

行政院國家科學委員會專題研究計畫 期中進度報告

利用動態數據做系統之監控偵錯與數據調諧(2/3)

計畫類別：個別型計畫

計畫編號：NSC93-2214-E-002-014-

執行期間：93 年 08 月 01 日至 94 年 07 月 31 日

執行單位：國立臺灣大學化學工程學系暨研究所

計畫主持人：黃孝平

計畫參與人員：鄭智成 林大溱

報告類型：精簡報告

處理方式：本計畫可公開查詢

中 華 民 國 94 年 6 月 1 日

利用動態數據做系統之監控偵錯與數據調諧 (2/3)

Abstract

The objective of this research is to utilize dynamic-PLSR1 (DPLS) to identifying dynamics of a process, and utilize PLS on modeling wavelet transformed input data for FDI. After modeling the dynamics of the process, filters are constructed and applied to the input data which have been pre-treated with Discrete Wavelet Transform (DWT). The DWT decomposes each input signal into three basic components -- trend, seasonal, and, stationary and random components. By this DWT pretreatment, it provides a capability to identify the source of sensor faults. The concepts and techniques are demonstrated using a simulated Wood and Berry system. It shows this presented method is effective in detecting and identifying either the faults caused by high frequency noises or by biases in relating outputs.

Keywords: subspace identification, impulse response sequence, closed loop, PLS, fault detection, wavelets

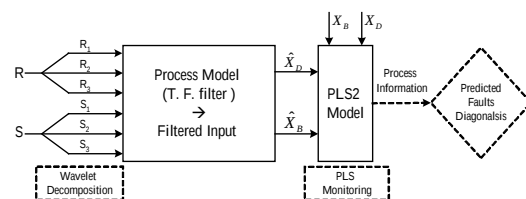
一、緣由與目的

製程偵錯與診斷(Fault Detection and Isolation, FDI)的目標，為儘早發現製程操作異常問題並了解造成異常的原因及時間。透過製程的監測，以維持製程操作的理想狀況，避免不必要的產品損失與成本的浪費。亦即提高產品的品質與良率，發揮製程的最大效能。

多變量製程管制技術(Multivariate statistical process control, MSPC)由於能克服諸多品質與製程變數共線性(Collinearity)的問題[1]，被大量應用於產品品質變數監控與可量測的製程變數管制與監測。此乃因大量多變數間若存在內相依性(inter-dependence)，則單一量測變數的變化不能作為正確的參考指標。因此，早期的多變量統計管制圖，利用 T^2 及 Q 管制圖的統計計算原理，克服變數共線性的問題。後期更結合多變量投影法(Multivariate Projection Method)原理，如主變量投影法(Principal Components Analysis, PCA)及部分最小平方法(Partial Least Squares, PLS)，將諸多可能相關之變數構成的複雜向量空間投影至較低維度且完全線性獨立的潛藏變數空間(Latent variable spaces)，以擷取大量變數產生龐大數據隱含的重要訊息。透過模型的建立與驗證，對正常與異常操作狀態作更明確的界定，在製程品質監控上佔有一席之地。

化工製程的偵測，必須透過量測器(Sensor)取得製程變數及輸出的正確訊息，才能了解製程異常及錯誤(fault)發生的精確時間及其型態。但是工廠的量測器常有校正異常及雜訊(noise)干擾過大的問題，且大部分的重要訊息發生於短暫的時間之內。因此，小波分析(Wavelet Analysis)提供訊號分解及去除雜訊(de-noising)[16]的工具。Kosanovich 及 Piovoso(1997)[17]曾應用小波轉換的優點，結合前人以 PCA 及 PLS 在製程偵測的方法。

本計劃應用一般的多變量製程管制技術(Multivariate statistical process control)與偵錯技術，配合傳統製程識別的概念以較為簡化的技術建立製程模型，以此模型預測輸出端是否有錯誤發生及輸出端開始發生錯誤的時間點。並於輸出端執行錯誤診斷，除貢獻管制圖的使用，並配合小波轉換(Wavelet Transform)分解訊號變化的型態，更進一步診斷錯誤的來源，稱之為預測式錯誤診斷(Predictive Fault diagnosis)，如圖一。



圖一、預測式錯誤診斷(Predictive Fault Diagnosis)示意圖

二、 部分最小平方法(PLS)

近代工業製程中，由於大量複雜的製程變數且常隱含及高的相關性。MSPC 由於可以擷取其中的重要訊息，並將維度作大幅簡化而受到廣泛的應用。其中部分最小平方法(Partial Least Squares, PLS)就是常見的一種重要工具之一。

部分最小平方法(Partial Least Squares, PLS)，亦稱為潛結構投影法(Projection to Latent Structure)，首先由經濟學家 Wood(1966)[25]所提出，初期廣泛為心理學等社會科學領域，化學與藥學等自然科學等領域所使用。PLS 之理論與方法，近幾年受到數學家與各方的質疑與討論。發展至1980年以後，開始有非線性應用(Nonlinear PLS)、Prefiltered PLS、Orthogonal Signal Correction (OSC)、Orthogonalized-PLS (O-PLS)等的發展。並於時間序列(time series)、批次(batch)及 wavelets variants。

PLS 與傳統多變量最小方差分析(MLR)，皆是處理兩群變數之相關性(relation)問題。但前者的發展與應用潛力更優於後者，主要因為 PLS 隱含潛變數(latent variable)的概念及克服多變量所衍伸的共線性問題。且適用於現實生活中經常發生的非因果關係模型(non-causal model)情況。PLS 引用 PCA 的概念，分析兩組可能各自內相關的多變量數據 X (predictor block)與 Y (predicted block)之潛變數，如(2)及(3)式。但由於必須找到兩組數據之主要關聯性的實際需求，而將 X 與 Y 合併成為(4)式。

$$X = TP^T + E = \sum_{j=1}^a t_j p_j^T + E \quad (2)$$

$$Y = UQ^T + F = \sum_{j=1}^a u_j q_j^T + F \quad (3)$$

$$\hat{Y} = \hat{U}Q^T + F = \sum_{j=1}^a \hat{u}_j q_j^T + F, (\hat{U} = TB) \quad (4)$$

由於計算方式及物理意義的不同，PLSR1 由於數學意義較為簡單而實用(Helland, 2001)[29]。因此，在識別及預測的應用上較為廣泛。PLSR1(PLSR of One

predicted variables)，每次運算僅考慮單一被預測變數 y_i ；如此，選取的變量僅與此被預測變數有最大共相關性。對於多被預測變量系統，以一連串的 PLSR1 演算法分別對每一被預測變數作 PLS 分析，而得到多組分別針對不同被預測變數的 X 變量。

$$(Y = [y_1 \quad \dots \quad y_p])$$

$$(起始值 \quad i, j = 0, \quad E_0 = X, \quad f_{i,0} = y_i)$$

$$(1) \quad w_{i,j} = \frac{E_{j-1}^T \cdot y_i}{\|E_{j-1}^T \cdot y_i\|}$$

$$(2) \quad t_{i,j} = E_{j-1} \cdot w_{i,j}$$

$$(3) \quad p_{i,j} = \frac{E_{j-1}^T \cdot t_{i,j}}{\|t_{i,j}^T \cdot t_{i,j}\|}$$

$$(4) \quad p_{j,new} = p_{j,old} / \|p_{j,old}\|$$

$$(5) \quad t_{j,new} = t_{j,old} \cdot \|p_{j,old}\|$$

$$(6) \quad w_{j,new} = w_{j,old} \cdot \|p_{j,old}\|$$

$$(7) \quad j = j + 1, \quad \text{to} \quad j = \min(m, n)$$

$$E_j = E_{j-1} - t_{i,j} p_{i,j}^T$$

$$f_{i,j} = f_{i,j-1} - b_{i,j} t_{i,j} q_{i,j}, \quad b_j = \frac{y_i^T t_{i,j}}{t_{i,j}^T t_{i,j}}$$

同理可將新數據投影至建模完成的主軸空間(PCS)，並依照 X 和 Y 的關係預測 Y 值，可估計如下：

$$\hat{Y}_{1,a} = X \cdot B_{1,a} \quad (6)$$

其中

$$B_{1,a} = [b_{1,j} \quad b_{2,j} \quad \dots \quad b_{p,j}],$$

$$b_{i,j} = W_{i,j} (P_{i,j}^T W_{i,j})^{-1} (T_{i,j}^T T_{i,j})^{-1} T_{i,j}^T f_{0,j}, \quad j = a$$

三、 PLS 在偵錯上的應用

另一方面，以多變量投影法(如 PCA 及 PLS 等)結合 Hotellin T^2 及 Q 管制圖於統計製程偵測(Statistical Process Monitoring, SPM)的使用，必須符合時間獨立(Time independency)且量測變數與 PCA 的殘差(Residuals)需為常態分布(Normal distribution)假設的假設條件。然而，實際

的化學製程中通常包含動態(dynamic)及非線性(non-linearly)的關係。因此, wise 等人 (1990)[18] 提出動態自相關(auto-correlation)發生時, 通常不滿足常態分布的假設。於是 Ku (1995)等人提出動態主成分分析法 (Dynamic Principal Component Analysis, DPCA)[3]。將時延(time lag)概念的造成的動態關係加入 PCA 的模型之中, 以克服動態及自相關性 (autocorrelation)在統計處理的限制。

PLS 在偵錯上的應用上, 由於其探討兩類(two-block)變數變數: 預測因子 X 及被預測因子 Y 之關聯性, 因此 PLS 在動態或製程輸入及輸出產生相關變數的診斷技術上較 PCA 為多元 (Multiple)。MacGregor 等(1995)[15]強調 PLS 在工程偵測應用時, 除可利用 X 變量(t-score)的 Hotelling T² 管制圖外, 亦可分析 X 及 Y 變數個別的平方預測誤差 (Squared prediction error, SPE)。Kruger (2001)[12]更提出可以對 Y 變量(u-score)作平方預測誤差分析, 以檢視潛變數模型(latent variable model)解釋製程變異的程度。

1. 動態 PLS 及其於識別的應用

同理, PLS 在動態模型的識別上, Ricker(1988)[8]首先提出將動態時延參數加入輸入資料計算 PLS 模型, 並可轉換成 PLS 有限脈衝應答(Finite Impulse Response, FIR)並識別為轉移函數(Transfer Function)模型。另外, Qin and McAvoy (1992a)[13]提出另一將輸入及輸出都加入時延的方法, 可以得到 ARMA(Autoregressive Moving Average)模型。另外, 為克服非線性的問題, Qin and McAvoy (1992b,1996)[34,40]提出積分 PLS 類神經網路結構(Integrated PLS-neural net structure)。其中前兩識別方法牽涉時延階次的選定, 而使過程繁複而難以處理。因此, Kaspar and Ray(1992)[9,10]提出另一動態轉換(Dynamic Transformation)的方法, 利用動態濾波器(dynamic filter)將輸入時間序列作轉換, 使輸入和輸出間僅存線性關係。如此, 可直接對轉換過的變數作線性代數(Linear Algebra Relation)分析, 但濾波器的階數必須審慎評估以克服模型

維度(automatic model reduction)不在簡化的缺點。

上述動態識別的發展, 主要應用於批次(batch type)識別, 亦即須先將數據收集完成後予以建模及偵錯。如此, 對於動態模式改變或大量數據貯存所需之大量空間之衍生之問題, 有其限制及缺點。因此, Ljung (1911)[14]提出遞迴 PLS(recursive PLS)的方法, 線上(on-line)更新動態模式。後續, Qin(1993, 1998)對化工製程得應用及並提出各式遞迴 PLS 的演算法。本計劃於程序識別使用 Ricker(1988)方法並比照動態 PCA (Ku,1995)[3], 稱之為動態偏最小回歸法(dynamic PLSR)。

2 動態 PLSR1 及程序識別

由於 PLSR1 僅針對單一預測輸出(predicted output)的理論結構, 相較於 PLS2 為簡單。因此, 實際演算上不需處理多預測輸出的複雜關係, 模型的精確度較高。所以, 仿效 DPCA 改寫 PLSR1 的樣本矩陣排列如下, 以計算動態系統的脈衝應答係數(impulse response coefficients), 而可對動態系統作識別(Identification)。

每次取單一輸出變數將樣本矩陣排列如下:

$$x = \begin{bmatrix} x_1(1) & L & x_{n_u}(1) \\ x_1(2) & L & x_{n_u}(2) \\ M & & M \\ x_1(N) & L & x_{n_u}(N) \end{bmatrix} \quad (7)$$

$$y = \begin{bmatrix} y(1) \\ y(2) \\ M \\ y(N) \end{bmatrix} \quad (8)$$

其中 x 為輸入矩陣, 包含 n_u 個預測變數及 N 個取樣, $x \in R^{N \times n_u}$ 。而 y 為輸出矩陣, 包含單一被預測變數的 N 個取樣點,

$y \in R^{N \times 1}$ 。在執行 PLSR1 之前，同樣對原數據均值原點化及正規化的前處理，若給定 n 則可重新排列矩陣如下：

$$x_{reg} = \begin{bmatrix} x_1(n) & L & x_1(1) & L \\ x_1(n+1) & L & x_1(2) & L \\ M & & M & \\ x_1(N-1) & L & x_1(N-n) & L \\ L & x_{n_u}(n) & L & x_{n_u}(1) \\ L & x_{n_u}(n+1) & L & x_{n_u}(2) \\ M & & M & \\ L & x_{n_u}(N-1) & L & x_{n_u}(N-n) \end{bmatrix} \quad (9)$$

$$y_{reg} = \begin{bmatrix} y(n+1) \\ y(n+2) \\ M \\ y(N) \end{bmatrix} \quad (10)$$

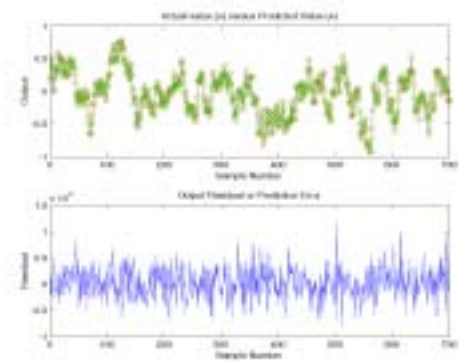
其中 n 為脈衝應答係數的係數個數。 x_{reg} 為回歸 X 矩陣(Regression X Matrix)， $x_{reg} \in R^{(N-n-1) \times (n \times n_u)}$ 。 y_{reg} 為回歸 Y 矩陣(Regression Y Matrix)， $y_{reg} \in R^{(N-n-1) \times 1}$ 。如此，以上述矩陣排列執行 PLSR1，稱之為動態 PLSR1 (dynamic-PLSR1)。將所得之回歸係數序列(亦即 3.2 述及之 PLSR1 演算法中(6)式的 $B1_a$ 或 $b_{1,j}$)，再以相對應的不同預測變數分開計算。則可得到每一預測變數相對於此被預測變數的脈衝應答係數(以 θ 表示)和 PLSR1 回歸係數的關係如下：

$$\theta = [b_{1a}(1:n) \quad b_{1a}(n+1:2n) \quad L \quad b_{1a}(l:r)]_{n \times m} \quad (11)$$

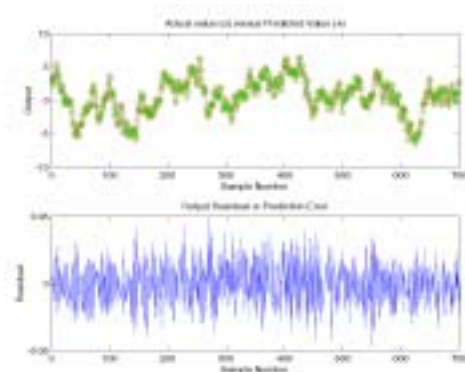
其中 $l=(n_u-1) \times n+1$ ， $r=n_u \times n$ 。將所得之脈衝應答係數，經過累加的計算可以得到其階梯應答(Step Respond)曲線。如此，可由反應曲線最適法(Reaction Curve Fitting)可以得到一階帶遲延轉移函數的參數：時延(dead time, t_0)、時間常數(time constant, τ)及穩態增益(steady state gain, K)。應用上述方法分別對 W&B 製程之 2×2 系統作轉移函數識別。Wood & Berry 製程系統之轉移函數為：

$$\begin{bmatrix} y_1(s) \\ y_2(s) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{12.8e^{-s}}{16.7s+1} & \frac{-18.9e^{-3s}}{21.0s+1} \\ \frac{6.6e^{-7s}}{10.9s+1} & \frac{-19.4e^{-3s}}{14.4s+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1(s) \\ u_2(s) \end{bmatrix} \quad (12)$$

由於每次僅能計算單一輸出所以分別對兩輸出作兩次 2×1 識別運算。首先對 y_1 及兩個輸入作系統識別並設定三個參數如下：(1)取樣 1000 個樣本($N=1000$ ，取樣間隔 1min)，(2)脈衝應答係數長度 300 ($n=300$)，(3)PLSR 潛變數(Latent Variables, lv)個數 40($lv=40$)。所得結果整理如下所示：，得到其預測殘差圖如圖二。並可以計算所建立的模型中 40 個潛變數(lv)分別解釋之 X 及 Y 變異及其累計值分別如表一。並以新的常態數據($N(0,0.5)$, $seed(3,5)$)加以驗證，如圖三。



圖二、W&B 製程中 y_1 建模數據之預測殘差圖

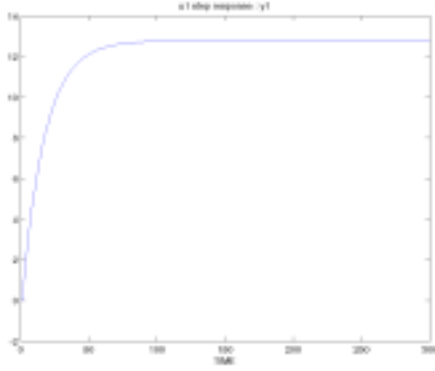


圖三、W&B 製程中 y_1 建模數據之預測驗證圖

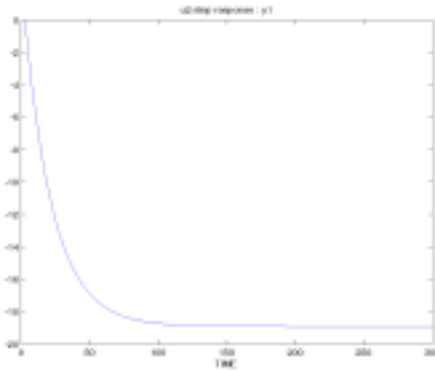
且針對此例脈衝回歸係數(以 θ 表示)和 PLSR1 回歸係數的關係如下：

$$\theta = [b_{1a}(1:300) \quad b_{1a}(301:600)]_{300 \times 2} \quad (13)$$

可由所得之脈衝應答係數累加計算得到輸出 y_1 分別對輸入 u_1 及 u_2 之一階帶遲延 (First Order Plus Dead Time, FOPDT) 模型之一階應答如圖四及圖五。



圖四、W&B 製程 y_1 對 u_1 之階梯應答



圖五、W&B 製程 y_1 對 u_2 之階梯應答

同理，可以得到對輸出 y_2 之階梯應答 (參數設定和 y_1 相同)。將上述階梯應答曲線所得結果可由反應曲線最適法可以得到一階帶遲延轉移函數(14)式。

$$\begin{bmatrix} \hat{G}p_1(s) \\ \hat{G}p_2(s) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{12.79e^{-0.5225s}}{16.67s+1} & \frac{-18.91e^{-2.5s}}{21.01s+1} \\ \frac{6.59e^{-6.55s}}{10.82s+1} & \frac{-19.42e^{-2.51s}}{14.42s+1} \end{bmatrix} \quad (14)$$

四、小波分析於錯誤診斷的應用

1. 小波分析(Wavelet Analysis)

若已知母波(Mother Wavelet)及其他所有的基底(basis)性質，則任何訊號一為訊號 $x(t)$ 透過尺度函數 (Scaling Function) ϕ 的平移(shifted versions)及小波函數(Wavelet

表一、測試一之潛變數(lv)分別解釋之 X 及 Y 變異及其累計值

Percent Variance Captured by PLS Model				
LV#	---X-Block---		---Y-Block---	
	This LV	Total	This LV	Total
1.0000	0.2677	0.2677	74.4144	74.4144
2.0000	0.3603	0.6281	16.2150	90.6294
3.0000	0.4207	1.0488	5.6221	96.2514
4.0000	0.5271	1.5759	1.4844	97.7359
5.0000	0.4551	2.0310	0.7935	98.5294
6.0000	0.4350	2.4660	0.4777	99.0071
7.0000	0.4039	2.8700	0.3042	99.3112
8.0000	0.4373	3.3072	0.1922	99.5034
9.0000	0.3749	3.6821	0.2044	99.7078
10.0000	0.3976	4.0797	0.1003	99.8081
11.0000	0.4602	4.5399	0.0479	99.8561
12.0000	0.5251	5.0651	0.0406	99.8966
13.0000	0.4000	5.4650	0.0231	99.9197
14.0000	0.2962	5.7613	0.0255	99.9452
15.0000	0.3158	6.0770	0.0161	99.9613
16.0000	0.3139	6.3909	0.0125	99.9738
17.0000	0.3812	6.7721	0.0078	99.9816
18.0000	0.4365	7.2087	0.0044	99.9860
19.0000	0.4076	7.6162	0.0033	99.9893
20.0000	0.3753	7.9915	0.0020	99.9913
21.0000	0.2929	8.2844	0.0016	99.9929
22.0000	0.3350	8.6193	0.0011	99.9940
23.0000	0.2971	8.9165	0.0008	99.9948
24.0000	0.2886	9.2051	0.0009	99.9957
25.0000	0.3058	9.5108	0.0008	99.9965
26.0000	0.2784	9.7892	0.0006	99.9971
27.0000	0.4048	10.1940	0.0006	99.9977
28.0000	0.3196	10.5136	0.0007	99.9984
29.0000	0.2729	10.7865	0.0005	99.9989
30.0000	0.3007	11.0872	0.0003	99.9992
31.0000	0.2802	11.3673	0.0002	99.9994
32.0000	0.3334	11.7008	0.0001	99.9995
33.0000	0.3150	12.0157	0.0001	99.9996
34.0000	0.3553	12.3711	0.0001	99.9997
35.0000	0.2792	12.6502	0.0001	99.9998
36.0000	0.3007	12.9510	0.0000	99.9998
37.0000	0.3062	13.2572	0.0000	99.9998
38.0000	0.3009	13.5581	0.0000	99.9999
39.0000	0.2917	13.8498	0.0000	99.9999
40.0000	0.3069	14.1567	0.0000	99.9999

Function) ψ 的解析(shifted and dilated version)，可以分解並重組表示如下：

$$x(t) = \sum_K u_{J_0 K} \phi_{J_0 K}(t) + \sum_{J=J_0}^J \sum_K X_{J,K} \psi_{J,K}(t) \quad (15)$$

其中小波函數(Wavelet Function) ψ 及尺度函數(Scaling Function) ϕ 分別依特殊的設計可表示如下：

$$\psi_{J,K}(t) = 2^{-J/2} \psi(2^{-J}t - K) \quad (16)$$

$$\phi_{J,K}(t) = 2^{-J/2} \phi(2^{-J}t - K) \quad (17)$$

其中 $J, K \in \mathbb{Z}$ ，稱之為元素(atoms)。如上構成小波解析中正交的基底(Orthonormal basis)，則所有 $L^2(R)$ 空間中函數皆可依上述正交元素的線性組合展開表示。

$$u_{J_0, K} = \int x(t) \cdot \phi_{J,K}^*(t) dt \quad (18)$$

$$X_{J,K} = \int x(t) \cdot \Psi_{J,K}^*(t) dt \quad (19)$$

$$\begin{cases} X_D = \hat{X}_D \\ X_B = \hat{X}_B \end{cases} \quad (28)$$

五、預測式錯誤診斷與小波分析

首先，預測式錯誤診斷必須先建立製程模型，使能執行預測的功能。本文在第四章論及以 DPLS1 作動態系統的因果模型(轉移函數)識別，且[測試二]已經針對本文所討論的模擬 W&B 製程完成模型識別的部分。因此，以下討論皆假設製程模行為已知，且配合離散式小波轉換技術及選取的特定母波函數(db5 及 dmey)小波執行訊號的分解。最後，利用 PLS2 方法進行錯誤診斷的研究。

輸出預測值 $\hat{y}$ 可以透過製程識別所建立的轉移函數計算如下：

$$\hat{y}(s) = \begin{bmatrix} \hat{x}_D(s) \\ \hat{x}_B(s) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} R(s) \\ S(s) \end{bmatrix} \quad (25)$$

且透過小波轉換，所有輸入訊號可被分解為低頻成分(low frequency component, l)、中頻(middle frequency component, m)、高頻(high frequency component, h)，可表示如下：

$$R = R_l + R_m + R_h, \quad S = S_l + S_m + S_h \quad (26)$$

由於小波重建的可加性，因此輸出預測可由小波轉換後所得不同頻帶之訊號，分別通過轉移函數模型之成分計算而得。其公式計算如下：

$$\begin{aligned} \hat{X}_D &= a_1 \cdot G_{11} \cdot R_1 + a_2 \cdot G_{11} \cdot R_2 + a_3 \cdot G_{11} \cdot R_3 \\ &\quad + a_4 \cdot G_{21} \cdot S_1 + a_5 \cdot G_{21} \cdot S_2 + a_6 \cdot G_{21} \cdot S_3 \\ \hat{X}_B &= b_1 \cdot G_{21} \cdot R_1 + b_2 \cdot G_{21} \cdot R_2 + b_3 \cdot G_{21} \cdot R_3 \\ &\quad + b_4 \cdot G_{22} \cdot S_1 + b_5 \cdot G_{22} \cdot S_2 + b_6 \cdot G_{22} \cdot S_3 \end{aligned} \quad (27)$$

其中 R_i 、 S_i 其中之下標 $i=1\sim3$ ，分別代表由低頻至高頻訊號。常態下，理想情況的輸出實際值與預測值相同，可表示如下：

因此，吾人可以列式如下式並執行偏回歸分析如下：

$$\begin{aligned} X_D &= a_1 \cdot G_{11} \cdot R_1 + a_2 \cdot G_{11} \cdot R_2 + a_3 \cdot G_{11} \cdot R_3 \\ &\quad + a_4 \cdot G_{21} \cdot S_1 + a_5 \cdot G_{21} \cdot S_2 + a_6 \cdot G_{21} \cdot S_3 \\ X_B &= b_1 \cdot G_{21} \cdot R_1 + b_2 \cdot G_{21} \cdot R_2 + b_3 \cdot G_{21} \cdot R_3 \\ &\quad + b_4 \cdot G_{22} \cdot S_1 + b_5 \cdot G_{22} \cdot S_2 + b_6 \cdot G_{22} \cdot S_3 \end{aligned} \quad (29)$$

首先，在常態下建立預測變數 T^2 及 Q (或 SPE)正常超作上下限及輸出應答之 SPE 上下限，並分別分解各個頻帶輸入值成分之大小及計算其正常上下限值。希望結合小波分析的工具及貢獻圖(Contribution plot)的觀念，診斷下列錯誤的發生：

(1) 輸出值正常下

輸入值異常之來源量測變數及其頻帶(低頻偏移或高頻雜訊)。

(2) 輸入值正常而輸出值異常下

輸出值異常之來源量測變數，及其訊號的型態是否源於製程的動態異常，或源於輸入(未能測量之)異常的擾動，而造成輸出異常。

本文針對多變數線性系統-Wood & Berry 製程為例，先以 db5 母波(Mother Wavelet)模擬各種錯誤的預測式錯誤診斷結果如下：

1. 各類錯誤範例測試

執行 PLS 之前，設計預測變數 X 矩陣及被預測變數 Y 矩陣如下：

$$X = \begin{bmatrix} g_{11}r_1 & L & g_{11}r_3 & g_{12}r & L & g_{12}r_3 \\ L & g_{21}r_1 & L & g_{11}r_3 & g_{22}r & L & g_{12}r_3 \end{bmatrix}_{m \times 12} \quad (30)$$

$$Y = \begin{bmatrix} X_D \\ X_B \end{bmatrix} \quad (31)$$

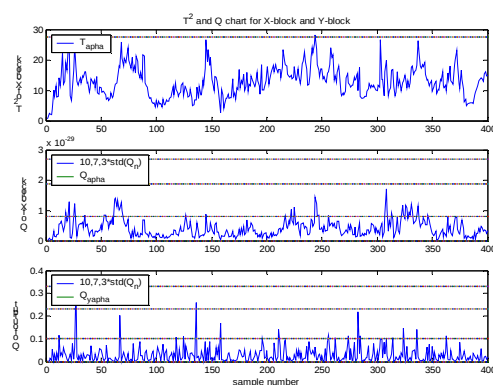
其中 $g_{ij}r_k$ 為輸入 R 之第 $k(k=1\sim3)$ 頻帶成分 r_k 經過 g_{ij} 轉移函數($i, j=1\sim2$)的預測, 得到的小波轉換輸入(Wavelet transformed input data)訊號對應之輸出預測值, 包含 12 個成分(變數), n 為取樣個數。而被預測變數 Y 為輸出實際量測值, 透過回歸之線性分析可以了解預測變數 X 及被預測變數 Y 是否皆處於常態, 亦可用以偵測錯誤的來源。

將 X 及 Y 經過均值移除(mean center)與正規化的前處理後, 以 NIPALS 演算法建立 PLS 模型, 得到 X 的權重(weights) w 及其負荷(loadings) p , 同時得到相對應的 Y 負荷(loadings) q 及內相關係數(inner relation coefficients) b_i 並可了解 X 空間解釋 Y 空間的變異量之比例大小(ssq)。經過上述模型的建立, 任何新的樣本都可以上列參數轉換至 X 變量 t 及 Y 變量 u 。

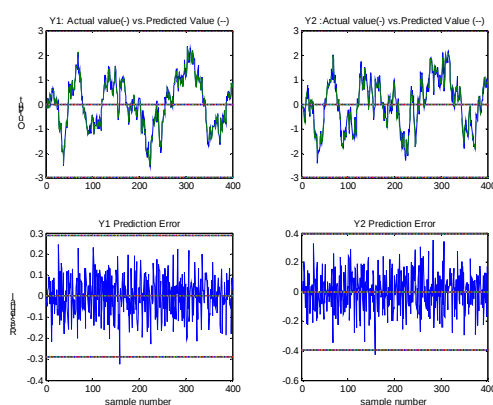
對於前變數個數的選擇, 實際製程中由於大量變數產生的線性相關問題, 必須將變異極小的變量移除。變異極小的變量除了可能代表無意義的雜訊外, 計算上可以避免 T^2 統計量運算時因分母過小造成計算上的困難, 例如導致 T^2 統計量於正常操作下反而異常變大的情況(T. Kourti and J. F. MacGregor, 1995)[2]。但是 P. Geladi and B. Kowalski (1986)[3]曾經提及移除變量使訊息失真的可能性。本文沒有刪除任何變量(即變數個數 $lv=12$)。並將結果整理用以偵錯。

(1) 正常操作狀態(樣本數 $n=400$)

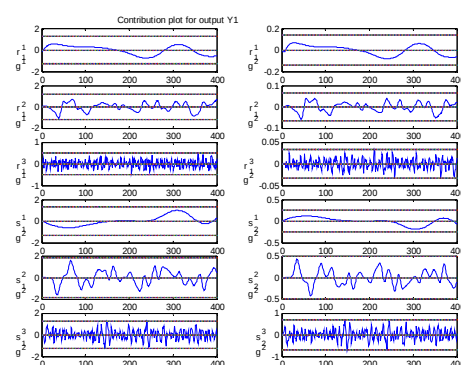
(輸入值 $R, S \sim N(0,0.5)$, 其輸入雜訊(input noise)分別皆為 $N(0,0.01)$, 而輸出雜訊為(Output noise) $N(0,0.2)$)。且其對常態



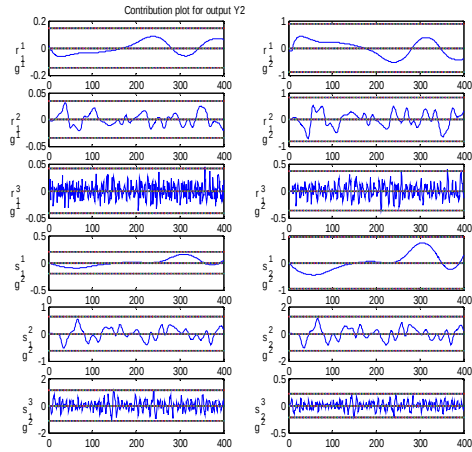
圖六、常態數據 T^2 及 Q 管制圖



圖七、常態數據 Y 殘差管制圖



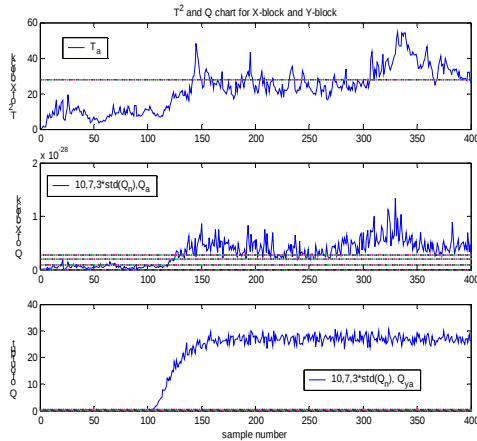
圖八、常態數據各頻帶對 $Y1$ 貢獻管制圖



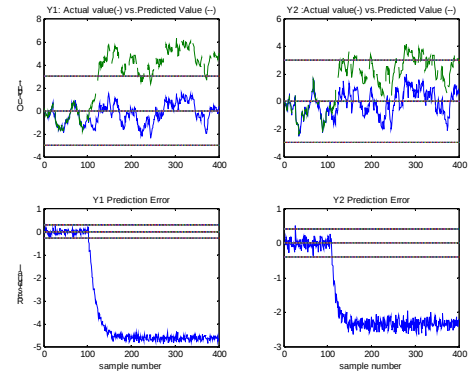
圖九、常態數據各頻帶對 Y2 貢獻管制圖

樣本作變量轉換後，所得 T^2 及 Q 管制圖如圖六。(以下設定 T^2 管制圖的上限值取 99%信賴區間， $\alpha=0.01$)。為了簡約篇幅，以下僅示範一種因輸入量測偏差引起的異常狀況。

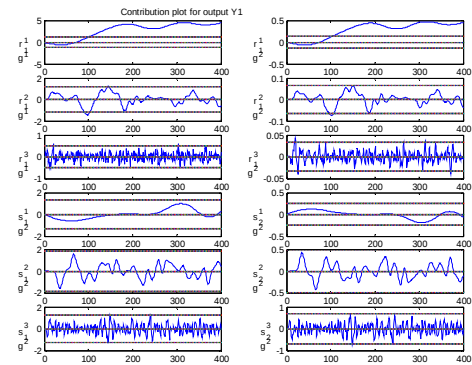
給定第一個輸入值 R 發生於 $t=100$ (時間獲取樣點)的量測偏移錯誤(5 個單位)，意即輸入之偏移錯誤未通過製程，僅影響預測值。



圖十、輸入量測偏差異常數據 T^2 及 Q 管制圖

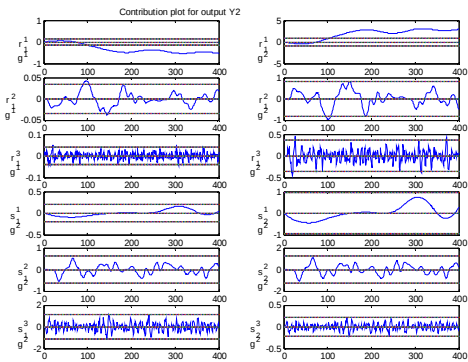


圖十一、輸入偵測器偏差異常數據 Y 殘差管制圖



圖十二、輸入偵測器偏差異常各頻帶對 Y1 貢獻管制圖

由第一個管制圖(圖十)顯示輸入有發生錯誤，且輸出的 SPE 圖超出上限。

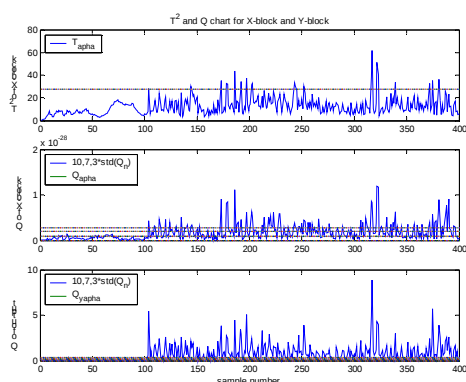


圖十三、輸入偵測器偏差異常各頻帶對 Y2 貢獻管制圖

而第二個管制圖(圖十一)顯示輸出之實際值皆在上下限的範圍內，但預測值卻受到輸入值量測錯誤的影響而使輸出預測值分布在正常範圍之外。然而，輸入錯誤的來源可由第三及第四個管制圖(圖十二

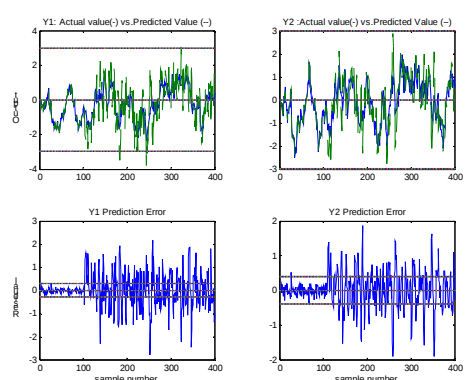
及十三)作診斷。由於此錯誤為低頻的偏移，因此最後兩個管制圖中和 r_1 有關之變數皆發生異常偏移正常範圍。由於來自輸入的量測錯誤會影響到所有和此量測量相關的所有輸出之預測，所以錯誤會成對出現。此乃本類錯誤的重要參考特徵。

(3)輸入的高頻量測錯誤($N(0,10)$)

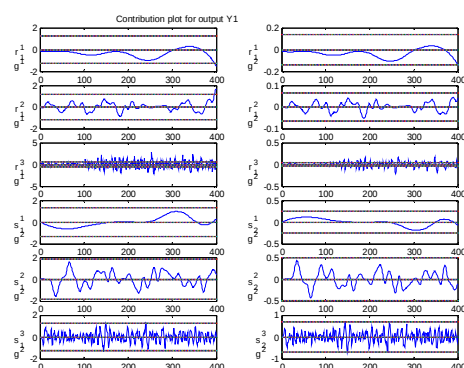


圖十四 輸入偵測器高頻異常數據 T^2 及 Q 管制圖

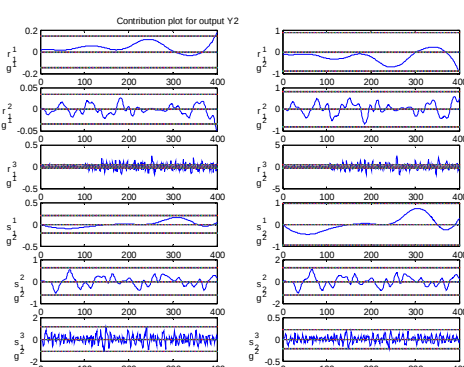
給定第一個輸入值 R ，一發生於 $t=100$ (時間獲取樣點)的高頻量測錯誤(變異為 10 單位($N(0,10)$))的高頻成分)，意即輸入之偏移錯誤未通過製程，僅影響預測值。



圖十五 輸入偵測器高頻異常數據 Y 殘差管制圖



圖十六、輸入偵測器高頻異常對 $Y1$ 貢獻管制圖



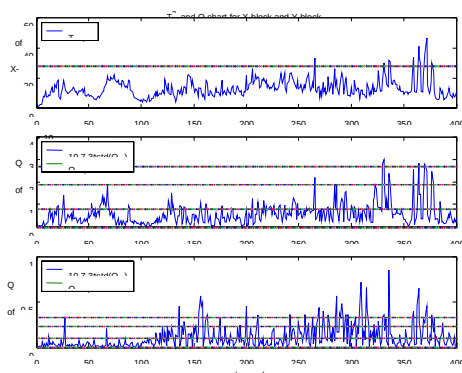
圖十七、輸入偵測器高頻異常對 $Y2$ 貢獻管制圖

由第一個管制圖(圖十四)顯示輸入有發生錯誤，且輸出的 SPE 圖超出上限。而第二個管制圖顯示輸出之實際值皆在上下限的範圍內，但預測值卻受到輸入值量測錯誤的影響而使輸出預測值高頻的震盪且分布在正常範圍之外。然而，輸入錯誤的來源可由第三及第四個管制圖作診斷。由於此錯誤為高頻雜訊，因此最後兩個管制圖中和 r_3 有關之變數皆發生異常偏移正常範圍。由於來自輸入的量測錯誤會影響到所有和此量測量相關的所有輸出之預測，所以錯誤會成對出現。此乃本類錯誤的重要參考特徵。

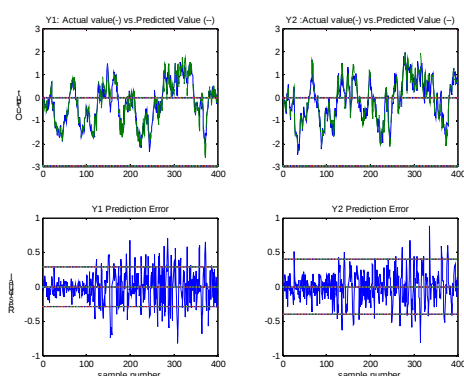
[比較] 輸入的高頻量測錯誤($N(0,1)$)

給定第一個輸入值 R ，一發生於 $t=100$ (時間或取樣點)的高頻量測錯誤(變異為 1 單位($N(0,1)$))的高頻成分)，意即輸

入之偏移錯誤未通過製程，僅影響預測值。

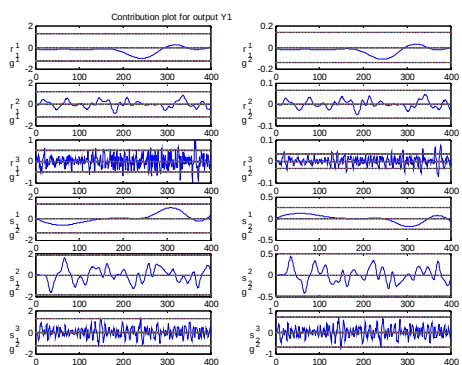


圖十八、輸入的高頻量測錯誤(N(0,1)) T^2 及Q管制圖



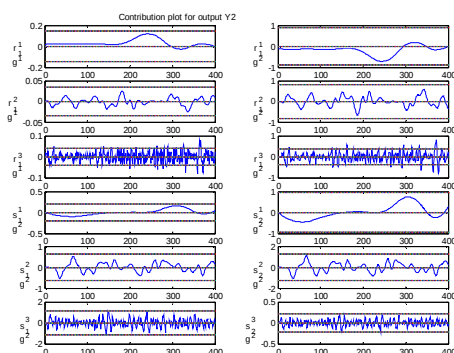
圖十九、輸入的高頻量測錯誤(N(0,1))Y殘差管制圖

由於此雜訊變異較上述小 10 倍，所以第一個管制圖(圖十八)輸入 X 的 T^2 及 Q 超出上限的分界並不明顯，且輸出的 SPE 圖超出上限雖可判斷，但起始點亦不



圖二十、輸入的高頻量測錯誤(N(0,1))輸

入對輸出 Y1 貢獻管制圖



圖二十一、輸入的高頻量測錯誤(N(0,1))輸入對輸出 Y2 貢獻管制圖

顯著。而第二個管制圖顯示輸出之實際值與預測值皆在上下限的範圍內，但兩量測輸出各自的預測殘差值卻高頻地超出正常範圍，但不及上例明顯。然而，輸入錯誤的來源可由第三及第四個管制圖作診斷。由於此錯誤為高頻雜訊，因此最後兩個管制圖中和 r_3 有關之變數皆應發生異常偏移正常範圍，但十分不顯著。可見其偵查的敏銳度(sensitive)亦有其限制存在。

六、 結論

本文結合傳統 FDI 方法的概念，用較為簡化的方法-動態 PLSR1 (dynamic PLSR 1)，建構製程的因果模型(Causal model);配合多變量統計原理為基礎的知識庫方法 (Knowledge-based method)-PLSR2，執行偵錯的功能。輔以離散式小波轉換(Discrete Wavelet Transform, DWT)技術，依頻率變化將訊號解析為趨勢變化(trend component)、週期變化(seasonal component)及高頻雜訊(stationary random noise component)三種分類成分。綜合上述，將製程輸入(Input)數據透過小波分析及模式預測，得到輸入訊號各頻帶對輸出的貢獻及輸出預測值(Predicted output)；並與製程輸出值作比較，作為錯誤診斷的基準及法則(Fault diagnosis rules)。因此，稱之為預測式錯誤診斷(Predictive Fault Diagnosis)。最後，以多變數線性系統-Wood & Berry 製程為例，測試其於各種異常狀況下的診斷效果。結果顯示，可直

接由製程輸入資料預測相對輸出錯誤發生的時間，並探討訊號趨勢偏移(bias or drift)及高頻擾動的發生，以診斷並推論造成錯誤的原因。

此種方法有別於前述的知識庫方法，不需要針對所有已知且可能發生的錯誤狀態收集樣本並建模及辨識。本法直接由常態建模及簡單的法則，便可作正確的推論診斷。但是實際應用於工廠的錯誤偵錯及診斷而言，因果模型(Causal model)數據的取得十分困難。然而，PLSR1 製程識別的步驟解決了系統動態的問題，輸入各頻帶訊號透過轉移函數的轉換，而與系統輸出完全線性相關。至於反應器內部錯誤的診斷，是後續值得探討的問題。

七、參考文獻

- [1] T. Kourti and J. F. MacGregor, Process analysis, monitoring and diagnosis, using multivariate projection methods, Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 28 (1995) 3-21.
- [2] W. Ku et al., Disturbance detection and isolation by dynamic principal component analysis, Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 30 (1995) 179-196.
- [3] P. Geladi and B. Kowalski, Partial Least-Squares Regression: A tutorial, Analytica Chimica Acta, 185 (1986) 1-17.
- [4] S. Wold et al., PLS-regression: a basic tool of chemometrics, Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 58 (2001) 109-130.
- [5] H. Wold, Estimation of Principle Components and Related Models by Iterative Least Squares, Multivariate Analysis, R. P. Krishnaiah, ed., Academic Press. New York (1966), p.391.
- [6] R. Manne, Analysis of Two Partial Least Squares Algorithms for Multivariate Calibration, Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems 2(1987) 283.
- [7] Inge. S. Helland, Some theoretical aspects of partial least squares regression, Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems 58(2001) 97-107.
- [8] N. L. Ricker, The use of biased least-squares estimators for parameters in discrete-time pulse response models, Ind. Engng Chem. Res. 27, 343-350.
- [9] M. H. Kaspar, Model identification for chemical process control, Ph.D. thesis, University of Wisconsin, Madison (1992).
- [10] M. H. Kaspar and W. H. Ray, Chemometric methods for process monitoring and high performance controller design, A.I.Ch.E. J. 38 (1992) 1593-1608.
- [11] S. J. Qin and T. J. McAvoy, Nonlinear PLS Modeling using Neural Networks, Comput. Chem. Eng. 16 (4) 379 (1992b).
- [12] U. Kruger et. Al., An Alternative PLS Algorithm for the Monitoring of Industrial Process, Proceedings of the American Control Conference, Arlington, VA June 25-27, 2001.
- [13] S. J. Qin, and T. J. McAvoy, Nonlinear PLS Modeling Via A Neural Net PLS Approach, Comput. Chem. Eng. 20 (2) 147-159 (1996).
- [14] L. Ljung, Issues in system identification, IEEE Control Sysytem Magazine, 11 (1), 25-29 (1991).
- [15] J. F. Macgregor and T. Kourti, Statistical process control of multivariate processes, Control Eng. Practice, vol. 3, No. 3, pp. 403-414 (1995).
- [16] A. Bakhtazad et al., Process data de-noising using wavelet transform, Intell. Data Analysis 3 (1999) 267-285.
- [17] K. A. Kosanovich and M. J. Piovoso, PCA of Wavelet Transformed Process Data for Monitoring, Intell. Data Analysis 1 (1997) 85-99.
- [18] B. M. Wise et al., A theoretical basis for the use of principlal component models for monitoring Multivariate process, Process Control and Quality, (1990) 1, pp.41-51.
- [19] 吳敏綺, 應用次空間程序識別做動態系統之監控及偵錯, 碩士論文, 國立台灣大學化學工程學研究所, 台北 (2002)。