

研究论文

## 基于贝叶斯推理的 PKPCAM 的非线性多模态过程 故障检测与诊断方法

卢春红, 熊伟丽, 顾晓峰

(江南大学轻工过程先进控制教育部重点实验室, 江苏 无锡 214122)

**摘要:** 针对一类非线性多模态的化工过程, 提出一种基于概率核主元的混合模型 (PKPCAM), 并利用贝叶斯推理策略进行过程监控与故障诊断。在提出的模型中, 每个操作模态由一个局部化的概率核主元分量描述, 从而构建的一系列分量对应了不同的操作模态。首先, 将过程数据从原始的度量空间投影到高维特征空间; 其次, 在该特征空间建立概率主元混合模型, 从概率角度刻画数据集的多个局部分量特征; 最后, 在提取的核主元分量内获得测试样本的后验概率, 结合模态内的马氏距离贡献度, 提出基于贝叶斯推理的全局概率指标进行故障检测, 同时利用模态内变量的相对贡献度, 基于全局贡献度指标进行故障诊断。利用 TEP 仿真平台, 与基于  $k$  均值聚类的次级主元分析和核主元分析的方法进行了对比分析, 验证了提出的贝叶斯推理的 PKPCAM 方法对非线性多模态过程进行故障检测与诊断的可行性和有效性。

**关键词:** 非线性多模态过程; 概率核主元混合模型; 贝叶斯推理; 故障检测; 故障诊断

**DOI:** 10.3969/j.issn.0438-1157.2014.12.030

中图分类号: TP 277

文献标志码: A

文章编号: 0438—1157 (2014) 12—4866—09

## Fault detection and diagnosis for nonlinear and multimode processes using Bayesian inference based PKPCAM approach

LU Chunhong, XIONG Weili, GU Xiaofeng

(Key Laboratory of Advanced Process Control for Light Industry (Ministry of Education), Jiangnan University,  
Wuxi 214122, Jiangsu, China)

**Abstract:** A probabilistic kernel principal component analysis mixture model (PKPCAM) based on Bayesian inference was proposed to detect and diagnose the fault in the nonlinear and multimode processes. In PKPCAM, each operating mode was characterized by a local probabilistic kernel principal component, leading to a series of components corresponding to multiple operation conditions. Firstly, process data were projected from the original measurement space into the high-dimensional feature space. Then the probabilistic kernel principal component analysis mixture model was estimated in the feature space and used to characterize the multiple local components from the viewpoint of probability. Finally, utilizing the posterior probability of the monitored sample in kernel subspace, according to Mahalanobis distance within the local mode, the Bayesian reference based global probability index was proposed for fault detection. And meantime, using the relative contribution of variable within mode, global contribution index was derived to perform diagnosis. Comparing to the two methods based on

2014-06-05 收到初稿, 2014-09-10 收到修改稿。

联系人: 顾晓峰。第一作者: 卢春红 (1982—), 女, 博士研究生。

基金项目: 中央高校基本科研业务费专项基金项目 (JUDCF12027, JUSRP51323B); 江苏高校优势学科建设工程项目 (PAPD); 江苏省普通高校研究生创新计划项目 (CX12\_0734)。

Received date: 2014-06-05.

Corresponding author: GU Xiaofeng, xgu@jiangnan.edu.cn

Foundation item: supported by the Fundamental Research Funds for the Central Universities of Ministry of Education of China (JUDCF12027, JUSRP51323B).

the sub-principal component analysis using  $k$ -means clustering and the kernel principal component analysis, the feasibility and effectiveness by the proposed Bayesian inference based PKPCAM method for fault detection and diagnosis in nonlinear and multimode process was validated on Tennessee Eastman process.

**Key words:** nonlinear and multimode process; probabilistic kernel principal component analysis mixture model; Bayesian inference; fault detection; fault diagnosis

## 引 言

过程监控尤其是故障检测与诊断, 对工厂的安全、过程的稳定及产品的质量至关重要。在日常生产中, 任何异常事件的自动检测及故障根源的准确辨识可有效避免严重事故的发生、改善产品质量及减少维修成本。过程监控的首要任务是及早检测出异常事件, 然后进一步诊断出与当前故障最相关的过程变量, 最后采取补救措施进行修复<sup>[1]</sup>。随着现代化工过程规模的增大和集成度的提高, 给故障检测与诊断技术带来了巨大的挑战。在过去的十多年中, 多元统计过程控制 (MSPC) 技术广泛应用于过程监控和故障诊断<sup>[1-3]</sup>。其中, 应用最普遍的是主元分析 (PCA) 和偏最小二乘 (PLS), 它们基于过程数据建立正常操作的模型, 利用  $T^2$  和 SPE 等统计指标来检测故障<sup>[4]</sup>。

实际上, 几乎所有的过程变量都有可能受到随机噪声的污染, 这些过程变量本质上为随机变量, 而大多数 MSPC 方法以确定性的方式进行建模。因此, 对其建立概率模型进行过程监控是一种有效的方法。Kim 等<sup>[5]</sup>利用概率主元分析 (PPCA) 进行过程监控, 过程数据中的噪声信息也被用于建模, 因而构建的模型较精确。然而, PPCA 方法仅局限于线性过程的监控。基于核的方法适用于非线性系统的建模<sup>[6-11]</sup>, Ge 等<sup>[6]</sup>提出核化的 PPCA 方法进行非线性过程监控。Schölkopf 等<sup>[12]</sup>首次提出一种新的 PCA 的非线性扩展方法——核 PCA (KPCA)。Lee 等<sup>[13]</sup>提出采用 KPCA 对污水处理过程进行检测的非线性过程检测技术, 并验证它与 PCA 检测方法相比更优越。然而, 这些基于核的方法大多数不是以概率方式应用于过程系统工程领域。由于正常操作的变换、产品策略的调整等因素, 导致工厂通常运行在不同工况下的多个稳定态, 采集的数据本质上呈现多模态特性。一般采取预聚类策略, 将训练集中的正常和故障数据分离。然而, 对于非线性多模态的过程, 传统的聚类技术并不是最佳选择<sup>[14]</sup>。

本文针对多模态的非线性化工过程, 结合贝叶斯推理策略, 提出一种概率核主元分析混合模型

(PKPCAM), 进行过程监控及故障诊断。首先将训练集投影到高维特征空间, 估计出 PKPCAM 模型, 然后结合贝叶斯推理策略, 提出全局概率指标及全局贡献度指标进行故障检测与诊断。最后, 利用 TEP 仿真过程验证基于贝叶斯推理的 PKPCAM 的故障诊断方法的有效性, 并将结果与次级主元分析 (Sub-PCA)<sup>[14]</sup>和核主元分析 (KPCA) 方法的结果进行比较。

## 1 核主元分析

核主元分析 (KPCA) 通过非线性映射函数  $\phi: R^d \rightarrow R^f (f > d)$ , 将原始空间  $R^d$  上的训练样本  $x = \{x_1, x_2, \dots, x_N\}$  变换到高维特征空间<sup>[13]</sup>。 $R^f$  空间的训练样本记为  $\phi_{f \times N} = [\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N]$ , 其中  $\phi_n = \phi(x_n) \in R^f$ 。特征空间的样本均值  $\bar{\phi}_0$  和协方差矩阵  $C_{f \times f}$  分别为

$$\bar{\phi}_0 = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \phi(x_n) = \phi s \quad (1)$$

$$C = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (\phi_n - \bar{\phi}_0)(\phi_n - \bar{\phi}_0)^T = \phi J J^T \phi^T \quad (2)$$

式中,  $J = N^{-1/2} (I_N - s \mathbf{1}^T)$  为中心化矩阵,  $s_{N \times 1} = N^{-1} \mathbf{1}$  为权值向量,  $\mathbf{1}$  代表  $N$  维元素为 1 的向量。直接计算非线性映射函数  $\phi(x_n)$  代价较大, 因此利用“核技巧”避免维数灾难<sup>[9]</sup>。核函数  $k$  满足下述条件

$$k(x, y) = \phi(x)^T \phi(y), \quad \forall x, y \in R^d \quad (3)$$

定义 Gram 矩阵  $K_0$  及中心化 Gram 矩阵  $K$

$$K_0 = \phi^T \phi \quad (4)$$

$$K = J^T \phi^T \phi J = J^T K_0 J \quad (5)$$

$K_0$  的第  $(i, j)$  个元素可计算为  $\phi(x_i)^T \phi(x_j) = k(x_i, x_j)$ 。最普遍实用的核函数是径向基函数 (RBF)

$$k(x, y) = \exp\left(-\frac{\|x - y\|^2}{2\sigma^2}\right) \quad (6)$$

式中,  $\sigma$  是核宽。

在特征空间, KPCA 对协方差矩阵  $C$  进行特征分解, 通常保留前  $q$  对特征值和对应的特征向量。

对于  $\mathbf{K}$  的前  $q$  个特征对  $\{(\lambda_n, \mathbf{v}_n)\}_{n=1}^q$ ,  $\lambda_n$  按照降序排列。 $\mathbf{C}$  的特征向量以矩阵形式表示为

$$\mathbf{U}_q = [\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_q] = \boldsymbol{\Phi} \mathbf{J} \mathbf{V}_q \mathbf{A}_q^{-1/2} \quad (7)$$

式中,  $\mathbf{V}_q = [\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_q]$ ,  $\mathbf{A}_q = \text{Dig}[\lambda_1, \dots, \lambda_q]$  是对角矩阵, 其对角元素  $\{\lambda_1, \dots, \lambda_q\}$  是  $\mathbf{C}$  矩阵的特征值。

## 2 融合贝叶斯推理的概率核主元分析混合模型

### 2.1 概率核主元分析混合模型 (PKPCAM)

Tipping 等<sup>[15]</sup>从高斯隐变量模型的角度提出了 PCA 的概率表达形式。针对非线性的生产过程, 提出概率核主元分析模型<sup>[16]</sup>。 $f$  维数据  $\phi(x)$  表示成隐变量  $z$  的线性组合加噪声

$$\phi(x) = \mathbf{W}z + \mu + \varepsilon \quad (8)$$

其中,  $z \in R^q$  满足均值为 0、方差为  $\mathbf{I}_q$  的高斯分布  $z \sim G(0, \mathbf{I}_q)$ ;  $\mathbf{W}$  是  $f \times q$  装载矩阵; 噪声  $\varepsilon \in R^f$  满足均值为 0、方差为  $\rho \mathbf{I}_f$  的高斯分布  $\varepsilon \sim G(0, \rho \mathbf{I}_f)$ ,  $\rho$  作为正则化参数, 预设较小的常数。因此,  $\phi(x) \sim G(\mu, \boldsymbol{\Sigma})$ , 其中  $\boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{W} \mathbf{W}^T + \rho \mathbf{I}_f$ 。该模型参数  $\{\mathbf{W}, \mu\}$  可通过最大化似然函数来求解<sup>[17]</sup>, 求出

$$\tilde{\mu} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \phi(x_n) = \boldsymbol{\Phi} \mathbf{s} \quad (9)$$

$$\tilde{\mathbf{W}} = \mathbf{U}_q (\mathbf{A}_q - \rho \mathbf{I}_q)^{1/2} \mathbf{R} \quad (10)$$

其中,  $\mathbf{R}$  为  $q \times q$  正交矩阵。不失一般性, 设  $\mathbf{R} = \mathbf{I}_q$ ,  $\mathbf{U}_q$  和  $\mathbf{A}_q$  是  $\mathbf{C}$  矩阵的前  $q$  个特征向量和特征值。将式(7)代入式(10)可得

$$\tilde{\mathbf{W}} = \boldsymbol{\Phi} \mathbf{J} \mathbf{V}_q \mathbf{A}_q^{1/2} (\mathbf{A}_q - \rho \mathbf{I}_q)^{1/2} \mathbf{R} = \boldsymbol{\Phi} \mathbf{J} \mathbf{Q} \quad (11)$$

其中,  $\mathbf{Q}$  为  $N \times q$  的经验装载矩阵

$$\mathbf{Q} = \mathbf{V}_q (\mathbf{I}_q - \rho \mathbf{A}_q^{-1})^{1/2} \mathbf{R} \quad (12)$$

概率核主元成分模型从概率角度扩展了传统 PCA 的应用范围, 而单一的全局 KPCA 和 PKPCA 方法不能对不同模式转换的过程进行建模。由于全局 PKPCA 依据所有模式数据分布结构来建立模型, 而多模式的过程数据可表示成多个子模型形式, 不同模式之间的数据结构差异较大, 因此, PKPCA 方法对多模式过程监控不够精确。因此, 提出 PKPCAM 方法对非线性多模式过程进行建模, 多个核主元成分组成的混合模型用于描述过程数据的多模式属性。PKPCAM 算法的概率密度函数表示为多个高斯密度函数的主元分量的加权和<sup>[16]</sup>

$$p(\phi(x)) = \sum_{i=1}^I m_i p(\phi(x)|i) \quad (13)$$

其中,  $m_i$  是混合模型中第  $i$  分量的权重系数,

它们之和为 1。第  $i$  分量的高斯密度函数表示为

$$p(\phi(x)|i) = G(\phi(x); \mu_i, \boldsymbol{\Sigma}_i) = \frac{(2\pi)^{-f/2}}{|\boldsymbol{\Sigma}_i|^{1/2}} \exp\left[-\frac{L_i(\phi(x))}{2}\right] \quad (14)$$

在每个混合分量内, 局部 PKPCA 模型满足:  $\phi(x)|i \sim G(\mu_i, \boldsymbol{\Sigma}_i)$ ,  $\boldsymbol{\Sigma}_i = \mathbf{W}_i \mathbf{W}_i^T + \rho_i \mathbf{I}$ ,  $\mathbf{W}_i$  为  $f \times q_i$  的装载矩阵, 反映了第  $i$  分量的核主元数量  $q_i$ 。第  $i$  分量的马氏距离  $L_i(\phi(x))$  表示为

$$L_i(\phi(x)) = (\phi(x) - \mu_i)^T \boldsymbol{\Sigma}_i^{-1} (\phi(x) - \mu_i) \quad (15)$$

混合模型参数  $\{\mu_i, \mathbf{Q}_i, m_i\}$  的最大似然估计可以利用 EM 算法求解。根据贝叶斯公式, 首先计算第  $i$  个分量内的第  $n$  个训练样本的后验概率  $\omega_{ni}$

$$\omega_{ni} = p(i|\phi(x_n)) = \frac{m_i p(\phi(x_n)|i)}{p(\phi(x_n))} = \frac{m_i \exp\left[-\frac{1}{2} L_i(\phi(x_n))\right]}{\sum_{j=1}^I m_j \exp\left[-\frac{1}{2} L_j(\phi(x_n))\right]} \quad (16)$$

EM 迭代可以计算出

$$\tilde{m}_i = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \omega_{ni} \quad (17)$$

$$\tilde{\mu}_i = \frac{\sum_{n=1}^N \omega_{ni} \phi_n}{\sum_{n=1}^N \omega_{ni}} = \sum_{n=1}^N s_{ni} \phi_n = \boldsymbol{\Phi} \mathbf{s}_i \quad (18)$$

其中,  $\mathbf{s}_i = [s_{1i}, s_{2i}, \dots, s_{Ni}]^T$ ,  $s_{ni} = \omega_{ni} / \left(\sum_{n=1}^N \omega_{ni}\right)$ 。

第  $i$  分量内, 具有局部权值的协方差矩阵  $\boldsymbol{\Sigma}_i$  为

$$\boldsymbol{\Sigma}_i = \sum_{n=1}^N s_{ni} (\phi(x_n) - \tilde{\mu}_i)(\phi(x_n) - \tilde{\mu}_i)^T = \boldsymbol{\Phi} \mathbf{J}_i \mathbf{J}_i^T \boldsymbol{\Phi}^T \quad (19)$$

式中,  $\mathbf{J}_i = (\mathbf{I} - \mathbf{s}_i \mathbf{1}^T) \mathbf{Q}_i \mathbf{Q}_i^T \left[ \mathbf{s}_{1i}^{1/2}, \mathbf{s}_{2i}^{1/2}, \dots, \mathbf{s}_{Ni}^{1/2} \right]$ 。

利用  $\mathbf{K}_i = \mathbf{J}_i^T \mathbf{K}_0 \mathbf{J}_i$ , 可得到更新值  $\tilde{\mathbf{Q}}_i$

$$\tilde{\mathbf{Q}}_i = \mathbf{V}_{q_i, i} (\mathbf{I}_{q_i} - \rho \mathbf{A}_{q_i, i}^{-1})^{1/2} \quad (20)$$

其中,  $\mathbf{A}_{q_i, i}$  和  $\mathbf{V}_{q_i, i}$  为  $\mathbf{K}_i$  的前  $q_i$  个特征值和特征向量。

### 2.2 基于贝叶斯推理的 PKPCAM 的故障检测与诊断

第  $i$  混合分量的马氏距离逼近自由度为  $d$  的  $\chi_d^2$  分布

$$L_i(\phi(x_n)|\phi(x_n) \in i) = (\phi(x_n) - \mu_i)^T \boldsymbol{\Sigma}_i^{-1} (\phi(x_n) - \mu_i) \quad (21)$$

若监控变量彼此相关, 则  $\boldsymbol{\Sigma}_i^{-1}$  为坏条件矩阵, 此时用正则化的马氏距离来替代

$$L_i(\phi(x_n)|\phi(x_n) \in i) = (\phi(x_n) - \mu_i)^T (\boldsymbol{\Sigma}_i + \varepsilon \mathbf{I})^{-1} (\phi(x_n) - \mu_i) \quad (22)$$

第  $i$  混合分量内的核投影测试样本  $x_i$  的局部马氏距离概率为

$$PL_i(\phi(x_i)) = Pr\{L_i(\phi(x_i)|\phi(x_i) \in i) \leq L_i(\phi(x_i)|\phi(x_i) \in i)\} \quad (23)$$

根据该概率指标判断测试样本  $x_i$  是否属于对应的混合分量。每个测试样本具有多个不同混合分量的后验概率  $p(i|\phi(x_i))$  作为权重, 与当前测试样本最为匹配的模式具有最大的权重, 其他的模式获得较小的权重。过程中多模式的转换可视为权重大小的调节。因此定义一个全局概率指标 GI

$$GI = \sum_{i=1}^I p(i|\phi(x_i)) PL_i(\phi(x_i)) \quad (24)$$

该指标表示为不同模式的数据样本比测试样本到相应模式中心距离小的全局概率。其将不同混合分量的距离度量与后验概率结合起来, 避免了因错分类导致的误检风险。由于后验概率不会改变 GI 的监控阈值, 在给定的显著性水平下, GI 的控制阈值 CL 满足自由度为  $d$  的  $\chi^2$  分布。

$$CL = g\chi_h^2 \quad (25)$$

其中

$$g = \frac{\text{tr}(\Sigma_i(\Sigma_i + \varepsilon I)^{-1})^2}{\text{tr}(\Sigma_i(\Sigma_i + \varepsilon I)^{-1})}$$

$$h = \frac{[\text{tr}(\Sigma_i(\Sigma_i + \varepsilon I)^{-1})]^2}{\text{tr}(\Sigma_i(\Sigma_i + \varepsilon I)^{-1})^2}$$

因此, 根据 GI 指标值是小于还是大于 CL, 决策过程测试样本处于正常还是故障状态。

本文提出基于贝叶斯推理的 PKPCAM 的贡献度方法, 用于诊断多模态过程中发生异常操作最可能的根源, 即主要故障变量。从概率分析的角度, 考虑了化工过程中所有可能出现的模式, 提出的贡献度指标可以全面进行故障诊断。

假设测试样本  $x_i$  属于第  $i$  混合分量的异常样本, 定义它到第  $i$  混合分量的马氏距离

$$L_i(\phi(x_i)|\phi(x_i) \in i) = \|\Sigma_i^{-1/2}(\phi(x_i) - \mu_i)\|^2 = \sum_{h=1}^{q_i} \mathbf{A}_{h,i} \left( \sum_{n=1}^N v_{n,h}^i k_i(x_i, x_n) \right)^2 \quad (26)$$

其中,  $v_{n,h}^i$  为核矩阵  $\mathbf{k}_i$  的第  $h$  特征向量的第  $n$  元素值。第  $r$  监控变量  $F_r$  的贡献度为混合分量内马氏距离的一次偏导

$$C(r) = \frac{\partial L_i(\phi(x_i)|\phi(x_i) \in i)}{\partial F_r} = \sum_{h=1}^{q_i} \left( 2\mathbf{A}_{h,i} \left( \sum_{n=1}^N v_{n,h}^i k_i(x_i, x_n) \right) \left( \sum_{n=1}^N v_{n,h}^i \frac{\partial k_i(x_i, x_n)}{\partial F_r} \right) \right) \quad (27)$$

考虑含有  $I$  个模式的多模态过程, 将属于每个模式的后验概率作为权重, 第  $i$  模式内的第  $r$  变量相对贡献度指标为

$$CB(r) = p(i|\phi(x_i)) * C(r) \quad (28)$$

对整个操作过程, 第  $r$  变量的全局贡献度为

$$GCB(r) = \sum_{i=1}^I CB(r) \quad (29)$$

该全局贡献度指标是相应的过程变量对异常操作的量化; 其值越大, 说明相应的变量是过程中异常行为的可能性越大。因此, 在正常状态下的变量贡献度通常比较小, 而具有较大贡献度幅值的变量将被识别为引发故障的根源变量。

### 2.3 算法流程

本文提出的 PKPCAM 监控方法, 首先利用训练样本估计概率核主元混合模型参数, 将测试样本投影到高维特征空间, 计算出它关于所有概率核主元混合分量的后验概率; 然后再利用获得的全局概率指标 GI 进行故障检测; 最后, 当故障检测完, 利用全局贡献度指标 GCB 进行故障诊断。

混合模型中混合分量数  $I$  及分量内的主元数  $q_i$  的决策较为复杂, 本文采取 Chen 等<sup>[18]</sup>报道的方法来选择这两个参数。混合模型中的参数初始化可基于用户的先验知识或聚类技术。

基于贝叶斯推理的 PKPCA 算法的监控过程描述如下, 算法流程如图 1 所示。

- (1) 收集不同模式的  $N$  个正常训练样本  $\{x_1, x_2, \dots, x_N\}$ ;
- (2) 计算核矩阵;
- (3) 迭代从  $e = 1$  开始, 初始化后验概率  $p(i|\phi_n)$ ,  $1 \leq i \leq I$ ,  $1 \leq n \leq N$ ;
- (4) 计算每次迭代的模型参数;
- (5) 进行特征值分解, 获得降维主元子空间的特征值和对应的特征向量;
- (6) 估计概率核主元分析的密度函数;
- (7) EM 算法迭代持续到后验概率收敛;
- (8) 对于测试样本  $x_i$ , 计算它到所有混合分量的马氏距离;
- (9) 计算  $x_i$  基于马氏距离的局部概率指标  $PL_i$ ;
- (10) 具体化控制限, 计算全局概率指标 GI;
- (11) 测试样本满足  $GI > CL$ , 检测为异常操作, 进行下面的故障诊断步骤; 否则为正常操作;
- (12) 对已识别出的故障样本, 计算每个变量对所有混合分量的局部贡献度指标  $C(r)$ ;
- (13) 计算每个变量的全局贡献度指标 GCB, 重要贡献的变量认为是故障发生的根源。

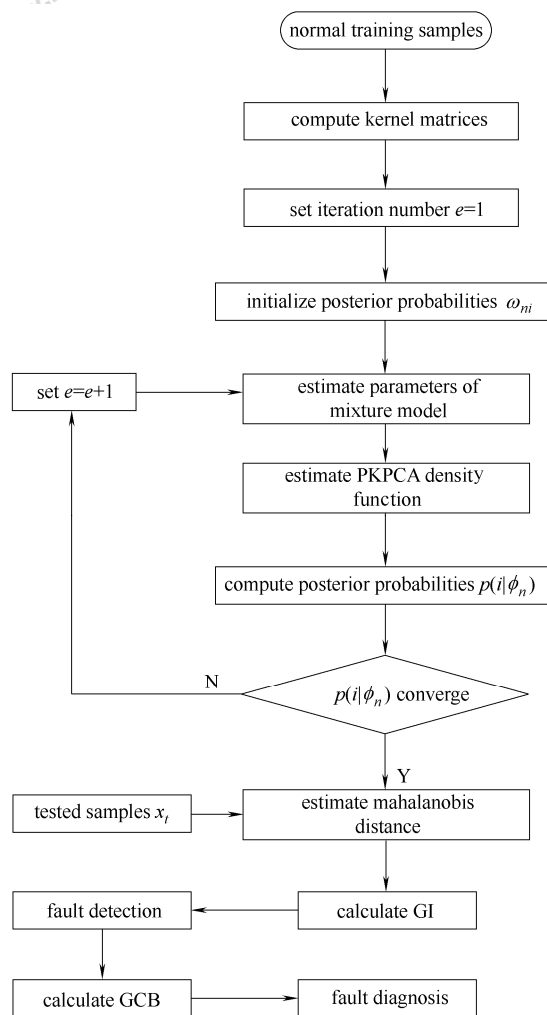


图 1 基于贝叶斯推理的 PKPCAM 的算法流程

Fig.1 Flow chart of proposed PKPCAM based on Bayesian reference method

### 3 仿真研究

#### 3.1 TEP 过程描述

TEP 是一个典型的复杂多变量非线性化工生产过程，它由伊斯曼化学公司创建，其测试过程基于真实工业过程的仿真。TEP 包括反应器、冷凝器、压缩机、分离器和汽提塔 5 个主要单元，A、B、C、D、E、F、G 和 H 8 种成分，有 4 种反应物，产生 2 种产品。该过程有 41 个测量变量和 12 个控制变量，采样间隔是 0.05 h。如表 1 所示，本文选择 34 个变量作为监控变量。如表 2 所示，根据产物 G 和 H 比例的不同，TEP 产生了 6 种最优的稳定模式<sup>[19]</sup>。由于 TEP 本质上是开环不稳定的，因此采用 Ricker<sup>[20]</sup>提出的分散控制策略。仿真过程中，混合分量个数为 6，分量内的主元数为 12；正则参数  $\rho=0.01$ ，RBF 函数中的核宽  $\sigma=2$ 。

表 1 TEP 中的监控变量

Table 1 Monitored variables in TEP

| Variable No. | Measurement variable  | Variable No. | Manipulated variable          |
|--------------|-----------------------|--------------|-------------------------------|
| 1            | A feed rate           | 18           | stripper temperature          |
| 2            | D feed rate           | 19           | steam flow rate               |
| 3            | E feed rate           | 20           | compressor work               |
| 4            | A+C feed rate         | 21           | reactor coolant temperature   |
| 5            | recycle flow rate     | 22           | separator coolant temperature |
| 6            | reactor feed rate     | 23           | D feed valve                  |
| 7            | reactor pressure      | 24           | E feed valve                  |
| 8            | reactor level         | 25           | A feed valve                  |
| 9            | reactor temperature   | 26           | A+C feed valve                |
| 10           | purge rate            | 27           | recycle valve                 |
| 11           | separator temperature | 28           | purge valve                   |
| 12           | separator level       | 29           | separator valve               |
| 13           | separator pressure    | 30           | stripper valve                |
| 14           | separator underflow   | 31           | steam valve                   |
| 15           | stripper level        | 32           | reactor coolant flow          |
| 16           | stripper pressure     | 33           | condenser coolant flow        |
| 17           | stripper underflow    | 34           | agitator speed                |

表 2 TEP 的 6 种过程操作模式

Table 2 Six process operation modes of TEP

| Mode | G/H mass ratio | Production rate (stream 11)                                  |
|------|----------------|--------------------------------------------------------------|
| 1    | 50/50          | 7038 kg · h <sup>-1</sup> G and 7038 kg · h <sup>-1</sup> H  |
| 2    | 10/90          | 1408 kg · h <sup>-1</sup> G and 12669 kg · h <sup>-1</sup> H |
| 3    | 90/10          | 10000 kg · h <sup>-1</sup> G and 1111 kg · h <sup>-1</sup> H |
| 4    | 50/50          | maximum                                                      |
| 5    | 10/90          | maximum                                                      |
| 6    | 90/10          | maximum                                                      |

在正常运行期间，对该 6 种模式，每种模式采集 100 个样本，构成 600 个训练样本。两个测试场景列于表 3，用于验证基于贝叶斯推理的 PKPCAM 方法的诊断能力。故障检测的控制置信限为 95%。首先，正常训练样本用于构建高维特征空间，并识别出概率核主元混合模型；其次，将两种场景的测试样本投影到核特征空间，计算全局概率指标 GI 并检测异常样本，并与 Sub-PCA<sup>[14]</sup>、KPCA 检测方法进行对比；再次，对检测出的故障样本，利用全局贡献度指标 GCB 诊断出故障根源变量；最后，与基于 KPCA 贡献度方法做对比，评估基于贝叶斯推理的 PKPCAM 方法对多模式非线性化工过程的故障诊断能力。

#### 3.2 故障检测与诊断结果

在第一种测试场景中，初始过程在模式 1 运行，10 h 后转换到模式 2。在共计 20 h 的正常操作后，预定义的故障 11（反应器冷却水的入口温度随机变

表 3 TEP 的两种测试场景

Table 3 Two test scenarios in TEP

| Case | Test scenario                                                                                                                                            |
|------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1    | 1st—200th samples: Mode 1<br>201st—400th samples: Mode 2<br>401st—500th samples: Mode 5 with random variation in reactor cooling water inlet temperature |
| 2    | 1st—200th samples: Mode 1<br>201st—400th samples: Mode 3<br>401st—500th samples: Mode 4 with step change in condenser cooling water inlet temperature    |

表 4 Sub-PCA、KPCA 和贝叶斯推理的 PKPCAM 方法的故障检测结果

Table 4 Comparison of fault detection results among Sub-PCA, KPCA and PKPCAM methods/%

| Case | Sub-PCA $T^2$ |     | Sub-PCA SPE |     | KPCA $T^2$ |     | KPCA SPE |      | PKPCAM |     |
|------|---------------|-----|-------------|-----|------------|-----|----------|------|--------|-----|
|      | D1            | D2  | D1          | D2  | D1         | D2  | D1       | D2   | D1     | D2  |
| 1    | 82.5          | 7.1 | 89.7        | 5.9 | 78.3       | 5.4 | 85.6     | 12.1 | 96.0   | 2.0 |
| 2    | 86.8          | 7.6 | 92.6        | 6.5 | 85.4       | 6.2 | 90.3     | 13.4 | 96.5   | 2.5 |

Note: D1—fault detection rate; D2—false alarm rate.

化) 发生。共采集到 500 个测试样本, 利用 GI 指标来检测异常操作; 作为对比, Sub-PCA 和 KPCA 方法则利用  $T^2$  和 SPE 指标来检测故障, 这 3 种方法的监控结果如图 2~图 4 所示, 具体的指标量化结果见表 4。如图 2 所示, 基于  $T^2$  指标的 KPCA 方法产生大量的未识别的故障样本, 而 SPE 指标则触发正常模式的多次误报。该方法未考虑过程的多模态特征, 因而获得较差的监控表现。从图 3 中可看出: Sub-PCA 方法的检测能力比 KPCA 方法稍强, 能获得较多的故障样本, 且正常操作期间的警报次数相对少些。从图 4 给出基于 GI 指标的 PKPCAM 方法的趋势中可观察到, 从 401 个样本起, GI 值超过置信度, 大多数的故障样本触发警报, 仅 4 个样本未被检测出, 检测精度达到 96%; 同时, 8 个正常样本被误检, 整体误报率为 2%。总体而言, 由于 KPCA 方法仅考虑了化工过程的非线性特性而忽视了多模态特性, 其故障检测率不高。Sub-PCA 方法针对过程的多模态特性, 采用  $k$  均值聚类技术将 PCA 装载矩阵分成多个聚类成分, 其故障检测能力相对 KPCA 方法较高, 但是由于不同的模式并不能精确定位, 而且监控不能达到最好的效果。这两种方法的最佳检测结果是: 误报率达到 5.4%, 检测率达到 92.6%。与贝叶斯推理的 PKPCAM 方法相比, Sub-PCA 和 KPCA 方法所构建的模型, 仅考虑了过程的某一方面特性, 因此它们的检测能力未能达到理想的结果。由于贝叶斯推理的 PKPCAM 方法恰当地描述了多模态非线性过程, 其故障检测能力大

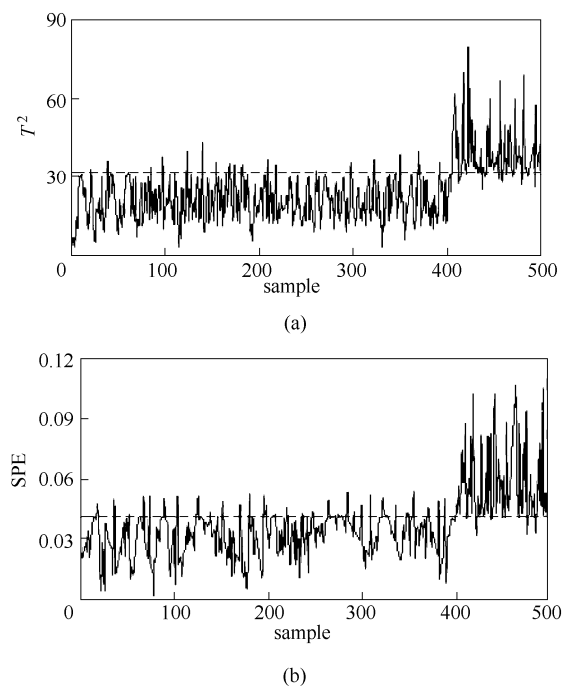


图 2 第 1 种测试场景的 KPCA 的监控趋势

Fig.2 KPCA based monitoring trend in the first test scenario

大提高。当 96 个故障被检测出后, 利用 GCB 诊断这些样本发生故障的根源, 并隔离主要故障变量。作为比较, 基于 KPCA 的贡献度及本文提出的全局贡献度指标 GCB 分别如图 5 (a)、(b) 所示。

反应器冷却水入口温度自第 401 个样本随机变化时, 反应器的温度快速上升, 反应器冷却水流速引起很大振荡。因此, 反应器的温度控制环开放冷却水阀门来补偿温度的变化, 使得温度返回到设置

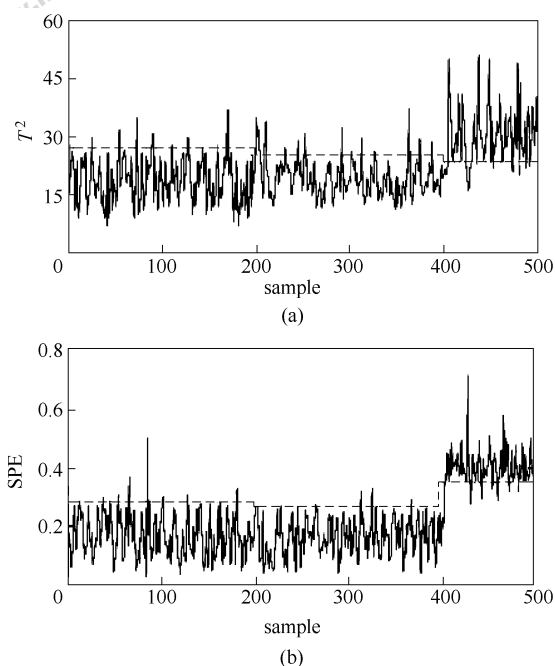


图 3 第 1 种测试场景的 Sub-PCA 的监控趋势

Fig.3 Sub-PCA based monitoring trend in the first test scenario

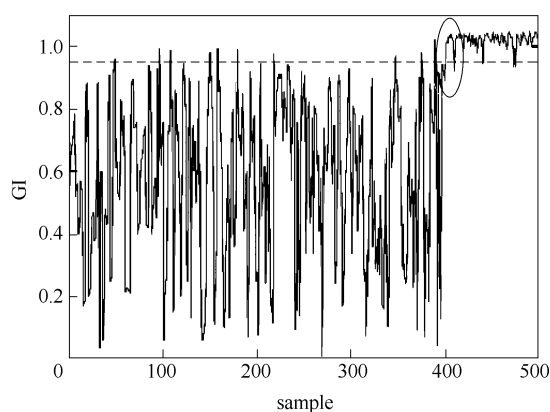


图 4 第 1 种测试场景的 PKPCAM 的监控趋势

Fig.4 PKPCAM based monitoring trend in the first test scenario

点。反应器温度的变化进一步传播到下流的冷凝器过程,使冷凝器的冷却水流量产生很大的变化。本文提出的 GCB 贡献度指标可以有效地找到具有较大贡献度幅值的主要故障变量,剩余的非故障变量则具有较小的贡献度幅值。识别出的 4 个主要故障变量为变量 9 (反应器温度)、32 (反应器冷却水流量)、21 (反应器冷却水出口温度) 和 33 (冷凝器冷却水流量),其中变量 9 具有最大的贡献度幅值,变量 32 其次,而变量 33 的贡献度幅值为第 4。基于贝叶斯推理的 PKPCAM 方法的诊断结果和过程分析、变量间的交互作用完全匹配。与之相比,基

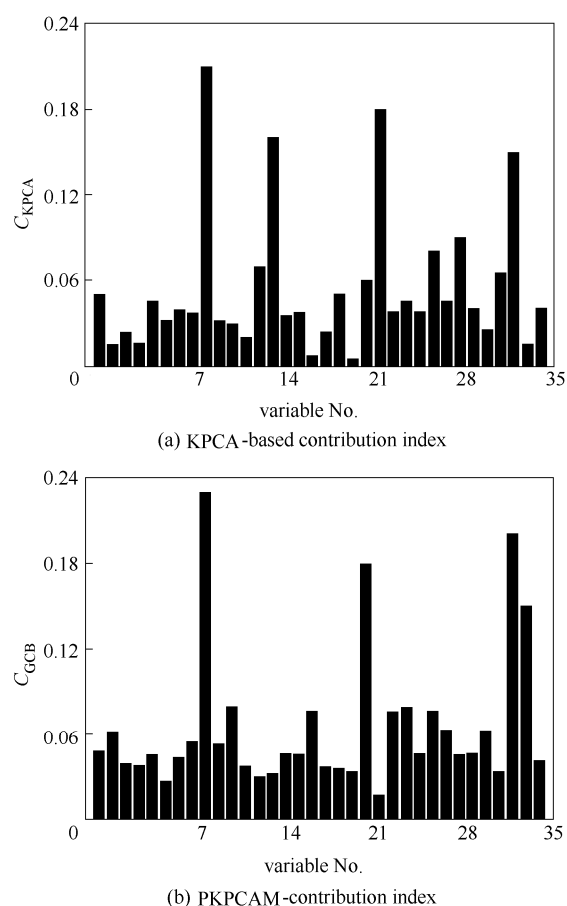


图 5 两种不同方法对第 1 种测试场景的诊断结果

Fig.5 Fault diagnosis results of two different methods in the first test scenario

于 KPCA 的贡献度指出,变量 9 和 32 分别是具有第 1 和第 4 最大贡献度幅值的主要故障变量;而变量 22 和 14 分别具有第 2 和第 3 大的贡献度幅值,它们与反应器冷却温度的异常变化不直接相关,该方法错误地将其诊断为主要故障变量。基于 KPCA 贡献度的方法通过高维特征空间刻画过程本身的非线性,但无法描述过程本身的多模态特性,将某些样本分类成不正确的模态,导致有偏差的诊断结果。相反,基于贝叶斯推理的 PKPCAM 方法采用贝叶斯推理策略,将多个不同的模态以概率方式组合,减轻了误分类的风险。该方法在高维特征空间内划分多个模态,将原始的故障变量从正常或不重要的变量中隔离出来。这个测试场景说明了本文提出的基于贝叶斯推理的 PKPCAM 方法,能够准确地对具有多模态的非线性过程进行故障检测与诊断。

第 2 种测试场景包含两个正常模态,在模态 4 引入冷凝器冷却水入口温度的阶跃变化,共产生 500 个测试样本。基于 PKPCAM、Sub-PCA、KPCA 3 种方法的故障检测结果如图 6~图 8 所示。图 6

中, KPCA 方法  $T^2$  指标趋势中, 较多的故障未警报, 获得较低的检测率, 而 SPE 指标趋势中则触发了较多的误报, 获得 13.4% 的误报率; 图 7 中, 相比 KPCA 而言, Sub-PCA 方法提高了检测能力, 其中 SPE 指标获得 92.6% 的检测精度, 而正常模态触发的误报

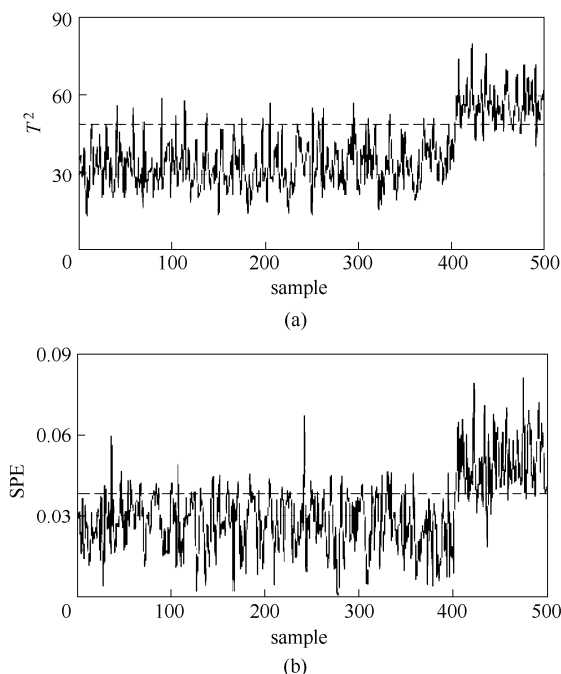


图 6 第 2 种测试场景的 KPCA 的监控趋势

Fig.6 KPCA based monitoring trend in the second test scenario

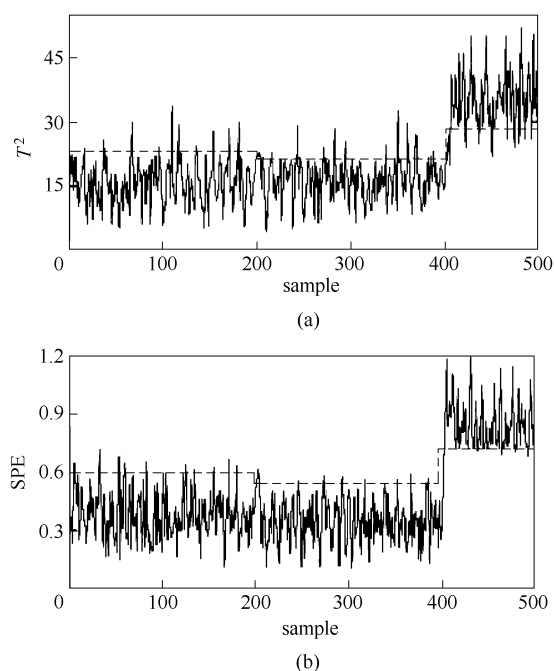


图 7 第 2 种测试场景的 Sub-PCA 的监控趋势

Fig.7 Sub-PCA based monitoring trend in the second test scenario

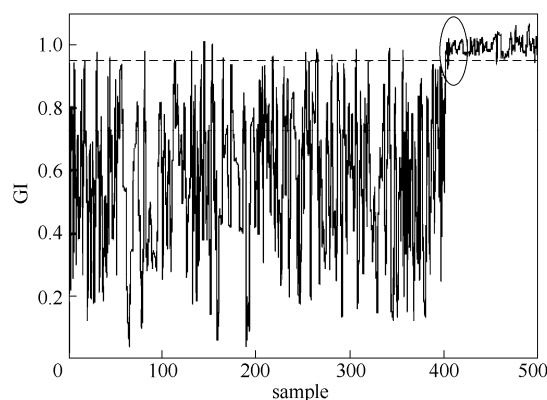


图 8 第 2 种测试场景的 PKPCAM 的监控趋势

Fig.8 PKPCAM based monitoring trend in the second test scenario

率分别为 7.6%、6.5%, 并不能达到令人满意的监控结果。图 8 中, 平均 3.5 个异常样本不能检测出来, 故障检测率为 96.5%。在 400 个正常样本中, 仅误报了 10 次。根据异常事件触发的警报次数及正常样本产生的误报次数, Sub-PCA 和 KPCA 两种方法的检测效果不佳; 与之相反, 基于贝叶斯推理的 PKPCAM 具有令人满意的故障检测能力。这些检测出的样本进一步用来诊断过程发生扰动的原因。当冷凝器冷却水入口温度发生阶跃变化时, 冷凝器出口到汽/液分离器的流速增加, 引起汽/液分离器的温度和分离器冷却水出口温度的升高。通过控制回路补偿此变化, 使分离器中的温度返回设置点。基于 KPCA 和 PKPCAM 方法的贡献度幅值如图 9 (a)、(b) 所示。GCB 贡献度表明变量 33 (冷凝器冷却水流量)、11 (分离器温度) 和 22 (分离器冷却水出口温度) 3 个主要变量具有比其他变量更大的贡献度幅值; 基于 KPCA 贡献度的方法则对变量 33 显示出最大的贡献度幅值, 而另外两个未被抓取的主要故障变量不能从正常变量中分离。比较结果进一步表明, PKPCAM 方法对非线性和多模态的化工过程具有更好的故障诊断能力。

## 4 结 论

本文提出了一种基于贝叶斯推理的 PKPCAM 的故障诊断方法, 可应用于复杂的非线性多模态化工过程。首先利用非线性核函数将原始度量空间内的过程数据投影到高维特征空间, 然后利用概率非线性核主元分析混合模型在特征空间内估计出多个核分量, 利用不同核分量构建全局概率指标 GI 进行故障检测, 并计算每个变量的全局贡献度指标

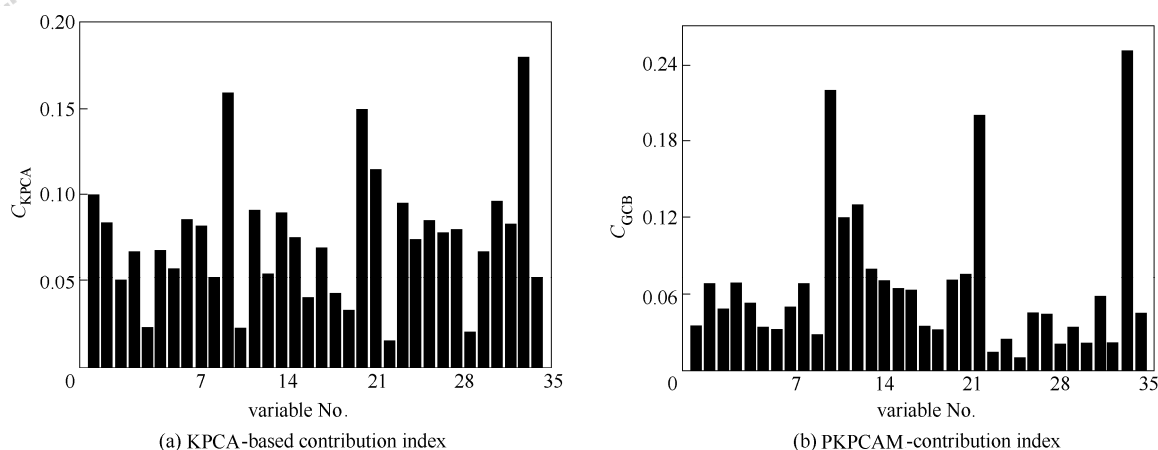


图 9 两种不同方法对第 2 种测试场景的诊断结果

Fig.9 Fault diagnosis results of two different methods in the second test scenario

GCB 用于诊断故障根源。将提出的贝叶斯推理的 PKPCAM 检测和诊断方法应用于 TEP, 设计了随机变化、阶跃变化的两种故障场景, 并与基于 Sub-PCA 和 KPCA 方法的结果进行了比较, 证明了基于贝叶斯推理的 PKPCAM 方法具有更好的监控能力, 并将故障根源变量从正常变量中有效隔离出来。然而, 由于实际应用系统的动态特性, 提出的 GI 指标与 SPE、 $T^2$  指标类似, 对数据的自相关度较敏感。因此, 提出的监控指标要求系统中的每个操作模式逼近稳定态。在工业实践中, 可融合过程专家知识进一步确认监控结果及提高系统的可靠性。因此, 本文方法为非线性多模态连续工业过程的监控提供了有效的工具。

## References

- [1] Chiang L H, Russell E L, Braatz R D. Fault Detection and Diagnosis in Industrial Systems [M]. London: Springer-Verlag, 2001
- [2] Xu Xianzhen (许仙珍), Xie Lei (谢磊), Wang Shuqing (王树青). Multi-mode process monitoring method based on PCA mixture model [J]. *CIESC Journal* (化工学报), 2011, **62** (3): 743-752
- [3] Qin S J. Statistical process monitoring: basics and beyond [J]. *J. Chemom.*, 2003, **17** (8/9): 480-502
- [4] Yue H, Qin S J. Reconstruction based fault identification using a combined index [J]. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2001, **40** (20): 4403-4414
- [5] Kim D, Lee I B. Process monitoring based on probabilistic PCA [J]. *Chemom. Intell. Lab. Syst.*, 2003, **67** (2): 109-123
- [6] Ge Z Q, Song Z H. Kernel generalization of PPCA for nonlinear probabilistic monitoring [J]. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2010, **49** (22): 11832-11836
- [7] Hu Y, Wang L, Ma H H, Shi H B. Online nonlinear process monitoring using kernel partial least squares [J]. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 2011, **62** (9): 2555-2561
- [8] Ge Z Q, Yang C J, Song Z H. Improved kernel-PCA based monitoring approach for nonlinear processes [J]. *Chem. Eng. Sci.*, 2009, **64** (9): 2245-2255
- [9] Vapnik V N. The Nature of Statistical Learning Theory [M]. New York: Springer, 2000
- [10] Jiang Q C, Yan X F. Statistical monitoring of chemical processes based on sensitive kernel principal components [J]. *Chinese J. Chem. Eng.*, 2013, **21** (6): 633-643
- [11] Deng X G, Tian X M, Chen S. Modified kernel principal component analysis based on local structure analysis and its application to nonlinear process fault diagnosis [J]. *Chemom. Intell. Lab. Syst.*, 2013, **127**: 195-209
- [12] Schölkopf B, Smola A, Müller K R. Nonlinear component analysis as a kernel eigen-value problem [J]. *Neural Comput.*, 1998, **10** (5): 1299-1319
- [13] Lee J M, Yoo C K, Choi S W, et al. Nonlinear process monitoring using kernel principal component analysis [J]. *Chem. Eng. Sci.*, 2004, **59** (1): 223-234
- [14] Lu N, Gao F R, Wang F L. Sub-PCA modeling and on-line monitoring strategy for batch processes [J]. *AIChE J.*, 2004, **50** (1): 255-259
- [15] Tipping M E, Bishop C M. Probabilistic principal component analysis [J]. *J. R. Stat. Soc.*, 1999, **61** (3): 611-622
- [16] Zhou S H. Probabilistic analysis of kernel principal components: mixture modeling, and classification [R]. College Park, MD: University of Maryland, 2003
- [17] Duda R O, Hart P E, Stork D G. Pattern Classification [M]. 2nd ed. New York: Wiley, 2001
- [18] Chen T, Sun Y. Probabilistic contribution analysis for statistical process monitoring: a missing variable approach [J]. *Control. Eng. Pract.*, 2009, **17** (4): 469-477
- [19] Downs J J, Vogel E F. Plant-wide industrial process control problem [J]. *Comput. Chem. Eng.*, 1993, **17** (3): 245-255
- [20] Ricker N L. Decentralized control of the Tennessee Eastman challenge process [J]. *J. Process Control*, 1996, **6** (4): 205-221