

基于GMM和贝叶斯推理的多模态过程运行状态评价

邹筱瑜¹, 常玉清^{1†}, 王福利^{1,2}, 周 阳³

(1. 东北大学 信息科学与工程学院, 辽宁 沈阳 110819;

2. 东北大学 流程工业综合自动化国家重点实验室, 辽宁 沈阳 110819;

3. 辽宁红沿河核电有限公司, 辽宁 大连 116319)

摘要: 为使综合经济效益最大化, 生产过程应保持在最优运行状态等级. 针对多模态过程运行状态等级优劣判断问题, 提出一种运行状态等级评价方法. 该方法对同一运行状态等级的多模态数据建立一个高斯混合模型(Gaussian mixture model, GMM), 确保特征提取的准确性, 避免模态划分问题. 至于在线评价策略, 本文采用贝叶斯推理, 确定当前运行状态属于各等级的后验概率. 并引入滑动窗口, 判定当前运行状态等级, 有效解决多模态过程运行状态在线评价问题. 针对“非优”运行状态, 本文提出一种基于变量偏导数的贡献计算方法, 对导致过程运行状态等级“非优”的原因变量进行追溯. 最后, 通过田纳西-伊斯曼(Tennessee-Eastman, TE)过程验证所提方法的有效性.

关键词: 多模态过程; 运行状态评价; 非优原因追溯; 高斯混合模型; 贝叶斯理论

中图分类号: TP277 文献标识码: A

Operation performance assessment for multimode processes based on GMM and Bayesian inference

ZOU Xiao-yu¹, CHANG Yu-qing^{1†}, WANG Fu-li^{1,2}, ZHOU Yang³

(1. College of Information Science and Engineering, Northeastern University, Shenyang Liaoning 110819, China;

2. State Key Laboratory of Synthetical Automation for Process Industries (Northeastern University), Shenyang Liaoning 110819, China;

3. Liaoning Hongyanhe Nuclear Power Co., LTD, Dalian Liaoning 116319, China)

Abstract: To maximize the comprehensive economic benefits of enterprises, the production process ought to be kept in the optimal operating performance grade. To solve the problem of process state judgement for multimode processes, a novel operation performance assessing approach is proposed in this paper. One Gaussian mixture model (GMM) is established for a same running grade with multi modes in this article, ensuring the precision of feature extraction and avoiding mode division. As to online evaluation strategy, Bayesian inference is applied to calculate the Posterior probability of the current performance belonging to each grade. Sliding window is then introduced to help determine the running state. The proposed method turns to be an effective solution to the multi-modal process operating performance optimality online assessment. A novel variable contribution calculation technique is subsequently put forward, in the form of partial derivatives, which is successfully applied to cause identification when the performance is assessed to be non-optimal. Finally the validity of the proposed approach is illustrated through TE process.

Key words: multimode process; operating performance assessment; nonoptimal cause identification; Gaussian mixture model (GMM); Bayesian inference

1 引言(Introduction)

良好的过程运行状态, 保证企业收益, 减少维护成本, 增大综合经济效益. 因此, 掌握生产过程的运行状态, 变得至关重要. 对过程优劣程度做出准确在线评价与原因追溯, 有助于现场操作人员判断产品状态, 调整生产, 获取更高综合经济效益.

传统的过程监测方法只能识别过程运行正常与否,

无法对过程运行状态好坏程度作出判断^[1]. 因此, 需要建立过程运行状态等级在线评价机制. 此外, 由于工况变化、生产策略调整等原因, 过程常运行于不同稳定工作点, 即呈现出多模态特性. 建立对多模态过程适用的运行状态最优性在线评价策略是一个难点, 相关文献较少.

目前, 学者们对于过程运行状态优劣评价方法做

收稿日期: 2015-05-05; 录用日期: 2015-10-09.

†通信作者. E-mail: changyuqing@ise.neu.edu.cn; Tel.: +86 24-83681106.

本文责任编辑: 阳春华.

国家自然科学基金项目(61533007, 61374146, 61174130, 61304121)资助.

Supported by National Natural Science Foundation of China (61533007, 61374146, 61174130, 61304121).

了一定研究. 过程危害分析法(process hazards analysis, PHA)^[2]是常用的基于过程知识的评价方法. 针对于小样本情况, 研究者提出灰色关联分析法(grey relational analysis, GRA)^[3-4]. 神经网络(artificial neural networks, ANN)^[5-7]有较强学习能力, 能表达变量与指标间的映射关系, 在非线性过程运行状态评价中有一定应用. Liang等^[8]、Wei等^[9]、Yi等^[10]和Liu等^[11]将模糊理论应用到了过程评价当中. 模糊评价(fuzzy assessment)方法的准确性很大程度上依赖于隶属函数和隶属度评价阈值 θ 的选取. Lin^[12]提出了一种基于样本点和模态中心马氏距离的多模态过程运行状态评价方法, 实现了对生产过程的安全性评价. Liu^[13-14]等提出基于指标预测的多模态过程评价方法, 此类方法要求获取每个建模数据的指标值.

在正常运行前提下, 针对多模态过程运行状态最优性评价和相应“非优”原因追溯问题, 本文提出基于GMM和贝叶斯推理的过程运行状态等级评价和“非优”原因追溯方法. 基于任意概率密度函数都可以由混合模型近似的理论, 在数据覆盖过程所有运行模态和等级的基础上, 本文提出, 用不同高斯混合模型分别提取每个运行状态等级特性, 获取各等级数据概率密度函数. 本方法不需对运行模态进行划分, 能准确提取多峰分布过程的特性, 避免多元统计方法难以避免的模态误划分问题. 高斯混合模型本身还具有一定鲁棒性, 建模数据中存在少数不同特性的数据时, 不会影响整体数据分布; 只有当不同特性的数据量大到一定程度时, 才会改变当前数据分布. 当过程特性确实发生较大改变时, 可应用模型更新方法, 对过程重新建立分布模型. 针对在线评价过程, 用贝叶斯理论求出在线数据来自各等级的后验概率, 将其与相应阈值进行比较, 对过程运行状态等级做出在线评价. 若评价结果为“非优”运行状态等级, 用本文提出的追溯方法进行原因变量追溯. 最后, 将所提方法应用于TE过程中, 验证该方法有效性.

2 多模态过程运行状态评价(Operation performance assessment for multimode process)

2.1 离线建模(Offline modeling)

本文在过程正常运行的前提下, 对过程运行状态好坏程度做出评价, 正常数据的噪声水平不会超过一定范围. 多模态过程包括稳定模态和过渡模态, 多模态过程数据不服从单高斯分布. 某一等级稳定模态的数据, 在一定范围内波动, 近似服从单高斯分布. 某一等级过渡模态的数据, 具有动态特性, 近似服从多高斯分布. 因此, 本文用高斯混合模型来描述一个等级数据的分布.

在实际生产中, 通过综合经济效益, 可以将运行状态分为若干等级, 得到各种等级的数据. 但是, 划分运

行模态很困难. 每个等级内的数据可能来自多个模态, 基于单峰分布假设的特征提取方法不再适用. 此时, 分别用一组高斯混合模型来描述各等级数据的分布, 避免模态划分问题.

假设通过离线分析, 覆盖所有运行模态的过程历史数据根据过程运行状态指标范围被划分为不同等级. 过程运行状态等级数目和种类需根据评价精度来划分.

针对多模态过程特征提取, 传统方法利用数据相似度划分模态, 对每个子模态各自建立模型^[15-16]. 此类模态划分方法存在以下两个问题: 1) 相似度阈值选取尚无理论指导; 2) 硬化分方法可能导致模态误划分.

本文提出, 对同一运行状态等级的多模态数据建立一个GMM, 刻画该等级内多模态过程特性, 避免模态划分, 减少模型数量. 现以两个运行状态等级, “优”和“非优”为例, 阐述所提方法, 示意图如图1.

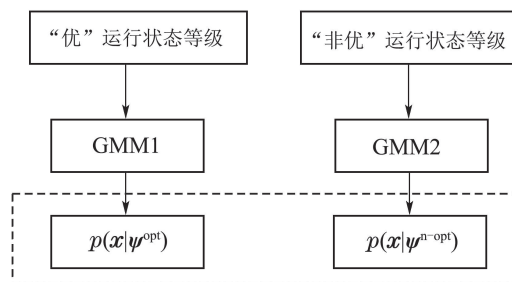


图1 方法示意图

Fig. 1 Schematic diagram of the proposed approach

在离线建模中, 不同分布对所需数据要求不一样, 但生产数据数量一般能足以描述其分布特性. 历史数据构成二维矩阵 $\mathbf{X}(M \times N)$, M 为过程变量数, N 为样本数. 如图2所示, 用长度为 H 的切割窗口内数据均值来代表该切割窗口的信息. 利用切割窗内数据均值代表该切割窗口的信息, 在一定程度上克服了噪声的影响, 使此均值更能反映切割窗口内的主要信息. 切割窗口选取不慎, 可能减缓、消除数据变化趋势, 使窗口均值反而不能体现数据特征. 本文选取的切割窗口长度, 通常远小于稳定模态和过渡模态长度. 正常情况下, 过程特性不会发生突变. 因此, 即使某切割窗口包含了两个模态数据, 这两种数据特性也非常相似. 因此, 取切割窗口内均值来代表该窗口的信息, 不会造成运行状态等级评价的误判断.

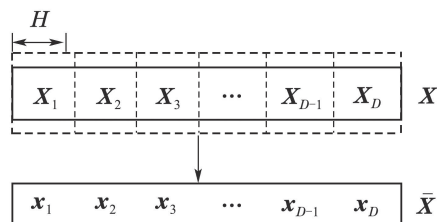


图2 建模数据构成示意图

Fig. 2 Illustration of modeling data construction

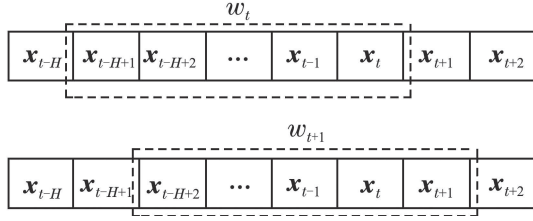


图3 滑动窗口示意图

Fig. 3 Illustration of sliding window

\mathbf{X} 被分割为一系列片段 $\mathbf{X} = [\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \dots, \mathbf{X}_D]$, 假设一共为 D 个片段, 其中 $\mathbf{X}_d = (\mathbf{x}[(d-1)H+1], \dots, \mathbf{x}[(d-1)H+H])_{M \times H} (d=1, 2, \dots, D)$. 将每个切割片段变量均值的集合 $\bar{\mathbf{X}} = [\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_D]$ 作为建模数据.

\mathbf{x} 来自一个多模态过程, $\mathbf{x} \in \bar{\mathbf{X}}$, 该过程根据运行状态指标值划分为“优”和“非优”两个等级, 分别用 G^{opt} 和 $G^{\text{n-opt}}$ 来表示. 基于GMM的两个运行状态等级的概率密度函数 $p(\mathbf{x}|\psi^{\text{opt}})$ 和 $p(\mathbf{x}|\psi^{\text{n-opt}})$ 分别表示为

$$p(\mathbf{x}|\psi^{\text{opt}}) = \sum_{k=1}^{K^{\text{opt}}} \omega_k^{\text{opt}} g(\mathbf{x}|\theta_k^{\text{opt}}), \quad (1)$$

$$p(\mathbf{x}|\psi^{\text{n-opt}}) = \sum_{k=1}^{K^{\text{n-opt}}} \omega_k^{\text{n-opt}} g(\mathbf{x}|\theta_k^{\text{n-opt}}), \quad (2)$$

其中:

$$g(\mathbf{x}|\theta_k^{\text{opt}}) = \frac{1}{(2\pi)^{M/2} |\Sigma_k^{\text{opt}}|^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mu_k^{\text{opt}})^T (\Sigma_k^{\text{opt}})^{-1} (\mathbf{x} - \mu_k^{\text{opt}})\right], \quad (3)$$

$$g(\mathbf{x}|\theta_k^{\text{n-opt}}) = \frac{1}{(2\pi)^{M/2} |\Sigma_k^{\text{n-opt}}|^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mu_k^{\text{n-opt}})^T (\Sigma_k^{\text{n-opt}})^{-1} (\mathbf{x} - \mu_k^{\text{n-opt}})\right]. \quad (4)$$

参数 $\psi_k^{\text{opt}} = \{\omega_k^{\text{opt}}, \mu_k^{\text{opt}}, \Sigma_k^{\text{opt}}\}$ 分别表示 G^{opt} 第 k 个高斯成分的先验概率、均值和协方差; $\psi_k^{\text{n-opt}} = \{\omega_k^{\text{n-opt}}, \mu_k^{\text{n-opt}}, \Sigma_k^{\text{n-opt}}\}$ 分别表示 $G^{\text{n-opt}}$ 第 k 个高斯成分的先验概率、均值和协方差;

$$\theta_k^{\text{opt}} = \{\mu_k^{\text{opt}}, \Sigma_k^{\text{opt}}\}, \theta_k^{\text{n-opt}} = \{\mu_k^{\text{n-opt}}, \Sigma_k^{\text{n-opt}}\};$$

K^{opt} 和 $K^{\text{n-opt}}$ 分别表示 G^{opt} 和 $G^{\text{n-opt}}$ 中高斯分量数目.

GMM的参数 ψ_k^{opt} 和 $\psi_k^{\text{n-opt}}$ 可用EM算法来求取^[17], 此时, K^{opt} 和 $K^{\text{n-opt}}$ 需根据过程知识提前确定. 在没有相关先验知识的情况下, G^{opt} 和 $G^{\text{n-opt}}$ 的高斯分量数目和模型参数可通过改进的EM算法—F-J算法求取^[18].

2.2 多模态过程运行状态在线评价(Operation performance grade online assessment for multi-mode processes)

在线评价中, 首先根据贝叶斯理论, 求出当前时刻属于各运行状态等级的后验概率. 通过比较后验概率大小, 判断过程运行状态等级.

引入滑动窗口, 如图3所示, 在时刻 t , 长度为 H 的滑动窗口 w_t 包括第1排虚线框内的样本; 在时刻 $t+1$, w_{t+1} 包括第2排虚线框内的样本. 用 w_t 内的均值, $\mathbf{x}_t \in \mathbb{R}^{M \times 1}$, 表示时刻 t 的信息. 那么, 由贝叶斯理论可得 \mathbf{x}_t 属于“优”运行状态等级的后验概率为

$$p(G^{\text{opt}}|\mathbf{x}_t) = \frac{p(\mathbf{x}_t|\psi^{\text{opt}})p(\psi^{\text{opt}})}{p(\mathbf{x}_t|\psi^{\text{opt}})p(\psi^{\text{opt}}) + p(\mathbf{x}_t|\psi^{\text{n-opt}})p(\psi^{\text{n-opt}})}. \quad (5)$$

其中 $p(\psi^{\text{opt}})$ 和 $p(\psi^{\text{n-opt}})$ 分别表示运行状态等级为“优”和“非优”的先验概率, 通过离线统计获得. 取定阈值 γ , 将 $p(G^{\text{opt}}|\mathbf{x}_t)$ 与 γ 进行比较, 辅助判断过程运行状态. γ 的选取可以通过领域专家知识或历史数据统计获得. 前者主观性较大, 后者可以对历史数据进行统计, 得到置信水平为 β 的情况下, 运行状态等级属于优的置信区间. 此区间的下限, 即为 γ 取值.

上述时刻 t 的评价结果是瞬时等级评价结果. 由于噪声干扰和工况起伏, 个别时刻运行状态可能出现波动. 但是, 评价结果不应随此类波动频繁变化. 为避免误评价, 连续 I 个滑动窗口的瞬时评价结果都与之前不同, 才改变评价结果. I 称为延时报警参数. I 的选取应满足: 避免短暂工况起伏引起的评价结果频繁跳变; 保证“非优”状态报警的及时性. I 的长度可以根据领域专家经验进行选取, 也可以通过历史统计获得, 将 I 取工况波动导致评价结果跳变的平均长度. 时刻 t 的评价结果用 r_t 表示, $r_t \in \{G^{\text{opt}}, G^{\text{n-opt}}\}$, 分别代表评价结果为“优”和“非优”等级.

在线评价流程图如图4所示, 具体评价流程总结如下:

- 1) $i = 0$.
- 2) 计算当前滑动窗口内的样本点均值, 获得 \mathbf{x}_t .
- 3) 根据式(1)至(5), 计算 $p(G^{\text{opt}}|\mathbf{x}_t)$.
- 4) 若 $p(G^{\text{opt}}|\mathbf{x}_t) \geq \gamma$, 进行下一步; 否则, 跳到步骤8).
- 5) 若 $r_{t-1} = G^{\text{opt}}$, 则 $r_t = G^{\text{opt}}$, 返回步骤1); 否则, 至下一步骤.
- 6) $i = i + 1$.
- 7) 若 $i \geq I$, $r_t = G^{\text{opt}}$, 返回步骤1); 否则, $r_t = G^{\text{n-opt}}$, 返回步骤2).
- 8) 若 $r_{t-1} = G^{\text{opt}}$, 至下一步骤; 否则, $r_t = G^{\text{n-opt}}$, 返回步骤1).

- 9) $i = i + 1$.
 10) 若 $i \geq I$, 则 $r_t = G^{\text{n-opt}}$, 返回步骤1); 否则, $r_t = G^{\text{opt}}$, 返回步骤2).

若在 t 时刻, 多模态过程运行状态等级为“非优”, 需进行“非优”原因变量追溯, 为过程的优化操作提供指导建议. 追溯方法在下一节中阐述.

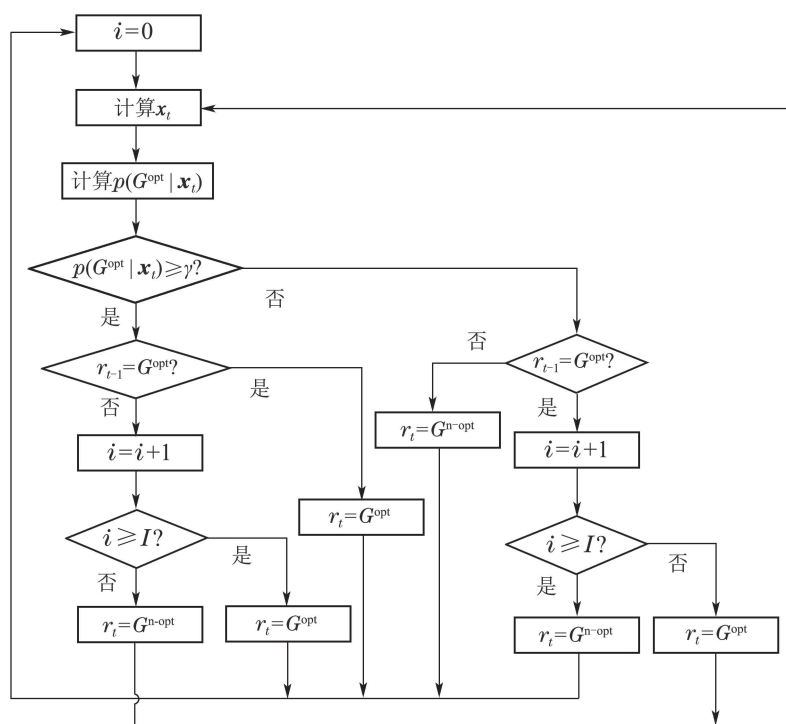


图4 过程运行状态等级评价流程图

Fig. 4 Flow chart of process operating performance assessing strategy

3 运行状态非优原因追溯(Nonoptimal performance cause identification)

针对多模态过程运行状态等级“非优”原因追溯问题, 本文提出一种新的贡献图法, 对导致“非优”运行状态的原因变量做出判断.

对时刻 t 进行“非优”原因追溯时, 认为原因变量是对后验概率 $p(G^{\text{opt}}|\mathbf{x}_t)$ 偏离最优状态影响较大的相关变量. 由式(5)得, 后验概率 $p(G^{\text{opt}}|\mathbf{x}_t)$ 正比于 $p(\mathbf{x}_t|\boldsymbol{\psi}^{\text{opt}})$. 将式(3)代入式(1), 得

$$p(\mathbf{x}_t|\boldsymbol{\psi}^{\text{opt}}) = \sum_{k=1}^{K^{\text{opt}}} \omega_k^{\text{opt}} g(\mathbf{x}_t|\boldsymbol{\theta}_k^{\text{opt}}) = \sum_{k=1}^{K^{\text{opt}}} \left\{ \frac{\omega_k^{\text{opt}}}{(2\pi)^{M/2} |\boldsymbol{\Sigma}_k^{\text{opt}}|^{1/2}} \cdot \exp\left[-\frac{1}{2}(\mathbf{x}_t - \boldsymbol{\mu}_k^{\text{opt}})^{\text{T}} (\boldsymbol{\Sigma}_k^{\text{opt}})^{-1} (\mathbf{x}_t - \boldsymbol{\mu}_k^{\text{opt}})\right] \right\}. \quad (6)$$

那么, 由正比关系得

$$p(G^{\text{opt}}|\mathbf{x}_t) \propto \sum_{k=1}^{K^{\text{opt}}} \left\{ \frac{\omega_k^{\text{opt}}}{(2\pi)^{M/2} |\boldsymbol{\Sigma}_k^{\text{opt}}|^{1/2}} \right\}.$$

$$\exp\left[-\frac{1}{2}(\mathbf{x}_t - \boldsymbol{\mu}_k^{\text{opt}})^{\text{T}} (\boldsymbol{\Sigma}_k^{\text{opt}})^{-1} (\mathbf{x}_t - \boldsymbol{\mu}_k^{\text{opt}})\right]. \quad (7)$$

用 $p(G^{\text{opt}}|\mathbf{x}_t)$ 对过程变量的偏导来量化各变量对后验概率 $p(G^{\text{opt}}|\mathbf{x}_t)$ 偏离最优状态的影响大小. 令 $\mathbf{x}_t = [x_{t1}, \dots, x_{tM}]^{\text{T}}$, 引入尺度因子 $\mathbf{v} = [v_1, \dots, v_M]^{\text{T}}$, $v_i = 1$ ($i = 1, \dots, M$), $\mathbf{x}_t \circ \mathbf{v}$ 表示向量 $[x_{t1}v_1, \dots, x_{tM}v_M]^{\text{T}}$ [19-20]. 所以, $p(G^{\text{opt}}|\mathbf{x}_t)$ 对第 i 个变量的尺度因子的偏导

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial v_i} (p(G^{\text{opt}}|\mathbf{x}_t)) &= \frac{\partial}{\partial v_i} (p(G^{\text{opt}}|\mathbf{x}_t \circ \mathbf{v})) \propto \\ & \sum_{k=1}^{K^{\text{opt}}} \left\{ \frac{\omega_k^{\text{opt}}}{(2\pi)^{M/2} |\boldsymbol{\Sigma}_k^{\text{opt}}|^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\mathbf{x}_t \circ \mathbf{v} - \boldsymbol{\mu}_k^{\text{opt}})^{\text{T}} \cdot \right. \right. \\ & \left. \left. (\boldsymbol{\Sigma}_k^{\text{opt}})^{-1} (\mathbf{x}_t \circ \mathbf{v} - \boldsymbol{\mu}_k^{\text{opt}})\right] \cdot \frac{\partial \left[-\frac{1}{2}(\mathbf{x}_t \circ \mathbf{v} - \boldsymbol{\mu}_k^{\text{opt}})^{\text{T}} (\boldsymbol{\Sigma}_k^{\text{opt}})^{-1} (\mathbf{x}_t \circ \mathbf{v} - \boldsymbol{\mu}_k^{\text{opt}})\right]}{\partial v_i} \right\}, \quad (8) \end{aligned}$$

其中

$$\frac{\partial \left[(\mathbf{x}_t \circ \mathbf{v} - \boldsymbol{\mu}_k^{\text{opt}})^{\text{T}} (\boldsymbol{\Sigma}_k^{\text{opt}})^{-1} (\mathbf{x}_t \circ \mathbf{v} - \boldsymbol{\mu}_k^{\text{opt}}) \right]}{\partial v_i} =$$

$$\frac{\partial[(\mathbf{x}_t \circ \mathbf{v} - \boldsymbol{\mu}_k^{\text{opt}})^\text{T} (\boldsymbol{\Sigma}_k^{\text{opt}})^{-1} (\mathbf{x}_t \circ \mathbf{v} - \boldsymbol{\mu}_k^{\text{opt}})]}{\partial v_i} = \frac{\partial[\text{tr}((\mathbf{x}_t \circ \mathbf{v} - \boldsymbol{\mu}_k^{\text{opt}})(\mathbf{x}_t \circ \mathbf{v} - \boldsymbol{\mu}_k^{\text{opt}})^\text{T} (\boldsymbol{\Sigma}_k^{\text{opt}})^{-1})]}{\partial v_i} = \text{tr} \left[\frac{\partial(\mathbf{x}_t \circ \mathbf{v} - \boldsymbol{\mu}_k^{\text{opt}})(\mathbf{x}_t \circ \mathbf{v} - \boldsymbol{\mu}_k^{\text{opt}})^\text{T}}{\partial v_i} (\boldsymbol{\Sigma}_k^{\text{opt}})^{-1} \right] \Big|_{v_i=1}. \tag{9}$$

将偏导数项展开有

$$\frac{\partial(\mathbf{x}_t \circ \mathbf{v} - \boldsymbol{\mu}_k^{\text{opt}})(\mathbf{x}_t \circ \mathbf{v} - \boldsymbol{\mu}_k^{\text{opt}})^\text{T}}{\partial v_i} \Big|_{v_i=1} = \mathbf{x}_{ti} \cdot \begin{pmatrix} 0 & \dots & 0 & x_{t1} - \mu_{k1}^{\text{opt}} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & x_{t(i-1)} - \mu_{k(i-1)}^{\text{opt}} & 0 & \dots & 0 \\ x_{t1} - \mu_{k1}^{\text{opt}} & \dots & x_{t(i-1)} - \mu_{k(i-1)}^{\text{opt}} & 2(x_{ti} - \mu_{ki}^{\text{opt}}) & x_{t(i+1)} - \mu_{k(i+1)}^{\text{opt}} & \dots & x_{tM} - \mu_{kM}^{\text{opt}} \\ 0 & \dots & 0 & x_{t(i+1)} - \mu_{k(i+1)}^{\text{opt}} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & x_{tM} - \mu_{kM}^{\text{opt}} & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}. \tag{10}$$

即该对角矩阵除第*i*行和第*i*列上的元素不为0外,其他元素均为0.

$$\left(\frac{\partial(\mathbf{x}_t \circ \mathbf{v} - \boldsymbol{\mu}_k^{\text{opt}} \circ \mathbf{v})(\mathbf{x}_t \circ \mathbf{v} - \boldsymbol{\mu}_k^{\text{opt}} \circ \mathbf{v})^\text{T}}{\partial v_i} \right)_{pq}$$

表示 $\frac{\partial(\mathbf{x}_t \circ \mathbf{v} - \boldsymbol{\mu}_k^{\text{opt}})(\mathbf{x}_t \circ \mathbf{v} - \boldsymbol{\mu}_k^{\text{opt}})^\text{T}}{\partial v_i}$ 第*p*行第*q*列的元素有

$$\left(\frac{\partial(\mathbf{x}_t \circ \mathbf{v} - \boldsymbol{\mu}_k^{\text{opt}} \circ \mathbf{v})(\mathbf{x}_t \circ \mathbf{v} - \boldsymbol{\mu}_k^{\text{opt}} \circ \mathbf{v})^\text{T}}{\partial v_i} \right)_{pq} = \begin{cases} 0, & p \neq i, q \neq i, \\ x_{ti}(x_{tq} - \mu_{kq}^{\text{opt}}), & p = i, p \neq q, \\ x_{ti}(x_{tp} - \mu_{kp}^{\text{opt}}), & q = i, p \neq q, \\ 2x_{ti}(x_{ti} - \mu_{ki}^{\text{opt}}), & p = q = i. \end{cases} \tag{11}$$

假设 $(\boldsymbol{\Sigma}_k^{\text{opt}})^{-1} = [\boldsymbol{\beta}_1^k, \boldsymbol{\beta}_2^k, \dots, \boldsymbol{\beta}_M^k]_{M \times M}$, $\boldsymbol{\beta}_i^k$ 表示 $(\boldsymbol{\Sigma}_k^{\text{opt}})^{-1}$ 的第*i*列,那么

$$\frac{\partial(\mathbf{x}_t \circ \mathbf{v} - \boldsymbol{\mu}_k^{\text{opt}})^\text{T} (\boldsymbol{\Sigma}_k^{\text{opt}})^{-1} (\mathbf{x}_t \circ \mathbf{v} - \boldsymbol{\mu}_k^{\text{opt}})}{\partial v_i} = 2x_{ti}(\mathbf{x}_t - \boldsymbol{\mu}_k^{\text{opt}})^\text{T} (\boldsymbol{\beta}_i^k). \tag{12}$$

将式(12)带入式(8),得

$$\frac{\partial}{\partial v_i} (p(G^{\text{opt}}|\mathbf{x}_t)) \propto \sum_{k=1}^{K^{\text{opt}}} \left\{ \frac{\omega_k^{\text{opt}} x_{ti}(\mathbf{x}_t - \boldsymbol{\mu}_k^{\text{opt}})^\text{T} (\boldsymbol{\beta}_i^k)}{(2\pi)^{M/2} |\boldsymbol{\Sigma}_k^{\text{opt}}|^{1/2}} \exp \left[-\frac{1}{2} (\mathbf{x}_t \circ \mathbf{v} - \boldsymbol{\mu}_k^{\text{opt}})^\text{T} (\boldsymbol{\Sigma}_k^{\text{opt}})^{-1} (\mathbf{x}_t \circ \mathbf{v} - \boldsymbol{\mu}_k^{\text{opt}}) \right] \right\}. \tag{13}$$

令

$$C_{ti} =$$

$$\left| \sum_{k=1}^{K^{\text{opt}}} \left\{ \frac{\omega_k^{\text{opt}} x_{ti}(\mathbf{x}_t - \boldsymbol{\mu}_k^{\text{opt}})^\text{T} (\boldsymbol{\beta}_i^k)}{(2\pi)^{M/2} |\boldsymbol{\Sigma}_k^{\text{opt}}|^{1/2}} \exp \left[-\frac{1}{2} (\mathbf{x}_t \circ \mathbf{v} - \boldsymbol{\mu}_k^{\text{opt}})^\text{T} (\boldsymbol{\Sigma}_k^{\text{opt}})^{-1} (\mathbf{x}_t \circ \mathbf{v} - \boldsymbol{\mu}_k^{\text{opt}}) \right] \right\} \right|_{v_i=1}. \tag{14}$$

C_{ti} 表示变量*x_{ti}*对*p(G^{opt}|\mathbf{x}_t)*的贡献, $i = 1, 2, \dots, M$.

但是,各变量对*p(G^{opt}|\mathbf{x}_t)*的贡献大小不尽相同.所以, $C_{ti}(i = 1, 2, \dots, M)$ 的大小,不能充分反映*x_{ti}*对“非优”运行状态的贡献是否超出一般水平.定义贡献指数

$$CI_{ti} = C_{ti}/L_i, \tag{15}$$

其中*L_i*($i = 1, \dots, M$)是变量*i*贡献的控制限.*L_i*可以通过核密度估计法确定变量贡献的分布,进而确定其在置信水平β下的控制限;也可以将历史数据中某变量贡献从小到大进行排序,位于比例β位置的贡献值,作为置信水平β下,此变量贡献的控制限.在数据充足的前提下,本文采取排序的方法,求取控制限.若*CI_{ti}* > 1, *x_{ti}*对*p(G^{opt}|\mathbf{x}_t)*的贡献超过固有范围,变量*i*为导致多模态过程运行状态等级“非优”的主导原因变量.若追溯结果没有变量贡献指数超过其控制限,则认为原因变量为贡献指数较大的变量.用*t - I + 1*到*t*时刻每个变量贡献指数的均值,进行原因追溯, *x_{ti}*的平均贡献指数表示为

$$\overline{CI}_{ti} = \sum_{t=I+1}^t CI_{ti}/I. \tag{16}$$

4 仿真分析(Simulation and analysis)

田纳西-伊斯曼(Tennessee-Eastman, TE)过程是由伊斯曼化学品公司创建的对真实工业过程的模

拟, 包含反应器、冷凝器、压缩机、分离器和汽提塔5个单元, 共有12个控制变量和41个测量变量^[14].

研究表明, TE过程的反应器压力和反应器液位设定值对过程稳定工作点有较大影响, 反应器温度设定值对过程运营成本有较大影响. 以运营成本大小为判定过程运行状态等级的指标, 以反应器压力、液位和温度设定值的变化模拟不同运行模态和状态等级, 对所提方法进行验证.

本文选取16个与评价指标相关的过程变量, 列于表1. 假设过程有“优”和“非优”两种运行状态等级, 每个等级内包含稳定模态A、稳定模态B、过渡模态AB和过渡模态BA四种模态. 本文以改变两个变量的设定值(幅值大于10%)来区分模态, 改变一个变量的设定值(幅值小于10%)来区分运行状态等级. 反应器温度的改变, 使评价指标发生较大变化. 当温度设定值为121.9℃时, 运营成本较低, 运行状态为“优”; 当温度设定值为113℃时, 运营成本较高, 运行状态为“非优”. 模态A直接过渡到模态B的过渡模态AB为“优”运行状态, 逐步过渡时为“非优”状态. 模态B直接过渡到模态A的过渡模态BA为“优”运行状态, 逐步过渡时为“非优”状态. 运行状态等级和模态所对应的设定值等相关信息列于表2. 不同等级的每个稳定模态, 分别模拟1500个小时的仿真过程, 每小时采样60次, 作为建模数据. 不同等级的每个过渡模态, 分别模拟30次过渡过程, 每小时采样60次, 作为建模数据. 根据过程特性, 选取 $H = 10$ 即可满足要求.

表1 TE过程变量表

Table 1 Variables of TE process

序号	变量名称
1	A进料量(流1)
2	D进料量(流2)
3	E进料量(流3)
4	A, C混合物料流量
5	再循环流量(流8)
6	反应器进料速度(流6)
7	反应器压力
8	反应器等级
9	反应器温度
10	产品分离器温度
11	产品分离器压力
12	产品分离器塔底流量(流10)
13	汽提器压力
14	汽提器温度
15	反应器冷却水出口温度
16	分离器冷却水出口温度

经过历史统计, 取工况波动导致评价结果跳变

的平均长度大致为10, 则选取 $I = 10$. 分别建立运行状态等级为“优”和“非优”的离线模型. 以等级“优”(模态A)过渡到等级“非优”(模态B)的过程为例, 验证提出的方法. 模拟50个小时的仿真过程, 每小时采样60次, 改变反应器温度的设定值得到等级“优”(模态A)逐步过渡到等级“非优”(模态B)的运行数据, 作为测试数据. 实验设计如表3所示, 前1200个采样窗口, 过程运行状态等级为“优”, 模态为A; 从第1201个采样窗口开始, 逐步减小反应器压力、液位和温度的设定值, 使过程运行状态从“优”转化为“非优”, 模态从A过渡到B, 此过渡模态AB的运行状态等级为“非优”; 直到1297个采样窗口, 过渡过程结束, 到达“非优”的稳定模态B.

表2 过程操作模态和状态列表

Table 2 Operating modes and performances of Tennessee Eastman process

运行状态等级	模态名称	反应器温度	反应器压力	反应器液位
优	稳定模态A	121.9℃	2950 kPa	65%
	稳定模态B		2650 kPa	55%
	过渡模态AB		A直接过渡到B	
	过渡模态BA		B直接过渡到A	
非优	稳定模态A	113℃	2950 kPa	65%
	稳定模态B		2650 kPa	55%
	过渡模态AB		A逐步过渡到B	
	过渡模态BA		B逐步过渡到A	

表3 TE过程实验设计

Table 3 Experimental design of Tennessee Eastman

采样窗口	运行状态等级	模态名称
起始 0	优	稳定模态A
终止 1200		
起始 1201	非优	过渡模态AB
终止 1297		
起始 1298	非优	稳定模态B
终止 3000		

过程运行状态评价结果如图5所示. 评价结果显示, 从1到1202个采样窗口, 运行状态等级评价结果以大于阈值0.85的后验概率被评价为“优”. 自1203个点评价采样窗口起, 运行状态等级为“优”的概率逐渐减小. 直到第1209个评价周期起, 运行状态等级评价结果为“优”的后验概率持续低于0.85. 到第1218个采样窗口, 连续10个评价点, 等级“优”的后验概率低于0.85. 此时, 运行状态等级评价结果从“优”转换为“非优”, 进行“非优”等级原因追溯. 此后, 运行状态评价结果保持为“非优”

等级. 评价结果和对应的采样窗口如表4所示. 评价结果与实际等级设置相一致运行, 说明本文提出的方法能够及时准确地评价过程运行状态最优性等级.

根据评价结果, 在第1218个采样窗口, 进行“非优”原因变量追溯, 第1209至1218个采样窗口贡献指数均值如图6所示. 对照表1和表2, 从图6的追溯结果可知, 追溯出的主导原因变量是反应器温度, 与实验设计相符.

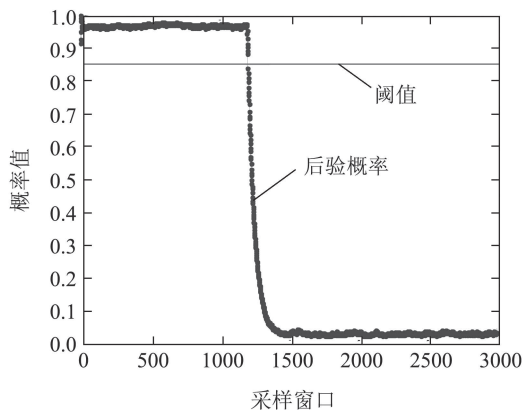


图5 过程运行状态等级评价图

Fig. 5 The result of process operating performance assessment strategy

表4 实验结果

Table 4 Result of the experiment

采样窗口	运行状态等级评价结果
起始 1	优
终止 1217	
起始 1218	非优
终止 3000	

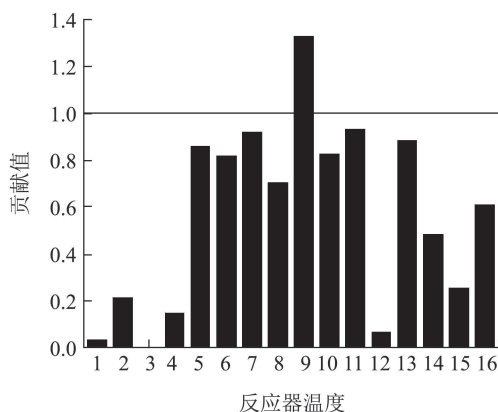


图6 非优原因追溯结果

Fig. 6 The indices of cause identification strategy

从以上评价和追溯结果看, 本文提出的基于GMM和贝叶斯推理的多模态过程运行状态在线评

价和“非优”原因追溯方法能对过程运行状态做出准确的评价和“非优”原因追溯.

5 结论(Conclusions)

针对多模态过程运行状态等级“优”与“非优”的判断问题, 本文提出基于GMM和贝叶斯推理的运行状态评价方法. 本方法对同一等级不同模态的数据, 建立一个GMM, 准确刻画了多峰分布数据特性, 避免硬化分带来的模态误划分问题. 针对过程运行状态等级“非优”原因追溯, 本文提出一种基于偏导数的“非优”原因追溯方法, 对主导变量进行判断. 最后, 将所提方法应用于TE过程运行状态评价中, 取得了良好效果, 验证了本方法评价的准确性和追溯的有效性.

参考文献(References):

- [1] WANG Shu, CHANG Yuqing, YANG Jie, et al. Multiway principle component analysis monitoring and fault variable detection based on substage separation for batch processes [J]. *Control Theory & Applications*, 2011, 28(2): 149 – 156.
(王姝, 常玉清, 杨洁, 等. 时段划分的多向主元分析间歇过程监测及故障变量追溯 [J]. 控制理论与应用, 2011, 28(2): 149 – 156.)
- [2] SRINIVASAN R, VENKATASUBRAMANIAN V. Multi-perspective models for process hazards analysis of large scale chemical processes [J]. *Computers and Chemical Engineering*, 1998, 22(12): S961 – S964.
- [3] MORAN J, GRANADA E, MIGUEZ J L, et al. Use of grey relational analysis to assess and optimize small biomass boilers [J]. *Fuel Processing Technology*, 2006, 87(2): 123 – 127.
- [4] XU G, YANG Y, LU S, et al. Comprehensive evaluation of coal-fired power plants based on grey relational analysis and analytic hierarchy process [J]. *Energy Policy*, 2011, 39(5): 2343 – 2351.
- [5] ESEN H, INALLI M, SENGUR A, et al. Artificial neural networks and adaptive neuro-fuzzy assessments for ground-coupled heat pump system [J]. *Energy and Buildings*, 2008, 40(6): 1074 – 1083.
- [6] JIANG Y, XU Z, YIN H. Study on improved BP artificial neural networks in eutrophication assessment of China eastern lakes [J]. *Journal of Hydrodynamics*, 2006, 18(3): 528 – 532.
- [7] GUO L, GAO J, YANG J, et al. Criticality evaluation of petrochemical equipment based on fuzzy comprehensive evaluation and a BP neural network [J]. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 2009, 22(4): 469 – 476.
- [8] LIANG Z, YANG K, SUN Y, et al. Decision support for choice optimal power generation projects: fuzzy comprehensive evaluation model based on the electricity market [J]. *General Information*, 2006, 34(17): 3359 – 3364.
- [9] WEI B, WANG S, LI L. Fuzzy comprehensive evaluation of district heating systems [J]. *Energy Policy*, 2010, 38(10): 5947 – 5955.
- [10] YI G, QIN H. Fuzzy comprehensive evaluation of fire risk on high-rise buildings [J]. *Procedia Engineering*, 2011, 11(1): 620 – 624.
- [11] LIU Y, WANG F, CHANG Y. Online fuzzy assessment of operating performance and cause identification of nonoptimal grades for industrial processes [J]. *Engineering Chemistry Research*, 2013, 52(50): 18022 – 18030.
- [12] LIN Y, CHEN M, ZHOU D. Online probabilistic operational safety assessment of multi-mode engineering systems using Bayesian methods [J]. *Reliability Engineering and System Safety*, 2013, 119(1): 150 – 157.

- [13] LIU Y, CHANG Y, WANG F. Online process operating performance assessment and nonoptimal cause identification for industrial processes [J]. *Journal of Process Control*, 2014, 24(10): 1548 – 1555.
- [14] LIU Y, WANG F, CHANG Y, et al. Comprehensive economic index prediction based operating optimality assessment and nonoptimal cause identification for multimode processes [J]. *Chemical Engineering Research and Design* 2015, 97 (1): 77 – 90.
- [15] TAN S, WANG F, PENG J, et al. Multimode process monitoring based on mode identification [J]. *Engineering Chemistry Research*, 2011, 51(1): 374 – 388.
- [16] WANG F, TAN S, PENG J, et al. Process monitoring based on mode identification for multi-mode process with transitions [J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2012, 110(1): 144 – 155.
- [17] YU J, QIN S. Multimode process monitoring with Bayesian inference-based finite Gaussian mixture models [J]. *AIChE Journal*, 2008, 54(7): 1811 – 1829.
- [18] FIGUEIREDO M, JAIN A. Unsupervised learning of finite mixture models [J]. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, 2002, 24(3): 381 – 396.
- [19] CHO J, LEE J, WOOK C, et al. Fault identification for process monitoring using kernel principal component analysis [J]. *Chemical Engineering Science*, 2005, 60(1): 279 – 288.
- [20] PENG K, ZHANG K, LI G, et al. Contribution rate plot for nonlinear quality-related fault diagnosis with application to the hot strip mill process [J]. *Control Engineering Practice*, 2013, 21(4): 360 – 369.

作者简介:

邹筱瑜 (1990–), 女, 博士研究生, 主要研究方向为复杂工业生产过程监测、故障诊断、运行状态评价及非优原因追溯等, E-mail: xiaoyuzou_neu@hotmail.com;

常玉清 (1973–), 女, 教授, 博士生导师, 主要研究方向为复杂工业生产过程建模、过程监测及质量预测等, E-mail: changyuqing@ise.neu.edu.cn;

王福利 (1957–), 男, 教授, 博士生导师, 主要研究方向为复杂工业过程建模、控制与优化, 复杂工业生产过程监测、故障诊断及质量预测等, E-mail: wangfuli@ise.neu.edu.cn;

周 阳 (1991–), 男, 学士, 主要研究方向为复杂工业生产过程监测、运行状态评价及非优原因追溯等, E-mail: zy.19910219@163.com.