



(12)发明专利

(10)授权公告号 CN 102298319 B

(45)授权公告日 2017. 07. 18

(21)申请号 201110138939.0

(51)Int.Cl.

(22)申请日 2011.05.23

G05B 13/04(2006.01)

(65)同一申请的已公布的文献号

审查员 张毅

申请公布号 CN 102298319 A

(43)申请公布日 2011.12.28

(30)优先权数据

12/784,689 2010.05.21 US

(73)专利权人 费希尔-罗斯蒙特系统公司

地址 美国得克萨斯州

(72)发明人 W·K·沃杰茨尼斯

T·L·布勒文斯

(74)专利代理机构 永新专利商标代理有限公司

72002

代理人 曹雯

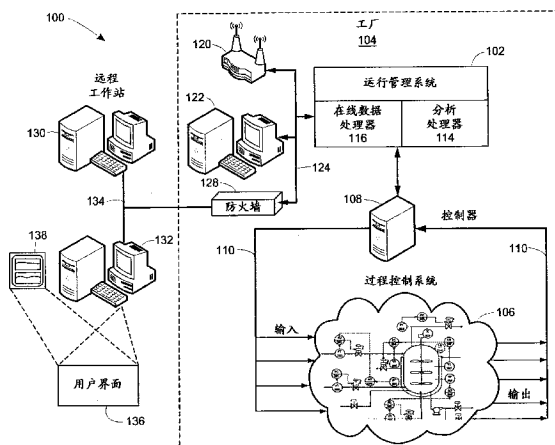
权利要求书5页 说明书21页 附图11页

(54)发明名称

过程分析模型与实际过程运转的在线对齐

(57)摘要

过程分析模型与实际过程运转的在线对齐涉及一种批次建模与分析系统,使用简单且计算上花费较少的技术来将收集自进行中的,当前运行的或在线批次过程的数据与为该批次过程构建的批次模型对齐,以使得能够可靠地确定相对于批次模型的在线批次过程的当前运行状态。这种数据对齐技术使得进一步的统计处理技术,诸如偏最小二乘(PLS)以及主成分分析(PCA)技术,可以被应用在在线批次数据以对当前运行批次的质量进行分析。反过来,这些分析向诸如批次操作员的用户提供有用信息,以使用户能够根据批次模型来确定当时批次的质量,以及在批次运行结束时能够达到所需批次输出质量度量的可能性。



1. 一种将在线过程运行对齐至过程模型的方法,所述过程模型具有用于多重过程变量的每个过程变量的模型轨迹,所述方法包括:

在计算机设备接收来自所述在线过程运行的值数据,所述值数据表示所述多重过程变量的每个过程变量的当前值;

存储所接收的来自所述在线过程运行的值数据至计算机可读存储器中;

在多个模型扫描位置中的每个模型扫描位置,为所述多重过程变量的每个过程变量,使用计算机设备分析所述值数据,以确定在最近确定的模型扫描位置的所述在线过程运行的过程变量与所述过程模型内的用于所述过程变量的模型轨迹值之间的距离;

为所述多个模型扫描位置的每个模型扫描位置,使用计算机设备加和为所述多重过程变量确定的距离,以为多个模型扫描位置的每个模型扫描位置生成加和的距离,所述加和的距离代表在单个模型扫描位置为所述多重过程变量确定的距离的和;

使用计算机设备确定最小加和的距离;以及

选择与所述最小加和的距离关联的模型扫描位置作为所述在线过程运行当前所对齐至的模型扫描位置。

2. 根据权利要求1所述的将在线过程运行对齐至过程模型的方法,其中,所述在多个模型扫描位置中的每个模型扫描位置,使用计算机设备分析所述值数据,以确定在最近确定的模型扫描位置的所述在线过程运行的过程变量与用于所述过程变量的模型轨迹值之间的距离,包括使用包括所述最近确定的模型扫描位置和比所述最近确定的模型扫描位置在时间上向前的一个或更多模型扫描位置的多个模型扫描位置。

3. 根据权利要求1所述的将在线过程运行对齐至过程模型的方法,其中,所述在多个模型扫描位置中的每个模型扫描位置,使用计算机设备分析所述值数据,以确定在最近确定的模型扫描位置的所述在线过程运行的过程变量与用于所述过程变量的模型轨迹值之间的距离,包括在所述多个模型扫描位置中的一个,确定在最近确定的模型扫描位置的在线过程变量的当前值与用于所述过程变量的模型轨迹值之间的欧氏距离。

4. 根据权利要求3所述的将在线过程运行对齐至过程模型的方法,还包括对所述欧氏距离求平方。

5. 根据权利要求3所述的将在线过程运行对齐至过程模型的方法,其中,所述在多个模型扫描位置中的每个模型扫描位置,使用计算机设备分析所述值数据,以确定在最近确定的模型扫描位置的所述在线过程运行的过程变量与用于所述过程变量的模型轨迹值之间的距离,还包括在所述多个模型扫描位置中的一个确定斜率差额距离,所述斜率差额距离限定在最近确定的模型扫描位置的在线过程变量的斜率与用于所述过程变量的模型轨迹的斜率之间的差额,并且包括结合所述欧氏距离和所述斜率差额距离以生成结合的距离作为所述在线过程运行的所述过程变量和所述模型轨迹之间的距离。

6. 根据权利要求5所述的将在线过程运行对齐至过程模型的方法,还包括当结合所述欧氏距离和所述斜率差额距离以生成所述在线过程运行的所述过程变量和所述模型轨迹之间的所述结合的距离时,给所述欧氏距离和所述斜率差额距离不同的权重。

7. 根据权利要求3所述的将在线过程运行对齐至过程模型的方法,其中,为所述多个模型扫描位置的每个模型扫描位置使用计算机设备加和为所述多重过程变量确定的距离还包括当计算所述加和时,给为所述多重过程变量确定的距离不相等的权重。

8. 根据权利要求3所述的将在线过程运行对齐至过程模型的方法,还包括基于加和所关联的模型扫描位置,给所述加和的一个或者多个分配惩罚因子。

9. 根据权利要求8所述的将在线过程运行对齐至过程模型的方法,其中,分配所述惩罚因子包括分配随着所述模型扫描位置自所述最近确定的模型扫描位置在时间上的增加而增加的惩罚因子。

10. 根据权利要求1所述的将在线过程运行对齐至过程模型的方法,其中,在多个模型扫描位置中的每个模型扫描位置,为所述多重过程变量的每个过程变量,使用计算机设备分析所述值数据,以确定在最近确定的模型扫描位置的所述在线过程运行的过程变量与所述过程模型内的用于所述过程变量的模型轨迹值之间的距离,包括在所述多个模型扫描位置的每个模型扫描位置,确定斜率差额距离为在最近确定的模型扫描位置的在线过程变量的斜率与用于所述过程变量的模型轨迹的斜率之间的距离。

11. 一种执行批次过程的在线过程运行的分析的方法,包括:

在所述在线过程运行之前,在计算机设备上生成统计模型,所述统计模型具有用于多重过程变量的每个过程变量的模型轨迹,所述统计模型具有多个模型扫描位置;

存储所述统计模型于计算机可读的存储器中;

在计算机设备接收来自所述在线过程运行的在线数据,所述数据表示所述多重过程变量的每个过程变量的当前值;

在多个模型扫描位置中的每个模型扫描位置,使用所述计算机设备分析所述多重过程变量的每个过程变量的当前值,以基于所述在线过程运行的过程变量的值与用于所述过程变量的模型轨迹值之间的差额,确定所述多个模型扫描位置中所述在线过程运行所对齐至的一个模型扫描位置;以及

基于所确定的对齐,执行对所述在线数据的分析。

12. 根据权利要求11所述的执行批次过程的在线过程运行的分析的方法,其中,生成所述统计模型包括收集所述多重过程变量的每个过程变量的数据用于多个过程运行,通过偏移所述多个过程运行的每个过程运行的数据至标准化的时间帧而对齐用于所述多个过程运行的每个过程运行的数据,以及发展所述统计模型的所述模型轨迹的每个模型轨迹为在标准化的时间帧中的数据的统计测量。

13. 根据权利要求12所述的执行批次过程的在线过程运行的分析的方法,其中,所述模型轨迹包括在一组标准化的时间的每个时间的过程变量的平均的测量。

14. 根据权利要求12所述的执行批次过程的在线过程运行的分析的方法,其中,所述模型轨迹包括在一组标准化的时间的每个时间的过程变量的偏差的统计测量。

15. 根据权利要求11所述的执行批次过程的在线过程运行的分析的方法,其中,基于所确定的对齐执行对所述在线数据的分析包括比较所述过程变量中的一个过程变量的在线数据和用于所述一个过程变量的模型轨迹。

16. 根据权利要求15所述的执行批次过程的在线过程运行的分析的方法,还包括确定用于过程变量的所述在线数据是否超出与用于所述过程变量的所述模型轨迹关联的范围,并且如果用于过程变量的所述在线数据超出与用于所述过程变量的所述模型轨迹关联的范围,指明问题。

17. 根据权利要求11所述的执行批次过程的在线过程运行的分析的方法,其中,基于所

确定的对齐执行对所述在线数据的分析包括执行对所述在线数据的主成份分析过程。

18. 根据权利要求11所述的执行批次过程的在线过程运行的分析的方法, 其中, 基于所确定的对齐执行对所述在线数据的分析包括执行对所述在线数据的偏小二乘分析以确定所述在线过程运行的预测质量。

19. 根据权利要求11所述的执行批次过程的在线过程运行的分析的方法, 其中, 基于所确定的对齐执行对所述在线数据的分析包括基于所述统计模型确定所述在线过程运行的预测质量。

20. 根据权利要求11所述的执行批次过程的在线过程运行的分析的方法, 其中, 使用所述计算机设备分析所述多重过程变量的每个过程变量的当前值, 以确定所述在线过程运行所对齐至的所述多个模型扫描位置中的那一个模型扫描位置包括:

在多个模型扫描位置中的每个模型扫描位置, 为所述多重过程变量的每个过程变量, 确定在最近确定的模型扫描位置的所述在线过程运行的过程变量与所述统计模型内的用于所述过程变量的模型轨迹值之间的距离;

为所述多个模型扫描位置的每个模型扫描位置, 加和为所述多重过程变量确定的距离, 以为多个模型扫描位置的每个模型扫描位置生成加和的距离, 所述加和的距离代表在单个模型扫描位置为所述多重过程变量的每个过程变量确定的距离的和;

确定最小加和的距离; 以及

选择与所述最小加和的距离关联的模型扫描位置作为所述在线过程运行当前所对齐至的模型扫描位置。

21. 根据权利要求20所述的执行批次过程的在线过程运行的分析的方法, 其中, 在多个模型扫描位置中的每个模型扫描位置确定在最近确定的模型扫描位置的所述在线过程运行的过程变量与用于所述过程变量的模型轨迹之间的距离包括使用包括所述最近确定的模型扫描位置和比所述最近确定的模型扫描位置在时间上向前的预定数量的一个或更多模型扫描位置的多个模型扫描位置。

22. 根据权利要求21所述的执行批次过程的在线过程运行的分析的方法, 其中, 确定距离包括在所述多个模型扫描位置中的一个, 确定在最近确定的模型扫描位置的在线过程变量的当前值与用于所述过程变量的模型轨迹值之间的欧氏距离。

23. 根据权利要求22所述的执行批次过程的在线过程运行的分析的方法, 其中, 确定距离还包括在所述多个模型扫描位置中的一个确定斜率差额距离, 所述斜率差额距离限定在最近确定的模型扫描位置的在线过程变量的斜率与用于所述过程变量的模型轨迹的斜率之间的差额, 并且包括结合所述欧氏距离和所述斜率差额距离以生成所述在线过程运行的所述过程变量和所述模型轨迹之间的距离。

24. 根据权利要求23所述的执行批次过程的在线过程运行的分析的方法, 还包括当结合所述欧氏距离和所述斜率差额距离以生成所述在线过程运行的所述过程变量和所述模型轨迹之间的距离时, 给所述欧氏距离和所述斜率差额距离不同的权重。

25. 根据权利要求21所述的执行批次过程的在线过程运行的分析的方法, 还包括当计算所述加和时, 给为所述多重过程变量确定的距离不相等的权重。

26. 根据权利要求21所述的执行批次过程的在线过程运行的分析的方法, 还包括基于加和所关联的模型扫描位置, 给所述加和的一个或者多个分配惩罚因子。

27. 根据权利要求26所述的执行批次过程的在线过程运行的分析的方法,其中,分配所述惩罚因子包括分配随着所述模型扫描位置自所述最近确定的模型扫描位置在时间上的增加而增加的惩罚因子。

28. 根据权利要求11所述的执行批次过程的在线过程运行的分析的方法,其中,生成统计模型,所述统计模型具有用于多重过程变量的每个过程变量的模型轨迹,包括统计地结合来自多个模型扫描位置的测量的数据以产生在单个模型扫描位置的用于过程变量的模型轨迹值。

29. 根据权利要求11所述的执行批次过程的在线过程运行的分析的方法,其中,分析所述多重过程变量的每个过程变量的当前值,确定所述在线过程运行所对齐至的所述多个模型扫描位置中的那一个模型扫描位置包括确定指示变量对齐,以及结合在多个模型扫描位置的每个模型扫描位置的所述在线过程运行的过程变量的值与用于所述过程变量的模型轨迹值的差额使用所确定的指示变量对齐,以确定所述在线过程运行所对齐至的所述多个模型扫描位置中的那一个模型扫描位置。

30. 一种用于将在线批次过程运行对齐至批次过程模型的计算机设备,所述批次过程模型具有用于多重批次过程变量的每个批次过程变量的模型轨迹,所述计算机设备包括:

第一单元,其接收来自所述在线批次过程运行的值数据,所述值数据表示用于所述多重批次过程变量的每个批次过程变量的当前值;

第二单元,其存储所接收的来自所述在线批次过程运行的值数据至计算机可读存储器中;

第三单元,在多个模型扫描位置中的每个模型扫描位置,为所述多重批次过程变量的每个批次过程变量,所述第三单元分析所述值数据,以确定在最近确定的模型扫描位置的所述在线批次过程运行的过程变量与所述批次过程模型内的用于所述过程变量的模型轨迹值之间的距离;

第四单元,为所述多个模型扫描位置的每个模型扫描位置,所述第四单元加和为所述多重批次过程变量确定的距离,以为多个模型扫描位置的每个模型扫描位置生成加和的距离,所述加和的距离代表在单个模型扫描位置为所述多重批次过程变量确定的距离的和;

第五单元,其确定最小加和的距离;以及

第六单元,其选择与所述最小加和的距离关联的模型扫描位置作为所述在线批次过程运行当前所对齐至的模型扫描位置。

31. 根据权利要求30所述的计算机设备,其中,所述第三单元使用多个模型扫描位置,所述多个模型扫描位置包括所述最近确定的模型扫描位置和比所述最近确定的模型扫描位置在时间上靠后的一个或更多模型扫描位置。

32. 根据权利要求30所述的计算机设备,其中,在所述多个模型扫描位置中的一个模型扫描位置,所述第三单元确定在最近确定的模型扫描位置的所述在线批次过程变量的当前值与用于所述批次过程变量的模型轨迹值之间的欧氏距离。

33. 根据权利要求32所述的计算机设备,其中,所述第三单元对所述欧氏距离求平方,以确定用于过程变量的距离。

34. 根据权利要求32所述的计算机设备,其中,所述第三单元确定所述欧氏距离的绝对值,以确定用于过程变量的距离。

35. 根据权利要求32所述的计算机设备, 其中, 在所述多个模型扫描位置中的一个模型扫描位置, 所述第三单元还确定斜率差额距离, 所述斜率差额距离限定在最近确定的模型扫描位置的在线批次过程变量的斜率与用于所述批次过程变量的模型轨迹的斜率之间的差额, 并且包括结合所述欧氏距离和所述斜率以生成结合的距离作为所述在线批次过程运行的所述过程变量和所述模型轨迹之间的距离。

36. 根据权利要求35所述的计算机设备, 其中, 所述第三单元还包括当结合所述欧氏距离和所述斜率差额距离以生成所述在线批次过程运行的所述过程变量和所述模型轨迹之间的距离时, 给所述欧氏距离和所述斜率差额距离不同的权重。

37. 根据权利要求32所述的计算机设备, 其中, 所述第四单元当计算所述加和时, 给在单个模型扫描位置为所述多重批次过程变量的不同变量确定的距离不相等的权重。

38. 根据权利要求32所述的计算机设备, 其中, 所述第四单元基于加和距离所关联的模型扫描位置, 给所述加和的距离的一个或者多个分配惩罚因子。

39. 根据权利要求38所述的计算机设备, 其中, 所述第四单元分配在所述模型扫描位置自所述最近确定的模型扫描位置在时间上增加时在程度上增加的惩罚因子。

40. 根据权利要求32所述的计算机设备, 其中, 在所述多个模型扫描位置的一个模型扫描位置, 所述第三单元确定所述距离为所述在最近确定的模型扫描位置的在线批次过程变量的斜率与用于所述批次过程变量的模型轨迹的斜率之间的差额。

过程分析模型与实际过程运转的在线对齐

技术领域

[0001] 本发明一般地涉及过程控制系统,更具体地涉及用于批次建模系统的数据对齐技术的实现,该批次建模系统辅助分析和预测在线或者进行中的批次过程的质量。

背景技术

[0002] 过程控制系统,例如用于化学、石油或者其他过程的过程控制系统,通常包括一个或者更多个过程控制器,以及通过模拟、数字或者结合的模拟/数字总线通信地耦接到至少一个主机或者操作者工作站和一个或者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,开关和传感器(例如,温度,压力和流速传感器),在过程中执行过程控制功能例如打开或者关闭阀以及测量过程控制参数。过程控制器接收表示现场设备所做的过程测量的信号,处理该信息以实施控制例程,并且生成控制信号,该控制信号通过总线或者其他通信线被发送至现场设备以控制该过程的运转。以此方式,过程控制器可以通过总线和/或其他通信线使用现场设备执行和协调控制策略。

[0003] 来自现场设备和控制器的过程信息可以是由操作者工作站(例如,基于处理器的系统)执行的一个或更多应用软件(即,软件例程,程序,等)可获得的,以使得操作者能够执行关于过程的所需的功能,例如观察过程的当前状态(例如,通过图形用于界面),评估该过程,修改该过程的运行(例如,通过可视的对象图),等。很多过程控制系统也包括一个或者更多应用软件站(例如,工作站),其通常使用个人电脑、笔记本、或者类似的实现并且通过局域网(LAN)通信地耦接至控制器、操作者工作站、和过程控制系统内的其他系统。每个应用软件站可以包括图形用户界面,其显示包括过程变量值、与过程关联的质量参数值的过程控制信息,过程故障检测信息,和/或过程状态信息。

[0004] 通常,在图形用户界面显示过程信息限制在显示与过程相关联的每个过程变量的值。此外,一些过程控制系统可以表征一些过程变量之间的简单关系以确定与过程关联的质量度量。然而,在该过程的直接产品不符合预定的质量控制度量的情形下,该过程和/或其他过程变量只能在完成一个批次、过程、和/或该直接产品的组装之后分析。虽然在完成该过程之后观察该过程和/或质量变量使得能够实现对后续产品的制造或者过程的改进,这些改进不能纠正当前完成的超出规格的产品。

[0005] 该问题在批次过程中尤其严重,也即在实现批次过程的批次过程控制系统中。如所知的,批次过程通常运行以通过多个阶段或者步骤来处理作为一个“批次”的同一组原料,以制造产品。批次过程的多个阶段或者步骤可以在一个仪器中执行,例如槽,而其他阶段或者步骤可以在其他仪器中执行。由于相同的原料随着时间在批次过程的不同阶段或者步骤被不同地处理,在同一件仪器内的很多情形中,很难在该批次过程的任何阶段或者步骤,准确地确定该批次内的材料是否被以合适的方式处理,该方式将可能产生具有所需或者充分质量度量的最终产品的制造。也就是说,因为被处理的材料的温度、压力、浓度、pH或者其他参数在批次运转过程中随着时间改变,当该材料保持在相同位置的很多时候,难以在批次运行中的任何具体时间确定该批次过程是否以可能产生具有所需质量度量的最

终产品的方式运行。

[0006] 一种已知的确定当前运行批次是否进展正常或者出于所需规范内(从而可能产生具有所需质量度量的终产品)的方法是比较正在进行的批次的运转中所做的不同过程变量测量和“理想批次”的运转中所做的类似测量。在此,理想批次是预定的、先前运行的批次,其被选为代表批次的正常或者预期运转并且产生具有所需质量度量的最终产品的批次运行。然而,过程的批次运行通常在时间长度中变化,即在用于完成批次的时间中改变,使得难以知道理想批次中的哪个时间最适合于正在进行的批次的当前测量的参数。而且,在很多情形中,与最终产品的质量没有显著退化的选定的理想批次的过程变量相比,批次过程变量在批次运转中会显著变化。因此,如果不是操作上不可能的,通常难以确定能够在所有情形中用作所有其他批次运行应该与之比较的理想批次的一个具体批次运行。

[0007] 一种克服了使用理想批次的问题之一的分析在线批次过程的结果的方法包括为该批次创建统计模型。该技术包括从一个批次过程的多个不同批次运行中为一组过程变量(批次参数)的每个收集数据,并且为这些批次运行的每个确定或者测量质量度量。之后,所收集的批次参数和质量数据用于创建该批次的统计模型,该统计模型代表产生所需的质量度量的批次的“正常”运转。该批次的这种统计模型然后可以被用于分析在特定批次运行中所得到的不同的过程变量测量与被用于开发模型的批次运行中的相同测量如何统计地相关。例如,这种统计模型可以被用于提供每个测量的过程变量的平均值或中间值,以及在可以与当前测量的过程变量相比较的批次运行中任意具体时间的每个测量的过程变量相关联的标准偏差。此外,这种统计模型,可以被用于预测该批次的当前状态将如何影响或者有关于该批次结束时所制造的该批次产品的最终质量。

[0008] 一般而言,这种批次建模需要大量的数据,这些数据可以收集自例如发射器,控制环路,分析器,虚拟传感器,计算模块以及人工录入的各种来源。大多数数据被存储在连续数据历史库中。然而,重要的数据以及,尤其是人工录入的数据,通常关联于过程管理系统。从这些类型的系统所提取的数据必须被合并以满足建立模型的要求。此外,正如上文所说明的,根据技术以及建模的观点,批次过程通常经历一些显著不同的阶段,步骤或时期。因此,批次过程通常会被相对于时期进一步划分,并且为每个时期分别地构建模型。在这种情况下,来自于许多批次运行的用于相同时期或阶段的数据被分组以开发用于该时期或阶段的统计模型。这种数据安排的目的是为了移除或者减少过程的非线性。基于阶段,时期或其他根据来开发分离的批次模型的另一个原因是,在一个批次的各个不同阶段,不同的过程参数是有效的并且被用于建模。因此,阶段模型可以以与每个特定阶段相关的一组特定参数来构建,从而仅包括或考虑在每个批次阶段相关的过程参数。例如在一个特定阶段,添加剂可以被添加到主批次装载中,并且有关于这些添加剂的过程参数在之前的批次阶段并不需要考虑,但这些过程参数却是与添加这些添加剂的批次阶段相关的。

[0009] 然而在创建这种统计批次模型时,仍有必要处理不同的批次运行通常持续不同的时间长度这一事实。这种现象是由许多因素引起的,例如,与批次运行中操作者进行手动操作相关联的不同的等待时间,要求较长或较短加热或其它处理时间的不同的环境条件,在批次运行中导致较长或较短处理时间的原材料成分的变化。事实上,在不同批次运行中,特定过程变量的数据趋势持续不同的时间长度是很正常的,并且因而在不同批次过程运行中共有的批次里程碑会相互之间具有时间上的偏移。然而,为了创建有效的统计模型,一个批

次的每个阶段,运行,或时期的数据必须与用于创建模型的其他批次中相同阶段,运行或时期的类似数据对齐。因此,在根据所测量的批次运行创建用于批次过程的统计模型之前,有必要将来自不同批次运行的批次数据对齐在共同的时间帧。

[0010] 一种用于对齐来自于一个批次过程的多个不同批次运行的批次数据的常规技术采用指示变量来表示特定批次运行的进展。最佳的指示变量通常是平稳的,连续的,并且单调的,并且跨越批次数据集中所有其他过程变量的范围。为了创建时间对齐的批次运行,批次数据被收集用于所有的过程变量,并且相对于指示变量在时间上被调整。在这种技术中,在任意特定时间任意批次的成熟度或者完成百分率的测量是由指示变量的当前值与指示变量的最终值的百分比率所确定的。

[0011] 另一种已知的对齐来自各种不同批次运行的批次数据的方法采用动态时间规整(DTW)技术,这是一种借鉴于语音识别的技术。DTW最小化不同批次运行变量的各个过程变量轨迹之间的距离。在这样做时,DTW将时间规整分析中的所有过程变量都考虑在内,并且已被确定为一种有效的对齐批次数据的方法。如果需要的话,DTW可以使用上述的指示变量,或者可以使用被创建或限定为批次完成时间的分数的附加变量。这种指示变量被添加到初始过程变量集中以提高DTW计算的稳健性,并且以避免在过长的时间段内收敛到局部最小值。无论如何,当被应用在批次数据时,DTW技术通常根据批次运行的总体时间来偏移特定批次运行中数据的时间量程,从而压缩或扩展该批次数据的时间量程以匹配该批次运行的预定或“标准化”时间。数据集中所有的批次运行都被偏移到标准化时间,以将每个批次运行中的数据与来自其他批次运行的数据对齐到共同的时间量程。批次模型然后可以根据度量到这种共同的或标准化时间量程的批次数据创建。

[0012] 一旦创建了统计模型,后续批次运行就可以通过收集该批次的数据并比较所测量的或所收集的数据与模型数据来与该模型进行比较。然而,为了恰当地将来自每个新批次运行的数据与该批次模型进行比较,新的批次数据还必须在时间上被度量(即,压缩或扩展)以匹配该批次模型所使用的标准化时间。在该批次运行完成之前,难以将从进行中的或者在线批次所接收的批次数据进行时间度量,这是因为直到批次完成执行之前,进行中的批次的运行时间是未知的。因此,其实只有在批次运行已全部执行完之后,新批次运行的批次数据才可以关于所创建的批次模型进行比较或分析。然而,如果从批次运行中收集的数据能够在该批次运行仍处于运行时使用该批次模型来进行比较或分析,将是更有帮助的,因为只有当批次运行仍运行时,才可以改变用于实现批次执行的控制参数来补偿该批次中的故障或其它质量下降。此外,在一个批次运行完成之前,能够知道该批次运行是否有可能制造具有不可接受的质量度量的最终产品是很有用的。特别地,如果能够在批次运行的处理中尽早得知该批次运行不可能制造出符合所需质量度量的最终产品,该批次运行可以被暂停或停止,并且未完成的批次可以被放弃,以节约处理时间及能源,并且使得设备能够被用于处理将形成所需输出的其他批次。

[0013] 因此,由于在批次模型中使用标准化批次运行时间(以补偿用于创建批次模型的不同批次运行的持续时间)而不能知道如何对在线批次过程所收集的批次数据进行标准化,使得产生了实现用于分析批次过程运行的工业用在线系统的实质性阻碍。在一种解决这种问题的尝试中,一种DTW在线实现在直到批次阶段终止点的每个批次运行扫描预测过程变量轨迹。然而,这些轨迹的预测通常与将来的批次运行不相符。更重要地,这种在线DTW

程序执行每一次新扫描,记述正在被分析的变量的完整轨迹,这使得这种技术在处理器使用而言较为笨重、昂贵,并且对于过程控制系统中的在线实现而言过于复杂。因此,最常用的被用于在线批次分析应用的方法要么假设被分析的在线批次以及在批次模型的开发中所使用的被对齐的批次具有相等的持续时间,要么使用一组试探性规则来对齐批次运行期间的批次数据。然而,这种假设当前批次与用于创建批次模型的被对齐的批次的标准化时间具有相同时间长度的设想往往是错误的,并且因此产生粗劣的分析结果。此外,这种简化的试探性规则通常不满足大多数应用的需要。因此,这些技术带来了误导性的结果。

发明内容

[0014] 一种批次建模与分析系统,使用简单且计算上花费较少的技术来将收集自进行中的、当前运行的或在线批次过程的数据与为该批次过程构建的批次模型对齐,以使得能够可靠地确定相对于该批次模型的在线批次过程的当前运行状态。这种数据对齐技术使得进一步的统计处理技术,诸如偏最小二乘或者潜在源投影(PLS)以及主成分分析(PCA)技术,可以被应用在在线批次数据以对当前运行批次的质量进行分析。反过来,这些分析向诸如批次操作员的用户提供有用信息,以便用户能够根据批次模型来确定当时批次的质量,以及在批次运行结束时能够达到所需批次输出质量度量的可能性。此外,这些分析技术可以使得用户能够根据批次的当前运行状态决定是否最好暂停或放弃该批次并重新开始,而不是继续该批次的运行,因为该批次的输出最终将不具有所需的或可接受的质量测量。这些分析技术还可以使得用户能够决定如何来修改后续批次运行阶段中批次的处理,以补偿该批次不理想的特性,从而在批次运行完成时获得所要求的批次质量。

附图说明

[0015] 图1是可以被用于实现批次过程的具有控制器与现场设备的过程控制网络的示意图;

[0016] 图2是表示示例性过程控制系统的框图,该示例性过程控制系统包括可以实现用于分析批次过程的在线批次分析系统的示例性运行管理系统;

[0017] 图3是用于确定批次过程的统计批次模型的示例性方法的流程图;

[0018] 图4是表示批次过程的示例性批次运行的数据结构示意图,包括与批次过程运行关联的过程变量测量以及质量变量测量;

[0019] 图5是表示用于批次过程的一些不同批次运行的批次数据的数据结构的示意图,包括用于每个批次运行的过程变量以及各自的质量变量;

[0020] 图6是表示用于批次过程的一些不同批次运行的批次数据的数据结构的示意图,包括过程变量以及各自的质量变量,在来自批次运行的数据已被对齐在离线对齐过程之后;

[0021] 图7示出了表示从图6的对齐的批次数据所获得的特定批次变量的轨迹的图形;

[0022] 图8示出了例程或方法的流程图,该例程或方法可以被用于实现确定相对于统计批次模型的在线批次运行的位置估计并基于所估计的位置执行该批次运行的在线批次分析的技术;

[0023] 图9示出了特定批次变量的过程变量轨迹,该过程变量轨迹被划分为在线批次数据

据将要对齐的多个扫描；

[0024] 图10示出了表示相对于图9中该过程变量的模型轨迹确定在线批次中过程变量的位置估计的方式的图形；

[0025] 图11示出了表示在统计扫描周期单调变化的过程变量以及用于提醒目的的该变量上限及下限的图形；

[0026] 图12示出了表示可以被用于开发统计过程模型的模型扫描混合方法的图形；

[0027] 图13示出了由现有技术的在线批次分析方法所生成的质量预测的图形；

[0028] 图14示出了由在此所述的在线批次分析方法所生成的质量预测的图形；

[0029] 图15示出了如同图14所示的在此所述的在线批次分析方法所生成的质量预测的图形，其使用在批次或批次阶段完成之后实施的后计算来补偿所确定的在批次或批次阶段结束时所测量的质量。

具体实施方式

[0030] 图1示出了示例性过程控制系统10，包括连接到数据历史库12以及一个或更多主工作站或计算机13（其可以是任意类型的个人计算机，工作站等）的过程控制器11，每个主工作站或计算机13具有显示屏14。控制器11还通过输入/输出（I/O）卡26和28连接到现场设备15-22，并且可以运行以使用现场设备15-22实现批次过程的一个或更多批次运行。数据历史库12可以是任意所需类型的数据收集单元，其具有任意所需类型的存储器以及任意所需的或已知的用于存储数据的软件、硬件或固件。数据历史库12可以与工作站13中的一个分离（如图1所示），或者是工作站13中的一个的一部分。控制器11，其可以是例如Emerson Process Management所售的**DeltaV[®]**控制器，通过例如以太网连接或任意其他所需的通信网络23通信地连接到主计算机13以及数据历史库12。控制器11还使用与例如标准4-20毫安设备和/或诸如**FOUNDATION[®]**Fieldbus协议，**HART[®]**协议，**WirelessHART[®]**协议等智能通信协议相关联的任意所需的硬件和软件通信地连接到现场设备15-22。

[0031] 现场设备15-22可以是任意类型的设备，诸如传感器，阀，发射器，定位器，等，而I/O卡26和28可以是符合任意所需通信或控制器协议的任意类型的I/O设备。在图1所示的实施例中，现场设备15-18是通过模拟线或结合的模拟与数字线与I/O卡26通信的标准4-20毫安设备或者HART设备，而现场设备19-22是诸如**FOUNDATION[®]**Fieldbus现场设备的智能设备，其采用Fieldbus通信协议通过数字总线与I/O卡28通信。当然，现场设备15-22可以符合任意其他所需的的标准或协议，包括将来开发的任意标准或协议。

[0032] 控制器11包括实现或监控一个或更多过程控制例程（存储在存储器32中）的处理器30，其可以包括控制环路，并且与设备15-22、主计算机13以及数据历史库12通信，从而以任意所需的方式控制过程。应当注意，在此所述的任意的控制例程或模块的其中的部分可以由不同的控制器所实现或执行，如果需要这样做的话。类似地，在此所述的将要在过程控制系统10中实现的控制例程或模块可以采用任意的形式，包括软件、固件、硬件等。控制例程可以以任意软件格式实现，诸如采用面向对象编程，采用梯形逻辑，时序功能图，功能块图，或者采用任意其他的软件编程语言或设计范例。类似地，控制例程可以被硬式编码到，例如一个或更多EPROM，EEPROM，专用集成电路（ASIC），或者任意其他硬件或固件元件中。因此，控制器11可以被配置成以任意所需的方式实现控制策略或控制例程。

[0033] 在一些实施例中,控制器11采用通常所称的功能块来实施控制策略,其中每一功能块是总体控制例程的对象或者其他部分(例如子例程),并且与其他功能块(通过被称为链接的通信)协同运行以在过程控制系统10中实现过程控制环路。功能块通常实施输入功能,控制功能或输出功能中的一种,该输入功能诸如与发射器、传感器或其他过程参数测量设备相关联的功能,该控制功能诸如与实施PID、模糊逻辑等控制的控制例程相关联的功能,该输出功能控制诸如阀的某种设备的运行以在过程控制系统10中执行某种物理功能。当然,还存在有混合的以及其他类型的功能块。功能块可以被存储在控制器11中并被其执行,这通常是在这些功能块被用于,或者关联于标准4-20毫安设备以及诸如HART设备的一些类型的智能现场设备的情况中,或者可以被存储在现场设备本身并由其实现,这可以是在使用Fieldbus设备的情况中。

[0034] 正如图1的分解的块40所示,控制器11可以包括一些如例程42与44所示的单环控制例程,以及如果需要的话,可以实现一个或更多高级控制环路,诸如控制环路46所示的多个/输入-多个/输出控制例程。每个这种环路通常被称为控制模块。单环控制例程42与44被表示为采用分别连接到适合的模拟输入(AI)与模拟输出(AO)功能块的、单个输入/单个输出模糊逻辑控制块以及单个输入/单个输出PID控制块来执行单环控制,这些控制块可以关联于诸如阀的过程控制设备,诸如温度和压力发射器的测量设备,或者过程控制系统10中任意其他的设备。高级控制环路46被表示为包括通信地连接到一个或更多AI功能块的输入以及通信地连接到一个或更多AO功能块的输出,然而高级控制块48的输入与输出可以被连接到任意其他所需的功能块或控制元件以接收其他类型的输入以及提供其他类型的控制输出。高级控制块48可以是任意类型的模块预测控制(MPC)块,中枢网络建模或控制块,多变量模糊逻辑控制块,实时优化块等,或者可以是可适调节控制块等。可以理解,图1所示的功能块,包括高级控制块48,可以由控制器11执行,或者可选地,可以设置在其他处理设备中并由其执行,诸如工作站13中的一个或者甚至现场设备19-22中的一个。

[0035] 此外,如在图1中所示,一个或更多过程分析例程50可以由过程控制系统10的各种设备存储并执行。虽然过程分析例程50被表示为存储在一个或更多计算机可读存储器52中以被执行在工作站13的处理器54上,例程50可以替代地被存储并执行在其他设备中。每个过程分析例程50通信地耦接到诸如控制例程42,44,46的一个或更多控制例程,和/或耦接到数据历史库12以接收一个或更多所测量的过程变量测量。每个过程分析例程50可以被用于开发统计过程模型并根据该模型来分析进行中的或在线批次过程。分析例程50还可以向诸如批次操作者的用户显示关于在线或进行中批次的信息,如同过程控制系统10所实现的。

[0036] 图2是表示过程控制环境100另一示例的框图,该过程控制环境100包括运行管理系统(OMS)102,又被称为过程监控与质量预测系统(PMS),其可以用于实现在线批次过程建模及分析系统。OMS 102被设置在包括过程控制系统106的工厂104中,该过程控制系统106可以包括例如图1的过程控制系统10的部分或全部。示例性工厂104可以是任意类型的制造设施,过程设施,自动化设施,和/或任意其他类型的过程控制结构或系统。在一些示例中,工厂104可以包括位于不同位置的多个设施,并且尽管图1的工厂104是表示为包括一个单独的过程控制系统106,工厂104还可以包括附加的过程控制系统。

[0037] 过程控制系统106,其通过数据总线110通信地耦接到控制器108,该过程控制系统

106可以包括任意数量的用于实现过程功能的现场设备(例如,输入和/或输出设备),该过程功能诸如执行过程中的物理功能或进行过程变量测试。现场设备可以包括任意类型的过程控制组件,该过程控制组件能够接收输入,生成输出,和/或控制过程。例如,现场设备可以包括诸如阀,泵,风扇,加热器,冷却器,和/或搅拌器的输入设备以控制过程。此外,现场设备可以包括诸如温度计,压力计,浓度计,液位计,流量计,和/或气体传感器的输出设备来测量过程内或部分过程的过程变量。输入设备可以从控制器108接收指令以执行一个或更多指定的命令并引起过程改变。再者,输出设备测量过程数据,环境数据,和/或输入设备数据并将所测量的数据作为过程控制信息发送给控制器108。这种过程控制信息可以包括对应于来自每个现场设备所测量的输出的变量的值(例如,所测量的过程变量和/或所测量的质量变量)。

[0038] 在图2示出的示例中,控制器108可以通过数据总线110与过程控制系统106中的现场设备通信,其可以耦接到过程控制系统106中的中间通信组件。这些通信组件可以包括现场接线盒以将命令区中的现场设备与数据总线110通信地耦接。此外,通信组件可以包括调度柜来组织到现场设备和/或现场接线盒的通信路径。再者,通信组件可以包括I/O卡以从现场设备接收数据并将数据转换为能够被示例性控制器108所接收的通信媒介。这些I/O卡可以将来自控制器108的数据转换为能够被对应的现场设备处理的数据格式。在一个示例中,数据总线110可以采用Fieldbus协议或其它类型的有线和/或无线通信协议(例如Profibus协议,HART协议等)实现。

[0039] 图1的控制器108管理一个或更多控制例程,从而管理过程控制系统106中的现场设备。控制例程可以包括过程监控应用程序,报警管理应用程序,过程趋势和/或历史应用程序,批次处理和/或活动管理应用程序,统计应用程序,流化视频应用程序,高级控制应用程序等。此外,控制器108可以将过程控制信息转发给OMS 102。控制例程可以被实现来确保过程控制系统106制造指定量的在一定质量阈值内的所需产品。例如,过程控制系统106可以被配置成在批次结束时制造产品的批次系统。在其他的示例中,过程控制系统106可以包括不断地制造产品的持续过程制造系统。

[0040] 来自于控制器108的过程控制信息可以包括对应于所测量的来源于过程控制系统106中现场设备的过程和/或质量变量的值。在其他示例中,OMS 102可以将过程控制信息中的值解析为对应的变量。所测量的过程变量可以关联于过程控制信息,该过程控制信息来源于测量部分过程和/或现场设备特性的现场设备。所测量的质量变量可以关联于过程控制信息,该过程控制信息有关于测量与已完成产品的至少一部分相关联的过程的特性。

[0041] 例如,过程工厂可以在在流体中形成一定浓度的化学制品的槽中进行化学反应。在这种示例中,流体中化学制品的浓度可以是一种质量变量。流体的温度和流体流入槽的速率可以是过程变量。通过过程控制建模和/或监控,OMS 102可以确定槽中流体的浓度是建立在槽中流体的温度以及流入槽的流体流速的基础上的。因此,不仅浓度是质量变量,流体流速与流体温度都会作用于或者影响浓度的质量。换言之,所测量的过程变量作用于或者影响所测量的质量变量的质量。OMS 102可以使用统计处理来确定每个过程变量对质量变量的影响和/或贡献。

[0042] 此外,OMS 102可以建模和/或确定关联于过程控制系统106的所测量的过程变量和/或质量变量之间的关系。所测量的过程和/或质量变量之间的这些关系可以形成一个或

更多计算的质量变量。计算质量变量可以是一个或更多所测量的过程变量,所测量的质量变量,和/或其他计算的质量变量的多变量的和/或线性代数的结合。此外,OMS 102可以由所测量的过程变量,所测量的质量变量,和/或计算的质量变量的结合确定总体质量变量。总体质量变量可以对应于整个过程的质量确定和/或对应于过程直接产品的预测的质量。

[0043] 如图2所示,OMS 102包括分析处理器114,其使用描述建模,预测建模,和/或优化来生成关于过程控制系统106状态和/或质量的反馈。分析处理器114可以检测,确定,和/或诊断过程运行故障并预测任意故障对关联于过程控制系统106直接产品质量的质量变量和/或总体质量变量的影响。此外,分析处理器114可以通过统计地和/或逻辑地将质量和/或过程变量结合到关联于过程总体质量的总体质量变量来监控过程的质量。分析处理器114然后可以将为总体质量变量计算的值和/或关联于其他质量变量的值与各自阈值进行比较。这些阈值可以建立在在过程中不同时间总体质量变量的预定质量限度的基础之上。例如,如果关联于过程的总体质量变量超过阈值一段时间,所预测的直接产品的最终质量可能不能达到最终产品相关的质量度量。

[0044] 如果总体质量变量和/或任意其他质量变量偏离各自阈值,分析处理器114可以在过程观察图和/或过程变化图中生成故障指示,以显示被解释的和/或未被解释的与总体质量变量关联的偏移(或变化),和/或可以显示产生该过程故障的变量。示例性分析处理器114管理分析,以通过提供使得操作者能够生成可以显示所测量的过程变量,所测量的质量变量,和/或计算的质量变量等的当前和/或过去值的过程质量图(例如,结合图,迷你图,过程变量图,可变趋势图,图像等)的功能来确定一个或更多过程故障的起因。此外,在一些情况中,分析处理器114在过程运行时生成这些图形,并且当OMS 102接收附加的过程控制信息时,分析处理器114不断地更新和/或重新计算关联于每个图形的多变量统计。

[0045] 为了执行用于批次过程的这些功能,OMS 102为一些不同批次运行的每个收集一些不同过程变量的批次过程数据。这种数据可以收集自控制器108或控制网络110中的现场设备,收集自可能已经收集并存储不同过程批次运行的过程数据的数据历史库(例如图1的历史库12),或者收集自任意其他的数据源。OMS 102然后处理这种数据以生成一个或更多统计批次模型,并将该统计批次模型存储在例如存储器中,该存储器诸如OMS 102的计算机可读介质,或者存储在图1的工作站13的存储器52中的一个。统计批次模型然后可以按照需要被获取以分析将来的进行中或者在线的批次运行。特别地,OMS 102可以使用所存储的批次模型来分析或使得用户能够分析在特定批次运行的在线或进行中的运行期间所收集的数据。

[0046] 然而,为了在批次在线运行时分析批次运行的数据,OMS 102必须首先确定相对于批次模型该在线批次所在的确切状态或阶段。也就是,OMS 102必须确定批次模型的哪个点要与在线批次数据进行比较,以能够确定关于在线批次的其他因素,诸如是否有在线批次的参数异常或者超出相对于批次模型中那些相同参数的规格,在线批次的输出是否会满足所需的质量度量,等等。事实上,任何采用统计批次模型的在线数据的分析必须首先确定最适合在线数据的统计批次模型中的点。只有在在线数据与统计批次模型对齐之后,才可以实施进一步的分析,诸如向操作者提供屏幕以表示在线批次如何与批次模型进行比较,实施统计分析以确定批次是否正常运行或者运行在范围内,或者批次是否运行异常和/或批次的输出是否预测为满足所需的质量度量,诸如所需的粘度、浓度、等等。

[0047] 作为一个示例,一旦当前在线批次的数据被对齐到批次模型的特定,OMS 102的分析处理器114可以向用户提供一组不同的图形或其它显示以使得用户能够确定在线批次运行的当前运行状态或可行性。以下讨论一些这类图形或显示,可以理解,其他显示、分析或信息也可以或可选地被提供给用户,诸如操作者、维护人员、等。

[0048] 作为一个示例,分析处理器114可以通过计算过程变量和/或质量变量相对于总体质量变量或者引起故障的质量变量的贡献来生成贡献图。过程和/或质量变量的贡献可以被显示为被解释的和/或未被解释的每一变量的偏差作为关联于总体质量的偏差和/或关联于故障的质量变量的贡献。

[0049] 此外,分析处理器114可以为任意被选定的过程和/或质量变量生成变量趋势图,该变量可能具有大于预定阈值的偏差。变量趋势图可以显示关联于过程的一段时间上的变量的值与之前过程中类似时间的变量值,例如模型变量值,的关系。通过生成贡献图和/或变量趋势图,分析处理器114还可以确定可行的过程的修正以解决批次过程中所检测到的故障。通过在用于创建具有关联偏差(例如标准偏差)的批次模型的批次数据历史图上重叠对齐于相同时间标度的当前值,变量趋势图可以帮助操作者确定过程故障的起因。

[0050] 分析处理器114还可以生成质量预测图以确定修正,如果实施的话,对于过程总体质量的作用。如果修正将总体质量维持或提高到特定阈值内,分析处理器114可以指示OMS 102实现修正。可选地,分析处理器114可以向控制器108发送指令以实现过程修正。

[0051] 进一步地,当确定关联于总体质量变量和/或任意其他质量变量的故障时,示例性分析处理器114可以生成迷你图。迷你图可以包括在指定时间的(例如,关联于过程故障的时间)过程和/或质量变量与由批次模型所预测的每个变量的平均值和/或标准偏差的关系。此外,迷你图可以包括指出关联于有关模型的每个过程和/或质量变量的在先值的火花线。从迷你图上,示例性分析处理器114可以使得操作者能够决定和/或选择一个或更多对过程的修正操作和/或确定修正是否将改进过程以使得总体质量变量被预测在指定限度内。

[0052] OMS 102通过在线数据处理器116管理过程控制数据的访问和控制,该过程控制数据包括过程偏移图,贡献图,变量趋势图,质量预测图,和/或迷你图。此外,在线数据处理器116向过程控制操作者提供访问权限以查看过程控制数据,变化和/或修改过程控制数据,和/或生成用于过程控制系统106中现场设备的指令。

[0053] 为了提供在线分析的访问,图2的工厂104被表示为包括通过局域网124(LAN)通信地耦接到在线数据处理器116的路由120和本地工作站122。此外,路由120可以将工厂104中任意其他的工作站(未示出)通信地耦接到LAN 124和/或在线数据处理器116。路由120,其可以无线地和/或通过有线连接通信地耦接到其他工作站,可以包括任意类型的无线和/或有线路由,该路由作为连接到LAN 124和/或在线数据处理器116的访问集线器。

[0054] LAN 124可以采用任意所需的通信媒介与协议实现。例如,LAN 124可以基于硬线或无线以太网通信方案。然而,也可以使用任意其他适合的通信媒介和协议。此外,尽管示出了单独的LAN,一个以上的LAN和工作站122中适合的通信硬件也可以被用来在工作站122与对应的类似工作站(未示出)之间提供足够的通信路径。

[0055] LAN 124还被示为通信地耦接到防火墙128,该防火墙128根据一个或更多的规则来确定来自远程工作站130和/或132的通信是否被允许接入工厂104。远程工作站130和132

可以向未处于工厂104内的操作者提供访问工厂104中资源的权限。远程工作站130和132通过广域网(WAN)134通信地耦接到防火墙128。

[0056] 工作站122,130和/或132可以被配置为基于由OMS 102执行的在线分析来观察,修改,和/或修正过程控制系统106中一个或更多的过程,或者这些工作站可以直接执行在此所述的在线过程分析应用程序及方法。例如工作站122,130和/或132可以包括用户界面136,其编排和/或显示由OMS 102生成的过程控制信息。在另一示例中,用户界面136可以从OMS 102接收所生成的图形和/或图表,或者可选地,用于生成过程控制图形和/或图表的数据。在将图形和/或图表接收到各个工作站122,130和/或132之后,用户界面136可以生成相对较易为操作者所理解的图形和/或图表138的显示。图2的示例性的配置示出了具有用户界面136的工作站132。然而,工作站122和/或130可以包括用户界面136。

[0057] 此外,用户界面136可以提醒过程控制操作者注意由在此所述的在线分析所确定的过程控制系统106和/或工厂104中任意其他的过程控制系统中任意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者来分析过程,从而确定过程故障的源头并且预测过程故障对直接产品质量的影响。用户界面136可以在过程进行时向操作者提供过程控制统计信息,由此使得操作者能够对过程进行调整以修正任意的故障。通过修正过程中的故障,操作者可以保持直接产品的质量。

[0058] 此外,通过示例性的OMS 102,用户界面136可以显示检测、分析、修正操作、以及质量预测信息。例如,用户界面136可以显示过程概览图表、过程变化图、迷你图、贡献图、可变趋势图、和/或质量预测图(例如,图形138)。在观察这些图形138之后,操作者可以选择附加的图形138来观察多变量和/或统计过程信息以确定过程故障的起因。此外,用户界面136可以显示可行的修正过程故障的操作。用户界面136可以之后允许操作者选择一个或更多的修正操作。在选定修正之后,用户界面136可以将修正发送到OMS 102,然后,OMS 102再向控制器108发送指令,以在过程控制系统106中做出适合的修正。

[0059] 图1的工作站122,130和/或132可以包括任意的计算设备,包括个人电脑,笔记本电脑,服务器,控制器,个人数字助理(PDA),微型计算机,等等。工作站122,130和/或132可以采用任意适合的计算机系统或处理系统来实现。例如,工作站122,130和/或132可以采用单个处理器的个人电脑,单个或多个处理器的工作站等来实现。

[0060] 图1的过程控制环境10以及图2的过程控制环境100被提供来表示系统的类型,下文中更具体描述的示例性的方法及装置可以被有利地在其中使用。然而,如果需要的话,在此所述的示例性的方法及装置可以使用在复杂度高于或低于图1和2中所示的示例性的过程控制环境10及100和/或过程控制系统106的其他系统中,和/或在有关过程控制作业,企业管理作业,通信作业等中使用的系统中。

[0061] 目前,许多过程控制系统提供过程控制信息的分解和/或统计分析。然而,这些系统通常采用离线工具来确定可能影响直接产品的质量的过程控制故障的起因以及可能的修正操作。这些离线工具可以包括过程调查,实验室调查,事务调查,查找故障,过程改进分析,和/或6-西格玛(6-sigma)分析。虽然这些工具可以修正用于后续产品的过程,但是这些工具不能纠正和/或修正故障发生时的过程质量。因此,这些离线工具对于过程控制环境是没有作用的,在直到过程被修正前,其可能导致生产出具有质量问题的产品。

[0062] 另一方面,在此所述的示例性的在线批次过程控制系统分析可以被用于过程控制

系统中以提供过程中的故障检测、分析、和/或修正信息,使得操作者能够在过程进行或持续时修正过程故障。换言之,过程修正可以响应于所预测的故障,在故障发生时或者基本上故障发生之后立即执行。虽然在此所述的示例性的方法及装置可以被用于预测和/或修正过程故障以改进批次和/或连续过程的过程质量,但是将以批次过程来具体地描述这些示例性的方法及装置。附加地或可选地,该示例性的方法及装置可以被用于通过预测产品质量和修正对应的过程故障和/或通过修正所检测的过程故障来修正产品质量。

[0063] 图3示出了可以由OMS 102 (其可以运行图1的例程50) 实现的方法的示例性流程图150,该方法用于为批次过程开发统计批次模型并且然后使用该统计批次模型来分析来自在线批次过程运行的数据。在块152,OMS 102为特定批次收集批次数据。这种批次数据可以包括用于特定过程批次运行的一些不同过程变量的测量的、计算的或估计的过程变量值,例如包括,诸如原材料构成的输入变量,诸如温度、流速、液位或其他过程变量测量的进行中过程变量测量,估计过程变量,诸如湿度、环境温度等的环境数据,包括在一个或更多实验室分析中离线测量或获得的任意数据的实验室数据,等等。这种数据可以在批次运行时在线收集,或者可以从之前批次运行的数据历史库(诸如图1的历史库12)中收集或获得。如果需要的话,用户或操作者可以选择特定的批次运行来在建模过程中使用,该特定批次运行的数据存储在数据历史库中。在块154中,在其数据已在块152收集的批次运行完成之后,和/或在该批次的不同阶段、运行或时期结束时,OMS 102收集用于该批次运行的质量测量或质量数据。质量数据可以包括该批次输出或者该批次的阶段、运行或时期之一的输出的质量的测量或指示,包括,例如材料粘度,特定化学制品或元素的浓度,pH值,材料构成或比例,和/或任意其他表示批次运行成功地生产可接受或所要求输出的质量数据。当然,要收集的特定质量数据可能取决于所制造的产品类型,并且这种质量数据可以在线测量,可以通过实验室分析确定,可以通过视觉观察(并且由用户输入)确定,可以根据其他参数计算,或者可以以任意其他已知方式来确定。此外,这种质量数据可以从批次历史库中获得,如果这种数据存储在其中,或者通过在线过程或离线实验室分析获得。

[0064] 图4表示用于示例性批次运行(例如批次#1)的数据结构200,包括测量过程变量202以及计算或者其他方法测量或确定的质量变量204,其可以包括一个或更多在批次结束时通过测量或观察所获得的总体质量变量。正如已知的,批次处理是一种产品制造,其中相对大量的产品和/或产品的部分是在一个或更多个由控制例程控制的位置并行生产的。此外,批次过程通常包括一个或更多过程阶段,每个阶段包括一个或更多运行并且每个运行包括一个或更多时期。就其本身而言,示例性测量过程变量202可以包括来自于单个时期、运行或阶段的过程变量(又被称为过程参数)或延续批次运行多个时期、运行或阶段的过程变量。经由示例,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对应于温度、压力、另外的流速,等等。变量204可以对应于质量变量,例如浓度等。虽然图4的批次过程被表示为包括8个测量过程变量202以及两个质量变量204,在其他示例中,批次运行可以包括较少或较多的过程变量以及较少或较多的质量变量。此外,批次过程数据是在沿Z轴所示(在图4中标为“时间”)的时间段中收集的。

[0065] 图4的数据图200表示出一些过程变量202仅与批次过程中的特定时间有关。例如,过程变量P1与批次的开始到批次(或者数据被收集的批次的阶段,运行或时期)的中间点有关。因此,如果变量P1关联于流体流速,该流体可能仅从批次开始到批次中间点在批次中流

动。在这之后,该批次可能不使用流体流量并且因此,变量P1与那时的批次过程不相关。相反,图4的变量P4与整个批次过程有关。

[0066] 示例性质量变量204可以关联于整个批次过程或者可以关联于批次过程的特定时期或阶段。质量变量204可以是测量的过程变量202和/或其他质量变量204之间的多变量的、统计的、和/或代数关系的结果,可以以任意已知方式测量或确定,或者可以由用户输入。例如,质量变量Q1可以对应于批次过程产生的产品的构成质量。构成质量Q1是一种质量变量,虽然其可能不能够直接地在过程控制系统106中测量。作为替代地,构成质量Q1可以根据测量的变量202的多变量结合建模和/或确定,或者可以由实验室分析确定。

[0067] 仍参考图3,在块156中,OMS 102接下来确定是否已为过程的足够批次运行收集批次数据,以为该批次创建适合的统计模型。如果没有,块156返回控制到块152以为批次过程的另外运行收集进一步的过程变量数据。当然,如果需要的话,用户可以预选择一个或更多批次运行来在创建批次模型中使用或者可以阻止特定批次运行(其不处于可接受性能的范围或者其具有可能使得其不能被创建批次模型使用所接受的其他问题)被用于创建统计批次模型。无论如何,当块156确定已经收集了用于足够批次运行的数据,块158对齐来自存储的批次模型的批次数据。

[0068] 为了说明这点,图5表示了关联于一组示例性批次运行的数据结构300,其可以在图3的块152-156中获得并被在块158开始时存储在存储器中。正如所示,数据结构300包括若干批次运行中的每个的过程变量302以及分别的质量变量304。批次运行(例如批次1-N)示出这种特定批次过程包括顺序执行的4个阶段(例如阶段1-4)。例如,阶段1可以对应于在一个批次中化学制品的结合与混合,而阶段2可以对应于在一个批次中那些混合的化学制品的烘干。这些阶段还可以被再划分为运行,时期,和/或级别。此外,质量变量304可以对应于每一批次阶段、时期、运行或级别的测量过程变量302,和/或可以对应于批次的结束。

[0069] 图5的示例性数据图示出每个独立批次可以在持续时间上不同,而且在批次之间批次每一阶段的开始和结束时间也不同。例如,相比于批次1,批次2在较短的时间内完成,但相比于批次1,批次3和4在较长的时间内完成。此外,相比于批次2,批次1要求较长的时间来完成阶段1。

[0070] 仍参考图3,块158对齐图5的批次数据以使得能够创建批次模型。在一些情况中,通过按照与对应阶段的时间长度成比例来压缩每个变量(未示出)的相关持续时间,这种数据可以被对齐。因此,可以采用在每个批次中所测量的过程变量302来解决完成批次和/或阶段的变化时间。在另外的示例中,上述所熟知的DTW方法可以被用于将批次数据与固定的或标准化的时间帧对齐,该时间帧可以是,例如,所有批次的中位时间帧,所有批次的平均时间帧,或者诸如关联于控制批次或选定批次的时间帧的某种其他时间帧。被对齐后,批次数据将表现为如图6的数据结构350所示,在其中每个批次的时间帧被标准化为精确地相同并且所有阶段相互对齐,通过在时间上被扩展或缩减,每个批次中的实际数据点被在时间上偏移,从而与将要在批次模型中使用的标准化时间帧相匹配。当然,每一阶段(时期或运行)中的时间可以根据那些阶段(时期或运行)的时间相对于该特定阶段(时期或运行)的标准化时间来被不同地偏移,以使得所有阶段分别地被对齐。无论如何,任意已知的方法,诸如DTW方法,都可以被用于时间对齐来自不同批次运行的批次数据,在处理该批次数据或开发统计模型之前。

[0071] 可以理解,由于用于创建图6数据结构的不同批次运行中时间帧的扩展与压缩,每个批次运行或多或少的数据点会被提供或关联标准化数据的每个不同的阶段。如果需要的话,这种数据可以被转换为固定数量或一组固定的标准化数据点(例如,使用线性或非线性内插),以使得被用于创建批次模型的每个批次具有相同数量的数据点,或者以使得批次模型的标准化时间帧中的每个相同时间具有数据点。当然,正如之前所述,通过采用直线内插或诸如非线性内插的任意其他所需的内插,数据中的点的值可以在多个点之间内插获得。此外,可以理解,不同批次运行所收集的每个数据点可以是统计数据点,例如一组连续收集的原始数据点的平均值、中位值等。因此,例如,一个批次运行的单个数据点可以被创建作为10个、100个等原始数据点的统计结合,以减少存储在存储器中的点的数量并减少关联于模型处理的处理时间。当然,用于创建批次运行中任意特定统计数据点的原始数据点的数量可以建立在相较于批次中总体时间长度的原始数据的测量频率等的基础上。

[0072] 一旦来自不同批次运行的批次数据被对齐后,如图6所示,块160(图3)根据所对齐的数据来创建统计批次模型,基于统计的观点,以确定批次过程的标准或期望运行,该批次过程由步骤152-156中收集自不同批次运行的数据所确定。一种创建统计批次模型的方法为批次运行中的每个过程变量创建一个或更多模型过程变量轨迹,其中每个这种模型过程变量轨迹确定或表示时间段上过程变量的期望或标准运行,在该时间段中过程变量与批次运行相关。这种时间段可以是,例如,批次的总体长度,一个或更多批次阶段、时期、运行、级别等。作为示例,每个模型过程变量轨迹可以限定过程变量的期望值为,例如,模型的标准化时间帧中每个时间位置上的过程变量平均值或中位值(由所收集的批次数据计算的)。此外,如果需要的话,每个模型过程变量轨迹可以包括一个或更多标准偏差,该标准偏差关联于在任意特定时间所收集的批次数据,以表明在该特定时间该变量的批次数据的典型偏差。一个示例性模型过程变量轨迹360如图7所示。模型过程变量轨迹360包括标准化批次时间上过程变量的中间值或平均值(如实线362所示),以及标准化批次时间上批次数据的第一标准上偏差与标准下偏差(如虚线364所示)。当然,线362与364可以由模型总体标准化时间段上所收集的不同批次运行的批次数据统计地确定。当然,可以为批次过程中的每个测量的或计算的过程变量在任意在其中那些过程变量涉及建模或比较目的的时间段上,创建类似图7轨迹的模型过程变量轨迹。此外,虽然线362表示每个时间点上批次变量的平均值,而线364表示每个时间点上批次变量的第一标准偏差,还可以采用其他过程变量值的统计手段来创建模型过程变量轨迹,例如包括中间值、第二标准偏差或则其他偏差确定值,等等。

[0073] 仍参考图3,块160还可以或可选地开发诸如PCA(主成分分析)模型或PLS(潜结构投影)模型的其他统计模型。正如已知的,PCA建模技术为批次数据开发一组主成分,其之后可以被用于分析其他批次数据,诸如来自在线批次的数据。更进一步地,PLS建模技术实施PLS(潜结构投影)计算将为批次运行所收集或确定的过程变量数据关联于质量变量,该质量变量是为模型中所使用的批次运行所测量、计算或用其他方式确定的。PLS模型然后可以被用于根据所测量的批次中变量的统计值来预测将来批次的质量变量。PCA与PLS建模技术是所熟知的,因此不在此赘述。当然,如果需要的话,可以根据图6的对齐的批次数据来建立其他类型的统计批次模型。在任意时间中,在一个或更多统计批次模型被建立之后,块162将这些模型存储在计算机可读存储器中,诸如图1的存储器52中,以备之后使用。

[0074] 现在参考图8,流程图400示出了根据图3的方法中创建的批次模型来为新的或者进行中批次过程运行进行批次数据在线分析的示例性方法。通常而言,在线过程监控的目标是检测批次运行中任意的异常运行,并且确定异常的来源,从而能够补偿或修正故障或其他批次问题,或者使得能够在尽可能短的时间内确定不能产生可接受最终产品的批次。在之后的情况中,操作者然后可以能够停止批次运行并且重新开始,以保存否则将要被用来实现完成该批次运行的原材料(在该批次中还未使用)与能量,并且将设备腾出给其他将形成可接受最终产品的批次运行使用。

[0075] 在块402中,例如OMS 102,自动地为将要在分析中使用的一组过程变量中的每个收集、过滤并预处理来自于进行中的或在线批次的批次过程测量数据、实验室分析数据以及人工输入数据的统计扫描。而且,与批次模型一样,从在线批次接收或收集的多个原始数据的值可以被统计地结合以创建单独测量的在线批次数据点,在此有时被称为统计扫描(因而其可以是原始数据扫描或者一组原始数据扫描的平均或者其他统计结合)。在块404,通过使用接下来将详述的技术,查找最符合所收集的在线扫描数据的模型统计扫描,OMS 102将当前批次数据点(其可以是数据的统计扫描)与之前为该批次创建的批次模型对齐。一旦当前或在线批次数据与批次模型对齐,OMS 102可以对在线批次数据实施任意所需的分析,如同块406所示。

[0076] 例如,在块406A,OMS 102可以对当前在线批次数据与批次过程变量模型轨迹进行比较,并提供任意上述的屏幕或用户显示。此外,在块406B,在线批次过程的运行可以采用PCA分析来监控或分析以确定在相同的统计扫描中当前批次过程与批次模型比较得如何,从而检测故障。在一个示例中,在线批次数据,在对齐到批次模型后,可以被投影到主成分空间,并且可以测试 T^2 与Q统计的控制上限(UCL)。最终,可以确定过程变量相对于总体方差的贡献。计算 T^2 与Q统计是熟知的,因此在此不再赘述。更进一步地,在块406C,OMS 102可以采用例如基于为该批次过程开发的PLS批次模型的PLS技术来实施批次质量预测。

[0077] 此外,在块410,OMS 102使用块406的分析来检测一个或更多有关于批次的误差,并且在块412可以提醒用户由这些分析所检测的潜在故障或问题。更进一步地,如果需要的话,OMS 102可以向用户提供当前批次最终产品的质量度量的预测,提供关于如何改变在线批次的将来阶段、时期或运行的控制的建议,以修正或者补偿在批次中已发生的可能导致劣质最终产品的故障或问题,或者可以实施关于分析数据的任意其他操作。如图8中的虚线所示,OMS102持续收集在线批次数据,甚至在实施在线数据对齐与基于模型的分析以及向用户提供显示时也持续收集。因此,虽然流程图400的方法不需要在每个数据收集扫描之后实施块406、408或410中的分析和/或显示步骤,但在需要时可以这样做。

[0078] 由于用于模型开发的历史数据对齐对例如在块406与408开发的 T^2 和Q统计具有重要影响,由块404实施的对齐对于正确的分析至关重要。在一个示例中,在线DTW过程可以应用在块404中,以将在线数据匹配于为图3的块160中的批次模型所开发的批次过程模型轨迹中的最相似点。特别地,在在线运行期间采用下述方法将批次进展数据(即在线批次数据)与批次模型对齐减少了过程的非线性与动态特性。本质上,这种将在线数据与批次模型对齐的方法依赖于这样的假设,对于一组称为统计扫描的预定时间间隔,每个批次或阶段模型都具有一组特定的模型参数。每次这种扫描可以包括预定数量的原始或统计数据点,并且批次或阶段模型中的每次扫描可以包括相同数量的统计或原始数据点。图9示出了模

型过程变量 X_m (从由图3的块160所开发的批次模型选取)的示例性模型过程变量轨迹502,该轨迹被划分为多个相等(在时间上)的统计扫描。如图9中的虚线所示,扫描位置可以在时间帧上扩展,该时间帧中具有在其中的或者与其关联的多个数据点。优选地,所有相关批次过程变量模型轨迹被划分为相同的扫描周期。

[0079] 一旦模型过程变量轨迹被划分为统计扫描周期或位置,对齐技术尝试根据所有批次过程变量的当前值选择最符合当前批次状态的单个扫描位置。这种在线数据与模型轨迹数据之间的对齐不同于通常使用在批次分析中的离线数据对齐技术,因为在数据被对齐时在线数据是不完整的。因此,批次未完成运行,并且因而在该种对齐技术中在线批次的总体时间未知。因此,虽然离线DTW技术通常根据批次的总体长度或批次的一部分(例如阶段,运行或时期)来在时间上匹配批次数据或者标准化批次数据,在线对齐技术并不知道批次的总体时间或者批次的相关部分,并且不能以该种方式标准化这种数据。

[0080] 为了以计算上简单的方式实现可以被用于提供在线或实时分析的在线对齐,已开发了针对典型DTW在线运行的修改,并且通常按下述操作。根本上说,这种技术的目标在于确定在线批次最可能或最适合的位置,通过对在线批次运行的最近收集的数据点(其可以是统计数据点)与批次模型中的模型过程变量轨迹进行比较来确定批次模型中的哪个扫描或扫描位置表现为在线批次最有可能的在线批次的当前位置。通常地,这种技术使用每个新的在线数据点(其通常是过程变量值的阵列,每个变量值可能是统计数据值)来为批次模型中若干扫描位置中的每个确定总体距离。该计算距离然后被用于确定哪个模型扫描位置是在线过程当前对齐的最可能的扫描位置。

[0081] 更具体地,一个扫描周期的总体距离是由过程变量距离的结合计算的,该过程变量距离是为每个考虑在模型中的过程变量所确定的。每个过程变量距离被确定为当被设置在批次模型中最后确定的(即最近确定的)扫描位置上时过程变量的当前值,与该过程变量处于过程模型中一个扫描位置上的模型轨迹的值之间的误差或差额。通常地,为其计算过程变量距离的扫描位置包括当前扫描位置(即根据为在线批次运行最后收集的数据点所确定的关联于在线批次运行的扫描位置)以及紧接着当前扫描位置的一组连续扫描位置,直到预测扫描范围。正如之前所注明的,过程变量距离是为所考虑的每个扫描位置,为包括在批次模型中的所有相关过程变量所计算的。为不同过程变量计算的过程变量距离之后按照一个扫描接着一个扫描地结合,从而为每个被考虑的扫描位置创建结合的距离,并且具有最小的这种结合或总体距离的扫描位置被确定为在线批次运行的最可能扫描位置。

[0082] 在一个示例中,为每个过程变量距离确定欧氏距离,这种欧氏距离是过程变量的在线批次轨迹与该过程变量的模型过程变量轨迹之间距离的一种测量。更具体地,这种欧氏距离从被设置在在线批次运行的最后确定的扫描位置的当前在线批次变量值扩展到预设数量(h)的将来扫描位置中的一个。为特定扫描位置的每个过程变量计算的过程变量距离然后被平方并加和,以为每个扫描位置生成过程变量距离的平方和。之后,具有与其关联的最小过程变量距离平方和的扫描位置被选为在线过程最可能关联的或者在线过程当前对齐的扫描位置。

[0083] 这种技术可以采用图10图形地表示,其示出了过程变量X的图9的模型过程变量轨迹502(例如,批次模型的中间过程变量轨迹),又被标为 X_m 。图10还示出了为测量的或在线过程变量X的确定轨迹504,其当然对应于批次模型的过程变量 X_m 。特别地,线504表示采用

在此所述的技术在以往确定的测量或在线过程变量X的轨迹。在这种情况下,标记为k的扫描位置(虚线)是在接收到来自在线批次运行的最后一组测量的过程变量之后,最近确定为在线批次的最适合或最可能位置的扫描位置,而扫描k+1是紧接着第k次扫描的扫描位置,依此类推。

[0084] 为了确定来自在线批次运行的批次过程变量的一组新的或最近测量值的位置,该技术根据批次模型中当前相关的所有测量的过程变量的最近测量或确定的批次变量值来确定表现为最可能批次位置的模型扫描位置(k,k+1,k+2,等)。这组最近的在线批次测量值在此被称作“当前”批次数据点。通常而言,参考图10的图形,该技术确定表示在最近确定为在线批次运行位置的扫描位置上从过程变量X的当前过程变量值到过程模型轨迹 X_m 的值之间距离的值。参考图10的放大部分,点510是当被设置在最近确定扫描位置k时测量过程变量X的当前值。点512是紧挨在当前值之前的在线过程变量X的值,而该当前值是扫描位置k之前被确定为在线批次的最可能位置处的值。这里要注意,在线批次轨迹被连接到点512,因为关联于过程变量X当前值的扫描位置尚未确定。此外,如点510及512之间的差额所示,变量X的当前过程数据的值与该变量之前值具有不同的大小。

[0085] 无论如何,一组欧氏距离 $d_0, d_1, d_2 \dots d_h$ 从点510(当前数据点)至在扫描位置k,k+1,k+2,...k+h上模型过程变量轨迹上的点计算。这些距离表示当被设置在扫描位置k(在线过程的最近确定位置)时过程变量X的当前在线过程变量值与当前扫描位置以及一组预设数量的将来扫描位置(预测范围)中的每一位置上的过程变量模型轨迹 X_m 之间的差额或误差。在这种情况下,所计算的距离是图10的图形上的欧氏距离。虽然图10仅示出了单个过程变量X相对于对应的过程模型变量轨迹 X_m 的这些距离计算,但是还可以为在模型中使用的或者与批次过程中特定点(例如阶段,运行,时期等)相关的过程变量中的每个确定类似的计算。

[0086] 接着,该技术一个扫描接着一个扫描地计算为每个过程变量所确定的距离的平方和。也就是,每个过程变量对应的距离 d_0 (关联于当前扫描位置)被平方并且之后将这些距离的平方加到一起以生成关联于扫描位置k的第一加和。类似地,每个过程变量对应的距离 d_1 (关联于第k+1扫描位置)被平方并且之后将这些距离的平方加到一起以生成关联于扫描位置k+1的第二加和。对被考虑的扫描位置(k+3...k+h)中的每个都重复这种加和处理。当然,在所有情况下,距离 d_0, d_1 等被平方以获得正值,因为这些距离表示每一扫描位置上批次运行的过程变量的当前测量值与这些过程变量的模型轨迹值之间的误差。以类似的方式,可以确定距离 d_0, d_1 等的绝对值来代替距离 d_0, d_1 等的平方。无论如何,距离的最小加和(其平方或其绝对值)定义了最可能是当前在线批次位置的扫描位置(k,k+1,k+2,...k+h)。因此,距离的最小加和被用来选择模型扫描位置,在该模型扫描位置在线过程被确定为有关于模型。

[0087] 应该理解,这种技术可以在任意特定时间确定当前扫描位置(k)关联于最短平方和的过程变量距离计算,并且因此,自最后一组测量或在线变量起在线批次并未移动或发展。另一方面,这种技术可以确定在线批次运行的位置的最佳估计是在时间上向前的下一个扫描位置(k+1)或者在时间上向前的一个以上的扫描位置(例如,扫描位置k+2,扫描位置k+3等)的。因此,这种技术实际上可以确定自最后对齐确定起在线批次的最佳当前估计已移动或跳过了多个扫描位置。然而,这种在线批次对齐方法不能在任何点返回扫描位置(例

如,扫描位置 $k-1, k-2$ 等),因为这将导致建模和预测非线性。也就是说,一旦对齐技术确定相对于批次模型在线批次已达到特定扫描位置,该技术不允许随后或将来的估计在时间上返回(到之前的模型扫描位置)。然而,这种技术可以保留任意需要时间的当前模型扫描位置 k 处的在线批次位置估计。在随后的情况中,该技术可以在将来的计算中忽略所有之前收集的在线数据点,该在线数据点是之前确定的关联于扫描位置 k 的,或者可以将当前数据点与之前收集的确定关联于相同扫描位置的数据点统计地结合。因此,在图10的示例中,如果该技术确定数据点510关联于扫描 k ,该技术可以丢弃数据点512(以使得在线批次轨迹将连接到点510而非点512)或者可以将数据点510与数据点512统计地结合以生成在扫描位置 k 处在线批次变量 X 的新测量值。

[0088] 无论如何,上述的距离计算可以被表示为一组距离平方的加和,并且在一个示例中,可以以矩阵形式表示为:

$$[0089] \quad e(k, j) = [M(k) - X(j)]^T W [M(k) - X(j)] \quad k=k, k+1, k+2 \dots k+h \quad (1)$$

[0090] 其中:

[0091] $e(k, j)$ -表示在采样测量时间 j (设置在当前扫描位置 $k=k$)的一组在线变量过程测量与在扫描位置 k (其中 $k=k, k+1, \dots k+h$)的那些变量的模型轨迹值之间的距离平方和的标量;

[0092] $M(k)$ -在扫描位置 k (其中 $k=k, k+1, \dots k+h$)处的批次模型轨迹变量值的矩阵(每个过程变量对应一个);

[0093] $X(j)$ -在采样测量时间 j (设置在当前扫描位置 $k=k$)处在线变量值的矩阵;

[0094] j -当前或最近批次扫描时间;

[0095] k -模型轨迹上的扫描位置, $k=k$ 是在线批次对齐到的最近确定扫描位置;

[0096] h -模型对齐区域;以及

[0097] W -参数权重矩阵(对角矩阵),定义在例如模型开发中,其确定在距离计算中每个变量 X 的相对重要程度。

[0098] 这里, W 矩阵是权重参数的对角矩阵,其可以被用于给为一些过程变量中的一些确定的欧氏距离与其这些过程变量的其他一些相比的更大或者更小的权重,从而能够修改距离计算以偏重(或者更重地依赖于)于已知的更关联于或者更好地指示在线批次相对于批次模型的当前位置的过程变量。当然,为了给所有的过程变量相等的权重, W 矩阵可以被设为单位矩阵。

[0099] 由等式(1)可以理解,距离 e (其是单独的过程变量距离的平方和)是为对在每个参考模型轨迹上最近确定的扫描位置 k 直到批次模型中接下来连续 h 个扫描位置或扫描(即 $k+1, k+2 \dots k+h$)的最近批次采样 j 计算的。

[0100] 作为上述距离计算的修改或替换,可能需要将在线轨迹与模型轨迹的导数(即斜率)考虑在在线数据与过程模型的匹配中。特别地,距离计算可以包括所考虑的每个扫描位置处过程变量的模型轨迹与当前确定过程变量轨迹的斜率之间的差额,尝试完全或部分地根据当前批次轨迹与模型轨迹的斜率的匹配来选择下一扫描位置。在这种情况下,与上述在等式(1)中确定的欧氏距离所使用的一样,为相同模型扫描位置计算每个在线轨迹与每个关联模型轨迹的导数。当前在线过程变量值的斜率被表示在图10中从扫描位置 $k-1$ 的在线批次轨迹到点510的所画的虚线上,而关联于模型轨迹上的一些扫描位置(扫描位置 $k+2$,

k+5,k+7等)的斜率也在图10中图形地示出。在一个示例中,这种导数距离计算可以被表示为:

$$[0101] \quad d(k, j) = [(M(k) - M(k-1)) - (X(j) - X(j-1))]^T W [(M(k) - M(k-1)) - (X(j) - X(j-1))]$$

(2)

[0102] 其中:

[0103] $M(k)$ -在扫描位置k处的批次模型轨迹变量值的矩阵(每个过程变量对应一个);

[0104] $M(k-1)$ -在扫描位置k-1处的批次模型轨迹变量值的矩阵(每个过程变量对应一个)

[0105] $X(j)$ -当被设置在当前扫描位置k=k时,在采样测量时间j处在线变量值的矩阵;

[0106] $X(j-1)$ -当被设置在当前扫描位置k=k-1时,在采样测量时间j-1处在线变量值的矩阵;

[0107] j-当前测量的批次样品时间;

[0108] k-在参考轨迹上最近对齐的扫描位置;

[0109] h-模型对齐区域;以及

[0110] W-参数权重对角矩阵,定义在例如模型开发中,其确定在计算中每个变量的相对重要程度。

[0111] 总体距离 $D(k, j)$ 于是可以由欧氏距离与导数距离的加权和定义为:

$$[0112] \quad D(k, j) = \alpha e(k, j) + \beta d(k, j) \quad 0 \leq \alpha, \beta \leq 1$$

[0113] 这里, α 和 β 是定义在总体距离计算中两个距离计算(欧氏和导数距离)相对重要性的权重因子。这些权重因子可以以任意所需的方式选择,诸如由操作者或用户采用模型拟合技术等方式。在一种情况中, α 加 β 可以等于1,其使得该计算归一化。此外,如果需要的话, α 或 β 可以设置为0。

[0114] 更进一步地,为了增加上述在线距离计算的稳定性与稳健性,一种可选的批次进展标准化时间变量可以被创建并且包括在变量参数组中。换言之,诸如上述讨论的一种现有对齐技术的指示变量对齐方法,可以通过将一个指示变量包括在过程变量组中来被使用,并且这个指示变量可以被加入作为欧氏距离和/或斜率差额确定中的一个变量。可选地,上述距离计算可以与指示技术计算结合(如果需要的话,采用适合的加权)来确定在线批次运行的最可能模型扫描位置,从而使得所确定的指示变量对齐连同在一些模型扫描位置的每个上的在线批次运行的过程变量值与那些过程变量的模型轨迹值之间的差值一起使用,以确定这些模型扫描位置中的哪个与在线批次过程运行中的哪个对齐。

[0115] 更进一步,为了进一步提高过程的稳定性并避免模型扫描进展过快(其可能发生在,例如,具有平坦过程变量轨迹的批次运行),可以在距离计算中加入惩罚以避免该确定过快或者过于迅速地进展完模型扫描位置。更具体地,可取的是使得距离计算包括,相较于停留在相同位置或者停留在相同的扫描位置,对向前移动一个扫描位置的惩罚。更进一步地,当向前移动超过一个扫描位置时,可以在数量或程度上增加这种惩罚。换言之,在单次移动中向前移动两个扫描位置的惩罚可以是向前移动一个扫描位置惩罚的2倍,或者可以是向前移动一个扫描位置惩罚的2倍左右,以便惩罚有利于在任意一个确定中移动最少数量的扫描位置的计算。这种惩罚计算使得距离计算倾向于这样的方式,该方式使得当不同扫描位置的计算否则会彼此类似或接近时,这在许多情况下可能发生,在线批次的新扫描

位置的确定较可能停留在相同的扫描位置上,或者向前移动较少数量的扫描位置。换言之,当关联于多个扫描位置的距离的平方和基本相同(或者甚至将来的扫描位置的距离否则要小于当前扫描位置的距离)时,具有惩罚变量是可取的,该惩罚变量将使得确定倾向于保持在相同扫描位置从而尽可能少地移动扫描位置。采用这种惩罚变量的原因正是在于,一旦做出选择模型中的特定扫描位置作为在线批次过程的当前位置的决定,批次模型就不可能在时间上返回。因此,这种惩罚评估提供了对齐方法的稳定性以确保在时间上向前移动(扫描位置)是合理的。

[0116] 一种表示惩罚沿扫描位置 k 快速进展方式的方式是将等式(3)的距离表达式修改为:

$$[0117] \quad D(k, j) = (1 + |\gamma(i + \delta)|) D(k, j) \quad 0 \leq \gamma; k = k + i; i = 0, 1, \dots, h; 0 \leq \delta < 1 \quad (4)$$

[0118] 其解是满足下述条件的指数 k

$$[0119] \quad \min_k \{D(k, j)\} \quad (5)$$

[0120] 这里,惩罚变量 $\gamma(i + \delta)$ 可以被确定为惩罚基部 γ ,其被修改为随着 i (惩罚被确定用于的将来扫描位置的数量)的增加而在数量上增加。附属惩罚变量 δ 可以是常量或者还可以随着 i 增加而变化。

[0121] 无论如何,上述的权重矩阵 W 使得具有与在线批次的位置更高关联的过程变量具有更高权重或者对距离计算具有更大影响,并且因而比其他过程变量对在线批次过程的当前位置的确定影响更大。这种方法还可以提供DTW方法与指示变量对齐技术的整合,并且可以在每个批次阶段结束时重新计算在线批次运行与模型扫描位置的对齐(被称为后计算),这对于质量预测根本上是可实施的。特别地,在此所述的方法可以根据在批次阶段结束时确定的测量批次质量变量重新计算每个批次阶段结束时若干模型扫描位置中的每个的在线批次过程运行的对齐。

[0122] 在此所述的DTW对齐算法还可以被用于具有变化的过程轨迹,状态或其他运行模式的持续过程。在这种情况下,对齐算法可以检测持续过程中的模式变化,该持续过程具有快速或逐渐变化的过程轨迹,状态或其他运行模式,以更好地确定在持续过程中的变化模式或过程状态。更具体地,该对齐技术可以被用于确定分离过程模式作为一组可能模式中的一个,过程可以按照该组可能模式运行,并且所检测的模式或状态变化可能导致使用不同的模式来分析当前条件下的过程。

[0123] 当然,可以对上述距离计算进行修改来计算不同的差额或者增加其他被考虑在距离计算中的因素,如果需要的话。此外,可以理解,这些计算可以在任意在线批次分析例程中实施,诸如图1的例程50,图2的OMS 102,等。

[0124] 根据测试,确定了关于在线批次轨迹的校准的一些问题,包括当上述在线对齐方法仅经过一个扫描就被关闭时批次中的转换点会引起显著的统计偏差这一事实。此外,对于还紧密聚集在训练集的所有批次的连续批次,其缓慢变化的数据信号可能产生非常小的模型扫描标准偏差,其反过来,可能贯穿噪声空间并引起误报警。更进一步,在单调变化数据的统计扫描的开始或结束时的在线数据值可能超过分析的西格玛边界并引起误报警。然而,为减少这些问题,可以对离线建模技术进行一些修改,这增加了模型的稳健性并且大大提高了上述在线DTW算法的有效性。

[0125] 特别地,一种具有模型校准可达到精度的在线采集可能落在模型扫描的开始或结束附近。可以理解,每个模型扫描可能是一些,例如100个,统计批次数据点的结合。因此,上述的在线DTW方法可以将采样与正确的模型扫描对齐,但是在信号在扫描周期单调变化的情况中,仍有可能发生统计偏差。特别地,虽然关联于正确的扫描,所测量的采样可能与模型扫描中较早的时间或者模型扫描中较晚的时间相关联,并且,由于所测量的信号在整个扫描周期单调变化,所测量的信号可能落在西格玛上限或下限(例如扫描模型的标准偏差)之外并因而可能引起报警。图11示出了这种观点。这里,单独的统计扫描周期600连同绘制在贯穿其中的持续单调数据信号602被示出。由于若干原始数据测量(或者甚至是统计数据测量,其中的每个都是若干原始数据测量的结合)将被在扫描周期600期间收集,存储在批次模型中的关联于扫描周期600的值是统计扫描周期600期间收集的各种数据点的平均值或中间值。这个值由线604所示。此外,由于信号602是单调的,其将具有用于误差检测目的的相对小的西格玛上下限(例如方差),这些值由线606A与606B所示。现在所测量的数据点610可能是实际上与扫描周期600的开始对齐并且可能事实上与线602完全匹配。然而,上述的对齐方法虽然将点610于正确的扫描周期600对齐,仍将导致数据点610落在为扫描周期600计算的西格玛下限608B之下的确定,导致误差的检测。随后落入扫描周期600中的点612也发生类似的事件,其落在西格玛上限606A之上。

[0126] 一种可以用于帮助修正这种问题的方法包括批次模型的离线预处理,在此被称为模型扫描混合。这种方法通常使得相邻扫描在时间上重叠,并且在当前扫描的中间值与标准偏差的计算中使用当前扫描之前或之后扫描的过程变量的值。这种相邻扫描间扫描数据的重叠增加了批次模型的稳健性。图12示出了这种模型扫描混合方法,并且示出扫描600与扫描620(扫描600之前的扫描)以及扫描622(扫描600之后的扫描)重叠。这种扫描的重叠减少了误报警。这里,应该理解,扫描600的值是扫描600、620与622收集的所有数据值的中间值,并且西格玛上下限626A与626B是根据扫描600、620以及622收集的所有数据值所确定的,结果是模型扫描混合。重要的是,这种模型扫描混合引起所测量的数据点610与612落入图12的西格玛限626A与626B内,即使这些点关联于扫描600的开始或结束。由于用更稳健的模型扫描内容较好地处理了转换点,这种技术提高了在线算法校准批次模型的能力。增加的扫描长度有利于处理跨越训练集批次的紧密聚集的信号,并且模型扫描混合的使用减少了由模型扫描的结束或开始的单调信号偏移所引起的误报警。此外,直接在线DTW算法与模型离线预处理的结合是令人称赞的技术,其导致了在线批次轨迹与统计模型的轨迹更稳健的跟踪。

[0127] 使用第一性原理哺乳动物细胞模拟生物反应器与运行中的化学工厂实施了在此公开的方法的模拟测试。在每种例子中,从历史批次收集数据并且生成统计模型。通过后处理,对单调的质量变量进行了偏最小二乘预测,通常根据实验室分析确定。这些结果与从非DTW在线分析过程(即一种现有技术方法),一种大体上如前述的在线DTW分析方法,以及这种在批次完成后提供的具有后计算的在线DTW分析中所获得的那些结果进行了比较。当批次增加或阶段完成后这种后计算显示了在线预测的修正。在许多情况下,实验室结果在批次结束的几个小时或几天之后是未知的,因此在批次结束时的批次质量的修正预测具有额外的价值。

[0128] 图13-15示出了采用现有技术方法(图13),上述DTW方法(图14)以及上述具有后计

算(图15)DTW方法的相同的批次运行。这里,该批次实际的实验室分析形成的值为18.7。在没有DTW(现有技术的对齐方法)的情况下,预测显著偏离了这个估计,如图13所示。这里,每个过程扫描仅在时间上被校准,并且如果在线批次运行超过模型,然后将重复最近的模型扫描。如图14所示,上述DTW方法显示了质量变量的预测输出的显著提高。具有后计算的DTW方法对在批次进展增加结束时的预测进行了调整,并且后计算根据完整的DTW算法和已知的结束点实施了预测的重构。重复的校准考虑到了将来将要对预测进行的修正,并且当批次长度不同于模型长度时该修正是最被注意的。例如,图14和15中的预测计算与在扫描33, 52, 73以及结束处所作修正的预期相同。该结果是最接近于真实值18.7的预测。

[0129] 无论如何,在线模型与在线批次运行对齐的DTW算法简便地最小化总体轨迹距离与轨迹距离的总体导数,而且由于在计算上简便,因而其是一种有效且适合的在线实现技术。此外,将标准化批次或阶段时间添加到参数集提高了算法的稳定性与稳健性。已经在模拟的以及来自于生物反应器与化学反应器的真实的数据上测试了该算法的有效性,并且测试确定了模型对齐不仅提高了PCA以及PLS性能,还使其成为用于合适的批次过程监控与质量预测的基本功能。

[0130] 正如之前所注明的,上述示例性方法和/或装置的至少一些由在计算机处理器上运行的一个或多个软件和/或固件程序实现。然而,包括但不限于专用集成电路、可编程逻辑阵列和其它硬件设备的专用硬件实现能够同样被构建为整体地或部分地实现这里所述的示例性方法和/或装置的一些或全部。此外,包括但不限于分布式处理或部件/对象分布式处理、并行处理或虚拟机处理的替代的软件实现也能够被构建为实现这里所述的示例性方法和/或系统。

[0131] 还需要说明的是,这里所述的示例性软件和/或固件实现存储在有形存储介质上,例如:磁性介质(例如,磁盘或磁带);磁光或光学介质例如光盘;或固态介质,例如存储卡或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它可重写(易失性)存储器的其它封装。因此,这里所述的示例性软件和/或固件能够存储在有形存储介质例如上面或后继描述的存储介质上。某种程度上上面的说明书引用特定的标准和协议来描述示例性部件和功能,应理解,本专利的范围不限于这样的标准和协议。例如,用于互联网和其它分组交换网络传输(例如,传输控制协议(TCP)/互联网协议(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))的每个标准代表本领域当前状态的例子。这样的标准周期性地由具有相同的一般功能的、更快或更有效的等效形式取代。因此,具有相同功能的替换标准和协议是被本专利设想到的,并旨在包括在所附权利要求的范围内的等效形式。

[0132] 此外,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装置,应注意,这样的系统仅仅是示例性的,且不应被认为是限制性的。例如,设想这些硬件和软件部件中的任何一个或全部可唯一地以硬件、唯一地以软件、唯一地以固件或以硬件、固件和/或软件的某种组合体现。因此,虽然上面的说明书描述了示例性方法、系统和机器可访问介质,这些例子不是实现这样的系统、方法和机器可访问介质的唯一方式。因此,虽然在这里描述了某些示例性方法、系统和机器可访问介质,本专利的覆盖范围不限于此。

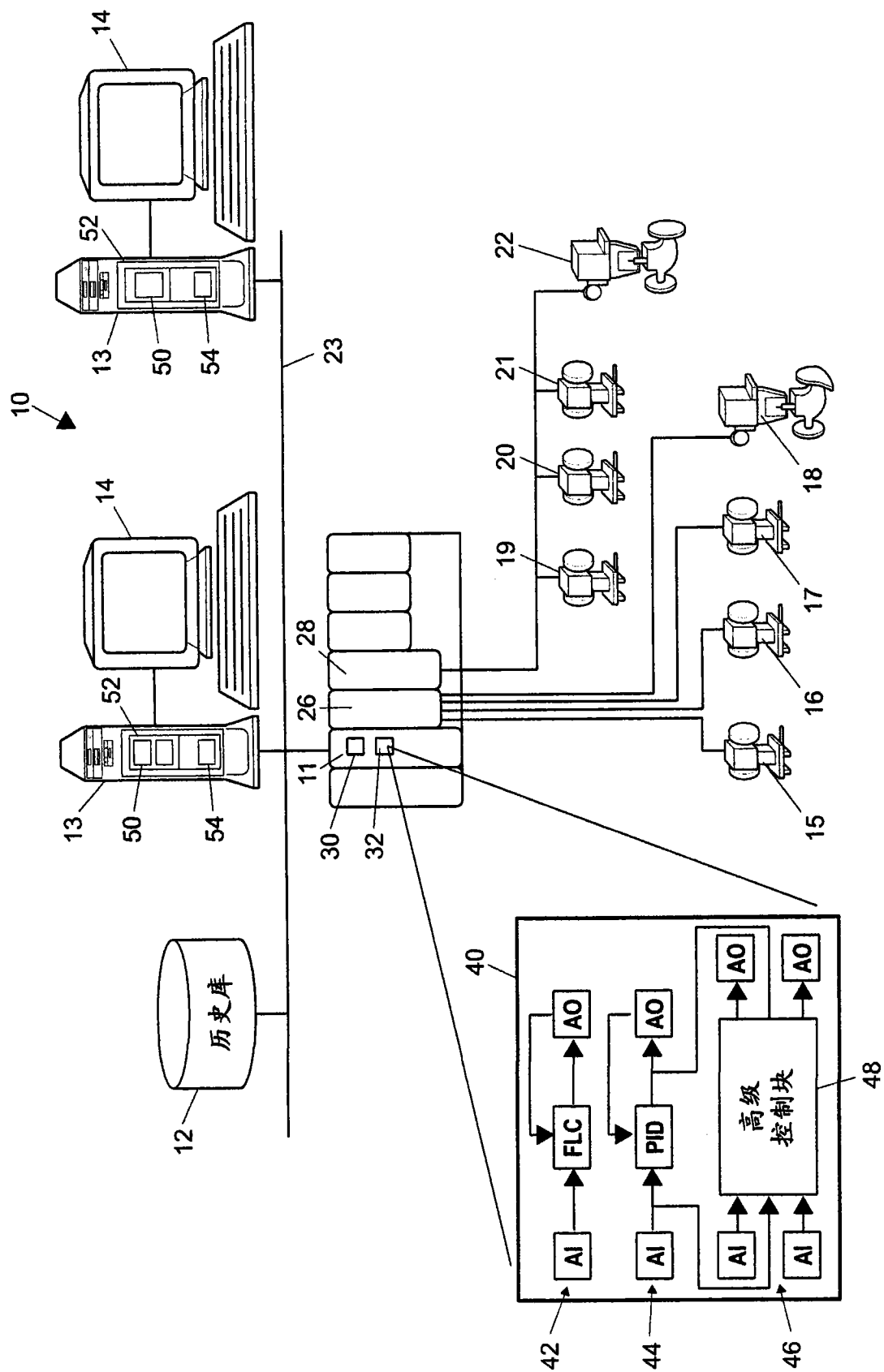


图1

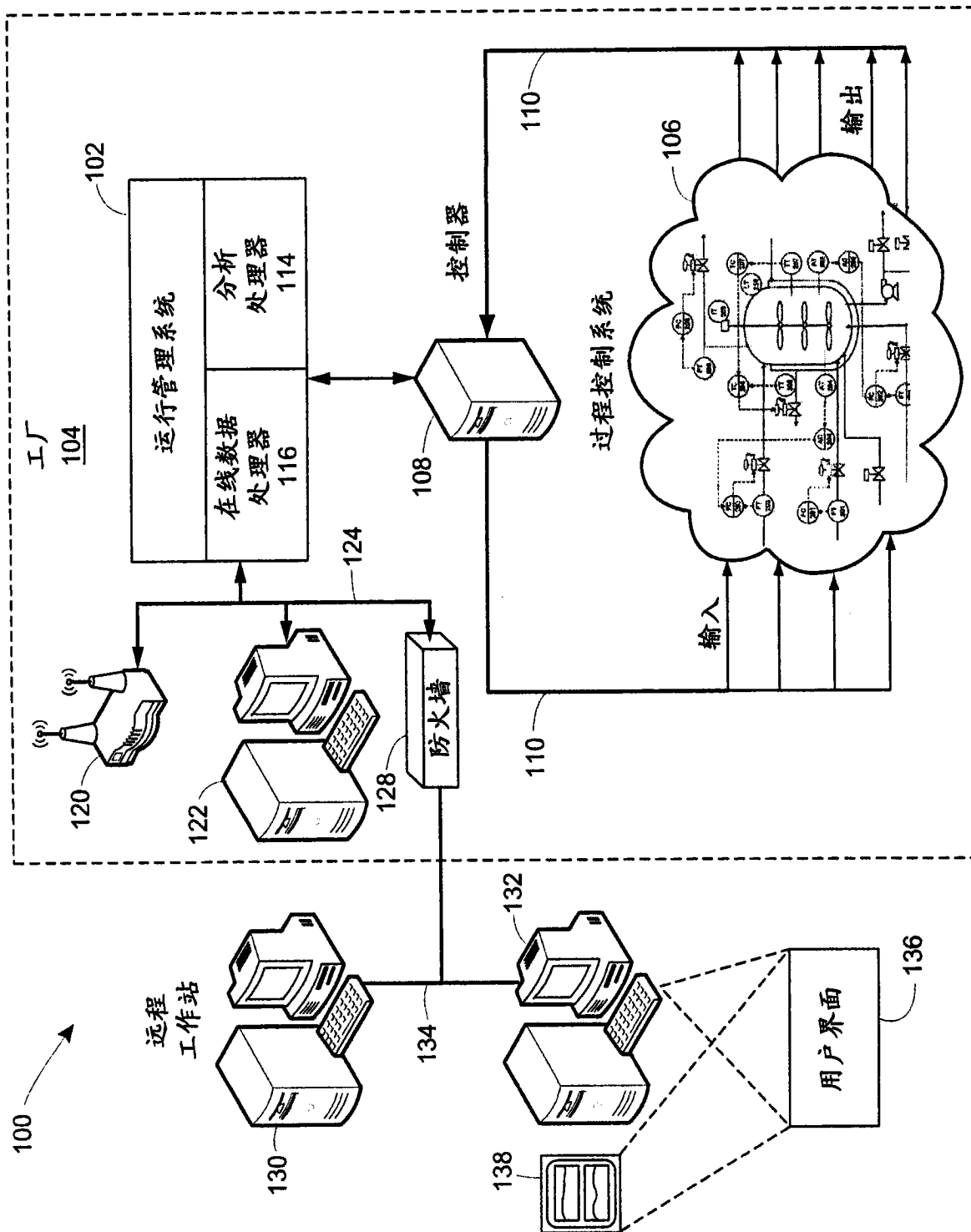


图2

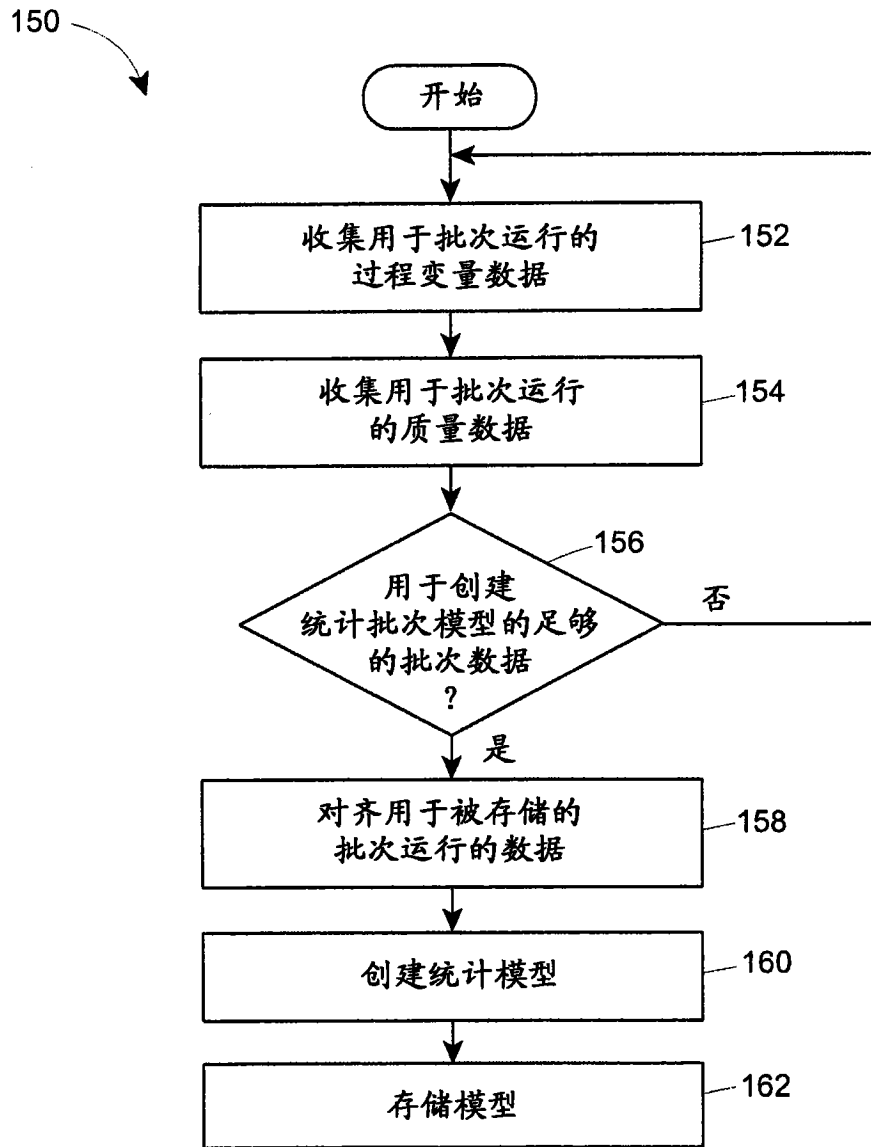


图3

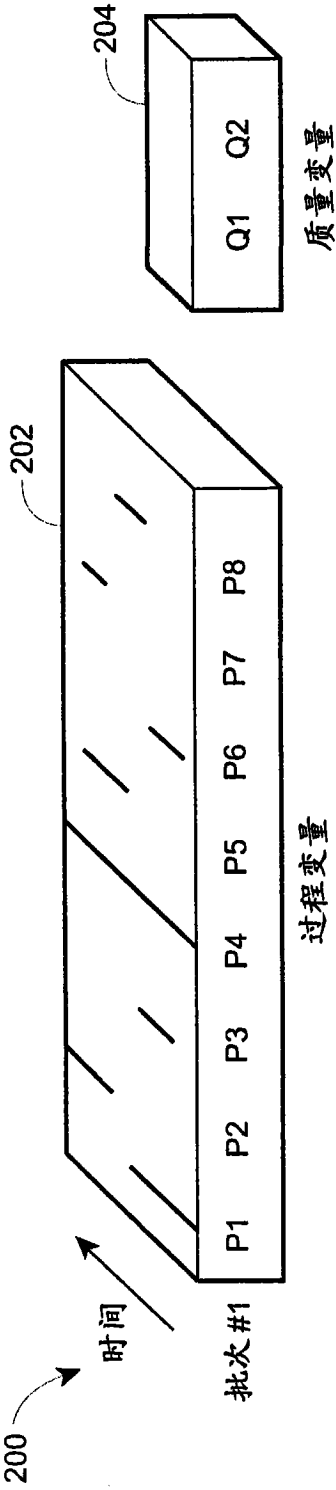


图4

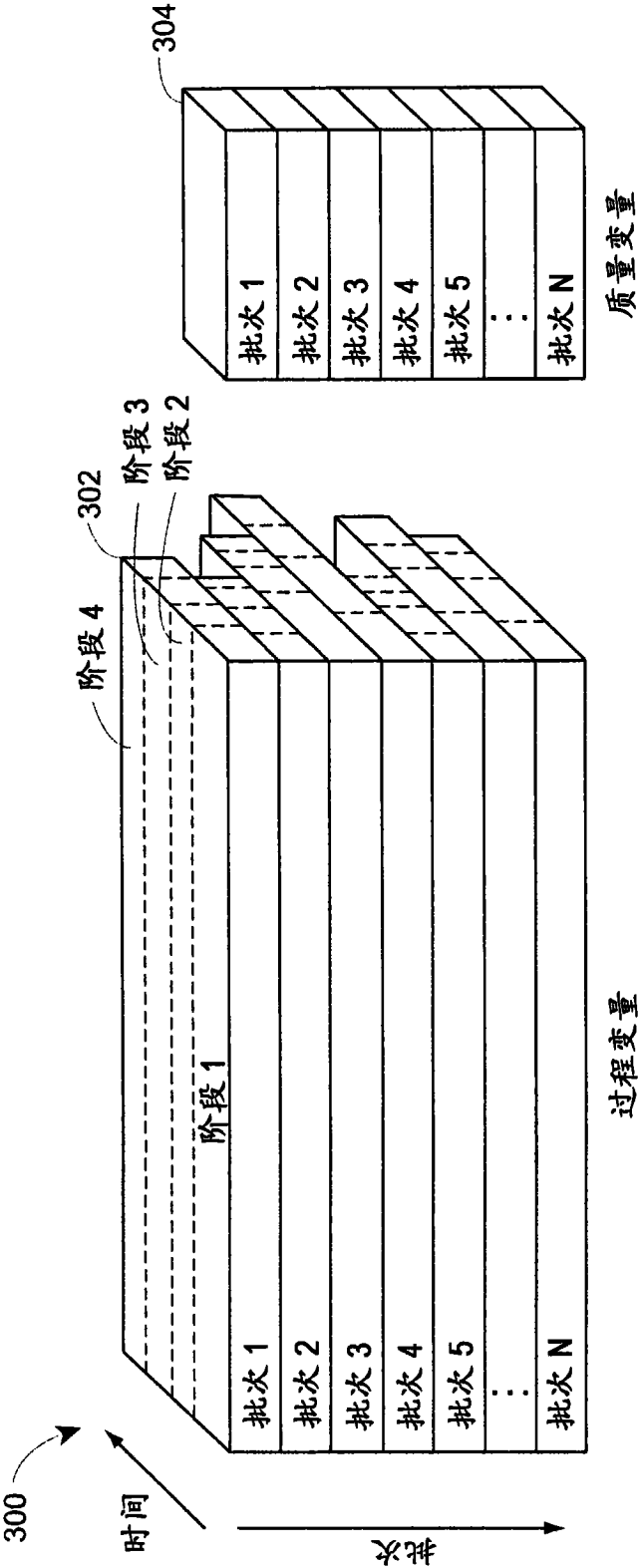


图5

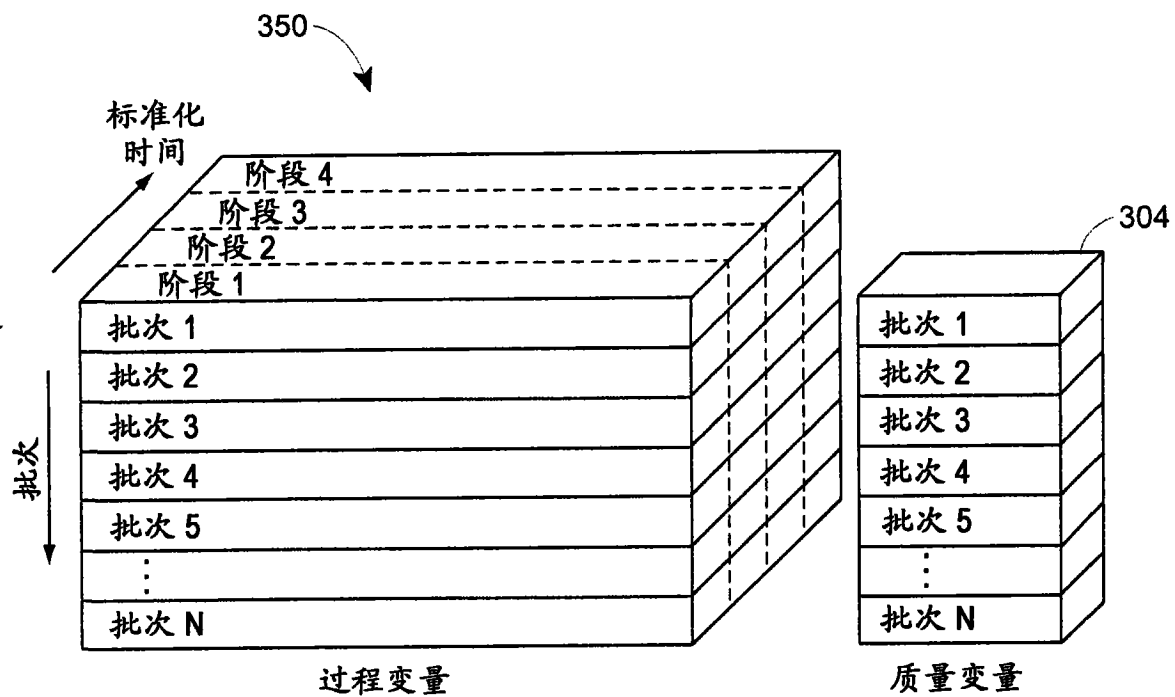


图6

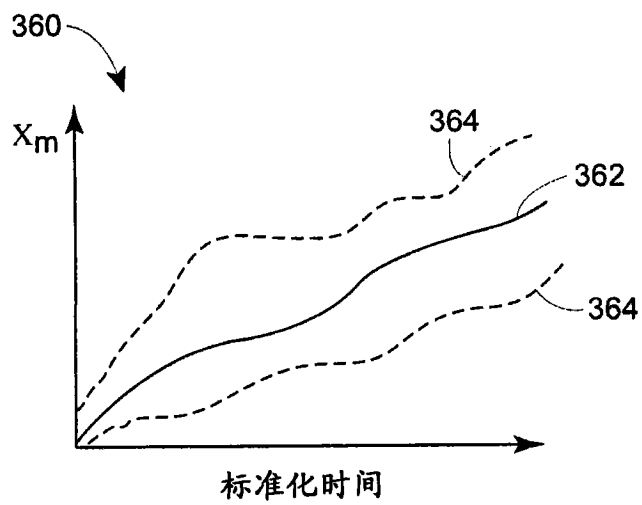


图7

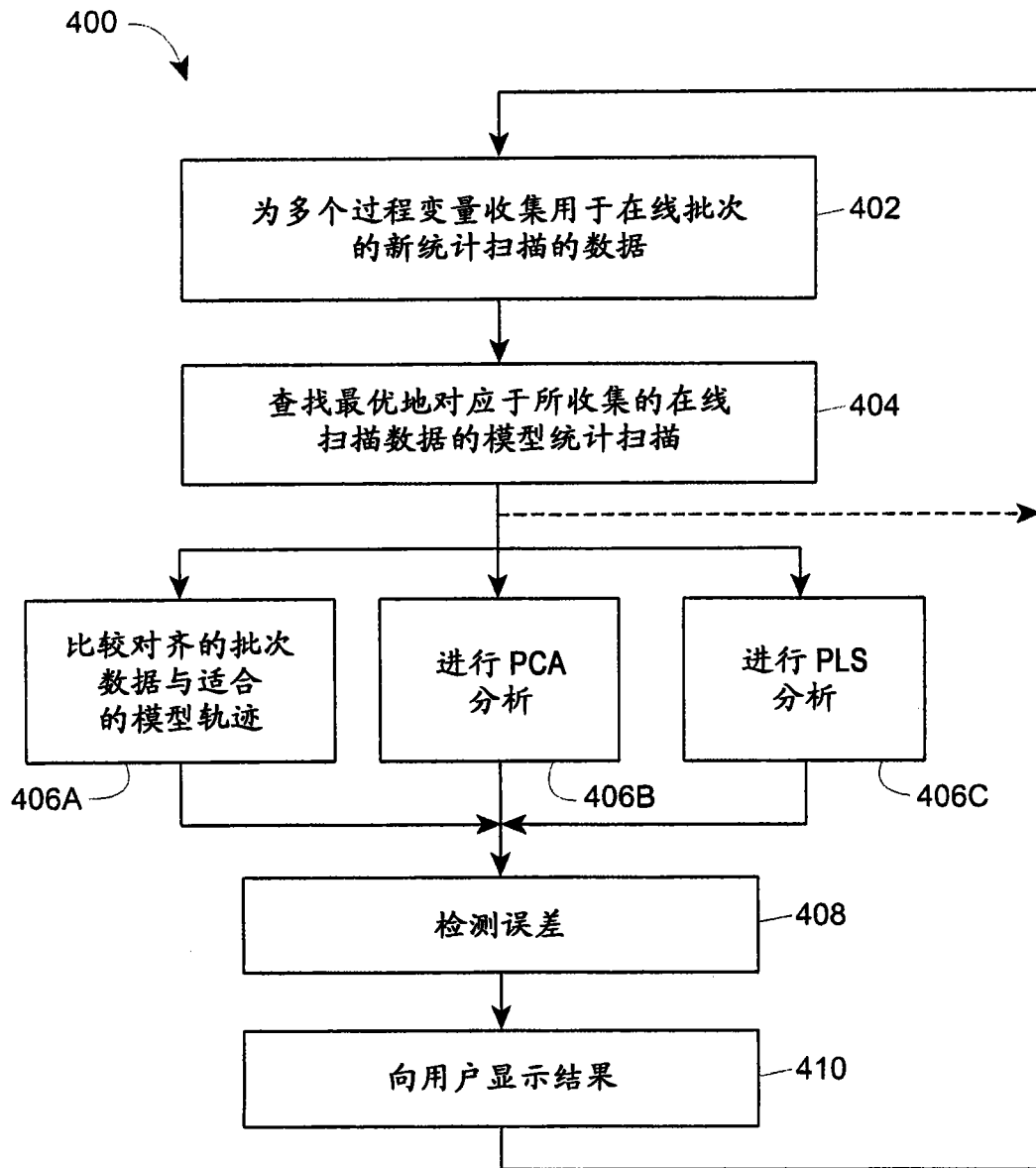


图8

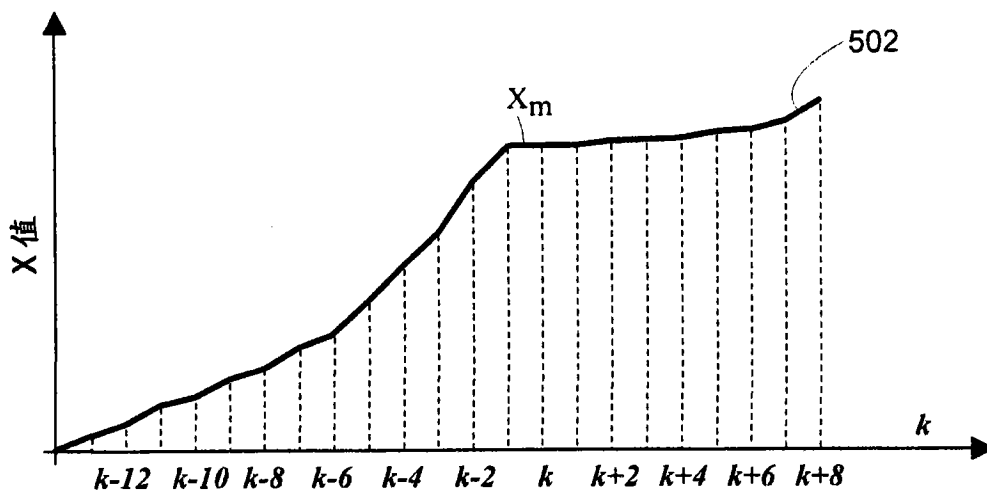


图9

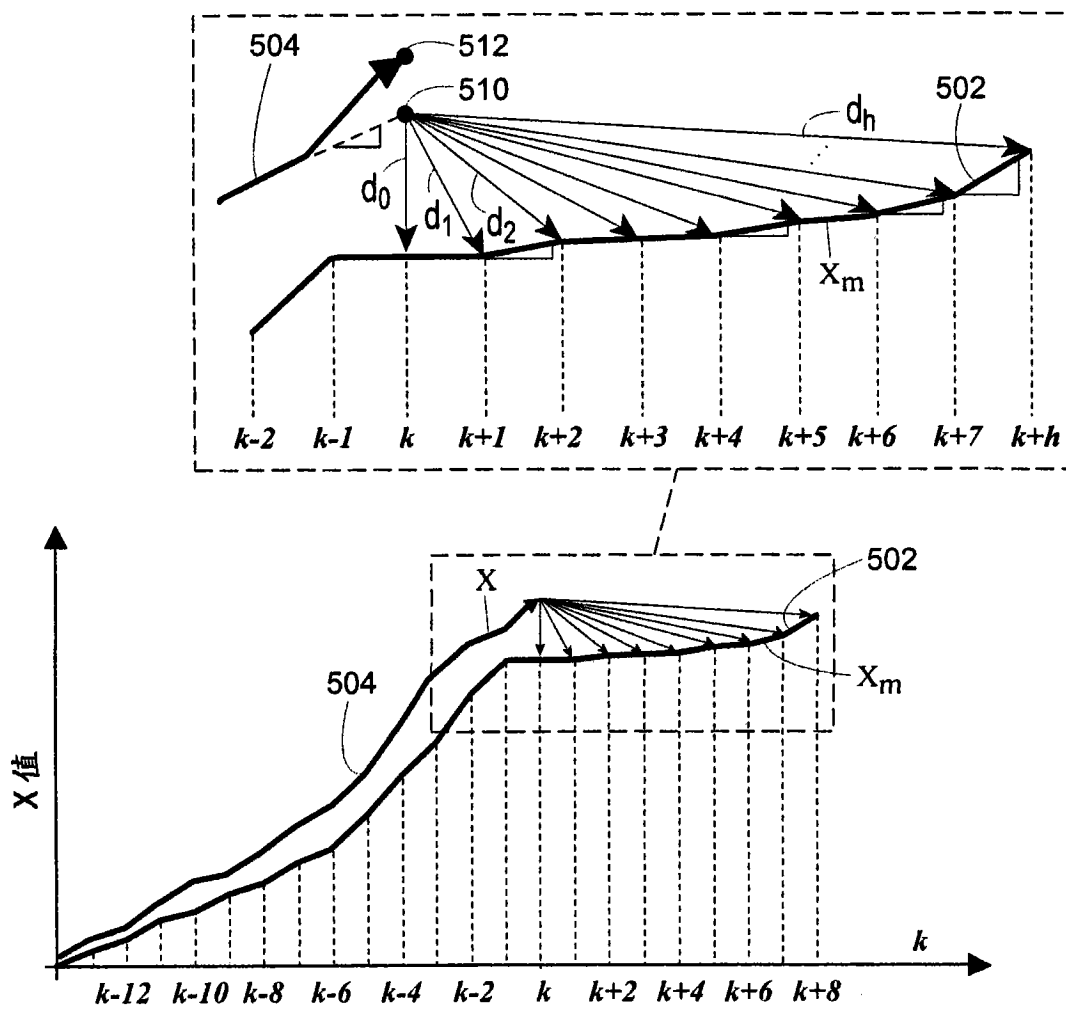


图10

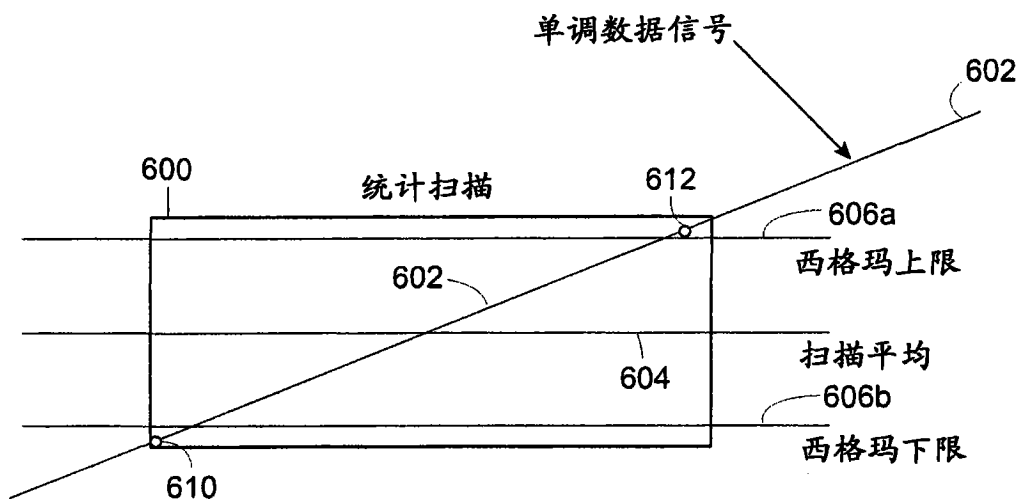


图11

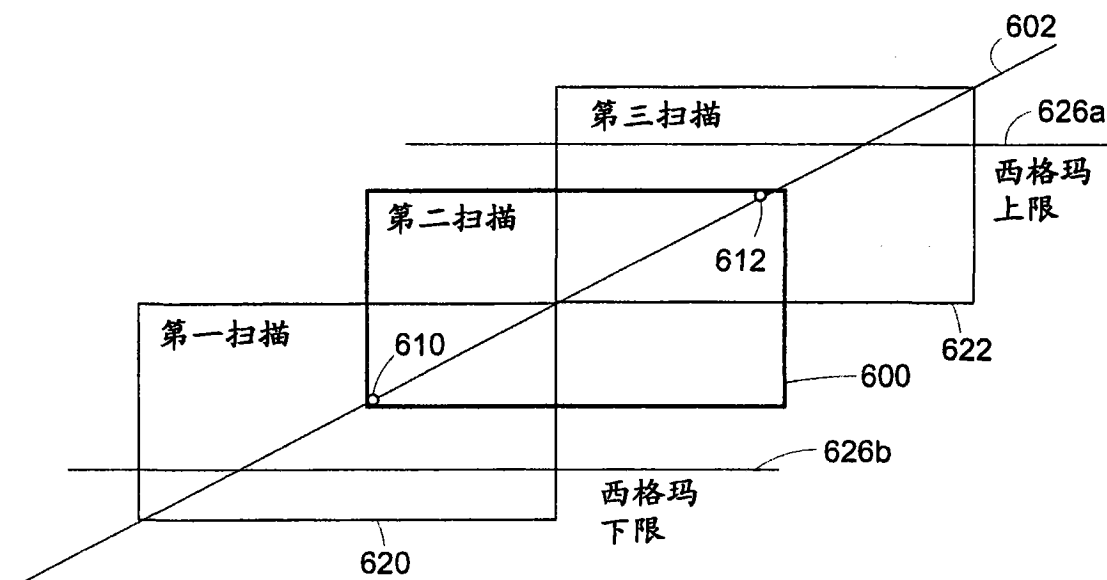


图12

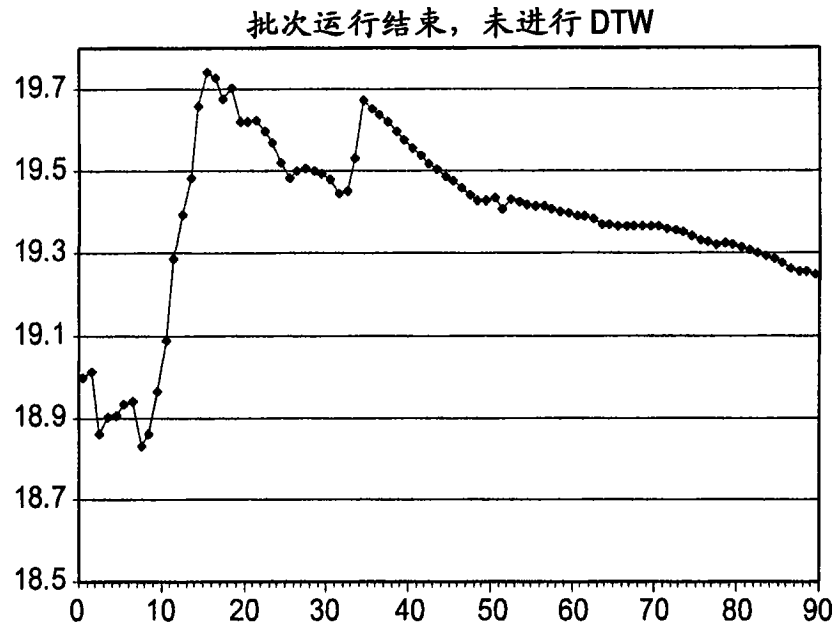


图13

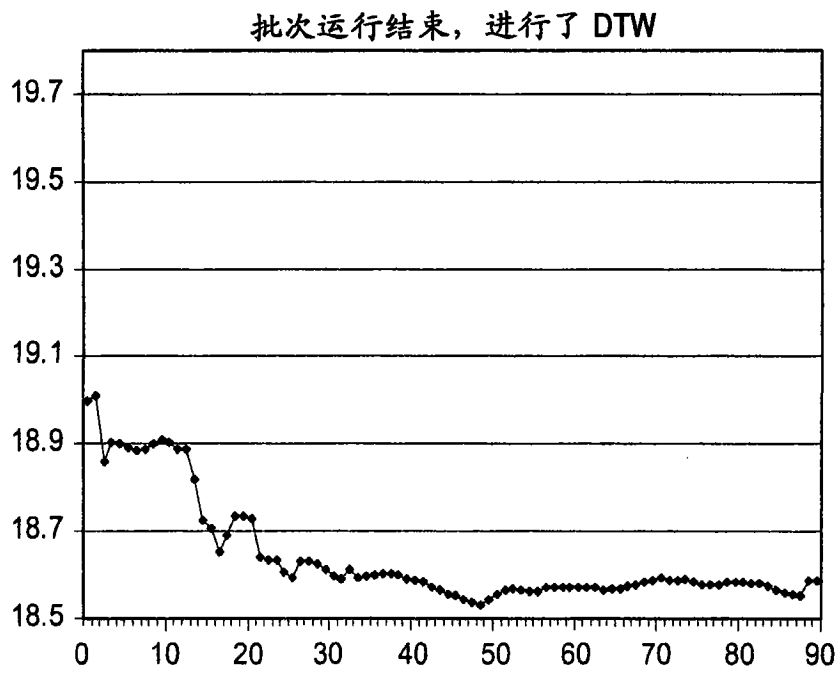


图14

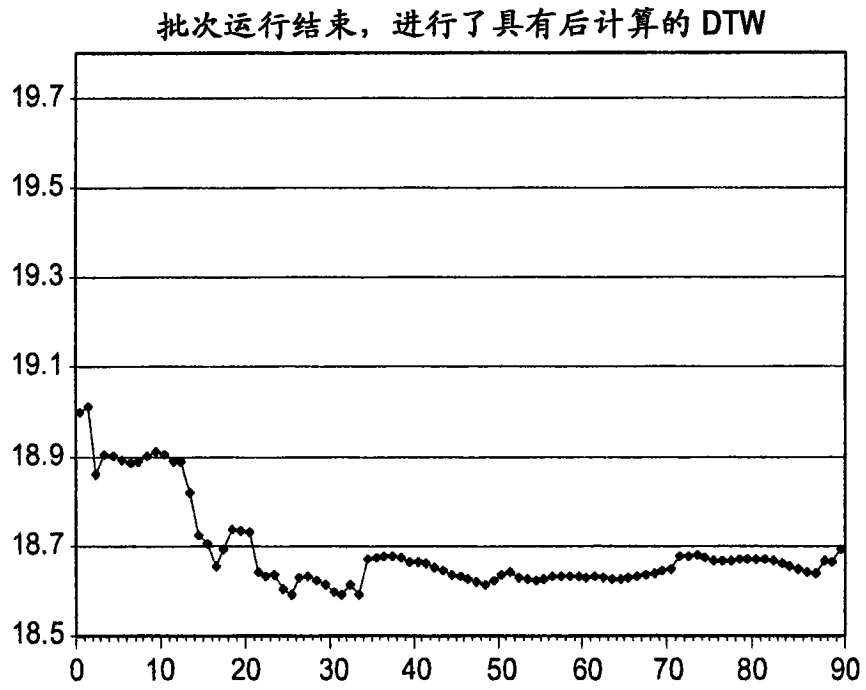


图15