

研究论文

递归核 PCA 及其在非线性过程 自适应监控中的应用

谢 磊, 王树青

(浙江大学先进控制研究所, 工业控制技术国家重点实验室, 浙江 杭州 310027)

摘要: PCA、PLS 作为常用的多变量统计监控算法, 一般适用于线性、定常的过程。针对实际工业过程的时变、非线性特性, 提出了一种递归核 PCA (RKPCA) 方法用于非线性过程的自适应监控。RKPCA 算法通过将递归奇异值分解推广到核空间, 给出了核形式描述的递归 KPCA 算法, 运算复杂度比 KPCA 明显降低, 保证非线性监控模型能够在线更新。在 Alstom 工业燃气发生装置上的自适应监控表明, 所提出的 RKPCA 算法能够及时跟踪非线性过程的时变特征, 保证了监控模型的有效性。

关键词: 时变非线性过程; 故障检测; 递归核主元分析; 自适应监控

中图分类号: TP 277

文献标识码: A

文献编号: 0438-1157 (2007) 07-1776-07

Recursive kernel PCA and its application in adaptive monitoring of nonlinear processes

XIE Lei, WANG Shuqing

(Institute of Advanced Process Control, State Key Laboratory of Industrial Control Technology,
Zhejiang University, Hangzhou 310027, Zhejiang, China)

Abstract: As widely used process monitoring techniques, principal component analysis (PCA) and partial least squares (PLS) are limited to the application in linear and time-invariant systems. To handle the nonlinear and time-varying characteristics of real processes, a recursive kernel PCA (RKPCA) algorithm was proposed for adaptive monitoring of nonlinear processes. By extending the incremental singular value decomposition (SVD) to the kernel space, the kernel formulation of incremental kernel PCA, which possessed much lower computational complexity and was suitable for online model updating, was obtained. Finally, the proposed algorithm was applied to the Alstom gasifier for adaptive monitoring and RKPCA could efficiently capture the time-varying and nonlinear relationship in process variables.

Key words: time-varying nonlinear process; fault detection; recursive kernel principal component analysis; adaptive process monitoring

引 言

随着数据采集能力的不断增强和 DCS 系统的

广泛使用, 过程工业运行中积累了大量的数据, 这些数据中蕴含了丰富的过程特征信息, 为基于数据的过程监控与故障诊断提供了坚实的基础。主元分

2006-08-07 收到初稿, 2007-03-09 收到修改稿。

联系人及第一作者: 谢磊 (1979—), 男, 博士, 助理研究员。

基金项目: 国家自然科学基金项目 (60421002, 70471052);

中国博士后科学基金项目。

Received date: 2006-08-07.

Corresponding author: Dr. XIE Lei. E-mail: leix@iipc.zju.edu.cn

Foundation item: supported by the National Natural Science Foundation of China (60421002, 70471052) and the Postdoctoral Science Foundation of China.

析 (PCA)、偏最小二乘 (PLS)^[1] 等多元统计方法能够有效地去除数据中的线性冗余信息, 得到反映过程运行特征的少数主要变量, 算法简洁, 实施方便, 目前已经广泛地应用于化工过程统计监控和故障诊断。然而, PCA、PLS 在实际应用中有两个重要的假设, 一是过程数据是线性相关的, 这限制了 PCA 在强非线性工业过程中的应用; 二是过程是时不变的, 即变量之间存在的线性关系不随着过程的运行发生改变, 然而绝大部分实际工业过程都会呈现缓变的特性, 诸如设备老化、催化剂失活、传感器飘移等, 为实现时变过程的自适应监控, 必须引进相应的模型在线更新算法, 如递归 PCA^[2]、递归 PLS^[3] 等。

目前解决非线性过程监控的途径主要有两种, 一是神经网络算法, 具体包括 Krammer^[4] 提出的 5 层神经网络方法, Dong 等^[5] 提出的主元曲线-神经网络模型算法等, 神经网络方法由于建立在经验风险最小化的基础之上, 模型的泛化能力也没有保障, 另外模型的结构也较难确定, 需要解决复杂的非线性优化问题; 二是核学习方法, 如核 PCA (kernel PCA, KPCA)、核 PLS (kernel PLS, KPLS) 等, 核方法通过核技巧将非线性数据映射到高维特征空间, 并在特征空间中做线性运算提出特征, 由于核方法建立在结构风险最小化基础之上, 较好地解决了模型泛化能力问题, 运算也较为简单, 在工业过程监控中也取得了不少应用^[6-8]。

传统 KPCA 算法的不足之处在于两方面, 首先 KPCA 将输入数据集作为一个整体进行运算, 运算的复杂度与样本数目直接相关, 对于大样本数据集, KPCA 的计算十分耗时; 二是缺少递归的 KPCA 算法, 当新的数据来临时, 必须重新计算整个 KPCA 模型, 从而限制了 KPCA 在非线形过程自适应监控中的应用。

本文提出了一种新的递归 KPCA (RKPCA) 算法用于时变非线性过程的自适应监控, 给出了算法实施的具体步骤和相关统计量的计算方法。在 Alstom 工业燃气发生装置上的监控表明, 所提出的 RKPCA 算法能够及时跟踪非线性过程的时变特征, 保证了监控模型的有效性。

1 核主元分析 (KPCA)

KPCA 作为 PCA 分析非线性形式的推广^[9], 首先将输入向量 \mathbf{x} 通过映射 Φ 投影到高维特征空

间中, 然后对 $\Phi(\mathbf{x})$ 进行线性 PCA 分析。令过程数据 $\mathbf{x}_i \in \mathcal{R}^n$ ($i=1, 2, \dots, N$), N 为采样本数, n 为测量变量的维数, 则特征空间内的协方差矩阵为

$$C_\Phi = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\Phi(\mathbf{x}_i) - \mathbf{m}_\Phi)(\Phi(\mathbf{x}_i) - \mathbf{m}_\Phi)^T = \frac{1}{N-1} \overline{\Phi}(\mathbf{X}) \overline{\Phi}(\mathbf{X})^T \quad (1)$$

其中, $\mathbf{m}_\Phi = \frac{1}{N} \Phi(\mathbf{X}) \mathbf{1}_N$ 为样本映射到特征空间后的均值, $\mathbf{1}_N \in \mathcal{R}^N$ 为全 1 的列向量。 $\overline{\Phi}(\mathbf{X}) = \Phi(\mathbf{X}) - \frac{1}{N} \Phi(\mathbf{X}) \mathbf{E}_N$ 为去均值后的特征向量矩阵, $\Phi(\mathbf{X}) = [\Phi(\mathbf{x}_1), \Phi(\mathbf{x}_2), \dots, \Phi(\mathbf{x}_N)]$ 为样本特征矩阵, $\mathbf{E}_N = \mathbf{1}_N \cdot \mathbf{1}_N^T$ 。

KPCA 求取下列的特征值分解问题

$$C_\Phi \mathbf{p}_i = \frac{1}{N-1} \overline{\Phi}(\mathbf{X}) \overline{\Phi}(\mathbf{X})^T \mathbf{p}_i = \lambda_i \mathbf{p}_i, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (2)$$

其中, λ_i 和 \mathbf{p}_i 分别为 C_Φ 的特征值与特征向量, \mathbf{p}_i 又称为 KPCA 的特征方向, 由于映射 $\Phi(\mathbf{x})$ 的显示形式通常是未知的, 直接计算式 (2) 的特征值分解一般比较困难。KPCA 通过所谓的核技巧避免了对 $\Phi(\mathbf{x})$ 具体形式的求取, 令 Gram 矩阵 $\mathbf{G} = \overline{\Phi}(\mathbf{X})^T \overline{\Phi}(\mathbf{X})$ 的特征值分解为

$$\mathbf{G} \mathbf{v}_i = \overline{\Phi}(\mathbf{X})^T \overline{\Phi}(\mathbf{X}) \mathbf{v}_i = \zeta_i \mathbf{v}_i \quad (3)$$

其中, ζ_i 和 \mathbf{v}_i 分别对应特征值与特征向量。将式 (3) 两边同时左乘 $\overline{\Phi}(\mathbf{X})$ 有

$$\overline{\Phi}(\mathbf{X}) \overline{\Phi}(\mathbf{X})^T \overline{\Phi}(\mathbf{X}) \mathbf{v}_i = \zeta_i \overline{\Phi}(\mathbf{X}) \mathbf{v}_i, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (4)$$

根据式 (4) 可以看出 $\zeta_i / (N-1)$ 与 $\overline{\Phi}(\mathbf{X}) \mathbf{v}_i / \|\overline{\Phi}(\mathbf{X}) \mathbf{v}_i\|$ 分别对应 C_Φ 的特征值与特征向量, 即有

$$\begin{cases} \lambda_i = \zeta_i / (N-1) \\ \mathbf{p}_i = \overline{\Phi}(\mathbf{X}) \mathbf{v}_i / \|\overline{\Phi}(\mathbf{X}) \mathbf{v}_i\| = \overline{\Phi}(\mathbf{X}) \mathbf{v}_i / \sqrt{\zeta_i} \end{cases} \quad (5)$$

定义特征空间中的内积满足 $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \Phi(\mathbf{x}_i)^T \Phi(\mathbf{x}_j)$, \mathbf{G} 可以通过式 (6) 计算得到

$$\mathbf{G} = \mathbf{K}(\mathbf{X}) - \frac{1}{N} \mathbf{K}(\mathbf{X}) \mathbf{E}_N - \frac{1}{N} \mathbf{E}_N \mathbf{K}(\mathbf{X}) + \frac{1}{N^2} \mathbf{E}_N \mathbf{K}(\mathbf{X}) \mathbf{E}_N \quad (6)$$

其中, $\mathbf{K}(\mathbf{X}) \in \mathcal{R}^{N \times N}$ 满足 $\mathbf{K}(\mathbf{X})_{i,j} = K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ 。注意到计算 \mathbf{G} 、 ζ_i 和 \mathbf{v}_i 只需要核函数 $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ 的形式而与 $\Phi(\mathbf{x})$ 的具体形式无关, 而 $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ 只涉及原样本空间中的 \mathbf{x}_i , 常见的定义包括径向基函数核、多项式核以及 Sigmoid 核等^[9]。

通过式 (5) 得到 KPCA 的特征值和特征方向

后, 新样本 z 在特征空间中的非线性主元 t 可通过式 (7) 计算

$$\begin{aligned} t &= \mathbf{P}^T [\Phi(z) - m_\phi] = \\ A^T \Phi(\mathbf{X})^T [\Phi(z) - \frac{1}{N} \Phi(\mathbf{X}) \mathbf{1}_N] &= \\ A^T [k(\mathbf{X}, z) - \frac{1}{N} \mathbf{K}(\mathbf{X}) \mathbf{1}_N] & \quad (7) \\ \mathbf{P} &= [p_1, p_2, \dots, p_r] = \\ \bar{\Phi}(\mathbf{X}) [v_1 / \sqrt{\zeta_1}, v_2 / \sqrt{\zeta_2}, \dots, v_r / \sqrt{\zeta_r}] &= \\ [\Phi(\mathbf{X}) - \frac{1}{N} \Phi(\mathbf{X}) \mathbf{E}_N] \mathbf{V} &= \Phi(\mathbf{X}) \mathbf{A} \quad (8) \end{aligned}$$

其中, r 为保留的核主元数目, \mathbf{P} 为核投影矩阵, $\mathbf{A} = [\mathbf{I} - \frac{1}{N} \mathbf{E}_N] \mathbf{V}$, $k(\mathbf{X}, z)$ 表示建模样本 \mathbf{X} 与新样本 z 的内积向量, 即 $k(\mathbf{X}, z) = [K(x_1, z), K(x_2, z), \dots, K(x_N, z)]^T$. 注意计算 t 时需要新样本 z 与所有建模样本 \mathbf{X} 的内积, 在建模样本较多时计算量很大, 不利于 KPCA 的在线实施. 为解决该问题, 可采用简约集合法 (reduced set)^[9] 对 KPCA 模型进行简化, 简化后的模型计算 t 时只需 z 与部分建模样本 \mathbf{X} 的内积.

与线性 PCA 类似, KPCA 用于过程监控时定义如下 T^2 与 Q 统计量

$$\begin{aligned} T^2 &= t^T \text{diag}^{-1}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_r) t \\ Q &= [\Phi(z) - m_\phi]^T (\mathbf{I} - \mathbf{P} \mathbf{P}^T) [\Phi(z) - m_\phi] = \\ K(z, z) - \frac{2}{N} \mathbf{1}_N^T k(\mathbf{X}, z) + \frac{1}{N^2} \mathbf{1}_N^T \mathbf{K}(\mathbf{X}) \mathbf{1}_N - t^T t & \quad (9) \end{aligned}$$

当非线性主元 t 满足正态分布的条件时, T^2 满足 F 分布

$$T^2 \sim \frac{r(N^2 - 1)}{N(N - r)} F_{r, N-r} \quad (10)$$

而 Q 统计量的分布满足 χ^2 分布

$$Q \sim g \chi_h^2 \quad (11)$$

其中, gh 与 $2g^2h$ 分别对应样本 Q 统计量的均值和方差.

2 递归核主元分析

传统 KPCA 需要求取式 (6) 中 $N \times N$ 矩阵的特征值分解, 对于过程工业来说, 由于温度、流量信号的采样间隔通常为秒级, 实际建模数据的样本数目 N 会很大, 这导致 KPCA 计算分解过程十分耗时, 以目前特征值分解效率最高的 Lanczos 算法为例^[10], 其计算复杂度仍达到 $O(N^3)$, 不利于 KPCA 建模的在线实施. 另外, 传统 KPCA 算法缺少有效的模型更新算法, 在实际应用中需要更新监控模型时, 一般需要重新计算整个 KPCA 模型,

不利于时变对象的自适应监控. 本节在递归奇异值分解^[11]的基础上, 提出了一种新的核空间内的递归 KPCA 算法, 其计算复杂度与 KPCA 相比大大降低, 保证了 KPCA 监控模型的在线更新.

2.1 递归奇异值分解

令 $\mathbf{X} = [x_1, x_2, \dots, x_N] \in \mathcal{R}^{n \times N}$ 为样本矩阵, 其奇异值分解满足 $\mathbf{X} = \mathbf{U} \mathbf{\Sigma} \mathbf{D}^T$. \mathbf{X} 的 m 维近似为

$$\mathbf{X} \approx \mathbf{X}_m = \mathbf{U}_m \mathbf{\Sigma}_m \mathbf{D}_m^T \quad (12)$$

其中, \mathbf{U}_m 、 \mathbf{D}_m 为 \mathbf{U} 与 \mathbf{D} 的前 m 列. $\mathbf{\Sigma}_m = \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_m)$ 为 \mathbf{X} 的最大的 m 个特征值. 注意到如果 \mathbf{X} 是零均值的, 那么 \mathbf{U}_m 即为 \mathbf{X} 的 PCA 投影矩阵, 另外当 \mathbf{X} 的后 $n - m$ 个奇异值均为零时, \mathbf{X} 是严格等于 \mathbf{X}_m 的.

假设新样本为 y , 则更新后的样本矩阵 $[\mathbf{X}_m \ y]$ 的奇异值分解可以表示为

$$[\mathbf{X}_m \ y] = [\mathbf{U}_m \ u] \begin{bmatrix} \mathbf{\Sigma}_m & \mathbf{U}_m^T y \\ \mathbf{0}_m^T & g \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{D}_m & \mathbf{0}_N \\ \mathbf{0}_m^T & 1 \end{bmatrix}^T \quad (13)$$

其中, $\mathbf{0}_m$ 表示 m 维的全零列向量, $g = \|(I - \mathbf{U}_m \mathbf{U}_m^T) y\| = \sqrt{y^T (I - \mathbf{U}_m \mathbf{U}_m^T) y}$, $u = (I - \mathbf{U}_m \mathbf{U}_m^T) y / g$.

令 $\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \mathbf{\Sigma}_m & \mathbf{U}_m^T y \\ \mathbf{0}_m^T & g \end{bmatrix}$, 将 \mathbf{F} 的奇异值分解 $\mathbf{F} = \mathbf{U}' \mathbf{\Sigma}' \mathbf{D}'^T$ 代入式 (13), 可以得到更新后样本矩阵的奇异值分解为

$$[\mathbf{X}_m \ y] = [\mathbf{U}_m \ u] \mathbf{U}' \mathbf{\Sigma}' \mathbf{D}'^T \begin{bmatrix} \mathbf{D}_m & \mathbf{0}_N \\ \mathbf{0}_m^T & 1 \end{bmatrix}^T = \mathbf{U}'' \mathbf{\Sigma}'' \mathbf{D}''^T \quad (14)$$

将 \mathbf{U}_m 、 \mathbf{D}_m 采用 \mathbf{U}'' 、 \mathbf{V}'' 的前 m 列向量, $\mathbf{\Sigma}''$ 用 $\mathbf{\Sigma}'$ 的前 m 个对角元素更新后, 式 (13)、式 (14) 便可以用于对下一个新样本的 SVD 更新.

2.2 递归核主元分析算法

将递归 SVD 分解算法推广到核空间内, 提出一种新的递归 KPCA 算法用于更新 \mathbf{C}_ϕ 的特征值分解.

令 $\Phi(y)$ 为新样本 y 在特征空间中的投影, 样本特征均值 m_ϕ 和协方差阵 \mathbf{C}_ϕ 分别通过式 (15) 进行更新

$$m'_\phi = \frac{1}{N+1} \Phi([\mathbf{X}, y]) \mathbf{1}_{N+1} = \frac{N}{N+1} m_\phi + \frac{1}{N+1} \Phi(y) \quad (15)$$

$$\mathbf{C}'_\phi = \frac{1}{N} \bar{\Phi}([\mathbf{X}, y]) \bar{\Phi}([\mathbf{X}, y])^T =$$

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\Phi(x_i) - m'_\phi)(\Phi(x_i) - m'_\phi)^T + \\
 & \frac{1}{N} (\Phi(y) - m'_\phi)(\Phi(y) - m'_\phi)^T = \\
 & \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\Phi(x_i) - m_\phi + \frac{1}{N+1} m_\phi - \frac{1}{N+1} \Phi(y) \right) \times \\
 & \left(\Phi(x_i) - m_\phi + \frac{1}{N+1} m_\phi - \frac{1}{N+1} \Phi(y) \right)^T + \\
 & \frac{1}{N} \left(\frac{N}{N+1} \Phi(y) - \frac{N}{N+1} m_\phi \right) \left(\frac{N}{N+1} \Phi(y) - \frac{N}{N+1} m_\phi \right)^T = \\
 & \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\Phi(x_i) - m_\phi)(\Phi(x_i) - m_\phi)^T + \\
 & \frac{1}{N+1} (\Phi(y) - m_\phi)(\Phi(y) - m_\phi)^T = \\
 & \frac{N-1}{N} C_\phi + \frac{1}{N+1} (\Phi(y) - m_\phi)(\Phi(y) - m_\phi)^T = \\
 & \frac{N-1}{N} \left[\sqrt{\frac{1}{N-1}} \bar{\Phi}(X) \sqrt{\frac{N}{N^2-1}} (\Phi(y) - m_\phi) \right] \times \\
 & \left[\sqrt{\frac{1}{N-1}} \bar{\Phi}(X) \sqrt{\frac{N}{N^2-1}} (\Phi(y) - m_\phi) \right]^T \quad (16)
 \end{aligned}$$

根据式 (5) 与式 (12), $\sqrt{\frac{1}{N-1}} \bar{\Phi}(X)$ 的 m 维 ($m > r$ 通常远小于 N) 近似为

$$\sqrt{\frac{1}{N-1}} \bar{\Phi}(X) \approx \sqrt{\frac{1}{N-1}} \bar{\Phi}_m(X) = P_m \Sigma_{\phi_m} D_{\phi_m} \quad (17)$$

其中, $P_m = \Phi(X) A_m$ 为式 (8) 定义的前 m 个投影向量构成的矩阵, $\Sigma_{\phi_m} = \text{diag}(\sqrt{\lambda_1}, \sqrt{\lambda_2}, \dots, \sqrt{\lambda_r})$, D_{ϕ_m} 为具有对应维数的右奇异阵。根据式 (13)、式 (16)、式 (17) 有

$$\begin{aligned}
 & \left[\sqrt{\frac{1}{N-1}} \bar{\Phi}(X) \sqrt{\frac{N}{N^2-1}} (\Phi(y) - m_\phi) \right] \approx \\
 & \left[\sqrt{\frac{1}{N-1}} \bar{\Phi}_m(X) \sqrt{\frac{N}{N^2-1}} (\Phi(y) - m_\phi) \right] = \\
 & [P_m u_\phi] \begin{bmatrix} \Sigma_{\phi_m} & P_m^T \Phi(y) \\ \mathbf{0}_m^T & g_\phi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} D_{\phi_m} & \mathbf{0}_N \\ \mathbf{0}_m^T & 1 \end{bmatrix}^T \quad (18)
 \end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned}
 g_\phi &= \left\| (I - P_m P_m^T) \sqrt{\frac{N}{N^2-1}} (\Phi(y) - m_\phi) \right\| = \\
 & \sqrt{\frac{N}{N^2-1}} \left\| (I - P_m P_m^T) (\Phi(y) - m_\phi) \right\| = \\
 & \sqrt{\frac{N}{N^2-1}} \left\| \Phi(y) - \frac{1}{N} \Phi(X) \mathbf{1}_N - \right.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \left. \Phi(X) A_m A_m^T (\Phi(X)^T \Phi(y) - \frac{1}{N} \Phi(X)^T \Phi(X) \mathbf{1}_N) \right\| = \\
 & \sqrt{\frac{N}{N^2-1}} \left\| \Phi(y) - \frac{1}{N} \Phi(X) \mathbf{1}_N - \right. \\
 & \left. \Phi(X) A_m A_m^T (k(X, y) - \frac{1}{N} K(X) \mathbf{1}_N) \right\| = \\
 & \sqrt{\frac{N}{N^2-1}} \left\| \Phi(y) - \Phi(X) B \right\| =
 \end{aligned}$$

$$\sqrt{\frac{N}{N^2-1}} \sqrt{K(y, y) - 2B^T k(X, y) + B^T K(X) B} \quad (19)$$

$$\begin{aligned}
 u_\phi &= \frac{1}{g_\phi} \sqrt{\frac{N}{N^2-1}} (I - P_m P_m^T) (\Phi(y) - m_\phi) = \\
 & \frac{1}{g_\phi} \sqrt{\frac{N}{N^2-1}} [\Phi(y) - \Phi(X) B] \quad (20)
 \end{aligned}$$

$$B = \frac{1}{N} \mathbf{1}_N + A_m A_m^T (k(X, y) - \frac{1}{N} K(X) \mathbf{1}_N) \quad (21)$$

令 $F_\phi = \begin{bmatrix} \Sigma_{\phi_m} & P_m^T \Phi(y) \\ \mathbf{0}_m^T & g_\phi \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Sigma_{\phi_m} & A_m^T k(X, y) \\ \mathbf{0}_m^T & g_\phi \end{bmatrix}$ 的奇异

值分解为 $F_\phi = U'_\phi \Sigma'_\phi D'^T_\phi$, 代入式 (18)

$$\begin{aligned}
 & \left[\sqrt{\frac{1}{N-1}} \bar{\Phi}_m(X) \sqrt{\frac{N}{N^2-1}} (\Phi(y) - m_\phi) \right] = \\
 & \left[\Phi(X) A_m \quad \frac{1}{g_\phi} \sqrt{\frac{N}{N^2-1}} (\Phi(y) - \Phi(X) B) \right] \times \\
 & U'_\phi \Sigma'_\phi D'^T_\phi \begin{bmatrix} D_{\phi_m} & \mathbf{0}_N \\ \mathbf{0}_m^T & 1 \end{bmatrix}^T = \\
 & \Phi([X y]) \begin{bmatrix} A_m & -\frac{1}{g_\phi} \sqrt{\frac{N}{N^2-1}} B \\ \mathbf{0}_m^T & \frac{1}{g_\phi} \sqrt{\frac{N}{N^2-1}} \end{bmatrix} \times \\
 & U'_\phi \Sigma'_\phi D'^T_\phi \begin{bmatrix} D_{\phi_m} & \mathbf{0}_N \\ \mathbf{0}_m^T & 1 \end{bmatrix}^T \quad (22)
 \end{aligned}$$

则有更新后的 KPCA 投影方向 P'_m 为

$$\begin{aligned}
 P'_m &= \Phi([X y]) \begin{bmatrix} A_m & -\frac{1}{g_\phi} \sqrt{\frac{N}{N^2-1}} B \\ \mathbf{0}_m^T & \frac{1}{g_\phi} \sqrt{\frac{N}{N^2-1}} \end{bmatrix} U'_\phi = \\
 & \Phi([X y]) A'_m \quad (23)
 \end{aligned}$$

通过式 (22) 得到更新后的 KPCA 的特征值和特征方向后, 令 A' 为 A'_m 的前 r 列, 有新样本 z 在特征空间中的 r 维非线性主元 t 为

$$\begin{aligned}
 t &= P'^T [\Phi(z) - m'_\phi] = \\
 & A'^T \begin{bmatrix} \Phi(X)^T \\ \Phi(y)^T \end{bmatrix} \left[\Phi(z) - \frac{1}{N+1} \Phi(X) \mathbf{1}_N - \frac{1}{N+1} \Phi(y) \right] = \\
 & A'^T \begin{bmatrix} k(X, z) - \frac{1}{N+1} K(X) \mathbf{1}_N - \frac{1}{N+1} k(X, y) \\ K(y, z) - \frac{1}{N+1} k(X, y)^T \mathbf{1}_N - \frac{1}{N+1} K(y, y) \end{bmatrix} \quad (24)
 \end{aligned}$$

根据式 (22), 递归 KPCA 算法在更新模型时, 仅需要计算 $F_\phi \in \mathfrak{R}^{(m+1) \times (m+1)}$ 的奇异值分解, 当采用 Lanczos 算法时, 其计算复杂度为 $O(m^3)$ 。对于 KPCA 来说, 通常远小于 N 的 m 便可以保证式 (17) 的精确性, 因此递归 KPCA 算法的计算复杂度将远小于 KPCA 的 $O(N^3)$ 。

3 仿真研究

Alstom Gasifer (燃气发生过程, 以下简称 AG) 是由英国 Alstom 电力公司的 Pike 等^[12]多位工程师根据工业实际和燃气发生机理提出的, 模型最早由 ACSL (advanced continuous simulation language) 语言编写, 后被移植到 MATLAB 平台上^[13]。由于 AG 模型考虑了燃气发生过程所有典型步骤 (如干燥过程、脱硫过程、裂解过程、气化过程等), 并经过试验数据验证, 过程本身具有多变量、非线性的特点, 因此成为研究各种控制算法的一个标准问题^[14-16], 也为分析监控算法提供了一个标准平台。

AG 过程包括 5 个控制变量 (分别为煤、石灰石、空气、水蒸气和焦炭的流量), 4 个被控变量 (分别为压力、温度、床负载、燃气热值), 控制变量和被控变量存在复杂的耦合关系。由于添加石灰石的目的在于脱去煤中所含的硫, 石灰石的输入速率和煤的输入速率要固定在 1:10, 因此 AG 过程需要设计一个 4×4 的控制系统。本文采用文献^[13]提出的 PI 控制方案, 添加测量噪声后, 产生过程监控所需的建模数据, 采样时间为 2 s, 共产生了 1000 个样本, 监控变量包括所有的控制与被控变量共 9 个。

为了分析 AG 过程的非线性对 PCA 监控所造成的影响, 本文首先分别采用 PCA 与 KPCA 算法建立过程监控模型, 其中 PCA 的主元数目根据交叉检验法取为 3, KPCA 算法的核形式取为 RBF 核 $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \exp\left[-\frac{1}{\gamma}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)^T(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j)\right]$, $\gamma=300$, KPCA 主元数目 $r=7$ 。AG 过程的燃气输出为后续的燃气轮机提供燃料, 为了保证燃气轮机的正常工作, 稳定的燃气压力是十分重要的, 监控算法必须及时地检测出燃气出口由于阀泄漏、阀黏滞等原因造成的压力异常波动。

图 1 与图 2 分别为采用 PCA 与 KPCA 算法对 AG 过程出口燃气压力阶跃变动的监控结果, 阶跃幅度为 -0.01 MPa, 在第 500 个采样即 1000 s 处引入。图中的水平线代表 99% 的控制限, 如图 1 所示, 虽然 PCA 的 T^2 与 SPE 统计量在后 500 个采样出现一定程度的增加, 但是并没有及时地检测出过程故障 (无论 T^2 还是 SPE 超出控制限的比例都没有明显增加, 仍然吻合于建模时设定的显著程

度 1%)。而图 2 给出的 KPCA 监控结果表明, 在 500 个采样过后, SPE 统计量超限的比例明显增加, 即新样本的分布和建模样本相比发生了很大变化, KPCA 准确地检出了过程出现的异常状况, 故障检出的滞后为 100 s (对应 50 个采样)。

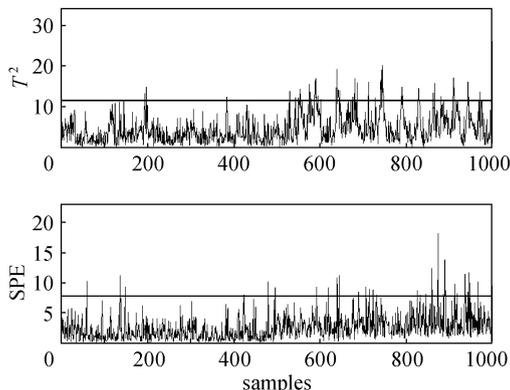


图 1 PCA 对出口燃气压力阶跃变动的监控结果
Fig. 1 PCA monitoring charts for step decrease of output gas pressure

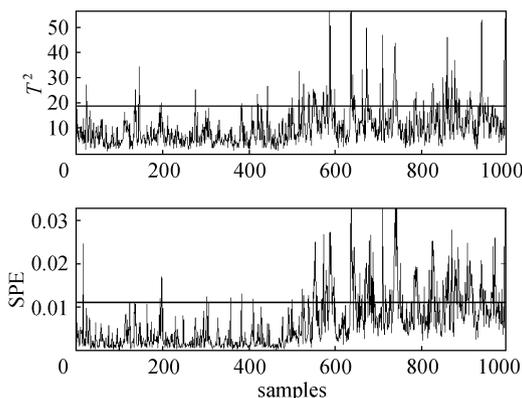


图 2 KPCA 对出口燃气压力阶跃变动的监控结果
Fig. 2 KPCA monitoring charts for step decrease of output gas pressure

造成 PCA 算法无法检测过程故障的原因在于, AG 过程本身具有较强的非线性特性, 采用 PCA 建模方法不足以描述过程数据内在的非线性关系, 也无法体现出过程故障对这种非线性关系造成的破坏作用。而 KPCA 将原始数据通过核方法映射到特征空间后, 数据间的非线性关系得到了充分的描述。

KPCA 算法的不足在于其所描述的非线性关系是静态的, 而时变非线性过程变量之间的关系会随着过程的进行不断改变, 过程的正常工况范围 (normal operation condition, NOC) 亦会随之改变, 这就导致采用确定 KPCA 模型监控时变非线

性过程时出现频繁的误警与漏报, 影响整个监控系统的性能。对于 AG 过程来说, 煤是制造燃气的重要原料, 在实际过程中, 根据来源不同, 煤的燃烧值等质量指标通常会在正常范围内出现一定变化, 监控系统必须能够适应、跟踪这种变化, 给出正确的监控结果。

图 3、图 4 分别是 KPCA 算法与 RKPCA 算法在煤质量发生斜坡 (ramp) 变化时的监控结果, 斜坡变化从 250 个采样点开始到 750 个采样点结束, 累计下降了 6%。RKPCA 采用 KPCA 模型作为初始模型, 核形式与主元数目和 KPCA 相同, 用于递归更新时的 $m=15$, 解释了 $\Phi(\mathbf{X})$ 96.3% 的变化方差, 保证了模型递归更新的精确性。图中的水平线仍代表 99% 的控制限。

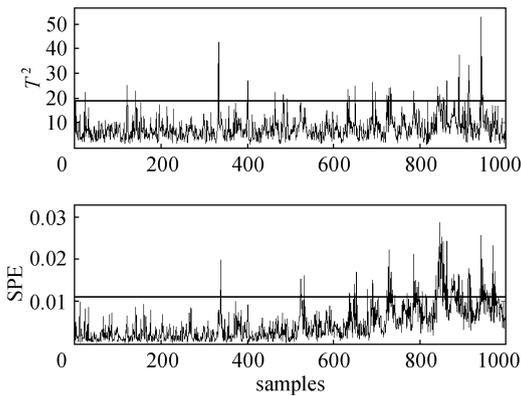


图 3 KPCA 对燃煤质量斜坡变化的监控结果
Fig. 3 KPCA monitoring charts for ramp change of coal quality

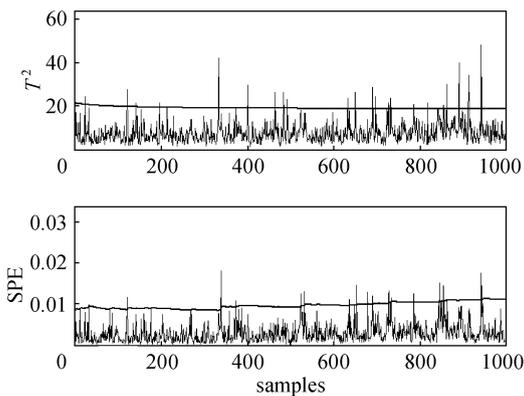


图 4 RKPCA 对燃煤质量斜坡变化的监控结果
Fig. 4 RKPCA monitoring charts for ramp change of coal quality

通过比较图 3 和图 4 可以看出, KPCA 由于不具备递归更新的能力, 在燃煤质量下降时无法跟踪过程正常工况的变化, 进而导致 SPE 统计量在 700

个采样过后不断超限, 过高的误警率降低了监控系统的可靠性。而 RKPCA 由于能够根据过程的新采样来逐步更新监控模型, 从而准确反映了过程工况所发生的变化, 误警率吻合于事先设置的水平。另外, 与 KPCA 不同, RKPCA 用于过程监控时统计量的控制限会随着过程的进行不断更新。

4 结 论

提出了一种实时的递归 KPCA (RKPCA) 算法解决时变非线性过程的自适应监控问题, 克服了传统 KPCA 模型更新耗时, 不利于在线使用的不足。在 AG 工业燃气发生过程上的监控应用表明, 所提出的 RKPCA 算法能够及时跟踪非线性过程的时变特征, 保证了监控模型在过程变化时的有效性。

References

- [1] Nomikos P, MacGregor J F. Monitoring of batch processes using multi-way principal component analysis. *AIChE Journal*, 1994, **40** (8): 1361-1375
- [2] Li W, Yue H H, Valle-Cervantes S, Qin S J. Recursive PCA for adaptive process monitoring. *Journal of Process Control*, 2000, **10** (5): 471-486
- [3] Joe Qin S. Recursive PLS algorithms for adaptive data modeling. *Computers & Chemical Engineering*, 1998, **22** (4/5): 503-514
- [4] Krammer M A. Nonlinear principal component analysis using autoassociative neural networks. *AIChE Journal*, 1991, **37** (2): 233-243
- [5] Dong D, McAvoy T J. Nonlinear principal component analysis—based on principal curves and neural networks. *Computers & Chemical Engineering*, 1996, **20** (1): 65-78
- [6] Yoo C K, Lee I-B. Nonlinear multivariate filtering and bioprocess monitoring for supervising nonlinear biological processes. *Process Biochemistry*, 2006, **41** (8): 1854-1863
- [7] Choi S W, Lee C, Lee J-M, Park J H, Lee I-B. Fault detection and identification of nonlinear processes based on kernel PCA. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2005, **75** (1): 55-67
- [8] Cho J-H, Lee J-M, Wook Choi S, Lee D, Lee I-B. Fault identification for process monitoring using kernel principal component analysis. *Chemical Engineering Science*, 2005, **60** (1): 279-288
- [9] Schölkopf B, Smola A J. *Learning with Kernels: Support Vector Machines, Regularization, Optimization and Beyond*. Cambridge, Massachusetts: The MIT Press, 2002

- [10] Golub G H, Van Loan C F. *Matrix Computation*. Baltimore and London: The John Hopkins University Press, 1996
- [11] Brand M., Incremental singular value decomposition of uncertain data with missing values//7th European Conference on Computer Vision (ECVV). Copenhagen Denmark: Springer, 2002
- [12] Pike A W, Donne M S, Dixon R. Dynamic modelling and simulation of the air blown gasification cycle prototype integrated plant//International Conference on Simulation. London: York University, IEE Press, 1998: 354-361
- [13] Dixon R, Pike A W. Alstom Benchmark Challenge II on gasifier control. *Control Theory and Applications, IEE Proceedings*, 2006, **153** (3): 254-261
- [14] Taylor C J, Shaban E M. Multivariable proportional-integral-plus (PID) control of the Alstom nonlinear gasifier simulation. *Control Theory and Applications, IEE Proceedings*, 2006, **153** (3): 277-285
- [15] Seyab R K A, Cao Y, Yang S H. Predictive control for the Alstom gasifier problem. *Control Theory and Applications, IEE Proceedings*, 2006, **153** (3): 293-301
- [16] Farag A, Werner H. Structure selection and tuning of multi-variable PID controllers for an industrial benchmark problem. *Control Theory and Applications, IEE Proceedings*, 2006, **153** (3): 262-267