

基于特征向量提取的核主元分析法

吴洪艳^{1,2} 黄道平¹

(华南理工大学自动化科学与工程学院 广州 510640)¹

(湛江师范学院信息科学与技术学院 湛江 524048)²

摘要 核主成分分析(KPCA)是非线性化工过程故障检测与诊断时常用的多变量统计控制方法之一。从两个方面改进了KPCA的故障检测性能。为了提高KPCA方法故障检测的准确率,提出了基于小波的KPCA故障检测方法。当样本数大时,采用基于几何考虑的特征向量提取(FVS)算法,降低了KPCA计算的复杂性,缩短了计算时间。Tennessee Eastman process 仿真给出了所提出的方法的有效性。

关键词 故障诊断,核主成分分析,特征向量提取,小波变换

中图分类号 TP277 文献标识码 A

Kernel Principal Component Analysis Based on Feature Vector Selection

WU Hong-yan^{1,2} HUANG Dao-ping¹

(College of Automation Science and Technology, South China University of Technology, Guangzhou 510640, China)¹

(College of Information Science and Technology, Zhanjiang Normal University, Zhanjiang 524048, China)²

Abstract Kernel principal component analysis(KPCA) is one of multivariate statistical control methods for solving nonlinear chemical process fault diagnosis. In this paper, it improves KPCA from two aspects. First, in order to improve the accuracy of KPCA for fault detection, a new method combined with wavelet was developed. Second, feature vector selection(FVS) scheme was adopted to reduce the computational complexity of KPCA whereas preserve the geometrical structure of the data. Tennessee Eastman process(TEP) simulations were carried out to show the given approach's effectiveness in process monitoring performance.

Keywords Fault diagnosis, Kernel principal component analysis, Feature extraction, Wavelet transform

随着DCS、智能仪表以及现场总线技术的广泛应用,化工过程中大量的过程数据被采集并存储下来。通过分析过程数据来判断系统的运行状态的统计过程监控方法受到广泛的关注。在解决过程变量非线性的问题时,Schölkopf等^[1]提出一种新方法,即核主成分分析方法(KPCA)。它的基本思想是首先将低维输入空间中各变量之间的非线性关系通过非线性映射 $\phi(x)$ 映射到高维特征空间中,然后在高维特征空间中进行主成分分析。其中非线性映射 $\phi(x)$ 的具体形式并不要求取,只需得到特征空间中的内积,而内积可以由一维的非线性函数表示。KPCA方法本质上是在高维特征空间实现线性PCA,因此很容易被理解和应用用于过程监控。一些学者的研究已经显示了KPCA方法在故障检测方面的作用^[2-4]。

在实际的过程监控中,KPCA方法还有不足之处,一方面,工业过程数据经常参杂噪声和干扰,例如白噪声和电磁干扰,借助这样的数据直接用KPCA对过程监控时,将影响过程信息处理分析的结果,降低结果的置信度^[5]。另一方面,KPCA方法需要计算核矩阵,它的大小是采样数的平方,当采样数大时,计算量大、耗时。

本文从以下两个方面改进KPCA的故障检测性能。1)

提出一种基于小波变换的KPCA故障检测方法(Wavelet-KPCA),测量数据通过小波变换获得小波系数,然后进行小波反变换获得重构的测量数据,以达到去噪声和干扰的目的。2)采用特征向量提取(FVS)算法(Baudat & Anouar, 2001)降低KPCA计算的复杂性,缩短计算过程的时间。在此基础上构建KPCA模型对化工过程进行故障检测。

1 核主成分分析(KPCA)

KPCA是把输入数据 x 通过非线性映射 ϕ 映射到高维的特征空间 F ,然后在空间 F 中实现PCA。假设映射数据做了中心化处理,即 $\sum_{i=1}^N \phi(x_i) = 0$, N 表示输入数据的长度,则相应的协方差矩阵可以写为:

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

则其主分量可以通过解决下面特征值方程得到:

$$\lambda v = Cv = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\phi(x_i) \cdot v) \phi(x_i) \quad (2)$$

其中, \cdot 代表点积, λ 表示特征值, v 是协方差矩阵 C 的特征向量。

到稿日期:2008-08-25 返修日期:2008-10-26 本文受广东省科技计划资助项目(2003B50301)资助。

吴洪艳(1970-),女,博士研究生,讲师,主要研究领域为智能控制理论与应用、故障诊断,E-mail: Wuhongyan70@sohu.com;黄道平(1961-),男,教授,主要研究领域为智能控制理论与应用、工业过程的故障诊断与事故预报。

对于任意 $\lambda \neq 0$ 的特征矢量 v 可以用 $\phi(x_i)$ 线性表示为:

$$v = \sum_{i=1}^N \alpha_i \phi(x_i) \quad (3)$$

在式(2)两边同乘以 $\phi(x_k)$ 得

$$\lambda(\phi(x_k) \cdot v) = (\phi(x_k) \cdot Cv), k=1, \dots, N \quad (4)$$

定义一个 $n \times n$ 维核矩阵 K , 其矩阵元素为:

$$k_{ij} = (\phi(x_i) \cdot \phi(x_j)) = k(x_i, x_j) \quad (5)$$

假设 $k(\cdot)$ 是对称的核函数, 则根据 Mercer 定理, 点积可以用核函数 $k(\cdot)$ 来代替, 这对应了用映射函数 ϕ 把数据映射到一个高维点积空间 F , 可以避免计算非线性映射过程及点积。

由联立等式(3)、式(4)、式(5)可得:

$$\lambda N\alpha = K\alpha, \alpha = [\alpha_1, \dots, \alpha_N]^T \quad (6)$$

其中 λ 表示特征值, α 是相应的特征矢量。与 PCA 算法相似, 数据点 $\phi(x_i) (i=1, \dots, N)$ 需要在特征空间 F 中做中心化处理, 则中心化后的核函数 \bar{K} 可以定义为:

$$\bar{K} = K - 1_N K - K 1_N + 1_N K 1_N \quad (7)$$

其中 $1_N = \left(\frac{1}{N}\right)_{N \times N}$

$$\text{则式(6)改为 } \lambda N\alpha = \bar{K}\alpha \quad (8)$$

向量 α 应标准化并满足 $\|\alpha\|^2 = 1/N\lambda$ 。

对于新的采样 x_{new} , 则 k 个特征空间中的主分量可计算:

$$\begin{aligned} t_{new,k} &= (v_k \cdot \phi(x_{new})) = \sum_{i=1}^N \alpha_i^k (\phi(x_i) \cdot \phi(x_{new})) \\ &= \sum_{i=1}^N \alpha_i^k k(x_i, x_{new}) \quad K=1, \dots, p \end{aligned} \quad (9)$$

KPCA 方法只需计算矩阵 K 来解决特征值问题, 计算简单, 更不用具体知道非线性映射关系 ϕ 。常用的核函数主要包括以下 3 类:

- (1) 多项式核函数, $k(x, y) = [(x \cdot y) + b]^d$
- (2) 径向基核函数, $k(x, y) = \exp(-\|x - y\|^2/c)$
- (3) 神经网络核函数, $k(x, y) = \tanh[v(x \cdot y) + c]$

本文中采用径向基核函数 $\exp(-\|x - y\|^2/c)$ 构造 KPCA 模型。

2 小波降噪

小波变换能把时域信号转变成频域小波系数。Donoho^[6]首次提出利用 DWT 和阈值法对信号降噪, 通过选择对信号的小波系数进行合适的阈值操作可以达到降噪的目的。

小波变换阈值去噪法的理论依据是, 小波变换特别是正交小波变换具有很强的去数据相关性, 它能使信号的能量集中在小波域里的一些大的小波系数中; 而噪声的能量却分布于整个小波域内, 因此, 经小波分解后, 信号的小波系数幅值要大于噪声的系数幅值。可以认为, 幅值比较大的小波系数一般以信号为主, 而幅值比较小的系数在很大程度上是噪声。于是, 采用阈值的办法可以把信号系数保留, 而使大部分噪声系数减少至零。阈值法分软阈值法和硬阈值法。

$$\text{设采样信号 } f(t) = s(t) + n(t) \quad (10)$$

$s(t)$ 是有用信号, $n(t)$ 是噪声信号

进行小波变换得到小波系数 $\omega_{j,k}$ 。

降噪过程:

$$\hat{\omega}_{j,k} = D(\omega_{j,k}, q) \quad (11)$$

其中, q 是阈值参数

相对软阈值方法:

$$\hat{\omega}_{j,k} = \text{sgn}(\omega_{j,k}) \times \max(0, |\omega_{j,k}| - q) \quad (12)$$

相对硬阈值方法:

$$\hat{\omega}_{j,k} = \begin{cases} \omega_{j,k} & \text{if } |\omega_{j,k}| > q \\ 0, & \text{else} \end{cases} \quad (13)$$

将处理后获得的小波系数做逆小波变换(IDWT)进行重构, 得到恢复的原始数据的估计值。

3 特征向量选择(FVS)

特征向量选择(FVS)算法可以在保留全部数据的几何结构情况下降低计算的复杂性, 节省计算时间。

从式(3)看到, 特征空间 F 中训练样本 $\{\phi(x_i)\} i=1, 2, \dots, N$ 可以表示特征向量 v 。实际情况下, 通过 $\phi(x_i)$ 拓展后的子空间的维数等于核矩阵 K 的秩, 而 K 的秩通常小于训练样本数 N , 特别是当训练样本数很大时, K 的秩远远小于 N ^[7]。如果特征空间的向量基 $\{\phi(x_k)\} i=1, 2, \dots, \text{rank}(K)$ 已知, 则式(3)可以重写为

$$v = \sum_{i=1}^{\text{rank}(K)} \alpha_i \phi(x_i) \quad (14)$$

这将大大提高计算效率。

本研究中, 采用基于几何考虑的算法 FVS^[7] 来获得特征空间的向量基。FVS 算法的思想是寻找一个样本的子集, 此子集在特征空间 F 中的映射能够充分表示全部样本数据的映射, 即这些数据是此子集的线性组合。

假设 $S = (x_{i1}, \dots, x_{iL})$ 是选择的样本子集, L 是向量个数。任一向量 x_i 的映射 ϕ_i 的估计值可以看作是 S 的线性组合:

$$\hat{\phi}_i = \langle \hat{\phi}_i, v_i \rangle \quad (15)$$

其中 $\phi_i = (\phi_{i1}, \dots, \phi_{iL})$ 是选择的样本子集的映射矩阵, $v_i = (v_{i1}, \dots, v_{iL})$ 是系数向量。

现在的目的是要寻找系数向量 v_i , 使估计值 $\hat{\phi}_i$ 尽可能地接近真实值 ϕ_i 。可以通过式(16)求得:

$$\min \delta_i = \frac{\|\phi_i - \hat{\phi}_i\|^2}{\|\phi_i\|^2} \quad (16)$$

将式(16)对 v_i 求导并使之等于零, 即 $\partial \delta_i / \partial v_i = 0$, 写成矩阵形式为:

$$\min \delta_i = 1 - \frac{K_s^T K_s^{-1} K_s}{k_{ii}} \quad (17)$$

其中 $k_{ii} = k(x_i, x_i)$, $K_s = (k_{s,ij})_{1 \leq i,j \leq L}$ 是选择向量的点积的平方阵, $K_s = (k_{s,p,i})_{1 \leq p \leq L}$ 是 x_i 和 S 之间的点积。

最终目标是使式(17)满足所有样本, 即

$$\max_s J_s = \frac{1}{n} \sum_{x_i \in X} \left(\frac{K_s^T K_s^{-1} K_s}{k_{ii}} \right) \quad (18)$$

可以通过迭代过程解决此问题。迭代结束条件是 K_s 不可逆或者 J_s 达到给定的边界值, 或达到了预先设定的选择的向量数。具体 FVS 算法如下:

Input: 1) training sample X ; 2) kernel function and its parameters.

Initialize; $S = \emptyset$ and $L = 0$.

First iteration; select a sample that maximizes J_s and add it to S ; let $L = 1$.

Do iterative procedure:

Combining with previous L samples, select a sample from the remaining samples

If Kss is no longer invertible
Then stop the iterative procedure
Else append the sample that can maximize J, to S
let L = L+1.

End if

End do

Output: S

4 Wavelet-KPCA 应用于故障检测

Wavelet-KPCA 方法与 PCA 一样使用 T^2 统计量和 Q 统计量作为监测。本文中, T^2 统计量定义为:

$$T^2 = [t_1, \dots, t_p] \Lambda^{-1} [t_1, \dots, t_p]^T \quad (19)$$

其中, t_k 为式(9)计算得到的主成分得分, Λ^{-1} 是数据 X 的协方差矩阵的前 p 个特征值所构成的对角矩阵的逆矩阵。

统计量的控制限是指在正常操作条件下, 过程操作点偏离正常情况所允许的范围。

T^2 统计量的控制限可以利用 F 分布按下式计算^[4]:

$$T_{p, N, \alpha}^2 \sim \frac{p(N-1)}{N-p} F_{p, N-p, \alpha} \quad (20)$$

N 为建模数据的样本个数, p 为主成分模型中保留的主成分个数, α 为显著性水平, 在自由度为 $p, n-p$ 条件下的 F 分布临界值可以在统计表中查到。

Q 统计量也称为预测误差平方和指标, 定义如下:

$$SPE = \bar{K}(x, x) - t^T t \quad (21)$$

Q 统计量的控制限可以在下式计算:

$$Q = \theta_1 \left[1 + \frac{C_\alpha \sqrt{2\theta_2 h_0^2}}{\theta_1} + \frac{\theta_2 h_0 (h_0 - 1)}{\theta_1^2} \right] \frac{1}{h_0} \quad (22)$$

$$\theta_i = \sum_{j=p+1}^n \lambda_j^i \quad (i=1, 2, 3), h_0 = 1 - \frac{2\theta_1 \theta_2}{3\theta_1^2}$$

其中, C_α 是正态分布在显著性水平 α 下的临界值, λ_j 为 X 的协方差矩阵较小的几个特征值。详细的 Wavelet-KPCA 算法如下:

- 步骤 1 对测量数据计算 J 层小波分解
- 步骤 2 阈值法去除值小的小波系数
- 步骤 3 逆小波变换重构原始测量数据的估计值
- 步骤 4 标准化重构后数据
- 步骤 5 计算核矩阵 K

$$k_{ij} = (\phi(x_i) \cdot \phi(x_j)) = k(x_i, x_j)$$

- 步骤 6 特征空间内核矩阵的中心化

$$\bar{K} = K - 1_N K - K 1_N + 1_N K 1_N$$

- 步骤 7 解 $\lambda N \alpha = \bar{K} \alpha$ 特征值, 并标准化 α_k

- 步骤 8 提取非线性主元

$$t_k = (v_k \cdot \phi(x)) = \sum_{i=1}^N \alpha_i^k (\phi(x_i) \cdot \phi(x)) = \sum_{i=1}^N \alpha_i^k k(x_i, x)$$

- 步骤 9 计算监测统计量 T^2, Q , 确定控制限

如果 T^2, Q 统计量超出控制限, 认为有故障发生。

5 仿真及结果

5.1 系统简介

Tennessee Eastman process (TEP) 是一个著名的化工过程测试仿真平台。它由连续搅拌式反应釜、冷凝器、气液分离塔、解吸塔、在沸器和离心式压缩机等多个操作单元组成, 系统包含 41 个测量变量和 12 个操控变量。系统各部分之间严重耦合且开环不稳定。它可以仿真正常操作条件和 21 种故障条件的过程情况。详细的介绍可参考文献[8]。本文中仿

真数据来源于 <http://www.brahms.scs.uiuc.edu>。

5.2 结果分析

1) 实施小波降噪

为了模拟实际工业条件下过程的噪声情况, 训练数据集加上了零均值、0.01 方差的高斯白噪声。每组仿真数据集为 300×52 的数据矩阵。本文所采用的小波是正交的 db4 小波, 并进行 5 层分解, 得到尺度系数 A5 和 5 个尺度的小波系数 D1, D2, D3, D4, D5。对小波系数进行软阈值处理, 由尺度系数和已经由阈值处理后的小波系数做逆小波变换进行重构, 得到原始数据的估计值, 达到去噪的目的。核函数采用径向基核函数, $c=0.5$ 。图 1 代表正常条件下的 2 种方法的监测表。可以看到, 由于测量数据含有噪声, KPCA 方法中有部分 Q 值超过控制限, 这表明系统处于失控之中, 有故障发生。而 Wavelet-KPCA 方法能给出正确的监测情况即系统在控制中(正常)。所以本文提出的方法能有效地避免故障的误报发生。

为了验证 2 种方法对故障的检测能力, 系统中从采样点 160~250 引入故障。相关的检测结果见图 2。图中的虚线是 99% 控制限。从图中可以看出, 从 160~250 采用点 KPCA 和 Wavelet-KPCA 方法都能检测到故障的发生, 但 KPCA 方法在 250~300 采用点之间有值超过了控制线, 说明有故障发生, 而实际上没有, 这证明 KPCA 方法有误报发生。通过比较, Wavelet-KPCA 比 KPCA 方法的误报率更低。

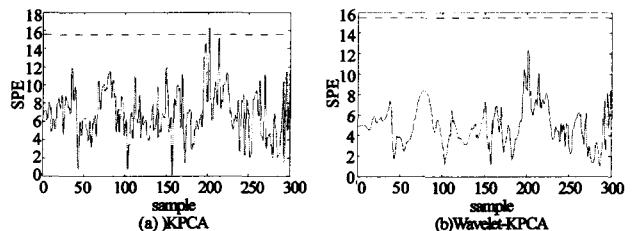


图 1 正常情况下的监控表

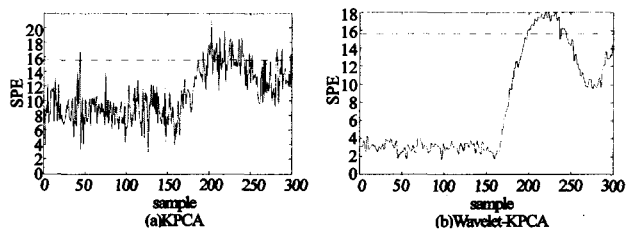


图 2 故障情况下的监控表

2) 实施 FVS 算法

实施特征向量选择(FVS)后, 剩余的向量数 $L=30$ 。故障 3, 4, 12 的相应故障检测率如表 1 所列。可以看出, 对不同的故障两种方法的故障检出率差别不大, 因此, FVS 对故障检出率的影响不突出, 只是有些小的波动, 但另一方面, 基于 FVS 算法的 KPCA 在计算时间上有显著的作用。KPCA 方法的核矩阵是 300×300 , 而基于 FVS 的 KPCA 方法的核矩阵是 30×30 , 计算量减小, 大大减少了耗时, 特别是样本数据集很大时, 效果更明显。

表 1 故障检测率比较

故障	KPCA	KPCA+FVS
3	70.31	69.98
4	97.84	97.80
12	98.62	98.46

(下转第 255 页)

次,得到的最大、最小和平均绝对差异度如表 2 所列。

表 2 两个 Hash 值之间的绝对差异度

	最大值	最小值	平均	每字符平均
绝对差异值	2139	677	1384	86.675

④ 运算速度分析

在改进的 Hash 算法中,当 CML 中每个格子由状态 n 变为状态 $n+1$ 时,需要进行 40×3 次 Logistic 映射运算。当输入文本包含 N 个字符时,则需进行 $40 \times 3N$ 次运算。由于 CML 有 16 个格子,因此需要计算的 Logistic 映射总次数为 $1920N$ 。这表明产生 Hash 值时需要计算的 Logistic 映射次数与消息长度之间为线性关系,能有效避免消息较长时计算量急剧增加的问题。

另外,当消息长度仅为 1 个字符时,由于设置了初始状态变量 $IV[1 \cdots 16]$,本文算法仍然可以保持时空混沌的优良特性,不会退化为单个的 Logistic 映射。

同时,在改进后的算法中,产生 Hash 值时,对于文献[7]中的攻击,当消息被重复扩展时,消息中的每个 ASCII 码值,加上它所对应的重复扩展形式,都会被用于调整格子的状态值,因此在产生 Hash 值时,它们迭代的次数是不相同的,产生的 Hash 值也不会相同,从而能够有效防止这种形式的碰撞攻击。

综上所述,改进的算法根据 Lyapunov 指数谱和 CML 的状态来确定时空混沌中的各参数值,有效地保证了系统处于完全发展的混沌状态,从而使算法具有很好的单向性和安全性。同时,改进后的算法的时间复杂度与消息的长度呈线性关系,随着消息的增加能有效减少 Hash 值的计算时间。

结束语 本文的研究对象是基于时空混沌的 Hash 函数构造方法。首先介绍了一种以时空混沌为基础的构造 Hash 函数的典型方案,并分析了它的不足和安全性问题。然后,提出了一种改进的 Hash 函数构造方法。改进后的算法具有很好的安全性和灵活性。同时与原算法相比,还具有更好的统计特性和更高的效率,有效地弥补了原算法中存在的碰撞漏洞。

参 考 文 献

[1] Wang X, Feng D, Lai X, et al. Collisions for Hash Functions MD4, MD5, HAVAL-128 and RIPEMD[C]//Rump Session of

(上接第 187 页)

结束语 本文提出了改进的非线性 KPCA 方法应用于化工过程的故障检测。一方面,所提出的方法结合了小波变换与 KPCA,对 KPCA 的性能进行了扩展。另一方面,引进特征向量选择算法,降低了计算费用,减少了耗时。通过非线性过程仿真表明,所提出的方法在故障检测方面优于 KPCA 方法。该方法具有有效性和实用性。

参 考 文 献

[1] Schölkopf B, Smola A J, Müller J. Nonlinear component analysis as a kernel eigenvalue problem[J]. Neural Computation, 1998, 10(5): 1299-1399

[2] Cui Peiling, Li Junhong, Wang Guizeng. Improved kernel principal component analysis for fault detection[J]. Expert System with Application, 2008, 34(2): 1210-1219

[3] Choi S W, Lee I B. Nonlinear dynamic process monitoring based

Crypto'04 E-print, 2004

[2] Wang X, Lai X, Feng D, et al. Cryptanalysis of the Hash Functions MD4 and RIPEMD[C]//Proceedings of Eurocrypt'05. Aarhus, Denmark, 2005: 1-18

[3] Wong Kwok-Wo. A combined chaotic cryptographic and hashing scheme[J]. Physics Letters A, 2003, 307: 292-298

[4] Yi Xun. Hash function based on chaotic tent maps [J]. IEEE Transactions on circuits and systems-II, 2005, 52(6): 354-357

[5] Davies R W, Price W L. Digital Signature—an Update[C]//Proceedings International Conference on Computer Communications. Sydney, Elsevier, North-Holland, 1984: 843-847

[6] Matyas S M, Meyer C H, Oseas J. Generating Strong One-way Functions with Cryptographic Algorithm [J]. IBM Technical Disclosure Bulletin, 1985, 27(10): 5658-5659

[7] 王继智, 王英龙, 王美琴. 一类基于混沌映射构造 Hash 函数方法的碰撞缺陷[J]. 物理学报, 2006, 55(10): 5048-5054

[8] Stallings W(美)著. 密码编码学与网络安全:原理与实践[M]. 刘玉珍,等译. 北京:电子工业出版社, 2004

[9] 张瀚, 王秀峰, 李朝晖, 等. 基于时空混沌系统的单向 Hash 函数构造[J]. 物理学报, 2005, 54: 4006-4011

[10] 杨维明. 时空混沌和耦合映象格子[M]. 上海:上海科技教育出版社, 1994

[11] Kaneko K. Pattern dynamics in spatiotemporal chaos: pattern selection, diffusion of defect and pattern competition intermittency[D]. 1989, 34: 1-41

[12] Ding Mingzhou, Yang Weiming. Stability of synchronous chaos and on-off intermittency in coupled map lattices [J]. Physical Review E, 1997, 56: 4009-4025

[13] Kohda T, Tsuneda A. Statistics of chaotic binary sequences[J]. IEEE Transactions on Information Theory, 1997, 43(1): 104-112

[14] Habutsu T, Nishio Y, Sasase I, et al. A secret key cryptosystem by iterating a chaotic map[C]//Advances in Cryptology-Euro-Crypt'91, Lecture Notes in Computer Science 0547. Berlin: Springer-Verlag, 1991: 127-140

[15] Bhattacharyya G K, Johnson R A. Statistical Concepts and Methods[M]. Toronto: John Wiley and Sons, 1997

[16] 赵德勤, 刘曾荣. 基于追踪控制的混沌系统广义同步[J]. 重庆邮电大学学报:自然科学版, 2007, 19(6): 759-761

on dynamic KPCA[J]. Chemical Engineering Science, 2004(59): 5897-5908

[4] Choi S W, Lee C, Lee J M, et al. Fault detection and identification of nonlinear processes based on KPCA[J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 2005(75): 55-67

[5] Kosanovich K A, Plovoso M J. PCA of wavelet transformed process data for monitoring[J]. Intelligent Data Analysis, 1997(1): 85-99

[6] Donoho D L. Denosing by soft-thresholding [J]. IEEE Transactions on Information Theory, 1995, 41(3): 613-627

[7] Baudat G, Anouar F. Kernel-based methods and function approximation[C]//Proceedings of international conference on neural networks. Washington, DC. 2001: 1244-1249

[8] Downs J H, Vogel E F. plant-wide industrial process control problem[J]. Computers Chemical Engineering, 1993, 17(3): 245-255