

# 间歇过程的统计建模与在线监测<sup>1)</sup>

陆宁云<sup>1,2</sup> 王福利<sup>1</sup> 高福荣<sup>2</sup> 王姝<sup>1</sup>

<sup>1</sup>(东北大学信息科学与工程学院 131 信箱 沈阳 110004)

<sup>2</sup>(香港科学技术大学化学工程系 清水湾 九龙 香港)

(E-mail: alicews5@163.com)

**摘要** 现代过程工业正逐渐倚重于生产小批量、多品种、高附加值产品的间歇过程。基于多元统计模型的过程监测是保障生产安全和产品质量的重要工具。从间歇过程独特的数据特性出发,将现有的多元统计建模方法进行合理的分类,简要回顾了各类方法的起源、发展及延伸的历程。除了阐述每种方法的基本原理,还详细讨论了各种方法的适用背景,相互关联及优缺点等内容,并对这一领域中依然存在的问题以及研究前景给出中肯的评述。

**关键词** 间歇过程, 多元统计模型, 过程监测, 主成分分析, 偏最小二乘, 三线性分解模型

**中图分类号** TP277

## Statistical Modeling and Online Monitoring for Batch Processes

LU Ning-Yun<sup>1,2</sup> WANG Fu-Li<sup>1</sup> GAO Fu-Rong<sup>2</sup> WANG Shu<sup>1</sup>

<sup>1</sup>(Box 131, the College of Information Science and Engineering, Northeastern University, Shenyang 100004)

<sup>2</sup>(Department of Chemical Engineering, Hong Kong University of Science & Technology, Clear Water Bay, Kowloon, Hong Kong)

(E-mail: alicews5@163.com)

**Abstract** The focus of modern process industry has shifted to the production of higher-value-added products through batch processes. Statistical process monitoring (SPM) has shown to be effective in ensuring process safety and product consistency for batch processes. This paper presents a review of multivariate statistical modeling and monitoring for batch process applications. Based on analysis of the nature of batch processes, this paper reviews each key method in terms of its motivation, development, and application prospective. The review ends with the authors' personal views of challenges and future directions for the area.

**Key words** Batch processes, multivariate statistical model, process monitoring, principal component analysis (PCA), partial least squares (PLS), trilinear decomposition model

## 1 问题的提出

为了迎合现代社会瞬息万变的市场需求,现代过程工业正逐渐倚重于生产小批量、多品种、高附加值产品的间歇工业过程。半导体加工、制药、注塑、发酵等都属于典型的间歇工业过程,间歇过程的产品与现代人的生活息息相关。因此,间歇过程的安全可靠运行以及连续稳定的产品质量逐渐成为过程工业界的关注焦点;间歇过程的建模与在线监测也成为一个方兴未艾的研究热点。

1) 国家自然科学基金(60374003)和973计划子课题(2002CB312200)资助

Supported by National Natural Science Foundation of P.R. China (60374003) and the Subproject of Project 973 (2002CB312200)

收稿日期 2005-7-6 收修改稿日期 2005-11-2

Received July 6, 2005; in revised form November 2, 2005

间歇过程的主要特点是在有限的时间内、以预先设计好的工序将原材料加工生产成符合质量要求的产品。虽然间歇过程的每一个操作周期都是严格按照设计好的流程进行，但是由于间歇过程固有的多变量、多工序、变量时变性、反应复杂、工序运行时间不确定，以及间歇过程产品市场占有周期短等多种原因，过程工程师难以在很短的产品研发周期内，依靠有限的资金投入，建立精确可靠的机理模型或基于知识推理的专家模型。而另一方面，随着计算机和电子测量技术的飞速发展，现代工业过程大都具有完备、甚至冗余的传感测量装置，可以在线获得大量的过程数据。显然，这些测量数据反映了生产过程的实时运行状态，通过适当的信息提取，过程测量数据可用于工业过程的建模与监测。由于工业过程数据的高维、高度耦合、数据缺损以及噪音问题等，以主成分分析 (PCA)<sup>[1]</sup>，主成分回归 (PCR)<sup>[1]</sup>，独立成分分析 (ICA)<sup>[2]</sup> 和偏最小二乘 (PLS)<sup>[3,4]</sup> 等为核心技术的多元统计建模方法，逐渐成为一个重要的过程分析和在线监测的工具，并且在工业过程中获得了许多成功的应用成果<sup>[5~8]</sup>。

虽然文献已经详细综述了连续过程中多元统计建模和在线监测的发展及应用现状，也简单涉及了间歇过程中的几种成熟的多元统计建模方法<sup>[5~8]</sup>，但是，鉴于间歇过程在现代过程工业中的愈发重要的地位，以及多元统计方法在间歇过程中逐渐成熟的应用，我们有必要专门针对间歇过程独特的数据特性，重点分析三维过程数据的各种统计特征，将现有的统计建模方法进行合理的分类，详细阐述各类方法的基本原理，适用背景，优缺点等，并对这一领域中依然存在的问题以及研究前景给出评述。

本文的结构安排如下：第二节中简单介绍间歇过程的数据特点以及不同的标准化处理手段；第三节中详细回顾间歇过程统计建模和在线监测技术的发展历程；第四节中讨论这一领域中依然存在的问题以及可行的研究方向；最后是结束语。

## 2 间歇过程的数据特征及标准化处理

### 2.1 间歇过程的数据特征

为了便于解释，首先考虑一个具有等长操作周期的间歇过程，假定有  $J_x$  个可在线测量的过程变量  $(x_{j_x}) (j_x = 1, \dots, J_x)$ ，并且在一次间歇操作周期内，对每个过程变量固定采集  $K$  个测量数据  $(x_{j_x,k}) (k = 1, \dots, K)$ 。这样，一次间歇操作的数据可以组成一个二维矩阵  $X (J_x \times K)$ ，即每一列由某个采样时刻的所有过程变量测量值组成，而每一行则是一个过程变量在一次间歇操作内的运行轨迹。假定历史数据库中有  $I$  次正常的间歇操作，则可得到  $I$  个二维矩阵  $X_i (J_x \times K) (i = 1, \dots, I)$ 。所有这些数据组成了三维过程数据  $\underline{X} (I \times J_x \times K)$ ，矩阵中每个元素表示为  $x_{i,j_x,k}$ 。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量。假定过程有  $J_y$  个可测质量变量  $(y_{j_y}) (j_y = 1, \dots, J_y)$ ，一次间歇操作得到的质量数据可组成一个列向量  $\mathbf{y} = [y_1, \dots, y_{J_y}]^T$ ， $I$  次间歇操作的质量测量值构成一个二维矩阵  $Y (I \times J_y)$ 。因此，间歇过程数据的典型形式是一个三维的过程变量  $\underline{X}$  和一个二维的质量变量矩阵  $Y$ 。

间歇过程数据除了具有三维的表达形式外，数据本身也具有复杂的统计特性。一方面，由于间歇过程本质上是动态过程，过程变量的轨迹随着时间呈现非线性变化趋势，并且过程变量之间通常也存在一定的耦合关系；因此，过程测量数据同时具有复杂的交叉相关性和自相关性。如果把每个过程变量的测量轨迹当作一个时间序列，那么一次间歇操作的测量数据可看作多变量、非线性、动态时间序列的集合。因而，从时间这个角度，在连续过程在线监测领域中非常流行的 PCA/PLS 等方法很难应用于间歇过程的三维数据。但从另一方面，由于所有建模数据都是正常工况下采集的，不同操作批次之间过程变量轨迹的变动是一种正常的随机变动；也就是说，从操作批次的角度，过程变量的测量值是相互独立的，并近似服从多维正态分布。因此，PCA/PLS 可以用来处理“操作批次”方向上的

方差信息，这也正是多变量投影方法可以延伸应用于间歇过程的基础所在。

## 2.2 三维数据的标准化处理

三维数据的预处理和标准化是间歇过程统计建模中一个非常重要的环节。不同的数据处理和标准化方法可以凸现间歇过程数据中不同的方差 / 协方差结构。因此，即使是相同的统计建模方法，若使用了不同的数据预处理和标准化，得到的统计模型也会大相径庭。本节只介绍三维数据的标准化问题（包括数据中心化和方差归一化），数据预处理将随同建模方法在后文中介绍。

现有的间歇过程统计建模方法中，三维过程数据  $X$  的标准化方法有两种，分别标记为 A 标准化和 B 标准化。A 标准化方法仅作用于操作批次的方向，对每个过程变量在每个采样时刻下不同操作批次的测量值， $[x_{1,j_x,k}, \dots, x_{I,j_x,k}]^T$ ，作中心化和方差归一化处理

$$(\tilde{x}_{i,j_x,k} = (x_{i,j_x,k} - \bar{x}_{j_x,k})/s_{j_x,k}, \bar{x}_{j_x,k} = \frac{1}{I} \sum_i x_{i,j_x,k}, s_{j_x,k} = \sqrt{\frac{1}{(I-1)} \sum_i (x_{i,j_x,k} - \bar{x}_{j_x,k})^2}).$$

于中心化时去掉了变量平均运行轨迹，这种标准化方法可以很大程度上剔除过程变量轨迹中的非线性和动特性，并突出了间歇过程不同操作批次之间的变化信息。这是适宜过程监测的标准化方法，因此绝大多数间歇过程监测方法中都使用了这种数据处理手段。

B 标准化方法同时作用于间歇操作批次和过程采样时间方向 ( $\tilde{x}_{i,j_x,k} = (x_{i,j_x,k} - \bar{x}_{j_x,k})/s_{j_x,k}$ ,  $\bar{x}_{j_x,k} = \frac{1}{KI} \sum_i \sum_k x_{i,j_x,k}$ ,  $s_{j_x} = \sqrt{\frac{1}{(KI-1)} \sum_i \sum_k (x_{i,j_x,k} - \bar{x}_{j_x,k})^2}$ )。标准化过程中得

到的平均值和方差是每个过程变量在所有操作批次所有采样时间上测量值的平均值和方差。因此，标准化后的数据保留了过程变量的轨迹形状，突出的是过程变量测量值在时间和批次方向上的整体变化信息。虽然 B 标准化方法在过程监测领域不如 A 方法适用，但 B 方法的优势在于处理不等长间歇过程的数据，这在后文中详细介绍。

间歇过程的质量数据  $Y$  是一个二维的矩阵，其标准化一般采用均值归零和方差归一化的处理手段，即  $\tilde{y}_{i,j_y} = (y_{i,j_y} - \bar{y}_{j_y})/s_{j_y}$ ,  $\bar{y}_{j_y} = \frac{1}{I} \sum_i y_{i,j_y}$ ,  $s_{j_y} = \sqrt{\frac{1}{(I-1)} \sum_i (y_{i,j_y} - \bar{y}_{j_y})^2}$ 。

## 3 基于多元统计模型的间歇过程在线监测方法

目前，现有的间歇过程多元统计建模和在线监测方法可大致分为三类：1) 基于三维矩阵展开的建模方法，即将三维矩阵根据需要展开成二维形式后进行多元统计建模，譬如 Nomikos & MacGregor 提出的多向主成分分析 / 多向偏最小二乘 (MPCA/MPLS)<sup>[9~11]</sup>, S. Wold 等提出的基于三维矩阵另一种展开方式的 MPCA/MPLS<sup>[12]</sup>，以及 I.B. Lee 等人提出的多向独立成分分析 (MICA) 等<sup>[13]</sup>，其中 MPCA/MPLS 是目前应用最为广泛的统计过程监测模型；2) 将传统 PCA/PLS 模型直接应用于经过特殊处理后的间歇过程数据，譬如，Rännar 等提出的自适应监测算法<sup>[14]</sup>，以及 Lu 等提出的分时段 PCA/PLS 建模的方法<sup>[15,16]</sup>；3) 可直接处理三维矩阵的三线性分解模型，譬如并行因子 (PARAFAC) 模型、Tucker 模型等<sup>[17~20]</sup>。除此之外，针对间歇过程的不等长特性和复杂的非线性及动态特性，一些基于上述方法的改进算法也相继出现，使得间歇过程的统计建模呈现出百花齐放的繁荣景象。

无论是连续过程还是间歇过程，和多元化发展的统计建模方法相比，基于多元统计模型的过程监测几乎都遵循如下的原理。统计建模时需要的过程数据通常来自于历史数据库中正常操作工况下的变量测量值。因此，统计模型反映的是正常操作工况下过程变量的统计特性，譬如变量自身的均值、方差以及变量之间的相关性、协方差信息等。经过适当的统计建模，高维、高度耦合的过程数据可以转化成低维的、满足一定统计分布的几个多元统计指标，比如主成分空间的 Hotelling T2 统计量以及主成分残差空间的预测误差平方

和 (SPE)<sup>[1]</sup>. 基于多元统计模型的过程监测就是在线监视新过程数据的多元统计指标是否符合原来的统计分布. 当新的过程出现异常并导致过程变量的运行轨迹或者过程变量之间的相互关系发生显著变化时, 正常操作工况下建立的统计模型无法完全解释新工况下过程数据所呈现的统计关系. 这将导致多元统计指标超出其对应的控制限, 提示异常工作状况的发生. 辅助以适当的诊断工具, 比如贡献图 (Contribution plot)<sup>[21]</sup>, Fisher 判别分析<sup>[22~24]</sup>等, 从异常的多元统计量中找到那些导致异常工况的过程变量, 过程监测也可以实现简单的故障隔离和故障原因诊断的功能.

下面将分别介绍三类间歇过程统计建模和监测方法的起源、发展及延伸的历程. 除了阐述每种方法的基本原理, 还将讨论各种方法的适用背景, 相互关联及优缺点等内容.

### 3.1 基于三维矩阵展开的监测方法

S. Wold 于 1987 年就提出了 PCA/PLS 模型在高维数据空间的延伸算法 — 多向主成分分析和多向偏最小二乘 (MPCA/MPLS)<sup>[25]</sup>; 1994 年, Nomikos & MacGregor 率先洞察到 MPCA/MPLS 模型的应用价值, 提出了基于 MPCA/MPLS 模型的一系列间歇过程的监测与诊断算法<sup>[9~11]</sup>, 并因此成为间歇工业过程多元统计建模与过程监测领域的奠基人. Nomikos & MacGregor 的算法在本文中标记为 NM-MPCA/MPLS 算法, 以便和后文中 S.Wold 等提出的另一种 MPCA/MPLS 算法<sup>[12]</sup> 区别, 后文中未经特殊标记的 MPCA/MPLS 均指 NM-MPCA/MPLS.

NM-MPCA 的原理非常简单, 将间歇过程三维数据  $\underline{X}(I \times J_x \times K)$  沿着时间方向展开为二维矩阵  $X(I \times KJ_x)$ , 标准化处理后 (A 标准化) 再进行 PCA 分析. 显然,  $X(I \times KJ_x)$  的每一行是一个间歇操作批次的所有测量数据, 其列元素则是由不同过程变量在不同采样时刻的测量值  $x_{j,k}$  构成. 对  $X(I \times KJ_x)$  进行主成分分析实际上是根据间歇操作批次之间存在的方差以及不同变量在不同采样时间上的协方差信息来提取主成分. 这样得到的 PCA 模型既包含了过程变量之间的交叉相关性, 又包含了过程变量自身数据中存在的自相关性. 由此模型计算出来的主成分得分  $t_i$  总结了第  $i$  次间歇操作测量数据中包含的主要过程信息; 而主成分  $t_i (i = 1, \dots, I)$  的变化信息 (即方差信息) 体现了不同操作批次之间的变化. 若过程监测时侧重于产品质量, 则可使用 MPLS 模型. 和 MPCA 类似, MPLS 可看成是用 PLS 算法得到二维展开矩阵和质量矩阵之间的回归关系.

MPCA/MPLS 模型将一次间歇操作周期内所有数据所构成的向量当作一个样本, 并转换为低维的主成分向量, 并在主成分和模型残差空间分别构建多元统计量进行过程监测. 这意味着, 在线过程监测时, MPCA/MPLS 模型需要当前采样时刻至操作周期结束这段时间内的变量测量值的估计值. 虽然, Nomikos & MacGregor 随着 MPCA/MPLS 算法同时提出了三种未来测量值预估方法<sup>[9]</sup>, Cho & Kim 提出一种新的方法<sup>[26]</sup>, 利用历史的间歇过程数据来提高未来测量值的预估精度; 但显然, 在线监测算法的准确性以及检测异常工况的灵敏度在很大程度上决定于未来数据估计值的准确程度. 为提高基于 MPCA/MPLS 模型在线监测算法的性能, 一个很自然的想法就是将间歇过程分成若干子操作时段, 建立每个子操作时段的 MPCA 模型, 这样可以减少需要预测的未来数据的个数, 并能够一定程度上提高在线监测的性能. Kosanovich 等<sup>[27]</sup> 于 1994 年将 MPCA 应用于一个聚合物反应工业过程时指出, 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<sup>[28]</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 等人的观点. 陈勇等<sup>[29]</sup> 提出多模型 MPCA 方法时也强调, 依据过程知识将间歇过程按照其特性划分为若干子阶段并建立多个 MPCA 模型会更有利于故障检测和诊断的实时性. Louwerse 等则是在一次间歇操作周期内均匀选取若干个标记点, 由间歇操作开始至标记点时刻的数据分别建立 MPCA 模型, 这样可以缩短在线监测时需要预估的未来测量数据的数量. 上述

改进方法在一定程度上提高了MPCA/MPLS模型监测异常工况的速度和精度；但是另一方面，这些方法显然也提升了监测模型的复杂度。

基于MPCA/MPLS模型过程监测方法的另一个问题是，MPCA/MPLS的建模对象是三维矩阵 $X(I \times J_x \times K)$ ，而不等长间歇过程的数据无法安排成三维数据。不等长操作周期是间歇工业过程的一个普遍问题。虽然，间歇过程是按照预先设计好的工序重复生产，但由于各种各样的原因，譬如气候的影响、原材料的质量差异、基于非时间坐标的的数据采集系统等，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。不等长间歇过程中一个最容易处理的情况是，虽然历史的正常间歇操作批次具有不同的数据长度，但是过程变量的运行轨迹在重要的时间段内基本一致。对于这种情形，有两种非常简单的方法处理间歇过程不等长数据。第一种方法称为“最短长度法”，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<sup>[30,31]</sup>。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都被包含在公共时间段内，超出最短长度的那部分数据中并没有重要的过程信息。显然，这种方法只适用于数据长度的差异不算严重的情况。另外一种方法是用最长操作周期的数据建模，然后将短间歇操作周期中所缺的那部分数据当作“缺损数据”处理<sup>[31]</sup>。Nomikos和MacGregor曾建议<sup>[11]</sup>，用一个合适的“指示”变量代替过程采样时间，将不同长度的变量轨迹统一成同样的长度。所谓的“指示”变量要求：1) 它在整个间歇操作周期中严格单调变化；2) 每一次间歇操作中，“指示”变量拥有同样的起始值和结束值。长度统一化的过程实际上相当于一个数据插值过程，即将“指示”变量均匀采样并计算对应于每个“指示”变量采样点的过程变量的数值。有些工业过程确实存在这样的“指示”变量，比如某些反应过程中的累计进料量<sup>[32]</sup>，反应程度<sup>[33,34]</sup>等。但是，将原始过程变量通过稀疏采样或插值方法统一化成相同长度的曲线可能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。另外，并不是每个工业过程中都存在这样的“指示”变量。

1998年，Kassidas等<sup>[35]</sup>尝试用动态时间扭曲(Dynamic time warping, DTW)方法来解决间歇过程的不等长数据问题。DTW方法起源于语音识别领域<sup>[36]</sup>，它通过适当地平移、拉伸或压缩两个不同信号轨迹的局部片断，保证变换后的两个信号轨迹的距离最小，最终同步两个不同长度甚至不同形状的信号轨迹。为了改善DTW动态寻优过程中的数据存储和运算速度问题，高翔等<sup>[37]</sup>提出了递推式DTW算法和基于粗格子点的算法。显然，DTW方法的工作对象通常是两个信号轨迹。DTW应用于不等长间歇过程数据时，需要预先定义一个标准的间歇操作的变量轨迹， $X_{REF}(J_x \times K_{REF})$ ，然后将数据库中所有正常的间歇操作数据， $X_i(J_x \times K_i)(i=1, 2, \dots, I)$ ，逐一与预先定义的标准轨迹进行同步操作，最终使得所有正常操作数据都具有同样的数据长度， $K_{REF}$ 。作为一种数据预处理方法时，DTW确实可以非常有效地同步不同长度的间歇过程数据<sup>[38]</sup>；但是，在线过程监测时，假设过程中已经出现了异常工况并导致过程变量的轨迹偏离正常轨迹，DTW在线算法却通过计算正在运行中的间歇过程变量轨迹和标准轨迹的最小距离来实现长度同步，这显然会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；而被DTW扭曲的故障特征又会给未来的故障诊断程序带来更大的困扰。在Rothwell等<sup>[30]</sup>的方法比较工作中，作者亦提到，基于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。

1998年，Wold等提出了基于三维数据另一种展开方式的多向主成分分析<sup>[12]</sup>(简称WKFH-MPCA)，即保留过程变量的维数，将操作批次和采样时间上的数据排列展开成纵向的二维矩阵 $X(KI \times J_x)$ ，标准化后进行PCA/PLS建模。在第二节中曾提及，这种标准化方法(即B方法)保留了过程变量的轨迹形状，突出的是过程变量在整个操作批次和操作时间上的变化信息。由于这种数据重组和标准化方法不能突出批次之间的方差信息，基

于此模型的监测方法对故障不甚敏感<sup>[20,39]</sup>. 但是, 如果在生成  $X(KI \times J_x)$  矩阵的同时, 抽取出对应的采样时间组成新向量  $\mathbf{y}(KI \times 1)$ , 并建立  $X(KI \times J_k)$  和  $\mathbf{y}$  之间的 PLS 模型; 此模型不仅可以直接对不等长间歇过程的数据建模, 而且可用来在线预测间歇过程反应程度或成熟度 (Maturity index). 另外, 基于该模型的在线预测方法不需要预估未来测量数据.

尽管 NM-MPCA/MPLS 采用的 A 标准化方法可以一定程度上去除过程变量时间方向上的非线性和动特性, 但过程变量之间仍有可能存在复杂的非线性耦合关系. 针对间歇过程的非线性特性, Dong 和 McAvoy 将非线性主成分分析 (NLPCA)<sup>[40]</sup> 延伸应用到间歇工业过程, 提出了多向非线性主成分模型 (MNLPCA)<sup>[28]</sup>. 和 MPCA/MPLS 类似, MNLPCA 首先将三维数据横向展开为二维矩阵  $X(I \times KJ_x)$ , 然后对  $X(I \times KJ_x)$  做非线性主成分分析. 针对间歇过程变量时间方向上的动特性, Chen 和 Liu<sup>[41]</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 (BDPCA/BDPLS). 其基本原理是将第  $i$  个操作批次第  $k$  个采样时间的数据  $\mathbf{x}_{i,k}$  扩展成  $[\mathbf{x}_{i,k}^T, \mathbf{x}_{i,k-1}^T, \dots, \mathbf{x}_{i,k-d}^T]^T$ , 即包含了以前的数据信息, 然后再作 MPCA/MPLS 分析, 其中  $d$  是时滞长度. 而针对操作批次方向上的动特性, Flores-Cerrillo 和 MacGregor<sup>[42]</sup> 提出将以前操作批次的信息引入 MPCA 模型的策略. Lee 和 Dorsey<sup>[43]</sup> 的基于状态空间模型的统计监测方法, 以及 Lu 等提出的二维动态主成分分析算法 (2D-DPCA)<sup>[44]</sup>, 则同时考虑时间和批次方向上的动特性. 对于批次方向上具有时变过程特性的间歇过程, Lee 等<sup>[45]</sup> 提出自适应多向主成分分析 (Adaptive MPCA), 随着操作批次的进行逐渐更新 MPCA 模型以适应新的过程特性.

独立成分分析 (ICA)<sup>[2]</sup>, 是和 PCA 功能相近的一种多元统计方法. PCA 通过提取携带方差信息最多的正交主成分实现降维; 而 ICA 的目的是去除原始变量间的关联性, 并没有正交性约束. 由于 ICA 可以提取非高斯分布的成分, 因此在处理动态过程数据时, ICA 比 PCA 更有优势. 和 MPCA/MPLS 方法类似, Yoo 等<sup>[13]</sup> 将 ICA 应用于间歇过程, 提出了多向独立成分分析算法 (MICA), 即先将三维过程数据横向展开成二维矩阵后进行 ICA 分析. Lee 等<sup>[46]</sup> 基于三维数据纵向展开方式提出了另一种 MICA 模型. 在基于 ICA/MICA 模型的间歇过程监测算法的基础上, 郭明和王树青<sup>[47]</sup> 以及何宁等<sup>[48]</sup> 分别提出了基于支撑向量机和字符串匹配的算法用以提高 ICA/MICA 模型的故障检测及诊断性能. 简而言之, ICA 继 PCA 之后也成为间歇过程建模与监测的重要工具.

### 3.2 间歇过程的自适应监测与分时段监测算法

虽然, 目前广泛应用于间歇过程统计建模和在线监测的 MPCA/MPLS 模型可以有效地监视过程的整体运行状况; 而且经过若干研究学者的改进和延伸, 基于 MPCA/MPLS 的在线监测算法以及处理不等长过程、非线性或动特性的相关算法也取得了很多成功地应用. 但是, 无论如何, 只要采用上述三维展开的思路, 将一次间歇操作的所有数据当作一个统计样本而建立 MPCA/MPLS 模型, 就没有办法从根本上避免预测未来测量数据的问题; 另外, 也很难进一步分析间歇过程不同时段对操作性能以及产品质量的影响关系, 因此上述方法不适用于多阶段的间歇过程. 多操作阶段可以认为是许多间歇过程的一个固有特征, 显然, 每个操作阶段都有其特定的控制目标和控制方案, 有不同的过程主导变量和过程特征. 因此, 对多阶段间歇过程的统计建模和在线监测不仅仅要分析过程的整体运行状况是否正常更应该深入分析过程的每一个操作子阶段是否正常, 各个操作阶段之间的过渡是否正常.

Rännar 等<sup>[14]</sup> 于 1998 年提出的基于 PCA 模型的自适应间歇过程在线监测算法, 采取了递推形式的分层多模块 PCA 模型结构 (Hierarchical PCA)<sup>[49]</sup>. 该方法不需要预估未来测量值, 同时也可适用于多阶段的间歇过程. 分层多模块 PCA 算法最初由 Wold 等<sup>[49]</sup> 于 1996 年提出, 将二维矩阵分割成若干相对独立的子矩阵  $X(n \times m)$ , 对这些子模块进行 PCA 分析得到底层模型, 然后对子模块的主成分所组成的得分矩阵再次 PCA 建模得到上层模

型。分层多模块 PCA 算法可提高模型的可解释性并有利于改进故障诊断的能力。Rännar 等<sup>[14]</sup>首次将分层多模块 PCA 算法应用于间歇过程的分析、建模和监测；谢磊等<sup>[50]</sup>汇报了该方法在多阶段链霉素发酵过程中的应用结果。自适应 PCA 建模与监测算法的基本原理是，将间歇过程的三维过程数据  $\underline{X}(I \times J \times K)$  沿着时间方向切割成  $K$  个时间片矩阵  $\bar{X}_k(I \times J_x)(k = 1, \dots, K)$ ，将每个时间片矩阵当作一个模块，然后应用分层多模块 PCA 算法，随着时间方向一步一步更新分层多模块 PCA 模型。在线监测时，调用对应采样时间上的各个 PCA 模型计算对应时刻的多元统计指标。

针对间歇过程常见的多操作阶段特性，Lu 等<sup>[15~16,39]</sup>提出了间歇过程子时段划分算法，基于子时段 PCA/PLS 模型的在线监测及质量预测算法，以及适用于不等长间歇过程的改进算法。子时段划分的主要依据是：1) 间歇过程的过程变量相关关系并不是随着操作时间时刻变化，而是跟随过程内部机制的变化而变化，呈现出分时段性；2) 虽然我们很难直接获取过程运行的基本原理，但是却可以非常容易地从过程数据中获取过程的统计特征，由过程统计特征的变化来推断过程内部运行机制的变化；3) 根据过程变量相关关系的变化将间歇操作周期划分为若干子操作时段，同一子时段内过程相关性保持近似一致，不同的子时段体现出显著不同的变量相关关系。因为在各个子时段中，过程数据具有相似的相关性模式（即主成分模型的载荷矩阵），可将这些模式的中心点作为子时段 PCA 模型的参数矩阵；这样，PCA 可直接应用于间歇过程的数据建模。

Rännar 等的自适应监测和 Lu 等的子时段监测方法都是先把间歇过程的三维数据切割成一系列的二维时间片矩阵，然后直接应用 PCA 的方法。两类方法都不需要预估未来测量值，且适用于多操作时段的间歇过程。但是 Rännar 等模型的结构复杂、计算量过大；其迭代更新过程中，前面时刻的模型误差将严重影响后面时刻的模型精度，模型的鲁棒性差。子时段 PCA 模型的结构介于 MPCA 模型和 Rännar 等的自适应模型之间，建模过程中不存在误差累积问题；但子时段 PCA 模型是完全没有考虑过程变量在时间上存在的自相关特性，使得模型对过程自相关性的变化不够敏感。

### 3.3 基于三线性模型的监测方法

从数学角度，前面介绍的两类方法都不是严格的多向分析方法。3.1 节的方法是将三维矩阵转化为二维矩阵然后应用二维分析工具，实际是一种变相的多向模型；而 3.2 节介绍的方法将三维数据作更细致的分割后直接应用 PCA/PLS 分析，是纯粹的二维分析手段。本节即将介绍的并行因子分析 (PARAFAC) 和 Tucker3 模型则是严格的三向模型（或称三线性模型）<sup>[17,18]</sup>，荷兰的 A.K.Smilde 等<sup>[19,20]</sup>陆续提出了一系列基于三线性模型的间歇过程监测算法。

三线性模型顾名思义就是将三维矩阵分解为三个方向上线性成分的外积和，三个方向的载荷向量提取了过程变量在对应方向上存在的线性关系。FARAFAC 模型在三个方向上保留同样个数的成分；而 tucker3 模型可以在不同方向上保留不同维数的成分。因此，FARAFAC 模型可以认为是一种有约束的 Tucker3 模型<sup>[50]</sup>。除了模型结构上的区别，FARAFAC 和 Tucker3 模型的识别方式也不同。FARAFAC 使用交替最小二乘 (ALS) 辨识法或直接用优化方法求取模型参数；而 Tucker 模型的辨识方法是广义秩消除方法 (GRAM)<sup>[51,52]</sup>。关于三线性模型的基础介绍可以参阅文献<sup>[17,18,51]</sup>。基于三线性模型的过程监测通过判断新过程数据经过三线性模型投影后得到的载荷向量以及残差量是否和建模数据的有显著差别来裁定过程是否处于正常工况。但在如何对载荷向量及残差作统计检验的问题上并没有成熟的方法。目前，只能假定三线性模型的载荷向量及残差符合正态分布，然后取正态分布的 95% 或 99% 控制限作为监测时的判断依据<sup>[53]</sup>。

虽然，相比于其它建模方法，基于过程数据的统计模型具有建模容易、模型简洁、不需要深入的过程机理知识等优点；但是，完全依赖于过程数据的模型很难泛化应用到历史

数据库中尚未出现过的操作条件, 而且统计模型的可解释性能比较差, 很难揭示出过程的本质特征。实际上, 统计建模和过程监测方法中更具实际意义的并不是如何建模, 而是如何解释模型。为了弥补统计模型的这个缺点, van Sprang, Ramaker 等<sup>[54~56]</sup> 提出将多元统计模型(即黑箱模型)和基于过程机理或知识的模型(即白色模型)相结合, 建立所谓的“灰色”模型。“灰色”建模方法相当于在统计建模时将外部过程知识当作约束条件; 因此, 过程的基本原理(即过程知识)可嵌入到统计模型中, 使得统计模型具有更好的解释能力和合理性。目前, 已经出现了基于三线性模型(Tucker 模型)的灰色模型, 并在一个生产聚氨酯树脂的工业过程中得到了很好的验证结果<sup>[54]</sup>。

和其它类别的监测方法相比, 三线性模型由于描述了三个方向上过程变量之间的相关关系, 在数据分析和故障解释上具有一定的优势。但其建模过程过于复杂, 目前在间歇过程中还没有得到广泛的应用。

关于不同监测方法的具体性能比较, 可参阅 Wise 等<sup>[53]</sup>, Westerhuis 等<sup>[57]</sup>, Van Sprang 等<sup>[58]</sup> 的相关文献。

## 4 研究展望与评述

间歇过程的统计建模和在线监测经过了十几年的发展和完善, 已经成为一个独具特色的研究领域。但总体来说, 这一新兴领域尚处于起步阶段, 较为成熟的理论算法以线性的多元统计模型为主; 而对于具有较强非线性、动特性、多工作点以及多产品的工业对象, 理论研究和实际应用都鲜有涉及。随着相关领域中各种方法的完善和普及, 基于多元统计模型的过程分析和在线监测具有非常广阔的发展前景。从目前的研究趋势来看, 有以下几点问题需要作进一步的研究。

1) 采样问题。现有的理论算法大都假定, 用于建模的过程变量、质量变量测量值具有固定的、一致的采样频率, 但是, 实际工业对象并不满足这一假定, 譬如温度、压力、流量等变量可以快速采样, 而平均分子量、浓度、PH 值等变量的实际采样频率则慢得多。现有方法的工业应用中, 并没有有效利用那些可高频采样的过程变量信息, 而是将它们的频率降低, 和低频率的变量保持频率一致。这种处理手段显然没有有效地利用现有的信息资源。在我们期待检测仪表快速发展的同时, 研究多采样频率数据的统计建模具有良好的理论与应用前景。

2) 非线性、动特性问题。虽然, 对于这个问题的研究已经产生一些成果, 主要集中在多元统计模型和神经网络技术以及动态时间序列分析方法的结合。但是, 大多数方法只是将连续过程中的相关方法作适当的延伸应用。由于间歇工业过程的非线性和动特性问题远比连续过程复杂, 这些算法的实际应用仍然存在大量的问题没有解决。

3) 多工作点或多产品过程中, 统计模型的可移植性问题。建立一个统计模型需要某些操作条件下完备的历史数据, 也需要耗费一定的人力、物力和财力资源。对于多工作点或多产品过程, 能否利用已有的过程知识, 将某个工作条件下建立的统计模型进行适当的修改、学习和进化, 使其很快地适用于新工作条件的统计分析和在线监测? 这是一个有难度却非常有意义的研究方向, 如果成功的话可节省大量的研究成本, 并大大缩短产品的研发周期。

4) 集统计分析、过程监测、故障诊断、质量控制于一体的系统设计及产品化问题。将现有的成熟方法有机结合、优化设计, 最终形成实用的科技产品, 是科研工作者的最终目标, 也是需要大量科研投入的方向之一。

## 5 结束语

过程安全和产品质量是工业生产的永恒课题。为了提高过程性能、改善产品质量，自20世纪80年代末，科研人员和过程工程师们开始尝试用多变量投影方法分析工业过程中累积存储了数十年的历史数据库，取得了令人欣喜的突破，由此产生了基于过程数据统计模型的过程分析、在线监测、故障检测及诊断、软测量、过程和产品优化等蓬勃发展的新兴领域。对生产过程的在线监测不仅可以为过程工程师提供有关过程运行状态的及时信息，而且可以为间歇过程的优化和产品质量改进提供必要的指导和辅助。由于这一研究领域正处于发展过程中，还存在不少问题，但其发挥的作用是巨大的，具有广阔的研究空间。一系列完善可行的间歇过程建模和在线监测算法必将推动整个间歇过程工业的长足进步和繁荣发展，为国家和社会提供高质量产品的同时，还可排除安全隐患、保障生命和财产、节约资源、保护环境，提供这些更加重要的无形的社会财富。

### References

- 1 Jackson J E. A User's Guide to Principal Components. Wiley: New York, 1991
- 2 Hyvärinen A, Karhunen J, Oja E. Independent Component Analysis. Wiley: New York, 2001
- 3 Geladi P, Kowalski B R. Partial least squares regression: A tutorial. *Analytica Chimica Acta*, 1986, **185**(1): 1~17
- 4 Hoskuldsson A. PLS regression methods. *Journal of Chemometrics*, 1988, **2**(3): 211~228
- 5 Martin E B, Morris A J. An overview of multivariate statistical process control in continuous and batch process performance monitoring. *Transactions of the Institute of Measurement and Control*, 1996, **18**(1): 51~60
- 6 Zhang J, Yang X H. Multivariate Statistical Process Control. Beijing: Chemical Industry Press, 2000
- 7 Kourtogiannis T. Process analysis and abnormal situation detection: From theory to practice. *IEEE Transactions on Control Systems Magazine*, 2002, **22**(5): 10~25
- 8 Liang J, Qian J. Multivariate statistical process monitoring and control: Recent developments and applications to chemical industry. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 2003, **11**(2): 191~203
- 9 Nomikos P, MacGregor J F. Monitoring batch processes using multiway principal component analysis. *American Institute of Chemical Engineers. AIChE Journal*, 1994, **40**(8): 1361~1375
- 10 Nomikos P, MacGregor J F. Multi-way partial least squares in monitoring batch processes. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 1995, **30**(1): 97~108
- 11 Nomikos P, MacGregor J F. Multivariate SPC charts for monitoring batch processes. *Technometrics*, 1995, **37**(1): 41~59
- 12 Wold S, Kettaneh N, Fridén H, Holmberg A M. Modelling and diagnostics of batch processes and analogous kinetic experiments. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 1998, **44**(1,2): 331~340
- 13 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
- 14 Rännar S, MacGregor J F, Wold S. Adaptive batch monitoring using hierarchical PCA. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 1998, **41**(1): 73~81
- 15 Lu N, Gao F, Wang F. A sub-PCA modeling and on-line monitoring strategy for batch processes. *American Institute of Chemical Engineers. AIChE Journal*, 2004, **50**(1): 255~259
- 16 Lu N, Gao F. Stage-based process analysis and quality prediction for batch processes. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 2005, **44**(10): 3547~3555
- 17 Sanchez E, Kowalski B R. Tensorial resolution: a direct trilinear decomposition. *Journal of Chemometrics*, 1990, **4**(1): 29~45
- 18 Bro R. Parafac. Tutorial and applications. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 1997, **38**(2): 149~171
- 19 Louwerse D J, Smilde A K. Multivariate statistical process control of batch processes based on three-way models. *Chemical Engineering Science*, 2000, **55**(7): 1225~1235
- 20 Smilde A K. Comments on three-way analysis used for batch process data. *Journal of Chemometrics*, 2001, **15**(1): 19~27

- 21 Miller P, Swanson R E, Heckler C E. Contribution plots: A missing link in multivariate quality control. *Applied Mathematics and Computer Science*, 1992, **8**(4): 775~792
- 22 Chiang L H, Russel E L, Braatz R D. Fault diagnosis in chemical process using fisher discriminant analysis, discriminant partial least squares and principal analysis. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2000, **50**(2): 243~252
- 23 Chen Y H, Jiang L Y, Guo M, Wang S Q. Monitoring batch processes using multiway Fisher discriminant analysis. *Journal of Jinlin University (Information Science Edition)*, 2004, **22**(4): 384~387
- 24 Jiang L Y, Wang S Q. Fault diagnosis for batch process based on MPCA-MDPLS. *Journal of Chemical Industry and Engineering, China*, 2005, **56**(3): 482~486
- 25 Wold S. Multi-way principal components- and PLS- analysis. *Journal of Chemometrics*, 1987, **1**(1): 41~56
- 26 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
- 27 Kosanovich K A, Dahl K S, Provoso M J. Improved process understanding using multiway principal component analysis. *Industrial Engineering and Chemical Research*, 1996, **35**(1): 138~146
- 28 Dong D, McAvoy T J. Batch tracking via nonlinear principal component analysis. *American Institute of Chemical Engineers. AIChE Journal*, 1996, **42**(8): 2199~2208
- 29 Chen Y, Liang J, Lu H. Multi-model MPCA with applications in the monitoring and fault diagnosis for multivariable control system. *Journal of Southern Yangtze University (Nature Science Edition)*, 2002, **1**(2): 108~111
- 30 Rothwell S G, Martin E B, Morris A J. Comparison of methods for dealing with uneven length batches. In: Proceedings of 7th International Conference on Computer Applications in Biotechnology (CAB7), Osaka, Japan: Elsevier Science Ltd., 1998. 387~392
- 31 Kourti T. Multivariate dynamic data modeling for analysis and statistical process control of batch processes, start-ups and grade transitions. *Journal of Chemometrics*, 2003, **17**(1): 93~109
- 32 Kourti T, Lee J, MacGregor J F. Experience with industrial applications of projection methods for multivariate statistical process control. *Computers and Chemical Engineering*, 1996, **20** (suppl.): 745~750
- 33 Tates A A, Louwerse D J, Smilde A K. Monitoring a PVC batch process with multivariate statistical process control charts. *Industrial Engineering & Chemical Research*, 1999, **38**(12): 4769~4776
- 34 Neogi D, Schlags C E. Multivariate statistical analysis of an emulsion batch process. *Industrial Engineering & Chemical Research*, 1998, **37**(10): 3971~3979
- 35 Kassidas A, MacGregor J F, Taylor P A. Synchronization of batch trajectories using dynamic time warping. *American Institute of Chemical Engineers. AIChE Journal*, 1998, **44**(4): 864~875
- 36 Sakoe H, Chiba S. Dynamic programming algorithm optimization for spoken word recognition. *IEEE Transactions on Acoustics, Speech and Signal Processing*, 1978, **26**(1): 43~49
- 37 Gao X, Wang G, Zhao L J, Ma J H. Improved DTW algorithms for synchronization of batch trajectories. *Information and Control*, 2001, **30**(2): 183~188
- 38 Li Y, Wang G, Cao R. Monitoring and fault diagnosis of batch process based on MPCA and DTW. *Journal of Shenyang Institute of Chemical Technology*, 2003, **17**(4): 285~289
- 39 Lu N, Gao F, Yang Y, Wang F. A PCA-based Modeling and On-line Monitoring Strategy for Uneven-length Batch Processes. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 2004, **43**(13): 3343~3352
- 40 Dong D, McAvoy T J. Nonlinear principal component analysis based on principal curves and neural network. *Computers and Chemical Engineering*, 1996, **20**(1): 65~78
- 41 Chen J, Liu J. On-line batch process monitoring using dynamic PCA and dynamic PLS models. *Chemical Engineering Science*, 2002, **57**(1): 63~75
- 42 Flores-Cerrillo J, MacGregor J F. Multivariate monitoring of batch processes using batch-to-batch information. *American Institute of Chemical Engineers. AIChE Journal*, 2004, **50**(6): 1219~1228
- 43 Lee J H, Dorsey A W. Monitoring of batch processes through state-space models. *American Institute of Chemical Engineers. AIChE Journal*, 2004, **50**(6): 1198~1210
- 44 Lu N, Yao Y, Wang F, Gao F. Two-dimensional dynamic PCA for batch process monitoring. *American Institute of Chemical Engineers. AIChE Journal*, 2005, In press
- 45 Lee J M, Yoo C K, Lee I B. On-line batch process monitoring using a consecutively updated multiway principal component analysis model. *Computers and Chemical Engineering*, 2003, **27**(8-9): 1903~1912
- 46 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

- 47 Guo M, Wang S Q. Research on process monitoring method based on independent component analysis. *Journal of Zhejiang University (Engineering Science)*, 2004, **38**(6): 665~669
- 48 He N, Xie L, Guo M, Wang S Q. Fault detection and diagnosis in continuous dynamic multivariate processes using independent component analysis. *Journal of Chemical Industry and Engineering, China*, 2005, **56**(4): 646~652
- 49 Wold S, Kettaneh N, Tjessem K. Hierarchical multiblock PLS and PC models for easier model interpretation and as an alternative to variable selection. *Journal of Chemometrics*, 1996, **10**(5,6): 463~482
- 50 Xie L, He N, Wang S Q. Step by step adaptive MPCA applied to an industrial batch process. *Journal of Chemical Engineering of Chinese Universities*, 2004, **18**(5): 643~647
- 51 Kiers H A L, ten Berge J M F, Bro R. PARAFAC2-part I. A direct fitting algorithm for the PARAFAC2 model. *Journal of Chemometrics*, 1999, **13**(3,4): 275~294
- 52 Smilde A, Bro R, Geladi P. Multi-way analysis: applications in the chemical science. England: Wiley, 2004.
- 53 Wise B M, Gallagher N B, Butler White J R D D, Bannar G G. A comparison of multiway principal component analysis, tri-linear decomposition and parallel factor analysis for fault detection in a semiconductor etch process. *Journal of Chemometrics*, 1999, **13**(3,4): 379~396
- 54 Van Sprang E N M, Ramaker H J, Westerhuis J A, Smilde A K. Statistical batch process monitoring using gray models. *American Institute of Chemical Engineers. AIChE Journal*, 2005, **51**(3): 931~945
- 55 Ramaker H J, van Sprang E N M, Gurden S P, Westerhuis J A, Smilde A K. Improved monitoring of batch processes by incorporating external information. *Journal of Process Control*, 2002, **12**(4): 569~576
- 56 Gurden S P, Westerhuis J A, bijlsma S, Smilde A. Modelling of spectroscopic batch process data using gray models to incorporate external information. *Journal of Chemometrics*, 2001, **15**(2): 101~121
- 57 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
- 58 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, **51**(16): 3979~3991

**陆宁云** 2004年毕业于东北大学并获得博士学位。目前为香港科技大学化工系博士后，研究方向为统计过程建模，过程监测、故障诊断和质量控制算法的研究与应用。

**(LU Ning-Yun)** Received her Ph. D. degree from Northeastern University in 2004. Currently, she is a post-doctor in Chemical Engineering Department at Hong Kong University of Science and Technology. Her research interests include multivariate statistical modeling, process monitoring, and fault diagnosis and quality control and their applications in process industry.)

**王福利** 东北大学信息科学与工程学院教授，博士生导师。研究方向为过程控制，过程优化，过程监测和故障诊断算法的研究与应用。

**(WANG Fu-Li)** Processor in School of Information and Science at Northeastern University. His research interests include process control, process optimization, process monitoring, and fault diagnosis and their applications in process industry.)

**高福荣** 1993年毕业于加拿大 McGill 大学并获得博士学位。现为香港科技大学化学工程系副教授，*Journal of Process Control* 副编辑。其主要研究方向为高分子加工，过程控制、优化、监测。

**(GAO Fu-Rong)** Received his Ph. D. degree from McGill University in Canada in 1993. He is currently an associate professor in Chemical Engineering Department at Hong Kong University of Science and Technology. Dr. Gao serves also as an associate editor of *Journal of Process Control*. His research interests include polymer processing, and batch process control, optimization, and monitoring.)

**王姝** 东北大学控制理论与控制工程专业博士生。从事统计过程建模、过程监测、故障诊断方法的研究与应用。

**(WANG Shu)** Ph. D. candidate of control theory and control engineering at Northeastern University. Her research interests include multivariate statistical modeling, process monitoring, and fault diagnosis and their applications in process industry.)