

ارزیابی کیفیت محصول مبتنی بر روش پارامتر وابسته به متغیر حالت با کاربرد در فرآیند تنسی ایستمن (TEP)

رعنا حسن پور^۱، میرمحمد خلیلی پور^{۲*}، جعفر صادقی^۳، بهاره بیدار^۴

^۱ فارغ التحصیل کارشناسی ارشد مهندسی شیمی، گروه مهندسی شیمی، دانشکده مهندسی شهید نیک‌بخت، دانشگاه سیستان و بلوچستان،
rana.hasanpour20@gmail.com
^{۲*} استادیار، گروه مهندسی شیمی، دانشکده مهندسی شهید نیک‌بخت، دانشگاه سیستان و بلوچستان، a.khalilipour@eng.usb.ac.ir
^۳ دانشیار، گروه مهندسی شیمی، دانشکده مهندسی شهید نیک‌بخت، دانشگاه سیستان و بلوچستان، sadeghi@eng.usb.ac.ir
^۴ استادیار، گروه مهندسی شیمی، دانشکده مهندسی شهید نیک‌بخت، دانشگاه سیستان و بلوچستان، b.bidar@eng.usb.ac.ir

پذیرش: ۱۴۰۲/۰۲/۲۰

ویرایش: ۱۴۰۲/۰۱/۲۲

دریافت: ۱۴۰۱/۰۹/۱۲

چکیده: توسعه و پیاده‌سازی روش‌های پیشرفته نظارت و کنترل نیازمند اندازه‌گیری متغیرهایی است که تعیین آن‌ها به روش فیزیکی امکان‌پذیر نیست یا اینکه سنجش آن‌ها بسیار دشوار است. حسگرهای نرم می‌توانند با تخمین متغیرهای دشوار اندازه‌گیر بوسیله متغیرهای آسان اندازه‌گیر جایگزین مناسبی برای حسگرهای سخت‌افزاری باشند. در این مقاله حسگر نرم داده محور بر مبنای مدل‌سازی پارامتر وابسته به حالت با استفاده از تکنیک متغیر سودمند محلی^۱ (LIV) به منظور تخمین کیفیت در فرآیند تنسی ایستمن ارائه گردیده است. این تکنیک ساختاری ساده دارد و نسبت به سایر روش‌های مدل‌سازی به تعداد متغیرهای ورودی کمتری نیازمند است، قابلیت شناسایی متغیرهای تأثیرگذار بر روی متغیرهای هدف را نیز داراست. در این مطالعه، مدل‌های حسگر نرم مبتنی بر LIV به منظور پیش‌بینی غلظت اجزاء A و E توسط نرم افزار MATLAB توسعه یافتند. نتایج حاصل از ارزیابی مدل‌های ارائه شده بر روی مجموعه داده‌ی آزمون، خطای جذر میانگین مربع خطا (RMSE) را به ترتیب ۰/۳۱۹۱ و ۰/۰۱۷۴ برای جزء A و جزء E گزارش می‌دهد. مدل LIV پیشنهادی، خطای پیش‌بینی (RMSE) برای غلظت جزء E را نسبت به روش‌های کمینه مربعات جزئی^۲ (PLS) و کمینه مربعات جزئی درونی پویا^۳ (DiPLS) به ترتیب به میزان ۹۸/۱۸٪ و ۹۷/۶٪ کاهش داده است.

کلمات کلیدی: تخمین کیفیت، حسگر نرم داده محور، فرآیند تنسی ایستمن، مدل‌سازی پارامتر وابسته به متغیر حالت، روش متغیر سودمند محلی.

SDP-Based Quality Monitoring with Application to the Tennessee Eastman Process (TEP)

Rana Hassanpour, Mir Mohammad Khalilipour, Jafar Sadeghi, Bahareh Bidar

Abstract: Development and implementation of advanced monitoring and control techniques requires measurement of variables which cannot be determined physically or difficult to measure. Soft sensors can be used as a relatively inexpensive alternative for hardware sensors as a suitable solution in the process industries by estimation of easy-to-measure variables using hard-to-measure variables. In this study, design of data-driven soft sensor based on state-dependent parameter modeling method by using local instrumental variable (LIV) have been presented to predict quality

³ Dynamic inner Partial least squares

¹ Local Instrumental Variable

² Partial Least Squares

variables in Tennessee Eastman (TE) process. Unlike other soft sensor modeling methods, the state dependent parameter modeling method has simple structure and often requires fewer input variables. Moreover, state dependent modeling method using local instrumental variable can identify influencing variables which have been affected the target variables. The performance of identifying technique and proposed soft sensors has been investigated on Tennessee Eastman process. In the present study, LIV based Soft sensor models have been developed using MATLAB software to predict concentration of A and E components. The evaluation results of the proposed models on the test data set report that the root mean squared error (RMSE) for concentration of components A and E are 0.3191 and 0.0174, respectively. The proposed LIV model reduced prediction error (RMSE) for the concentration of component E by 98.18% and 97.6% as compared to Partial Least Squares (PLS) and Dynamic Inner Partial least squares (DiPLS) methods, respectively.

Keywords: Quality prediction, Data-driven soft sensor, Tennessee Eastman process, State-dependent parameter modeling, Local instrumental variable method.

همچنین در مقایسه با هزینه‌های لازم برای بسیاری از تجهیزات سخت افزاری، پیاده سازی این حسگرها هزینه کمتری دارد [۲ و ۳].

بر اساس نوع روش مدل سازی، حسگرهای نرم به دو دسته کلی مدل محور^۵ و داده محور^۶ تقسیم می شوند. واضح است که امکان توسعه حسگرهای مدل محور برای فرآیندهای صنعتی بسیار مشکل و غیرعملی است زیرا به دانش پدیده شناسی بالایی از فرآیند احتیاج است. در نتیجه در فرآیندهای صنعتی، حسگرهای داده محور محبوبیت پیدا کردند که شرایط واقعی یک واحد فرآیندی را بر مبنای داده‌های اندازه گیری شده ورودی و خروجی فرآیند، توصیف می کنند [۴ و ۵].

محبوب ترین تکنیک‌های مدل سازی خطی که برای حسگرهای نرم داده محور بکار برده می شوند شامل روش تحلیل مؤلفه اصلی^۷ (PCA)، روش کمینه مربعات جزئی^۸ (PLS) می باشد. مدل های بدست آمده از ترکیب روش های PCA و PLS با مدل های رگرسیونی، مدل رگرسیون کمینه مربعات جزئی^۹ (PLSR) و مدل رگرسیون مؤلفه اصلی^{۱۰} (PCR) نامیده می شوند. با این حال، نقاط ضعف این مدل ها نیز در طبیعت خطی و ناتوانی در مدل سازی سیستم های غیرخطی و اغلب پیش بینی ضعیف به دلیل چشم پوشی از رابطه بین ورودی و خروجی سیستم است، در نتیجه به عنوان مرحله پیش پردازش برای سایر روش های آماری به کار می روند [۶ و ۷]. متداول ترین تکنیک های غیرخطی، روش شبکه عصبی مصنوعی^{۱۱} (ANN)، سیستم عصبی - فازی^{۱۲} (NFS) و ماشین بردار پشتیبان^{۱۳} (SVM) می باشند. شبکه عصبی مصنوعی یک روش مشهور در مدل سازی غیرخطی برای حسگرهای نرم داده محور است. روش سیستم عصبی - فازی به موجب شبکه عصبی دارای توانایی یادگیری تطبیق پذیر، قابلیت پردازش موازی و دارای قابلیت لحاظ نمودن داده های دیده نشده است. مشکل اساسی روش NFS افزایش ابعاد است که بالتبع هزینه محاسبات و حافظه مورد نیاز را افزایش می دهد. در سال های اخیر، روش

۱- مقدمه

فرآیندهای صنعتی به دلیل نیاز به کنترل کیفیت محصول، کاهش آلودگی های زیست محیطی و افزایش ایمنی فرآیند نیازمند بهبود سیستم های اندازه گیری و کنترل خود هستند. هنگامی که امکان اندازه گیری متغیرهای مهم فرآیندی که اطلاعات مربوط به کیفیت محصول را ارائه می دهند، با استفاده از تجهیزات ابزار دقیق یا حسگرهای سخت افزاری وجود نداشته و یا اندازه گیری های انجام شده توسط این حسگرها غیر قابل اعتماد و هزینه بر باشد، مشکلات کنترلی و نظارت مستمر بر فرآیند ظاهر می شوند. این متغیرها، متغیرهای دشوار اندازه گیر^۱ نامیده می شوند که در بیشتر موارد توسط تجزیه و تحلیل آزمایشگاهی توام با تأخیر طولانی اندازه گیری می شوند. در این راستا حسگرهای نرم^۲ (حسگرهای استنتاجی) به عنوان یک راه حل جهت بهبود قابلیت اطمینان سیستم های اندازه گیری، نظارت و کنترل فرآیند در حال توسعه هستند. یکی از مهم ترین کاربردهای حسگرهای نرم، پیش بینی برخط^۳ متغیرهای دشوار اندازه گیر بر مبنای متغیرهای فرآیندی آسان اندازه گیر^۴ که توسط حسگرهای سخت افزاری موجود به راحتی اندازه گیری می شوند، است [۱].

حسگرهای نرم، مزایای بسیاری در مقایسه با تجهیزات ابزار دقیق سنتی دارند. این حسگرها با پیش بینی داده ها به صورت برخط، مشکل تحلیل های آزمایشگاهی را برطرف می کنند، بنابراین باعث بهبود عملکرد سیستم کنترل می شوند. همچنین با جمع آوری اطلاعات پنهان در داده ها، دید بهتر و دقیق تری نسبت به فرآیند در اختیار متخصصین قرار می دهند. از آنجایی که قابلیت بکارگیری به صورت موازی با تجهیزات اندازه گیری موجود را دارند، لذا امکان داشتن فرآیند با قابلیت اطمینان بیشتری را فراهم می کنند.

⁸ Partial least squares

⁹ Partial least squares regression

¹⁰ Principal component regression

¹¹ Artificial Neural Network

¹² Neuro-Nuzzy System

¹³ Support Vector Machine

¹ Difficult-to-measure

² Soft sensor

³ Online prediction

⁴ Easy-to-measure

⁵ Model-driven

⁶ Data-driven

⁷ Principal component analysis

(LSSVR) به منظور مدل سازی حسگر نرم برای فرآیند تنسی ایستمن انجام دادند. گریک و همکارانش [۲۳] یک روش تطبیقی برای حسگر نرم برای پیش بینی آنالین و نظارت بر فرآیند براساس ترکیبی از مدل های گوسی ارائه کردند. نتایج بدست آمده با استفاده از فرآیند معیار تنسی ایستمن نشان داد که مدل حسگر پیشنهاد شده، دقت کمتری نسبت به مدل PCA بازگشتی دارد، اما این مدل نیازمند متغیرهای فرآیندی کمتری است. یان و همکاران [۲۴] یک روش جدید مدل سازی حسگر نرم مبتنی بر رگرسیون ترکیبی گاوسی^{۱۴} (GMR) برای پیش بینی کیفیت در فرآیندهای چند مرحله ای و چندفازی معرفی کردند. عملکرد روش پیشنهادی در فرآیند تنسی ایستمن حاکی از عملکرد موثرتر مدل GMR در در پیش بینی کیفیت در مقایسه با مدل ترکیبی گاوسی مبتنی بر کمینه مربعات جزئی^{۱۵} (GMM-PLS) است.

هی و همکاران [۲۵] یک مدل ماشین یادگیری افراطی موازی دوگانه با ضریب همبستگی پیرسون^{۱۶} (PCC) مبتنی بر زیر شبکه مستقل^{۱۷} (PCCIS-DPELM) برای مدل سازی دقیق فرآیندهای شیمیایی پیچیده ارائه کردند. مدل PCCIS-DPELM بر روی فرآیند تنسی ایستمن پیاده گردید و نتایج خطای پیش بینی کمتری نسبت به مدل های DPELM و ELM نشان داد. علاوه بر این، در مقایسه با مدل DPELM و مدل ELM، مدل پیشنهادی با ساختار ساده و پاسخ سریع توانست به عملکرد مطلوب تری دست یابد.

دانگ و کین [۲۶] روش کمینه مربعات جزئی درونی پویا^{۱۸} (DiPLS) را برای مدل سازی پویا فرآیندها ارائه کردند. نتایج پیاده سازی مدل پیشنهادی بر روی فرآیند تنسی ایستمن نشان داد که وقتی ارتباطات پویا در داده ها وجود دارد، مدل سازی داده ها با روش DiPLS در مقایسه با روش مدل سازی PLS کارآمدتر است. کین و همکاران [۲۷] الگوریتم جدید رگرسیون ترکیبی تدریجی وابسته به کیفیت^{۱۹} (QSFR) را به عنوان پایه حسگر نرم ارائه دادند. نتایج این مدل در مقایسه با روش رگرسیون ترکیبی تدریجی (SFR) و PLS بر روی فرآیند تنسی ایستمن پیش بینی های بهتری را گزارش کرد.

گوا و همکاران [۲۸] یک مدل حسگر نرم مبتنی بر رمزگذار خودکار متغیر گاوسی^{۲۰} (GMVAE) تحت چارچوب یادگیری به موقع^{۲۱} (JITL) توسعه دادند که بتواند بر روی داده های صنعتی با ابعاد بالا، غیر خطی و چند وجهی اعمال گردد. اثربخشی روش پیشنهادی از طریق پیاده سازی بر روی فرآیند معیار تنسی ایستمن مورد تایید قرار گرفت. ژانگ و همکاران [۲۹] یک مدل حسگر نرم برای پیش بینی کیفیت مبتنی بر ماشین ماتریس

SVM محبوبیت زیادی بدست آورده است چرا که مشکلات کمینه کردن محلی و بیش برازش^۱ که در شبکه عصبی مصنوعی رخ می دهد را ندارد. مدل رگرسیون بردار پشتیبان^۲ (SVR) سعی می کند یک سطح بهینه به عنوان تابع تصمیم گیرنده در فضایی با ابعاد بالا پیدا کند که بخاطر استفاده از تکنیک های خاص آماری با رگرسیون معمولی تفاوت دارد [۹۰].

به منظور بررسی تغییرات با زمان فرآیندها، تکنیک شناسایی متغیر با زمان مورد استفاده قرار گرفت. این تکنیک بر مبنای شناسایی کمینه مربعات بازگشتی^۳ (RLS) استوار است که با استفاده از بهینه سازی آبر پارامترها^۴ و تکنیک های پالایش^۵ بازگشتی تخمین های بهتری برای پارامترهای متغیر با زمان^۶ (TVP) بدست آورد. از آنجایی که الگوریتم TVP در شناسایی تغییرات بسیار شدید پارامترهای وابسته به حالت در سیستم های غیرخطی ناتوان بود، رویکرد پارامتر وابسته به حالت^۷ (SDP) برای تحلیل رفتار سیستم های غیرخطی ارائه گردید [۱۰]. روش مبنای SDP به صورت تک متغیر حالت بوده، لذا برای رفع مشکل پارامتر با تابعیت چندحالتی، صادقی و توکلی [۱۱ و ۱۲] رویکرد مدل پارامتر وابسته به چندین متغیر حالت^۸ (MSDP) را توسعه داد. در ادامه بیدار و همکاران [۱۳] با بکارگیری متغیر سودمند محلی^۹، یک روش جدید از تخمین پارامتر وابسته به حالت (SDP) به نام روش متغیر سودمند محلی (LIV) ارائه نمودند. این روش که بر مبنای کمینه مربعات وزنی^{۱۰} (WLS) استوار است، می تواند به صورت مستقیم و بدون پارامتری کردن مدل نهایی، برای درون یابی^{۱۱} در مجموعه داده ها استفاده شود. این قابلیت به همراه عدم نیاز به تعداد بالایی از متغیرهای ورودی مدل از مزیت های مهم روش LIV می باشد. در سال های اخیر تکنیک های مدل سازی بر مبنای رویکرد SDP به صورت موفقیت آمیزی در فرآیندهای مختلف صنعتی مورد استفاده قرار گرفتند [۲۰-۱۴].

فرآیند شیمیایی شرکت ایستمن در سال ۱۹۹۳ توسط داوون و وگل [۲۱] برای آزمودن روش های جدید کنترل فرآیند مطرح شد. شرکت شیمیایی ایستمن با شیه سازی فرآیند تنسی ایستمن^{۱۲} (TEP) امکان طراحی و ارزیابی روش های کنترل و نظارت فرآیند را بر روی مدلی از یک فرآیند صنعتی واقعی محقق نمود. پس از آن مطالعات گسترده ای در زمینه های مختلف از جمله طراحی حسگر نرم داده محور بر روی این فرآیند انجام گردید.

جی و سونگ [۲۲] یک مطالعه مقایسه ای از سه روش مختلف یادگیری بهنگام^{۱۳} (JITL) براساس حداقل مربعات جرئی (PLS)، رگرسیون بردار پشتیبان (SVR) و حداقل مربعات رگرسیون بردار پشتیبان

¹² Tennessee Eastman Process¹³ Just in Time Learning¹⁴ Gaussian Mixture Regression¹⁵ Gaussian Mixture Model¹⁶ Pearson Correlation Coefficient¹⁷ Double Parallel Extreme Learning Machine with Pearson Correlation

Coefficient based Independent Subnets

¹⁸ Dynamic inner PLS¹⁹ Quality-relevant slow feature regression²⁰ Gaussian mixture Variational Autoencoder²¹ Just-in-time learning¹ Over-fitting² Support vector regression³ Recursive least squares⁴ Hyper-parameter⁵ Filtering⁶ Time varying parameter⁷ State dependent parameter⁸ Multi state-dependent parameter models⁹ Local instrumental variable¹⁰ Weighted least squares¹¹ Interpolation

ورودی محدودتر و قابلیت پیش‌بینی مطلوب‌تر گردد. لذا، هدف از این پژوهش، استفاده از رویکرد LIV در طراحی حسگر نرم داده محور به منظور پیش‌بینی متغیرهای کیفیت در فرآیند تنسی ایستمن است. به موازات طراحی مدل حسگر، شناسایی متغیرهای تأثیرگذار بر متغیرهای نهایی انجام گرفته تا مدلی با ساختار ساده و خطی ارائه گردد که از لحاظ مدت زمان محاسبات و پردازش مدل در مقایسه با سایر مدل‌های ارائه شده، زمان محاسبات و خطای پیش‌بینی کمتری داشته باشد.

۲- تئوری روش شناسایی مدل‌های LIV

فرض کنید مدل‌سازی مبتنی بر داده برای یک سیستم غیرخطی، یک مدل با پارامترهای وابسته به حالت را در هر نمونه زمانی t ، مانند رابطه زیر پیشنهاد می‌دهد [۱۸ و ۱۳].

$$\begin{cases} y_t = \sum_{i=1}^n a_{i,t} \cdot z_{i,t} + e_t \\ a_{i,t} = a_i(x_{1,i,t}, x_{2,i,t}, \dots, x_{ns_i,i,t}) \end{cases}, \quad \forall t \quad (1)$$

که در آن y_t خروجی مدل، n تعداد پارامترها/رگر سورها، $z_{i,t}$ رگر سور i ام و $a_i(\cdot)$ پارامتر وابسته به حالت i ام است که تابعی از ns_i حالت‌های متناظر $(x_{j,i,t}, j=1,2,\dots,ns_i)$ می‌باشد. زمانی که فرض می‌شود $a_{i,t}$ ثابت باشد و تابع هیچ متغیر حالتی نیست، $ns_i=0$ خواهد بود. واریانس σ^2 خطای ناشناخته سفید با متوسط صفر، توزیع گاوسی و واریانس σ^2 است. در تکنیک LIV مفاهیم مدل‌سازی چندجمله‌ای با مفهوم متغیر سودمند مورد استفاده قرار گرفته‌اند تا یک روش تخمین پارامترها را به طوری که به طور همزمان آن‌ها را تخمین بزنند، بدست دهد. اگر فرض شود که عملکرد هر پارامتر وابسته به حالت نسبت به حالت‌های متناظر آن می‌تواند توسط چند جمله‌ای محلی در فضای متغیر حالت تعریف شود، در نتیجه تخمین محلی پارامترهای این چند جمله‌ای‌ها با بکارگیری روش متغیر سودمند امکان‌پذیر خواهد بود. با این فرض، $a_{i,t}$ می‌تواند به صورت زیر تعریف گردد [۱۸ و ۱۳].

$$a_{i,t} = S_{i,t} \mathbf{A}_{i,t} \quad i=1,2,\dots,n \quad (2)$$

که در آن بردار پارامترهای ثابت محلی چند جمله‌ای توصیف کننده $a_{i,t}$ است و $S_{i,t}$ توسط رابطه (۳) بیان می‌شود.

$$\begin{aligned} S_{i,t} &= S_{0,i,t} \otimes S_{1,i,t} \otimes S_{2,i,t} \otimes \dots \otimes S_{ns_i,i,t}, \quad i=1,2,\dots,n \\ S_{j,i,t} &= \begin{bmatrix} 1 & x_{j,i,t} & x_{j,i,t}^2 & \dots & x_{j,i,t}^{q_{j,i,t}} \end{bmatrix}, \quad j=0,1,2,\dots,ns_i \\ q_{0,i} &= 0 \end{aligned} \quad (3)$$

نماد $\otimes$ ، نماد ضرب تانسوری کرونگر^۴ است و $q_{j,i}$ درجه چند جمله‌ای توصیف کننده $a_{i,t}$ با توجه به $x_{j,i,t}$ است. تعداد پارامترها در $\mathbf{A}_{i,t}$ توسط رابطه زیر بدست می‌آید.

$$p_i = \prod_{j=0}^{ns_i} (1 + q_{j,i}) \quad (4)$$

پشتیبان چند کلاسه^۱ (MSMM) به همراه تکنیک بگینگ-اسمت^۲ و یک روش تحلیل حساسیت براساس تغییر شکل منحنی پیشنهاد نمودند. سپس، حسگر پیشنهادی بر روی فرآیند تنسی ایستمن اعمال گردید و شاخص‌های عملکردی قابل قبولی حاصل گردید.

لی و همکاران [۳۰] یک روش مدلسازی حسگر نرم جدید به نام رگرسیون بردار پشتیبان گروهی نیمه نظارت شده^۳ (SSESVR) توسط ترکیب یادگیری نیمه نظارت شده با یادگیری گروهی پیشنهاد کردند. تأیید اثربخشی و برتری روش SSESVR پیشنهادی بر روی فرآیند تنسی ایستمن انجام شد. یو و همکاران [۳۱] براساس تحلیل علیت و یادگیری پایدار، حسگرهای نرم برای پیش‌بینی پایدار متغیرهای کیفیت و دشوار اندازه گیر پیشنهاد نمودند. اثربخشی روش پیشنهادی در فرآیند تنسی ایستمن نشان داده شد و نتایج خوبی بدست آمد.

به جهت پرداخت به خاصیت غیرخطی بودن، رفتار متغیر با زمان، و کمبود برجسته در داده‌های فرآیندی، وانگ و همکاران [۳۲] یک حسگر نرم مبتنی بر خوشه‌بندی برخط پویا^۴ (ODCSS) برای سیستم‌های با داده نیمه‌نظارت شده صنعتی پیشنهاد کردند. نتایج کاربرد این روش بر روی فرآیند تنسی ایستمن نشان داد که رویکرد حسگر نرم ODCSS پیشنهادی نسبت به حسگرهای نرم متداول در یک محیط یکسان عملکرد بهتری دارد. به منظور مقابله با این مشکلات، کوسول سونگ تاوی و همکاران [۳۳] یک حسگر نرم بر اساس زیر مجموعه‌های ضریب همبستگی تطابق ادغام شده با ماشین یادگیری افراطی آزاد معکوس موازی (CCCS-PIFELM) برای فرآیندهای شیمیایی چند متغیره پیشنهاد کردند. به منظور ارزیابی عملکرد پیش‌بینی رویکرد CCCS-PIFELM، فرآیند معیار تنسی ایستمن به عنوان مطالعه موردی برای پیش‌بینی ترکیبات محصول استفاده شد. با توجه به نتایج شبیه‌سازی، رویکرد CCCS-PIFELM پیشنهادی می‌تواند دقت پیش‌بینی بالاتری را در مقایسه با رویکردهای سنتی به دست آورد. شن و همکاران [۳۴] یک مدل حسگر نرم مبتنی بر رگرسیون رمزگذار خودکار متغیر β خود وزنی^۵ (SW- β -VAER) برای نظارت و اندازه‌گیری فرآیندهای صنعتی با شرایط چند حالتی توسعه دادند مدل پیشنهادی بر روی واحد صنعتی تنسی ایستمن پیاده‌سازی گردید و مقایسه نتایج اثربخشی و برتری آن را نسبت به سایر روش‌ها نشان داد.

همانطور که از ارزیابی مطالعات پیشین بر روی فرآیند تنسی ایستمن مشخص است، در سال‌های اخیر تکنیک‌های متعددی به منظور طراحی حسگر نرم داده محور با هدف پیش‌بینی بر خط و نظارت بر این فرآیند ارائه شده است. با این حال، برای چنین فرآیندهای پیچیده صنعتی، ارائه تکنیک‌های نوآورانه ضروری است. با توجه به قابلیت‌هایی روش شناسایی و مدل‌سازی وابسته به متغیر حالت، انتخاب این روش شناسایی برای تخمین کیفیت اجزاء در فرآیندهای که رفتاری پیچیده و نامشخص دارند، می‌تواند منجر به طراحی و توسعه حسگرهای نرم محور با بکارگیری متغیرهای

^۴ Online-dynamic-clustering-based soft sensor

^۵ Self-weighted β variational autoencoder regression

^۶ Kronecker tensor product

^۱ Multiclass support matrix machine

^۲ Bagging-SMOTE technique

^۳ Semi-supervised ensemble support vector regression

$$\mathbf{P}_k = \hat{\sigma}_k^2 (\mathbf{U}_k^T \mathbf{U}_k) \quad (9-ب)$$

ماتریس وزنی محلی، $\mathbf{W}_{m,k}$ ، برای برخورد با برخی الزامات در مدل می‌تواند به طور کلی تعریف شود. یک تعریف ساده از ماتریس وزنی محلی در تخمین پارامتر وابسته به حالت می‌تواند یک ماتریس قطری باشد که درایه‌های قطری آن مقادیر تابع کرنل متناظر با i امین پارامتر وابسته به حالت در نمونه k ام است. به عنوان نمونه $\mathbf{W}_{m,k}$ به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$\left\{ \begin{aligned} \mathbf{W}_{m,k} &= \text{diag}(K(\Delta_{i,k,t})) \\ \Delta_{i,k,t} &= \sum_{j=1}^{n_{S_i}} \left(\frac{x_{j,i,t} - x_{j,i,k}}{\lambda_{j,i}} \right)^2 \end{aligned} \right\} \quad \left\{ \begin{aligned} \forall t \\ 0 < \sum_{v=1}^{i-1} p_v < m \leq \sum_{v=1}^i p_v \end{aligned} \right. \quad (9)$$

$K(\cdot)$ تابع چگالی کرنل^۱ و $\lambda_{j,i}$ پهنای باند متناظر با $x_{j,i,t}$ است که به عنوان آبر پارامتر^۲ شناخته می‌شود. معیار پهنای باند در مدل‌های LIV نظیر یک شاخص آنالیز حساسیت عمل می‌نماید. به طوری که هر چه میزان پهنای باند بیشتر باشد با به عبارت دیگر به سمت بی‌نهایت میل کند، کرنل هموارتر می‌شود و تقریباً وزن یکسانی به داده‌های کنار هم می‌دهد که نشان دهنده این است که کرنل، تفاوت زیادی بین داده‌ها قائل نمی‌شود. در این حالت خطا زیاد شده و عدم قطعیت پایین می‌آید و میزان نوسان در شناسایی پارامتر کمتر می‌گردد. در مقابل پهنای باند کمتر، به نقطه اوج کرنل وزن بیشتری داده و خطا در آن نقطه را کمینه می‌نماید که سبب بالا رفتن عدم قطعیت می‌گردد. در این حالت میزان نوسان در شناسایی پارامتر بیشتر می‌شود، به همین جهت می‌بایست مقادیر بهینه پهنای باند تعیین گردد. بهینه‌سازی پهنای باندها به دو روش بهینه‌سازی بیشینه احتمال^۳ (ML) و اعتبار سنجی متقابل^۴ قابل انجام است. تابع چگالی کرنل براساس نوع داده‌ها و نحوه تغییرات متغیر حالت می‌تواند به شش فرم تابع یکنواخت^۵ (UF)، تابع اپانچینکوف^۶ (EP)، تابع وزنی-دوگانه^۷ (BW)، تابع وزنی-سه‌گانه^۸ (TW)، تابع مکعبی-سه‌گانه^۹ (TC) و تابع گاوسی نرمال^{۱۰} (NG) در نظر گرفته شود. با جایگزین کردن $\hat{\mathbf{A}}_k$ تخمین زده شده در رابطه (۲)، تخمین پارامتر و کوواریانس آن در نمونه k ام به صورت زیر حاصل می‌گردد [۱۸و۱۳].

$$\left\{ \begin{aligned} \hat{\mathbf{a}}_k &= \mathbf{S}_k \hat{\mathbf{A}} \\ \text{cov}(\hat{\mathbf{a}}_k) &= \mathbf{S}_k \mathbf{P} \mathbf{S}_k^T \end{aligned} \right. \quad (11.10)$$

$\hat{\mathbf{a}}_k$ و $\mathbf{S}_k$ به صورت روابط (۱۲) و (۱۳) بیان می‌شوند که در آن‌ها $\mathbf{0}$ ، بردار صفر است.

تمامی عضوهای $\mathbf{A}_{i,t}$ توابع وابسته به حالت‌های $x_{j,i,t}$ ، $j = 1, 2, \dots, n_{S_i}$ هستند. با جایگزین نمودن از رابطه (۲)، مدل ارائه شده در رابطه (۱) به فرم برداری زیر تبدیل می‌شود.

$$\mathbf{y}_t = \mathbf{z}_t^T \mathbf{A}_t + e_t \quad (5)$$

که در آن $\mathbf{A}_t$ بردار پارامترهای چندجمله‌ای‌های محلی توصیف کننده پارامترهای وابسته به حالت و $\mathbf{z}_t$ بردار جدید رگرورها در نمونه زمانی t است که به صورت زیر تعریف می‌شود [۱۳و۱۸].

$$\mathbf{z}_t = [\mathbf{z}_{1,t} \mathbf{S}_{1,t} \quad \mathbf{z}_{2,t} \mathbf{S}_{2,t} \quad \dots \quad \mathbf{z}_{n,t} \mathbf{S}_{n,t}] \quad (6)$$

با تعریف $\mathbf{Z} = [\mathbf{z}_1^T \quad \mathbf{z}_2^T \quad \mathbf{z}_3^T \quad \dots \quad \mathbf{z}_p^T]^T = [\mathbf{z}_1 \quad \mathbf{z}_2 \quad \dots \quad \mathbf{z}_p]$ که در آن $p = \sum_{i=1}^n p_i$ بیان‌کننده تعداد رگرورها در $\mathbf{z}_t$ یا به صورت معادل برابر تعداد تمام پارامترهای مدل در $\mathbf{A}_t$ است. اگر $\mathbf{y} = [y_1 \quad y_2 \quad y_3 \quad \dots]^T$ باشد، سپس راه حل تخمین IV در رابطه (۵) در نمونه k ام می‌تواند به شکل زیر نوشته شود.

$$\hat{\mathbf{A}}_k = (\mathbf{U}_k^T \mathbf{Z})^{-1} \mathbf{U}_k^T \mathbf{y} \quad (7-الف)$$

$$\mathbf{P}_k = \hat{\sigma}_k^2 (\mathbf{U}_k^T \mathbf{Z})^{-1} (\mathbf{U}_k^T \mathbf{U}_k) (\mathbf{Z}^T \mathbf{U}_k)^{-1} \quad (7-ب)$$

$$\hat{\sigma}_k^2 = \text{var}(\mathbf{y} - \mathbf{Z} \hat{\mathbf{A}}_k) \quad (7-ج)$$

$\mathbf{P}_k$ ماتریس کوواریانس تخمین پارامتر وابسته به حالت است، $\hat{\mathbf{A}}_k$ در نمونه k ام و $\mathbf{U}_k$ همانطور که در رابطه (۸) تعریف شده است، نقش ماتریس IV در آن نمونه را ایفا می‌کند که اصطلاحاً متغیر سودمند محلی (LIV) نامیده می‌شود.

$$\mathbf{U}_k = [\mathbf{U}_{1,k} \quad \mathbf{U}_{2,k} \quad \dots \quad \mathbf{U}_{p,k}] \quad (8)$$

$\mathbf{U}_{m,k}$ متغیر سودمند محلی متناظر با $\mathbf{Z}_m$ برای هر $m = 1, 2, \dots, p$ است. متغیر سودمند ایده‌آل انتخاب شده برای تخمین پارامتر، متغیر سودمندی است که با رگرورهای غیرمتناظر در ارتباط نمی‌باشد. این به این دلیل است که درایه‌های خارج از قطر $\mathbf{U}_k^T \mathbf{Z}$ توسط $\mathbf{U}_k$ برابر صفر قرار داده می‌شود و در نتیجه $\mathbf{U}_k^T \mathbf{Z}$ یک ماتریس قطری خواهد بود و این سبب می‌گردد که تخمین هر پارامتر وابسته به حالت تحت تأثیر تخمین سایر پارامترها قرار نمی‌گیرد. بنابراین تخمین همزمان پارامترها در فضاهای متغیر حالت خودشان بدون نیاز به برگشت متناسب امکان‌پذیر است. با استفاده از ماتریس LIV پیشنهاد شده، پارامترهای تخمین زده شده در رابطه (۷) پس از آن می‌تواند به سادگی زیر فرمول بندی گردد [۱۳و۱۸].

$$\hat{\mathbf{A}}_k = \mathbf{U}_k^T \mathbf{y} \quad (9-الف)$$

⁶ Epanechnikov function

⁷ Bi-Weight function

⁸ Tri-Weight function

⁹ Tri-Cube function

¹⁰ Normal Gaussian function

¹ Kernel Density Function

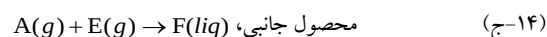
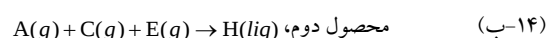
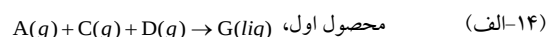
² Hyper parameter

³ Maximum Likelihood

⁴ Cross-Validation

⁵ UniForm function

گازی به عنوان خوراک وارد راکتور می‌شوند و محصولات G و H به صورت مایع در مسیر خروجی تشکیل می‌شود. ماده F نیز به صورت محصول جانبی و اکشن‌ها در فرآیند تولید می‌شود. روابط شیمیایی حاکم بر واکنش‌ها در ادامه بیان شدند.

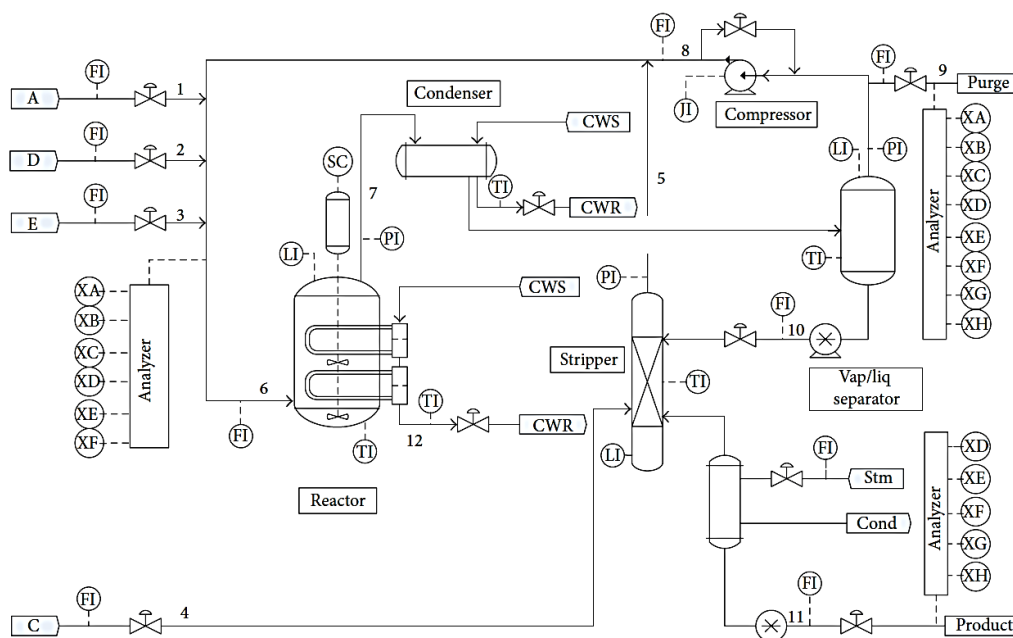


$$\hat{\mathbf{a}}_k = [\hat{a}_{1,k} \quad \hat{a}_{2,k} \quad \cdots \quad \hat{a}_{n,k}]^T \quad (121)$$

$$\mathbf{S}_k = \begin{bmatrix} \mathbf{S}_{1,k} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{S}_{2,k} & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{S}_{n,k} \end{bmatrix} \quad (13)$$

۳- شرح فرآیند تنسی ایستمن

همانطور که در شکل (۱) نشان داده شده است، فرایند تنسی ایستمن شامل پنج واحد عملیاتی اصلی رآکتور^۱، چگالنده^۲، محصول، جداکننده مایع/بخار^۳، کمپرسور^۴ جریان برگشتی و عریان ساز^۵ محصول می‌باشد. در این فرایند مواد واکنش دهنده A، C، D، E و ماده بی اثر B در حالت



شکل ۱. نمودار جریان فزاینده تنفس استمر [۳۵]

G و H که محصولات فرآیند هستند از پایین برج گرفته می‌شوند، هم چنین مواد F و B از بالای برج به صورت بخار برای زدایش^۶ فرستاده می‌شوند. این فرآیند دارای ۴۱ متغیر قابل اندازه‌گیری^۷ یا خروجی‌های فرآیند و ۱۲ متغیر قابل تنظیم^۸ است. مشخصات متغیرهای قابل تنظیم در جدول (۱) آورده شده است.

۱۹ از بین ۴۱ متغیر قابل اندازه‌گیری، ۲۲ متغیر که به صورت (1) XMEAS تا (22) XMEAS معرفی شدند، متغیرهای آسان اندازه‌گیر هستند و در شبیه‌سازی هر ۰/۳ دقیقه یک بار نمونه برداری می‌شوند. در جدول (۲) توصیف این متغیرها آورده شده است. متغیر دیگر که به صورت (23) XMEAS تا (41) XMEAS نشان داده شدند، متغیرهای دشوار

نرخ واکنش‌ها براساس رابط‌های آرنیوس تابعی از دما است. هم‌چنین واکنش‌ها برگشت‌ناپذیر و گرمازا می‌باشند. واکنش تولید محصول G دارای انرژی فعالیت بیشتری نسبت به واکنش تولید محصول H بوده و در نتیجه به دما حساس‌تر است. خوراک فرآیند به صورت گاز و کاتالیست مورد استفاده قابل حل در فاز مایع و غیر فرار است. محصول بصورت فاز گاز رآکتور را ترک کرده و پس از عبور از چگالنده و جداکننده مایع/ بخار، محصولات به صورت فاز مایع از مواد اولیه‌ی تبدیل نشده که به صورت فاز گاز هستند، جدا می‌شوند. جریان گازی مواد اولیه تبدیل نشده قبل از ورود به رآکتور از کمپرسور جریان برگشتی عبور می‌کند. محصولات به برح‌بان‌ساز محصول خوراندن می‌شوند و مواد مورد نظر

⁵ Stripper

6 Purge

⁷ Measurement Variable

⁸ Manipulated Variable

¹ Reactor² Condenser³ Vapor/liquid separator⁴ Compressor

اندازه گیر فرآیند هستند، که توسط آنالیز کروماتوگرافی بر روی خطوط جریان ۶، ۹ و ۱۱ بدست می آیند.

جدول ۱. متغیرهای قابل تنظیم [۲۱]

متغیر	توصیف متغیر
XMV(1)	جریان خوراک D (خط جریان ۲)
XMV(2)	جریان خوراک E (خط جریان ۳)
XMV(3)	جریان خوراک A (خط جریان ۱)
XMV(4)	جریان خوراک A و C (خط جریان ۴)
XMV(5)	شیر کمپرسور برگشتی
XMV(6)	شیر زدایش
XMV(7)	جریان مایع جداساز (خط جریان ۱۰)
XMV(8)	جریان محصول مایع عریان ساز (خط جریان ۱۱)
XMV(9)	شیر بخار عریان ساز
XMV(10)	جریان آب خنک کننده راکتور
XMV(11)	جریان آب خنک کننده کمپرسور
XMV(12)	سرعت همزن

جدول ۲. متغیرهای آسان اندازه گیر [۲۴]

متغیر	واحد	توصیف متغیر
XMEAS(1)	kscmh	خوراک A (خط جریان ۱)
XMEAS(2)	kg h ⁻¹	خوراک D (خط جریان ۲)
XMEAS(3)	kg h ⁻¹	خوراک E (خط جریان ۳)
XMEAS(4)	kscmh	خوراک A و C (خط جریان ۴)
XMEAS(5)	kscmh	جریان برگشتی (خط جریان ۸)
XMEAS(6)	kscmh	نرخ خوراک راکتور (خط جریان ۶)
XMEAS(7)	kPa	فشار راکتور
XMEAS(8)	%	سطح راکتور
XMEAS(9)	°C	دمای راکتور
XMEAS(10)	kscmh	نرخ زدایش (خط جریان ۹)
XMEAS(11)	°C	دمای جداساز محصول
XMEAS(12)	%	سطح جداساز محصول
XMEAS(13)	kPa	فشار جداساز محصول
XMEAS(14)	m ³ h ⁻¹	جریان پایین جداساز محصول (خط جریان ۱۰)
XMEAS(15)	%	سطح عریان ساز
XMEAS(16)	kPa	فشار عریان ساز
XMEAS(17)	m ³ h ⁻¹	جریان پایین عریان ساز (خط جریان ۱۱)
XMEAS(18)	°C	دمای عریان ساز
XMEAS(19)	kg h ⁻¹	جریان بخار عریان ساز
XMEAS(20)	kW	کار کمپرسور
XMEAS(21)	°C	دمای خروجی آب خنک کننده کمپرسور
XMEAS(22)	°C	دمای خروجی آب خنک کننده جداساز

مقادیری که از خطوط جریان ۶ و ۹ بدست می آیند دارای تأخیر زمانی و زمان نمونه برداری ۶ دقیقه ای هستند در حالی که متغیرهای اندازه گیری شده از خط جریان ۱۱ دارای تأخیر زمان نمونه برداری ۱۵ دقیقه هستند. در جدول ۳ توصیف متغیرهای دشوار اندازه گیر آورده شده است. در این پژوهش متغیر XMEAS(29) (غلظت جزء A در خط جریان ۹) و متغیر XMEAS(38) (غلظت جزء E در خط جریان ۱۱) به عنوان متغیرهای خروجی و ۲۲ متغیر آسان اندازه گیر به عنوان ورودی های برای توسعه حسگر نرم در نظر گرفته شدند [۲۱].

جدول ۳. متغیرهای دشوار اندازه گیر [۲۴]

خط جریان	متغیر	واحد	نام ماده مربوطه
۶	XMEAS(23)	%mol	A
۶	XMEAS(24)	%mol	B
۶	XMEAS(25)	%mol	C
۶	XMEAS(26)	%mol	D
۶	XMEAS(27)	%mol	E
۶	XMEAS(28)	%mol	F
۹	XMEAS(29)	%mol	A
۹	XMEAS(30)	%mol	B
۹	XMEAS(31)	%mol	C
۹	XMEAS(32)	%mol	D
۹	XMEAS(33)	%mol	E
۹	XMEAS(34)	%mol	F
۹	XMEAS(35)	%mol	G
۹	XMEAS(36)	%mol	H
۱۱	XMEAS(37)	%mol	D
۱۱	XMEAS(38)	%mol	E
۱۱	XMEAS(39)	%mol	F
۱۱	XMEAS(40)	%mol	G
۱۱	XMEAS(41)	%mol	H

۴- مراحل طراحی حسگر نرم داده محور

۴-۱- انتخاب داده های فرآیند

در مرحله اول می بایست داده های مورد نیاز برای طراحی حسگر نرم داده محور فراهم گردد. در این پژوهش از مجموعه داده معیار^۱ ارائه شده توسط راسل و همکاران [۳۶] برای فرآیند تنسی ایستمن استفاده شده است. این داده ها در شرایط عملیاتی نرمال فرآیند جمع آوری شده اند و شامل ۱۴۶۰ نمونه است. این مجموعه داده به دو بخش؛ بخش اول حاوی ۵۰۰ نمونه داده های آموزش مدل و بخش دوم حاوی ۹۶۰ نمونه داده های آزمون تقسیم شده است.

¹ Benchmark dataset

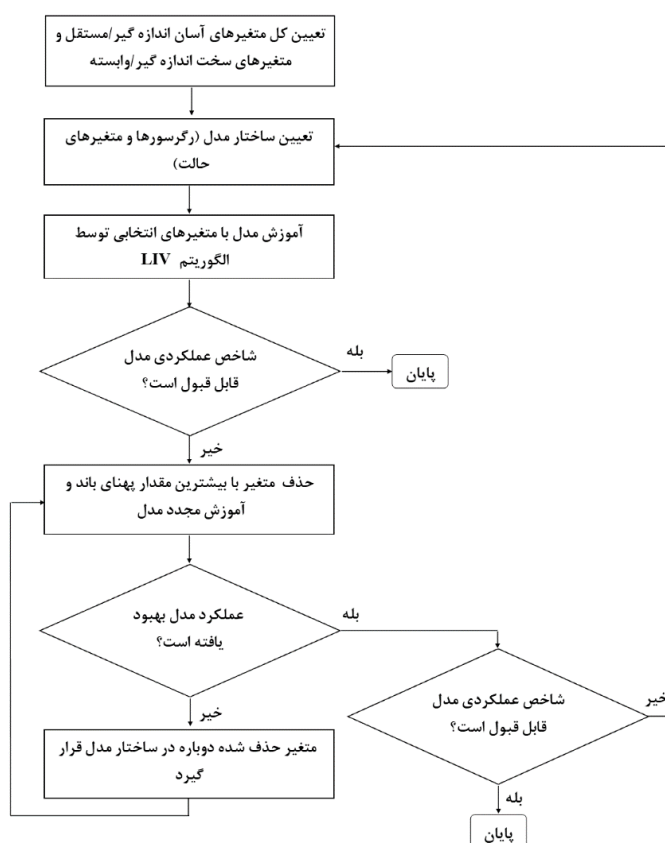
۴-۲- انتخاب متغیرها

در دسترس بودن تمامی متغیرها در پایگاه داده‌های واحد به این معنی نیست که همه آن‌ها بر متغیر خروجی تأثیرگذار هستند. لذا انتخاب دقیق و مناسب متغیرهای ورودی مدل حسگر نرم عملکرد حسگر را بهبود می‌بخشد. به علاوه تعدد متغیرهای ورودی می‌تواند سبب ایجاد بیش‌برازش داده‌های آموزش و کاهش صحت عملکرد پیش‌بینی مدل شود. در نتیجه، انتخاب متغیرها یکی از گام‌های اساسی در توسعه‌ی حسگر نرم داده محور است و به طور مستقیم با دقت پیش‌بینی حسگر ارتباط دارد [۳۷ و ۳۸]. روش مدل‌سازی LIV که به عنوان روش پایه طراحی حسگر نرم در این پژوهش مورد استفاده قرار گرفته است، در مرحله آموزش داده علاوه بر

بدست آوردن مدل حسگر، به طور همزمان قادر به شناسایی متغیرهای تأثیرگذار بر روی متغیر کیفیت خروجی می‌باشد.

۴-۳- شناسایی مدل و تخمین پارامترهای مدل

شناسایی مدل، فرآیند طراحی مدل براساس داده‌های آموزش است. این مرحله شامل انتخاب ساختار مدل و بهینه‌سازی پارامترهای آن است. مراحل آموزش مدل حسگر نرم بر مبنای روش LIV و نحوه‌ی تعیین ساختار و متغیرهای مؤثر آن با استفاده از دیاگرام شماتیک در شکل (۲) نشان داده شده است.



شکل ۲. دیاگرام شماتیک آموزش مدل حسگر نرم براساس روش LIV و تعیین متغیرهای مؤثر

مدل‌ها، می‌توان تابع احتمال را با اضافه کردن پارامترهایی افزایش داد اما این کار باعث بیش‌برازش می‌شود. بیش‌برازش زمانی رخ می‌دهد که مدل آماری بجای کمیت اصلی، نویزها و یا خطاهای تصادفی را توصیف می‌کند. در BIC این مشکل توسط یک جمله جریمه^۴ برطرف می‌شود. معیار اطلاعاتی بیزین به صورت رابطه (۱۵) تعریف می‌شود [۳۹].

$$BIC = -2 \ln(\hat{L}) + k \cdot \ln(n) \quad (1512)$$

در این پژوهش برای انتخاب بهترین مدل از بین ساختارهای بدست آمده از معیار اطلاعاتی بیزین^۱ (BIC) و معیار اطلاعاتی آکائیک^۲ (AIC) براساس تابع لگاریتم بیشینه احتمالات استفاده شده است.

۴-۳-۱- معیار اطلاعاتی بیزین

معیار اطلاعاتی بیزین (BIC) معیاری برای انتخاب مدل از بین تعداد متناهی مدل است. در این روش مدلی که دارای BIC کمتری باشد، ترجیح داده می‌شود. این معیار براساس تابع احتمال^۳ تعیین می‌شود. در جین برازش

³ Likelihood Function

⁴ Penalty Term

¹ Bayesian Information Criterion

² Akaike Information Criterion

یکی دیگر از شاخص‌های کمی، میانگین خطای مطلق^۳ (MAE)

است.

$$MAE = \frac{\sum_{i=1}^N |y_i - \hat{y}_i|}{N} \quad (19)$$

ضریب تعیین^۴، که با R^2 نمایش داده می‌شود، نسبت واریانس متغیر وابسته که قابل پیش‌بینی است را از متغیر(های) مستقل بیان می‌کند. R^2 نشان می‌دهد که به چه میزان نقاط داده پیش‌بینی شده و واقعی با یکدیگر سازگار هستند. ضریب تعیین تعدیل شده^۵ (R_{adj}^2) سازگاری مقادیر را با در نظر گرفتن تعداد ترم‌های موجود در مدل نشان می‌دهد.

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2} \quad (20)$$

$$R_{adj}^2 = 1 - \left[\frac{(1 - R^2)(N - 1)}{(N - k - 1)} \right] \quad (21)$$

که در آن‌ها، N تعداد داده‌ها، k تعداد متغیرهای مستقل موجود در مدل و $\bar{y}$ ، $\hat{y}_i$ ، y_i و $\bar{y}$ به ترتیب مقدار واقعی، مقدار پیش‌بینی شده، میانگین مقادیر y و میانگین مقادیر $\hat{y}$ است.

۵- نتایج و بحث

در ابتدا ۲۲ متغیر آسان اندازه‌گیر به عنوان ورودی‌های مدل حسگر نرم در نظر گرفته شدند و یک روش ترکیبی برای حذف متغیرهای غیر ضروری از مدل با استفاده از روش حذف پس‌رو و معیار پهنای باند بهینه مدل‌های LIV پیشنهاد گردید. در اینجا برای تعیین مقادیر بهینه پهنای باند از روش بهینه‌سازی بیشینه احتمال (ML) استفاده شده است، هم‌چنین نوع تابع کرنل برای بررسی داده‌ها از نوع تابع گاوسی نرمال فرض شده است. همانطور که از دیاگرام ارائه شده در شکل (۲) مشخص است، بعد از تعیین کل متغیرها، باید ساختار مدل یا به عبارت دیگر رگرسورها و متغیرهای حالت تعیین شوند. از آنجایی که مدل‌های LIV به صورت چند ورودی و تک خروجی هستند، در اینجا نیز شناسایی مدل حسگر نرم برای هر متغیر کیفیت به صورت جداگانه انجام شده است. ساختار مدل LIV بر هر خروجی y_1 (غلظت جزء A) و y_2 (غلظت جزء E) مطابق رابطه (۱) در نظر گرفته شده است. در اینجا تمامی ورودی‌های انتخاب شده که همان ۲۲ متغیر آسان اندازه‌گیر فرآیند می‌باشند، به عنوان متغیرهای حالت در یک پارامتر در نظر گرفته شده و رگرسور مدل یک فرض شده است. بنابراین رابطه (۱) برای هر متغیر کیفیت فرآیند به شکل زیر بیان می‌شود:

در این رابطه n تعداد مشاهدات، k تعداد پارامترهای مدل و $\hat{L}$ مقدار تابع بیشینه احتمال مدل است. این روش دارای معایبی نیز است از جمله این که رابطه فوق فقط به‌ازای نمونه‌هایی که در آن‌ها اندازه نمونه n بسیار بزرگتر از تعداد پارامترهای k است، معتبر است [۴۰].

۴-۳-۲- معیار اطلاعاتی آکائیک

معیار اطلاعاتی آکائیک (AIC) اندازه‌ای از کیفیت نسبی مدل‌های آماری برای یک مجموعه داده است. با وجود یک سری از مدل‌ها برای داده‌ها AIC کیفیت هر مدل را نسبت به دیگر مدل‌ها برآورد می‌کند. در تئوری اطلاعات AIC برآوردی نسبی از اطلاعات از دست‌رفته در اثر استفاده از یک مدل موجود برای فرآیند داده‌ها، پیشنهاد می‌کند. برای انجام این کار از مقایسه بین خوبی برازش مدل و پیچیدگی مدل استفاده می‌شود. نکته اینجاست که AIC معیاری برای کیفیت مطلق مدل ندارد، به طور مثال اگر تمامی مدل‌ها به‌طور ضعیفی برازش داده شده باشند، AIC نمی‌تواند هشدار در این زمینه بدهد. مقدار AIC طبق رابطه (۱۶) محاسبه می‌شود [۴۱ و ۴۲].

$$AIC = 2k - 2\ln(\hat{L}) \quad (1613)$$

در اینجا نیز k تعداد پارامترهای مدل و $\hat{L}$ مقدار تابع بیشینه احتمال مدل است. با وجود تعدادی مدل پیشنهادی، مدلی ارجح است که کمترین مقدار AIC را داراست.

۴-۴- اعتبار سنجی مدل

به منظور اعتبارسنجی مدل شناسایی شده و بررسی عملکرد آن معیارهای آماری متعددی مورد استفاده قرار گرفت است که در ادامه به آن‌ها اشاره شده است [۴۳]. همبستگی پیرسون^۱ - متداول‌ترین معیار اندازه‌گیری همبستگی در آمار - که همبستگی بین مقادیر مشاهده شده و پیش‌بینی شده را ارزیابی می‌کند و توسط رابطه زیر بیان می‌شود:

$$R = \frac{\sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - \bar{\hat{y}})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - \bar{\hat{y}})^2 \sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2}} \quad (1714)$$

اعتبارسنجی کمی مدل هم‌چنین می‌تواند با اندازه‌گیری جذر میانگین مربع خطا^۲ (RMSE) که متوسط مربع فاصله بین مقدار واقعی و مقدار پیش‌بینی شده توسط مدل را اندازه‌گیری می‌کند، تعیین گردد.

$$RMSE = \sqrt{\sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2 / N} \quad (1815)$$

⁴ Coefficient of determination

⁵ Adjusted coefficient of determination

¹ Pearson correlation

² Root mean squares error

³ Mean absolute error

می‌شود. در نهایت، پس از چندین مرحله تکرار روش حذف پس‌رو، ساختار مدل با بهترین شاخص‌های عملکردی برای هر دو کیفیت اجزاء بدست می‌آید.

مدل‌های LIV برای پیش‌بینی غلظت جزء A بر طبق الگوریتم شکل ۲ با استفاده از روش سعی و خطا و حذف پس‌رو ساخته شدند که نتایج پیش‌بینی حاصل از مدل‌های آموزش داده شده در هر مرحله با شاخص عملکردی و معیارهای AIC و BIC در جدول ۴ آورده شده است. در هر مرحله با توجه به شاخص‌های عملکردی بدست آمده از نتایج پیش‌بینی مدل مشخص می‌شود که متغیر حذف شده تأثیر قابل توجهی بر میزان دقت مدل دارد یا خیر. در صورتی که دقت مدل با حذف متغیر انتخاب شده به شدت کاهش یابد، وجود آن متغیر در ساختار مدل الزامی است.

$$y_{1,t} = a_{1,t} \{X_1, X_2, X_3, \dots, X_{22}\} \times 1 + e_t \quad (22)$$

$$y_{2,t} = a_{2,t} \{X_1, X_2, X_3, \dots, X_{22}\} \times 1 + e_t \quad (23)$$

شناسایی مدل برای هر کدام از متغیرهای خروجی به صورت جداگانه و بر طبق مراحل بیان شده در الگوریتم شکل ۲ انجام گرفت. در هر مرحله پهنای باند ($\lambda_{j,i}$) متناظر با هر متغیر حالت توسط روش بهینه‌سازی بیشینه احتمال تعیین گردید. سپس متغیرهای حالتی که مقدار پهنای باند بدست آمده آن‌ها عدد بسیار بزرگی است یا در مقایسه با مقیاس سایر متغیرهای حالت بزرگ باشد، از مجموعه متغیرهای حالت حذف گردید و دوباره مدل بر مبنای مجموعه متغیرهای حالت جدید آموزش داده شد. درجه چندجمله‌ای محلی برای هر متغیر حالت صفر در نظر گرفته شده است یا به عبارت دیگر نحوه تغییرات متغیر حالت به صورت محلی ثابت فرض

جدول ۴. شاخص‌های عملکردی مدل‌های ارائه شده بر روی داده‌های آموزش برای پیش‌بینی غلظت جزء A

شماره	متغیرهای حالت انتخاب شده	تعداد متغیرها	R ²	RMSE	ln(L)	AIC	BIC
۱	$X_1, X_2, X_3, X_4, X_5, X_6, X_7, X_8, X_9, X_{10}, X_{11}, X_{12}, X_{13}, X_{14}, X_{15}, X_{16}, X_{17}, X_{18}, X_{19}, X_{20}, X_{21}, X_{22}$	۲۲	۱	$2/6 \times 10^{-10}$	-۱/۷۹	۴۷/۵۸	۱۴۰/۳
۲	$X_1, X_2, X_4, X_6, X_7, X_8, X_9, X_{10}, X_{11}, X_{12}, X_{13}, X_{14}, X_{17}, X_{19}, X_{20}, X_{21}$	۱۶	۱	۰/۰۰۴۳	-۱/۷۳۲۹	۳۵/۴۶	۱۰۲/۹
۳	$X_1, X_2, X_6, X_7, X_9, X_{10}, X_{11}, X_{12}, X_{13}, X_{14}, X_{17}, X_{20}, X_{21}$	۱۳	۱	۰/۰۲۶۴	-۱/۷۳۲۲	۲۹/۴۶	۸۴/۲۵
۴	$X_1, X_2, X_6, X_7, X_9, X_{10}, X_{11}, X_{12}, X_{13}, X_{14}, X_{17}, X_{20}$	۱۲	۱	۰/۰۱۷۰	-۱/۷۴۳۰	۲۷/۴۸	۷۸/۰۶
۵	$X_1, X_2, X_6, X_7, X_9, X_{10}, X_{11}, X_{12}, X_{17}, X_{20}$	۱۰	۰/۹۹۹۹	۰/۱۲۹۲	-۱/۴۴۶۴	۲۲/۸۹	۶۵/۰۳
۶	$X_1, X_2, X_6, X_7, X_9, X_{11}, X_{12}, X_{17}, X_{20}$	۹	۱	۰/۱۰۰۲	-۱/۴۴۷۴	۲۰/۸۹	۵۸/۸۲
۷	$X_1, X_2, X_7, X_9, X_{11}, X_{12}, X_{17}, X_{20}$	۸	۱	۰/۱۲۷۰	-۱/۳۸	۱۸/۷۷	۵۲/۴۸
۸	$X_1, X_2, X_7, X_{11}, X_{12}, X_{17}, X_{20}$	۷	۱	۰/۱۰۷۶	-۱/۴۵	۱۶/۹	۴۶/۴۱
۹	$X_1, X_2, X_7, X_{11}, X_{20}$	۵	۰/۹۹۹۴	۰/۱۲۸۲	-۱/۴۳۷۶	۱۲/۸۷	۳۳/۹۴
۱۰	X_1, X_7, X_{11}, X_{20}	۴	۰/۹۹۹۳	۰/۱۲۷۹	-۱/۴۳۷۷	۱۰/۸۷	۲۷/۷۳
۱۱	X_1, X_7, X_{20}	۳	۰/۸۲۸۶	۰/۱۵۷۵	-۱/۳۹۹۰	۸/۷۹	۲۱/۴۳

نرخ خوراک A در خط جریان ۱ (X_1)، فشار جریان‌ساز (X_{16}) و کار کمپرسور (X_{20}) به عنوان تأثیرگذارترین متغیرها در پیش‌بینی غلظت جزء E در ساختار مدل باقی ماندند. مشخصات مدل‌های انتخاب شده برای حسگر نرم، با پهنای باند بهینه نهایی در جدول ۶ آورده شده است. همانطور که مشخص است از بین ۲۲ متغیر آسان اندازه‌گیر که به عنوان ورودی‌های اولیه مدل حسگر نرم انتخاب شدند، تنها ۳ متغیر آسان اندازه‌گیر برای پیش‌بینی غلظت جزء A و غلظت جزء E بر مبنای تکنیک LIV کافی است.

در این حالت، بهترین مدل بدست آمده با توجه به شاخص‌های AIC و BIC، مدل ارائه شده در ردیف ۱۱ جدول ۴ است که با رنگ خاکستری متمایز شده است. در این حالت نرخ خوراک A در خط جریان ۱ (X_1)، فشار رآکتور (X_7) و کار کمپرسور (X_{20}) به عنوان تأثیرگذارترین متغیرهای حالت برای پیش‌بینی غلظت جزء A در ساختار مدل باقی ماندند. در ادامه با استفاده از روش سعی و خطا و حذف پس‌رو مدل‌های LIV برای پیش‌بینی غلظت جزء E نیز ساخته شدند. نتایج پیش‌بینی مدل‌های ارائه شده با محاسبه شاخص عملکردی و معیارهای AIC و BIC در جدول ۵ آورده شده است. در این حالت مدل ردیف ۱۹ که با رنگ خاکستری متمایز شده است، با توجه به اینکه دارای پایین‌ترین مقدار AIC و BIC است، به عنوان مطلوب‌ترین مدل انتخاب می‌شود. در این حالت

جدول ۵. شاخص های عملکردی مدل های ارائه شده بر روی داده های آموزش برای پیش بینی غلظت جزء E

شماره	متغیرهای حالت انتخاب شده	تعداد متغیرها	R^2	RMSE	$\ln(\hat{L})$	AIC	BIC
۱	$X_1, X_2, X_3, X_4, X_5, X_6, X_7, X_8, X_9, X_{10}, X_{11}, X_{12}, X_{13}, X_{14}, X_{15}, X_{16}, X_{17}, X_{18}, X_{19}, X_{20}, X_{21}, X_{22}$	۲۲	۱	$1/1 \times 10^{-1}$	-۴/۹۲۴۴	۵۳/۸۴	۱۴۶/۵۷
۲	$X_1, X_2, X_4, X_5, X_6, X_7, X_8, X_9, X_{10}, X_{11}, X_{12}, X_{13}, X_{14}, X_{15}, X_{16}, X_{17}, X_{18}, X_{19}, X_{20}, X_{21}$	۲۰	۱	۰/۰۰۱۷	-۴/۸۰۸۸	۴۹/۶۱	۱۳۳/۹۰
۳	$X_1, X_2, X_4, X_5, X_6, X_8, X_9, X_{10}, X_{11}, X_{12}, X_{13}, X_{14}, X_{15}, X_{16}, X_{17}, X_{18}, X_{19}, X_{20}, X_{21}$	۱۹	۱	۰/۰۰۳۴	-۴/۶۲۳۹	۴۷/۲۴	۱۲۷/۳۲
۴	$X_1, X_2, X_4, X_5, X_6, X_8, X_9, X_{10}, X_{11}, X_{12}, X_{14}, X_{15}, X_{16}, X_{17}, X_{18}, X_{19}, X_{20}, X_{21}$	۱۸	۱	۰/۰۰۲۸	-۴/۶۲۹۳	۴۵/۲۵	۱۲۱/۱۲
۵	$X_1, X_2, X_4, X_6, X_8, X_9, X_{10}, X_{11}, X_{12}, X_{14}, X_{15}, X_{16}, X_{17}, X_{18}, X_{19}, X_{20}, X_{21}$	۱۷	۱	۰/۰۰۲	-۴/۸۴۹۵	۴۳/۶۹	۱۱۵/۳۴
۶	$X_1, X_2, X_4, X_6, X_8, X_9, X_{10}, X_{11}, X_{12}, X_{14}, X_{15}, X_{16}, X_{17}, X_{18}, X_{20}, X_{21}$	۱۶	۱	$2/94 \times 10^{-4}$	-۴/۷۲۲۵	۴۱/۴۴	۱۰۸/۸۷
۷	$X_1, X_4, X_6, X_8, X_9, X_{10}, X_{11}, X_{12}, X_{14}, X_{15}, X_{16}, X_{17}, X_{18}, X_{20}, X_{21}$	۱۵	۰/۹۹۹۴	۰/۰۰۳	-۴/۶۷۷۸	۳۹/۳۵	۱۰۲/۵۷
۸	$X_1, X_4, X_6, X_8, X_9, X_{11}, X_{12}, X_{14}, X_{15}, X_{16}, X_{17}, X_{18}, X_{20}, X_{21}$	۱۴	۰/۹۷۴۳	۰/۰۰۳۸	-۴/۶۱۰۲	۳۷/۲۲	۹۶/۲۲
۹	$X_1, X_4, X_6, X_8, X_9, X_{11}, X_{12}, X_{14}, X_{15}, X_{16}, X_{17}, X_{18}, X_{20}$	۱۳	۱	$7/48 \times 10^{-5}$	-۴/۷۰۷۳	۳۵/۴۱	۹۰/۲۰
۱۰	$X_1, X_4, X_6, X_9, X_{11}, X_{12}, X_{14}, X_{15}, X_{16}, X_{17}, X_{18}, X_{20}$	۱۲	۰/۸۹۰۲	۰/۰۰۱۴	-۴/۷۰۱۵	۳۳/۴۰	۸۳/۹۷
۱۱	$X_1, X_4, X_6, X_9, X_{11}, X_{14}, X_{15}, X_{16}, X_{17}, X_{18}, X_{20}$	۱۱	۰/۹۹۵۳	$5/08 \times 10^{-4}$	-۴/۷۴۸۴	۳۱/۴۹	۷۷/۸۵
۱۲	$X_1, X_4, X_6, X_{11}, X_{14}, X_{15}, X_{16}, X_{17}, X_{18}, X_{20}$	۱۰	۰/۸۲۵۰	۰/۰۰۵۲	-۴/۶۶۷۷	۲۹/۳۳	۷۱/۴۸
۱۳	$X_1, X_4, X_6, X_{11}, X_{14}, X_{16}, X_{17}, X_{18}, X_{20}$	۹	۰/۹۷۵۵	۰/۰۰۱۱	-۴/۷۲۱۶	۲۷/۴۴	۶۵/۳۷
۱۴	$X_1, X_4, X_6, X_{11}, X_{14}, X_{16}, X_{18}, X_{20}$	۸	۰/۸۳۳۹	۰/۰۰۰۵	-۴/۶۶۸۰	۲۵/۳۳	۵۹/۰۵
۱۵	$X_1, X_6, X_{11}, X_{14}, X_{16}, X_{18}, X_{20}$	۷	۰/۹۱۰۶	۰/۰۰۳۹	-۴/۵۸۴۶	۲۳/۱۶	۵۲/۶۷
۱۶	$X_1, X_6, X_{11}, X_{16}, X_{18}, X_{20}$	۶	۰/۸۹۹۹	۰/۰۰۴۳	-۴/۶۸۴۴	۲۱/۳۶	۴۶/۶۵
۱۷	$X_1, X_{11}, X_{16}, X_{18}, X_{20}$	۵	۰/۸۵۷۰	۰/۰۰۴۸	-۴/۶۷۱۰	۱۹/۳۴	۴۰/۴۱
۱۸	$X_1, X_{16}, X_{18}, X_{20}$	۴	۰/۸۲۶۲	۰/۰۰۴۹	-۴/۶۶۷۱	۱۷/۳۳	۳۴/۱۹
۱۹	X_1, X_{16}, X_{20}	۳	۰/۸۴۱۱	۰/۰۰۵۰	-۴/۴۵۵۱	۱۴/۷۰	۲۷/۳۴

جدول ۶. متغیرهای حالت انتخاب شده و پهنای باند متناظر برای

مدل های بدست آمده

متغیر کیفیت	متغیرهای حالت انتخاب شده	پهنای باند بهینه متناظر با هر متغیر
غلظت A	X_1, X_7, X_{20}	۰/۰۰۸۲ ۰/۰۸۹۱ ۰/۰۷۸۳
غلظت E	X_{20}, X_1, X_{16}	۰/۰۱۲۸ ۰/۰۵۲۵ ۰/۰۶۷۵

مجموعه داده های آموزش در جدول ۸ آورده شده است. همچنین نتایج پیش بینی این مدل های آموزش داده شده در شکل ۴ نشان داده شده است. از مقایسه مقادیر RMSE و MAE در جدول ۷ و ۸ مشخص می شود که عملکرد پیش بینی مدل های حسگر نرم بر روی مجموعه داده های آزمون افت ناچیزی پیدا کرده است.

جدول ۷. شاخص های عملکردی مدل های L1V بر روی مجموعه داده آموزش

متغیر کیفیت خروجی	شاخص عملکردی داده های آموزش			
	MAE	RMSE	R^2_{adj}	R^2
غلظت جزء A در خط جریان ۹	۰/۱۱۱۹	۰/۱۵۷۵	۰/۸۲۷۵	۰/۸۲۸۶
غلظت جزء E در خط جریان ۱۱	۰/۰۰۳۱	۰/۰۰۵۰	۰/۸۴۰۱	۰/۸۴۱۱

به منظور مقایسه کمی، نتایج عملکرد مدل های ردیف ۴، ۸ و ۱۱ به منظور پیش بینی غلظت جزء A ساخته شدند، بر روی داده های آزمون (۹۶۰ داده) در جدول ۹ آورده است.

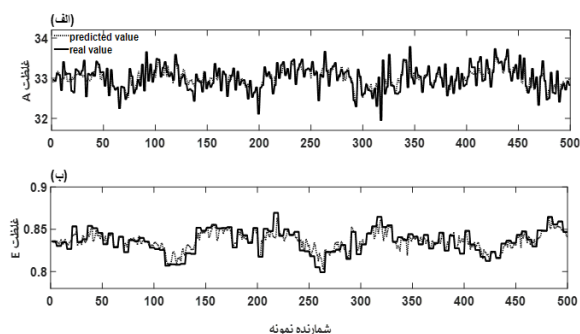
به منظور بررسی کمی، شاخص های عملکردی مدل های پیشنهاد شده بر روی مجموعه داده آموزش در جدول ۷ آمده است. مقادیر R^2_{adj} بدست آمده مشابه مقادیر R^2 هستند که نشان دهنده این است که مدل بیش برآزشی بر روی داده ها انجام نداده و متغیرهای غیر ضروری نیز در ساختار مدل اضافه نشده است، زیرا در این صورت اختلاف بین این دو شاخص افزایش می یافت. بعلاوه بر مبنای شاخص RMSE و MAE نیز دقت پیش بینی مدل های حاصله اثبات می شود.

نتایج حاصل از پیش بینی آن ها بر روی داده های آموزش در شکل ۳ آورده شده است. با نگاه کلی به مدل های آموزش داده شده می توان دریافت مدل های منتخب برای پیش بینی غلظت جزء A و غلظت جزء E رفتار داده ها را به خوبی دنبال می کنند. نتایج اعتبارسنجی مدل بر روی یک

جدول ۹. شاخص های عملکردی مدل های ارائه شده بر روی داده های آزمون

برای پیش بینی غلظت جزء A

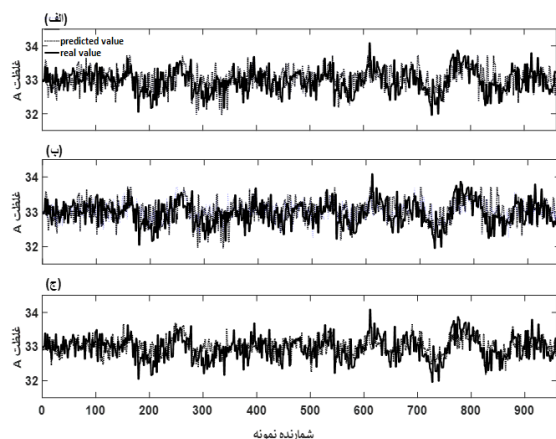
متغیرهای حالت انتخاب شده	تعداد	R^2	RMSE	MAE
۴ $X_1, X_2, X_6, X_7, X_9, X_{10}, X_{11}, X_{12}, X_{13}, X_{14}, X_{17}, X_{20}$	۱۲	۰/۸۳۹۴	۰/۳۷۸۵	۰/۲۹۶۹
۸ $X_1, X_2, X_7, X_{11}, X_{12}, X_{17}, X_{20}$	۷	۰/۹۹۹۹	۰/۳۳۴۸	۰/۲۶۶۲
۱۱ X_1, X_7, X_{20}	۳	۱	۰/۳۱۹۱	۰/۲۵۱۵



شکل ۳. نتایج پیش بینی غلظت با استفاده از حسگر نرم بر روی مجموعه داده آموزش: الف) جزء A؛ ب) جزء E

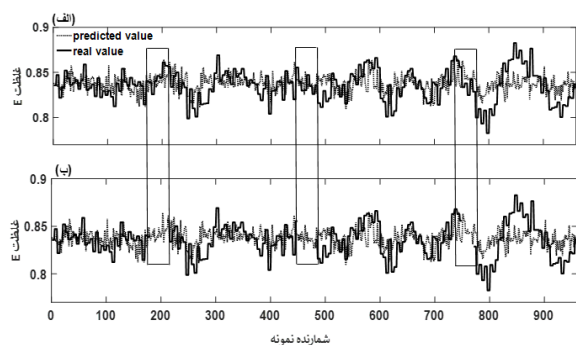
جدول ۸. شاخص های عملکردی حسگرهای نرم مبتنی بر LIV بر روی مجموعه داده آزمون

شاخص عملکردی مجموعه داده آزمون	متغیر کیفیت خروجی			
	MAE	RMSE	R^2_{adj}	R^2
غلظت جزء A در خط جریان ۹	۰/۲۵۱۵	۰/۳۱۹۱	۱	۱
غلظت جزء E در خط جریان ۱۱	۰/۰۱۳۶	۰/۰۱۷۴	۰/۹۷۳۷	۰/۹۷۳۹



شکل ۵. نتایج پیش بینی مدل های LIV برای غلظت A بر روی مجموعه داده آزمون: الف) مدل ردیف ۴؛ ب) مدل ردیف ۸؛ ج) مدل ردیف ۱۱

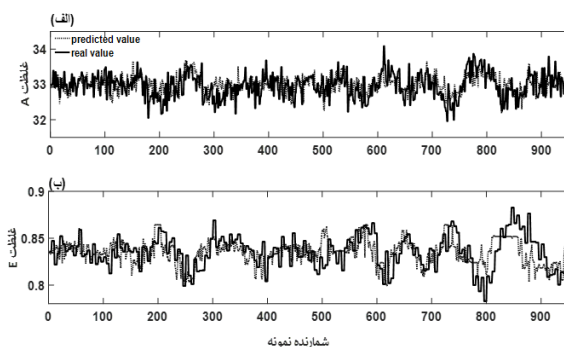
به منظور ارزیابی قابلیت و توانمندی حسگر نرم طراحی شده به منظور پیش بینی غلظت جزء E، آزمایشی ترتیب داده شده که در طی آن به صورت تصادفی برخی از قسمت های داده های آزمون را با مقادیر از دست رفته جایگزین کرده و سپس نتایج پیش بینی مدل بر روی این مجموعه داده جدید نیز بررسی گردید. نتایج حاصل از این بررسی در شکل ۶-ب آورده شده است. همانطور که در شکل ۶ نشان داده شده است، حسگر نرم قادر به پیش بینی کیفیت، در بخش هایی که در آن مجموعه داده آزمون حاوی داده های از دست رفته تصادفی است (با کادر مستطیلی مشخص شده) خواهد بود، که این قابلیت حسگر نرم را در شرایط عدم حضور داده نشان می دهد.



شکل ۶. مقایسه نتایج پیش بینی غلظت E بر روی داده های آزمون: الف) بدون مقادیر از دست رفته؛ ب) با مقادیر از دست رفته

مقایسه نتایج عملکردی مدل های بدست آمده بر داده های آزمون حاکی از صحت انتخاب مدل ردیف ۱۱ به عنوان پایه حسگر نرم می باشد. این ساختار در مقایسه با سایر ساختارهای بررسی شده تنها از ۳ متغیر حالت برای پیش بینی متغیر کیفیت خروجی استفاده می کند و همچنین دارای کمترین مقدار RMSE و MAE نسبت به دو مدل دیگر است.

همچنین نتایج حاصل از پیش بینی مدل های ردیف ۴ و ۸ با نتایج پیش بینی مدل انتخاب شده به عنوان پایه حسگر نرم بر روی مجموعه داده های آزمون مقایسه گردید. همانطور که در شکل ۵-الف و ۵-ب نشان داده شده، مدل ردیف ۴ و ۸ در بسیاری از نقاط مخصوصاً در نقاط انحرافی، پیش بینی ضعیفی در مقایسه با داده های واقعی ارائه کرده اند. در مقایسه با دو مورد دیگر مدل انتخاب شده ردیف ۱۱ توانسته روند متغیر کیفیت خروجی را بهتر ردیابی کند و عملکرد پیش بینی دقیق تری را نشان می دهد (شکل ۵-ج).



شکل ۴. نتایج پیش بینی غلظت با استفاده از حسگرهای نرم بر روی مجموعه داده آزمون: الف) جزء A؛ ب) جزء E

پیشنهادی با استفاده از تکنیک متغیر سودمند محلی (LIV) ارائه گردیده است. این تکنیک علاوه بر اینکه ساختاری ساده دارد و نسبت به سایر روش های مدل سازی به تعداد متغیرهای ورودی کمتری نیازمند است، قابلیت شناسایی متغیرهای تأثیرگذار بر روی متغیرهای هدف را نیز داراست. ساختار مدل حسگر نرم مبتنی بر LIV در بخش آموزش مدل معیارهای اطلاعاتی بیزین (BIC) و آکائیک (AIC) را برای غلظت جزء A به ترتیب ۸/۷۹ و ۲۱/۴۳ گزارش نمود. همچنین معیارهای اطلاعاتی بیزین (BIC) و آکائیک (AIC) برای ساختار مدل LIV منتخب در پیش بینی جزء E به ترتیب ۱۴/۷۰ و ۲۷/۳۴ بدست آمد. مدل حسگر نرم ارائه شده به منظور پیش بینی غلظت جزء A توانست با سه متغیر به عنوان ورودی مدل و خطای RMSE ۰/۳۱۹۱، متغیر غلظت را پیش بینی نماید. مقدار خطای پیش بینی (RMSE) برای غلظت جزء A در مدل LIV نسبت به مدل های کمینه مربعات جزئی (PLS)، رگرسیون ترکیبی (SFR) و رگرسیون ترکیبی تدریجی وابسته به کیفیت (QSFR) با اختلاف جزئی به ترتیب ۰/۲۳، ۴/۲۴، ۹/۲۴ و ۱۷/۲۹ بیشتر می باشد در صورتی که تعداد متغیرهای ورودی مدل LIV نسبت به مدل های ذکر شده به میزان ۸۵٪ کاهش یافته است.

مدل حسگر نرم ارائه شده به منظور پیش بینی غلظت جزء E توانست متغیر خروجی را با سه متغیر ورودی مدل حسگر نرم و خطای RMSE ۰/۱۷۴ پیش بینی کند. همچنین مقدار خطای پیش بینی (RMSE) برای غلظت جزء E را نسبت به روش های کمینه مربعات جزئی (PLS) و کمینه مربعات جزئی درونی پویا (DiPLS) به ترتیب به میزان ۹۸/۱۸٪ و ۹۷/۶٪ کاهش داده است. مدل های حسگر نرم ارائه شده بر مبنای روش LIV توانستند در شرایطی که مجموعه داده های فرآیند حاوی مقادیر از دست رفته باشند، متغیر هدف را با عملکرد مطلوب پیش بینی کنند.

مراجع

- [1] Fortuna L., Graziani S., Rizzo A., Xibilia M.G., Soft sensors for monitoring and control of industrial processes, *Springer, New York*, pp. 2-5, 2007.
- [2] Khatibisepehr S., Huang B., Domlan E., Soft sensor solutions for control of oil sands processes. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, Vol. 91. pp., 1416-1426, 2013.
- [3] Khatibisepehr S., Bayesian Solutions to Multi-Model Inferential Sensing Problem, *University of Alberta, Doctor of Philosophy*, 2013.
- [4] Li H., Yu D., Braun J., A review of virtual sensing technology and application in building systems, *HVAC&R Research*, Vol. 17, no. 5, pp. 619-645, 2011.
- [5] Kadlec P., Gabrys B., Strandt S., Data-driven soft sensors in the process industry, *Computers and Chemical Engineering*, Vol. 33, pp. 795-814, 2009.

جدول ۱۰ و ۱۱ شاخص های عملکردی حسگر نرم پیشنهادی را با سایر تکنیک های مدل سازی برای پیش بینی غلظت جزء A و E مقایسه می کند. همانطور که از جدول ۱۰ مشخص می شود، مقادیر RMSE برای تکنیک های حسگر نرم PLS، SFR و QSFR کمی از روش پیشنهادی ارائه شده بهتر است. اما با مقایسه تعداد متغیرهای ورودی لازم برای این سه روش (۲۲ متغیر ورودی) و روش LIV (۳ متغیر ورودی) مشخص می شود که پیچیدگی مدل بدست آمده و حجم محاسبات لازم برای رسیدن به چنین دقتی بالا می باشد. به بیان دیگر، تعداد متغیرهای ورودی مدل LIV به میزان حدود ۸۵٪ نسبت به روش های ذکر شده در جدول ۱۰ کاهش یافته است. علاوه بر این مدل ارائه شده دارای R^2 بیشتری به نسبت دیگر مدل هاست که نشان می دهد داده های پیش بینی و واقعی در این مدل دارای سازگاری بیشتری هستند.

جدول ۱۰. شاخص های عملکردی مدل های حسگر نرم فرآیند تنسی ایستمن برای

پیش بینی غلظت جزء A

نویسنده	نوع مدل	تعداد متغیرهای ورودی	R^2	RMSE
کین و همکاران [۳۲]	PLS	۲۲	۰/۵۲۷۱	۰/۳۰۵۶
	SFR	۲۲	۰/۶۰۴۰	۰/۲۸۹۶
	QSFR	۲۲	۰/۶۶۹۴	۰/۲۶۳۹
پژوهش فعلی	LIV	۳	۱	۰/۳۱۹۱

با توجه به مقادیر ارائه شده در جدول ۱۱ نیز می توان نتیجه گرفت که مدل LIV دارای بیشترین مقدار RMSE در مقایسه روش های ذکر شده است. همچنین مدل LIV در مقایسه با دیگر تکنیک های مدل سازی از دقت بیشتر و تعداد متغیرهای ورودی کمتری برخوردار است که این سبب سادگی مدل و کاهش بار محاسباتی در مدل سازی می شود. به عنوان نمونه میزان افزایش دقت مدل (شاخص RMSE) بدست آمده توسط روش LIV نسبت به مدل های PLS و DiPLS به ترتیب ۹۸/۱۸٪ و ۹۷/۶٪ گزارش شده است.

جدول ۱۱. شاخص های عملکردی مدل های حسگر نرم فرآیند تنسی

ایستمن برای پیش بینی غلظت جزء E

نویسنده	نوع مدل	تعداد متغیرهای ورودی	R^2	RMSE
دانگ و کین [۳۱]	PLS	۳۳	-	۰/۹۵۹۰
	DiPLS	۳۳	-	۰/۷۴۱۸
پژوهش فعلی	LIV	۳	۰/۹۷۳۹	۰/۱۱۷۴

۶- نتیجه گیری

در این پژوهش طراحی حسگر نرم داده محور به منظور پیش بینی کیفیت در فرآیند تنسی ایستمن بر مبنای روش شناسایی تفسیر پذیر داده و تکنیک مدل سازی وابسته به حالت مورد بررسی قرار گرفت. حسگر نرم

- instrumental variable (LIV) technique, *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, Vol.84, pp. 49-59, 2018.
- [19] Bidar B., Shahraki F., Sadeghi J., Khalilipour M.M., Soft sensor modeling based on multi-state-dependent parameter models and application for quality monitoring in industrial sulfur recovery process, *IEEE Sensors Journal*, Vol.18, No.11, pp. 4583-4591, 2018.
- [20] Roja Parvizi Moghadam, Jafar Sadeghi, Farhad Shahraki, Soft sensor model for monitoring and online control based on a dynamic model and local instrumental variable technique, *International Journal of Modelling, Identification and Control*, Vol.39, No.3, pp. 192-203, 2021.
- [21] Downs J.J., Vogel E.F., A plant-wide industrial process control problem, *Computers and Chemical Engineering*, Vol. 17, pp. 245-255, 1993.
- [22] Ge Z., Song Z., A comparative study of just-in-time-learning based methods for online soft sensor modeling, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, Vol. 104, pp. 306-317, 2010.
- [23] Grbic R., Sliskovic D., Kadlec P., Adaptive soft sensor for online prediction and process monitoring based on a mixture of Gaussian process models, *Computers and Chemical Engineering*, Vol. 58, pp. 84-97, 2013.
- [24] Yuan X., Ge Z., Song Z., Soft sensor model development in multiphase/multimode processes based on Gaussian mixture regression, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, Vol. 138, pp. 97-109, 2014.
- [25] He Y., Geng Z., Zhu Q., Data driven soft sensor development for complex chemical processes using extreme learning machine, *Chemical Engineering Research and Design* Vol.102, pp. 1-11, 2015.
- [26] Dong Y., Qin S., Regression on dynamic PLS structures for supervised learning of dynamic data, *Journal of Process Control*, Vol. 68, pp. 64-74, 2018.
- [27] Qin Y., Zhao C., Huang B., A new soft-sensor algorithm with concurrent consideration of slowness and quality interpretation for dynamic chemical process, *Chemical Engineering Science*, Vol. 199, pp. 28-39, 2019.
- [28] Guo F., Wei B., Huang B., A just-in-time modeling approach for multimode soft sensor based on Gaussian mixture variational autoencoder, *Computers and Chemical Engineering*, Vol. 146, pp.107230, 2021.
- [29] Zhang T., Zhang Sh., He F., Quality prediction and sensitivity analysis of fine chemical products based on support matrix machine, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, Vol. 231, pp.104716, 2022.
- [30] Li Zh., Jin H., Dong Sh., Qian B., Yang B., Chen X., Semi-supervised ensemble support vector
- [6] Kaneko H., Arakawa M., Funatsu K., Development of a new soft sensor method using independent component analysis and partial least squares, *AIChE Journal*, Vol. 55, pp. 87-98, 2009.
- [7] Sliskovic D., Grbic R., Hocenski Z., Methods for plant data-based process modeling in soft sensor development, *Automatika*, Vol. 52, pp. 306-318, 2011.
- [8] Jang J.-S.R., Sun C.-T., Mizutani E., Neuro-fuzzy and soft computing: A computational approach to learning and machine intelligence, *Prentice-Hall Upper Saddle River, NJ, USA*, 1997.
- [9] Kaneko H., Funatsu K., Adaptive soft sensor based on online support vector regression and Bayesian ensemble learning for various states in chemical plants. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, Vol. 137, pp. 57-66, 2014.
- [10] Young P.C., Recursive estimation and time-series analysis, *Second ed., Springer, New York*, 2011.
- [11] Sadeghi J., Modelling and control of non-linear systems using State-Dependent Parameter (SDP) models and Proportional-Integral-Plus (PIP) control method, *Lancaster University, Doctor of Philosophy, United Kingdom*, 2006.
- [12] Tavakoli Dastjerd F., Sadeghi J., Shahraki F., Khalilipour M.M., Bidar B., Soft sensor design using multi-state dependent parameter methodology based on generalized random walk method, *IEEE Sensors Journal*, Vol. 22, No.8, pp. 7888-7901, 2022.
- [۱۳] بیدار، ب.، طراحی حسگر نرم داده محور به منظور پیش‌بینی برخط کیفیت محصول در برج‌های تقطیر به روش پارامتر وابسته به متغیر حالت، دانشگاه سیستان و بلوچستان، پایان نامه دکتری، ۱۳۹۶.
- [۱۴] نعیمی ف.، طراحی حسگر نرم افزاری داده محور به منظور پیش‌بینی برخط کیفیت نفت خام در واحد نمک‌زدایی / آب‌زدایی به روش پارامتر وابسته به متغیر حالت، دانشگاه سیستان و بلوچستان، پایان نامه کارشناسی ارشد، ۱۳۹۷.
- [۱۵] هادی‌زاده، گ.، طراحی حسگر نرم داده‌محور به منظور پیش‌بینی کیفیت در فرآیند ناپیوسته صنعتی تولید رزین پلی‌استر، دانشگاه سیستان و بلوچستان، پایان نامه کارشناسی ارشد، ۱۳۹۹.
- [16] Gharehbaghi H., Sadeghi J., A novel approach for prediction of industrial catalyst deactivation using soft sensor modeling, *Catalysts*, Vol. 6, pp. 93-109, 2016.
- [17] Bidar B., Sadeghi J., Shahraki F., Khalilipour M.M., Data-driven soft sensor approach for online quality prediction using state dependent parameter models, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, Vol. 162, pp. 130-141, 2017.
- [18] Bidar B., Khalilipour M.M., Shahraki F., Sadeghi J., A data-driven soft-sensor for monitoring ASTM-D86 of CDU side products using local

- [36] Russell E.L., Chiang L.H., Braatz, R.D., Fault detection in industrial processes using canonical variate analysis and dynamic principal component analysis. , *Chemometrics and intelligent laboratory systems*, Vol. 51, pp. 81–93, 2000.
- [37] Andersen C.M., Bro R., Variable selection in regression-a tutorial, *Journal of Chemometrics*, Vol. 24, pp. 728-737, 2010.
- [38] Reunanen J., Overfitting in making comparisons between variable selection methods, *The Journal of Machine Learning Research*, Vol. 3, pp. 1371-1382, 2003.
- [39] Findley D. F., Counterexamples to parsimony and BIC, *Annals of the Institute of Statistical Mathematics*, Vol. 43, pp. 505-514, 1991.
- [40] Giraud C., Introduction to High-Dimensional Statistics: *Taylor & Francis*, 2014.
- [41] Aho, K., Derryberry D., Peterson T., Model selection for ecologists: the worldviews of AIC and BIC, *Ecology*, Vol. 95, pp. 613-636, 2014.
- [42] Akaike H., Information theory and an extension of the maximum likelihood principle, in *Selected Papers of Hirotugu Akaike*, *Springer*, pp. 199-213, 1998.
- [43] Sá M., Joaquim P., Applied statistics using SPSS, STATISTICA, MATLAB and R, *Second ed.*, *Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg*, 2007.
- regression based soft sensor for key quality variable estimation of nonlinear industrial processes with limited labeled data, *Chemical Engineering Research and Design*, Vol. 179, pp.510-526, 2022.
- [31] Yu F., Xiong Q., Cao L., Yang F., Stable soft sensor modeling based on causality analysis, *Control Engineering Practice*, Vol. 122, pp.105109, 2022.
- [32] Wang Y., Jin H., Chen X., Wang B., Yang B., Qian B., Online-Dynamic-Clustering-Based Soft Sensor for Industrial Semi-Supervised Data Streams, *Sensors*, Vol.23, No.3, PP. 1520, 2023.
- [33] Shen b., Yao L., Yang Z., Ge Z., Mode Information Separated β -VAE Regression for Multimode Industrial Process Soft Sensing, *IEEE Sensors Journal*, Vol. 23, No. 9, pp. 10231-10240, 2023.
- [34] Kusolsongtawee T., Kheawhom S., Olaru S., Bumroongsri P., Development of a Data-Driven Soft Sensor for Multivariate Chemical Processes Using Concordance Correlation Coefficient Subsets Integrated with Parallel Inverse-Free Extreme Learning Machine, *Engineering Journal*, Vol.27, No.6, 2023.
- [35] Yin S., Gao X., Karimi H., Zhu X., Study on Support Vector Machine-Based Fault Detection in Tennessee Eastman Process, *Abstract and Applied Analysis*, *Hindawi*, 2014.