

# 复杂工业过程质量相关的故障检测与诊断技术综述

彭开香<sup>1,2</sup> 马亮<sup>1,2</sup> 张凯<sup>1,2</sup>

**摘要** 质量相关的故障检测与诊断技术是保证安全生产及获得可靠产品质量的有效手段,是当前国际过程控制领域的研究热点. 首先,梳理了质量相关的故障检测技术中典型方法的基本思想和改进过程;其次,概述了质量相关的故障诊断技术中常用的贡献图法及其相关改进方法之间的联系,并通过带钢热连轧过程(Hot strip mill process, HSMP)案例比较了各种典型方法在质量相关的故障检测与诊断性能上的异同;最后,面向复杂工业过程运行数据的主要特性,评析了质量相关的故障检测与诊断方法的研究现状,并指出了该研究领域亟需解决的问题和未来的发展方向.

**关键词** 质量相关, 故障检测, 故障诊断, 偏最小二乘, 贡献图

**引用格式** 彭开香, 马亮, 张凯. 复杂工业过程质量相关的故障检测与诊断技术综述. 自动化学报, 2017, 43(3): 349–365

**DOI** 10.16383/j.aas.2017.c160427

## Review of Quality-related Fault Detection and Diagnosis Techniques for Complex Industrial Processes

PENG Kai-Xiang<sup>1,2</sup> MA Liang<sup>1,2</sup> ZHANG Kai<sup>1,2</sup>

**Abstract** Quality-related fault detection and diagnosis techniques have been extensively applied to the process control field to guarantee production safety and product quality, which, thus, have recently become an active area of research both in academia and industry. Firstly, the basic idea and improvements of typical methods for quality-related fault detection techniques are introduced in this paper. Then, quality-related fault diagnosis techniques are revisited, with special case study attention on the contribution plot based methods and their improved methods, in which on a hot strip mill process (HSMP) is used to show their different performances. Finally, the state-of-the-art research of quality-related fault detection and diagnosis methods for main characteristics of complex industrial process operation data are reviewed, and open problems, challenges and perspectives for future research are presented as well.

**Key words** Quality-related, fault detection, fault diagnosis, partial least squares (PLS), contribution plot

**Citation** Peng Kai-Xiang, Ma Liang, Zhang Kai. Review of quality-related fault detection and diagnosis techniques for complex industrial processes. *Acta Automatica Sinica*, 2017, 43(3): 349–365

为了适应市场对多品种、多规格、高附加值产品的需求,现代工业过程正朝着高效、大型和集成化方向发展.随着生产规模的扩大及复杂性的增加,采用合理的质量相关的故障检测与诊断方法来保障复杂工业过程的安全稳定运行及连续稳定的产品质量已经逐渐成为过程控制领域的首要任务.

复杂工业过程与生俱来的非线性、动态、多模式、多时段、高维度、间歇等特性,使得传统的基于过程机理模型的过程监控方法很难适应实际工业过

程的复杂程度;而随着大量的新型仪表、网络化仪表和传感技术应用于生产制造全流程中,大量的过程数据被采集并存储下来,使得基于数据驱动的故障检测与诊断方法成为了当今过程监控领域的主流技术,已成功应用于化工、医药、钢铁冶金、高分子聚合物、微电子制造等生产过程中<sup>[1–6]</sup>.

在基于数据驱动的故障检测与诊断的众多方法中,研究论文和应用案例数量最多的是多元统计过程监控(Multivariate statistical process monitoring, MSPM)方法,其依托的主要理论是以主元分析(Principle component analysis, PCA)、偏最小二乘(Partial least squares, PLS)、规范变量分析(Canonical variable analysis, CVA)等为核心的投影降维方法.虽然基于PCA的故障检测与诊断技术能够有效地监测过程变量的波动和异常状况,但是企业管理人员和工程师们可能更加关心的是由过程变量引起的故障是否会导致最终产品质量和产量的变化<sup>[7]</sup>.因此,我们更需要探寻易测的过程变量与难以测量的质量变量间的相关关系,以通过过程变

收稿日期 2016-06-03 录用日期 2016-10-14  
Manuscript received June 3, 2016; accepted October 14, 2016  
国家自然科学基金(61473033)资助  
Supported by National Natural Science Foundation of China (61473033)

本文责任编辑 胡昌华  
Recommended by Associate Editor HU Chang-Hua  
1. 北京科技大学自动化学院 北京 100083 2. 钢铁流程先进控制教育部重点实验室 北京 100083

1. School of Automation and Electrical Engineering, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083 2. Key Laboratory for Advanced Control of Iron and Steel Process of Ministry of Education, Beijing 100083

量的变化来监测质量指标的波动情况。

为了获取过程变量与质量变量之间的约束关系,国内外的研究学者已经发表和出版了大量的学术论文及著作,主要研究方向包括基于多元线性回归(Multiple linear regression, MLR)<sup>[8-11]</sup>、PLS<sup>[12-14]</sup>、CVA<sup>[15-18]</sup>等方法的质量相关的过程监测技术。MLR方法主要通过研究过程变量轨迹的变化来分析并在线监测最终产品的质量情况;而基于PLS与基于CVA的过程监测方法类似,主要区别是在获取投影方向时,前者立足于两组变量之间的协方差最大化,而后者立足于两组变量之间的相关系数最大化;从三者之间的关系来看,CVA是PLS的基础,MLR是CVA的特例,PLS是MLR的扩展,PLS可以实现多种数据分析方法的综合应用,可以集MLR、CVA与PCA的基本功能于一体<sup>[19-20]</sup>。同时,从近年来质量相关的过程监测技术已取得的研究成果来看,基于PLS及其相关扩展模型的质量相关的故障检测与诊断技术是最常用的方法<sup>[12, 14, 21-22]</sup>,已逐渐成为过程和质量工程师的得力助手。此外,针对不同的监控指标和应用对象,CVA及MLR方法中的典型代表主元回归(Principle component regression, PCR)<sup>[23]</sup>方法等也在不同应用领域具有相应的优势。

本文针对复杂工业过程质量相关的故障检测与诊断技术的研究现状进行综述,结构如下:首先,对质量相关的故障检测技术中常用的PLS及其扩展模型、PCR模型、CVA模型的基本思想做一梳理总结,重点介绍各模型的改进过程及思路,并用带钢热连轧生产过程案例对比仿真分析各种模型在质量相关及质量无关故障检测应用上的有效性;然后,概述了质量相关的故障诊断技术中常用的贡献图法及其相关改进方法之间的联系,并用带钢热连轧生产过程案例对比仿真分析各种方法在质量相关的故障诊断应用性能上的异同;最后,对复杂工业过程质量相关的故障检测与诊断方法的研究现状进行评析,并指出未来该领域中的热点研究方向。

## 1 质量相关的故障检测技术

为了更好地关注真正有用的质量相关信息,有必要采取适当的手段对过程测量数据进行预处理,剔除冗余信息的干扰。针对这一问题,变量选择技术<sup>[24-25]</sup>及正交信号修正(Orthogonal signal correction, OSC)技术<sup>[26-27]</sup>是两种发展比较成熟且常用的预处理手段,它们分别从变量滤波及特征滤波两个不同的角度去除非质量相关信息,最终都是为了增强过程变量与质量变量之间的相关关系,但是这些方法都不是为了过程监测而提出的。基于此,近十多年来,国内外的研究学者提出了一些基于

PLS、PCR、CVA等模型的过程监测技术。

### 1.1 基于PLS模型的方法

假设对某生产过程的 $m$ 个过程变量和 $p$ 个质量变量进行 $n$ 次采样,得到过程变量矩阵 $\mathbf{X}$ ( $\mathbf{X} \in \mathbf{R}^{n \times m}$ )和质量变量矩阵 $\mathbf{Y}$ ( $\mathbf{Y} \in \mathbf{R}^{n \times p}$ )。基于PLS模型的方法将数据矩阵 $[\mathbf{X}, \mathbf{Y}]$ 投影到一个由较少潜变量 $[t_1, \dots, t_A]$ ( $A$ 为PLS主元个数)所张成的低维空间中:

$$\begin{cases} \mathbf{X} = \mathbf{T}\mathbf{P}^T + \mathbf{E} \\ \mathbf{Y} = \mathbf{T}\mathbf{Q}^T + \mathbf{F} \end{cases} \quad (1)$$

式中, $\mathbf{T} = [t_1, \dots, t_A]$ 为得分矩阵, $\mathbf{P} = [p_1, \dots, p_A]$ 和 $\mathbf{Q} = [q_1, \dots, q_A]$ 分别为 $\mathbf{X}$ 和 $\mathbf{Y}$ 的载荷矩阵, $\mathbf{E}$ 和 $\mathbf{F}$ 分别为 $\mathbf{X}$ 和 $\mathbf{Y}$ 的残差矩阵。

令 $\mathbf{W} = [w_1, \dots, w_A]$ 为计算得分向量的权重矩阵,由于不能直接由原始测量数据矩阵 $\mathbf{X}$ 直接得到 $\mathbf{T}$ ,所以引入权重矩阵 $\mathbf{R} = [r_1, \dots, r_A]$ ,满足 $\mathbf{T} = \mathbf{X}\mathbf{R}$ ,且有:

$$r_i = \prod_{j=1}^{i-1} (\mathbf{I}_m - w_j p_j^T) w_i \quad (2)$$

进一步可得:

$$\mathbf{R} = \mathbf{W}(\mathbf{P}^T \mathbf{W})^{-1} \quad (3)$$

同时满足: $\mathbf{P}^T \mathbf{R} = \mathbf{R}^T \mathbf{P} = \mathbf{W}^T \mathbf{W} = \mathbf{I}_A$ 。

PLS方法将过程变量空间分解为两个斜交投影的子空间:得分子空间,即质量相关子空间;残差子空间,即质量无关子空间。传统的故障检测方法是利用 $T^2$ 统计量及 $Q$ 统计量分别对得分子空间及残差子空间进行监测<sup>[14]</sup>。

在线监测中,对于一个新测量样本 $\mathbf{x}_{\text{new}}$ ,PLS模型的得分和残差部分可以计算如下:

$$\begin{cases} t_{\text{new}} = \mathbf{R}^T \mathbf{x}_{\text{new}} \\ \tilde{\mathbf{x}}_{\text{new}} = (\mathbf{I} - \mathbf{P}\mathbf{R}^T) \mathbf{x}_{\text{new}} \end{cases} \quad (4)$$

基于PLS模型的质量相关故障的统计监测指标可以计算如下<sup>[1]</sup>:

$$T^2 = t_{\text{new}}^T \Lambda^{-1} t_{\text{new}} \quad (5)$$

式中, $\Lambda = \frac{1}{n-1} \mathbf{T}^T \mathbf{T}$ 为建模得分的样本协方差,而质量无关故障的统计监测指标可以计算如下:

$$Q = \|\tilde{\mathbf{x}}_{\text{new}}\|^2 \quad (6)$$

相关统计量控制限的计算可以参见文献[12, 28]。

## 1.2 基于 PLS 扩展模型的方法

虽然基于 PLS 的质量相关的故障检测技术已经在化工及制药等生产过程中得到广泛应用,但是仍然存在两方面问题: 1) PLS 模型需要选择较多的主元来描述与质量相关的变化,使得模型的解释非常困难,而且这些主元中依然含有一些和质量变量正交的成分,对预测产品质量没有帮助; 2) PLS 模型并没有按照过程变量矩阵中方差大小的顺序来抽取主元,使得用  $Q$  统计量监测残差子空间并不合适<sup>[29]</sup>. 基于此,为了改进质量相关的过程监测效果,国内外的研究学者在基本 PLS 模型的基础上,进一步提出了一些基于其扩展模型的过程监测方法.

### 1.2.1 基于全潜结构投影 (T-PLS) 模型的方法

Zhou 等<sup>[29]</sup> 将 PCA 方法去除变量间相关性的优势与 PLS 方法抽取过程变量中与质量相关空间的优势有效结合,构建了 T-PLS 模型,将其主元空间再次分解为与质量相关的子空间  $\mathbf{X}_y$  和与质量无关的子空间  $\mathbf{X}_o$ ,将残差空间再次分解为含较大方差变化的子空间  $\mathbf{X}_r$  和仅包含噪声的残差子空间  $\mathbf{E}_r$ ,该模型仅通过检测  $\mathbf{X}_y$  和  $\mathbf{E}_r$  便可知生产过程中是否有质量相关的故障发生.

通过 T-PLS 方法,可以对  $\mathbf{X}$  和  $\mathbf{Y}$  建模如下:

$$\begin{cases} \mathbf{X} = \mathbf{X}_y + \mathbf{X}_o + \mathbf{X}_r + \mathbf{E}_r \\ \mathbf{Y} = \mathbf{T}_y \mathbf{Q}_y^T + \mathbf{F} \end{cases} \quad (7)$$

式中,  $\mathbf{X}_y = \mathbf{T}_y \mathbf{P}_y^T$ ,  $\mathbf{X}_o = \mathbf{T}_o \mathbf{P}_o^T$ ,  $\mathbf{X}_r = \mathbf{T}_r \mathbf{P}_r^T$ , 衡量了生产过程中的主要变化,适合用  $T^2$  统计量监测;而  $\mathbf{E}_r$  为过程中的残差部分,适合用  $Q$  统计量监测.

在线监测中,对于一个新测量样本  $\mathbf{x}_{\text{new}}$ ,相应的得分和残差部分可以计算如下:

$$\begin{cases} \mathbf{t}_{y,\text{new}} = \mathbf{R} \mathbf{Q}_y^T \mathbf{Q}_y \mathbf{x}_{\text{new}} \\ \mathbf{t}_{o,\text{new}} = \mathbf{P}_o^T (\mathbf{P} \mathbf{R}^T - \mathbf{P}_y \mathbf{R}^T) \mathbf{x}_{\text{new}} \\ \mathbf{t}_{r,\text{new}} = \mathbf{P}_r^T (\mathbf{I} - \mathbf{P} \mathbf{R}^T) \mathbf{x}_{\text{new}} \\ \tilde{\mathbf{x}}_{r,\text{new}} = (\mathbf{I} - \mathbf{P}_r \mathbf{P}_r^T) (\mathbf{I} - \mathbf{P} \mathbf{R}^T) \mathbf{x}_{\text{new}} \end{cases} \quad (8)$$

基于 T-PLS 模型的质量相关故障的统计监测指标可以计算如下:

$$\begin{cases} T_y^2 = \mathbf{t}_{y,\text{new}}^T \Lambda_y^{-1} \mathbf{t}_{y,\text{new}} \\ Q_r = \|\tilde{\mathbf{x}}_{r,\text{new}}\|^2 \end{cases} \quad (9)$$

式中,  $\Lambda_y = \frac{1}{n-1} \mathbf{t}_y^T \mathbf{t}_y$  为通过训练数据估计的  $\mathbf{t}_y$  的协方差,而质量无关故障的统计监测指标可以计算如下:

$$\begin{cases} T_o^2 = \mathbf{t}_{o,\text{new}}^T \Lambda_o^{-1} \mathbf{t}_{o,\text{new}} \\ T_r^2 = \mathbf{t}_{r,\text{new}}^T \Lambda_r^{-1} \mathbf{t}_{r,\text{new}} \end{cases} \quad (10)$$

式中,  $\Lambda_o$ 、 $\Lambda_r$  分别为  $\mathbf{t}_o$ 、 $\mathbf{t}_r$  的协方差矩阵.

相关统计量控制限的计算可以参见文献 [30].

进一步地, Li 等<sup>[31]</sup> 研究了 T-PLS 模型的故障可检测性问题,提出了质量相关故障检测方法的联合监测指标; Zhao 等<sup>[32]</sup> 提出了 T-PLS 模型的多空间分解形式,并将具有不同来源特征的多组过程变量中与质量相关的子空间和与质量无关的子空间进一步分解,有效地提高了质量变量对过程变量的解释能力及实时监测的性能.

### 1.2.2 基于并发潜结构投影 (C-PLS) 模型的方法

T-PLS 模型在实际的应用中存在两个明显的缺陷: 1) 没有明确地解释导致 PLS 模型主元空间中包含与质量无关变化的原因; 2) 主元空间没有必要分解为 4 个子空间,完全可以分解为与质量相关的子空间和与输入相关的子空间. 基于此, Qin 等<sup>[7]</sup> 对质量变量全局监控的角度,构建了 C-PLS 模型,简化了 T-PLS 模型的结构.

通过 C-PLS 方法,可以将  $\mathbf{X}$  和  $\mathbf{Y}$  建模如下:

$$\begin{cases} \mathbf{X} = \mathbf{U}_c \mathbf{R}_c^{-1} + \mathbf{T}_x \mathbf{P}_x^T + \tilde{\mathbf{X}} \\ \mathbf{Y} = \mathbf{U}_c \mathbf{Q}_c^T + \mathbf{T}_y \mathbf{P}_y^T + \tilde{\mathbf{Y}} \end{cases} \quad (11)$$

式中,  $\mathbf{U}_c$  为输入中与可预测的质量相关的协方差部分,  $\mathbf{T}_x$  为输入中与可预测的质量无关的方差部分,  $\mathbf{T}_y$  为不能被输入预测的质量中的方差部分,  $\tilde{\mathbf{X}}$  为与  $\mathbf{Y}$  正交的子空间.

在线监测中,对于一个新测量样本  $\mathbf{x}_{\text{new}}$ ,基于 C-PLS 模型的质量相关故障的统计监测指标可以计算如下:

$$T_c^2 = (n-1) \mathbf{u}_c^T \mathbf{u}_c = (n-1) \mathbf{x}_{\text{new}}^T \mathbf{R}_c \mathbf{R}_c^T \mathbf{x}_{\text{new}} \quad (12)$$

式中,  $(\mathbf{I} - \mathbf{P}_x \mathbf{P}_x^T)^2 = \mathbf{I} - \mathbf{P}_x \mathbf{P}_x^T$ ,  $\Lambda_x = \frac{1}{n-1} \mathbf{T}_x^T \mathbf{T}_x$  为建模得分的样本协方差,而质量无关故障的统计监测指标可以计算如下:

$$\begin{cases} T_x^2 = \mathbf{t}_x^T \Lambda_x^{-1} \mathbf{t}_x = \tilde{\mathbf{x}}_c^T \mathbf{P}_x \Lambda_x^{-1} \mathbf{P}_x^T \tilde{\mathbf{x}}_c \\ Q_x = \|\tilde{\mathbf{x}}_c\|^2 = \tilde{\mathbf{x}}_c^T (\mathbf{I} - \mathbf{P}_x \mathbf{P}_x^T) \tilde{\mathbf{x}}_c \end{cases} \quad (13)$$

相关统计量控制限的计算可以参见文献 [7].

### 1.2.3 基于改进潜结构投影 (M-PLS) 模型的方法

与 T-PLS 模型相同, C-PLS 模型并没有改变基本 PLS 模型对质量变量的预测能力,而是根据质量变量空间进一步分解了测量变量空间,在计算量上还是有些复杂. 基于此, Ding 等<sup>[10]</sup> 和 Yin 等<sup>[10,33]</sup> 构建了 M-PLS 模型,将过程变量空间分解为两个子空间,但要求主元子空间不包含与质量变量正交的成分,对预测产品质量有全部贡献,而残差空间对其预测没有任何贡献.

通过 M-PLS 方法, 可以将  $\mathbf{X}$  和  $\mathbf{Y}$  建模如下:

$$\begin{cases} \mathbf{X} = \hat{\mathbf{X}} + \tilde{\mathbf{X}} \\ \mathbf{Y} = \hat{\mathbf{Y}} + \mathbf{E}_y \end{cases} \quad (14)$$

式中,  $\hat{\mathbf{X}}$  为对预测产品质量有全部贡献的子空间,  $\tilde{\mathbf{X}}$  与质量变量正交的子空间,  $\hat{\mathbf{Y}}$  为与  $\mathbf{X}$  相关的子空间,  $\mathbf{E}_y$  为与  $\mathbf{X}$  无关的子空间.

引入系数矩阵  $\mathbf{M} = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^\dagger \mathbf{X}^T \mathbf{Y}$ , 对  $\mathbf{M}\mathbf{M}^T$  奇异值分解 (Singular value decomposition, SVD) 得:

$$\mathbf{M}\mathbf{M}^T = \begin{bmatrix} \mathbf{P}_M & \tilde{\mathbf{P}}_M \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Lambda_M & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{P}_M^T \\ \tilde{\mathbf{P}}_M^T \end{bmatrix} \quad (15)$$

式中,  $\mathbf{P}_M \in \mathbf{R}^{m \times p}$ ,  $\tilde{\mathbf{P}}_M \in \mathbf{R}^{m \times (m-p)}$ ,  $\Lambda_M \in \mathbf{R}^{p \times p}$ .

构建两个正交投影  $\mathbf{\Pi}_M = \mathbf{P}_M \mathbf{P}_M^T$  和  $\mathbf{\Pi}_M^\perp = \tilde{\mathbf{P}}_M \tilde{\mathbf{P}}_M^T$ , 则将过程变量空间  $\mathbf{X}$  分解为两个正交的子空间:

$$\hat{\mathbf{X}} = \mathbf{X} \mathbf{P}_M \mathbf{P}_M^T \in \text{span}\{\mathbf{M}\} \quad (16)$$

$$\tilde{\mathbf{X}} = \mathbf{X} \tilde{\mathbf{P}}_M \tilde{\mathbf{P}}_M^T \in \text{span}\{\mathbf{M}\}^\perp \quad (17)$$

在线监测中, 对于一个新测量样本  $\mathbf{x}_{\text{new}}$ , 基于 M-PLS 模型的质量相关故障的统计监测指标可以计算如下:

$$T_y^2 = \mathbf{x}_{\text{new}}^T \mathbf{P}_M \left( \frac{\mathbf{P}_M^T \mathbf{Y}^T \mathbf{Y} \mathbf{P}_M}{N-1} \right)^{-1} \mathbf{P}_M^T \mathbf{x}_{\text{new}} \quad (18)$$

质量无关故障的统计监测指标可以计算如下:

$$T_x^2 = \mathbf{x}_{\text{new}}^T \tilde{\mathbf{P}}_M \left( \frac{\tilde{\mathbf{P}}_M^T \mathbf{Y}^T \mathbf{Y} \tilde{\mathbf{P}}_M}{N-1} \right)^{-1} \tilde{\mathbf{P}}_M^T \mathbf{x}_{\text{new}} \quad (19)$$

相关统计量控制限的计算可以参见文献 [10].

#### 1.2.4 基于高效潜结构投影 (E-PLS) 模型的方法

M-PLS 模型避免了 C-PLS 模型在实际应用中复杂的迭代计算过程, 很巧妙地利用 SVD 产生了两个正交的子空间; 而在残差子空间中, 虽然对预测产品质量没有帮助, 但其中的变化仍有可能影响产品质量. 基于此, 为了保证空间分解的完备性, Peng 等<sup>[34]</sup> 在 M-PLS 模型的基础上, 对  $\tilde{\mathbf{X}}$  进一步主元分析, 产生了两个正交的子空间, 构建了 E-PLS 模型.

通过 E-PLS 方法, 可以将  $\mathbf{X}$  和  $\mathbf{Y}$  建模如下:

$$\begin{cases} \mathbf{X} = \hat{\mathbf{X}} + \mathbf{T}_x \mathbf{P}_x^T + \tilde{\mathbf{X}}_r \\ \mathbf{Y} = \hat{\mathbf{Y}} + \mathbf{E}_y \end{cases} \quad (20)$$

式中,  $\hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{X}\mathbf{M}$ ,  $\mathbf{T}_x$  为输入中对预测质量无关的方差部分,  $\tilde{\mathbf{X}}_r$  为残差空间.

在线监测中, 对于一个新测量样本  $\mathbf{x}_{\text{new}}$ , 基于 E-PLS 模型的质量相关及质量无关故障的统计监测指标可以参照式 (18) 和 (13) 计算.

E-PLS 模型的相关统计量控制限的计算可以参见文献 [7, 10, 34].

#### 1.3 基于 PCR 模型的方法

在利用 PLS 方法进行质量相关的故障检测时, 过程变量之间常会存在多重共线问题, 会使回归系数的估计受到严重影响, 回归模型的稳定性变差, 影响过程变量与质量变量间的回归分析效果. 基于此, Peng 等<sup>[23]</sup> 在传统 MLR 方法<sup>[8-11]</sup> 的基础上, 受 T-PLS 与 C-PLS 的启发, 提出了基于 PCR 模型的质量相关的故障检测方法, 弥补了传统 PLS 方法的不足, 提高了质量相关故障的检测能力.

对  $\mathbf{X}$  进行 PCA 分解得:

$$\mathbf{X} = \mathbf{T}_{pc} \mathbf{P}_{pc}^T + \mathbf{T}_{res} \mathbf{P}_{res}^T \quad (21)$$

式中,  $\mathbf{T}_{pc}$  和  $\mathbf{T}_{res}$  分别为主元得分矩阵及残差得分矩阵,  $\mathbf{P}_{pc}$  和  $\mathbf{P}_{res}$  分别为主元载荷矩阵及残差载荷矩阵.

计算线性回归系数得:

$$\mathbf{C}_{PCR} = \mathbf{P}_{pc} (\mathbf{T}_{pc}^T \mathbf{T}_{pc})^{-1} \mathbf{T}_{pc}^T \mathbf{Y} \quad (22)$$

对  $\mathbf{C}_{PCR}$  进行 QR 分解得:

$$\mathbf{C}_{PCR} = \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_{\hat{y}} & \mathbf{Q}_{\hat{y}^\perp} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{R}_{\hat{y}} \\ 0 \end{bmatrix} \quad (23)$$

则将  $\mathbf{X}$  投影到两个正交的子空间:

$$\begin{cases} \mathbf{X}_{\hat{y}} = \mathbf{X} \mathbf{Q}_{\hat{y}} \mathbf{Q}_{\hat{y}}^T \\ \mathbf{X}_{\hat{y}^\perp} = \mathbf{X} \mathbf{Q}_{\hat{y}^\perp} \mathbf{Q}_{\hat{y}^\perp}^T \end{cases} \quad (24)$$

对  $\mathbf{X}_{\hat{y}}$  和  $\mathbf{X}_{\hat{y}^\perp}$  分别进行 PCA 分解得:

$$\begin{cases} \mathbf{X}_{\hat{y}} = \mathbf{T}_{\hat{y}} \mathbf{P}_{\hat{y}}^T \\ \mathbf{X}_{\hat{y}^\perp} = \mathbf{T}_{\hat{y}^\perp} \mathbf{P}_{\hat{y}^\perp}^T + \mathbf{T}_{\tilde{y}} \mathbf{P}_{\tilde{y}}^T \end{cases} \quad (25)$$

在线监测中, 对于一个新测量样本  $\mathbf{x}_{\text{new}}$ , 基于 PCR 模型的质量相关故障的统计监测指标可以计算如下:

$$T_y^2 = \mathbf{x}_{\text{new}}^T \mathbf{Q}_{\hat{y}} \mathbf{Q}_{\hat{y}}^T \mathbf{P}_{\hat{y}} \left( \frac{\mathbf{T}_{\hat{y}}^T \mathbf{T}_{\hat{y}}}{N-1} \right)^{-1} \mathbf{P}_{\hat{y}}^T \mathbf{Q}_{\hat{y}} \mathbf{Q}_{\hat{y}}^T \mathbf{x}_{\text{new}} \quad (26)$$

质量无关故障的统计监测指标可以计算如下:

$$\begin{cases} T_o^2 = \mathbf{x}_{\text{new}}^T \mathbf{Q}_{\hat{y}^\perp} \mathbf{P}_{\hat{y}^\perp} \left( \frac{\mathbf{T}_{\hat{y}^\perp}^T \mathbf{T}_{\hat{y}^\perp}}{N-1} \right)^{-1} \mathbf{P}_{\hat{y}^\perp}^T \mathbf{Q}_{\hat{y}^\perp}^T \mathbf{x}_{\text{new}} \\ Q_o = \mathbf{x}_{\text{new}}^T \mathbf{Q}_{\hat{y}^\perp} \mathbf{Q}_{\hat{y}^\perp}^T \mathbf{P}_{\tilde{y}} \mathbf{P}_{\tilde{y}}^T \mathbf{Q}_{\hat{y}^\perp} \mathbf{Q}_{\hat{y}^\perp}^T \mathbf{x}_{\text{new}} \end{cases} \quad (27)$$

PCR 模型的相关统计量控制限的计算可以参见文献 [12, 23, 28].

#### 1.4 基于 CVA 模型的方法

CVA 方法是一种直接从生产过程数据中产生状态空间方程的子空间辨识方法, 它与 PCA 和 PLS 有着紧密的联系, 这种联系促进了基于 CVA 的方法向具有序列相关性的故障检测方向偏移, 使得基于 CVA 的故障检测技术在化工和制造业等领域得到成功应用<sup>[15-18]</sup>.

CVA 方法的核心思想是在过程变量和质量变量间寻找最优的投影方向  $\mathbf{a}$  和  $\mathbf{b}$ , 使得投影  $\mathbf{a}^T \mathbf{x}$  和  $\mathbf{b}^T \mathbf{y}$  之间的相关性最大, 其目标最大化准则函数为

$$\begin{cases} \rho_{xy}(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = \frac{\mathbf{a}^T \mathbf{C}_{xy} \mathbf{b}}{(\mathbf{a}^T \mathbf{C}_{xx} \mathbf{a})^{\frac{1}{2}} (\mathbf{b}^T \mathbf{C}_{yy} \mathbf{b})^{\frac{1}{2}}} \\ \text{s.t. } \mathbf{a}^T \mathbf{C}_{xx} \mathbf{a} = \mathbf{b}^T \mathbf{C}_{yy} \mathbf{b} = 1 \end{cases} \quad (28)$$

式中,  $\mathbf{C}_{xx} = E(\mathbf{X}\mathbf{X}^T)$ ,  $\mathbf{C}_{yy} = E(\mathbf{Y}\mathbf{Y}^T)$  分别为  $\mathbf{X}$  和  $\mathbf{Y}$  的自协方差矩阵,  $\mathbf{C}_{xy} = E(\mathbf{X}\mathbf{Y}^T)$  为  $\mathbf{X}$  和  $\mathbf{Y}$  之间的互协方差矩阵, 且有  $\mathbf{C}_{yx} = E(\mathbf{Y}\mathbf{X}^T) = \mathbf{C}_{xy}$ .

上述的优化问题可以通过如下的 SVD 实现:

$$\mathbf{C}_{xx}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{C}_{xy} \mathbf{C}_{yy}^{-\frac{1}{2}} = \mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{V}^T \quad (29)$$

式中,  $\mathbf{a} = \mathbf{U}^T \mathbf{C}_{xx}^{-1/2}$ ,  $\mathbf{b} = \mathbf{V}^T \mathbf{C}_{yy}^{-1/2}$ ,  $\mathbf{D} = \mathbf{a}\mathbf{C}_{xy}\mathbf{b}^T = \text{diag}\{\rho_1, \dots, \rho_d, 0, \dots, 0\}$  中的元素  $\rho_1, \dots, \rho_d$  为对应的规范变量间的相关系数, 且  $\rho_1 \geq \dots \geq \rho_d$ .

在线监测中, 对于一个新测量样本  $\mathbf{x}_{\text{new}}$ , 基于 CVA 模型的质量相关故障的统计监测指标可以计算如下:

$$T_p^2 = \mathbf{x}_{\text{new}}^T \mathbf{a}_p^T \mathbf{a}_p \mathbf{x}_{\text{new}} \quad (30)$$

式中,  $p$  为选取的典型相关维数.

质量无关故障的统计监测指标可以计算如下:

$$T_q^2 = \mathbf{x}_{\text{new}}^T \mathbf{a}_q^T \mathbf{a}_q \mathbf{x}_{\text{new}} \quad (31)$$

式中,  $q$  为噪声空间维数.

CVA 模型的相关统计量控制限的计算可以参见文献 [15].

#### 1.5 对比总结

以上对基于 PLS 及其扩展模型、PCR、CVA 模型的质量相关的故障检测方法的基本思想进行了详细地梳理, 下面从计算复杂度、空间投影结构、子空间分解个数、统计量个数上对以上 7 种模型进行对比总结, 如表 1 所示, 其中  $a$  为经过交叉检验得到的主元个数.

以上 7 种方法将测量变量空间分解为不同的子空间, 而故障检测就是利用相关统计量对各子空间

分别进行监测. 如果相关统计量均在相应的控制限内, 那么认为生产过程中没有发生质量相关或质量无关的故障; 反之, 生产过程中则有质量相关或质量无关的故障发生. 下面对基于以上 7 种模型的质量相关及质量无关故障的相关监测统计量进行概括总结, 如表 2 所示.

表 1 对比结果

Table 1 Comparison results

方法	计算复杂度	投影结构	子空间个数	统计量个数
PLS	$a$ 次 SVDs	斜交	2	2
T-PLS	$a+3$ 次 SVDs	正交	4	4
C-PLS	$a+2$ 次 SVDs	正交	3	3
M-PLS	2 次 SVDs	正交	2	2
E-PLS	3 次 SVDs	正交	3	3
PCR	3 次 SVDs	正交	3	3
CVA	1 次 SVD	正交	2	2

表 2 监测统计量总结

Table 2 Summary of monitoring statistics

方法	质量相关故障统计量	质量无关故障统计量
PLS	$T^2$	$Q$
T-PLS	$T_y^2$ 和 $Q_r$	$T_o^2$ 和 $T_r^2$
C-PLS	$T_c^2$	$T_x^2$ 和 $Q_x$
M-PLS	$T_y^2$	$T_x^2$
E-PLS	$T_y^2$	$T_x^2$ 和 $Q_x$
PCR	$T_y^2$	$T_o^2$ 和 $Q_o$
CVA	$T_p^2$	$T_q^2$

#### 1.6 对比仿真研究

为了验证以上 7 种模型在质量相关及质量无关故障检测应用上的有效性, 这里用带钢热连轧过程案例来对比仿真研究.

带钢热连轧过程是一个极其复杂的工业过程, 其设备布置图如图 1 所示. 精轧机组一般由 6~7 个机架组成, 每台机架主要由一对工作辊、一对支撑辊和相应的液压压下装置等部分构成. 在轧机的下支撑辊下部一般装有轧制力检测装置, 用于测量带钢轧制力, 每台轧机的驱动一般由一台大型的交流电机完成. 上、下工作辊之间的辊缝主要由高精度的液压伺服控制系统完成, 以保证一定厚度的带钢经该机架轧制后得到相应的出口厚度.

轧机控制系统一般配备自动厚度控制 (Automatic gauge control, AGC)、精轧温度控制 (Finishing temperature control, FTC)、自动板型控制 (Automatic slab control, ASC) 等控制器, 以保证带钢出口厚度、温度、板型等达到相应要求. 在精轧机组出口处一般装有测厚仪、测温

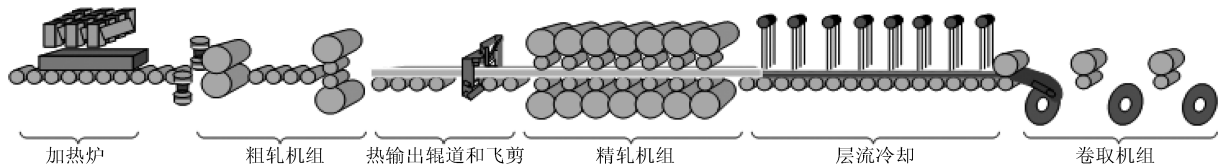


图 1 带钢热连轧机布置图

Fig. 1 Schematic layout of the hot strip mill

仪、测宽仪和板型仪等各类仪表及传感器,记录并存储了大量的现场数据,为基于数据驱动的故障检测与诊断方法提供了大量的资源。

整个带钢热连轧过程,我们关心的质量变量为厚度、宽度及出口温度等,尤其是出口厚度,是直接影响产品质量的关键因素。出口厚度是由 X 射线测厚仪在最后一个机架的出口处测量,发生在前面机架的故障要等到 X 射线测厚仪测量到异常的厚度值,才能针对该故障进行诊断,由此产生一个明显的滞后延迟,给实际的生产运行维护带来了很大不便。因此,采用正确的质量相关的故障检测与诊断方法对保证带钢厚度符合要求具有重要的现实意义。

本文以某钢铁公司 1700 mm 带钢热连轧生产线为研究背景,利用以上 7 种模型对现场采集的两组数据进行质量相关及质量无关故障的检测。过程变量考虑为 7 机架的辊缝、轧制力、弯辊力(第一机架无弯辊)共 20 个变量,质量变量考虑为精轧末机架的出口厚度。精轧机轧制过程变量及质量变量分配情况如表 3 所示。

表 3 过程及质量变量分配表  
Table 3 Assignment table of process and quality variables

变量	类型	描述	单位
1~7	过程变量	第 $i$ 机架的平均辊缝 ( $i = 1, \dots, 7$ )	mm
8~14	过程变量	第 $i$ 机架的轧制力 ( $i = 1, \dots, 7$ )	MN
15~20	过程变量	第 $i$ 机架的弯辊力 ( $i = 2, \dots, 7$ )	MN
21	质量变量	精轧末机架出口厚度	mm

首先,考虑的故障为精轧机轧制过程中时常发生的第 2、3 机架之间冷却水控制阀的执行器故障,其不能按设定模式关闭,会对第 3 及之后机架的轧制力造成影响。由于机架本身 AGC 的作用,辊缝也相应地发生变化,从而导致出口带钢厚度产生正向偏差,影响最终的产品质量,故该故障为质量相关的故障。该故障从第 10s 开始,持续 10s,在第 20s 左右结束,采样间隔为 10 ms。

然后,考虑的故障为第 5 机架的弯辊力采样值发生故障,其是一种阶跃跳变故障。当该故障发生时,变量 18 会突然增大,而随着 AGC 的反馈调节

作用,后面两个机架弯辊力的值也会发生相应变化。但是,该故障只会引起带钢板型变化,对出口带钢厚度影响很小,故为质量无关的故障。

按照表 2 中总结的质量相关及质量无关故障的监测统计量,利用以上 7 种模型对现场采集的两组能够反映精轧机轧制过程的质量相关及质量无关故障样本数据进行检测,检测结果如图 2 及图 3 所示。

通过图 2 和图 3 可以看出,对于带钢热连轧生产过程中发生的质量相关及质量无关的故障,7 种模型均可以给出明显的报警。在故障报警率 (Fault alarm rate, FAR) 及故障检测率 (Fault detection rate, FDR) 方面,对比结果如表 4 所示。

表 4 故障报警率及故障检测率对比结果  
Table 4 FAR and FDR comparison results

方法	质量相关	质量相关	质量无关	质量无关
	FAR	FDR	FAR	FDR
PLS	0.1812	0.8680	0.0019	0.9960
T-PLS	0.2146	0.8920	0.0078	0.9981
C-PLS	0.2181	0.9713	0.0041	0.9982
M-PLS	0.1946	0.8480	0.0530	0.9981
E-PLS	0.2179	0.9712	0.0041	0.9983
PCR	0.1927	0.9014	0.0052	0.9944
CVA	0.2011	0.8966	0.0037	0.9929

从表 4 的 FAR 和 FDR 对比情况来看,针对带钢热连轧生产过程中发生的质量相关的故障,虽然 7 种模型的 FAR 基本相似,但是 FDR 却不尽相同,与另外 5 种模型相比,C-PLS 和 E-PLS 模型具有更高的 FDR;而对于带钢热连轧生产过程中发生的质量无关的故障,7 种模型的 FAR 和 FDR 差别却很小,其主要与本文所选择案例的质量变量较少,仅为精轧末机架出口厚度有关。

从仿真结果来看,以上 7 种模型都使用了相关统计量对不同的子空间进行质量相关及质量无关故障的检测。因此,未来的工作有必要进一步深入分析空间分解对质量相关故障检测能力的影响问题,进而研究如何获得过程变量与质量变量之间精确的回归系数以改善质量相关故障的检测性能。

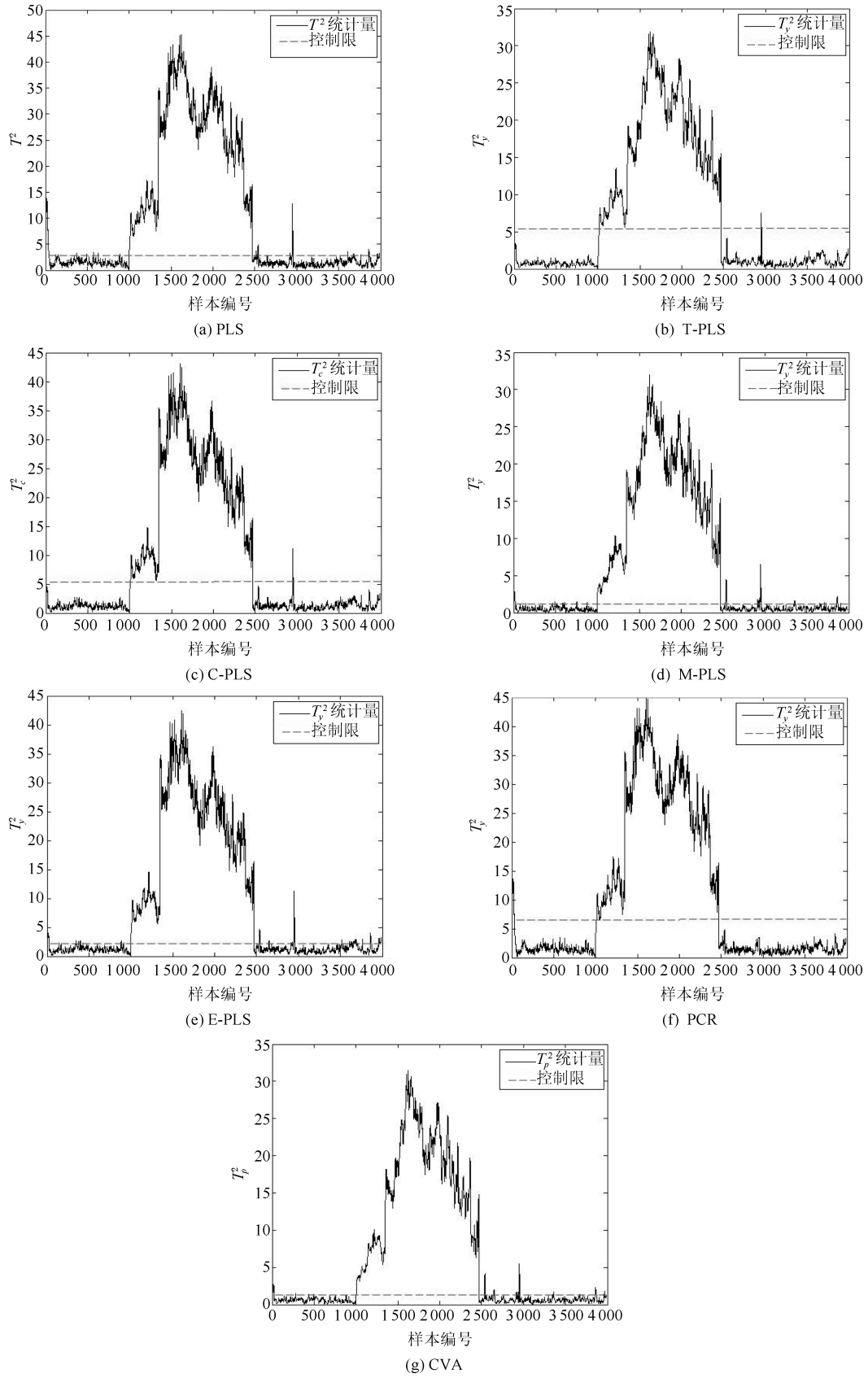


图 2 质量相关的故障检测结果

Fig.2 Quality-related fault detection results

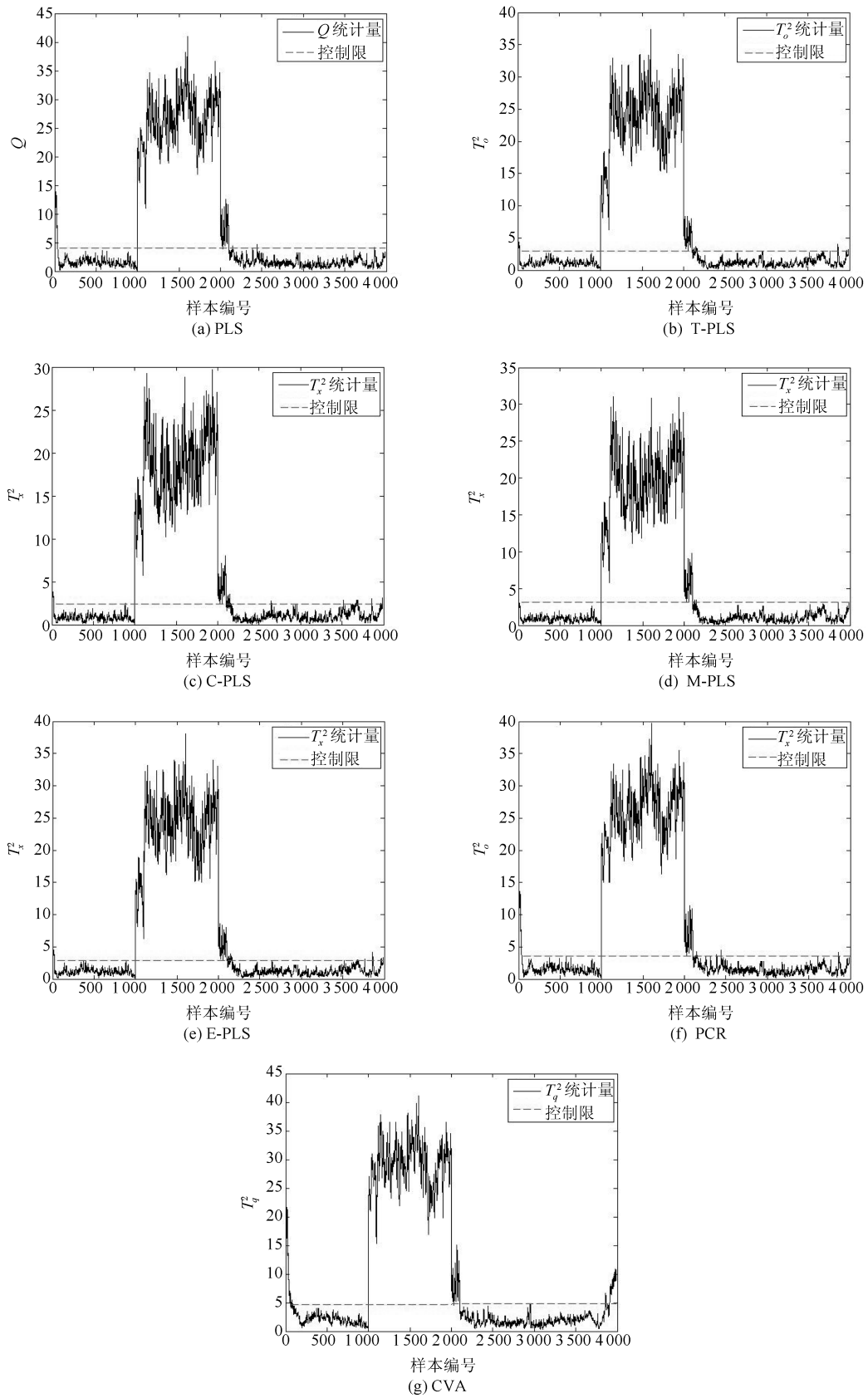


图3 质量无关的故障检测结果

Fig. 3 Quality-unrelated fault detection results



## 2 基于贡献图的质量相关的故障诊断技术

当常用的多元统计指标  $T^2$  及  $Q$  统计量超过了控制限, 相关的基于 PCR、PLS、CVA 等方法的监测模型可以给出明显报警, 提示生产过程出现异常状况, 但却不能明确地提供与质量相关的故障变量和故障种类. 为了解决以上问题, 大量的基于多元统计的故障诊断方法涌现出来, 主要包括判别分析法<sup>[35-36]</sup>、基于相异因子的模式匹配方法<sup>[37-38]</sup>、基于结构残差的方法<sup>[39-41]</sup>、基于贡献图<sup>[42-45]</sup>及贡献率<sup>[46-47]</sup>的方法等. 在众多的方法中, 贡献图法及其相关改进方法以其不需要对系统的结构、原理及故障信息有深入的了解, 近年来在与质量相关的故障诊断中得到了广泛应用, 被学术界和工业界广泛研究和推广. 基于此, 本部分将重点对质量相关的故障诊断技术中常用的贡献图及其相关改进方法进行梳理总结.

### 2.1 基于贡献图的方法

贡献图法的核心思想是当与质量相关的故障发生后, 通过计算每一个变量对平方预报误差 (Squared prediction error, SPE) (也称  $Q$  统计量) 和  $T^2$  统计量的贡献进行故障识别, 具有较大贡献的变量很可能是质量相关的故障变量, 但最终的故障原因还需要利用相关过程知识进一步分析和确定. MacGregor 等<sup>[48]</sup> 最先提出了贡献图法; Miller 等<sup>[49]</sup> 尝试将该方法应用于过程质量控制中; Louw-erse 等<sup>[50]</sup> 将该方法应用于基于 PLS 模型的批次过程判别分析中; 李钢等<sup>[51]</sup> 提出了基于 T-PLS 模型的贡献图方法, 并用统一的方式描述了所有变量对  $Q_r$ ,  $T_y^2$ ,  $T_r^2$ ,  $T_o^2$  的贡献图; Westerhuis 等<sup>[52]</sup> 和 Conlin 等<sup>[53]</sup> 相继讨论了贡献图的控制限问题, 希望以此提高贡献图的故障诊断性能.

基于 SPE 统计量的贡献图法定义式如下:

$$\text{SPE} = \|\tilde{\mathbf{C}}\mathbf{x}\|^2 = \sum_{i=1}^m C_i^{\text{SPE}} = \sum_{i=1}^m (\xi_i^T \tilde{\mathbf{C}}\mathbf{x})^2 \quad (32)$$

式中,  $\tilde{\mathbf{C}} = \mathbf{I} - \mathbf{P}\mathbf{P}^T$ ,  $C_i^{\text{SPE}}$  为各个变量对 SPE 的贡献值,  $\xi_i$  为单位矩阵  $\mathbf{I}_m$  的第  $i$  列.

基于  $T^2$  统计量的贡献图法定义式如下:

$$T^2 = \mathbf{x}^T \mathbf{D}\mathbf{I}_m \mathbf{x} = \mathbf{x}^T \mathbf{D} \sum_{i=1}^m \xi_i \xi_i^T \mathbf{x} = \sum_{i=1}^m C_i^{T^2} \quad (33)$$

式中,  $\mathbf{D} = \mathbf{P}^T \mathbf{\Lambda}^{-1} \mathbf{P}$ ,  $C_i^{T^2}$  为各个变量对  $T^2$  统计量的贡献值.

### 2.2 基于重构贡献图的方法

虽然贡献图法在实际的应用中可以有效地诊断出对产品质量影响比较大的故障变量, 但由于实际

的故障与征兆之间存在非单一的映射关系, 使得利用该方法解释故障的原因比较困难. 基于此, Alcalá 等<sup>[54-55]</sup> 提出了重构贡献图 (Reconstruction-based contribution, RBC) 法, 其利用沿着某一特定变量方向进行重构的故障检测指数之和作为该变量的贡献值.

按照

$$\mathbf{x}_k = \mathbf{x}_k^* + \xi_i \mathbf{f}_i \quad (34)$$

式中,  $\mathbf{x}_k^*$  为无故障时的正常值,  $\xi_i$  为故障方向向量,  $\mathbf{f}_i$  为故障幅值. 则沿故障方向向量  $\xi_i$  进行重构得:

$$\mathbf{z}_i = \mathbf{x} - \xi_i \mathbf{f}_i \quad (35)$$

Dunia 等<sup>[56]</sup> 给出了基于 SPE 的沿任意方向的重构形式; Yue 等<sup>[57]</sup> 给出了基于  $T^2$  的重构形式. 将这两种统计量表示成统一形式, 则故障重构指标可以表示为

$$\text{Index}(\mathbf{z}_i) = \mathbf{z}_i^T \tilde{\mathbf{C}}\mathbf{z}_i = \|\mathbf{z}_i\|_M^2 = \|\mathbf{x} - \xi_i \mathbf{f}_i\|_M^2 \quad (36)$$

重构的任务就是找到合适的  $\mathbf{f}_i$  使  $\text{Index}(\mathbf{z}_i)$  最小, 从而找到准确的故障辨识方向  $\xi_i$ . 对式 (36) 求偏导数并令其为 0, 可解得:

$$\mathbf{f}_i = (\xi_i^T \tilde{\mathbf{C}}\xi_i)^{-1} \xi_i^T \tilde{\mathbf{C}}\mathbf{x} \quad (37)$$

用  $\text{RBC}_i^{\text{Index}}$  表示变量  $\mathbf{x}_i$  对故障检测指标的重构贡献值:

$$\text{RBC}_i^{\text{Index}} = \|\xi_i \mathbf{f}_i\|_M^2 \quad (38)$$

将式 (37) 代入式 (38) 可得:

$$\text{RBC}_i^{\text{Index}} = \frac{(\xi_i^T \tilde{\mathbf{C}}\mathbf{x})^2}{\xi_i^T \tilde{\mathbf{C}}\xi_i} \quad (39)$$

式中,  $\xi_i$  可以是任意方向的故障, 也可以是多维的故障矩阵.

RBC 法在应用中, 当故障幅值较大时, 能从理论上保证正确的诊断结果, 较传统的贡献图法更具有有一般性, 但该方法计算量相对较大, 所阐述的物理意义不够明确. 基于此, Li 等<sup>[58]</sup> 将 RBC 法扩展到更一般情况, 提出了基于 T-PLS 模型的广义 RBC 法, 该方法既可以诊断传感器故障, 又可以分离带有已知故障方向的过程故障.

根据故障重构的结果, 针对所有可能的故障类别  $\Xi_i$ , 广义 RBC 法定义式如下:

$$\text{RBC}_i = \varphi(\mathbf{x}) - \varphi(\mathbf{z}_i) = \mathbf{x}^T \tilde{\mathbf{C}}\Xi_i (\Xi_i^T \tilde{\mathbf{C}}\Xi_i)^{\dagger} \Xi_i^T \tilde{\mathbf{C}}\mathbf{x} \quad (40)$$

式中,  $\varphi$  为 Yue 等<sup>[57]</sup> 提出的由  $T^2$  和 SPE 统计量合成的指标.

广义 RBC 法利用一种新的质量相关的故障检测指标  $\varphi$ , 将传统的贡献图法与重构的故障诊断思想相结合, 提高了与质量相关故障诊断的正确率, 但

该方法需要故障方向矩阵, 限制了其广泛应用. 基于此, Li 等<sup>[59]</sup> 提出了多向 RBC 法, 该方法不需要故障方向矩阵, 比传统的 RBC 法的候选变量少很多, 减小了计算复杂度, 且对于单传感器故障则完全退化为传统的 RBC 法, 具有较强的兼容性.

### 2.3 基于相对贡献图的方法

相对贡献图的概念最早是由 Westerhuis 等<sup>[52]</sup> 提出的, 在传统贡献图法的基础上引入了贡献图期望值的概念并将其作为比例因子. 在实际的应用中, 由于计算期望值比控制限容易, 所以使用基于期望值的相对贡献图法更简单, 更适用于复杂工业过程的故障诊断.

相对贡献值  $rC_i^{SPE}$  与  $C_i^{SPE}$  之间满足如下关系:

$$rC_i^{SPE} = \frac{C_i^{SPE}}{E[C_i^{SPE}]} \quad (41)$$

式中,  $E[C_i^{SPE}]$  为  $C_i^{SPE}$  的期望值, 则  $rC_i^{SPE}$  的期望值为

$$E[rC_i^{SPE}] = E\left[\frac{C_i^{SPE}}{E[C_i^{SPE}]}\right] = 1 \quad (42)$$

同理, 可得  $E[rRBC_i^{Index}] = 1$ . 可以看出, 在正常工况下, 各个变量贡献值的期望值相等且恒为 1.

进一步地, 由式 (32) 和式 (41) 可得:

$$rC_i^{SPE} = \frac{(\xi_i^T \tilde{C}x)^2}{\xi_i^T \tilde{S}C\xi_i} = \frac{(\xi_i^T \tilde{C}x)^2}{\xi_i^T \tilde{C}S\tilde{C}\xi_i} \quad (43)$$

式中,  $S = E[xx^T]$ .

同理, 由式 (39) 和式 (41) 可得:

$$rRBC_i^{Index} = \frac{(\xi_i^T \tilde{C}x)^2}{\xi_i^T \tilde{S}C\xi_i} = \frac{(\xi_i^T \tilde{C}x)^2}{\xi_i^T \tilde{C}S\tilde{C}\xi_i} \quad (44)$$

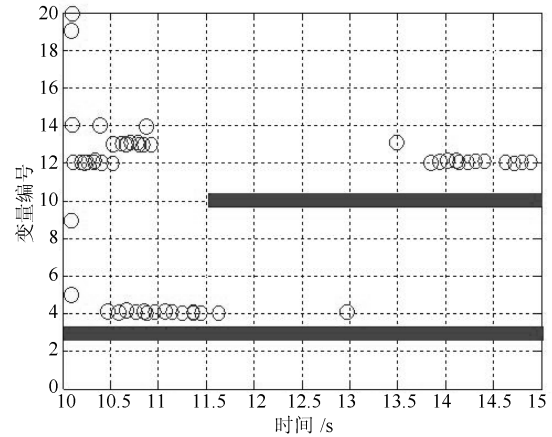
由式 (43) 和式 (44) 可以看出: 尽管传统贡献图法和 RBC 法的贡献值表达形式不同, 但它们的相对贡献值的表达形式却完全相同.

### 2.4 对比仿真研究

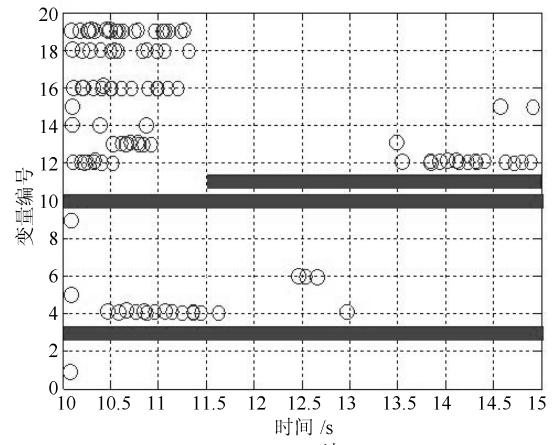
为了更清晰地了解传统贡献图法、RBC 法及相对贡献图法在质量相关的故障诊断应用中的有效性, 仍然采用第 1.6 节中的带钢热连轧过程案例对比仿真研究. 故障诊断结果如图 4 所示, 符号“o”表示每个时间点所对应的每个变量的诊断结果.

从图 4 中可以看出, 图 4(a) 中只有故障变量 3 被诊断出来, 与实际不符; 而图 4(b) 和 4(c) 中故障变量 3 和故障变量 10 均被诊断出来, 与实际情况相符. 随着故障的传播, 其他的故障变量也被诊断

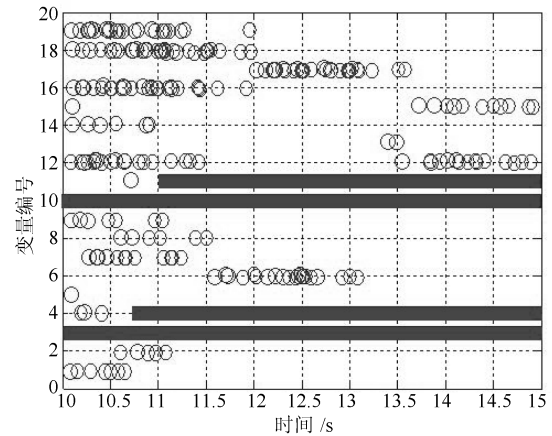
出来, 诊断结果很好地反应了实际的质量相关故障的诊断过程, 但相对贡献图法的计算量要比 RBC 法小很多. 综合来看, 针对在精轧机轧制过程中质量相关故障诊断的应用性能上, 相对贡献图法要好于 RBC 法及传统的贡献图法.



(a) 传统贡献图法  
(a) Traditional contribution plot method



(b) RBC 法  
(b) Reconstruction based contribution plot method



(c) 相对贡献图法  
(c) Relative contribution plot method

图 4 质量相关的故障诊断结果

Fig. 4 Quality-related fault diagnosis results

### 3 复杂工业过程质量相关的故障检测与诊断技术研究现状

复杂工业过程结构庞大, 生产过程内部机理繁杂, 运行数据在记录、传输过程中不可避免地含有各种噪声、测量误差及数据缺失等情况, 导致了研究人员获得的现场数据结构复杂、品质良莠不齐, 难以寻找到合理的统计规律, 即便经过预处理之后的数据仍可能含有复杂特性, 而当前的质量相关的故障检测与诊断技术的研究主要集中在处理这些复杂工业过程运行数据的特性上. 基于此, 本部分将面向复杂工业过程运行数据的动态、非线性、多模态、间歇等主要特性, 对复杂工业过程质量相关的故障检测与诊断方法的研究现状进行评述分析.

#### 3.1 面向复杂工业过程的动态特性

实际的工业生产过程并不完全处于稳态, 而基本都是一个动态的过程, 虽然稳态数据的协调方法和变量聚类较为简单, 但并不符合工业现场的实际情况, 无较大的应用价值, 因此必须利用动态的理论思想对工业生产过程进行分析.

传统的 PLS 及其扩展模型是基于稳态数据建立的纯代数结构, 并不适合于描述动态过程. 为了描述实际工业过程的动态特性, 先后有多个学者提出了 PLS 及其扩展模型的动态改进方法, 这些方法大致可以分为三类: 1) 加入动态滤波器的方法, 如 Kaspar 等<sup>[60]</sup> 提出的先利用动态滤波器对输入数据进行预处理, 再利用传统的稳态 PLS 方法回归建模; 2) 与动态模型相结合的方法, 如 Kaspar 等<sup>[61]</sup> 及 Lakshminarayanan 等<sup>[62]</sup> 将外生变量自回归 (Auto-regressive exogenous, ARX) 模型与 PLS 模型结合来刻画生产过程的动态特性; 3) 将生产过程的过去信息嵌入输入数据矩阵中.

在以上三类动态改进方法中, 第三类方法在基于 PLS 的质量相关的故障检测与诊断应用中占大部分. Ricker<sup>[63]</sup> 通过在输入数据矩阵中增加历史输入信息, 提出了一种基于有限脉冲响应 (Finite impulse response, FIR) 的动态 PLS 方法; Qin 等<sup>[64]</sup> 则将过去输入、输出信息同时嵌入数据矩阵中, 提出了基于多变量滑动自回归 (Auto-regressive moving average, ARMA) 模型的动态 PLS 方法, 然而这些方法都不同程度上增加了输入数据矩阵的维数, 难以应用于实际的工业过程监控. 基于此, Chen 等<sup>[65]</sup> 提出了动态 PLS 方法, 并将其应用于间歇过程的在线监控中; Lee 等<sup>[66]</sup> 提出了基于动态 PLS 的多重故障诊断方法; Fletcher 等<sup>[67]</sup> 提出了局部动态 PLS 方法, 并将其应用于间歇过程建模中; Li 等<sup>[58]</sup> 和 Liu 等<sup>[68]</sup> 先后将动态 T-PLS 方法及动态 C-PLS

方法应用于动态过程的质量相关的过程监测及故障诊断中; Jiao 等<sup>[69]</sup> 提出了基于自动回归滑动平均模型 (Auto-regressive moving average exogenous, ARMAX) 的动态最小二乘方法, 并将其应用于动态输入、静态输出过程的质量相关的故障检测中, 取得了良好的效果.

同时, 在动态 PLS 方法中, PLS 及其扩展模型的更新也是近年来一个值得关注的话题. Helland 等<sup>[70]</sup> 利用新数据和原模型参数进行模型更新提出了递推偏最小二乘 (Recursive partial least squares, RPLS) 算法; Qin<sup>[71]</sup> 对该方法进行补充, 提出了分块 RPLS 算法和两种数据更新方法: 移动窗口法和遗忘因子法; Dong 等<sup>[72]</sup> 在前人研究工作的基础上, 将自适应技术与 T-PLS 模型结合, 提出了递推 T-PLS (Recursive total projection to latent structures, RTPLS) 方法, 实现了时变、动态过程质量相关的故障诊断, 能够很好地跟踪过程的动态变化, 解决了传统 PLS 模型确定之后, 无法对工况变化做出反应的缺陷.

此外, 由于基于 CVA 的子空间方法能有效地对动态系统辨识, 所以在监控含有自相关的生产过程时, 能从根本上消除自相关对监控指标的影响. Wang 等<sup>[73]</sup> 率先尝试将 CVA 方法应用于连续生产过程监控中; 与此同时, Negiz 等<sup>[15]</sup> 将基于 CVA 的状态变化量与相关统计量相结合, 应用于牛奶巴氏杀菌过程监控中, 取得了良好的监控效果. 基于此, Russell 等<sup>[16]</sup> 将 CVA 方法应用于 TE (Tennessee eastman) 过程的过程监控中, 并与 PCA、动态 PCA (Dynamic principal component analysis, DPCA) 的监控效果做一对比, 证明了 CVA 方法的优越性; Jiang 等<sup>[74]</sup> 将 CVA 方法与贡献图法有效结合, 应用于 TE 过程的故障辨识中; 曹玉苹等<sup>[75]</sup> 在传统 CVA 方法的基础上, 进一步地将过程数据和质量数据空间精细化分解, 使监控系统在检测故障的同时, 能够有效地分析过程故障与产品质量的关系, 对实际工业应用具有重要价值.

#### 3.2 面向复杂工业过程的非线性特性

从严格意义上讲, 绝大多数的复杂工业过程变量之间、过程变量与质量变量之间的相关关系都是非线性的, 且随着如半导体制造、生物发酵等工业过程的复杂化, 数据的非线性特性变得尤为明显, 使得传统的线性方法往往无法获得满意的效果. 基于此, 大量的 PLS 及其扩展模型的非线性改进方法涌现出来, 这些方法大多是针对基本模型的内模型或外模型进行改进.

非线性 PLS 方法最早由 Wold 等提出<sup>[76]</sup>; Qin 等<sup>[77]</sup>、Malthouse 等<sup>[78]</sup> 先后将神经网络技术引入

到 PLS 建模体系中; Lindgren 等<sup>[79]</sup> 提出了核 PLS (Kernel projection to latent structures, KPLS) 方法, 该方法通过核函数将原始变量的低维空间映射到高维空间, 再用线性的 PLS 方法建模, 由于该方法无需非线性优化, 模型训练较为容易, 成为了面向非线性数据特性的质量相关的故障诊断领域的主流方法. 基于此, Zhang 等<sup>[80]</sup> 提出了基于多模块的核 PLS (Multi-block kernel partial least squares, MBKPLS) 方法, 并将其应用于大规模生产过程的分散式故障诊断中; Peng 等<sup>[81]</sup> 提出了全核 PLS (Total kernel projection to latent structures, T-KPLS) 方法, 并将其应用于带钢热连轧生产过程 (Hot strip mill process, HSPM) 质量相关的故障诊断中; Zhao 等<sup>[82]</sup> 将全局函数与局部函数结合, 提出了混合核 T-PLS 方法, 并将其应用于化工过程质量相关的故障检测与辨识中; Mori 等<sup>[83]</sup> 提出了多向核 PLS (Multiway kernel partial least squares, MKPLS) 方法, 并将其应用于非线性间歇过程质量相关的性能监控中; Zhang 等<sup>[84]</sup> 提出了基于核 C-PLS (Kernel concurrent projection to latent structures, KCPLS) 的重构方法, 并将其应用于非线性的青霉素发酵生产过程的故障诊断中; 此外, 该课题组<sup>[85]</sup> 还提出了定向的核 PLS (Directional kernel partial least squares, DKPLS) 方法, 建立了更直接的过程变量与质量变量间的关系模型, 并将其应用于重烧镁的生产过程监控中; Luo 等<sup>[86]</sup> 提出了多线性 PLS 方法, 并将其应用于间歇过程的质量预测及质量相关的过程监控中, 取得了良好的效果.

同时, 面向具有非线性及动态多重特性数据的工业过程, Liu 等<sup>[87]</sup> 提出了动态全核 PLS (Dynamic total kernel projection to latent structures, DT-KPLS) 方法, 并将其应用于非线性动态系统的质量相关的过程监控中; Jia 等<sup>[88]</sup> 通过在传统的 KPLS 模型中引入遗忘因子, 提出了动态核 PLS (Dynamic kernel partial least squares, D-KPLS) 方法, 并将其应用于质量相关的故障检测中; 邓晓刚等<sup>[89]</sup> 提出了基于核 CVA (Kernel canonical variate analysis, KCVA) 的故障诊断方法, 其利用核函数完成了非线性空间到高维线性空间的映射, 并在线性空间中使用 CVA 方法来辨识状态空间模型, 实现了具有非线性及动态特性的连续搅拌反应釜 (Continuous stirred tank reactor, CSTR) 系统的过程监控; Tan 等<sup>[90]</sup> 将 KCVA 方法与独立成分分析 (Independent component analysis, ICA) 方法有效结合, 应用于连续退火生产线的故障检测与诊断中; Samuel 等<sup>[91]</sup> 将核密度估计方法与传统的 CVA 方法有效结合, 提出了一种新的 KCVA 方法, 并利

用 TE 过程仿真说明了该方法在对具有非线性及动态多重特性的工业过程进行过程监测的优势.

### 3.3 面向复杂工业过程的多模态特性

复杂工业生产过程方案的变动、产品类型的改变、外界环境的变化、原料和组分的变更等均会导致生产过程具有不同潜在过程特性的多种模态, 使得面向多模态生产过程质量相关的故障检测与诊断问题的研究面临着较大的挑战.

针对多模态生产过程的质量相关的故障检测与诊断问题, 一些学者如 Hwang 等<sup>[92]</sup>、Lane 等<sup>[93]</sup>、Zhao 等<sup>[94]</sup> 在传统 PLS 模型的基础上提出了整体建模方法, 但是这种方法所建立的模型无法准确地刻画所有的运行模态; 而通过每种模态分别建模及分析的方法则需要根据各子模态间的相似程度指标分析或是利用聚类算法实现子模态之间的迁移, 虽然可以获取更多单一模态的独立信息, 但是很多有用的过程特性没有得到深入的挖掘和理解, 且当模型结构较为复杂时, 增加了在线实施的难度<sup>[94]</sup>.

对于高斯混合模型 (Gaussian mixture model, GMM) 的多模态过程监控方法, 能够监控多操作条件及非线性的生产过程, 近年来引起了不少学者如 Yue 等<sup>[95]</sup>、Yu 等<sup>[96]</sup>、Qin 等<sup>[95-96]</sup>、Yoo 等<sup>[97]</sup> 的关注, 但在实际应用中很难决定其局部模型的数量, 且模型的训练较为复杂. 针对该问题, Peng 等<sup>[98]</sup> 将 GMM 法与传统的 PLS 方法有效结合, 提出了一种新的多重 PLS 方法和质量相关的故障概率指标, 并将其应用于具有多模态特性的带钢热连轧生产过程的质量预测及故障监测中, 为多模态生产过程的过程监控提供了一种新方法.

### 3.4 面向复杂工业过程的间歇特性

与连续生产过程相比, 间歇过程具有过程机理复杂、规模庞大、工况多变、运行环境恶劣、操作条件漂移、边界条件模糊等特性, 使得间歇过程的质量相关的故障检测与诊断问题显得更加复杂. 针对该问题, Nomikos 等和 Koori 等的研究小组<sup>[99-100]</sup> 率先在间歇过程的监测及故障诊断中引入 PLS 方法, 提出了多向 PLS 方法, 其基本思想是将三维历史数据展开成二维数据, 再用传统的 PLS 方法对间歇生产过程进行监控. 基于此, Chen 等<sup>[101]</sup> 提出了间歇动态 PLS (Batch dynamic partial least squares, BDPLS) 方法, 并将其应用于间歇过程的在线监测中; Ündey 等<sup>[102]</sup> 提出了间歇及半间歇过程的性能监测及故障诊断框架; Facco 等<sup>[103]</sup> 提出了移动平均 PLS 软测量方法, 并将其应用于间歇过程的质量评价中; Wang<sup>[104]</sup> 提出了基于 PLS 的鲁棒数据驱动模型, 并将其应用于间歇过程的产品质量预测中; Stubbs 等<sup>[105]</sup> 提出了多向间隔 PLS 方法, 并将其应

用于间歇过程的性能监测中; Peng 等<sup>[23]</sup> 提出了一种新的 PCR 方法, 并将其应用于具有多规格及多批次间歇特性的带钢热轧生产过程的质量相关的故障检测与诊断中; 该课题组<sup>[106]</sup> 还针对拥有多模态操作环境的间歇过程, 提出了质量相关的故障检测与诊断框架, 为间歇过程的过程监控提供了一套新技术和解决方案。

同时, 基于时段的间歇过程统计建模方法得到了 Kesavan 等<sup>[107]</sup>、Ündey 等<sup>[108]</sup>、Zhao 等<sup>[109-111]</sup>、Lu 等<sup>[112]</sup> 研究人员的重视。该方法将多时段间歇过程划分为若干个子时段, 建立了基于子时段的统计分析模型并用于过程监测, 克服了传统多向统计分析方法在多时段间歇过程应用中的难点, 提高了在线故障检测的精度和灵敏度, 促进了对复杂工业过程的了解<sup>[111]</sup>。然而, 该方法在应用中控制决策点的选取依然取决于对相关具体过程机理的深入了解和认识。基于此, Russell 等<sup>[113]</sup> 提出了更为一般的数据驱动方法, 该方法可以在任一过程时刻通过递归方式对产品质量进行在线监控; Pan 等<sup>[114]</sup> 将该方法在甲基丙烯酸甲酯聚合过程中成功加以应用, 并获得了较好的质量监控效果; Kaistha 等<sup>[115]</sup> 提出了一种基于处方的质量改进策略, 并将其应用于尼龙-66 过程, 减少了最终产品质量的波动。

此外, 复杂间歇过程生产线上经常生产不同规格的产品, 传统的多元统计方法往往难以在新产品生产的初期进行正常地监测, 其原因在于只有当生产过程数据存储到一定数量时, 才能建立新产品的监测模型, 从而导致了大量的原材料消耗、不合格产品或事故的发生。因此, 针对复杂间歇过程, 能够提出一种基于产品需求改变驱动的监测模型移植技术具有重要的工程意义。

复杂工业过程除了具有上述特性外, 强耦合性、多批次、非高斯、变频等也是其重要特性。从已获得的研究成果来看, 当前质量相关的故障检测与诊断技术主要面向的是复杂工业过程的动态及非线性特性, 而对于多模态及间歇特性的研究成果还很少, 更缺乏对复合特性的考虑, 回避了该研究领域的本质难点。因此, 有必要针对复杂工业过程的复合特性及复杂工况进行综合研究, 突破复杂工业过程质量相关的故障检测与诊断技术的关键问题具有重要的研究价值。

## 4 总结与展望

本文对复杂工业过程质量相关的故障检测与诊断技术的研究现状进行了较为全面的综述, 对相关的研究成果进行了分类和评析, 并通过带钢热轧过程案例对比分析了经典方法在质量相关的故障检

测与诊断上的不同性能。与传统的故障检测与诊断方法的研究状况相比, 质量相关的故障检测与诊断技术的研究还处于一个相对初步的探索阶段, 现有的方法大多是基于 PLS 及其扩展模型的方法, 且大多数方法是针对某一特定工况或应用对象下的系统, 缺乏较为系统性的研究和分析。因此, 有必要进一步深入分析实际工业过程的复杂工况, 研究新的质量相关的故障检测与诊断方法必将成为未来过程控制领域重要的研究方向。具体可以从以下几个方向开展研究工作:

1) 统计过程监测与过程知识相结合的质量相关监测模型建立问题。基于数据驱动的 MSPM 方法尽管在质量相关的故障检测与诊断技术中具有很强的通用性, 但复杂工业生产过程内部的机理和经验知识的缺乏可能会导致质量监控信息的不准确, 如果能将监控系统的模型、过程内部机理和经验知识相结合, 使得不同的方法间优势互补, 可以提高过程监测的性能, 保证产品的质量。

2) 复杂间歇过程中过渡过程的质量监控问题。针对复杂间歇过程中多时段特性及时段间的模糊过渡行为, 深入研究潜在的过渡过程的相关特性与产品质量间的关系很有必要, 能有效地降低故障误报率, 提高产品的合格率。

3) 质量相关故障的传播路径跟踪及故障定位问题。复杂工业过程由成千上万个控制回路构成, 由于物料、能量及信息间的传递和反馈控制作用的存在, 使得设备本身或外部扰动等引起的故障很容易在回路间传播, 对生产过程的稳定运行和产品的质量造成严重影响。因此, 如何跟踪质量相关故障在回路间的传播路径, 从而定位故障源并排除故障具有重要意义。

4) 复杂动态工业过程的多故障诊断问题。当复杂动态工业过程同时发生多个故障时, 故障之间通常会表现出传播特性, 即异常状态不仅可以使所在设备或子系统发生故障, 而且还可能导致其他相关设备或子系统发生故障; 此外, 故障与原因之间的非单一映射关系使得复杂动态工业过程的多故障诊断成为一个综合而又复杂的问题。因此, 提出解决多故障诊断问题的整体方案, 突破复杂动态工业过程多故障诊断领域的关键问题, 形成一套多故障诊断的综合方法, 不仅具有重要的学术价值, 也是大量复杂动态工业过程生产和运行的迫切需求。

## References

- 1 Qin S J. Survey on data-driven industrial process monitoring and diagnosis. *Annual Reviews in Control*, 2012, **36**(2): 220-234
- 2 Gao Z W, Cecati C, Ding S X. A survey of fault diagnosis and fault-tolerant techniques — Part II: fault diag-

- nosis with knowledge-based and hybrid/active approaches. *IEEE Transactions on Industrial Electronics*, 2015, **62**(6): 3768–3774
- 3 Yin S, Li X W, Gao H J, Kaynak O. Data-based techniques focused on modern industry: an overview. *IEEE Transactions on Industrial Electronics*, 2015, **62**(1): 657–667
- 4 Kano M, Nakagawa Y. Data-based process monitoring, process control, and quality improvement: recent developments and applications in steel industry. *Computers & Chemical Engineering*, 2008, **32**(1–2): 12–24
- 5 Ge Z Q, Song Z H, Gao F R. Review of recent research on data-based process monitoring. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2013, **52**(10): 3543–3562
- 6 Zhou Dong-Hua, Hu Yan-Yan. Fault diagnosis techniques for dynamic systems. *Acta Automatica Sinica*, 2009, **35**(6): 748–758  
(周东华, 胡艳艳. 动态系统的故障诊断技术. *自动化学报*, 2009, **35**(6): 748–758)
- 7 Qin S J, Zheng Y Y. Quality-relevant and process-relevant fault monitoring with concurrent projection to latent structures. *AIChE Journal*, 2013, **59**(2): 496–504
- 8 Li B B, Morris A J, Martin E B. Generalized partial least squares regression based on the penalized minimum norm projection. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2004, **72**(1): 21–26
- 9 Ergon R. Reduced PCR/PLSR models by subspace projections. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2006, **81**(1): 68–73
- 10 Ding S X, Yin S, Peng K X, Hao H Y, Shen B. A novel scheme for key performance indicator prediction and diagnosis with application to an industrial hot strip mill. *IEEE Transactions on Industrial Informatics*, 2013, **9**(4): 2239–2247
- 11 Yin S, Ding S X, Haghani A, Hao H Y, Zhang P. A comparison study of basic data-driven fault diagnosis and process monitoring methods on the benchmark Tennessee Eastman process. *Journal of Process Control*, 2012, **22**(9): 1567–1581
- 12 MacGregor J F, Jaeckle C, Kiparissides C, Koutoudi M. Process monitoring and diagnosis by multiblock PLS methods. *AIChE Journal*, 1994, **40**(5): 826–838
- 13 Wold S. Exponentially weighted moving principal components analysis and projections to latent structures. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 1994, **23**(1): 149–161
- 14 Li G, Qin S J, Zhou D H. Geometric properties of partial least squares for process monitoring. *Automatica*, 2010, **46**(1): 204–210
- 15 Negiz A, Çlınar A. Statistical monitoring of multivariable dynamic processes with state-space models. *AIChE Journal*, 1997, **43**(8): 2002–2020
- 16 Russell E L, Chiang L H, Braatz R D. Fault detection in industrial processes using canonical variate analysis and dynamic principal component analysis. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2000, **51**(1): 81–93
- 17 Juricek B C, Seborg D E, Larimore W E. Fault detection using canonical variate analysis. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2004, **43**(2): 458–474
- 18 Stubbs S, Zhang J, Morris J. Fault detection in dynamic processes using a simplified monitoring-specific CVA state space modelling approach. *Computers & Chemical Engineering*, 2012, **41**: 77–87
- 19 Chen Z W, Ding S X, Zhang K, Li Z B, Hu Z K. Canonical correlation analysis-based fault detection methods with application to alumina evaporation process. *Control Engineering Practice*, 2016, **46**: 51–58
- 20 Barker M, Rayens W. Partial least squares for discrimination. *Journal of Chemometrics*, 2003, **17**(3): 166–173
- 21 De Jong S. PLS fits closer than PCR. *Journal of Chemometrics*, 1993, **7**(6): 551–557
- 22 Zhang K, Hao H Y, Chen Z W, Ding S X, Peng K X. A comparison and evaluation of key performance indicator-based multivariate statistics process monitoring approaches. *Journal of Process Control*, 2015, **33**: 112–126
- 23 Peng K X, Zhang K, Dong J, You B. Quality-relevant fault detection and diagnosis for hot strip mill process with multi-specification and multi-batch measurements. *Journal of the Franklin Institute*, 2015, **352**(3): 987–1006
- 24 Pudil P, Novovičová J, Kittler J. Floating search methods in feature selection. *Pattern Recognition Letters*, 1994, **15**(11): 1119–1125
- 25 Abrahamsson C, Johansson J, Sparén A, Lindgren F. Comparison of different variable selection methods conducted on NIR transmission measurements on intact tablets. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2003, **69**(1–2): 3–12
- 26 Wold S, Antti H, Lindgren F, Öhman J. Orthogonal signal correction of near-infrared spectra. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 1998, **44**(1–2): 175–185
- 27 Fearn T. On orthogonal signal correction. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2000, **50**(1): 47–52
- 28 Choi S W, Lee I B. Multiblock PLS-based localized process diagnosis. *Journal of Process Control*, 2005, **15**(3): 295–306
- 29 Zhou D H, Li G, Qin S J. Total projection to latent structures for process monitoring. *AIChE Journal*, 2010, **56**(1): 168–178
- 30 Nomikos P, MacGregor J F. Multivariate SPC charts for monitoring batch processes. *Technometrics*, 1995, **37**(1): 41–59
- 31 Li G, Qin S J, Zhou D H. Output relevant fault reconstruction and fault subspace extraction in total projection to latent structures models. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2010, **49**(19): 9175–9183
- 32 Zhao C H, Sun Y X. The multi-space generalization of total projection to latent structures (MsT-PLS) and its application to online process monitoring. In: Proceedings of the 10th IEEE International Conference on Control and Automation. Hangzhou, China: IEEE, 2013. 1441–1446
- 33 Yin S, Wei Z L, Gao H J, Peng K X. Data-driven quality related prediction and monitoring. In: Proceedings of the 38th Annual Conference on IEEE Industrial Electronics Society. Montreal, Canada: IEEE, 2012. 3874–3879
- 34 Peng K X, Zhang K, You B, Dong J. Quality-relevant fault monitoring based on efficient projection to latent structures with application to hot strip mill process. *IET Control Theory & Applications*, 2015, **9**(7): 1135–1145
- 35 Raich A, Çınar A. Statistical process monitoring and disturbance diagnosis in multivariable continuous processes. *AIChE Journal*, 1996, **42**(4): 995–1009

- 36 Yoon S, MacGregor J F. Fault diagnosis with multivariate statistical models — Part I: using steady state fault signatures. *Journal of Process Control*, 2001, **11**(4): 387–400
- 37 Kano M, Hasebe S, Hashimoto I, Ohno H. Statistical process monitoring based on dissimilarity of process data. *AIChE Journal*, 2002, **48**(6): 1231–1240
- 38 Kano M, Nagao K, Hasebe S, Hashimoto I, Ohno H, Strauss R, Bakshi B R. Comparison of multivariate statistical process monitoring methods with applications to the Eastman challenge problem. *Computers & Chemical Engineering*, 2002, **26**(2): 161–174
- 39 Qin S J, Li W H. Detection, identification, and reconstruction of faulty sensors with maximized sensitivity. *AIChE Journal*, 1999, **45**(9): 1963–1976
- 40 Qin S J, Li W H. Detection and identification of faulty sensors in dynamic processes. *AIChE Journal*, 2001, **47**(7): 1581–1593
- 41 Gertler J, Li W H, Huang Y B, McAvoy T. Isolation enhanced principal component analysis. *AIChE Journal*, 1999, **45**(2): 323–334
- 42 Zhou Z, Wen C L, Yang C J. Fault isolation based on  $k$ -nearest neighbor rule for industrial processes. *IEEE Transactions on Industrial Electronics*, 2016, **63**(4): 2578–2586
- 43 Li G, Qin S J, Yuan T. Data-driven root cause diagnosis of faults in process industries. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2016, **159**: 1–11
- 44 He B, Chen T, Yang X H. Root cause analysis in multivariate statistical process monitoring: integrating reconstruction-based multivariate contribution analysis with fuzzy-signed directed graphs. *Computers & Chemical Engineering*, 2014, **64**: 167–177
- 45 Liu Q, Chai T Y, Qin S J. Fault diagnosis of continuous annealing processes using a reconstruction-based method. *Control Engineering Practice*, 2012, **20**(5): 511–518
- 46 Peng K X, Zhang K, Li G, Zhou D H. Contribution rate plot for nonlinear quality-related fault diagnosis with application to the hot strip mill process. *Control Engineering Practice*, 2013, **21**(4): 360–369
- 47 Peng K X, Zhang K, Li G. Online contribution rate based fault diagnosis for nonlinear industrial processes. *Acta Automatica Sinica*, 2014, **40**(3): 423–430
- 48 MacGregor J F, Kourti T. Statistical process control of multivariate processes. *Control Engineering Practice*, 1995, **3**(3): 403–414
- 49 Miller P, Swanson R E, Heckler C E. Contribution plots: a missing link in multivariate quality control. *Applied Mathematics and Computer Science*, 1998, **8**(4): 775–792
- 50 Louwerse D J, Tates A A, Smilde A K, Koot G L M, Berndt H. PLS discriminant analysis with contribution plots to determine differences between parallel batch reactors in the process industry. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 1999, **46**(2): 197–206
- 51 Li Gang, Qin Si-Zhao, Ji Yin-Dong, Zhou Dong-Hua. Total PLS based contribution plots for fault diagnosis. *Acta Automatica Sinica*, 2009, **35**(6): 759–765  
(李钢, 秦泗钊, 吉吟东, 周东华. 基于 T-PLS 贡献图方法的故障诊断技术. *自动化学报*, 2009, **35**(6): 759–765)
- 52 Westerhuis J A, Gurden S P, Smilde A K. Generalized contribution plots in multivariate statistical process monitoring. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2000, **51**(1): 95–114
- 53 Conlin A K, Martin E B, Morris A J. Confidence limits for contribution plots. *Journal of Chemometrics*, 2000, **14**(5–6): 725–736
- 54 Alcalá C F, Qin S J. Reconstruction-based contribution for process monitoring. *Automatica*, 2009, **45**(7): 1593–1600
- 55 Alcalá C F, Qin S J. Analysis and generalization of fault diagnosis methods for process monitoring. *Journal of Process Control*, 2011, **21**(3): 322–330
- 56 Dunia R, Qin S J. Subspace approach to multidimensional fault identification and reconstruction. *AIChE Journal*, 1998, **44**(8): 1813–1831
- 57 Yue H H, Qin S J. Reconstruction-based fault identification using a combined index. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2001, **40**(20): 4403–4414
- 58 Li G, Liu B S, Qin S J, Zhou D H. Quality relevant data-driven modeling and monitoring of multivariate dynamic processes: the dynamic T-PLS approach. *IEEE Transactions on Neural Networks*, 2011, **22**(12): 2262–2271
- 59 Li G, Qin S J, Chai T Y. Multi-directional reconstruction based contributions for root-cause diagnosis of dynamic processes. In: Proceedings of the 2014 American Control Conference. Portland, OR, USA: IEEE, 2014. 3500–3505
- 60 Kaspar M H, Ray W H. Dynamic PLS modelling for process control. *Chemical Engineering Science*, 1993, **48**(20): 3447–3461
- 61 Kaspar M H, Ray W H. Chemometric methods for process monitoring and high-performance controller design. *AIChE Journal*, 1992, **38**(10): 1593–1608
- 62 Lakshminarayanan S, Shah S L, Nandakumar K. Modeling and control of multivariable processes: dynamic PLS approach. *AIChE Journal*, 1997, **43**(9): 2307–2322
- 63 Ricker N L. The use of biased least-squares estimators for parameters in discrete-time pulse-response models. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 1988, **27**(2): 343–350
- 64 Qin S J, McAvoy T J. A data-based process modeling approach and its applications. In: Proceedings of the 3rd IFAC Symposium on Dynamics and Control of Chemical Reactors, Distillation Columns and Batch Processes. Maryland, USA: IFAC, 1992. 93–98
- 65 Chen J H, Liu K C. On-line batch process monitoring using dynamic PCA and dynamic PLS models. *Chemical Engineering Science*, 2002, **57**(1): 63–75
- 66 Lee G, Song S O, Yoon E S. Multiple-fault diagnosis based on system decomposition and dynamic PLS. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2003, **42**(24): 6145–6154
- 67 Fletcher N M, Morris A J, Montague G, Martin E B. Local dynamic partial least squares approaches for the modelling of batch processes. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 2008, **86**(5): 960–970
- 68 Liu Q, Qin S J, Chai T Y. Quality-relevant monitoring and diagnosis with dynamic concurrent projection to latent structures. In: Proceedings of the 19th IFAC World Congress. Cape Town, South Africa: IFAC, 2014. 2740–2745

- 69 Jiao J F, Yu H, Wang G. A quality-related fault detection approach based on dynamic least squares for process monitoring. *IEEE Transactions on Industrial Electronics*, 2016, **63**(4): 2625–2632
- 70 Helland K, Berntsen H E, Borgen O S, Martens H. Recursive algorithm for partial least squares regression. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 1992, **14**(1–3): 129–137
- 71 Qin S J. Recursive PLS algorithms for adaptive data modeling. *Computers & Chemical Engineering*, 1998, **22**(4–5): 503–514
- 72 Dong J, Zhang K, Huang Y, Li G, Peng K X. Adaptive total PLS based quality-relevant process monitoring with application to the Tennessee Eastman process. *Neurocomputing*, 2015, **154**: 77–85
- 73 Wang Y, Seborg D E, Larimore W E. Process monitoring based on canonical variate analysis. In: Proceedings of the 1997 European Control Conference. Brussels: IEEE, 1997. 3089–3094
- 74 Jiang B B, Huang D X, Zhu X X, Yang F, Braatz R D. Canonical variate analysis-based contributions for fault identification. *Journal of Process Control*, 2015, **26**: 17–25
- 75 Cao Yu-Ping, Huang Lin-Zhe, Tian Xue-Min. A process monitoring method using dynamic input-output canonical variate analysis. *Acta Automatica Sinica*, 2015, **41**(12): 2072–2080  
(曹玉苹, 黄琳哲, 田学民. 一种基于 DIOCVA 的过程监控方法. 自动化学报, 2015, **41**(12): 2072–2080)
- 76 Wold S, Kettaneh-Wold N, Skagerberg B. Nonlinear PLS modeling. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 1989, **7**(1–2): 53–65
- 77 Qin S J, McAvoy T J. Nonlinear PLS modeling using neural networks. *Computers & Chemical Engineering*, 1992, **16**(4): 379–391
- 78 Malthouse E C, Tamhane A C, Mah R S H. Nonlinear partial least squares. *Computers & Chemical Engineering*, 1997, **21**(8): 875–890
- 79 Lindgren F, Geladi P, Wold S. The kernel algorithm for PLS. *Journal of Chemometrics*, 1993, **7**(1): 45–59
- 80 Zhang Y W, Zhou H, Qin S J, Chai T Y. Decentralized fault diagnosis of large-scale processes using multiblock kernel partial least squares. *IEEE Transactions on Industrial Informatics*, 2010, **6**(1): 3–10
- 81 Peng K X, Zhang K, Li G. Quality-related process monitoring based on total kernel PLS model and its industrial application. *Mathematical Problems in Engineering*, 2013, **2013**: Article ID 707953
- 82 Zhao X Q, Xue Y F. Output-relevant fault detection and identification of chemical process based on hybrid kernel T-PLS. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 2014, **92**(10): 1822–1828
- 83 Mori J, Yu J. Quality relevant nonlinear batch process performance monitoring using a kernel based multiway non-Gaussian latent subspace projection approach. *Journal of Process Control*, 2014, **24**(1): 57–71
- 84 Zhang Y W, Sun R R, Fan Y P. Fault diagnosis of nonlinear process based on KCPLS reconstruction. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2015, **140**: 49–60
- 85 Zhang Y W, Du W Y, Fan Y P, Zhang L J. Process Fault detection using directional kernel partial least squares. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2015, **54**(9): 2509–2518
- 86 Luo L J, Bao S Y, Mao J F, Tang D. Quality prediction and quality-relevant monitoring with multilinear PLS for batch processes. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2016, **150**: 9–22
- 87 Liu Y, Chang Y Q, Wang F L. Nonlinear dynamic quality-related process monitoring based on dynamic total kernel PLS. In: Proceeding of the 11th World Congress on Intelligent Control and Automation. Shenyang, China: IEEE, 2014. 1360–1365
- 88 Jia Q L, Zhang Y W. Quality-related fault detection approach based on dynamic kernel partial least squares. *Chemical Engineering Research and Design*, 2016, **106**: 242–252
- 89 Deng Xiao-Gang, Tian Xue-Min. Nonlinear process fault diagnosis based on kernel canonical variate analysis. *Control and Decision*, 2006, **21**(10): 1109–1113  
(邓晓刚, 田学民. 基于核规范变量分析的非线性故障诊断方法. 控制与决策, 2006, **21**(10): 1109–1113)
- 90 Tan S, Wang F L, Chang Y Q, Chen W D, Xu J Z. Fault detection and diagnosis of nonlinear processes based on kernel ICA-KCCA. In: Proceeding of the 2010 Chinese Control and Decision Conference. Xuzhou, China: IEEE, 2010. 3869–3874
- 91 Samuel R T, Cao Y. Kernel canonical variate analysis for nonlinear dynamic process monitoring. *IFAC-PapersOnLine*, 2015, **48**(8): 605–610
- 92 Hwang D H, Han C H. Real-time monitoring for a process with multiple operating modes. *Control Engineering Practice*, 1999, **7**(7): 891–902
- 93 Lane S, Martin E B, Kooijmans R, Morris A J. Performance monitoring of a multi-product semi-batch process. *Journal of Process Control*, 2001, **11**(1): 1–11
- 94 Zhao S J, Zhang J, Xu Y M. Performance monitoring of processes with multiple operating modes through multiple PLS models. *Journal of Process Control*, 2006, **16**(7): 763–772
- 95 Yue H H, Qin S J, Wiseman J, Toprac A. Plasma etching endpoint detection using multiple wavelengths for small open-area wafers. *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films*, 2001, **19**(1): 66–75
- 96 Yu J, Qin S J. Multiway Gaussian mixture model based multiphase batch process monitoring. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2009, **48**(18): 8585–8594
- 97 Yoo C K, Villez K, Lee I B, Rosén C, Vanrolleghem P A. Multi-model statistical process monitoring and diagnosis of a sequencing batch reactor. *Biotechnology and Bioengineering*, 2007, **96**(4): 687–701
- 98 Peng K X, Zhang K, You B, Dong J. Quality-related prediction and monitoring of multi-mode processes using multiple PLS with application to an industrial hot strip mill. *Neurocomputing*, 2015, **168**: 1094–1103
- 99 Nomikos P, MacGregor J F. Multi-way partial least squares in monitoring batch processes. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 1995, **30**(1): 97–108
- 100 Kouti T, Nomikos P, MacGregor J F. Analysis, monitoring and fault diagnosis of batch processes using multiblock and multiway PLS. *Journal of Process Control*, 1995, **5**(4): 277–284



- 101 Chen J H, Cheng Y C. Applying partial least squares based decomposition structure to multiloop adaptive proportional-integral-derivative controllers in nonlinear processes. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2004, **43**(18): 5888–5898
- 102 Ündey C, Ertunç S, Çinar A. Online batch/fed-batch process performance monitoring, quality prediction, and variable-contribution analysis for diagnosis. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2003, **42**(20): 4645–4658
- 103 Facco P, Doplicher F, Bezzo F, Barolo M. Moving average PLS soft sensor for online product quality estimation in an industrial batch polymerization process. *Journal of Process Control*, 2009, **19**(3): 520–529
- 104 Wang D. Robust data-driven modeling approach for real-time final product quality prediction in batch process operation. *IEEE Transactions on Industrial Informatics*, 2011, **7**(2): 371–377
- 105 Stubbs S, Zhang J, Morris J. Multiway interval partial least squares for batch process performance monitoring. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2013, **52**(35): 12399–12407
- 106 Peng K X, Zhang K, You B, Dong J, Wang Z D. A quality-based nonlinear fault diagnosis framework focusing on industrial multimode batch processes. *IEEE Transactions on Industrial Electronics*, 2016, **63**(4): 2615–2624
- 107 Kesavan P, Lee J H, Saucedo V, Krishnagopalan G A. Partial least squares (PLS) based monitoring and control of batch digesters. *Journal of Process Control*, 2000, **10**(2–3): 229–236
- 108 Ündey C, Çinar A. Statistical monitoring of multistage, multiphase batch processes. *IEEE Control Systems Magazine*, 2002, **22**(5): 40–52
- 109 Zhao C H. Concurrent phase partition and between-mode statistical analysis for multimode and multiphase batch process monitoring. *AIChE Journal*, 2014, **60**(2): 559–573
- 110 Zhao C H, Wang F L, Lu N Y, Jia M X. Stage-based soft-transition multiple PCA modeling and on-line monitoring strategy for batch processes. *Journal of Process Control*, 2007, **17**(9): 728–741
- 111 Zhao Chun-Hui, Wang Fu-Li, Yao Yuan, Gao Fu-Rong. Phase-based statistical modeling, online monitoring and quality prediction for batch processes. *Acta Automatica Sinica*, 2010, **36**(3): 366–374  
(赵春晖, 王福利, 姚远, 高福荣. 基于时段的间歇过程统计建模、在线监测及质量预报. *自动化学报*, 2010, **36**(3): 366–374)
- 112 Lu N Y, Gao F R. Stage-based online quality control for batch processes. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2006, **45**(7): 2272–2280
- 113 Russell S A, Kesavan P, Lee J H, Ogunnaike B A. Recursive data-based prediction and control of batch product quality. *AIChE Journal*, 1998, **44**(11): 2442–2458
- 114 Pan Y D, Lee J H. Recursive data-based prediction and control of product quality for a PMMA batch process. *Chemical Engineering Science*, 2003, **58**(14): 3215–3221

- 115 Kaistha N, Johnson M S, Moore C F, Leitnaker M G. On-line batch recipe adjustments for product quality control using empirical models: application to a nylon-66 process. *ISA Transactions*, 2003, **42**(2): 305–315



**彭开香** 北京科技大学自动化学院教授. 2007 年获得北京科技大学控制科学与工程博士学位. 主要研究方向为复杂工业系统故障诊断与容错控制.

E-mail: kaixiang@ustb.edu.cn

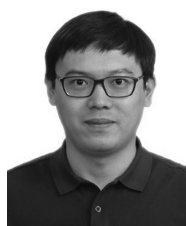
(**PENG Kai-Xiang** Professor at the School of Automation and Electrical Engineering, University of Science and Technology Beijing. He received his Ph.D. degree in control science and engineering from University of Science and Technology Beijing in 2007. His research interest covers fault diagnosis and fault-tolerant control for complex industrial system.)



**马亮** 北京科技大学自动化学院博士研究生. 2012 年获得华北理工大学控制理论与控制工程硕士学位. 主要研究方向为数据驱动的故障诊断与容错控制. 本文通信作者.

E-mail: mlypplover@sina.com

(**MA Liang** Ph.D. candidate at the School of Automation and Electrical Engineering, University of Science and Technology Beijing. He received his master degree in control theory and control engineering from North China University of Science and Technology in 2012. His research interest covers data-based fault diagnosis and fault-tolerant control. Corresponding author of this paper.)



**张凯** 北京科技大学自动化学院博士后, 2016 年获得德国杜伊斯堡-艾森大学博士学位. 主要研究方向为数据驱动故障诊断, 统计过程监控, 诊断方法性能评估.

E-mail: kai.zhang@uni-due.de

(**ZHANG Kai** Postdoctor at the School of Automation and Electrical Engineering, University of Science and Technology Beijing. He received his Ph.D. degree from the Institute of Automatic Control and Complex Systems, University of Duisburg-Essen, Germany in 2016. His research interest covers data-based fault diagnosis, statistical process monitoring, and performance assessment for fault diagnosis methods.)