

偏最小二乘线性模型及其非线性动态扩展模型综述

孔祥玉¹, 曹泽豪^{1†}, 安秋生², 徐中英¹, 罗家宇¹

(1. 火箭军工程大学 导弹工程学院, 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: 偏最小二乘(Partial least square, PLS)是一种基于数据驱动可以处理多个因变量对多个自变量的回归建模方法,因其具有提取质量相关信息的特性,在质量相关复杂工业过程监控中得到广泛的应用,成为近几十年复杂工业过程故障检测和诊断领域的研究热点. 对此,介绍线性、非线性、动态 PLS 模型及其故障检测技术. 首先,介绍标准 PLS 模型,在此基础上对传统 PLS 模型进行细化分并指出其优缺点,针对标准 PLS 存在的两个问题以及工业过程数据的两种极端情况,从数据预处理类、多空间类和分块类三方面梳理线性 PLS 模型的发展和改进历程;其次,将非线性 PLS 模型扩展方法分为两类,重点介绍核函数非线性 PLS 模型的研究现状;再次,指出动态扩展方法的两种基本思路,对 PLS 动态模型进行分类,阐明动态特性的成因,从本质上揭示两种动态扩展方法的原理,按照分类综述动态 PLS 模型的发展现状;最后,指出该领域亟需解决的问题和未来研究方向.

关键词: 偏最小二乘; 数据驱动; 质量相关; 线性; 非线性; 动态; 过程监控

中图分类号: TP273

文献标志码: A

Review of partial least squares linear models and their nonlinear dynamic expansion models

KONG Xiang-yu¹, CAO Ze-hao^{1†}, AN Qiu-sheng², XU Zhong-ying¹, LUO Jia-yu¹

(1. School of Missile Engineering, Rocket Force University of Engineering, Xi'an 710025, China; 2. School of Mathematics and Computer Science, Shanxi Normal University, Linfen 041004, China)

Abstract: Partial least square(PLS) is a data-driven regression modeling method that can process multiple dependent variables against multiple independent variables. It has been widely used in quality-related complex industrial process monitoring and has attracted many attentions in complex industrial process fault detection and diagnosis, for its characteristic of extracting quality-related information. In this paper, the linear, nonlinear, dynamic PLS model and their fault detection technology are introduced. Firstly, the standard PLS model is introduced, and based on which the traditional PLS is classified in different ways and its advantages and disadvantages are pointed out. Based on the two problems in standard PLS and two specific situations of industrial process data, the improvement of linear PLS models are reviewed in the three aspect of data preprocessing, multi-space and sub-chunking, respectively. Secondly, the non-linear PLS model expansion methods are divided into two types, and the current research status of the non-linear PLS model of kernel function is mainly introduced. Thirdly, two ideas of expanding dynamic models are introduced, and according to the two ideas, the PLS dynamic models are classified. The origin of dynamic characteristics are clarified, and according to the origin, the principle of the two dynamic expansion methods is revealed in essence. Based on the classification the development of dynamic PLS models are reviewed. Finally, open challenges and future directions are presented.

Keywords: partial least squares; data driven; quality-related; linear; nonlinear; dynamic; process monitoring

0 引言

近几十年来,现代化工、冶金、机械、物流等工业呈现向大型化、复杂化方向发展的趋势,这些大型复杂工业过程无法完全依靠传统方法建立精确的物理模型进行管理监控^[1],一旦发生事故,便会造成巨大

的财产损失和人员伤亡. 例如: 1974年意大利塞韦索一家化工反应堆发生泄漏,导致28名工人死亡,2000余人二恶英中毒; 1984年印度博帕尔农药厂发生毒气泄漏,致使2.5万人直接死亡,55万人间接死亡,5万人永久残废; 2005年吉林市中石化吉林石化公司双

收稿日期: 2017-10-03; 修回日期: 2017-12-25.

基金项目: 国家自然科学基金项目(61673387, 61374120).

作者简介: 孔祥玉(1967-), 男, 教授, 博士生导师, 从事系统特征提取、自适应信号处理等研究; 曹泽豪(1993-), 男, 硕士生, 从事系统特征提取、多元统计过程监控的研究.

†通讯作者. E-mail: 578021174@qq.com

苯厂连续发生爆炸,形成特大环境污染事故. 为了避免这些重大事故的发生,大型复杂工业过程监控已成为人们研究的热点问题之一.

随着新型仪表以及传感器的发展,大量反映工业过程运行机理和运行状态数据的采集已成为可能. 由于大量的数据可以利用,人们提出了基于数据驱动的建模方法,并已广泛应用于过程监控. 这类方法通常称为多元统计过程监控 (Multivariate statistical process monitoring, MSPM) 方法^[2]. MSPM 依托的主要理论是以主元分析 (Principle component analysis, PCA)^[3]、规范变量分析 (Canonical variable analysis, CVA)^[4]、独立成分分析 (Independent component analysis, ICA)^[5]、Fisher 判别分析 (Fisher discriminant analysis, FDA)^[6]、偏最小二乘 (Partial least squares, PLS)^[7] 等为核心的投影降维算法.

在工业过程中,大量过程变量中通常仅有几个关键的变量,关键变量的变化会影响最终产品的质量,甚至造成重大事故. 人们把这些关键变量称为质量变量. 然而 PCA、ICA 和 FDA 算法对工业过程中所有变量进行无差别的监控,在降维过程中并未考虑质量变量,可能会去掉一些与质量变量相关的关键信息,而这些关键信息的缺失会造成过程监控失效. 基于这一不足,人们提出了与质量相关的投影降维算法,如 CVA 和 PLS. 这类算法在进行投影降维建模时尽可能保留了与质量变量相关的信息,而在过程监控领域,这类算法通常称为质量相关的故障检测与诊断方法. CVA 常用于动态系统建模,而 PLS 的研究更为广泛,人们已经提出了大量线性、非线性以及动态 PLS 扩展模型. 最近在过程监控领域,学者们发表了一些综述性文献^[8-10],其中都涉及了 PLS 模型,但对 PLS 模型的综述都不够完整且没有给出详细的分类.

本文给出 PLS 模型发展结构,如图 1 所示. 基于图 1,将工业过程故障检测技术作为主要应用背景,以分类和扩展方法为横轴,线性、非线性、动态为纵轴,对 PLS 模型进行全面的综述. 首先,介绍线性 PLS 模型,并对传统 PLS 模型按照不同的方式进行分类,随后按照 PLS 存在问题以及数据的极端情况对线性 PLS 模型发展现状进行综述;其次,针对基于核函数的非线性 PLS 模型进行综述;再次,阐明动态成因,对动态 PLS 模型进行综述;最后,指出该领域亟需解决的问题和未来研究方向.

1 线性偏最小二乘模型

PLS 是由 Wold 等^[7]于 1983 年提出的. PLS 有如下几个特点^[11]: 1) 可以实现多个因变量对多个自变量的回归建模,比逐个因变量做多元回归更加有效、可靠,整体性更强; 2) 解决了自变量之间的多重相关性问题; 3) 可以实现多种数据分析的综合应用. 一次 PLS 算法相当于同时实现多元线性回归 (Multiple linear regression, MLR)、主成分分析 PCA 以及典型相关分析 (Anonical correlation analysis, CCA),因此, PLS 被称为第 2 代回归分析方法^[12].

1.1 传统偏最小二乘模型

1.1.1 标准偏最小二乘基本模型及其故障检测技术

PLS 又称潜结构投影模型. 首先要明确两个基本概念^[13]: 一是显变量,即可以直接测量的变量,也就是原始的 \mathbf{X} 和 \mathbf{Y} , 变量之间可能有强相关性; 二是潜变量,即无法直接测量的变量,变量之间不具有强相关性,是显变量的线性组合.

假设自变量数据矩阵 $\mathbf{X} = [\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_n]^T$ 的潜变量为 $\mathbf{t}_i, i = 1, 2, \dots, A$; 因变量数据矩阵 $\mathbf{Y} = [\mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \dots, \mathbf{y}_n]^T$ 的潜变量为 $\mathbf{u}_i, i = 1, 2, \dots, A$. 其中: \mathbf{X} 和 \mathbf{Y} 是零均值、单位方差标准化后的数据矩阵, \mathbf{X} 和 \mathbf{Y} 通常也称为输入、输出. 由基本概念可得

$$\mathbf{t}_i = \mathbf{X} \mathbf{w}_i, \mathbf{u}_i = \mathbf{Y} \mathbf{c}_i, i = 1, 2, \dots, A. \quad (1)$$

其中: \mathbf{w}_i 和 \mathbf{c}_i 分别是输入潜变量 \mathbf{t}_i 和输出潜变量 \mathbf{u}_i 的权向量; 权重矩阵为 $\mathbf{W} = [\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_A]$; A 为主元潜变量个数,一般由交叉验证^[14]得到.

PLS 是由数据矩阵 \mathbf{X} 和 \mathbf{Y} 对潜变量回归建模的算法,而潜变量的选取应满足两个原则^[15]: 1) \mathbf{t}_i 和 \mathbf{u}_i 尽可能大地携带各自数据矩阵的变异信息; 2) \mathbf{t}_i 与 \mathbf{u}_i 的相关程度能够达到最大. 这两个原则可转化为如下优化问题的解:

$$\begin{cases} \max \mathbf{w}_i^T \mathbf{X}_i^T \mathbf{Y}_i \mathbf{c}_i; \\ \text{s.t. } \|\mathbf{w}_i\| = \|\mathbf{c}_i\| = 1. \end{cases} \quad (2)$$

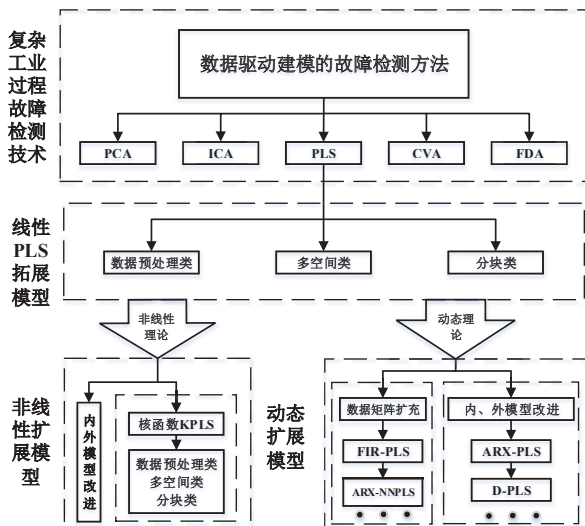


图 1 PLS 模型发展结构

PLS模型的求解可以采用特征分解法(ED)^[11,15],也可以采用奇异分解法(SVD)^[16-17]. PLS模型通常利用 \mathbf{X} 和 \mathbf{Y} 分别对 t_i 和 u_i 进行回归建模,其外部模型如下:

$$\begin{cases} \mathbf{X} = \hat{\mathbf{X}} + \tilde{\mathbf{X}} = \sum_{i=1}^A t_i p_i^T + \tilde{\mathbf{X}} = \mathbf{T} \mathbf{P}^T + \tilde{\mathbf{X}}, \\ \mathbf{Y} = \hat{\mathbf{Y}} + \tilde{\mathbf{Y}} = \sum_{i=1}^A u_i q_i^T + \tilde{\mathbf{Y}} = \mathbf{U} \mathbf{Q}^{*T} + \tilde{\mathbf{Y}}^*. \end{cases} \quad (3)$$

其中: $\hat{\mathbf{X}}$ 为主元子空间, $\tilde{\mathbf{X}}$ 为残差子空间, $\hat{\mathbf{Y}}$ 为可预测部分, $\tilde{\mathbf{Y}}$ 为残差, $\mathbf{T} = [t_1, t_2, \dots, t_A]$ 为得分矩阵, \mathbf{X} 和 \mathbf{Y} 为对应 \mathbf{X} 和 \mathbf{Y} 的负载矩阵. $\mathbf{B} = \text{diag}\{b_1, b_2, \dots, b_A\}$, b_i 为内部回归系数,则 $\mathbf{U} = \mathbf{T} \mathbf{B}$. 内部模型如下:

$$u_i = b_i t_i + r_i, \quad (4)$$

其中 r_i 为残差. 该模型为线性内部模型,可以改为非线性或动态内部模型,从而得到非线性和动态PLS模型. 线性PLS内、外部模型示意如图2所示.

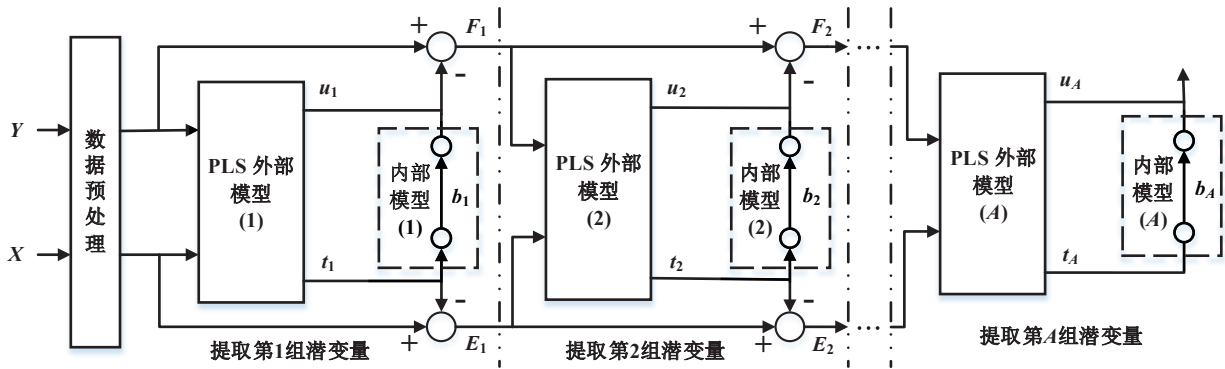


图2 线性PLS内、外部模型示意

在故障检测应用中,PLS模型参数通常由非线性迭代算法(NIPALS)求解^[18],采用 \mathbf{X} 和 \mathbf{Y} 对 t_i 进行回归建模,即

$$\begin{cases} \mathbf{X} = \hat{\mathbf{X}} + \tilde{\mathbf{X}} = \sum_{i=1}^A t_i p_i^T + \tilde{\mathbf{X}} = \mathbf{T} \mathbf{P}^T + \tilde{\mathbf{X}}, \\ \mathbf{Y} = \hat{\mathbf{Y}} + \tilde{\mathbf{Y}} = \sum_{i=1}^A t_i q_i^T + \tilde{\mathbf{Y}} = \mathbf{T} \mathbf{Q}^T + \tilde{\mathbf{Y}}. \end{cases} \quad (5)$$

其中 $\mathbf{Q} = [q_1, q_2, \dots, q_A]$ 为 \mathbf{Y} 对 \mathbf{T} 的回归矩阵,通常称负载矩阵. 由于 \mathbf{T} 无法从 \mathbf{X} 中直接计算得到,引入新权重矩阵 $\mathbf{R} = \mathbf{W}(\mathbf{P}^T \mathbf{W})^{-1}$,可得 $\mathbf{T} = \mathbf{X} \mathbf{R}^{[19]}$,基于 \mathbf{R} ,可得到 \mathbf{Y} 对 \mathbf{X} 的回归矩阵 $\mathbf{C} = \mathbf{R} \mathbf{Q}^T$ ^[20].

以上两种回归模型有近似关系,即 $\mathbf{Q}^T \approx \mathbf{B} \mathbf{Q}^{*T}$. 这两种回归模型都基于标准的PLS,标准PLS在 \mathbf{X} 空间诱导了一个斜交分解^[21],将 \mathbf{X} 空间分解为主元子空间 $\hat{\mathbf{X}}$ 和残差子空间 $\tilde{\mathbf{X}}$. 主元子空间 $\hat{\mathbf{X}}$ 反映了与 \mathbf{Y} 相关的变化,由 T^2 统计量监控;残差子空间 $\tilde{\mathbf{X}}$ 反映了与 \mathbf{Y} 无关的变化,由 Q 统计量监控. 传统PLS模型应用于故障检测,统计量 T^2 和SPE的公式以及控制限参数参见文献[22].

1.1.2 传统偏最小二乘模型分类

按照数据空间的结构分解方式划分,传统PLS模型有3种,分别是标准的PLS模型、W-PLS模型^[23]和SIMPLS模型^[24]. 这3种PLS模型的区别在于对输入

数据空间的结构分解方式:标准PLS是斜交分解,W-PLS和SIMPLS都是正交分解. 对于应用于过程监控而言,标准PLS模型效果更优.

按照模型求解方法划分,传统PLS模型有两种,分别是基于特征分解法(ED)和奇异分解法(SVD)的PLS模型和基于非线性迭代(NIPALS)的PLS模型. 基于ED和SVD的模型在计算过程中要处理维度较大的数据矩阵,在线模型更新较为困难;非线性迭代(NIPALS)求解方法将求解过程分解,通过迭代方式构建模型,其计算量较小,有利于过程监控.

按照更新方式划分,传统PLS模型有两种,分别是仅更新输入 \mathbf{X} 的PLS模型和仅更新输出 \mathbf{Y} 的PLS模型^[19]. 根据问题所需选取合适的更新方式,有利于增强模型更新的效率.

按照核矩阵划分,传统线性核PLS模型有两种,分别是核矩阵为 $\mathbf{X}^T \mathbf{Y} \mathbf{Y}^T \mathbf{X}$ 的线性核PLS模型^[25]和核矩阵为 $\mathbf{X} \mathbf{X}^T \mathbf{Y} \mathbf{Y}^T$ 的线性核PLS模型^[26]. 根据问题所需选取合适的核矩阵,能大大减少运算复杂度.

1.2 数据预处理类

标准PLS模型存在两个缺点:1) $\hat{\mathbf{X}}$ 中包含了与 \mathbf{Y} 正交的成分;2) $\tilde{\mathbf{X}}$ 内部有较大的变异. 缺点1)的成因是PLS算法对 \mathbf{X} 进行了斜交分解^[21];缺点2)的成因是PLS算法旨在 \mathbf{X} 和 \mathbf{Y} 协方差最大,并没有按照

X 方差的降序提取潜变量^[27]. 为了克服缺点 1), 人们采用数据预处理方法将正交成分去除, 目的是建立更加精确的 PLS 回归模型. 人们相继提出了 6 种正交信号修正算法, 下面介绍这 6 种正交信号修正算法的主要思想、相互关系及其故障检测技术.

1) 正交信号修正 (OSC) 算法最早由 Wold 等^[28] 提出, 后面称为 SWosc 算法. SWosc 算法的目的是去除 X 中与 Y 正交的最大变化. 首先对 X 做 PCA 主元分析, 将第 1 主成分作为起始正交得分向量 t_{\perp} ; 做 t_{\perp} 到 Y 的正交投影, 得到与 Y 正交的得分 t_{new} ; 构建 X 关于 t_{new} 的 PLS 迭代模型, 迭代求得 3 个参数 W 、 P 、 q ; 由 3 个参数求得正交得分向量 w_{\perp} , 并迭代至 t_{\perp} 收敛, 求得对应的负载向量 p_{\perp} ; 通过 p_{\perp} 求得正交分量 X_{\perp} ; 最后得到修正后的自变量数据 X_{OSC} , 其中 $X_{OSC} = X - X_{\perp}$. 将 X_{OSC} 代回 X 即可进行下一组正交信息的去除. 后面 5 种算法均可采用同样的操作去除下一组正交信息. 为了更直观地描述算法思想, 图 3 给出了 SWosc 算法流程.

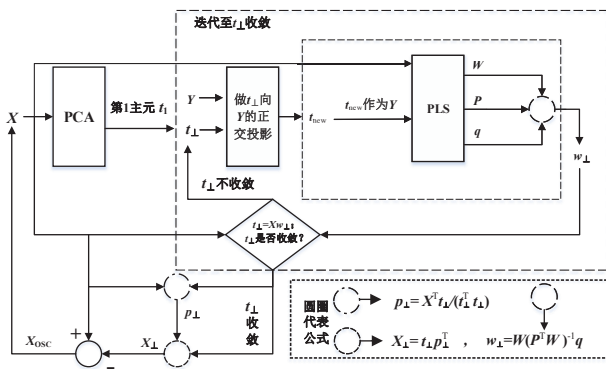


图 3 SWosc 算法流程

2) Sjöblom 等^[29] 修改了 SWosc 算法并应用于校准转移, 后面称为 JSosc 算法. JSosc 算法与 SWosc 算法大致相同, 只是先迭代求得收敛的 t_{new} , 然后构建 X 关于 t_{new} 的 PLS 迭代模型, 迭代求解参数 W 、 P 、 q , 并求得 w_{\perp} 、 t_{\perp} 、 p_{\perp} 、 X_{\perp} 和 X_{OSC} . 为了对比 SWosc 与 JSosc 的异同, 图 4 给出了 JSosc 算法流程.

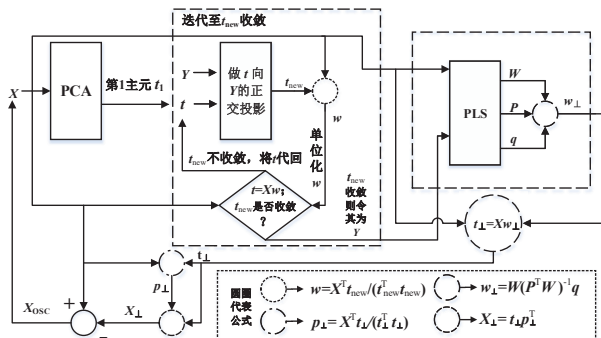


图 4 JSosc 算法流程

正交信号类算法的关键是要找到 w_{\perp} , 后面 4 种算法以不同的角度求得 w_{\perp} , 之后过程参照 JSosc 算法流程图.

3) Andersson^[30] 提出了直接正交化 (DO) 算法. 该算法确保了自变量中与因变量完全相关的信息不被删除, 但降低了模型的预测能力. DO 算法没有迭代过程, 由 X 向 Y 做正交投影, 得到正交阵 $Z = X - Y(Y^T Y)^{-1} Y^T X$, 然后对 Z 进行 PCA 主元分析, 得到最大特征值对应的特征向量作为 w_{\perp} .

4) Fearn^[31] 提出了一种新的 OSC 算法, 后面称为 TFosc 算法. TFosc 算法的思想不同于 SWosc 和 Sjosc, 也没有迭代过程. 为解决矩阵 $M X^T X$ 的特征值问题给出 $M = I - X^T Y (T^T X X^T Y)^{-1} Y^T X$, 并构建了正交阵 $Z = X M$. TFosc 与 DO 相同, w_{\perp} 就是 Z 主元分析后最大特征值对应的特征向量.

随后, Trygg 等^[32] 提出了基于 NIPALS 的正交信号 PLS (O-PLS) 算法, 还提出了主成分分析 (PCA) 去除正交信息的 O-PLS 扩展算法.

5) 偏最小二乘正交投影 (OPLS) 算法是直接对 X 和 Y 进行一轮 PLS 迭代, 得到参数 w 、 p , 并求得 $w_{\perp} = p - (w^T p / (w^T w)) w$.

6) 主成分分析偏最小二乘正交投影 OPLS (PCA) 算法是先进行一次 OPLS 算法, 得到 X_{\perp} 和 X_{OSC} ; 然后对 X_{\perp} 进行主成分分析后, 将 X_{\perp} 的残差部分重新加入 X_{OSC} 中, 相当于将自变量数据矩阵 X 仅移除 X_{\perp} 的主成分部分.

基于标准 PLS 模型, 6 种 OSC 预处理方法都可以构建 OSC-PLS 模型

$$\begin{cases} X_{osc} = T P^T + \tilde{X}_{osc}, \\ Y = T Q^T + \tilde{Y}. \end{cases} \quad (6)$$

OSC-PLS 模型应用于故障检测, 统计量 T^2 和 SPE 的公式以及控制限参数与标准 PLS 模型一样.

1.3 多空间类

虽然正交信号修正 (OSC) 预处理能够有效克服缺点 1), 但是 OSC-PLS 模型的残差空间 \tilde{X}_{osc} 内部依然有较大的变异, 过程监控时采用 Q 统计量监控 \tilde{X}_{osc} 并不合适^[33]. 为克服 PLS 的缺点 2), Zhou 等^[33] 专门为过程监控提出了全潜结构投影 (T-PLS) 模型. T-PLS 监控模型的主要思想是将不同类的信息映射到不同的潜在子空间, 对潜在子空间进行全方位的监控. 该思想引领了多空间类算法的发展.

1.3.1 全潜结构投影 (T-PLS) 模型

T-PLS 算法将 \hat{X} 分解为与 Y 相关的子空间 X_y 和与 Y 正交的子空间 X_o , 将 \hat{X} 分解为含有较大变异

的子空间 \mathbf{X}_r 和最终残差空间 \mathbf{E}_r , 模型如下:

$$\begin{cases} \mathbf{X} = \mathbf{X}_y + \mathbf{X}_o + \mathbf{X}_r + \mathbf{E}_r = \\ \quad \mathbf{T}_y \mathbf{P}_y^T + \mathbf{T}_o \mathbf{P}_o^T + \mathbf{T}_r \mathbf{P}_r^T + \mathbf{E}_r, \\ \mathbf{Y} = \mathbf{T}_y \mathbf{Q}_y^T + \tilde{\mathbf{Y}}. \end{cases} \quad (7)$$

其中: \mathbf{T}_y 、 \mathbf{T}_o 和 \mathbf{T}_r 为对应部分的得分矩阵, \mathbf{P}_y 、 \mathbf{P}_o 和 \mathbf{P}_r 为对应部分的负载矩阵. \mathbf{X}_y 、 \mathbf{X}_o 和 \mathbf{X}_r 衡量过程主要变化, 因此适用于 T^2 统计量监控; \mathbf{E}_r 为残差部分, 因此适用于 Q 统计量监控. 为了提高 T-PLS 模型过程监控能力, Li 等^[34] 研究 T-PLS 模型的故障可检测性问题, 提出了质量相关故障检测方法的联合监测指标. 为了有效地提高 T-PLS 质量变量对过程变量的解释能力及实时监测的性能, Zhao 等^[35] 提出了 T-PLS 模型的多空间分解形式, 并将具有不同来源特征的多组过程变量中与质量相关的子空间和与质量无关的子空间进一步分解. T-PLS 模型应用于故障检测, 统计量 T_y^2 、 T_o^2 、 T_r^2 和 SPE 的公式以及控制限参数参见文献 [33].

1.3.2 并发潜结构投影(C-PLS)模型

T-PLS 在故障检测中存在两个不足: 1) 模型仅监控可预测部分 $\hat{\mathbf{Y}}$, 这使得不可预测的质量变化不受 T-PLS 的监控; 2) 输入数据空间 \mathbf{X} 不必要地分成 4 个子空间, 它可以简洁地分为预测相关子空间和预测无关子空间.

基于上述问题, Qin 等^[36] 基于标准 PLS 提出了并发潜结构投影模型(C-PLS). 已知 \mathbf{Y} 的可预测部分为 $\hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{TQ}^T = \mathbf{XRQ}^T$, 其中 \mathbf{T} 包含了与 \mathbf{Y} 相关和正交的得分, 因此有必要对 $\hat{\mathbf{Y}}$ 进行 SVD 分解, 即

$$\hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{U}_c \mathbf{D}_c \mathbf{V}_c^T \equiv \mathbf{U}_c \mathbf{Q}_c^T, \quad (8)$$

则不可预测部分为 $\tilde{\mathbf{Y}}_c = \mathbf{Y} - \hat{\mathbf{Y}}$. 将 \mathbf{Y} 分成可预测部分 $\hat{\mathbf{Y}}$ 和不可预测部分 $\tilde{\mathbf{Y}}_c$, 对 $\tilde{\mathbf{Y}}_c$ 进行主元分析, 将较大变异提取出来进行监控, 即 $\tilde{\mathbf{Y}}_c = \mathbf{T}_y \mathbf{P}_y^T + \tilde{\mathbf{Y}}$. 将 $\hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{XRQ}^T$ 代入式(8)得到 $\mathbf{U}_c = \mathbf{XRQ}^T \mathbf{V}_c \mathbf{D}_c^{-1} = \mathbf{XR}_c$, 其中 \mathbf{R}_c 为 \mathbf{X} 关于 \mathbf{U}_c 的权重矩阵. 将 \mathbf{X} 向 $\text{span}\{\mathbf{R}_c\}$ 和 $\text{span}\{\mathbf{R}_c\}^\perp$ 上投影, 即将 \mathbf{X} 正交分解为与 $\hat{\mathbf{Y}}$ 相关和与 $\hat{\mathbf{Y}}$ 无关的 \mathbf{X}_c 、 $\tilde{\mathbf{X}}_c$ 两部分, 两个正交投影算子为 $\Pi_{\mathbf{R}_c} = \mathbf{R}_c(\mathbf{R}_c^T \mathbf{R}_c)^\dagger \mathbf{R}_c^T$ 和 $\Pi_{\mathbf{R}_c}^\perp = \mathbf{I} - \mathbf{R}_c(\mathbf{R}_c^T \mathbf{R}_c)^\dagger \mathbf{R}_c^T$.

同理, 对 $\tilde{\mathbf{X}}_c$ 做主元分析, 即 $\tilde{\mathbf{X}}_c = \mathbf{T}_x \mathbf{P}_x^T + \tilde{\mathbf{X}}$, 构造出 C-PLS 模型

$$\begin{cases} \mathbf{X} = \mathbf{U}_c \mathbf{R}_c^\dagger + \mathbf{T}_x \mathbf{P}_x^T + \tilde{\mathbf{X}}, \\ \mathbf{Y} = \mathbf{U}_c \mathbf{Q}_c^T + \mathbf{T}_y \mathbf{P}_y^T + \tilde{\mathbf{Y}}. \end{cases} \quad (9)$$

其中: \mathbf{U}_c 代表 \mathbf{X} 中与 $\hat{\mathbf{Y}}$ 相关部分的得分, \mathbf{T}_x 代表 \mathbf{X}

中与 $\hat{\mathbf{Y}}$ 不相关部分的主元得分, $\tilde{\mathbf{X}}$ 为输入残差, \mathbf{T}_y 代表 \mathbf{Y} 中不可预测部分的主元得分, $\tilde{\mathbf{Y}}$ 为输出残差. \mathbf{R}_c^\dagger 、 \mathbf{Q}_c 、 \mathbf{P}_x 、 \mathbf{P}_y 为对应部分的负载矩阵, $\mathbf{R}_c^\dagger = (\mathbf{R}_c^T \mathbf{R}_c)^{-1} \mathbf{R}_c^T$.

C-PLS 模型应用于故障检测, \mathbf{X} 中预测相关统计量 T_c^2 、预测无关统计量 T_x^2 和 Q_x 以及 \mathbf{Y} 中不可预测统计量 T_y^2 以及对应控制限参数参见文献 [36].

1.3.3 改进潜结构投影(M-PLS)模型

Li 等^[21] 给出了 PLS 算法对 \mathbf{X} 斜交分解的几何解释, 斜交分解使 $\hat{\mathbf{X}}$ 中含有预测无用的变化, 会妨碍过程监控整体效率^[33]. 为消除输入中对预测无用的变化, Yin 等^[37] 提出了改进潜结构投影(M-PLS)模型, 对 \mathbf{X} 采取了正交分解, 并且采用 SVD 分解避免了大量的迭代过程, 成功地应用于 TE 工业过程. 算法首先给出了期望 \mathbf{Y} 的分解如下:

$$\mathbf{Y} = \mathbf{X} \mathbf{M} + \mathbf{E}_y = \hat{\mathbf{Y}} + \mathbf{E}_y. \quad (10)$$

期望 $\hat{\mathbf{Y}}$ 与 \mathbf{X} 相关, 而 \mathbf{E}_y 部分与 \mathbf{X} 不相关, 即 $\text{cov}(\mathbf{e}_y, \mathbf{x}^T)$ 为零. 基于此, 可由式(10)得到如下公式:

$$\frac{1}{N} \mathbf{Y}^T \mathbf{X} = \frac{1}{N} \mathbf{M}^T \mathbf{X}^T \mathbf{X} + \frac{1}{N} \mathbf{E}_y^T \mathbf{X} \approx \mathbf{M}^T \frac{\mathbf{X}^T \mathbf{X}}{N}, \quad (11)$$

故 \mathbf{X} 与 \mathbf{Y} 之间的相关矩阵为 $\mathbf{M} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{Y}$, 也就是总体参数的最小二乘估计量^[15]. 考虑到 $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ 非满秩的情况, 令 $\mathbf{M} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^\dagger \mathbf{X}^T \mathbf{Y}$. 以上操作将 \mathbf{Y} 分为与 \mathbf{X} 相关的部分 $\hat{\mathbf{Y}}$ 和不相关的部分 \mathbf{E}_y . 然后将 \mathbf{X} 向 $\text{span}\{\mathbf{M}\}$ 和 $\text{span}\{\mathbf{M}\}^\perp$ 上投影, 即将 \mathbf{X} 正交分解为完全负责预测 \mathbf{Y} 的子空间 $\hat{\mathbf{X}}$ 和与 \mathbf{Y} 无关的子空间 $\tilde{\mathbf{X}}$, 其中正交投影算子由 $\mathbf{M} \mathbf{M}^T$ 的 SVD 分解求得. 该操作避免了复杂的迭代过程, 大大减少了计算量. 至此, 得到改进的潜结构投影模型(M-PLS)为

$$\begin{cases} \mathbf{X} = \hat{\mathbf{X}} + \tilde{\mathbf{X}}, \\ \mathbf{Y} = \mathbf{X} \mathbf{M} + \mathbf{E}_y. \end{cases} \quad (12)$$

M-PLS 模型应用于故障检测, $\hat{\mathbf{X}}$ 监控统计量 T_x^2 、 $\tilde{\mathbf{X}}$ 监控统计量 T_x^2 和 \mathbf{E}_y 监控统计量 SPE_y 或者 T_{comb}^2 以及对应的控制限参数参见文献 [34].

1.3.4 高效潜结构投影(E-PLS)模型

Peng 等^[38] 分析了 M-PLS 算法, 指出相关信息系数矩阵 $\mathbf{M} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^\dagger \mathbf{X}^T \mathbf{Y}$ 中含有 $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$ 的广义逆, 这可能导致 \mathbf{X} 中与 \mathbf{Y} 相关的信息丢失. $\tilde{\mathbf{X}}$ 内可能还有与 \mathbf{Y} 相关的部分, 因此有必要借鉴 C-PLS 中的做法, 通过 PCA 进一步分解 $\tilde{\mathbf{X}}$, 即 $\tilde{\mathbf{X}} = \mathbf{T}_x \mathbf{P}_x^T + \tilde{\mathbf{X}}_r$. 从

而得到改进潜结构投影模型(E-PLS)为

$$\begin{cases} \mathbf{X} = \hat{\mathbf{X}} + \mathbf{T}_x \mathbf{P}_x^T + \tilde{\mathbf{X}}_r, \\ \mathbf{Y} = \mathbf{X} \mathbf{M} + \mathbf{E}_y. \end{cases} \quad (13)$$

E-PLS模型应用于故障检测, $\hat{\mathbf{X}}$ 监控统计量 T_x^2 、 $\mathbf{T}_x \mathbf{P}_x^T$ 监控统计量 T_x^2 和 $\tilde{\mathbf{X}}_r$ 监控统计量 Q_x 以及对应的控制限参数参见文献[36-38].

1.4 分块类

在处理工业过程数据时经常遇到两种极端的情况: 1) 过程数据变量数目极大; 2) 过程数据样本数极大. 在这两种情况下, 采用以上两类算法都不合适. 因为上述两类算法都是由标准 PLS 改进而来的, 标准 PLS 是批处理算法, 处理这些数据时不但对潜变量解释困难, 而且模型更新困难、效率低下, 无法满足工业过程监控的需求. 为此, 人们采用分块的思想, 将过程数据按照变量或者样本数进行分块, 得到子块后利用子块内的关系和子块间的关系建立监控模型. 其中: Wold^[39] 和 Wold 等^[40] 提出了按变量分块的多块投影方法(MB-PLS); Helland 等^[41] 提出了按样本数或批次分块逐块更新模型的递推偏最小二乘(RPLS). MB-PLS 能够对不同子块以及整体建立监控模型, 提高故障诊断效率; RPLS 能够不增加数据矩阵大小, 利用新数据和原模型参数更新模型, 提高模型更新能力. 下面介绍这两种分块算法的改进历程及其故障检测技术.

1.4.1 多块偏最小二乘(MB-PLS)模型

Wold 提出的 MB-PLS 算法无法实现任意分块, 基于此, Wangen 等^[42] 提出了任意分块的多块偏最小二乘(MB-PLS)模型. 首先由先验知识将 \mathbf{X} 分为 B 个子块, 即 $\mathbf{X}(b) (b = 1, 2, \dots, B)$, 分别进行 PLS 迭代, 得到子块得分 $\mathbf{t}(b) (b = 1, 2, \dots, B)$, 子块得分 $\mathbf{t}(b)$ 可组合为复合矩阵 \mathbf{T}_c ; 然后进行 \mathbf{T}_c 关于 \mathbf{Y} 的 PLS 迭代, 得到超级得分向量 \mathbf{t}_S 和 \mathbf{q} 等参数; 最后用 $\mathbf{t}(b)$ 和 \mathbf{t}_S 分别更新 $\mathbf{X}(b)$ 和 \mathbf{Y} , 得到 MB-PLS 模型为

$$\begin{cases} \mathbf{X}(b) = \sum_{i=1}^A \mathbf{t}(b)_i \mathbf{p}_i^T + \mathbf{E}(b) = \\ \quad \mathbf{T}(b) \mathbf{P}^T + \mathbf{E}(b), \\ \mathbf{Y} = \sum_{i=1}^A \mathbf{t}_S_i \mathbf{q}_i^T + \mathbf{F} = \mathbf{T}_S \mathbf{Q}^T + \mathbf{F}. \end{cases} \quad (14)$$

其中: $\mathbf{T}(b)$ 为块得分矩阵, $\mathbf{P}(b)$ 为对应块负载矩阵, $\mathbf{E}(b)$ 为子块残差, \mathbf{F} 为 \mathbf{Y} 的残差, $\mathbf{T}_S = [\mathbf{t}_{S1}, \dots, \mathbf{t}_{SA}]$ 为超级得分矩阵. 模型通过 $\mathbf{t}(b)$ 更新 $\mathbf{X}(b)$, 使 $\mathbf{t}(b)$ 之间正交, \mathbf{t}_S 之间相关.

1.4.2 基于超级得分更新的MB-PLS模型

Westerhuis 等^[43-44] 指出, 由 Wangen 等^[42] 提出的块得分更新子块 $\mathbf{X}(b)$ 会去掉对其他子块预测 \mathbf{Y} 有用的信息, 因此该模型预测能力较差, 他们提出用超级得分 \mathbf{t}_S 更新 $\mathbf{X}(b)$ 的算法, 构建出如下模型:

$$\begin{cases} \mathbf{X}(b) = \sum_{i=1}^A \mathbf{t}_S_i \mathbf{p}_S^T(b) + \mathbf{E}(b) = \\ \quad \mathbf{T}_S \mathbf{P}_S^T(b) + \mathbf{E}(b), \\ \mathbf{Y} = \sum_{i=1}^A \mathbf{t}_S_i \mathbf{q}_i^T + \mathbf{F} = \mathbf{T}_S \mathbf{Q}^T + \mathbf{F}. \end{cases} \quad (15)$$

其中: \mathbf{T}_S 为超级得分矩阵; $\mathbf{P}_S(b)$ 为子块的超级得分负载矩阵; 模型利用 \mathbf{t}_S 更新 $\mathbf{X}(b)$, 使 \mathbf{t}_S 之间正交, $\mathbf{t}(b)$ 之间相关, 具有与常规 PLS 等效的建模能力^[43]. 由于 \mathbf{t}_S 是 $\mathbf{t}(b)$ 的线性组合, 子块 $\mathbf{X}(b)$ 用 \mathbf{t}_S 更新会导致块与块间信息互融, 造成 $\mathbf{t}(b)$ 难以解释; 而 Dayal 等^[19] 指出, 标准 PLS 算法只能更新 \mathbf{Y} 而不更新 \mathbf{X} . Westerhuis 等^[45] 引入该思想, 避免了信息互融.

MBPLS 模型具有较好的潜变量解释能力, 能够有效降低故障诊断的复杂性. 为了加强 MBPLS 的监控能力, MacGregor 等^[46] 提出了子块的监控指标以及整体的监控指标; Qin 等^[47] 提出了故障检测的 4 种统计量, 即总体的 T_S^2 和 Q_S , 分块的 T_b^2 和 Q_b ; 之后, Choi 等^[48] 对这些统计量进一步分析和整理, 并应用于污水处理(WWTP)过程监测中. MBPLS 模型应用于故障检测, 统计量公式及其对应控制限参数可参见文献[46-48].

1.4.3 分块递推偏最小二乘(RPLS)模型

当样本数或批次较多, 需要克服时变扰动并实时更新模型时, 通常采用分块递推偏最小二乘(BRPLS)算法. BRPLS 由 Qin^[49] 在 RPLS 算法基础上改进而来, 算法利用历史模型参数与新数据模型参数获取新的模型, 避免重复使用历史数据, 因此, 该算法对多操作、时变工业过程有着较强的模型更新和追踪能力, 同时 Qin 将自适应滑动窗口和自适应遗忘因子技术引入 BRPLS 算法; 后来, Chang 等^[50] 通过统计量自适应确定遗忘因子, 提出了改进的 BRPLS, 应用于管坯斜轧穿孔能耗过程, 表现出较强的模型在线更新能力. 另外, Qin 还在文献[49]中通过 ARX 和 FIR 模型将 RPLS 算法扩展到非线性建模和动态建模应用中.

2 非线性偏最小二乘模型

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都存在非线性关系, 线性 PLS 模型在实际过程监控应用中往往无法得到满意的效果. 为了处理这类非线性问题, 人们提出了许多

非线性PLS扩展模型. 根据目前研究成果, 非线性扩展方法可以分为以下两类: 1) 改进PLS内、外部模型, 得到非线性PLS模型; 2) 将数据间的非线性关系线性化, 再通过线性PLS建模.

2.1 内外模型改进的非线性PLS模型

由Wold等^[18]提出的非线性迭代算法(NIPALS)方法就是改进内部模型的算法之一, NIPALS使用多项式非线性映射描述了潜变量之间的非线性关系. 后来, Frank^[51-52]提出了用潜变量作为平滑器的输入和基于样条插值的非线性PLS回归模型. 由于神经网络(NN)具有较好的非线性拟合能力, Qin等^[53]通过NN构建PLS的内部模型, 得到了神经网络偏最小二乘(Neural network partial least squares, NNPLS)模型. 而Malthouse等^[54]通过前馈神经网络构建了非参数的非线性偏最小二乘(Nonlinear partial least squares, NLPLS)模型, 通过实验显示出比传统投影回归方法更好的预测性能. 然而, 以上改进内外模型非线性算法的复杂度远高于线性PLS, 扩展到现有线性PLS模型上的难度较大.

2.2 核偏最小二乘(K-PLS)模型

针对模型复杂度过高和扩展难度大的问题, Rosipal等^[55]基于核函数理论^[56-57]和Cover定理^[58], 提出了非线性核偏最小二乘(K-PLS), 通过核函数将原始变量由低维空间映射到再生核希尔伯特空间(RKHS), 即高维特征空间, 使非线性数据在高维特征空间中呈线性关系, 然后在RKHS中巧妙利用核函数 K 建立线性PLS模型. 该模型具有等同于线性PLS的复杂度, 因此, 基于核函数的非线性PLS成为非线性工业过程监控领域的主流方法. 标准PLS可通过非线性映射函数 Φ 映射为如下模型:

$$\begin{cases} \Phi(X) = \hat{\Phi}(X) + \Phi_r(X) = \\ \quad P^T + \Phi_r(X), \\ Y = \hat{Y} + Y_r = TQ^T + Y_r. \end{cases} \quad (16)$$

其中 Φ 无需求得, 可由核函数 K 替代 Φ 在RKHS中的点积运算, 即通过 $K = \Phi(X)\Phi^T(X)$ 来求解故障检测所需要的参数, 如 T 、 U 、 Q 以及 R . K-PLS模型的统计量 T^2 和SPE及其对应的控制限参数参见文献^[59].

2.3 核偏最小二乘KPLS算法的扩展历程

KPLS算法提出后, 受到了一大批学者的重视. 在数据预处理方面, Kim等^[60]将正交信号(OSC)引入KPLS, 得到OSC-KPLS模型. OSC-KPLS具有较低的模型复杂度和估计误差以及较好的因变量预测能力. 近来, Gao等^[61]将随机梯度回归(Stochastic

gradient boosting, SGB)以及核纯净信号分析(Kernel net analyte preprocessing, KNAP)引入KPLS, 得到了改进的核偏最小二乘(MKPLS)模型. MKPLS模型能够有效去除建模无关信息, 并且避免过拟合问题, 比KPLS预测精度更高.

在多空间方面, Peng等^[62]将KPLS算法扩展到全潜空间, 提出了全核PLS(T-KPLS)方法, 并应用于带钢热连轧生产过程(HSPM)质量相关的故障诊断中. 之后, Peng等^[63]针对T-KPLS模型的非线性情况, 给出了扩展到非线性的贡献图方法. 为了捕获非高斯潜在子空间和剩余子空间内批处理数据的异常, Mori等^[64]提出了非线性批处理的多向核PLS(MKPLS)方法, 并开发新的监测指标, 应用于非线性的青霉素发酵生产过程的故障检测中. Sun等^[65]提出了并发核潜结构(C-KPLS)算法, 应用于汽车电池故障检测. 为了解决剩余子空间包含输出变量相关变化的问题, Zhang等^[66]提出了定向的核偏最小二乘(DKPLS)模型. DKPLS在输入与输出变量之间建立了更直接的关系, 并成功地用于监测蒙特卡洛仿真和电熔镁炉(EFMF)过程监控. 为了加强C-KPLS的监控能力, Sheng等^[67]提出了基于C-KPLS的综合监控方法, 给出了较为全面的过程监控指标, 并应用于TE工业过程, 取得了良好的效果.

在分块方面, Zhang等^[68]提出了基于多模块的KPLS(MBKPLS)方法, 并将其应用于大规模生产过程的分散式故障诊断. MBKPLS能够有效捕捉过程中的复杂关系, 极大提高了诊断能力.

为了提高KPLS模型的应用范围, Zhang等^[69]将KPLS与ICA结合起来, 将KPLS引入非高斯领域. Wang等^[70]将多尺度核引入KPLS得到多尺度核偏最小二乘(Multi-scale KPLS)模型, 很好地解决了概率积分法参数辨识问题. 之后, Liu等^[71]将滑动窗口引入Multi-scale KPLS模型, 提高了模型的自适应能力. 而Shi等^[72]将KPLS与FDA结合起来得到KPLS-FDA模型, 该模型在正常工况下可预测产品质量, 在异常工况下可根据Fisher相似度系数确定故障类型.

3 动态偏最小二乘模型

现实中复杂工业过程是一个动态过程, 工业过程数据内部存在动态关系, 在处理这些过程数据时, 线性PLS算法难以发挥有效的作用. 为了有效地解决动态难题, 人们提出了两种PLS动态扩展方法: 1) 数据预处理方法, 即输入中大量引入相关变量的历史数据, 通过数据扩充思想将时间动态建模问题转化为空间静态建模问题, 然后用已有的线性PLS算法建

模;2) 建立动态内、外部模型的方法,对PLS算法进行动态扩展.

3.1 动态特性的成因

一般的工业过程都是动态过程,其稳态过程只是暂时的、相对的,因为工业生产过程总是存在各种各样的波动、干扰以及操作条件的改变等.常见的动态变化原因表现为以下几点^[73]:

1) 原料批次的变化,生产过程的复合操作,设备的定期切换等;

2) 过程的不稳定性,如相同批次原料性质的差异和波动,冷却水温度波动,催化剂活性的变化,设备管路的结垢等;

3) 设备故障,人为的误操作等;

4) 生产装置的开停车操作.

由于以上复杂的操作和过程的不稳定性,工业过程是动态变化的,数据存在动态特性是必然的.

假设 $\mathbf{y}(k)$ 为 k 时刻的主导输出变量, $\mathbf{x}(k)$, $\mathbf{x}(k-1)$, \dots , $\mathbf{x}(k-n)$ 为过渡过程各时刻的输入变量.数据动态特性表现为:主导输出变量 $\mathbf{y}(k)$ 不仅与 k 时刻的输入变量 $\mathbf{x}(k)$ 相关,还与历史时刻的输入变量 $\mathbf{x}(k-1)$, \dots , $\mathbf{x}(k-n)$ 相关,甚至还与历史时刻的输出变量 $\mathbf{y}(k-1)$, \dots , $\mathbf{y}(k-n)$ 相关,而且动态特性还会通过变量之间的增量反映出来^[74].

3.2 数据矩阵扩充的方法

由上述分析可知,动态关系可通过历史数据与当前数据之间的相关性表现出来,因此,构建动态模型可以采用数据矩阵扩充的思想,同时使用历史数据与当前数据构建模型.该模型在每个时刻都能够反映出历史数据与当前数据之间的相关性,即动态特性.

根据目前的研究来看,常用的数据矩阵扩充方法一般有两种:1) 将大量的历史输入数据加入输入数据矩阵中,即采用有限冲击响应(Finite impulse response, FIR)模型的矩阵格式^[75],后面称为FIR数据矩阵. Ricker^[76]采用这种方法,基于有限冲击响应FIR动态经验模型,提出了FIR-PLS动态模型. FIR-PLS利用偏最小二乘代替最小二乘对FIR模型系数矩阵 C 进行参数辨识,避免了建模时出现病态矩阵,并与SVD参数辨识法相比显示出较好的效果. 2) 将大量的历史输入以及历史输出数据加入输入数据矩阵中,即采用外生变量自回归(Autoregressive exogenous, ARX)模型的矩阵格式^[77-78],后面称为ARX数据矩阵. Qin等^[79]利用该方法,通过ARX数据矩阵将NNPLS引入动态,得到动态神经网络偏最小二乘(D-NNPLS)模型,并应用于催化重整系统.之

后, Qin等^[80]又将非线性外生变量自回归(Nonlinear autoregressive exogenous, NARX)模型以及非线性有限冲击响应(Nonlinear finite impulse response, NFIR)模型引入NNPLS,将其扩展为非线性动态算法. 基于以上研究, Baffi等^[81]提出在FIR或ARX模型结构中基于线性、二次和神经网络的非线性动态PLS算法,并应用于pH中和系统,对提出的算法进行了对比.

上述采用数据矩阵扩充思想构建动态模型的方法有着扩展难度小的优势,已被广泛应用于工业过程监控领域. 基于DPLS模型, Chen等^[82]提出了批次动态偏最小二乘BDPLS模型,并将其应用到DuPont间歇工业过程. Lee等^[83-84]提出了基于系统分解的DPLS故障诊断方法,并应用到TE工业过程中. 为了使T-KPLS准确处理动态过程, Liu等^[85]也使用FIR数据矩阵,提出了动态全核偏最小二乘(DT-KPLS)模型,并将其应用于非线性动态系统的质量相关的过程监控. 而Liu等^[86]分别构建了历史输入扩展矩阵和历史输出扩展矩阵,应用于CPLS模型,得到了动态并发潜结构投影(DCPLS)模型. 但是两个扩展矩阵的引入导致变量过多,造成故障难以定位. 因此, Liu等^[86]又将DCPLS扩展到多块DCPLS,通过连续退火工艺过程验证了算法的有效性. Tong等^[87]提出了基于自回归(Autoregressive, AR)模型的OPLS动态方法,并建立了基于贝叶斯推理的概率监控指标,应用于TE工业过程. Jiao等^[88]基于自回归移动平均(Autoregressive moving average exogenous, ARMAX)模型矩阵格式将M-PLS拓展到动态,得到了DM-PLS模型,并应用于TE工业过程.

3.3 内、外部模型改进的方法

扩充矩阵的动态模型没有给出动态关系的明确表示,并且算法计算量的大小随着历史数据数量的增加而增加. 基于以上问题, Kaspar等^[89]在不扩充输入矩阵的情况下,用动态滤波器对该动态数据进行处理,使得输入中的动态部分被去除;在过滤后的输入与输出之间建立静态外部模型;而在内部模型中,通过控制系统设计出输入潜变量与输出潜变量之间的内部动态模型;最终构建出外静、内动的D-PLS模型. 基于Kaspar等人的研究, Lakshminarayanan等^[90]通过ARX模型或Hammerstein模型对输入输出潜变量之间的动态关系进行描述,提出了改进内部模型的动态ARX-PLS算法. Wang等^[91]将DPLS的动态潜变量通过模糊聚类算法进行分类,并按照分类建立多个子模型以拟合系统的非线性,提高了DPLS的预测精度和泛化能力.

上述算法尽管给出了内部动态关系的明确表示,但还存在内部模型与外部模型动、静不统一的缺点。鉴于此, Li等^[92]提出了新的目标函数并得到动态外部模型,通过历史输入潜变量加权与输出潜变量构建出动态内部模型,最终给出了内外模型一致的D-PLS模型。在过程监控中, D-PLS存在与PLS模型相同的缺点,因此将其扩展为D-TPLS模型,通过TE过程验证了算法的有效性。Dong等^[93]指出, Li等^[92]构建的内部模型存在难以解释的缺陷,因此,采用ARX模型对输入输出潜变量之间的动态关系进行描述,得到一个明确的内部动态模型,并给出了内外模型统一的动态偏最小二乘(Di-PLS)模型。

最近, Dong等^[94]将RPLS思想引入T-PLS,提出了自适应递推T-PLS(RTPLS)模型。RTPLS具有较强的模型更新能力,能够充分利用全潜空间监视时变和非平稳过程。考虑到过程数据的非高斯情况, Zhang等^[95]将D-PLS与ICA结合起来,提出了DPLS-ICA模型,并给出了新模型的故障检测方法,将其应用于TE工业过程,取得了很好的效果。

4 研究展望

本文以故障检测技术为主要应用背景,专门针对线性PLS模型及其非线性动态扩展模型进行了全面的综述。尽管学者们在线性、非线性和动态方面提出了大量的建模方法以及过程监控技术,但仍不完善,还有如下问题需要进一步研究和讨论:

1) 主元个数确定问题。PLS建模方法研究比较广泛,出现了许多新的模型和方法,但其主元个数确定通常使用交叉验证。在面对不断发展的复杂工业过程时,交叉验证算法过于复杂,因此,最优主元个数更简单的确定方法将是一个急需研究的问题。

2) 非线性参数确定问题。基于核函数的非线性算法,其核函数的选择以及最优参数的选择通常依靠经验和重复实验来决定,重复性实验消耗了大量的时间和资源。核函数及其参数自适应快速的选择算法将是一个有意义的研究方向。

3) 故障检测问题。大多数算法应用于故障检测时只能针对某一特定的工况或者特定的一个研究对象,并且故障检测阈值的选择通常是“硬阈值”,没有考虑实际报警数据与阈值大小的相对程度,也没有考虑实际中的各种干扰。此外,仅通过数据建模,缺少监控对象的模型和内部机理,使得一些可利用的经验无法纳入模型中,限制了算法的应用范围。

4) 非线性PLS模型发展方向。基于传统神经网络的非线性算法结构复杂、参数较多,而且存在过

拟合问题。近来兴起的深度学习中卷积神经网络(Convolutional neural networks, CNN)能够有效解决这个问题, CNN与PLS的结合可成为非线性算法发展的一个新方向。

5) 动态PLS模型发展方向。大多数动态PLS算法以数据预处理为主,使用历史数据扩充矩阵能够有效解决动态性问题,但是大大增加了计算量以及故障诊断难度。如何确定最少增加历史数据量并具有良好的动态处理能力是一个具有价值的研究方向。变量之间的增量反映出了动态特性,而实测数据包含了动态和静态数据。Kaspar等^[89]利用动态滤波方法将动态信息滤除,然后通过静态信息建模,这样做可能丢失一些重要的动态信息,因此,将动态和静态数据分开,分别建立动态、静态模型将是另一个值得研究的方向。最近, Li等^[92]提出了内外模型统一的动态算法,对该算法的扩展将是一个新颖的研究方向,并且该算法的故障检测和诊断方法目前尚不完善,仍需深入研究并在实际工业过程中进行实践应用。

6) PLS算法的应用研究方向。非高斯、多模态、间歇、多批次、分频等都是工业过程的典型特性,在这些工业特性中,基本都同时具有非线性以及动态特性,因此,可以将现有的非线性、动态及其结合算法改进后应用于具有不同的工业特性中。如Zhang等^[69]将PLS、K-PLS与ICA结合起来,成功地把线性和非线性PLS算法应用到非高斯领域;而Zhang等^[95]将D-PLS与ICA结合起来,成功地把动态算法应用到非高斯领域。针对多模态、间歇、多批次、分频等特性的PLS算法尽管已有大量学者研究,但还不完善,有待于进一步的发展。

7) PLS算法融合研究方向。本文在综述算法模型的同时给出了算法的优缺点,其中RPLS具有较强的模型更新能力和克服时变扰动能力,而T-PLS可以全方位监控潜在子空间。Dong等^[94]将两种算法的思想结合起来,得到了兼有两种算法优点的RTPLS算法。因此,将具有不同优点的算法融合起来也是一个很有价值的研究方向。

5 结语

PLS已成为质量相关多元统计建模的主要方法,它由线性发展到非线性,由静态发展到动态,描述着工业过程的基本特性,并向着非线性动态方向发展。PLS模型不仅仅局限于过程监控领域,在医学、统计学、生物学、机械理论、社会学、药理学、地质学、化学等关键学科中都有广泛的应用。可见PLS模型仍具有巨大的研究价值。

参考文献(References)

- [1] Ding E L, Fennel H, Ding S X. Model-based diagnosis of sensor faults for ESP systems[J]. *Control Engineering Practice*, 2004, 12(7): 847-856.
- [2] Li H, Xiao D Y. Survey on data driven fault diagnosis methods[J]. *Control and Decision*, 2011, 26(1): 1-9.
- [3] Jolliffe I T. *Principal component analysis and factor analysis*[M]. New York : Springer, 1986.
- [4] Chiang L H, Russell E L, Braatz R D. *Fault detection and diagnosis in industrial systems*[M]. London: Springer-Verlag, 2001.
- [5] Hyvärinen A, Oja E. Independent component analysis: Algorithms and applications[J]. *Neural Networks*, 2000, 13(4): 411-430.
- [6] Chiang L H, Russell E L, Braatz R D. Fault diagnosis in chemical processes using Fisher discriminant analysis, discriminant partial least squares, and principal component analysis[J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2000, 50(2): 243-252.
- [7] Wold S, Albano C, Dun M. Pattern regression finding and using regularities in multivariate data[M]. London: Applied Science Publishers, 1983.
- [8] Yin S, Ding S X, Haghani A, et al. A comparison study of basic data-driven fault diagnosis and process monitoring methods on the benchmark Tennessee Eastman process[J]. *J of Process Control*, 2012, 22(9): 1567-1581.
- [9] Yin S, Ding S X, Xie X, et al. A review on basic data-driven approaches for industrial process monitoring[J]. *IEEE Trans on Industrial Electronics*, 2014, 61(11): 6418-6428.
- [10] Peng K X, Ma L, Zhang K. Review of quality-related fault detection and diagnosis techniques for complex industrial processes[J]. *Acta Automatica Sinica*, 2017, 43(3): 349-365.
- [11] Wang H W. *Partial least squares regression method and application*[M]. Beijing: National Defence Industry Press, 1999: 1-5.
- [12] Fornell C, Bookstein F L. Two structural equation models: LISREL and PLS applied to consumer exit-voice theory[J]. *J of Marketing Research*, 1982, 19(4): 440-452.
- [13] Bayne C K. Latent variable path modeling with partial least squares[J]. *Technometrics*, 1992, 34(1): 110-111.
- [14] Wold S. Cross-validatory estimation of the number of components in factor and principal components models[J]. *Technometrics*, 1978, 20(4): 397-405.
- [15] Wang H W, Wu Z B, Meng J. *Partial least squares regression linear and nonlinear method*[M]. Beijing: National Defence Industry Press, 2006: 72-75.
- [16] Lorber A, Wangen L E, Kowalski B R. A theoretical foundation for the PLS algorithm[J]. *J of Chemometrics*, 1987, 1(1): 19-31.
- [17] Kaspar M H, Ray W H. Partial least squares modelling as successive singular value decompositions[J]. *Computers & Chemical Engineering*, 1993, 17(10): 985-989.
- [18] Wold S, Kettaneh-Wold N, Skagerberg B. Nonlinear PLS modeling[J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 1989, 7(1/2): 53-65.
- [19] Dayal B, MacGregor J F. Improved PLS algorithms[J]. *J of Chemometrics*, 1997, 11(1): 73-85.
- [20] Geladi P, Kowalski B R. Partial least-squares regression: A tutorial[J]. *Analytica Chimica Acta*, 1985, 185(86): 1-17.
- [21] Li G, Qin S J, Zhou D. Geometric properties of partial least squares for process monitoring[J]. *Automatica*, 2010, 46(1): 204-210.
- [22] Joe Qin S. Statistical process monitoring: Basics and beyond[J]. *J of Chemometrics*, 2003, 17(8/9): 480-502.
- [23] Helland I S. On the structure of partial least squares regression[J]. *Communications in Statistics-Simulation and Computation*, 1988, 17(2): 581-607.
- [24] De Jong S. SIMPLS: An alternative approach to partial least squares regression[J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 1993, 18(3): 251-263.
- [25] Lindgren F, Geladi P, Wold S. The kernel algorithm for PLS[J]. *J of Chemometrics*, 1993, 7(1): 45-59.
- [26] Rännar S, Lindgren F, Geladi P, et al. A PLS kernel algorithm for data sets with many variables and fewer objects. Part 1: Theory and algorithm[J]. *J of Chemometrics*, 1994, 8(2): 111-125.
- [27] Zhou D H, Li G, Li Y. *Data-driven industrial process fault diagnosis technology: Based on principal component analysis and partial least squares*[M]. Beijing: Science Press, 2010: 177-178.
- [28] Wold S, Antti H, Lindgren F, et al. Orthogonal signal correction of near-infrared spectra[J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 1998, 44(1): 175-185.
- [29] Sjöblom J, Svensson O, Josefson M, et al. An evaluation of orthogonal signal correction applied to calibration transfer of near infrared spectra[J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 1998, 44(1): 229-244.
- [30] Andersson C A. Direct orthogonalization[J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 1999, 47(1): 51-63.
- [31] Fearn T. On orthogonal signal correction[J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2000, 50(1): 47-52.
- [32] Trygg J, Wold S. Orthogonal projections to latent structures (O-PLS)[J]. *J of Chemometrics*, 2002, 16(3): 119-128.
- [33] Zhou D, Li G, Qin S J. Total projection to latent structures for process monitoring[J]. *AIChE Journal*, 2010, 56(1): 168-178.
- [34] Li G, Joe Qin S, Zhou D. Output relevant fault reconstruction and fault subspace extraction in total projection to latent structures models[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2010, 49(19): 9175-9183.

- [35] Zhao C, Sun Y. The multi-space generalization of total projection to latent structures(MsT-PLS) and its application to online process monitoring[C]. The 10th Conf on Int Control and Automation. Hangzhou: IEEE, 2013: 1441-1446.
- [36] Qin S J, Zheng Y. Quality-relevant and process-relevant fault monitoring with concurrent projection to latent structures[J]. *AIChE Journal*, 2013, 59(2): 496-504.
- [37] Yin S, Ding S X, Zhang P, et al. Study on modifications of PLS approach for process monitoring[J]. *IFAC Proc Volumes*, 2011, 44(1): 12389-12394.
- [38] Peng K, Zhang K, You B, et al. Quality-relevant fault monitoring based on efficient projection to latent structures with application to hot strip mill process[J]. *IET Control Theory & Applications*, 2015, 9(7): 1135-1145.
- [39] Wold H. Soft modelling: The basic design and some extensions[J]. *Systems Under Indirect Observation*, 1982, 2: 589-591.
- [40] Wold S, Hellberg S, Lundstedt T, et al. PLS model building: Theory and application PLS modeling with latent variables in two or more dimensions[C]. *PLS Symposium, Frankfurt am Main*, 1987: 1-21.
- [41] Helland K, Berntsen H E, Borgen O S, et al. Recursive algorithm for partial least squares regression[J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 1992, 14(1/2/3): 129-137.
- [42] Wangen L E, Kowalski B R. A multiblock partial least squares algorithm for investigating complex chemical systems[J]. *J of Chemometrics*, 1989, 3(1): 3-20.
- [43] Westerhuis J A, Kourti T, MacGregor J F. Analysis of multiblock and hierarchical PCA and PLS models[J]. *J of Chemometrics*, 1998, 12(5): 301-321.
- [44] Westerhuis J A, Coenegracht P M J. Multivariate modelling of the pharmaceutical two step process of wet granulation and tableting with multiblock partial least squares[J]. *J of Chemometrics*, 1997, 11(5): 379-392.
- [45] Westerhuis J A, Smilde A K. Deflation in multiblock PLS[J]. *J of Chemometrics*, 2001, 15(5): 485-493.
- [46] MacGregor J F, Jaekle C, Kiparissides C, et al. Process monitoring and diagnosis by multiblock PLS methods[J]. *AIChE Journal*, 1994, 40(5): 826-838.
- [47] Qin S J, Valle S, Piovoso M J. On unifying multiblock analysis with application to decentralized process monitoring[J]. *J of Chemometrics*, 2001, 15(9): 715-742.
- [48] Choi S W, Lee I B. Multiblock PLS-based localized process diagnosis[J]. *J of Process Control*, 2005, 15(3): 295-306.
- [49] Qin S J. Recursive PLS algorithms for adaptive data modeling[J]. *Computers & Chemical Engineering*, 1998, 22(4/5): 503-514.
- [50] Chang Y Q, Yuan Y, Wang F L. Improved block-wise recursive partial least square modeling method and its application[J]. *Control and Decision*, 2009, 24(8): 1243-1246.
- [51] Frank I E. A nonlinear PLS model[J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 1990, 8(2): 109-119.
- [52] Frank I E. Modern nonlinear regression methods[J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 1995, 27(1): 1-19.
- [53] Qin S J, McAvoy T J. Nonlinear PLS modeling using neural networks[J]. *Computers & Chemical Engineering*, 1992, 16(4): 379-391.
- [54] Malthouse E C, Tamhane A C, Mah R S H. Nonlinear partial least squares[J]. *Computers & Chemical Engineering*, 1997, 21(8): 875-890.
- [55] Rosipal R, Trejo L J. Kernel partial least squares regression in reproducing kernel hilbert space[J]. *J of Machine Learning Research*, 2002, 2(2): 97-123.
- [56] Mercer J. Functions of positive and negative type, and their connection with the theory of integral equations[J]. *Philosophical Trans of the Royal Society of London, Series A: Containing Papers of a Mathematical or Physical Character*, 1909, 209: 415-446.
- [57] Williams C K I. Learning with kernels: Support vector machines, regularization, optimization, and beyond[J]. *IEEE Trans on Neural Networks*, 2005, 16(3): 781-781.
- [58] Cover T M. Geometrical and statistical properties of systems of linear inequalities with applications in pattern recognition[J]. *IEEE Trans on Electronic Computers*, 1965, 14(3): 326-334.
- [59] Zhang Y W, Li H Q. The fault monitoring and diagnosis based on KPLS[C]. The 21th Chinese Control and Decision Conf. Guilin: IEEE, 2009: 5299-5303.
- [60] Kim K, Lee J M, Lee I B. A novel multivariate regression approach based on kernel partial least squares with orthogonal signal correction[J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2005, 79(1): 22-30.
- [61] Gao Y, Kong X, Hu C, et al. Multivariate data modeling using modified kernel partial least squares[J]. *Chemical Engineering Research and Design*, 2015, 94: 466-474.
- [62] Peng K, Zhang K, Li G. Quality-related process monitoring based on total kernel PLS model and its industrial application[J]. *Mathematical Problems in Engineering*, 2013(4): 1-14.
- [63] Peng K, Zhang K, Li G, et al. Contribution rate plot for nonlinear quality-related fault diagnosis with application to the hot strip mill process[J]. *Control Engineering Practice*, 2013, 21(4): 360-369.
- [64] Mori J, Jie Y. Quality relevant nonlinear batch process performance monitoring using a kernel based multiway non-Gaussian latent subspace projection approach[J]. *J of Process Control*, 2014, 24(1): 57-71.
- [65] Sun R, Fan Y, Zhang Y. Fault monitoring of nonlinear process based on kernel concurrent projection to latent structures[C]. The 33rd Chinese Control Conf(CCC). Nanjing: IEEE, 2014: 5184-5189.
- [66] Zhang Y, Du W, Fan Y, et al. Process fault detection using directional kernel partial least squares[J]. *Industrial*

- & Engineering Chemistry Research, 2015, 54(9): 2509-2518.
- [67] Sheng N, Liu Q, Qin S J, et al. Comprehensive monitoring of nonlinear processes based on concurrent kernel projection to latent structures[J]. IEEE Trans on Automation Science and Engineering, 2016, 13(2): 1129-1137.
- [68] Zhang Y, Zhou H, Qin S J, et al. Decentralized fault diagnosis of large-scale processes using multiblock kernel partial least squares[J]. IEEE Trans on Industrial Informatics, 2010, 6(1): 3-10.
- [69] Zhang Y, Zhang Y. Complex process monitoring using modified partial least squares method of independent component regression[J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 2009, 98(2): 143-148.
- [70] Wang Z S, Deng K Z. Parameters identification of probability integral method based on multi-scale kernel partial least squares regression method[J]. Chinese J of Rock Mechanics and Engineering, 2011, 30(2): 3863-3870.
- [71] Liu J Z, Qin T M, Yang T T, et al. SCR denitration system modeling based on self-adaptive multi-scale kernel partial least[J]. Proc of the CSEE, 2015, 35(23): 6083-6088.
- [72] Shi H T, Liu J C, Tan S, et al. Process monitoring and quality prediction method based on hybrid KPLS-FDA[J]. Control and Decision, 2013, 28(1): 141-146.
- [73] Hong W R. Quasi sequential approach to large scale dynamic process optimization[D]. Hangzhou: School of Control Science and Engineering, Zhejiang University, 2005.
- [74] Cao P F, Luo X L. Modeling of soft sensor for chemical process[J]. CIESC Journal, 2013, 64(3): 788-800.
- [75] Cutler C R, Ramakar B L. Dynamic matrix control — A computer control algorithm[C]. The 17th Conf on Joint Automatic Control Conf. Houston: IEEE, 1980: 72.
- [76] Ricker N L. The use of biased least-squares estimators for parameters in discrete-time pulse-response models[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 1988, 27(2): 343-350.
- [77] Ljung L. System identification: Theory for the user[M]. Beijing: Tsinghua University Press, 2002.
- [78] Qin S J. Partial least squares regression for recursive system identification[C]. The 32nd Conf on Decision and Control. San Antonio: IEEE, 1993: 2617-2622.
- [79] Qin S J, McAvoy T J. A data-based process modeling approach and its applications[J]. IFAC Proc Volumes, 1992, 25(5): 93-98.
- [80] Qin S J, McAvoy T J. Nonlinear FIR modeling via a neural net PLS approach[J]. Computers & Chemical Engineering, 1996, 20(2): 147-159.
- [81] Baffi G, Martin E B, Morris A J. Non-linear dynamic projection to latent structures modelling[J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 2000, 52(1): 5-22.
- [82] Chen J, Liu K C. On-line batch process monitoring using dynamic PCA and dynamic PLS models[J]. Chemical Engineering Science, 2002, 57(1): 63-75.
- [83] Lee G, Song S O, Yoon E S. Multiple-fault diagnosis based on system decomposition and dynamic PLS[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2003, 42(24): 6145-6154.
- [84] Lee G, Han C, Yoon E S. Multiple-fault diagnosis of the Tennessee Eastman process based on system decomposition and dynamic PLS[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2004, 43(25): 8037-8048.
- [85] Liu Y, Chang Y, Wang F. Nonlinear dynamic quality-related process monitoring based on dynamic total kernel PLS[C]. The 11th Conf on Intelligent Control and Automation. Shenyang: IEEE, 2014: 1360-1365.
- [86] Liu Q, Qin S J, Chai T. Quality-relevant monitoring and diagnosis with dynamic concurrent projection to latent structures[J]. IFAC Proc Volumes, 2014, 47(3): 2740-2745.
- [87] Tong C D, Shi X H, Lan T. Orthogonal signal correction based auto-regression model with application to dynamic process monitoring[J]. Control and Decision, 2016, 31(8): 1505-1508.
- [88] Jiao J, Yu H, Wang G. A quality-related fault detection approach based on dynamic least squares for process monitoring[J]. IEEE Trans on Industrial Electronics, 2016, 63(4): 2625-2632.
- [89] Kaspar M H, Ray W H. Dynamic PLS modelling for process control[J]. Chemical Engineering Science, 1993, 48(20): 3447-3461.
- [90] Lakshminarayanan S, Shah S L, Nandakumar K. Modeling and control of multivariable processes: Dynaeak mic PLS approach[J]. AIChE Journal, 1997, 43(9): 2307-2322.
- [91] Wang W, Zhao L J, Yue H, et al. Multivariable modeling based on dynamic fuzzy PLS and its application[J]. J of System Simulation, 2010, 22 (5): 1309-1312.
- [92] Li G, Liu B, Qin S J, et al. Quality relevant data-driven modeling and monitoring of multivariate dynamic processes: The dynamic T-PLS approach[J]. IEEE Trans on Neural Networks, 2011, 22(12): 2262-2271.
- [93] Dong Y, Qin S J. Dynamic-inner partial least squares for dynamic data modeling[J]. Ifac Papersonline, 2015, 48(8): 117-122.
- [94] Dong J, Zhang K, Huang Y, et al. Adaptive total PLS based quality-relevant process monitoring with application to the Tennessee Eastman process[J]. Neurocomputing, 2015, 154: 77-85.
- [95] Zhang K, Dong J, Peng K. A novel dynamic non-Gaussian approach for quality-related fault diagnosis with application to the hot strip mill process[J]. J of the Franklin Institute, 2017, 354(2): 702-721.