

文章编号: 1001-0920(2013)11-1691-06

## 用于故障检测的集成核主分量分析

甘良志<sup>a</sup>, 刘海宽<sup>a</sup>, 张士诚<sup>b</sup>

(江苏师范大学 a. 电气工程及自动化学院, b. 数学科学学院, 江苏 徐州 221116)

**摘要:** 针对复杂环境下的多变量工业过程在线故障检测问题, 提出基于集成核主分量分析的解决方法. 该方法首先求出样本映射后的无限维空间的多组近似基, 将主分量分析问题特征向量的解空间限定在近似基张成空间求解; 然后集成特征向量和特征值, 并计算 Hotelling  $T^2$  统计量和平方预报误差; 最后据此判断检测结果. 该方法对 Tennessee Eastman 过程故障检测样本进行测试, 并与其他两种方法进行对比. 测试结果表明了所提出方法的有效性.

**关键词:** 集成学习; 非监督学习; 核主分量分析; 故障检测

**中图分类号:** TP273

**文献标志码:** A

## Ensemble kernel principal component analysis for fault detection

GAN Liang-zhi<sup>a</sup>, LIU Hai-kuan<sup>a</sup>, ZHANG Shi-cheng<sup>b</sup>

(a. School of Electrical Engineering and Automation; b. School of Mathematical Sciences, Jiangsu Normal University, Xuzhou 221116, China. Correspondent: GAN Liang-zhi, E-mail: lzh\_box@163.com)

**Abstract:** An ensemble principal component analysis is presented for online multivariable process fault detection on complicated conditions. In reproducing kernel Hilbert space(RKHS) spanned by the mapped samples, groups of basis(approximate) are found. Eigenvectors for principal component analysis problem are limited to the spaces spanned by approximate basis. The eigenvectors and eigenvalues in different subspace are integrated to make up for the approximation. Hotelling  $T^2$  and squared prediction error are calculated according to integrated eigenvectors and eigenvalues. Experiments on Tennessee Eastman is presented to demonstrate the effectiveness of the ensemble learning.

**Key words:** ensemble learning; unsupervised learning; kernel principal component analysis; fault detection

### 0 引言

在线监测复杂的工业生产过程, 及时发现异常并合理处置, 是保障生命财产安全和提高生产效率的重要手段. 由于工业生产过程和环境都很复杂, 测量的数据通常受到噪声污染, 同时数据量也非常大, 因此故障检测通常采用统计方法. 主分量分析(PCA)是常用的统计检测方法之一<sup>[1-2]</sup>, 但常规的PCA不能解决非线性系统故障检测问题.

支持向量机成功利用核学习解决非线性问题, 同时通过控制结构风险提升学习机的推广能力<sup>[3]</sup>, 这为构造非线性的PCA提供了思路. 在核学习方法的启发下, 文献[4]提出了核化的主分量分析(KPCA)<sup>[4]</sup>. KPCA仍然有两个问题需要解决: 1) 预防过学习; 2) 为了避免维数灾难必须消减核矩阵维数. 根据统计学习理论的结论, KPCA必须控制学习能力, 同时降

低核矩阵的维数以简化计算过程, 于是学者们先后提出了多种针对核学习的稀疏化方法<sup>[5-6]</sup>, 然而, 深入的研究结果表明, 稀疏化牺牲了算法的稳定性, 正如文献[7]指出的, 天下没有免费的午餐.

为了在缩减核矩阵维数的同时, 克服由于稀疏化造成的算法不稳定缺陷, 本文提出了集成的核主分量分析(EKPCA)方法. 集成学习针对监督学习<sup>[8]</sup>的研究成果已经非常丰富, 但是非监督学习不容易评判学习的成效, 很少有人研究. 因为集成学习的理论表明, 只有保障简单学习器的有效性、多样性, 才能通过集成学习提升机器的性能<sup>[9-10]</sup>; 因此本文提出的EKPCA力图在确保简单学习器多样性的前提下, 保障每个简单学习器性能, 期望获得最佳的集成效果. EKPCA的过程如下: 首先, 求样本映射后无限维空间的多组近似基, 将特征向量的解空间限定在每组近

收稿日期: 2012-07-24; 修回日期: 2012-10-17.

基金项目: 国家自然科学基金项目(61271002); 江苏省自然科学基金项目(BK2011205).

作者简介: 甘良志(1974—), 男, 副教授, 博士, 从事机器学习的研究; 刘海宽(1962—), 男, 教授, 博士, 从事智能控制等研究.

似基张成空间内分别求解多个 KPCA 问题; 然后, 集成特征向量和特征值. 在应用于在线故障检测时, 通过集成特征向量和特征值计算平方预报误差 (SPE) 和 Hotelling  $T^2$  统计量, 据此判断检测结果. 通过 TE (Tennessee Eastman) 数据集故障检测实验检验了 EKPCA 的效果.

## 1 KPCA 简介

为了求解 KPCA, 定义从  $n$  维实空间  $\mathbf{R}^n$  到特征空间  $\mathbf{F}$  的非线性映射  $\varphi: \mathbf{R}^n \rightarrow \mathbf{F}$ , 将样本  $\{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^N$  映射到特征空间后重新标记为  $\{\varphi(\mathbf{x}_i)\}_{i=1}^N$ . 在特征空间  $\mathbf{F}$  定义一个满足条件  $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \varphi^T(\mathbf{x}_i)\varphi(\mathbf{x}_j)$  的核函数  $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ , 空间  $\mathbf{F}$  就是一个内积空间. 中心化数据集  $\{\varphi(\mathbf{x}_i)\}_{i=1}^N$ , 令

$$\tilde{\varphi}(\mathbf{x}_i) = \varphi(\mathbf{x}_i) - \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \varphi(\mathbf{x}_j),$$

并构造如下矩阵:

$$\Phi = [\varphi(\mathbf{x}_1), \varphi(\mathbf{x}_2), \dots, \varphi(\mathbf{x}_N)], \quad (1)$$

$$\tilde{\Phi} = [\tilde{\varphi}(\mathbf{x}_1), \tilde{\varphi}(\mathbf{x}_2), \dots, \tilde{\varphi}(\mathbf{x}_N)]. \quad (2)$$

相关矩阵  $\tilde{\mathbf{R}}$  和核矩阵  $\mathbf{K}$  为

$$\tilde{\mathbf{R}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \tilde{\varphi}(\mathbf{x}_i)\tilde{\varphi}^T(\mathbf{x}_i), \quad (3)$$

$$\mathbf{K} = \Phi^T \Phi. \quad (4)$$

KPCA 问题归结为求关系矩阵  $\tilde{\mathbf{R}}$  的特征值  $\lambda$  和特征向量  $\tilde{\mathbf{q}}$  的问题, 即

$$\tilde{\mathbf{R}}\tilde{\mathbf{q}} = \lambda\tilde{\mathbf{q}}. \quad (5)$$

如果特征空间是无限维的, 则关系矩阵  $\tilde{\mathbf{R}}$  也是无限维的, 式 (5) 不可直接求解; 因此, 假设当

$$\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \varphi(\mathbf{x}_j) = 0$$

时, KPCA 的特征向量解可用特征空间的样本描述<sup>[4]</sup>, 即

$$\tilde{\mathbf{q}} = \Phi\alpha = \sum_{i=1}^N \alpha_i \varphi(\mathbf{x}_i), \quad (6)$$

其中  $\alpha = [\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N]^T$  是一个  $N$  维列向量. 方程 (5) 两边同乘以  $\Phi$ , 方程变为

$$\mathbf{K}\alpha = N\lambda\alpha, \quad (7)$$

其中  $N$  为样本总量. 方程 (7) 是普通的征值问题, 只要样本数量不大, 求解并不困难.

当  $\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \varphi(\mathbf{x}_j) \neq 0$  时, KPCA 用中心化样本描

述特征向量并记为  $\tilde{\mathbf{q}} = \tilde{\Phi}\alpha$ . 令  $\tilde{\mathbf{K}} = \tilde{\Phi}^T \tilde{\Phi}$ , KPCA 问题变为

$$\tilde{\mathbf{K}}\alpha = N\lambda\alpha. \quad (8)$$

其中  $\tilde{\mathbf{K}} = N\Phi^T \tilde{\mathbf{R}}\Phi$  可由核矩阵  $\mathbf{K}$  得到, 即

$$\tilde{\mathbf{K}} = \mathbf{K} - \mathbf{1}_{1/N}\mathbf{K} - \mathbf{K}\mathbf{1}_{1/N} + \mathbf{1}_{1/N}\mathbf{K}\mathbf{1}_{1/N}, \quad (9)$$

这里

$$\mathbf{1}_{1/N} = \frac{1}{N} \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \dots & 1 \end{bmatrix}$$

为一个  $N \times N$  的矩阵.

将求解方程 (7) 得到的特征值按大小排序为  $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_N$ , 它们与特征向量  $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N$  分别对应, 相关矩阵  $\tilde{\mathbf{R}}$  的第  $k$  个特征向量记为

$$\tilde{\mathbf{q}}_k = \Phi\alpha_k = \sum_{i=1}^N \alpha_{k,i} \varphi(\mathbf{x}_i),$$

其中  $\alpha_{k,i}$  表示第  $k$  个特征向量  $\alpha_k$  的第  $i$  个分量. 对  $\tilde{\mathbf{q}}_k$  归一化, 使得  $\tilde{\mathbf{q}}_k^T \tilde{\mathbf{q}}_k = 1$ , 归一化公式为

$$\alpha_k^T \alpha_k = 1/\lambda_k. \quad (10)$$

变量  $\mathbf{x}$  在第  $k$  个特征向量  $\tilde{\mathbf{q}}_k$  上的投影为第  $k$  个主分量, 可按如下式计算:

$$t_k = \sum_{i=1}^N \alpha_{k,i} k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}). \quad (11)$$

## 2 集成 KPCA

由方程 (6) 易知, 特征向量  $\tilde{\mathbf{q}}$  是特征空间中样本的线性组合. 文献 [10] 认为, 如果求出全体样本  $\{\varphi(\mathbf{x}_i)\}_{i=1}^N$  张成空间的一组基, 并用这组基来描述特征向量  $\tilde{\mathbf{q}}$ , 则 KPCA 核矩阵的维数就与样本数无关, 从而可以做到有效消减维数, 简化计算; 但在无限维特征空间的基通常不具有稀疏性, 所以有必要通过计算近似基获得稀疏性. 近似基求解算法可以求出无限维内积空间的一组稀疏近似基, 其计算流程如下<sup>[10]</sup>:

Step 1: 建立两个集合  $\mathbf{X}_I = \{\varphi(\mathbf{x}_1)\}$ ,  $\mathbf{X}_D$  (初始时为空集).

Step 2: 对于样本集  $\{\varphi(\mathbf{x}_i)\}_{i=1}^N$  中的每个  $\varphi(\mathbf{x}_k)$ , 令

$$\bar{\varphi}(\mathbf{x}_k) = \varphi(\mathbf{x}_k) - \sum_{\varphi(\mathbf{x}_i) \in \mathbf{X}_I} \lambda_i \varphi(\mathbf{x}_i),$$

计算

$$\min \bar{\varphi}^T(\mathbf{x}_k) \bar{\varphi}(\mathbf{x}_k). \quad (12)$$

Step 3: 如果  $\min \bar{\varphi}^T(\mathbf{x}_k) \bar{\varphi}(\mathbf{x}_k) \leq \varepsilon$ , 表示  $\mathbf{X}_I$  中的元素可以近似描述  $\varphi(\mathbf{x}_k)$ , 则将其加到  $\mathbf{X}_D$  中; 否则, 认为  $\mathbf{X}_I$  中的元素不能描述  $\varphi(\mathbf{x}_k)$ , 将  $\varphi(\mathbf{x}_k)$  加入到  $\mathbf{X}_I$  中,  $\varepsilon$  是描述线性组合误差的参数.

Step 4: 如果  $k = N$ , 则结束计算, 否则  $k = k + 1$ , 返回 Step 2.

式 (12) 描述的最小值问题揭示了集合  $\mathbf{X}_I$  中的元素线性组合某个样本的能力. 在无限维空间中,  $\varepsilon$  可

以决定近似基的稀疏程度, 即每组基的样本数.

## 2.1 核矩阵计算技巧

用近似基求解算法得到  $\{\varphi(\mathbf{x}_i)\}_{i=1}^N$  的一组近似基后, 将其构成的向量记作  $\Phi_I = [\varphi(\mathbf{x}_{I1}), \varphi(\mathbf{x}_{I2}), \dots, \varphi(\mathbf{x}_{Ik})]$ , 则方程 (6) 描述的特征向量可以近似表示为

$$\tilde{\mathbf{q}} = \sum_{i=1}^{Ik} \alpha_i \varphi(\mathbf{x}_i) = \Phi_I \alpha. \quad (13)$$

方程 (5) 描述的问题转换为

$$\tilde{\mathbf{R}} \Phi_I \alpha = \lambda \Phi_I \alpha, \quad (14)$$

两边同乘以  $\Phi_I^T$ , 并记

$$\mathbf{K}_I = \Phi_I^T \Phi_I, \quad (15)$$

得到  $\Phi_I^T \tilde{\mathbf{R}} \Phi_I \alpha = \lambda \mathbf{K}_I \alpha$ . 问题再一次归结为特征值与特征向量问题, 即

$$(\mathbf{K}_I)^{-1} (\Phi_I^T \tilde{\mathbf{R}} \Phi_I) \alpha = \lambda \alpha. \quad (16)$$

令  $\mathbf{K}_s = \Phi_I^T \tilde{\mathbf{R}} \Phi_I$ , 不失一般性, 假设  $\Phi_I$  的第  $m$  和第  $n$  个列向量分别是  $\varphi(\mathbf{x}_m)$  和  $\varphi(\mathbf{x}_n)$ , 则  $\mathbf{K}_s$  的第  $m$  行第  $n$  列元素可记为  $(\mathbf{K}_s)_{m \times n}$ , 其表达式为

$$\begin{aligned} (\mathbf{K}_s)_{m \times n} &= \varphi^T(\mathbf{x}_m) \left[ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \tilde{\varphi}(\mathbf{x}_i) \tilde{\varphi}^T(\mathbf{x}_i) \right] \varphi(\mathbf{x}_n) = \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [\varphi^T(\mathbf{x}_m) \tilde{\varphi}(\mathbf{x}_i) \tilde{\varphi}^T(\mathbf{x}_i) \varphi(\mathbf{x}_n)] = \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N k(\mathbf{x}_m, \mathbf{x}_i) k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_n) - \\ &= \frac{1}{N^2} \left[ \sum_{j=1}^N k(\mathbf{x}_m, \mathbf{x}_j) \right] \left[ \sum_{j=1}^N k(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_j) \right]. \end{aligned} \quad (17)$$

令  $\mathbf{K}(m, :)$  和  $\mathbf{K}(:, n)$  分别表示核矩阵  $\mathbf{K}$  的第  $m$  行和第  $n$  列,  $\mathbf{1}_N = [1, 1, \dots, 1]$  表示 1 行  $N$  列的行向量, 则式 (17) 可改写为

$$\begin{aligned} (\mathbf{K}_s)_{m \times n} &= \frac{1}{N} \mathbf{K}(m, :) \mathbf{K}(:, n) - \frac{1}{N^2} \mathbf{K}(m, :) \times \\ &= \frac{1}{N} \mathbf{1}_N^T \times \mathbf{1}_N \times \mathbf{K}(:, n). \end{aligned} \quad (18)$$

方程 (5) 转换为

$$(\mathbf{K}_I)^{-1} \mathbf{K}_s \alpha = \lambda \alpha. \quad (19)$$

方程 (19) 是典型的特征值与特征向量问题, 因为特征向量是一组近似基的线性组合, 所以具有稀疏性.

## 2.2 集成 KPCA 的方法

解方程 (19) 得到的特征向量为  $\tilde{\mathbf{q}} = \Phi_I \alpha$ , 解 KPCA 得到的特征向量为  $\tilde{\mathbf{q}} = \Phi \alpha$ , 两个特征向量的解空间不同. 考虑到  $\Phi$  中的向量可以用  $\Phi_I$  中的向量近似线性组合, 所以它们必然十分接近, 可以认为方程 (19) 获得的稀疏 KPCA 是一个比较强的特征学习机, 可以对若干稀疏 KPCA 进行集成. PCA 是一种

无监督学习, 不易对学习结果进行加权集成, 鉴于特征向量的每个解空间十分接近, 可以采用平均集成. 下面给出 KPCA 集成算法的流程 (仍然设样本集构成的向量为  $\Phi = [\varphi(\mathbf{x}_1), \varphi(\mathbf{x}_2), \dots, \varphi(\mathbf{x}_N)]$ ).

Step 1: 设定重复次数 Re;

Step 2: 计算核矩阵  $\mathbf{K} = \Phi^T \Phi$ ;

Step 3: 计算样本集  $\{\varphi(\mathbf{x}_i)\}_{i=1}^N$  的 Re 组近似基  $\Phi_I^1, \Phi_I^2, \dots, \Phi_I^{\text{Re}}$  (每次选择近似基时, 上一次选择的落伍者具有优先被选择的权利, 以保证多样性);

Step 4: 对每组近似基  $\Phi_I^k$ , 根据式 (15) 求  $\mathbf{K}_I^k = (\Phi_I^k)^T \Phi_I^k$ , 根据式 (18) 求  $\mathbf{K}_s^k = (\Phi_I^k)^T \tilde{\mathbf{R}} \Phi_I^k$ , 其中  $k = 1, 2, \dots, \text{Re}$ ;

Step 5: 根据方程 (19), 对每一组  $\mathbf{K}_I^k$  和  $\mathbf{K}_s^k$  求对应的特征值  $\lambda^k$  与特征向量矩阵  $\alpha^k$ , 这样得到 Re 组特征值  $\lambda^1, \lambda^2, \dots, \lambda^{\text{Re}}$  与特征向量矩阵  $\alpha^1, \alpha^2, \dots, \alpha^{\text{Re}}$ ;

Step 6: 对  $k = 1, 2, \dots, \text{Re}$ , 将  $\lambda^k$  按分量从大到小排序, 并取前  $n$  个特征值  $\lambda_1^k \geq \lambda_2^k \geq \dots \geq \lambda_n^k$  及其分别对应的特征向量  $\alpha_1^k, \alpha_2^k, \dots, \alpha_n^k$ , 求特征空间对应的特征向量为

$$\tilde{\mathbf{q}}_i^k = \Phi_I^k \alpha_i^k, \quad i = 1, 2, \dots, n; \quad (20)$$

Step 7: 求集成特征值

$$\bar{\lambda}_i = \frac{1}{\text{Re}} \sum_{k=1}^{\text{Re}} \lambda_i^k, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (21)$$

和特征空间中的集成特征向量

$$\bar{\mathbf{q}}_i = \frac{1}{\text{Re}} \sum_{k=1}^{\text{Re}} \tilde{\mathbf{q}}_i^k, \quad i = 1, 2, \dots, n; \quad (22)$$

Step 8: 归一化后的  $\bar{\lambda}_i$  和  $\bar{\mathbf{q}}_i$  为 EKPCA 的第  $i$  个特征值及其在特征空间中对应的特征向量;

Step 9: 最后计算变量  $\mathbf{x}$  在第  $i$  个特征向量方向的投影即  $\mathbf{x}$  的第  $i$  个主分量

$$t_i = \varphi(\mathbf{x})^T \bar{\mathbf{q}}_i. \quad (23)$$

仔细分析 EKPCA 算法, 可得出以下 3 点结论: 首先, 稀疏化能够消减核矩阵的维数; 然后, 鉴于统计学习理论已明确指出, 与参数成线性关系的函数集的 VC 维等于参数的个数<sup>[3]</sup>, 所以稀疏化同时也能够控制 KPCA 的结构风险, 增强泛化能力; 最后, 稀疏化即使遗漏数据集的某些特性, 即欠学习 (或称学习不足), 也可以通过多个稀疏解的集成加以弥补.

## 3 EKPCA 应用于故障检测

故障是指为了保证系统的正常工作不能允许的状态偏离, 包括系统参数改变, 超范围的扰动, 执行或检测机构的非正常工作等. 故障检测是通过传感器检测的数据判断系统是否有故障发生. 故障检测

尤其是实时的在线故障检测对安全高效生产具有重大意义. 采用EKPCA在线检测工业过程故障的方法与PCA相同<sup>[1-2]</sup>. 首先, 根据经验数据建立EKPCA模型, 即计算经验数据的特征值、特征向量; 然后, 以它们为参数计算经验数据的SPE和Hotelling  $T^2$ , 并确定控制限; 在线检测时, 计算在线数据的SPE和Hotelling  $T^2$  并与控制限比较, 从而得出检测结果. 通过式(21)和(22)得到经验数据EKPCA问题的特征值和特征向量后, 对第  $i$  个过程变量  $\mathbf{x}_i$ , 式(23)可求得前  $n$  个主分量  $t_1, t_2, \dots, t_n$ , Hotelling  $T^2$  统计量为

$$T_i^2 = [t_1, t_2, \dots, t_n] \Lambda^{-1} [t_1, t_2, \dots, t_n]^T = \sum_{j=1}^n (t_j^2 / \bar{\lambda}_j). \quad (24)$$

其中:  $\bar{\lambda}_j$  为式(21)求得的第  $j$  个特征值,  $\Lambda$  为对角矩阵, 由前  $n$  个集成特征值构成.

$\hat{\varphi}_N(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^N t_i \tilde{\mathbf{q}}_i$  是  $N$  个主分量在特征空间中的重构向量, 同理  $\hat{\varphi}_n(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^n t_i \tilde{\mathbf{q}}_i$ , 样本  $\mathbf{x}$  的平方预报误差 SPE 定义为

$$\begin{aligned} \text{SPE}_x &= \|\hat{\varphi}_N(\mathbf{x}) - \hat{\varphi}_n(\mathbf{x})\|^2 = \\ & \hat{\varphi}_N^T(\mathbf{x}) \hat{\varphi}_N(\mathbf{x}) - 2 \hat{\varphi}_N^T(\mathbf{x}) \hat{\varphi}_n(\mathbf{x}) + \hat{\varphi}_n^T(\mathbf{x}) \hat{\varphi}_n(\mathbf{x}) = \\ & \sum_{i=1}^N t_j^2 - 2 \sum_{i=1}^n t_j^2 + \sum_{i=1}^n t_j^2 = \\ & \sum_{i=1}^N t_j^2 - \sum_{i=1}^n t_j^2, \end{aligned} \quad (25)$$

其中  $t_j$  为通过式(23)求得的第  $j$  主分量.

当采用 Hotelling  $T^2$  和 SPE 作为故障检测的判断标准时, 控制限的确定十分关键, 本文通过预先实验获得统一的控制限.

#### 4 基于EKPCA的TE过程故障检测实验

TE过程是一个多变量的复杂化工过程, 为了方便实验研究, 文献[11]为该过程建立了等效模型, 作为故障检测的标准问题<sup>[12]</sup>. 文献[11]公布的测试数据库得到众多研究者认可, 经常被用于测试故障检测方法的有效性<sup>[1-2]</sup>. 研究人员模拟了22种不同工作状态下的生产过程, 每种工作状态运行两次, 运行过程中每3分钟对关键的52个过程变量采样一次, 将每次的采样结果构成一个样本, 因此每种工作状态测得2个数据集(本文称为一组), 其中一个供算法训练用, 称为训练数据集; 另一个数据集供测试算法有效性用, 称为测试数据集. 将22组数据按顺序编号, 第0组的两个数据集是正常工作下采集的, 将其中的训练数据集记作train 00, 测试数据集记作test 00; 其他21组数据都是在不同的故障状

态下测得, 将它们编号为故障01~21, 第22组数据对应的是故障21; 将其中的训练数据集记作train 01~train 21, 测试数据集记作test 01~test 21; train 00由500个样本构成, train 01~train 21由480个样本构成, test 01~test 21包含960个样本; 因此train 00和test 00可以分别记作  $500 \times 52$  和  $480 \times 52$  的矩阵, train 01~train 21都是  $480 \times 52$  的矩阵, test 01~test 21都是  $960 \times 52$  的矩阵.

不失一般性, 假设一个无故障的数据集为  $\mathbf{D}_0 = \{\mathbf{x}_i^0\}_{i=1}^N$ , 用EKPCA计算这个数据集的SPE和Hotelling  $T^2$ , 并判断新的采样数据  $\mathbf{x}$  是否为故障数据的流程如下.

基于EKPCA的故障检测流程如下:

**Step 1: 数据离线预处理.** 对预先收集的无故障数据集  $\mathbf{D}_0 = \{\mathbf{x}_i^0\}_{i=1}^N$ , 先对其中心化, 计算  $\mathbf{D}_0$  所有样本的平均值  $\bar{\mathbf{X}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{x}_i^0$ , 然后中心化  $\tilde{\mathbf{x}}_i^0 = (\mathbf{x}_i^0 - \bar{\mathbf{X}})$ , 最后归一化, 对中心化后的每个过程变量的最大值构成向量  $\mathbf{X}_{\max}$ , 取最小值并构成向量  $\mathbf{X}_{\min}$ , 完成归一化计算

$$\mathbf{x}_i^{c0} = \tilde{\mathbf{x}}_i^0 \bullet \div (\mathbf{X}_{\max} - \mathbf{X}_{\min}).$$

其中:  $\bullet \div$  为点除运算符, 表示向量对应位置的元素相除;  $\mathbf{x}_i^{c0}$  表示归一化后的样本. 处理后的数据集重新标记为  $\mathbf{D}_{c0} = \{\mathbf{x}_i^{c0}\}_{i=1}^N$ .

**Step 2: 求近似基.** 将  $\mathbf{D}_{c0}$  映射到无限维空间, 标记为  $\varphi(\mathbf{D}_{c0}) = \{\varphi(\mathbf{x}_i^{c0})\}_{i=1}^N$ , 以径向基函数  $k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = e^{-\frac{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2}{\sigma}}$  为核函数, 用近似基算法求 Re 组近似基. 每次选择近似基时, 上一次选择的落伍者具有优先的被选择的权利, 以保证多样性.

**Step 3: 求取集成特征值和集成特征向量.** 对数据集  $\mathbf{D}_{c0}$ , 用EKPCA方法求解下式并归一化:

$$\bar{\lambda}_i = \frac{1}{\text{Re}} \sum_{k=1}^{\text{Re}} \lambda_i^k, \quad \bar{\mathbf{q}}_i = \frac{1}{\text{Re}} \sum_{k=1}^{\text{Re}} \tilde{\mathbf{q}}_i^k.$$

**Step 4: 计算检测指标.** 首先, 计算  $\{\varphi(\mathbf{x}_i^{c0})\}_{i=1}^N$  中的每个数据  $\{\varphi(\mathbf{x}_i^{c0})\}$  的  $k$  次主分量  $t_k = \langle \bar{\mathbf{q}}_k, \varphi(\mathbf{x}_i^{c0}) \rangle$ ; 然后, 计算

$$\begin{aligned} \text{Hotelling } T^2 &= \sum_{j=1}^n (t_j^2 / \bar{\lambda}_j), \\ \text{SPE}_{\mathbf{x}_i^{c0}} &= \sum_{j=1}^N t_j^2 - \sum_{i=1}^n t_i^2, \end{aligned}$$

其中  $n$  是保留的主分量数, 确定控制限.

**Step 5: 在线判断检测结果.** 对于在线采样的数据  $\mathbf{x}$ , 首先中心化归一化

$$\mathbf{x}_c = (\mathbf{x} - \bar{\mathbf{X}}) \bullet \div (\mathbf{X}_{\max} - \mathbf{X}_{\min});$$

在此基础上计算主分量  $t_k = \langle \bar{\mathbf{q}}_k, \varphi(\mathbf{x}_c) \rangle$  以及  $T^2 =$

$\sum_{j=1}^n (t_j^2 / \bar{\lambda}_j)$  或  $SPE_{x_c} = \sum_{j=1}^N t_j^2 - \sum_{i=1}^n t_i^2$ , 最后判断该数据是否为故障数据.

以上介绍的是基于 EKPCA 故障检测流程, 其新颖之处一方面在于采用了集成学习方法计算主分量和特征值; 另一方面, 在基于 EKPCA 的故障检测流程中, Step 1 到 Step 4 只与正常数据集有关, 可以离线实现, 待检测数据可随时采集随时判断, 所以是一种在线的故障检测方法. 由于在求无限维空间的基时运用了近似方法, EKPCA 选择的 Re 组近似基能否有效覆盖数据集的特性令人心怀疑虑. 图 1 通过统计每个样本在 Re 组近似基中出现的总次数表明, 由于采用了正确的近似基选择策略, 每个样本都必然出现在近似基中, 且概率相差不大. 在第  $m$  组近似基中遗漏的数据集的特性, 极有可能在第  $m + 1$  组近似基中被抽取, 这正是集成学习的可取之处.

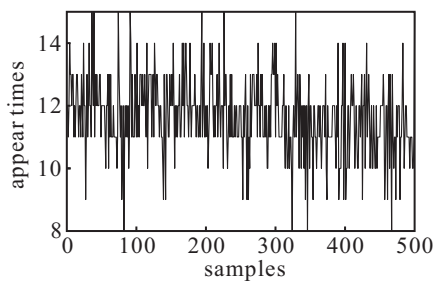


图 1 样本在近似基中出现的次数

图 2 展示了  $T^2$  控制限确定过程. 将数据集 train00 作为预先采集的经验数据, 用 EKPCA 方法离线计算检测指标 Hotelling  $T^2$ ; 根据故障检测的精度要求, 当故障误报概率小于 0.2% 时, 控制限为  $C = 0.16$ .

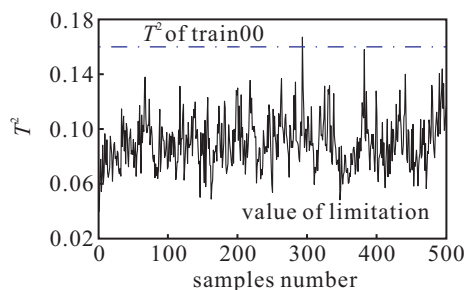


图 2 确定控制限

图 3 和图 4 显示了故障 04 和故障 11 的检测结果. 模拟在线故障检测, 每次从 test04(或 test 11) 数据集中调用一个数据, 以 EKPCA 在 train00 上获得的特征值、特征向量和主分量计算 Hotelling  $T^2$  和 SPE 值, 并与控制限比较. 基于 EKPCA 的故障检测方法在故障 04 和故障 11 的诊断过程中显示出优异的判断能力.

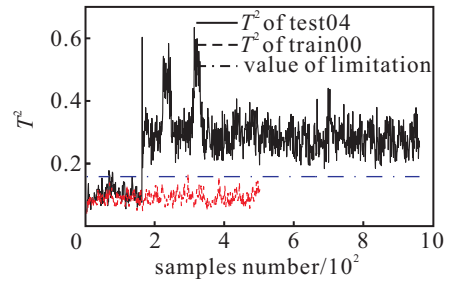


图 3 EKPCA 对数据集 test04 检测

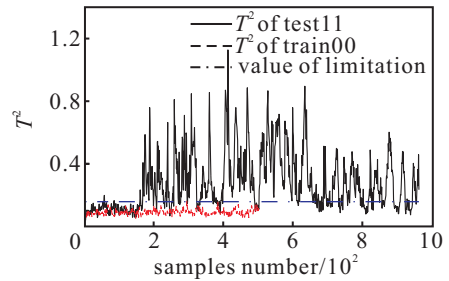


图 4 EKPCA 对数据集 test 11 检测

表 1 将 EKPCA 故障检测与文献 [2] 的研究结果进行对比. 表 1 中, KPCA 和改进核主分量分析 (IKPCA) 的检测结果直接摘自文献 [2], EKPCA 数据是本文检测方法的统计结果. 从表 1 可以看出, 基于 EKPCA 故障检测的结果比 KPCA 方法的结果更精确; 用 EKPCA 与 IKPCA 对 7 组相同的故障数据进行检测, EKPCA 在 5 组数据上都获得了更精确的结果. 这表明, 集成学习在提高非监督学习机的性能方面也有很大潜力.

表 1 故障检测错误率对比

统计量	测试数据集						
	03	04	09	11	13	15	21
SPE (IKPCA)	0.99	1.00	1.00	0.51	0.18	0.86	0.70
$T^2$ (IKPCA)	0.75	0.83	0.83	0.12	0.15	0.74	0.33
SPE (KPCA)	1.00	1.00	1.00	0.99	0.97	0.99	1.00
$T^2$ (KPCA)	0.97	0.98	0.96	0.70	0.21	0.91	0.72
SPE (EKPCA)	0.94	0.12	0.90	0.65	0.18	0.60	0.62
$T^2$ (EKPCA)	<b>0.73</b>	<b>0.01</b>	<b>0.67</b>	0.15	<b>0.04</b>	<b>0.58</b>	0.37

### 5 结 论

为了解决复杂的多变量工业过程在线故障检测问题, 本文在 KPCA 的基础上提出了基于 EKPCA 的解决方法. 该方法求样本映射后无限维空间的多组近似基, 以每组近似基张成空间作为 PCA 问题特征向量的解空间求解特征向量和特征值, 然后集成它们. 最后计算 Hotelling  $T^2$  和 SPE, 并据此判断检测结果. 该故障检测方法在样本充分的条件下, 是一种在线监测方法. 为了检验基于 EKPCA 的故障检测方法的有效性, 本文用 EKPCA 对 TE 过程故障检测数据进行模拟在线测试, 并将结果与 KPCA 和 IKPCA 的测试结

果对比. 对比结果表明, EKPCA 能够在 TE 过程故障检中获得更加准确的结果.

### 参考文献(References)

- [1] 范玉刚, 李平, 宋执环. 基于特征样本的 KPCA 在故障诊断中的应用[J]. 控制与决策, 2005, 20(12): 1415-1419.  
(Fan Y G, Li P, Song Z H. KPCA based on feature samples for fault detection[J]. Control and Decision, 2005, 20(12): 1415-1419.)
- [2] Ge Z, Yang C, Song Z. Improved kernel PCA-based monitoring approach for nonlinear processes[J]. Chemical Engineering Science, 2009, 64(9): 2245-2255.
- [3] Vapnik V N. Statistical learning theory[M]. New York: John Wiley and Sons, 1998: 169-175.
- [4] Scholkopf B, Smola A, Muller K R. Nonlinear component analysis as a kernel eigenvalue problem[J]. Neural Computation, 1998, 10(5): 1299-1319.
- [5] Hinton G E, Salakhutdinov R R. Reducing the dimensionality of data with neural networks[J]. Science, 2006, 313(5786): 504-507.
- [6] d' Aspremont A, El Ghaoui L, Jordan M I, et al. A direct formulation for sparse PCA using semidefinite programming[J]. SIAM Review, 2007, 49(3): 434-448.
- [7] Xu H, Mannor S. Sparse algorithms are not stable: A no-free-lunch theorem[J]. IEEE Trans on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 2012, 34(1): 187-193.
- [8] Opitz D, Maclin R. Popular ensemble methods: An empirical study[J]. J of Artificial Intelligence Research, 1999, 1106(257): 169-198.
- [9] Hansen L K, Salamon P. Neural network ensembles[J]. IEEE Trans Pattern Analysis and Machine Intelligence, 1990, 12 (10): 993-1001.
- [10] 甘良志. 核学习算法与集成方法研究[D]. 杭州: 浙江大学 控制科学与工程系, 2010.  
(Gan L Z. Kernel learning algorithms and ensemble methods[D]. Hangzhou: Department of Control Science and Engineering, Zhejiang University, 2010.)
- [11] Braatz R D. TE process simulator software[EB/OL]. [2002-04]. <http://brahms.scs.uiuc.edu>.
- [12] Downs J J, Vogel E F. A plant-wide industrial process control problem[J]. Computers and Chemical Engineering, 1993, 17(3): 245-255.

(上接第1690页)

- [4] Olfati-Saber R, Murray R. Consensus problems in networks of agents with switching topology and time-delays[J]. IEEE Trans on Automatic Control, 2004, 49(9): 1520-1533.
- [5] Ren W, Beard R. Consensus seeking in multiagent systems under dynamically changing interaction topologies[J]. IEEE Trans on Automatic Control, 2005, 50(5): 655-661.
- [6] Ren W. On consensus algorithms for double-integrator dynamics[J]. IEEE Trans on Automatic Control, 2008, 53(6): 1503-1509.
- [7] Ren W, Moore K, Chen Y. High-order and model reference consensus algorithms in cooperative control of multivehicle systems[J]. ASME J of Dynamic Systems, Measurement and Control, 2005, 129(5): 678-688.
- [8] Ni W, Cheng D. Leader-following consensus of multi-agent systems under fixed and switching topologies[J]. Systems and Control Letters, 2010, 59(3/4): 209-217.
- [9] Li Z, Duan Z, Chen G, et al. Consensus of multiagent systems and synchronization of complex networks: A unified viewpoint[J]. IEEE Trans on Circuits and Systems, 2010, 57(1): 213-224.
- [10] Li Z, Liu X, Lin P, et al. Consensus of linear multi-agent systems with reduced-order observer-based protocols[J]. Systems and Control Letters, 2011, 60(7): 510-516.
- [11] Wang W, Slotine J. A theoretical study of different leader roles in networks[J]. IEEE Trans on Automatic Control, 2006, 51(7): 1156-1161.
- [12] Zhang H, Lewis F, Das A. Optimal design for synchronization of cooperative systems: State feedback, observer and output feedback[J]. IEEE Trans on Automatic Control, 2011, 56(8): 1948-1952.
- [13] Boyd S, Ghaoui L E, Feron E, et al. Linear matrix inequalities in system and control theory[M]. Philadelphia: SIAM, 1994: 7-8.