

密级: (_____)

中国科学院研究生院

硕士学位论文

基于鲁棒 PCA 的化工过程故障诊断研究

作者姓名: _____ 于东升 _____

指导教师: _____ 叶齐祥 副教授 中国科学院研究生院 _____

学位类别: _____ 工程硕士 _____

学科专业: _____ 物流工程 _____

培养单位: _____ 中国科学院研究生院工程教育学院 _____

2012 年 4 月

**Research on Fault Diagnosis Methods by Robust Principle
Component Analysis For Chemical Industry Process Based on
Tennessee Eastman Process**

By

YU Dongsheng

A Dissertation Submitted to

Graduate University of Chinese Academy of Sciences

In partial fulfillment of the requirement

For the degree of

Master of Logistics Engineering

College of Engineering

4, 2012

**中国科学院研究生院直属院系
研究生学位论文原创性声明**

本人郑重声明：所呈交的学位论文是本人在导师的指导下独立进行研究工作所取得的成果。尽我所知，除文中已经注明引用的内容外，本论文不包含任何其他个人或集体已经发表或撰写过的研究成果。对论文所涉及的研究工作做出贡献的其他个人和集体，均已在文中以明确方式标明或致谢。

作者签名：

日 期：

**中国科学院研究生院直属院系
学位论文授权使用声明**

本人完全了解并同意遵守中国科学院有关保存和使用学位论文的规定，即中国科学院有权保留送交学位论文的副本，允许该论文被查阅，可以公布该论文的全部或部分内
容，可以采用影印、缩印或其他复制手段保存、汇编本学位论文。

涉密的学位论文在解密后适用本声明。

作者签名：

日 期：

导师签名：

日 期：

摘 要

化工生产在工业生产中占有举足轻重的地位，其产品涉及到人们生活的各个方面。随着科学技术，尤其是计算机技术的飞速发展，化工过程生产装置的规模越来越大，工艺越来越复杂，投资越来越大，自动化水平越来越高，因此化工过程的安全性和可靠性就显得特别重要。采用故障诊断技术来提高化工过程的安全性和可靠性是一种有效而重要的方法，对化工过程进行故障诊断研究具有极其重要的实际价值。

本文回顾了多种故障诊断方法、过程模型和各种多变量统计方法，介绍了利用多变量平方预测误差法和 Hotelling 统计法进行故障检测的原理。论文将对主元分析法 (Principle Component Analysis, PCA) 进行故障诊断时存在的主要优缺点进行了研究和改进。针对 PCA/LDA/FDA/线性 SVM 等线性分析方法无法应用于非线性过程的缺点，提出了基于鲁棒主元分析法 (Robust Principle Component Analysis, RPCA) 进行故障诊断。RPCA 的求解是一个非线性的优化过程，通过矩阵秩的优化来计算和表示带有噪声信号的相关性。计算中需要对于样本数据所组成的矩阵进行低秩化 (Low-rank)，进而计算出每一个样本对于低秩化矩阵内样本的误差并用于故障诊断。

论文针对 PCA 方法和 RPCA 方法开展研究，在 (Tennessee Eastman Process, TEP) 化工过程软件仿真平台上进行了仿真试验。试验结果表明了 PCA 方法对于故障检测的有效性。同时也表明了，对于复杂化工过程故障非线性，及数据信号有噪声和随机干扰的情况下，应用 RPCA 方法进行故障分类的可行性。

关键字： 化学危险品；化工过程；故障诊断；主成分分析；鲁棒主成分分析；TEP

Abstract

Chemical production plays an important role in industry systems, and the relevant products spread over our daily life. With the evolvement of sciences, especially the computer techniques, chemical equipments are becoming more and more complex and at the same time the automatic control is becoming popular. These factors make it necessary to use faculty diagnose techniques to guarantee the robustness and reliability of chemical process.

In this thesis, we first review various kinds of fault diagnose approaches, process models and multi-variant statistical methods. We also introduce principles of the multi-variant square prediction method and Hotelling method for fault diagnosis. We discuss the advantages and disadvantages of Principle Component Analysis (PCA) for fault diagnosis. For the disadvantages of linear methods, such as PCA, LDA, FDA and linear SVM, we propose to use Robust Principle Component Analysis (RPCA) method for fault diagnosis. The solution of RPCA is a non-linear optimization process, using the optimization of matrix rank to calculate and representation the relevant of noise signals. In the solution, we need to calculate a low-rank matrix on sample matrix, then errors of each sample in the sample matrix and low-rank matrix can be calculated, which are use for fault diagnosis.

We propose to use PCA and RPCA methods for fault diagnosis. Simulations are carried out on TEP platform, which show that the PCA method is effective to fault detection. They also demonstrate that for the non-linear distribution, noise and interrupted data, RPCA is robust to fault diagnosis.

Key Words: Hazardous chemical substances; Chemical process; Principal component analysis; Robust principal component analysis; Fault diagnosis; Tennessee Eastman process

目 录

| | |
|-------------------------------|-----------|
| 摘 要 | I |
| ABSTRACT | II |
| 第一章 绪论 | 1 |
| 1.1 化学工业故障诊断的研究背景 | 1 |
| 1.2 危险化学品生产的特点 | 2 |
| 1.3 故障诊断方法概述 | 4 |
| 1.3.1 基于解析模型的方法 | 5 |
| 1.3.2 基于知识的方法 | 6 |
| 1.3.3 基于信号处理的方法 | 6 |
| 1.4 本文研究内容 | 7 |
| 1.5 本文组织结构 | 8 |
| 第二章 国内外研究现状及文献综述 | 9 |
| 2.1 故障诊断方法 | 9 |
| 2.1.1 多变量统计方法 | 9 |
| 2.1.2 基于知识和解析模型的方法 | 11 |
| 2.2 TEP 过程仿真 | 12 |
| 2.3 本章小结 | 12 |
| 第三章 TEP 化工仿真过程描述 | 14 |
| 3.1 TEP 过程流程图 | 14 |
| 3.2 TEP 过程变量描述 | 17 |
| 3.3 TEP 过程中故障描述 | 19 |
| 3.4 TEP 过程仿真 | 21 |
| 3.5 本章小结 | 22 |
| 第四章 基于 PCA 的故障检测 | 23 |
| 4.1 主元分析法 (PCA) | 23 |

| | |
|--------------------------------|-----------|
| 4.1.1 应用 PCA 的前提条件 | 23 |
| 4.1.2 主元分析的基本原理 | 23 |
| 4.2 基于 PCA 的故障检测 | 25 |
| 4.2.1 T-2 统计法 | 25 |
| 4.2.2 SPE 统计法 | 27 |
| 4.3 基于 PCA 的 TEP 过程故障检测 | 27 |
| 4.4 本章小结 | 30 |
| 第五章 基于 RPCA 的故障诊断 | 32 |
| 5.1 RPCA 基本原理 | 32 |
| 5.1.1 RPCA 模型的建立 | 32 |
| 5.1.2 模型求解 | 33 |
| 5.2 仿真实验 | 35 |
| 5.3 本章小结 | 38 |
| 第六章 总结与展望 | 39 |
| 6.1 结论 | 39 |
| 6.2 展望 | 39 |
| 参考文献 | 41 |
| 致 谢 | 46 |
| 附 录 | 47 |

图表目录

| | | |
|-------|---------------------------------------|----|
| 图 1.1 | 2001-2008 年中国化工企业较大及其以上级别事故数目统计 | 1 |
| 图 1.2 | 故障诊断方法分类图 | 5 |
| 图 1.3 | 本文研究框图 | 8 |
| 图 3.1 | TEP 过程工艺流程图 | 14 |
| 表 3.1 | TEP 过程各种成分的物理特性 (100 °C) | 15 |
| 表 3.2 | TEP 过程操作模式参数 | 16 |
| 表 3.3 | 过程操作约束 | 16 |
| 表 3.4 | 控制变量 | 17 |
| 表 3.5 | 连续测量变量 (3 分钟采样间隔) | 18 |
| 表 3.6 | 成分测量 | 19 |
| 表 3.7 | TEP 过程故障 | 20 |
| 表 3.8 | 下表是在标称状态下的设定点变动 | 21 |
| 图 3.2 | 反应器压力 | 21 |
| 图 3.4 | 产品分离器温度; 图 3.5 汽提塔温度 | 21 |
| 图 4.1 | 故障 1SPE 检测 | 28 |
| 图 4.2 | 故障 4SPE 检测 | 29 |
| 图 4.3 | 故障 $4T^2$ 检测 | 29 |
| 图 5.1 | 故障 1 和 2; 图 5.2 故障 1 和 4 | 35 |
| 图 5.7 | 故障 2 和故障 4; 图 5.8 故障 4 和故障 5 | 37 |

第一章 绪论

1.1 化学工业故障诊断的研究背景

重大危险化学品事故具有突发性、复杂性、激变性、群体性的特点，不仅能够导致泄漏、火灾、爆炸、中毒、窒息、灼伤等严重事故后果，还可引起多米诺式灾害链的发生，导致重大人员伤亡事故。因此，预防和控制重大工业事故已成为各国经济和技术发展的重要研究对象之一。随着化学工业的高速发展，我国的危险化学品生产安全形势日益严峻，爆炸、火灾、中毒等各类重大事故频繁发生，伤亡总数逐年上升。2001-2008年中国化工企业共发生较大及其以上级别事故119起，其中，死亡510人，重伤105人，轻伤377人。

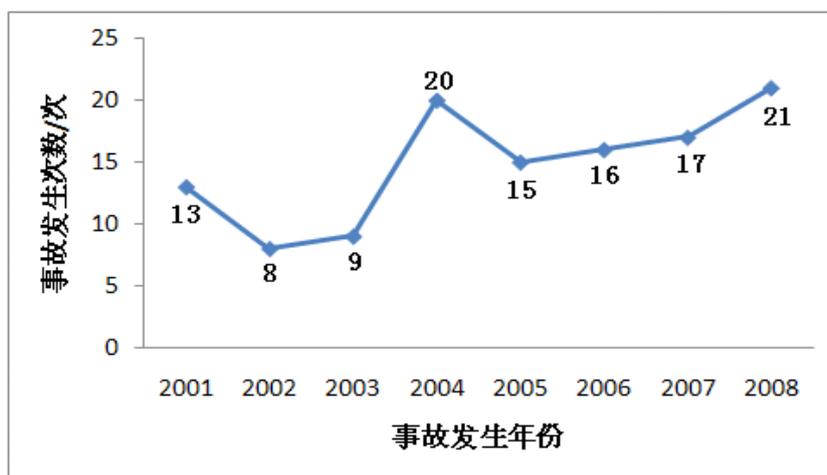


图 1.1 2001-2008 年中国化工企业较大及其以上级别事故数目统计

从事故次数和伤亡人数可知，随着年份的增长，重大危险化学品事故造成的危害越来越大。高金吉院士指出需要尽早采取超前预防、消患治本的措施，从而尽量避免事故的发生。

重大危险化学品事故的发生是多种因素综合作用的结果，而且各个因素之间存在着复杂的因果联系。从众多的因素中寻找事故发生的本质原因和分析事故发生的机理，分析化工系统事故成因，是危险化学品事故预测和应急管理亟待解决的关键科学问题。

化工几乎涉及到了我们社会的方方面面，化工事故一旦发生，如果不能及时救治，后果不堪想象。据美国“Oil&Gas Journal”杂志报道，一个炼油厂更新一套中型催化裂化（FCCU）装置能够实现日产值增加 5000 美元，而停产一天就会损

失 20 万美元，从新技术中得到的受益会因为事故而迅速损失，停车一天的损失超过了更新技术所带来的一个月的收益^[1]。1984 年 12 月位于印度博帕尔市的美国碳化物公司农药厂，发生毒气泄漏事件，造成 2000 多人死亡，20 多万人受害，成为世界工业史上最大的恶性事故。2002 年 10 月 27 日，内蒙古自治区乌海泰达制钠公司因氯气管道腐蚀造成氯气泄漏，发生特大中毒事故，致使 1 人死亡、1 人重度中毒、8 人中度中毒、32 人轻度中毒、369 人有刺激性反应^[2]。2010 年 1 月 7 日 17 时 30 分左右，中国石油天然气集团公司兰州石化公司 303 厂 316 烃类罐区一裂解碳四储罐阀门处突然发生泄漏，现场可燃气体浓度达到极限，在当班操作人员进行紧急处理时发生爆炸，随即起火，爆炸事故造成了 6 人遇难，1 人重伤，5 人轻伤。这些事故的发生给我们以沉痛的教训，时刻都在警示我们，必须采取更有效的措施来保证生产过程的安全性与稳定性，尽量减少此类事故的再次发生。因此，化工过程的故障诊断问题得到了越来越多的国内外专家、学者的高度重视，并得到了迅速的发展，取得了大量的理论和应用成果^[3-9]。

综上所述，针对化工过程进行故障诊断研究不仅具有重要的科学意义，而且能提高我们对于部分化工过程致因的分析能力，以加强化工过程的安全性和稳定性。

本论文受到国家重大基础研究计划“973”项目课题资助。课题信息：“事故致灾过程和事故致因理论”（课题编号：2011CB706901）。2011.01-2015.12，经费 420 万元，在研；项目研究重大危险化学品事故数据源及其设备完整性理论。其科学目标是获取有效性、完整性的事故数据源，为科学研究和事故应急提供平台基础。同时通过数据挖掘与修补技术，探索其与设备完整性的科学联系，为化工机械和监测设备提供研究开发的科学依据。

1.2 危险化学品生产的特点

20 世纪 90 年代，随着科学技术的发展，化工工业受到几个主要发展趋势的冲击，其中一个冲击是自动控制技术、计算机技术和通讯技术的广泛应用，导致化工工业生产过程和管理等方面的变革，促使过程控制技术向高层次发展。随着化工生产过程向大型化、集成化、复杂化发展，企业对生产过程的控制、调度、优化等方面提出了越来越高的要求，控制的目标已不再局限于对某一变量，或某

几个变量的平稳操作，而越来越多地加入了以经济效益为代表的其它控制要求。显然，传统的以单变量控制为基础的控制技术已无法满足这些需求，以多变量预测控制与优化控制为主要特征的先进控制(Advanced Process Control, APC)技术在一些发达国家得到广泛的应用和发展。美国、英国、法国、加拿大等国家相继成立了专门从事控制与优化软件开发的软件公司，纷纷推出了自己的 APC 软件包，通过在化工、石油、冶金、建材等企业的应用，取得了十分可观的经济效益。

20 世纪 70 年代初，我国陆续从日本、美国、法国等国家引进了一批大型现代化的石油化工装置。如 30 万吨级乙烯、合成氨、化纤等，使我国的化工生产水平和技术水平有了很大的提高。特别是使我国的化工原料基础由粮食和煤转为石油和天然气，使我国的化学工业结构、生产规模和技术水平都发生了根本性的变化。

目前，我国化工生产过程与发达国家相比水平较低，主要体现在产品质量不稳定，成本高，尤其在我国加入 WTO 之后的这些年里，化工行业面临的挑战更大。

现代化的化工生产过程规模越来越大，生产工艺日益复杂，自动化程度越来越高。通常，化工过程一般具有易燃、易爆、易中毒，高温、高压，有腐蚀等特点，因而，与其他工业部门相比化工工业有更大的危险性。化工过程由大量的状态变量来表述，当这些变量处于理想值附近时，认为过程处于正常操作状态，当一个或多个状态变量发生变化，且变化超出了规定的约束范围时，就会导致故障的发生。

总结起来，化工过程的特点主要有：

1) 化工生产使用的原料、半成品和成品种类繁多，绝大部分是易燃、易爆、有毒害、有腐蚀的危险化学品。这给生产中的这些原材料、燃料、中间产品和成品的贮存和运输都提出了特殊的要求。

2) 化工生产要求的工艺条件苛刻。有些化学反应在高温、高压下进行，有的要在低温、高真空度下进行。如由轻柴油裂解制乙烯、进而生产聚乙烯的生产过程中，轻柴油在裂解炉中的裂解温度为 800℃，裂解气要在深冷(-96℃)条件下进行分离，纯度为 99.99%的乙烯气体在 294kPa 压力下聚合，制取聚乙烯树脂。

3) 生产规模大型化。近 20 多年来，国际上化工生产采用大型生产装置是一

个明显的趋势。以化肥为例，20 世纪 50 年代合成氨的最大规模为 6 万吨/年，60 年代初为 12 万吨/年，60 年代末，发展到 30 万吨/年，70 年代发展为 54 万吨/年，90 年代以后发展到 60 万吨以上，21 世纪达到了 90 万吨/年。乙烯装置的生产能力也从 50 年代的 10 万吨/年，发展到 70 年代的 60 万吨/年。裂解炉单台炉的生产能力从 4.5 万吨/年达到 10 万吨/年。采用大型装置可以明显降低单位产品的建设投资和生产成本，提高劳动生产能力，降低能耗。因此，世界各国都积极发展大型化工生产装置。但大型化会带来重大的潜在危险性。

4) 生产方式的高度自动化与连续化。化工生产已经从过去落后的手工操作、间断生产转变为高度自动化、连续化生产;生产设备由敞开式变为密闭式;生产装置从室内走向露天;生产操作由分散控制变为集中控制，同时，也由人工手动操作变为仪表自动操作，进而又发展为计算机控制。连续化与自动生产是大型化的必然结果，但控制设备也有一定的故障率。据美国石油保险协会统计，控制系统发生故障而造成的事故占炼油厂火灾爆炸事故的 6.1%。

5) 过程趋于复杂化，系统内部和系统之间高度关联、祸合，一旦发生故障，极易引起连锁反应。过程复杂多变，主要体现在：数据量大、过程的不确定性、含有噪声和随机干扰、数据采集传感器类型多、数据冗余严重、过程变量间的相关性复杂、过程机理复杂、突变性、随机性、变量间的关联耦合严重等等。

正因为化工生产具有以上特点，安全生产在化工行业就更为重要。一些发达国家的统计资料表明，在工业企业发生的爆炸事故中，化工企业占了三分之一。

1.3 故障诊断方法概述

故障的定义最早由 Himmelblau 于 1978 年提出，是指系统至少有一个可观测或可计算的重要变量或特性偏离了正常范围。故障诊断包括故障检测、故障分离和故障辨识三个方面，其中故障检测是指判断系统是否有故障发生，故障分离是指确定故障发生的部位及种类，故障辨识则是指确定故障参数的大小及故障发生时间。

故障诊断方法可以分为三大类：基于解析模型的方法，基于知识的方法和基于信号处理的方法。后两类方法，包括故障树、专家系统、神经网络、SVM 及主元分析等，近几年发展较快。其方法具体如下：

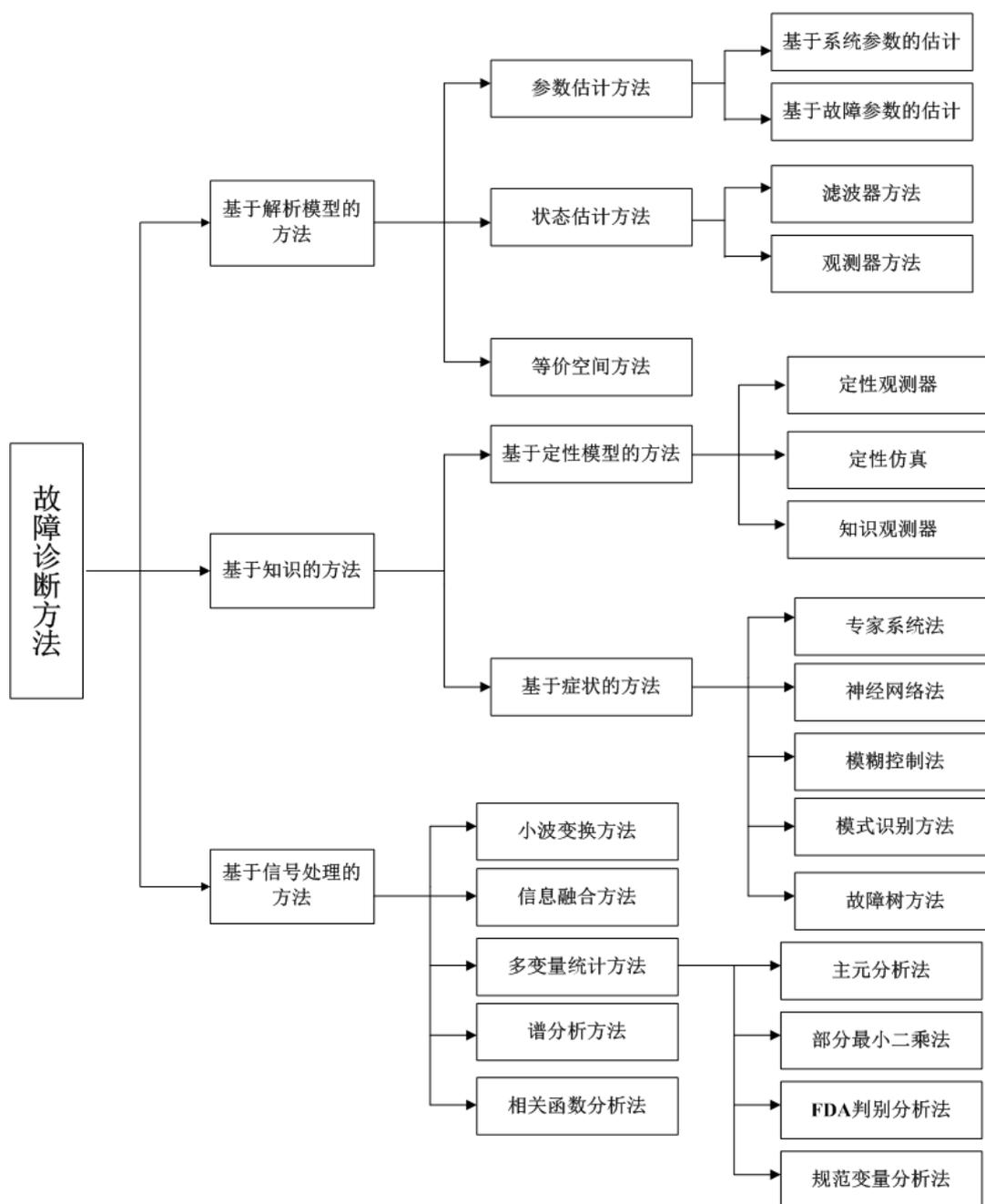


图 1.2 故障诊断方法分类图

1.3.1 基于解析模型的方法

基于解析模型的方法是最早发展起来的，此方法需要建立被诊断对象的比较准确的数学模型。进一步，它又可以分为参数估计方法、状态估计方法和等价空间方法。把残差作为特征数据是基于解析模型方法的主流，残差是对象观测值和数学模型之间一致性比较的结果。一般，如果故障发生了，残差会较大，如果是噪声、干扰、模型误差等，残差值会较小，所以可以定义适当的阈值来检测故障是否发生了。因此，基于解析模型的方法就是将系统的数学模型产生的信号与系

统实际测得的信号进行比较, 比较的结果就是表示这两种信号差别的残差量, 然后对残差进行分析处理, 进而实现故障诊断。

实际生产过程中, 由于各种未知扰动、噪声等因素的影响, 很难得到精确的数学模型, 因此, 基于解析模型的故障诊断方法的鲁棒性问题具有极大研究价值。由于建模不确定和故障实际上都是不期望的动态特性, 如果不能很好处理建模不确定的影响, 原有的故障诊断系统将会受到极大影响, 甚至会完全失效。

1.3.2 基于知识的方法

基于知识的方法使用定性的模型来获得过程监控的量度, 它不需要系统的精确数学模型, 特别适合于不能获取详细数学模型的系统。大多数基于知识的量度都是基于因果分析的、专家系统和模式识别的。基于知识的方法主要可分为两大类: 基于定性模型的方法和基于症状的方法。基于定性模型的方法, 系统的定性模型是由一组表示系统物理参数的定性变量和一组表示各参数间相互关系的定性方程构成。定性方程描述并模仿定性结构, 以确定从给定的初始状态出发得到当前系统状态。此方法比基于症状的方法知识获取更简单, 一般可分为知识观测器法、定性观测器法和定性仿真法。

目前研究的比较深入也比较广泛的是基于症状的方法, 主要有: 专家系统方法、神经网络方法、模糊推理方法、模式识别方法及故障树方法等。

基于知识的故障诊断方法对于复杂的系统和非线性系统有较高的实际意义。由于该方法充分考虑了人的智能因素, 更符合对实际系统的自然推理, 是一类有前途的诊断方法。但是该方法自身存在一些缺陷, 并且有些理论尚不成熟, 真正成功应用于工业实际过程的并不多。

1.3.3 基于信号处理的方法

当可以得到被控过程的输入输出信号, 但很难建立被控对象的解析数学模型时, 可采用基于信号处理的方法, 它是目前应用比较广泛的一种方法。

现代化的化工生产过程规模大、复杂, 建立准确的数学模型很困难, 即使得到了也是极其复杂的非线性模型。另一方面, 现代化的化工生产过程中安装了大量的传感器, 并随着计算机的引入, 使得人们通过计算机控制系统从过程变量中采集和存储了大量的数据。这些为实现多变量统计提供了坚实的基础。因此, 在化工过程故障诊断中多变量统计方法得到了广泛的应用。

基于信号处理的方法避开了系统建模的难点,它是通过对大量的过程数据进行分析,提取数据的主要特征信息进行诊断的方法,该方法实现简单,实时性好。由于典型的现代化生产过程都有大量的仪器仪表,会产生大量的数据,这些都是基于信号的故障诊断方法应用的有利条件。因此,这类诊断方法在现代化的大工业系统中有着广泛的应用前景。基于信号处理的诊断方法的诊断效果高度依赖于过程数据的数量和质量,多用于故障的检测,对故障的分离和诊断要差一些。

1.4 本文研究内容

从上述分析可以看出,化工过程故障诊断问题尤为重要,是一个重要的研究课题。针对化工生产过程的特点,多变量统计方法能够很好地解决其故障诊断问题,并得到了广泛的应用。然而,利用多变量统计方法进行化工故障诊断时还存在着一些不足,有待于我们去解决,本文主要致力于解决这些问题。

本文以一个典型的化工生产过程 TE 过程作为研究对象,对多变量统计方法进行了研究,其中重点研究了主元分析方法(PCA)和鲁棒主元分析方法(RPCA),对于 RPCA,我们重点介绍起原理和其应用于故障分类中非线性有点。并通过在 TE 过程中进行仿真应用研究,来说明此方法的可行性,从而为化工生产过程故障诊断提供了有益的参考和帮助。论文共分五章,主要内容包括:

第一章主要介绍了化学工业故障诊断的研究背景以及危险化学品生产的主要特点;从宏观的角度对故障诊断的方法进行论述。

第二章主要针对国内外研究现状进行综述,分别介绍了一些常见的故障诊断方法,如 PCA,SVM,FDA 等方法,并比较了各个算法优缺点。

第三章为了明确地了解故障诊断方法的优缺点,给出了一个真实的化工过程平台 TE 过程,介绍了 TE 过程的工艺流程、变量、故障等相关信息。

第四章对化工过程故障诊断中应用最为广泛的主元分析法(PCA)进行了详细的阐述,并且引入了多变量平方预测误差统计量(SPE)和 Hotelling T^2 统计量,对其应用做了深入的研究。以及利用贡献图进行故障辨识的方法,对 TE 过程的仿真研究进一步验证了主元分析方法的主要优缺点。

第五章是论文的核心,针对主元分析方法处理非线性问题能力差的缺点,提出了利用鲁棒主元分析方法处理非线性问题的思想,阐述了鲁棒主元分析方法的

基本原理。并且真谛 TEP 仿真平台数据库，主要应用鲁棒主元分析法，对故障辨识做了进一步研究，尝试引入残差 1-范数和均方误差等来作为故障辨识的主要依据。

最后，在结论和展望中，对论文所取得的成果和得出的结论进行了总结，并指出了有待进一步研究课题。

1.5 本文组织结构

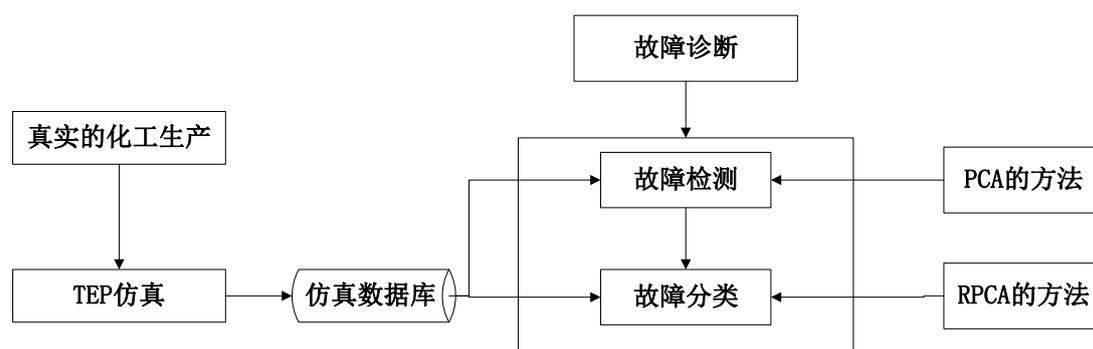


图 1.3 本文研究框图

第二章 国内外研究现状及文献综述

2.1 故障诊断方法

2.1.1 多变量统计方法

PCA 的方法是故障诊断中应用最为广泛的降维方法之一。文章^[10]中第一次成功的将 PCA 方法引入到多维化工数据的降维中,开启的 PCA 在故障诊断中的应用。

文章^[11-16]则将 PCA 方法扩展到故障检测,它们应用 PCA 的降维能力,得到故障样本的低维模型,并利用此模型成功追踪化工过程的失控状态和一些故障扰动带来的不正常操作。PCA 的算法研究与应用也一直受广大化工公司或高科技公司重视,文章^[17-20]为应用 PCA 超过 6 年的杜邦公司和其他一些公司在其应用期间发表的一些成果。

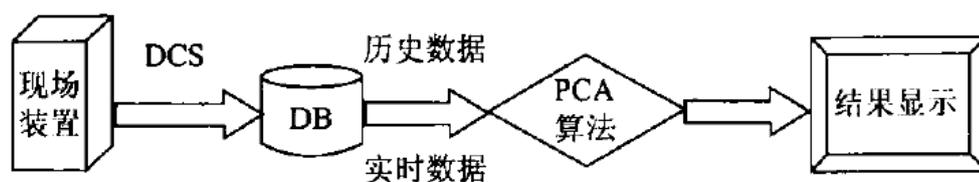


图 2.1 一般化工数据 PCA 故障检测

PCA 的方法 虽然是一种目前广泛应用于过程监控的数据驱动方法,但 PCA 是一种线性变换方法,不适用于非线性过程。对此,出现了各种不同的非线性 PCA,其中 Schlkopf 等人提的核主元分析法 KPCA(kernel principal component analysis)是一种很有效的非线性过程故障诊断方法,它有线性 PCA 的简单性,极具实用价值^[21-22],用 KPCA 进行故障诊断时,首先通过非线性映射将原输入空间映射到一个高维的特征空间,然后在高维的特征空间上进行主元分析,从而把输入空间中的非线性问题转化为特征空间中的线性问题;利用 KPCA 进行故障诊断时,主要存在以下三个方面的缺点:第一,在 KPCA 的训练阶段,需要存储和计算核矩阵,并对核矩阵进行特征值分解,然而核矩阵的维数等于样本数目的平方,对于大样本的非线性化工过程来说,计算非常耗时。第二,在工业生产过程中,实际得到的现场数据不可避免的带有噪声、随机干扰,噪声和干

扰的水平将直接影响到主元模型的准确性。第三，故障诊断能力差。最近几年成功应用于图像处理和人脸识别的 RPCA 算法在故障诊断中还没有得到重视，而通过文章^[23-24]我们可以看出 RPCA 优越的非线性性，虽然其求解过程为一个 NP-hard 非凸问题，这两篇文章成功的应用若干凸问题进行逼近求解，在人脸识别试验中得到了较好的分类结果。关于 RPCA 在化工故障诊断中的应用我们将在第五章中详细阐述。

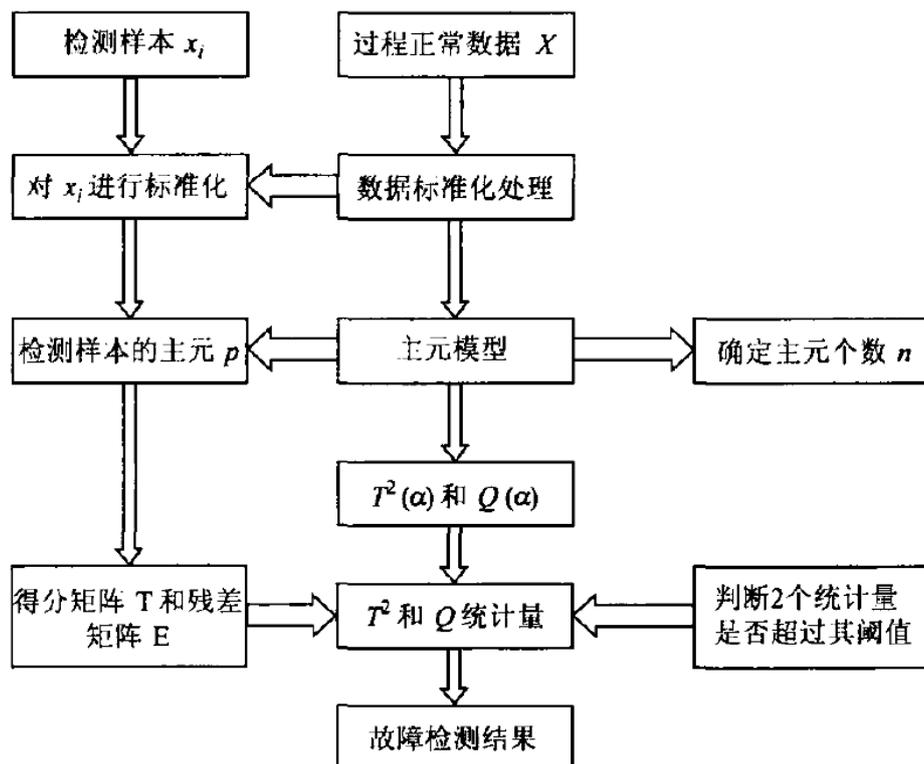


图 2.2 故障检测流程图

Fisher 判别式分析 (Fisher discriminant analysis, 简称 FDA) 是 Fisher^[51]于 1936 年提出的，主要用于模式识别的一种降低特征空间维数的模式分类方法。直到最近，Chiang^[52-53]将 FDA 引入到流程工业过程，对其进行故障诊断分析。FDA 用于流程工业的故障诊断的基本思想与 PCA 比较类似，都是通过将高维数据投影到最能代表数据变化的特征方向上达到降维的目的。与 PCA 不同的是，FDA 在建立模型时，不仅利用了正常工况的历史数据，而且还利用了各种故障条件下的历史数据，其故障诊断能力显然要优于基于 PCA 的方法。文章^[25-26]在故障分类中成功引入 FDA 的方法，并指出 FDA 在分类过程中所需要的每一类样本必须为已知故障数据，这大大限制了 FDA 在故障诊断中应用。做为另一个重要的分类方法 DPLS 在故障诊断则得到了广泛的应用，文章^[27-29]介绍了 DPLS 分

类模型,部分最小二乘方法能够通过成分提取和空间压缩技术克服噪声和变量的相关性,并根据正常工况的生产数据,准确捕捉质量变量和过程变量之间的关系。该方法不依赖过程机理模型,不需要故障样本;能够弥补 PCA 等其他统计方法无法考虑过程变量对质量变量影响的不足,同时文章^[27,30]在小比率分类问题中对比了 DPLS 和 PCA 算法,结果显示了 DPLS 算法优于 PCA 算法。

支持向量机 (support vector machine, SVM) 是 Vapnik 于 1995 年提出的以训练误差作为优化问题的约束条件,以置信范围值最小化作为优化目标,是一种基于结构风险最小化准则的学习方法,它结构简单,其推广能力明显优于传统的学习方法^[49]。基于 SVM 分类特点,很多文章都结合 PCA 和 SVM 对故障进行分类,文章^[50]中提出的 PCA_SVM 方法,在类别的选择上突破了很多文献中只有 2 类或 3 类的局限,选取了 5 类 TEP 数据的故障样本。通过将故障样本投影到正常样本得到的主元空间,一方面可以达到降维的效果,减少计算量;另一方面可以提取各类故障的主要特征,从而为后续分类模型奠定了基础。

2.1.2 基于知识和解析模型的方法

文章^[31]中 D.F.Specht 首次应用神经网络的方法做故障诊断,此文中他主要是通过神经网络对故障进行简单的分类。

在文章^[32]中, Huajing Fang, Hao Ye 等提出了 Networked control systems (NCS), 并对比分析了 NCS 和 DCS, 其主要是针对系统信号时间延迟设计的模型。在此方面他们课题组有多年的工作经验, 并发表了很多此方面的文章。

基于故障预测的方法 Orchard^[33-35]建立了 PF (particle-filtering) 模型, 此模型主要是配合系回路反馈信息来诊断实际生产工艺中的故障, 其优点是可以忽略高斯条件假设, 在 2008 年 Orchard 给出了此模型严谨的数学证明。

文章^[36]中 Marcos E. Orchard 和 Liang Tang 改进了 PF 模型, 提出了 RSPF 模型; 此模型主要是针对 PF 模型中忽略了一些对密度函数有部分影响的稀事件。

文章^[37]中 W.E.Vesely 首次将故障树理论化, 并成功应用于工业故障和核系统故障诊断中, 文中体现了故障树在评价系统可靠性和安全性上的优越性; 之后模糊数学的方法, 使得此理论又有了重要的进步, 衍生出模糊故障树理论。

针对非线性系统故障诊断的 T-S (Tagaki-Sugeno) 模型, 采用了传统的局部线性化和参数调度的思想, 具有良好的逼近性能; 其模糊规则的结论部分一般为

线性或放射的函数。文献^[38]中首先基于 T-S 模型建立了内燃机实验装置的输出估计模型，通过对残差分量的逻辑判断实现了传感器，执行器增益故障的诊断；文献^[39]基于 T-S 模型及并行分布式补偿的思想设计了模糊观测器，其形式为多个线性观测器的模糊融合。另外，文献^[40]利用 RLS 辨识当前工作区下的线性模型得到时间常数、静态增益等特征参数，与 T-S 模型计算出的特征参数相比较，实现了故障诊断。文献^[41]提出了基于 Hopfield 网络实现的 RLS 辨识的故障诊断方案。

遗传规划是遗传算法的一个分支，它用特定的数据结构取代定长二进制串作为进化的个体。文献^[42]提出了一种基于遗传规划的非线性系统结构和参数辨识算法。采用 Akaike 信息准则(AIC)作为性能指标，同时考虑了模型结构的复杂度(规定模型参数越多则性能越差)。

文献^[43]提出了一种直接度量轨迹间距离的函数模糊 C 均值算法用于变速箱故障检测。文献^[44]提出了一种结合神经网络概率密度估计与贝叶斯决策的故障诊断方案，可给出错分故障的概率，判断是否有未知故障发生。

文献^[45]提出了一种自学习分类树算法用于模糊规则的提取，可生成相对小的规则集，规则的可解释性好，便于先验知识的引入。

2.2 TEP 过程仿真

TEP 是 Eastman company 提供的化工仿真，文章^[46]为最早的一篇 TEP 过程的文章，其提供了仿真代码，并详细介绍了 TEP 过程和其中变量之间的关系。

文章^[47-48]深入研究了 TEP 的过程控制，并分析了重要变量的调整对引入故障的影响，给出了闭环 TEP 过程中各种调节变量的临界值和 21 种故障引入时的控制变量值。同时文章^[48]给出了 TEP 的 MATLAB 仿真程序。

2.3 本章小结

本章综述了故障诊断的一些方法，重点论述了 PCA 方法在故障诊断过程中的重要性，并指出 PCA 方法的线性缺陷极大地限制了它的应用，解决此问题的过程中出现了 KPCA 算法，并得到了应用，而 RPCA 算法在故障诊断中并没有得到广泛的应用，其应用将在第五章中给出详细的论述。

FDA 作为优秀分类方法相比较 DPLS 却没有在故障诊断中得到重视，而作为最大程度的分开两类样本，它们都是最优，同时它们共同的缺点为只能对已知的故障类做出高效的分类。

TEP 作为成熟的化工仿真工具，给故障诊断提供有效的数据库和仿真平台。

第三章 TEP 化工仿真过程描述

本文的应用研究是基于 TEP (Tennessee Eastman Process) 化工过程进行的。TEP 过程是基于实际工业过程的过程控制案例。测试过程是基于一个真实工业过程的仿真, 其中的成分、动力学、运行条件等因为专利权的问题都做过部分修改。TEP 第一次提出是在 1990 年在芝加哥举行的美国化工学会 (AIChE) 年会上。它是有美国 Eastman (伊斯曼) 化学公司的 Downs 和 Vogel 提出来的一个用来开发、研究和评价过程控制技术和监控方法的现实的化工过程模型^[48], 之后大量的文献引用它作为数据源, 来进行控制、优化、过程监控、故障诊断等研究。它可以在 MATLAB 上进行仿真。TEP 过程的原型是 Eastman 化学公司的一个实际工艺流程。目前, TEP 过程已经作为典型的化工过程故障检测和诊断对象被广泛研究。

3.1 TEP 过程流程图

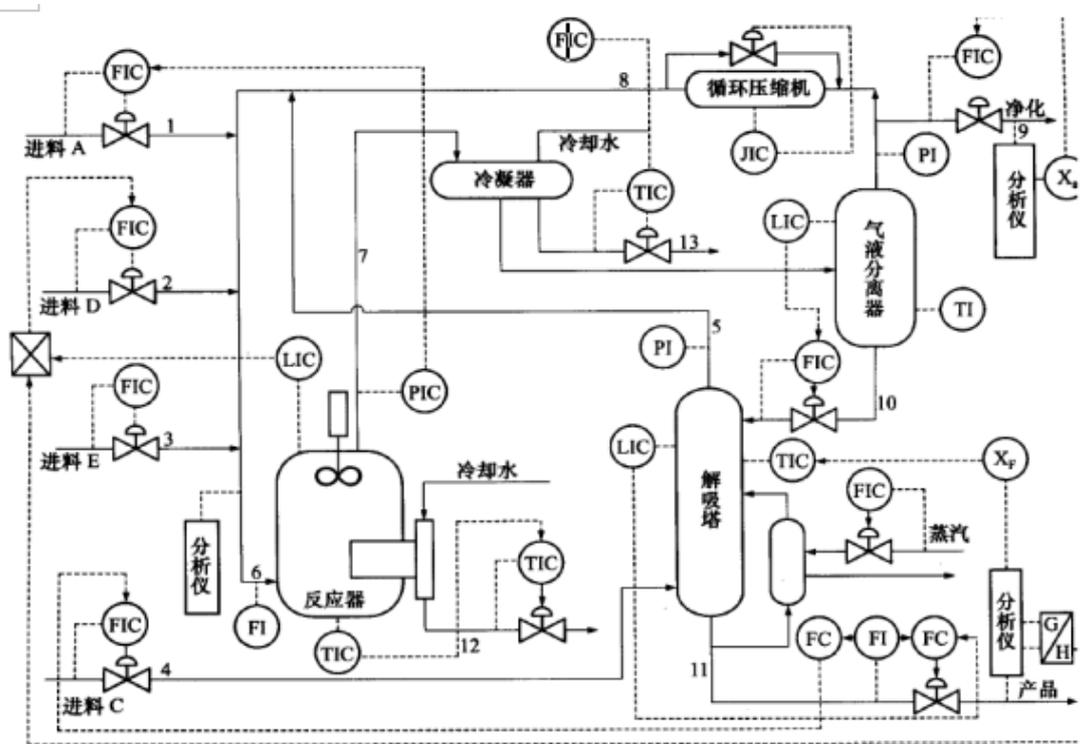


图 3.1 TEP 过程工艺流程图

TE 生产过程主要由四种气态物料参与反应, 分别为 A、C、D 和 E, 生产出两种产品 G、H, 并伴有一种副产品 F, 此外在产品的进料中含有少量的惰性

气体 B。整个过程主要由四种反应组成，反应方程式如下：

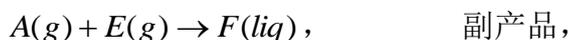


表 3.1 TEP 过程各种成分的物理特性 (100°C)

| 成分 | 分子量 | 液体密度 / $kg \cdot m^{-3}$ | 液体热熔 / $KJ \cdot kg^{-1} \cdot C^{-1}$ | 气体热熔 / $KJ \cdot kg^{-1} \cdot C^{-1}$ | 汽化热 / $KJ \cdot kg^{-1}$ |
|----|------|-----------------------------|---|---|-----------------------------|
| A | 2.0 | - | - | 14.6 | - |
| B | 25.4 | - | - | 2.04 | - |
| C | 28.0 | - | - | 1.05 | - |
| D | 32.0 | 299 | 7.66 | 1.85 | 202 |
| E | 46.0 | 365 | 4.17 | 1.87 | 372 |
| F | 48.0 | 328 | 4.45 | 2.02 | 372 |
| G | 62.0 | 612 | 2.55 | 0.712 | 523 |
| H | 76.0 | 617 | 2.45 | 0.628 | 486 |

上述反应均是放热反应，且反应是不可逆的。反应的速率是与温度相关的一个函数。生产 G 产品时，对温度是非常灵敏的。相对于反应物浓度而言，这个反应可以近似被看作一阶反应。

整个过程主要有五个操作单元组成：反应器、产品冷凝器、气液分离器、循环压缩机和汽提塔。气态的反应物进入到反应器中，生成液态产品气相的反应是在一种不挥发的气相催化剂的作用下进行的。反应器内置有冷凝包用来移除反应产生的热量。产品以气态的形式出来，并夹杂有一些未反应物。催化剂仍然滞留在反应器中。

从反应器出来的产品流量，首先经过一个冷凝器，冷凝之后从里面出来到气液分离器中。在气液分离器中，没有被压缩的组分通过一个离心式的压缩机被回

收到反应器中的物料中；被压缩的组分到了产品的提馏段进行提馏，从而移除剩余的反应物。产品 G 和 H 从提馏段中出来，在下面的精馏段中被分离，这不包括在这个模型范畴以内。那些惰性气体和气态的副产品主要通过放空手段进行了移除。

根据 G/H 质量比的不同，TE 过程有六个操作模式，各模式参数见表 3.2 其中模式 1 叫做标称状态，我们要做的仿真就是基于此模式。TE 过程实际运行于哪个模式，即 G/H 物料比率，通常是由对产物的需求和装置的生产能力决定的。可以根据不同的需求使系统工作在相应的模式下。

表 3.3 给出了控制系统应满足的过程约束条件。这些约束条件主要用于对装置进行保护。其中，最高与最低停机极限是过程连锁策略的一部分，以避免出现灾难性故障。

表 3.2 TEP 过程操作模式参数

| 模 | G/H 比率 | 产 品 生 产 率 |
|---|--------|--|
| 1 | 50/50 | 7038kgh ⁻¹ G 和 7038kgh ⁻¹ H |
| 2 | 10/90 | 1048 kgh ⁻¹ G 和 12669 kgh ⁻¹ H |
| 3 | 90/10 | 10000 kgh ⁻¹ G 和 1111 kgh ⁻¹ H |
| 4 | 50/50 | 最大生产率 |
| 5 | 10/90 | 最大生产率 |
| 6 | 90/10 | 最大生产率 |

表 3.3 过程操作约束

| 过程变量 | 正常操作限制 | | 停车限制 | |
|---------|------------------------------|-------------------------------|-------------------|--------------------|
| | 低 限 | 高 限 | 低 限 | 高 限 |
| 反应器压力 | 无 | 2895kpa | 无 | 3000kpa |
| 反应器液位 | 50% (11.8m ³) | 100% (21.3m ³) | 2.0m ³ | 24.0m ³ |
| 反应器温度 | 无 | 150℃ | 无 | 175℃ |
| 产品分离器液位 | 30% (3.3m ³) | 100% (9.0m ³) | 1.0m ³ | 12.0m ³ |
| 汽提塔基础液位 | 30% (3.5m ³) | 100% (6.6m ³) | 1.0m ³ | 3.0m ³ |

TEP 模型的控制策略设计:

TE 过程主要有十二个操纵变量和四十一个测量变量, 表为十二个操纵变量, 1-3 为 22 个过程连续变量测量值, 1-4 为 19 个色谱测量组分值。研究这个过程的首要前提就是要有一套控制方案来操作这个装置。这个过程的控制目标对于化学反应来说是非常典型的:

- (1) 要保证过程变量值在期望范围内。
- (2) 在设备的限制条件下, 要保证过程操作的条件。
- (3) 在有扰动的情况下, 使得产品收率和产品质量的变化尽可能的小。
- (4) 要尽量减小影响其它过程的阀门开度。
- (5) 当产品的收率和混合产品的组成发生变化时, 能迅速、平稳的从扰动中恢复过来。

3.2 TEP 过程变量描述

整个 TEP 过程包括 41 个测量变量和 12 个操作变量 (控制变量), 其中 41 个测量变量包括 22 个连续测量变量和 19 个成分测量值。控制变量在表 3.4 中列出。表 3.5 中列出了 22 个连续测量变量, 从 XMEAS(1)~XMEAS(22), 它们每 3 分钟被采样一次。

表 3.4 控制变量

| 变量名 | 变量符号 | 基础值 | 低限 | 高限 | 单位 |
|----------|-------|--------|-----|-------|--------------------------------|
| D 流量 | XMV1 | 63.053 | 0 | 5811 | Kgh-1 |
| E 流量 | XMV2 | 53.980 | 0 | 8354 | Kgh-1 |
| A 流量 | XMV3 | 24.644 | 0 | 1.017 | kscmh |
| AC 混合流量 | XMV4 | 61.302 | 0 | 15.25 | kscmh |
| 压缩循环阀 | XMV5 | 22.210 | 0 | 100 | % |
| 放空阀 | XMV6 | 40.064 | 0 | 100 | % |
| 分离器液体流量 | XMV7 | 38.100 | 0 | 65.71 | m ³ h ⁻¹ |
| 汽提塔液体流量 | XMV8 | 46.534 | 0 | 49.10 | m ³ h ⁻¹ |
| 汽提塔蒸汽阀 | XMV9 | 47.446 | 0 | 100 | % |
| 反应器冷凝水流量 | XMV10 | 41.106 | 0 | 227.1 | m ³ h ⁻¹ |
| 冷凝器冷却水 | XMV11 | 18.114 | 0 | 272.6 | m ³ h ⁻¹ |
| 搅拌速度 | XMV12 | 50.000 | 150 | 250 | rpm |

上述的每一个操纵变量都是通过设置相应的 XMV 来定义的, 其值在 0~100

之间。基础值即 XMV 变量的初始值，XMV 变量的范围为 0~100。在实际过程中，变量的低限为 $XMV(i) = 0$ ，高限为 100。我们在研究过程中可以使这些变量超过 0~100 的限制，但是在程序的实际运行过程中，它们会被限制为 0 或者 100。

表 3.5 连续测量变量 (3 分钟采样间隔)

| 变量名 | 变量符号 | 基础值 | 单位 |
|------------|---------|---------|-----------|
| A 物料流量 | XMEAS1 | 0.25052 | kscmh |
| D 物料流量 | XMEAS2 | 3664.0 | Kgh-1 |
| E 物料流量 | XMEAS3 | 4509.3 | Kgh-1 |
| A、C 混合物料流量 | XMEAS4 | 9.3477 | kscmh |
| 回收流量 | XMEAS5 | 26.902 | kscmh |
| 反应器进料率 | XMEAS6 | 42.339 | kscmh |
| 反应器压力 | XMEAS7 | 2705.0 | kPa gauge |
| 反应器液位 | XMEAS8 | 75.00 | % |
| 反应器温度 | XMEAS9 | 120.40 | oC |
| 放空率 | XMEAS10 | 0.3372 | kscmh |
| 产品分离器温度 | XMEAS11 | 80.109 | oC |
| 产品分离器液位 | XMEAS12 | 50.000 | % |
| 产品分离器压力 | XMEAS13 | 2633.7 | kPa gauge |
| 产品分离器出口流量 | XMEAS14 | 25.160 | m3h-1 |
| 汽提塔液位 | XMEAS15 | 50.000 | % |
| 汽提塔压力 | XMEAS16 | 3102.2 | kPa gauge |
| 汽提塔出口流量 | XMEAS17 | 22.949 | m3h-1 |
| 汽提塔温度 | XMEAS18 | 65.731 | oC |
| 汽提塔蒸汽流量 | XMEAS19 | 230.31 | kgh-1 |
| 压缩机工作功率 | XMEAS20 | 341.43 | kw |
| 反应器冷却水出口温度 | XMEAS21 | 94.599 | oC |
| 分离器冷却水出口温度 | XMEAS22 | 77.297 | oC |

表 3.6 成分测量

| 组分 | 变量名 | 基础值 | 单位 |
|----|---------|---------|------|
| A | XMEAS23 | 32.188 | Mol% |
| B | XMEAS24 | 8.8933 | Mol% |
| C | XMEAS25 | 26.383 | Mol% |
| D | XMEAS26 | 6.8820 | Mol% |
| E | XMEAS27 | 18.776 | Mol% |
| F | XMEAS28 | 1.6567 | Mol% |
| A | XMEAS29 | 32.958 | Mol% |
| B | XMEAS30 | 13.823 | Mol% |
| C | XMEAS31 | 23.978 | Mol% |
| D | XMEAS32 | 1.2565 | Mol% |
| E | XMEAS33 | 18.579 | Mol% |
| F | XMEAS34 | 2.2633 | Mol% |
| G | XMEAS35 | 4.8436 | Mol% |
| H | XMEAS36 | 2.2986 | Mol% |
| D | XMEAS37 | 0.01787 | Mol% |
| E | XMEAS38 | 0.83570 | Mol% |
| F | XMEAS39 | 0.09858 | Mol% |
| G | XMEAS40 | 53.724 | Mol% |
| H | XMEAS41 | 43.828 | Mol% |

表 3.6 中描述了 19 个成分测量值，从 XMEAS (23) ~XMEAS (41)。成分测量值从流 6、9 和 11 中测出来的。流 6 和流 9 的采样间隔和时间延迟都是 6 分钟；而流 11 为 15 分钟。所有的过程测量值都包括高斯噪声。

3.3 TEP 过程中故障描述

TEP 过程的过程仿真包括 21 个预先设定好的故障，如表 3.7 所示。这些故障中，16 个是已知的，5 个是未知的^[38]。故障 1~7 与过程变量的阶跃变化有关，如冷却水的入口温度或者进料成分的变化。故障 8~12 与一些过程变量的可变性增大有关。故障 13 是反应动力学中的缓慢漂移，故障 14、15 和 21 是与粘滞阀有关的。故障 16~20 是未知的。

为了便于对故障诊断算法进行检验与评价，可以通过改变过程的设定点来进

行。在标称状态下设定点的几种典型变动由表 3.8 给出。当然，也可以通过改变负载扰动，来检验故障诊断算法的性能。

表 3.7 TEP 过程故障

| 编号 | 故障描述 | 分类 |
|----|------------------------------|------|
| 1 | A/C 进料流量比变化，组分 B 含量不变（流 4） | 阶跃 |
| 2 | 组分 B 含量发生变化，A/C 进料流量比不变（流 4） | 阶跃 |
| 3 | 物料 D 的温度发生变化（流 2） | 阶跃 |
| 4 | 反应器冷却水入口温度发生变化 | 阶跃 |
| 5 | 冷凝器冷却水入口温度发生变化 | 阶跃 |
| 6 | 物料 A 损失（流 1） | 阶跃 |
| 7 | 物料 C 压力损失（流 4） | 阶跃 |
| 8 | 物料 A,B,C 的组成发生变化（流 4） | 随机变量 |
| 9 | 物料 D 的温度发生变化（流 2） | 随机变量 |
| 10 | 物料 C 的温度发生变化（流 2） | 随机变量 |
| 11 | 反应器冷却水入口温度发生变化 | 随机变量 |
| 12 | 冷凝器冷却水入口温度发生变化 | 随机变量 |
| 13 | 反应动力学特性发生变化 | 慢漂移 |
| 14 | 反应器冷却水阀门 | 黏住 |
| 15 | 冷凝器冷却水阀门 | 黏住 |
| 16 | 未知 | 未知 |
| 17 | 未知 | 未知 |
| 18 | 未知 | 未知 |
| 19 | 未知 | 未知 |
| 20 | 未知 | 未知 |
| 21 | 流 4 的阀门固定在稳态位置 | 恒定位置 |

表 3.8 下表是在标称状态下的设定点变动

| 过程变量 | 类型 | 副值 |
|-------------|-----|--|
| 生产率变动 | 阶跃型 | -15% (将那些影响过程生产率的设定值变量做阶跃型变动, 以使得离开解析塔的产品流量从 14228 减少为 12094kg/h) |
| 生产配比变动 | 阶跃型 | 50G/50H 变为 40G/60H (将影响产品配比的变量做节约型变动, 以使输出变量从 G: 7038kg/h, H: 7033kg/h, 变为 G: 5630kg/h, H: 8446kg/h) |
| 反应器操作压力变动 | 阶跃型 | -60kpa (压力从 2705kpa 跳变为 2645kpa) |
| 释放气中 B 含量变动 | 阶跃型 | +2% 释放气中 B 含量从 13.82% 跳变为 15.82% |

3.4 TEP 过程仿真

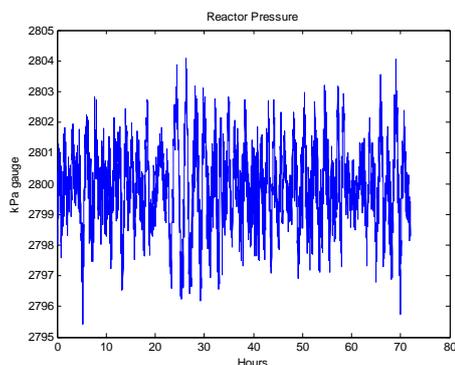


图 3.2 反应器压力

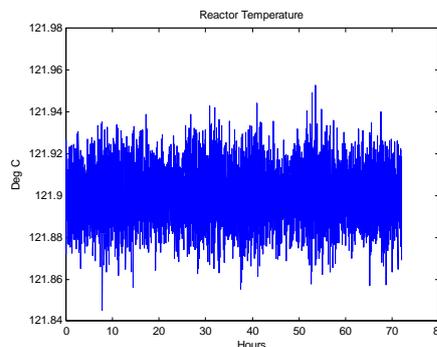


图 3.3 反应器温度

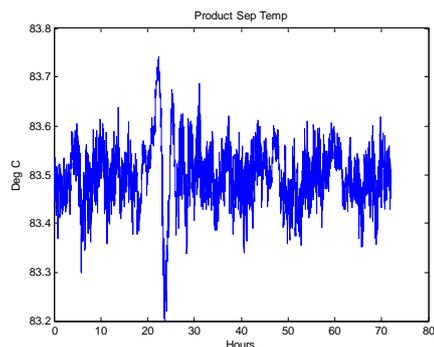


图 3.4 产品分离器温度

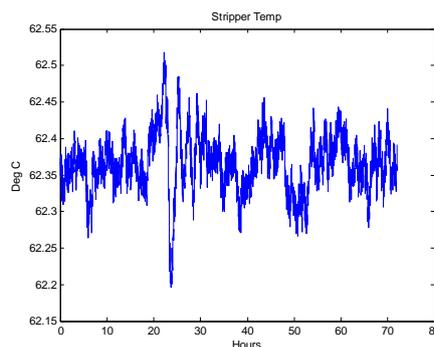


图 3.5 汽提塔温度

在正常运行情况下 (即故障 0), 系统的稳态闭环仿真如上图所示, 系统的各个过程变量基本上保持不变。

建立过程的数学模型, 首先要得到稳态无故障的过程数据。设定每组数据的过程仿真时间为 48 小时, 每 3 分钟采取 1 个数据点。选取 41 个输出变量和 11

个控制变量进行数据分析，第 12 个控制变量由于在该控制方案中保持恒定，而没有加以考虑。整个分析过程所需要的数据包括：两组稳态无故障数据，20 组带不同干扰的测试数据。在这 20 组数据中，前 8 小时处于稳态无故障工况，第 8 小时引入各自不同的故障。

3.5 本章小结

本章主要对课题的应用研究对象 TE 化工过程进行了详细的介绍，包括过程的工艺流程、过程变量、过程故障和过程仿真，为后续的研究奠定了基础。TE 过程作为一个典型的化工过程，它具有化工过程各方面的特点，工艺简单明了，过程故障具有典型性，用它来作为具体的研究对象，具有典型的代表性，很适合作为我们对化工过程进行理论研究的平台。

第四章 基于 PCA 的故障检测

4.1 主元分析法 (PCA)

主元分析法 (Principal Component Analysis, PCA) 最早是有 Pearson 于 1901 年提出来的, 现在是在监控工业系统中使用的最为广泛的数据处理技术之一, 并被归类为标准的多变量统计方法。

4.1.1 应用 PCA 的前提条件

生产过程中每个传感器在主元分析中都用一个随机变量表示。在把 PCA 引入生产过程的故障诊断中时, 做了以下假设:

- 1) 生产过程中的各变量都服从相同的高斯正态分布, 即要相互独立。
- 2) 生产过程处于稳态, 不存在序列相关。
- 3) 相关变量之间是线性相关的。
- 4) 生产过程中各参数是不随时间变化而变化的。

而实际生产过程中这些假定的前提条件一般是很难被满足的, 针对这些前提条件的限制, 可以对普通 PCA 方法进行一系列的改进。

4.1.2 主元分析的基本原理

PCA 是一种线性降维技术, 是按获取数据的变化度为最优的。它的基本方法就是构建原变量的线性组合, 以产生互不相关的新变量, 在保证损失信息尽量少的前提下, 选取一些新变量来代替原来变量, 以实现降维。在过去的几十年里, 人们对它作了大量的研究, 并在化工系统中进行了大量的应用。但是, PCA 是一种线性变换方法, 当用于非线性过程时, 其性能会大大降低。

PCA 确定了一系列互相正交的向量, 称为负荷向量, 按照在负荷向量方向的方差大小来排序。给定一个训练集, 它有 n 个观测值, m 个过程变量, 写成下式中的矩阵 X 的形式, 则负荷向量可用过求解最优化问题来计算:

$$X = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1m} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2m} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nm} \end{bmatrix} \quad (4.1)$$

$$\max_{v \neq 0} \frac{v^T X^T X v}{v^T v} \quad (4.2)$$

其中 $v \in \mathfrak{R}^m$ 。最优化问题可以通过奇异值分解来计算：

$$\frac{1}{\sqrt{n-1}} X = USV^T \quad (4.3)$$

其中 $U \in \mathfrak{R}^{n \times n}$ 和 $V \in \mathfrak{R}^{m \times m}$ 都是酉矩阵，矩阵 $S \in \mathfrak{R}^{n \times m}$ 包含沿其主对角线递减的实的非负奇异值 ($\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_{\min(m,n)} \geq 0$)，其他非对角线元素为零。负荷向量是矩阵 V 中正交的列向量，训练集沿矩阵 V 第 i 列的投影的方差等于 σ_i^2 。而求解上式等价于求解样本协方差矩阵 S 的特征值分解：

$$S = \frac{1}{n-1} X^T X = V \Lambda V^T \quad (4.4)$$

这里对角矩阵 $\Lambda = S^T S \in \mathfrak{R}^{m \times m}$ 包含幅值递减的 ($\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_m \geq 0$) 非负实特征值，并且第 i 个特征值等于第 i 个奇异值的平方 (即 $\lambda_i = \sigma_i^2$)。

为了最优地获取数据的变化量，同时最小化随机噪声对 PCA 表示的影响，与 α 个最大奇异值相对应的负荷向量被保留。选择负荷矩阵 $P \in \mathfrak{R}^{m \times n}$ 的列，使其与前 α 个奇异值相关联的负荷向量相对应，则 X 观测到底维空间的投影就包含在得分矩阵中：

$$T = XP \quad (4.5)$$

而且， T 返回到 m 维观测空间的投影为：

$$\hat{X} = TP^T \quad (4.6)$$

X 和 \hat{X} 的差就是残差矩阵 E ：

$$E = X - \hat{X} \quad (4.7)$$

这个残差矩阵获取了用于 $m - \alpha$ 个最小奇异值相关联的负荷向量所张成的观测空间的变化量。由 \hat{X} 和 E 张成的子空间分别称为得分空间和残差空间。包含在矩阵 E 中的子空间具有小的信噪比，并且把这个空间从 X 中去除就会发生一个更精确的过程表示， \hat{X} 。

定义 t_i 为训练集中 T 的第 i 列，则有下列特性：

1. $Var(t_1) \geq Var(t_2) \geq \dots \geq Var(t_\alpha)$;
2. $Mean(t_i) = 0, \forall i$;
3. $t_i^T t_k = 0, \forall i \neq k$;
4. 不存在能够获取更多数据变化的 α 个元素其他正交扩展。

其中， $Var(\cdot)$ 表示求取变量的方差， $Mean(\cdot)$ 表示求取变量的均值。测试集的一个新观测向量（列） $x \in \mathfrak{R}^m$ ，可以投影到低维得分空间 $t_i = x^T p_i$ ，这里 p_i 是第 i 个负荷向量。被转换变量 t_i 也称为 x 的第 i 个主元。为了区分被转换变量和被转换的观测值，称被转换变量为主元，单独被转换的观测值为得分。

4.2 基于 PCA 的故障检测

主元分析法(PCA)进行故障检测和诊断的基本思想是：根据过程正常工作情况下得到的数据，按照一定的标准，利用统计的方法找出能够表达正常工作情况下各个变量之间的因果关系的低维主元成分，即主元模型，一旦过程的实时测量数据与建立的主元模型不符，就可以判断过程中已有故障发生，再通过对测量数据中各变量变化对主元模型的方差贡献率的分析，来进行故障诊断。

当利用正常的历史数据完成主元模型的建立后，就可以对新采集到的数据进行故障检测了。首先根据主元模型计算出新数据的估计值，然后就可以检测过程中是否发生故障了。常用的故障检测方法有：平方预测误差(SPE)法和 Hotelling T^2 统计法。

4.2.1 T-2 统计法

训练集中的数据包含 m 个观测变量，每个变量有 n 个观测值，把这些数据排入矩阵 $X \in \mathfrak{R}^{n \times m}$ ：

$$X = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1m} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2m} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nm} \end{bmatrix} \quad (4.8)$$

则训练集的样本协方差矩阵等于：

$$S = \frac{1}{n-1} X^T X \quad (4.9)$$

矩阵 S 的一种特征值分解为：

$$S = V\Lambda^{-1}V^T \quad (4.10)$$

它揭示了协方差矩阵的关联结构，其中 Λ 是对角阵， V 是正交阵 ($V^T V = I$)。

观测变量 $x \in \mathfrak{R}^m$ 的投影 $y = V^T x$ 将观测空间分解成一组与 y 的元素相对应的不相关的变量。 y 的第 i 个元素的方差等于矩阵 Λ 中第 i 个特征值。假设可逆且定义：

$$z = \Lambda^{-\frac{1}{2}} V^T x \quad (4.11)$$

则 Hotelling 统计量可以定义为下式：

$$T^2 = z^T z \quad (4.12)$$

如果假设观测值是多元正太分布中随机抽出的，则可以基于显著性水平 α 来确定 T^2 统计量的适当阈值。如果再假设正常情况下样本均值向量和协方差分别与真实的矩阵均值向量和协方差矩阵相等，则 T^2 统计量就遵守自由度为 m 的 χ^2 分布：

$$T_\alpha^2 = \chi_\alpha^2(m) \quad (4.13)$$

集合 $T^2 \leq T_\alpha^2$ 在观测空间中是一个团圆形的置信区域。如果受控状态的实际协方差矩阵未知，但可以从样本协方差矩阵中估计时，那么，对于取自训练集外的观测值，故障也能通过下式计算的阈值检测出来：

$$T_\alpha^2 = \frac{m(n-1)(n+1)}{n(n-m)} F_\alpha(m, n-m) \quad (4.14)$$

其中， $F_\alpha(m, n-m)$ 是指自由度为 m 和 $n-m$ 的 F 分布的上临界点。

4.2.2 SPE 统计法

SPE（平方预测误差）又称为 Q 统计量，所以此方法又称为 Q 统计法。我们知道 T^2 统计量对在 PCA 空间中与较小奇异值相对应的误差极为敏感，因为它直接测量沿着每一个负荷向量的变化。换句话说，它直接测量与较小奇异值相对应的得分。观测空间中与 $m-a$ 个最小奇异值相对应的那部分可以用 Q 统计量进行更强的鲁棒性监控。

$$Q = r^T r, r = (I - PP^T)x \quad (4.15)$$

这里 r 是残差向量，是观测值 x 到残差空间的投影。由于 Q 统计量不是直接测量沿着每个负荷向量的变化，而是测量残差空间的总变化量，所以 Q 统计量不受对较小奇异值的误差过度敏感的影响。Q 统计量是 2-范数的平方，用来度量测量值相对于低维 PCA 表示的偏差。

Q 统计量的分布可以按 Jackson 和 Mudholkar 的方法来近似求的：

$$Q_\alpha = \theta_1 \left[\frac{h_0 c_\alpha \sqrt{2\theta_2}}{\theta_1} + 1 + \frac{\theta_2 h_0 (h_0 - 1)}{\theta_1^2} \right]^{1/h_0} \quad (4.16)$$

这里 $\theta_i = \sum_{j=a+1}^n \sigma_j^{2i}$ ， $h_0 = 1 - \frac{2\theta_1\theta_3}{3\theta_2^2}$ ， c_α 是与 $(1-\alpha)$ 分位点对应的标准差。给定

显著性水平 α ，Q 统计量的阈值就可以用上式计算，它也可以用来检测故障。

4.3 基于 PCA 的 TEP 过程故障检测

前面介绍了利用 PCA 进行故障诊断的基本原理，接下来将 PCA 方法应用于 TE 过程进行故障诊断，在实际应用中来检验 PCA 方法的优劣性，为进一步的研究奠定基础。

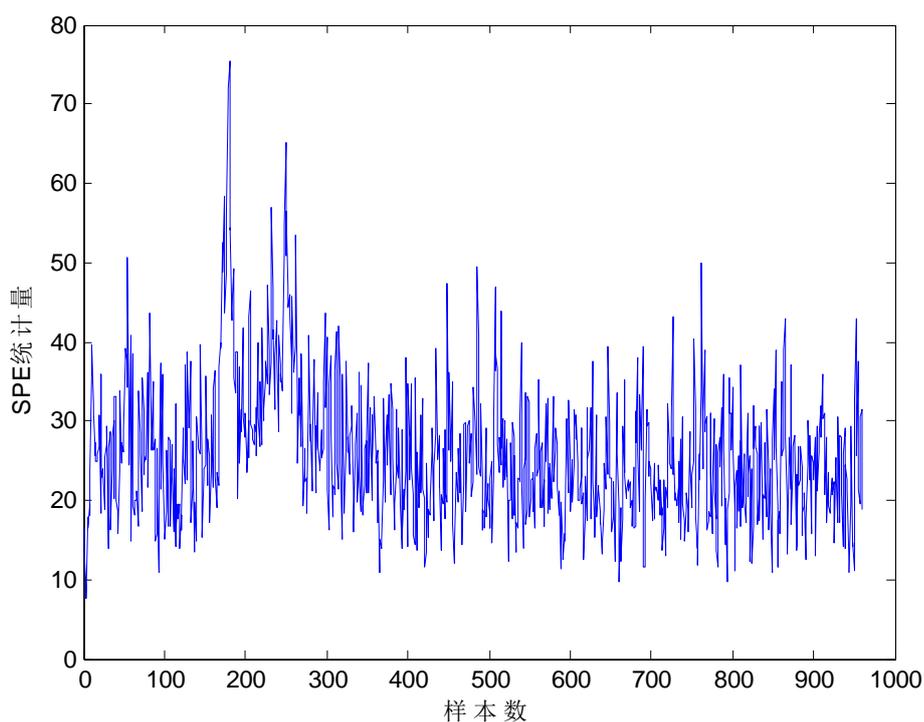


图 4.1 故障 1SPE 检测

上图是利用 PCA 方法对 TEP 过程的故障 1 进行检测的 SPE 图。当故障 1 发生时，在流 4 中的 A/C 进料比引起了一个阶跃变化，这导致在流 4 中 C 进料增加，而 A 进料减少。进一步导致再循环流 5 中 A 进料的减少，并且控制回路作用反应使流 1 中的 A 进料增加。随着时间的推移，这两种作用相抵消，这导致在足够长的时间之后流 6 中 A 进料的成分成为常数。

由于反应物 A 和 C 的比例发生变化，与物质平衡有关的变量(例如液位、压力、成分)的分配关系也会跟着改变。因为超过半数的监控变量明显地偏离了它们的正常运行特性，这样故障可以很容易地被检测出来。

由上图看出，第 160 个采样样本时引入故障，SPE 方法都能够准确及时地检测到故障。前 8 小时系统都为无故障模式运行状态，8 小时后引入故障，共计 960 个样本，前 160 个样本为正常样本，后 800 个为故障样本。从仿真图看出，SPE 方法对故障 1 都很敏感，并没有明显的误报和漏报。

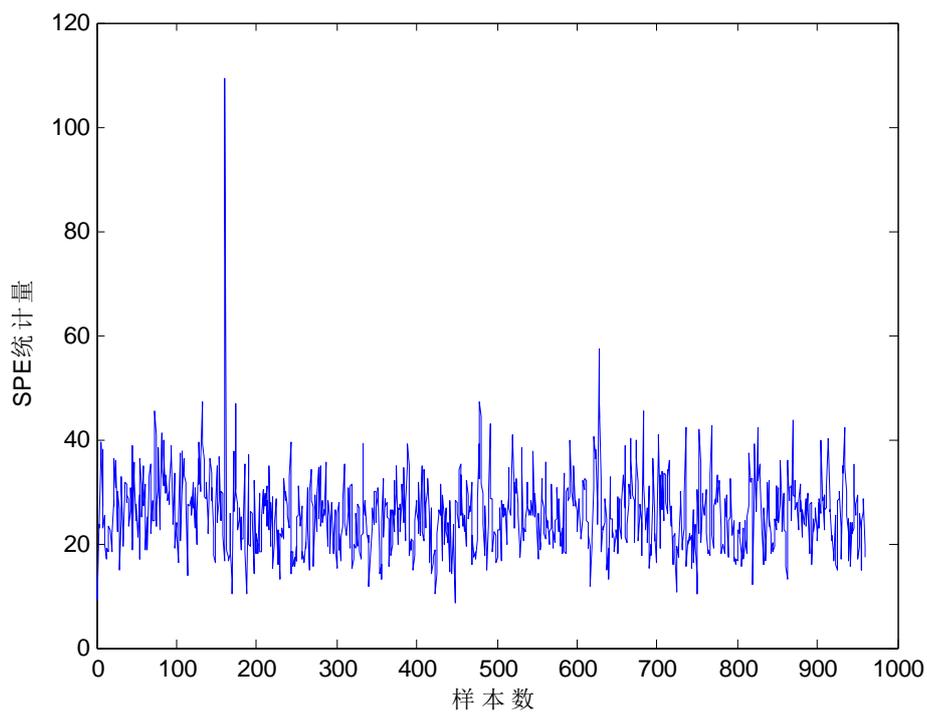


图 4.2 故障 4SPE 检测

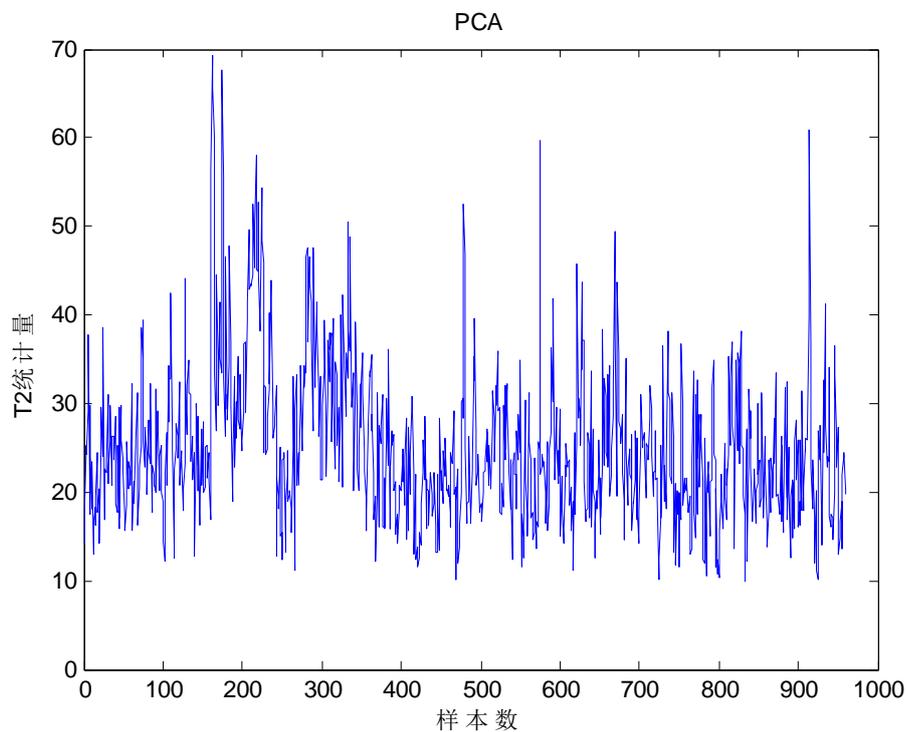


图 4.3 故障 4 T^2 检测

图 4.2 和 4.3 是故障 4 的故障检测结果,很明显 T^2 统计量很难检测出此故障,

出现了明显的误诊和漏诊现象。出现这种情况并不是偶然的，它是由系统本身的特点和代 A 方法本身的缺点所造成的。在 4.1 中我们知道 PCA 是一种线性降维技术，是按获取数据的变化度为最优的。它的基本方法就是构造原变量的线性组合，以产生一系列互不相干的新变量，从中选取少数几个新变量，使他们含有尽可能多的信息。而 TE 作为一个典型的化工过程，它具有复杂多变、非线性的特点。所以对于利用线性 PCA 方法对 TEP 过程进行故障检测时出现误报和漏报现象是正常的，也就是说 PCA 方法在非线性系统中对类似温度这样剧烈变化的强非线性变量所引起的故障进行检测时会失效，我们应该寻求更好的非线性方法。

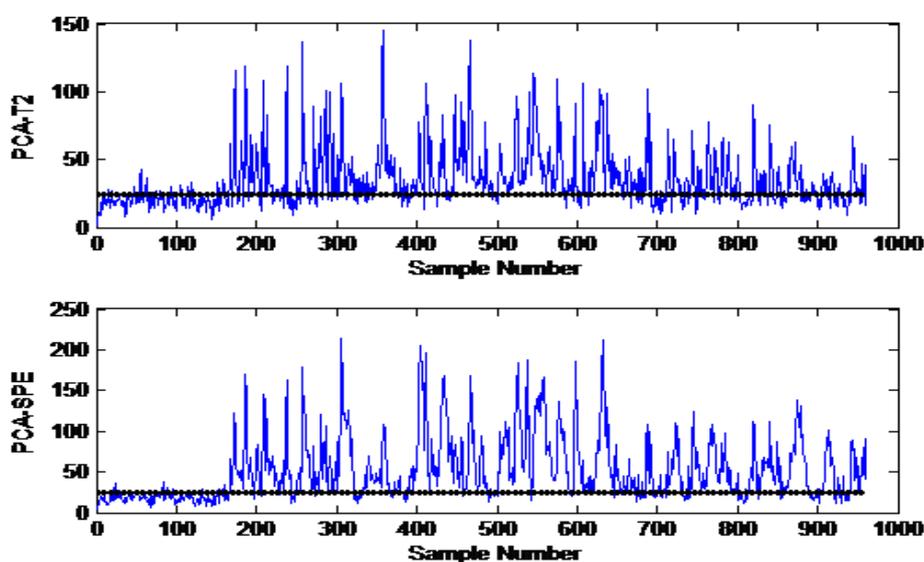


图 4.4 故障 11 的 SPE 和 T^2 统计量检测

故障 11 是反应器冷却水入口温度发生变化，与故障 4 所不同的是，故障 11 是一种随机变化。此故障的发生会引起反应器冷却水流速的很大震荡，进而使得反应器的温度所长生变化。图 4.4 是故障 11 的故障检测结果。

4.4 本章小结

本章重点研究了主元分析(PCA)方法及其在 TEP 过程故障检测中的应用。PCA 以是一种线性降维技术，是按获取数据的变化度为最优的，它忽略了过程数据中可能存在的非线性，最高阶的 PCA 向量可能不包含诊断故障所需要的判别力，而且在确定更低维度的表达式时，它没有考虑类之间的信息。从利用 PCA 方法对 TEP 过程进行故障检测的仿真研究中，证明了 PCA 方法在非线性过程中

故障检测效果差，甚至检测不出有些故障的发生，所以，需要对 PCA 方法做进一步的改进，这将在下一章进行描述。

PCA 方法在 TE 化工过程中的应用表明，PCA 不能直接应用于非线性系统，解决此问题的方法是围绕两点展开的：第一，对 PCA 方法进行改进；第二，将 PCA 方法与其它方法结合起来使用。

第五章 基于 RPCA 的故障诊断

第四章介绍了主元分析(PCA)方法,它是一种目前广泛应用于过程监控的数据驱动方法,但 PCA 是一种线性变换方法,当应用于非线性过程时其性能会大大降低。为了克服这一缺点,出现了各种不同的非线性 PCA 方法。其中, Yi Ma 和 Arvind Ganesh 等人提出的鲁棒主元分析方法 (Robust Principal Component Analysis, RPCA)是一种很有效的非线性过程故障诊断方法,具有类似于线性 PCA 的简单性,极具实用价值。

5.1 RPCA 基本原理

RPCA 的方法目前主要多见于图像处理方向,其优越的非线性性使其应用更为适应现在复杂的非线性分类问题。其基本思想如下:对于同一类故障数据阵,我们将其分解为一个低秩矩阵和一个稀疏残差矩阵的和;然后将这个非凸的优化问题,用一些列凸优化问题逼近求解。

5.1.1 RPCA 模型的建立

对于同一个故障的样本数据 d_1, d_2, \dots, d_n , 令 $D = [d_1, d_2, \dots, d_n]$ 为其构成的矩阵,则从理论上讲在允许的小的波动范围内矩阵 D 中每一个样本应该是近似线性相关的,从而存在一个变换 $\tau = [\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_n]$ 使得每一个 $d_i \circ \tau_i, i = 1, \dots, n$ 尽可能的线性相关,于是我们得到以下初步模型:

$$\min_{\tau, A} \text{rank}(A) \quad (5.1)$$

$$s.t. \quad D \circ \tau = A$$

下面引入残差阵来进一步刻画模型,令 e_j 为每一个样本 d_j 允许的残差,则矩阵 $\{d_j \circ \tau_j - e_j\}_{j=1}^n$ 应该为一个低秩矩阵(即极多的样本数据之间都是线性相关的),并且每一个残差之间都是相互独立的,从而我们可以将模型 5.1 进一步刻画为如下形式:

$$\min_{\tau, E, A} \text{rank}(A) \quad (5.2)$$

$$s.t. \quad D \circ \tau = A + E$$

$$\|E\|_0 \leq k$$

其中 $E = [e_1, e_2, \dots, e_n]$ 。这里 $\|\bullet\|_0$ 为记录残差矩阵 E 中非零数字的个数， k 为一个常数，代表了矩阵 D 中所有的有波动的数据个数总和。为了便于求解我们可以将上述模型表示为：

$$\min_{\tau, E, A} \text{rank}(A) + \gamma \|E\|_0 \quad (5.3)$$

$$s.t. \quad D \circ \tau = A + E$$

其中 γ 为拉格朗日参数。到此模型基本就建立完成，综上所述我们可知对于同一类故障数据阵，求解上述模型后，得到的残差矩阵中元素应该是相当小的数。

5.1.2 模型求解

模型的凸松弛：

在 5.3 中，容易知道此模型为一个非凸优化问题，已证实此问题为一个 NP-hard 问题，并且不容易逼近，要处理的第一步即是对此问题进行凸松弛，如果矩阵 A 的原型为一个秩不是很高的矩阵，且残差矩阵 E 中非零数的数值很小，我们根据已知文献[16]可以对模型 5.1 做以下转化：

$$\min_{\tau, E, A} \|A\|_* + \gamma \|E\|_1 \quad (5.4)$$

$$s.t. \quad D \circ \tau = A + E$$

其中 $\|A\|_* \approx \sum_{i=1}^m \sigma_i(A)$ ， $\sigma_i(A)$ 为矩阵 A 的奇异值， $\|E\|_1$ 为 E 中所有元素的绝对值之和（即， $\sum_{ij} |E_{ij}|$ ）。转化之后我们可以看出目标函数是一个非光滑，但为连续凸函数。

反复线性化：

在 5.4 中我们可以看出模型的约束条件为一个非线性约束条件，下面我们将

其转化为一组线性约束条件。当 τ 的变化很小的时候，我们可以用下述线性约束条件来逼近它。假设 G 是由 $\tau = [\tau_1 | \dots | \tau_n] \in R^{m \times n}$ 参数构成的 m 参数群，则对于 $\Delta\tau = [\Delta\tau_1 | \dots | \Delta\tau_n] \in R^{m \times n}$ ，我们有下面式子成立：

$$D \circ (\tau + \Delta\tau) \approx D \circ \tau + \sum_{i=1}^n J_i \Delta\tau_i \xi_i^T \quad (5.5)$$

其中 $J_i = \frac{\partial}{\partial \zeta} d_i \circ \zeta |_{\zeta=\tau_i} \in R^m$ 为第 i 个样本关于变换参数 τ_i 的 Jacobian 矩阵，

$\{\xi_i\}$ 为 R^n 的标准正交基。从上面的定义我们可以将模型 5.4 转为下面形式：

$$\min_{\tau, E, A} \|A\|_* + \gamma \|E\|_1 \quad (5.6)$$

$$s.t. \quad D \circ \tau + \sum_{i=1}^n J_i \Delta\tau_i \xi_i^T = A + E$$

由于模型的局部局限性，我们不渴望通过变化 $\tau + \Delta\tau$ 得到模型 5.4 的精确解，但是我们可以得到模型 5.4 的局部最小解。对于模型 5.6 我们可以用下面拉格朗日乘子法去计算。设 $h(A, E, \Delta\tau) = D \circ \tau + \sum_{i=1}^n J_i \Delta\tau_i \xi_i^T - A - E$ ，则拉格朗日函数为：

$$L_\mu(A, E, \Delta\tau, Y) = \|A\|_* + \lambda \|E\|_1 + \langle Y, h(A, E, \Delta\tau) \rangle + \frac{\mu}{2} \|h(A, E, \Delta\tau)\|_F^2 \quad (5.7)$$

其中 Y 为拉格朗日乘子矩阵， μ 为一个正常数， $\langle \cdot, \cdot \rangle$ 为两矩阵的内积， $\|\cdot\|_F$ 为 Frobenius 范数。

通过 AML 迭代算法求解上述优化问题，基本迭代函数如下：

$$\begin{aligned} (A_{k+1}, E_{k+1}, \Delta\tau_{k+1}) &= \arg \min_{A, E, \Delta\tau} L_{\mu_k}(A, E, \Delta\tau, Y_k), \\ Y_{k+1} &= Y_k + \mu_k h(A_{k+1}, E_{k+1}, \Delta\tau_{k+1}). \end{aligned} \quad (5.8)$$

可以看出上述迭代公式很难直接解决，一般情况下会做下面变化：

$$\begin{aligned} A_{k+1} &= \arg \min_A L_{\mu_k}(A, E_k, \Delta\tau_k, Y_k), \\ E_{k+1} &= \arg \min_E L_{\mu_k}(A_{k+1}, E, \Delta\tau_k, Y_k), \end{aligned}$$

$$\Delta\tau_{k+1} = \arg \min_{\Delta\tau} L_{\mu_k}(A_{k+1}, E_{k+1}, \Delta\tau, Y_k) \quad (5.9)$$

尽管上述每一步都是一个凸规划问题，但是根据已知文献知识，它们都具有各自相对有效的解决算法，大体步骤如下：

1、初始化： $(A^0, E^0, \Delta\tau^0) \in R^{m \times n} \times R^{m \times n} \times R^{m \times n}, \lambda > 0$ 。

2、迭代：

$$A_{k+1} = US_{\frac{1}{\mu_k}}[\Sigma]V^T;$$

$$E_{k+1} = S_{\frac{\lambda}{\mu_k}}[D \circ \tau + \sum_{i=1}^n J_i \Delta\tau_k \xi_i \xi_i^T + \frac{1}{\mu_k} Y_k - A_{k+1}];$$

$$\Delta\tau_{k+1} = \sum_{i=1}^n J_i^+(A_{k+1} + E_{k+1} - D \circ \tau - \frac{1}{\mu_k} Y_k) \xi_i \xi_i^T;$$

$$Y_{k+1} = Y_k + \mu_k h(A_{k+1}, E_{k+1}, \Delta\tau_{k+1}).$$

3、输出结果：为模型 5.6 输出 $(A^*, E^*, \Delta\tau^*)$

其中 $S_{\alpha}[x] = \text{sign}(x) \cdot \max\{|x| - \alpha, 0\}, \alpha \geq 0$ 。

5.2 仿真实验

第四章中我们做了 PCA 故障检测的仿真实验，我们知道 PCA 分类能力非常差，下面我们通过上面的模型对 RPCA 基于 TEP 做故障分类实验。

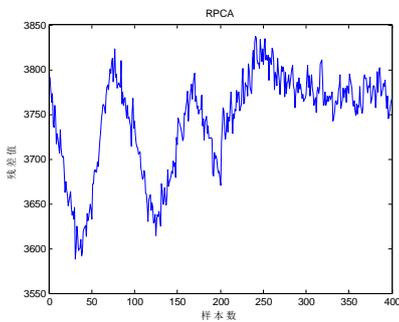


图 5.1 故障 1 和 2

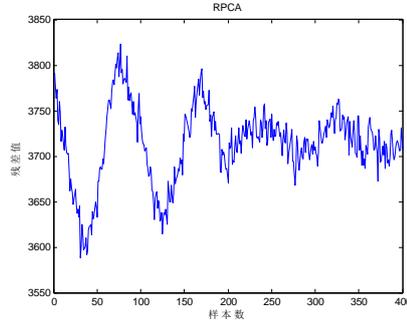


图 5.2 故障 1 和 4

图 5.1 是分别取了故障 1 和故障 2 的 200 个样本点，计算的检测率

为 0.9550 ($ratio = \frac{\text{第二类样本检测正确数}}{\text{第二类样本总数}}$), 从图像中可以看出符合这个

结果。图 5.2 为故障 1 和故障 4 的 RPCA 分类, 检测率为 0.6250, 对这样的结果, 我们做了一下分析, 对故障 1 和故障 4 我们知道每类故障样本都有 52 变量, 我们分别对比了 1 和 4 的没个变量的数值, 下面取部分对比图:

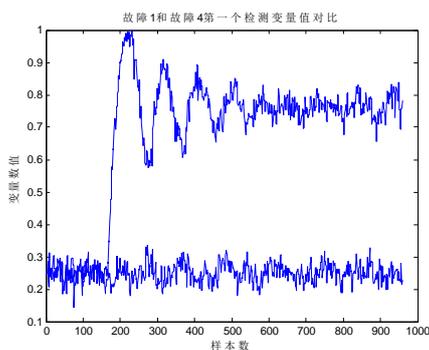


图 5.3

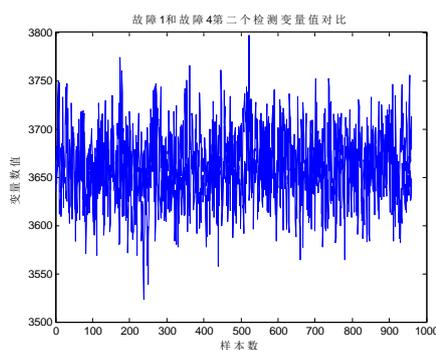


图 5.4

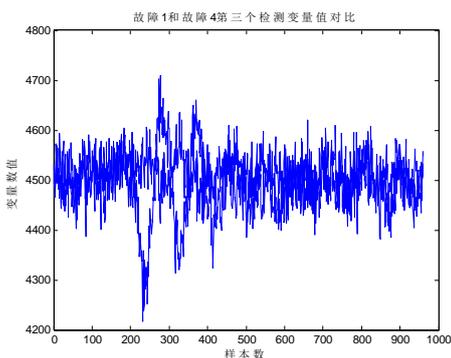


图 5.5

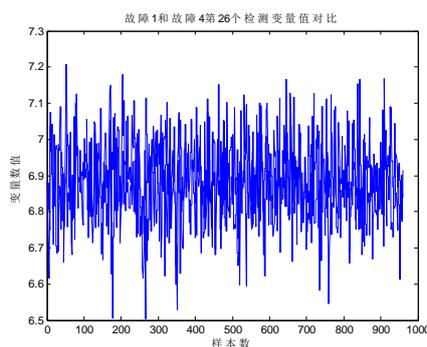


图 5.6

从上面变量值对比图可以看出故障 1 和故障 4 的很多变量的数值都很接近, 从而分类的时候比较困难。针对此, 我们从设想充分应用每类故障单个变量的信息, 对故障进行分类, 一种做法是分别提取残差矩阵的每一类进行上述处理, 但是效果不是很明显, 对于更好的刻画方法需要进步的研究。

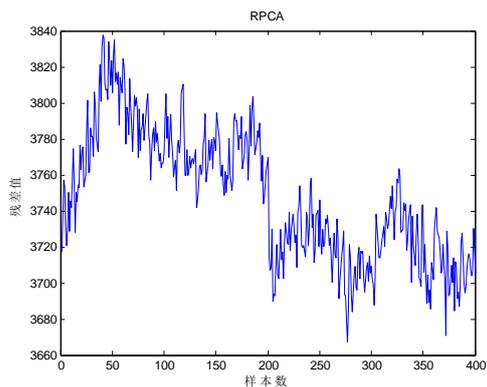


图 5.7 故障 2 和故障 4

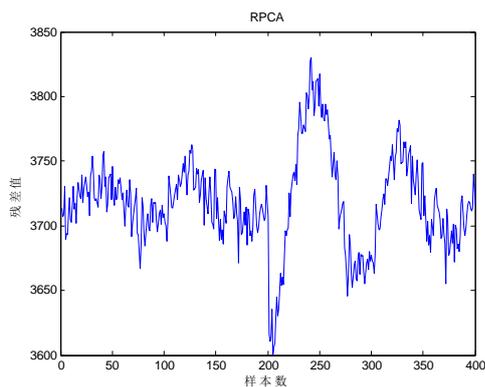


图 5.8 故障 4 和故障 5

其中故障 2 和故障 4 的检测率为 0.9551，而故障 4 和故障 5 的检测率为 0.5400。

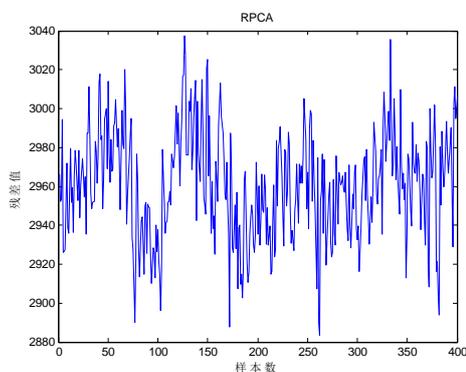


图 5.9 故障 4 和故障 16

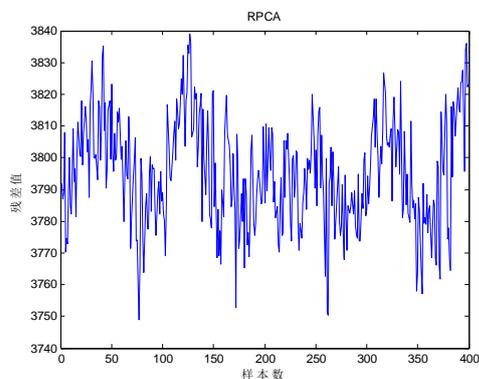


图 5.10 故障 4 和故障 16

上图显示的两个实验结果，都是对故障 4 和故障 16 的 RPCA 检测结果，图 5.9 是在 $\tau=10000$ 时候的结果，检测率为 0.4850，而我们调整 $\tau=1000$ 或更小的时候检测率为 0.5600，此外我们做了一些其他的相同类型的实验，结果都显示，每次实验都有一个比较合适的 τ ，这个值实验的时候通过尝试可以得到。

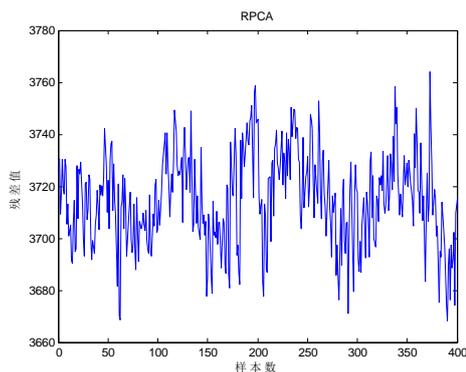


图 5.11 故障 16 和故障 17

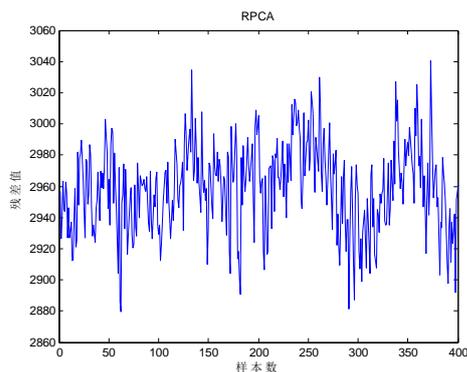


图 5.12 故障 16 和故障 17

上图为故障 16 和故障 17 的 RPCA 结果, 我们通过第三章中知道故障 16 和故障 17 在 TEP 中均为未知故障, 并且之前的文献中 TEP 实验都指出对于未知故障的检测通常的算法 (FDA, SVM 等) 检测率都很低, 图 5.11 中的检测率为 0.5400, $\tau=1000$, 图 5.12 的检测率为 0.5600, $\tau=10000$, 而当 $\tau=50000$ 时, 检测率为 0.4950。

5.3 本章小结

本章主要针对论述了 RPCA 的模型建立, 以及模型求解, 从模型建立的过程中, 我们可以看出 RPCA 优于 PCA, 其更适应现有复杂的化工系统, 模型求解过程中引入拉格朗日乘法, 分成多个目标求解, 并多次应用 SVD 求解。

实验部分我们只做了 RPCA 故障分类的实验, 其实不难想象, 应用 RPCA 可以像第四章中应用 PCA 一样做故障检测, 应为 RPCA 直接求出原有样本矩阵的低秩形式, 而不是想 PCA 那样借助于样本协方差阵, 同时 RPCA 没有线性的局限性, 故其做故障分类应该效果更佳。在做故障分类的时候, 我们刻画的标准, 为残差的均值, 此时对于未知故障 16-20 的检测率为 60% 左右, 相信如果找到合适的标准, 检测率将会得到进一步提高。

第六章 总结与展望

6.1 结论

本文回顾了多种故障诊断方法、过程模型和各种多变量统计方法，介绍了利用多变量平方预测误差法和 Hotelling 统计法进行故障检测的原理。论文将对主元分析法(Principle Component Analysis, PCA)进行故障诊断时存在的主要优缺点进行了研究和改进。针对 PCA/LDA/FDA/线性 SVM 等线性分析方法无法应用于非线性过程的缺点，提出了基于鲁棒主元分析法(Robust Principle Component Analysis, RPCA)进行故障诊断。RPCA 的求解是一个非线性的优化过程，通过矩阵秩的优化来计算和表示带有噪声信号的相关性。计算中需要对于样本数据所组成的矩阵进行低秩化(Low-rank)，进而计算出每一个样本对于低秩化矩阵内样本的误差并用于故障诊断。

论文针对 PCA 方法和 RPCA 方法开展研究，在(Tennessee Eastman Process, TEP)化工过程软件仿真平台上进行了仿真试验。试验结果表明了 PCA 方法对于故障检测的有效性。同时也表明了，对于复杂化工过程故障非线性，及数据信号有噪声和随机干扰的情况下，应用 RPCA 方法进行故障分类的可行性。

在 TEP 的仿真过程中，熟悉了 matlab 仿真的初步应用，并对 TEP 仿真程序做了一些调试，了解到 TEP 仿真过程中一些变量之间的关系，并通过文献搜集到 TEP 中 15 种故障的调试变量。

6.2 展望

尽管本文针对化工过程故障诊断进行了深入的研究，并针对 PCA 方法的主要缺点提出了改进的方法，在 TEP 化工过程中进行了仿真应用研究，也取得了较好的效果，并对应用 RPCA 做故障分类做了一些初步工作。但是，从目前的研究工作来看，笔者认为还有以下问题值得去研究：

TEP 仿真程序，TEP 作为现在故障诊断最为重要的仿真程序，应该

对其做更进一步了解，希望能添加一些更现代化的故障在里面，调试出更贴近于目前化工生产的故障，以便于研究。

关于 RPCA 的应用，本文只是对其在故障分类的应用做了初步的论述，RPCA 的优越性，相信它在故障诊断中会有更好的发展前景，比如：相对于 PCA 借助协方差阵，来提取主元信息，RPCA 直接运用了样本矩阵，从这一点可以看出，其在故障检测中的应用也大有潜力。

PLS、FDA、CVA 都是很有前途和实用意义的故障诊断方法，其中关于 PLS 和 CVA 的研究较少，所以，对这些方法进行研究具有深远的意义，应进行广泛而深入的研究。

参考文献

- [1] Schnaith M W, Sexson P A, True D R, et al. New cracking Processes have good reliability. *Oil&Gas Journal*, 1998, 96(25):53-56.
- [2] 周厚云, 赵正宏. 化工安全工作回顾与展望. *中国化工信息*, 2003, 17(18):A20.
- [3] Michiel Debruyne, Mia Hubert, Johan Van Horebeek. Detecting influential observations in Kernel PCA. *Computational Statistics and Data Analysis*, 2009, 18(8):1-13.
- [4] Gyeongyong Heo, Paul Gader, Hichem Frigui. RKF-PCA: Robust kernel fuzzy PCA. *Neural Networks*, 2009, 22:642-650.
- [5] Ji-Dong Shao, Gang Rong, Jong Min Lee. Learning a data-dependent kernel function for KPCA-based nonlinear process monitoring. *Chemical Engineering Research and Design*, 2009, 4:1-10.
- [6] SangWook Choi, Julian Morris, In-Beum Lee. Nonlinear multiscale modeling for fault detection and identification. *Chemical Engineering Science*, 2008, 63: 2252-2266.
- [7] Yingwei Zhang. Enhanced statistical analysis of nonlinear processes using KPCA, KICA and SVM. *Chemical Engineering Science*, 2009, 64:801-811.
- [8] 周海英, 周健. 化工设备故障诊断仿真模型设计及计算分析. *计算机与现代化*, 2008, 10:98-101.
- [9] 谷雷, 杨青, 王大志. 基于小波分析与概率神经网络的化工过程故障诊断. *工业仪表与自动化装置*, 2008, 3:8-11.
- [10] J.E. Jackson, *A User's Guide to Principal Components*, Wiley, New York, 1991.
- [11] T. Kourti, J.F. MacGregor, *J. Quality Technol.* 28(1996) 409-428.
- [12] J.F. MacGregor, *Proc. of the IFAC Conference on Advanced Control of Chemical Processes*, Pergamon Press, New York, 1994, pp. 427-435.
- [13] A.C. Raich, A. Cinar, *Proc. of the IFAC Conf. on Advanced Control of Chemical Processes*, Pergamon, New York, 1994, pp. 427-435.

- [14] A.C. Raich, A. Cinar, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* 30 (1995)37–48.
- [15] A.C. Raich, A. Cinar, *AIChE J.* 42(1996)995–1009.
- [16] J. Zhang, E. Martin, A.J. Morris, *Proc. of the American Control Conf.*, IEEE Press, Piscataway, NJ, 1995, pp. 751–755.
- [17] K.A. Kosanovich, M.J. Piovoso, K.S. Dahl, J.F. MacGregor, P. Nomikor, *Proc. of the American Control Conf.*, IEEE Press, Piscataway, NJ, 1994, pp. 1294–1298.
- [18] M.J. Piovoso, K.A. Kosanovich, R.K. Pearson, *Proc. of the American Control Conf.*, Piscataway, IEEE Press, NJ, 1992, pp. 2359–2363.
- [19] M.J. Piovoso, K.A. Kosanovich, *Int. J. Control* 59(1994)743.
- [20] B.M. Wise, N.B. Gallagher, *J. Process Control* 6(1996) 329–348.
- [21] Scholkopf, B. Smola, A. J., & M. J. L. (1998). Nonlinear component analysis as a kernel eigenvalue problem. *Neural Computation*, 10(5), 1299–1319.
- [22] Cho, J. H., Lee, J. M., Choi, S. W., Lee, D., & Lee, I. B. (2005). Fault identification for process monitoring using kernel principal component analysis. *Chemical Engineering Science*, 60, 279–288.
- [23] John Wright, Wenli Xu, and Yi Ma. RASL: Robust Alignment by Sparse and low-rank Decomposition for Linearly Correlated Images. Manuscript Submitted to *IEEE Trans. PAMI*, July 2010.
- [24] Arvind Ganesh, Zhouchen Lin, Yi Ma. Fast Algorithms for Recovering a Corrupted Low-Rank Matrix. 2009 3rd IEEE International Workshop on Computation Advances in Multi-Sensor Adaptive Processing.
- [25] R.O. Duda, P.E. Hart, *Pattern Classification and Scene Analysis*, Wiley, New York, 1973.
- [26] R. Hudlet, R. Johnson, in: J. Van Ryzin Ed. ., *Classification and clustering*, Academic Press, New York, 1977, pp. 371–394.

-
- [27] B.K. Alsberg, R. Goodacre, J.J. Rowland, D.B. Kell, *Analytica Chimica Acta* 348(1997)389–407.
- [28] M. Defernez, K. Kemsley, *Trends in Analytical Chemistry* 16(1997)216–221.
- [29] J. Nouwen, F. Lindgren, W. Karcher, B. Hansen, H.J.M. Verharr, J.L.M. Hermens, *Environ. Sci. Technol.* 31(1997)2313–2318.
- [30] E.K. Kemsley, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* 33 1996. 47–61.
- [31] D.F. Specht, “A General Regression Neural Network” , *IEEE Trans on Neural Networks*, vol.2, no.6, pp.568-76, Nov, 1991.
- [32] Huajing Fang, Hao Ye, Maiying Zhong. “Fault diagnosis of networked control systems”, Received 5 October 2006; accepted 21 January 2007, Available online 25 April 2007.
- [33] M. Orchard, B. Wu, and G. Vachtsevanos, “A Particle Filter Framework for Failure Prognosis” , *Proceedings of World Tribology Congress III*, Washington D C, Sept. 12-16, 2005.
- [34] M. Orchard, G. Kacprzyński, K. Goebel, B. Saha, and G. Vachtsevanos, “Advances in Uncertainty Representation and Management for Particle Filtering Applied to Prognostics,” 2008 International Conference on Prognostics and Health Management PHM 2008, Denver, CO, USA, October 9 - 12, 2008.
- [35] M. Orchard, *On-line Fault Diagnosis and Failure Prognosis Using Particle Filters. Theoretical Framework and Case Studies*, Publisher: VDM Verlag Dr. Müller Aktiengesellschaft & Co. KG, Saarbrücken, Germany, April 2009, 108 pages. Atlanta: The Georgia Institute of Technology, Diss., 2007.
- [36] M.E. Orchard, Liang Tang, Kai Goebel, and George Vachtsevanos, “A Novel RSPF Approach to prediction of high-risk, low-probability failure events” *Annual Conference of the Prognostics and Health Management Society*, 2009.
- [37] W.E. Vesely, F.F. Goldberg, N.H. Roberts, D.F. Haasl, *Fault Tree Handbook*.

- [38] Laukonen E G, Passino K M, et al, Faultdetectionandios lation foran expe
rimentalintentr alcombustion engineviafuzzyidentification[J]. IEEETrans Cont
rol SystemsTeChnology, 1995, 3(3): 347—355.
- [39] Patton R J, ChenJ, Lopez—Toribio C J. Fuzzy observers for nonlinear
dynamic systems fault diagnosis[A]. IEEE oC nfDecisionando Control[C]Fl
oirda. USA: Tampa. 1998.
- [40] Ball P. Isermann R. Fault detection and isolation for nonlinear process b
ased on local linear fuzzy models and parameter estimation [A]. American
ControlConf[C]. Pennsylvania, USA: Philadelphia, 1998.
- [41] Srinivasan A, Batur C. Hopfield / ART-1neural net-work- based fault dete
ction and ioslation [J]. IEEE Trans Neural Net works, 1994, 5(6): 890—8
99.
- [42] WitczakM, Obucbowicz A Korbicz J. Genetic programming based approac
hes to identification and fault diagnosis of nonlinear dynamic systems [J]. I
nt J Control, 2oo2, 75(13): 1012—1031.
- [43] JocntgenA, MikeninaL, et al. Automatic fault detection in gear boxes by d
ynamic fuzzy data analysis [J]. Fuzzy Sets and Systems, 1999, 105(1): 1
23—132.
- [44] ZhaoJ S, Chen B Z, et al. Multidimensional non-or-thogonal Wavelet-sigm
oid basis function neural net-work for dynamic process fault diagnosis
[J]. Computers&Chemical Engineering, 1998, 23(1)83-92.
- [45] Fuessel D, Isermann R. Hierarchical motor diagnosis utilizing structural k
nowledge and a self-learning neuro-fuzzy scheme [J]. IEEE Trans Industria
l Electronics, 2000, 47(5): 1070—1077.
- [46] DOWNS, J. J. and E. F. VOGEL (1993). “A plant-wide industrial control
problem”. Comput. Chem.Engng., 17, pp. 245—255.
- [47] LYMAN, C., P. R AND; GEORGAKIS (1995). “Plant-wide control of the
tennessee eastman problem”.Comput. Chem. Engng., 19, pp. 332—331.

- [48] MCAVOY, T. J. and N. YE (1994).“Base control for the tennessee eastman problem”. *Comput. Chem.Engng.*, 18, pp. 383–413.
- [49] Bian Zhaoqi,Zhang Xuegong.*Pattern Recognition*.Beijing:Tsing Hua University Publisher,2000.
- [50] 何菲, 杜文莉, 钱峰.PCA_SVM 的多故障分类方法在 TEP 过程中的应用.*计算机与应用化学*.2010.Vol.27,No.10.
- [51] Fisher R.A., The utilization of multiple measurements in taxonomic problems[J], *Aanals of Eugenics*,1936,7(2):179-188.
- [52] Chiang L.H., Ruddell E.L.and Braatz R.D., *Fault Detection and Diagnosis in Industrial Systems*[M],London:Springer-Verlag,2001.
- [53] Ching L.H., Ruddell E.L.and Braatz R.D., Fault diagnosis in chemical processes using fisher discriminant analysis,discriminant partial least squares,and principal component analysis[J],*Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*,2000,50(2):243-252.

致 谢

在中国科学院研究生院攻读硕士学位三年的学习生活中，我经历了诸多坎坷，也付出了艰辛的努力，同时也得到了很大的收获。在毕业论文完成之际，由衷地感谢这三年来曾经给予我无数帮助的老师、同学、朋友和家人。

本课题的研究工作是在焦建彬教授和叶齐祥副教授的悉心指导下完成的。首先，我要感谢导师叶齐祥老师在我攻读硕士学位期间从理论和实验方面给予的大量的、极其有益的指导和他在我论文的撰写和修改中倾注的心血，感谢焦建彬教授在我的学习中对我每一点进步的指导和鼓励，在生活和思想上对我的关心和帮助。两位恩师在科研上精益求精，在学术上认真严谨，是真正的科学工作者。

其次，感谢张思华老师和韩为民老师在我精神状态低迷的时候，给了我极大的鼓舞，感谢陈孝罡师兄、张立国师兄和彭艺师姐在两年的学习与生活中对我的极大帮助，他在理论学习和项目开发过程中给我提供了耐心的引导和帮助。感谢我的好友吴善杰，唐理鼎，周克成以及实验室的兄弟姐妹，三年的科研生活中大家在忐忑时互相鼓励，在瓶颈时献计献策，在茫然时互相提点。这些一起度过的日子在我记忆中永远不会褪色。

感谢我的父母，他们给了我巨大的、无私的爱和永远无条件支持，永远是我最强后盾和避风的港湾。

感谢参加开题及中期评阅的各位老师和专家们，他们丰富的经验和无私的工作对论文方向和研究进度的把握和指点给整个研究工作带来了巨大的帮助。

最后，感谢参加论文评审和答辩的各位老师。

于东升

2012 年 4 月

附录

RPCA部分代码:

```
Function [A,E,Y] = singular_value_rpca( D, lambda, tau, delta, svdMethod, A0)
```

```

VERBOSE                                = 2;
EPSILON_PRIMAL                          = 5e-4;
if nargin < 5, svdMethod = 'svd';
    end
if nargin < 4, delta = 0.9;
end;

if nargin < 3, tau = 1e4;
end;

MAX_ITER                                = 25000;
DISPLAY_EVERY                            = 100;
[m,n] = size(D);
Y = zeros(m,n); % Lagrange multiplier
A = zeros(m,n); % Structure
E = zeros(m,n); % Error
rankA = 0;
iter = 0;
converged = false;
while ~converged
    iter = iter + 1;
    switch lower(svdMethod)
        case 'svdlibc'
            [U diagS V] = svdlibc(Y, rankA+1);
        case 'propack'
            [U,S,V] = lansvd(Y,rankA+1,'L');

```

```

diagS = diag(S);
case 'svds'
    [U, S, V] = svds(Y, rankA+1, 'L');
    diagS = diag(S);
otherwise
    [U,S,V] = svd(Y,0);
    diagS = diag(S);
end

A = U * diag(pos(diagS-tau)) * V';
E = sign(Y) .* pos( abs(Y) - lambda*tau );
M = D - A - E;

rankA = sum(diagS>tau);
cardE = sum(sum(double(abs(E)>0)));

Y = Y + delta * M;
if VERBOSE > 1 && mod(iter, DISPLAY_EVERY)==0 && nargin>=6,
    disp(['    Iteration '    num2str(iter)                ...
          '|A|_F '        num2str(norm(A,'fro'))          ...
          'rank(A) '      num2str(rankA)                  ...
          '|E|_F '        num2str(norm(E,'fro'))          ...
          '|E|_0 '        num2str(cardE) ...
          '|D-A-E|_F '    num2str(norm(M,'fro')) ...
          '|A-A0|_F / |A0|_F ' num2str(norm(A-A0,'fro')/norm(A0,'fro')) ...
          '|D-A-E|_1,inf ' num2str(max(max(abs(M)))) ]);
elseif VERBOSE > 0 && mod(iter, DISPLAY_EVERY)==0,
    disp(['    Iteration '    num2str(iter)                ...
          'rank(A) '        num2str(rankA) ...

```

```
        '||E||_0 ' num2str(cardE) ]);  
end  
  
if ( norm(D-A-E,'fro')/norm(D,'fro') < EPSILON_PRIMAL || iter >= MAX_ITER )  
    converged = true;  
end  
if ( iter >= MAX_ITER )  
    disp('Maximum number of iterations reached.' );  
end  
end
```

基于RPCATEP故障诊断的部分代码:

```

Train = load('4_200.txt');
Test  = load('5_200.txt');
D     = [Train',Test'];
    lambda = 0.1;
tau = 1000;
    delta = 0.1;
    svdMethod = 'svds';

    %%%%%%%%%%%%%%%RPCA 主程序
[A, E, Y] = singular_value_rpca(D,lambda,tau,delta,'svds',1);
    %%%%%%%%%%%%%%%计算残差
s = size(D);
EE = zeros(s(1),1);

for i = 1:s(1)
    for j = 1:s(2)
        EE(i,1) = EE(i,1)+E(i,j)*E(i,j);
    end
    EE(i,1) = sqrt(EE(i,1));
end

s1 = size(Train);
s2 = size(Test);
s11 = s1(1);
s22 = s2(1);
M1_E = 0;
for i = 1:s11
    M1_E = M1_E+ EE(i);
end
    
```

```
M1_E = M1_E / 200;
M2_E = 0;
for i = s11+1:(s11+s22)
    M2_E = M2_E+ EE(i);
end

M2_E = M2_E / 200;
LL = zeros(s22,1);
Correct = 0;
for i = 1:s22
    if( abs(EE(i+s11,1)-M1_E) > abs(EE(i+s11,1)-M2_E))
        LL(i,1) = 2;
        Correct = Correct+1;
    else
        LL(i,1) = 1;
    end
end
ratio = Correct / s22
```

PCA故障检测部分代码:

```
function [DS2, eigVec, eigValue, Q]=pca(A)
if nargin<2, eigVecNum=min(size(A));
end
数据标准化%
A_mean=mean(A);
A_std=std(A);
d=size(A,1);
n=size(A,2);
for i=1:d;
    A(i,:)=(A(i,:)-A_mean)./A_std;
end
if n>=d
    [eigVec, eigValue]=eig(A*A');
    eigValue=diag(eigValue);
    % ===== Sort based on descending order
    [eigValue, index]=sort(eigValue, 'descend');
    eigVec=eigVec(:, index(1:eigVecNum));
    eigValue=eigValue(1:eigVecNum);
else
    [eigVec, eigValue]=eig(A'*A);
    eigValue=diag(eigValue);
    % ===== Sort based on descending order
    [eigValue, index]=sort(eigValue, 'descend');
    eigVec=eigVec(:, index(1:eigVecNum));
end
percent=0.85;
k=0;
for i=1:size(eigValue)
```

```
alpha(i)=sum(eigValue(1:i))/sum(eigValue);
if alpha(i)>=percent
    k=i;
    break;
end
end
P=eigVec(:,1:k);
SPE统计量%
figure(1);
for i=1:size(A,1)
    spe(i)=A(i,:)*(eye(size(A,2))-P*P')*A(i,:);
end
plot(spe);
r=A-A*P*P';
Q=r'*r;
```