

文章编号: 1001-0920(2005)12-1415-04

基于特征样本的 KPCA 在故障诊断中的应用

范玉刚, 李平, 宋执环

(工业控制技术国家重点实验室, 浙江大学工业控制技术研究所, 杭州 310027)

摘要: 核函数主元分析(KPCA)可用于非线性过程监控. 建立 KPCA 模型首先要计算核矩阵 K , K 的维数等于训练样本的数量. 对于大样本集, 计算 K 很困难. 对此提出一种基于特征样本的 KPCA (SKPCA), 其基本思想是, 首先利用非线性映射函数将输入空间映射到特征子空间, 然后在特征子空间中计算主元. 将 SKPCA 应用于监控 Tennessee Eastman 过程, 并与基于全体样本的 KPCA 作比较, 仿真结果显示, 二者诊断结果基本相同, 然而特征样本只是训练样本中的一小部分, 因此减少了 K 的维数, 解决了 K 的计算问题.

关键词: 核函数主元分析; 故障监测; 特征空间; 特征提取

中图分类号: TP274 **文献标识码:** A

KPCA Based on Feature Samples for Fault Detection

FAN Yu-gang, LI Ping, SONG Zhi-huan

(National Lab of Industrial Control Technology, Institute of Industrial Process Control, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China. Correspondent: FAN Yu-gang, E-mail: ygf@ipc.zju.edu.cn)

Abstract: Kernel principal component analysis (KPCA) has emerged in recent years as a nonlinear process monitoring technique. The KPCA is computed using a kernel matrix K , whose dimension is equivalent to the number of trained samples. For large data sets, KPCA based on feature samples (SKPCA) is proposed to solve the computation problem of K . The basic idea is to map the input space into a subspace via nonlinear mapping and then to compute the principal components in that subspace. SKPCA is used to monitor the Tennessee Eastman process. The simulation shows that the result is almost same compared to the KPCA based on the all samples. But feature samples are only a small part of the trained sample sets. The computational problem is solved by reducing the dimensions of matrix K .

Key words: Kernel principal component analysis; Fault detection; Feature space; Feature extraction

1 引言

主元分析(PCA)是将多个相关的变量转化为少数几个相互独立变量的一种有效分析方法, 但 PCA 是一种线性算法. 对于非线性过程, 线性主元分析不能有效地对数据进行维数压缩. 核函数主元分析(KPCA)是一种非线性主元分析, 是 Scho lkopf 等^[1] 在研究支持矢量分类算法时提出的. 它通过某种事先选择的非线性映射将输入矢量 X 映射到一个高维空间 F , 使输入矢量具有更好的可分性, 然后对高维空间中的映射数据作线性主元分析, 从而得

到数据的非线性主元

然而当对具有 N 个样本的数据集建立 KPCA 模型时, 需要计算 $N \times N$ 的核矩阵 K , K 的维数等于样本数量, 这将导致 K 的计算困难. 由于进行在线实时监测时, 每个训练样本都参与运算, 因而加大了在线实时监测的计算量.

为解决 K 的计算问题, 本文提出基于特征样本的 KPCA (SKPCA). 目前解决 K 计算问题的方法可分为两类: 一类是将核矩阵某些数据用零替换, 形成稀疏矩阵^[2]; 另一类是削减训练样本数量, 如文献

收稿日期: 2004-11-15; 修回日期: 2005-03-01.

基金项目: 国家 863 计划项目(2002AA 412010-12); 浙江省科技计划项目(2004C31106).

作者简介: 范玉刚(1973-), 男, 山东文登人, 博士生, 从事数据挖掘、机器学习等研究; 李平(1954-), 男, 广西北流人, 教授, 博士生导师, 从事工业过程模型化、智能控制等研究.

[2, 3] SKPCA 采用特征样本提取方法, 样本的提取并非简单随机地减少样本数量, 而是通过提取特征样本, 确保样本分布结构基本不变, 从而保证 SKPCA 模型与用全体样本建立的主元模型基本相同

SKPCA 是一个两步过程: 首先对训练样本集进行特征样本提取, 然后对特征样本进行核函数主元分析. 本文将 SKPCA 应用于 TE 过程的故障诊断, 并与基于全体样本的 KPCA 比较, 结果显示, 二者并无明显差异, 但前者减少了训练样本, 降低了 K 的维数, 因此解决了 K 的计算问题, 减少了建立 KPCA 模型和在线实时监测的计算量

2 核函数主元分析

核函数主元分析是一种非线性方法, 它引入某种非线性映射, 将原空间中的非线性问题转化为映射空间中的线性问题. 线性主元是原始变量的线性组合, 它使数据点到它所代表的直线间距离之和为最小, 而非线性主元则使数据点到它所代表的曲线或曲面间距离之和最小

对于数据矩阵 $X_{N \times M}$, 每一列对应于一个变量, 每一行为一个观测样本. 设原始空间 R 通过非线性映射 ϕ 映射到空间 F , 原始数据 x_i 在映射空间 F 的像为 $\phi(x_i)$, 假设映射数据是零均值的, 那么映射数据 $\phi(x)$ 的协方差矩阵可表示为

$$\bar{C} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \phi(x_i) \phi(x_i)^T$$

对矩阵 \bar{C} 作特征矢量分析, 设其特征值为 λ , 特征矢量为 v , 则 $\lambda v = \bar{C}v$, \bar{C} 的特征矢量 v 可用 $\phi(x_i)$ 线性表示为

$$v = \sum_{i=1}^N a_i \phi(x_i)$$

定义一个 $N \times N$ 维核矩阵 $K = (k_{ij})_{1 \leq i, j \leq N}$, 其中 $k_{ij} = \phi(x_i)^T \phi(x_j)$, 由矩阵 K 的特征矢量 α 可求出 \bar{C} 的特征矢量 v .

通过计算映射数据在特征矢量 v_k 上的投影来计算主元, 即

$$t = v_k^T \phi(x) = \sum_{i=1}^N a_i^k \phi(x_i)^T \phi(x) \quad (1)$$

核函数主元分析详细过程参见文献[4, 5]

3 基于特征样本提取的 KPCA

特征样本提取的目标是, 在高维空间 F 中, 选取尽量少的特征样本来描述整个样本集, 使得它们的分布等特征相同, 从而保证 SKPCA 模型与用全体样本建立的主元模型基本一致

3.1 特征样本提取

3.1.1 特征样本提取原理

原始数据 x_i 在映射空间 F 的像为 $\phi(x_i)$, 设 $\hat{\phi} = \phi(x_i)$, $k_{ij} = \hat{\phi}^T \phi$, 从 N 个样本中选取的特征样本为 $X_s = \{x_{s1}, \dots, x_{sL}\}$, 那么其他样本在空间 F 中的映射可用特征样本的映射近似表示, 即 $\hat{\phi} = \varphi_s^T a_i$, 其中: $\varphi_s = (\phi_1, \dots, \phi_L)$, $a_i = (a_{i1}, \dots, a_{iL})^T$, a_i 是使 $\hat{\phi}$ 和 ϕ 差异最小的系数向量, $\hat{\phi}$ 和 ϕ 的差异可表示为 $\delta_i = \|\hat{\phi} - \phi\|^2 / \|\phi\|^2$. 由文献[3]知,

$$\min_{a_i} \delta_i = 1 - \frac{K_{si}^T K_{ss}^{-1} K_{si}}{k_{ii}}$$

其中: $K_{ss} = (k_{s_p s_q})_{1 \leq s_p, s_q \leq L}$, $k_{s_p s_q} = \phi(x_{s_p})^T \phi(x_{s_q})$, x_{s_p} 和 x_{s_q} 是特征样本, $K_{si} = (k_{s_p i})_{1 \leq s_p \leq L}$.

从样本集中提取特征样本集 S 时, S 应满足代表性指标. 为此最小化所有样本的差异 δ_i 的和, 即

$$\min_S \left[\sum_{x_i \in X} \left(1 - \frac{K_{si}^T K_{ss}^{-1} K_{si}}{k_{ii}} \right) \right], \quad (2)$$

$$\max_S \left[\sum_{x_i \in X} \frac{K_{si}^T K_{ss}^{-1} K_{si}}{k_{ii}} \right]$$

定义 $J_s = \frac{1}{N} \sum_{x_i \in X} J_{si}$, 其中

$$J_{si} = \frac{K_{si}^T K_{ss}^{-1} K_{si}}{k_{ii}} = \frac{\|\hat{\phi}\|^2}{\|\phi\|^2}$$

则式(2)等于 $\max_S (J_s)$.

从 J_s 和 J_{si} 的定义可以看出, 它们的取值范围为 $(0, 1]$

3.1.2 特征样本提取算法

特征样本提取算法是一个循环过程: 首先提取样本集的中间样本, 这时特征样本集 S 中只有一个样本 ($L = 1$), 计算 S 的代表性, 即计算 J_s 和 J_{si} , 将最小 J_{si} 对应的样本添加到特征样本集 S 中; 然后计算新的特征样本集 S 的代表性. 这个过程不断循环, 直到 J_s 满足要求. 特征样本提取算法的执行步骤如下:

- 1) 给定停止条件, 即最大代表性指标 $\max \text{Fitness}$;
- 2) 提取样本集的中间样本 $x_m, S = \{x_m\}, L = 1$;
- 3) 计算 J_s 和 $J_{sj}, 1 < j < N$;
- 4) 提取样本 $x_j^*, j = \arg \min J_{sj}$;
- 5) $L = L + 1, S = S \cup \{x_j^*\}$;
- 6) 如果满足 $L < N$ 和 $J_s < \max \text{Fitness}$, 转 3), 否则转 7);
- 7) S 为提取的特征样本.

在原算法中, 第 1 个特征样本通过计算最大 J_s 来确定, 本文采用中间样本作为第 1 个特征样本. 同样达到了原算法的效果, 但却简化了计算. 相关证明



可参考文献[3]

3.2 SKPCA 模型

建立 SKPCA 模型分两步进行: 首先进行特征样本的提取, 然后对特征样本进行核函数主元分析与基于全体样本的 KPCA 相比, 本文的 KPCA 采用特征样本替换整个样本, 因为一般情况下特征样本只占总体很小一部分, 所以可减少用训练样本建立主元模型的计算以及在线实时监测的计算量

4 SKPCA 故障诊断

通过计算现场数据偏离 SKPCA 模型的程度, 判断系统过程是否发生故障 SKPCA 通过核方法将线性主元分析拓展到非线性领域, 从而为非线性系统的故障诊断提供了一种有效的方法 T^2 统计量和 SPE 统计量及其控制限的计算方法, 是 SKPCA 故障诊断监控的关键问题

4.1 统计控制指标

同 PCA 一样, 通过计算 Hotelling T^2 统计量和平方预报误差 (SPE) 对生产过程进行监控 对第 i 个时刻的过程变量 x_i , T^2 统计量定义为 $T_i^2 = [t_1, \dots, t_p] \Lambda^{-1} [t_1, \dots, t_p]^T$, 其中: t_k 是通过式 (1) 计算的主元, Λ^{-1} 是由与前 q 个主元所对应的特征值所组成的对角矩阵的逆

SPE 定义为^[4]

$$\begin{aligned} \text{SPE} &= \Phi(x) - \hat{\Phi}_p(x)^2 = \\ & \Phi(x) - \hat{\Phi}_p(x)^2 = \\ & \hat{\Phi}(x) \hat{\Phi}(x) - 2 \hat{\Phi}(x) \hat{\Phi}_p(x) + \\ & \hat{\Phi}_p(x) \hat{\Phi}_p(x) = \\ & \sum_{j=1}^N t_j V_j^T \sum_{k=1}^N t_k V_k^T - 2 \sum_{j=1}^N t_j V_j^T \sum_{k=1}^p t_k V_k^T + \\ & \sum_{j=1}^p t_j V_j^T \sum_{k=1}^p t_k V_k^T = \\ & \sum_{j=1}^N t_j^2 - 2 \sum_{j=1}^p t_j^2 + \sum_{j=1}^p t_j^2 = \sum_{j=1}^N t_j^2 - \sum_{j=1}^p t_j^2 \end{aligned}$$

4.2 统计控制限

SKPCA 用于生产过程故障诊断, 其统计控制限的确定是一个难点 统计控制限受采用的核函数和核函数的参数等诸多因素的影响 如果采用高斯核函数, 统计控制限的确定可以参考文献[4] 若采用其他的核函数, 则应根据具体问题, 通过试验得到统计控制限

5 仿真实验

5.1 Tennessee Eastman (TE) 过程

TE 过程是由 Downs 和 Vogel 提出的一个标准测试过程, 大量文献引用它作为数据源来进行控制优化、过程监控、故障诊断等研究

TE 过程的原型是一个真实的化工过程, 生产过程的流程由图 1 给出 此流程图从 4 种反应物中

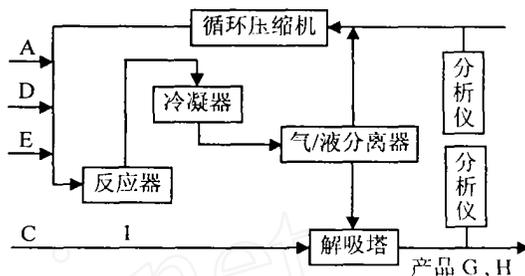
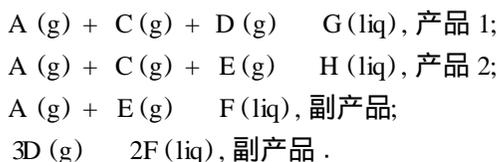


图 1 TE 过程

产生两种产品, 另外还有一种添加物和一种副产品, 共有 8 种成分: A, B, C, D, E, F, G, H. 其化学反应分别为



其中: (g) 表示气体, (liq) 表示液体 所有的反应都是不可逆的放热反应, 反应速率是温度的函数, 产品 G 对温度敏感 此生产过程有 5 个主要操作单元, 即反应器、冷凝器、气/液分离器、循环压缩机、产品解吸塔 关于 TE 过程的详细描述可参见文献[6, 7]

5.2 TE 过程的故障诊断

从 <http://brahms.scs.uiuc.edu> 下载本文的 TE 过程数据 数据产生的仿真环境 (TE 过程采用的控制系统等) 参见文献[8] 首先让 TE 过程正常运行, 然后引入故障, 产生一组故障数据 TE 过程预设了 20 种故障, 每种故障过程产生一组故障数据, 共生成 20 组故障数据 稳态无故障数据包含 500 个样本, 每个样本由 52 个过程变量采样组成, 因此稳态无故障数据是一个 500×52 的矩阵, 每组故障数据包含 960 个样本, 是一个 960×52 的矩阵 本文选用一组稳态无故障数据和 20 组故障数据, 稳态无故障数据用于建立 SKPCA 模型, 故障数据则用于测试

利用 SKPCA 和基于全体样本的 KPCA, 分别对 20 组故障进行诊断分析, 并选取类型不同的故障 2 和故障 8, 说明两种方法并无明显差异, 但前者的计算量减少许多

仿真实验中, 特征提取和主元分析都采用多项式核函数 $K(x, y) = (1 + xy)^2$ 故障 2 是成分 B 发生阶跃跳变, 但 A/C 进料比不变; 故障 8 是进料 1 中 A, B, C 组分发生随机变化

图 2 和图 3 分别是故障 2 和故障 8 的监控图, 它们是由 T^2 图和 SPE 图构成 其中, (a) 是 SKPCA 监

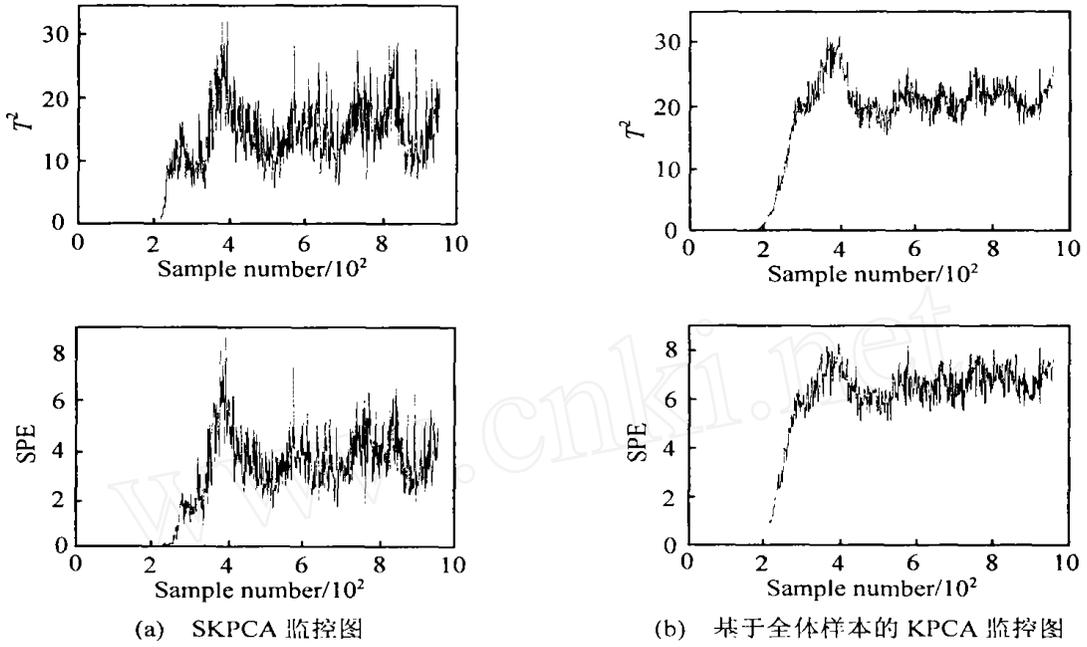


图2 故障2监控图

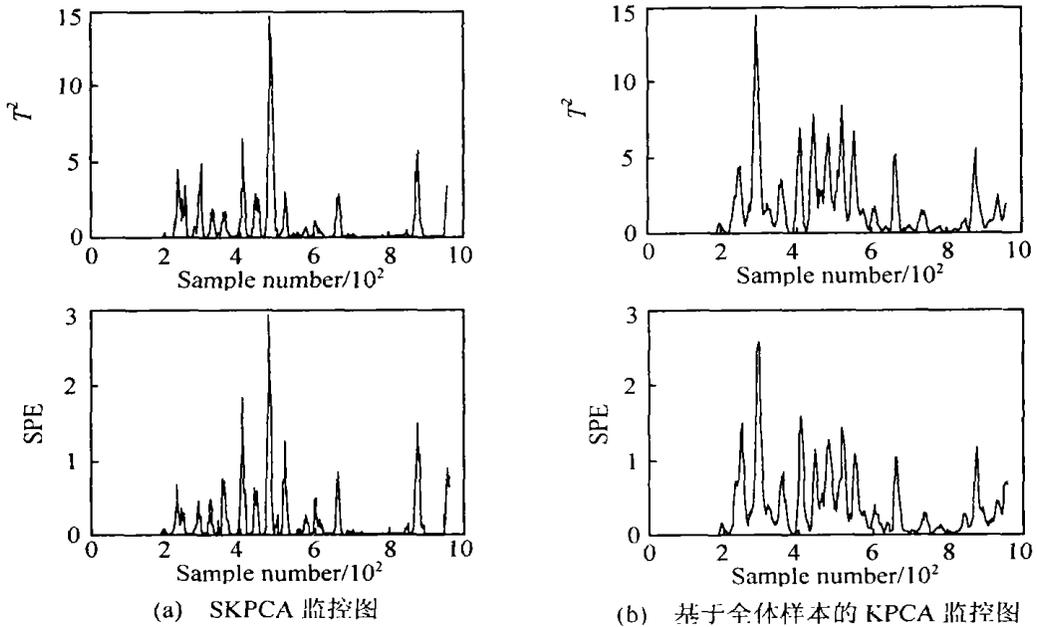


图3 故障8监控图

控图, (b) 是基于全体样本的 KPCA 监控图 (a) 和 (b) 不同之处在于采用的训练样本不同: (b) 采用的训练样本为 TE 过程正常运行的样本, 共有 500 个; (a) 采用的训练样本只是 (b) 的一部分, 是从全体样本中提取的特征样本, 特征样本只是这 500 个样本中的 3 个, 分别是样本 1、样本 80 和样本 120 (分别表示稳态无故障数据包中第 1 个、第 80 个和第 120 个样本), 但这 3 个样本的代表性已经大于 99%, 即 J_s 99%。由图可见, SKPCA 和基于全体样本的 KPCA, 故障诊断效果几乎一致, 但前者只有 3 个样本用于建立主元模型, 并且实时在线监控时只有 3

个样本参与运算, 因此前者的计算量大大减少。

6 结 语

SKPCA 模型的建立分两步进行, 首先从训练样本集提取特征样本, 然后用特征样本建立 KPCA 模型。实验证明, 与基于全体样本的 KPCA 相比, SKPCA 保证了几乎相同的故障诊断质量, 然而特征样本只有 3 个, 相对于含有 500 个样本的原训练样本集, 训练样本大大减少, 降低了 K 的维数, 从而解决了 K 的计算问题。同时改进了特征样本的提取算法, 用中间样本作为第 1 个特征样本, 简化了运算

(下转第 1422 页)

控制有源电力滤波器的检测算法,在稳态和暂态两种情况下都能得到较好的补偿效果和跟随效果

参考文献(References)

- [1] Wu J C, Jou H L. Simplified Control Method for the Single-phase Active Power Filter[J]. *IEE Proc Electr Power Appl*, 1996, 143(3): 219-224
- [2] Huang S J, Wu J C. A Control Algorithm for Three-phase Three-wired Active Power Filters under Nonideal Mains Voltages[J]. *IEEE Trans on Power Electronics*, 1999, 14(4): 753-760
- [3] 王向军,尹为民,吴正国. 基于自适应滤波理论的单相电力有源滤波器[J]. *电力电子技术*, 1999, 33(4): 19-21.
(Wang X J, Yin W M, Wu Z G. The Single-phase Active Filter Based on Adaptive Filter Theory [J]. *Power Electronics*, 1999, (4): 19-21.)
- [4] 张鹏鹰,王向军,曹跃云. 并联型电力有源滤波器直流电容电压的研究[J]. *电力电子技术*, 2000, 34(3): 3-6
(Zhang P Y, Wang X J, Cao Y Y. DC Capacitor Voltage of Shunt Active Power Filter [J]. *Power Electronics*, 2000, (3): 3-6.)
- [5] 吴言凤,吴正国,夏立. 一种基于自适应滤波的三相有源电力滤波器的检测算法[J]. *海军工程大学学报*, 2002, 14(1): 54-57.
(Wu Y F, Wu Z G, Xia L. Analysis of Control Algorithm for the Three-phase Active Power Filter[J]. *J of Naval University of Engineering*, 2002, 14(1): 54-57.)
- [6] 杨军,王兆安,邱关源. 并联型电力有源滤波器直流侧电压的控制[J]. *电力电子技术*, 1996, 30(4): 48-89
(Yang J, Wang Z A, Qiu G Y. DC-side Voltage Control of Shunt Active Power Filter [J]. *Power Electronics*, 1996, 30(4): 48-89.)
- [7] Bernard Widrow, Eugene Walach. *Adaptive Inverse Control* [M]. Prentice-Hall Press, 1996
- [8] Widrow B. Adaptive Inverse Control [A]. *The 2nd IFAC Workshop on Adaptive Control and Signal Processing* [C]. Lund, Sweden, 1986
- [9] Plett G L. Adaptive Inverse Control of Linear and Nonlinear Systems Using Dynamic Neural Networks [J]. *IEEE Trans on Neural Networks*, 2003, 14(2): 360-376

(上接第 1418 页)

将 KPCA 应用于故障诊断还有许多方面需要进一步完善. 目前 KPCA 只能诊断故障是否发生,而不能识别故障,原因在于无法从特征空间 F 向原空间进行映射,因而无法象线性 PCA 那样进行故障重构. 另外, T^2 统计量和 SPE 统计量及其控制限的计算方法还需从理论上进一步完善.

参考文献(References)

- [1] Schölkopf B, Smola A, Müller K R. Nonlinear Component Analysis as a Kernel Eigenvalue Problem [J]. *Neural Computation*, 1998, 10(5): 1299-1319
- [2] Kim Sang-Woon, John Oommen B. On Using Prototype Reduction Schemes to Optimize Kernel-based Nonlinear Subspace Methods[J]. *Pattern Recognition*, 2004, 37(2): 227-239
- [3] Baudat G, Anouar F. Feature Vector Selection and Projection Using Kernels[J]. *Neurocomputing*, 2003, 55(1-2): 21-38
- [4] Lee Jong-Min, Chang Kvoov Yoo, Sang Wook Choi, et al. Nonlinear Process Monitoring Using Kernel Principal Component Analysis [J]. *Chemical Engineering Science*, 2004, 59(1): 223-234
- [5] 李巍华,廖广兰,史铁林. 核函数主元分析及其在齿轮故障诊断中的应用[J]. *机械工程学报*, 2003, 39(8): 65-70
(Li W H, Liao G L, Shi T L. Kernel Principal Component Analysis and Its Application in Gear Fault Diagnosis [J]. *Chinese J of Mechanical Engineering*, 2003, 39(8): 65-70.)
- [6] Downs J J, Vogel E F. A Plant-wide Industrial Process Control Problem [J]. *Computers and Chemical Engineering*, 1993, 17(3): 245-255
- [7] Lyman P R, Georgakis C. Plant-wide Control of the Tennessee Eastman Problem [J]. *Computers and Chemical Engineering*, 1995, 19(3): 321-331
- [8] Leo H Chiang, Randy J Pell, Mary Beth Seasholtz. Exploring Process Data with the Use of Robust Outlier Detection Algorithms [J]. *J of Process Control*, 2003, 13(5): 437-449