

基于WPG-KNMF的非线性动态过程监控研究

张成¹, 邓成龙², 李元^{3†}

(1. 沈阳化工大学 理学院, 辽宁 沈阳 110142; 2. 沈阳化工大学 计算机科学与技术学院, 辽宁 沈阳 110142;

3. 沈阳化工大学 信息工程学院, 辽宁 沈阳 110142)

摘要: 针对非线性动态过程故障检测问题, 本文提出一种基于Wasserstein距离投影梯度核非负矩阵分解(WPG-KNMF)的故障检测方法. 首先, 采用投影梯度方法对KNMF的基矩阵和系数矩阵进行更新. 其次, 在高维特征空间中, 使用Wasserstein距离结合滑动窗口方法, 构造新的统计量进行故障检测. 本文方法将KNMF中迭代方法改进为投影梯度方法, 通过KNMF将数据的非线性结构捕获, 并结合Wasserstein距离消除样本间自相关性影响. 通过一个数值例子和基于工业控制系统执行器诊断方法的开发与应用(DAMADICS)过程的实验数据进行仿真实验, 与传统核主成分分析(KPCA)、核非负矩阵分解等方法进行对比, 仿真结果验证了本文所提方法的有效性.

关键词: 核非负矩阵分解; 非线性过程; 动态过程; 投影梯度; Wasserstein距离; 故障检测

引用格式: 张成, 邓成龙, 李元. 基于WPG-KNMF的非线性动态过程监控研究. 控制理论与应用, 2025, 42(3): 569–578

DOI: 10.7641/CTA.2023.30121

Research on nonlinear dynamic processes monitoring based on WPG-KNMF

ZHANG Cheng¹, DENG Cheng-long², LI Yuan^{3†}

(1. College of Science, Shenyang University of Chemical Technology, Shenyang Liaoning 110142, China;

2. College of Computer Science and Technology, Shenyang University of Chemical Technology, Shenyang Liaoning 110142, China;

3. College of Information Engineering, Shenyang University of Chemical Technology, Shenyang Liaoning 110142, China)

Abstract: Aiming at the fault detection of nonlinear dynamic processes, a fault detection method based on the Wasserstein distance projection gradient kernel non-negative matrix factorization (WPG-KNMF) is proposed. Firstly, the projection gradient method is used to update the basis matrix and coefficient matrix in kernel non-negative matrix factorization (KNMF). Secondly, the Wasserstein distance combined with the sliding window method is used to construct new statistics for fault detection in high-dimensional feature space. In this paper, the iterative method in KNMF is improved to the projection gradient method. The nonlinear structure of the data is captured by the KNMF and the Wasserstein distance is combined to eliminate the influence of autocorrelation between samples. The proposed approach is tested in a numerical case and in the development and application of methods for actuator diagnosis in industrial control systems (DAMADICS) process. The experimental results indicate that the proposed approach has an advantage over conventional methods, such as the kernel principal component analysis (KPCA) and the kernel non-negative matrix factorization.

Key words: kernel non-negative matrix factorization; nonlinear process; dynamic process; projected gradient; Wasserstein distance; fault detection

Citation: ZHANG Cheng, DENG Chenglong, LI Yuan. Research on nonlinear dynamic process monitoring based on WPG-KNMF. *Control Theory & Applications*, 2025, 42(3): 569–578

1 引言

随着现代工业过程越来越大型化和复杂化, 企业对工业生产中生产的效益以及安全性有着更高的要求. 近年来, 为了有效监控生产过程的安全性, 基于数

据驱动的多元统计过程监控方法得到了广泛地应用^[1–2], 其中主要包含主成分分析(principal component analysis, PCA)^[3]、独立成分分析(independent component analysis, ICA)^[4]和非负矩阵分解(non-negative

收稿日期: 2023–03–09; 录用日期: 2023–12–06.

†通信作者. li-yuan@mail.tsinghua.edu.cn; Tel.: +86 13082424115.

本文责任编辑: 王东.

国家自然科学基金项目(62273242), 辽宁省教育厅基本科研项目(LJKMZ20220792), 辽宁省研究生教育教学改革项目(LNYJG2022177)资助.

Supported by the National Natural Science Foundation of China (62273242), the Basic Scientific Research Project of Liaoning Provincial Department of Education (LJKMZ20220792) and the Graduate Education Project of Liaoning Provincial Department of Education (LNYJG2022177).

matrix factorization, NMF)^[5-6]等.

PCA是被最广泛应用的故障检测与诊断方法. 研究表明, 基于PCA的过程监控方法在线性过程具有良好的故障检测性能^[7]. 事实上, PCA方法在非线形过程中的检测性能往往不能达到理想效果. 为了监控非线性过程, 核主成分分析(kernel PCA, KPCA)^[8-9]方法被提出, 其引入了核技巧, 解决了具有非线性特征的过程监控问题. KPCA方法对于数据要求其近似符合高斯分布, 但是在现实工业过程中无法满足数据的高斯性要求. 近年来NMF作为一种新的降维方法, 已成为图像处理、模式识别和工业过程监测等领域的重点研究课题. NMF只对数据有非负性约束, 对于线性数据有着较高检测率, 但是不能捕获数据的非线性结构. 为了捕获数据的非线性结构, 核非负矩阵分解(kernel NMF, KNMF)^[10-11]方法被提出. KNMF通过非线性映射将原始数据映射到高维特征空间, 使得原本线性不可分的数据变得线性可分, 之后在特征空间中使用NMF进行故障检测. 一般KNMF方法的更新规则采用Lee和Seung^[12]提出的乘法更新算法. 然而, 对于特征空间使用乘性更新规则容易引起迭代结果落入局部最优点. 梯度下降方法^[13]是机器学习的一种常用的优化算法, 可以用于KNMF方法之中, 但是其迭代结果同样容易得到局部最优点. KNMF虽然能够有效捕获数据的非线性结构, 但是实际生产过程中的动态性会对监控产生影响. 动态性是表示整个系统处于运动和发展过程中的一种特性. 其中主要包含了变量间的互相关关系, 以及样本间的自相关关系. 而基于时间序列的样本间自相关性的研究, 在过程监控中是重点研究内容. 处理样本的自相关性的方法有Li^[14]提出的NMF结合滑动窗口的方法, 以及Ku等^[15]提出的动态主元分析(dynamic PCA, DPCA)等, 但是对于自相关性较强的化工过程, 其检测结果仍不理想. 实际生产过程中的数据往往具有非线性动态特征, 如连续搅拌釜(continuous stirred tank reactor system, CS-TR)^[16]过程、工业控制系统执行器诊断方法的开发与应用(development and application of methods for actuator diagnosis in industrial control systems, DAMAD-ICS)^[17-18]过程等. 这些工业过程的数据不仅具有非线性结构, 而且有着较强的自相关性, 这些特性制约着过程监控的结果.

针对非线性动态过程故障检测问题, 本文提出了一种基于Wasserstein距离投影梯度核非负矩阵分解(wasserstein distance projected gradient KNMF, WPG-KNMF)故障检测方法. 首先, 应用投影梯度方法迭代优化KNMF方法特征空间的基矩阵和系数矩阵. 之后, 应用滑动窗口技术计算特征空间系数矩阵Wasserstein距离, 并将获得的Wasserstein距离值作为统计值进行过程监控. 在数值例子和DAMADICS过程中的仿真

结果验证了该方法既可以有效捕获数据的非线性结构, 又可以消除数据的动态性对故障检测的影响.

2 非负矩阵分解

给定一个 m 行 n 列的非负矩阵 \mathbf{X} , NMF目的是将矩阵 \mathbf{X} 近似地分解为两个非负矩阵 \mathbf{W} 和 \mathbf{H} 的乘积, 其中: \mathbf{W} 称为基矩阵, \mathbf{H} 称为系数矩阵, 即

$$\mathbf{X}_{m \times n} \approx \mathbf{W}_{m \times d} \mathbf{H}_{d \times n}, \quad (1)$$

其中 d 的大小满足 $d \leq \frac{mn}{m+n}$. 原始矩阵 \mathbf{X} 的任一列向量可以与分解后基矩阵所有基向量的加权和相对应, 基向量的权重则为系数矩阵列向量.

为最小化 $\|\mathbf{X} - \mathbf{W}\mathbf{H}\|$, Lee等^[12]提出了非负矩阵的乘性更新规则, 即

$$\mathbf{W}_{ij}^{k+1} = \mathbf{W}_{ij}^k \frac{(\mathbf{X}(\mathbf{H}^k)^T)_{ij}}{(\mathbf{W}^k \mathbf{H}^k (\mathbf{H}^k)^T)_{ij}}, \quad (2)$$

$$\mathbf{H}_{ij}^{k+1} = \mathbf{H}_{ij}^k \frac{((\mathbf{W}^k)^T \mathbf{X})_{ij}}{((\mathbf{W}^k)^T \mathbf{W}^k \mathbf{H}^k)_{ij}}, \quad (3)$$

其中 k 为迭代次数. 在迭代的过程中, 随机非负初始化 \mathbf{W} 和 \mathbf{H} , 选择合适的迭代次数, 之后使用式(2)–(3)进行迭代, 得到最终优化的基矩阵 \mathbf{W} 和系数矩阵 \mathbf{H} .

3 核非负矩阵分解

KNMF方法是将原始非线性数据集映射到特征空间, 使其线性可分. 此外, 通过引入核函数, 可以直接得到低维数据映射到高维空间后的内积.

给定一个高维特征空间 \mathbf{F} , 对 n 个样本, 即

$$\Phi: \mathbf{x} \in \mathbf{X} \rightarrow \Phi(\mathbf{x}) \in \mathbf{F}. \quad (4)$$

KNMF的目标也是找到两个非负因子, 即

$$\Phi(\mathbf{X}) = \mathbf{W}_\Phi \mathbf{S}, \quad (5)$$

其中: \mathbf{W}_Φ 是特征空间的基, \mathbf{S} 是特征空间的系数. 所以特征空间目标函数可以写为

$$\min \mathbf{J}(\mathbf{W}_\Phi, \mathbf{S}) = \|\Phi(\mathbf{X}) - \mathbf{W}_\Phi \mathbf{S}\|_F^2, \quad (6)$$

由于无法直接得到 $\Phi(\mathbf{X})$, 所以需要引入核函数进行计算, 而核的类型有多种, 通常选用经典的高斯核^[19], 即

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \exp\left(\frac{-\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^2}{\delta^2}\right), \quad (7)$$

更具体地说, 内核被定义为^[10]

$$k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \langle \Phi(\mathbf{x}), \Phi(\mathbf{y}) \rangle = \Phi^T(\mathbf{x})\Phi(\mathbf{y}). \quad (8)$$

由上述内核定义可知

$$\mathbf{K} = \Phi^T(\mathbf{X})\Phi(\mathbf{X}). \quad (9)$$

记 $\mathbf{W}_\Phi = [\mathbf{w}_\Phi^1 \ \mathbf{w}_\Phi^2 \ \cdots \ \mathbf{w}_\Phi^i]$, 而其中 $\mathbf{w}_\Phi^i = \mathbf{c}_{1i}\varphi(\mathbf{x}_1) + \cdots + \mathbf{c}_{ni}\varphi(\mathbf{x}_n)$, \mathbf{c}_{ji} 为系数, 所以得到 $\mathbf{W}_\Phi = \Phi(\mathbf{X})\mathbf{C}$, 因此, 目标函数可改写为

$$\min \mathbf{J}(\mathbf{C}, \mathbf{S}) = \|\Phi(\mathbf{X}) - \Phi(\mathbf{X})\mathbf{C}\mathbf{S}\|_F^2 =$$

$$\text{tr}(\mathbf{K} - 2\mathbf{KCS} + \mathbf{S}^T \mathbf{C}^T \mathbf{KCS}), \quad (10)$$

其中: $\mathbf{C} = [c_{ji}]_{j,i}^{n,d}$ 为系数矩阵, tr 是矩阵的迹.

由于正交性可以提高子空间的近似性能和几何解释以及具有减少计算负载的能力, 因此, 总是期望基向量是相互正交的, 所以, 基矩阵添加了正交约束. 除了正交约束外, 还引入了对所有矩阵因子的非负约束, 从而, 产生了以下优化问题:

$$\begin{aligned} \min J(\mathbf{C}, \mathbf{S}) &= \text{tr}(\mathbf{K} - 2\mathbf{KCS} + \mathbf{S}^T \mathbf{C}^T \mathbf{KCS}), \\ \text{s.t. } \mathbf{C}^T \mathbf{K} \mathbf{C} &= \mathbf{I}, \mathbf{C} \geq 0, \mathbf{S} \geq 0, \end{aligned} \quad (11)$$

$J(\mathbf{C}, \mathbf{S})$ 关于 \mathbf{C} 的偏导为

$$\nabla_{\mathbf{C}} J(\mathbf{C}, \mathbf{S}) = \frac{\partial J(\mathbf{C}, \mathbf{S})}{\partial \mathbf{C}} = (2\mathbf{KCS}^T - 2\mathbf{KS}^T), \quad (12)$$

$J(\mathbf{C}, \mathbf{S})$ 关于 \mathbf{S} 的偏导为

$$\nabla_{\mathbf{S}} J(\mathbf{C}, \mathbf{S}) = \frac{\partial J(\mathbf{C}, \mathbf{S})}{\partial \mathbf{S}} = \mathbf{C}^T \mathbf{KCS} - \mathbf{C}^T \mathbf{K}, \quad (13)$$

所以可以得到 \mathbf{C} 和 \mathbf{S} 的更新规则如下:

$$\mathbf{C}^{k+1} = \mathbf{C}^k \frac{(\mathbf{K}(\mathbf{S}^k)^T)}{(\mathbf{K}\mathbf{C}^k \mathbf{S}^k (\mathbf{S}^k)^T)}, \quad (14)$$

$$\mathbf{S}^{k+1} = (\mathbf{C}^k)^T \mathbf{K}, \quad (15)$$

其中 k 为迭代次数.

4 基于WPG-KNMF的非线性动态过程监控方法

4.1 投影梯度核非负矩阵分解

对于式(11)目标函数包含两个需要更新的矩阵 \mathbf{C} 和 \mathbf{S} , 需要找到其全局最优解. 一般应用乘法更新方法或者梯度下降方法对目标函数进行求解, 但是很容易得到一个局部最优解, 并且迭代时间长. 为此, 本节采用投影梯度下降方法^[20]求解目标函数(11). 这样可以降低迭代时间, 并保证得到的收敛结果是一个全局最优解.

为了得到式(11)的解, 需要通过固定一个矩阵变量来优化更新另一个矩阵变量. 式(16)–(17)是一个交替优化问题, 其中 α 是步长

$$\mathbf{C}^{k+1} = \max(0, \mathbf{C}^k - \alpha_k \nabla_{\mathbf{C}} J(\mathbf{C}^k, \mathbf{S}^k)), \quad (16)$$

$$\mathbf{S}^{k+1} = \max(0, \mathbf{S}^k - \alpha_k \nabla_{\mathbf{S}} J(\mathbf{C}^k, \mathbf{S}^k)), \quad (17)$$

实际上, 式(16)–(17)是运用块坐标下降方法, 是对两个变量块 \mathbf{C} 和 \mathbf{S} 依次进行更新. 即便目标函数没有关于函数的凸假设的情况下, 得到的两个解同样会全局收敛^[21]. 因此, 投影梯度下降法对于求解(11)的问题具有较好的优化性质.

对于式(16)–(17), 投影梯度下降方法另一种表达方式如下.

首先, 固定 \mathbf{S} 对 \mathbf{C} 进行更新, 即

$$\mathbf{C}^{k+1} = P[\mathbf{C}^k - \alpha_k \nabla_{\mathbf{C}} J(\mathbf{C}^k, \mathbf{S}^k)], \quad (18)$$

之后, 固定 \mathbf{C} 对 \mathbf{S} 进行更新

$$\mathbf{S}^{k+1} = P[\mathbf{S}^k - \alpha_k \nabla_{\mathbf{S}} J(\mathbf{C}^k, \mathbf{S}^k)], \quad (19)$$

其中: k 为迭代次数, $P[\cdot]$ 为

$$P[\mathbf{X}_{ij}] = \begin{cases} \mathbf{X}_{ij}, & \mathbf{X}_{ij} > 0, \\ 0, & \mathbf{X}_{ij} \leq 0. \end{cases} \quad (20)$$

不同的投影梯度方法在步长的选择上存在差异, 本文选用沿投影弧^[22]的方法选择步长

1) 给定 $0 < \beta < 1, 0 < \sigma < 1$, 随机初始化 \mathbf{X}^1 ;

2) For $k = 1, 2, \dots$,

$$\mathbf{X}^{k+1} = P[\mathbf{X}^k - \alpha_k \nabla f(\mathbf{X}^k)],$$

使 $\alpha_k = \beta^{tk}$ 满足

$$f(\mathbf{X}^{k+1}) - f(\mathbf{X}^k) \leq \sigma \nabla f(\mathbf{X}^k)^T (\mathbf{X}^{k+1} - \mathbf{X}^k). \quad (21)$$

通过尝试步长大小为 $1, \beta^1, \beta^2, \dots$, 来选择步长. 投影梯度方法的证明中一般使用条件(21), 其确保了每次迭代数值的充分减少. 由于 α_k 和 α_{k-1} 是相近的, 为了减少搜索 α_k 的时间, 可以使用 α_{k-1} 作为初始猜测, 然后增加或减少它, 以找到最大的 β^{tk} 来满足式(21).

乘法更新方法的迭代是一个无限循环, 它必须人为的设置停止条件去停止迭代. Brunet等^[23]提出一种最近两次迭代之间差异性比较的方法, 如果差异足够小, 则将迭代过程停止. 然而, 这种停止方法并不能揭示得到的解是否接近于平稳点. 除了时间或迭代限制外, 平稳性检查也是算法的标准条件. 此外, 在交替最小二乘中, 每个子问题都涉及到一个优化过程, 所以每个子问题也需要一个停止条件.

在边界约束优化中, 检验一个点是否接近于平稳点的一个常见条件如下:

$$\|\nabla^P f(\mathbf{X}^k)\| \leq \varepsilon \|\nabla f(\mathbf{X}^1)\|, \quad (22)$$

其中投影梯度为 $\nabla^P f(\mathbf{X}^k)$, 定义为

$$\nabla^P f(\mathbf{X}^k) \equiv \begin{cases} \nabla f(\mathbf{X})_i, & l_i < \mathbf{X}_i < u_i, \\ \min(0, \nabla f(\mathbf{X})_i), & \mathbf{X}_i = l_i, \\ \max(0, \nabla f(\mathbf{X})_i), & \mathbf{X}_i = u_i. \end{cases} \quad (23)$$

式(22)来自于有界条件的KKT (Karush-Kuhn-Tucker)条件的等价形式, 对于KNMF来说,

$$\|\nabla^P J(\mathbf{C}^k, \mathbf{S}^k)\|_F \leq \varepsilon \|\nabla J(\mathbf{C}^1, \mathbf{S}^1)\|_F. \quad (24)$$

由于交替最小二乘法的每个子问题都需要一个停止条件, 所以有两个停止条件, 即

$$\|\nabla_{\mathbf{C}}^P J(\mathbf{C}^{k+1}, \mathbf{S}^k)\|_F \leq \bar{\varepsilon}_{\mathbf{C}}, \quad (25)$$

$$\|\nabla_S^P \mathbf{J}(\mathbf{C}^{k+1}, \mathbf{S}^{k+1})\|_F \leq \bar{\varepsilon}_S, \quad (26)$$

$$\bar{\varepsilon}_C = \bar{\varepsilon}_S \equiv$$

$$\max(10^{-3}, \varepsilon) \|\nabla \mathbf{J}(\mathbf{C}^1, \mathbf{S}^1)\|_F. \quad (27)$$

对于一个随机生成的 10×1000 的非负矩阵,使用乘性更新方法和投影梯度方法得到最终的基矩阵和系数矩阵的迭代时间如表1所示.可以看出投影梯度更新方法的迭代效率要高于乘性更新方法.

表1 迭代时间对比

Table 1 Comparison of iteration time

迭代方法	平均迭代时间/s
乘性更新	0.2613
投影梯度下降	0.0014

选取误差值为0.01时,投影梯度更新方法与乘法更新方法迭代次数对比图如图1所示.可以看出迭代到0.01误差时,投影梯度更新方法迭代的次数要远低于乘法更新方法迭代次数,这一结果说明投影梯度方法迭代效率更高.

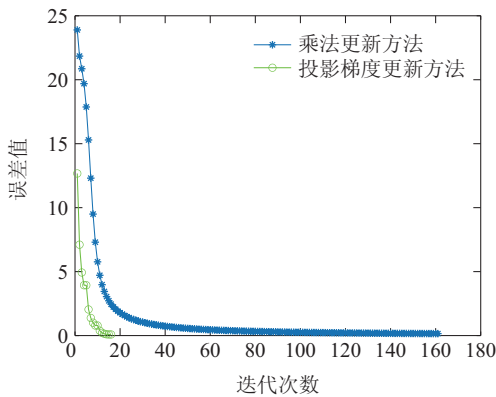


图1 迭代次数对比图

Fig. 1 Comparison of the number of iterations

确定了最终迭代得到的 \mathbf{C} 和 \mathbf{S} ,则特征空间可分解为

$$\Phi(\mathbf{X}) = \Phi(\mathbf{X})\mathbf{C}\mathbf{S} + \mathbf{E}, \quad (28)$$

其中 \mathbf{E} 是残差矩阵.由于

$$\begin{aligned} & (\Phi(\mathbf{X})\mathbf{C}) ((\Phi(\mathbf{X})\mathbf{C})^T \Phi(\mathbf{X})\mathbf{C})^{-1} (\Phi(\mathbf{X})\mathbf{C})^T = \\ & (\Phi(\mathbf{X})\mathbf{C})(\Phi(\mathbf{X})\mathbf{C})^T, \end{aligned}$$

所以 $\Phi(\mathbf{X})\mathbf{C}$ 是负载矩阵.类似PCA,对于每个新样本 $\varnothing(\bar{\mathbf{x}})$,相应的得分向量 \mathbf{l} 可以定义为

$$\begin{aligned} \mathbf{l} &= (\Phi(\mathbf{X})\mathbf{C})^T \varnothing(\bar{\mathbf{x}}) = \\ & \mathbf{C}^T \Phi^T(\mathbf{X}) \varnothing(\bar{\mathbf{x}}) = \mathbf{C}^T \bar{\mathbf{k}}, \end{aligned} \quad (29)$$

其中 $\bar{\mathbf{k}}$ 为

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{k}} &= \Phi^T(\mathbf{X}) \varnothing(\bar{\mathbf{x}}) = \\ & [\varnothing^T(\mathbf{x}_1) \varnothing(\bar{\mathbf{x}}) \cdots \varnothing^T(\mathbf{x}_n) \varnothing(\bar{\mathbf{x}})]^T = \end{aligned}$$

$$[k(\mathbf{x}_1, \bar{\mathbf{x}}) \cdots k(\mathbf{x}_n, \bar{\mathbf{x}})]^T. \quad (30)$$

4.2 Wasserstein距离

Wasserstein距离来源于最优传输理论,也被称为推土机距离^[24-25].假设有两个不同的数据分布 \mathbf{p} 和 \mathbf{q} ,将数据从分布 \mathbf{p} 移动成分布 \mathbf{q} 时所需要移动的平均距离最小值就称为Wasserstein距离.

假设要把分布 $\mathbf{p}(x)$ 转化成 $\mathbf{q}(x)$,设距离函数即转移成本为 $d(x, y)$,那么, Wasserstein距离定义为

$$W[p, q] = \inf_{\gamma \in \Pi[p, q]} \iint \gamma(x, y) d(x, y) dx dy, \quad (31)$$

其中: $\gamma \in \Pi[p, q]$ 是指 \mathbf{p} 和 \mathbf{q} 的联合分布, \inf 指代最大下界.

设 $\mathbf{Y}_1 \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\mathbf{Y}_2 \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 为两组 m 维的数据集,将 \mathbf{Y}_1 作为起始点, \mathbf{Y}_2 作为要逼近的终点,所需代价的总量即为 $\gamma(\mathbf{Y}_1, \mathbf{Y}_2)$.具体而言, $\gamma(\mathbf{Y}_1, \mathbf{Y}_2)$ 刻画 \mathbf{Y}_1 转移到 \mathbf{Y}_2 ,使 $\mathbf{Y}_1, \mathbf{Y}_2$ 服从相同分布所需要距离的百分比.而两个分布之间的距离则为 $\|\mathbf{Y}_1 - \mathbf{Y}_2\|$,因而,总代价,也即统计量为

$$W = \sum_{\mathbf{Y}_1, \mathbf{Y}_2} \gamma(\mathbf{Y}_1, \mathbf{Y}_2) \|\mathbf{Y}_1 - \mathbf{Y}_2\|. \quad (32)$$

从式(32)可以看出,两个分布的差异程度可以通过 W 的值来确定, W 值越小则说明两个分布差异越小,反之越大则说明两个分布差异越大.在当前的研究中传统KNMF方法进行故障检测时使用 N^2 统计量^[26],其公式如下所示:

$$N^2 = \mathbf{l}^T \mathbf{l}. \quad (33)$$

当样本间自相关性高时, N^2 统计量难以有效地在过程监控中检测到故障.而 W 统计量对数据的分布没有要求,并且可以有效地捕获到两个分布之间的差异性,较好地降低了样本间自相关性影响,对故障有着较高的检测率.

4.3 故障检测流程

基于WPG-KNMF故障检测分为离线建模和在线检测两个阶段,具体流程如下:

1) 离线建模.

a) 收集两组正常情况下的数据集 \mathbf{X} 和 \mathbf{X}_1 ,分别作为训练数据集和验证数据集并标准化.

b) 根据投影梯度KNMF方法得到训练数据 \mathbf{X} 的基矩阵和系数矩阵,通过式(29)得到训练数据和验证数据的得分矩阵 \mathbf{l} 和 \mathbf{l}_1 .

c) 选择合适的窗宽和步长,结合Wasserstein距离通过式(32)得到 W 统计量.

d) 使用核密度估计(kernel density estimation, KDE)^[27]计算得到 W 统计量控制限.

其中,在KNMF中,没有关于数据分布的假设.因此,不能使用近似分布函数来确定本节中定义的 W 统

计量的控制限. 核密度估计作为一种著名的非参数密度估计方法, 在此次研究中被用来估计上述统计量的控制限.

2) 在线检测.

a) 采集新的在线测试样本 \mathbf{X}_2 , 将测试数据基于训练数据的均值和方差标准化.

b) 将测试数据使用高斯核函数计算核矩阵, 通过式(29)得到测试数据的得分 \mathbf{l}_2 .

c) 选择与训练数据一致的窗宽和步长, 结合 Wasserstein 距离, 通过式(32)得到 \bar{W} 统计量.

d) 判断 \bar{W} 的统计量值是否超过正常建模时得到的控制限, 如果超出则表明发生故障, 否则表明其为正常.

5 仿真实验

本节选用数值例子和 DAMADICS 平台对本文方法进行验证, 并选择 KPCA, KNMF, DPCA, 动态核主成分分析(dynamic KPCA, DKPCA)等算法作为对比, 验证所提出算法的有效性.

5.1 数值仿真

本节通过引用文献[28]中具有非线性动态性质的数值例子对本文方法进行验证, 模型如下所示:

$$\begin{cases} \begin{bmatrix} x_1(k) \\ x_2(k) \\ x_3(k) \end{bmatrix} = \\ \begin{bmatrix} 0.118 & -0.191 & 0.287 \\ 0.847 & 0.264 & 0.943 \\ -0.333 & 0.514 & -0.217 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1(k-1) \\ x_2(k-1) \\ x_3(k-1) \end{bmatrix} + \\ \begin{bmatrix} t(k) \\ t^2(k) - 3t(k) \\ -t^3(k) + 3t^2(k) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} e_1(k) \\ e_2(k) \\ e_3(k) \end{bmatrix}, \\ t(k) = 0.811t(k-1) + 0.193w(k), \end{cases} \quad (34)$$

其中: x_1, x_2, x_3 为观测变量; t 为潜隐变量; $e_i (i = 1, 2, 3) \sim N(0, 0.01)$ 为高斯噪声; $w \in [0.01, 2]$ 为均匀分布的随机变量. 首先, 根据式(34)生成一组有 2000 个正常样本的数据作为训练数据, 之后, 生成另一组有 2000 个样本的数据作为测试数据, 其中测试数据的前 500 个样本为正常样本数据作为校验数据, 测试数据的后 1500 个数据在变量 x_3 上添加幅值为 -0.5 的阶跃故障作为故障数据. 生成 10 组有 2000 个正常样本的数据, 之后, 对这 10 组数据计算均值, 得到一组有 2000 个样本的数据作为验证数据集, 用于控制限的确定.

对于算法的整体优劣性评价, 采用故障检测率 (fault detection rate, FDR)、故障误报率 (fault false ala-

rm rate, FAR) 两个指标评价. FDR 定义为在控制限之上的故障样本占所有故障样本的比例; FAR 定义为在控制限之上的正常样本与全部正常样本的比例.

对上述数值例子分别运用 NMF, KPCA, KNMF, DPCA, DKPCA, WPG-KNMF 方法对其进行检测. 各方法核宽参数根据交叉验证, 统一设置为 30. 对于 KPCA, 主元个数根据 95% 的累计贡献率选择; 对于 NMF, d 值的选择根据 Li^[6] 的阐述, 利用 PCA 得到的主成分数量作为 d 值, 基矩阵的初始化则用 PCA 的负载矩阵的绝对值进行初始化, 而系数矩阵则使用正数随机初始化; 对于 KNMF 和 WPG-KNMF, 其 d 值和基矩阵的初始化则利用 KPCA 的主成分数和负载矩阵绝对值, 系数矩阵则使用正数随机初始化; 对于 DPCA 和 DKPCA 方法, 时滞参数根据交叉验证, 选择为 2; 对于 WPG-KNMF 方法, 窗宽的选择较为重要^[29]. 在本例当中, 采集 10 组正常样本并计算均值得到一组验证数据集用于建立模型. 当选择的窗宽较小时, Wasserstein 距离难以分析数据的分布差异性. 而选择的窗宽较大时, 虽然会有较好检测性能, 但是同样会引起多数的历史数据信息对未来数据信息产生掩盖效应, 这样就导致了在线检测过程中会产生较大的延迟. 经过交叉验证, 选择使得误报数最少的最小窗口作为最佳窗宽. 基于上述分析, 选择 WPG-KNMF 方法的窗宽为 140. 以上方法用核密度估计获得控制限时, 统一设置 95% 的置信水平.

6 种方法检测结果如表 2-3 所示. 对于图 2(a), NMF 方法无法解决样本间的自相关性, 并且对于数据的非线性结构无法有效识别, 所以不能有效检测故障. 对于图 2(b)-(c), KPCA 和 KNMF 方法虽然对数据的非线性结构进行了有效的捕获, 但是对于样本间的自相关性处理能力不足, 所以检测效果不佳. 对于图 2(d), DPCA 方法虽然降低了样本的自相关性, 但是无法捕获数据的非线性结构, 因此无法获得较好的检测性能. 对于图 2(e), DKPCA 虽然能够捕获数据的非线性结构, 以及降低样本间的自相关性, 但是无法完全消除样本间的自相关性, 并且当数据存在非高斯性时, 这就与 T^2 统计量需要数据服从多元正态分布以及相互独立的要求相悖, 因此检测效果不佳. 图 2(f) 给出 WPG-KNMF 方法检测结果, 其中, 由于前 140 s 没有达到窗宽范围, 因此无法检测. WPG-KNMF 可以有效捕获数据的非线性结构, 同时统计量 W 可以有效降低数据非高斯性与自相关性对监控产生的影响. 因此, 本文所提方法相较于其他传统方法具有较好的检测性能.

5.2 DAMADICS 平台

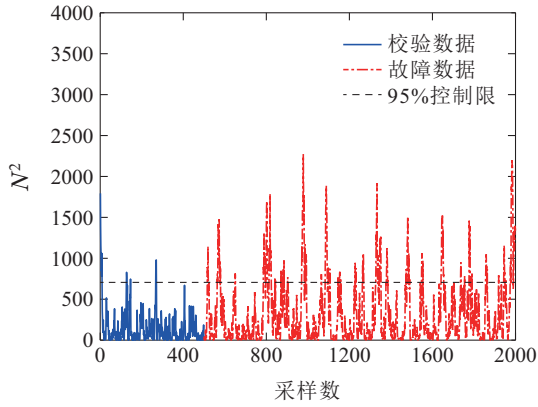
本节通过 DAMADICS 过程仿真数据, 比较了传统 NMF, KPCA, KNMF, DPCA, DKPCA 方法与 WPG-KNMF 方法的监测性能.

表2 各算法检测率

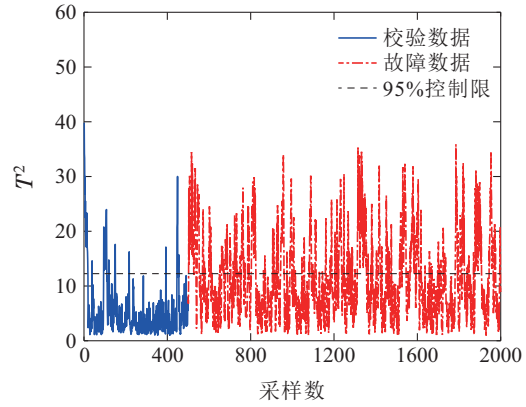
NMF	KPCA	KNMF	DPCA	DKPCA	WPG-KNMF
$N^2/1\%$	$T^2/1\%$	$N^2/1\%$	$T^2/1\%$	$T^2/1\%$	$W/1\%$
14.6	36.9	32.6	32.5	35.3	94.4

表3 各算法误报率

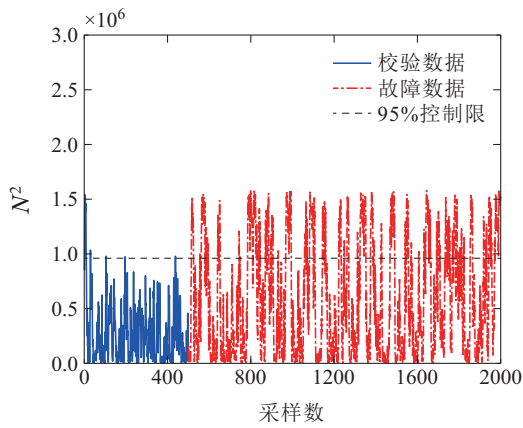
NMF	KPCA	KNMF	DPCA	DKPCA	WPG-KNMF
$N^2/1\%$	$T^2/1\%$	$N^2/1\%$	$T^2/1\%$	$T^2/1\%$	$W/1\%$
2.8	9.2	2.4	3.8	3.2	2.0



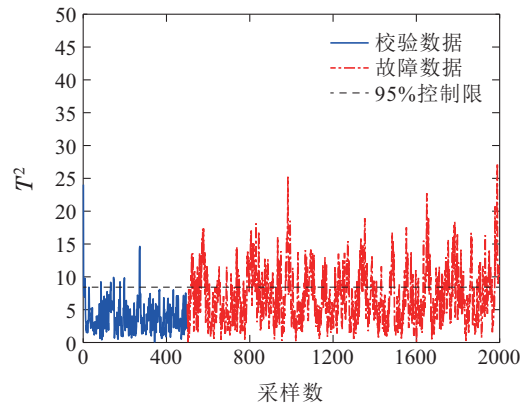
(a) NMF



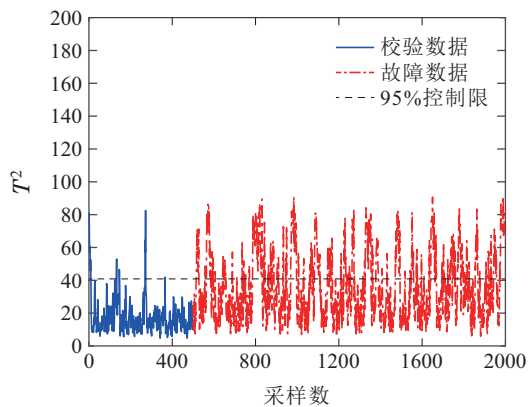
(b) KPCA



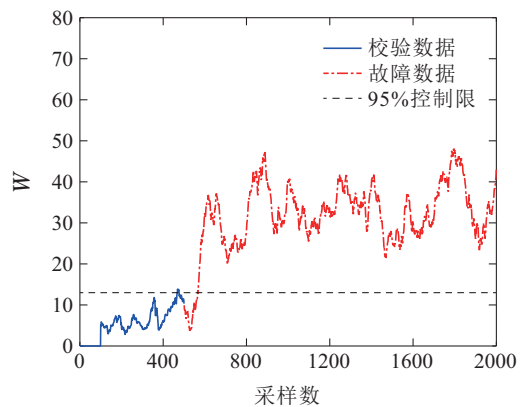
(c) KNMF



(d) DPCA



(e) DKPCA



(f) WPG-KNMF

图2 各方法故障检测结果

Fig. 2 Fault detection results of each method

DAMADICS^[16]的基准执行器的总体结构由控制阀、气动伺服电机和定位器这三个重要部分组成. 控制阀是一种控制流经流体流量的高压系统. 气动伺服电机是一种将电信号转化为推动阀杆运动的力的装置.

定位器可以检测阀杆的实际位移, 更精确地控制阀门, 其原理图如图3所示. CV表示过程控制外部信号, CV1说明内部电流作用于E/P单元, 而E/P为电气动传感器. PSP表示定位器供应压力单元, 通过Pz给E/P供

应压力, 并通过 P_s 将E/P传感器的压力输出. F 表示主管道流量, 由流量变送器FT控制. 支流管道分别由 Fv 和 $Fv3$ 表示, 其流通由 p_1, p_2 表示的压力阀门的入口和出口以及压力变送器PT控制. T_1 表示液体温度, 由温度变送器TT控制. V 表示控制阀, 其3个截止阀分别为 $V1, V2, V3$. 其他主要变量分别为: 定位器 P 、气动伺服电机 S 、阀塞位移 X 、内部控制器 ZC 以及阀杆位置变送器 ZT . 该基准是基于工业过程中使用的电动-气动阀门执行器的完整工作机电系统. 基准系统可以在静态和动态非线性, 多信号、闭环操作等过程中产生一套完整的模拟故障的电动阀门执行子系统. 该基准有19种不同的故障设置, 这些故障可分为4类: 控制阀故障、气动伺服电动机故障、定位器故障和一般故障/外部故障. 基准执行器有6个过程变量进行过程监控, 具体如表4所示.

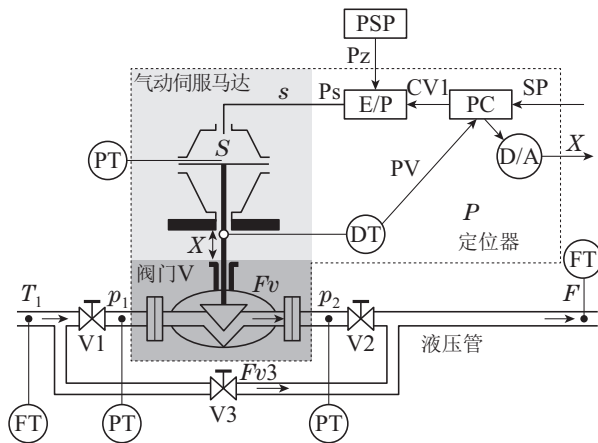


图3 DAMADICS结构

Fig. 3 Structure of DAMADICS

表4 过程变量

Table 4 Process variables

编号	过程变量
1	过程控制外部信号CV
2	阀门入口的液体压力值 p_1
3	阀门出口的液体压力值 p_2
4	阀杆位移 X
5	液体流量 F
6	液体温度 T_1

为了进行监控, 给出了正弦信号 $u_1 = 0.27 \times \sin(0.02\pi t) + 0.62$ 作为训练数据的输入信号, 同时, 给出了添加 $e \in (0, 0.01)$ 的噪声的正弦信号 $u_2 = (0.27 + e) \sin(0.02\pi t) + 0.62$ 作为验证数据和测试数据的输入信号. 这里展示了本文方法对于各种故障的检测性能, 本文选取故障编号为10的数据进行对比. 设置故障开始时间为300 s, 阈值用黑色虚线表示, 300 s后故障开始出现, 直到1000 s时停止.

在本次实验使用KNMF方法时, 原始核矩阵为 $K = 1000 \times 1000$ 大小, 因此通过对比乘性更新方法和

投影梯度下降方法, 可以说明投影梯度下降方法具有较好的迭代效率. 两种迭代方法选取相同的误差值 10^{-5} , 最大迭代时间设为1000 s, 最大迭代次数均为1000次. 由表5可以看出, 乘法更新迭代所需时间要多于投影梯度下降方法的迭代时间. 根据文献[20], 其主要原因是乘法更新方法在每次迭代时使用较低的迭代成本, 这使得其收敛速度缓慢. 而投影梯度下降的方法其迭代成本是由步长控制的, 基于式(21)选择合适的步长来控制迭代成本. 这种方法使得其收敛速度相较于乘法更新方法更快. 当选取迭代的误差值更小时, 也就是算法结果的精度更高时, 乘法更新迭代收敛时间较长, 而投影梯度下降方法收敛速度则较快, 这说明投影梯度下降算法具有更好的算法效率并可以提高迭代得到的基矩阵和系数矩阵的结果精度.

表5 仿真实验的迭代时间对比

Table 5 Comparison of iteration time of simulation experiment

迭代方法	平均迭代时间/s
乘性更新	59.7677
投影梯度下降	2.3059

将NMF, KPCA, KNMF, DPCA, DKPCA与WPG-KNMF算法进行比较. 各方法参数选择如下: 核宽参数根据经验法统一设置为20; 对于NMF, KNMF和WPG-KNMF方法, 其 d 值和基矩阵分别根据PCA和K-PCA得到的主元个数以及负载矩阵初始化; 对于DPCA和DKPCA, 时滞参数根据经验法选择为2; 对于WPG-KNMF方法, 由交叉验证方法, 将窗宽设置为20. 以上方法主元个数根据累计95%贡献率选择. 用核密度估计获得控制限时, 统一设置95%的置信水平.

6种算法对各种故障的检测率和误报率如表6-7所示, 对比各算法对DAMADICS平台的检测效果, 可以发现NMF方法既没有捕获数据的非线性, 又无法解决样本的动态性, 所以检测效果不佳. 由于故障样本的变化趋势具有很强的规律性, 样本之间的自相关性较高. KPCA, KNMF两种方法只解决了数据的非线性特征, 无法解决样本间的自相关性, 所以无法对其进行有效的监控. DPCA只降低了样本的自相关性, 而没有考虑数据的非高斯性和非线性结构, 因此, 监测效果不佳. DKPCA无法完全消除样本自相关性以及数据非高斯性所带来的影响, 使得其监测效果较差. WPG-KNMF能够捕捉数据的非线性结构, 并且在进行在线监测时使用 W 统计量, 降低了数据的非高斯性和自相关性对监测性能的影响. 测试结果表明, WPG-KNMF方法的检测性能优于传统方法. 图4给出了各算法对于故障10的检测结果对比图, 可以看出本文算法在非线性的动态工业过程良好的检测能力.

表6 各方法故障检测率

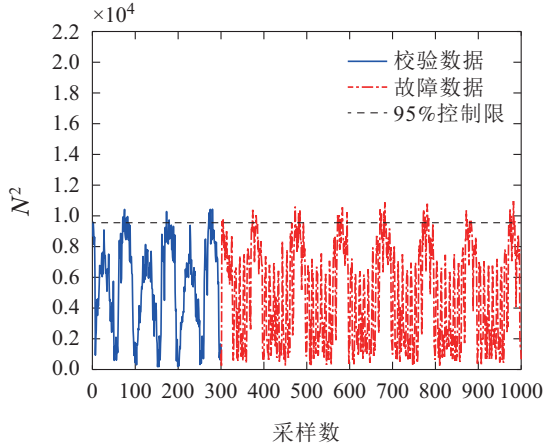
Table 6 Fault detection rate of each method

故障	NMF	KPCA	KNMF	DPCA	DKPCA	WPG-KNMF
	$N^2/\%$	$T^2/\%$	$N^2/\%$	$T^2/\%$	$T^2/\%$	$W/\%$
1	5.2	3.2	0	3.8	35.1	92.2
2	5.0	3.7	0.2	4.7	45.7	99.5
3	5.2	5.2	5.2	5.3	5.5	1.5
4	5.5	5.0	4.5	5.4	5.1	19.4
5	5.1	5.1	4.1	5.3	5.4	3.2
6	5.1	5.3	4.1	5.3	5.5	3.0
7	99.7	0	0	100	100	99.7
8	5.5	5.2	4.1	5.3	5.5	0.8
9	5.7	5.2	4.1	5.3	5.3	5.7
10	7.5	5.7	7.1	4.8	9.3	99.7
11	5.8	5.1	5.1	5.4	5.7	68.1
12	4.4	5.2	5.4	5.3	4.5	53.6
13	5.5	4.0	2.7	4.8	49.4	93.0
14	5.8	5.1	4.1	5.3	5.5	5.5
15	11.7	3.2	1.2	5.3	43.4	99.5
16	5.7	4.4	4.5	4.4	19.9	99.7
17	58.5	0	0	100	100	99.7
18	10.0	3.8	2.86	4.7	49.4	99.7
19	6.2	5.0	5.2	5.3	5.5	83.5

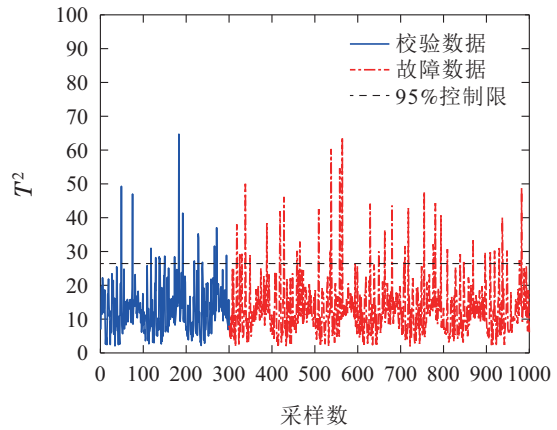
表7 各方法故障误报率

Table 7 Fault False Alarm rate of each method

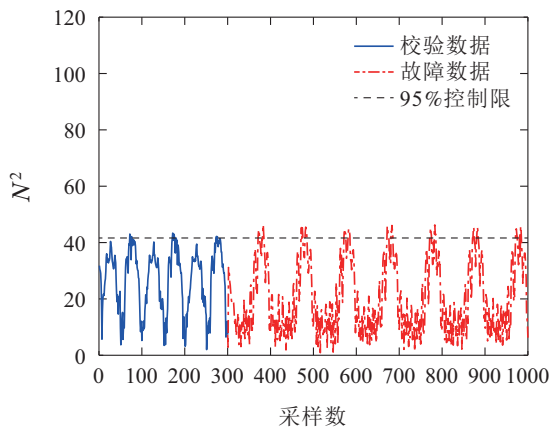
故障	NMF	KPCA	KNMF	DPCA	DKPCA	WPG-KNMF
	$N^2/\%$	$T^2/\%$	$N^2/\%$	$T^2/\%$	$T^2/\%$	$W/\%$
1	4.0	2.3	4.2	3.8	4.6	2.1
2	4.0	2.3	5.0	3.1	4.7	3.0
3	3.6	4.5	3.3	3.3	4.3	3.2
4	5.0	4.3	4.9	3.5	4.9	3.5
5	4.3	4.2	5.3	3.3	4.1	3.6
6	4.0	4.3	5.2	3.3	4.3	3.0
7	6.0	3.8	3.7	3.6	4.6	3.1
8	4.0	4.3	5.3	3.3	4.3	3.6
9	5.6	4.3	5.5	3.7	4.4	3.0
10	4.6	6.3	3.0	3.4	5.0	3.1
11	5.3	4.0	5.3	3.3	4.3	3.0
12	5.3	4.3	3.3	2.9	5.3	3.6
13	4.3	3.0	5.4	3.3	4.3	2.8
14	4.6	4.3	5.3	3.6	4.2	3.0
15	4.3	2.3	3.3	3.3	4.3	3.7
16	5.3	3.6	5.0	3.5	4.0	2.2
17	4.0	0	5.3	3.6	4.6	3.0
18	3.0	2.6	5.1	3.3	3.8	2.7
19	5.0	3.6	3.3	3.7	4.3	3.0



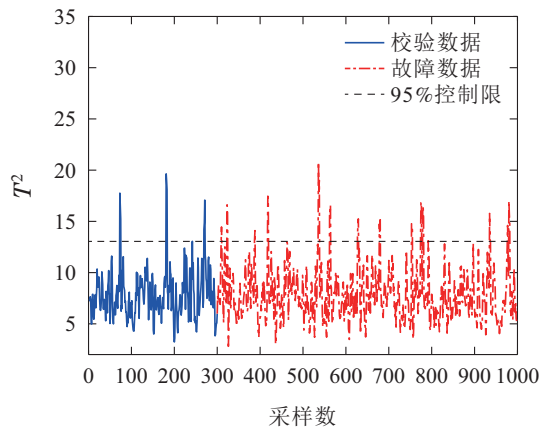
(a) NMF



(b) KPCA



(c) KNMF



(d) DPCA

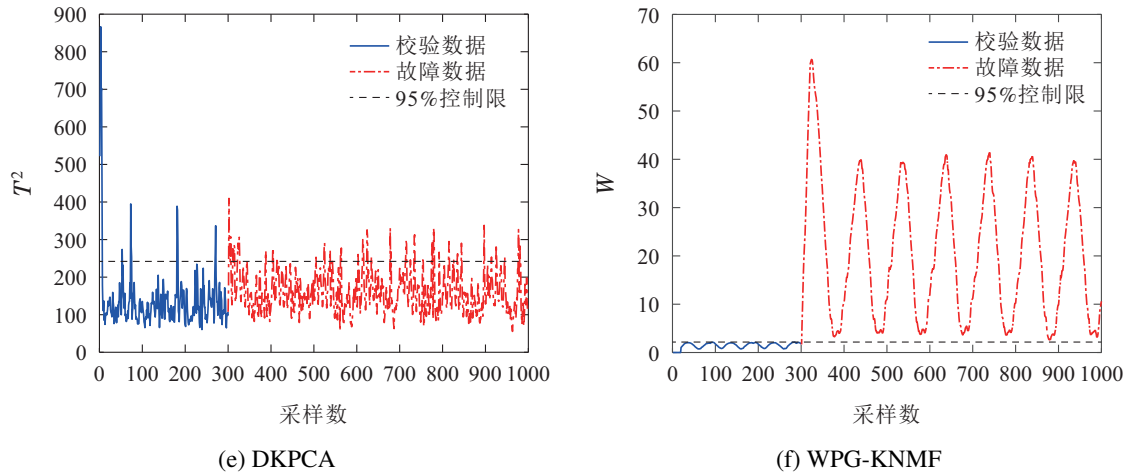


图4 故障10检测结果图

Fig. 4 The result of fault 10 detection

6 结论

针对KNMF方法在非线性动态过程中故障检测率低的问题, 本文提出了一种基于Wasserstein距离投影梯度核非负矩阵分解的方法. 本文通过投影梯度方法求解得到一个平稳的基矩阵和系数矩阵. 将KNMF与Wasserstein距离相结合, 既可以有效的将数据的非线性结构捕获, 又可以消除样本间自相关性的影响. 通过数值例子和基于DAMADICS平台的实验数据验证了本文算法的有效性.

参考文献:

- [1] KANO M, NAKAGAWA Y. Data-based process monitoring, process control, and quality improvement: Recent developments and applications in steel industry. *Computers and Chemical Engineering*, 2008, 32(1/2): 12 – 24.
- [2] NOR N M, HASSAN C R C, HUSSAIN M A. A review of data-driven fault detection and diagnosis methods: Applications in chemical process systems. *Reviews in Chemical Engineering*, 2020, 36(4): 513 – 553.
- [3] DUNIA R, QIN S J. Joint diagnosis of process and sensor faults using principal component analysis. *Control Engineering Practice*, 1998, 6(4): 457 – 469.
- [4] ALIAJAMI, MAHDI DANESHVAR. Data driven approach for fault detection and diagnosis of turbine in thermal power plant using independent component analysis (ICA). *International Journal of Electrical Power & Energy Systems*, 2012, 43(1): 728 – 735.
- [5] LI Le, ZHANG YuJin. A survey on algorithms of non-negative matrix factorization. *Acta Electronica Sinica*, 2008, 36(4): 737 – 743. (李乐, 章毓晋. 非负矩阵分解算法综述. 电子学报, 2008, 36(4): 737 – 743.)
- [6] LI X B, YANG Y P, ZHANG W D. Fault detection method for non-Gaussian processes based on non-negative matrix factorization. *Asia Pacific Journal of Chemical Engineering*, 2012, 8(3): 362 – 370.
- [7] WANG H Q, SONG Z H, LI P. Fault detection behavior and performance analysis of principal component analysis based process monitoring methods. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2002, 41(10): 2455 – 2464.
- [8] YAN X Y, GUAN T, FAN K X, et al. Novel double layer BiLSTM minor soft fault detection for sensors in air-conditioning system with KPCA reducing dimensions. *Journal of Building Engineering*, 2021, DOI: /10.1016/j.jobee.2021.102950.
- [9] ZHOU B Q, GU X S. Multi-block statistics local kernel principal component analysis algorithm and its application in nonlinear process fault detection. *Neurocomputing*, 2020, 376: 222 – 231.
- [10] ZHAI L R, ZHANG Y W, GUAN S P, et al. Nonlinear process monitoring using kernel nonnegative matrix factorization. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 2017, 96(2): 554 – 563.
- [11] WANG Y S, SUN T S, DING M T, et al. A novel industrial process fault monitoring method based on kernel robust non-negative matrix factorization. *Measurement Science and Technology*, 2021, DOI: 10.1088/1361-6501/ac0de2.
- [12] LEE D D, SEUNG H S. Learning the parts of objects by non-negative matrix factorization. *Nature*, 1999, 401(6755): 788 – 791.
- [13] FAN, SAITE, ZHANG X M, et al. Reinforced knowledge distillation: Multi-class imbalanced classifier based on policy gradient reinforcement learning. *Neurocomputing*, 2021, 463: 422 – 436.
- [14] LI X, LIU C. Moving window non-negative matrix projection for adaptive process monitoring. *International Conference on Intelligent Autonomous Systems*. Dalian, China: IEEE, 2022, 34: 297 – 302.
- [15] KU W, STORER R H, GEORGAKIS C. Disturbance detection and isolation by dynamic principal component analysis. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 1995, 30(1): 179 – 196.
- [16] RUSSO L P, BEQUETTE B W. Effect of process design on the open-loop behavior of a jacketed exothermic CSTR. *Computers & Chemical Engineering*, 1996, 20(4): 417 – 426.
- [17] MICHAL B, RON P, MICHAL S, et al. Introduction to the DAMADICS actuator FDI benchmark study. *Control Engineering Practice*, 2006, 14(6): 577 – 596.
- [18] SUN T S, WANG Y S, DING M T. A novel method for actuator fault detection considering complex operating processes. *Journal of Process Control*, 2022, 110: 1 – 10.
- [19] ZHANG D Q, CHEN S C. Clustering incomplete data using kernel-based fuzzy c-means algorithm. *Neural Processing Letters*, 2003, 18(3): 155 – 162.
- [20] LIN C J. Projected gradient methods for nonnegative matrix factorization. *Neural Comput*, 2007, 19(10): 2756 – 2779.
- [21] FLATZ M, VAJTER IC M. Parallel non-negative matrix factorization via newton iteration. *Parallel Processing Letters*, 2016, DOI: 10.1142/S0129626416500146.
- [22] DIMITRI P, BERTSEKAS. On the goldstein-levitin-polyak gradient projection method. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 1976, 21(2): 174 – 184.

- [23] BRUNET J P, TAMAYO P, GOLUB T R, et al. Metagenes and molecular pattern discovery using matrix factorization. *Proceedings of the National Academy of Science*, 2004, 101(12): 4164 – 4169.
- [24] NI K Y, BRESSON X, CHAN T, et al. Local histogram based segmentation using the wasserstein distance. *International Journal of Computer Vision*, 2009, 84(1): 97 – 111.
- [25] YANG Q S, YAN P K, ZHANG Y B, et al. Low-dose ct image denoising using a generative adversarial network with wasserstein distance and perceptual loss. *IEEE Transactions on Medical Imaging*, 2018, 37(6): 1348 – 1357.
- [26] WANG G, LIU J, ZHANG Y. A novel multimode data processing method and its application in industrial process monitoring. *Journal of Chemometrics*, 2015, 29(2): 126 – 138.
- [27] WANG Y, YUAN S M, LING D, et al. Fault monitoring based on adaptive partition non-negative matrix factorization for non-gaussian processes. *IEEE Access*, 2019, 7: 32783 – 32795.
- [28] DENG X G, DENG J W. Incipient fault detection for chemical processes using two-dimensional weighted slkpc. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2019, 58(6): 2280 – 2295.
- [29] KANO M. Statistical process monitoring based on dissimilarity of process data. *AIChE Journal*, 2002, 48(6): 1231 – 1240.

作者简介:

张成 副教授, 博士, 目前研究方向为过程故障诊断分析, E-

mail: zhangcheng@syuct.edu.cn;

邓成龙 硕士研究生, 目前研究方向为过程故障诊断分析, E-

mail: 1289860176@qq.com;

李元 教授, 博士, 目前研究方向为基于数据驱动复杂过程故障诊断, E-mail: li-yuan@mail.tsinghua.edu.cn.