

半监督稀疏鉴别核局部线性嵌入的 非线性过程故障检测

任世锦¹, 李新玉², 徐桂云², 潘剑寒¹, 杨茂云¹

(1.江苏师范大学计算机学院,江苏 徐州 221116)

(2.中国矿业大学机电工程学院,江苏 徐州 221116)

[摘要] 复杂过程往往受到运行状态复杂、工作条件恶劣等因素影响,过程数据具有很强的非线性、随机性和流形结构.近年来,核局部线性嵌入(kernel locally linear embedding, KLE)已经成功应用于复杂过程故障检测.然而 KLE 是一种无监督流形学习算法,能够保持样本的局部几何信息,忽视了总体数据样本集全局/非局部鉴别信息.针对上述问题,本文提出一种新的半监督稀疏鉴别核局部线性嵌入(semi-supervised sparse discriminant KLE, SSDKLE)算法并用于非线性工业过程故障检测.本文主要贡献如下:(1)把半监督学习与 Fisher 鉴别分析(fisher discriminant analysis, FDA)引入到 KLE,有效地利用了总体数据集几何鉴别信息,提高了算法对不同类别数据的分离性;(2)基于稀疏表示通过重构优化方法对信号自适应稀疏表达的优点,利用稀疏表示自适应选择最近邻样本以及数目,提高算法鲁棒性和局部保持性能;(3)引入局部邻域处理以及核技巧策略降低过程工况数据变化对监测算法的影响,提高非线性多工况过程监测方法的性能.基于 UCI 数据和 TE 平台的仿真实验结果验证了所提算法的有效性.

[关键词] 过程故障检测,核局部线性嵌入,半监督学习, Fisher 鉴别分析,稀疏表示

[中图分类号] TP391.9 **[文献标志码]** A **[文章编号]** 1001-4616(2018)04-0049-10

Semi-supervised Sparse Discriminant Kernel Locally Linear Embedding for Nonlinear Process Fault Detection

Ren Shijin¹, Li Xinyu², Xu Guiyun², Pan Jianhan¹, Yang Maoyun¹

(1.School of Computer Science & Technology, Jiangsu Normal University, Xuzhou 221116, China)

(2.School of Mechatronic Engineering, China University of Mining and Technology, Xuzhou 221116, China)

Abstract: Complex processes usually work under hazardous environment and varying operation conditions, and the process data exhibits high nonlinearity, randomness and local manifold structure. In recent years, kernel locally linear embedding (KLE) has been successfully applied in fault detection for complex processes. However, KLE is an unsupervised learning method and can preserve the nonlinear locality of the data while ignoring the global/nonlocal discriminant information. To address the issue, a semi-supervised sparse discriminant kernel locally linear embedding (SSDKLE) approach is developed and applied to fault detection for nonlinear process in this work. The main contributions of the developed algorithm are summed as follows: (1) Exploiting the labeled and unlabeled data samples, semi-supervised learning and Fisher discriminant analysis technique are introduced to KLE, effectively revealing the global geometric discriminant information hidden in the original data, and the performance of the proposed method is thus enhanced; (2) Considering that a signal can be sparsely represented by a set of atoms through an optimization algorithm, sparse representation is introduced to determine the neighborhood of the samples, improving the robustness and locality preserving of the proposed approach; (3) Local neighborhood processing strategy and kernel trick are introduced to LLE to reduce nonlinearity and distributions of process data with the changing operations, enhancing the performances of multimode and nonlinear process monitoring approaches. Experimental result on TE simulation platform demonstrates the efficiency and effectiveness of the proposed algorithm.

Key words: process fault detection, kernel locally linear embedding, semi-supervised learning, Fisher discriminant analysis, sparse representation

收稿日期:2018-08-16.

基金项目:国家自然科学基金(61703187、61773185).

通讯联系人:任世锦,副教授,研究方向:机器学习、过程与机械故障诊断. E-mail: sjren_phd@163.com

在过去 20 年里,数据驱动的化工过程监测在生产安全和产品质量保证中发挥重要的作用,已经引起很多学者和工程技术人员的关注.一般来说,过程数据集为高维数据,其内蕴维数通常远小于伴随空间的维数.多变量统计过程控制(multivariate statistical process control, MSPC)广泛应用于故障检测与诊断.常见的 MSPC 方法有主元分析(principal component analysis, PCA),偏最小二乘(partial least squares, PLS),独立主元分析(independent component analysis, ICA)以及 Fisher 鉴别分析(Fisher discriminant analysis, FDA)等^[1-4].

故障监测本质上是一个模式识别问题,其核心为特征抽取和识别.由于产品规格变化导致运行工况变化,复杂工业过程呈现非线性、非平稳特性.针对上述问题,人们提出各种扩展 MSPC 方法,比如核 PCA(kernel PCA, KPCA)、多尺度核 FDA、批次动态 KPCA、核高斯混合模型(kernel Gaussian mixture model, KGMM)等故障诊断方法^[5-8].流形学习能够发现隐藏在高维数据空间中有意义的低维几何结构,更好地发现原始数据结构,有利于抽取可靠、有效的数据特征.流形学习算法如局部线性嵌入(locally linear embedding, LLE)、最大方差伸展(maximum variance unfolding, MVU)、局部保持投影、局部切空间对齐(local tangent space alignment, LTSA)、数据局部和全局几何结构保持方法等,已经成功应用于工业过程故障诊断^[9-13].一般来说,未标记样本数量往往远大于标记样本,标记数据集无法准确描述全体数据分布.使用少量标记样本的有监督学习往往会产生过拟合、泛化性能不高的问题.半监督学习充分利用标记和未标记样本集信息,更好地揭示原始数据结构信息,有效克服有监督学习机的问题,有利于提高过程故障诊断的性能^[10,14-16].考虑到 KPCA 与 LLE 分别揭示数据集的全局和局部信息,文[10]提出融合半监督学习、KPCA 与 LLE 方法解决 LLE 方法无法利用全体数据样本信息问题.文[15]提出半监督概率 PLS 回归模型软测量方法,用于产品质量的准确性.文[16]提出了核学习驱动的半监督核 FDA 算法,并使用 k -近邻以及 Bayesian 推理准则结合的非线性过程故障诊断方法.

稀疏表示(sparse representation, SR)对信号与不同特性的数据字典元素进行匹配,根据不同特性的匹配数据字典元素对原始信号进行重构,实现不同特性成分分离和信号降噪^[17-25].SR 准确快速地捕获信号中的特征信息,无需事先确定基函数,具有较好的自适应性以及鲁棒性^[26-27].由于 SR 方法具有强大的信号处理能力,近年来人们使用 SR 方法提高现有机器学习算法性能.比如,根据类别样本集对测试样本重构的残差确定测试样本所属类别^[19].考虑到稀疏表示具有良好数据稀疏表示与去噪性能以及流形学习能够刻画数据几何结构的能力,有学者开展了运用 SR 技术提高流形学习算法性能的研究^[21,23-24].比如,稀疏保持投影(sparse preserving projection, SPP)与稀疏近邻保持嵌入(sparse neighborhood embedding, SNE)通过保持数据稀疏重构关系刻画数据稀疏结构、近邻/非近邻结构.另外,把鉴别信息引入稀疏维数约简算法也是抽取高效特征的可行方法^[21,24-26].文[21]提出了稀疏表示保持嵌入(sparse representation preserving embedding, SRPE)的维数约简算法.该方法通过求解鲁棒稀疏表示优化问题得到稀疏权重.稀疏权重能够较好地刻画了样本之间关系,因而根据稀疏权重构建近邻图能够更好刻画数据局部/非局部几何结构系,提高了 SRPE 动态过程故障诊断性能.文[25]提出鉴别稀疏保持嵌入(discriminant sparse preserving projection, DSPP)方法,DSPP 通过更新 SPP 的稀疏权重得到包含数据鉴别信息的鉴别稀疏权重,然后构建保持最优鉴别权重关系的维数约简优化问题.

KLLE 没有充分利用数据集鉴别信息,且容易受到数据噪声的影响,影响了 KILLE 的过程故障诊断性能. FDA 通过同时最大化异类样本散度距离、最小化同类样本散度距离,使得约简后低维数据空间中同类数据样本尽可能靠近、异类样本尽可能远离,较好地保持了数据的全局鉴别信息,广泛应用到复杂过程故障诊断中^[16-17,25].基于上述讨论,考虑到半监督核局部线性嵌入(semi-supervised kernel locally linear embedding, SKLLE)良好的维数约简性能^[10],本文提出了半监督稀疏鉴别核局部线性嵌入(semi-supervised sparse discriminant kernel locally linear embedding, SSDKLLE)算法,并用于过程故障检测.本文主要贡献如下:(1)充分利用标记样本和未标记样本信息,把半监督 KFDD 刻画的全局几何鉴别信息引入到 LLE 中,能够保持样本的局部几何信息,克服了传统 LLE 以及 SKLLE 没有利用全体数据样本的全局鉴别几何信息的问题;(2)基于数据稀疏性特点,利用 SR 方法自适应选择最近邻样本,提高算法的鲁棒性和准确刻画数据局部几何结构能力;(3)引入局部邻域处理以及核技巧策略消除过程工况数据分布变化对监测算法的影响,适合复杂过程故障监测的问题.基于 TE 平台的仿真实验结果验证了所提算法的有效性.

1 LLE 简介

给定数据集 $X=[\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N] \in R^{D \times N}$, 其输出数据集 $Y=[\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_N] \in R^{d \times N}$, d 远小于 D . 假定每个数据点的近邻数据量为 k , 那么最优重构权重矩阵 $W=[W_{ij}]_{i,j=1}^N$ 由下面的优化问题求取, 即

$$\arg \min \mathcal{E}(W) = \sum_{i=1}^N \left\| \mathbf{x}_i - \sum_{j=1}^N W_{ij} \mathbf{x}_j \right\|^2 \quad (1)$$

$$\text{s.t.} \begin{cases} \sum_{j=1}^N W_{ij} = 1, & i = 1, 2, \dots, N, \\ W_{ij} = 0, & \mathbf{x}_j \notin N(\mathbf{x}_i), \end{cases} \quad (2)$$

式中, $N(\mathbf{x}_i)$ 为 \mathbf{x}_i 的近邻集. 基于最优权重矩阵 W , 低维嵌入 \mathbf{y}_i 可以由下面重构误差最小化求取, 即

$$\begin{aligned} \arg \min \mathcal{E}(Y) &= \sum_{i=1}^N \left\| \mathbf{y}_i - \sum_{j=1}^N W_{ij} \mathbf{y}_j \right\|^2 = \text{tr}(Y^T M Y) \\ \text{s.t. } Y^T Y &= I_N, \end{aligned} \quad (3)$$

式中, $M=(I-W)^T(I-W)$.

LLE 算法为无监督流形学习算法, 没有利用标记样本信息, 且算法性能容易受到近邻数量、数据噪声以及样本稀疏的影响, 导致低维流形结构的破坏. 受到稀疏表示选择数据点近邻以及 SKLLE 启发^[10], 提出半监督稀疏鉴别核局部线性嵌入算法并用于过程故障诊断, 下节给出 SSDKLLE 算法的具体实现方法.

2 半监督稀疏鉴别核局部线性嵌入算法

SSDKLLE 算法分成两个阶段: (1) 首先使用特征映射把原始数据映射到高位特征空间, 在特征空间使用稀疏表示自适应选择样本点的近邻; 然后基于标记样本与未标记数据信息使用局部规格化距离确定近邻图, 消除过程工况对数据分布不确定性的影响; 由 KLLE 刻画数据局部信息, 提高了算法鲁棒性. 我们把该算法称之为半监督稀疏 KLLE (semisupervised sparse KLLE, SSKLLE); (2) 融合半监督 KFDA 与 SSKLLE 共同刻画数据的几何结构, 提高数据特征抽取的有效性.

2.1 SSKLLE

令 $X=[\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_u, \mathbf{x}_{u+1}, \dots, \mathbf{x}_N] \in R^{D \times N}$, 其中, $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_u$ 为标记样本, $\mathbf{x}_{u+1}, \dots, \mathbf{x}_N$ 表示未标记样本. 使用非线性映射函数 $\phi: R^D \rightarrow R^F$ 把原始数据集 X 映射到高维特征空间 $\phi(X)=[\phi(\mathbf{x}_1), \dots, \phi(\mathbf{x}_u), \phi(\mathbf{x}_{u+1}), \dots, \phi(\mathbf{x}_N)]$. 对每个训练样本 $\phi(\mathbf{x}_i)$, 把 $\phi(\mathbf{x}_i)$ 从 $\phi(X)$ 移出后的样本集记为 $\phi(X)_{-i}$, 使用 $\phi(X)_{-i}$ 作为字典对 $\phi(\mathbf{x}_i)$ 进行线性表示. 重构权重 $\mathbf{s}_i \in R^{N \times 1}$ ($i=1, 2, \dots, N$) 通过下面基于 l_1 -范数的最优重构问题求得^[28-29]

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{s}_i^c} & \left\| \mathbf{s}_i \right\|_1 \\ \text{s.t. } & \begin{cases} \left\| \phi(X)_{-i}^T \phi(\mathbf{x}_i) - \phi(X)_{-i}^T \phi(X)_{-i} \mathbf{s}_i \right\| < \varepsilon, \\ \mathbf{1}^T \mathbf{s}_i = 1, \end{cases} \end{aligned} \quad (4)$$

式中, $\mathbf{k}_i = \phi(X)_{-i}^T \phi(\mathbf{x}_i^c) = [k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_i), k(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_i), \dots, k(\mathbf{x}_{N_c}, \mathbf{x}_i)]^T$ 为与样本点 \mathbf{x}_i 有关的核向量, $\mathbf{K} = \phi(X)^T \phi(X) = [k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)]_{i,j=1,2,\dots,N}^N$ 为数据集对应的核矩阵, $k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_i) = \phi(\mathbf{x}_1)^T \phi(\mathbf{x}_i)$ 为满足 Mercer 条件的核函数^[30]. 求解式(4)所示上述优化问题得到 \mathbf{s}_i 最优解, 对 \mathbf{s}_i 进行填 0 扩展 $\tilde{\mathbf{s}}_i \in R^N$ 使得 $\phi(X)_{-i}^c \mathbf{s}_i^c = \phi(X) \tilde{\mathbf{s}}_i$ 成立. 这样 \mathbf{s}_i 中非零元素对应的样本点为 $\phi(\mathbf{x}_i)$ 近邻, 记为 $Nn(\phi(\mathbf{x}_i))$. 这样根据上面稀疏表示可以自适应确定样本的近邻.

对于多工况过程, 过程工况变化往往导致复杂工业过程数据点分布存在不确定性, 并且不同工况数据局部几何结构形式也有所不同. 因此, 消除不同工况数据的局部几何特性, 增强不同工况数据分布一致性, 有利于统计量构造^[31]. 为此, 利用样本的局部近邻关系对数据点与近邻数据点距离进行局部规格化, 消除工况变化对数据分布的影响. 对两个特征空间的数据 $\phi(\mathbf{x}_i), \phi(\mathbf{x}_j)$, $d'(\phi(\mathbf{x}_i), \phi(\mathbf{x}_j))$ 表示局部规格化距离定义为

$$d'(\phi(x_i), \phi(x_j)) = \sqrt{\frac{\|\phi(x_i) - \phi(x_j)\|^2}{S_i S_j}}, \quad (5)$$

$$S_i = \frac{1}{|Nn(\phi(x_i))|} \sum_{x_j^p \in Nn(\phi(x_i))} \|\phi(x_i) - \phi(x_j^p)\|^2, \quad (6)$$

式中, S_j 定义类似 S_i , $|Nn(\phi(x_i))|$ 为集合的基, x_j^p 为 x_i 的 p -th 近邻. 从式(6)定义可以看出, S_i 可以认为数据点 $\phi(x_i)$ 在局部近邻域中的“方差”, 表示 $\phi(x_i)$ 与其近邻样本之间的偏离程度. 由此可以看出, 式(5)定义的局部规格化距离利用数据的局部信息对每个工况数据进行标准化, 消除了不同工况变量自身变异大小的影响, 更好地处理多工况工业过程数据, 降低了不同数据分布不确定性问题.

对于标记数据集, 不同样本之间距离包含不同的分类信息量. 比如, 对于图 1 所示的两类数据(分别由矩形和三角形表示), 同类数据点 (c, d) 距离大于数据点 (a, b) 之间距离, 显然数据点 c 和 d 很有可能位于类别边界上. 后者数据对更加需要关注, 即数据对 (c, d) 所含信息量要大于数据对 (a, b) . 异类数据点对(比如 (e, f))所含信息量显然大于同类数据点对 (c, d) . 异类数据点对 (e, f) 之间的距离要小于数据点 (g, f) 之间距离, 显然前者更加难以区分, 需要更多的关注.

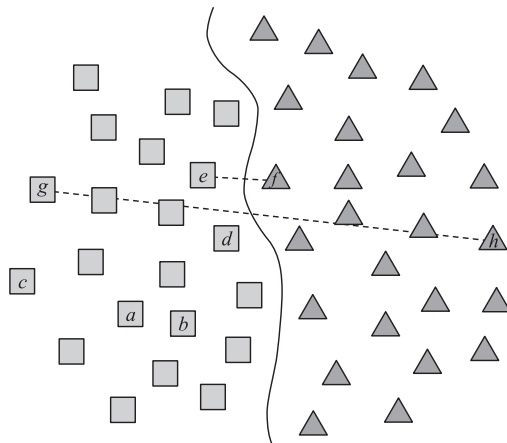


图 1 标记数据对包含的分类信息量

Fig. 1 Classification information hidden in data pairs

根据上述讨论, 为了充分利用标记样本与标记样本数据, 我们重新定义了距离

$$Z_{ij} = \begin{cases} (1-r)d'(\phi(x_i), \phi(x_j)), & x_i, x_j \text{ same class,} \\ (1+r)/d'(\phi(x_i), \phi(x_j)), & x_i, x_j \text{ different class,} \\ d'(\phi(x_i), \phi(x_j)), & x_i \text{ or } x_j \text{ unknown class,} \end{cases} \quad (7)$$

这里, r 为调整系数. r 取足够大值, 目的保证异类数据对之间的距离大于同类数据对之间的距离.

根据样本近邻关系, SKLLE 的优化问题可以写成如下形式

$$\arg \min \mathcal{E}(\mathbf{W}) = \sum_{i=1}^N \left(\left\| \phi(x_i) - \sum_{j=1}^N W_{ij} \phi(x_j) \right\|^2 + \lambda \sum_{j=1}^K W_{ij}^2 \right) \quad (8)$$

$$\text{s.t.} \begin{cases} \sum_{j=1}^N W_{ij} = 1, \\ W_{ij} = 0, \quad \phi(x_j) \notin Nn(\phi(x_i)), \end{cases} \quad (9)$$

式中, $Nn(x)$ 表示样本 x 的近邻集合, 对于同类样本, 其重构权重变大; 对异类样本, 其对应的重构权重变小. 对于低维嵌入空间数据样本集, 使用原始数据集局部和全局鉴别信息有利于提高约简空间中异类数据的分离性, 进而提高分类器精度^[26,32]. 考虑到 SKFDA 通过利用全体数据集鉴别信息提高维数约简的性能, 本文把 SKFDA 嵌入到 SKLLE 优化问题, 提出 SSDKLLE 算法, 并给出其具体描述.

2.2 SSDKLLE

根据核技巧理论, 特征空间 Ξ 的鉴别向量 ψ 由全体样本数据 $\phi(X)$ 的线性组合表示, 即

$$\psi(X) = A^T \phi(X), \quad (10)$$

式中, A 为投影矩阵, SKFDA 的正则化类间散度矩阵 S_{rw}^ϕ 和类内散度矩阵 S_{rw}^ϕ , 定义如下:^[16]

$$S_{rw}^\phi = (1-\beta)S_\phi^w + \beta I, \quad (11)$$

$$S_{rb}^\phi = (1-\beta)S_\phi^b + \beta S_\phi^t, \quad (12)$$

这里, $\beta \in [0, 1]$ 是折中参数, 一般取 0.5; I 是具有合适维的单位矩阵, S_ϕ^b 和 S_ϕ^w 分别为类间、类内散度矩阵, 其形式为

$$S_\phi^b = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N w_{i,j}^b (\psi(x_i) - \psi(x_j)) (\psi(x_i) - \psi(x_j))^T, \quad (13)$$

$$S_{\phi}^w = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N w_{i,j}^w (\boldsymbol{\psi}(x_i) - \boldsymbol{\psi}(x_j)) (\boldsymbol{\psi}(x_i) - \boldsymbol{\psi}(x_j))^T, \quad (14)$$

这里, $N = N_L + N_U$, N_L 和 N_U 分别为标记样本和未标记样本数量, $w_{i,j}^w$ 和 $w_{i,j}^b$ 分别为类内和类间加权, 其定义为

$$w_{i,j}^b = \begin{cases} \frac{1}{N_L} - \frac{1}{N_k}, & y_i \neq y_j, \\ 1/N_L, & \text{otherwise}, \end{cases} \quad (15)$$

$$w_{i,j}^w = \begin{cases} \frac{1}{N_k}, & y_i = y_j = k, k \in \{1, 2, \dots, M\}, \\ 0, & \text{otherwise}, \end{cases} \quad (16)$$

这里, y_i 为样本 x_i 的标记, N_k 为 k th 类样本数量. 类似地定义高维特征空间中总体样本矩阵, 其形式为

$$S_{\phi}^t = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N w_{i,j}^t (\boldsymbol{\psi}(x_i) - \boldsymbol{\psi}(x_j)) (\boldsymbol{\psi}(x_i) - \boldsymbol{\psi}(x_j))^T, \quad (17)$$

这里 $w_{i,j}^t = \frac{1}{N}$. 注意到散度矩阵均具有如下统一形式

$$S_{\phi}' = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N w_{i,j}' \boldsymbol{\psi}(x_i) \boldsymbol{\psi}(x_j)^T = \boldsymbol{\psi}(X) \mathbf{L}' \boldsymbol{\psi}(X)^T = \mathbf{A}^T \boldsymbol{\phi}(X) \mathbf{L}' \boldsymbol{\phi}(X)^T \mathbf{A}, \quad (18)$$

这里, $\mathbf{L}' = \mathbf{D}' - \mathbf{W}'$, \mathbf{D} 为 $N \times N$ 的对角矩阵, 其对角元素 $D'_{i,i} = \sum_{j=1}^N w'_{i,j}$, $\mathbf{W}' = [w'_{i,j}]_{i,j=1}^N$. 特征空间的投影矩阵中的向量 \mathbf{A} 可以写为 $\mathbf{A} = \boldsymbol{\phi}(X) \mathbf{P}$. 上式可以重新写为

$$S_{\phi}' = \mathbf{P}^T \boldsymbol{\phi}(X)^T \boldsymbol{\phi}(X) \mathbf{L}' \boldsymbol{\phi}(X)^T \boldsymbol{\phi}(X) \mathbf{P} = \mathbf{P}^T \mathbf{K} \mathbf{L}' \mathbf{K}^T \mathbf{P}, \quad (19)$$

这里, $\mathbf{K} = [k(x_i, x_j)]_{i,j=1}^N$ 为对称核矩阵, $k(x_i, x_j)$ 为满足 Mercer 条件的核函数. 令投影矩阵为正交矩阵, 即 $\mathbf{A}^T \mathbf{A} = \mathbf{I}$, 则 $\mathbf{A}^T \mathbf{A} = \mathbf{P}^T \mathbf{K} \mathbf{P} = \mathbf{I}$. 那么式 (13)、(14) 对应的正则化类内和类间散度矩阵转换为

$$S_{rw}^{\phi} = \mathbf{P}^T ((1-\beta) \mathbf{K} \mathbf{L}^w \mathbf{K}^T + \beta \mathbf{K}) \mathbf{P} = \mathbf{P}^T S_{rw} \mathbf{P}, \quad (20)$$

$$S_{rb}^{\phi} = \mathbf{P}^T ((1-\beta) \mathbf{K} \mathbf{L}^b \mathbf{K}^T + \beta \mathbf{K} \mathbf{L}^t \mathbf{K}^T) \mathbf{P} = \mathbf{P}^T S_{rb} \mathbf{P}, \quad (21)$$

这里, $S_{rw} = (1-\beta) \mathbf{K} \mathbf{L}^w \mathbf{K}^T + \beta \mathbf{K}$, $S_{rb} = (1-\beta) \mathbf{K} \mathbf{L}^b \mathbf{K}^T + \beta \mathbf{K} \mathbf{L}^t \mathbf{K}^T$. 显然矩阵 S_{rw} 和 S_{rb} 是非奇异的. 为保持数据的局部结构以及全局鉴别结构信息, 最优投影矩阵参数 \mathbf{P} 可通过求解下面的 SSDKLE 优化问题得到, 即

$$\begin{aligned} \min J(\mathbf{P}) &= \alpha \sum_{i=1}^N \left\| \mathbf{P}^T \boldsymbol{\phi}(X)^T \boldsymbol{\phi}(x_i) - \sum_{j=1}^N W_{ij} \mathbf{P}^T \boldsymbol{\phi}(X)^T \boldsymbol{\phi}(x_j) \right\|^2 - (1-\alpha) \text{tr}(\mathbf{P}^T S_{rw}^{-1} S_{rb} \mathbf{P}) = \\ &\quad \alpha \text{tr}(\mathbf{P}^T \mathbf{K} \mathbf{M} \mathbf{K} \mathbf{P}) - (1-\alpha) \text{tr}(\mathbf{P}^T S_{rw}^{-1} S_{rb} \mathbf{P}) \end{aligned} \quad (22)$$

$$\text{s.t. } \mathbf{P}^T \mathbf{K} \mathbf{P} = \mathbf{I}, \quad (23)$$

这里, $\alpha \in [0, 1]$ 实现数据局部结构保持与全局鉴别信息保持的折中, $\text{tr}(\cdot)$ 表示矩阵的迹, $\mathbf{M} = (\mathbf{I} - \mathbf{W})^T (\mathbf{I} - \mathbf{W})$. 注意到约束条件可以写为 $\mathbf{P}^T \mathbf{K} \mathbf{P} = \mathbf{P}^T \boldsymbol{\phi}(X)^T \boldsymbol{\phi}(X) \mathbf{P} = \mathbf{I}$, 显然约束条件降低了约简空间数据特征的冗余性. 上面优化问题充分利用标记和未标记数据样本, 目标函数第一项保留了数据的局部几何信息, 第二项表示在低维空间内数据保持数据全局鉴别信息. 显然, 当 $\alpha = 0$ 时, 上述优化问题转化为

$$\begin{cases} \arg \max J(\mathbf{P}) = \text{tr}(\mathbf{P}^T S_{rw}^{-1} S_{rb} \mathbf{P}) \\ \text{s.t. } \mathbf{P}^T \mathbf{K} \mathbf{P} = \mathbf{I}. \end{cases} \quad (24)$$

上述优化问题等价于 Ge et al. 提出的 SKFDA 算法^[16], 该结论由下面的定理 1 给出.

定理 1 SKFDA 算法对应的优化问题为如下形式

$$\begin{cases} \arg \max J(\mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^T S_{rb} \mathbf{p}}{\mathbf{p}^T S_{rw} \mathbf{p}} \\ \text{s.t. } \mathbf{p}^T \mathbf{K} \mathbf{p} = 1. \end{cases} \quad (25)$$

那么该优化问题等价于式 (24) 所示的优化问题.

证明 由于上述两者优化问题的约束条件相同, 所以我们这里忽略约束条件. 显然 SKFDA 的最优解

转化为如下的广义特征值问题

$$S_{rb}p = \lambda S_{rw}p, \quad (26)$$

这里 λ 为广义特征值, p 为相应的特征向量. 由于 S_{rw} 是非奇异的, 式(26)对应最优解与式(25)最优解相同, 两者优化问题等价. 证毕.

由定理 1 可知, 式(24)所示优化问题等价于 SKFDA 算法. 当 $\alpha=1$ 时, 该算法退化到 SKLLE. 这样通过调节参数 α 值实现两种算法的折中, 更好地利用数据的全局鉴别信息和局部信息, 有效地适应复杂数据的维数约简问题. 下面给出由式(22)和(23)所示优化问题求解最优投影矩阵 P 方法.

根据式(22)和(23)所示优化问题目标函数和约束条件构造如下所示的 Lagrange 方程:

$$L(P, \lambda) = \alpha \text{tr}(P^T K M K P) - (1-\alpha) \text{tr}(P^T S_{rw}^{-1} S_{rb} P) - \lambda (P^T K P - I), \quad (27)$$

这里, λ 为 Lagrange 乘子. 上式分别对 P 和 λ 求导并等于 0 可得:

$$\frac{\delta L(P, \lambda)}{\delta P} = \alpha K M K P + \alpha (K M K)^T P - (1-\alpha) S_{rw}^{-1} S_{rb} P - (1-\alpha) (S_{rw}^{-1} S_{rb})^T P - 2\lambda K P = 0, \quad (28)$$

$$\frac{\delta L(P, \lambda)}{\delta \lambda} = P^T K P - I = 0. \quad (29)$$

注意到矩阵 S_{rw} , S_{rb} , K 以及 M 均是对称的, 对式(27)~(29)进行整理可得:

$$(\alpha (K M K)^T - (1-\alpha) S_{rw}^{-1} S_{rb}) P = \lambda K P. \quad (30)$$

这样求解式(22)和(23)所示优化问题转化为上面的广义特征值问题. 设矩阵 $K^{-1}(\alpha (K M K)^T - (1-\alpha) S_{rw}^{-1} S_{rb})$ 的特征值为升序排列, 即 $0 < \gamma_1 \leq \gamma_2 \leq \dots$, 那么前 d 个非零最小特征值对应的特征向量 p_1, p_2, \dots, p_d 作为矩阵 P 的列向量, 即 $P = [p_1, p_2, \dots, p_d]$. 对于新的数据样本 x , 那么其在低维空间投影为

$$\psi(x) = P^T \phi(x) = P^T k_x, \quad (31)$$

这里, $k_x = [k(x_1, x), k(x_2, x), \dots, k(x_N, x)]^T$. 常用的核函数有高斯函数、多项式核函数等, 这里选取高斯核函数 $k(x_2, x_1) = \exp(-\gamma_h \|x_2 - x_1\|^2)$. 核函数参数 γ_h 对算法的性能影响很大, 常见的核函数确定方法有试错法、网格搜索方法、生物智能优化算法(遗传算法、粒子群算法等), 这些方法需要大量的计算. 本文使用文[30]提出的确定核函数参数方法, 即 $\gamma_h = 1/(D\sqrt{2})$, D 为输入空间数据的维数.

在使用核方法时, 往往需要对核矩阵 K 均值中心化. 假设其中心化核矩阵为 \tilde{K} , 其计算方法为

$$\tilde{K} = K - KE - EK + EKE, \quad (32)$$

这里矩阵 $E = [e_{ij}]_{i,j=1}^N \in R^{N \times N}$, $e_{ij} = 1/N$. 新样本对应的中心化核向量为

$$\tilde{k}_x = k_x - I_{1 \times N} K - k_x I_{N \times N} + I_{1 \times N} K I_{N \times N}, \quad (33)$$

这里, $I_{1 \times N} = (1/N)_{1 \times N}$, $I_{N \times N} = (1/N)_{N \times N}$. 基于 SSDKLE 的过程故障检测算法过程如下所示:

输入: 标记数据集 X_L , 未标记数据集 X_U , 记 $X = [X_L, X_U]$, 约简维数设为 d , 核函数参数 γ , 近邻阈值 ε , 正则化参数 β , 折中系数 α .

输出: 投影矩阵 P .

步骤 1 根据式(32)计算中心化核矩阵 \tilde{K} , 对 X 中样本通过式(4)所示优化问题得到重构系数 s_i , 由 $|s_i| \geq \varepsilon$ 确定样本 x_i 的近邻样本集 $Nn(\phi(x_i))$, $i=1, 2, \dots, N$.

步骤 2 求解式(8)、(9)所示 SSKLLE 优化问题得到最优重构矩阵 W .

步骤 3 由式(14)、(15)、(19)计算正则化类内散度矩阵 S_{rw}^ϕ 、类间散度矩阵 S_{rb}^ϕ 和总体散度矩阵 S_n^ϕ .

步骤 4 根据式(30)计算投影矩阵 P .

步骤 5 对于样本 x , 根据式(33)计算中心化核向量 \tilde{k}_x , 低维约简样本为 $z = P^T \tilde{k}_x$.

步骤 6 由 KNN 确定样本 x 的类别, 由此判断过程当前状态.

基于 SSDKLE 的过程故障检测算法过程如图 2 所示.

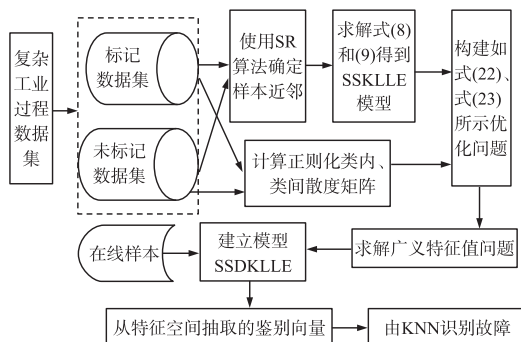


图 2 基于 SSDKLE 的过程故障检测方法流程图

Fig. 2 Schematic diagram of SSDKLE for process fault detection

3 实验仿真

在本节,我们对实际数据集(UCI 数据集)和 TE 过程平台做大量的实验,以更客观准确地估计 SSDKLE 的性能. 我们把 SSDKLE 与监督 LPP(supervised LPP,SLPP)、DSPP 以及 ISKLE^[10] 算法进行比较.

在仿真中,由稀疏表示确定的近邻数量一般限制在 $[5,15]$,式(4)所示约束条件阈值设为 10^{-4} ,式(22)的折中参数 α 在 $[0.1,0.8]$ 内调整. 所有结果基于最优模型参数得到.

3.1 UCI 数据集

首先在 Benchmark 数据集上进行实验仿真,该实验仿真检验本文算法对高维数据和低维数据集处理的有效性. 这里使用 7 个真实数据集进行仿真实验,其中 2 个数据集是图像数据集(人脸图像和手写数字图像),其余数据集从 UC Irvine 机器学习库(<http://archive.ics.uci.edu/ml/>)下载. 这些数据集的具体指标见表 1.

在实验中,每类数据随机选取 20%的样本数量作为标记样本,剩余数据作为未标记样本,对 SSDKLE 算法的评估结果见表 2. 从表 2 可以看出,SSDKLE 优于其他分类算法. 在所有的特征抽取算法中,SLPP 分类方法总体来说表现最差,SSDKLE 和 ISKLE 算法性能可以接受. SSDKLE 算法性能优于其他算法,其原因在于 SSDKLE 利用了隐藏在数据中的局部几何信息和全局鉴别信息,具有良好的鲁棒性、自动确定近邻等优点,因而获得良好的性能.

表 1 UCI 数据集的统计量

Table 1 Statistics of UCI data sets			
data set	size	number of features	number of classes
MNIST	10 000	784	10
Yale	165	4 096	15
Waveform	800	21	3
Vowels	990	10	11
Libras	360	90	15
Control Chart	600	60	6
Breast Cancer	569	30	2

表 2 7 个数据集的聚类精度

Table 2 Clustering accuracy on seven data sets %				
data sets	SSDKLE	ISKLE	DSPP	SLPP
MNIST	82.6	76.5	70.6	68.3
Yale	93.7	89.4	87.1	84.1
Waveform	75.5	73.8	72.3	61.9
Vowel	72.4	69.6	67.7	63.9
Libras	79.6	77.8	75.9	72.2
Control Chart	80.8	79.1	76.8	71.5
Breast Cancer	99.3	97.5	97.1	95.4

3.2 TE Benchmark 仿真

Tennessee Eastman(TE)仿真平台已经被广泛应用于评估过程监测算法的有效性^[33-35]. TE 平台的工作流程图见图 3. 该过程由 5 个主要部分组成,即连续搅拌式反应釜、分凝器、气液分离塔、再沸器、离心式压缩机 5 个操作单元组成,包含 30 个微分方程、148 个代数方程. 数据具有非线性、强耦合、时变等特点,

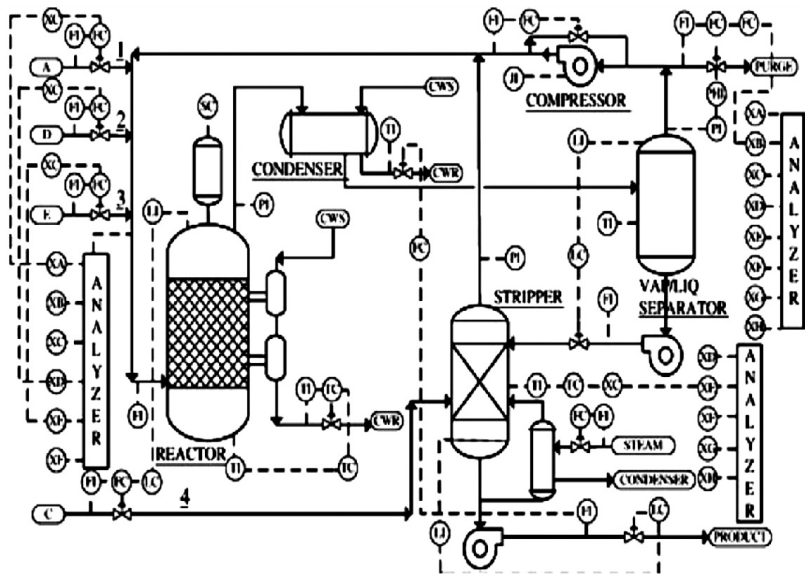


图 3 TE 过程流程图

Fig. 3 Schematic diagram of the TE process

是典型的复杂工业过程. 该过程有 A、C、D、E 4 种气体进料成分, 每种进料中还含有惰性不可溶的 B 组分, 过程产物为 G 和 H.

TE 过程一共有 41 个测量变量和 12 个控制变量^[34]. 本文选取了常用的与过程运行状况紧密相关的 33 个过程变量作为建模变量, 包括 22 个测量变量和 11 个操作变量, 这 33 个变量的详细说明见表 3. 如同文献[35], 选择 16 个变量用于过程监测(详见表 4).

表 3 TE 过程建模变量
Table 3 TE process modeling variables

编号	变量名	编号	变量名	编号	变量名
1	物料 A 流量	12	分离器液位	23	D 进料量
2	物料 D 流量	13	分离器压力	24	E 进料量
3	物料 E 流量	14	分离器塔底流量	25	A 进料量
4	总进料流量	15	汽提塔等级	26	总进料量
5	循环流量	16	汽提塔压力	27	压缩机再循环阀
6	反应器进料流速	17	汽提塔底部流量	28	排放阀
7	反应器压力	18	汽提塔温度	29	分离器罐液流量
8	反应器等级	19	汽提塔上部蒸汽流量	30	汽提器液体产品流量
9	反应器温度	20	压缩机功率	31	汽提器水阀阀
10	排空速率	21	反应器冷却水出口温度	32	反应器冷却水流量
11	分离器温度	22	分离器冷却水出口温度	33	冷凝器冷却水流量

表 4 TE 过程 16 个监测变量
Table 4 TE process monitoring variables

编号	变量名	编号	变量名	编号	变量名
1	物料 A 流量	7	反应器温度	13	汽提塔底部流量
2	物料 D 流量	8	排空速率	14	汽提塔温度
3	物料 E 流量	9	分离器温度	15	反应器冷却水出口温度
4	总进料流量	10	分离器压力	16	分离器冷却水出口温度
5	循环流量	11	分离器塔底流量		
6	反应器进料流速	12	汽提塔压力		

在 TE 平台上, 可以模拟 6 种不同的操作工况以适应不同产品质量的需要. 在本文中, 选取了 2 种操作工况进行多工况过程的模拟, 每种工况对应产品质量如表 5 所示. 在正常工况下运行仿真时间 60 h, 数据采样间隔为 0.05 h, 首先 20 h 工作在模式 1, 然后 20 h 工作于模式 2, 这样每个模式共有 400 个数据点, 共有 1 200 个数据点组成历史数据.

表 5 仿真实验中使用的 2 种运行模式
Table 5 Two operation modes in the simulation

mode	mass ratio G/H	production rate
1	50/50	7 038 kg·h ⁻¹ G and 7 038 kg·h ⁻¹ H
2	10/90	1 111 kg·h ⁻¹ G and 10 000 kg·h ⁻¹ H

每个模式下引入 1 个正常工况和 1~10 种故障, 其中, 故障 1~7 是过程变量的阶跃变化, 故障 8~10 是变量的随机变化故障. 有关这 10 种故障类型的详细描述可以参考文[34]. 从每个稳态正常工况采集 60 个数据点, 随机选取故障数据 200 个, 这样数据分为正常数据和故障数据两类. 为了便于说明本文所提算法的性能, 我们设低维约简空间为 2D 空间. 由局部 Fisher 鉴别分析(local Fisher discriminant analysis, LFDA)对两类高维过程数据进行维数约简(全部数据均为标记数据), 在 2 维约简空间中作为原始数据的真实分布(如图 4(a)所示, 星型和圆分别表示故障状态和正常状态数据). 我们从两类数据随机分别选取 50 和 20 个故障数据、正常数据作为未标记数据(“+”表示), 其余样本均为标记样本, 标记样本与未标记样本的分布如图 4(a)所示. 图 4(b)~(d)分别为 KFDA、ISKLE 和 SSDKLE 对原始数据样本进行局部数据结构抽取的结果. 通过图 4(b)~(d)对比可以看出, 与 ISKLE 和 KFDA 相比, SSDKLE 明显地提高了不同类别数据的分离性, 相同类别数据散度分布更加紧凑, 更有利于识别不同类别数据, 能够取得更好的故障识别精度. 从仿真效果可以看出, 本文算法提高了 TE 过程正常状态和故障状态数据的分离性, 有利于增强故障检测的准确率.

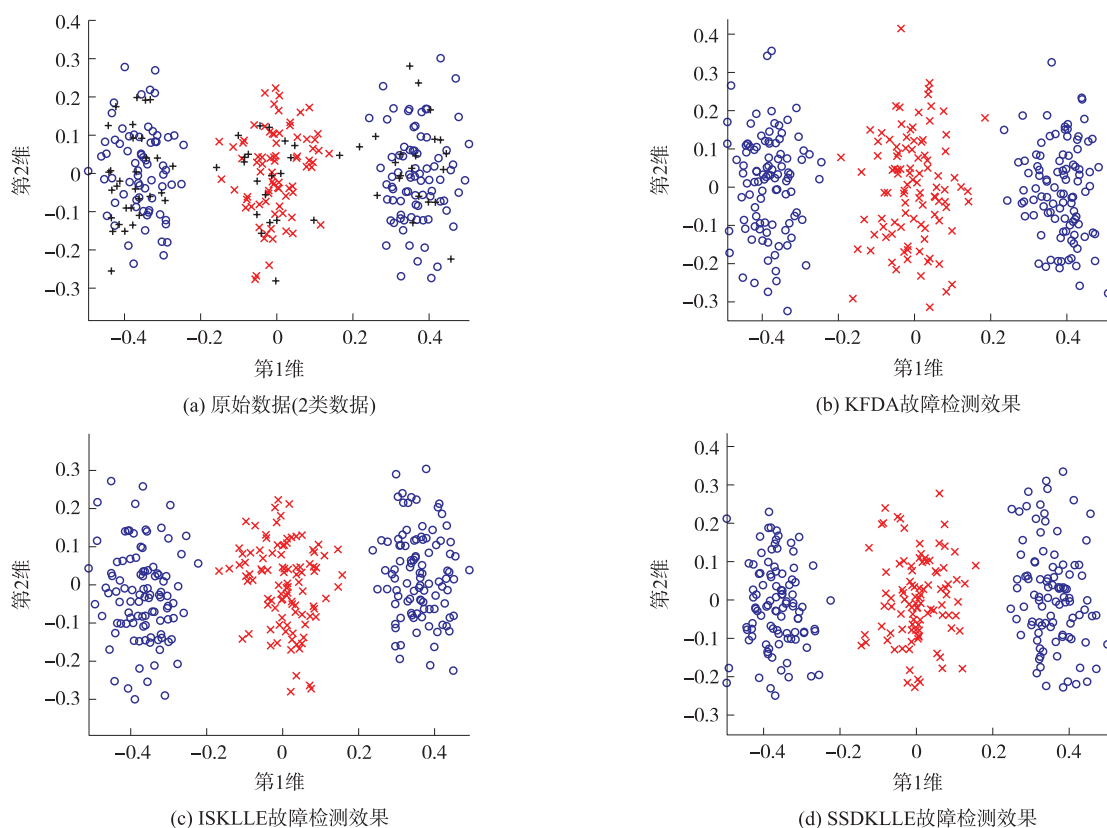


图4 KFDA, ISKLLE 和 SSDKLLE 维数约简效果对比

Fig. 4 Comparison of features extracted by KFDA, ISKLLE and SSDKLLE

4 结语

提出一种半监督稀疏鉴别核局部线性嵌入的非线性工业过程故障检测方法. 新方法克服了传统 KLLE 无法利用标记样本以及忽视全体数据样本集鉴别信息问题, 抽取有效的数据特征. 该方法利用稀疏表示自适应确定样本的最近邻样本集合, 提高 SSDKLLE 的数据局部保持性能和鲁棒性; 引入局部邻域处理以及核技巧策略提高描述非线性多工况数据分布的能力, 有利于提高后续过程监测方法性能. 文中给出了 SSDKLLE 算法详细推导过程, 并讨论了与其他算法的关系, 最后使用 UCI 数据集和 TE 平台仿真数据验证本文算法的有效性.

[参考文献]

- [1] WANG L, SHI H B. Improved kernel PLS-based fault detection approach for nonlinear chemical processes[J]. Chinese journal of chemical engineering, 2014, 22(6): 657-663.
- [2] TONG C D, PALAZOGLU A, YAN X F. Improved ICA for process monitoring based on ensemble learning and Bayesian inference[J]. Chemometrics and intelligent laboratory systems, 2014, 135: 141-149.
- [3] KANO M, HASEBE S, HASHIMOTO I H. A new multivariate statistical process monitoring method using principal component analysis[J]. Computer & chemical engineering, 2001, 25(7/8): 1103-1113.
- [4] NOMIKOS P, MACGREGOR J F. Monitoring batch processes using multiway principal component analysis[J]. American chemical engineering journal, 1994, 40(8): 1361-1375.
- [5] GE Z, YANG C, SONG Z. Improved kernel PCA-based monitoring approach for nonlinear processes[J]. Chemical engineering science, 2009, 64(9): 2245-2255.
- [6] JIE Y. A nonlinear kernel Gaussian mixture model based inferential monitoring approach for fault detection and diagnosis of chemical processes[J]. Chemical engineering science, 2012, 68(1): 506-519.
- [7] JIANG Q C, YAN X F. Monitoring multi-mode plant-wide processes by using mutual information-based multi-block PCA, joint probability, and Bayesian inference[J]. Chemometrics and intelligent laboratory systems, 2014, 136: 121-137.
- [8] NOR N M, HUSSAIN M A, HASSAN C R. Fault diagnosis and classification framework using multi-scale classification based on kernel Fisher discriminant analysis for chemical process system[J]. Applied soft computing, 2017, 61: 959-972.

- [9] LIU Y J, CHEN T, YAO Y. Nonlinear process monitoring and fault isolation using extended maximum variance unfolding[J]. Journal of process control, 2014, 24(6): 880–891.
- [10] ZHANG Y W, FU Y J, WANG Z B, et al. Fault detection based on modified kernel semi-supervised locally linear embedding[J]. IEEE access, 2018, 6: 479–487.
- [11] RONG G, LIU S Y, SHAO J D. Fault diagnosis by locality preserving discriminant analysis and its kernel variation[J]. Computer & chemical engineering, 2013, 49: 105–113.
- [12] CHEN G, LIU F L, HUANG W. Sparse discriminant manifold projections for bearing fault diagnosis[J]. Journal of sound and vibration, 2017, 399: 330–344.
- [13] YU J B. Hidden Markov models combining local and global information for nonlinear and multimodal process monitoring[J]. Journal of process control, 2010, 20: 344–359.
- [14] WANG X G, FENG H C, FAN Y P. Fault detection and classification for complex processes using semi-supervised learning algorithm[J]. Chemometrics and intelligent laboratory systems, 2015, 149: 24–32.
- [15] ZHEN J H, SONG Z H. Semi-supervised learning for probabilistic partial least squares regression model and soft sensor application[J]. Journal of process control, 2018, 64: 123–131.
- [16] GE Z Q, ZHONG S Y, ZHANG Y W. Semi-supervised kernel learning for FDA model and its application for fault classification in industrial processes[J]. IEEE transactions on industrial informatics, 2016, 12(4): 1403–1411.
- [17] FENG J, WANG J, ZHANG H G, et al. Fault diagnosis method of joint fisher discriminant analysis based on the local and global manifold learning and its kernel version[J]. IEEE transactions on automation science and engineering, 2016, 13(1): 122–133.
- [18] WEI J, MENG M, WANG J B, et al. Adaptive semi-supervised dimensionality reduction with sparse representation using pairwise constraints[J]. Neurocomputing, 2016, 177: 564–571.
- [19] XU Y, SHEN F M, XU X, et al. Large-scale image retrieval with upervised sparse hashing[J]. Neurocomputing, 2017, 229: 45–53.
- [20] SUN R B, YANG Z B, CHEN X F, et al. Gear fault diagnosis based on the structured sparsity time-frequency analysis[J]. Mechanical systems and signal processing, 2018, 102: 346–363.
- [21] XIAO Z H, WANG H G, ZHOU J W. Robust dynamic process monitoring based on sparse representation preserving embedding[J]. Journal of process control, 2016, 40: 119–133.
- [22] GU J, JIAO L C, YANG S Y, et al. Sparse learning based fuzzy c-means clustering[J]. Knowledge-based systems, 2017, 119: 113–125.
- [23] ZHANG Y, XIANG M, YANG B. Linear dimensionality reduction based on hybrid structure preserving projections[J]. Neurocomputing, 2016, 173: 518–529.
- [24] SHAO Z F, ZHANG L. Sparse dimensionality reduction of hyperspectral image based on semi-supervised local Fisher discriminant analysis[J]. International journal of applied earth observation and geoinformation, 2014, 31: 122–129.
- [25] 马小虎, 谭延琪. 基于鉴别稀疏保持嵌入的人脸识别算法[J]. 自动化学报, 2014, 40(1): 73–82.
- [26] CHEN P, JIAO L C, LIU F, et al. Semi-supervised double sparse graphs based discriminant analysis for dimensionality reduction[J]. Pattern recognition, 2017, 61: 361–378.
- [27] HE G, DING K, LIN H. Gearbox coupling modulation separation method based on match pursuit and correlation filtering[J]. Mechanical systems and signal processing, 2016, 66/67: 597–611.
- [28] 李海山. 基于稀疏表示理论的地震信号处理方法研究[D]. 青岛: 中国石油大学, 2013.
- [29] 杜佳兵, 唐刚, 王华庆. 基于信号空间压缩感知算法的机械故障诊断[J]. 北京化工大学学报(自然科学版), 2017, 44(5): 85–90.
- [30] VAREWYCK M, MARTENS J P. A practical approach to model selection for support vector machines with a Gaussian kernel[J]. IEEE transactions on systems, man, and cybernetics Part B(Cybernetics), 2011, 41(2): 330–340.
- [31] 郑鑫, 田学民, 张汉元. 基于动态稀疏保局投影的故障检测方法[J]. 化工学报, 2016, 67(3): 833–838.
- [32] YU L, YANF D, WANG H. Sparse multiple maximum scatter difference for dimensionality reduction[J]. Digital signal processing, 2017, 62: 91–100.
- [33] DOWNS J J, VOGEL E F. A plant-wide industrial process control problem[J]. Computers & chemical engineering, 1993, 17(3): 245–255.
- [34] LEE J M, QIN S J, LEE I B. Fault detection and diagnosis based on modified independent component analysis[J]. American chemical engineering journal, 2006, 52(10): 3501–3514.
- [35] 文巧钧. 基于状态空间模型的复杂动态过程监测方法研究[D]. 杭州: 浙江大学, 2014.

[责任编辑: 丁 蓉]