

# 基于时段的间歇过程统计建模、在线监测及质量预报

赵春晖<sup>1</sup> 王福利<sup>1</sup> 姚远<sup>2</sup> 高福荣<sup>2</sup>

**摘要** 首先针对基于多元统计技术的间歇过程统计建模、在线监测、故障诊断及质量预测等热点问题进行了论述,回顾了各类方法的发展,并分析了各自的优缺点.接下来重点针对间歇工业过程多时段及时段过渡特性,详细介绍了基于时段的统计分析策略,分析了各时段的潜在过程行为及其对产品质量的影响与作用关系,探讨了该思想方法的本质依据,揭示了其研究价值和重要意义.最后从解决实际问题的角度出发,发掘了其存在的潜在问题及今后的研究前景与发展空间.基于时段的间歇过程多元统计分析是一个既有理论意义又有较高实际应用价值的研究课题,必将有利于后续的过程监测、故障诊断及质量改进.

**关键词** 多时段间歇过程,多元统计分析,统计建模,过程监测,质量预测

**DOI** 10.3724/SP.J.1004.2010.00366

## Phase-based Statistical Modeling, Online Monitoring and Quality Prediction for Batch Processes

ZHAO Chun-Hui<sup>1</sup> WANG Fu-Li<sup>1</sup> YAO Yuan<sup>2</sup> GAO Fu-Rong<sup>2</sup>

**Abstract** The paper first presents a comprehensive description of some hot problems in statistical modeling, online monitoring, and quality prediction for batch process based on multivariate statistical techniques, including the development of various solutions and their advantages and disadvantages. Then, phase-based statistical analysis strategies are addressed with a focus on the multiplicity of operation phase and phase transition behaviors. This part analyzes the phase-based process characteristics and their effects on product quality, discusses the inherent basis, and reveals their significance. Finally, from the viewpoint of solving practical problems, the existing problems are explored and their prospective development is discussed. Phase-based statistical analysis for batch processes is important in both theory meaning and application, which will benefit further process monitoring, fault diagnosis and quality prediction.

**Key words** Multiphase batch processes, multivariate statistical analysis, statistical modeling, process monitoring, quality prediction

作为工业生产中一种重要的生产方式,目前被业界广泛认可的间歇过程是指在有限的时间内、按照预先设计好的工序流程将原材料加工生产成符合质量要求的产品.与连续工业生产过程相比,它具有生产过程本身反应复杂、产品生命周期有限等典型特点.间歇过程的统计建模、在线监测、故障诊断及质量控制成为科研人员广泛的研究课题.而以主元分析(Principal component analysis, PCA)<sup>[1-3]</sup>、独立成分分析(Independent component analysis, ICA)<sup>[4-6]</sup>以及偏最小二乘回归(Partial least squares, PLS)<sup>[7-8]</sup>等为核心的多元统计分析技术,因其在处理高维、高度耦合数据时具有独特的优势,越来越受到研究人员和现场工程师的青睐.

二十世纪 90 年代中期, Nomikos 和 MacGregor<sup>[9-11]</sup>提出的多向主元分析(Multiway PCA, MPCA)和多向偏最小二乘回归(Multiway PLS, MPLS)首次将多元统计分析方法成功应用到间歇过程中,引发了之后基于多向(Multiway)统计分析的一系列研究热潮,揭开了基于数据的间歇过程统计建模、在线监测、故障诊断及质量预测控制的新篇章.国外各科研小组<sup>[12-21]</sup>均已投入大量人力、物力和资源,面向间歇过程展开了如火如荼的研究工作,产生了丰富的理论研究成果,可谓百家争鸣,百花齐放.

近年来,基于时段的间歇过程统计建模思想得到了研究人员的重视<sup>[15, 17, 22-31]</sup>,并面向多时段间歇过程进行了相应的卓有成效的研究工作,他们的工作极大地促进了该领域的进一步发展.本文将针对前人工作做一阶段性的总结,梳理其发展脉络,从而为后续研究理出思路.

## 1 间歇过程多时段特性分析

### 1.1 间歇过程的数据特征

间歇操作实时测量的过程数据可以表示为三维

收稿日期 2008-12-05 录用日期 2009-10-21  
Manuscript received December 5, 2008; accepted October 21, 2009  
国家自然科学基金(60774068)资助  
Supported by National Natural Science Foundation of China (60774068)  
1. 东北大学信息学院 沈阳 110004 2. 香港科技大学化工系 香港  
1. College of Information Science and Engineering, Northeastern University, Shenyang 110004 2. Department of Chemical and Biomolecular Engineering, Hong Kong University of Science and Technology, Hong Kong

数组:  $X(I \times J \times K)$ , 其三个维数分别表示间歇操作周期 ( $i = 1, \dots, I$ )、过程变量个数 ( $j = 1, \dots, J$ ) 和每一次间歇操作中测量点的个数 ( $k = 1, \dots, K$ )。

间歇过程的产品质量通常是在一次间歇操作结束后离线测定, 可以表示为二维的数据阵  $Y(I \times J_y)$ 。因此, 间歇过程数据的典型形式是一个三维的过程变量数组  $X(I \times J \times K)$  和一个二维的质量变量矩阵  $Y(I \times J_y)$ 。

## 1.2 间歇过程的多时段特性

间歇过程操作中的过程变量相关关系并非随时间时刻变化, 而是跟随过程操作进程或过程机理特性的变化发生规律性的改变。而多时段性恰恰是间歇过程的一个显著特点<sup>[15, 24-25]</sup>, 譬如注塑过程可以划分为注射、保压和冷却三个主要的时段; 发酵过程按细菌的生长周期也可大致分为停滞期、指数生长期、静止期等时段。每个时段都有其特定的控制目标, 有不同的过程主导变量和过程特征。此外在质量预测分析中, 许多研究人员<sup>[22, 32-33]</sup> 亦指出, 过程变量对产品质量的影响具有时间区域特性。Lu 等<sup>[22, 27-28]</sup> 也指出, 间歇过程的过程变量和质量变量之间的预测关系并不是随着操作时间时刻变化, 而是具有明显的分时段性。在同一时段内部, 过程运行行为对质量的影响效果是类似的, 但是在不同子时段中, 决定最终产品质量的关键过程变量及其对质量的影响能力和方式是不同的, 即二者显示出不同的相随而动的统计关系。

因此, 对多时段间歇过程的统计分析不仅仅要关注过程整体的运行状况, 更应该深入分析每一个子时段的潜在过程相关特性, 揭示各个时段对质量不同的影响与作用能力。Kosanovich 等<sup>[23]</sup> 于 1994 年将 MPCA 应用于一个聚合物反应工业过程时就指出, 针对过程中两个明显具有不同特征的反应时段分别建立 MPCA 模型, 可以更加准确、有效地监测并诊断过程中出现的异常工况。Dong 和 McAvoy 等<sup>[15]</sup> 对一个绝缘密封放热化学反应器的间歇过程建立非线性 MPCA 模型时亦验证了 Kosanovich 等的观点。

## 2 间歇过程统计建模、过程监测及质量预测

### 2.1 间歇过程数据预处理

为了利用多元统计分析技术对间歇过程数据进行分析, 必须预先进行相应的数据处理。对于三维间歇过程数据  $X(I \times J \times K)$ , 有两种常用的处理方式。一种是基于三维矩阵展开的建模方法, 即将三维数组根据需要展开成二维数据的形式后再进行多元统计分析, 它是目前应用最为广泛的处理方式。另一种是直接针对三维数据阵进行处理, 建立三线性

分解模型<sup>[34-37]</sup>, 譬如并行因子分析 (Parallel factor analysis, PARAFAC), Tucker-3 模型、 $N$  维偏最小二乘 ( $N$ -way partial least squares,  $N$ -PLS) 等。

将一个三维矩阵展开成二维矩阵, 通常采用变量展开和批次展开这两种方式<sup>[38]</sup>。批次展开方式保留了批次方向而将时间和过程变量两个维数上的数据揉合在一起, 构成二维矩阵  $X(I \times KJ)$ , 其每一行包含了一次间歇操作周期内的所有数据; 变量展开方式保留了过程变量的维数而将间歇操作周期和采样时间上的数据揉合在一起, 构成二维矩阵  $X(KI \times J)$ , 其每一列包含了过程变量在所有间歇周期的所有采样时刻上的测量数据。

三维数据的标准化可以在展开后的二维矩阵中进行处理。对批次展开后的数据  $X(I \times KJ)$  进行标准化, 实际上是抽取了间歇过程正常操作下过程变量的平均运行轨迹, 可以在一定程度上去除动特性及非线性的影响, 它们突出了间歇过程不同操作批次之间一种正常的随机波动。其数学表达式为

$$\begin{aligned} \tilde{x}_{ijk} &= \frac{x_{ijk} - \bar{x}_{jk}}{s_{jk}} \\ \bar{x}_{jk} &= \frac{1}{I} \sum_{i=1}^I x_{ijk} \\ s_{jk} &= \sqrt{\frac{1}{I-1} \sum_{i=1}^I (x_{ijk} - \bar{x}_{jk})^2} \end{aligned} \quad (1)$$

对变量展开后的数据  $X(KI \times J)$  进行标准化是针对每个变量进行的, 利用的是每个过程变量在所有间歇操作的所有时间上的平均值和方差。其并不介意每一次间歇操作的数据长度是否一致, 而且在线应用时也无需预估未知数据<sup>[22, 39-41]</sup>。但由于过程变量测量值的均值与方差均随着时间不断变化, 并且在不同的操作工序中显示出不同的变化特征, 因此该均值与方差并不代表过程运行的平均水平和波动程度。其数学表达式为

$$\begin{aligned} \tilde{x}_{ijk} &= \frac{x_{ijk} - \bar{x}_j}{s_j} \\ \bar{x}_j &= \frac{1}{KI} \sum_{k=1}^K \sum_{i=1}^I x_{ijk} \\ s_j &= \sqrt{\frac{1}{KI-1} \sum_{k=1}^K \sum_{i=1}^I (x_{ijk} - \bar{x}_j)^2} \end{aligned} \quad (2)$$

关于三维数据展开方式的讨论以及相应的过程监测方法的比较可参阅文献 [36, 42-43]。

### 2.2 间歇过程统计建模、在线监测及质量预测

本章将从解决实际问题的角度出发, 基于三维数据展开预处理方式, 针对间歇过程应用中的几大热点难点问题, 概要介绍其现有的解决方案与思路,

分析它们各自的优缺点。

### 2.2.1 不等长问题

由于各种各样的原因, 实际工业过程不可能达到完全地重复生产, 因此过程数据的长度也不可能完全相同. 常见的处理手段是在建模之前, 用一些方法将不等长数据变成等长的数据. 其中最简单的处理方式, 一是“最短长度法”<sup>[44-45]</sup>, 即找到最短的一次间歇操作数据, 将其余的间歇操作数据截取, 使得它们都具有最短的数据长度. 这种方法除了要求过程变量轨迹在公共部分保持一致之外, 还要求间歇过程的主要操作及重要过程信息都被包含在公共时间段内. 二是以最长周期的数据作为参考, 将其他过程中缺少的部分当作“缺损数据”处理<sup>[45]</sup>.

Nomikos 和 MacGregor<sup>[11]</sup> 用一个合适的“指示”变量代替过程采样时间, 采用插值的手段将变量轨迹统一成同样的长度. 此外, 近年来研究学者尝试采用时间调整 (Time alignment) 的思想<sup>[46-47]</sup>, 通过适当地平移、拉伸或压缩两个不同信号轨迹的局部片断, 从而达到同步两个不同长度甚至不同形状的信号轨迹的目的. 但是, 对原始过程轨迹的处理会扭曲原始过程变量的自相关及变量之间的交叉相关关系, 在一定程度上掩盖异常工况的数据特征, 降低故障的可检测性. 在 Rothwell 等的一篇比较性文章中<sup>[44]</sup> 提到, 基于动态时间扭曲 (Dynamic time warping, DTW) 的不等长间歇过程监测方法, 在故障检测和诊断时甚至不如最短长度法和指示变量法.

### 2.2.2 动特性问题

实际间歇工业过程中, 过程变量之间往往呈现出动态特性, 即不同时刻间时序相关. Rännar 等<sup>[48]</sup> 提出了递推分层自适应 PCA 算法来抽取过程动态变化趋势. 该算法包括了底层时间片 PCA 模型以及基于底层主元得分的上层 PCA 模型, 较好地考虑了过程数据不同时刻间的时序相关性. 但是其模型结构复杂, 计算量过大, 而且在迭代更新过程中, 前面时刻的模型误差将严重影响后面时刻的模型精度, 具有误差累积的缺陷.

目前, 处理时序动态性多采用时间序列扩展方法. Chen 和 Liu 等<sup>[49]</sup> 提出了间歇过程动态主成分分析和动态偏最小二乘算法 (Batch dynamic PCA/batch dynamic PLS, BDPCA/BDPLS), 针对每个间歇操作将不同采样时刻的变量涵盖在同一数据单元中进行 PCA/PLS 分析, 进而可以提取不同采样时刻之间的变量相关关系. 但是这种扩展数据阵受时滞长度选取的限制, 只能表征该局部时间段内的动态性.

### 2.2.3 数据预估问题

针对 MPCA/MPLS 在线应用的数据预估问题,

Nomikos 与 MacGregor<sup>[11]</sup> 总结了三种方法, 包括零补足法、当前数据补足法以及基于 PCA 映射的预估方法. 但是这些预估数据无法真实地反映实际过程潜在的相关特性, 进而影响在线应用的性能. Cho 与 Kim<sup>[50]</sup> 将历史批次作为参考轨迹数据库, 在线实施时通过实时计算当前新批次已知的测量数据与历史批次对应部分的距离, 从中选择与其最为相似的批次用作数据补充. 但是该算法计算量过于复杂, 此外单纯依靠距离亦无法可靠地表征真实的过程潜在相关特性. Louwerse 等<sup>[36]</sup> 选取时间标记点分别建立局部 MPCA 模型, Ündey 等根据过程进度度建立局部 MPLS 预测模型<sup>[16]</sup>, 这些算法只是降低了数据预估的计算量, 并未彻底摆脱数据预估的问题. Rännar 等<sup>[48]</sup> 的递推分层自适应 PCA 算法避免了数据预估问题, 但其离线建模及在线应用过于复杂.

基于变量展开的建模方法<sup>[12, 18]</sup> 虽然可以避免数据预估的问题, 但由于间歇过程运行轨迹在该方向上动态变化剧烈且无确定的统计分布规律, 直接影响特征提取的准确性与难度. 近年来, 人们结合批次展开与变量展开方式的优点<sup>[39-41]</sup>, 构建二维建模数据单元进行统计分析, 成功克服了数据预估的缺陷, 极大地推动了相关算法的发展.

### 2.2.4 慢时变问题

在实际工业过程中, 受各种因素影响, 譬如外界温度的变化、设备老化等原因, 运行状态往往会不断地缓慢变化. 对于慢时变间歇过程, 人们通常采用被动的适应更新策略<sup>[51-53]</sup>, 但是自适应算法存在误更新的缺陷, 从而影响更新后的模型的准确性.

鉴于慢时变问题本质上就是批次方向上动态性的一种反映, Lu 等<sup>[54]</sup> 提出了一种二维动态主元分析 (Two-dimensional dynamic PCA, 2D-DPCA) 策略, 通过选取适当的数据支持域用于对分析单元进行时间和批次双向扩展, 可以直接提取批次及时间方向上局部的动态相关关系. 但是批次间相关关系的分析范围及提取性能受限于“数据支持域”的具体设定. Zhao 等<sup>[55]</sup> 建立了基于批次间“相对变化”的统计建模方法, 提取慢时变行为本身变量之间固有的潜在相关特性, 从而将慢时变模式主动容纳到监测系统, 可以增强模型的鲁棒性而无须随着慢时变被动更新校正, 克服了误更新的缺陷.

### 2.2.5 多模态问题

由于原材料配方以及生产策略等的不同, 运行过程亦具有不同的生产模态, 在各个模态下呈现不同的过程潜在相关特性. 对于多模态问题, 人们或者采用整体建模思想, 或者分别针对各个模态建立不同的监测模型.

基于各个运行模态具有共同的特征子空间的

前提假设, Hwang 与 Han<sup>[56]</sup> 提出了一种基于分层聚类的 PCA 建模方法, Lane 等<sup>[57]</sup> 提出了一种集合主元分析 (Pooled PCA) 建模方法. 他们利用 PCA 提取出各个模态间的共有特征子空间作为统一的模型. 整体建模方法模型结构简单, 计算量相对较小; 但是该模型无法全面、准确地刻画所有的运行模态, 尤其是当各个模态间存在较大的差异时, 往往对某些模态表征有失偏颇. Zhao 与 Zhang 等<sup>[58]</sup> 针对各个模态分别建立独立模型, 并建立各个模态间的相似度指标分析判断模态间的迁移. Chen 与 Liu<sup>[59]</sup> 采用启发式平滑聚类算法 (Heuristic smoothing clustering, HSC) 能够自动进行数据分类获得各个运行模态. 独立建模方法可以更贴切地表征各个运行模态不同的潜在特性, 但是往往模型结构复杂, 而且增加了在线实施难度.

### 2.2.6 非高斯问题

目前, 解决非高斯问题通常采用独立成分分析 (ICA)<sup>[4-6, 41, 60-63]</sup> 技术. 作为更高阶的统计分析方法, 相比于 PCA, 其统计意义及条件更强, 在分析非高斯过程数据方面具有独特的优势. Yoo 等<sup>[63]</sup> 将 ICA 技术应用于间歇过程, 提出了多向独立成分分析 (Multiway ICA, MICA) 方法. 此外, 针对实际工业生产并非单一的高斯或非高斯过程<sup>[55, 64-66]</sup> 的问题, 人们提出了 ICA 与 PCA 结合的建模方法.

需要指出的是, 由于不满足高斯分布的前提假设, ICA 统计指标的控制限无法像 PCA 中那样借助某种固定的分布规律进行估计. 当数据分布规律无法确知时, 人们通常采用非参数密度估计的方法<sup>[67-69]</sup>, 但是该方法需要大量的数据样本, 而且对多维数据联合概率密度分布的估计难度增大. 另一方面, 与 PCA 中固定的特征提取结果相比, 独立成分的估计具有诸多不确定因素. Lee 等<sup>[70]</sup> 提出了一种改进的 ICA 算法, 可以获得确定的信号分离结果.

### 2.2.7 非线性问题

归纳起来, 目前处理非线性的方法主要有几大类: 神经网络方法<sup>[71]</sup>、主元曲线方法<sup>[72]</sup>、局部线性近似方法<sup>[73]</sup> 以及基于核技术 (Kernel) 的统计方法<sup>[74-77]</sup>. 为了处理非线性问题, Kramer<sup>[71]</sup> 最先提出基于神经网络的非线性 PCA, Dong 等<sup>[72]</sup> 针对中间层含意不明显等缺点作了改进. 但是该类方法计算复杂, 而且保留的主元个数必须预先指定, 一旦其发生变化, 神经网络需要重新进行训练. 局部线性近似建模方法<sup>[73]</sup> 将整个过程拆分为若干局部片段, 每个片段都可以由一个线性模型近似表征, 但是却可能会丢失某些重要非线性潜在特征.

核技术<sup>[74-77]</sup> 的基本思想是通过非线性映射  $\Phi(x)$  将原始的非线性输入空间变换到一个高维隐

性的线性特征空间. 采用核技术, 仅仅借助于简单的内积算子和核函数就可以在这个高维空间中进行特征提取. 和其他非线性方法相比, 核技术无需任何非线性优化计算, 思想方法简单、易于理解. 但是, 由于非线性映射后的数据形式不可见, 为故障诊断带来了困难<sup>[78-79]</sup>. 此外, 为了解决面向间歇过程的核算法数据预估的缺陷, Zhao 等<sup>[80]</sup> 将变量展开与批次展开处理方式有效融合到核运算中, 并且区分了非线性时段特征, 较好地考虑了非线性相关关系的动态变化, 实现了在线应用.

## 3 基于时段的间歇过程统计建模、在线监测及质量预测

基于 MPCA/MPLS 的统计分析算法将一次间歇操作的所有数据当作一个整体对待, 忽视了间歇生产中的局部过程行为特征. 为了克服传统多向统计分析技术在多时段间歇过程中应用的弱点, 将过程分成若干子时段, 建立基于子时段的统计分析模型用于过程监测、故障诊断和质量预测是非常有意义的事情. 在面向间歇过程的统计建模、在线监测、故障诊断及质量预测这一研究领域, 科研人员已经做了大量的工作, 并取得了一系列研究成果, 这为基于时段的统计分析奠定了丰富的理论基础. 很自然地, 在时段概念提出后, 现有的研究成果完全可以加以利用, 将时段概念与之结合起来, 建立基于时段的统计建模、过程监测及质量预测方法.

### 3.1 时段划分算法

如何将一个间歇过程合理地划分成不同的子时段是基于时段进行统计分析的基础与关键. 从不同的角度出发, 现有的时段识别方法可分为如下四种:

1) 依据过程机理知识和专家经验的方法<sup>[15, 17, 23]</sup>. 该方法侧重利用专家经验及过程知识, 依据过程反应机理或是物理操作单元的不同来划分过程运行的不同物理时段. 但是对于一个复杂、陌生的工业过程, 很难获取这样的过程知识.

2) 特征分析方法<sup>[24-25, 31]</sup>. 该方法对过程变量或对提取的某些统计特征沿时间方向上的发展轨迹进行分析. 对应于时段交替处, 变量运行轨迹或是特征信号亦随之发生相应的变化, 据此可以识别各个时段. 指示变量方法是其中一种典型代表.

3) 自动识别算法<sup>[26-30]</sup>. 该方法无需过程先验知识, 通过某种算法程序能够自动识别出过程中的各个时段. 其中的典型代表为 Lu 等的聚类算法<sup>[26-28]</sup> 与 Camacho 等的多时段 (Multi-phase, MP) 算法<sup>[29-30]</sup>. 聚类算法利用改进的 K-means 聚类程序, 将时间片相关性模式 (PCA 负载/PLS 回归矩阵) 划分成  $C$  个不同的子类, 分别表征了  $C$  种

不同的变量相关性特征. 而 MP 算法依据得到的局部模型是否能够改善原有模型的数据重构能力来确定是否接受该划分.

4) 基于过渡的软时段划分算法<sup>[81]</sup>. 针对之前时段划分算法硬分类的缺陷, Zhao 等<sup>[81]</sup> 建立了一种基于过渡的软时段划分算法, 引入模糊时段的概念, 可以将间歇过程按其潜在特性的发展变化, 分解成若干子时段及主要时段之间的过渡区域.

这几种时段识别方法各自具有不同的适用场合与优缺点. 聚类算法与 MP 算法是比较常用的两种时段自动划分方法. 其中, 聚类方法侧重于分析追踪过程相关特性的变化, MP 算法侧重于改善模型的重构能力, 而软时段划分算法则侧重于分析时段间的过渡现象. 在实际应用中, 根据具体情况选用适合的算法或者将几种方法有效结合往往能够达到较好的效果.

将间歇过程分成若干时段后, 相应的统计建模策略可以分为两大类: 1) 将每个时段作为独立个体分别建立模型; 2) 考虑各个时段之间的相关性, 譬如 Hierarchical PCA/PLS (HPCA/HPLS), Consensus PCA/PLS (CPCA/CPLS) 以及 Multiblock PCA/PLS (MBPCA/MBPLS) 等<sup>[82]</sup>, 其中以 MBPCA/MBPLS 算法较为典型.

### 3.2 基于时段的过程监测

在多时段背景下实际问题具备了新的特点和难点. 不等长、动特性、慢时变及非线性等行为亦呈现不同的运行模式, 需要进一步理解分析, 寻求更为合理、贴切的解决方案和思路.

许多研究学者已经意识到间歇过程的多时段特性以及基于时段进行统计分析的重要性与意义, 陆续提出并发展了一系列解决方案. 其中, Kosanovich 的两时段 MPCA 算法<sup>[23]</sup> 以及 Dong 和 McAvoy<sup>[15]</sup> 的多时段算法是对时段概念最早的认识与初步探讨. 此后, 英国的 Martin 和 Morris 教授<sup>[21, 57]</sup> 领导的研究小组基于 Group 概念展开了相应的统计分析, Lennox 等<sup>[25]</sup> 对局部建模方法进行了相关研究. 上述研究工作中的“Group”等局部建模思想其实就是“时段”概念的一种变体. Ündey 等<sup>[17]</sup> 直接具体明确地提出了时段概念. 他们借助于实际生产的不同物理反应单元将整个过程分为若干时段, 同时结合反应机理, 各个时段又可以细分成更多的子时段, 进而建立了基于时段的统计分析及过程监测模型.

相较于传统的多向统计分析方法, 基于时段的统计分析策略可以提高在线故障检测的精度和灵敏度, 有利于准确的故障隔离和诊断; 并可以更细致地揭示过程运行的潜在特征, 促进对复杂工业过程的了解. 但是, 上述基于时段的 MPCA 建模算法同

样无法克服在线实施时数据预估的缺陷. 为此, Lu 等<sup>[26]</sup> 提出了间歇过程子时段划分算法, 并将各时段内的二维 PCA 时间片模型简单取平均作为时段代表性模型. 他们指出, 在潜在特性近似一致的时段中, 用最简单的二维统计模型完全可以有效地提取出这一子时段中的数据特征. 这意味着如果间歇过程经过合理的划分, 简单的二维统计分析方法可以直接应用于间歇过程. 子主元分析 (SubPCA) 模型结构简单、计算量小, 而且可以很容易实现过程运行状态的在线监测而无需数据预估, 这将极大地改进并简化过程的在线监测和故障诊断程序. 此外, 对于多时段间歇过程, 数据不等长问题显得更为复杂, 因为不等长现象可能发生在某一个或某几个特定的时段中, 而并非整个过程的统一特性. Lu 等<sup>[83]</sup> 在其子时段算法基础之上, 直接针对不等长过程数据进行分析, 不需要预先处理不等长建模数据, 而是采用“串行”聚类操作从中获取不等长时段的具体信息, 并建立了子时段过程监测模型. 在线应用时, 利用过程时间与监测结果相结合可以实时反推正常工况、异常工况以及时段变迁这三种不同情况. 此外, Camacho 等<sup>[29-30, 84]</sup> 基于 MP 时段划分方法, 建立了多时段统计模型, 同样可以实现实时的在线监测.

针对各个时段独立建模虽然可以揭示其不同的潜在特性, 但是却忽视了它们之间的相关关系. Multiblock 算法考虑了各时段间的变量相关性, 但是其实时监测的效率未必比 MPCA/MPLS 有显著提高. 此外, 由于用于监测的系统信息来自于多个时段, 增加了故障诊断的难度. Liu 等<sup>[85]</sup> 利用 PLS 算法建立各个时段之间的因果作用关系, 将时段内部以及时段之间的相关特性进行区分, 可以更为详细地分析判断过程异常是由时段内部波动还是时段间的相关关系发生变化引起的.

对于以生化过程为代表的这一类慢反应过程, 建模数据量通常不足以提供常规方法中必要的分析单元, 由此产生了新的问题: 如何在有限数据情况下进行时段划分并建立子时段监测模型实现在线监测? Lu 等<sup>[86]</sup> 仅仅基于一次正常间歇操作批次进行了子时段识别并建立了基于时段的监测模型, 实现了在线应用. 而 Zhao 等<sup>[87]</sup> 针对少量几个批次的情况, 构建了泛化滑动窗口作为数据单元, 融合了若干批次的信息, 并基于此实现了时段划分、建模、监测及在线更新. 相较于 Lu 等的工作, 该算法更具普遍适用性, “一个建模批次”的情况仅仅是该算法的一个应用特例.

上述基于多时段的基本建模方法, 从本质上来说都是严格地将整个过程划分为多个时段从而建立多时段模型, 而并没有考虑到时段间的过渡现象. 对此, Zhao 等<sup>[81]</sup> 建立了一种基于过渡的软时段划分

算法, 模糊化了各时段之间的分界点. 针对过渡区域, 该算法利用  $0 \sim 1$  模糊隶属度作为与过渡模式相邻的两个子时段模型的权重系数, 通过简单的加权平均综合了相邻两个时段的过程特征, 增强了过渡监测模型的鲁棒性. 基于软时段划分的建模思想克服了传统硬划分算法的硬伤, 完善与补充了多时段算法体系, 并为后续的深入研究奠定了基础. 随后, Yao 与 Gao<sup>[88]</sup> 在此基础上为了更合理、客观地确定过渡区域, 采用了不同的相似度指标来分析各 PCA 模型间的相似关系, 进一步发展了软时段过渡方法.

### 3.3 基于时段的质量预测

在质量预测中, Nomikos 与 MacGregor 提出的多向偏最小二乘方法 (MPLS)<sup>[10]</sup> 将间歇操作周期内所有过程数据作为预测变量, 和最终的产品质量建立回归关系, 除了模型结构复杂、计算负荷大等缺点外, 亦很难揭示操作周期内过程行为对于质量影响关系的变化, 并不适用于多工序或者多时段的间歇过程.

Zhao 等<sup>[89]</sup> 对间歇过程的多时段特性进一步研究后发现, 间歇过程产品的质量指标可以大致分成两类: 某些质量指标只决定于某一个或几个特定的时段, 其他时段对其没有显著影响, 这一类质量指标被称为“时段型质量指标”; 而另一类质量指标受整个间歇操作周期内所有时段过程行为的影响, 各个独立时段无法完整地描述质量波动信息, 这一类质量指标被称为“过程型质量指标”.

对于第一类质量指标, 模型中包含和产品质量并无密切关系的时段的过程数据不仅会增加模型的复杂程度、降低模型的可解释性, 还会影响模型对产品质量的预测精度. Duchesne 与 MacGrego<sup>[33]</sup> 提出了一种路径多模块偏最小二乘 (Pathway MBPLS) 算法, 引入过程运行中所获得的质量中间实测值来帮助识别过程轨迹对于质量影响的局部效应. 但是实际中很难获取“中间质量”的在线测量值. 在一些多时段间歇过程中, 同一时段内过程变量对于质量的影响作用是相似的, Lu 等<sup>[27]</sup> 提出基于子时段 PLS 回归模型的质量预测算法, 将同一时段内部的所有时间片回归矩阵简单取平均作为该时段的代表性 PLS 模型, 并成功识别了质量控制和质量改进的关键时段, 实现了在线质量预测. 第一类质量指标虽然只和某一个或几个子时段密切相关, 在时段内部仍然呈现时间上的累积效应. Zhao 等<sup>[90]</sup> 进一步发展了基于子时段的质量分析与预测算法, 提出了“时段平均轨迹”的概念, 并建立了各时段平均运行水平与质量的回归关系. 相较于之前的实时质量预测模型, 这种预测关系更为稳定可靠.

对于第二类质量指标, 时段对于质量的影响

可以分为局部作用与累积作用两种. Reinikainen 等<sup>[91]</sup> 采用 Priority PLS 回归算法, 按照时段运行先后顺序, 逐步分析各时段的重要质量相关信息, 将各个时段对于质量的作用累积起来. 而 Zhao 等<sup>[92]</sup> 在各个时段内不仅将过程系统信息详细分解为质量相关以及无关两大部分, 亦将质量信息分解成能被各时段解释以及无法解释的两大部分, 可以深入理解过程行为与质量之间的作用关系在间歇操作的各个时段间的发展变化.

## 4 研究展望

由于间歇过程本身的复杂性, 面向间歇过程的多变量统计建模、监测、故障诊断及质量改进这一研究领域仍有大量的空白和难题没有涉及和解决, 结合目前该领域的研究现状来看, 还有许多需要进一步探讨的地方.

理论方法需要进一步完善, 主要有:

1) 多时段不等长问题. 在多时段背景下解决不等长问题, 需要同时兼顾不等长时段识别、不等长数据特征提取以及在线应用时针对新数据进行时段归属判断等诸多方面.

2) 多时段多模态问题. 针对该类问题, 如果能够在各个时段内提取出各模式之间的共同特性, 挖掘不同模态间变化的规律, 进而解决模型的可移植性问题, 可以有效地节约研究成本.

3) 非线性问题. 在非线性的情况下, 如何将整个过程按照非线性关系的发展变化划分为各个不同子时段, 从而建立多时段非线性模型, 该类问题尚未能进行相应的深入研究.

4) 时段软过渡问题. 如何将软过渡思想扩展应用于分析间歇过程中的其他各种过渡现象, 深入研究其潜在特性, 进而挖掘过渡控制的可能性.

另一方面, 从实际应用的角度, 有以下几点问题需要作进一步的探讨:

1) 数据预处理问题. 对于实际测量数据需要进行适当的信号提炼, 突出测量数据中的系统性信息, 使其能够真正表征实际生产状况.

2) 适用条件问题. 在将理论方案付诸实践时, 需要事先对实际的应用状况作出准确判断, 根据实际情况选择适用的解决方案; 必要时还要对理论方法作一定的调整.

3) 数据不充分问题. 为节省研究成本并缩短产品研发周期, 可以采取仿真实验与实际相结合的方法. 首先建立简单的机理模型, 用于产生仿真数据; 然后利用实际生产过程数据进行修正、学习和进化.

## 5 结束语

间歇过程的统计建模、在线监测及质量预测, 经

过了十几年的发展和完善, 相关理论方法不断涌现、成熟和普及, 已经成为一个独具特色的研究课题, 具有非常广阔的发展前景. 针对间歇工业过程多时段及时段过渡特点, 进一步丰富基于时段的多变量统计建模、监测、诊断及质量预测算法, 建立切实可行的实施方案, 这将会极大地保证过程的安全生产和连续稳定的产品质量, 具有重要的理论研究意义与实际应用价值. 因此, 我们有理由相信, 在今后相当长的一段时期内, 针对该领域的深入探讨仍将是广大研究者关注之重, 并将会迈向一个新的台阶.

## References

- Dunteman G H. *Principal Component Analysis*. London: SAGE publication LTD, 1989
- Jackson J E. *A User's Guide to Principal Components*. New York: Wiley, 1991
- Kourti T, MacGregor J F. Process analysis, monitoring and diagnosis, using multivariate projection methods. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 1995, **28**(1): 3–21
- Comon P. Independent component analysis, a new concept. *Signal Processing*, 1994, **36**(3): 287–314
- Hyvarinen A, Oja E. Independent component analysis: algorithms and applications. *Neural Networks*, 2000, **13**(4-5): 411–430
- Kano M, Tanaka S, Hasebe S, Hashimoto I, Ohno H. Monitoring independent components for fault detection. *American Institute of Chemical Engineers Journal*, 2003, **49**(4): 969–979
- Hoskuldsson A. PLS regression methods. *Journal of Chemometrics*, 1988, **2**(3): 211–228
- Dayal B S, MacGregor J F. Improved PLS algorithms. *Journal of Chemometrics*, 1997, **11**(1): 73–85
- Nomikos P, MacGregor J F. Monitoring batch processes using multiway principal component analysis. *American Institute of Chemical Engineers Journal*, 1994, **40**(8): 1361–1375
- Nomikos P, MacGregor J F. Multi-way partial least squares in monitoring batch processes. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 1995, **30**(1): 97–108
- Nomikos P, MacGregor J F. Multivariate SPC charts for monitoring batch processes. *Technometrics*, 1995, **37**(1): 41–59
- Wold S, Kettaneh N, Friden H, Holmberg A. Modelling and diagnostics of batch processes and analogous kinetic experiments. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 1998, **44**(1-2): 331–340
- Wold S, Geladi P, Esbensen K, Ohman J. Multi-way principal components-and PLS-analysis. *Journal of Chemometrics*, 1987, **1**(1): 41–56
- Wold S, Sjostrom M. Chemometrics, present and future success. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 1998, **44**(1): 3–14
- Dong D, McAvoy T J. Multistage batch process monitoring. In: Proceedings of American Control Conference. Seattle, USA: IEEE, 1995. 1857–1861
- Ündey C, Tatara E, Cinar A. Intelligent real-time performance monitoring and quality prediction for batch/fed-batch cultivations. *Journal of Biotechnology*, 2004, **108**(1): 61–77
- Ündey C, Cinar A. Statistical monitoring of multistage, multiphase batch processes. *IEEE Control Systems Magazine*, 2002, **22**(5): 40–52
- Ündey C, Ertunc S, Cinar A. Online batch/fed-batch process performance monitoring, quality prediction, and variable-contribution analysis for diagnosis. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 2003, **42**(20): 4645–4658
- Zamproga E, Barolo M, Seborg D E. Optimal selection of soft sensor inputs for batch distillation columns using principal component analysis. *Journal of Process Control*, 2005, **15**(1): 39–52
- Kourti T, Nomikos P, MacGregor J F. Analysis, monitoring and fault diagnosis of batch processes using multiblock and multiway PLS. *Journal of Process Control*, 1995, **5**(4): 277–284
- Martin E B, Morris A J. Enhanced bio-manufacturing through advanced multivariate statistical technologies. *Journal of Biotechnology*, 2002, **99**(3): 223–235
- Lu Ning-Yun. *Multivariate Statistical Modeling, Online Monitoring and Quality Prediction for Batch Processes* [Ph. D. dissertation], Northeastern University, China, 2006 (陆宁云. 间歇工业过程的统计建模、在线监测和质量预测 [博士学位论文], 东北大学, 中国, 2006)
- Kosanovich K A, Piovoso M J, Dahl K S, MacGregor J F, Nomikos P. Multi-way PCA applied to an industrial batch process. In: Proceedings of American Control Conference. Baltimore, USA: IEEE, 1994. 1294–1298
- Kosanovich K A, Dahl K S, Piovoso M J. Improved process understanding using multiway principal component analysis. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 1996, **35**(1): 138–146
- Lennox B, Hiden H G, Montague G A, Kornfeld G, Goulding P R. Application of multivariate statistical process control to batch operations. *Computers and Chemical Engineering*, 2000, **24**(2-7): 291–296
- Lu N Y, Gao F R, Wang F L. Sub-PCA modeling and on-line monitoring strategy for batch processes. *American Institute of Chemical Engineers Journal*, 2004, **50**(1): 255–259
- Lu N Y, Gao F R. Stage-based process analysis and quality prediction for batch processes. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 2005, **44**(10): 3547–3555
- Lu N Y, Gao F R. Stage-based online quality control for batch processes. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 2006, **45**(7): 2272–2280
- Camacho J, Pico J. Online monitoring of batch processes using multi-phase principal component analysis. *Journal of Process Control*, 2006, **16**(10): 1021–1035
- Camacho J, Pico J. Multi-phase principal component analysis for batch processes modeling. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2006, **81**(2): 127–136
- Doan X T, Srinivasan R, Bapat P M, Wangikar P P. Detection of phase shifts in batch fermentation via statistical analysis of the online measurements: a case study with rifamycin B fermentation. *Journal of Biotechnology*, 2007, **132**(2): 156–166
- Chu Y H, Lee Y H, Han C H. Improved quality estimation and knowledge extraction in a batch process by bootstrapping-based generalized variable selection. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 2004, **43**(11): 2680–2690
- Duchesne C, MacGregor J F. Multivariate analysis and optimization of process variable trajectories for batch process. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2000, **51**(1): 125–137

- 34 Bro R. PARAFAC. Tutorial and applications. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 1997, **38**(2): 149–171
- 35 Tucker L R. *The Extension of Factor Analysis to Three Dimensional Matrices*. New York: Holt, Rinehart and Winston, 1964. 110–162
- 36 Louwse D J, Smilde A K. Multivariate statistical process control of batch processes based on three-way models. *Chemical Engineering Science*, 2002, **55**(7): 1225–1235
- 37 Smilde A K. Comments on three-way analyses used for batch process data. *Journal of Chemometrics*, 2001, **15**(1): 19–27
- 38 Westerhuis J A, Kourti T, MacGregor J F. Comparing alternative approaches for multivariate statistical analysis of batch process data. *Journal of Chemometrics*, 1999, **13**(3-4): 397–413
- 39 Lee J M, Yoo C K, Lee I B. Enhanced process monitoring of fed-batch penicillin cultivation using time-varying and multivariate statistical analysis. *Journal of Biotechnology*, 2004, **110**(2): 119–136
- 40 Albazzaz H, Wang X Z. Statistical process control charts for batch operations based on independent component analysis. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 2004, **43**(21): 6731–6741
- 41 Lee J M, Yoo C K, Lee I B. On-line batch process monitoring using different unfolding method and independent component analysis. *Journal of Chemical Engineering of Japan*, 2003, **36**(11): 1384–1396
- 42 Gurden S P, Westerhuis J A, Bro R, Smilde A K. A comparison of multiway regression and scaling methods. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2001, **59**(1-2): 121–136
- 43 van Sprang E N M, Ramaker H J, Westerhuis J A, Gurden S P, Smilde A K. Critical evaluation of approaches for on-line batch process monitoring. *Chemical Engineering Science*, 2002, **57**(18): 3979–3991
- 44 Rothwell S G, Martin E B, Morris A J. Comparison of methods for dealing with uneven length batches. In: Proceedings of the International Conference on Computer Applications in Biotechnology. Osaka, Japan: Elsevier, 1998. 387–392
- 45 Kourti T. Multivariate dynamic data modeling for analysis and statistical process control of batch processes, startups and grade transitions. *Journal of Chemometrics*, 2003, **17**(1): 93–109
- 46 Kassidas A, MacGregor J F, Taylor P A. Synchronization of batch trajectories using dynamic time warping. *American Institute of Chemical Engineers Journal*, 1998, **44**(4): 864–875
- 47 Fransson M, Folestad S. Real-time alignment of batch process data using COW for on-line process monitoring. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2006, **84**(1-2): 56–61
- 48 Rännar S, MacGregor J F, Wold S. Adaptive batch monitoring using hierarchical PCA. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 1998, **41**(1): 73–81
- 49 Chen J H, Liu K C. On-line batch process monitoring using dynamic PCA and dynamic PLS models. *Chemical Engineering Science*, 2002, **57**(1): 63–75
- 50 Cho H W, Kim K J. A method for predicting future observations in the monitoring of a batch process. *Journal of Quality Technology*, 2003, **35**(1): 59–69
- 51 Lee J M, Yoo C K, Lee I B. On-line batch process monitoring using a consecutively updated multiway principal component analysis method. *Computers and Chemical Engineering*, 2003, **27**(12): 1903–1912
- 52 Li W H, Yue H H, Valle-Cervantes S, Qin S J. Recursive PCA for adaptive process monitoring. *Journal of Process Control*, 2000, **10**(5): 471–486
- 53 Lee D S, Vanrolleghem P A. Monitoring of a sequencing batch reactor using adaptive multiblock principal component analysis. *Biotechnology and Bioengineering*, 2003, **82**(4): 489–497
- 54 Lu N Y, Yao Y, Gao F R, Wang F L. Two-dimensional dynamic PCA for batch process monitoring. *American Institute of Chemical Engineers Journal*, 2005, **51**(12): 3300–3304
- 55 Zhao C H, Wang F L, Gao F R, Zhang Y W. Enhanced process comprehension and statistical analysis for slow-varying batch processes. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 2008, **47**(24): 9996–10008
- 56 Hwang D H, Han C. Real-time monitoring for a process with multiple operating modes. *Control Engineering Practice*, 1999, **7**(7): 891–902
- 57 Lane S, Martin E B, Kooijmans R, Morris A J. Performance monitoring of a multi-product semi-batch process. *Journal of Process Control*, 2001, **11**(1): 1–11
- 58 Zhao S J, Zhang J, Xu Y M. Monitoring of processes with multiple operating modes through multiple principal component analysis models. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 2004, **43**(22): 7025–7035
- 59 Chen J, Liu J. Mixture principal component analysis models for process monitoring. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 1999, **38**(4): 1478–1488
- 60 Lee J M, Yoo C K, Lee I B. Statistical process monitoring with independent component analysis. *Journal of Process Control*, 2004, **14**(5): 467–485
- 61 Chen J, Wang X Z. A new approach to near-infrared spectral data analysis using independent component analysis. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, 2001, **41**(4): 992–1001
- 62 Lee J M, Yoo C K, Lee I B. Statistical monitoring of dynamic processes based on dynamic independent component analysis. *Chemical Engineering Science*, 2004, **59**(14): 2995–3006
- 63 Yoo C K, Lee J M, Vanrolleghem P A, Lee I B. On-line monitoring of batch processes using multiway independent component analysis. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2004, **71**(2): 151–163
- 64 Kano M, Tanaka S, Hasebe S, Hashimoto I, Ohno H. Combination of independent component analysis and principal component analysis for multivariate statistical process control. In: Proceedings of International Symposium on Design, Operation and Control of Chemical Plants. Taipei, China: IEEE, 2002. 319–324
- 65 Ge Z Q, Song Z H. Process monitoring based on independent component analysis-principal component analysis (ICA-PCA) and similarity factors. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 2007, **46**(7): 2054–2063
- 66 He N, Wang S Q, Xie L. An improved adaptive multiway principal component analysis for monitoring streptomycin fermentation. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 2004, **12**(1): 96–101
- 67 Martin E B, Morris A J. Non-parametric confidence bounds for process performance monitoring charts. *Journal of Process Control*, 1996, **6**(6): 349–358
- 68 Levinson W A. Approximate confidence limits for  $C_{pk}$  and control limits form non-normal process capabilities. *Quality Engineering*, 1997, **9**(4): 635–640
- 69 Chen Q, Wynne R J, Goulding P, Sandoz D. The application of principal component analysis and kernel density estimation to enhance process monitoring. *Control Engineering Practice*, 2000, **8**(5): 531–543



- 70 Lee J M, Qin S J, Lee I B. Fault detection and diagnosis based on modified independent component analysis. *American Institute of Chemical Engineers Journal*, 2006, **52**(10): 3501–3514
- 71 Kramer M A. Nonlinear principal component analysis using autoassociative neural networks. *American Institute of Chemical Engineers Journal*, 1991, **37**(2): 233–243
- 72 Dong D, McAvoy T J. Nonlinear principal component analysis based on principal curves and neural networks. *Computers and Chemical Engineering*, 1996, **20**(1): 65–78
- 73 Kerschen G, Golvinval J C. Non-linear generalization of principal component analysis: from a global to a local approach. *Journal of Sound and Vibration*, 2002, **254**(5): 867–876
- 74 Widodo A, Yang B S. Application of nonlinear feature extraction and support vector machines for fault diagnosis of induction motors. *Expert Systems with Applications*, 2007, **33**(1): 241–250
- 75 Lee J M, Yoo C K, Lee I B. Fault detection of batch processes using multiway kernel principal component analysis. *Computers and Chemical Engineering*, 2004, **28**(9): 1837–1847
- 76 Cho H W. Identification of contributing variables using kernel-based discriminant modeling and reconstruction. *Expert Systems with Applications*, 2007, **33**(2): 274–285
- 77 Zhang Y W, Qin S J. Fault detection of nonlinear process using multiway kernel independent component analysis. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 2007, **46**(23): 7780–7787
- 78 Scholkopf B, Mika S, Burges C J C, Knirsch P, Muller K R, Ratsch G. Input space versus feature space in kernel-based methods. *IEEE Transactions on Neural Networks*, 1999, **10**(5): 1000–1017
- 79 Cui P L, Li J H, Wang G Z. Improved kernel principal component analysis for fault detection. *Expert Systems with Applications*, 2008, **34**(2): 1210–1219
- 80 Zhao C H, Gao F R, Wang F L. Nonlinear batch process monitoring using phase-based kernel independent component analysis-principal component analysis (KICA-PCA). *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 2009, **48**(20): 9163–9174
- 81 Zhao C H, Wang F L, Lu N Y, Jia M X. Stage-based soft-transition multiple PCA modeling and on-line monitoring strategy for batch processes. *Journal of Process Control*, 2007, **17**(9): 728–741
- 82 Westerhuis J A, Kourti T, Macgregor J F. Analysis of multi-block and hierarchical PCA and PLS models. *Journal of Chemometrics*, 1998, **12**(5): 301–321
- 83 Lu N Y, Gao F R, Yang Y, Wang F L. PCA-based modeling and on-line monitoring strategy for uneven-length batch processes. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 2004, **43**(13): 3343–3352
- 84 Camacho J, Pico J, Ferrer A. Multi-phase analysis framework for handling batch process data. *Journal of Chemometrics*, 2008, **22**(11-12): 632–643
- 85 Liu J L, Wong D S H. Fault detection and classification for a two-stage batch process. *Journal of Chemometrics*, 2008, **22**(6): 385–398
- 86 Lu N Y, Yang Y, Wang F L, Gao F R. A stage-based monitoring method for batch process with limited reference data. In: *Proceedings of the International Symposium on Dynamics and Control of Process Systems*. Boston, USA: IEEE, 2004. 471–476
- 87 Zhao C H, Wang F L, Mao Z Z, Lu N Y, Jia M X. Adaptive monitoring based on ICA for multi-phase batch processes with limited modeling data. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 2008, **47**(9): 3104–3113
- 88 Yao Y, Gao F. Phase and transition based batch process modeling and online monitoring. *Journal of Process Control*, 2009, **19**(5): 816–826
- 89 Zhao Chun-Hui. *Statistical Modeling, Online Monitoring and Quality Prediction for Multiphase Batch Processes* [Ph. D. dissertation], Northeastern University, China, 2004 (赵春晖. 多时段间歇过程统计建模、在线监测及质量预报 [博士学位论文], 东北大学, 中国, 2004)
- 90 Zhao C H, Wang F L, Mao Z Z, Lu N Y, Jia M X. Quality prediction based on phase-specific average trajectory for batch processes. *American Institute of Chemical Engineers Journal*, 2008, **54**(3): 693–705
- 91 Reinikainen S P, Hskuldsson A. Multivariate statistical analysis of a multi-step industrial processes. *Analytica Chimica Acta*, 2007, **595**(1-2): 248–256
- 92 Zhao C H, Wang F L, Gao F R. Improved calibration investigation using phase-wise local and cumulative quality interpretation and prediction. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2009, **95**(2): 107–121



赵春晖 东北大学博士研究生。主要研究方向为基于多元统计技术的过程监测、故障诊断及质量预测。

E-mail: huihuizh@gmail.com

(ZHAO Chun-Hui Ph. D. candidate at Northeastern University. Her research interest covers multivariate statistical process monitoring, fault diagnosis, and quality prediction.)

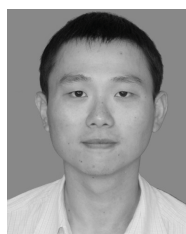


王福利 东北大学教授。主要研究方向为复杂工业过程建模与优化、故障诊断。本文通信作者。

E-mail: flwang@mail.neu.edu.cn

(WANG Fu-Li Professor at Northeastern University. His research interest covers modeling and optimization of complex system, and fault diagnosis.

Corresponding author of this paper.)



姚远 香港科技大学化工系博士研究生。主要研究方向为多元统计过程监测、故障诊断。

E-mail: edmundyao@hotmail.com

(YAO Yuan Ph. D. candidate in the Department of Chemical and Biomolecular Engineering, Hong Kong University of Science and Technology. His research interest covers multivariate statistical process monitoring and fault diagnosis.)



高福荣 香港科技大学化工系教授。主要研究方向为过程建模、控制和监测。

E-mail: kefgao@ust.hk

(GAO Fu-Rong Professor in the Department of Chemical and Biomolecular Engineering, Hong Kong University of Science and Technology. His research interest covers process modeling, control and monitoring.)