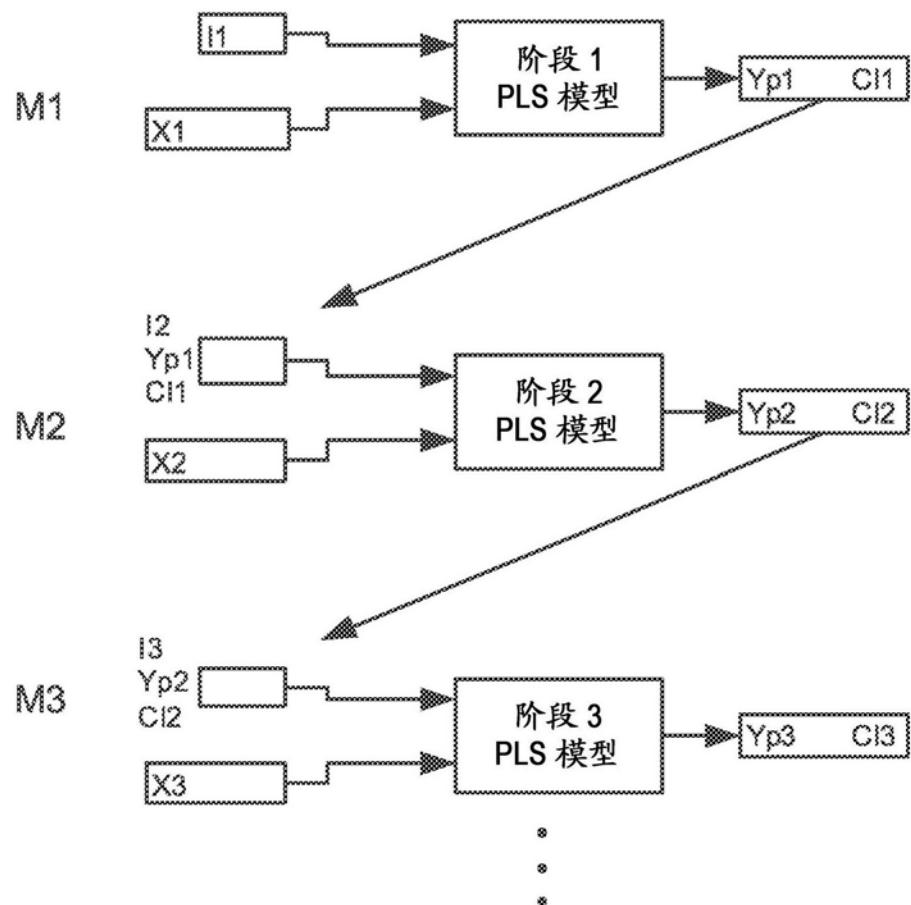


图15