

文章编号: 1001-0920(2002)02-0215-04

基于迭代主成分分析的过程监测方法的研究与实现

陆宁云, 杨英华, 王福利

(东北大学 信息科学与工程学院, 辽宁 沈阳 110004)

摘要: 利用迭代主成分分析(PCA)算法, 提出一种在线过程监测方法。根据实际生产过程经验, 提供了由多元统计控制图判断过程是否正常的准则, 实现了实时在线的 PCA 建模和过程监测。仿真例子验证了这种过程监测方法的有效性和可行性。

关键词: 多元统计控制图; 迭代主成分分析; 过程监测; 故障检测及诊断

中图分类号: TP 277

文献标识码: A

Research and implementation of process monitoring based on iterative principal component analysis(PCA)

LU Ning-yun, YANG Ying-hua, WANG Fu-li

(School of Information Science and Engineering, Northeastern University, Shenyang 110004, China)

Abstract: A new method based on iterative PCA is presented to realize on-line modeling and process monitoring. According to the operation experiences in real processes, some rules are proposed by which operator can judge whether the process is under control or not when monitoring the multivariate statistical control charts. The simulation shows the validity and feasibility of this method.

Key words: multivariate statistical control chart; iterative PCA; process monitoring; fault detection and diagnosis

1 引言

连续生产过程中存在大量高度相关的过程变量, 这些变量在每一时刻的采样值都蕴含着生产过程是否正常、产品质量是否合格等信息。由于变量间的高度相关性, 故障或扰动会导致许多变量采样值的异常, 因而仅监视各个独立的过程变量, 对于过程监测、故障检测及诊断并无裨益。以主成分分析(PCA)为代表的多元统计控制图方法^[1~4], 将生产过程中大量高度相关的过程变量投影到一个包含原空间绝大多数信息的低维子空间中, 从而使得过程

监测、故障检测及诊断等研究工作大为简化。但是, 传统的 PCA 模型一旦建立后便不再更改, 若实际过程发生变化, 就要在新的过程状态下积累足够多的正常数据后才能建立新的模型, 而实际过程往往无法在短时间内提供较为完备的正常数据集。为此, 一些学者研究了迭代的多变量投影方法, 并已提出了几种可行的算法^[5~7]。

本文采用迭代 PCA 算法, 提出一种在线过程监测方法, 并根据实际生产过程经验, 提供由多元统计控制图来判断数据是否正常的若干准则, 实现了实时在线的 PCA 建模和过程监测。仿真例子验证了这

收稿日期: 2000-05-19; 修回日期: 2000-10-18

作者简介: 陆宁云(1978—), 女, 江苏连云港人, 博士生, 从事过程监测、故障检测及诊断的研究; 王福利(1957—), 男, 辽宁辽阳人, 院长, 教授, 博士生导师, 从事过程监测、过程优化和软测量等研究。

种过程监测方法的有效性和可行性。

2 PCA 算法

假设某过程有 m 个过程变量 x_1, x_2, \dots, x_m , 其正常状态下的 n 个历史数据构成正常数据阵 $X_{n \times m}$ 。现对过程变量 x_1, x_2, \dots, x_m 进行在线监测。为了避免过程变量的不同量纲对结果的影响, 同时也为了便于数学运算, 需要对建模数据进行标准化处理, 将各个变量的采样数据转换为均值是 0, 方差是 1 的数据。记标准化后的数据阵为 \tilde{X} , 其协方差阵为 $\tilde{D} = \text{Cov}(\tilde{X}^T \tilde{X})$, \tilde{D} 的第 i 个特征根为 λ_i , λ_i 对应的特征向量为 p_i 。

PCA 的基本思想是基于过程变量正常数据阵的奇异值分解 $\tilde{X} = Q \Lambda P^T$, 将 \tilde{X} 分解成主成分得分向量 t_i , 负载向量 p_i 的外积和加上残差项 E , 选取的主成分个数为 k 。则有

$$\tilde{X} = Q \Lambda P^T = T P^T + E = t_1 p_1^T + t_2 p_2^T + \dots + t_k p_k^T + E \quad (1)$$

PCA 将 m 维过程变量投影到 k 维主成分空间, 由主成分 T 和负载矩阵 P 也可以重构原始数据 \tilde{X} 。重构的数据记为 X , 重构误差 $E = (\tilde{X} - X)$ 。定义第 i 个采样数据 \tilde{x}^i 的预测误差平方和 SPE ^{i} 如下

$$\text{SPE}^i = \sum_{j=1}^m (\tilde{x}_j^i - \hat{x}_j^i)^2 = (\tilde{x}_j^i - \hat{x}_j^i) (\tilde{x}_j^i - \hat{x}_j^i)^T \quad (2)$$

基于 PCA 的过程监测通过监视较低维数的主成分和 SPE 值是否处于统计受控限内, 得出过程是否正常的结论。显然, 用 PCA 建模在正常操作下应有足够的过程变量数据, 并且该模型是静止和时不变的, 这在很大程度上限制了 PCA 方法的实际应用。因此, 随之产生了迭代 PCA 算法^[5]。

假定已有 K 组正常状态下的过程数据 X^K , 并由此建立了 PCA 模型

$$\tilde{X}^K = T^K (P^K)^T + E \quad (3)$$

现产生了第 $K+1$ 组正常数据 x^{K+1} , 此时需要更新模型, 主要是获取新的主成分负载矩阵 P , 即确定 $K+1$ 组正常数据阵 \tilde{X}^{K+1} 协方差阵 \tilde{D}^{K+1} 的特征向量。首先对新老数据重新作标准化处理; 然后求取新的协方差阵, 利用 Golub^[9] 提出的方法求取新的特征值和特征向量, 其部分迭代公式如下

$$\tilde{X}^{K+1} = \begin{bmatrix} \tilde{X}^K \Sigma^K (\Sigma^{K+1})^{-1} - \mathbf{1}^K \Delta u^{K+1} (\Sigma^{K+1})^{-1} \\ (\tilde{x}^{K+1} - u^{K+1}) (\Sigma^{K+1})^{-1} \end{bmatrix} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \tilde{D}^{K+1} = & (\Sigma^{K+1})^{-1} \Sigma^K \tilde{D}^K \Sigma^K (\Sigma^{K+1})^{-1} + \\ & (\Sigma^{K+1})^{-1} (\Delta u^{K+1})^T \Delta u^{K+1} (\Sigma^{K+1})^{-1} + \\ & (\tilde{x}^{K+1})^T \tilde{x}^{K+1} \end{aligned} \quad (5)$$

其中, $\Sigma^j = \text{diag}(\sigma_1^j, \sigma_2^j, \dots, \sigma_m^j)$, $j = K, K+1$; σ_i ($i = 1, 2, \dots, m$) 为各变量 x_i 的样本方差; $\Delta u^{K+1} = u^{K+1} - u^K$, u 为 X 的均值向量; $\mathbf{1}^K = [1, 1, \dots, 1]_{1 \times K}^T$, \tilde{X}^K 是 K 组标准化后的正常数据阵; $\Lambda^K = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m)$, λ_i 是 \tilde{D}^K 的特征根; P^K 为 \tilde{D}^K 的特征向量矩阵。关于 \tilde{D}^{K+1} 的特征向量矩阵 P^{K+1} 的推导过程参见文献[5, 9]。

3 基于迭代 PCA 算法的过程监测方法的实现

基于多变量统计方法的过程监测主要是通过监视统计变量分布图实现的。实际生产过程中的变量大都高度相关, 这些变量的线性组合可以定义一种基本扰动或故障类型, PCA 模型中的主成分其实就是过程变量的线性组合, 原变量出现故障必然反映在主成分或 SPE 的变化上。由于主成分个数少、空间维数低, 因此可通过监视主成分时间序列图, 两个主成分关系图, SPE 图等多变量控制图, 来判断过程变量是否发生异常, 产品质量是否合格。

在主成分子空间构造 Hotelling s 统计量

$$T^2 = n(t \Lambda^{-1} t^T) \quad (6)$$

其中 Λ 是 $\tilde{X}^T \tilde{X}$ 前 k 个特征根组成的对角矩阵, T^2 服从 $\frac{k(n-1)}{n-k} F_{k, (n-k), \alpha}$ 分布, 定义 $\alpha = 0.05$ 时的置信区间边界为警戒边界, $\alpha = 0.01$ 时的置信区间边界为动作边界。对于 SPE, 满足 Q 统计量分布, Q 统计量上限的确定参见文献[2, 5]。

由于迭代 PCA 算法用于在线建模和实时监测, 对各种控制图的分析也有别于传统的 PCA 算法。首先考虑下面两个问题: 1) 如何判断过程变量的新采样数据是正常数据、劣点还是故障数据; 2) 如何更新控制图正常操作域的置信区间边界。

根据实际生产过程中的操作经验, 我们提出以下准则来判断新数据是正常数据、劣点还是故障数据:

1) 若发生以下 3 种情况, 则认为过程处于“失控”或“即将失控”状态, 可能已经或即将发生故障:

连续 q_1 个点超出动作边界; 连续 q_2 个点超出警戒边界; 对于一维控制图, 连续 q_3 个点呈上升趋势; 对于二维控制图, 连续 q_3 个点按时间排列呈扩

散趋势, 且第 1 个点与最后一个点的欧氏距离大于正常操作域(椭圆)的短轴长度。

2) 若以下两种情况发生, 则认为新数据是劣点: $k_1(k_1 < q_1)$ 个数据点超出动作边界, 但后续数据点仍回到正常操作域; $k_2(k_2 < q_2)$ 个数据点超出警戒边界, 但后续数据点仍回到正常操作域。

3) 前两种情况都没有发生, 而且新数据点在各个控制图中都处于正常操作域, 则认为新数据是正常数据, 将其暂存于历史数据存储区, 以使用此数据更新 PCA 模型。

如何随着动态建模的进行, 更新正常操作域的边界是基于迭代 PCA 算法的过程监测中一个重要的细节问题, 开始建模时只有少量的正常数据, 由这些数据作均值的假设检验, 计算出的正常操作域置信区间要比由完备数据集计算出的置信区间大, 若用这个正常操作域边界对后续数据进行判断, 必然导致漏报率增大。许多实际上是劣点或故障的数据被认为是正常数据而更新模型, 这样势必使模型的精确性降低; 若每来一个新数据都更新正常操作域边界, 重复计算将会占用很多时间。本文基于折衷的思想, 提出如下方法更新置信区间边界。

1) 由 N_0 个初始数据建立 PCA 模型, 并设置 A, B 和 C 区(如图 1 所示); 定义 $\alpha = 0.05$ 的置信区间边界为警戒限, $\alpha = 0.01$ 时的置信区间边界为动作限, $\alpha = 0.1$ 的置信区间边界作为辅助量;

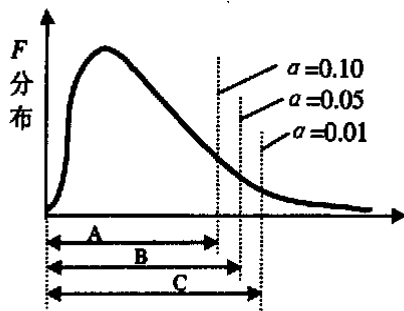


图 1 F 分布密度函数及 A, B, C 3 区划分

2) 用迭代 PCA 方法更新模型, 计算新数据 T^2 统计量数值, 并统计落于 A, B, C 3 区的次数;

3) 当新数据又达到 N_0 时, 验证这些新数据落于 3 区的次数是否近似为 90%, 95% 和 99%; 是则保留该置信区间边界不再更改; 否则重新作假设检验确定新的置信区间边界, 初始数据设为 $2N_0$, 返回 1)。

基于迭代 PCA 算法的过程监测算法具体实现步骤如下:

1) 由 N_0 个初始数据建立 PCA 模型, 保存采样

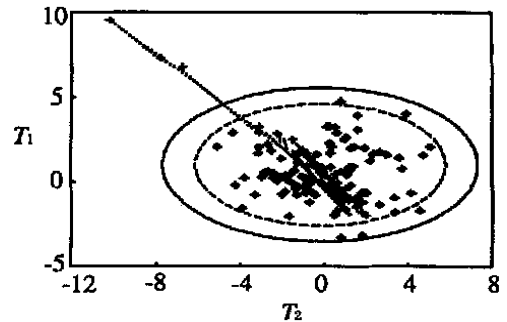
点个数, 过程变量均值向量和方差向量, 协方差阵的特征根以及对应的特征向量, 主成分个数, 作主成分和 SPE 均值的假设检验, 计算出置信区间的边界, 开始监视各统计控制图。

2) 新采样数据置入数据暂存区: 计算新数据的各统计量值, 判断该数据是正常数据、劣点还是故障数据; 新数据是正常数据, 则用迭代 PCA 算法更新模型; 是劣点, 则清空历史数据暂存区; 是故障数据, 则分析过程变量 x_i 对 SPE 的贡献率, 找出贡献率最大的变量, 检查是否有故障, 是则排除故障; 否则找出贡献率次大的变量, 直到故障排除。

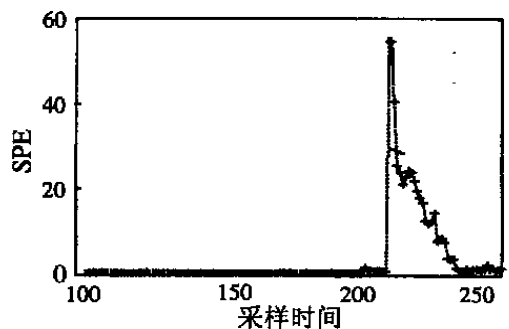
3) 当新数据积累到 $n_0(i = 1, 2, \dots)$ 时, 重新作均值假设检验, 计算出新的置信区间边界(直到边界不再变化), 转 2)。

4 仿真举例

本文选取的仿真对象是一个双效蒸发器闭环控制系统^[10], 仿真模型是该系统在稳态值附近线性化后的状态方程模型。为了保证系统的稳定性, 采取极点配置状态负反馈控制。该系统是状态可观的, PCA 模型中选取的过程变量历史数据阵 X 由 3 个控制量和 5 个状态量($u_1, u_2, u_3; x_1, x_2, x_3, x_4, x_5$) 组成, 其中各个状态量附加 1% 的白噪声。



(a) T_1-T_2 图



(b) SPE-时间图

图 2 仿真模型实时过程监测

仿真中,由该模型产生300个采样点,稳态后前50个点作为初始数据,随后的50个数据均落于C区。重新作假设检验,置信区间边界经一次调整后便固定不变。从控制图中可看出第200个采样时刻检测到故障,从SPE图也可明显看出有故障发生。经诊断确定是控制量 u_1 发生异常,实际原因是该时刻 u_1 发生阶跃扰动。截取的部分监测图如图2所示,其中“*”为正常数据,“+”为故障数据。

5 结 论

本文从实际生产过程经验出发,提出了如何在线判别过程的新采样数据是正常数据、劣点或故障数据的准则,以及如何更改正常操作域的一种实验方法;同时提供了一种基于迭代PCA的过程监测算法,实现了生产过程的在线建模和实时监测,也可以进行简单的故障诊断。由于各种生产过程本身特性的不同,在应用准则判断过程是否正常时要根据具体情况而定。应用本文算法对双效蒸发器模型进行仿真,证明该算法是有效可行的。

参考文献(References):

- [1] E B Martin, A J Morris, J Zhang Process performance monitoring using multivariate statistical process control [J]. IEE Proc Contr Theory Appl, 1996, 143(2): 132-144
- [2] F Jia, E B Martin, A J Morris Multiple sensor disturbance identification through principle component analysis[A]. Proc of the 14th IFAC[C]. Beijing, 1999 551-556
- [3] Barry M Wise, Neal B Gallagher. The process chemometrics approach to process monitoring and fault detection[J]. J Process Contr, 1996, 6(6): 329-348
- [4] J Zhang, E B Martin, A J Morris Fault detection and diagnosis using multivariate statistical techniques[J]. Chem Eng Res, 1996, 74(12): 89-96
- [5] S Joe Qin, Weihua Li, H Henry Yue. Recursive PCA for adaptive process monitoring[A]. Proc of the 14th IFAC[C]. Beijing, 1999 85-90
- [6] Bhupinder S Dayal, John F MacGregor. Recursive exponentially weighted PLS and its applications to adaptive control and prediction[J]. J Process Contr, 1997, 7(3): 169-179
- [7] S Joe Qin. Recursive PLS algorithms for adaptive data modeling [J]. Comp Chem Eng, 1998, 22(4/5): 503-514
- [8] S Wold. Cross-validatory estimation of the number of components in factor and principle components models [J]. Technometrics, 1978, 20(4): 397-405
- [9] Golub G H. Some modified matrix eigenvalue problems [J]. SIAM Rev, 1997, 15: 318-334
- [10] 蒋慰孙, 叶银川. 多变量控制系统分析与设计[M]. 北京: 中国石化出版社, 1997.
- [6] Jing Wan, Zi-xing Cai, Limin Jia Automatic train operation based on direct fuzzy neural control[A]. Proc of the 2nd Chinese World Congress on Intelligent Control and Intelligent Automation[C]. Xi'an, 1997. 578-584
- [7] 何兵, 万百五, 贾利民. 高速列车自动运行智能控制器设计研究[A]. 第2届全球智能控制大会论文集[C]. 西安, 1997. 572-577.
- [8] 何兵, 万百五. 递阶模糊逻辑系统研究及其在列车自动化中的研究[J]. 西北工业大学学报(J of Northwestern Polytec Univ), 1998, 16(3): 427-433
- [9] Chang C S, Xu D Y. Differential evolution based tuning of fuzzy automatic train operation for mass rapid transit system [J]. Proc of the IEE, 2000, 147(3): 206-212
- [10] Seong Ho Han, Yun Sub Byen, Jong Hyen Baek, et al. An optimal automatic train operation (ATO) control using genetic algorithms (GA) [A]. TENCON 99, Proc of the IEEE[C]. Cheju Island, South Korea, 1999. 360-362

(上接第206页)