Vol. 22 No. 3 Sep. 2001

上海海运学院学报
Journal of
Shanghai Maritime University

基于可变多元统计模型的故障诊断方法

高　翔　(中国科学院 沈阳自动化研究所　沈阳　110015)
王　纲　(沈阳化工学院　沈阳　110021)
马纪虎　(中国科学院 沈阳自动化研究所　沈阳　110015)

摘　要　在间歇反应过程中,由于各批次多元轨迹时间长度不同,无法使用固定多方向主元分析(MPCA)模型对过程中新批次数据进行故障诊断;因此,提出了用递推式动态时间错位(DTW)算法,对每一个新批次的情况自适应地确定该批次的MPCA模型,仿真结果证明该方法有效。

关键词　间歇过程,动态时间错位,多向主元分析,多元统计过程控制,故障诊断
中图分类号　TP277

The Approach of Fault Diagnosis Based on Variable Multivariate Statistical Model

Gao Xiang　Wang Gang　Ma Jihu

Abstract　Due to the difference in time lengths of multivariate trajectories in the batch process, it is difficult to diagnose the fault of the new batch based on the fixed MPCA model. The approach of adaptive MPCA to the new batch with the recursive Dynamic Time Warping algorithm is presented, and the simulation results prove the effectiveness of the approach.

Key words　batch process, dynamic time warping, multiway principal component analysis, multivariate statistical process control, fault diagnosis

0　引　言

多元统计过程控制(Multivariate Statistical Process Control, MSPC)[1]是利用大量正常多维历史数据建立多变量统计模型,在生产过程中检测的多维数据通过多元统计投影的方法,映射到该统计模型中由少量不相关的潜隐变量(主元变量)构造的低维空间,通过主元分析法(Principal Component Analysis, PCA)[2]分析过程是否超出控制限的故障诊断方法。

针对间歇过程的过程监控问题,Nomikos & MacGregor 提出,将考虑到批次、过程变量和时间数据的多向主元分析法(Multiway Principal Component Analysis, MPCA)[3]应用到这类过程的故障诊断。该方法的一个重要的强假设是各批次的持续时间相同。但由于种种原因,存在着各批次时间长度不一致的情况,局部特征也不一致,导致理想化的 MPCA 建模和诊断的困难。Anthanassios Kassidas, *et al.* (1998)[4]应

来稿日期: 2001- 03- 05
第一作者高　翔(1967-　　),男,在读博士生,主要研究方向为多元统计过程控制及故障诊断等。

用动态规划的思想,提出用动态时间错位(Dynamic Time Warping, DTW)方法来同步化各批次轨迹,以达到它们时间长度的一致。该方法的优点在于充分考虑了轨迹间局部特征的相似性。但在故障诊断过程中,由于待测的轨迹和MPCA模型的时间长度不一致,Kassidas的作法是以各批次共同的MPCA模型为标准,将待测的轨迹和模型同步。该方法的不足之处在于用模型监视每一个批次时,任何批次都必须适应已建MPCA模型的标准。这样,存在着批次中轨迹上某些点压缩平均的现象,不利于发现异常。

本文提出了可变多元统计模型的概念,首先建立参考MPCA模型,在故障诊断中,针对待测新批次轨迹的情况,利用递推式DTW算法构造出与该批次相对应的MPCA模型,以达到提高诊断准确性的目的。

1 DTW算法

DTW是一种确定性统计模型的柔性模式匹配方案。它运用动态规划原理,非线性地转移、压缩和扩展局部模式。当两模式之间获最短距离时,模式内的相似特征能够匹配。

设 $\boldsymbol{T}(t\times N)$ 为待同步化轨迹, $\boldsymbol{R}(r\times N)$ 为参考轨迹; t 和 r 为采样次数, N 为变量个数; i 和 j 分别为 $\boldsymbol{T}$ 和 $\boldsymbol{R}$ 轨迹上关于时间的指标,DTW在 $t\times r$ 个网格中的优化路径为 K 个点($\max(t,r)\leqslant K\leqslant t+r$)的 $\boldsymbol{F}^*$ 序列。文[4]给出对称式和非对称式两种常规算法。对称式算法是将每一点 $c(k)=[i(k),j(k)]$ 上 $\boldsymbol{T}$ 轨迹的时间指标 i 和 $\boldsymbol{R}$ 轨迹的时间指标 j 都投影至共同的时间指标 k(图1),而非对称算法是将 $\boldsymbol{T}$ 的时间指标 i 投影到 $\boldsymbol{R}$ 的时间指标 j。

$D_A(i,j)$ 为从起始点(1,1)至中间点 (i,j) 的最短累积距离,在搜索中,需要考虑如下3种约束。

(1) 始终点约束:起始点为(1,1),中间点为 (i,j),终止点为 (t,r)。

(2) 局部约束: $\boldsymbol{F}^*$ 上每一点 (i,j) 的可能的前点为 $(i-1,j)$、$(i-1,j-1)$ 或 $(i,j-1)$。

(3) 全局约束:在 $t\times r$ 网格内,以对角线为中轴,沿对角线方向的带状搜索区域,其宽度为 $M\leqslant|t-r|$。

由对称式算法, $D_A(i,j)$ 可由下面的递推公式得到:

$$D_A(i,j)=\min[D_A(i-1,j),D_A(i-1,j-1),D_A(i,j-1)]+d(i,j)$$
$$D_A(1,1)=d(1,1) \tag{1}$$

$$d(i,j)=[T(i,:)-R(j,:)] * W * [T(i,:)-R(j,:)]^T \tag{2}$$

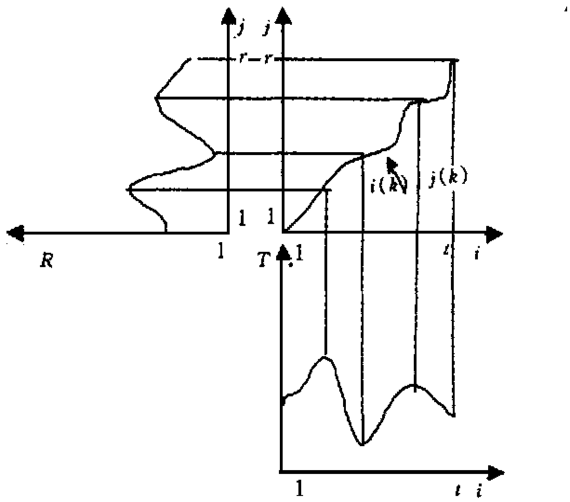


图1 用DTW对称式非线性排列轨迹 R 和 T 的时间指标

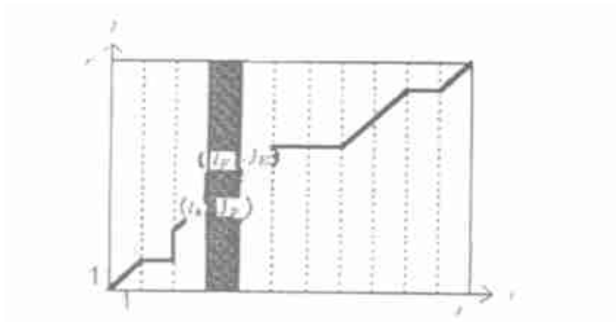


图2 递推式算法示意图

$d(i,j)$ 为在轨迹 $\boldsymbol{T}$ 的 i 行向量和轨迹 $\boldsymbol{R}$ 的 j 行向量带加权的局部距离平方和。 $\boldsymbol{W}(j\times j)$ 为对角阵,体现了同步化算法中各变量相对于 $d(i,j)$ 的重要程度。

递推式DTW算法的思想[5]是在路径的始点和终点之间,在待同步化轨迹的每一个采样时刻,找出路径的中继点。也就是说,这 t 个中继点把路径划分为 $t-1$ 个窗口,每个中继点是该窗口的终点,也是下一窗口的始点(如图2)。局部寻优在 $(i-1,:)$ 和 $(i,:)$ 两列之间,按(1)式的判断进行,然后在下一窗口寻优之前,删除 $D_A(i-1,:)$。这样,就将整体寻优变成局部寻优,不仅使运算的速度提高,存储量降低,而且能够做到在线同步化过程监视。设每一窗口的中继点为 (I_E,J_E),前一窗口的中继点为 (I_P,J_P) [(I_P,J_P) 的初值为(1,1)],有 $I_E=I_P+1$,而 J_E 的确定需满足

$$D_A(I_E,J_E)=\min[D_A(I_E,J_P),D_A(I_E,J_P+1)\dots D_A(I_E,r)] \tag{3}$$

由此可见,无论是确定中继点的位置,还是窗口

内局部寻优, 必须算出窗口内的各个 $D_A(i,j)$ 值, 由式(1)知, 每个 $D_A(i,j)$ 值的大小受 $d(i,j)$ 值的影响。所以, 由式(2)知, $R(j,:)$ 不变, $T(i,:)$ 变化, 即各过程变量变化, 将影响 $d(i,j)$ 值, 进而影响 $D_A(i,j)$ 值, 最后导致中继点位置或优化路径的变化, 引起 MPCA 模型和新批次投影关系的变化。

2　多方向主元分析法简介

主元分析法(PCA)是用构造出的不相关潜隐变量描述相关原始过程变量的绝大部分信息。设数据矩阵 $\boldsymbol{X}(m\times n)$, 即 m 个历史正常数据样本, n 维原始过程变量, 为了避免过程变量不同量纲对结果的影响和数学上处理的需要, 需对建模数据进行量化处理。设 $\boldsymbol{X}$ 的均值行向量为 $\boldsymbol{x}(1\times n)$, 标准差向量 $\sigma(1\times n)$, $\boldsymbol{X}$ 的每一行都与 $\boldsymbol{x}$ 相减, 得到行向量差的结果的第 i 个元素除以 σ 中第 i 个元素, 最终得到量化后的矩阵 $\boldsymbol{X}(m\times n)$, 它是均值为 0, 方差为 1 的数据集合。有:

$$\boldsymbol{X}=\boldsymbol{T}\boldsymbol{P}'+E \tag{4}$$

其中, $\boldsymbol{T}(m\times a)$ 为得分矩阵(Score Matrix), 提取采样数据间相关信息; $\boldsymbol{P}(n\times a)$ 为载荷矩阵(Loading Matrix), 提取原始变量的关联信息。在 $\boldsymbol{T}$ 和 $\boldsymbol{P}$ 内部, 各个列向量之间都满足相互内积为 0, 自身长度为 1 的条件。而 $\boldsymbol{E}(m\times n)$ 为残差矩阵, 表征模型中的误差信息。

在间歇过程中, 每次过程数据集合构成了一族过程变量的时间轨迹, 其历史数据集合为三维矩阵, 可以表示为 $\boldsymbol{X}(I\times J\times K)$。其中 I 代表批次, J 代表过程变量, K 代表时间序列。

多向主元分析法(MPCA)将三维数据矩阵展开, 形成一个新的两维矩阵。Nomikos & MacGregor[2] 认为最合适的展开方式是: $\boldsymbol{X}(I\times J\times K)$ 沿时间坐标轴按采样时刻均分成 K 个竖直片, 然后从左到右依次排列这 K 个竖直片, 这样, 三维数据矩阵分解成两维数据矩阵 $\boldsymbol{X}(I\times JK)$, 其后的处理方法与 PCA 相同(如图 3)。

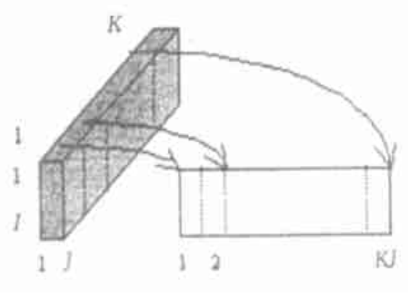


图 3　MPCA 的展开方式

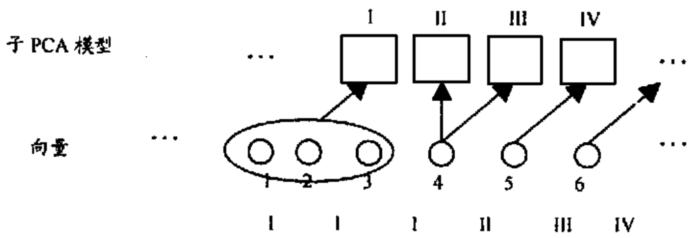
3　用可变 MPCA 模型的同步化监控方法

在传统方法中, 在用 MPCA 模型进行监控时, 若被监控的新批次时间长度短于 MPCA 模型的长度, 相差部分用“0”或用最后数值补齐, 若被监控的新批次时间长度大于模型的长度, 余下部分予以截去。利用 Kassidas 提出的同步化方法, 我们可以将新批次与 MPCA 模型同步, 进而进行故障诊断。仔细分析 MPCA 模型, 可以将其沿时间轴分成 K 个等份, 得到 K 个 PCA 子模型, 而待测新批次轨迹同步化后, 变形成为一个与 MPCA 模型相适应的, K 个 $1\times N$ 的向量新轨迹, 第 i 个向量与第 i 个 PCA 子模型对应($1\leqslant i\leqslant K$)。但待测新批次轨迹同步化前, 过程采样有 K^* ($K^*\neq K$) 个采样点, 这样轨迹可以表征为 K^* 个 $1\times N$ 的向量, 第 i 个向量却不与第 i 个 PCA 子模型对应($1\leqslant i\leqslant K, K^*$)。因此, 在诊断多元投影时, 存在如下 3 种情况: (1) 一个向量对应多个 PCA 子模型; (2) 一个向量只对应一个 PCA 子模型; (3) 多个向量对应一个 PCA 子模型(如图 4(a))。由于 Kassidas 的同步化方法以 MPCA 模型为同步化基准, 最后一种情况是多个向量压缩平均投影至一个 PCA 子模型, 造成了诊断工作的不准确, 而且无法从诊断中的模型时间指标得知新批次轨迹发生故障的确切时间。

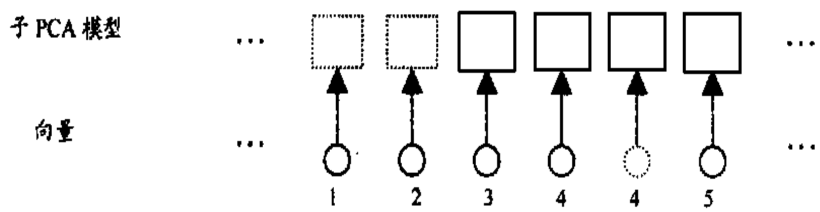
针对以上情况, 我们提出了对称式 DTW 监控方法以及相应的对称式 MPCA 模型的概念。已有的 MPCA 模型称之为 MPCA 参考模型, 在每一条新批次轨迹的故障诊断过程中, 利用 DTW 的对称式算法, 将该轨迹和参考 MPCA 模型均进行扩展, 同步化后长度均为 $K(\max(t,r)\leqslant K\leqslant t+r)$。扩展后形成的临时 MPCA 模型称之为对称式 MPCA 模型(如图 4(b))。该方法的优点在于能够让每一个向量都投影至与其相关的子 PCA 模型中去, 故障检测工作具有充分性和仔细性; 但缺点在于模型过于庞大, 而且对称式 MPCA 模型的时间指标并不代表待测轨迹的时间指标, 同样不知道发生故障的确切时间。

在此基础上, 利用递推式 DTW 算法中 $t-1$ 个中继点和初始点(1, 1), 我们提出了简化式 DTW 监控方法和相应的简化式 MPCA 模型的概念。优化路径上的中继点(i,j) 的横坐标对应着轨迹上时刻 i 的向量, 其纵坐标对应着第 j 个子 PCA 模型。这样, 每一向量有且仅有一次投影至子 PCA 模型的机会(如图 4(c))。对于多个向量对应一个子 PCA 模

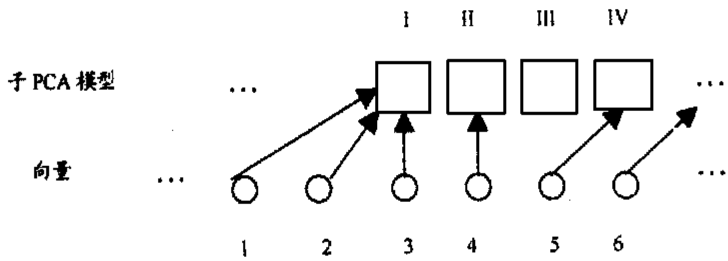
型的情况,不是压缩平均投影,而是各自投影至对应的子 PCA 模型中去;对于一个向量对应多个子 PCA 模型,本方法只允许该向量投影至第一个与之相关的子 PCA 模型,其余的子模型均视为冗余模型不予理睬,这样,有对应关系的各子模型组成临时的 MPCA 模型称之为简化式 MPCA 模型。值得注意的是,简化式 MPCA 模型的持续时间长度和待测轨迹的持续时间长度完全相同。本方法的特点是简化式 MPCA 模型对于相应的批次轨迹来说,属于“量身定制”,这样,完全可以知道故障发生的确切时间。



a)待测轨迹与参考模型同步的不变的 MPCA 模型



b) 依对称式 DTW 算法轨迹向量与各子模型一一对应的对称式 MPCA 模型



c) 依简化式DTW 算法各轨迹向量只有一个子模型的简化式MPCA 模型

图 4 几种 MPCA 模型中各子模型和待测轨迹各时刻向量对应关系的比较

(图中罗马字为子 PCA 模型标号;阿拉伯数字为轨迹采样点各向量标号)

4 仿真实例

采用某化工厂的聚氯乙烯生产过程的实际数据对可变多元统计 MPCA 模型方法进行仿真研究。首先,我们用正常的 50 个批次同步化后建立 MPCA 参考模型,经计算,取参考模型时间长度为 3 405,权矩阵为对角阵 $\boldsymbol{W}$:

$\boldsymbol{W}$= diag[1.334 3, 1.781 0, 0.559 0, 0.329 1, 0.471 7, 0.536 9, 1.043 4, 0.473 1, 0.392 6, 3.078 9]

平方预测误差(Square Prediction Error, SPE)是PCA 方法检验过程异常和故障的一种性能指标[6]。我们对图 4 中的 3 种方法进行了 SPE 检验。

在线监控中,需要即时计算各采样点的统计控制指标预测误差平方和 SPE_k(k= 1, 2, …, r),其定义如下:

$$\mathrm{SPE}_k = \boldsymbol{X}_k(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{P}_R\boldsymbol{P}_R^T)\boldsymbol{X}_k^T \tag{5}$$

其中,R 为第 k 个 PCA 子模型的主元个数,$\boldsymbol{X}_k$ 为该子模型的数据矩阵,$\boldsymbol{I}$ 为 $R\times R$ 维的单位阵,$\boldsymbol{P}$ 为载荷向量。R 的确定,可以用方差累积贡献率方法,即前几个主元的方差占所有主元方差的比率。若第 k 个子模型中,前 3 个主元就可以描述超过 85% 的原始数据变化信息,就取 R= 3。

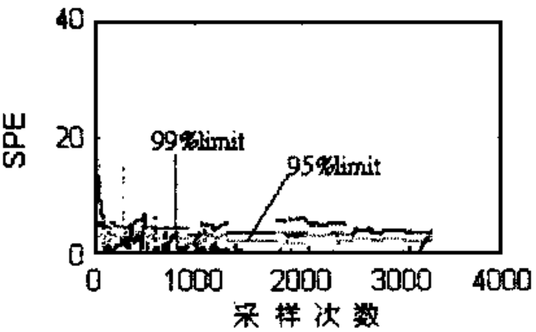
第 k 个子模型的预测平方误差和的统计控制限 $\mathrm{SPE}_{k,\alpha}$定义为[6]:

$$SPE_{k,\alpha}=\theta_{k,1}\left(\frac{c_\alpha(2\theta_{k,2}h_{k,0}^2)^{1/2}}{\theta_{k,1}}+1+\frac{\theta_{k,2}h_{k,0}(h_{k,0}-1)}{\theta_{k,1}}\right)^{\frac{1}{h_{k,0}}} \tag{6}$$

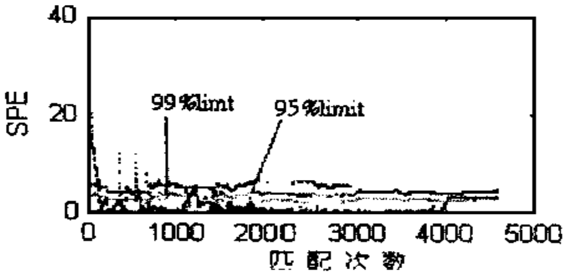
$$\theta_{k,i}=\sum_{r=R+1}^{J}\lambda_{k,r}^{i},\qquad i=1,2,3 \tag{7}$$

$$h_{k,0}=1-(2\theta_{k,1}\theta_{k,3})/(3\theta_{k,2}^2) \tag{8}$$

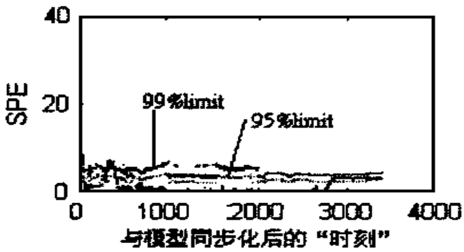
其中, c_α 为对应上述 $1-\alpha$ 百分数的正常偏差, 若 $SPE_k<SPE_{k,\alpha}$, 则该时刻SPE 统计正常, 否则异常。



(a) 用简化式 DTW 的 MPCA 模型监控



(b) 用对称式 DTW 的 MPCA 模型监控



(c) 用参考模型不变的 MPCA 模型监控

图 5　用 3 种方法监控SPE 的比较

图 5 为某一批次的 SPE 在线监控的各种方法比较。从图 5 中可知, 图(a) 的模型时间长度等于监控批次的反应时间长度 3 287, 而且在各时刻明确标示了 SPE; 图(b) 可看成是伸长了的图(a), 其长度为对称式算法的 K 值 5 502, 但其异常的时刻不可能从图中找出; 图(c) 是以参考模型为主, 这样为了"适应"参考模型, 被监控批次某些局部特征已被压缩, 以至于有用的信息可能丢失。

检测出某时刻 SPE 超限后, 可以使用贡献图(Contribution Plot)[7] 来检验是哪一个变量对 SPE 贡献最大, 继而查找故障原因。这部分内容不是本文论述的重点, 不再赘述。

5　结　语

准确的 MPCA 模型是做好间歇过程多元统计监控的基础。由于各批次反应时间长度不能严格相同,传统 MPCA 方法没有考虑到各批次都需要和MPCA 模型同步, 而且在建模时把异步的正常批次简单地建成一个统计模型, 造成了各批次特征不甚相似的缺陷。而使用同一不变的 MPCA 模型, 将被监控批次同步变形和固定 MPCA 模型比较, 又丢失过程中有用的信息, 且不清楚故障发生的时间。本文基于 DTW 的同步化方法, 提出了可变统计模型的思想, 解决了上述问题。建模的最终目的, 是为过程监控服务的。简化式 DTW 的 MPCA 模型监控, 就是以监控对象为主导, 体现了监控对象的完整性。

参考文献

[1]　MacGregor J F. On-line statistical process control. Chemical Engineering Progress, 1988, Oct: 21~ 31

[2]　Dunia R, Qin S J, Edgar T F, *et al*. Identification of faulty sensors using principal component analysis. J. AIChE, 1996, 42(10): 2797~ 2812

[3]　Nomikos P, MacGregor J F. Monitoring of batch processes using multiway principal component analysis. J. AIChE, 1994, 40(8): 1361~ 1375

[4]　Athanassios Kassidas, John F MacGregor, Paul A Taylor. Synchronization of batch trajectories using dynamic time warping. J. AIChE, 1998, 44(4): 864~ 875

[5]　高　翔, 王　纲, 赵立杰, 等. 多元轨迹同步化问题的改进型DTW 算法. 信息与控制, 2001(2): 183~ 188

[6]　Jackson J E. Control procedures for residuals associated with principal component analysis. Technometrics, 1979, 21: 341~ 347

[7]　Miller P, Swanson R E, Heckler C F. Contribution plots: The missing link in multivariate quality control. 37th Annual Fall Conference ASQC, Rochester, NY, 1993

(责任编辑　王海江)