

面向污水处理的动态变分贝叶斯混合因子故障诊断

肖红军¹, 刘乙奇², 黄道平^{2†}

(1. 佛山科学技术学院 自动化学院, 广东 佛山 528000; 2. 华南理工大学 自动化科学与工程学院, 广东 广州 510640)

摘要: 在污水生化处理过程中, 存在着多变量耦合、强非线性、参数时变、大滞后等特点, 面对这些特点, 传感器故障频发, 从而导致生化过程无法得到有效优化和诊断. 为此, 本文在结合动态数据特性的基础上提出了一种基于变分贝叶斯混合因子的动态故障诊断方法, 同时, 利用混合因子的在线调整实现了诊断模型的半自适应化. 该方法能够捕捉到污水处理过程的强非线性和动态性, 从而可有效降低故障诊断的误报率和漏报率. 通过在国际水协会的BSM1模型上的模拟研究, 充分表明所提出的策略可以显著提高故障诊断能力, 精确地检测传感器的突变和漂移故障, 甚至定位故障所发生的根本原因.

关键词: 故障诊断; 污水处理; 变分贝叶斯学习; 混合因子; 半自适应

中图分类号: TP273

文献标识码: A

Dynamic fault diagnosis via variational Bayesian mixture factor analysis with application to wastewater treatment

XIAO Hong-jun¹, LIU Yi-qi², HUANG Dao-ping^{2†}

(1. College of Automation, Foshan University, Foshan Guangdong 528000, China;

2. College of Automation Science and Technology, South China University of Technology, Guangzhou Guangdong 510640, China)

Abstract: Exposure to variables coupled, significant nonlinearities, parameters shift and time delay in the wastewater treatment processes often result in sensors unavailable and even the entire plant not to be optimized and diagnosed efficiently. Therefore, this work presents the design of a dynamic fault diagnosis method on the basis of the variational Bayesian mixture factor analysis (VBMFA) together with the dynamic data. Also, the mixture factors can be identified in a semi-adaptive way. The purpose of proposed methodologies is to capture strong nonlinearity and the significant dynamic feature of WWTPs, which seriously limit the application of conventional multivariate statistical methods for fault diagnosis implementation. The performance of our proposed method is validated through a simulation study at BSM1. Results have demonstrated that the proposed strategy can significantly improve the ability of fault diagnosis under fault-free scenario, accurately detect the abrupt change and drift fault, and even localize the root cause of corresponding fault properly.

Key words: fault diagnosis; wastewater treatment; variational Bayesian learning; mixture factor analysis; semi-adaptive

1 引言(Introduction)

在污水生化处理过程中, 存在着多变量耦合、强非线性、参数时变、大滞后等特点, 面对这些特点, 传感器故障频发, 直接导致生化过程无法得到有效优化和诊断^[1]. 因此, 实现在线仪表实时监测, 为进一步确保污水处理过程的稳定运行和排放达标具有重要的意义. 但是, 恶劣的气候环境直接加剧了污水处理过程在线仪表故障率. 因此, 如何在恶劣条件下实现污水处理过程的故障诊断和辨识是一个不可避免的问题.

近20年来, 基于数据驱动或多元统计的故障诊断方法得到了广泛的关注, 特别是在化工、医药、炼钢以

电力传输等领域得到了广泛应用^[2]. 其中, 主元分析方法(principal component analysis, PCA)^[3-5]和偏最小二乘方法(partial least squares, PLS)^[6]应用最为普遍, 此类方法的实质是将一个高维测量空间投射到一个低维测量空间, 以提取工业过程中的特征信息, 最后通过 T^2 因子或开方预测误差(squared prediction error, SPE)服从高斯分布来区别故障数据和正常数据. PCA和PLS方法能够合理运行的前提条件是所监控数据必须服从高斯或近似高斯分布, 但污水处理过程的监测数据往往呈现非高斯非线性特性^[7]. 而独立元分析方法(independent component analysis, ICA)对数据

收稿日期: 2015-07-16; 录用日期: 2016-08-11.

[†]通信作者. E-mail: audhuang@scut.edu.cn; Tel.: +86 20-87114189.

本文责任编辑: 阳春华.

国家自然科学基金项目(61403142), 佛山市科技创新专项资金项目(2014AG10018)资助.

Supported by National Natural Science Foundation of China (61403142) and Technology Innovation Special Fund of Foshan (2014AG10018).

的分布没有苛刻的要求,从而成为解决这类问题的一种有效途径^[8].此外,其他的一些多元统计学故障诊断方法如费舍尔方法(fisher discriminant analysis, FDA)^[9]、典型变量分析(canonical variable analysis)^[10]及支持向量机(support vector machine, SVM)^[11],在海量数据压缩和过程监控中都得到了有效的验证,但始终没有解决在污水处理过程的高度不确定性问题.有学者提出了概率PCA(probabilistic principal component analysis, PPCA)方法,其基本思想是假定过程变量和噪声都服从高斯分布,比较有效的处理了不确定性问题,但是假定所有变量方差相同使得故障诊断模型存在欠拟合问题^[4].因子分析(factor analysis, FA)通过区别设定每个变量的方差,可有效的弥补PPCA的不足^[12].但是,FA使用最小二乘法或最大似然法对模型参数进行识别,不可回避的造成了模型的过拟合问题.因此,一些学者引入变分贝叶斯学习实现FA或PCA参数的辨识^[13],并最终将模型用于过程监控,该方法可以非常好的处理合成数据集,但对于污水处理过程的动态特性(如:季节性或昼夜变化)、非线性特性(如,与温度相关的动力学特性)以及动态特性无能为力^[14].一种合理的方法是,将一些传统的局部线性模型合成以接近全局非线性的逼近能力.然而,混合建模有几个缺点:1)在建模过程中不能自动确定有效因子数;2)不能轻易鉴别模型中各个因子重要程度;3)当样本数据有限时,可能引起奇异和过拟合问题.

针对上述问题,本文提出变分贝叶斯混合因子分析(VBMFA)方法,该方法不仅能自动确定局部模型的个数,而且还能够避免模型的过拟合问题.更为重要的是,基于VBMFA过程监测方法,可以解决污水处理过程显著的非线性问题,尤其在系统处于线性特性和非线性特性的混合体而不可简单归类于线性或非线性的情况下.文中依然沿用传统PCA的 T^2 和SPE作为故障诊断和辨识的监控标准,但是在VBMFA算法的基础上对 T^2 和SPE分别进行了加权平均改进.考虑到污水处理过程的实时变化,对应的权值可自适应修改,同时,在原始数据矩阵中引入时延数据,从而加强了模型动态特性的描述能力.这种自适应机制并非调整局部模型的平均值和方差来实现模型的自适应输出,而是调整局部模型的各权值来实现,这一方面可避免模型在线处理引起的计算量大的问题,另一方面也可以避免离线模型动态特性差的问题.因此,所得到的方法本质上是一种半自适应故障诊断方法.本文的独到之处:1)考虑到工作日和周末数据波动;2)将VBMFA引入了故障诊断;3)在原始数据矩阵中引入时延数据以加强模型动态特性的描述能力;4)自适应概率加权策略适用于其他局部混合模型分析;5)提出了自适应控制限以监测强非线性和动态特征的污水

处理过程.

文中的第2节在通过改进FA模型基础上得到了VBMFA模型;此后的第3节结合VBMFA模型和传统 T^2 及SPE因子提出了一种自适应的故障诊断指标;接着第4节利用国际水协会的BSM1模型验证了所提出方法的有效性;最后形成了论文的结论.

2 模型推理(Model reasoning)

2.1 因子分析(Factor analysis)

因子分析是一种十分有效的数据降维和特征提取方法,在经济学、社会学等领域得到了广泛的应用^[14],但是,在过程监控领域则起步较晚.类似于PCA,因子分析可将原始变量 $x \in \mathbb{R}^m$ 映射为因子 t 和噪声 $e \in \mathbb{R}^m$ 以及均值向量 $\mu \in \mathbb{R}^m$ 的线性组合.如:

$$x = \Lambda t + \mu + e, \quad (1)$$

其中: $\Lambda \in \mathbb{R}^{(m \times k)}$ 为负载矩阵, m 为变量个数, k 为因子个数, e 是服从高斯分布的噪声,其协方差矩阵 Ψ 为一对角矩阵.相应的模型参数 $\theta = \{\mu, \Lambda, \Psi\}$ 可通过期望最大算法来估计.因子分析在实现数据降维情况下保留原有变量大部分的信息,最重要的是,因子变量相较于PCA的主元更具有可解释性,即某个因子是对某些原始变量信息的综合和反映.因此,因子分析为过程故障诊断提供了更多的可能性^[15].

2.2 变分贝叶斯混合因子分析(Variational Bayesian mixture factor analysis)

FA模型的各个因子用可测变量的线性组合来描述,因此,无法体现污水处理过程的全局非线性特征.反之,式(2)所示的混合因子模型利用多个FA的加权平均来表示描述数据 x_i ,可以很好的解决这一问题.

$$p(x_i | \pi, \Lambda, \mu, \Psi) = \sum_{s_i}^S p(s_i | \pi) p(x_i | s_i, \Lambda, \mu, \Psi), \quad (2)$$

其中: S 是因子分析模型的数量, π 是各个因子对应的混合比例或称权值向量, s_i 是第 s 个因子模型利用数据点 i 进行建模的离散指示变量, $\Lambda = \{\Lambda^s\}_{s=1}^S$ 是混合模型中各个因子模型负载矩阵的集合,而 Λ^s 代表了第 s 个因子模型的负载矩阵.整合所有的这些参数比较复杂,为了简化推理过程,选用Dirichlet先验似然项来估算相应的权值向量 π ^[13],如式(3):

$$p(\pi | a^* m^*) = \text{Dir}(\pi | a^* m^*), \quad (3)$$

其中: a^* 为增强因子常数, $m^* = [\frac{1}{S}, \dots, \frac{1}{S}]$.此时,由于参数 S 是事先给定,无论向量 π 维数大小, $p(\pi | a^* m^*)$ 都是由超参数 a^* 唯一决定的.而各因子负载矩阵的列向量服从零均值但方差不同的高斯分布,对于超参数本文假定其服从伽马分布,如式(4):

$$p(\Lambda | \nu) = \prod_{s=1}^S p(\Lambda^s | \nu^s) =$$

倘若直接沿用集成好的模型,有可能会造成模型对新数据的偏移而造成故障误报或漏报.如果完全采用在线VBMFA的方法,即对VBMFA全部的辨识参数实现在线更新,将使得模型更加复杂化,因此,文中创新性的采用了半自适应化的方式,在新数据到来之时只对新数据对应的各个FA模型的权值进行相应的更新.依上所述在各个局部空间得到新数据 x_{new} 的监测结果,每个局部FA模型在利用 x_{new} 进行运算时对合成模型的贡献可通过如式(19)的估计后验分布得到:

$$q(s_{\text{new}}) = \frac{1}{Z_{\text{new}}} \exp[\Psi(\alpha m_s) - \Psi(\alpha) + \frac{1}{2} \ln |\Sigma^s| - \frac{1}{2} \text{tr}[\Psi^{-1} \langle \mathcal{R} \mathcal{R}^T \rangle]_{q(\bar{\lambda}^s) q(t|s)}], \quad (19)$$

其中 $\mathcal{R} = x_{\text{new}} - \bar{\lambda}^s[t^s; 1]$.

而合成的监控指标 T^2 和SPE分别定义为 ST^2 和SSPE,其中:

$$ST_{\text{new}}^2 = \sum_{s=1}^S q(s_{\text{new}}) T_{s,\text{new}}^2, \quad (20)$$

$$\text{SSPE}_{\text{new}} = \sum_{s=1}^S q(s_{\text{new}}) \text{SPE}_{s,\text{new}}. \quad (21)$$

由于局部模型的 T^2 和各个FA模型中因子数量 K_s 有关,因此控制限同样需要整合,如式(22):

$$T^2 \leq T_{\text{lim}}^2 = \sum_{s=1}^S q(s_{\text{new}}) \chi_{\alpha}^2(k_s). \quad (22)$$

而局部 $\text{SPE} \chi_{\alpha}^2(p)$ 的控制限恒定,因此,SPE的控制限无需整合.尽管在模型训练结束后,各个局部FA模型结构不再改变,但是,一旦 ST^2 和SSPE超出预先定义的控制限,本文所提出的过程监控模型就可以通过各个局部因子模型的贡献更新相应的局部模型混合权值进行模型自适应处理.

3.2 控制限设定(Control limits setting)

检测故障后,通常需要得到更多的信息来找到对应故障产生的根本原因.一般常采用贡献图来识别故障,贡献图能体现出各个变量对统计量的贡献大小,而贡献大小通常表明了该变量与故障类型的关联度.但是在稳态过程中,贡献图各个变量的方差占比相对稳定.因此,本文使用控制限来比较新样本的方差和无故障样本的方差,如果在无故障时的方差很小,而新样本方差较大,则有可能产生了某一特定故障.通过控制限分析所有的过程变量,很容易找到少数的贡献异常变化的过程变量.利用历史方差占比三倍标准差作为贡献图的控制限,意味着每个变量的贡献在较长时间服从高斯分布,但是,由于变量的大小和幅值是存在差异的,使用同一方差进行故障辨识有失偏颇.因此,文中利用因子分析的特点,利用辨识的变量方差的差异对各个变量制定差异性的故障辨识控制限,即对不同变量使用不同的3倍方差控制限.

4 仿真研究(Simulation research)

4.1 仿真平台(Simulation platform)

污水处理过程极其复杂,不仅包含了各种物理、化学,也包括了生化反应,加之各种不确定性因素充斥其中,如进水流量、水质和负荷变化等,这给污水处理监控模型的构建和控制带来了巨大的挑战.为了充分验证所提出的算法,文中利用国际水协会(IWA)研发的“仿真基准模型”(benchmark simulation model 1, BSM1)作为实际污水处理过程进行实时仿真,该模型涵盖了硝化和反硝化过程,目的是有效的去除污水中的氨氮.污水厂BSM1模型架构如图2所示.

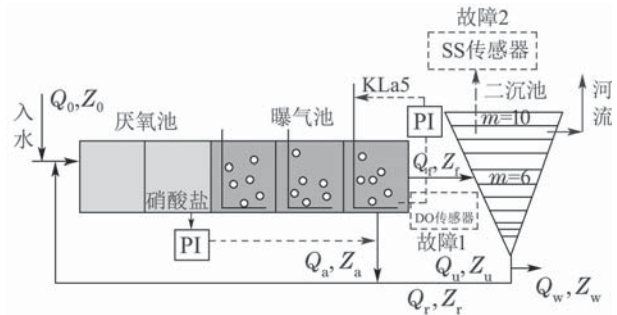


图2 基于BSM1的污水处理平台架构图

Fig. 2 The schematic of wastewater plant for BSM1

4.2 数据预处理(Data pretreatment)

本算例取样了16个重要的变量,涵盖了反应过程的各个环节,如表1所示.

表1 过程监控传感器

Table 1 Selected sensors for process monitoring

序号	变量描述	变量符号
1	出水总氮(mg·N/l)	TN
2	出水总化学需氧量(mg·COD/l)	TCOD
3	出水 $\text{NH}_4^+ + \text{NH}_3$ (mg·N/l)	S_{NH}
4	出水悬浮固体浓度(mg·SS/l)	SS
5	出水生物需氧量(g·COD/m ³)	BOD
6	入水悬浮固体浓度(mg·SS/l)	SS
7	入水 $\text{NH}_4^+ + \text{NH}_3$ (mg·N/l)	S_{NH}
8	第3个反应池溶解氧(g·COD/m ³)	S_{O}
9	第3个反应池氨氮(mg·N/l)	S_{NO}
10	第3个反应池 $\text{NH}_4^+ + \text{NH}_3$ (mg·N/l)	S_{NH}
11	第4个反应池溶解氧(g·COD/m ³)	S_{O}
12	第5个反应池溶解氧(g·COD/m ³)	S_{O}
13	第5个反应池氨氮(mg·N/l)	S_{NO}
14	第5个反应池 $\text{NH}_4^+ + \text{NH}_3$ (mg·N/l)	S_{NH}
15	第5个反应池SS	SS
16	第5个反应池KLa	KLa

分析以上传感器检测的数据,发现枯水季节每天的SS和 S_{NH} 有明显的规律,即做饭时段和早晚洗漱时段污水量较大,周末污水排放量明显比工作日少,而其他变量也有类似规律.根据这一特点,分别统计出

工作日和休息日的数据均值作为其典型流量, 将原始样本数据减去典型流量得到一个偏差值, 然后将所有变量的偏差值进行标准化处理, 标准化处理后的偏差值反映了污水处理过程的动态变化, 为下一步故障诊断和识别提供了有效依据。

4.3 故障诊断(Fault diagnosis)

1) 零故障情况下算法验证.

本文选用两周1344样本数据的其中900个数据作为训练样本, 其余数据作为测试样本. 图3(a)和3(d)分

别表示FA模型的控制限为95%时测试样本 T^2 和SPE的误报警情况, 明显可以看出基于FA模型的误报警率较高, 主要是因为当测量数据最大或者最小时, FA模型不能适应强非线性特性. 但从图3(b)和3(e)可以看出, 同样的测试样本控制限同为95%时, VBMFA误报警率更低, 因为VBMFA的控制限随着新数据的到来实现自适应调整, 从而有效的避免了误报警. 同时, 值得注意到, 由于引入了动态数据的缘故, 动态VBMFA的诊断效果进一步的改进(图3(c)和3(f)).

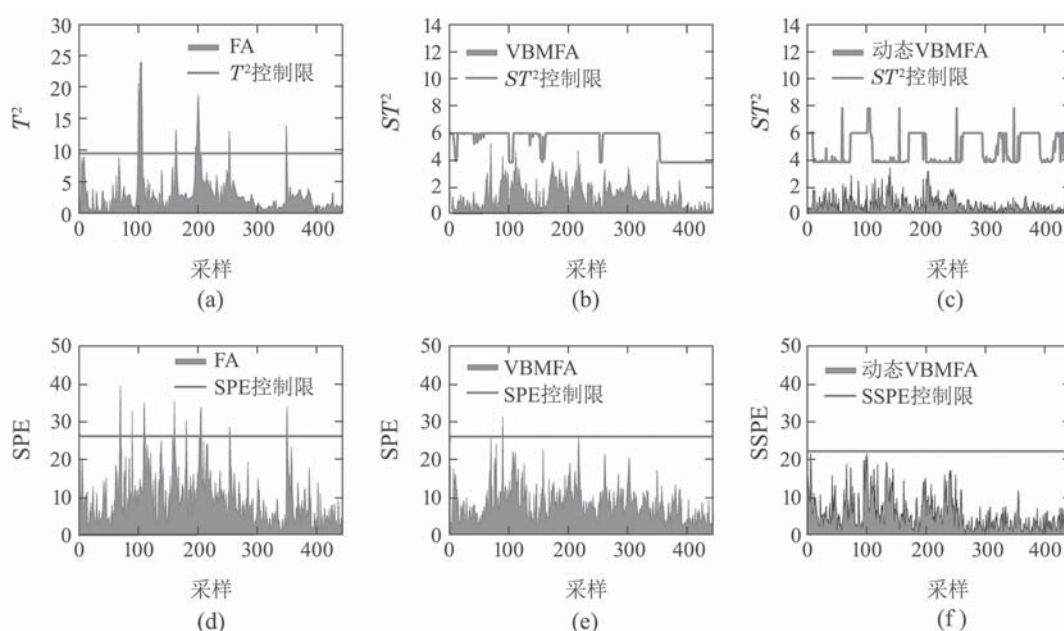


图 3 零故障情况下FA, VBMFA和动态VBMFA的误报警检测

Fig. 3 Fault diagnosis under normal condition using FA, VBMFA and dynamic VBMFA

为了进一步说明所提出方法的有效性, 表2给出了PCA, FA, VBPCA, VBMFA和动态VBMFA等5种方法在零故障情况下误报警的具体数据. PCA和FA的 T^2 误报警率十分相似, 而SPE的误报警率不尽相同, 主要原因在于FA模型针对不同变量辨识了不同方差, 对变量的差异性进行了充分的描述, 因此其误报警率较低. 而当使用变分贝叶斯学习来更新PCA参数后, 即VBPCA, 误报警次数再次减少, 这是因为变分贝叶斯学习能够在考虑模型不确定的前提下充分合理的辨识PCA模型的参数, 相比于其他估计方法如最小二乘法、点估计等, 更能克服过拟合问题. 此外, 需要指出的是变分贝叶斯学习具有不确定性描述能力, 适合于解决不确定性条件下的辨识问题. 尽管如此, VBPCA还是不能捕捉到所有的过程特性, 尤其是强非线性和动态过程特性. 而表2同时反映出VBMFA有更好的监控效果, 其 T^2 误报警数为0次, SPE的误报警数也仅为1次. 还有一个值得强调问题的是, 除了VBMFA和动态VBMFA

之外的其他3种方法, 其模型参数的确定都需要根据经验人工调整, 因此, 在实际应用中操作可行性较差. 而VBMFA的各个局部模型因子数量都是由算法自动确定. 从表2中也可以看出由于考虑了数据的动态性, 动态VBMFA的故障误报率最低.

表 2 5种故障诊断方法的误报警统计表

Table 2 False alarm statistics for five fault diagnosis methods

诊断方法	T^2	SPE	参数设定
PCA	26/444	21/444	主元个数: 4
FA	24/444	15/444	因子个数: 4
VBPCA	16/444	13/444	主元个数: 3
VBMFA	0/444	1/444	最大因子数: 16 局部因子数: 2, 3, 1
动态VBMFA	0/444	0/444	最大因子数: 32 局部因子数: 2, 3, 1

2) 典型故障情况下的算法验证.

突变和漂移故障是污水处理过程最常见的两类传感器故障,为了评价动态VBMFA的故障诊断能力,选用第12个传感器 S_O 和第4个传感器SS两个指标分别模拟产生两类故障.出于成本和环境监控的考虑, S_O 和SS指标在WWTP的过程监控中非常重要,尤其是 S_O ,直接关系着污水厂的污水处理效果.

对于突变故障,设定测试样本 S_O 数据从第165个到第215个数据突然增大30%,从图4(a)和4(c)可以看出, ST^2 和SSPE指标可以在保证不误报警率的情况下准确地识别故障.而FA虽然也检测出了 S_O 突变故障,但是伴随着大量的误报警.

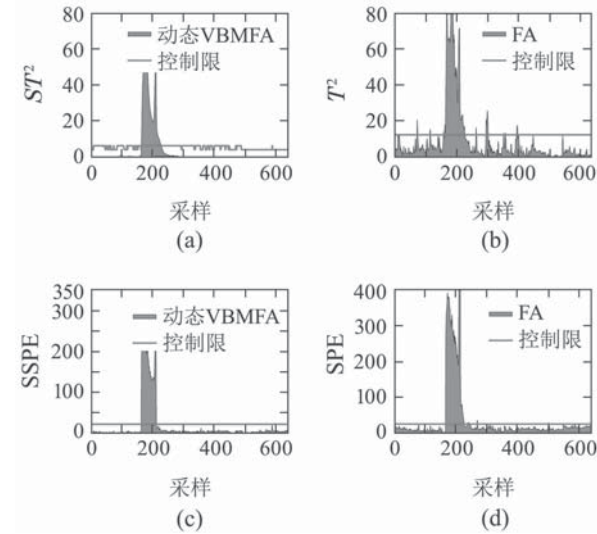


图 4 动态VBMFA 和FA对 S_O 发生突变故障的诊断

Fig. 4 Fault detection for an abrupt change using dynamic VBMFA and FA

图5(a)和5(c)则反映了测试样本SS数据从第200个到第300个数据漂移时,动态VBMFA较好的检测到此类漂移故障.

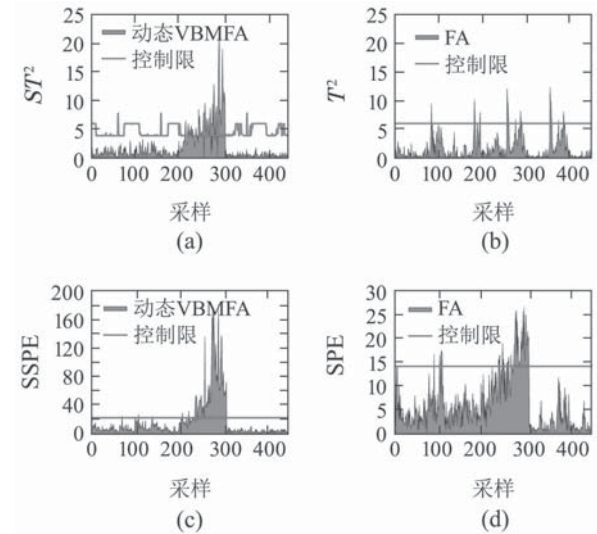


图 5 动态VBMFA和FA对SS发生漂移故障的诊断

Fig. 5 Fault detection for a drift fault using dynamic VBMFA and FA

从图5中可以看出,一旦识别出该类故障, ST^2 的控制限会自动减小,因此能更有效检测漂移故障诊断能力.而FA的 T^2 和SPE明显不能完全检测出SS仪表的漂移故障(图5(b)和5(d)).

表3–4给出了PCA, FA, VBPCA, VBMFA和动态VBMFA等不同方法在上述两种故障下的故障漏报率和误报率,从表3–4中可以看出,VBMFA和动态VBMFA的故障漏报率和误报率明显低于其他方法,尤其是动态VBMFA的故障误报率为0.

表 3 S_O 突变30%时的故障漏报率和误报率

Table 3 Missing detected rate and false alarm rate under an 30% change of S_O

诊断方法	故障漏报率		故障误报率	
	T^2	SPE	T^2	SPE
PCA	18/642	16/642	11/642	9/642
FA	21/642	5/642	12/642	4/642
VBPCA	14/642	15/642	12/642	8/642
VBMFA	9/642	1/642	2/642	0/642
动态VBMFA	4/642	0/642	0/642	0/642

表 4 SS漂移0.15时的故障漏报率和误报率

Table 4 Missing detected rate and false alarm rate under an 0.15 drifting of SS

诊断方法	故障漏报率		故障误报率	
	T^2	SPE	T^2	SPE
PCA	45/442	36/442	23/442	12/442
FA	61/442	32/442	11/442	6/442
VBPCA	43/442	23/442	7/442	9/442
VBMFA	25/442	16/442	2/442	0/442
动态VBMFA	21/442	14/442	0/442	0/442

4.4 故障识别(Fault identification)

本文在故障贡献图中针对不同变量引入不同的三倍标准差作为其控制限,试图找到故障产生的根本原因.在检测到突变故障时,SSPE的贡献图可有效区分故障传感器和正常传感器,如图6(a),很明显第12个传感器的检测指标 S_O 偏离了其控制限,即第12个传感器发生了故障.从图2可知,DO传感器处于闭环系统中,传感器的故障只需通过鉴定闭环系统中故障发生初期随时间传播的贡献图变化(即,第5个反应池 $S_O \rightarrow S_{NO} \rightarrow S_{NH} \rightarrow KLa \rightarrow$ 出水 BOD),再结合工程师的经验,便可有效的实现故障解耦和故障的鉴定.同样,图6(b)清楚的展示了基于动态VBMFA的故障贡献图在检测到漂移故障时识

别出第4个传感器的检测指标SS偏离了其控制限, 即第4个传感器发生了故障。

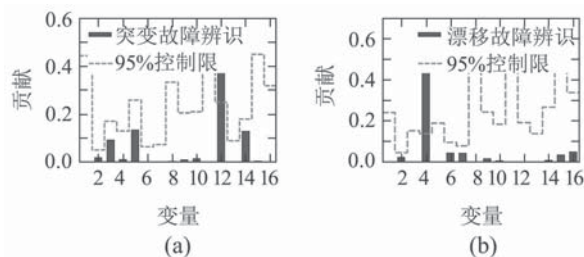


图 6 基于动态VBMFA的突变和漂移故障识别

Fig. 6 Fault identification for an abrupt change and a drift fault using VBMFA

4.5 参数分析(Parameters analysis)

在对附录中的方程(A2)进行优化的时候, $q(s_i)$ 可能获得的是零解, 这主要起源于局部数据不能够支撑因子负载矩阵的维度复杂性. 因此, 为了在优化过程中增加目标函数 F , 这些冗余的成分应该通过设定 $q(s_i)$ 为零解来相应去除, 这也是通常意义上的“成分死亡”. 这种处理方法适用于没有必要的因子, 而对于重要的因子, 数据生成不会自发发生, 需要引入启发机制. 可通过设定家长成分与随机概率 $e^{-\beta F}$ 成正比, 并试图将其分割成两个高斯分布, 而高斯分布的初始化则是通过数据的局部特性来给定 $q(s_i)$. 这样通常导致 F 减少, 如果 F 不能恢复则数据生成不会发生. 所以通过监测 F 来判断数据生成与否. 而且, VBMFA的各个局部FA模型因子维数由ARD自动确定, 这能够显著提高VBMFA模型的性能. 与此同时, 各局部模型对应的权值也是自动更新的, 如 ST^2 和SSPE指标的控制限是自适应更新的. 各局部模型的最大因子数则表示ARD能够学习的参数数量, 因此, 该参数通常设置为 $p-1$ 或者 $p-2$. 各模型计算都需用新样本 x_{new} 和参数 θ , 而 θ 在模型训练阶段就已经确定, 因此, $q(s_i)$ 的更新实际上只与新样本 x_{new} 相关.

5 结论(Conclusions)

本文提出了一种基于变分贝叶斯混合因子的动态半自适应故障诊断方法, 提出的模型在国际水协会的BSM1平台上得到了有效验证. 实验表明, 尽管污水处理的过程变量具有强非线性和动态特性, 所提出方法不仅在零故障时能够有效降低误报警, 而且在突变和漂移故障产生时, 由于采用了混合因子建模方法, 避免了单个因子模型局部建模的局限性, 充分反映了数据的全局分布和非线性特性, 从而能够准确的检测故障并识别故障产生的根本原

因. 相比于其他方法, 基于动态VBMFA的WWTP过程监控有着更优异的性能, 下一步还可将自适应调整的范围从权值调整拓展到方差和均值调整.

参考文献(References):

- [1] HUANG Daoping, QIU Yu, LIU Yiqi, et al. Review of data-driven fault diagnosis and prognosis for wastewater treatment [J]. *Journal of South China University of Technology*, 2015, 43(3): 111 – 120. (黄道平, 邱禹, 刘乙奇, 等. 面向污水处理的数据驱动故障诊断及预测方法研究 [J]. 华南理工大学学报, 2015, 43(3): 111 – 120.)
- [2] QIN S J. Survey on data-driven industrial process monitoring and diagnosis [J]. *Annual Reviews in Control*, 2012, 36(2): 220 – 234.
- [3] LI Rongyu, RONG Gang. Principal component analysis (PCA) of fault isolation based on fault mapping vector and structured residual [J]. *Control Theory & Applications*, 2008, 25(6): 1099 – 1104. (李荣雨, 荣冈. 基于故障映射向量和结构化残差的主元分析(PCA)故障隔离 [J]. 控制理论与应用, 2008, 25(6): 1099 – 1104.)
- [4] GE Z, SONG Z. Mixture Bayesian regularization method of PPCA for multimode process monitoring [J]. *AIChE Journal*, 2010, 56(11): 2838 – 2849.
- [5] GE Z, SONG Z. Robust monitoring and fault reconstruction based on variational inference component analysis [J]. *Journal of Process Control*, 2011, 21(4): 462 – 474.
- [6] LEE G, AND C H, YOON E S. Multiple-fault diagnosis of the tennessee eastman process based on system decomposition and dynamic PLS [J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2004, 43(25): 8037 – 8048.
- [7] OLSSON G. ICA and me — A subjective review [J]. *Water Research*, 2012, 46(46): 1585 – 1624.
- [8] LEE J M, YOO C, LEE I B. Statistical process monitoring with independent component analysis [J]. *Journal of Process Control*, 2004, 14(5): 467 – 485.
- [9] CHIANG L H, KOTANCHEK M E, KORDON A K. Fault diagnosis based on fisher discriminant analysis and support vector machines [J]. *Computers & Chemical Engineering*, 2004, 28(8): 1389 – 1401.
- [10] RUSSELL E L, CHIANG L H, BRAATZ R D. Fault detection in industrial processes using canonical variate analysis and dynamic principal component analysis [J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2000, 51(1): 81 – 93.
- [11] SHIN H J, EOM D H, KIM S S. One-class support vector machines—an application in machine fault detection and classification [J]. *Computers & Industrial Engineering*, 2005, 48(2): 395 – 408.
- [12] JEONG H, CHO S, KIM D, et al. A heuristic method of variable selection based on principal component analysis and factor analysis for monitoring in a 300 kW MCFC power plant [J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2012, 37(15): 11394 – 11400.
- [13] LIU Y, PAN Y, SUN Z, et al. Statistical monitoring of wastewater treatment plants using variational Bayesian PCA [J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2014, 53(8): 3272 – 3282.
- [14] GE Z, SONG Z. Maximum-likelihood mixture factor analysis model and its application for process monitoring [J]. *Chemometrics & Intelligent Laboratory Systems*, 2010, 102(1): 53 – 61.
- [15] JIANG Q, YAN X. Probabilistic monitoring of chemical processes using adaptively weighted factor analysis and its application [J]. *Chemical Engineering Research & Design*, 2014, 92(1): 127 – 138.
- [16] BISHOP C M. *Pattern Recognition and Machine Learning* [M]. New York: Springer-Verlag, 2006: 140 – 155.
- [17] BEAL M J. *Variational algorithms for approximate Bayesian inference* [D]. London: University College London, 2015.

- [18] WEBB G I, ZHENG Z. Multi-strategy ensemble learning: reducing error by combining ensemble learning techniques [J]. *IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering*, 2004, 16(8): 980 – 991.
- [19] CHOI S W, PARK J H, LEE I B. Process monitoring using a Gaussian mixture model via principal component analysis and discriminant analysis [J]. *Computers & Chemical Engineering*, 2004, 28(8): 1377 – 1387.

附录 A (Appendix A)

为了求取VBMFA的各个参数, 可通过贝叶斯方法构造优化函数如下:

$$L = \ln x = \ln \left\{ \int d\pi p(\pi | \alpha^* m^*) \int d\nu p(\nu | a^*, b^*) \int d\Lambda p(\Lambda | \nu) \int d\mu p(\mu | \mu^*, \nu^*) \prod_{i=1}^N \left[\prod_{s_i=1}^S p(s_i | \pi) \right] \int dt_i p(t_i | p(x_i | s_i, \Lambda, \mu, \Psi)) \right\}. \quad (A1)$$

从上式可知, 由于大量积分运算的存在加大了计算的难度. 为此, 文中利用变分学习算法对上式进行了约减和逼近. 变分学习算法主要目的是通过求解积分运算的下界去估计积分, 从而有效的解决了积分运算计算量大的问题. 因此, 文中对上式通过引入 $q(\pi, \nu, \Lambda, \mu)$ 分布逼近相应的 $p(\pi, \nu, \Lambda, \mu)$ 分布, 从而达到求解最值的目的. 同时利用Kullback-Leibler收敛方法^[16], L 可重写为

$$L \geq \int d\pi \ln \frac{p(\pi | \alpha^* m^*)}{q(\pi)} + \sum_{s=1}^S \int d\nu^s q(\nu^s) \left[\ln \frac{p(\nu^s | a^*, b^*)}{q(\nu^s)} + \int d\tilde{\Lambda}^s q(\tilde{\Lambda}^s) \ln \frac{p(\tilde{\Lambda}^s | a^*, b^*)}{q(\tilde{\Lambda}^s)} \right] + \sum_{i=1}^N \sum_{s_i=1}^S q(s_i) \left[\int d\pi \ln \frac{p(s_i | \pi)}{q(s_i)} + \int dt_i q(t_i | s_i) \ln \frac{p(t_i)}{q(t_i | s_i)} \right] + \int d\tilde{\Lambda}^s q(\tilde{\Lambda}^s) \int dt_i q(t_i | s_i) \ln p(x_i | s_i, t_i, \tilde{\Lambda}, \Psi) = F(q(\theta), q(s, t, \Theta)), \quad (A2)$$

其中 $\theta = (\alpha^* m^*, a^*, b^*, \mu^*, \nu^*, \Psi)$. 参数下界为可变后验分布, 定义 $q(\theta)$ 为各个数据点隐含变量的后验分布. 为了求解下界最优, 分别对式(A2)求解各自相对于 $q(\cdot)$ 的微分并令其等于零, $q(\cdot)$ 可用式(A3)表示.

$$q(\pi) = \text{Dir}(\pi | \alpha m). \quad (A3)$$

可变参数 αm 的各元素为

$$\alpha m_s = \alpha^* m_s^* + \sum_{i=1}^N q(s_i), \quad (A4)$$

其中: $\alpha = \alpha^* + n$, $m_s^* = \frac{1}{S}$, $\sum_{s=1}^S m_s = 1$.

$$q(\nu_l^s) = Ga(\nu_l^s | a^* + \frac{p}{2}, b^* + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^p \langle \Lambda_{jl}^s \rangle_{q(\Lambda^s)}), \quad (A5)$$

$$q(\Lambda^s) = \prod_{j=1}^p q(\Lambda_j^s) = \prod_{j=1}^p N(\Lambda_j^s | \bar{\Lambda}^s, \Gamma_j^s), \quad (A6)$$

其中: Λ_j^s 表示 Λ^s 的第 j 个列向量, 为 $k_s + 1$ 维, 而 $\langle \Lambda_{jl}^s \rangle_{q(\Lambda^s)}$ 表示求解对 $q(\Lambda^s)$ 的期望值, 以此类推, 后续 $\langle \cdot \rangle$ 都表示了对期望值的求解. 可变参数 $\bar{\Lambda}^s, \Gamma_j^s$ 为

$$\Gamma_j^s = \begin{bmatrix} \Sigma_{\Lambda\Lambda}^{j,s-1} & \Sigma_{\Lambda\mu}^{j,s-1} \\ \Sigma_{\mu\Lambda}^{j,s-1} & \Sigma_{\mu\mu}^{j,s-1} \end{bmatrix}^{-1}, \quad (A7)$$

$$\bar{\Lambda}_j^s = \begin{bmatrix} \bar{\Lambda}_j^s \\ \bar{\mu}_j^s \end{bmatrix}. \quad (A8)$$

在式(A7)和(A8)中所对应的变量可通过以下公式求解:

$$\Sigma_{\Lambda\Lambda}^{j,s-1} = \text{diag} \langle \nu^s \rangle_{q(\nu^s)} + \Psi_{jj}^{-1} \sum_{i=1}^N q(s_i) \langle t_i t_i^T \rangle_{q(t_i | s_i)}, \quad (A9)$$

$$\Sigma_{\mu\mu}^{j,s-1} = \nu_j^* + \Psi_{jj}^{-1} \sum_{i=1}^N q(s_i), \quad (A10)$$

$$\Sigma_{\Lambda\mu}^{j,s-1} = \Sigma_{\mu\Lambda}^{j,s-1} = \Psi_{jj}^{-1} \sum_{i=1}^N q(s_i) \langle t_i \rangle_{q(t_i | s_i)}, \quad (A11)$$

$$\bar{\Lambda}_j^s = [\tilde{\Gamma}_j^s]_{\Lambda\Lambda} + (\Psi_{jj}^{-1} \sum_{i=1}^N q(s_i) x_{ij} \langle t_i \rangle_{q(t_i | s_i)}), \quad (A12)$$

$$\bar{\mu}_j^s = [\tilde{\Gamma}_j^s]_{\mu\mu} + (\Psi_{jj}^{-1} \sum_{i=1}^N q(s_i) x_{ij} + \nu_j^* \mu_j^*), \quad (A13)$$

其中 Ψ^{-1} 表示 Λ^s 的协方差矩阵, 而

$$q(t_i | s) = N(t_i | \bar{t}_i^s, \Sigma^s), \quad (A14)$$

其中: $t_i^s = \Sigma^s \langle \Lambda^{sT} \Psi^{-1} (x_i - \mu^s) \rangle_{q(\bar{\Lambda}^s)}$, $|\Sigma^s|^{-1} = I + \langle \Lambda^{sT} \Psi^{-1} \Lambda^s \rangle_{q(\bar{\Lambda}^s)}$.

借用Dirichlet分布^[17], $q(s_i)$ 可用下式计算:

$$q(s_i) = \frac{1}{Z_i} \exp[\psi(\alpha m_{s_i}) - \psi(\alpha) + \frac{1}{2} \ln |\Sigma^s| - \frac{1}{2} \text{tr}[\Psi^{-1} \langle \tilde{\gamma} \tilde{\gamma}^T \rangle]_{q(\bar{\Lambda}^s) q(t_i | s_i)}], \quad (A15)$$

其中: $\tilde{\gamma} = x_i - \bar{\Lambda}^{s_i} [t_i; 1]$, Z_i 为各个数据的标准化常数, $\sum_{s_j=1}^S q(s_j) = 1$.

$$\Psi^{-1} = \text{diag} \left\{ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \tilde{\gamma} \tilde{\gamma}^T \rangle_{q(\bar{\Lambda}^s) q(s_i) q(t_i | s_i)} \right\}, \quad (A16)$$

$$\psi(\alpha^*) = \ln b^* + \frac{1}{sk} \sum_{s=1}^S \sum_{j=1}^k \langle \ln \nu_l^s \rangle_{q(\nu_l^s)}, \quad (A17)$$

$$b^{*-1} = \frac{1}{a^* S k} \sum_{s=1}^S \sum_{j=1}^k \langle \nu_l^s \rangle_{q(\nu_l^s)}, \quad (A18)$$

$$\psi(\alpha^*) - \psi\left(\frac{\alpha^*}{S}\right) = \frac{1}{S} \sum_{s=1}^S [\psi(\alpha) - \psi(\alpha m_s)]. \quad (A19)$$

μ^* 和 ν^* 可通过式(A20)和式(A21)得到:

$$\mu^* = \frac{1}{S} \sum_{s=1}^S \langle \mu^s \rangle_{q(\mu^s)}, \quad (A20)$$

$$\nu^* = [\nu_1^* \cdots \nu_S^*], \quad (A21)$$

其中:

$$\nu_j^* = \frac{1}{S} \sum_{s=1}^S \langle (\mu_j^s - \mu_j^*) (\mu_j^s - \mu_j^*) \rangle_{q(\mu^s)}. \quad (A22)$$

先更新 μ^* , 然后利用 μ^* 更新 ν^* .

作者简介:

肖红军 (1979-), 男, 副教授, 博士, 主要研究方向为智能检测与智能控制, E-mail: jinsery@163.com;

刘乙奇 (1983-), 男, 讲师, 博士, 主要研究方向为工业系统的智能检测与智能控制, E-mail: aulyq@scut.edu.cn;

黄道平 (1961-), 男, 教授, 博士, 博士生导师, 主要研究方向为工业系统的智能检测与智能控制, E-mail: audhuang@scut.edu.cn.