

## 基于主元分析得分重构差分的故障检测策略

张 成<sup>1,2</sup>, 郭青秀<sup>1</sup>, 李 元<sup>1†</sup>, 高宪文<sup>2</sup>

(1. 沈阳化工大学 技术过程故障诊断与安全性研究中心, 辽宁 沈阳 110142; 2. 东北大学 信息科学与工程学院, 辽宁 沈阳 110819)

**摘要:** 基于主元分析(PCA)的统计过程控制方法通常假设数据的生成过程是独立同分布的. 当数据存在多模态结构或过程变量非线性相关时, PCA方法的故障检测性能将受到影响. 针对上述问题, 本文提出一种基于PCA得分重构差分的故障检测策略. 首先, 应用PCA将输入空间分解为主元子空间和残差子空间; 接下来, 应用 $k$ 近邻( $k$ NN)规则重构当前样本得分向量并计算样本的得分重构差分向量; 最后, 计算得分重构差分向量的统计值并进行故障检测. 本文方法不仅可以降低数据多模态和变量非线性相关等特征对过程故障检测的影响, 同时可以降低统计量的自相关性、提高过程故障检测率. 将本文方法在两个模拟例子和田纳西-伊斯曼(TE)过程中进行测试, 并与PCA、核主元分析(KPCA)、动态主元分析(DPCA)和 $k$ 最近邻故障检测(FD- $k$ NN)方法进行对比分析, 测试结果证明了本文方法的有效性.

**关键词:** 主元分析; 得分重构差分;  $k$ 近邻; TE过程; 故障检测

**引用格式:** 张成, 郭青秀, 李元, 等. 基于主元分析得分重构差分的故障检测策略. 控制理论与应用, 2019, 36(5): 774 – 782

DOI: 10.7641/CTA.2018.70915

## Fault detection strategy based on difference of score reconstruction associated with principal component analysis

ZHANG Cheng<sup>1,2</sup>, GUO Qing-xiu<sup>1</sup>, LI Yuan<sup>1†</sup>, GAO Xian-wen<sup>2</sup>

(1. Research Center for Technical Process Fault Diagnosis and Safety,

Shenyang University of Chemical Technology, Shenyang Liaoning 110142, China;

2. College of Information Science and Engineering, Northeastern University, Shenyang Liaoning 110819, China)

**Abstract:** The statistical process control based on principal component analysis (PCA) usually assumes that the underlying data generation process is independent and identically distributed (I.I.D.). When PCA is applied to detect faults in a process with multimodal structure or nonlinear monitored variables, its fault detection performance will descend. Aiming at the above limitations of PCA, a fault detection strategy based on difference of score reconstruction associated with PCA (Diff-PCA) is proposed in this paper. First, an input space is decomposed into two subspaces: principal component subspace (PCS) and residual subspace (RS) using PCA. Next, the reconstructed score vectors of each score vector are computed respectively through  $k$  nearest neighbors ( $k$ NN) rule in PCS and RS, and then a difference vector of score reconstruction can be also obtained. At last, the statistic values of the difference vectors are monitored to detect faults. Diff-PCA is capable of not only reducing the influence of multimodal and nonlinear characteristics, but also eliminating the autocorrelation of the statistic and improving the fault detection rate (FDR). The efficiency of the proposed strategy is implemented in two simulated cases and in the Tennessee Eastman (TE) processes. The experimental results indicate that the proposed method outperforms the conventional PCA, Kernel PCA (KPCA), Dynamic PCA (DPCA) and the fault detection method based on  $k$  nearest neighbors (FD- $k$ NN).

**Key words:** principal component analysis; difference of score reconstruction;  $k$  nearest neighbors; Tennessee Eastman processes; fault detection

**Citation:** ZHANG Cheng, GUO Qingxiu, LI Yuan, et al. Fault detection strategy based on difference of score reconstruction associated with principal component analysis. *Control Theory & Applications*, 2019, 36(5): 774 – 782

收稿日期: 2017-12-08; 录用日期: 2018-06-01.

<sup>†</sup>通信作者. E-mail: li-yuan@mail.tsinghua.edu.cn; Tel.: +86 13082424115.

本文责任编辑: 陈增强.

国家自然科学基金项目(61490701, 61573088, 61673279), 辽宁省教育厅项目(LZ2015059), 辽宁省自然科学基金项目(2015020164)资助.

Supported by the National Natural Science Foundation of China (61490701, 61573088, 61673279), the Education Department Research Project of Liaoning Province (LZ2015059) and the National Natural Science Foundation of Liaoning (2015020164).

## 1 引言

随着现代化生产技术的快速发展, 过程监视与故障诊断方法在保证生产安全、提高生产效率等方面起着重要作用. 由于分布式控制系统(distributed control systems, DCS)可以自动测量和存储大量的多变量采样数据, 因此基于数据驱动的多元统计过程控制(multivariate statistical process control, MSPC)方法已经成为当今过程监视与故障诊断研究的热点<sup>[1-2]</sup>.

主元分析(principal component analysis, PCA)作为一种基于数据驱动的过程控制方法, 已经被广泛地应用于化工生产过程并且取得了可喜的成果<sup>[3-4]</sup>. PCA方法通过线性变换将原始空间分解成主元子空间(principal component subspace, PCS)和残差子空间(residual subspace, RS), 同时应用Hotelling's  $T^2$ 和平方预测误差(squared prediction error, SPE)两个统计量对样本在上述两个子空间的状态进行监控<sup>[5]</sup>.  $T^2$ 和SPE控制限通常在假设过程变量服从多元高斯分布的前提下进行确定, 这将影响PCA方法在非线性的故障检测性能. 为了解决非线性过程的监控问题, 一些基于PCA的非线性方法已经被提出, 同时得到快速发展<sup>[6-7]</sup>. 近些年, 基于核理论的主元分析(kernel PCA, KPCA)方法已经有效地被用于解决非线性系统的过程监控问题<sup>[8-10]</sup>. 为了描述过程数据的动态特性和进行相关的应用分析, 动态主元分析(dynamic PCA, DPCA)方法已经得到了广泛的应用<sup>[11-12]</sup>. DPCA是一种将传统PCA推广到动态多变量过程的方法. 由于DPCA考虑了数据中的序列相关性, 因此它在含有时滞系统的故障诊断中具有良好的表现.

上述方法, 如PCA, KPCA和DPCA等, 适用于单模态过程监控<sup>[13]</sup>. 若将其应用于多模态过程, 通常存在较高的误报情况. 为了监视多模态过程, He等提出一种基于 $k$ 最近邻故障检测方法(fault detection based on  $k$  nearest neighbors, FD- $k$ NN)<sup>[14]</sup>. 由于FD- $k$ NN方法应用当前样本与其近邻的距离来分析当前样本状态, 因此该方法降低了多模态特征对过程监控的影响. 当不同模态数据的方差结构差异较大且密集模态发生微小尺度故障时, FD- $k$ NN方法的故障检测性能下降<sup>[15]</sup>.

基于以上分析可以看出, 过程监控变量的分布特征直接影响传统PCA方法的故障检测能力. 另外, 文献[16]指出统计指标的自相关性(autocorrelation)也是影响故障检测结果的一个因素. 考虑到传统PCA方法在非线性和多模态过程的局限性以及统计指标自相关性对检测结果的影响问题, 本文提出一种基于PCA得分重构差分的故障检测策略(fault detection strategy based on the difference of score reconstruction associated with PCA, Diff-PCA). 首先, 应用PCA将输入空间分解为两个子空间PCS和RS; 接下来, 在得分空

间利用 $k$ NN规则进行得分重构并计算样本得分与其重构得分的差分; 最后, 对差分向量计算形如 $T^2$ 的统计指标并完成故障检测. 本文的余下部分安排如下: 第2节简要叙述PCA方法; 第3节给出基于主元分析得分重构差分的故障检测策略基本框架; 在第4节中, 通过两个数值例子说明本文方法的有效性; 第5节给出本文方法在TE过程中仿真应用, 同时与PCA, KPCA, FD- $k$ NN等方法进行对比分析, 进一步验证本文方法的有效性; 第6节给出结论和相关展望.

## 2 主元分析

假设 $\mathbf{x} = [x_1 \ x_2 \ \cdots \ x_n]$ 为包含 $n$ 个变量的参考数据, PCA方法通过对参考数据 $\mathbf{x}$ 的协方差矩阵进行特征分解将输入空间分解为PCS和RS, 具体过程见式(1):

$$\mathbf{x} = \hat{\mathbf{t}}\hat{\mathbf{P}}^T + \tilde{\mathbf{t}}\tilde{\mathbf{P}}^T = [\hat{\mathbf{t}} \ \tilde{\mathbf{t}}][\hat{\mathbf{P}} \ \tilde{\mathbf{P}}]^T = \mathbf{t}\mathbf{P}^T, \quad (1)$$

其中: 称 $\mathbf{t}$ 为样本得分向量, 称 $\mathbf{P}$ 为负载矩阵. 依据主元方差累计贡献(cumulative percent variance, CPV)或残差方差累计贡献(residual percent variance, RPV)可以确定主元数 $r$ , 其中被选取的 $r$ 个主元包含了数据的主要变化信息. 此时, 称 $\hat{\mathbf{P}} = [\hat{\mathbf{p}}_1 \ \hat{\mathbf{p}}_2 \ \cdots \ \hat{\mathbf{p}}_r]$ 为主元负载矩阵, 称 $\hat{\mathbf{t}} = [\hat{t}_1 \ \hat{t}_2 \ \cdots \ \hat{t}_r]$ 为主元得分向量且 $\hat{t}_i = \mathbf{x}\hat{\mathbf{p}}_i$ . 主元负载矩阵 $\hat{\mathbf{P}}$ 确定了输入数据的主要变化方向, 而相应的残差负载矩阵 $\tilde{\mathbf{P}}$ 反映了过程变量的相关性信息.

在过程故障检测中, 通常采用 $T^2$ 和SPE统计指标分别监视样本在PCS和RS中的变化:

$$T^2 = \hat{\mathbf{t}}\hat{\mathbf{\Lambda}}^{-1}\hat{\mathbf{t}}^T = \mathbf{x}\hat{\mathbf{P}}\hat{\mathbf{\Lambda}}^{-1}\hat{\mathbf{P}}^T\mathbf{x}^T, \quad (2)$$

$$\text{SPE} = (\mathbf{x} - \mathbf{x}\hat{\mathbf{P}}\hat{\mathbf{P}}^T)(\mathbf{x} - \mathbf{x}\hat{\mathbf{P}}\hat{\mathbf{P}}^T)^T. \quad (3)$$

$T^2$ 和SPE统计指标的控制限可以由式(4)–(5)确定<sup>[4]</sup>:

$$T_{\text{UCL}}^2 = \frac{r(m-1)(m+1)}{m(m-r)}F_{r, m-r; \alpha}, \quad (4)$$

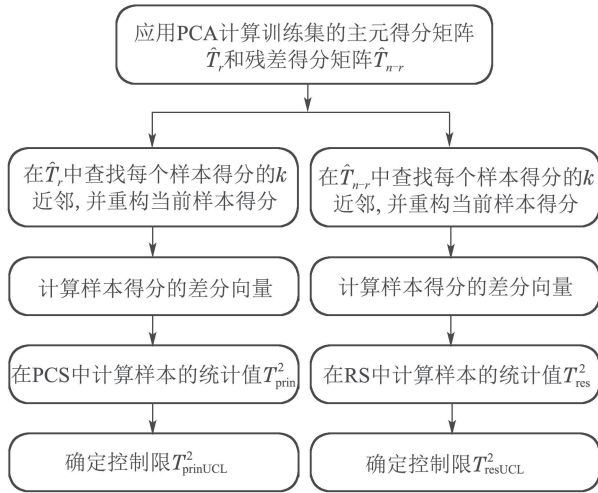
$$\text{SPE}_{\text{UCL}} = g \cdot \chi_{h; \alpha}^2, \quad (5)$$

其中:  $T^2$ 近似服从自由度为 $r$ 和 $m-r$ 的 $F$ 分布,  $m$ 为样本数量; SPE近似服从自由度为 $h$ 的 $\chi^2$ 分布. 如果将参考数据SPE统计指标的均值和方差分别记为 $a$ 和 $b$ , 那么参数 $g = b/2a$ , 同时 $h = 2a^2/b$ <sup>[4]</sup>.  $\alpha$ 为置信水平, 通常被选取为0.99或0.95.

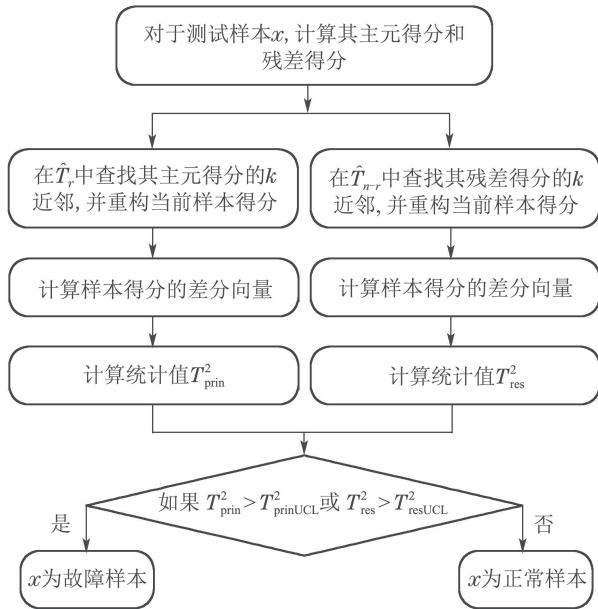
## 3 基于主元分析得分重构差分的故障检测策略

本节针对传统PCA- $T^2$ 和PCA-SPE方法的局限性, 例如 $T^2$ 统计量需要假设过程得分服从多元高斯分布和SPE统计量需要过程残差变量独立同分布, 提出一种基于得分重构差分的故障检测策略. 其故障检测过程包含两部分: 模型建立和在线检测. 在模型建立

过程中,首先通过PCA将输入空间分解为PCS和RS;接下来,应用 $k$ 近邻方法进行得分重构获得得分重构差分向量;最后,计算两个统计指标并确定控制限. 在线检测过程中,首先将测试样本通过模型建立过程中获得的负载矩阵映射至PCS和RS中;接下来,计算该测试样本的两个重构差分向量,并计算两个统计指标;最后,将两个统计指标分别与模型建立中确定的统计控制限进行比较,给出检测结果. 详细过程如图1所示.



(a) 模型建立



(b) 故障检测

图1 Diff-PCA故障检测流程图

Fig. 1 Flow chart of fault detection method using Diff-PCA

### 3.1 模型建立

假设参考数据矩阵为  $\mathbf{X}_{m \times n}$ , 其中  $m$  和  $n$  分别为样本数和变量数. 应用PCA获得数据在PCS和RS的得分矩阵  $\hat{T}_r$ ,  $\hat{T}_{n-r}$  及负载矩阵  $\hat{P}$ ,  $\hat{\tilde{P}}$ .

在PCS中, 对于第  $i$  个样本的得分  $\hat{t}_i$ , 在矩阵  $\hat{T}_r$  中查找它的前  $k$  个近邻  $\hat{t}_i^{(j)} \in \hat{T}_r, j = 1, 2, \dots, k$ , 并计算  $\hat{t}_i^{(j)}$  的均值向量  $\hat{m}_i = (\hat{m}_{i1}, \hat{m}_{i2}, \dots, \hat{m}_{ir})$  和标准差对角矩阵的逆矩阵  $\hat{\sigma}_i = \text{diag}\{\hat{\sigma}_1^{-1}, \hat{\sigma}_2^{-1}, \dots, \hat{\sigma}_r^{-1}\}$ . 应用  $\hat{m}_i$  重构  $\hat{t}_i$  可以获得差分向量  $\hat{e}_i$ , 如式(6):

$$\hat{e}_i = \hat{t}_i - \hat{m}_i. \quad (6)$$

当得分矩阵  $\hat{T}_r$  中存在非线性或者多模态结构时, 式(6)可以将样本主元得分调整为单一模态, 消除结构影响. 考虑到多模态问题中存在模态密度差异问题, 将式(6)可以进行归一化处理, 如式(7):

$$\bar{e}_i = \hat{e}_i \cdot \hat{\sigma}_i. \quad (7)$$

由式(7)获得的  $\bar{e}_i$  近似服从多元高斯分布. 接下来, 可以在PCS中根据式(2)建立一个新的统计指标, 记为  $T_{\text{prin}}^2$ , 如式(8):

$$T_{\text{prin}}^2 = \bar{e}_i \Sigma_{\bar{e}}^{-1} \bar{e}_i^T, \quad (8)$$

其中  $\Sigma_{\bar{e}}$  为得分差分  $\bar{e}$  的协方差矩阵.

同理, 在RS中可以建立相似的统计量  $T_{\text{res}}^2$ . 记第  $i$  个样本  $x_i$  的残差得分向量为  $\tilde{t}_i \in \tilde{T}_{n-r}$ . 首先, 在  $\tilde{T}_{n-r}$  中查找  $\tilde{t}_i$  的前  $k$  个近邻  $\tilde{t}_i^{(j)}, j = 1, 2, \dots, k$ . 接下来, 计算差分向量  $\check{e}_i = \tilde{t}_i - \check{m}_i$ , 其中  $\check{e}_i = \tilde{t}_i - \check{m}_i$ ,  $\check{m}_i$  和  $\check{\sigma}_i$  分别为  $\tilde{t}_i^{(j)}$  的均值向量和标准差对角矩阵的逆矩阵. 于是RS中统计量  $T_{\text{res}}^2$  可以定义为

$$T_{\text{res}}^2 = \check{e}_i \Sigma_{\check{e}}^{-1} \check{e}_i^T. \quad (9)$$

$T_{\text{prin}}^2$  和  $T_{\text{res}}^2$  的控制限  $T_{\text{prinUCL}}^2$  和  $T_{\text{resUCL}}^2$  可以分别由核密度估计(kernel density estimation, KDE)方法确定<sup>[17]</sup>.

### 3.2 故障检测

假设一个测试样本  $x_*$  在PCS和RS中的得分向量分别为  $\hat{t}_* = x_* \hat{P}$  和  $\tilde{t}_* = x_* \hat{\tilde{P}}$ .

首先, 在矩阵  $\hat{T}_r$  中查找  $\hat{t}_*$  前  $k$  个近邻得分向量  $\hat{t}_*^{(j)} \in \hat{T}_r, j = 1, 2, \dots, k$ , 并由式(6)–(7)计算得分差分向量  $\bar{e}_* = (\hat{t}_* - \hat{m}_*) \cdot \hat{\sigma}_*$ . 于是由式(8),  $x_*$  的  $T_{\text{prin}}^2$  可以表示为  $T_{\text{prin}}^2 = \bar{e}_* \Sigma_{\bar{e}}^{-1} \bar{e}_*^T$ ; 同理, 由式(9),  $x_*$  的  $T_{\text{res}}^2$  可以表示为  $T_{\text{res}}^2 = \check{e}_* \Sigma_{\check{e}}^{-1} \check{e}_*^T$ . 接下来, 将  $T_{\text{prin}}^2$  和  $T_{\text{res}}^2$  分别与建模过程中确定的控制限  $T_{\text{prinUCL}}^2$  和  $T_{\text{resUCL}}^2$  进行比较, 确定检测结果.

## 4 模拟实例

### 4.1 非线性实例

本节通过一个包含6个监控变量的非线性数值例子来验证本文方法的有效性. 在监控变量中, 前两个变量  $x$  和  $y$  为过程主要变量并且满足如下关系:

$$y = x^2 + e, \quad (10)$$

其中: 变量  $x$  在  $[-5, 5]$  服从均匀分布,  $e$  是  $[0, 2]$  上的均

匀噪声序列. 余下变量为均值为0, 方差为0.1的高斯白噪声.

由以上模型共产生300个参考样本, 并从中随机选取200个样本用于训练模型, 余下100个样本用于校验模型的有效性. 通过对变量 $y$ 增加扰动, 生成100个故障点. 图2给出本例中训练样本、校验样本和故障样本的散点图. 可以看出, 100个故障样本明显偏离了训练样本的轨迹.

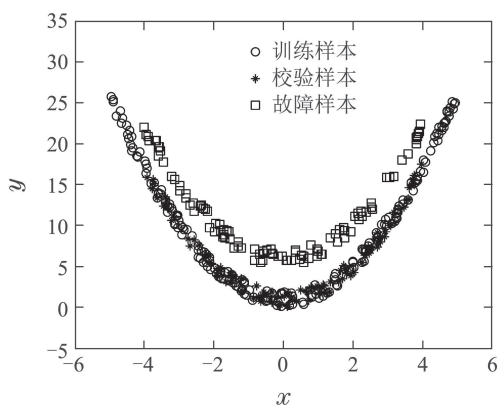


图2 非线性例子: 样本散点图

Fig. 2 Nonlinear case: scatter plots of samples

首先, 应用传统的PCA- $T^2$ 和PCA-SPE在本例中进行故障检测, 其中主元数为2. 置信水平为0.99的检测结果如图3所示. 可以看出, PCA- $T^2$ 和PCA-SPE总共只检测出一个故障点. 图4给出各类样本在主元空间的散点图及置信水平为0.99的 $T^2$ 控制限. 由于训练样本在主元子空间存在非线性结构, 这将使得一些明显故障区域被包含在控制限内, 并引起故障漏报.

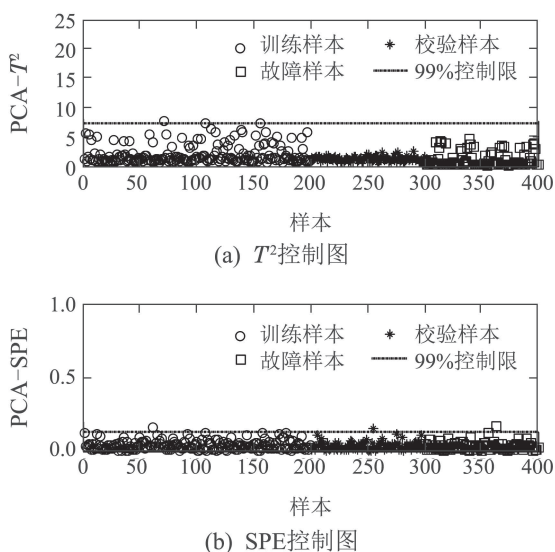


图3 PCA检测结果

Fig. 3 Results of PCA

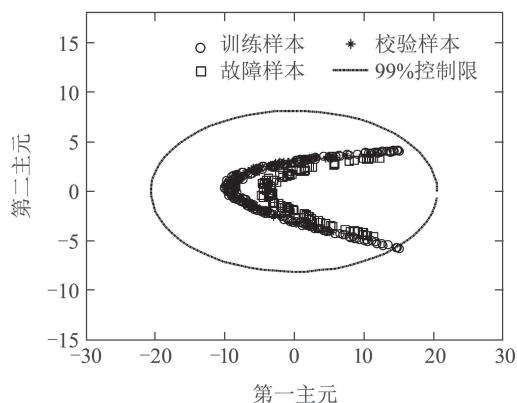


图4 主元子空间散点图

Fig. 4 Scatter plots of samples in PCS

接下来, 应用KPCA- $T^2$ 和KPCA-SPE方法对本例进行了故障检测. 核函数选择为高斯径向基核函数

$$K(x, y) = \exp\left(-\frac{\|x - y\|^2}{\beta}\right).$$

通过交叉验证方法, 参数 $\beta$ 和主元数分别设置为10和15, 故障检测结果如图5所示. 在本例中虽然KPCA可以准确捕获训练数据的非线性结构, 但它并不能区分过程的微小偏移. 因此, 该方法在本例中的故障检测率为0.

最后, 应用本文方法在本例中进行故障检测. 主元数为2和置信水平为0.99的检测结果如图6所示. 可以看出,  $T^2_{\text{prin}}$ 和 $T^2_{\text{res}}$ 两个控制图综合检测出全部故障, 故障检测率高于传统的方法, 如KPCA- $T^2$ , KPCA-SPE和PCA- $T^2$ , PCA-SPE.

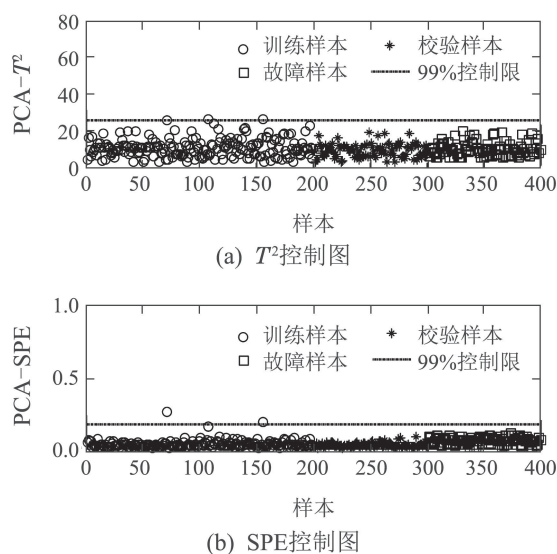


图5 KPCA检测结果

Fig. 5 Results of KPCA

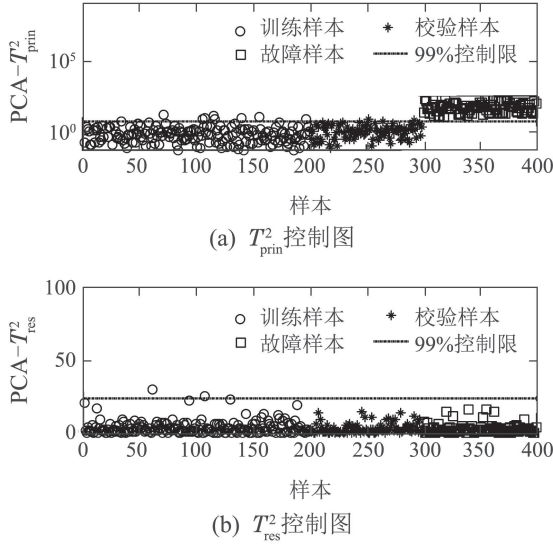


图6 Diff-PCA检测结果

Fig. 6 Results of Diff-PCA

## 4.2 多模态例子

在本节中,通过一个包含4个监控变量的多模态模拟例子来证明本文方法的有效性.在4个变量中,前两个变量为主要变量,余下变量为随机噪声.主要模型如下:

$$\text{M1} \begin{cases} x = t + e, \\ y = 2t + e, \end{cases} \quad t \sim U(-1, 1), \quad (11)$$

$$\text{M2} \begin{cases} x = t + e, \\ y = 50 + 2t + e, \end{cases} \quad t \sim U(-5, 5). \quad (12)$$

由式(11),每个模态随机生成100个参考样本以构成一个训练集;每个模态随机生成50个校验样本用于校验不同方法的有效性.在模态1中,由于变量 $y$ 发生阶跃变化,产生100个故障样本.训练样本、校验样本和故障样本关于变量 $x$ 和 $y$ 的散点图如图7所示.由于以较小尺度偏离第一模态轨迹的故障表现不明显,所以图中对局部分布情况进行了放大处理.

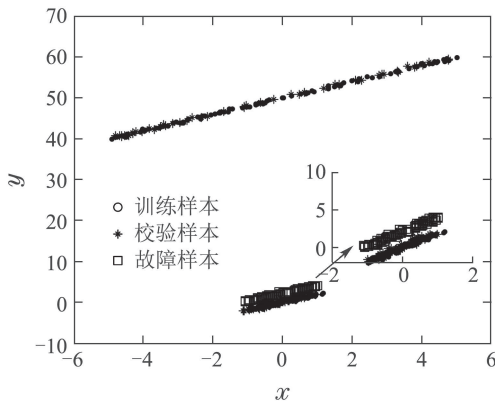


图7 多模态例子: 样本散点图

Fig. 7 Multimode case: scatter plots of samples

本例中,分别应用传统的PCA- $T^2$ , PCA-SPE, FD- $k$ NN和本文方法Diff-PCA- $T^2_{\text{prin}}$ , Diff-PCA- $T^2_{\text{res}}$ 进行了故障检测.根据CPV = 0.85,主元数被设置为2;通过寻优测试,FD- $k$ NN方法中近邻数,Diff-PCA- $T^2_{\text{prin}}$ 和Diff-PCA- $T^2_{\text{res}}$ 中得分重构中的近邻数均被设置为3;各种方法均采用置信水平为0.99的控制限进行故障检测.以上各种方法的检测结果如图8-10所示.由于传统的PCA- $T^2$ 和PCA-SPE适合于单模态故障检测,因此在本例测试中具有最低的故障检测率. FD- $k$ NN方法检测出部分故障,故障检测率高于传统的PCA方法.但是,由于两个模态的分布密度差异较大,同时FD- $k$ NN方法对密集模态小尺度故障并不敏感,因此本例中的部分故障被误报为正常样本.本文方法Diff-PCA- $T^2_{\text{prin}}$ 和Diff-PCA- $T^2_{\text{res}}$ 综合故障检测率达到100%.可以看出,本文方法在多模态过程中故障检测是有效的.通常,统计指标的自相关性也是影响检测性能的一个原因,因此在本例中进一步从自相关性的角度进行了分析,如图11-12所示.与 $T^2$ 和SPE相比,本文方法中的 $T^2_{\text{prin}}$ 和 $T^2_{\text{res}}$ 均具有较低的自相关性,这也是本文方法具有最高检测率的一个原因.

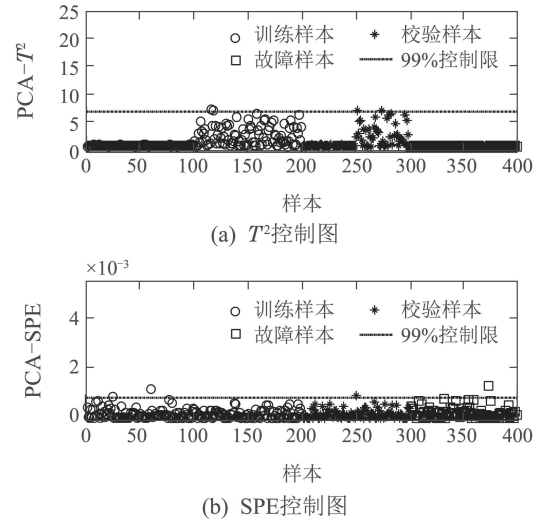
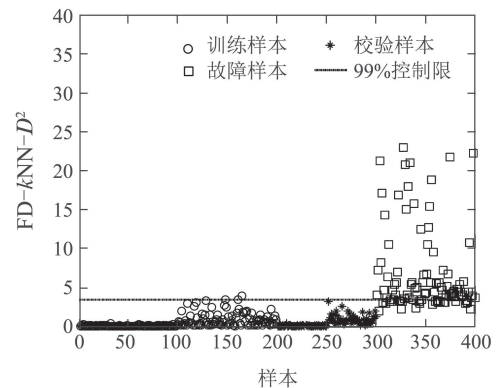


图8 PCA检测结果

Fig. 8 Results of PCA

图9 FD- $k$ NN检测结果Fig. 9 Results of FD- $k$ NN



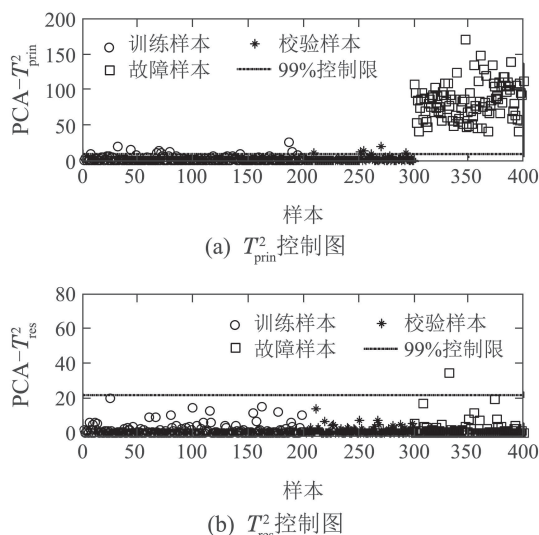


图 10 Diff-PCA检测结果

Fig. 10 Results of Diff-PCA

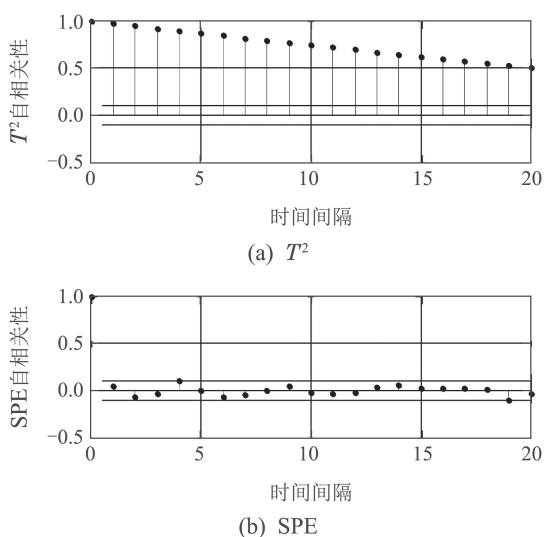


图 11 PCA统计指标自相关性

Fig. 11 Autocorrelation of statistics in PCA

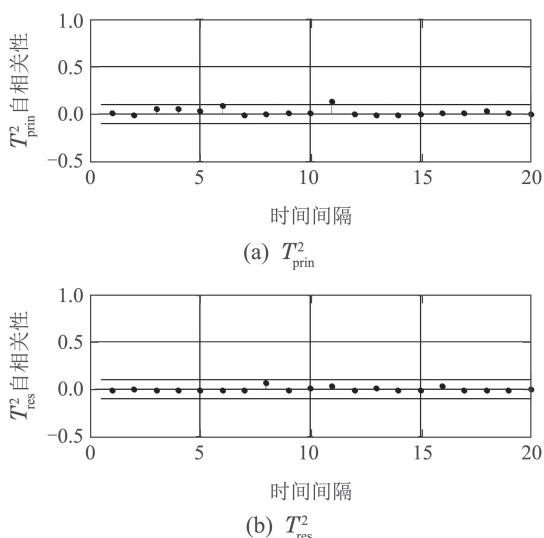


图 12 Diff-PCA统计指标自相关性

Fig. 12 Autocorrelation of statistics in Diff-PCA

## 5 TE过程

TE过程是Downs等人基于Tennessee Eastman化学公司实际化工生产过程提出的一个仿真系统<sup>[18]</sup>。如图13所示,TE过程包含5个操作单元:反应器、冷凝器、循环压缩机、分离器和汽提塔;包含4种气体原料A、C、D和E,两种液态产物G和H,还包含副产物F和惰性气体B。整个过程共包含22个连续过程测量变量、19个成分测量变量和11个控制变量。TE过程是一个常用的标准问题(benchmark problem),其较好地模拟了实际复杂工业过程系统的许多典型特征,因此被作为仿真例子广泛应用于控制、优化、过程监控与故障诊断的研究中<sup>[18-19]</sup>。

TE仿真系统通过3分钟采样间隔不仅能够模拟正常操作环境,同时还可以模拟21种故障环境。在本节中,依据文献[18],选取33个变量对故障进行分析。选取960个正常样本被用于建立模型,同时选取480个正常样本用于模型校验。每种故障包含960个样本且故障于161时刻被引入并持续到过程结束。

如文献[18-19]介绍,由于故障3、9和15的故障尺度较小且整个过程表现平稳,因此各种方法均不能有效检测以上过程故障。KPCA和DPCA等可以准确地检测故障1、2、6、7、8、12、13和14,且故障检测率达到95%以上;对故障5、10、16和19具有较低的检测率<sup>[19]</sup>。在本节中,将Diff-PCA- $T^2_{\text{prin}}$ 和Diff-PCA- $T^2_{\text{res}}$ 对故障5、10、14、16和19进行检测并与传统的PCA、KPCA、DPCA及FD- $k$ NN等方法进行对比分析。各种方法的参数设置如下:PCA的主元数设置为9<sup>[18]</sup>;KPCA主元数设置为25,通过交叉验证方法确定窗宽参数为542<sup>[19]</sup>;DPCA方法中主元数设置为20,参数lag = 2<sup>[18]</sup>;FD- $k$ NN中近邻数 $k$ 设置为3;Diff-PCA- $T^2_{\text{prin}}$ 和Diff-PCA- $T^2_{\text{res}}$ 中主元数为9,而得分重构中的近邻数 $k$ 通过对校验数据的寻优测试确定为50。以上各种方法的故障检测率和误报率见表1和2,其中,最高检测率与最低误报率已被加粗。图14-18给出 $T^2_{\text{prin}}$ 和 $T^2_{\text{res}}$ 关于上述故障的故障检测控制图。

由表1可以看出,本文方法与基于PCA的其他方法对故障14均具有良好的检测性能,检测率达到100%。对于故障5和19,基于 $T^2$ 和SPE的不同故障检测策略,故障检测率均低于70%;而本文方法的检测率达到90%以上,特别是对故障5的故障检测率达到100%。Diff-PCA- $T^2_{\text{res}}$ 与KPCA-SPE对故障10和16的检测率近似相同,但是本文方法具有较低的故障误报率。综合以上检测结果可以发现, $T^2_{\text{res}}$ 具有高于 $T^2_{\text{prin}}$ 的故障检测率。这说明上述故障是由残差空间异常变化引起

的. 由于SPE统计量需要假设过程残差变量是独立同分布并且平稳变化的, 然而这种假设在非线性过程通常是较难得到满足, 因此对于上述故障而言, 基于SPE的不同检测策略具有较低的故障检测率或较高的误报率. 另外, 从本质上来说, SPE计算的是残差得分到坐标原点的欧氏距离, 而这种距离的计算过程并没有考虑变量的方差结构. 一旦故障是由方差较小变量的异常变化引起且故障尺度较小, 那么在SPE计算过程中, 方差较大的变量对SPE的贡献可以覆盖异常变量相应的贡献, 从而使得故障点被误报为正常点, 使得

故障检测率降低.

在本例中, 由He等提出的多模态故障检测方法FD- $k$ NN<sup>[14]</sup>也对上述故障进行了测试. 由表1和2可以看出, 本文方法具有高于FD- $k$ NN的故障检测率. 主要原因是FD- $k$ NN应用测试样本与其近邻的欧氏距离来监控测试样本状态<sup>[20]</sup>. 对于这种距离, 向量的所有分量都被同等对待, 换句话说, 变量和协方差结构之间的相关性没有被考虑在内. 其次, 由于FD- $k$ NN方法只考虑训练数据本身的变化, 而不能挖掘过程潜隐变量的变化.

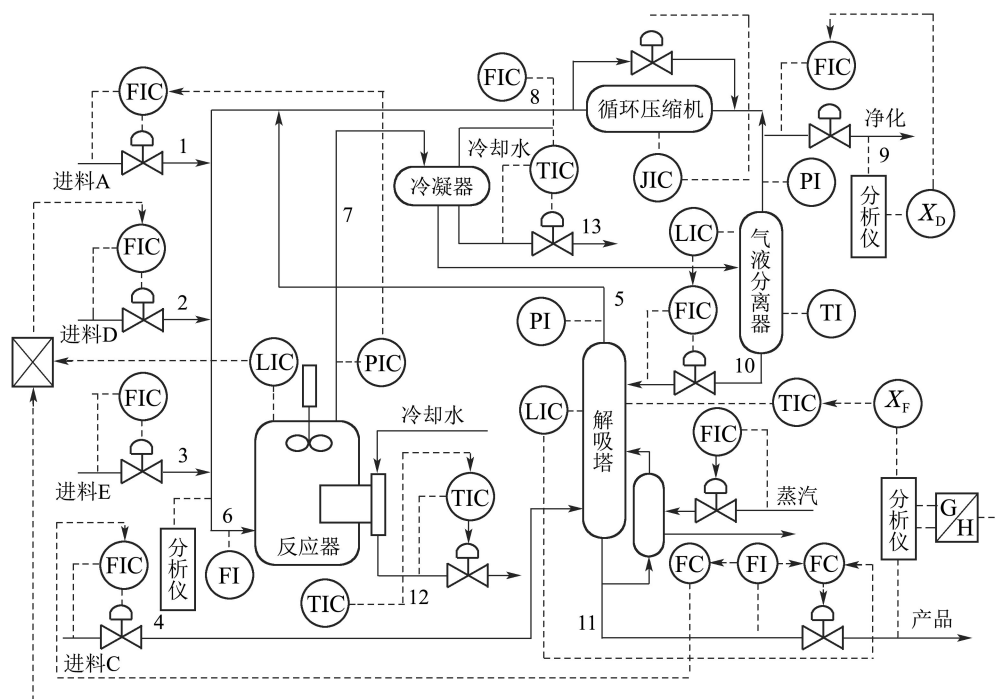


图 13 TE过程流程图

Fig. 13 Layout of TE processes

表 1 各种方法故障检测率

Table 1 Fault detection rate based on different methods

| 方法                  | 故障5           | 故障10         | 故障14          | 故障16         | 故障19         |
|---------------------|---------------|--------------|---------------|--------------|--------------|
| PCA- $T^2$          | 30.13         | 49.25        | 99.63         | 35.75        | 20.63        |
| PCA-SPE             | 30.75         | 55.88        | <b>100.00</b> | 53.13        | 35.50        |
| KPCA- $T^2$         | 31.88         | 56.63        | <b>100.00</b> | 40.88        | 56.75        |
| KPCA-SPE            | 44.38         | 82.13        | <b>100.00</b> | 85.75        | 42.13        |
| DPCA- $T^2$         | 27.75         | 45.25        | 99.75         | 28.25        | 11.00        |
| DPCA-SPE            | 31.13         | 52.13        | 99.75         | 49.38        | 60.25        |
| FD- $k$ NN          | 26.63         | 44.00        | <b>100.00</b> | 30.88        | 11.63        |
| $T^2_{\text{prin}}$ | 30.75         | 49.25        | 87.50         | 31.75        | 5.50         |
| $T^2_{\text{res}}$  | <b>100.00</b> | <b>83.75</b> | <b>100.00</b> | <b>86.25</b> | <b>90.50</b> |

表 2 各种方法故障误报率

Table 2 False alarm rate based on different methods

| 方法                  | 故障5         | 故障10        | 故障14        | 故障16        | 故障19        |
|---------------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| PCA- $T^2$          | 1.88        | 1.88        | <b>0.63</b> | 17.50       | <b>0.63</b> |
| PCA-SPE             | 4.38        | 3.13        | 3.75        | 8.13        | 1.88        |
| KPCA- $T^2$         | 1.25        | 2.50        | <b>0.63</b> | 17.50       | <b>0.63</b> |
| KPCA-SPE            | 3.75        | 5.00        | 3.75        | 46.25       | 3.75        |
| DPCA- $T^2$         | 1.88        | 1.88        | 1.88        | 12.50       | <b>0.63</b> |
| DPCA-SPE            | 3.13        | 3.75        | 5.63        | 4.38        | 2.50        |
| FD- $k$ NN          | 0.63        | 1.88        | <b>0.63</b> | 5.63        | 2.50        |
| $T^2_{\text{prin}}$ | 1.87        | 2.50        | 1.75        | 16.05       | 2.50        |
| $T^2_{\text{res}}$  | <b>0.00</b> | <b>0.63</b> | <b>0.63</b> | <b>1.25</b> | <b>0.63</b> |

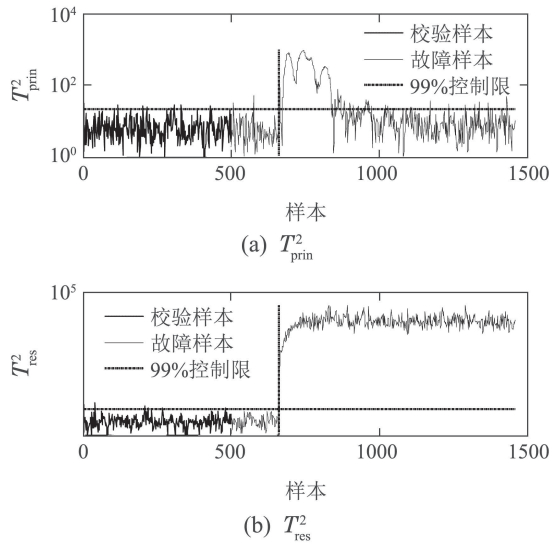


图 14 故障5检测结果  
Fig. 14 Results of fault 5

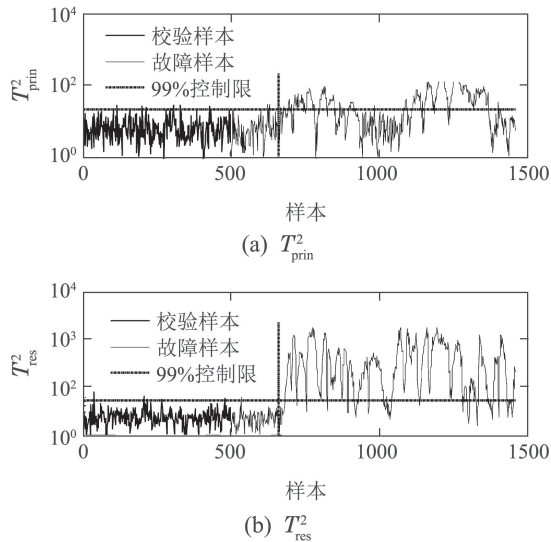


图 15 故障10检测结果  
Fig. 15 Results of fault 10

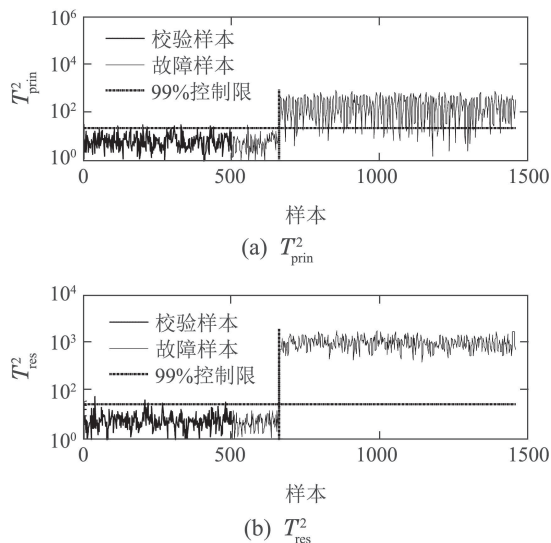


图 16 故障14检测结果  
Fig. 16 Results of fault 14

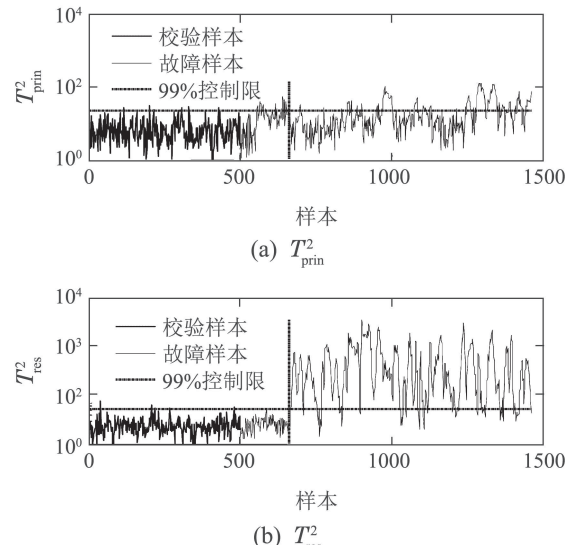


图 17 故障16检测结果  
Fig. 17 Results of fault 16

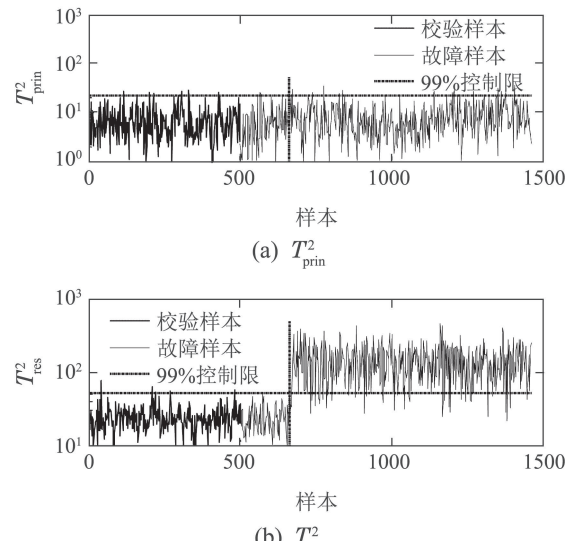


图 18 故障19检测结果  
Fig. 18 Results of fault 19

## 6 结论

传统的PCA方法利用 $T^2$ 和SPE统计指标进行故障检测. 当数据具有多模态结构或过程变量非线性相关时,  $T^2$ 和SPE具有较低的故障检测率. 为了提高过程故障检测能力, 本文提出一种基于得分重构差分的故障检测策略. 得分重构差分方法能够降低过程数据多模态或变量非线性特征的影响, 能够提高故障检测率. 通过模拟测试与对比分析, 本文方法的有效性得到验证.

由于本文方法应用 $k$ 近邻规则进行得分重构, 因此近邻数的选择问题是接下来研究的一个方向; 同时, 虽然本文方法相比传统方法具有较高的检测性能, 但文中未给出故障隔离策略, 因此, 本文方法的隔离策略也是未来的一个研究方向.



## 参考文献:

- [1] QIN S J. Statistical process monitoring: basics and beyond. *Journal of Chemometrics*, 2003, 17(8/9): 480 – 502.
- [2] GE Z, SONG Z. Multivariate statistical process control. *Quality & Reliability Engineering International*, 2007, 23(5): 517 – 543.
- [3] QIU Tian, BAI Xiaojing, ZHENG Xiyu. Incipient fault detection of multivariate exponentially weighted moving average principal component analysis. *Control Theory & Applications*, 2014, 31(1): 19 – 26.  
(邱天, 白晓静, 郑茜予. 多元指数加权移动平均主元分析的微小故障检测. 控制理论与应用, 2014, 31(1): 19 – 26.)
- [4] ZHOU Donghua, LI Gang, LI Yuan. *Data Driven Based Process Fault Detection and Diagnosis Technology*. Beijing: Science Press, 2011.  
(周东华, 李钢, 李元. 数据驱动的工业过程故障诊断技术. 北京: 科学出版社, 2011.)
- [5] CONG Ya, GE Zhiqiang, SONG Zhihuan. Multi-rate principle component analysis for process monitoring. *Journal of Shanghai Jiaotong University*, 2015, 49(6): 762 – 767.  
(丛亚, 葛志强, 宋执环. 多采样率主元分析的过程故障检测. 上海交通大学学报, 2015, 49(6): 762 – 767.)
- [6] JIA F, MARTIN E B, MORRIS A J. Nonlinear principal components analysis for process fault detection. *Computers & Chemical Engineering*, 1998, 22(12): S851 – S854.
- [7] MORI Y, KURODA M, MAKINO N. *Nonlinear Principal Component Analysis*. Singapore: Springer, 2016.
- [8] LEE J M, YOO C K, SANG W C. Nonlinear process monitoring using kernel principal component analysis. *Chemical Engineering Science*, 2004, 59(1): 223 – 234.
- [9] WANG H, YAO M. Fault detection of batch processes based on multivariate functional kernel principal component analysis. *Chemometrics & Intelligent Laboratory Systems*, 2015, 149(Part A): 78 – 89.
- [10] ZHANG Y. Enhanced statistical analysis of nonlinear processes using KPCA, KICA and SVM. *Chemical Engineering Science*, 2009, 64(5): 801 – 811.
- [11] KU W, STORER R H, GEORGAKIS C. Disturbance detection and isolation by dynamic principal component analysis. *Chemometrics & Intelligent Laboratory Systems*, 1995, 30(1): 179 – 196.
- [12] RATO T J, REIS M S. Fault detection in the Tennessee Eastman benchmark process using dynamic principal components analysis based on decorrelated residuals (DPCA-DR). *Chemometrics & Intelligent Laboratory Systems*, 2013, 125(7): 101 – 108.
- [13] WANG G, LIU J, ZHANG Y. A novel multimode data processing method and its application in industrial process monitoring. *Journal of Chemometrics*, 2015, 29(2): 126 – 138.
- [14] HE Q P, WANG J. Fault detection using the k-nearest neighbor rule for semiconductor manufacturing processes. *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, 2007, 20(4): 345 – 354.
- [15] MA H, HU Y, SHI H. A novel local neighborhood standardization strategy and its application in fault detection of multimode processes. *Chemometrics & Intelligent Laboratory Systems*, 2012, 118(7): 287 – 300.
- [16] RATO T J, REIS M S. Advantage of using decorrelated residuals in dynamic principal component analysis for monitoring large-scale systems. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2013, 52(38): 13685 – 13698.
- [17] DEHNAD K. Density estimation for statistics and data analysis. *Technometrics*, 1986, 29(4): 296 – 297.
- [18] WANG J, HE Q P. Multivariate statistical process monitoring based on statistics pattern analysis. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2010, 49(17): 7858 – 7869.
- [19] CHENG C Y, HSU C C, CHEN M C. Adaptive kernel principal component analysis (KPCA) for monitoring small disturbances of nonlinear processes. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2011, 49(5): 2254 – 2262.
- [20] ZHOU Z, WEN C, YANG C. Fault detection using random projections and k-nearest neighbor rule for semiconductor manufacturing processes. *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, 2015, 28(1): 70 – 79.

## 作者简介:

张成 副教授, 博士研究生, 研究方向为复杂工业过程故障诊断, E-mail: zcgg\_2005@126.com;

郭青秀 硕士研究生, 研究方向为复杂工业生产过程智能建模等, E-mail: 505087396@qq.com;

李元 教授, 博士生导师, 研究方向为复杂工业过程故障诊断, E-mail: li-yuan@mail.tsinghua.edu.cn;

高宪文 教授, 博士生导师, 研究方向为复杂工业生产过程智能建模等, E-mail: gaoxianwen@ise.neu.edu.cn.