

基于高效核偏最小二乘的质量相关故障检测

孔祥玉¹, 周红平^{1†}, 罗家宇¹, 安秋生², 陈雅琳¹

(1. 火箭军工程大学 导弹工程学院, 陕西 西安 710025; 2. 山西师范大学 数学与计算机科学学院, 山西 临汾 041004)

摘要: 核偏最小二乘(KPLS)是一种多元统计方法, 广泛应用于过程监控, 然而, KPLS采用斜交分解, 导致质量相关空间存在冗余信息易引发误报警. 因此, 本文提出了高效核偏最小二乘(EKPLS)模型, 所提方法通过奇异值分解(SVD)将核矩阵正交分解为质量相关空间和质量无关空间, 有效降低质量相关空间中的冗余信息, 并采用主成分分析(PCA)按方差大小将质量相关空间分解为质量主空间和质量次空间. 此外, 为进一步降低由质量无关故障引发的误报警, 提出基于质量估计的正交信号修正(OSC)预处理方法, 并结合EKPLS模型提出了OSC-EKPLS算法. OSC-EKPLS通过质量估计值对被测数据进行OSC预处理, 降低了计算复杂度和误报率. 最后, 通过数值仿真和田纳西-伊斯曼过程验证了OSC-EKPLS具有良好的故障检测性和更低的误报率.

关键词: 故障检测; 正交信号修正; 质量相关; 核偏最小二乘; 非线性过程监测; 误报率

引用格式: 孔祥玉, 周红平, 罗家宇, 等. 基于高效核偏最小二乘的质量相关故障检测. 控制理论与应用, 2023, 40(4): 683–692

DOI: 10.7641/CTA.2022.11145

Quality-related fault detection based on efficient kernel PLS

KONG Xiang-yu¹, ZHOU Hong-ping^{1†}, LUO Jia-yu¹, AN Qiu-sheng², CHEN Ya-lin¹

(1. Department of Missile Engineering, Rocket Force University of Engineering, Xi'an Shaanxi 710025, China;

2. Department of Mathematics and Computer Science, Shanxi Normal University, Linfen Shanxi 041004, China)

Abstract: Kernel partial least squares (KPLS) is a multivariate statistical method that is widely used in process monitoring. However, the KPLS adopts oblique decomposition, which leads to the existence of redundant information in the quality-related space and results in false alarms. Therefore, this paper proposes an efficient kernel partial least squares (EKPLS) model. The proposed method orthogonally decomposes the kernel matrix into quality-related space and quality-unrelated space through the singular value decomposition (SVD), which effectively reduces the redundancy information in the quality-related space. Then, the principal component analysis (PCA) is used to decompose the quality-related space into quality primary space and quality secondary space according to the variance. In addition, to further reduce the false alarms caused by quality-unrelated faults, an orthogonal signal correction (OSC) preprocessing method based on the quality estimation is proposed, and an OSC-EKPLS algorithm, combined with the EKPLS model, is proposed. The OSC-EKPLS performs OSC preprocessing on the measured data through the quality estimation value, which reduces the computational complexity and the false alarm rate. Finally, it is verified that the OSC-EKPLS has good fault detection and lower false alarm rate by numerical simulation and Tennessee-Eastman process.

Key words: fault detection; orthogonal signal correction; quality-related; kernel partial least squares; nonlinear process monitoring; false alarm rate

Citation: KONG Xiangyu, ZHOU Hongping, LUO Jiayu, et al. Quality-related fault detection based on efficient kernel PLS. *Control Theory & Applications*, 2023, 40(4): 683–692

1 引言

多元统计过程监控(multivariate statistical process monitoring, MSPM)因无需完备的先验知识和建立系统的精确模型, 在工业过程的故障检测中得到了广泛的应用.

常用的MSPM方法有主成分分析(principal component analysis, PCA)^[1]、偏最小二乘(partial least squares, PLS)^[2]、规范变量分析(canonical variable analysis, CVA)^[3]等为核心的投影降维方法. 近年来, 有研究和工业实践表明^[4–8], 并不是所有的工业故障都会

收稿日期: 2021–11–23; 录用日期: 2022–04–28.

[†]通信作者. E-mail: 2227922558@qq.com; Tel.: +86 18423221514.

本文责任编辑: 王大轶.

国家自然科学基金项目(61673387, 61833016), 陕西省自然科学基金项目(2020JM–356)资助.

Supported by the National Natural Science Foundation of China (61673387, 61833016) and the National Natural Science Foundation of Shaanxi Province (2020JM–356).

导致产品质量的波动. 相反, 如果忽略质量无关故障的报警, 可以大大减少工厂不必要的停机和维护, 最终带来可观的经济效益. 由于质量变量的采集通常具有显著的时延, 因此对这些质量变量和过程变量进行建模, 然后利用该模型来指导故障检测方案的实施是合理的. PLS因适用于大数据、多变量、复杂环境下的产品质量故障监测, 受到众多专家学者的关注. 目前, 基于PLS模型的监测方法已经得到迅速发展. Peng等^[9]提出高效潜结构投影(efficient projection to latent structures, EPLS)算法, 弥补了传统PLS斜交分解和残差空间中存在较大变异信息的缺陷, 全面提高了质量相关故障的可检测性. Kong等^[10]利用质量无关故障数据建立正交信号修正(orthogonal signal correction, OSC)模型, 提出4种OSC-EPLS算法, 有效降低了EPLS算法的误报率. 值得注意的是, 以上研究都是针对线性系统. 当过程数据具有强非线性时, PLS将很难给出令人满意的结果. 因此, 有必要针对非线性问题展开研究.

在实际工业过程中, 过程变量与过程变量之间以及过程变量与质量变量之间的非线性是不容忽视的, 为了解决这个问题, 人们提出了许多非线性PLS扩展模型. Rosipal等^[11]提出的KPLS(kernel PLS), 因其具有等同于线性PLS的复杂度, 成为非线性工业过程监控领域的主流方法. 在KPLS模型中, 原始输入数据通过非线性映射投影到高维空间中, 然后在特征数据和质量数据之间构建线性PLS模型. Peng等^[12]提出了一种基于KPLS模型的非线性质量相关故障检测方法, 称为全核PLS(total kernel PLS, TKPLS). Sun等^[13]提出了并发核潜结构(kernel concurrent projection to latent structures, KCPLS)算法. Jiao等^[14]将改进潜结构投影(modifications of PLS, MPLS)模型扩展到非线性领域, 提出了改进核偏最小二乘(modified kernel partial least squares, MKPLS).

然而, 对降低KPLS及其扩展方法因斜交分解导致的误报情况的研究还不够完善. 由于KPLS模型采用斜交分解导致质量相关空间存在质量无关信息, 将引发误报警, 残差空间中存在较大变异信息, 导致统计量构造不合理. 为了改进KPLS模型, 本文提出了针对后处理模型改进的高效核偏最小二乘方法(efficient kernel partial least squares, EKPLS). EKPLS首先通过高斯核函数将原始过程变量映射到高维特征空间, 将数据间的非线性关系线性化. 然后构建KPLS模型, 采用奇异值分解(singular value decomposition, SVD)算法将核矩阵正交分解为质量相关空间和质量无关空间. 此外, 通过PCA将质量相关空间分解为质量主空间和质量次空间, 提取质量相关空间中的关键指标信息. 最后, 设计各个空间的故障控制限并计算相应的统计量, 实现质量相关故障的在线检测. 为了进一步

降低EKPLS在故障检测中的误报率, 结合OSC预处理方法提出基于质量估计的OSC-EKPLS算法. 基于质量估计的OSC模型利用测试数据的PLS输出预测值建模, 对测试数据进行去质量相关预处理. 与现有的大多数非线性方法相比, OSC-EKPLS具有更简单的诊断逻辑和更稳定的性能. 本文创新体现在以下几点: 1) 提出了一种用于非线性过程监测的EKPLS模型; 2) 提出了基于质量估计的OSC预处理模型; 3) 基于OSC-EKPLS算法构建了一套完整的非线性过程监控技术.

本文结构安排如下: 第2节介绍了KPLS模型; 第3节提出了基于EKPLS算法的过程监控技术和基于质量估计的OSC模型; 第4节通过一个数值实例和田纳西-伊斯曼工业过程, 比较了MKPLS, TKPLS和OSC-EKPLS算法在故障检测中的效果; 最后在第5节对OSC-EKPLS算法进行总结.

2 KPLS模型

假设非线性过程包含 m 个过程变量和 p 个质量变量, 则自变量矩阵 $X = [x_1 \ x_2 \ \cdots \ x_n]^T \in \mathbb{R}^{n \times m}$, 因变量矩阵 $Y = [y_1 \ y_2 \ \cdots \ y_n]^T \in \mathbb{R}^{n \times p}$, 由 n 个训练样本组成, 其中 $x_i \in \mathbb{R}^m$, $y_i \in \mathbb{R}^p$, $i = 1, 2, \dots, n$.

为了处理过程变量之间的非线性特征, 定义一种非线性映射 ϕ , 将输入向量从原始空间映射到特征空间 F . 经过非线性映射后, 原始输入矩阵 X 变为

$$\Phi_{\text{raw}} = [\phi(x_1) \ \phi(x_2) \ \cdots \ \phi(x_n)]^T \in \mathbb{R}^{n \times M}, \quad (1)$$

其中 Φ_{raw} 的维数 M 可以非常大甚至无限大.

为了将特征数据集中到零均值, 需要对正常训练数据进行以下预处理:

$$\Phi = \Phi_{\text{raw}} - \bar{\Phi}_{\text{raw}}, \quad (2)$$

$$\bar{\Phi}_{\text{raw}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \phi(x_i) = \frac{1}{n} \mathbf{1}_n \mathbf{1}_n^T \Phi_{\text{raw}}, \quad (3)$$

其中: $\bar{\Phi}_{\text{raw}}$ 是 Φ_{raw} 的均值, $\mathbf{1}_n$ 表示元素全为数字1的 n 维列向量.

为了避免 Φ 的显式使用, 定义核矩阵

$$K = \Phi \Phi^T \in \mathbb{R}^{n \times n}, \quad (4)$$

因此, 计算 K , 即

$$K = \left(I_n - \frac{1}{n} \mathbf{1}_n \mathbf{1}_n^T \right) K_{\text{raw}} \left(I_n - \frac{1}{n} \mathbf{1}_n \mathbf{1}_n^T \right), \quad (5)$$

其中: $K_{\text{raw}} = \Phi_{\text{raw}} \Phi_{\text{raw}}^T$, I_n 是 n 维单位矩阵.

根据Cover定理^[15], 非线性数据集 (X, Y) 近似变成线性数据集 (Φ, Y) , 其中 Φ 包含过程变量的所有故障信息. KPLS算法从 Φ 和 Y 矩阵中依次提取潜变量 t , u 和权重向量 w , q . 通过表1构建的KPLS模型如下:

$$\begin{cases} \Phi = \hat{\Phi} + \tilde{\Phi} = TP^T + \tilde{\Phi}, \\ Y = \hat{Y} + \tilde{Y} = TQ^T + \tilde{Y}, \end{cases} \quad (6)$$

其中: $T \in \mathbb{R}^{n \times A}$ 是得分矩阵, $P \in \mathbb{R}^{M \times A}$ 和 $Q \in \mathbb{R}^{p \times A}$ 分别是 Φ 和 Y 的负载矩阵. $\tilde{\Phi}$ 和 \tilde{Y} 是建模残差. A 是通过交叉验证^[16] 确定的主元个数.

表1 KPLS算法
Table 1 Algorithm of KPLS

1	令 $i = 1, Y_1 = Y, K_1 = K$;
2	令 u_i 为 Y_1 的第1列;
3	计算 Φ 的得分: $t_i = \Phi \Phi^T u_i = K u_i$;
4	单位化 $t_i: t_i = \frac{t_i}{\ t_i\ }$;
5	计算输出负载向量: $q_i = Y_i^T t_i$;
6	计算输出得分向量: $u_i = Y_i q_i$;
7	单位化 $u_i: u_i = \frac{u_i}{\ u_i\ }$;
8	重复步骤3-7, 直到 t_i 收敛;
9	计算 Φ 和 Y 的残差: $K_{i+1} = (I_n - t_i t_i^T) K_i (I_n - t_i t_i^T)$, $Y_{i+1} = (I_n - t_i t_i^T) Y_i$;
10	保存 $T = [T \ t_i], U = [U \ u_i]$;
11	令 $i = i + 1$, 重复步骤2-10, 直到 $i > A$.

根据Mercer定理^[17-18], 如果核函数是正积分算子的连续核, 则存在到特征空间F的非线性映射. 不同的核函数决定不同的映射 ϕ 和特征空间F. 本文采用高斯核函数

$$K(x, y) = \exp\left(-\frac{\|x - y\|^2}{c}\right). \quad (7)$$

参数 c 是高斯函数的宽度. 一般来说, 当 c 增大时, 模型的误报率降低, 而漏报率升高. Schölkopf等^[19] 提出了一种确定 c 的方法, 被广泛用在基于KPLS的非线性回归中. 本文通过实验为正常训练数据寻找低于10%误报率的参数 c .

3 EKPLS过程监控技术

由于KPLS将特征空间F斜交分解为主元空间和残差空间, 导致主元空间 $\hat{\Phi}$ 中可能包含不影响输出 Y 且对预测 Y 无用的变化^[20]. 为了改进原始KPLS模型, EKPLS模型采用SVD正交分解核矩阵, 得到质量相关空间和质量无关空间; 并采用PCA按方差大小, 将质量相关空间划分为质量主空间和质量次空间.

3.1 EKPLS模型及其统计量

由KPLS模型可以得出 Φ 和 Y 的关系如下所示^[13]:

$$Y = \Phi C + E_y, \quad (8)$$

$$C = \Phi^T U (T^T \Phi \Phi^T U)^{-1} T^T Y = \Phi^T U (T^T K U)^{-1} T^T Y, \quad (9)$$

其中: C 是 Φ 和 Y 之间的回归系数矩阵, E_y 为模型误差.

由于 Φ 不能显式求取, 无法直接建立 Φ 和 Y 的回归模型. 可以通过建立 K 与 Y 的回归模型, 间接建立 Φ 和

Y 的回归模型. 将式(9)代入式(8), 得^[13]

$$Y = \Phi \Phi^T U (T^T K U)^{-1} T^T Y + E_y = K U (T^T K U)^{-1} T^T Y + E_y. \quad (10)$$

令

$$M = U (T^T K U)^{-1} T^T Y, \quad (11)$$

所以

$$\hat{Y} = K M. \quad (12)$$

显然, 式(10)建立了核矩阵和输出矩阵之间的线性关系. 接下来, 将核矩阵分解为两个正交的部分, 其中一个完全负责预测输出, 而另一个对预测输出没有贡献. 为此, 采取了以下空间分解.

对 $M M^T$ 进行SVD, 即^[13]

$$M M^T = [\hat{\Gamma} \ \tilde{\Gamma}] \begin{bmatrix} \Lambda & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\Gamma} \\ * \end{bmatrix}, \quad (13)$$

其中: $\hat{\Gamma} \in \mathbb{R}^{n \times p}$, $\tilde{\Gamma} \in \mathbb{R}^{n \times (n-p)}$, $\Lambda \in \mathbb{R}^{p \times p}$.

将 K 分别投影到 $\hat{\Gamma} \hat{\Gamma}^T$ 和 $\tilde{\Gamma} \tilde{\Gamma}^T$, 得到质量相关空间 K_y 和质量无关空间 K_o ^[13], 即

$$K_y = \hat{\Gamma} \hat{\Gamma}^T K, \quad K_o = \tilde{\Gamma} \tilde{\Gamma}^T K, \quad (14)$$

然后对质量相关空间 K_y 进行PCA处理, 将其分解为质量主空间和质量次空间. 质量主空间 (K_{y1}) 监测质量相关空间 K_y 中的较大异常波动, 质量次空间 (K_{y2}) 监测质量相关空间 K_y 中的较小异常波动.

EKPLS模型如下所示:

$$\begin{cases} K = K_{y1} + K_{y2} + \tilde{K} = T_y P^T + K_{y2} + \tilde{K}, \\ Y = \hat{Y} + \tilde{Y} = K M + \tilde{Y}. \end{cases} \quad (15)$$

EKPLS过程监控统计量构造如下: 对于一组给定的测试样本 $x_{\text{new}} \in \mathbb{R}^m$, 将其映射到特征空间F后为 $\phi(x_{\text{new}})_{\text{raw}} \in \mathbb{R}^M$; 其内积为

$$k_{\text{raw}}^{\text{new}} = K(x_i, x_{\text{new}}) = \langle \phi(x_i), \phi(x_{\text{new}}) \rangle, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (16)$$

中心化向量 $\phi(x_{\text{new}})_{\text{raw}}$:

$$\phi(x_{\text{new}}) = \phi(x_{\text{new}})_{\text{raw}} - \frac{1}{n} \bar{\phi}_{\text{raw}}^T \mathbf{1}_n. \quad (17)$$

中心化向量 k_{new} :

$$k_{\text{new}} = \left(I_n - \frac{1}{n} \mathbf{1}_n \mathbf{1}_n^T\right) (k_{\text{raw}}^{\text{new}} - \frac{1}{n} K_{\text{raw}} \mathbf{1}_n), \quad (18)$$

EKPLS模型先将 k_{new} 分解为质量相关空间 k_y 和质量无关空间 k_o . 人们往往更加关心质量相关空间 k_y 内的空间变化. 因为 $k_y \in \mathbb{R}^{n \times 1}$ 中 $n \gg 1$ (空间内信息复杂且无序), 只构建 T^2 统计量, 会对 k_y 空间内方差较小部分产生较高漏报. 所以通过PCA将 k_y 内的信息按照方差大小分解到 k_{y1} 和 k_{y2} , 然后构建 T^2 统计量监测 k_{y1} 内的变化(方差较大)和 Q 统计量监测 k_{y2} 内的变化(方差较小).

用 t_y 和 t_o 构造 T^2 统计量, k_{y2} 构造 Q 统计量, 如下:

$$t_y = P^T \hat{\Gamma} \hat{\Gamma}^T k_{new}, \quad (19)$$

$$t_o = \tilde{\Gamma}^T k_{new}, \quad (20)$$

$$T_y^2 = t_y^T \left(\frac{P^T \hat{\Gamma} \hat{\Gamma}^T K^T K \hat{\Gamma} \hat{\Gamma}^T P}{n-1} \right)^{-1} t_y, \quad (21)$$

$$T_o^2 = t_o^T \left(\frac{\tilde{\Gamma}^T K^T K \tilde{\Gamma}}{n-1} \right)^{-1} t_o, \quad (22)$$

$$Q = \|k_{y2}\|^2 = k_{y1}^T (I - PP^T) k_{y1}, \quad (23)$$

$$k_{y1} = Pt_y. \quad (24)$$

通过 F 分布确定 T^2 统计量的控制限, χ^2 分布确定 Q 统计量的控制限, 如下:

$$J_{th, T_y^2} = \frac{A_1(n^2-1)}{n(n-1)} \mathcal{F}_\alpha(A_1, n-1), \quad (25)$$

$$J_{th, T_o^2} = \frac{(m-p)(n^2-1)}{n(n-m+p)} \mathcal{F}_\alpha(m-p, n-m+p), \quad (26)$$

$$J_{th, Q} = g\chi_{h, \alpha}^2, \quad g = \frac{S}{2u}, \quad h = \frac{2u^2}{S}, \quad (27)$$

其中: A_1 是对质量相关空间 K_y 进行PCA处理时的主元个数, 由累计方差贡献率确定; u 和 S 为正常样本计算 Q 统计量对应的均值和方差。

3.2 基于质量估计的OSC模型

KPLS及其扩展方法由于空间分解的局限性, 质量相关空间仍存在质量无关信息. 为进一步降低质量无关故障导致的误报警, 考虑对原始数据进行OSC预处理.

目前已有6种OSC算法^[21-25], Svante Wold最先提出了SWosc(Svante Wold osc)算法. OSC算法的目的是去除 x 中与 y 正交的信息. 因为质量无关故障和输出 y 正交. 所以, 对测试数据进行OSC预处理后会出现两种现象: 1) x_{new} 为质量相关故障, 那么 x_{new} 几乎没有变化, 或只有少量信息丢失. 2) x_{new} 为质量无关故障, 那么 x_{new} 会丢失大量信息.

目前, OSC预处理方法可以分成基于正常数据和基于故障数据两类, 其处理思想是采用正常数据或故障数据进行OSC建模找出投影方向矩阵 P_\perp 和 W_\perp , 然后从 x_{new} 中减去投影在 P_\perp 和 W_\perp 方向上的信息. OSC模型的建立过程, 实际是质量无关信息的一个特征提取过程. 如果建模数据包含的质量无关信息特征种类越多, 则通过OSC预处理后的数据就会包含更少的质量无关信息. 基于正常数据的OSC模型包含的质量无关信息少, 导致 x_{new} 按照矩阵 P_\perp 和 W_\perp 投影后并不能去除大量质量无关信息. 文献[10]已通过实验证明基于故障数据的OSC模型在去除质量无关信息能力上比基于正常数据的OSC模型更强. 但是, 不同种类故障数据建立的OSC模型, 在去除质量无关信息的能力上有较大差异, 很难寻找到合适的故障数据, 从而建

立去正交能力优秀的OSC模型.

针对以上两种OSC模型的缺点, 本文提出第3类OSC模型—基于质量估计的OSC模型. 由于输入和输出之间存在内在关联并且输出存在滞后性, 所以前两类OSC预处理方法都存在一个建模过程, 其目的是寻找一个较好的去正交方向. 根据OSC预处理原理, 不难发现: 采用 y_{new} 对 x_{new} 进行OSC预处理, 可以达到最好的去正交效果. 然而, y_{new} 并不能和 x_{new} 同时获得. 因此, 本文采用PLS模型中的估计值 \hat{y}_{new} 来代替 y_{new} . 由于PLS模型能较好的预测 y_{new} , 所以 \hat{y}_{new} 和 y_{new} 非常接近, 从而采用 \hat{y}_{new} 对 x_{new} 进行OSC预处理, 可以达到很好的去正交效果. 此举不但可以达到较好的去正交效果, 还避免了OSC的建模过程, 从而降低了计算量.

文献[10]对比了6种OSC算法应用在EPLS模型中的故障检测效果, 本文采用总体效果较好的SWosc算法进行数据预处理. 表2给出了基于质量估计的SWosc算法步骤.

表2 基于质量估计的SWosc算法

Table 2 SWosc algorithm based on quality estimation

- 1 标准化 X_{new} 并计算:
- 2 $\hat{Y}_{new} = X_{new} X^T U (T^T X X^T U)^{-1} T^T Y$;
- 3 通过PCA求 X_{new} 的第一主元 t , 令 $t_\perp = t$;
- 4 计算 $t_{new} = t - \frac{\hat{Y}_{new}^T t}{\hat{Y}_{new}^T \hat{Y}_{new}} \hat{Y}_{new}$;
- 5 对 X_{new} 和 t_{new} 进行PLS, 计算负载 P , q 和权重 W ;
- 6 计算 $w_\perp = W (P^T W)^{-1} q$;
- 7 计算 $t_\perp = X_{new} w_\perp$;
- 8 重复步骤3-6, 直到 t_\perp 收敛;
- 9 计算 $p_\perp = \frac{X_{new}^T t_\perp}{t_\perp^T t_\perp}$;
- 10 去正交后的结果: $X_{OSC} = X_{new} - t_\perp p_\perp^T$;
- 11 重复以上步骤, 直到满足设定的去正交次数.

3.3 OSC-EKPLS过程监控技术

基于所提的EKPLS模型和OSC预处理方法, 设计预处理和后处理相结合的非线性过程监控策略, 实现在线过程监测.

OSC-EKPLS过程监控具体步骤如下:

1) 离线建模阶段.

步骤1 标准化 X 和 Y ;

步骤2 通过式(4)-(5)和式(7)使用正常样本计算核矩阵 K ;

步骤3 通过表1和式(11)计算 M ;

步骤4 对 MM^T 进行SVD分解, 通过式(14)计算 K_y 和 K_o ;

步骤5 对 K_y 进行PCA分解;

步骤6 通过式(25)-(27)计算控制限.

2) 在线检测阶段.

步骤 1 通过表2得到 $X_{\text{new-osc}}$;

步骤 2 分别将 $X_{\text{new-osc}}$ 中的每一个样本 $x_{\text{new-osc}}$ (每一行), 通过式(16)映射到特征空间中得到 $k_{\text{raw}}^{\text{new}}$;

步骤 3 通过式(18)计算 k_{new} ;

步骤 4 由式(19)–(24)计算统计量 T_y^2 , T_o^2 和 Q ;

步骤 5 判断依据:

a) 若 $T_y^2 > J_{\text{th}, T_y^2}$ 或 $Q > J_{\text{th}, Q}$, 则检测到质量相关故障.

b) 若 $T_o^2 > J_{\text{th}, T_o^2}$, 则检测到质量无关故障.

基于SWosc-EKPLS算法的过程监控技术是在EKPLS算法的基础上利用SWosc算法的去正交优势, 去除输入数据中与质量无关的信息. 将预处理后的信息投影到EKPLS算法分解的3个子空间中, 结合EKPLS算法对过程进行全面、高效的监测. SWosc-EKPLS与MKPLS, TKPLS算法相比, 对质量无关故障误报警情况均有所改善, 系统鲁棒性明显提升, 稳定性进一步提高.

4 仿真实验

在本节中, 将通过一个数值实例和田纳西-伊斯曼工业过程测试所提方法的性能. 同时, 将在相同的模拟条件下, 将其与MKPLS和TKPLS方法进行比较, 验证了其优越性. 为了便于描述, 本文将采用文献[26]中的误报率(false alarm rate, FAR)和有效报警率(fault detection rate, FDR)两个指标来评价故障检测效果, 公式如下:

$$\text{FDR} = \frac{N_{\text{nea}}}{N_{\text{tfs}}}, \quad (28)$$

$$\text{FAR} = \frac{N_{\text{nfa}}}{N_{\text{tfs}}}, \quad (29)$$

其中: N_{nea} 和 N_{nfa} 分别表示有效报警和错误报警的数目, N_{tfs} 代表故障样本的总数.

在工业过程中, 良好的故障检测效果体现在以下两方面:

1) 当检测数据是质量无关故障时, 质量相关的统计指标FAR低.

2) 当检测数据是质量相关故障时, 质量相关的统计指标FDR高.

4.1 数值仿真实验

采用文献[12]中介绍的以下数值实例:

$$\begin{cases} x_1 \sim N(1, 0.01^2), x_2 \sim N(1, 0.01^2), \\ x_3 = \sin x_1 + e_1, \\ x_4 = x_1^2 - 3x_1 + 4 + e_2, \\ x_5 = x_2^2 + \cos x_2^2 + 1 + e_3, \\ y = x_3^2 + x_3x_4 + x_1 + v, \end{cases} \quad (30)$$

其中: $v \sim N(0, 0.05^2)$, $e_i \sim N(0, 0.001^2)$, $i = 1, 2, 3$.

根据式(30), x_1 中发生的故障将影响质量变量 y , 而 x_2 中发生的故障与 y 无关.

训练样本由400个正常样本组成. 另外生成400个测试样本, 其中前200个是正常样本, 后200个是故障样本. 故障种类如下所示:

故障 1 x_1 中出现阶跃偏差: $x_1 = x_1^* + f$;

故障 2 x_1 中出现坡度偏差: $x_1 = x_1^* + (k - 200)f$;

故障 3 x_2 中出现阶跃偏差: $x_2 = x_2^* + f$;

故障 4 x_2 中出现坡度偏差: $x_2 = x_2^* + (k - 200)f$;

其中: $k(201 \leq k \leq 400)$ 是样本的序列号, x_1^* 和 x_2^* 分别是 x_1 和 x_2 的正常值, f 是故障幅度.

TKPLS模型参数为: $A = 3$, $A_y = 1$, $A_r = 1$, $A_o = 2$; MKPLS模型参数参考文献[13]: $A = 3$; OSC-EKPLS模型参数为: $A = 1$, $A_1 = 1$, 去正交次数为3; 其他参数为 $c = 2500$, $n = 400$, $m = 5$, $p = 1$, $\alpha = 0.99$.

1) 令 $f = 0.1$, 设置故障1, y 的动态趋势如图1所示. 显然, 故障1对质量变量有显著影响. 图2–4分别显示了MKPLS, TKPLS和OSC-EKPLS对故障1的检测结果. 从图2–4可以看出, 当故障1发生时, MKPLS, TKPLS和OSC-EKPLS在其与 y 相关的空间均发出警报, 表明当前故障对质量变量有重大影响. 此外, 将MKPLS, OSC-EKPLS和TKPLS检测不同幅度故障1的FDRs记录到表3中. 如表3所示, 在所有考虑的情况下, MKPLS, TKPLS和OSC-EKPLS的FDRs保持100%. 故障2也是一个与质量相关的故障. 设置故障2, 并将MKPLS, OSC-EKPLS和TKPLS检测不同幅度故障2的FDRs记录到表3中, 可以看到MKPLS, OSC-EKPLS和TKPLS的FDRs也都超过了88%. 因此在检测质量相关故障方面, OSC-EKPLS有着和MKPLS, TKPLS相同的能力.

2) 令 $f = 0.1$, 设置故障3, y 的动态趋势如图5所示. 显然, 当前故障对质量变量没有影响. 图6–8分别显示了MKPLS, TKPLS和OSC-EKPLS对故障3的检测结果. 图6中MKPLS的 T_y^2 统计量和图7中TKPLS的 T_y^2 统计量存在较小误报警. 然而, 在图8中, OSC-EKPLS的 T_y^2 和 Q 统计量均未报警. 此外, 将MKPLS, OSC-EKPLS和TKPLS检测不同幅度故障3的FDRs记录到表4中. 由表4可知, TKPLS, OSC-EKPLS和MKPLS均保持较低误报率. 故障4也是与质量无关的故障. 设置故障4, 并将MKPLS, OSC-EKPLS和TKPLS检测不同幅度故障4的FDRs记录到表4中, 可以看出, OSC-EKPLS在所有考虑的情况下都保持极低的FARs, 最高虚警率小于3%. 因此, 在检测质量无关故障方面, OSC-EKPLS有着和MKPLS, TKPLS相同的能力. 此外, OSC-EKPLS能够在较少主元的情况下, 达到和MKPLS相近的故障检测性能.

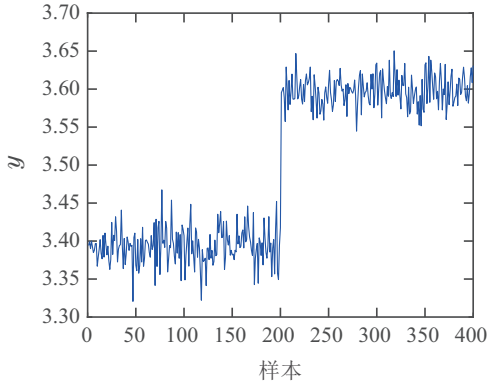


图1 故障1发生时, y 的变化

Fig. 1 The change of y when Fault1 occurs

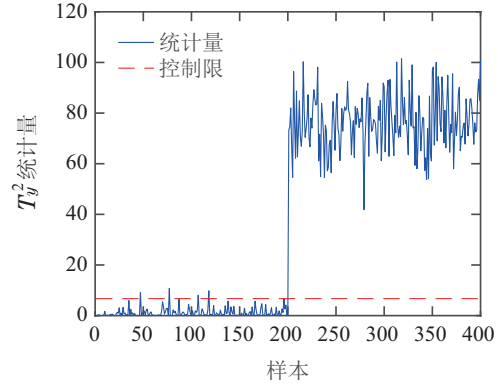


图3 TKPLS对故障1的检测结果

Fig. 3 The detection results of TKPLS for Fault1

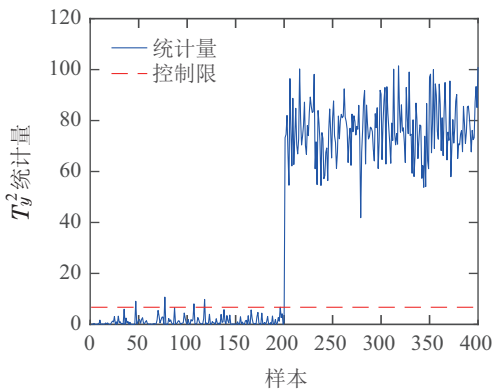


图2 MKPLS对故障1的检测结果

Fig. 2 The detection results of MKPLS for Fault1

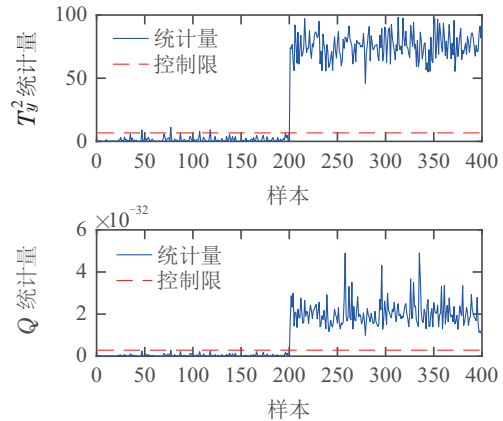


图4 OSC-EKPLS对故障1的检测结果

Fig. 4 The detection results of OSC-EKPLS for Fault1

表3 MKPLS, OSC-EKPLS和TKPLS检测不同幅度的故障1和故障2的FDRs

Table 3 FDRs of MKPLS, OSC-EKPLS and TKPLS for Fault1 and Fault2 with different fault magnitudes

故障1			故障2				
f	MKPLS/% (T_y^2)	OSC-EKPLS/% (T_y^2 或 Q)	TKPLS/% (T_y^2)	f	MKPLS/% (T_y^2)	OSC-EKPLS/% (T_y^2 或 Q)	TKPLS/% (T_y^2)
0.1	100	100	100	0.001	89.5	88	89.5
0.2	100	100	100	0.002	94	94	94
0.3	100	100	100	0.003	95.5	95.5	95.5
0.4	100	100	100	0.004	96	97	96

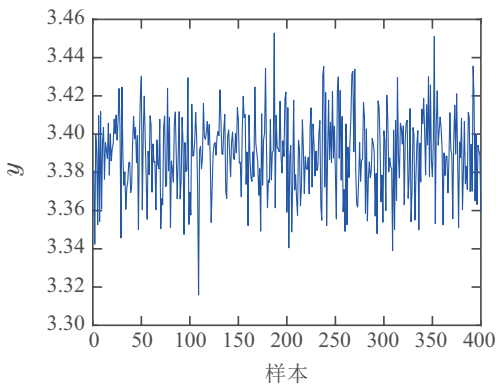


图5 故障3发生时, y 的变化

Fig. 5 The change of y when Fault3 occurs

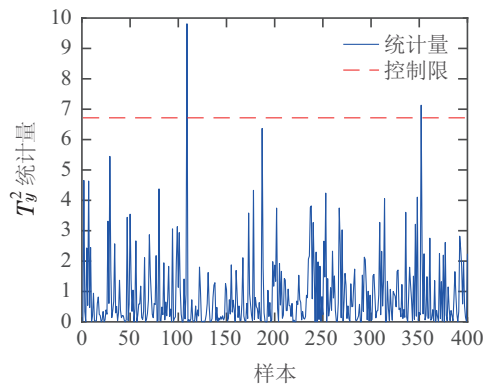


图6 MKPLS对故障3的检测结果

Fig. 6 The detection results of MKPLS for Fault3

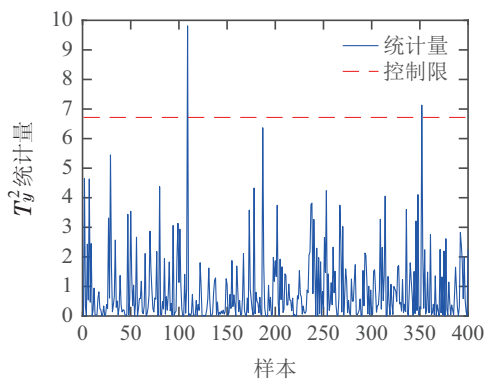


图 7 TKPLS对故障3的检测结果

Fig. 7 The detection results of TKPLS for Fault3

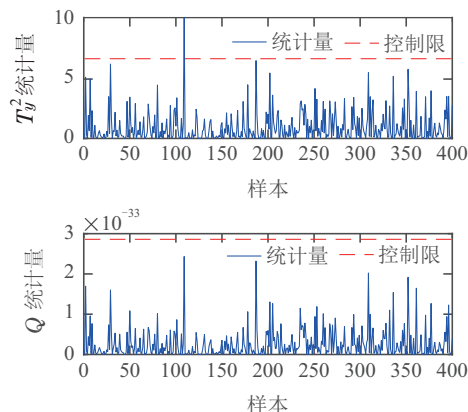


图 8 OSC-EKPLS对故障3的检测结果

Fig. 8 The detection results of OSC-EKPLS for Fault3

表 4 MKPLS, OSC-EKPLS和TKPLS检测不同幅度的故障3和故障4的FDRs

Table 4 FDRs of MKPLS, OSC-EKPLS and TKPLS for Fault3 and Fault4 with different fault magnitudes

故障3				故障4			
f	MKPLS/% (T_y^2)	OSC-EKPLS/% (T_y^2 或 Q)	TKPLS/% (T_y^2)	f	MKPLS/% (T_y^2)	OSC-EKPLS/% (T_y^2 或 Q)	TKPLS/% (T_y^2)
0.1	0.5	0	0.5	0.001	0.5	1	0.5
0.2	1	2.5	1	0.002	0	0	0
0.3	0.5	1.5	0.5	0.003	1.5	0.5	1.5
0.4	0	0	0	0.004	0.5	0	0.5

4.2 工业实例

本节将应用田纳西-伊斯曼过程(tennessee eastman process, TEP), 验证OSC-EKPLS算法在故障监测中的有效性.

TEP是按照真实化工厂的工业基准开发的一个工业模拟器. 整个流程由5个操作单元组成, 包括反应器、冷凝器、分离器、压缩机和汽提塔^[27]. 4种气体原料成分(A, C, D, E)与惰性气体(B)一起反应生成两种液体产物(G, H)和一种液体副产物(F). 由于其潜在反应机理十分复杂, 很难对TEP进行精确的物理建模. 但是, 在这个过程中存在大量的测量数据. 因此, TEP非常适合测试基于数据的监控方法. TEP包含两个变量块, 即11个操纵变量XMV(1-11)和41个测量变量XMEAS(1-41), 其中包括22个过程变量和19个分析变量. 本文选择11个操纵变量XMV(1-11)和22个过程变量XMEAS(1-22)来组成输入矩阵 X , 并选择产物G(XMEAS(35))作为输出 y . 根据文献[26]的标准, 故障IDV(1, 2, 5-8, 10, 12, 13)是质量相关故障, 而IDV(3, 4, 9, 11, 14, 15)是质量无关故障.

TKPLS模型参数为 $A_y = 1, A_r = 6, A_o = 9$; OSC-EKPLS模型为 $A_1 = 1$, 去正交次数为1; 其他参数为 $A = 10, n = 500, m = 33, p = 1, c = 10^4, \alpha = 0.99$.

1) 质量相关故障检测

以IDV(1)为例, 图9-11分别显示了MKPLS, T-

KPLS和OSC-EKPLS的检测结果. 如图11所示, OSC-EKPLS的 T_y^2 和 Q 统计量明显发出报警, 表明IDV(1)对质量变量有显著影响. 同样, MKPLS和TKPLS针对该类故障均有类似监测性能, 它们在 T_y^2 统计量中也明显发出了报警. 此外, 将MKPLS, OSC-EKPLS和TKPLS的FDRs记录在表5中, 并标粗3个算法中的最高检测率. 从表5中可以看出, OSC-EKPLS对IDV(6, 8, 12, 13)的检测率更高, 其中对IDV(8, 12)的检测率有明显提高; 在检测除IDV(5, 7)以外的故障时, 所有FDRs均超过70%. 因此, OSC-EKPLS在检测TEP的质量相关故障方面表现良好.

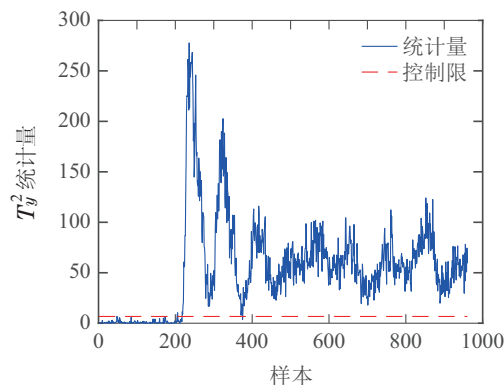


图 9 MKPLS对IDV(1)的检测结果

Fig. 9 The detection results of MKPLS for IDV(1)

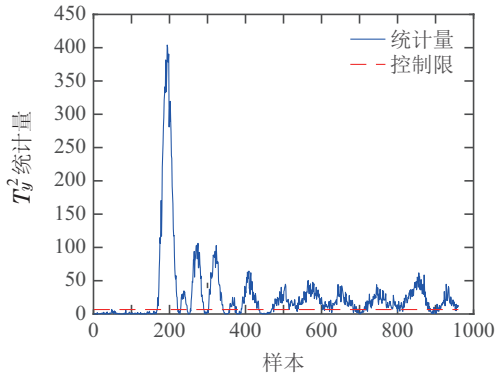


图 10 TKPLS对IDV(1)的检测结果

Fig. 10 The detection results of TKPLS for IDV(1)

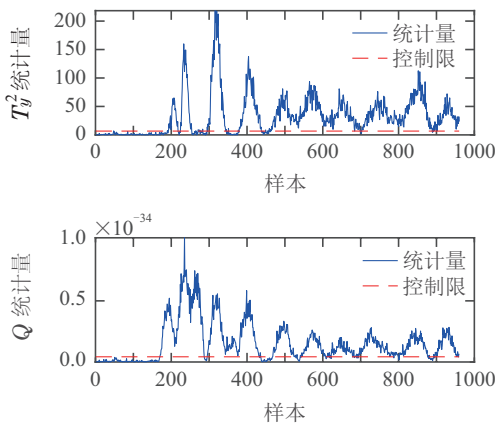


图 11 OSC-EKPLS对IDV(1)的检测结果

Fig. 11 The detection results of OSC-EKPLS for IDV(1)

表 5 MKPLS, OSC-EKPLS 和 TKPLS 检测 TEP 质量相关故障的 FDRs

Table 5 FDRs for TEP quality-related faults detected by MKPLS, OSC-EKPLS, and TKPLS

IDV	MKPLS/% (T_y^2)	OSC-EKPLS/% (T_y^2 或 Q)	TKPLS/% (T_y^2)
1	93.00	87.88	79.63
2	89.63	88.38	89.63
5	15.50	23.25	24.50
6	95.50	99.25	97.75
7	55.38	44.63	47.75
8	64.75	87.50	74.00
10	73.13	72.63	66.25
12	76.75	85.88	78.00
13	82.63	87.63	85.63

2) 质量无关故障检测

以IDV(4)为例, 图12-14分别显示了MKPLS, TKPLS和OSC-EKPLS的检测结果. 从图12-14可以看出MKPLS的 T_y^2 统计量、TKPLS的 T_y^2 统计量、OSC-EKPLS的 T_y^2 和 Q 统计量均存在较少的误报. 将MKPLS, OSC-EKPLS和TKPLS的FARs记录到表6中, 并标粗3

个算法中的最低误报率. 在表6中可以看到, 对于所有考虑的质量无关故障, OSC-EKPLS保持非常低的FARs, 除IDV(15)外, OSC-EKPLS的FARs均小于10%.

此外, OSC-EKPLS仅在检测IDV(9)时表现出高于MKPLS的误报率. 然而, MKPLS对于IDV(11, 15)的FARs均超过10%, TKPLS对于IDV(3, 11, 15)的FARs均超过10%. 因此, 在相同主元情况下, OSC-EKPLS整体上表现出比MKPLS和TKPLS更优的故障检测性能.

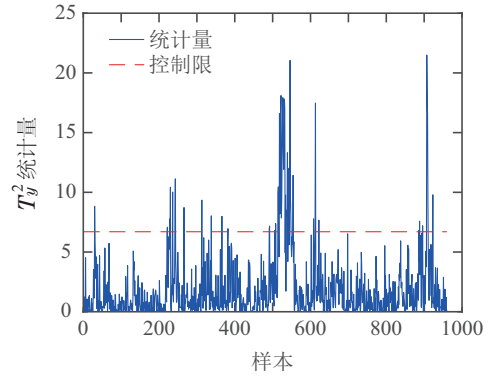


图 12 MKPLS对IDV(4)的检测结果

Fig. 12 The detection results of MKPLS for IDV(4)

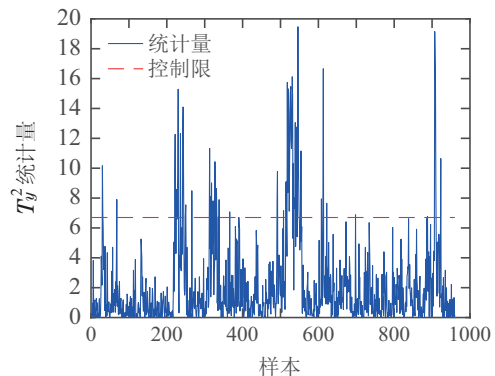


图 13 TKPLS对IDV(4)的检测结果

Fig. 13 The detection results of TKPLS for IDV(4)

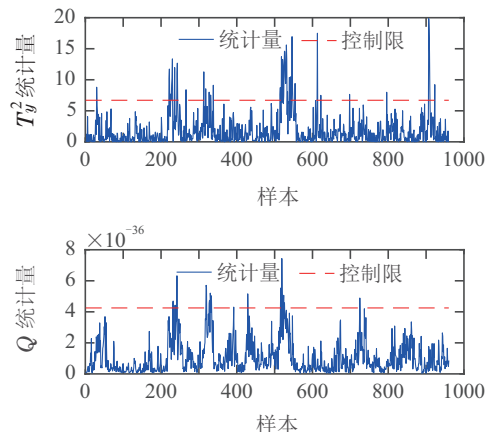


图 14 OSC-EKPLS对IDV(4)的检测结果

Fig. 14 The detection results of OSC-EKPLS for IDV(4)

表6 MKPLS, OSC-EKPLS 和 TKPLS 检测 TEP 质量无关故障的 FARs

Table 6 FDRs for TEP quality-unrelated faults detected by MKPLS, OSC-EKPLS, and TKPLS

IDV	MKPLS/% (T_y^2)	OSC-EKPLS/% (T_y^2 或 Q)	TKPLS/% (T_y^2)
3	8.13	8.00	11.13
4	7.13	6.13	8.88
9	6.88	7.13	8.13
11	10.88	9.88	11.75
15	10.38	10.13	12.88

5 总结

本文基于高效核偏最小二乘法提出了一种非线性质量相关算法——OSC-EKPLS。首先,由正常数据建立EKPLS模型。然后,对测试数据进行基于质量估计的OSC预处理。最后,构造合适统计量进行故障检测。OSC-EKPLS与TKPLS算法相比,计算量和误报率更低;与MKPLS算法相比,主元个数相同时,OSC-EKPLS整体上表现出更优的故障检测性能;此外,主元个数较少时,OSC-EKPLS表现出与MKPLS相近的故障检测性能。数值仿真和工业实例的仿真结果均表明:OSC-EKPLS对所有考虑的质量相关故障保持很高的故障检测率;对所有考虑的质量无关故障保持较低的误报率。未来,可继续研究提高OSC-EKPLS对初期微小故障的检测率和基于OSC-EKPLS的故障诊断策略。

参考文献:

- [1] DONG Jie, YOU Peihang, PENG Kaixiang. Dynamic processes fault detection and classification based on dynamic-inner principal component analysis and hidden Markov model. *Control Theory & Applications*, 2020, 37(10): 2073 – 2080.
(董洁, 游培航, 彭开香. 基于动态内部主元分析和隐马尔科夫模型的动态过程故障检测与分类方法. *控制理论与应用*, 2020, 37(10): 2073 – 2080.)
- [2] WANG Bo, XIA Qinfeng, QIAN Long, et al. Fault diagnosis based on fully-correlated kernel partial least squares for pumping unit. *Control Theory & Applications*, 2020, 37(9): 2039 – 2046.
(汪波, 夏钦锋, 钱龙, 等. 全相关核偏最小二乘故障诊断方法及在抽油机上应用. *控制理论与应用*, 2020, 37(9): 2039 – 2046.)
- [3] SHANG Liangliang, LIU Jianchang, TAN Shubin, et al. Soft sensor modeling for multimode process based on adaptive efficient recursive canonical variate analysis. *Control Theory & Applications*, 2016, 33(3): 380 – 386.
(商亮亮, 刘建昌, 谭树彬, 等. 基于自适应高效递推规范变量分析的多模过程软传感器建模. *控制理论与应用*, 2016, 33(3): 380 – 386.)
- [4] ZHANG C F, PENG K X, DONG J. An extensible quality-related fault isolation framework based on dual broad partial least squares with application to the hot rolling process. *Expert Systems with Applications*, 2020, 167(1): 114166.
- [5] WU D H, ZHOU D H, CHEN M Y, et al. Output-relevant common trend analysis for KPI-related nonstationary process monitoring with applications to thermal power plants. *IEEE Transactions on Industrial Informatics*, 2020, 17(10): 6664 – 6675.
- [6] WANG G, JIAO J F. A kernel least squares based approach for nonlinear quality-related fault detection. *IEEE Transactions on Industrial Electronics*, 2017, 64(4): 3195 – 3204.
- [7] JIAO J F, ZHEN W T, WANG G, et al. KPLS-KSER based approach for quality-related monitoring of nonlinear process. *ISA Transactions*, 2020, 108(5): 144 – 153.
- [8] JIAO J F, YU H, WANG G. A quality-related fault detection approach based on dynamic least squares for process monitoring. *IEEE Transactions on Industrial Electronics*, 2016, 63(4): 2625 – 2632.
- [9] PENG K X, ZHANG K, YOU B, et al. Quality-relevant fault monitoring based on efficient projection to latent structures with application to hot strip mill process. *IET Control Theory and Applications*, 2015, 9(7): 1135 – 1145.
- [10] KONG Xiangyu, LUO Jiayu, ZHANG Qi, et al. Quality-related fault detection method based on orthogonal signal correction and efficient PLS. *Control and Decision*, 2020, 35(5): 146 – 153.
(孔祥玉, 罗家宇, 张琪, 等. 基于正交信号修正与高效偏最小二乘的质量相关故障检测方法. *控制与决策*, 2020, 35(5): 146 – 153.)
- [11] ROSIPAL R, TREJO L J. Kernel partial least squares regression in reproducing kernel hilbert space. *Journal of Machine Learning Research*, 2002, 2(2): 97 – 123.
- [12] PENG K X, ZHANG K, LI G. Quality-related process monitoring based on total kernel PLS model and its industrial application. *Mathematical Problems in Engineering*, 2013, 2013(4): 707953.
- [13] SUN R R, FAN Y P, ZHANG Y W. Fault monitoring of nonlinear process based on kernel concurrent projection to latent structures. *The 33rd Chinese Control Conference*. Nanjing, China: IEEE, 2014: 5184 – 5189.
- [14] JIAO J F, ZHAO N, WANG G, et al. A nonlinear quality-related fault detection approach based on modified kernel partial least squares. *ISA Transactions*, 2017, 66: 275 – 283.
- [15] COVER T M. Geometrical and statistical properties of systems of linear inequalities with applications in pattern recognition. *IEEE Transactions Electronic Computers*, 1965, 14(3): 326 – 334.
- [16] WOLD S. Cross-validatory estimation of the number of components in factor and principal components models. *Technometrics*, 1978, 20(4): 397 – 405.
- [17] ROSIPAL R, TREJO L J. Kernel partial least squares regression in reproducing kernel hillbert space. *Journal of Machine Learning Research*, 2001, 2: 97 – 123.
- [18] CHO H J, LEE J, CHOI S W, et al. Fault identification for process monitoring using kernel principal component analysis. *Chemical Engineering Science*, 2005, 60(1): 279 – 288.
- [19] SCHÖLKOPF B, RÄTSCH G. Kernel PCA and denoising in feature spaces. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2008, 11: 536 – 542.
- [20] LI Qiang, KONG Xiangyu, LUO Jiayu, et al. Quality-relevant and process-relevant fault diagnosis with concurrent modified partial least squares. *Control Theory & Applications*, 2021, 38(3): 318 – 328.
(李强, 孔祥玉, 罗家宇, 等. 基于并发改进偏最小二乘的质量相关和过程相关的故障诊断. *控制理论与应用*, 2021, 38(3): 318 – 328.)
- [21] WOLD S, ANTTI H, LINDGREN F, et al. Orthogonal signal correction of near-infrared spectra. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 1998, 44(1): 175 – 185.
- [22] SJOBLÖM J, SVENSSON O, JOSEFSON M. An evaluation of orthogonal signal correction applied to calibration transfer of near infrared spectra. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 1998, 44(4): 229 – 244.
- [23] FEARN T. On orthogonal signal correction. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2000, 50(1): 47 – 52.
- [24] ANDERSSON C A. Direct orthogonalization. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 1999, 47(1): 51 – 63.

- [25] TRYGG J, WOLD S. Orthogonal projections to latent structures (O-PLS). *Journal of Chemometrics*, 2010, 16(3): 119 – 128.
- [26] ZHOU D H, LI G, QIN S J. Total projection to latent structures for process monitoring. *Aiche Journal*, 2010, 56(1): 168 – 178.
- [27] YIN S, DING S, HAGHANI A, et al. A comparison study of basic data-driven fault diagnosis and process monitoring methods on the benchmark Tennessee Eastman process. *Journal of Process Control*, 2012, 22(9): 1567 – 1581.

作者简介:

孔祥玉 教授, 博士生导师, 目前研究方向为随机系统分析、非线性

性系统建模及其应用、复杂系统故障诊断等研究, E-mail: xiangyukong01@163.com;

周红平 硕士研究生, 目前研究方向为复杂系统特征提取和故障检测, E-mail: 2227922558@qq.com;

罗家宇 博士研究生, 目前研究方向为数据驱动的复杂系统下故障监测与诊断等研究, E-mail: 540629964@qq.com;

安秋生 教授, 博士, 硕士生导师, 目前研究方向为数据库理论、粗糙集与概念格, E-mail: aaqss@sina.com;

陈雅琳 硕士研究生, 目前研究方向为特征提取和多元统计过程监测, E-mail: cyl2318959445@163.com.