文章编号: 1001-0920 (2016) 07-1213-06 DOI: 10.13195/j.kzyjc.2015.0629

基于敏感稀疏主元分析的化工过程监测与故障诊断

刘 洋[1,2], 张国山[1]

(1. 天津大学 电气与自动化工程学院，天津 300072；2. 山东理工大学 电气与电子工程学院，山东 淄博 255049)

摘 要: 提出敏感稀疏主元分析 (SSPCA) 算法用于监测复杂的化工过程. 根据主元分析与数据矩阵奇异值分解之间的关系, 通过将 $L_{2,1}$ 范数作为目标函数和惩罚项得到一个获取稀疏主元负载的凸优化问题, 并通过一个迭代算法进行求解. SSPCA 算法能同时兼顾大得分主元与小得分主元在监测算法中的作用, 提高了其对故障的敏感度. 证明了 SSPCA 算法的单调性和全局收敛性, 对田纳西伊斯曼过程一个算例的监测结果表明了 SSPCA 算法的有效性.

关键词: 敏感稀疏主元分析；$L_{2,1}$ 范数；过程监测；凸优化；故障诊断

中图分类号: TP273 **文献标志码:** A

Chemical process monitoring and fault diagnosis based on sensitive sparse principal component analysis

LIU Yang[1,2], *ZHANG Guo-shan*[1]

(1. School of Electrical Engineering and Automation，Tianjin University，Tianjin 300072，China；2. School of Electrical and Electronic Engineering，Shandong University of Technology，Zibo 255049，China．Correspondent: ZHANG Guo-shan，E-mail：zhanggs@tju.edu.cn)

Abstract: The sensitive sparse principal component analysis(SSPCA) algorithm is proposed for monitoring complex chemical process. By using the relationship between principal component analysis(PCA) and the singular value decomposition of data matrices, the convex optimization problem is presented by introducing $L_{2,1}$norm into the cost function and the regularization penality for extracting the principal components(PCs) loadings. An iterative algorithm is proposed to solve the convex optimization problem. Meanwhile, the SSPCA algorithm is capable to take into account both PCs with large scores and PCs with small scores to promote the sensitivity to the abnormal situations in the process monitoring. A case study on the Tennessee Eastman process illustrates the effectiveness of the SSPCA algorithm.

Keywords: sensitive sparse principal component analysis；$L_{2,1}$ norm；process monitoring；convex optimization；fault diagnosis

0 引 言

随着分布式系统在工业过程中的应用, 多元统计监测 (MSPM) 方法得到日益广泛的应用, 其中主元分析 (PCA) 作为最常用的方法之一, 被大量地研究并应用于实际过程[1]. 传统 PCA 方法所得到的主元几乎是所有过程变量的线性组合, 因此主元所代表的具体意义很难加以描述, 从而为故障诊断和分离带来了困难. Jolliffe[2]首次提出了主元稀疏性的问题, 并将最小绝对收缩选择算子 (lasso) 引入到传统 PCA 中, 提出了 ScoTLASS 算法[3]来获取稀疏主元. 随后的十几年出现了许多有关稀疏主元问题的研究成果. Zou 等[4]将传统 PCA 转化为一种回归形式的优化问题, 结合 LASSO (或弹性网) 惩罚项提出了稀疏主元分析算法 (SPCA). Shen 等[5]通过求解近似秩矩阵问题和引入惩罚项, 提出了 sPCA-rSVD 算法. 基于此, Witten 等[6]提出的迭代方法成为了求解 ScoTLASS 第一主元的最佳方法. Qi 等[7]将 L_1 范数与 L_2 范数结合起来得到一种凸范数, 利用得到的范数取代传统问题中常用的范数获取稀疏主元. Qi 等[8]通过使用广义弹性网约束在希尔伯特空间中给出了稀疏主元分析算法. Wang 等[9]通过张量分解算法给出了一种稀疏主元分析算法, 该算法可以在多个方向上得到一组稀疏负载矢量. 向馗等[10]对主元分析中的稀疏性进行了总结, 将文献 [6] 提出的方法应用到心电信号的 T 波

收稿日期: 2015-05-19；**修回日期:** 2015-10-12.

基金项目: 国家自然科学基金项目(61473202).

作者简介: 刘洋(1977−), 男, 讲师, 博士生, 从事非线性系统过程监测的研究；张国山(1961−), 男, 教授, 博士生导师, 从事非线性系统控制、最优控制与智能控制等研究.

交替分析中[11]. Allen 等[12]提出了稀疏非负广义 PCA 算法, 并将该算法应用到代谢学核磁共振数据的分析中.

目前, 大多数流行的稀疏主元算法都忽略了一个问题, 即小得分主元 (小方差或小特征值主元) 当作无用部分被丢弃[13]. 文献 [13] 指出, 小得分主元对于算法性能的影响与大得分主元 (大方差或大特征值主元) 同样重要, 并通过事例说明了这一点. 这表明, 在过程监测中如果不考虑小得分主元, 则会遗漏故障的重要信息, 影响到故障监测算法的灵敏度, 从而降低故障监测算法的性能. 针对这个问题, 目前仍缺乏相应的研究成果, 同时在复杂化工过程监测领域也缺乏稀疏主元分析相关算法的应用.

本文针对主元稀疏问题和 Jolliffe 所提出的问题, 引入 $L_{2,1}$ 范数作为目标函数和惩罚项, 使原主元稀疏问题转化为一个凸优化问题, 并在一个框架下完成对稀疏主元问题和 Jolliffe 所提出问题的求解, 通过一个有效的迭代算法实现稀疏主元的求解. 最后通过对化工过程标准算例 —— 田纳西-伊斯曼过程的监测结果显示出 SSPCA 算法对故障更加敏感性, 检测性能更好, 并且相对贡献的使用为故障诊断提供了有效的依据.

1 敏感稀疏主元分析算法

1.1 $L_{2,1}$ 范数

$L_{2,1}$ 范数作为 L_1 范数的旋转不变型在文献 [14] 中首次被提出, 它可以实现在所有数据中提取稀疏的数据特性, 而且所提取的特性是不同得分数据的联合特性[15-17], 因此 $L_{2,1}$ 范数已被广泛应于多任务处理、社交媒体数据分析等领域. $L_{2,1}$ 范数的具体形式为

$$\|\boldsymbol{A}\|_{2,1}=\sum_{i=1}^{n}\sqrt{\sum_{j=1}^{m}a_{ij}^2}=\sum_{i=1}^{n}\|a^i\|_2, \tag{1}$$

其中 a^i 为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的第 i 行, 对于任何旋转矩阵 $\boldsymbol{B}$ 均有 $\|\boldsymbol{AB}\|_{2,1}=\|\boldsymbol{A}\|_{2,1}$ 成立. 由于 $L_{2,1}$ 范数满足范数的 3 个基本条件, $L_{2,1}$ 范数是有效范数[15].

1.2 算法描述

PCA 是一种基本的多元统计方法, 它通过数据坐标变换实现数据降维和特征提取. 由于简单的形式和处理大量数据的能力, PCA 被应用于图像分析、模式识别、数据压缩、过程监测等多个领域. PCA 的求解形式主要包括协方差形式和矩阵低秩近似形式, 这两种形式的求解都是借助奇异值分解方法实现的[14]. 在这一部分, 根据 PCA 与奇异值分解的关系提出一种新的 SPCA 算法. 数据矩阵中心归一化后为 $\boldsymbol{X}\in\boldsymbol{R}^{N\times m}$. 其中: m 为变量数, N 为每个变量的采样数. 对 $\boldsymbol{X}$ 进行奇异值分解可以得到

$$\boldsymbol{X}=\boldsymbol{UDV}^{\mathrm{T}}. \tag{2}$$

其中

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{U}=[\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_m]\in\boldsymbol{R}^{N\times m},\\&\boldsymbol{V}=[\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2\cdots,\boldsymbol{v}_m]\in\boldsymbol{R}^{m\times m},\\&\boldsymbol{D}=\mathrm{diag}(d_1,d_2,\cdots,d_m)\in\boldsymbol{R}^{m\times m},\\&d_1\geqslant d_2\geqslant\cdots\geqslant d_m\geqslant 0.\end{aligned}$$

根据 PCA 与 SVD 的关系得到如下主元优化问题:

$$\hat{\boldsymbol{V}}=\arg\min_{\hat{\boldsymbol{V}}}\|\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{V}}\|_{2,1}+\lambda\|\hat{\boldsymbol{V}}\|_{2,1}. \tag{3}$$

其中: $\boldsymbol{Y}=\boldsymbol{UV}$ 为传统 PCA 主元, $\lambda\geqslant 0$. 可见, 该优化问题的第 1 项比传统 PCA 的目标函数对离群值更具有鲁棒性, 且 $\|\hat{\boldsymbol{V}}\|_{2,1}$ 惩罚项的引入使得优化问题 (3) 在求解时, 能够考虑不同得分主元对算法性能的影响[15], 从而避免了 Jolliffe 所提到的问题[13]. 但 Zuo 等[4]指出, 形如优化问题 (3) 所引入的惩罚项是为了解决当数据矩阵不满秩时的主元选取问题, 为了获得稀疏主元, 需要在优化问题 (3) 的基础上引入 L_1 范数作为惩罚项[4]. $L_{2,1}$ 范数作为 L_1 范数的旋转不变形被用作惩罚项在实际情况中是最为理想的选择[15], 因此为了获得稀疏主元, 在优化问题 (3) 中引入 $L_{2,1}$ 范数作为惩罚项, 得到如下优化问题:

$$\begin{aligned}&\hat{\boldsymbol{V}}=\\&\arg\min_{\hat{\boldsymbol{V}}}\|\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{V}}\|_{2,1}+\lambda\|\hat{\boldsymbol{V}}\|_{2,1}+\lambda_1\|\hat{\boldsymbol{V}}\|_{2,1}=\\&\arg\min_{\hat{\boldsymbol{V}}}\|\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{V}}\|_{2,1}+(\lambda+\lambda_1)\|\hat{\boldsymbol{V}}\|_{2,1}=\\&\arg\min_{\hat{\boldsymbol{V}}}\|\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{V}}\|_{2,1}+\eta\|\hat{\boldsymbol{V}}\|_{2,1},\end{aligned} \tag{4}$$

其中 $\eta\geqslant 0$. 优化问题 (3) 与 (4) 是等价的, 当 η 足够大时, 可以获得稀疏的 $\hat{\boldsymbol{V}}$, 进而获得稀疏负载矢量, 即 $L_{2,1}$ 范数的引入实现了在一个框架下对不同得分主元联合特性的提取和稀疏主元的求解, 进而得到如下优化问题:

$$\hat{\boldsymbol{V}}=\arg\min_{\hat{\boldsymbol{V}}}\|\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{V}}\|_{2,1}+\zeta\|\hat{\boldsymbol{V}}\|_{2,1}. \tag{5}$$

稀疏负载矢量 $\hat{\boldsymbol{V}}$ 表示为

$$\bar{\boldsymbol{V}}=\hat{\boldsymbol{V}}/\|\hat{\boldsymbol{V}}\|_2. \tag{6}$$

令代价函数

$$J=\|\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{V}}\|_{2,1}+\zeta\|\hat{\boldsymbol{V}}\|_{2,1},$$

对 $\hat{\boldsymbol{V}}$ 求导并等于零, 得到

$$\frac{\partial J}{\partial\hat{V}}=0. \tag{7}$$

进而有

$$(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D_E}\boldsymbol{X}+\zeta\boldsymbol{D_V})\hat{\boldsymbol{V}}=\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D_E}\boldsymbol{Y}, \tag{8}$$

其中 $\boldsymbol{D_V}$ 和 $\boldsymbol{D_E}$ 为对角线矩阵, 分别为

$$\boldsymbol{D_V}=\begin{bmatrix}1/2\|\hat{\boldsymbol{V}}^1\|_2 & & \\ & \ddots & \\ & & 1/2\|\hat{\boldsymbol{V}}^m\|_2\end{bmatrix},\tag{9}$$

$$\boldsymbol{D_E}=\begin{bmatrix}1/2\|\boldsymbol{E}^1\|_2 & & \\ & \ddots & \\ & & 1/2\|\boldsymbol{E}^m\|_2\end{bmatrix},\tag{10}$$

$\boldsymbol{E}=\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{V}}$, $\hat{\boldsymbol{V}}^i$ 和 $\hat{\boldsymbol{E}}^i$ 分别为 $\hat{\boldsymbol{V}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{E}}$ 的第 i 行, $i=1,2,\cdots,m$. 得到

$$\hat{\boldsymbol{V}}=(\boldsymbol{X}^{\rm T}\boldsymbol{D_E}\boldsymbol{X}+\zeta\boldsymbol{D_V})^{-1}\boldsymbol{X}^{\rm T}\boldsymbol{D_E}\boldsymbol{Y}.\tag{11}$$

下面给出优化问题的迭代算法. 每次迭代时, $\hat{\boldsymbol{V}}$ 由这一时刻的 $\boldsymbol{E}$、$\boldsymbol{D_V}$ 和 $\boldsymbol{D_E}$ 进行计算, 由计算出的 $\hat{\boldsymbol{V}}$ 对 $\boldsymbol{E}$、$\boldsymbol{D_V}$ 和 $\boldsymbol{D_E}$ 进行更新, 整个迭代算法重复直至算法收敛, 具体步骤如下.

算法 1

Step 1: $t=0$, 任选 $\hat{\boldsymbol{V}}\in\boldsymbol{R}^{m\times m}$, 不失一般性, 选择 $\hat{\boldsymbol{V}}$ 为单位阵.

Step 2: 对中心化的数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 进行奇异值分解, 得到 $\boldsymbol{Y}$.

Step 3: 根据 $\boldsymbol{E}=\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{V}}$, 计算得到 $\boldsymbol{E}$.

Step 4: 根据式 (8) 和 (9) 计算 $\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{E}}^t$ 和 $\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{V}}^t$.

Step 5: 计算

$$\hat{\boldsymbol{V}}_{t+1}=(\boldsymbol{X}^{\rm T}\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{E}}^t+\zeta\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{V}}^t)^{-1}\boldsymbol{X}^{\rm T}\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{E}}^t\boldsymbol{Y}.$$

Step 6: $t=t+1$.

Step 7: 返回 Step 3, 直至收敛.

Step 8: $\bar{\boldsymbol{V}}=\hat{\boldsymbol{V}}/\|\hat{\boldsymbol{V}}\|_2$.

Step 9: 利用交叉验证方法得到与稀疏主元相对应的负载矢量 $\boldsymbol{P}$.

1.3 算法分析

算法 1 在每次迭代都会使优化问题的代价函数值单调递减. 为了证明这一点, 首先引入一个引理.

引理 1[14]　如果 $v_t^i|_{i=1}^r$ 是非零矢量, 则有下式成立:

$$\sum_i\|v_{t+1}^i\|_2-\sum_i\frac{\|v_{t+1}^i\|_2^2}{2\|v_t^i\|_2}\leqslant\sum_i\|v_t^i\|_2-\sum_i\frac{\|v_t^i\|_2^2}{2\|v_t^i\|_2}.\tag{12}$$

定理 1　在每次迭代过程中, 算法 1 可以使得优化问题的代价函数单调递减, 并最终收敛到全局最优解.

证明　容易验证式 (11) 是如下优化问题的解:

$$\min_{\hat{\boldsymbol{V}}}\ {\rm Tr}[(\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{V}})^{\rm T}\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{E}}^t(\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{V}})]+\zeta{\rm Tr}(\hat{\boldsymbol{V}}^{\rm T}\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{V}}^t\hat{\boldsymbol{V}}).\tag{13}$$

在第 t 步迭代时, 有

$$\boldsymbol{V}_{t+1}=\arg\min_{\hat{\boldsymbol{V}}_t}{\rm Tr}[(\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{V}}_t)^{\rm T}\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{E}}^t(\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{V}}_t)]+\zeta{\rm Tr}(\hat{\boldsymbol{V}}_t^{\rm T}\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{V}}^t\hat{\boldsymbol{V}}_t).\tag{14}$$

于是有如下不等式成立:

$$\begin{aligned}&{\rm Tr}[(\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{V}}_{t+1})^{\rm T}\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{E}}^t(\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{V}}_{t+1})]+\\&\zeta{\rm Tr}(\hat{\boldsymbol{V}}_{t+1}^{\rm T}\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{V}}^t\hat{\boldsymbol{V}}_{t+1})\leqslant\\&{\rm Tr}[(\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{V}}_t)^{\rm T}\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{E}}^t(\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{V}}_t)]+\\&\zeta{\rm Tr}(\hat{\boldsymbol{V}}_t^{\rm T}\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{V}}^t\hat{\boldsymbol{V}}_t).\end{aligned}\tag{15}$$

为简化表达形式, 设 $\boldsymbol{E}_t=\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{V}}$, 式 (15) 可表示为

$$\begin{aligned}&{\rm Tr}(\boldsymbol{E}_{t+1}^{\rm T}\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{E}}^t\boldsymbol{E}_{t+1})+\zeta{\rm Tr}(\hat{\boldsymbol{V}}_{t+1}^{\rm T}\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{V}}^t\hat{\boldsymbol{V}}_{t+1})\leqslant\\&{\rm Tr}(\boldsymbol{E}_t^{\rm T}\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{E}}^t\boldsymbol{E}_t)+\zeta{\rm Tr}(\hat{\boldsymbol{V}}_t^{\rm T}\boldsymbol{D}_{\boldsymbol{V}}^t\hat{\boldsymbol{V}}_t),\end{aligned}\tag{16}$$

即

$$\begin{aligned}&\sum_{i=1}^N\frac{\|\boldsymbol{E}_{t+1}^i\|_2^2}{2\|\boldsymbol{E}_t^i\|_2}+\zeta\sum_{i=1}^m\frac{\|\hat{\boldsymbol{V}}_{t+1}^i\|_2^2}{2\|\hat{\boldsymbol{V}}_t^i\|_2}\leqslant\\&\sum_{i=1}^N\frac{\|\boldsymbol{E}_t^i\|_2^2}{2\|\boldsymbol{E}_t^i\|_2}+\zeta\sum_{i=1}^m\frac{\|\hat{\boldsymbol{V}}_t^i\|_2^2}{2\|\hat{\boldsymbol{V}}_t^i\|_2}.\end{aligned}\tag{17}$$

其中: $\boldsymbol{E}_{t+1}^i$ 和 $\boldsymbol{E}_t^i$ 分别为 $\boldsymbol{E}_{t+1}$ 和 $\boldsymbol{E}_t$ 的第 i 行, $\hat{\boldsymbol{V}}_{t+1}^i$ 和 $\hat{\boldsymbol{V}}_t^i$ 分别为 $\hat{\boldsymbol{V}}_{t+1}$ 和 $\hat{\boldsymbol{V}}_t$ 的第 i 行. 根据引理 1, 如下不等式成立:

$$\begin{aligned}&\sum_{i=1}^N\|\boldsymbol{E}_{t+1}^i\|_2-\sum_{i=1}^N\frac{\|\boldsymbol{E}_{t+1}^i\|_2^2}{2\|\boldsymbol{E}_t^i\|_2}\leqslant\\&\sum_{i=1}^N\|\boldsymbol{E}_t^i\|_2-\sum_{i=1}^N\frac{\|\boldsymbol{E}_t^i\|_2^2}{2\|\boldsymbol{E}_t^i\|_2},\\&\sum_{i=1}^m\|\hat{\boldsymbol{V}}_{t+1}^i\|_2-\sum_{i=1}^m\frac{\|\hat{\boldsymbol{V}}_{t+1}^i\|_2^2}{2\|\hat{\boldsymbol{V}}_t^i\|_2}\leqslant\\&\sum_{i=1}^m\|\hat{\boldsymbol{V}}_t^i\|_2-\sum_{i=1}^m\frac{\|\hat{\boldsymbol{V}}_t^i\|_2^2}{2\|\hat{\boldsymbol{V}}_t^i\|_2},\end{aligned}\tag{18}$$

进而得到

$$\|\boldsymbol{E}_{t+1}\|_{2,1}+\zeta\|\hat{\boldsymbol{V}}_{t+1}\|_{2,1}\leqslant\|\boldsymbol{E}_t\|_{2,1}+\zeta\|\hat{\boldsymbol{V}}_t\|_{2,1}.\tag{19}$$

算法可以在每步迭代时使得优化问题的代价函数值单调递减.

上述优化问题可以进一步改写为

$$\begin{aligned}&\min_{\boldsymbol{W}}\|\boldsymbol{W}\|_{2,1},\\&{\rm s.t.}\ \boldsymbol{AW}=\boldsymbol{Y}.\end{aligned}\tag{20}$$

其中

$$\boldsymbol{A}=[\boldsymbol{X}\ \ \zeta\boldsymbol{I}],\ \boldsymbol{W}=[\hat{\boldsymbol{V}}^{\rm T}\ \ \boldsymbol{G}^{\rm T}]^{\rm T},$$

$$\boldsymbol{G}=\frac{1}{\zeta}(\boldsymbol{Y}-\boldsymbol{X}\hat{\boldsymbol{V}}).$$

这种形式的优化问题常出现在信号处理领域和多任务特征提取领域, 且已被证明是一个凸优化问题[15-16], 即所给出的优化问题是凸优化问题, 由于算法是单调递减的, 算法最终可以收敛到优化问题的全

局最优解. □

为监测系统性能, 使用如下形式的SPE和T^2统计量:

$$T^2 = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}\Lambda_{pc}^{-1}\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x},$$
$$\mathrm{SPE} = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P}\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{x}. \tag{21}$$

监测指标的置信限制分别为

$$T_{\mathrm{lim}}^2 = \frac{l(n^2-1)}{n(n-l)}F_{l,n-l,\beta},$$
$$\mathrm{SPE}_{\mathrm{lim}} = (\sigma/2\mu)\chi^2_{(2\mu^2/\sigma),\beta}. \tag{22}$$

其中: l为隐变量个数, n为采样数, σ为SPE的方差, μ为SPE的均值. 通过以上两个指标可以完成对故障的检测, 然后使用变量的贡献图对故障进行诊断. 第i个变量对于SPE和T^2统计量的贡献可以表示为

$$C_i^{\mathrm{SPE}} = (\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}\xi_i)^2,$$
$$C_i^{T^2} = (\bar{\boldsymbol{Y}}\Lambda^{-1/2}\xi_i)^2. \tag{23}$$

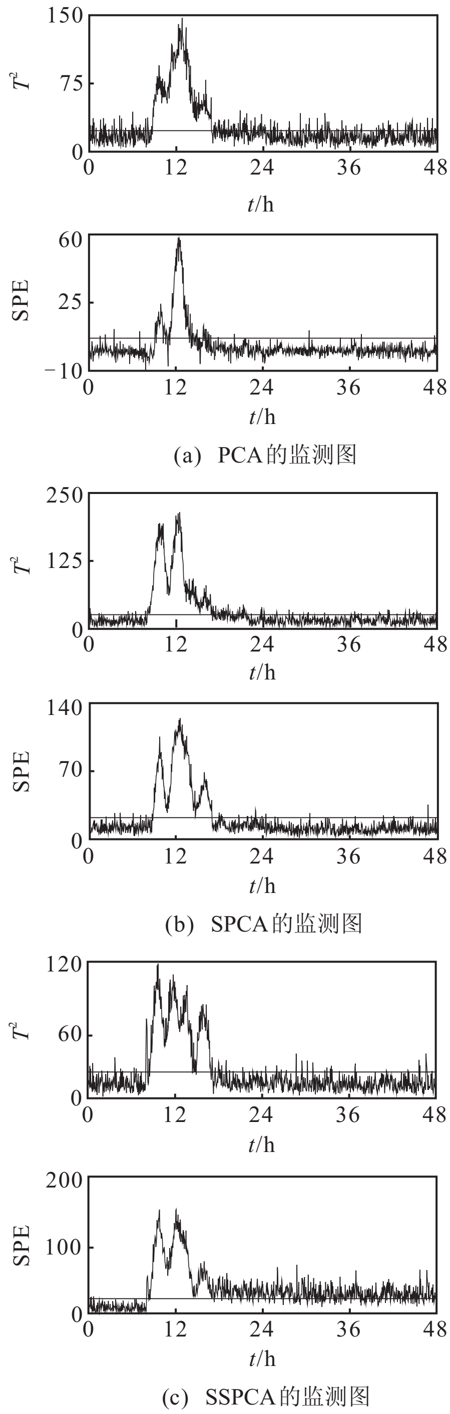
其中: $\boldsymbol{D}=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P}\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}$, $\bar{\boldsymbol{Y}}=\boldsymbol{X}\boldsymbol{P}$, Λ为$\boldsymbol{X}$协方差矩阵的特征值矩阵, ξ_i为单位矩阵的第i列. 在给出变量对统计量的贡献后, 依据变量对统计量的贡献上控制限度形式[18], 定义本文的贡献上控制限度为

$$C_{\mathrm{UCL}} = \mu + 2.357\,6s, \tag{24}$$

其中μ和s分别为贡献C的均值和标准差. 使用变量对统计量的相对贡献C_i/C_{UCL}识别故障变量, 如果相对贡献大于1, 则表明该变量对故障显著影响. 置信度水平选择为99%, 根据式(22)可以计算得到置信限制, 若SPE和T^2统计量的监测曲线超过置信限制, 则认为有故障发生.

2 结果与讨论

田纳西伊斯曼过程[19]是由伊斯曼化学公司提供的基于实际化工过程的一个标准算例, 被广泛用来评估过程控制和监测算法的性能[20]. 整个过程包括53个监测变量, 21个预设故障(IDV(1)～IDV(21)), 正常状态标记为IDV(0). 本文对其中22个过程变量(XMEAS(1)～XMEAS(22))、11个控制变量(XMV(1)～XMV(11))进行监测, 并按顺序构成监测矩阵. 监测过程时长48小时, 采样时间3 min, 故障在第8小时引入, 一直持续到监测结束. 对故障5进行监测, 并将SSPCA算法的结果与传统PCA和SPCA[4]进行比较, 其中SPCA使用由Sjöstrand等人开发的Matlab工具箱SpaSM完成计算, 结果如图1所示. 本文使用故障检测率和故障误报率来量化说明监测结果, 当任何一个统计量的监测曲线超过置信限制时即表明有故障发生.



(a) PCA的监测图

(b) SPCA的监测图

(c) SSPCA的监测图

图1 故障5的监测图

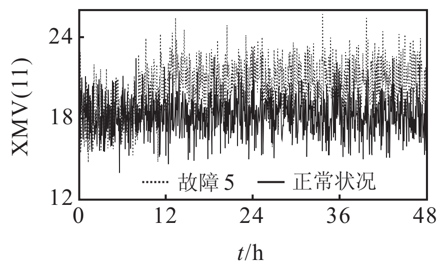


图2 XMV(11)故障前后对比图

由图1(a)和图1(b)可见, PCA和SPCA在早期均能检测出故障, 但在18小时附近均回到置信限制以下, 之后只有少量故障报警, 使操作人员认为故障已经恢复, 但由图2 XMV(11)故障前后对比图可见, 实际上故障仍没有消除. 由图1(c)可见, SSPCA也能在早期及时检测出故障, T^2监测曲线虽然与PCA和

SPCA 的 T^2 监测曲线相似, 即在约第 18 小时回到置信限制以下, 但 SSPCA 的 SPE 监测曲线在第 8 小时超过置信限制后, 仍能保持在置信限制之上. 由表 1 可见, SSPCA 的故障检测率 (90.25%) 远高于 PCA 和 SPCA (37.62%、44.25%), SSPCA 对其他故障的检测率也要远高于 PCA 和 SPCA, 即 SSPCA 对故障的灵敏度更高. 由表 2 可见, SSPCA 的故障误报率比 PCA 和 SPCA 分别低 4.17% 和 2.09%.

表 1　故障检测率　　%

编号	PCA	SPCA	SSPCA	编号	PCA	SPCA	SSPA
1	86.50	83.12	97.50	12	85.37	82.12	100
2	83.37	89.00	99.12	13	85.50	81.62	99.87
3	37.87	51.25	95.12	14	100	100	100
4	35.00	50.00	92.12	15	40.62	50.12	91.62
5	37.62	44.25	90.25	16	65.37	70.50	95.75
6	100	100	100	17	72.50	80.50	95.50
7	100	100	100	18	76.12	75.87	93.37
8	89.50	94.75	100	19	44.62	49.25	90.12
9	47.87	54.37	99.25	20	59.37	61.37	92.75
10	70.75	77.87	93.00	21	54.12	62.87	86.37
11	62.75	72.87	91.00				

表 2　故障误报率　　%

编号	PCA	SPCA	SSPCA
0	6.25	4.17	2.08

使用 SSPCA 对故障进行监测后, 33 个变量对 SPE 和 T^2 统计量的相对贡献如图 3 所示. 由图 3 可见, 对于 T^2 统计量有主要贡献的是第 11、19、28、31 变量, 对于 SPE 有主要贡献的是第 19、22、31、33 变量. 结合 TE 过程的运行情况可以判断出, 故障 5 是由第 33 变量的故障所造成的. 主要贡献变量故障前后的波形对比如图 4 所示. 其中第 11、19、22、28、31 变量均能在系统自身的控制策略作用下在大约第 18 小时回到正常状态, 而第 33 变量无法靠系统自身能力补偿, 因此故障依然存在, 即图 2 所示的 XMV(11) 故障是故障 5 的根本所在, 这与由图 3 所判断的结果相一致.

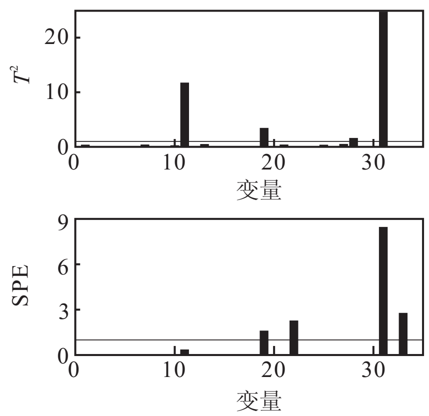


图 3　变量相对贡献图

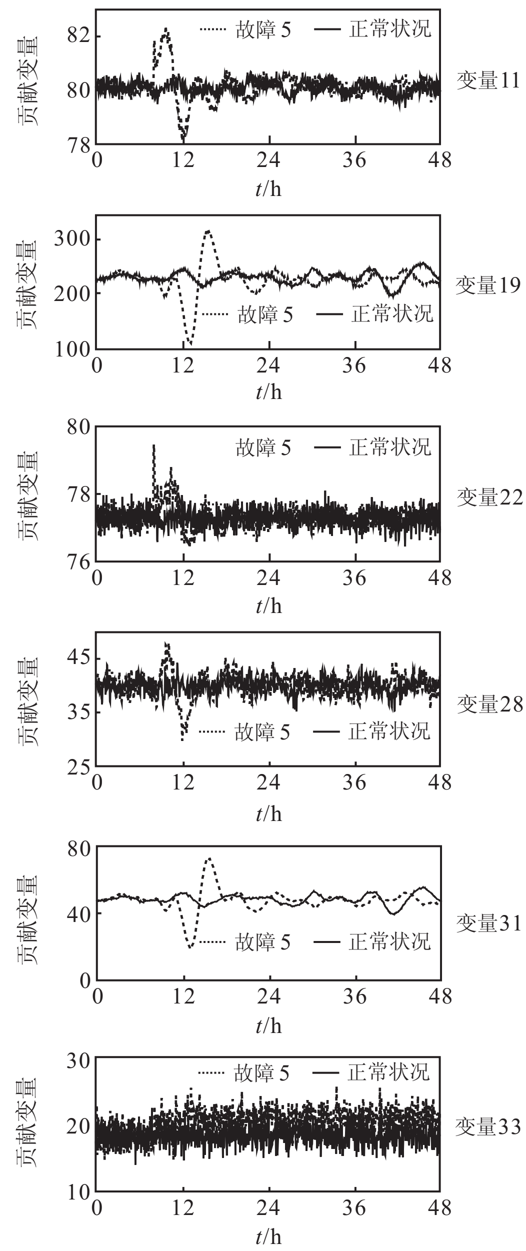


图 4　主要贡献变量故障前后波形图

通过分析可以发现, 在故障发生的 18 小时后, 根据 PCA 和 SPCA 的监测曲线可以认为故障已经消除, 但事实上故障仍然存在, 其原因在于 PCA 和 SPCA 在提取 (稀疏) 主元时舍弃的小得分主元中包含着故障的关键信息. 由于 $L_{2,1}$ 范数的引入使得 SSPCA 所获得的稀疏主元中包含了 PCA 和 SPCA 所舍弃的关键信息, 从而使得 SSPCA 的监测更为准确, 灵敏度更高.

3　结　论

本文提出一种新的稀疏主元分析算法——敏感稀疏主元分析 (SSPCA) 算法, 并证明了算法的单调性和全局收敛性. 利用主元分析与数据矩阵奇异值分解的关系, 通过将 $L_{2,1}$ 范数引入作为代价函数和惩罚项提取稀疏主元, 进而得到一个凸稀疏主元负载优化问题, 并给出一种迭代算法用来求解该问题. $L_{2,1}$ 惩罚项的引入建立了 Jolliffe 所提出问题与稀疏

主元求解之间的联系, 从而在获得稀疏主元的同时, 能兼顾不同方差或特征值主元对算法监测性能的作用, 使SSPCA进行过程监测和故障诊断时能考虑到不同得分主元中所包含的信息. 最后使用田纳西伊斯曼过程中的一个案例对SSPCA算法进行验证, 结果与PCA 和SPCA检测结果的比较显示出, SSPCA算法对故障更加敏感, 故障检测的准确率得到明显提高. 另外, 使用相对贡献能有效识别出对故障起关键作用的变量, 为下一步的故障分离提供了依据. 本文算法对田纳西伊斯曼过程其他故障的诊断和故障的分离是下一步的研究方向.

参考文献(**References**)

[1] Yin S, Li X, Gao H, et al. Data-based techniques focused on modern industrial: An overview[J]. IEEE Trans on Industrial Electronics, 2015, 62(1): 657-667.

[2] Jolliffe I T. Principal component analysis[M]. 2nd ed. New York: Springer-Verlag, 2002: 168-195.

[3] Jolloffe I T, Trendafilov N T, Uddin M. A modified principal component technique based on the LASSO[J]. J Computational and Graphical Statistics, 2003, 12(3): 531-547.

[4] Zou H, Hastie T, Tibshirani R. Sparse principal component analysis[J]. J of Computational and Graphical Statistics, 2006, 15(2): 265-286.

[5] Shen H, Huang J. Sparse principal component analysis via regularized low rank matrix approximation[J]. J of Multivariate Analysis, 2008, 99(6): 1015-1034.

[6] Witten D M, Tibshirani R, Hastie T. A penalized matrix decomposition with applications to sparse principal components and canonical correlation analysis[J]. Biostatistics, 2009, 10(3): 515-534.

[7] Qin X, Luo R, Zeng J. Sparse principal component analysis by choice of norm[J]. J of Multivariate Analysis, 2013, 114(2): 127-160.

[8] Qi X, Luo R. Sparse principal component analysis in Hilbert space[J]. Scandinavian J of Statistics, 2015, 42(1): 270-289.

[9] Wang D, Kong S. Feature selection from high-order tensorial data via sparse decomposition[J]. Pattern Recognition Letters, 2012, 33(13): 1695-1702.

[10] 向馗, 李炳南. 基于稀疏主元分析的微伏级T波交替幅值量化[J]. 生物医学工程学杂志, 2012, 29(5): 954-982.
(Xiang K, Li B N. Quantifying the amplitude of microvolt T wave alternans with sparse principal component analysis[J]. J of Biomedical Engineering, 2012, 29(5): 954-982.)

[11] 向馗, 李炳南. 主元分析中的稀疏性[J]. 电子学报, 2012, 40(12): 2525-2532.
(Xiang K, Li B N. Sparsity in principal component analysis: A survey[J]. Acta Electronica Sinica, 2012, 40(12): 2525-2532.)

[12] Allen G I, Maletic-Savatic M. Sparse non-negative generalized PCA with applications to metabolonics[J]. Bioinformatics, 2011, 27(21): 3029-3035.

[13] Jolliffe I T. A note on the use of principal components in regression[J]. Applied Statistics, 1982, 31(3): 300-303.

[14] Ding C, Zhou D, He X, et al. R1-PCA: Rotational invariant L_1-norm principal component analysis for robust subspace factorization[C]. Proc of the 23th Int Conf on Machine Learning. Pittsburgh, 2006: 281-288.

[15] Nie F, Huang H, Cai X, et al. Efficient and robust feature selection via joint $L_{2,1}$-norms minimization[J]. Advances in Neural Information Processing Systems, 2010, 23: 1813-1821.

[16] Yi Y, Ma Z, Hauptman A G, et al. Feature selection of multimedia analysis by sharing information among multiple tasks[J]. IEEE Trans on Multimedia, 2013, 15(3): 661-669.

[17] Tang J, Liu H. An supervised feature selection framework for social media data[J]. IEEE Trans on Knowledge and Data Engineering, 2014, 26(12): 2914-2927.

[18] Choi S W, Lee I B. Multiblock PLS-based localized process diagnosis[J]. J of Process Control, 2005, 15(2): 295-306.

[19] 蒋浩天, 拉塞尔, 布拉茨. 工业系统的故障检测与诊断[M]. 北京：机械工业出版社, 2003: 104-105.
(Jiang H T, Russell E L, Braatz R D. Fault detection and diagnosis in industrial systems[M]. Beijing: China Machine Press, 2003: 104-105.)

[20] Shen Y, Ding S X, Haghani A, et al. A comparison study of basic data-driven fault diagnosis and process monitoring methods on the benchmark tennessee eastman process[J]. J of Process Control, 2012, 22(9): 1567-1581.

(责任编辑：郑晓蕾)