第 28 卷第 2 期
2011 年 2 月

控 制 理 论 与 应 用
Control Theory & Applications

Vol. 28 No. 2
Feb. 2011

文章编号: 1000−8152(2011)02−0149−08

时段划分的多向主元分析间歇过程监测及故障变量追溯

王 姝[1,2], 常玉清[1,2], 杨 洁[2], 王福利[1,2], 冯淑敏[2]

(1. 东北大学 流程工业综合自动化教育部重点实验室, 辽宁 沈阳 110004;

2. 东北大学 信息科学与工程学院, 辽宁 沈阳 110004)

摘要: 针对间歇过程的多时段特性, 提出一种生产过程操作时段划分方法. 该方法利用反映过程特性变化的负载矩阵以及主成份矩阵的变化实现了间歇过程子时段的两步划分. 提出了基于加权负载向量夹角余弦的负载矩阵相似性度量以及基于加权奇异值变化的奇异值矩阵相似性度量方法, 以更客观的反映负载矩阵以及奇异值矩阵的相似性, 进而更准确的判断过程特性的变化. 根据同一操作子时段的过程特性, 其负载矩阵和奇异值矩阵相似性较大的特点, 实现了生产过程的子时段划分. 将基于子时段划分的多向主元分析(MPCA)建模应用于三水箱系统的在线监测和故障变量追溯, 实验结果验证了该方法的有效性.

关键词: 间歇过程; 主成份分析; 子时段划分; 过程监测; 故障变量追溯

中图分类号: TP277 **文献标识码**: A

Multiway principle component analysis monitoring and fault variable detection based on substage separation for batch processes

WANG Shu[1,2], CHANG Yu-qing[1,2], YANG Jie[2], WANG Fu-li[1,2], FENG Shu-min[2]

(1. Key Laboratory of Integrated Automation of Process Industry, Northeastern University, Ministry of Education, Shenyang Liaoning 110004, China;

2. School of Information Science & Engineering, Northeastern University, Shenyang Liaoning 110004, China)

Abstract: According to the multistage characteristics of the batch process, we propose a new stage separation method for the production process. Based on the variation in loading matrices and principal component matrices which reflect the evolvement of the underlying process behavior, a two-step substage separation is proposed. To objectively show the similarity between the loading matrices and the similarity between the principal component matrices, two similarity measurement methods are applied to estimate the variation of the process characteristic with higher accuracy. These two methods are respectively based on the weighted cosine of the angle between loading vectors, and based on the weighted absolute value of the singular value variation. Process substage separation is realized because the loading matrices and the singular value matrices in the same operation substage are with great similarity. Based on the improved stages separation method, the multiway principle component analysis(MPCA) modeling is applied to online monitoring and fault variable detection in a three-tank system. The experimental results verify the effectiveness of the method.

Key words: batch processes; principal component analysis(PCA); substage separation; process monitoring; fault variable detection

1 引言(Introduction)

为了迎合现代社会瞬息万变的市场需求, 现代过程工业正逐渐倚重于小批量、多品种、高附加值产品的间歇生产过程. 针对间歇过程的过程监测、故障诊断以及质量预测研究已经成为目前相关领域的研究热点.

主元分析(PCA)[1~3]方法作为多元统计过程建模的核心技术, 只需要利用正常的生产过程数据建立模型, 在处理高维数据时具有很大的优势, 因此在工业生产过程中的应用越来越广泛. 20世纪90年代中 期Nomikos和MacGregor提 出 的MPCA(multiway PCA)[4~6]方法首次将多元统计分析方法成功应用于间歇生产过程, 使得基于多元统计技术的间歇过程建模、过程监测及故障诊断等内容成为当今控制领域的研究热点之一.

多时段特性是许多间歇过程的一个固有特征, 例如批生物发酵过程可以按细菌生长周期分为延滞期、生长期、稳定期和死亡期; 注塑成型生产过程按照操作过程可以分为注射、保压和冷却3个阶段. Kosanovich等人[7]在1994年将MPCA方法应用于聚合物反应工业过程, 提出针对具有不同特性的反应时段分别建立MPCA模型, 可以更加准确、有效地监测生产过程的运行状态. Lu等人[8]和Zhao等人[9]分别在2004和2007年提出了基于k-means的间歇过程

收稿日期: 2009−10−12; 收修改稿日期: 2010−04−27.
基金项目: 国家自然科学基金资助项目(61074074); 国家“973”计划子课题资助项目(2009CB320601).

子时段划方法, 将间歇过程又进一步划分为操作时段和过渡时段, 使得对间歇过程特性的分析和研究更加深入.

综上所述, 针对具有多操作阶段特性的间歇生产过程, 如何进行正确的操作时段及过渡时段的划分, 是正确反应多时段间歇过程特性的关键. 本文首先提出一种新的间歇过程时段划分方法用于实现间歇过程的操作时段及过渡时段的精确划分. 该方法的基本思想是: 不同的操作时段, 过程特性不同, 反应过程特性变化过程变量变异方向或变异的幅值就会有所变化. 本文首先根据主成份分析后负载矩阵的变化对间歇过程进行第1步划分, 划分后每个时段均具有相同的变量变异方向; 然后, 再根据各时间片矩阵的奇异值对角阵的变化, 对过程操作过程进行第2步子时段划分. 经过2步划分之后, 每个子时段均具有相同的变量变异方向和变异幅值, 即每个子时段具有相同的生产过程特性.

在对间歇过程进行合理时段划分之后, 本文提出一种基于子时段划分的MPCA模型的间歇过程监测及故障变量追溯方法, 并将其应用于三水箱系统, 实现对该间歇生产过程的监测.

2 MPCA建模(MPCA modeling)

2.1 间歇过程数据的二维时间片展开(Two-dimensional time-slice data unfolding for batch process)

一个间歇生产过程, 其建模数据通常表示为最常用的三维矩阵形式$\widetilde{X}(I\times J\times K)$, 其中$I$, J和K分别表示间歇操作次数(也称批次)、过程变量个数以及每一次间歇操作过程的采样时刻个数. 为了利用MPCA方法实现间歇过程建模, 首先需要将建模数据进行二维展开. 不同特性的间歇过程, 建模需求不同, 数据展开方式也不同, 大致具有A~D6种方式[10].

本文假设各个批次的操作时间相同, 并对间歇过程数据进行如图1所示的二维时间片展开(也称D展开), 进而得到K个时间片矩阵$\boldsymbol{X}_k(I\times J)(k=1,2,\cdots,K)$.

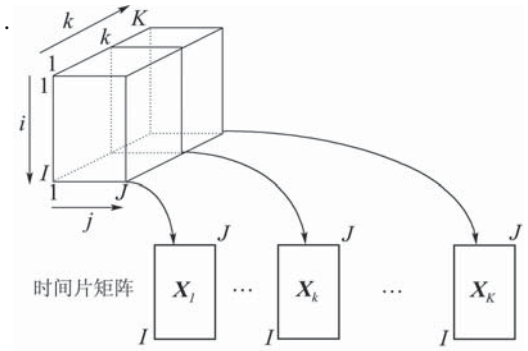

图 1 间歇过程数据的二维时间片展开

Fig. 1 Two-dimensional time-slice data unfolding for batch process

2.2 MPCA建模(MPCA modeling)

对间歇过程数据进行二维展开之后, MPCA建模和PCA建模的步骤没有任何区别. MPCA建模的工作对象是K个时间片矩阵$\boldsymbol{X}_k(I\times J)(k=1,2,\cdots,K)$, 按式(1)所示的主成份分析方法分别对其进行主成份分析后得到K个负载矩阵$\boldsymbol{P}_k(J\times J)=[\boldsymbol{p}_{k,1}\ \boldsymbol{p}_{k,2}\ \cdots\ \boldsymbol{p}_{k,J}](k=1,2,\cdots,K)$.

如式(2)所示的主成份矩阵中, $t_{k,i,j}$为第k个时间片矩阵第i个批次的过程变量$\boldsymbol{x}_i=(x_{i,1},x_{i,2},\cdots,x_{i,J})$在第$j$个变量投影方向$\boldsymbol{p}_{k,j}(J\times 1)$上的主成份得分.

$$\boldsymbol{X}_k=\boldsymbol{T}_k\boldsymbol{P}_k^{\mathrm{T}}, \tag{1}$$

$$\boldsymbol{T}_k(I\times J)=\begin{bmatrix} t_{k,1,1}\cdots t_{k,1,j}\cdots t_{k,1,J}\\ \vdots\qquad\vdots\qquad\vdots\\ t_{k,i,1}\cdots t_{k,i,j}\cdots t_{k,i,J}\\ \vdots\qquad\vdots\qquad\vdots\\ t_{k,I,1}\cdots t_{k,I,j}\cdots t_{k,I,J}\end{bmatrix}=$$
$$[\boldsymbol{t}_{k,1}\cdots\boldsymbol{t}_{k,j}\cdots\boldsymbol{t}_{k,J}]. \tag{2}$$

根据主成份分析原理可知, 在J个投影方向上, 各主成份提取的数据变异信息有如式(3)所示的关系, 式(3)中, $\mathrm{Var}(\boldsymbol{t}_{k,j})=\lambda_{k,j}$表示主成份$\boldsymbol{t}_{k,j}$的方差, 也是主成份$\boldsymbol{t}_{k,j}$提取的过程变量信息的大小. $\lambda_{k,j}$为时间片矩阵$\boldsymbol{X}_k(I\times J)$的协方差矩阵$\boldsymbol{X}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}_k$的第$j$个(按从大到小排列)特征值. J个特征值构成如式(4)所示的对角矩阵$\boldsymbol{S}_k$, 也是时间片矩阵$\boldsymbol{X}_k(I\times J)$的协方差矩阵的奇异值阵.

$$\mathrm{Var}(\boldsymbol{t}_{k,1})\geqslant\mathrm{Var}(\boldsymbol{t}_{k,2})\geqslant\cdots\geqslant\mathrm{Var}(\boldsymbol{t}_{k,J}), \tag{3}$$

$$\boldsymbol{S}_k=\mathrm{diag}\{\lambda_{k,1},\lambda_{k,2},\cdots,\lambda_{k,J}\}. \tag{4}$$

基于二维时间片展开的MPAC建模原理如图2所示. 可见, K个时间片矩阵进行MPCA建模以后, 可以得到K个负载矩阵$\boldsymbol{P}_k(k=1,2,\cdots,K)$和$K$个奇异值阵$\boldsymbol{S}_k(k=1,2,\cdots,K)$.

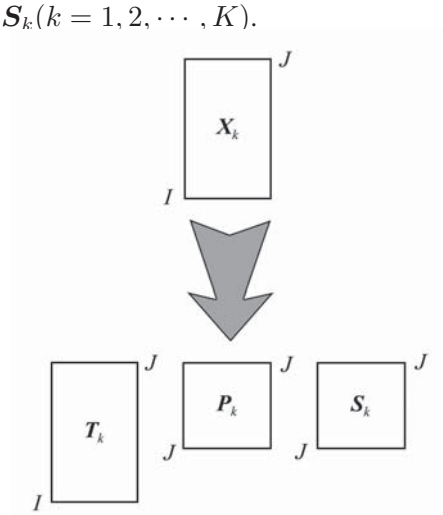

图 2 第k个时间片矩阵的PCA建模

Fig. 2 PCA modeling for the kth time-slice matrix

2.3 基于MPCA的过程监测模型(MPCA based process monitoring model)

基于PCA方法的过程监测是通过监视两个多元统计量, Hotelling$-T^2$和残差子空间的Q统计量, 实现生产过程运行状态异常的实时监测. 其中, 第k个时间片, 第i个批次的过程变量$\boldsymbol{x}_{k,i}(1\times J)$所对应的$T^2$统计量定义如下:

$$T_{k,i}^2=\boldsymbol{t}_{k,i}\boldsymbol{S}_k^{-1}\boldsymbol{t}_{k,i}^{\mathrm{T}}, \tag{5}$$

其中$\boldsymbol{t}_{k,i}=\boldsymbol{x}_{k,i}\boldsymbol{P}_k$为第$k$个时间片第$i$个批次的数据$\boldsymbol{x}_{k,i}(1\times J)$的主成份向量.

Q统计量, 也称之为预测误差平方和指标(squared prediction error, SPE), 是测量值偏离主成份模型的距离, 定义如下:

$$\mathrm{SPE}_{k,i}=(\boldsymbol{x}_{k,i}-\hat{\boldsymbol{x}}_{k,i})(\boldsymbol{x}_{k,i}-\hat{\boldsymbol{x}}_{k,i})^{\mathrm{T}}. \tag{6}$$

当样本数据满足正态分布时, T^2统计量的控制限可以利用F分布采用式(7)计算[1]:

$$T_\alpha^2\sim\frac{A(I-1)}{I-A}F_{A,I-A,\alpha}, \tag{7}$$

其中: A为主成份个数, I为建模批次, α为显著性水平.

SPE统计量的控制限可由式(8)计算[6]. 其中m_k是建模数据集中所有批次的测量数据在第k个时刻SPE值的均值, v_k是对应的方差.

$$\begin{cases}\mathrm{SPE}_{k,\alpha}=g_k\chi_{h_k,\alpha}^2,\\ g_k=v_k/2m_k,\\ h_k=2m_k^2/v_k.\end{cases} \tag{8}$$

2.4 故障变量追溯(Fault variable detection)

贡献图(contribution plot)[11], 作为一种故障诊断的辅助工具, 能够从异常的T^2和SPE统计量中找到那些导致过程异常的过程变量, 实现简单的故障隔离和故障原因诊断的功能. 针对主成份和残差子空间的两个统计量, 有两种贡献图可用于故障诊断: T^2贡献图和SPE贡献图. 对异常的T^2和SPE统计量贡献较大的那些过程变量受过程异常工况的影响比较显著, 根据这些信息再辅佐以过程知识, 可获取有价值的故障信息.

3 间歇过程的子时段划分(Separation of sub stages for batch process)

当生产过程处于不同的操作时段时, 其运行状态和操作目标往往有所差异, 那么用来表征生产过程特性的过程变量信息就会表现出不同的特征.

从第2节可以看出, 主成份分析后的负载矩阵$\boldsymbol{P}_k$表达了原变量的数据变异方向; 奇异值矩阵$\boldsymbol{S}_k$表达了在各个数据变异方向上数据变异的大小. 上述两个矩阵从不同的角度反映了原过程变量的变化情况. 本文提出的间歇过程子时段划分就是基于负载矩阵$\boldsymbol{P}_k$和奇异值矩阵$\boldsymbol{S}_k$的变化来判断生产操作时段发生的变化. 主要思想是: 首先根据负载矩阵的变化, 即根据过程变量变异方向的变化对间歇过程进行第1步时段划分, 使得划分后每个子时段均具有相同的变量变异方向; 然后, 再在具有相同变量变异方向的时段内, 根据各时间片矩阵的奇异值对角阵的变化, 即各变量变异方向上变量变化大小的不同, 对过程操作时段进行第2步划分. 经过两步划分之后, 每个子时段均具有相近的变量变异方向和变异大小, 也就是每个子时段具有相同的生产过程特性.

3.1 第1步时段划分(First sub stages separation)

假设建模数据均为去除奇异点后的正常标准化数据.

本文定义如式(9)所示相似度, 用来衡量两个负载矩阵之间的相似性.

$$d_{i,j}^p=1-\sum_{l=1}^J\gamma_l\frac{|\boldsymbol{p}_{il}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{p}_{jl}|}{\|\boldsymbol{p}_{il}\|\cdot\|\boldsymbol{p}_{jl}\|}. \tag{9}$$

式(9)中的γ_l为加权系数, 用以强调不同投影方向的不同重要性. γ_l按下式取值:

$$\gamma_l=\frac{1}{l}/\sum_{h=1}^J\frac{1}{h},\ l=1,2,\cdots,J. \tag{10}$$

从式(10)可以看出$\sum\limits_{l=1}^J\gamma_l=1$, 并且有$1>\gamma_1>\gamma_2>\cdots>\gamma_{a_a}>0$.

式(9)的第2部分表示负载矩阵$\boldsymbol{P}_i$和$\boldsymbol{P}_j$中J个投影方向的夹角余弦值的加权和. 由于两个相近的方向的夹角余弦值接近1, 而$\gamma_l<1$, 所以$d_{i,j}^p\geqslant 0$. 式(9)的值越接近0, 表示负载矩阵$\boldsymbol{P}_i$和$\boldsymbol{P}_j$间的相似度越高.

第1步时段划分算法及主要步骤如下:

Step 1　按式(9)(10)计算第1个时间片负载矩阵$\boldsymbol{P}_1(J\times J)=[\boldsymbol{p}_{1,1}\,\boldsymbol{p}_{1,2}\cdots\boldsymbol{p}_{1,J}]$与第2个时间片负载矩阵$\boldsymbol{P}_2(J\times J)=[\boldsymbol{p}_{2,1}\,\boldsymbol{p}_{2,2}\cdots\boldsymbol{p}_{2,J}]$之间的相似度$d_{1,2}^p$. 若满足$d_{1,2}^p<\delta_p$($\delta_p$为给定的较小阈值), 将时间片1, 2归为时段$s_1$, 并计算负载矩阵$\boldsymbol{P}_1(J\times J)$和$\boldsymbol{P}_2(J\times J)$的均值负载矩阵

$$\bar{\boldsymbol{P}}^1=\frac{1}{2}\sum_{k=1}^2\boldsymbol{P}_k;$$

Step 2　按式(9)(10)计算时段s_1的均值负载矩阵$\bar{\boldsymbol{P}}^1$与第3个时间片负载矩阵$\boldsymbol{P}_3$之间的相似度$d_{s_1,3}^p$. 若满足$d_{s_1,3}^p\leqslant\delta_p$, 将时间片3归为时段$s_1$, 并重新计算时段$s_1$的均值负载矩阵

$$\bar{\boldsymbol{P}}^1=\frac{1}{3}\sum_{k=1}^3\boldsymbol{P}_k,$$

再依次计算均值负载矩阵与其他时间片的相似度,

直至第k_{s_1}个时间片, 使得$d^p_{s_1,k_{s_1}} \leqslant \delta_p$不满足. 重新计算时段$s_1$的均值负载矩阵$\bar{\boldsymbol{P}}^1 = \dfrac{1}{k_{s_1}-1}\sum\limits_{k=1}^{k_{s_1}-1}\boldsymbol{P}_k$, 并将第$k_{s_1}$个时间片归为新的时段$s_2$;

Step 3 从时间片k_{s_1}开始, 依次重新计算时段s_2的均值负载矩阵与后面的负载矩阵的相似度, 当阈值公式得不到满足时, 进入新时段s_3, 依次类推, 直至将所有的时间片分段结束.

假设经过第1步时段划分后, 划分后的时段记为时段s_1, 时段$s_2,\cdots$,时段s_C. 时段$s_l(l=1,2,\cdots,C)$所包含的时刻为$k_{s_{l-1}} \sim k_{s_l}-1, k_{s_0}=1, k_{s_C}=K+1$, 该时段内的均值负载矩阵表示如式(11)所示:

$$\bar{\boldsymbol{P}}^l = \frac{1}{k_{s_l}-k_{s_{(l-1)}}-1}\sum_{k=k_{s_{(l-1)}}}^{k_{s_l}-1}\boldsymbol{P}_k. \tag{11}$$

3.2 第2步子时段划分(Second sub stages separation)

本文定义如式(12)所示相似度, 来衡量两个奇异值矩阵之间的相似性.

$$d^S_{i,j} = \sum_{l=1}^{J}\gamma_l\,|\lambda_{i,l}-\lambda_{j,l}|. \tag{12}$$

式(12)中的γ_l为式(10)所示的加权系数. 可以看出$d^S_{i,j} \geqslant 0$, 式(12)的值越小表示奇异值矩阵$\boldsymbol{S}_i$和$\boldsymbol{S}_j$间的相似度越高.

第2步子时段划分算法及主要步骤如下:

Step 1 在时段s_1内, 按式(10)(12)计算第1个奇异值矩阵$\boldsymbol{S}_1=\mathrm{diag}\{\lambda_{1,1},\lambda_{1,2},\cdots,\lambda_{1,J}\}$与第2个奇异值矩阵$\boldsymbol{S}_2=\mathrm{diag}\{\lambda_{2,1},\lambda_{2,2},\cdots,\lambda_{2,J}\}$之间的相似度$d^S_{1,2}$, 若$d^S_{1,2}<\delta_S$($\delta_S$为给定的较小阈值), 则将时间片1和2归为子时段时段$s_{1,1}$, 并计算奇异值矩阵$\boldsymbol{S}_1$和$\boldsymbol{S}_2$的均值奇异值矩阵$\bar{\boldsymbol{S}}^{1,1}=\dfrac{1}{2}\sum\limits_{k=1}^{2}\boldsymbol{S}_k$;

Step 2 计算子时段$s_{1,1}$的均值奇异值矩阵$\bar{\boldsymbol{S}}^{1,1}$与时段$s_1$内其他时间片的相似度, 直至第$k_{s_{1,1}}$个时间片, 使得$d^S_{s_{1,1},k_{s_{1,1}}} \leqslant \delta_S$不满足. 重新计算时段$s_{1,1}$的均值奇异值矩阵

$$\bar{\boldsymbol{S}}^{1,1} = \frac{1}{k_{s_{1,1}}-1}\sum_{k=1}^{k_{s_{1,1}}-1}\boldsymbol{S}_k,$$

并将第$k_{s_{1,1}}$个时间片归为新的子时段$s_{1,2}$;

Step 3 从时间片k_1开始, 依次重新计算子时段$s_{1,2}$的均值奇异值矩阵与其他奇异值阵的相似度, 当阈值公式得不到满足时, 进入新的子时段$s_{1,3}$, 依次类推, 直至将时段s_1内的所有时间片全部分段结束.

Step 4 按照Step 1~Step 3的方法, 对时段s_2按照奇异值矩阵的相似度再进行时段的细化分, 得到子时段$s_{2,1},s_{2,2},\cdots$. 以此类推, 直至将所有时段的第2步细划分结束.

第2步时段细化分之后得到操作子时段中, 每个子时段均具有相近的负载矩阵和奇异值矩阵, 而不同的子时段将具有不同的负载矩阵或不同的奇异值矩阵, 也有可能两者均不相同.

当某一子时段或连续几个时段相对于其他时段所含样本数较少时, 表示该子时段为生产操作时段间的过渡时段. 因此, 本文提出的生产操作子时段划分算法简单的实现了生产操作时段以及过渡时段的划分, 避免了硬化分算法[8]过渡段模型精度不高以及软划分算法[9]复杂、计算量大且需要设置较多参数的缺陷.

可见, 按照上述方法进行时段两步划分之后, 每个子时段内的时间片将具有相同的过程特性. 那么, 就可以采用统一的模型来近似代替同一时段内的时间片PCA模型.

4 基于子时段MPCA建模、在线过程监测及故障变量追溯(Multi-sub-stage MPCA modeling, on-line process monitoring and fault variable detection)

4.1 基于子时段MPCA建模的步骤(Multi-sub-stage MPCA modeling steps)

对生产过程进行子时段划分之后, 每个时段都具有不同的运行特征, 因此应针对不同的子时段建立不同的PCA模型. 在同一子时段内, 由于运行特征相近, 因此可以采用统一的代表模型. 本文提出的基于子时段MPCA建模步骤如图3所示. 具体描述如下:

1) 获得I个批次的正常运行状态数据, 按2.1节所述方式, 对其进行二维时间片展开, 并对其进行标准化处理(0均值和1标准差).

2) 对标准化后的时间片数据分别进行PCA, 得到负载矩阵$\boldsymbol{P}_i(J\times J)(i=1,2,\cdots,K)$、主成份矩阵$\boldsymbol{T}_i(I\times J)(i=1,2,\cdots,K)$以及奇异值对角阵$\boldsymbol{S}_i(J\times J)(i=1,2,\cdots,K)$.

3) 按照3.1节所描述方法对生产过程进行操作时段的第1步化分, 得到操作时段$s_1,s_2,\cdots,s_C$.

4) 按照3.2节所描述方法对第1步划分后的时段进行第2步细化分, 得到子时段$s_{1,1},s_{1,2},\cdots,s_{2,1},s_{2,2},\cdots,s_{C,1},s_{C,2},\cdots$, 并计算每个子时段$s_{l,m}$(表示在第1步时段划分后的时段$l$内, 进行第2步时段划分后的第$m$个子时段)的均值奇异值对角矩阵$\bar{\boldsymbol{S}}^{l,m}$.

5) 按式(13)所示累计贡献率对各子时段保留主成份个数$a^{l,m}(a^{l,m}\leqslant J)$, 去除原变量空间中的冗余信息及测量噪声对模型的影响.

$$\sum_{i=1}^{a^{l,m}}\lambda_{l,m,i}\Big/\sum_{j=1}^{J}\lambda_{l,m,j}. \tag{13}$$

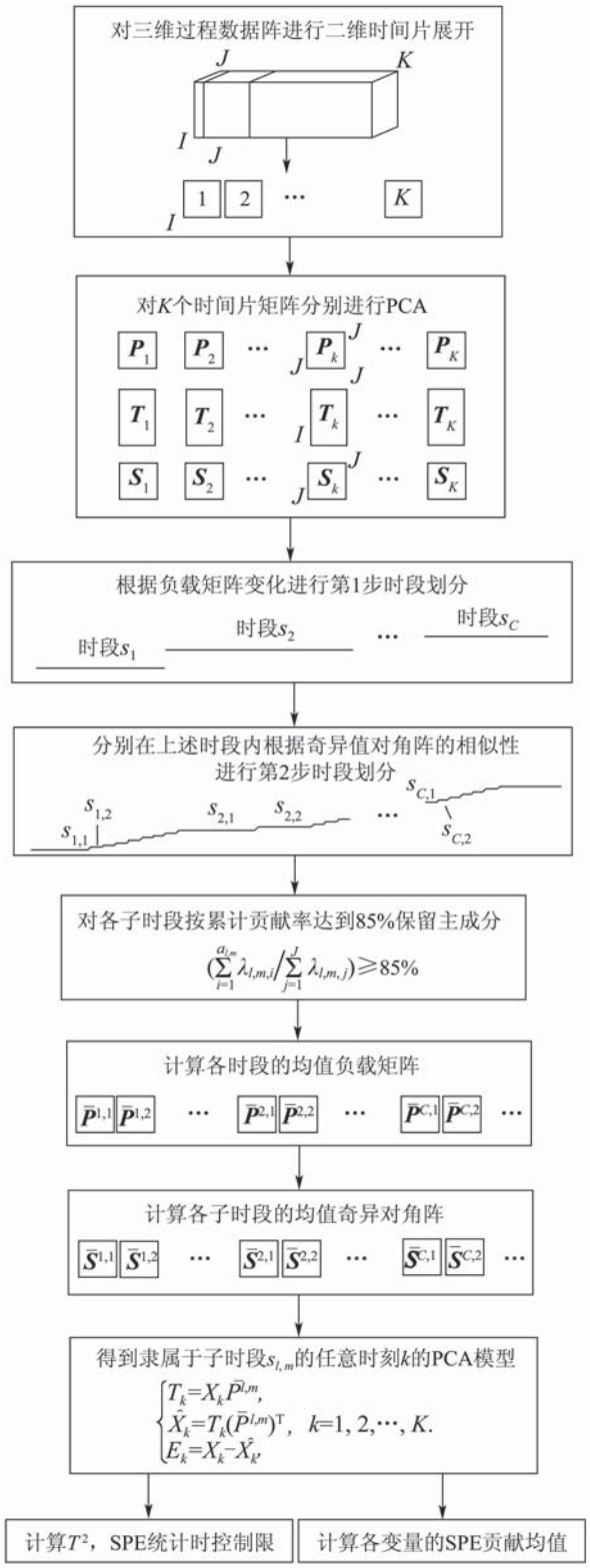

图 3 基于子时段MPCA建模方法示意图

Fig. 3 Illustration of substage based MPCA modeling method

6) 依照保留的变量投影方向, 重新计算各子时段的均值负载矩阵和均值奇异值对角阵.

为描述方便, 保留$a^{l,m}(a^{l,m} \leqslant J)$个主成份后, 各子时段的均值负载矩阵用$\bar{\boldsymbol{P}}^{l,m}$表示, 它的维数从原来的$J \times J$维降为$J \times a^{l,m}(a^{l,m} \leqslant J)$; 均值奇异值对角矩阵依然用$\bar{\boldsymbol{S}}^{l,m}$表示, 但它的维数从原来的$J \times J$维降为$a^{l,m} \times a^{l,m}$维;

7) 得到各子时段的PCA模型, 如式(14)所示. 生产操作过程中每个子时段均具有相近的负载矩阵, 因此其PCA模型均采用均值负载矩阵描述.

隶属于子时段$s_{l,m}$的任意时刻k, 都可以采用时段$s_{l,m}$所对应的均值负载矩阵$\bar{\boldsymbol{P}}^{l,m} = [\boldsymbol{p}_1^{l,m}, \boldsymbol{p}_2^{l,m}, \cdots, \boldsymbol{p}_{a^{l,m}}^{l,m}]$来近似描述. 因此, 隶属于时段$s_{l,m}$的任意$k$时刻的PCA模型可以表示为:

$$\begin{cases} \boldsymbol{T}_k = \boldsymbol{X}_k \bar{\boldsymbol{P}}^{l,m}, \\ \hat{\boldsymbol{X}}_k = \boldsymbol{T}_k (\bar{\boldsymbol{P}}^{l,m})^{\mathrm{T}}, \\ \boldsymbol{E}_k = \boldsymbol{X}_k - \hat{\boldsymbol{X}}_k. \end{cases} \tag{14}$$

8) 按照保留后的主成份, 利用式(7)(8)计算T^2和SPE统计量控制限, 用于实现过程在线监测.

9) 按式(15)(16)计算在各子时段中各变量$x_1, x_2, \cdots, x_J$的SPE统计量贡献均值, $C_{x_j,\overline{\mathrm{SPE}}}^{l,m}(j = 1, 2, \cdots, J)$, 用于异常状态下的故障变量追溯.

$$C_{x_j,\overline{\mathrm{SPE}}}^{l,m} = \frac{1}{k^{l,m}} \sum_{k=1}^{k^{l,m}} (\bar{x}_{k,j}^{l,m} - \hat{\bar{x}}_{k,j}^{l,m})^2 / \overline{\mathrm{SPE}^{l,m}}, \tag{15}$$

其中: $\bar{x}_{k,j}^{l,m}$为在子时段$s_{l,m}$中第k个时间片的变量x_j的均值, $\hat{\bar{x}}_{k,j}^{l,m}$为利用式(14)得到的均值估计值.

$$\overline{\mathrm{SPE}^{l,m}} = \bar{\boldsymbol{e}}^{l,m} (\bar{\boldsymbol{e}}^{l,m})^{\mathrm{T}} = \sum_{j=1}^{J} \frac{1}{k^{l,m}} \sum_{k=1}^{k^{l,m}} (\bar{x}_{k,j} - \hat{\bar{x}}_{k,j})^2. \tag{16}$$

4.2 基于子时段划分MPCA的在线监测及故障变量追溯(On-line monitoring and fault variable detection based on sub-stage separation MPCA)

在线过程监测时, 实时获得当前时刻的采样数据$\boldsymbol{x}(1 \times J)$后, 按下述步骤实现生产过程的在线监测.

Step 1　获取当前时刻的过程变量$\boldsymbol{x}(1 \times J)$.

Step 2　判断当前时刻所处的操作子时段$s_{l,m}$.

Step 3　利用操作子时段$s_{l,m}$的负载矩阵, 按式(15)计算$\boldsymbol{x}$所对应的主成份向量$\boldsymbol{t}(1 \times a^{l,m})$以及预测误差向量$\boldsymbol{e}(1 \times J)$. 式(17)中$\boldsymbol{I}$为$(J \times J)$的单位阵.

$$\begin{cases} \boldsymbol{t} = \boldsymbol{x} \bar{\boldsymbol{P}}_i, \\ \boldsymbol{e} = \boldsymbol{x} - \hat{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{x}(\boldsymbol{I} - \bar{\boldsymbol{P}}_i \bar{\boldsymbol{P}}_i^{\mathrm{T}}). \end{cases} \tag{17}$$

Step 4　按式(18)计算数据$\boldsymbol{x}$对应的T^2和SPE统计量.

$$\begin{cases} T^2 = \boldsymbol{t}(\bar{\boldsymbol{S}}^{l,m})^{-1} \boldsymbol{t}^{\mathrm{T}}, \\ \mathrm{SPE} = \boldsymbol{e}\boldsymbol{e}^{\mathrm{T}}. \end{cases} \tag{18}$$

Step 5　判断T^2和SPE统计量是否超出相应的控制限; 若两者均未超出, 判定当前过程测量数据正常, 返回Step 1; 否则判定当前过程发生异常,

去Step 6.

Step 6 采用SPE贡献图进行故障变量追溯.

过程变量$\boldsymbol{x}(1\times J)$中的第$j$个变量$x_j$对SPE统计量的贡献按式(19)计算:

$$C_{x_j,\mathrm{SPE}}=(x_j-\hat{x}_j)^2/\mathrm{SPE},\ j=1,2,\cdots,J. \tag{19}$$

由于过程变量对SPE统计量的贡献有大有小, 某过程变量x_j对SPE统计量的贡献较大, 并不能完全说明就是该变量的变化导致过程发生异常. 因此, 为了这种现象导致的错误诊断, 本文采用式(20)所示的变量x_j对SPE统计量的贡献变化率来实现异常状态下的故障变量追溯.

$$\Delta C_{x_j,\mathrm{SPE}}=|C_{x_j,\mathrm{SPE}}-C_{x_j,\overline{\mathrm{SPE}}}|/C_{x_j,\overline{\mathrm{SPE}}}, \tag{20}$$

其中$C_{x_j,\overline{\mathrm{SPE}}}$是变量$x_j$对SPE统计量的历史贡献均值.

5 三水箱系统中的实验研究(Experiment research on three-tank system)

5.1 三水箱实验系统(Three-tank system)

图4为东北大学211工程实验室的三水箱实验系统示意图, 其中CV12, CV23为连通阀, LV1, LV2, LV3为泄漏阀, 系统中两个闭环控制系统通过调节进水阀门1和2的开度, 保持水箱1和水箱3液位在设定值附近变化. 系统中的过程变量及工程单位如表1所示.

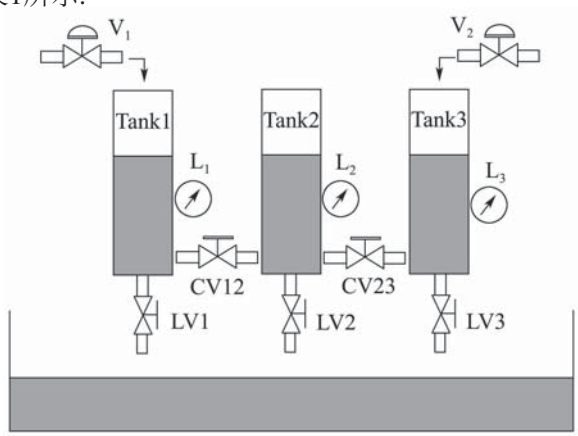

图 4 三水箱系统图

Fig. 4 Three-tank system

表 1 三水箱系统的过程变量

Table 1 Process variables of three-tank system

序号	变量描述	符号	单位
1	进水阀门开度1	V_1	%
2	进水阀门开度2	V_2	%
3	水箱1液位	L_1	mm
4	水箱2液位	L_2	mm
5	水箱3液位	L_3	mm

5.2 实验数据的获取(Acquisition of experiment data)

水箱1的液位设定为300 mm、水箱3的液位设定为200 mm、水箱2的液位保持浮动. 在泄漏阀保持某一较小开度的条件下, 对由2个阀门开度和3个水箱液位组成的5个过程变量每秒采样一次. 每一次正常操作条件下采集130个样本, 一共进行25次实验操作, 其中前20组数据用于建模, 后5组数据用于模型测试. 部分过程数据曲线如图5所示. 过程监测建模的三维数据阵表示为$\widehat{\boldsymbol{X}}(20\times5\times130)$.

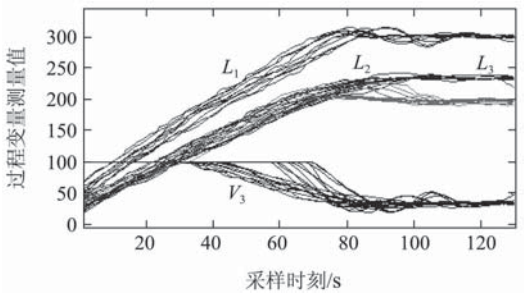

图 5 三水箱过程建模数据

Fig. 5 Modeling data of three-tank process

5.3 子时段划分(Sub-stage separation)

将三维建模数据阵$\widehat{\boldsymbol{X}}(20\times5\times130)$按时间片进行二维展开, 得到130个时间片矩阵$\boldsymbol{X}_1(20\times5)$, $\boldsymbol{X}_2(20\times5),\cdots,\boldsymbol{X}_{130}(20\times5)$. 分别对每个时间片进行PCA. 然后按照负载矩阵的变化对该过程进行第1步时段划分($\delta_{\mathrm{p}}=0.7$), 划分结果如图6和图7所示. 对照实际过程分析, 时段s_1的特点是两个进水阀门均出于全开状态; 时段s_2的特点是进水阀门1出于全开状态, 进水阀门2开度逐渐变小; 时段s_3的特点是2个进水阀门均处于调节状态, 3个水箱液位依然逐渐上升; 时段s_4的特点是2个进水阀门处于反复微调状态, 3个水箱液位趋于稳态; 时段s_5的特点是系统达到稳态.

在时段$s_1\sim s_5$内, 再分别按照奇异值矩阵的变化进行第2步时段细化分, 划分结果如图8、图9所示. 从划分结果可以看出, 在投影方向相同的情况下, 由于奇异值矩阵不相似, 在一些时段的边缘又再一次划分出了新的子时段.

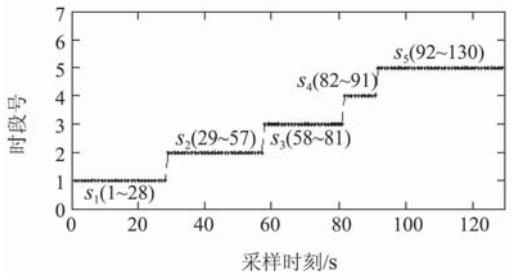

图 6 第1步时段划分后的结果

Fig. 6 First stage separation result

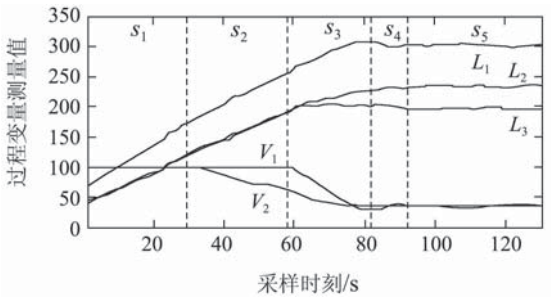

图 7　第1步时段划分结果分析

Fig. 7　Analysis of first stage separation result

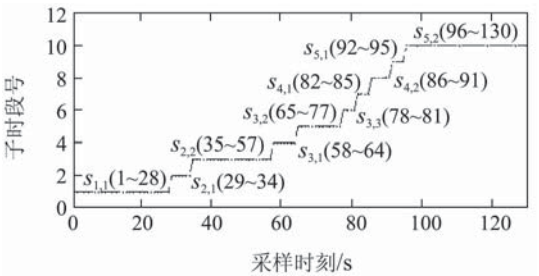

图 8　第2步子时段划分后的结果

Fig. 8　Second sub-stage separation result

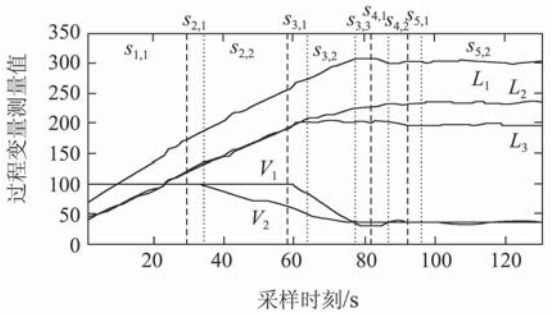

图 9　第2步子时段划分结果分析

Fig. 9　Analysis of second substage separation result

从上述时段划分结果可以看出, 在系统达到稳态时, 变量投影方向和奇异值矩阵是极其相似的; 当生产过程从一个生产操作时段往新时段过渡时, 主成份投影方向和奇异值矩阵两者至少有一个会发生变化. 从图9可以看出, 一个间歇生产过程, 可以认为是由操作时段以及操作时段间的若干过渡时段组成的.

5.4　在线监测(On-line monitoring)

从5组正常工况的测试数据中任选一组, 模拟实际过程的在线监测, 监测结果如图10所示. 从监测结果可以看出, 两个监测指标T^2和SPE都处在正常的统计控制限之内.

另选一组测试数据, 从第50个采样点同时将泄漏阀2和3打开模拟水箱2和3的泄漏故障, 并对过程进行在线监测, 监测结果如图11所示. 从图11可以看出, 当发生故障时, SPE监测指标比较及时的显示系统故障, T^2监测指标在延迟3个采样时刻以后也显地超出控制限, 及时的指示过程出现异常.

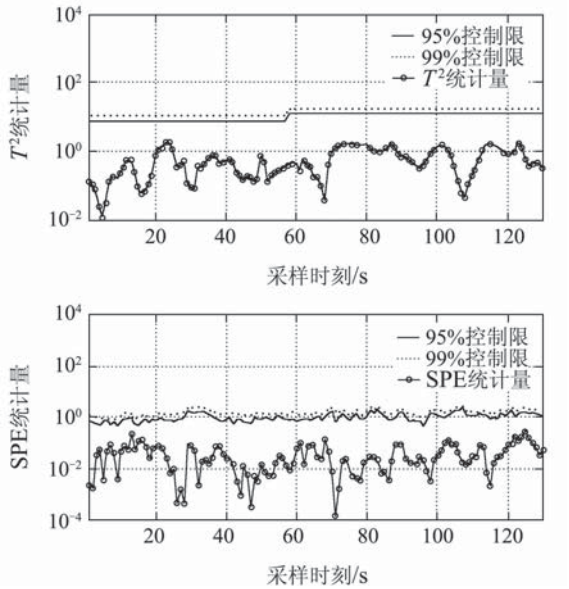

图 10　正常批次的过程在线监测图

Fig. 10　Process monitoring charts for a normal batch

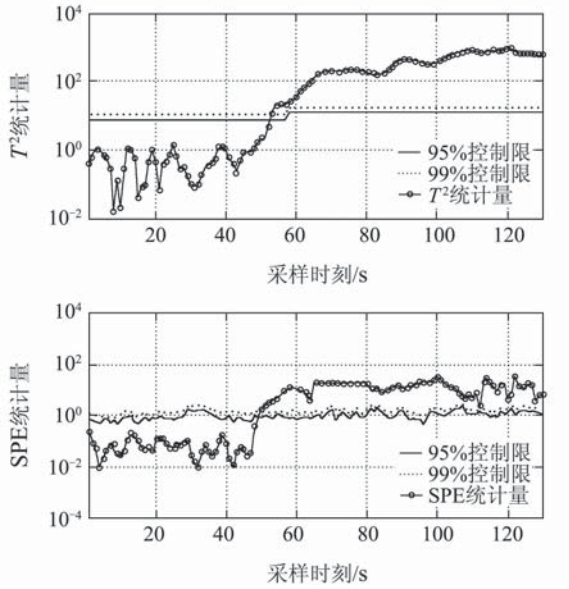

图 11　泄漏阀2和3故障在线监测图

Fig. 11　Process monitoring charts for fault of leak valve 2 and 3

对上述故障, 采用SPE贡献变化率图的故障变量追溯结果如图12所示. 从图12可以看出, 在故障发生早期(55 s), 显示了故障变量4和5(液位1和液位2)的贡献变化率较大; 另外, 变量2(阀门2开度)在没有发生故障的情况下, 其SPE贡献变化率也较大, 分析原因是: 闭环控制系统在液位2偏离设定值时, 改变了进水阀门2的开度以保持液位2稳定而导致的.

在故障持续一段时间以后(65 s), 由于过程变量之间的耦合作用, 故障影响传递到整个过程, 各个变量均发生不同程度的异常变化, 真正的故障变量被湮没, 这将增大故障变量追溯的难度. 因此, 当生产过程发生异常时, 应及时的进行故障变量追溯.

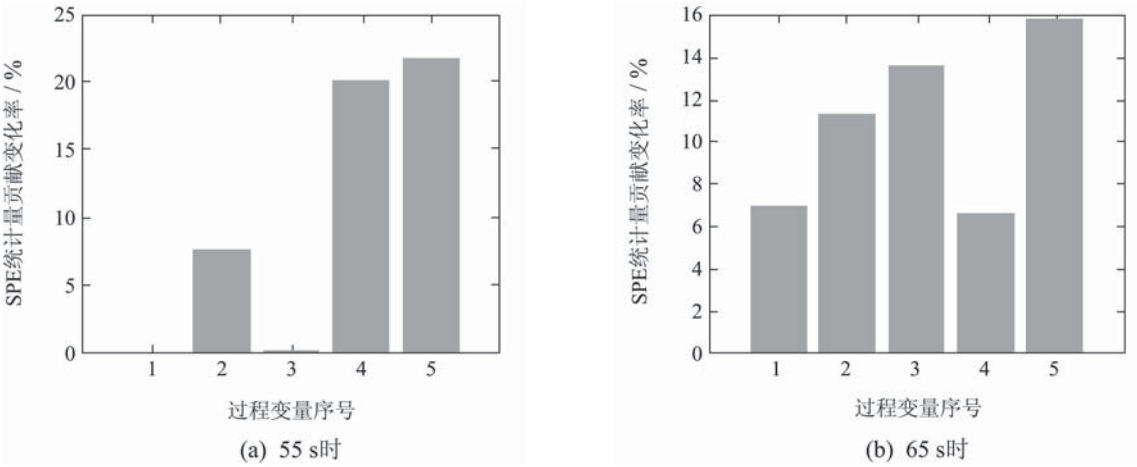

图 12 泄漏阀2和3故障SPE贡献变化率图

Fig. 12 Variation rate of SPE contribution for leak valve 2 and 3fault

6 结论(Conclusion)

本文提出了一种间歇过程子时段划分方法. 该方法根据变量信息变异方向不同以及变量变异的幅值不同, 对生产操作时段进行了两步划分. 同时, 针对负载矩阵和奇异值矩阵描述变量变异的不同特性, 同时为了强调不同主成份具有不同的地位, 提出了负载矩阵和主成份矩阵相似性度量方法, 基于该方法实现了间歇过程的子时段划分. 最后, 文中给出了基于子时段划分的MPCA建模方法和步骤, 并将其应用于三水箱系统的在线监测. 从实验结果可以看出, 该方法能够有效的实现过程监测, 快速检测异常状况.

参考文献(References):

[1] JACKSON J E. *A User's Guide to Principal Components*[M]. New York: Wiley, 1991.

[2] KOURTI T, MACGREGOR J F. Process analysis, monitoring and diagnosis, using multivariate projection methods[J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems,* 1995, 28(19): 3 – 21.

[3] WANG X Z. *Data Mining and Knowledge Discovery for Process Monitoring and Control*[M]. London: Springer, 1999.

[4] NOMIKOS P, MACGREGOR J F. Monitoring batch processes using multiway principal component analysis[J]. *American Institute of Chemical Engineers Journal*, 1994, 40(8): 1361 – 1375.

[5] NOMIKOS P, MACGREGOR J F. Multi-way partial least squares in monitoring batch processes[J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 1995, 30(1): 97 – 108.

[6] NOMIKOS P, MACGREGOR J F. Multivariate SPC charts for monitoring batch processes[J]. *Technometrics*, 1995, 37(1): 41 – 59.

[7] KOSANOVICH K A, PIOVOSO M J, DAHL K S. Multi-way PCA applied to an industrial batch process[C] //*Proceedings of American Control Conference.* Baltimore, USA: IEEE, 1994: 1294 – 1298.

[8] LU N Y, GAO F R, WANG F L. A sub-PCA modeling and on-line monitoring strategy for batch processes[J]. *American Institute of Chemical Engineers Journal*, 2004, 50(1): 255 – 259

[9] ZHAO C H, WANG F L, LU N Y, et al. Stage-based soft-transition multiple PCA modeling and on-line monitoring strategy for batch processes[J]. *Journal of Process Control*, 2007, 17(9): 728 – 741.

[10] WESTERHUIS J A, KOURTI T, MACGREGOR J F. Comparing alternative approaches for multivariate statistical analysis of batch process data[J]. *Journal of Chemometrics*, 1999, 13(3/4): 397 – 413.

[11] MILLER P, SWANSON R E, HECKLER C E. Contribution plots: a missing link in multivariate quality control[J]. *International Journal of Applied Mathematics and Computer Science*, 1992, 8(4): 775 – 792.

作者简介:

王 姝 (1979—), 女, 助教, 博士研究生, 主要研究方向为复杂工业生产过程监测、故障诊断及故障预测等, E-mail: wangshu@ise.neu.edu.cn;

常玉清 (1973—), 女, 副教授, 博士, 主要研究方向为复杂工业生产过程建模、过程监测及质量预测等, E-mail: changyuqing@mail.neu.edu.cn;

王福利 (1957—), 男, 教授, 博士生导师, 主要研究方向为复杂工业过程建模、控制与优化, 复杂工业生产过程监测、故障诊断及质量预测等, E-mail: wangfuli@ise.neu.edu.cn;

杨 洁 (1981—), 男, 硕士研究生, 主要研究方向为复杂工业生产过程监测、故障诊断及故障预测等, E-mail: wnn-yj@163.com;

冯淑敏 (1987—), 女, 硕士研究生, 主要研究方向为多模态过程建模与监测, E-mail: fengshuminok@126.com.