

基于 k 近邻主元得分差分的故障检测策略

张成^{1,2} 高宪文¹ 李元²

摘要 针对具有非线性和多模态特征过程的故障检测问题, 本文提出一种基于 k 近邻主元得分差分的故障检测策略. 首先, 通过主元分析 (Principal component analysis, PCA) 方法计算样本的真实得分. 然后, 应用样本的 k 近邻均值计算样本估计得分. 接下来, 通过上述两种得分计算样本的得分差分矩阵和残差矩阵, 其中残差矩阵由样本的估计得分计算得到, 这区别于传统方法. 最后, 在差分子空间和残差子空间中分别建立新的统计指标进行故障检测. 值得注意的是本文的得分差分方法能够消除数据结构对过程故障检测的影响, 同时, 新的统计量能够提高过程的故障检测率. 将本文方法在两个模拟例子和 Tennessee Eastman (TE) 过程中进行测试, 并与传统方法如 PCA、KPCA、DPCA 和 FD- k NN 等进行对比分析, 测试结果证明了本文方法的有效性.

关键词 主元分析, 得分差分, k 近邻, 多模态过程, TE 过程, 故障检测

引用格式 张成, 高宪文, 李元. 基于 k 近邻主元得分差分的故障检测策略. 自动化学报, 2020, 46(10): 2229–2238

DOI 10.16383/j.aas.c180163

Fault Detection Strategy Based on Principal Component Score Difference of k Nearest Neighbors

ZHANG Cheng^{1,2} GAO Xian-Wen¹ LI Yuan²

Abstract In order to monitor a process with nonlinear and multimode characteristics effectively, this paper presents a novel fault detection method using principal component score difference based on k nearest neighbors. In the proposed method, firstly, real scores of samples are calculated through principal component analysis (PCA) method. Next, estimated scores of samples are calculated using the mean of k nearest neighbors through a linear transformation. After that a score difference matrix can be obtained through calculating the difference between the real scores and the estimated scores; meanwhile, a residual matrix can be also obtained by reconstructing a sample using the estimated scores. At last, two new statistics are built to monitor the variability of a sample in the score difference subspace (SDS) and residual subspace (RS), respectively. It should be noted that the proposed difference method is able to eliminate the impact of data structure on process monitoring and the new statistics can improve fault detection rate of a process. The efficiency of the proposed method in this paper is tested in two simulated cases and in the Tennessee Eastman (TE) processes. The experimental results indicate that the proposed method outperforms the conventional methods, such as PCA, KPCA, DPCA, and FD- k NN.

Key words Principal component analysis (PCA), difference of scores, k nearest neighbors (k NN), multimode process, Tennessee Eastman (TE) processes, fault detection

Citation Zhang Cheng, Gao Xian-Wen, Li Yuan. Fault detection strategy based on principal component score difference of k nearest neighbors. *Acta Automatica Sinica*, 2020, 46(10): 2229–2238

在现代化生产过程中, 有效的故障检测方法能够保障生产安全和提高生产效率. 由于生产过

程中多变量数据可以由分布式控制系统进行采集, 因此, 许多基于数据驱动的多变量统计过程控制 (Multivariate statistical process control, MSPC) 方法已经得到了广泛应用并取得了可喜的成果^[1–2].

主元分析 (Principal component analysis, PCA) 作为一种典型的 MSPC 方法已经成功地被应用到生产过程的故障检测领域中并取得良好的效果^[3–4]. PCA 通过对监控变量实施线性变换并依据累积百分比方差 (Cumulative percent variance, CPV) 将输入空间分解为主元子空间 (Principal component subspace, PCS) 和残差子空间 (Residual subspace, RS). 在 PCS 和 RS 中, 分别应用 T^2

收稿日期 2018-03-22 录用日期 2018-07-05
Manuscript received March 22, 2018; accepted July 5, 2018
国家自然科学基金 (61490701, 61573088, 61673279), 辽宁省自然科学基金 (2015020164) 资助
Supported by National Natural Science Foundation of China (61490701, 61573088, 61673279) and National Natural Science Foundation of Liaoning Province (2015020164)
本文责任编辑 刘允刚
Recommended by Associate Editor LIU Yun-Gang
1. 东北大学信息科学与工程学院 沈阳 110819 2. 沈阳化工大学技术过程故障诊断与安全性研究中心 沈阳 110142
1. College of Information Science and Engineering, Northeastern University, Shenyang 110819 2. Research Center for Technical Process Fault Diagnosis and Safety, Shenyang University of Chemical Technology, Shenyang 110142

和平方预测误差 (Square prediction error, SPE) 两个统计量实现对样本状态 (正常或故障) 的监控^[4]. 近年来, 基于 PCA 的不同故障检测策略已经被提出, 如核主元分析 (Kernel PCA, KPCA)^[5] 和动态主元分析 (Dynamic PCA, DPCA)^[6]. KPCA 是指首先通过非线性变换将输入空间映射至高维特征空间 (Feature space, FS), 然后在 FS 中执行 PCA 方法进行故障检测^[7]. 由于 KPCA 能够捕获过程的非线性特征, 故它更适合非线性过程的故障检测^[8]. DPCA 是考虑到过程的动态特征而被提出的. 在 DPCA 方法中, 首先通过增广过程时间序列的方法将样本的动态特征转换为变量静态特征, 然后应用静态 PCA 实现对过程动态和静态特征的同步提取^[9]. 需要注意的是上述基于 PCA 的不同方法首先对样本数据进行适当处理, 然后执行 PCA 故障检测. 故障检测过程仍然应用 T^2 和 SPE 两个统计量对过程进行监控. T^2 和 SPE 适用于单模态过程故障检测, 并且在故障检测过程中通常假设过程变量是独立同分布^[10]. 当得分变量存在多模态结构或非线性相关时, T^2 和 SPE 控制图通常具有较低的故障检测率 (Fault detection rate, FDR) 或较高的误报率 (False alarm rate, FAR)^[11].

针对非线性和多模态过程故障检测问题, He 等提出应用 k 近邻规则的故障检测 (Fault detection using the k -nearest neighbor rule, FD- k NN) 方法^[12]. FD- k NN 首先在训练集中依据欧氏距离查找样本的 k 近邻集, 然后以样本与其 k 近邻的距离之和作为统计指标进行过程监控. 该方法能够降低过程的非线性和多模态等特征对故障检测的影响, 相比传统的基于 PCA 的不同方法具有较高的故障检测性能^[12]. 与传统多模型方法相比^[13-14], FD- k NN 在多模态过程中只需要建立一个模型即可完成过程的故障检测, 它是一种更加适合多模态过程故障检测的单模型方法. 考虑到 FD- k NN 中查找 k 近邻计算的复杂度, 一种基于主元的 k 近邻规则 (Principal component-based k nearest neighbor rule, PC- k NN) 被提出^[15]. 该方法只在主元空间执行 k 近邻规则进行故障检测. 由于少量主元参与查找样本 k 近邻的计算, 因此相比 FD- k NN, PC- k NN 具有高效性. 然而, FD- k NN 和 PC- k NN 方法具有相应的局限性^[16]. 首先, 在多模态过程中如果模态方差结构差异明显, 即存在密集模态和稀疏模态, 这时密集模态的小尺度故障通常不能被上述方法检测. 其次, PC- k NN 方法只监视了样本在 PCS 中的变化, 一旦故障完全发生在 RS 中该方法是无效的.

针对具有非线性和多模态特征过程的故障检测问题, 本文提出一种基于 k 近邻主元得分差分的故障检测策略 (Fault detection strategy based on

principal component score difference of k nearest neighbors, k Diff-PCA). 在 k Diff-PCA 中, 首先在训练集中查找样本的 k 近邻集并计算该集合的均值样本; 然后, 应用 PCA 计算训练集的主元负载矩阵, 同时计算样本与其均值样本的主元得分向量; 接下来, 计算每个样本的得分差分向量并获得过程的差分子空间; 最后, 在差分子空间计算新的统计量进行过程监控. 在样本残差的计算中, 本文应用上述均值样本的得分对测试样本进行重构, 该过程区别于传统的残差计算方法.

1 主元分析

假设 $X_{m \times n}$ 为训练集合, 其中 m 和 n 分别为样本数和监控变量数. 在 PCA 中, 首先通过式 (1) 计算 X 的协方差矩阵 C .

$$C = \frac{1}{m-1} X^T X \quad (1)$$

接下来, 将协方差矩阵 C 进行特征值分解, 记 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ 为按照降序排列的特征值, $P = [\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_n]$ 为与特征值相对应的特征向量矩阵. 然后, 通过 CPV 确定主元数 r 同时获得主元负载矩阵 $P_r = [\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_r]$. 于是, X 的得分矩阵可表示为 $T = XP_r$ 且 X 可以被分解为以下形式:

$$X = TP_r^T + E \quad (2)$$

其中, E 为残差矩阵.

在故障检测过程中, PCA 方法应用 T^2 和 SPE 统计量分别监控样本在 PCS 和 RS 中的状态 (正常或故障).

$$T^2 = \mathbf{t} \Lambda^{-1} \mathbf{t}^T \quad (3)$$

$$SPE = \mathbf{e} \mathbf{e}^T \quad (4)$$

其中, $\mathbf{t} = \mathbf{x} P_r$ 为样本 \mathbf{x} 的得分向量; Λ 为前 r 个特征值构成的对角矩阵; $\mathbf{e} = \mathbf{x} - \mathbf{t} P_r^T$ 为样本 \mathbf{x} 的残差向量. 当变量服从多元高斯分布时, T^2 和 SPE 的控制限可以由式 (5) 和式 (6) 确定^[17].

$$T_{UCL}^2 = \frac{r(m-1)(m+1)}{m(m-r)} F_{r, m-r; \alpha} \quad (5)$$

$$SPE_{UCL} = g \cdot \chi_{h; \alpha}^2 \quad (6)$$

2 基于 k 近邻主元得分差分的故障检测策略

由于 PCA 方法通常不能有效捕获过程的非线性和多模态特征, 因此其在具有上述特征的过程中进行故障检测时, 通常不能获得令人满意的检测结果. 当主元子空间中存在非线性或多模态结构时, 传统的 T^2 统计量具有较低的故障检测率. 主要原因是

在高维子空间中 T^2 统计量的控制限具有超椭圆结构, 这种超椭圆结构虽然能够准确检测过程的正常样本, 但是其对过程部分故障会产生误判. 此外, 由式 (4) 可知 SPE 用于监控样本残差的变化, 而式 (4) 可整理成如下形式:

$$SPE = (\mathbf{x}PP^T - tP_r^T)(\mathbf{x}PP^T - tP_r^T)^T = [\mathbf{t} \mathbf{t}_R][\mathbf{t} \mathbf{t}_R]^T - 2\mathbf{t}\mathbf{t}^T + \mathbf{t}\mathbf{t}^T = \mathbf{t}_R\mathbf{t}_R^T \quad (7)$$

其中, \mathbf{t}_R 为样本的残差得分向量. 由式 (7) 可知, 从本质上看, SPE 计算的是样本残差得分到中心的平方欧氏距离. 当样本残差得分分布平稳时, 使用这种距离对过程监控是有效的. 然而, 如果残差得分分布差异较大且故障由分布平稳得分的异常变化引起, 那么这种故障通常不能被 SPE 控制图检测.

为了降低非线性和多模态特征对 PCA 故障检测的影响和提高 PCA 的过程故障检测率, 本节提出一种基于 k 近邻主元得分差分的故障检测方法.

首先, 计算样本 \mathbf{x} 的主元得分向量 \mathbf{t} . 其次, 在训练集 X 中应用 k 近邻规则查找 \mathbf{x} 的 k 近邻样本 $\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots, \mathbf{x}^{(k)}$, 并计算 k 近邻样本均值 \mathbf{m} 的得分向量 $\mathbf{t}^{[m]}$.

$$\mathbf{m} = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k \mathbf{x}^{(i)} \quad (8)$$

$$\mathbf{t}^{[m]} = \mathbf{m}P_r \quad (9)$$

接下来, 计算 \mathbf{x} 的主元得分 \mathbf{t} 与 k 近邻估计得分 $\mathbf{t}^{[m]}$ 的差分向量 \mathbf{s} , 如式 (10) 所示.

$$\mathbf{s} = \mathbf{t} - \mathbf{t}^{[m]} = (\mathbf{x} - \mathbf{m})P_r \quad (10)$$

由式 (10) 可以看出, \mathbf{s} 本质上在衡量样本 \mathbf{x} 与其近邻中心 \mathbf{m} 的差异. 由几何知识可知, 向量 \mathbf{x} 与 \mathbf{m} 的差 $\mathbf{x} - \mathbf{m}$ 表达的是一个起点为 \mathbf{m} 终点为 \mathbf{x} 的向量. 这种差运算能够消除样本相对于坐标原点的差异, 同时可以获得样本相对于近邻的变化信息^[12, 15]. 综上, 通过差分方法得到的差分向量 \mathbf{s} 不包含过程的结构信息. 换句话说, 差分方法能够降低多模态或非线形结构对过程故障检测的影响.

最后, 根据式 (11) 计算统计量 T_{diff}^2 ,

$$T_{\text{diff}}^2 = \mathbf{s} \Sigma_s^{-1} \mathbf{s}^T \quad (11)$$

其中, Σ_s 为训练样本得分差分矩阵 S 的协方差矩阵. 在残差子空间建立如下统计量:

$$q_{\text{diff}} = (\mathbf{x} - \mathbf{t}^{[m]}P_r^T)\Sigma_e^{-1}(\mathbf{x} - \mathbf{t}^{[m]}P_r^T)^T \quad (12)$$

其中, Σ_e 是残差矩阵 $E = X - T^{[m]}P_r^T$ 的协方差矩阵.

由式 (10) 可知, 数据集 S 具有中心在差分子空间坐标原点的单模态结构, 若假设得分差分向量满

足多元高斯分布, 则 T_{diff}^2 的控制限可依据式 (5) 进行确定. 对于 q_{diff} , 式 (12) 可以改写成如下形式:

$$q_{\text{diff}} = [(\mathbf{x} - \mathbf{m}) + \mathbf{e}_m]\Sigma_e^{-1}[(\mathbf{x} - \mathbf{m}) + \mathbf{e}_m]^T \quad (13)$$

其中, \mathbf{e}_m 为样本近邻均值的残差. 若假设 $\mathbf{e} = (\mathbf{x} - \mathbf{m}) + \mathbf{e}_m$ 近似服从多元高斯分布, 同样 q_{diff} 的控制限也可以由式 (5) 进行确定. 为了方便, T_{diff}^2 和 q_{diff} 的控制限也可以应用核密度方法 (Kernel density estimation, KDE) 进行确定^[18]. KDE 方法在控制限的确定过程中已经得到了广泛的应用^[19-21].

本文方法故障检测过程包含两步: 离线建模和在线检测.

1) 离线建模

步骤 1. 第一步: 应用式 (1) 和式 (2) 计算训练数据的得分矩阵 T 及负载矩阵 P_r ;

步骤 2. 应用式 (8) 计算训练样本 \mathbf{x} 的 k 近邻均值向量 \mathbf{m} , 记训练集的 k 近邻均值矩阵为 M ; 应用式 (9) 计算训练集的得分估计矩阵 $T^{[m]} = MP_r$;

步骤 3. 应用式 (10) 计算训练集得分差分矩阵 $S = T - T^{[m]}$, 并计算 S 的协方差矩阵 Σ_s ;

步骤 4. 应用式 (11) 和式 (12) 计算训练样本的 T_{diff}^2 和 q_{diff} 并确定控制限 T_{diffUCL}^2 和 q_{diffUCL} .

2) 在线检测

对于测试样本 \mathbf{x} ,

步骤 1. 计算 \mathbf{x} 的得分向量 \mathbf{t} ;

步骤 2. 应用式 (8) 计算 \mathbf{x} 的 k 近邻均值向量 \mathbf{m} 并应用式 (9) 计算 \mathbf{x} 的估计得分 $\mathbf{t}^{[m]}$;

步骤 3. 应用式 (10) 计算 \mathbf{x} 的得分差分向量 \mathbf{s} 并应用式 (11) 和式 (12) 计算 T_{diff}^2 和 q_{diff} ;

步骤 4. 若 $T_{\text{diff}}^2 > T_{\text{diffUCL}}^2$ 或 $q_{\text{diff}} > q_{\text{diffUCL}}$, \mathbf{x} 为故障样本; 否则, \mathbf{x} 为正常样本.

需要注意的是本文方法中 T_{diff}^2 统计量不同于 PC- k NN 和 PCA 中的 D^2 (式 (14)) 与 T^2 统计量.

$$D^2 = \sum_{i=1}^k (\mathbf{t} - \mathbf{t}^{(i)})(\mathbf{t} - \mathbf{t}^{(i)})^T \quad (14)$$

与 PC- k NN 相比, 本文方法虽然同样应用 k 近邻规则, 但只是应用该规则进行样本主元得分的估计. 由式 (11) 和式 (14) 可以看出, 本文方法应用 T_{diff}^2 监控样本在得分差分子空间中的变化, 而 PC- k NN 应用 D^2 监控样本在主元子空间中的变化. 同样, 虽然 T_{diff}^2 与 T^2 具有相似结构, 但两者在不同的子空间 (差分子空间和主元子空间) 监控样本的变化. 另外, 本文方法中的残差统计量 q_{diff} 不同于 SPE 统计量. 由式 (4) 和式 (13) 可以看出 q_{diff} 和 SPE 分别通过 $\mathbf{t}^{[m]}$ 和 \mathbf{t} 对样本进行重构.

3 仿真实验

3.1 非线性例子

在本节中, 通过一个非线性数值例子^[12, 22] 证明 k Diff-PCA 的有效性. 该例共包含 6 个监控变量, 其中前两个变量 x 和 y 满足如下关系:

$$y = x^2 + e \tag{15}$$

其中, 变量 x 在 $[-5, 5]$ 服从均匀分布, e 是 $[0, 2]$ 上的均匀噪声序列. 余下变量为均值为 0 和方差为 0.1 的高斯白噪声. 本例中, 200 个正常样本用于模型训练. 测试集同样包含 200 个样本, 其中前 100 个为在正常条件下采集的校验样本, 余下的为通过对变量 y 增加扰动生成的故障点, 样本散点图如图 1 所示.

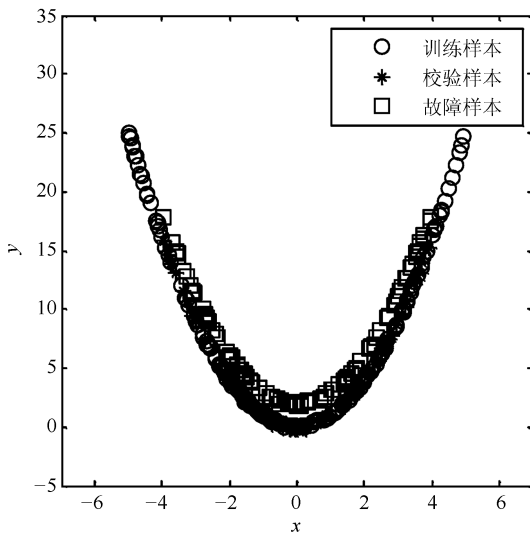


图 1 非线性例子: 样本散点图

Fig.1 Nonlinear case: scatter plots of samples

为了验证本文方法的有效性, 在本节中将基于 PCA 的方法, 如 $PCA-T^2$ 、 $PCA-SPE$ 、 $KPCA-T^2$ 和 $KPCA-SPE$ 等对本例进行测试. 同时, 适用于非线性和多模态过程故障检测的方法 $FD-kNN$ 在本例中也被测试. 通过 $CPV = 85\%$ 确定 PCA 和 KPCA 的主元数分别为 2 和 6, 其中 KPCA 中核函数选择高斯核函数 $K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \exp(-\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2/\beta)$ 且窗宽参数 $\beta = 30$. 通过寻优测试, $FD-kNN$ 和本文方法中的近邻数 $k = 3$. 以上方法均采用 99% 的控制限进行故障检测.

图 2 给出 $PCA-T^2$ 和 $PCA-SPE$ 的故障检测结果. 虽然 PCA 能够捕获过程方差变化的方向, 但是其使用的统计量 T^2 并不适用于具有非线性结构过程的故障检测. 因此, $PCA-T^2$ 和 $PCA-SPE$ 的故障检测率为 0. 适用于非线性过程故障检测的

KPCA 方法在本例中故障检测结果如图 3 所示. 图 4 给出 KPCA 中前 4 个主元得分的等高线及训练样本和故障样本的分布. 由图 4 可以看出, KPCA 应用非线性映射能够捕获训练数据的非线性结构. 但是由于故障样本具有较小的偏离尺度且具有训练数据的非线性结构, 因此从主元得分的角度观察仍然不能将训练样本与故障样本分离. 综上, KPCA 在本例中的故障检测率为 0.

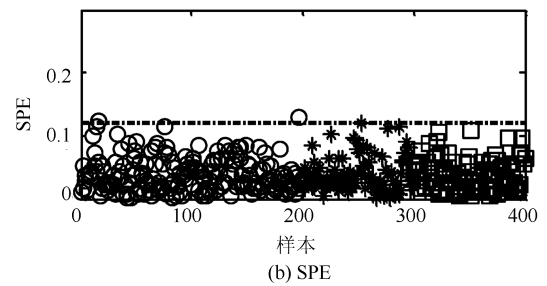
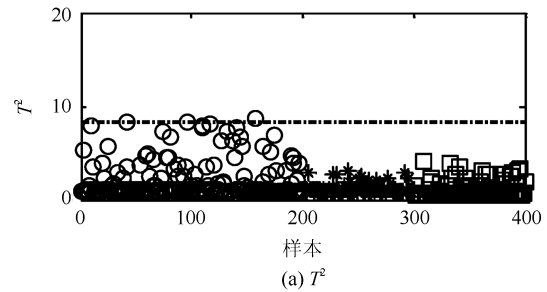


图 2 PCA 检测结果

Fig.2 Detection results using PCA

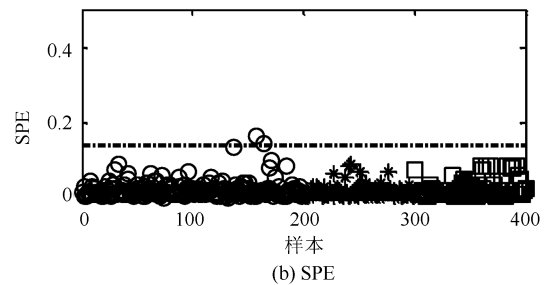
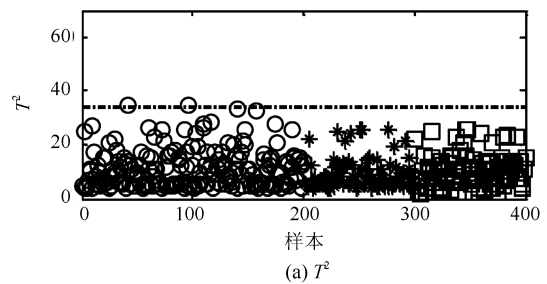


图 3 KPCA 检测结果

Fig.3 Detection results using KPCA

图 5 给出 $FD-kNN$ 方法在本例中的故障检测结果. 可以看出, $FD-kNN$ 方法并不能有效识别过程故障且故障检测率为 0. 主要原因是 $FD-kNN$ 方

法适用于非线性过程大尺度故障的检测, 其对过程的小尺度故障检测通常具有较高的漏报率. 本文方法的故障检测结果如图 6 所示. 综合检测结果分析, 本文方法的故障检测率达到 99% 且高于其他的传统方法. 在本文方法中, 由于差分方法既能够消除主元空间的非线性结构, 又能够增大过程离群点偏离训练样本轨迹的尺度, 因此本文方法具有最高的故障检测率.

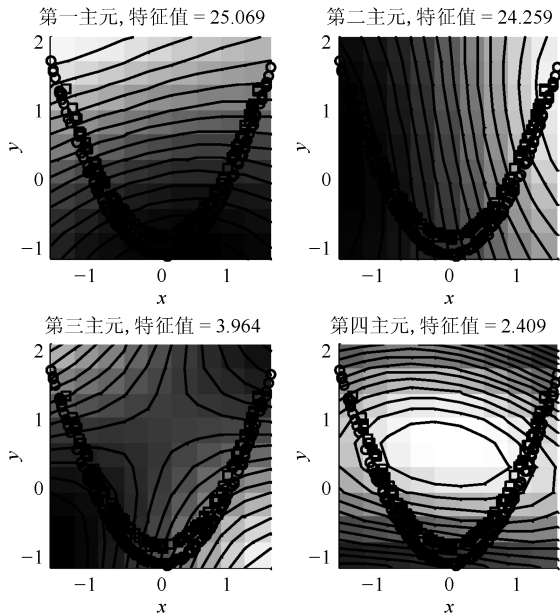


图 4 KPCA 前 4 个主元等高线

Fig. 4 Contourlines of the first four PCs in KPCA

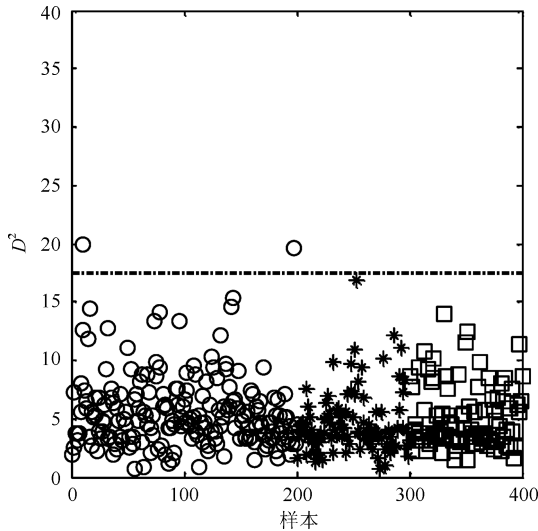


图 5 FD-kNN 检测结果

Fig. 5 Detection results using FD-kNN

3.2 多模态例子

本节引用的多模态例子^[22] 包含两个模态, 每个

样本包含 4 个监控变量. 主要模型如下:

$$\begin{aligned}
 M_1 & \begin{cases} x = t + e, \\ y = 2t + e, \end{cases} & t \sim U(-1, 1) \\
 M_2 & \begin{cases} x = t + e, \\ y = 50 + 2t + e, \end{cases} & t \sim U(-5, 5)
 \end{aligned} \tag{16}$$

其中, x 和 y 为过程主要变量, 余下变量为随机噪声. 训练集包含 200 个样本, 其中前 100 个由模态 1 (M_1) 产生, 余下的由模态 2 (M_2) 产生. 校验集包含 100 个样本, 其中前 50 个由 M_1 随机生成, 余下的由 M_2 生成. 在模态 M_1 中, 通过对变量 y 增加扰动, 生成 100 个故障样本. 训练样本 (o), 校验样本 (*) 和故障样本 (□) 关于变量 x 和 y 的散点图如图 7 所示.

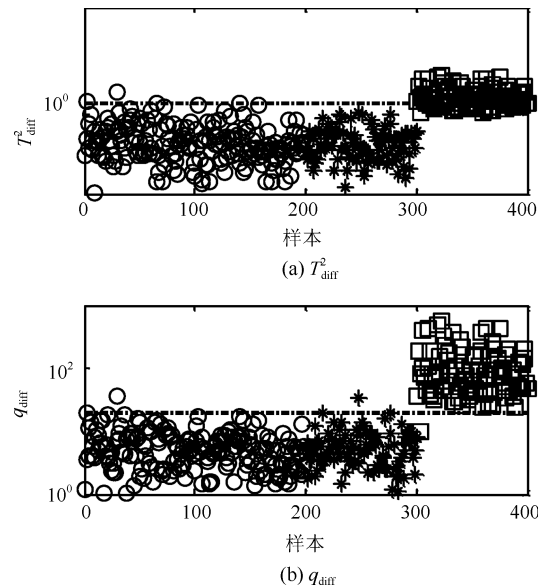


图 6 k Diff-PCA 检测结果

Fig. 6 Results using k Diff-PCA

在该例中, 传统的 PCA 方法, PC- k NN 方法及本文方法被测试. 各种方法的参数设置和故障检测率和误报率见表 1.

表 1 参数设置, 故障检测率和误报率

Table 1 Setting of parameters, FDR and FAR

方法	PCs	k	FDR	FAR
PCA	2	—	0	0
PC- k NN	2	3	85	0
本文方法	2	5	100	0

图 8 给出 PCA 方法对本例的故障检测结果. 可以看出, PCA 方法对本例的故障检测是无效的. 主要原因是在 PCA 方法中确定统计量 T^2 控制限时通常假设过程的得分变量服从独立高斯分布, 而由

于本例中存在明显的多模态结构, 因此过程得分变量并不满足上述假设条件 (如图 9 所示), 从而降低了 PCA 方法的故障检测率。

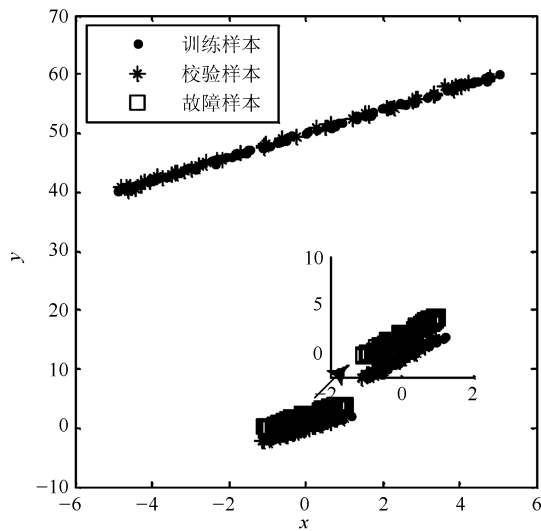


图 7 多模态例子: 样本散点图

Fig. 7 Multimodal case: scatter plots of samples

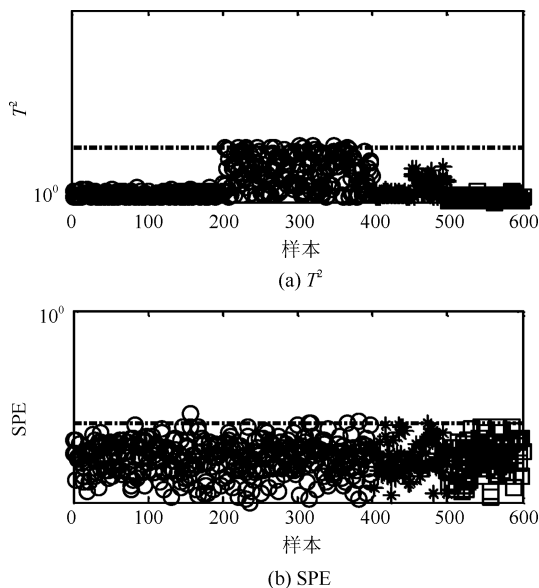


图 8 PCA 检测结果

Fig. 8 Detection results using PCA

考虑到主元子空间仍然存在多模态结构, 因此基于主元的 k 近邻方法即 PC- k NN 在本例中进行了测试, 检测结果见图 10. 可以看出, 相比 PCA 方法, PC- k NN 方法的故障检测率大幅度提高. 由于本例中两个模态数据的方差结构差异明显, 即第二个模态的分散程度明显高于第一模态, 因此第二模态样本的 D^2 值显著大于第一模态的 D^2 . 为了更好地监控过程变化, D^2 的控制限完全由第二模态的 D^2 值所决定且其明显大于第一模态的 D^2 值. 综上,

当第一模态发生故障且故障尺度较小时, 故障样本的 D^2 值被第二模态的 D^2 值所淹没. 因此, D^2 控制图中依旧存在故障漏报情形, 其漏报率为 15%.

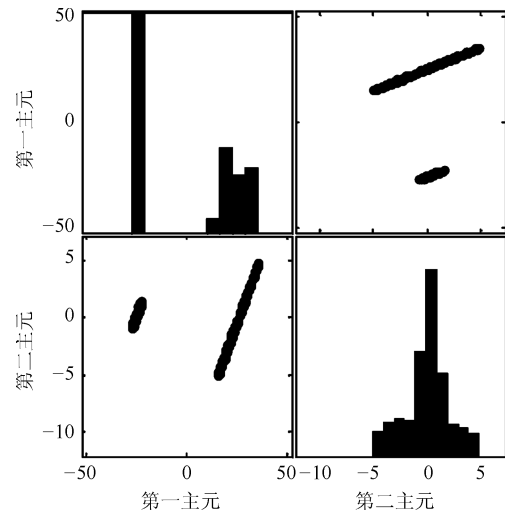


图 9 多模态例子: 得分散点图

Fig. 9 Multimodal case: scatter plots of scores

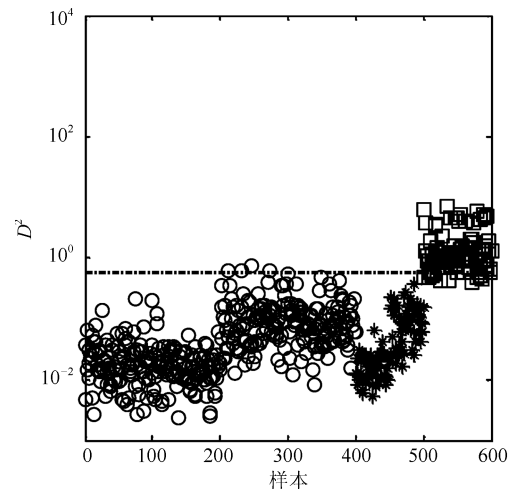


图 10 PC- k NN 检测结果

Fig. 10 Detection results using PC- k NN

本文方法的故障检测结果见图 11. 可以看出, 本文方法的故障检测率达到 100%. 图 12 给出本文方法中样本在差分子空间的分布. 可以看出, 本文方法中的差分处理方式能够消除过程多模态的分布特征, 同时使得故障点偏离正常轨迹的特征得到保持且被强化. 因此, 本文方法具有最优的检测性能。

4 TE 过程

TE (Tennessee Eastman) 过程是 Downs 等人基于 Tennessee Eastman 化学公司实际化工生产过程提出的一个仿真模型^[21]. 由于该过程能够较好地模拟实际化工过程的典型特征, 因此其被作为

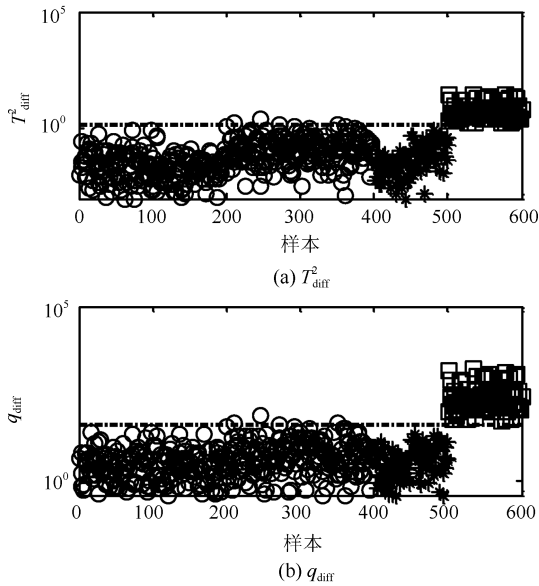


图 11 k Diff-PCA 检测结果
Fig. 11 Results using k Diff-PCA

仿真例子广泛应用于过程监控与故障诊断的研究中^[21-23]. 图 13 给出 TE 过程所包含的 5 个操作单元. TE 数据集包含 22 个连续测量变量, 19 个成分测量变量及 11 个控制变量. 在本节中, 依据文献^[21] 选取 33 个变量 (22 个连续测量变量和 11 个控制变量) 对故障进行分析. TE 仿真器可以模拟两种工作环境, 即模态 1 和模态 3^[24]. 在本节中, 训练数据集由模态 1 和模态 3 的 2000 个正常样本构成, 其

中前 1000 个来自于模态 1, 余下的来自模态 3. 应用本文方法及传统方法分别对模态 1 的故障 8 (本节记为 F_1) 和 10 (F_2) 及模态 3 的故障 5 (F_3), 8 (F_4) 与 10 (F_5) 进行了故障检测, 各种故障均包含 1000 个样本且故障由 200 时刻引入并持续到过程结束.

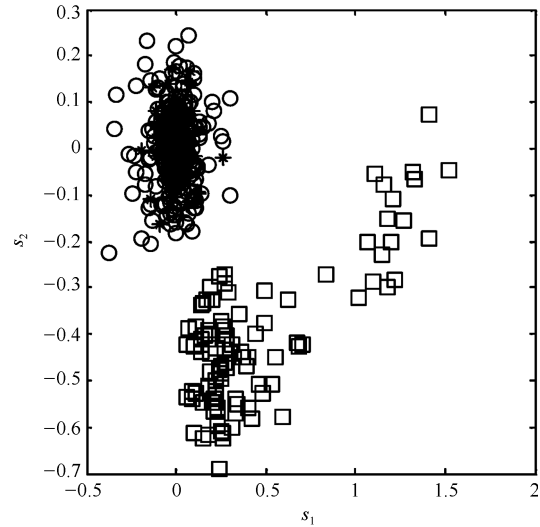


图 12 样本得分差分散点图
Fig. 12 Scatter plots of score difference of samples

在本例中, 基于 PCA 不同方法的主元数均通过 $CPV = 85\%$ 进行确定. 在 KPCA 中, 核函数选取为高斯核函数; 在 DPCA 中, 如文献^[21] 中所述,

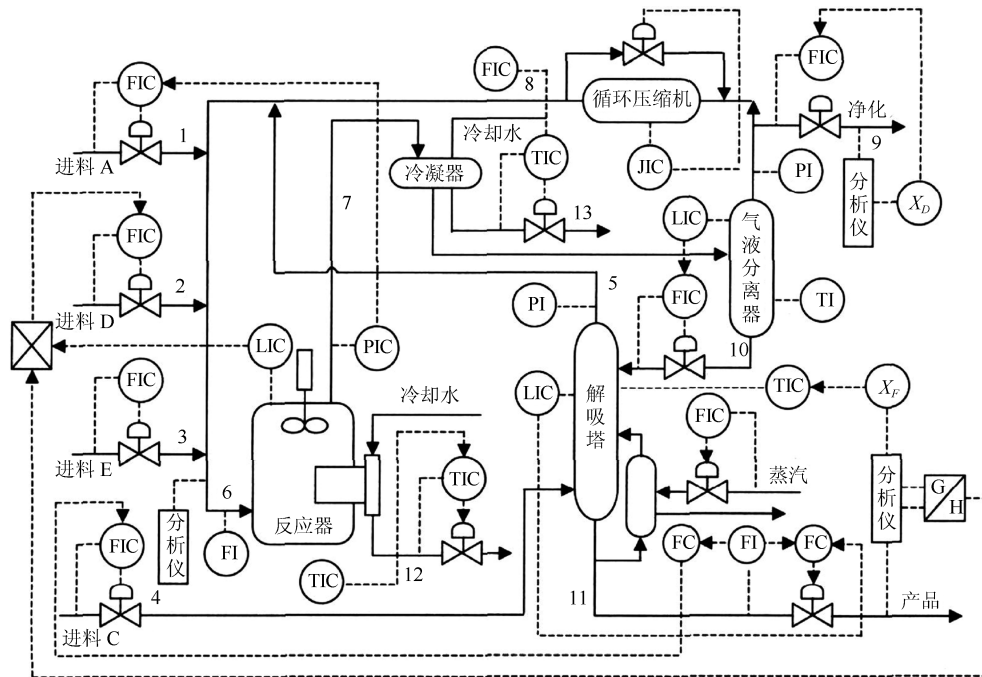


图 13 TE 过程
Fig. 13 Layout of TE process

参数 $\text{lag} = 2$. 各种方法对上述故障的故障检测率和误报率见表 2 和 3. 图 14~18 给出本文方法关于上述故障的故障检测控制图, 注意为了便于观察检测结果, 部分图中数据进行了取对数处理.

表 2 各种方法的故障检测率

Table 2 FDRs using different methods

方法	F ₁	F ₂	F ₃	F ₄	F ₅
PCA- T^2	54.6	0.1	89.4	67.8	3.4
PCA-SPE	79.8	0.6	98.8	76.5	1.4
KPCA- T^2	69.6	1.4	6.1	67.6	0.5
KPCA-SPE	83.5	1.4	65.5	83.5	2
DPCA- T^2	84.1	0	93.5	75.9	4.5
DPCA-SPE	65.8	0.1	88.1	76.6	1.5
T_{diff}^2	87.3	1.5	92.5	72.5	4.8
q_{diff}	92.5	90.3	100	92.5	95.1

表 3 各种方法的故障误报率

Table 3 FARs using different methods

方法	F ₁	F ₂	F ₃	F ₄	F ₅
PCA- T^2	0	0	1.5	1.5	1.5
PCA-SPE	0	0	2.5	2.5	2.5
KPCA- T^2	0.5	0.5	2	2	2
KPCA-SPE	0	0	2.5	2.5	2.5
DPCA- T^2	0	0	3	3	3
DPCA-SPE	0	0	2.5	2.5	2.5
T_{diff}^2	0	0	0.5	0.5	0.5
q_{diff}	0	0	1	1	1

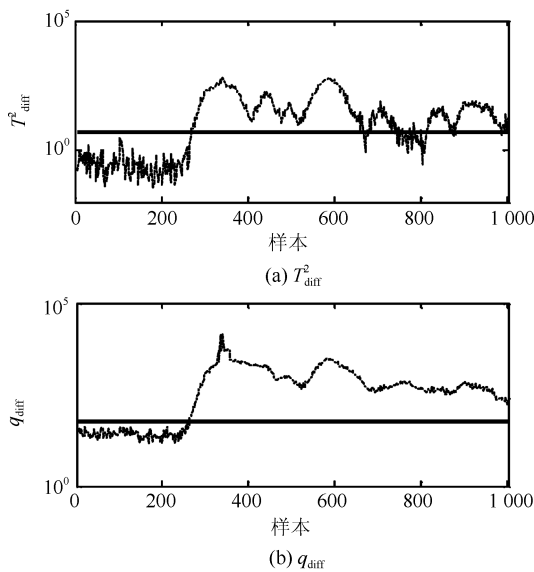


图 14 F₁ 的 $k\text{Diff-PCA}$ 检测结果

Fig. 14 Detection results using $k\text{Diff-PCA}$ of F₁

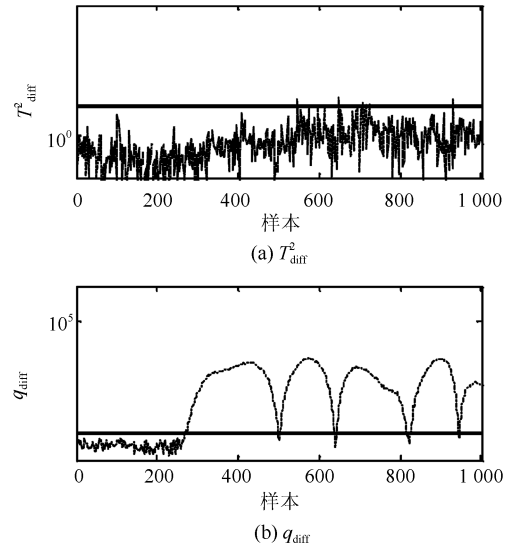


图 15 F₂ 的 $k\text{Diff-PCA}$ 检测结果

Fig. 15 Detection results using $k\text{Diff-PCA}$ of F₂

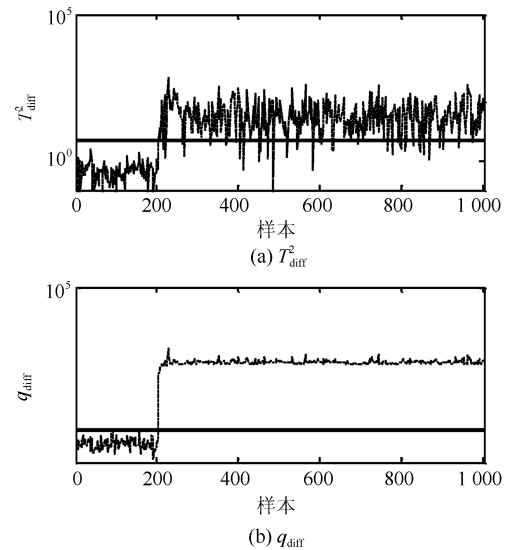


图 16 F₃ 的 $k\text{Diff-PCA}$ 检测结果

Fig. 16 Detection results using $k\text{Diff-PCA}$ of F₃

由表 2 和检测控制图可以看出, 本文方法能够有效识别上述 5 种故障, 故障检测率达到 90% 以上. 特别是对故障 F₃ 的检测率达到 100%. 综合分析, 本文方法在 TE 多模态例子中的故障检测率高于传统的方法. 此外, q_{diff} 的故障检测率高于 T_{diff}^2 和传统的 SPE. 这说明本文应用样本 k 近邻均值得分重构样本的方法能够有效地分离故障且强化故障尺度, 使得上述故障能够被准确检测. 通过本例的检测结果可以看出, 传统的基于 PCA 的不同方法适用于单模态过程检测, 同时这些方法对多模态过程大尺度故障检测是有效的, 如本例中的故障 F₁、F₃ 和 F₄. 本文方法的 k 近邻得分差分策略适用于具有非线性和多模态过程的故障检测; 同时, 相比传统的

KPCA 和 DPCA 方法, 本文方法具有较低的计算复杂度和较高的运算效率. 综上, 本文方法是一种适用于多模态过程故障检测的单模型方法.

方法在间歇生产过程中的应用也是未来的一个研究问题.

References

- Peng Kai-Xiang, Ma Liang, Zhang Kai. Review of quality-related fault detection and diagnosis techniques for complex industrial processes. *Acta Automatica Sinica*, 2017, **43**(3): 349–365
(彭开香, 马亮, 张凯. 复杂工业过程质量相关的故障检测与诊断技术综述. *自动化学报*, 2017, **43**(3): 349–365)
- Su Q L, Chiu M S. Monitoring ph-shift reactive crystallization of l-glutamic acid using moving window MPCA. *Journal of Chemical Engineering of Japan*, 2016, **49**(7): 680–688
- Bakdi A, Kouadri A. A new adaptive PCA based thresholding scheme for fault detection in complex systems. *Chemometrics & Intelligent Laboratory Systems*, 2017, **49**(7): 680–688
- Zhang C, Gao X, Xu T, Li Y, Pang Y. Fault detection and diagnosis strategy based on a weighted and combined index in the residual subspace associated with PCA. *Journal of Chemometrics*. [Online], available: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/cem.2981>, July 1, 2018.
- Xu Y, Liu Y, Zhu Q. Multivariate time delay analysis based local KPCA fault prognosis approach for nonlinear processes. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 2016, **24**(10): 1413–1422
- Ammiche M, Kouadri A, Bensmail A. A modified moving window dynamic PCA with fuzzy logic filter and application to fault detection. *Chemometrics & Intelligent Laboratory Systems*, 2018, **177**(1): 100–113
- Taouali O, Jaffel I, Lahdhiri H. New fault detection method based on reduced kernel principal component analysis (RKPCA). *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 2016, **85**(5-8): 1–6
- Zhang Y, Li S, Hu Z. Improved multi-scale kernel principal component analysis and its application for fault detection. *Chemical Engineering Research & Design*, 2012, **90**(9): 1271–1280
- Rato T J, Reis M S. Fault detection in the Tennessee Eastman benchmark process using dynamic principal components analysis based on decorrelated residuals (DPCA-DR). *Chemometrics & Intelligent Laboratory Systems*, 2013, **125**(7): 101–108
- Wang G, Liu J, Zhang Y. A novel multimode data processing method and its application in industrial process monitoring. *Journal of Chemometrics*, 2015, **29**(2): 126–138
- Rato T J, Reis M S. Advantage of using decorrelated residuals in dynamic principal component analysis for monitoring large-scale systems. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2013, **52**(38): 13685–13698
- He Q P, Wang J. Fault detection using the k-nearest neighbor rule for semiconductor manufacturing processes. *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, 2007, **20**(4): 345–354
- Zhao S J, Zhang J, Xu Y M. Monitoring of processes with multiple operating modes through multiple principle component analysis models. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2004, **43**(22): 7025–7035

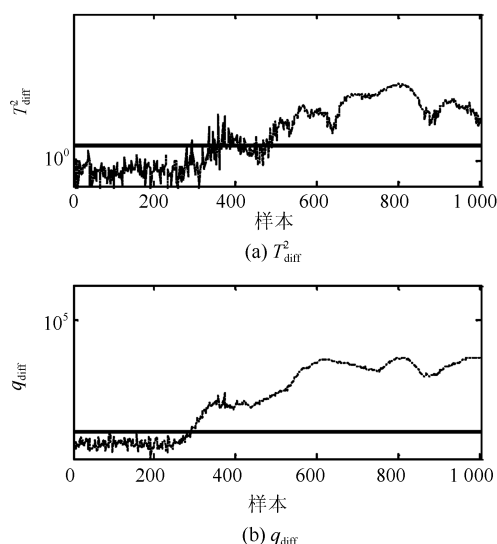


图 17 F_4 的 k Diff-PCA 检测结果

Fig. 17 Detection results using k Diff-PCA of F_4

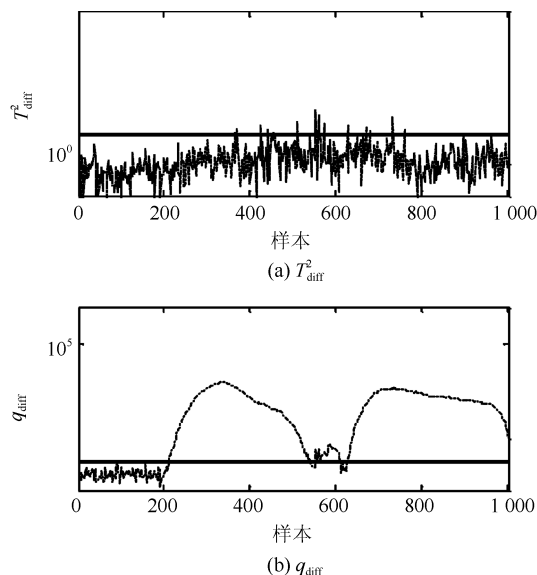


图 18 F_5 的 k Diff-PCA 检测结果

Fig. 18 Detection results using k Diff-PCA of F_5

5 结论

为了更好地对非线性和多模态过程进行故障检测, 本文提出一种基于主元得分差分的故障检测策略. 得分差分方法能够降低过程数据多模态或变量非线性特征的影响, 能够提高故障检测率. 通过模拟测试与对比分析, 本文方法的有效性得到验证. 由于本文方法应用 k 近邻规则进行得分估计, 因此近邻数的选择问题是接下来研究的一个方向; 同时, 本文

- 14 Zhao S J, Zhang J, Xu Y M. Performance monitoring of processes with multiple operating modes through multiple PLS models. *Journal of Process Control*, 2006, **16**(7): 763–772
- 15 He Q P, Wang J. Large-scale semiconductor process fault detection using a fast pattern recognition-based method. *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing*, 2010, **23**(2): 194–200
- 16 Ma H, Hu Y, Shi H. A novel local neighborhood standardization strategy and its application in fault detection of multimode processes. *Chemometrics & Intelligent Laboratory Systems*, 2012, **118**(7): 287–300
- 17 Ma H, Hu Y, Shi H. Nonlinear process monitoring using kernel principal component analysis. *Chemical Engineering Science*, 2004, **59**(1): 223–234
- 18 Samuel R T, Cao Y. Nonlinear process fault detection and identification using kernel PCA and kernel density estimation. *Systems Science & Control Engineering*, 2016, **4**(1): 1–9
- 19 Kano M, Sakata T, Hasebe S. Just-in-time statistical process control: adaptive monitoring of vinyl acetate monomer process. *World Congress*, 2011, **18**(1): 13157–13162
- 20 Wang G, Liu J, Li Y. Fault detection based on diffusion maps and k nearest neighbour diffusion distance of feature space. *Journal of Chemical Engineering of Japan*, 2015, **48**(9): 756–765
- 21 Wang J, He Q P. Multivariate statistical process monitoring based on statistics pattern analysis. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2010, **49**(17): 7858–7869
- 22 Zhang Cheng, Guo Qing-Xiu, Li Yuan, Gao Xian-Wen. Fault detection strategy based on difference of score reconstruction associated with principal component analysis. *Control Theory & Applications*, 2019, **36**(5): 774–782
(张成, 郭青秀, 李元, 高宪文. 基于主元分析得分重构差分的故障检测策略. *控制理论与应用*, 2019, **36**(5): 774–782)
- 23 Cheng C Y, Hsu C C, Chen M C. Adaptive kernel principal component analysis (KPCA) for monitoring small disturbances of nonlinear processes. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2011, **49**(5): 2254–2262
- 24 Yu H, Khan F. Improved latent variable models for nonlinear and dynamic process monitoring. *Chemical Engineering Science*, 2017, **168**: 325–338



张成 沈阳化工大学副教授, 东北大学博士研究生. 主要研究方向为复杂工业过程故障诊断.

E-mail: zhangcheng@syuct.edu.cn

(ZHANG Cheng Associate professor at Shenyang University of Chemical Technology, Ph.D. candidate at Northeastern University. His main research

interest is fault diagnosis of processes.)



高宪文 东北大学教授. 1998 年获得东北大学博士学位. 主要研究方向为工业过程监视和故障诊断, 数据分析, 模式识别. 本文通信作者.

E-mail: gaioxianwen@ise.neu.edu.cn

(GAO Xian-Wen Professor at Northeastern University. He received his Ph.D. degree from Northeastern

University in 1998. His research interest covers industrial process monitoring and fault diagnosis, process data analysis, and pattern recognition. Corresponding author of this paper.)



李元 沈阳化工大学教授. 2004 年获得东北大学博士学位. 主要研究方向为系统识别, 故障检测, 复杂过程故障诊断.

E-mail: liyuan@mail.tsinghua.edu.cn

(LI Yuan Professor at Shenyang University of Chemical Technology. She received her Ph.D. degree from Northeastern University in 2004. Her

research interest covers system identification, fault detection and classification, and data-driven complex process fault diagnosis.)