

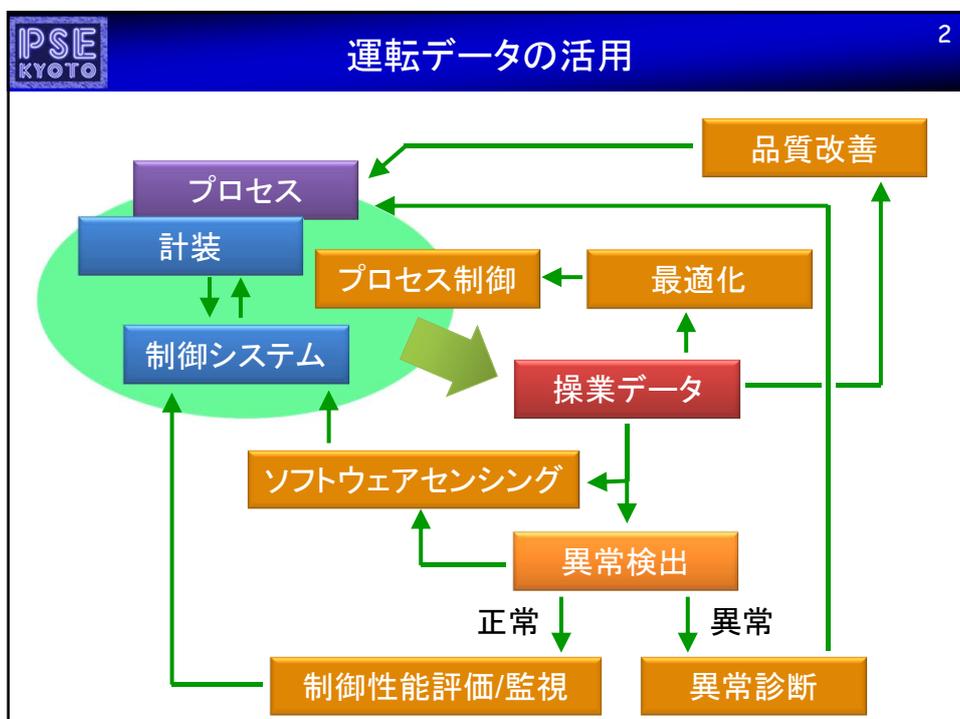
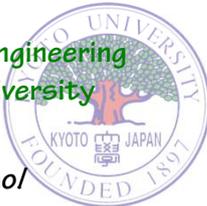
PSE
KYOTO

運転データからのモデリング

京都大学 加納 学

Division of Process Control & Process Systems Engineering
Department of Chemical Engineering, Kyoto University

manabu@cheme.kyoto-u.ac.jp
<http://www-pse.cheme.kyoto-u.ac.jp/~kano/>



IPSE KYOTO 3

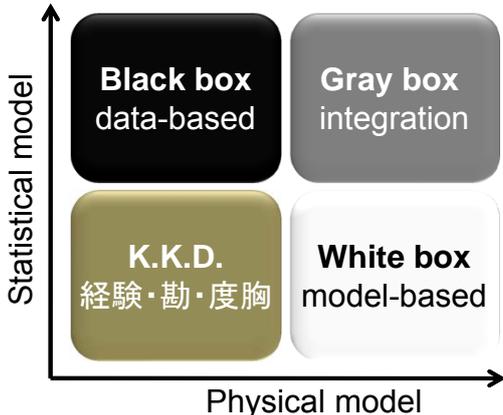
様々な技術があるが、何がKEYなのか？

- 状態推定(ソフトセンサー)**
オンラインで測定されていない製品品質を推定する
- プロセス制御**
製品品質や運転状態を希望通りに操る
- 運転管理(異常検出)**
早期に異常を検出する
- 制御性能監視**
制御系が満足のいく性能を発揮しているか監視する
- 異常診断**
異常の原因を究明する
- 最適化**
最適な運転条件を求める
- 品質改善**
製品品質や歩留りを改善する



IPSE KYOTO 4

統計的モデル vs. 物理モデル





ソクラテス:
「およそ理論を無視したものなら、
そのようなものを技術とは呼ばないよ」
(プラトン、「ゴルギアス」)

 プロセスモデルの種類 5

- **物理モデル(現象論的モデル)**
物理や化学の法則に基づいて化学プロセスの動特性を一連の微分方程式や代数方程式で表現するモデル
- **ブラックボックスモデル(統計的モデル)**
プロセスの運転データから導出されるモデル
例えば, 操作変数を人為的に変化させることによって, 操作変数が制御変数に与える影響を知ることができるため, そのときの入出力データからモデルを構築できる.
システム同定:
入出力データから統計的モデルを構築すること
- **グレイボックスモデル=現象論的モデル+統計的モデル**

 内容 6

- **プロセスモデルの構築**
- ステップ応答からの伝達関数モデルの構築
- 最小二乗法(回帰分析)
- 離散時間モデルの同定
- 閉ループ系の同定

7

例題： 槽型加熱器のモデル化

物質収支
$$\rho A \frac{dL}{dt} = \rho F_i - \rho F$$

エネルギー収支
$$\rho c_p A \frac{d(LT)}{dt} = \rho c_p F_i T_i - \rho c_p F T + Q$$

8

例題： 槽型加熱器のモデル化

物質収支
$$A \frac{dL}{dt} = F_i - F$$

エネルギー収支
$$A \frac{d(LT)}{dt} = F_i T_i - F T + \frac{Q}{\rho c_p}$$

$$A \frac{d(LT)}{dt} = AL \frac{dT}{dt} + AT \frac{dL}{dt} = AL \frac{dT}{dt} + T(F_i - F)$$

$$AL \frac{dT}{dt} = F(T_i - T) + \frac{Q}{\rho c_p}$$

9

例題： 槽型加熱器のモデル化

状態方程式

$$A \frac{dL}{dt} = F_i - F$$

$$AL \frac{dT}{dt} = F(T_i - T) + \frac{Q}{\rho c_p}$$

状態変数

L

T

10

線形化

- 化学プロセスの物理モデルの多くは非線形微分方程式で与えられる。しかし、**プロセスが狭い条件範囲で運転される場合には、線形モデルによって非線形モデルを十分な精度で近似できる。**
- プロセスをある定常状態に保つことが目的である場合には、その定常点周りでのプロセスの動特性は線形近似したモデルを用いて表現できるため、**その線形モデルに基づいて制御系を設計すればよい。**
- 近年、反応器など非線形性が強く、かつ高い制御性能を要求されるプロセスに対して、非線形モデルに基づくモデル予測制御の適用などが進められている。

11

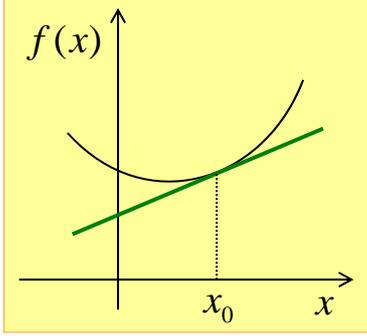
線形化

テイラー展開

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0) \frac{x-x_0}{1!} + f^{(2)}(x_0) \frac{(x-x_0)^2}{2!} + \dots$$

$$+ f^{(n)}(x_0) \frac{(x-x_0)^n}{n!} + \dots$$

↓ 2次以上の項を無視

$$f(x) \approx f(x_0) + f'(x_0)(x-x_0)$$


12

例題：物質収支式の線形化

$$A \frac{dL}{dt} = F_i - a\sqrt{L}$$

↓

$$\sqrt{L} \approx \sqrt{\tilde{L}} + \frac{1}{2\sqrt{\tilde{L}}}(L - \tilde{L})$$

$$A \frac{dL}{dt} = F_i - a\sqrt{\tilde{L}} - \frac{a}{2\sqrt{\tilde{L}}}(L - \tilde{L})$$

13

定常値からの変化量に着目

定常値からの変化量

$$\delta x = x - \tilde{x}$$

状態方程式の線形近似

$$\frac{dx}{dt} = f(x) \approx f(\tilde{x}) + f'(\tilde{x})(x - \tilde{x})$$

定常状態

$$0 = \frac{d\tilde{x}}{dt} = f(\tilde{x})$$

$$\frac{d\delta x}{dt} = f'(\tilde{x})\delta x$$

14

例題：物質収支式の表現

定常値からの変化量 $\delta L = L - \tilde{L}$

物質収支式 $A \frac{dL}{dt} = F_i - a\sqrt{\tilde{L}} - \frac{a}{2\sqrt{\tilde{L}}}(L - \tilde{L})$

定常状態 $0 = \tilde{F}_i - a\sqrt{\tilde{L}}$

$$\begin{aligned} A \frac{d\delta L}{dt} &= \delta F_i - \frac{a}{2\sqrt{\tilde{L}}}\delta L \\ &= \delta F_i - \frac{\tilde{F}_i}{2\tilde{L}}\delta L \end{aligned}$$

$$A \frac{d\delta L}{dt} = \delta F_i - \frac{\tilde{F}_i}{2\tilde{L}} \delta L$$

$$AL \frac{d\delta T}{dt} = \tilde{F}_i (\delta T_i - \delta T) + \delta F_i (\tilde{T}_i - \tilde{T}) + \frac{\delta Q}{\rho c_p}$$

状態空間表現

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \delta L \\ \delta T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{\tilde{F}_i}{2A\tilde{L}} & 0 \\ 0 & -\frac{\tilde{F}_i}{AL} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta L \\ \delta T \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{1}{A} & 0 & 0 \\ \frac{\tilde{T}_i - \tilde{T}}{AL} & \frac{\tilde{F}_i}{AL} & \frac{1}{\rho c_p AL} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta F_i \\ \delta T_i \\ \delta Q \end{bmatrix}$$

- プロセスモデルの構築
- ステップ応答からの伝達関数モデルの構築
- 最小二乗法(回帰分析)
- 離散時間モデルの同定
- 閉ループ系の同定

17

伝達関数

線形微分方程式

$$a_n \frac{d^n y}{dt^n} + a_{n-1} \frac{d^{n-1} y}{dt^{n-1}} + \dots + a_1 \frac{dy}{dt} + a_0 y$$

$$= b_m \frac{d^m u}{dt^m} + b_{m-1} \frac{d^{m-1} u}{dt^{m-1}} + \dots + b_1 \frac{du}{dt} + b_0 u$$

 ラプラス変換

伝達関数

$$G(s) = \frac{Y(s)}{U(s)} = \frac{b_m s^m + b_{m-1} s^{m-1} + \dots + b_1 s + b_0}{a_n s^n + a_{n-1} s^{n-1} + \dots + a_1 s + a_0}$$

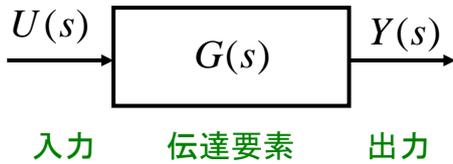
■ 定常値からの変化量で表現, 初期条件=0

18

伝達関数とブロック線図

伝達関数 $G(s) = \frac{Y(s)}{U(s)}$

ブロック線図



入力 伝達要素 出力

19

例題： 物質収支式のラプラス変換

線形微分方程式 $A \frac{d\delta L}{dt} = \delta F_i - \frac{\tilde{F}_i}{2\tilde{L}} \delta L$

ラプラス変換

↓

$\left(As + \frac{\tilde{F}_i}{2\tilde{L}} \right) \delta L(s) = \delta F_i(s)$

伝達関数 $G(s) = \frac{\delta L(s)}{\delta F_i(s)} = \frac{\frac{2\tilde{L}}{\tilde{F}_i}}{\frac{2A\tilde{L}}{\tilde{F}_i} s + 1}$

1次遅れ
 $\frac{K}{Ts + 1}$

20

1次遅れ要素

1次遅れ要素 $G(s) = \frac{K}{Ts + 1}$

K 定常ゲイン
 T 時定数

ステップ応答
 $y(t) = K(1 - e^{-t/T})$

- 新しい定常状態における出力値はKである.
- 時定数Tに等しい時間が経過すると、出力の変化幅は最終的な変化幅の63.2%に達する.



例題：一次遅れ系のステップ応答

21

伝達関数

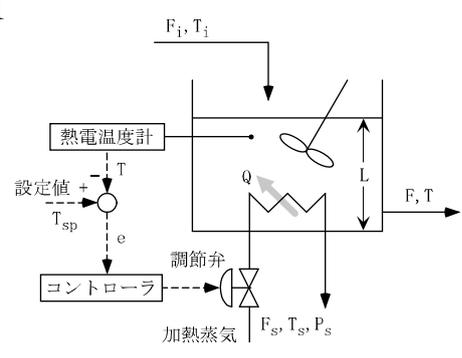
$$G(s) = \frac{\delta L(s)}{\delta F_i(s)} = \frac{\frac{2\tilde{L}}{\tilde{F}_i}}{\frac{2A\tilde{L}}{\tilde{F}_i}s + 1}$$

定常ゲイン

時定数

1次遅れ

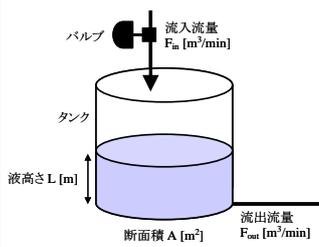
$$\frac{K}{Ts + 1}$$

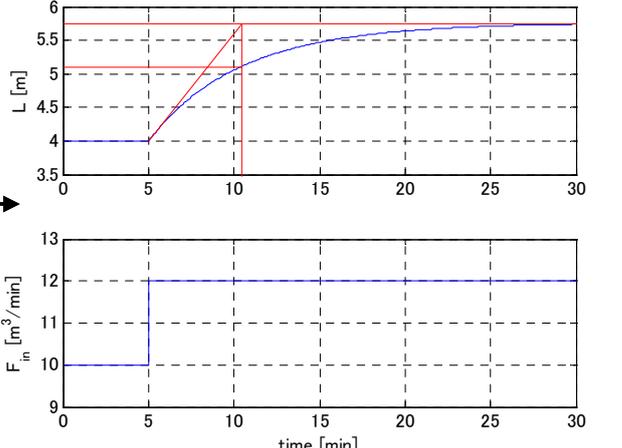




例題：一次遅れ系のステップ応答

22





$$K = \frac{y^*}{u^*} = \frac{1.75}{2.0} = 0.875$$

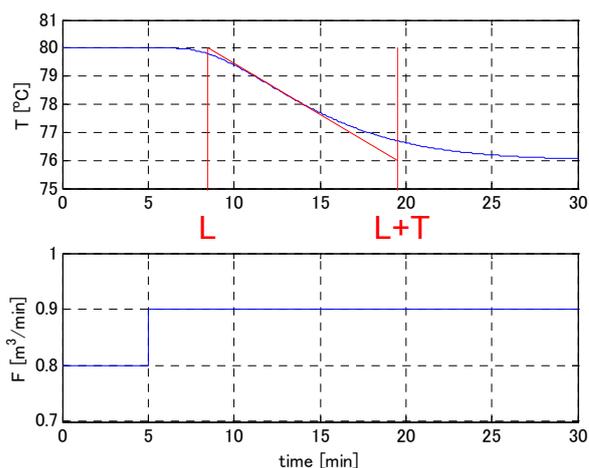
$$T = t_{63.2\%} - t_0 = 10.5 - 5.0 = 5.5$$

$$P(s) = \frac{0.875}{5.5s + 1}$$

$$P(s) = \frac{K}{Ts + 1} e^{-Ls}$$

プロセスが, このモデルで正確に表現されるわけではない.

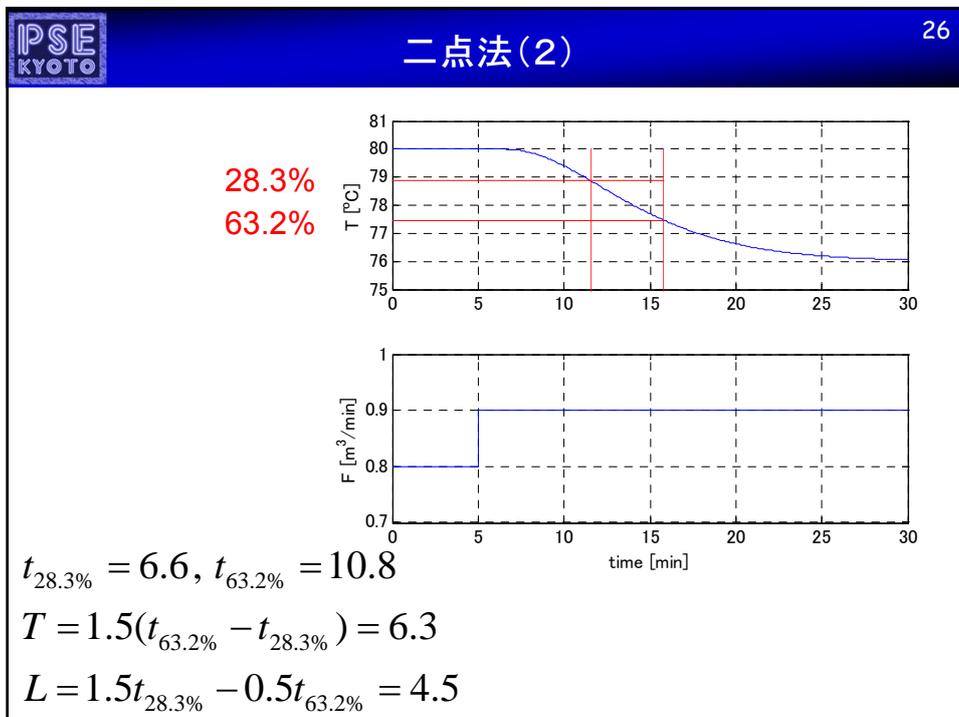
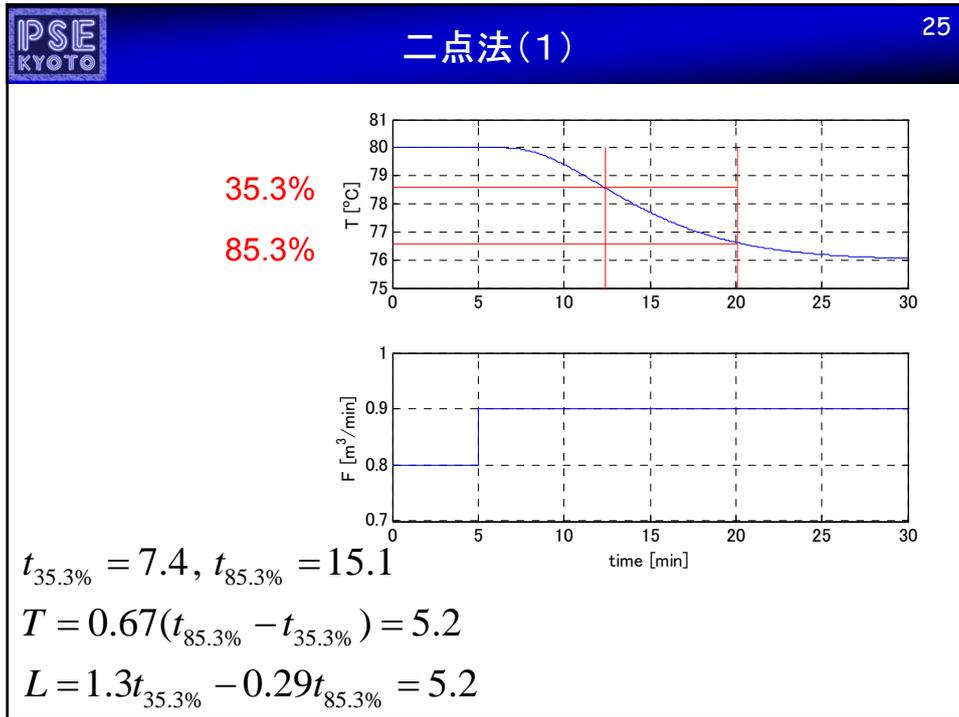
むだ時間を持つプロセスや, 高次遅れプロセスを, このような単純な伝達関数で表現しましょうということ.

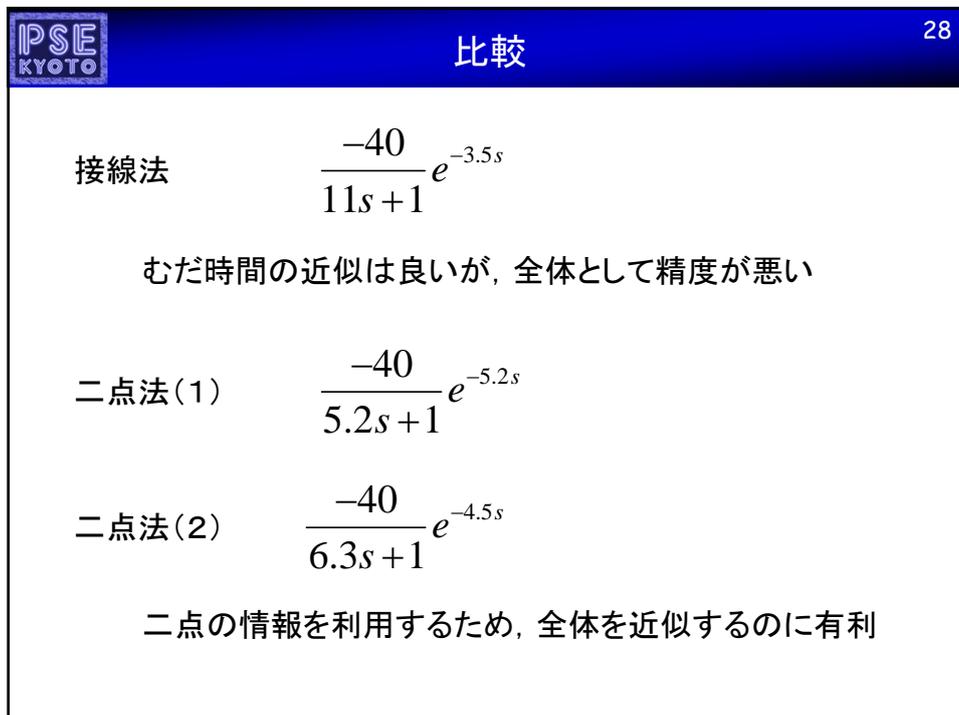
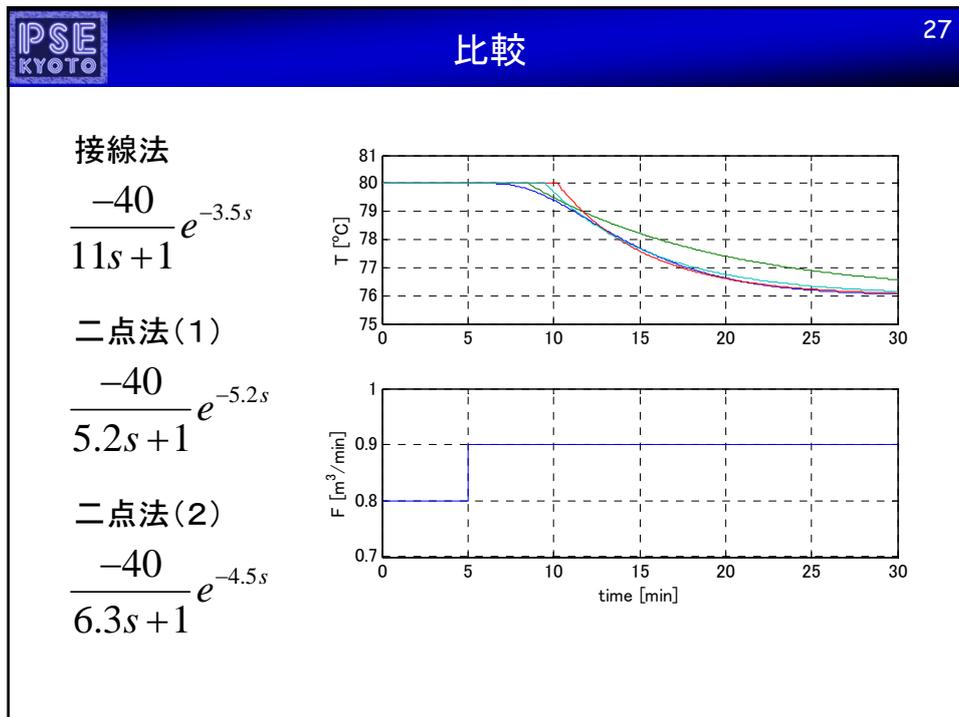


$$K = \frac{y^*}{u^*} = \frac{-4.0}{0.1} = -40$$

$$L = 3.5, L + T = 14.5$$

$$P(s) = \frac{-40}{11s + 1} e^{-3.5s}$$





PSE KYOTO 29

内容

- プロセスモデルの構築
- ステップ応答からの伝達関数モデルの構築
- **最小二乗法(回帰分析)**
- 離散時間モデルの同定
- 閉ループ系の同定

PSE KYOTO 30

回帰分析物語： ミッション

ある朝の会話

上司： 製品品質の管理を強化する必要がある。
まず、製品特性AとBの関係を調べてほしい。

部下： はい。
製品特性AとBは相関が強いので、
回帰分析でモデル化してみます。

上司： よし。では、明日。



31

回帰分析物語：モデルの構築

- 特性AとBのデータを収集(10点)
- 最小二乗法によって、
特性Aから特性Bを予測する単回帰モデルを構築

特性B = 0.573 × 特性A - 37.18

	特性A	特性B
1	167.0	61.0
2	167.5	55.5
3	168.4	57.0
4	172.0	57.0
5	155.3	50.0
6	151.4	50.0
7	163.0	66.5
8	174.0	65.0
9	168.0	60.5
10	160.4	49.5

32

回帰分析物語：モデルの変形

結果の報告

部下：回帰分析の結果から、製品特性AとBには
次のような関係があると判明しました。

特性B = 0.573 × 特性A - 37.18

上司：このモデルが信頼できるなら、測定が大変な特性A
を特性Bから推定できるのではないかね。

部下：そうですね。この式を変形すると、こうなります。

特性A = (特性B + 37.18) ÷ 0.573
= 1.745 × 特性B + 64.89

33

回帰分析物語： 2つのモデル

モデルの吟味

上司： ちょっと待て. 特性Aを目的変数として
回帰分析をしたら, どうなる?

部下： 計算してみます. えー, こうなります.
 $特性A = 0.785 \times 特性B + 119.77$

上司： おい. さっきの式と違うじゃないか!
 $特性A = 1.745 \times 特性B + 64.89$

部下： 確かに. . .



34

クイズ： どっち？

特性Bから特性Aを推定するために,
どちらのモデルを利用すべきか？

$特性A = (特性B + 37.18) \div 0.573$
 $= 1.745 \times 特性B + 64.89$

$特性A = 0.785 \times 特性B + 119.77$

a. どちらでも構わない.
b. 上側のモデルを使うべき.
c. 下側のモデルを使うべき.
d. 判断できない.

PSE
KYOTO
単回帰分析
35

- **(単)回帰分析**
結果である目的変数 y と原因である説明変数 x の関係を**単回帰式**を用いて表現しようとする手法

$$y = \underline{b_1}x + \underline{b_0}$$

(標本)偏回帰係数

現実には、目的変数は説明変数以外の要因にも影響されるため、それらの n 番目の標本(測定値)が**単回帰モデル**によって表現されると考える。

$$y_n = \underline{\beta_1}x_n + \underline{\beta_0} + \varepsilon_n$$

母偏回帰係数

誤差項 ε_n は互いに独立に $N(0, \sigma^2)$ に従うと仮定する。

PSE
KYOTO
目的変数の予測
36

- 目的変数の期待値
誤差項 ε_n の期待値は 0 であるから

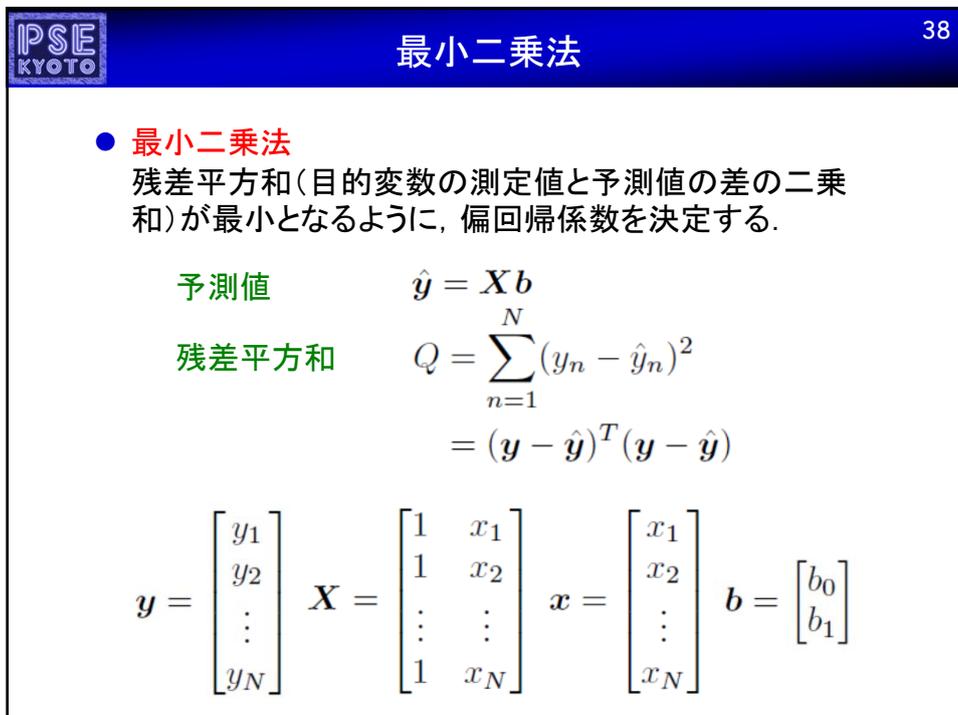
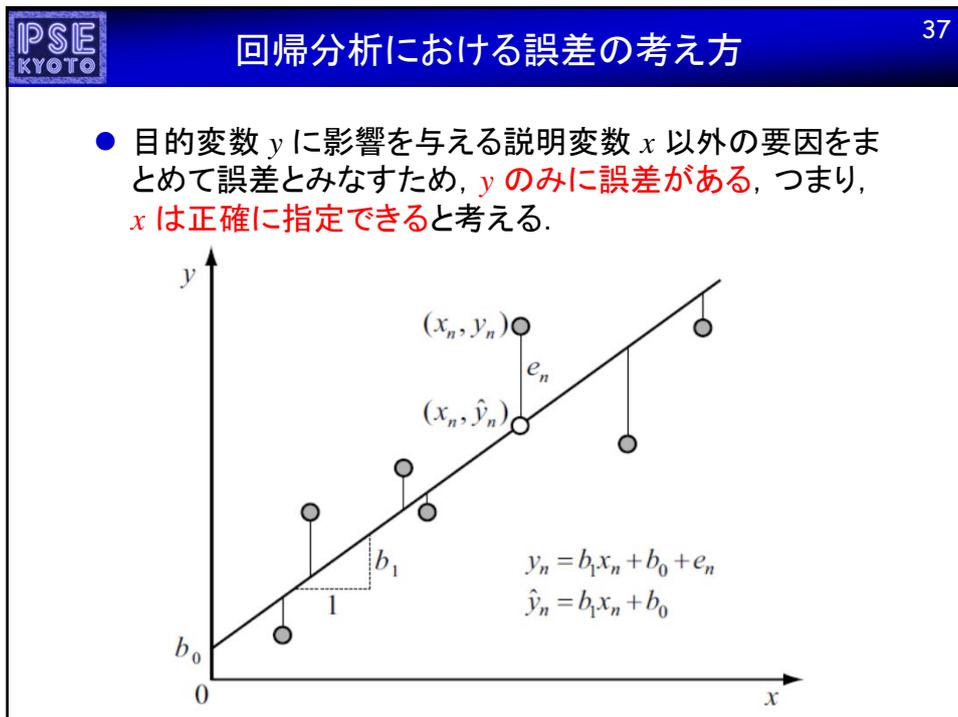
$$E(y_n) = E(\beta_1 x_n + \beta_0 + \varepsilon_n) = \beta_1 x_n + \beta_0$$

- 目的変数の予測値
母偏回帰係数 β_0, β_1 の推定値 b_0, b_1 が得られれば

$$\hat{y}_n = b_1 x_n + b_0$$

- **残差**
目的変数の測定値と予測値の差

$$e_n = y_n - \hat{y}_n = y_n - b_1 x_n - b_0$$





正規方程式の導出

39

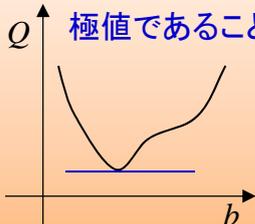
- 残差平方和

$$Q = \sum_{n=1}^N (y_n - \hat{y}_n)^2 = (\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}})^T (\mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}})$$

$$= \mathbf{y}^T \mathbf{y} - 2\mathbf{y}^T \mathbf{X} \mathbf{b} + \mathbf{b}^T \mathbf{X}^T \mathbf{X} \mathbf{b}$$
- 必要条件

$$\frac{1}{2} \frac{\partial Q}{\partial \mathbf{b}} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial Q}{\partial b_0} \quad \frac{\partial Q}{\partial b_1} \right]^T = \mathbf{X}^T \mathbf{X} \mathbf{b} - \mathbf{X}^T \mathbf{y} = 0$$

極値であること!





正規方程式

$$\mathbf{X}^T \mathbf{X} \mathbf{b} = \mathbf{X}^T \mathbf{y}$$



平均を0にする意味

40

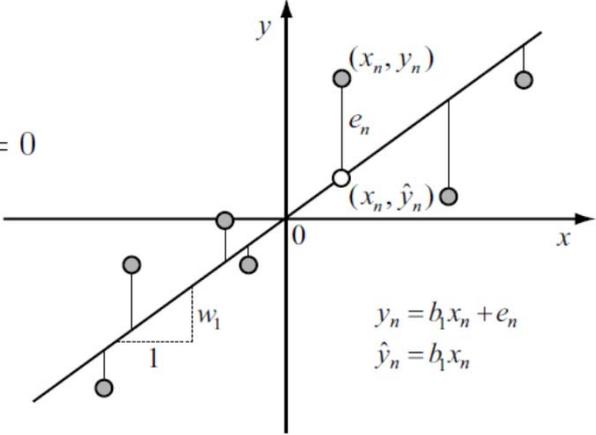
$b_0 = \bar{y} - b_1 \bar{x}$

↓ $\bar{y} = \bar{x} = 0$

$b_0 = 0$

↓

$\hat{y}_n = b_1 x_n$



$y_n = b_1 x_n + e_n$
 $\hat{y}_n = b_1 x_n$

単回帰式(直線)が原点を通る(切片が0となる)ように、データを移動させる。



標準化の効果

41

- 単回帰分析で得られる偏回帰係数の値は、説明変数と目的変数の大きさによって変化する。
 - 説明変数が質量である場合、その測定単位が kg か g によって偏回帰係数の値は異なる。
- 測定単位の影響を排除するデータの前処理方法として、各変数の平均を0、分散を1にする標準化がある。

$$y = \frac{y^* - \bar{y}^*}{s_{y^*}} \quad x = \frac{x^* - \bar{x}^*}{s_{x^*}}$$

$$s_x^2 = \frac{1}{N-1} \mathbf{x}^T \mathbf{x} = 1$$

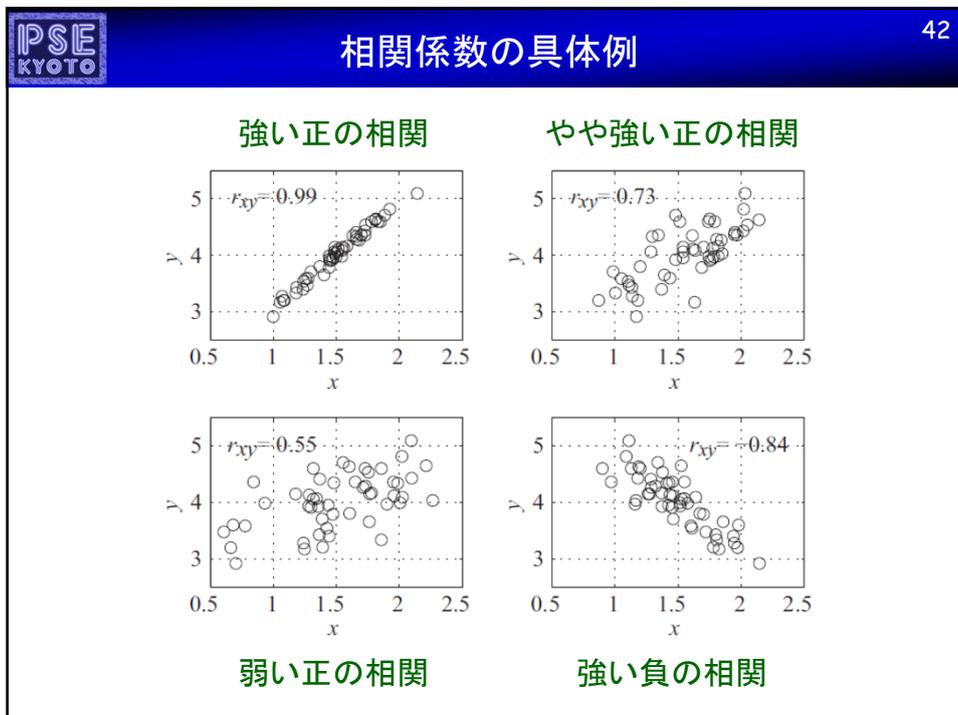
$$r_{xy} = \frac{s_{xy}^2}{s_x s_y} = \frac{1}{N-1} \mathbf{x}^T \mathbf{y}$$

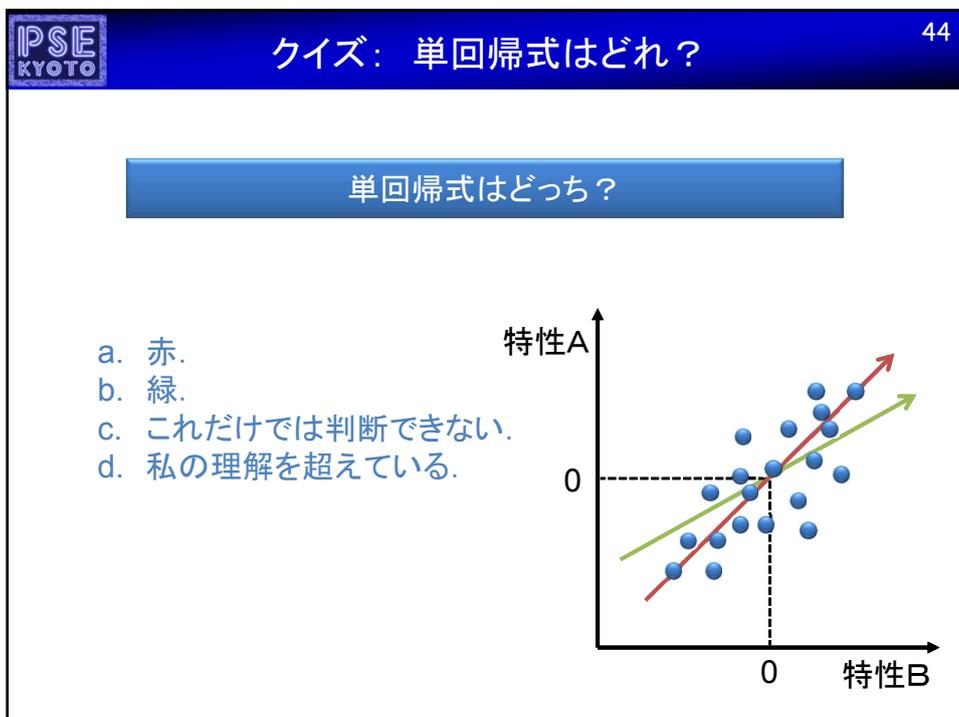
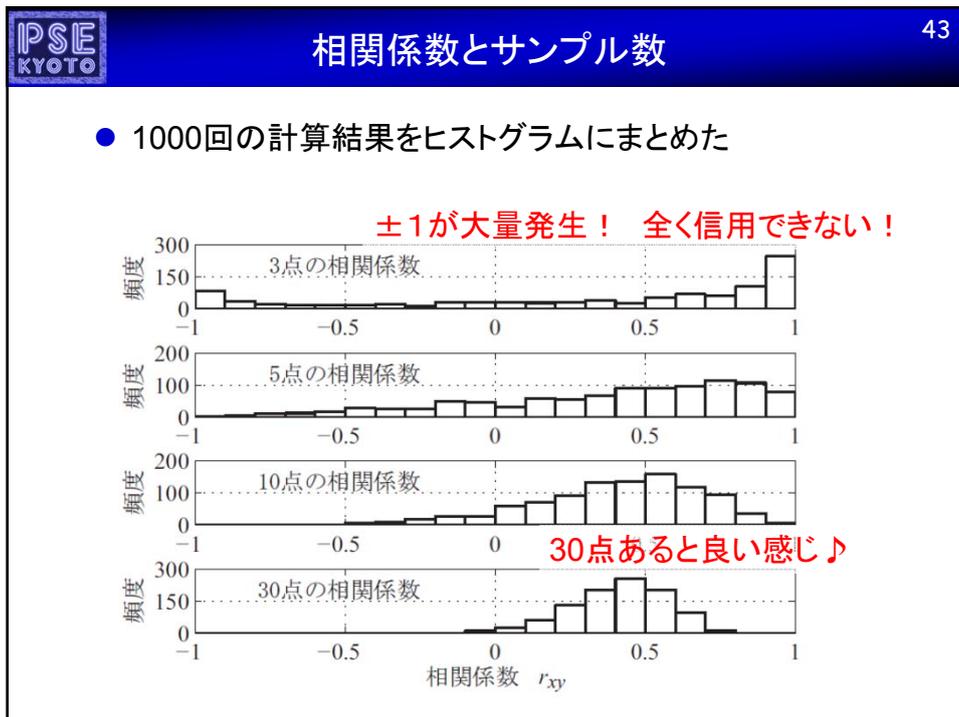
➔

標準偏回帰係数

$$b_1 = \frac{S_{xy}}{S_{xx}} = \frac{\mathbf{x}^T \mathbf{y}}{\mathbf{x}^T \mathbf{x}} = r_{xy}$$

標準偏回帰係数 = 相関係数





PSE KYOTO 45

内容

- プロセスモデルの構築
- ステップ応答からの伝達関数モデルの構築
- 最小二乗法(回帰分析)
- 離散時間モデルの同定
- 閉ループ系の同定

PSE KYOTO 46

離散時間伝達関数

離散時間伝達関数

$$G(q) = \frac{B(q)}{A(q)} = \frac{b_1q^{-1} + b_2q^{-2} + \cdots + b_mq^{-m}}{1 + a_1q^{-1} + a_2q^{-2} + \cdots + a_nq^{-n}}$$

遅延演算子

$$q^{-1}x(t) = x(t-1)$$

PSE
KYOTO
離散時間モデル
47

Box-Jenkinsモデル $y(t) = \frac{B(q)}{A(q)}u(t) + \frac{C(q)}{D(q)}e(t)$

出力誤差モデル $y(t) = \frac{B(q)}{A(q)}u(t) + e(t)$

ARXモデル $A(q)y(t) = B(q)u(t) + e(t)$

ARMAXモデル $A(q)y(t) = B(q)u(t) + C(q)e(t)$

PSE
KYOTO
1次遅れ要素の離散化
48

伝達関数 $P(s) = \frac{K}{Ts + 1}$

微分方程式 $T \frac{dy}{dt} + y = Ku$

差分方程式 $T \frac{y(k) - y(k-1)}{\Delta t} + y(k-1) = Ku(k-1)$

$$y(k) = \left(1 - \frac{\Delta t}{T}\right)y(k-1) + \frac{K\Delta t}{T}u(k-1)$$



1次遅れ要素の離散化

49

$$\text{差分方程式 } y(k) = \left(1 - \frac{\Delta t}{T}\right) y(k-1) + \frac{K \Delta t}{T} u(k-1)$$

Δt の取り方によっては大きな誤差が生じる

ゼロ次ホールドの前提下で、厳密な離散モデル

$$y(k) = e^{-\Delta t/T} y(k-1) + K(1 - e^{-\Delta t/T}) u(k-1)$$

ARXモデル



2遅れ要素の離散化

50

$$P(s) = \frac{K(T_n s + 1)}{(T_1 s + 1)(T_2 s + 1)}$$

ゼロ次ホールドの前提下で、厳密な離散モデル

$$y(k) = a_1 y(k-1) + a_2 y(k-2) + b_1 u(k-1) + b_2 u(k-2)$$

$$a_1 = e^{-\Delta t/T_1} + e^{-\Delta t/T_2} \quad K = \frac{b_1 + b_2}{1 - a_1 - a_2}$$

$$a_2 = -e^{-\Delta t/T_1} + e^{-\Delta t/T_2}$$

$$b_1 = K \left(1 + \frac{T_n - T_1}{T_1 - T_2} e^{-\Delta t/T_1} + \frac{T_2 - T_n}{T_1 - T_2} e^{-\Delta t/T_2} \right)$$

$$b_2 = K \left(e^{-\Delta t/T_1 - \Delta t/T_2} + \frac{T_n - T_1}{T_1 - T_2} e^{-\Delta t/T_2} + \frac{T_2 - T_n}{T_1 - T_2} e^{-\Delta t/T_1} \right)$$

PSE
KYOTO
予測誤差法
51

ARXモデル $A(q)y(t) = B(q)u(t) + e(t)$

$$y(t) = (1 - A(q))y(t) + B(q)u(t) + e(t)$$

$$= \sum_{i=1}^n a_i y(t-i) + \sum_{i=1}^m b_i u(t-i) + e(t)$$

予測値 $\hat{y}(t) = (1 - A(q))y(t) + B(q)u(t)$

予測誤差 $\varepsilon(t) = y(t) - \hat{y}(t) = A(q)y(t) - B(q)u(t)$
 $= y(t) - \boldsymbol{\varphi}(t)\boldsymbol{\theta}$

PSE
KYOTO
予測誤差法
52

予測誤差 $\varepsilon(t) = y(t) - \hat{y}(t) = A(q)y(t) - B(q)u(t)$
 $= y(t) - \boldsymbol{\varphi}(t)\boldsymbol{\theta}$

$$\boldsymbol{\varphi}(t) = [-y(t-1) \quad \cdots \quad -y(t-n) \quad u(t-1) \quad \cdots \quad u(t-m)]$$

$$\boldsymbol{\theta} = [a_1 \quad \cdots \quad a_n \quad b_1 \quad \cdots \quad b_m]^T$$

$$\boldsymbol{\theta} = (\boldsymbol{\Phi}^T \boldsymbol{\Phi})^{-1} \boldsymbol{\Phi}^T \mathbf{y}$$

最小二乗法によって、離散時間伝達関数および連続時間伝達関数を同定できる。



2次遅れ要素の同定

53

$$y(k) = a_1 y(k-1) + a_2 y(k-2) + b_1 u(k-1) + b_2 u(k-2)$$

$$y = \begin{bmatrix} y(3) \\ y(4) \\ \vdots \\ y(N) \end{bmatrix}, X = \begin{bmatrix} y(2) & y(1) & u(2) & u(1) \\ y(3) & y(2) & u(3) & u(2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ y(N-1) & y(N-2) & u(N-1) & u(N-2) \end{bmatrix}$$

$$\theta = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ b_1 \\ b_2 \end{bmatrix}$$

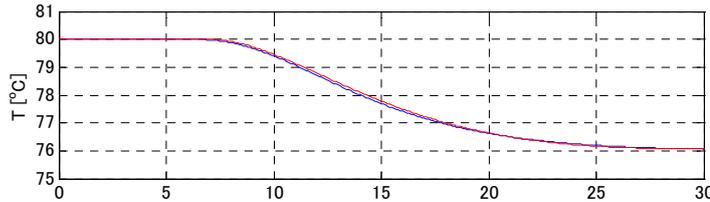
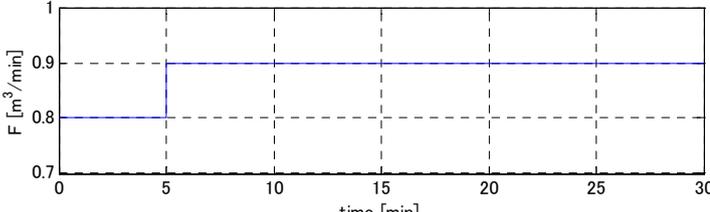
$$y = X\theta$$

$$\theta = (X^T X)^{-1} X^T y$$



例題：伝達関数モデルの同定

54

$$P(s) = \frac{-38.6}{22.8s^2 + 7.4s + 1} e^{-2s}$$

	内容	55
<ul style="list-style-type: none">● プロセスモデルの構築● ステップ応答からの伝達関数モデルの構築● 最小二乗法● 離散時間モデルの同定● 閉ループ系の同定		

	閉ループ系の同定	56
<p data-bbox="719 1417 852 1453">資料参照</p> <p data-bbox="424 1547 1147 1619">同定用信号(設定値変更でも良い)を付加しなければ, プロセスのモデルは同定できない.</p> <p data-bbox="424 1664 1123 1736">同定用信号(設定値変更でも良い)を付加するなら, どの方法を用いても大差ない結果が得られるだろう.</p>		