

Teollisten prosessien mallinnus korrelaatio- ja regressiomenetelmiä käyttäen

Tomi Helin

Tampereen Teknillinen Yliopisto, PL692, 33101 Tampere
Puh. 045 679 0171, tomi.helin@tut.fi

Mikko Huovinen

Tampereen Teknillinen Yliopisto, PL692, 33101 Tampere
Puh. 040 575 9571, mikko.huovinen@tut.fi

Hannu Koivisto

Tampereen Teknillinen Yliopisto, PL692, 33101 Tampere
Puh. 040 502 1690, hannu.koivisto@tut.fi

AVAINSANAT mallinnus, kunnonvalvonta, tukijärjestelmät

TIIVISTELMÄ

Teollisuuden prosessit ovat usein hyvin monimutkaisia, useista toisiinsa kytkeytyneistä osaprosesseista muodostuvia kokonaisuuksia, joille tyypillisiä piirteitä ovat mm. epälineaariset riippuvuudet, hidas dynamiikka, sisäiset kierrot, lukuisat tarkkailtavat ja hallittavat muuttujat. Tämän tyyppisten prosessien ohjaus vaatii prosessioperaattoreilta erityistä tarkkaavaisuutta ja prosessin hyvää tuntemusta. Prosessit ovat myös ylläpidon kannalta haasteellisia ja prosessiteollisuudessa onkin viime vuosina kehitetty erilaisia päätöksenteon tukijärjestelmiä, joiden toteuttaminen edellyttää riittävän tarkan prosessimallin luomista. Teollisten prosessien mallinnus on kuitenkin erityisen haastavaa ja työlästä, joten on perusteltua kehittää tätä tukevia työkaluja.

Tässä paperissa esitellään korrelaatio- ja regressioanalyysiin perustuva mallinnusmenetelmä, jonka avulla pystytään helposti luomaan prosessista kerätyn mittausdatan perusteella alustavia prosessimalleja mielenkiinnon kohteena oleville prosessimuuttujille. Menetelmää on kehitetty ja kokeiltu nikkelikasteen liuotusprosessin mallintamisessa ja alustavat tulokset vaikuttavat lupaavilta. Menetelmä on osoittautunut käteväksi tavaksi luoda alustavia mallirakenteita ja prosessimalleja eri tarpeisiin.

1 JOHDANTO

Prosessin tarkka fysikaalinen mallintaminen on usein mahdotonta prosessien monimutkaisen rakenteen ja/tai heikon prosessituntemuksen vuoksi. Tällöin malli saatetaan pyrkiä luomaan datapohjaisesti identifioimalla. Tämän kaltaisessa mallinnuksessa usein erotetaan kaksi erillistä vaihetta, jotka ovat sopivan mallirakenteen valinta/identifiointi ja tämän jälkeinen mallin parametrien numeerinen identifiointi. Jälkimmäiseen on luotu erilaisia matemaattisia optimointialgoritmeja ja valmiita työkaluja, joilla mallin tuottamaa virhettä pyritään minimoimaan. Näistä ensimmäinen vaihe on useasti haastavampi ja sille on hankalampaa luoda systemaattista prosessidataan pohjautuvaa ratkaisutapaa.

Mallirakenteen identifiointi voidaan edelleen jakaa mallin muuttujien ja mallirakenteen (esim. mallin kertaluokka) valintaan. Mallin muuttujien valinnassa selvitetään mallinnettavan muuttujan käyttäytymistä parhaiten selittävät muuttujat lukuisien muuttujakandidaattien joukosta. Oleellista on myös päätellä vastaavat prosessiviiveet selittävien ja selitettävien muuttujien välillä. Näin saadaan luotua ns. kvalitatiivinen malli, joka kuvaa muuttujien väliset suhteet karkealla tasolla, mutta ei ota kantaa vaikutusten kvantitatiiviseen suuruuteen tai tarkempaan prosessin dynamiikkaan. Tässä paperissa esiteltävä sovellus keskittyy sopivien muuttujien valintaan.

Mallirakenteen valinta on oma alueensa ja siihen löytyy myös datapohjaisia käytäntöjä ja työkaluja. Mallirakenteen päättämiseen saataneen tulevaisuudessa apua laitteiston ja prosessien suunnitteludataan liitettävästä metadatasta, joka kuvaa prosessin laitteita, niiden ominaisuuksia sekä prosessin keskinäisiä vuorovaikutuksia, kts. esim. /1/. Näin ollen mallintaja voi hakea mallin rakennetta ja parametreja koskevaa informaatiota suoraan prosessien suunnitteludatasta. Tällaiset metadataa hyödyntävät suunnittelustandardit ovat yleistymässä ja esim. XMPlant-standardia /2/ hyödyntää jo usea alan toimija. Kuitenkin käytännön apua prosessimallinnukseen näistä tekniikoista on vasta vuosien päästä ja maailma on muutenkin täynnä teollisia prosesseja, joille metadataa hyödyntävää suunnitteludataa ei tule koskaan saataville. Näin ollen paperissa

esiteltävä työkalun ajatuksena on helpottaa tämän osa-alueen ongelmia datapohjaisella menetelmällä ja käyttöliittymällä, joiden tuottamien tulosten perusteella tarkemman kvantitatiivisen mallin luonti helpottuu.

Kehitetty sovellus on Matlab-pohjainen ja perustuu prosesseista kerätyn aikasarjadataan hyödyntämiseen. Sovelluksen käyttöliittymässä esitetään käyttäjälle matemaattisesti ratkaistun optimointitehtävän perusteella malliin liitettäviä muuttujakandidaatteja, joita käyttäjä voi lisätä malliin tai poistaa mallista kokeiltuaan niiden vaikutusta mallin tarkkuuteen. Käyttäjällä on myös mahdollisuus vaikuttaa sovelluksen suorittaman optimointitehtävän parametreihin.

Lähtövaatimuksena sovelluksen käytölle on riittävästi prosessidataa ja jonkintasoista ymmärrystä mallinnettavasta prosessista. Riippuen mallin käyttötarkoituksesta prosessiymmärryksen merkitys vaihtelee; jos mallia halutaan käyttää esim. jonkin suureen ennustamiseen tai tarkempaan diagnostiikkaan, korostuu prosessiymmärryksen merkitys. Jos taas malleja käytetään esim. pelkästään mittausredundanssin lisäämiseen ja mittausvikojen havaitsemiseen, voidaan tuloksia hyödyntää vaikka luodut mallit perustuisivatkin triviaaleihin korrelaatioihin. Kehitystyötä on tehty Tampereen teknillisellä yliopistolla eri hankkeiden yhteydessä, joissa on mallinnettu teollisia tuotantoprosesseja. Yleisenä lähtökohtana oli yksittäisten ratkaisujen lisäksi yleisluontoinen tietämyksen kartuttaminen ja kokemusten kerääminen datapohjaisen mallinnustyökalun käytöstä.

2 JÄRJESTELMÄKUVAUS

Tarve kehitellylle järjestelmälle ilmaantui usean eri projektin yhteydessä. Yhteisten tarpeiden havaitsemisen jälkeen mietittiin mitä ominaisuuksia järjestelmän tulisi täyttää, jotta siitä tulisi mahdollisimman yleiskäyttöinen. Alusta lähtien oli selvää, että järjestelmän tulisi pystyä hyödyntämään hyvin epäideaalista aikasarjadataa, sillä prosessidatassa on usein puuttuvia mittauksia ja saatavilla olevien mittausten tietosisältö on pieni johtuen suhteellisen suuresta kohinasta. Lisäksi datassa on paljon epäoleellista informaatiota sisältäviä osuuksia (esim. prosessiseisokit), jotka helposti dominoivat korrelaatioanalyysiä. Tästä johtuen datan esikäsittelyn merkitys korostuu ja siihen tulee panostaa luomalla sopivia työkaluja. Datapohjaisia menetelmiä käytettäessä on muistettava, että saatavat tulokset ovat suoraan riippuvaisia datan laadusta ja kattavuudesta. Tästä johtuen järjestelmävaatimusten lisäksi myös käytettävälle prosessidatalle on tiettyjä vaatimuksia, joista tärkein lienee se, että data on tarpeeksi informaatorikasta, ts. se sisältää merkittävimmät prosessin toimintatilanteet. Dataaadun vaikutuksista myöhemmin lisää.

Datapohjaisessa lähestymistavassa on käytännössä usein lähdettävä liikkeelle muuttujajoukon karsinnasta, sillä suuri muuttujamäärä monimutkaistaa optimointitehtävää, jolloin mallin identifiointi vaikeutuu. Mallin selittävien tekijöiden alustavaan valintaan ja viiveiden estimointiin käytetään Disturbance Propagation Path Identification-algoritmiin perustuvaa rutiinia /3/. Disturbance Propagation Path Identification-algoritmissa prosessimuuttujien väliset viiveet estimoidaan aikasarjadatasta ristikorrelaation perusteella. Estimoitujen viiveiden merkitsevyyttä testataan usealla tilastollisella testillä. Tilastollisesti merkitsevistä viiveistä muodostetaan seuraava viivematriisi

$$\Lambda = \begin{bmatrix} - & \lambda_{1,2} & \dots & \lambda_{1,p} \\ & - & \dots & \dots \\ & & \dots & \lambda_{p-1,p} \\ & & & - \end{bmatrix}$$

missä $\lambda_{m,n}$ on muuttujien m ja n välinen tilastollisesti merkitsevä positiivinen viive. Viivematriisi voidaan pyrkiä järjestämään maksimoimalla ylädiagonaaliin jäävien alkioiden lukumäärien summa. Tällöin matriisin ensimmäinen alkio edustaa tapahtumaketjun aiheuttajaa (juurisyytä) ja viimeinen alkio edustajaa tapahtumaketjun päätösvaihetta. Viivematriisista saadaan kätevästi selville millä viiveillä muut muuttujat vaikuttavat tarkastelun kohteena olevaan muuttujaan, esim. muuttujien vaikutusajat muuttujaan n selviävät tarkastelemalla matriisin saraketta n .

Mahdollisiksi ongelmakohtiksi Disturbance Propagation Path Identification-algoritmissa muodostuvat viiveiden laskentaan käytetyn ristikorrelaation lineaarisuusoletus, estimointiin käytetyn datan laatu ja muuttuvat viiveet. Vaikka korrelaation perustuvalla algoritmilla on puutteensa, lähinnä lineaarisuus, se valittiin myös tämän sovelluksen perustaksi, sillä se on intuitiivinen ja helppo ymmärtää sekä sen avulla voidaan päätellä muuttujien väliset viiveet. Vaihtoehtoisena menetelmänä on mainittu myös ns. transfer entropy -menetelmä, mutta se ei huomioi prosessiviiveitä.

Alustavan muuttujien valinnan ja viiveiden estimoinnin jälkeen luodaan mallinnettavaa muuttujaa kuvaava regressiomalli /4/. Mallin selittävien tekijöiden lopulliseen valintaan käytetään lisäävää regressiomenetelmää ja

edellisen vaiheen viiveillä viivästettyä aikasarjadataa. Myös mallinnettava muuttuja eri viiveillä viivästettynä voidaan lisätä muuttujakandidaattien joukkoon, jolloin saadaan muodostettua lineaarisen regressiomallin sijaan ARX-malli (autoregressive with exogenous terms).

Lisäävässä regressiomenetelmässä aloitetaan regressiomallista jossa on vain vakiotermit. Käyttäjä valitsee malliin yhden muuttujan algoritmin ehdottamien muuttujakandidaattien joukosta, jonka muuttujat korreloivat parhaiten mallinnettavan muuttujan (prosessin ulostulosuureen) kanssa. Tämän jälkeen käyttäjä lisää malliin iterointikierron kerrallaan muuttujia algoritmin ehdottamien muuttujakandidaattien joukosta. Ensimmäisen iterointikierroksen jälkeen algoritmi ehdottaa lisättäväksi sellaista muuttujaa, jonka malliin jo kuuluvien muuttujien kanssa korreloimaton osa korreloi parhaiten mallinnusresiduaalin kanssa. Muuttujien lisäämistä jatketaan kunnes merkittäviä korrelaatioita ei enää löydy, mallinnusvirheen neliösumma ei enää pienene merkittävästi tai käyttäjä haluaa lopettaa iteroinnin. Joka muuttujan lisäämisen yhteydessä tarkennetaan Disturbance Propagation Path Identification-algoritmeilla estimoidut viiveet tarkastelemalla lisättävän muuttujan eri viiveiden vaikutusta mallinnusvirheeseen. Käyttäjällä on mahdollisuus tarkastella etukäteen lisättävien muuttujien vaikutusta mallin tarkkuuteen esimerkiksi visuaalisesti, muuttaa malliin lisättävien muuttujien viiveitä, poistaa vapaasti malliin jo lisättyjä muuttujia sekä vaikuttaa algoritmin parametreihin.

Käyttöliittymän on intuitiivinen ja nopea käyttää, sillä suuressa datajoukossa muuttujien eri kombinaatioiden määrä kasvaa nopeasti. Käyttäjällä on myös mahdollisuus vaikuttaa ”automaatioasteen” määrään, eli käyttäjän pystyy niin haluttaessa puuttumaan kriteerien ja lopulliseen muuttujien valintaan, sillä regressioanalyysi voi epäonnistua monesta eri syystä. Epäonnistumisia voi sattua erityisesti, jos monen selittäjän regressioanalyysi suoritetaan täysin automaattisesti askeltavasti. Käytännössä käyttäjän tulee ainakin valvoa mallinnuksen etenemistä, jotta malleista saadaan mielekkäitä.

3 KOKEMUKSIA JA JATKOSUUNNITELMIA

Sovelluksen kehitystyö on melko alkuvaiheessa ja sitä ei ole ehditty vielä testaamaan paljoa, mutta alustavasti tulokset vaikuttavat lupaavilta. Kuitenkin jo alustavissa testeissä on tullut esiin yksityiskohtia, jotka on huomioitava sovellusta käytettäessä. Kuten jo aiemmin mainittiin, datan esikäsittelyyn ja karsintaan tulee kiinnittää erityisesti huomiota. Lisäksi usein suoraan infojärjestelmistä kerätty mittaustiedosto ei ole aina informaatioisältään parhaassa mahdollisessa muodossa. Siksi laskettujen apumuuttujien käyttö voi usein parantaa tuloksia merkittävästi. Hyvä esimerkki tällaisesta tilanteesta on höyryentalpian laskenta lämpötila ja painemittauksista. Toisaalta tällaisten apumuuttujien luontiin tarvitaan usein jonkin verran prosessiymmärrystä.

Mallinnuksessa on lisäksi havaittu haitallisia ominaisuuksia, joille on hanka tehdä mitään. Yksi perustavaa laatua oleva ongelma on käytettävän datan kattavuus; toivottavaa olisi, että dataa on oltava kerättyä kaikista prosessin yleisimmistä toimipisteistä ja ajotavoista, mikä ei aina toteudu. Myös mittauslaadun kanssa voi tulla ongelmia, jos mittauksien tarkkuus ja toistettavuus ovat heikkoja. Em. datan kattavuuteen liittyy myös ongelma, joka on tuttu adaptiivisen säädön ongelmista; prosesseja ajetaan usein vakio-toimipisteissä, jolloin prosessin dynamiikka ei tule toivotulla tavalla esille. Datan tulisi siis olla siinä määrin informaatio-rikasta, että prosessissa on tarpeeksi ”eloa” identifiointia varten. Lisäksi korrelaatioanalyysille on tyypillistä, että tulokset riippuvat vahvasti ”herätesignaalin” taajuudesta suhteessa tutkittavan prosessin aikavakioon. Esimerkiksi suuritaajuusena hitaaseen prosessiin syötetty signaali ei juuri vaikuta ulostuloon, vaikka muuttujien välillä olisi matalilla taajuuksilla selvä riippuvuus. Samoin ”herätesignaalin” sijoittuminen suhteessa prosessiin vaikuttaa tuloksiin; esim. matalataajuuksinen signaali syötettynä takaisinkytkettyyn järjestelmään asetusarvona aiheuttaa selvän korrelaation ulostulon kanssa, mutta säätimestä johtuen vastaavaa korrelaatiota ei ole, jos signaali syötetään asetusarvon ja ulostulon väliin (esim. prosessihäiriö). Toisaalta suuritaajuus häiriön vaikutus saattaa näkyä korrelaatioissa paremmin kuin suuritaajuus asetusarvosignaalin.

Kuten jo edellä mainittiin, korrelaatiolaskennoilla on myös se heikkous, että se on herkkä satunnaisille, mutta numeerisesti suurille muutoksille. Esimerkiksi lyhykestoinen ja prosessin perustoiminnan kannalta epäoleellinen muutos datassa, kuten mittaushäiriö, prosessin poikkeamatilanne tai seisokki, saattaa peittää oleellisten ilmiöiden korrelaatiot alleen. Siksi ennalta ennustamattomien ja epäoleellisten ilmiöiden vaikutusta tulokseen voidaan pyrkiä pienentämään esikäsittelyn lisäksi laskemalla korrelaatioita ns. liukuvassa ikkunassa. Ts. datasta lasketaan useampi tulos eri ajanjaksoilta ja tulokset yhdistetään esim. keskiarvottamalla ne. Tämä vähentää satunnaisten häiriöiden vaikutusta ja samalla vahvistaa toistuvien ilmiöiden vaikutusta, jotka ovat yleensä prosessin kannalta oleellisimpia. Toisaalta satunnaisesti ”aktivoituvan”, mutta oleellisen ilmiön aiheuttama korrelaatio saattaa jäädä laskennassa huomaamatta, mikäli ko. ilmiö tapahtuu vain harvoin. Tämä on valitettava ilmiö, jonka hallinta jää käyttäjän vastuulle.

Em. seikoista johtuen voidaan todeta, että algoritmin tuottamat tulokset ovat riippuvaisia käytettävissä olevan datan laadusta ja kattavuudesta. Ideaali tilanne olisi, jos datan keruun aikana voitaisiin suorittaa prosessikokeita datan kattavuuden ja laadun varmistamiseksi, mutta tämä ei kuitenkaan yleensä ole toteutettavissa, sillä prosessikokeiden suorittaminen häiritsee usein tuotantoa. Tämän vuoksi käyttäjällä on mahdollisuus määrittää työkalun ”automaatioaste” ja osallistua halutussa määrin mallien luontiin sekä algoritmin käyttämien parametrien valintaan.

Huomioitava seikka on myös regressiomallien perustuminen oletukseen prosessien lineaarisuudesta. Tämä oletus pätee usein vain paikallisesti ja luotujen mallien käytettävyys siis myös rajoittuu paikalliseksi. Yksi mahdollisuus kiertää ongelmaa on luoda ja käyttää paloittain määritelty malliparametreja. Algoritmista voidaan myös luoda online versio, joka voi päivittää mallien adaptiivisia parametreja rekursiivisesti. Hankalampia tapauksia voi esiintyä esim. tilanteessa, jossa regressiomalli toimii hyvin tietyllä alueella, mutta perustuu mittausdataan antureista, joiden luotettavuus tippuu siirryttäessä toiselle toimialueelle. Tällaisessa tapauksessa koko mallirakenne voitaisiin määrittellä paloittain. Tällaiset järjestelyt tietysti vaativat lisää prosessituntemusta ja lisäävät konfigurointityötä, jonka täytyy olla hyvin perusteltua. Työkaluun on kuitenkin tarkoitus rakentaa lisää mahdollisuuksia datan esikäsitelyyn ja karsintaan, jotta tällaisten tapausten havaitseminen ja tutkiminen helpottuu. Toinen mahdollinen jatkokehittelysuunta on taajuustarkastelun lisääminen työkaluun. Yksinkertaisimmillaan tämä voisi tarkoittaa vaikkapa erillistä tulosten laskentaa erilaisten taajuustason esisuodatusten jälkeen. Näin voitaisiin mahdollisesti huomioida paremmin signaalien taajuuksisillön vaikutus suhteessa prosessin aikavakioon sekä muuttujien erilainen kytkeytyminen mallirakenteeseen.

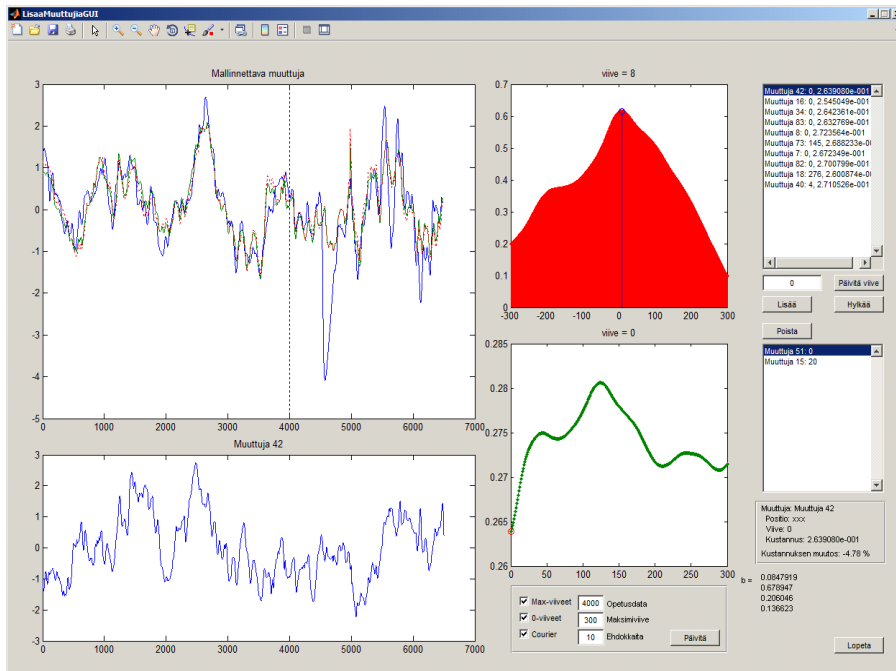
Työkalua voidaan käyttää sekä kvalitatiivisten, että kvantitatiivisten prosessimallien luontiin. Käyttökohteita ovat esim. erilaisten soft sensoreiden luonti mittaus- ja säätötarkoituksiin sekä prosessimallien luonti ja mittausredundanssin lisääminen diagnostiikkatarkoituksiin. Vaikka työkalu käyttää regressiomalleja mallirakenteen selvittämiseen, voi lopullinen malli olla mikä tahansa malli, ts. työkalua voidaan käyttää oleellisten muuttujien löytämiseen. Työkalulla voidaan myös tutkia prosessirakennetta ja analysoida prosessien ristikkäisvaikutuksia.

4 SOVELLUKSEN KÄYTTÖ

Sovellusta on alustavasti kokeiltu eräässä nikkelikiven liuotusprosessissa. Prosessi on hyvin laaja ja monimutkainen kokonaisuus, joka sisältä hidasta dynamiikkaa, epälineaarisia riippuvuuksia ja sisäisiä kiertoja. Prosessin kemialliset reaktiot tunnetaan pääpiirteittäin, mutta reaktioiden tarkan toteutumisen havainnointi on mahdotonta. Prosessiin syötettävä raaka-aine vaikuttaa voimakkaasti osaprosesseihin ja raaka-aineen ominaisuudet vaihtelevat. Muuttuvien virtausten ja raaka-aineen vaihteluiden vuoksi prosessi ei saavuta koskaan tasapainotilaa. Prosessi sisältää useita tarkkailtavia ja hallittavia muuttujia. Lisäksi osaprosessien häiriötilat ja laiterikkojen aiheuttamat alasajot vaikuttavat välillisesti koko liuottamon toimintakuntoon. Osaprosessien todellinen tila voidaan saada selville vasta aikaa vievän laboratorioanalyysin valmistuttua, jolloin ohjaustoimet ovat pahasti myöhässä. Prosessin ohjaus vaatii erityistä tarkkaavaisuutta ja prosessin hyvää tuntemusta sekä kykyä arvioida omien toimien vaikutuksia jopa vuorokauden päähän tapahtumahetkestä.

Mittausdata sisältää virtaus-, konsentraatio-, tiheys-, paine- ja lämpötilamittauksia koko prosessista. Mittausdata esikäsiteltiin ennen mallin identifiointia poistamalla etiöpisteitä, suodattamalla mittauksissa olevaa kohinaa nolla-vaiheisella digitaalisella edestakaisin suodattimella. Lopuksi mittausdata normalisoitiin. Mittausdata on hyvin ongelmallista, koska osassa muuttujien mittauksiin summautuneen kohinan hajonta on suurempaa kuin merkityksellisten muutosten hajonta. Lisäksi mittausdata sisältää paljon puuttuvia mittauksia ja epäoleellista informaatiota, kuten prosessiseisokkeja. Yhtenäisen datapätjän, jossa minkään muuttujan mittauksissa ei ole katkoja tms., löytäminen oli vaikeaa.

Mallin identifiointiin käytettiin kappaleessa 2. käsiteltyä sovellusta. Sovelluksen sisäänmenona annetaan Disturbance Propagation Path Identification-algorimilla estimoiduilla viiveillä viivästetty mittausdata. Kuvassa 1 on esimerkki sovelluksen graafisesta käyttöliittymästä. Kuvan oikeassa yläikkunassa on algoritmin ehdottamat malliin seuraavaksi lisättävät muuttujakandidaatit. Oikeassa alaikkunassa näkyy malliin lisätyt muuttujat. Vasemmassa yläikkunassa on mallinnettavan muuttujan aikasarja (sininen), lisättävän muuttujan vaikutus malliin (vihreä) ja edellisellä iteraatiokierröksellä estimoitu malli (punainen) sekä opetus- että validointidatalle. Vasemmassa alaikkunassa näkyy seuraavaksi lisättävän muuttujan aikasarja ja keskimmaisissa ikkunoissa on visualisoitu Disturbance Propagation Path Identification-algorimilla estimoitujen viiveiden validointia sekä ristikkökorrelaation että mallinnusvirheen perusteella



Kuva 1. Graafinen käyttöjärjestelmä mallien identifiointiin

5 KIRJALLISUUSLUETTELO

- [1] Thambirajah, J., Benabbas, L., Bauer, M. and Thornhill, N.F. "Cause-and-effect analysis in chemical processes utilizing XML, plant connectivity and quantitative process history", Computers and Chemical Engineering, Pergamon Press, 33 (2009) 2, pp. 503–512.
- [2] <http://www.noumenon.co.uk/>
- [3] Bauer, M. and Thornhill, N.F. "A practical method for identifying the propagation path of plant-wide disturbances", Journal of Process Control, Elsevier, 18 (2008) 7/8, pp. 707-719
- [4] Hocking, R. R. "The Analysis and Selection of Variables in Linear Regression," Biometrics, 32 (1976).