

研究论文

DOI: 10.11949/0438-1157.

基于 LSTM 自适应动态重构主成分分析的过程监测方法

高振鹏, 张湔南, 赵立杰

(沈阳化工大学信息工程学院, 辽宁 沈阳 110142)

摘要: 针对间歇过程变量时序相关性强、运行状态时变以及早期故障信号弱等问题, 传统动态重构主成分分析 (DRPCA) 采用静态重构矩阵, 难以跟踪不同运行阶段的动态特性变化; 同时, 线性 PCA 对增量矩阵的表征能力有限, 导致微小故障和过程监测灵敏度不足, 易出现检出延迟和漏报率偏高等现象。为此, 本文提出一种基于长短期记忆网络 (LSTM) 的自适应动态重构主成分分析方法 (LADRPCA), 用于过程监测。该方法首先利用 LSTM 对滑动窗口时序数据建模, 获取过程变量的长短期时间相关性; 随后结合 Cayley 变换在线生成满足正交约束的时变重构矩阵, 使模型能够随过程状态变化自适应更新; 最后在 PCA 统计量监测框架的基础上, 引入自编码器对增量矩阵进行特征提取, 并利用重构误差增强对早期微弱故障的监测能力。在三水箱过程和青霉素发酵过程上的实验结果表明, LADRPCA 能够缩短故障检测延迟, 提高故障检测率, 并在较低误报率下保持对早期微弱故障的较好灵敏度与稳定性, 具有一定的过程监测应用潜力。

关键词: 主元分析; 间歇式; 过程监测; 长短期记忆网络; 自编码器; 过程系统

中图分类号: TQ 028.8

文献标志码: A

文章编号: 0438-1157 (XXXX) XX-0001-16

Process monitoring method based on LSTM adaptive dynamic reconstruction principal component analysis

GAO Zhenpeng, ZHANG Haonan, ZHAO Lijie

(College of Information Engineering, Shenyang University of Chemical Technology, Shenyang 110142, Liaoning, China)

Abstract: Batch processes are characterized by strong temporal correlations among process variables, time-varying operating states, and weak incipient fault signals. Traditional dynamic reconstruction principal component analysis (DRPCA) employs a static reconstruction matrix, making it difficult to track changes in dynamic characteristics across different operating phases. Moreover, linear PCA has limited capability to represent incremental matrices, resulting in insufficient sensitivity to minor and incipient faults, as well as delayed detection and missed alarms. To address these problems, an LSTM-based adaptive dynamic reconstruction principal component analysis method, termed LADRPCA, is proposed for process monitoring. First, an LSTM network is employed to model sliding-window time-series data and capture the long- and short-term temporal correlations among process variables. Then, the Cayley transform is used to generate time-varying reconstruction matrices satisfying orthogonality constraints, enabling the model to adaptively track changes in process states. Finally, an autoencoder is

收稿日期: 2026-07-01 修回日期: 2026-08-02

通信作者: 赵立杰(1972—), 女, 博士, 教授, zhaolijie@syuct.edu.cn

第一作者: 高振鹏(1990—), 男, 博士, 讲师, gaozhenpeng_syuct@163.com

基金项目: 辽宁省教育厅高等学校基本科研项目 (LJ212510149028, LJ212410149042); 2023 年度辽宁省研究生教育教学改革研究项目 (2023-132)

引用本文: 高振鹏, 张湔南, 赵立杰. 基于 LSTM 自适应动态重构主成分分析的过程监测方法[J]. 化工学报, XXXX, XX(XX): 1-16

Citation: GAO Zhenpeng, ZHANG Haonan, ZHAO Lijie. Process monitoring method based on LSTM adaptive dynamic reconstruction principal component analysis[J]. CIESC Journal, XXXX, XX(XX): 1-16

incorporated into the PCA statistical monitoring framework to extract features from incremental matrices, and its reconstruction error is used to enhance the sensitivity to incipient weak faults. Experimental results obtained from a three-tank process and a penicillin fermentation process demonstrate that LADRPCA can reduce fault detection delays, improve fault detection rates, and maintain good sensitivity and stability to incipient faults at a low false alarm rate, indicating its potential for process monitoring applications.

Keywords: principal component analysis; batchwise; process monitoring; long-short term memory; autoencoder; process systems

引 言

间歇过程是一种以生产更高质量、严格精细化产品为目标的应用十分广泛的生产方式^[1-2],在现代工业生产中,间歇过程由于其产品种类多、规模小、个性化、附加值高等优点备受关注,由于其生产的灵活和高效的特点,被广泛应用于医药化工^[3]、污水处理^[4]、金属冶炼^[5]、半导体^[6]和生物制药^[7]等领域。然而,间歇过程复杂的生产方式导致系统一旦发生故障,直接影响产品质量,甚至还会引发安全事故危及操作人员的生命安全^[8-9]当间歇过程中的某个变量发生变化时,就会影响整个工业生产过程,进而直接影响到产品的生产效率。同时,间歇过程具有强非线性、非高斯、多阶段和多模态共存等十分复杂的特性,相比于连续过程发生的故障,其故障随机性强、持续时间短以及重复发生频率高,如果没有高效地对故障做出回应,则将造成检测效率降低、速度较慢,对工业生产中的人员安全和财产起不到更好的保障作用,因此,对间歇过程进行故障检测是十分必要和迫切的^[10-12]。

间歇过程通常包含升温、反应、保温、冷却和分离等多个阶段,不同阶段之间工况变化明显,变量间存在强耦合关系,过程动态特性随时间持续演化。同时,由于各批次在初始条件、原料性质、环境因素、设备状态和操作策略等方面难以完全一致,批次间差异较为显著。这些因素使间歇过程表现出非平稳、非线性、动态时变和阶段切换等特征,给过程建模、状态评估与故障监测带来挑战。在实际生产中,原料成分或浓度波动、温度与压力偏差、流量和pH值异常、传感器漂移、执行器故障以及设备老化等因素均可能诱发潜在故障。由于间歇过程具有较强的时间相关性和阶段依赖性,某一阶段的异常可能沿时间方向累积并传递至后续阶段,最终导致产品质量下降、能耗增加、生产效率降低,甚至引发批次报废和安全事故。因此,面向间歇过程建

立高效、灵敏且可靠的故障监测方法,对提高生产安全水平、保障产品质量、降低生产成本和推动过程工业智能化具有重要意义。

早在1959年,Jackson^[13]就把主成分分析(PCA)用于描述多变量过程,随后在1979年,Jackson^[14]把PCA投影与降维用于多变量过程监测,用于PCA的统计量和控制图也在同一时期被提出。另一种常用的投影和降维技术—PLS,同样被用于多变量过程监测,其采用与PCA相似的统计量和控制图^[15-16]。PCA与PLS共同构成了MSPC的基础,尽管这个基础已经在数十年前被奠定,但直到1980年以来,它们才在实际应用中取得较大进展,这一方面是因为只有现代计算机的软硬件才有可能执行各种MSPC技术中涉及的大量计算,另一方面,直到先进的传感器和数据采集系统出现,才大幅增加了用MSPC技术正确处理海量数据的需求^[17]。工厂直接测量的大量数据包含真正影响工艺与质量的关键信息,同时也包含了冗余和噪声,只有能够同时处理所有数据变量并深入挖掘和分析的MSPC技术才能有效地提取重要信息并排除噪声影响。PCA和PLS的目标都是创建一个反映系统真实维度的主成分集合,这些主成分是原始测量变量的线性组合,由于许多工业过程可能包含高度相关的过程变量,因此可以使用较少数量的主成分来捕获过程数据的变化^[18]。因此,PCA和PLS在简化和处理多变量过程数据中被广泛应用。

围绕PCA和PLS,研究者提出了多种扩展方法。例如,动态PCA(dynamic PCA,DPCA)^[19]和动态PLS(dynamic PLS,DPLS)^[20]通过引入历史样本信息增强对过程动态性的描述;核PCA(kernel PCA,KPCA)^[21-22]和核PLS(kernel PLS,KPLS)^[23]通过非线性映射提升对复杂非线性过程的建模能力。此外,基于多块信息提取的PCA^[24]、分布式偏最小二乘^[25]、级联监测网络^[26]、广义概率监测模型^[27]以及基于小波的统计控制图^[28]等方法,也为复杂、高维、强耦合

和非线性过程监测提供了有效工具。同时,分布式ICA-PCA等独立分量分析与主成分分析结合的建模思路也用于工业过程故障监测^[29]。

针对高度相关数据异常和多阶段时变过程,已有研究进一步将Hellinger距离、多阶段AR-PCA及动态PCA框架用于过程监测^[30-32]。这些方法增强了对过程动态特征的描述能力,但总体上仍依赖预先设定的阶段划分、固定投影空间或线性结构,对运行状态持续变化和早期微弱故障的在线自适应跟踪能力仍然有限。

随着过程数据采集与存储能力的提高,深度信念网络、自编码器、循环神经网络、LSTM和卷积神经网络等非线性建模方法逐渐应用于间歇过程监测^[33-39]。上述方法能够通过多层网络学习复杂的非线性特征,但多数研究侧重于全局潜在特征提取,对不同运行阶段下动态映射关系的实时变化关注不足。同时,完全依赖神经网络输出进行异常判别,容易弱化传统统计监测方法的结构约束和可解释性,网络规模及参数设置也会对模型稳定性和在线计算效率产生影响。

动态重构主成分分析(DRPCA)^[40]通过构建最优正交重构矩阵,将过程数据分解为主元空间分量、动态增量分量和噪声分量,能够有效挖掘过程动态变化信息,并在故障监测精度与计算效率之间取得较好平衡。尽管DRPCA能够通过重构增量表征过程动态信息,但在间歇过程监测中仍存在一定局限。DRPCA的重构矩阵通常基于离线正常数据一次性确定,并在后续监测过程中保持不变,因此难以根据过程运行状态的变化实时调整。其次,DRPCA主要依赖线性PCA提取增量特征,对复杂动态关系和微弱异常的监测能力有限,在早期微小故障或缓慢渐变故障发生时,可能出现检测响应滞后、漏报率较高等问题。从方法机理上看,DRPCA利用正交重构矩阵描述相邻采样时刻之间的动态关系。对于平稳或动态变化较弱的过程,由正常历史数据得到的固定重构矩阵能够在一定程度上表征过程的整体动态特征。然而,间歇过程通常包含多个运行阶段,各阶段的变量相关结构具有明显差异。采用单一固定矩阵时,模型更倾向于描述不同阶段动态关系的整体平均特征,难以准确反映当前阶段的局部动态状态。由此产生的动态增量中可能包含由正常阶段变化引起的非故障偏差,使监测统计量出现额外波动,并降低模型对微弱故障的辨

识能力。因此,有必要根据当前过程状态对重构矩阵进行动态调整,将传统静态重构机制扩展为时变自适应重构机制,以增强DRPCA对间歇过程非平稳动态特性的适应能力。

针对上述问题,本文提出一种基于LSTM的自适应动态重构主成分分析方法(LADRPCA)。首先,利用LSTM从滑动窗口数据中提取当前运行状态的时序特征,生成与过程状态相关的动态参数。其次,结合Cayley变换将学习得到的参数映射为满足正交约束的时变重构矩阵,使重构矩阵能够随过程状态在线自适应更新,从而克服传统DRPCA静态重构矩阵难以跟踪过程时变与阶段切换的不足。最后,在主元空间和残差空间统计量的基础上,引入自编码器重构误差统计量,增强对增量向量中微弱异常特征的响应。通过上述机制,所提方法能够更好地适应间歇过程的强动态、非平稳和时变特性,为过程监测提供新的解决思路。

1 基本方法

1.1 动态重构主成分分析(DRPCA)

动态重构主成分分析是一种面向动态工业过程监测的多变量统计建模方法。传统PCA主要关注变量之间的静态相关关系,能够通过降维提取数据中的主要变化信息,但对于工业过程数据中普遍存在的时间相关性和动态演化特征刻画能力有限。动态PCA(DPCA)虽然通过构造时滞扩展矩阵引入历史样本信息,在一定程度上增强了对动态过程的描述能力,但其本质上仍是对当前样本与历史样本进行简单拼接,缺乏对相邻样本之间直接动态联系的定量建模。针对这一问题,DRPCA通过寻找当前样本与历史样本之间的最优正交重构关系,提取过程数据中的直接动态连接信息,从而提高动态过程监测的有效性。

设经过标准化处理后的训练数据矩阵为:

$$X = \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \vdots \\ X_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times p} \quad (1)$$

式中, n 表示样本数量; p 表示过程变量个数; $X_i \in \mathbb{R}^{1 \times p}$ 为第*i*个采样时刻的样本向量。为了刻画相邻样本之间的动态关系,DRPCA将训练数据划分为过去子矩阵和当前子矩阵:

$$X_A = \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \vdots \\ X_{n-1} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(n-1) \times p} \quad (2)$$

$$X_B = \begin{bmatrix} X_2 \\ X_3 \\ \vdots \\ X_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(n-1) \times p} \quad (3)$$

式中, X_A 表示过去样本组成的子矩阵; X_B 表示当前样本组成的子矩阵。DRPCA 的核心思想是寻找一个正交重构矩阵 $R \in \mathbb{R}^{p \times p}$, 使得当前样本经过正交变换后能够尽可能逼近其对应的过去样本, 即:

$$\hat{X}_{i-1} = X_i R \quad (4)$$

式中, $\hat{X}_{i-1}$ 表示由当前样本 X_i 重构得到的过去样本。该重构过程可理解为利用当前时刻数据反映其与上一时刻数据之间的动态联系。为了保证重构矩阵能够保持原始数据的几何结构, 并降低噪声和过拟合对模型的影响, DRPCA 对重构矩阵施加正交约束, 即:

$$R^T R = I \quad (5)$$

在此基础上, 最优重构矩阵 R 可通过最小化当前样本重构过去样本的误差获得:

$$\min J = \min \sum_{i=2}^n \|X_i R - X_{i-1}\|^2 \quad (6)$$

将其写成矩阵形式为:

$$\min J = \min \|X_B R - X_A\|_F^2 \quad (7)$$

式中, $\|\cdot\|_F$ 表示 Frobenius 范数。上述优化问题的目标是使当前子矩阵 X_B 经正交矩阵 R 变换后尽可能接近过去子矩阵 X_A 。因此, 矩阵 R 包含了训练数据集中当前样本与历史样本之间的直接动态映射关系。

对矩阵 $X_A^T X_B$ 进行奇异值分解:

$$X_A^T X_B = U S V^T \quad (8)$$

式中, U 和 V 为正交矩阵; S 为奇异值对角矩阵。在正交约束 $R^T R = I$ 下, 通过奇异值分解可得到使目标函数最小的重构矩阵为:

$$R = V U^T \quad (9)$$

获得重构矩阵后, DRPCA 利用当前样本与其重构过去样本之间的差异构造重构增量矩阵。对于第 i 个样本, 其重构增量向量定义为:

$$E_\Delta(i) = X_i - \hat{X}_{i-1} = X_i - X_i R = X_i (I - R) \quad (10)$$

由所有样本组成的重构增量矩阵可表示为:

$$E_\Delta = X_B - X_B R = X_B (I - R) \quad (11)$$

与直接相邻样本差分相比, 重构增量矩阵不仅包含过程变量的变化信息, 还保留了原始数据中的

部分基础信息和动态关联结构, 能够更加充分地反映动态工业过程的运行特征。因此, DRPCA 进一步以重构增量矩阵 E_Δ 作为 PCA 建模对象, 对其进行主成分分解:

$$E_\Delta = T_\Delta P_\Delta^T + \tilde{E}_\Delta \quad (12)$$

式中, T_Δ 为得分矩阵; P_Δ 为负载矩阵; $\tilde{E}_\Delta$ 为残差矩阵。通过对 E_Δ 进行 PCA 分解, DRPCA 将重构增量信息划分为主元子空间和残差子空间, 分别用于描述过程中的主要动态变化和未建模残差信息。

1.2 长短期记忆网络(LSTM)

长短期记忆网络是一种适用于时序数据建模的深度学习结构, 能够有效处理长序列依赖问题, 避免传统循环神经网络的梯度消失问题。LSTM 通过遗忘门、输入门和输出门控制信息的保留与更新, 可自适应学习间歇过程的复杂动态变化规律, 为后续动态重构提供时序特征支撑。

$$f_t = \sigma(W_f[h_{t-1}, x_t] + b_f) \quad (13)$$

$$i_t = \sigma(W_i[h_{t-1}, x_t] + b_i) \quad (14)$$

$$\tilde{c}_t = \tanh(W_c \cdot [h_{t-1}, x_t] + b_c) \quad (15)$$

$$c_t = f_t \odot c_{t-1} + i_t \odot \tilde{c}_t \quad (16)$$

$$o_t = \sigma(W_o[h_{t-1}, x_t] + b_o) \quad (17)$$

$$h_t = o_t \odot \tanh(c_t) \quad (18)$$

式中, $\sigma(\cdot)$ 为 Sigmoid 激活函数; $\odot$ 为逐元素乘法; W_f, W_i, W_c, W_o 和 b_f, b_i, b_c, b_o 分别为各门控的权重矩阵与偏置向量; $h_t \in \mathbb{R}^{d_h}$ 为隐层状态向量; d_h 为隐层维度。LSTM 输出当前时刻的隐层状态 h_t , 经全连接层映射为无约束参数矩阵, 进而作为生成时变正交重构矩阵的输入支撑。LSTM 的结构如图 1 所示。

1.3 Cayley 变换

Cayley 变换是一种将反对称矩阵映射为正交矩阵的方法。本文利用该变换生成满足正交约束的重构矩阵, 从而避免直接对矩阵进行复杂的正交化处理。在动态监测中, 该变换用于实现时变正交重构矩阵的快速更新, 保证生成的重构矩阵满足正交约束, 从而使后续动态增量计算更加稳定。

对 LSTM 输出进行反对称化处理, 得到满足 $A(t)^T = -A(t)$ 的矩阵 $A(t)$ 。进一步定义

$$M(t) = I - A(t) \quad (19)$$

$$N(t) = I + A(t) \quad (20)$$

在此基础上, 时变重构矩阵可表示为:

$$R(t) = M(t) N^{-1}(t) \quad (21)$$

也就是:

$$R(t) = [I - A(t)][I + A(t)]^{-1} \quad (22)$$

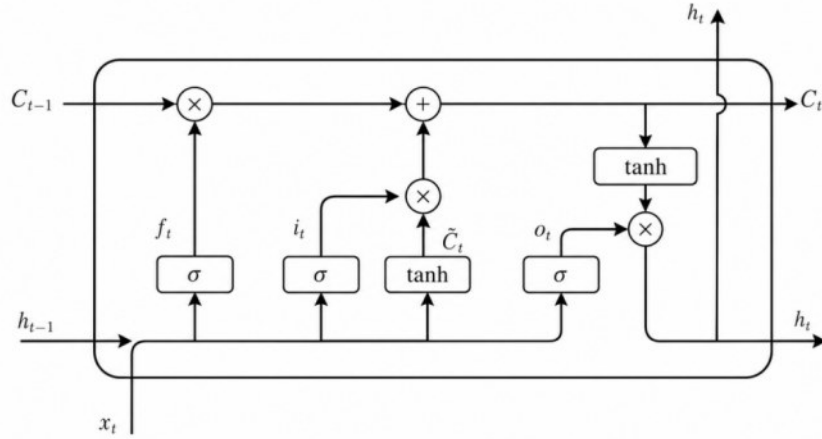


图1 LSTM结构图

Fig.1 LSTM structure diagram

由于 $A(t)$ 为反对称矩阵,重构矩阵的转置可写为:

$$R^T(t) = [I - A(t)]^{-1} [I + A(t)] \quad (23)$$

因此有

$$R^T(t)R(t) = [I - A(t)]^{-1} [I + A(t)] [I - A(t)] [I + A(t)]^{-1} = I \quad (24)$$

可以验证 $R^T(t)R(t) = I$,即 $R(t)$ 为正交矩阵。与直接输出重构矩阵相比,Cayley变换可以在生成过程中保持正交约束,减少额外的正交化处理。

1.4 自编码器(AE)

自编码器(Autoencoder, AE)是一种无监督人工神经网络,常用于数据降维和特征提取。其基本结构由编码器与解码器两部分组成:编码器将原始输入数据压缩至低维隐藏空间,提取数据的本质特征表示;解码器则将低维特征反向映射重构原始数据,使重构误差尽可能小,从而保留原始数据的主要信息。结构如图2所示。

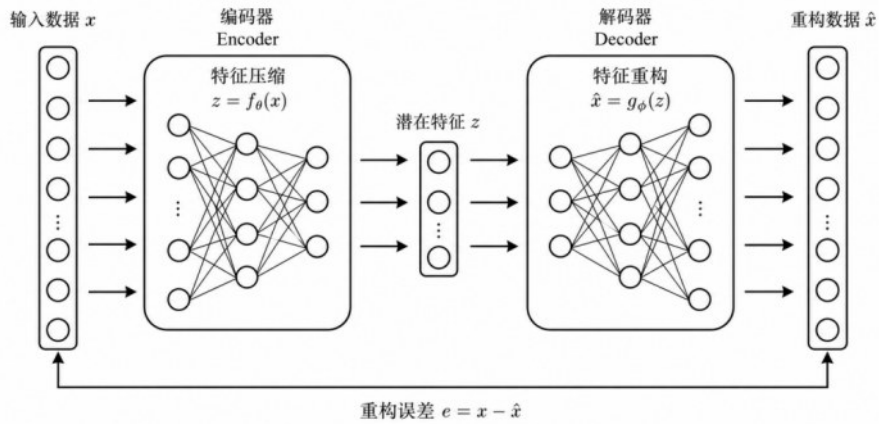


图2 AE结构图

Fig.2 AE structure diagram

设输入样本为 $x \in \mathbb{R}^m$,输入样本个数为 n ,编码后的隐藏层特征向量为 $z \in \mathbb{R}^d$,其中 $d < m$ 。编码器将输入 x 映射至低维隐藏层,得到特征表示 z :

首先,将输入样本映射至编码层的线性空间:

$$u_e = W_e x + b_e \quad (25)$$

随后,通过非线性激活函数获得隐含特征:

$$z = f(u_e) \quad (26)$$

式中, W_e 和 b_e 分别为编码层的权重矩阵和偏置

向量; u_e 为编码层的线性输出; z 为经过非线性映射后获得的低维特征表示。解码器将隐藏层特征 z 反向映射,重构原始输入 $\hat{x}$:

$$\hat{x} = g(W_d z + b_d) \quad (27)$$

式中, $g(\cdot)$ 为解码器的激活函数; $W_d \in \mathbb{R}^m \times d$ 为解码器权重矩阵; $b_d \in \mathbb{R}^m$ 为对应的偏置向量。

自编码器网络训练的目标是最小化输入数据

与重构数据之间的重构误差,损失函数定义为:

$$J_{AE} = \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^n \|\hat{\mathbf{x}}_i - \mathbf{x}_i\|^2 \quad (28)$$

通过最小化上述损失函数,网络参数 $\theta = \{\mathbf{W}_e, \mathbf{W}_d, \mathbf{b}_e, \mathbf{b}_d\}$ 经反向传播算法迭代更新,使重构数据与原始输入尽可能一致。

在本文方法中,自编码器作为PCA统计监测框架的补充,对增量矩阵 $\mathbf{E}_\Delta$ 进行特征提取与参数化建模。经正常工况数据离线训练后,自编码器能够建立增量矩阵在正常工况下的分布基准。当过程发生故障时,故障样本的增量特征偏离正常分布,重构误差增大,据此可实现对早期微弱故障的灵敏检测。相较于线性PCA,自编码器能够提取增量矩阵中的特征。当故障引起增量向量变化时,其重构误差会增大,因此可作为PCA统计量的补充,用于提高对微弱故障的检测能力。

2 LADRPCA 间歇过程监测方法

2.1 数据预处理

间歇过程数据构成三维矩阵 $\mathbf{X}(I \times J \times K)$, 其中 I 为批次数, J 为变量数, K 为采样时刻数。为便于建模,采用批次-变量展开法将三维数据展开为二维矩阵,展开过程如图3所示。

首先,沿时间方向将三维矩阵展开,得到二维矩阵 $\mathbf{X}(I \times KJ)$, 其中每行对应一个批次,每列对应某时刻某变量的观测值;然后对其进行标准化处理(沿批次方向对每个时刻-变量组合计算均值和标准差);再沿批次方向将各时刻数据依次堆叠,重排为 $\mathbf{X}(KI \times J)$, 其中每行对应某批次某时刻的样本向量,每列对应一个过程变量;最后以 $\mathbf{X}(KI \times J)$ 作为后续建模的数据矩阵。

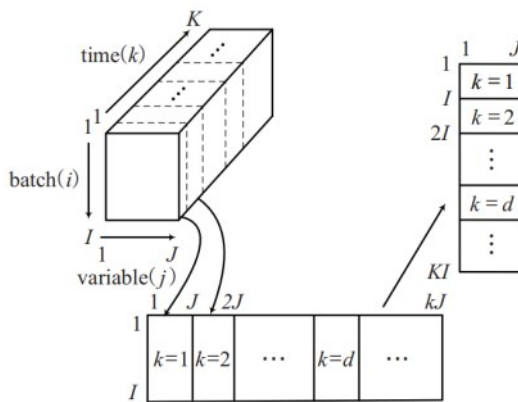


图3 间歇过程数据展开方式

Fig.3 Data expansion method for batch processes

在实际生产过程中,数据动态性问题往往对故障检测结果造成不良影响。对于间歇过程而言,不同采样时刻之间的过程变量存在强时序相关性,若直接对展开后的二维数据进行静态建模,则难以有效描述变量间的动态演化规律。为此,本文在数据预处理阶段引入滑动窗口机制,以当前时刻 t 为基准,截取长度为 $l+1$ 的历史数据序列,构造时序输入矩阵:

$$\mathbf{z}(t) = [\mathbf{x}(t-l), \mathbf{x}(t-l+1), \dots, \mathbf{x}(t)] \in \mathbb{R}^{(l+1) \times m} \quad (29)$$

式中, m 为过程变量个数; l 为滞后阶数;滑动窗口长度为 $l+1$ 。同时,构造对应的时滞窗口矩阵:

$$\mathbf{X}_{\text{lag}}(t) = [\mathbf{x}(t-l-1), \mathbf{x}(t-l), \dots, \mathbf{x}(t-1)] \in \mathbb{R}^{(l+1) \times m} \quad (30)$$

即 $\mathbf{X}_{\text{lag}}(t)$ 的第 i 行为 $\mathbf{z}(t)$ 第 i 行对应的前一采样时刻数据,两者配对用于后续动态增量矩阵的计算。第 i 批次在第 k 采样时刻的窗口数据矩阵具体形式为:

$$\mathbf{X}_i(k) = \begin{bmatrix} x_{k-l,1}^i & x_{k-l,2}^i & \dots & x_{k-l,m}^i \\ x_{k-l+1,1}^i & x_{k-l+1,2}^i & \dots & x_{k-l+1,m}^i \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{k,1}^i & x_{k,2}^i & \dots & x_{k,m}^i \end{bmatrix} \quad (31)$$

滞后阶数 l 的选取对模型性能有重要影响: l 过小时历史信息不足,难以表征过程动态; l 过大则引入与当前阶段无关的早期历史信息,增加计算负担。本文在验证集上对比不同滞后阶数下的监测效果,综合考虑故障检测率、误报率和计算复杂度,最终选取滞后阶数 $l=5$, 对应滑动窗口长度为6。

2.2 LSTM-Cayley 时变正交重构矩阵生成

上述滑动窗口数据 $\mathbf{z}(t)$ 与时滞矩阵 $\mathbf{X}_{\text{lag}}(t)$ 将作为后续时变重构矩阵生成的输入。传统 DRPCA 中的重构矩阵 $\mathbf{R}^*$ 通过离线训练获得,为全局静态固定矩阵,难以随间歇过程状态的实时演化自适应更新。为克服这一缺陷,本文引入 LSTM 网络与 Cayley 变换,构建时变正交重构矩阵生成机制。在线监测阶段,以当前时刻 t 的滑动窗口历史数据为输入,构造时序输入矩阵 $\mathbf{z}(t) \in \mathbb{R}^{(l+1) \times m}$ 作为 LSTM 的输入。需要说明的是, $\mathbf{z}(t)$ 仅作为 LSTM 的时序输入,用于提取当前过程状态的动态特征;最终生成的时变重构矩阵 $\mathbf{R}(t)$ 仍作用于当前样本 $\mathbf{x}(t) \in \mathbb{R}^{1 \times m}$ 。将 $\mathbf{z}(t)$ 输入至已训练的 LSTM 网络,经门控机制对窗口内历史时序信息进行选择性记忆与遗忘,输出隐藏状态 $\mathbf{h}_t$, 提取过程数据中的时序相关信息。随后,通过线性映射层将 $\mathbf{h}_t$ 映射为 $m \times m$ 阶参数矩阵 $\mathbf{P}(t)$, 并对其进行反对称化处理,得到反对称矩阵 $\mathbf{A}(t)$, 满足 $\mathbf{A}(t)^T = -\mathbf{A}(t)$:

$$A(t) = \frac{P(t) - P(t)^T}{2}, P(t) = \text{reshape}(\mathbf{W}_p \mathbf{h}_t + \mathbf{b}_p) \# (32)$$

式中, $\mathbf{W}_p \in \mathbb{R}^{m^2 \times d_h}$ 为线性映射权重矩阵; $\mathbf{b}_p \in \mathbb{R}^{m^2}$ 为偏置向量; d_h 为 LSTM 隐藏层维数。进一步, 利用 Cayley 变换将 $A(t)$ 映射为满足正交约束的时变重构矩阵 $\mathbf{R}(t)$:

$$\mathbf{R}(t) = (\mathbf{I} - A(t))(\mathbf{I} + A(t))^{-1} \# (33)$$

由第 1.3 节可知, $\mathbf{R}(t)$ 满足 $\mathbf{R}(t)^T \mathbf{R}(t) = \mathbf{I}$, 无需引入迭代正交化过程。 $\mathbf{R}(t)$ 随每一时刻 LSTM 输出实时更新。

为进一步说明 Cayley 变换的理论作用, 由式 (32) 可知, $A^T(t) = -A(t)$ 。根据式 (33), 有

$$\mathbf{R}^T(t) = [\mathbf{I} - A(t)]^{-1} [\mathbf{I} + A(t)] \# (34)$$

进而得到

$$\mathbf{R}^T(t) \mathbf{R}(t) = [\mathbf{I} - A(t)]^{-1} [\mathbf{I} + A(t)] [\mathbf{I} - A(t)] [\mathbf{I} + A(t)]^{-1} = \mathbf{I} \# (35)$$

因此, Cayley 变换能够将 LSTM 生成的动态参数映射为满足正交约束的时变重构矩阵。LSTM 负责提取当前过程状态的时序特征, Cayley 变换负责保持重构矩阵的结构稳定性, 二者共同实现重构矩阵随过程状态的自适应更新。

基于时变正交重构矩阵 $\mathbf{R}(t)$, 在线计算当前时刻的增量矩阵:

$$\mathbf{E}_\Delta(t) = \mathbf{z}(t) - \mathbf{X}_{\text{lag}}(t) \mathbf{R}(t), \mathbf{E}_\Delta(t) \in \mathbb{R}^{(l+1) \times m} \# (36)$$

式中, $\mathbf{X}_{\text{lag}}(t) \in \mathbb{R}^{(l+1) \times m}$ 为当前时刻构造的时滞窗口矩阵; $\mathbf{E}_\Delta(t) \in \mathbb{R}^{(l+1) \times m}$ 为动态增量矩阵; 包含过程状态偏离正常重构轨迹的动态残差信息, 是后续异常检测的核心特征载体。为与后续 PCA 与自编码器建模输入保持一致, 本文取 $\mathbf{E}_\Delta(t)$ 的最后一行作为当前时刻的动态增量向量 $\mathbf{e}_\Delta(t) \in \mathbb{R}^{1 \times m}$, 并将其用于后续监测统计量计算。训练阶段采用整个滑动窗口的重构误差更新 LSTM-Cayley 模块, 以充分利用窗口内历史动态信息; 在线监测阶段则取增量矩阵最后一行作为当前时刻的监测特征。

为了使 LSTM 网络能够学习到有效的动态子空间映射, 本文以重构误差最小为优化目标。通过最小化正常工况下的动态重构误差, LSTM-Cayley 模块能够学习正常过程中的时变动态映射关系。当过程发生故障时, 该映射关系被破坏, 动态增量误差增大, 从而为后续异常检测提供敏感特征。因此, 定义 LSTM 模块的损失函数 L_{LSTM} 为历史滑动窗口内重构误差的均方范数:

$$L_{\text{LSTM}} = \frac{1}{N_{\text{train}}} \sum_{t=1}^{N_{\text{train}}} \|\mathbf{z}(t) - \mathbf{X}_{\text{lag}}(t) \mathbf{R}(t)\|_F^2 \# (37)$$

式中, N_{train} 为离线训练样本的总数; $\|\cdot\|_F$ 为

Frobenius 范数。通过反向传播算法最小化 L_{LSTM} , LSTM 的权重参数及线性映射参数 $\mathbf{W}_p, \mathbf{b}_p$ 得以更新。由于 Cayley 变换是可导的, LSTM 参数和线性映射参数可以通过反向传播进行更新。

本文模型参数的设置遵循动态信息充分性、模型复杂度可控和在线计算稳定性相平衡的原则。其中, 滑动窗口长度决定模型使用的近期历史信息范围; LSTM 网络规模根据输入变量维数和正常训练样本规模进行控制, 以避免网络容量过大导致过拟合; 自编码器采用低维特征压缩方式, 使隐藏特征维数低于原始增量向量维数, 从而形成必要的信息瓶颈, 避免网络退化为简单的恒等映射。PCA 保留的主元数根据正常训练数据的累积方差贡献率确定, 监测统计量控制限则按照不同运行阶段的正常样本分布, 在 99% 置信水平下分别确定。本文重点研究状态相关的时变正交重构机制, 未对全部神经网络超参数进行穷举式全局优化, 参数自动选择及其跨过程迁移能力将在后续研究中进一步讨论。

2.3 基于自编码器的增量矩阵特征提取

传统 DRPCA 对增量矩阵 $\mathbf{E}_\Delta$ 采用线性 PCA 进行特征提取, 模型表征能力有限, 对早期微弱故障及渐变缓慢故障的响应不足。为此, 本文在 PCA 统计量监测框架的基础上, 引入自编码器对增量向量进行更精细的特征提取, 并利用重构误差补充 PCA 统计量的监测能力。

在离线建模阶段, 利用正常工况下全部批次数据的增量向量 $\mathbf{E}_\Delta \in \mathbb{R}^{N \times m}$ 对自编码器进行训练。编码器将增量向量 $\mathbf{e}_\Delta(t) \in \mathbb{R}^{1 \times m}$ 映射至低维隐藏特征 $\mathbf{Z}_{ae}$:

$$\mathbf{Z}_{ae} = f(\mathbf{W}_e \mathbf{e}_\Delta + \mathbf{b}_e) \# (38)$$

解码器将低维特征 $\mathbf{Z}_{ae}$ 重构为增量向量的估计值 $\hat{\mathbf{e}}_\Delta$:

$$\hat{\mathbf{e}}_\Delta = g(\mathbf{W}_d \mathbf{Z}_{ae} + \mathbf{b}_d) \# (39)$$

自编码器的训练目标为最小化增量向量的重构误差:

$$J_{AE} = \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^n \|\hat{\mathbf{e}}_i - \mathbf{e}_i\|^2 \# (40)$$

式中, n 为训练样本数。经正常工况数据充分训练后, 自编码器建立正常工况下增量矩阵的分布基准。当过程发生故障时, 增量矩阵的统计分布产生偏移, 自编码器对异常增量向量的重构误差增大, 从而实现对早期微弱故障的灵敏响应。相较于线性 PCA, 自编码器具有更强的特征表征能力, 能够捕获增量矩阵中复杂的异常结构, 有效弥补了线

性方法对微弱故障不敏感的不足。

2.4 监测统计量构建与控制限确定

在LADRPCA框架下,结合动态重构矩阵 $\mathbf{R}(t)$ 与自编码器,构建3个互补的监测统计量。

T^2 统计量:在离线建模阶段,对正常工况下全部训练样本的动态增量向量集合 $\mathbf{e}_\Delta(t)$ 进行PCA分解,保留前 k 个主成分,得到载荷矩阵 $\mathbf{P}_k \in \mathbb{R}^{m \times k}$ 。在线监测阶段,将当前时刻动态增量向量 $\mathbf{e}_\Delta(t) \in \mathbb{R}^{1 \times m}$ 投影至主元子空间,得到得分向量:

$$\mathbf{t}_i = \mathbf{P}_k^T \mathbf{e}_\Delta(t)^T \in \mathbb{R}^k \quad (41)$$

基于得分向量构造 T^2 统计量,用于监测主元空间的整体动态偏离:

$$T^2 = \mathbf{t}_i^T \mathbf{\Lambda}^{-1} \mathbf{t}_i \quad (42)$$

式中, $\mathbf{t}_i \in \mathbb{R}^k$ 为当前增量向量在主元子空间的投影得分向量; $\mathbf{\Lambda} = \text{diag}\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k\}$ 为PCA分解所得前 k 个特征值构成的对角矩阵; λ_j 为第 j 个主成分对应的方差; k 为保留的主成分个数;由累积方差贡献率确定。

SPE统计量:用于监测残差空间的局部异常,计算为原始增量与其主元重构值之间的偏差平方和:

$$\text{SPE} = \|\mathbf{e}_\Delta(t) - \mathbf{e}_\Delta^{\text{PCA}}(t)\|^2 \quad (43)$$

式中, $\mathbf{e}_\Delta(t) \in \mathbb{R}^{1 \times m}$ 为当前时刻的动态增量向量; $\mathbf{e}_\Delta^{\text{PCA}}(t) = \mathbf{e}_\Delta(t) \mathbf{P}_k \mathbf{P}_k^T \in \mathbb{R}^{1 \times m}$ 为 $\mathbf{e}_\Delta(t)$ 在主元子空间的投影重构值; $\mathbf{P}_k \in \mathbb{R}^{m \times k}$ 为由前 k 个主成分载荷向量构成的载荷矩阵; $\|\cdot\|$ 表示欧氏范数。SPE统计量能够捕捉主元空间所未覆盖的异常残差成分,与 T^2 统计量形成互补。

SPE-R统计量:由自编码器重构误差构建,用于提升对微小故障的检测灵敏度。在离线阶段,利用正常工况训练集的全部增量向量 $\{\mathbf{e}_\Delta(t)\}_{t=1}^{N_{\text{train}}}$ 计算自编码器重构误差的均值,作为正常工况基准:

$$\bar{\sigma}_{\text{base}}^2 = \frac{1}{N_{\text{train}}} \sum_{t=1}^{N_{\text{train}}} \|\mathbf{e}_\Delta(t) - \hat{\mathbf{e}}_\Delta(t)\|^2 \quad (44)$$

在线阶段,以该基准对当前重构误差进行归一化,得到SPE-R统计量:

$$\text{SPE-R} = \frac{\|\mathbf{e}_\Delta(t) - \hat{\mathbf{e}}_\Delta(t)\|^2}{\bar{\sigma}_{\text{base}}^2} \quad (45)$$

式中, $\mathbf{e}_\Delta(t) \in \mathbb{R}^{1 \times m}$ 为当前时刻的动态增量向量; $\hat{\mathbf{e}}_\Delta(t) \in \mathbb{R}^{1 \times m}$ 为自编码器对 $\mathbf{e}_\Delta(t)$ 的重构输出; $\bar{\sigma}_{\text{base}}^2$ 为正常工况训练集的平均重构误差平方,用于消除量纲差异、实现相对比较; N_{train} 为训练集样本总数。通过归一化处理,SPE-R将在线重构误差与正常工况下的平均误差进行比较,有从而反映当前

样本是否偏离正常状态。

考虑到间歇过程不同运行阶段具有不同的统计分布特征,本文采用分阶段控制限确定方法。设过程共划分为 S 个运行阶段,本文青霉素发酵过程取 $S=4$ 。对于第 s 个阶段, T^2 控制限采用该阶段正常样本在99%置信水平下的 F 分布近似确定,SPE与SPE-R控制限采用该阶段正常验证集统计量的99%分位数确定。由此可得到各运行阶段下 T^2 、SPE和SPE-R统计量对应的控制限,为后续在线监测阶段的故障判别提供依据。

2.5 离线建模与在线监测流程

在完成动态增量向量构造、统计量定义以及控制限确定的基础上,本文进一步给出LADRPCA方法的离线建模与在线监测流程。离线阶段主要用于建立正常工况模型和确定控制限,在线阶段则根据实时数据计算监测统计量,并与相应控制限进行比较,从而实现过程监测。

2.5.1 离线建模阶段 Step 1:收集正常工况下的间歇过程多批次训练数据 $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{I \times K \times J}$,通过批次-变量法展开为二维矩阵 $\mathbf{X}(KI \times J)$,进行标准化处理与批次差异消除;

Step 2:构建时滞增广矩阵 $\mathbf{X}_{\text{lag}}$,确定滞后窗口长度 l ;

Step 3:以正常工况下的滑动窗口数据为输入,训练LSTM-Cayley模块,使其生成满足正交约束的时变重构矩阵 $\mathbf{R}(t)$;

Step 4:计算训练集的增量矩阵 $\mathbf{E}_\Delta^{\text{train}}$,训练自编码器,建立正常工况下 $\mathbf{E}_\Delta$ 的分布基准;

Step 5:计算 T^2 、SPE与SPE-R统计量的控制限。

2.5.2 在线监测阶段 Step 1:获取当前时刻的在线过程数据,进行预处理并构建滑动窗口历史数据;

Step 2:将滑动窗口数据输入LSTM,经Cayley变换实时生成时变重构矩阵 $\mathbf{R}(t)$,计算当前增量矩阵 $\mathbf{E}_\Delta(t)$,并取其最后一行得到当前动态增量向量 $\mathbf{e}_\Delta(t)$;

Step 3:将 $\mathbf{e}_\Delta(t)$ 输入自编码器,计算SPE-R统计量;同时对 $\mathbf{e}_\Delta(t)$ 进行PCA分析,计算 T^2 与SPE统计量;

Step 4:将3个统计量与对应控制限进行比较,当任一统计量连续超过相应控制限时,判定过程发生故障并触发报警。

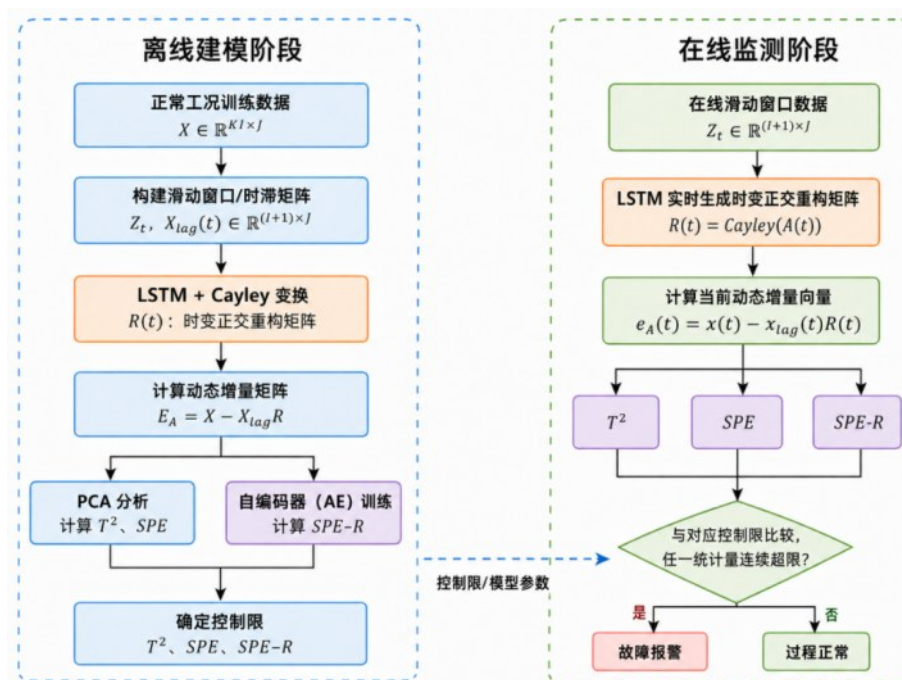


图4 LADRPCA过程监测流程

Fig.4 LADRPCA process monitoring flow

综合以上各模块, LADRPCA方法的整体框架如图4所示。该方法包含数据预处理、LSTM-Cayley时变重构矩阵生成、自编码器增量特征提取和多统计量监测四个部分。离线建模阶段, 利用正常工况下的多批次历史数据, 完成展开标准化、时变重构矩阵训练、自编码器训练及控制限确定。在线监测阶段, 对每个采样时刻的实时数据依次进行滑动窗口构建、 $R(t)$ 实时生成和动态增量计算, 再通过 T^2 、SPE和SPE-R三个统计量是否超限来判断是否发生故障。上述各模块相互衔接, 使LADRPCA在跟踪间歇过程时变特性的同时, 也具备对早期微弱故障的较好感知能力。

3 实验与结果分析

3.1 三水箱过程及数据设置

三水箱系统是一个典型的多变量液位控制实验装置, 它在过程控制教学和科研中应用广泛。这个系统的主要组成部分包括三个水箱、两个水泵、三个液位计、两个流量计以及若干个阀门。三个水箱分别记为T1、T2和T3, 每个水箱都配有一个液位计, 分别记为Z1、Z2和Z3, 用来实时测量水箱里面的液位高度。水泵P1和P2负责从下面的蓄水池里面抽水, 然后分别往水箱T1和T2里面注水。两个流量计F1和F2分别安装在水泵P1和P2的出水管

道上, 用来测量输入流量的大小。水箱之间通过管道和阀门连接在一起。此外, 每个水箱底部还设有泄漏阀门LV1、LV2、LV3, 可以用来模拟各种泄漏故障。系统的整体结构如图5所示。

图中, T1、T2和T3表示三个水箱, P1、P2和P3表示水泵, CV1、CV2、CV3和CV2'表示水箱间的连通阀, LV1、LV2和LV3表示泄漏阀, Z1、Z2和Z3表示压力式液位计, F1和F2表示涡轮流量计, Q1和Q2分别表示泵1和泵2的流量, S表示水箱截面积, S_0 表示连通管或泄漏管的截面积。

本实验选取三个水箱液位、两个进水流量以及两个水箱间连接流量共7个过程变量作为监测变量。采样周期设置为1s, 每个运行批次包含300个采样点。正常工况下共生成30个批次, 其中20个批次用于离线建模, 10个批次用于控制限确定和正常工况误报率评价。针对每种故障分别生成10个测试批次, 数据均使用正常训练集的均值和标准差进行标准化处理。

在正常运行状态下, 水箱1和水箱2底部排液阀LV1、LV2均保持关闭, 系统通过进水流量和水箱间连接流量的动态调节维持稳定运行。为验证不同监测方法对局部阀门故障及复合阀门故障的检测能力, 在正常测试批次中设置3种持续性故障。其中, Fault1在第120个采样点打开水箱1底部排液

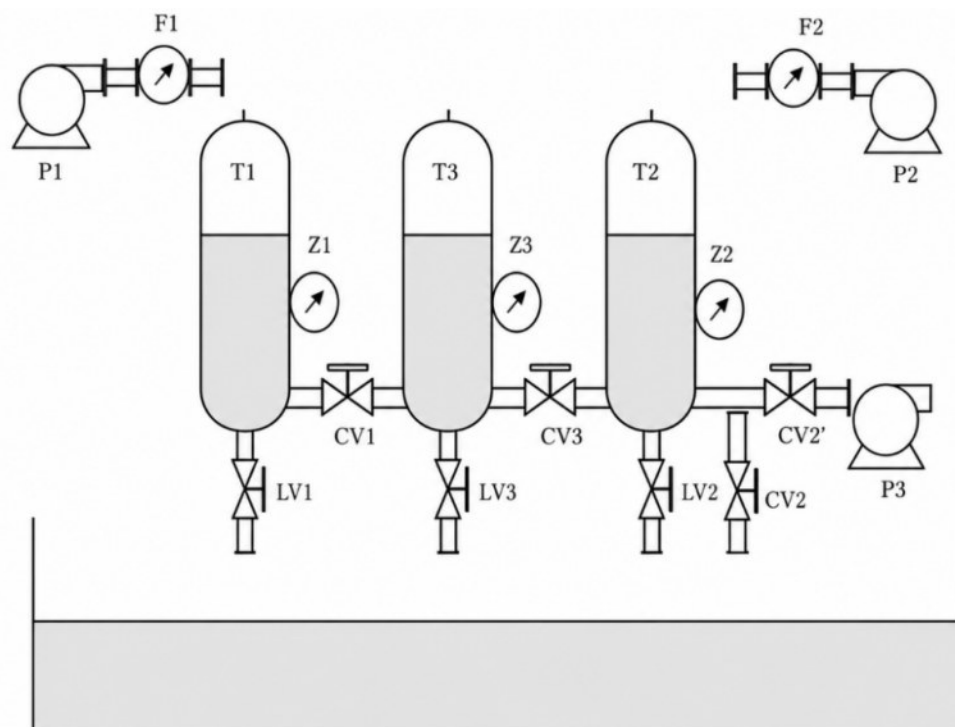


图5 三水箱系统图

Fig.5 System diagram of three water tanks

表1 监测变量

Table 1 Monitoring Variables

变量序号	符号	变量名称
1	Z1	水箱1液位
2	Z2	水箱2液位
3	Z3	水箱3液位
4	F1	水箱1进水流量
5	F2	水箱2进水流量
6	CV1	水箱1至水箱2连接流量
7	CV3	水箱2至水箱3连接流量

阀 LV1; Fault2 在第 160 个采样点打开水箱 2 底部排液阀 LV2; Fault3 在第 160 个采样点同时打开 LV1 和 LV2。相应阀门打开后保持该状态直至运行结束。单阀故障首先引起对应水箱液位变化,并通过水箱间连接关系向其他变量传播;双阀故障则会导致多个液位和流量变量发生协同偏移。具体故障设置如表 2 所示。

表2 三水箱过程故障设置

Table 2 Fault settings of the three-tank process

故障	故障阀门	故障描述	引入采样点
Fault1	LV1	水箱1底部排液阀开启,引起水箱1液位下降,并影响水箱间连接流量及相邻水箱液位	120
Fault2	LV2	水箱2底部排液阀开启,引起水箱2液位下降,故障影响通过水箱间耦合关系逐渐传播	160
Fault3	LV1、LV2	水箱1和水箱2底部排液阀同时开启,引起多个水箱液位及连接流量发生协同偏移	160

3.2 各方法监测结果

为定量评价不同方法在三水箱过程中的监测性能,本文采用故障检测率(Fault Detection Rate, FDR)、误报率(False Alarm Rate, FAR)作为评价指标。任一监测统计量连续超过相应控制限时判定发生故障。

表3给出了六种方法在三种阀门故障场景下的 FDR 和 FAR 结果。综合三种故障可知, LADRPCA 的平均 FDR 为 97.28%, 平均 FAR 为 0.91%; DRPCA 的平均 FDR 为 94.06%, 平均 FAR 为 1.50%。与 DRPCA 相比, LADRPCA 的平均 FDR 提高 3.23 个百分点, 平均 FAR 降低 0.60 个百分点, 相对降幅约为

表3 不同方法在三水箱过程中的故障监测结果

Table 3 Fault monitoring results of different methods for the three-tank process

故障	DiPCA		DEDPCA		HMM		AE		DRPCA		LADRPCA	
	FAR	FDR	FAR	FDR	FAR	FDR	FAR	FDR	FAR	FDR	FAR	FDR
Fault1	2.15	86.62	1.87	89.44	2.31	84.72	2.08	88.33	1.42	92.27	0.86	96.76
Fault2	2.26	88.59	1.94	91.43	2.41	86.46	2.13	89.51	1.48	94.29	0.89	96.82
Fault3	2.43	89.57	2.06	91.27	2.58	87.43	2.27	90.29	1.61	95.61	0.97	98.27

39.69%。结果表明,所提方法在三水箱过程不同阀门故障下均保持了较高的检测率和较低的误报率。

从不同故障场景来看,Fault3为第160个采样点同时打开LV1和LV2的复合阀门故障,水箱1和水箱2同时产生附加排液,多个液位及流量变量发生协同变化,故障特征相对明显。因此,各方法在Fault3下的FDR整体高于单阀故障。其中,LADRPCA的FDR达到98.27%,FAR为0.97%。

Fault1和Fault2分别为打开LV1和LV2的单阀故障,其故障影响需要通过水箱间的液位和流量耦合关系逐渐传播。LADRPCA在Fault1和Fault2下的FDR分别为96.76%和96.82%,说明LADRPCA对单阀异常引起的局部液位偏移和动态传播特征具有较好的监测能力。

3.3 典型故障监测结果分析

为进一步直观分析各方法在故障发生前后的统计量变化及报警响应过程,本文选取故障2作为故障代表进行展示。故障2在第160个采样点打开水箱2底部排液阀LV2,并持续至批次运行结束,属于典型的单阀泄漏故障。该故障首先引起水箱2液位下降,随后通过水箱之间的耦合关系影响连接流量及相邻水箱液位,具有故障影响由局部向系统逐步传播的特点。因此,选取故障2能够较好地检验不同方法对局部泄漏故障、动态传播特征以及早期微弱异常的监测能力。

由图6可以看出,在故障发生前,各方法的监测统计量总体处于相应控制限以内,表明所建立的监测模型能够较好地描述正常运行状态。第160个采样点引入Fault2后,各方法的统计量均出现不同程度的上升,但在响应速度、超限稳定性和故障表征能力方面存在明显差异。DiPCA、DEDPCA和HMM对故障的响应相对滞后,部分统计量在故障初期仍受到正常动态波动的影响,存在报警延迟或超限不连续现象;AE能够对故障引起的变化产生响应,但单独采用重构误差难以充分刻画变量之间的动态传播关系。DRPCA通过提取相邻采样时刻之间的

动态信息,提高了故障监测灵敏度,但由于采用固定重构矩阵,其统计量在故障初期的响应速度和稳定性仍受到一定限制。相比之下,LADRPCA在故障发生后能够更快地表现出明显且持续的超限趋势,同时故障发生前的统计量波动相对较小,说明其能够有效区分正常阶段变化与故障引起的动态偏离。上述结果表明,LSTM-Cayley时变正交重构机制增强了模型对过程动态变化的跟踪能力,自编码器重构误差则进一步提高了对早期微弱异常的敏感性。

3.4 青霉素发酵过程

青霉素发酵过程是典型的间歇过程,具有多阶段、强动态时变、多模态以及高斯非高斯混合分布的复杂特性。本文选择美国Illinois州立理工学院设计的仿真青霉素发酵过程的仿真平台Pensim2.0来模拟间歇过程^[41],从该平台得到的间歇过程数据已经得到国际上的普遍认可。除了可以提供正常多批次训练数据,Pensim2.0还可以通过设置故障类型与故障开始和终止的时间得到故障数据集,而故障类型包括通气速率故障、搅拌速率故障和底物进料速率故障,产生故障的方式为添加阶跃、斜坡信号。本文从该平台提供的18个变量中选取10个作为监控变量,选取变量如表4所示。

设定每批次反应时间为400 h,采样间隔0.5 h,每批次采样点数为800,共采集30批次正常数据用于离线建模,得到训练样本集。在线检测阶段,分别引入3类典型故障进行测试:通气速率故障、搅拌速率故障和底物进料速率故障,分别设置故障注入时刻为第180采样点和第320采样点两种场景,覆盖发酵前期与后期的故障检测能力评估,如表5所示。

3.5 各方法监测结果

为验证所提LADRPCA方法在不同故障类型和故障发生阶段下的监测性能,选取DiPCA、DEDPCA、HMM、AE和DRPCA作为对比方法。所有方法均采用相同的训练数据、故障测试批次及评价

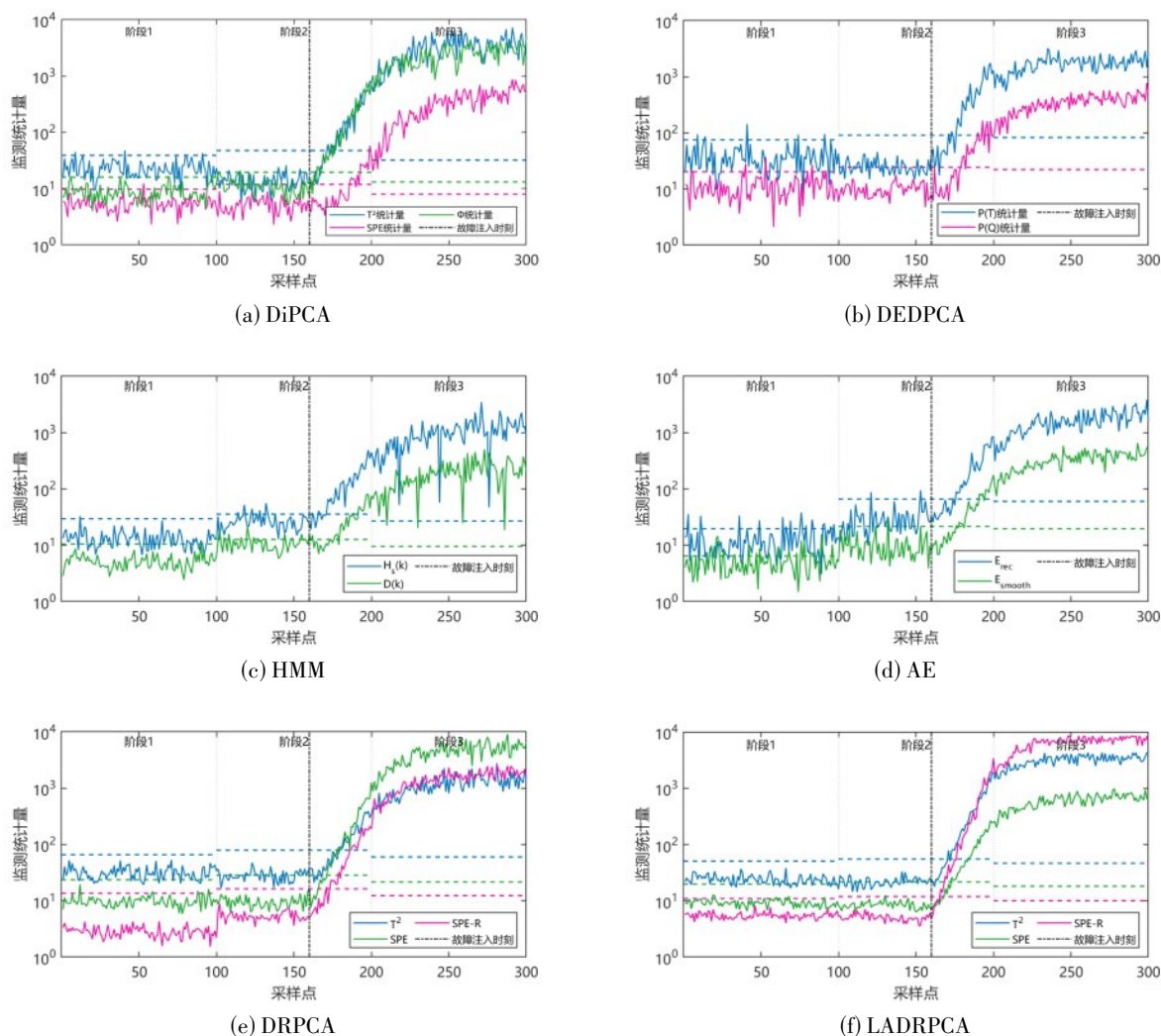


图6 各方法监测结果

Fig.6 Monitoring results of various methods

表4 监控变量

Table 4 Monitoring variables

变量序号	变量名称
1	通气速率
2	搅拌速率
3	底物进料速率
4	底物进料温度
5	底物浓度
6	溶解氧(DO)浓度
7	反应器体积
8	二氧化碳浓度
9	pH值
10	发酵罐温度

标准,具体监测结果如表6所示。

表6给出了六种方法在六种故障场景下的FDR和FAR结果。综合六种故障可知,LADRPCA的平

表5 青霉素发酵过程的6个故障批次

Table 5 Six faulty batches in the penicillin fermentation process

故障	变量名	引入采样点
Fault1	通气速率(L/h)	180
Fault2	通气速率(L/h)	320
Fault3	搅拌速率(r/min)	180
Fault4	搅拌速率(r/min)	320
Fault5	底物进料速率(L/h)	180
Fault6	底物进料速率(L/h)	320

均FDR为95.24%,平均FAR为0.91%;DRPCA的平均FDR为90.45%,平均FAR为1.63%。与DRPCA相比,LADRPCA的平均FDR提高4.79个百分点,平均FAR降低0.73个百分点,相对降幅约为44.4%。说明在本文仿真条件下,时变正交重构与自编码器的

表6 不同方法对故障统计

Table 6 Fault statistics using different methods

故障	DiPCA		DEDPCA		HMM		AE		DRPCA		LADRPCA	
	FAR	FDR	FAR	FDR	FAR	FDR	FAR	FDR	FAR	FDR	FAR	FDR
Fault1	1.81	87.93	1.94	89.61	1.88	91.77	1.84	84.92	1.43	91.35	0.72	96.13
Fault2	2.16	89.12	1.76	91.08	2.31	87.21	2.47	80.16	1.38	89.54	0.97	94.22
Fault3	1.72	92.62	2.26	88.69	2.25	89.46	1.92	82.53	2.11	92.56	0.98	97.61
Fault4	1.95	86.74	2.13	88.53	2.09	90.38	1.63	83.47	1.74	88.61	1.29	91.25
Fault5	2.08	90.87	1.58	92.72	1.49	85.65	1.97	81.89	1.25	87.09	0.85	95.77
Fault6	3.71	90.05	2.39	81.67	2.28	71.46	3.16	73.33	1.88	93.54	0.63	96.46

增强机制的结合有助于降低固定重构矩阵对过程状态变化适应不足造成的影响,并补充线性统计量对微弱异常特征表征能力的不足。

按故障注入时刻进一步分析,在第180采样点注入的Fault1、Fault3和Fault5中,LADRPCA的平均FDR为96.50%,平均FAR为0.85%;在第320采样点注入的Fault2、Fault4和Fault6中,其平均FDR为93.98%,平均FAR为0.96%。结果表明,LADRPCA在发酵前期和后期故障场景中均保持了较高的检测率,但后期故障的平均检测率略低于前期故障,说明不同运行阶段下的变量动态关系和故障传播特征仍会对监测性能产生影响。

从不同故障变量来看,LADRPCA在Fault5中的FDR相较于DRPCA提高8.68个百分点,是六种故障场景中检测率增幅最明显的情形,表明所提方法对发酵前期底物进料速率异常具有较好的响应能力。在Fault6中,LADRPCA的FAR相较于DRPCA降低1.25个百分点,表明LADRPCA在该后期故障场景下能够减少正常动态变化引起的误报警。

同时,LADRPCA在Fault4下的FDR为91.25%,虽然高于其他对比方法,但低于其在其余五种故障场景下的检测率。Fault4为第320采样点发生的搅拌速率故障,此时过程所处运行阶段、变量耦合关系和故障影响传播方式均与发酵前期存在差异。该结果表明,虽然时变重构矩阵能够改善模型对阶段变化的适应能力,但对于部分后期故障,模型的监测灵敏度仍有进一步提升空间。

3.6 典型故障监测结果分析

表6已从故障检测率和误报率两个方面对各方法的整体监测性能进行了定量比较。为进一步直观展示不同方法在故障发生后的统计量响应过程,本文对各故障场景下的监测曲线进行了绘制。由于篇幅限制,本文选取具有代表性的Fault3作为典

型故障案例进行可视化分析,其余故障的监测结果不再逐一展开。

Fault3为搅拌速率在第180个采样点引入的故障,属于发酵前期发生的典型执行变量异常。搅拌速率直接影响溶解氧传递、底物混合以及菌体生长状态,其异常可能影响溶解氧、底物混合和菌体生长等相关变量,因此适合作为典型故障案例进行分析。选择Fault3作为典型案例进行曲线分析,有助于进一步比较不同方法对早期微弱故障、动态时变特性以及故障传播过程的响应能力。

本节以第180个采样点引入搅拌速率故障的Fault3为例,对各方法的监测曲线进行比较分析。Fault3属于发酵前期发生的执行变量异常,搅拌速率的变化会影响培养液混合、溶解氧传递以及菌体生长状态,因此该故障发生后,其影响会逐渐反映到多个过程变量中。由图中可以看出,DiPCA不同统计量对故障的响应存在明显差异,其中部分统计量虽然在故障发生后较短时间内越过控制限,但整体响应稳定性不足,主要报警统计量仍存在一定延迟。这说明DiPCA虽然引入动态主元思想,但其对间歇过程阶段变化和非平稳波动的适应能力有限,早期故障信息容易受到正常动态波动干扰。DEDPCA的统计量在第255采样点后才触发报警,检测延迟较大。说明该方法虽然通过动态扩展增强了时序信息利用,但对搅拌速率故障早期引起的微弱偏移仍不够敏感。HMM的报警时刻集中在第240至265采样点之间,说明隐状态转移模型能够描述一定的运行状态变化,但对发酵前期故障传播初期的细微信号响应仍较慢。AE方法主要依赖重构误差识别异常,但由于未显式引入过程动态重构关系,其报警时刻仍明显滞后,说明单独使用自编码器难以充分刻画搅拌速率异常的动态传播过程。相比上述方法,DRPCA的报警时间有所提前,说明

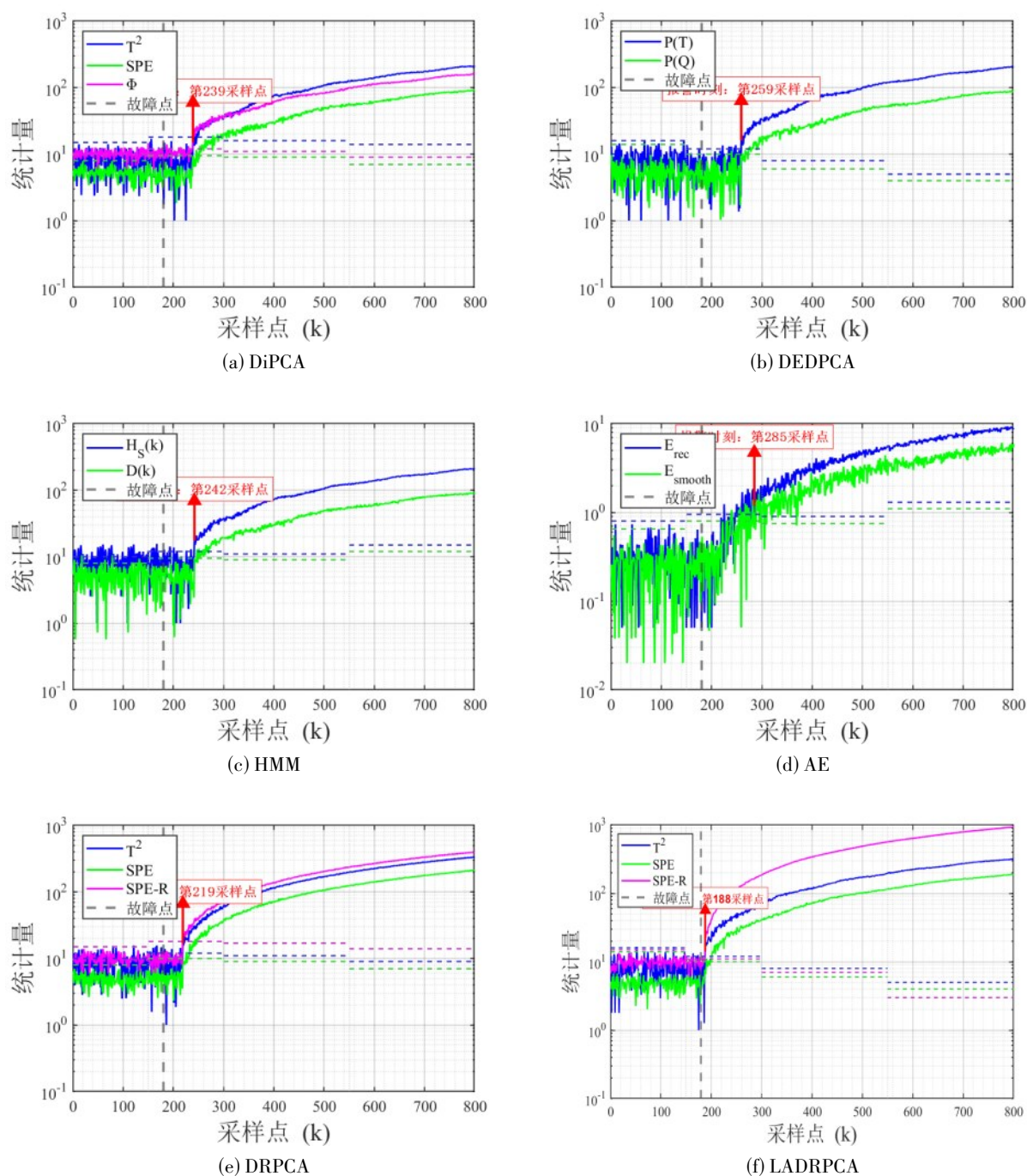


图7 各方法监测结果

Fig.7 Monitoring results of various methods

动态重构思想能够在一定程度上改善传统方法对过程动态变化描述不足的问题。但从监测曲线可以看出,DRPCA 仍存在一定检测延迟。这是因为 DRPCA 中的重构矩阵通常由离线正常数据训练得到,在线监测过程中保持固定,难以根据当前采样点所处的运行状态进行调整。当间歇过程处于不同运行阶段时,变量之间的相关关系和动态特征

会发生变化,固定重构矩阵对这种变化的适应能力相对有限。相比之下,LADRPCA 能够在故障发生后较短时间内实现报警。该结果表明,LSTM-Cayley 模块生成的时变重构矩阵能够根据当前滑动窗口数据进行调整,有助于提高模型对过程动态变化的适应能力。同时, $SPE-R$ 统计量利用自编码器重构误差反映增量向量的异常变化,对 T^2 和 SPE

统计量形成补充,使监测结果更加全面。综合来看,LADRPCA能够在本文青霉素发酵仿真条件下缩短故障检测延迟,提高故障检测率,并在较低误报率下保持较好的监测稳定性。需要指出的是,本文结果主要验证了所提方法在仿真过程中的有效性,其在实际生产噪声、传感器状态变化和复杂工况切换条件下的适用性,仍需通过实际生产过程数据进一步验证。

4 结论

针对间歇过程多变量耦合、动态时变显著以及早期故障信号较弱等问题,传统DRPCA存在重构矩阵全局静态固定、难以随过程状态变化进行自适应调整,以及线性PCA对增量矩阵异常特征表征能力不足等局限。为此,本文提出了一种基于LSTM自适应动态重构主成分分析的间歇过程故障监测方法LADRPCA。该方法利用LSTM从滑动窗口数据中提取过程时序特征,并结合Cayley变换在线生成满足正交约束的时变重构矩阵,使模型能够跟踪不同运行阶段下动态映射关系的变化;同时,引入自编码器对动态增量向量进行特征提取,并利用重构误差统计量补充 T^2 和SPE统计量,提高对早期微弱异常的监测灵敏度。

分别在三水箱过程和Pensim 2.0青霉素发酵过程中对所提方法进行了实验验证。在三水箱过程的3种阀门故障场景下,LADRPCA的平均FDR和平均FAR分别为97.28%和0.91%,相比DRPCA,平均FDR提高3.23个百分点,平均FAR降低0.60个百分点。在青霉素发酵过程的6种故障场景下,LADRPCA的平均FDR和平均FAR分别为95.24%和0.91%,相比DRPCA,平均FDR提高4.79个百分点,平均FAR降低0.73个百分点。典型故障监测曲线进一步表明,LADRPCA能够更及时、稳定地响应故障引起的动态偏离。上述结果说明,时变正交重构机制与自编码器增强机制的结合能够提高模型对间歇过程动态变化和早期异常的监测能力。

本文实验主要基于三水箱过程和青霉素发酵仿真数据,其在实际工业噪声、传感器漂移、设备老化以及复杂工况切换条件下的适用性仍需进一步验证。后续将结合实际间歇生产过程数据,研究自动参数选择、运行阶段自识别、自适应控制限和模型增量更新方法,并开展异常变量贡献分析与故障

定位研究,以提高所提方法在复杂工业场景中的适应能力和应用范围。

参考文献

- [1] 周东华,史建涛,何潇. 动态系统间歇故障诊断技术综述[J]. 自动化学报, 2014, **40**(2): 161-171.
Zhou D H, Shi J T, He X. Review of intermittent fault diagnosis techniques for dynamic systems[J]. Acta Automatica Sinica, 2014, **40**(2): 161-171.
- [2] Van den Kerkhof P, Gins G, Vanlaer J, et al. Dynamic model-based fault diagnosis for (bio)chemical batch processes[J]. Computers & Chemical Engineering, 2012, **40**: 12-21.
- [3] Marais H, Van S G, Uren K R. The merits of exergy-based fault detection in petrochemical processes[J]. Journal of Process Control, 2019, **74**: 110-119.
- [4] Baklouti I, Mansouri M, Ben Hamida A, et al. Monitoring of wastewater treatment plants using improved univariate statistical technique[J]. Process Safety and Environmental Protection, 2018, **116**: 287-300.
- [5] Strydom J J, Miskin J J, McCoy J T, et al. Fault diagnosis and economic performance evaluation for a simulated base metal leaching operation[J]. Minerals Engineering, 2018, **123**: 128-143.
- [6] Fan S S, Hsu C Y, Tsai D M, et al. Data-driven approach for fault detection and diagnostic in semiconductor manufacturing[J]. IEEE Transactions on Automation Science and Engineering, 2020, **17** (4): 1925-1936.
- [7] Tulsyan A, Garvin C, Ündey C. Advances in industrial biopharmaceutical batch process monitoring: Machine-learning methods for small data problems[J]. Biotechnology and Bioengineering, 2018, **115**(8): 1915-1924.
- [8] Kong X Y, Yang Z Y, Liu Y M, et al. Overview of industrial process monitoring methods based on independent component analysis and its extended model[J]. Control and Decision, 2022, **37** (4): 799-814.
- [9] Liu Q, Zhuo J, Lang Z Q, et al. Perspectives on data-driven operation monitoring and self-optimization of industrial processes [J]. Acta Automatica Sinica, 2018, **44**(11): 1944-1956.
- [10] Wang L M, He X, Zhou D H. Average dwell time-based optimal iterative learning control for multi-phase batch processes[J]. Journal of Process Control, 2016, **40**: 1-12.
- [11] Zhang H L, Qi Y S, Wang L, et al. Fault detection and diagnosis of chemical process using enhanced KECA[J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 2017, **161**: 61-69.
- [12] Ben Khediri I, Limam M, Weihs C. Variable window adaptive kernel principal component analysis for nonlinear nonstationary process monitoring[J]. Computers & Industrial Engineering, 2011, **61**(3): 437-446.
- [13] Jackson J E. Quality control methods for several related variables [J]. Technometrics, 1959, **1**(4): 359-377.
- [14] Jackson J E, Mudholkar G S. Control procedures for residuals associated with principal component analysis[J]. Technometrics, 1979, **21**(3): 341-349.
- [15] Ji C, Sun W. A review on data-driven process monitoring methods: characterization and mining of industrial data[J]. Processes, 2022, **10**(2): 335.

- [16] Melo A, Câmara M M, Pinto J C. Data-driven process monitoring and fault diagnosis: a comprehensive survey[J]. *Processes*, 2024, **12**(2): 251.
- [17] Jolliffe I T, Cadima J. Principal component analysis: a review and recent developments[J]. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 2016, **374**(2065): 20150202.
- [18] Sherif M Z, Botre C, Mansouri M, et al. Process monitoring using data-based fault detection techniques: comparative studies[M]. *Fault Diagnosis and Detection*. 2017, **32**: 137–144.
- [19] Ku W F, Storer R H, Georgakis C. Disturbance detection and isolation by dynamic principal component analysis[J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 1995, **30**(1): 179–196.
- [20] Wold S, Sjöström M, Eriksson L. PLS-regression: a basic tool of chemometrics[J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2001, **58**(2): 109–130.
- [21] Apsemidis A, Psarakis S, Moguerza J M. A review of machine learning kernel methods in statistical process monitoring[J]. *Computers & Industrial Engineering*, 2020, **142**: 106376.
- [22] Pani A K. Non-linear process monitoring using kernel principal component analysis: a review of the basic and modified techniques with industrial applications[J]. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, 2022, **39**(2): 327–344.
- [23] Si Y B, Wang Y Q, Zhou D H. Key-performance-indicator-related process monitoring based on improved kernel partial least squares[J]. *IEEE Transactions on Industrial Electronics*, 2021, **68**(3): 2626–2636.
- [24] 顾炳斌, 熊伟丽. 基于多块信息提取的 PCA 故障诊断方法[J]. *化工学报*, 2019, **70**(2): 736–749.
- Gu B B, Xiong W L. Fault diagnosis method for PCA based on multi-block information extraction[J]. *CIESC Journal*, 2019, **70**(2): 736–749.
- [25] Chen X L, Wang J, Ding S X. Complex system monitoring based on distributed least squares method[J]. *IEEE Transactions on Automation Science and Engineering*, 2021, **18**(4): 1892–1900.
- [26] Yu W K, Zhao C H, Huang B. MoniNet with concurrent analytics of temporal and spatial information for fault detection in industrial processes[J]. *IEEE Transactions on Cybernetics*, 2022, **52**(8): 8340–8351.
- [27] Yu W K, Wu M, Huang B, et al. A generalized probabilistic monitoring model with both random and sequential data[J]. *Automatica*, 2022, **144**: 110468.
- [28] Cohen A, Atoui M A. On wavelet-based statistical process monitoring[J]. *Transactions of the Institute of Measurement and Control*, 2022, **44**(3): 525–538.
- [29] 衷路生, 何东, 龚锦红, 等. 基于分布式 ICA-PCA 模型的工业过程故障监测[J]. *化工学报*, 2015, **66**(11): 4546–4554.
- Zhong L S, He D, Gong J H, et al. Fault monitoring of industrial process based on distributed ICA-PCA model[J]. *CIESC Journal*, 2015, **66**(11): 4546–4554.
- [30] Harrou F, Madakyaru M, Sun Y. Improved nonlinear fault detection strategy based on the Hellinger distance metric: Plug flow reactor monitoring[J]. *Energy and Buildings*, 2017, **143**: 149–161.
- [31] 高学金, 黄梦丹, 齐咏生, 等. PDPSO 优化多阶段 AR-PCA 间歇过程监测方法[J]. *化工学报*, 2018, **69**(9): 3914–3923.
- Gao X J, Huang M D, Qi Y S, et al. Batch process monitoring using multiphase AR-PCA optimized with PDPSO[J]. *CIESC Journal*, 2018, **69**(9): 3914–3923.
- [32] Dong Y N, Qin S J. A novel dynamic PCA algorithm for dynamic data modeling and process monitoring[J]. *Journal of Process Control*, 2018, **67**: 1–11.
- [33] Liu F, Wang P L, Cai Z D, et al. Batch process fault diagnosis based on the combination of deep belief network and long short-term memory network[C]//2019 CAA Symposium on Fault Detection, Supervision and Safety for Technical Processes (SAFEPROCESS). July 5–7, 2019. Xiamen, China. IEEE, 2019: 208–214.
- [34] Yu J B, Zheng X Y, Liu J T. Stacked convolutional sparse denoising auto-encoder for identification of defect patterns in semiconductor wafer map[J]. *Computers in Industry*, 2019, **109**: 121–133.
- [35] 朱春梦, 李增, 柳楠, 等. 基于自编码器和多尺度符号转移熵的 FCC 沉降器跑剂故障检测[J]. *化工学报*, 2025, **76**(9): 4512–4523.
- Zhu C M, Li Z, Liu N, et al. Fault detection of catalyst loss in FCC disengager based on autoencoder and multi-scale symbolic transfer entropy[J]. *CIESC Journal*, 2025, **76**(9): 4512–4523.
- [36] 高学金, 刘腾飞, 徐子东, 等. 基于循环自动编码器的间歇过程故障监测[J]. *化工学报*, 2020, **71**(7): 3172–3179.
- Gao X J, Liu T F, Xu Z D, et al. Intermittent process fault monitoring based on recurrent autoencoder[J]. *CIESC Journal*, 2020, **71**(7): 3172–3179.
- [37] 张海利, 王普, 高学金, 等. 基于批次图像化的卷积自编码故障监测方法[J]. *控制与决策*, 2021, **36**(6): 1361–1367.
- Zhang H L, Wang P, Gao X J, et al. Fault detection of batch image-based convolutional autoencoder[J]. *Control and Decision*, 2021, **36**(6): 1361–1367.
- [38] Agarwal P, Aghaei M, Tamer M, et al. A novel unsupervised approach for batch process monitoring using deep learning[J]. *Computers & Chemical Engineering*, 2022, **159**: 107694.
- [39] Wang K, Gopaluni R B, Chen J, et al. Deep learning of complex batch process data and its application on quality prediction[J]. *IEEE Transactions on Industrial Informatics*, 2020, **16**(12): 7233–7242.
- [40] Li H Q, Jia M X, Mao Z Z. Dynamic reconstruction principal component analysis for process monitoring and fault detection in the cold rolling industry[J]. *Journal of Process Control*, 2023, **128**: 103010.
- [41] Birol G, Ündey C, Çinar A. A modular simulation package for fed-batch fermentation: penicillin production[J]. *Computers & Chemical Engineering*, 2002, **26**(11): 1553–1565.