



Monitorowanie i Diagnostyka w Systemach Sterowania

**Wydział Elektrotechniki i Automatyki
Katedra Elektrotechniki, Systemów Sterowania i Informatyki
dr hab. inż. Michał Grochowski**

Monitorowanie i Diagnostyka w Systemach Sterowania

na studiach II stopnia specjalności: Systemy Sterowania i Podejmowania Decyzji

Zastosowanie PCA dla celów diagnostyki

na podstawie:

Haykin, S. Neural Networks and Learning Machines. Pearson Prentice Hall, 2009

oraz

Jackson, J.E., A User's Guide to Principal Components, Wiley-Interscience (New York), 1991

Opracował: dr inż. Michał Grochowski

kiss.pg.mg@gmail.com

michal.grochowski@pg.edu.pl

tel: 58 347 23 57

Wprowadzenie do Analizy Składników Podstawowych:

Zakładamy że mamy n pomiarów o rozmiarze m :

$$\begin{array}{c}
 \text{Kolejne pomiary} \\
 X = \begin{bmatrix} x_{1,1} & \cdots & x_{1,n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{m,1} & \cdots & x_{m,n} \end{bmatrix} \\
 \text{zmienne}
 \end{array}$$

m – jest duże, ... , za duże

Celem jest redukcja ilości zmiennych do np. l zmiennych.

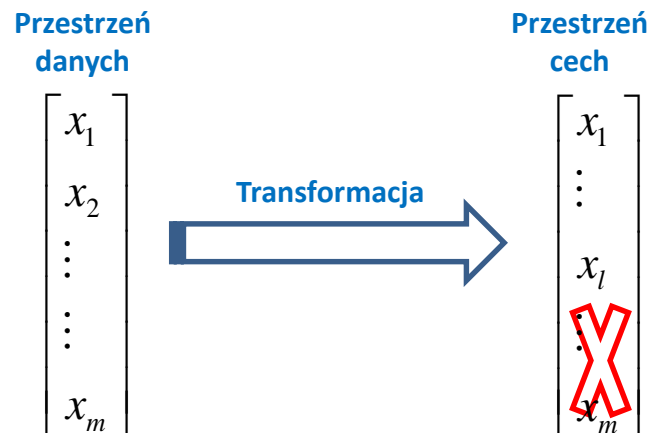
Jak to efektywnie zrobić ??

- ile danych odrzucić ?
- które ?

aby nie utracić ważnych informacji o obiekcie

Wprowadzenie do Analizy Składników Podstawowych:

- Jeżeli odrzucamy któreś z danych, w opisie obiektu wprowadzamy „jakiś” błąd;
- Sztuka polega na tym aby wybrać dane najbardziej cenne z punktu widzenia ilości informacji o procesie i odrzucić takie dane (i tyle danych) aby błąd odwzorowania procesu był jak najmniejszy;
- Nie da się tego efektywnie zrobić w przestrzeni pomiarów, więc należy przetransformować je do przestrzeni cech i tam spróbować je „jakoś” wybrać;



Wprowadzenie do Analizy Składników Podstawowych:

- Wyobraźmy sobie wektor transformacji (również odwrotnej) T który dokona transformacji wektora pomiarów X do nowej przestrzeni w postaci wektora X_{new} ;

$$\vec{T} \cdot \vec{X} = \vec{X}_{new}$$

- Transformacja powinna być optymalna w sensie minimalizacji popełnianego błędu średniokwadratowego;
- Wektor X_{new} powinien być po transformacji T , np. tak „zorganizowany” aby pierwsze l punktów niosło najwięcej informacji o procesie. Pozostałe $m-l$ można by zaniedbać.

Przestrzeń
danych

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix}$$

Transformacja



Przestrzeń
cech

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_l \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix}$$

Rozmiary macierzy:

$$\vec{T} = \begin{bmatrix} \quad \end{bmatrix}_{[m,m]}$$

$$\vec{X} = \begin{bmatrix} \quad \end{bmatrix}_{[m,1]}$$

$$\vec{X}_{new} = \begin{bmatrix} \quad \end{bmatrix}_{[m,1]}$$

Wprowadzenie do Analizy Składników Podstawowych:

Nieco teorii pozwalającej na zaprojektowanie odpowiedniej transformacji

Dany jest m -wymiarowy, wektor wartości losowych opisujących dany proces:

$$\vec{X}$$

Zakładamy wartość oczekiwaną procesu (zmiennych) równą 0:

$$E[\vec{X}] = 0$$

Wprowadzamy m -wymiarowy wektor jednostkowy:

$$\vec{q}$$

Norma takiego wektora w przestrzeni Euklidesowej wynosi:

$$\|\vec{q}\| = 1$$

$$\|\vec{q}\| = \sqrt{(\vec{q}^T \cdot \vec{q})} = 1$$

Wprowadzenie do Analizy Składników Podstawowych:

Projekcja przestrzeni X na przestrzeń q :

$$A = \bar{X}^T \vec{q} = \vec{q}^T \bar{X}$$

Wartość oczekiwana w nowej przestrzeni:

$$E[A] = E[\vec{q}^T \bar{X}] = \vec{q}^T E[\bar{X}] = 0$$

Wariancja w nowej przestrzeni:

$$\sigma^2 = E[A^2] = E[(\vec{q}^T \bar{X})(\bar{X}^T \vec{q})] = \vec{q}^T E[\bar{X}\bar{X}^T] \vec{q} = \vec{q}^T R \vec{q} \quad (*)$$

Macierz korelacji R :

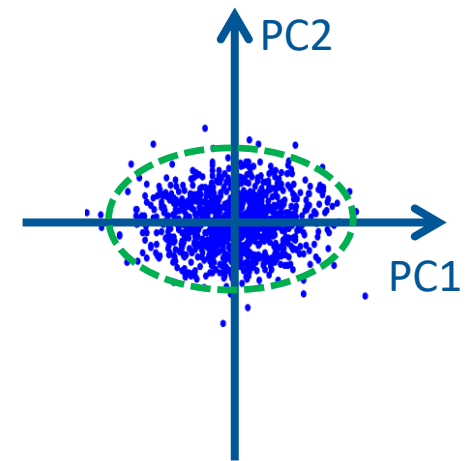
$$\vec{R} = E[\bar{X}\bar{X}^T]$$

R jest symetryczna, więc:

$$\vec{R}^T = \vec{R}$$

Użyteczna własność:

$$\vec{a}^T \vec{R} \vec{b} = \vec{b}^T \vec{R} \vec{a}$$



Rozmiary macierzy:

$$\vec{q} = \begin{bmatrix} \end{bmatrix}_{[m,1]}$$

$$\vec{R} = \begin{bmatrix} \end{bmatrix}_{[m,m]}$$

$$\vec{a} = \begin{bmatrix} \end{bmatrix}_{[m,1]}$$

$$\vec{b} = \begin{bmatrix} \end{bmatrix}_{[m,1]}$$

Wprowadzenie do Analizy Składników Podstawowych:

- Chcielibyśmy tak „zorganizować” dane aby były ułożone malejąco pod względem wariancji (minimalizować $q^T R q$);
- Na R nie mamy wpływu, możemy jedynie odpowiednio dobrać q.
Z (*) widzimy że wariancja jest pewną funkcją wektora jednostkowego q.
- Zdefiniujmy więc funkcję $\varphi(\bullet)$ zależną od q, postaci:

$$\varphi(\vec{q}) = \vec{q}^T R \vec{q} = \sigma^2 \quad (1)$$

- Odpowiednio „manipulując” $\varphi(q)$ szukamy ekstremum (minimum) wariancji danych zbioru X. W ekstremum (minimum wariancji) zachodzi:

$$\varphi(\vec{q} + \delta\vec{q}) = \varphi(\vec{q}) \quad (2)$$

- Wykorzystując (1) i (2), możemy napisać:

$$\begin{aligned} \varphi(\vec{q} + \delta\vec{q}) &= (\vec{q} + \delta\vec{q})^T \vec{R}(\vec{q} + \delta\vec{q}) = \\ &= \vec{q}^T R \vec{q} + 2(\delta\vec{q})^T R \vec{q} + (\delta\vec{q})^T R (\delta\vec{q}) \\ &= \varphi(\vec{q}) + 2(\delta\vec{q})^T R \vec{q} = \vec{q}^T R \vec{q} \end{aligned} \quad (3)$$

Wprowadzenie do Analizy Składników Podstawowych:

- Stąd zachodzi (w ekstremum):

$$(\delta\vec{q})^T R\vec{q} = 0 \quad (4)$$

q jest wektorem jednostkowym, więc:

$$\|\varphi(\vec{q} + \delta\vec{q})\| = 1$$

lub inaczej:

$$(\vec{q} + \delta\vec{q})^T (\vec{q} + \delta\vec{q}) = 1$$

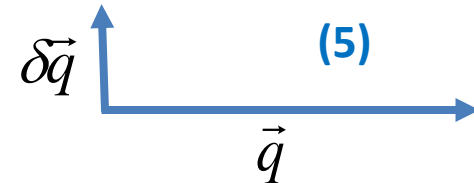
rozwijając:

$$\vec{q}^T \vec{q} + 2(\delta\vec{q})^T \vec{q} + (\delta\vec{q})^T (\delta\vec{q}) = 1$$

więc:

$$(\delta\vec{q})^T \vec{q} = 0 \quad (5)$$

Wektory muszą być do siebie ortogonalne



Wprowadzenie do Analizy Składników Podstawowych:

Wykorzystując (4) i (5) oraz wprowadzając pewien wektor pomocniczy λ (skalar, tego samego rozmiaru co wejścia macierzy R), możemy napisać:

$$(\delta\vec{q})^T R\vec{q} - \lambda(\delta\vec{q})^T \vec{q} = 0$$

grupując:

$$(\delta\vec{q})^T [R\vec{q} - \lambda\vec{q}] = 0$$

stąd:

$$R\vec{q} - \lambda\vec{q} = 0$$

więc (w ekstremum):

$$R\vec{q} = \lambda\vec{q} \tag{6}$$

Rozwiązując (6) względem λ otrzymamy wartości własne macierzy korelacji R .

Wprowadzenie do Analizy Składników Podstawowych:

Wartości własne macierzy R :

$$\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$$

i odpowiadające im wektory własne:

$$\vec{q}_1, \vec{q}_2, \dots, \vec{q}_m$$

Rezultatem projekcji X na q jest:

$$R\vec{q}_j = \lambda_j \vec{q}_j \quad j = 1, 2, \dots, m \quad (7)$$

Uzeregujmy λ malejąco:

$$\lambda_1 > \lambda_2 > \lambda_3 > \dots > \lambda_j > \dots > \lambda_m \quad \lambda_1 = \lambda_{\max} \quad itd \dots$$

Zdefiniujemy:

$$\vec{Q} = [\vec{q}_1, \vec{q}_2, \dots, \vec{q}_j, \dots, \vec{q}_m]$$

Rozmiary macierzy:

$$\vec{Q} = \begin{bmatrix} & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \end{bmatrix}_{[m,m]}$$

Wprowadzenie do Analizy Składników Podstawowych:

(7) możemy zapisać jako:

$$R\vec{Q} = \vec{Q}\Lambda \quad (8)$$

gdzie:

$$\Lambda = \text{diag}[\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m]$$

Macierz Q jest ortogonalna, więc zachodzi:

$$\vec{q}_i^T \vec{q}_j = \begin{cases} 1 & j = i \\ 0 & j \neq i \end{cases}$$

oraz:

$$\vec{Q}^T \vec{Q} = \vec{I}$$

$$\vec{Q}^T = \vec{Q}^{-1}$$

Wprowadzenie do Analizy Składników Podstawowych:

Mnożąc lewostronnie (8) przez Q^T :

$$\vec{Q}^T R \vec{Q} = \vec{Q}^T \vec{Q} \vec{\Lambda} = \vec{\Lambda} \quad (9)$$

inaczej:

$$\vec{q}_j^T \vec{R} \vec{q}_k = \begin{cases} \lambda_j & k = j \\ 0 & k \neq j \end{cases}$$

Mnożąc prawostronnie (8) przez Q^T :

$$R \vec{Q} \vec{Q}^T = \vec{Q} \vec{\Lambda} \vec{Q}^T$$

Macierz korelacji można więc wyrazić za pomocą wartości i wektorów własnych R :

$$\vec{R} = \sum_{i=1}^m \lambda_i \vec{q}_i \vec{q}_i^T \quad (10)$$

Wprowadzenie do Analizy Składników Podstawowych:

Z (1):

$$\varphi(\vec{q}) = \vec{q}^T R \vec{q} = \sigma^2$$

otrzymujemy:

$$\varphi(\vec{q}_j) = \lambda_j = \sigma_j^2$$

Wektor własne macierzy korelacji R definiują wektory jednostkowe q_j , reprezentujące podstawowe kierunki wzdłuż których $\phi(q_j)$ osiągają ekstremum.

Tak otrzymana macierz R jest zorganizowana w ten sposób iż pierwsze jej elementy zawierają elementy o największej wariancji (niosą najwięcej informacji o zmienności procesu w kierunku wskazanym przez wektory własne).

W tej przestrzeni łatwo (znacznie łatwiej) jest zredukować rozmiar danych o te najmniej znaczące.

Wprowadzenie do Analizy Składników Podstawowych:

Reprezentacja danych

Rzutowjemy X na q_j -ty wektor (analiza):

$$a_j = \vec{q}_j^T \vec{x} = \vec{x}^T \vec{q}_j \quad j = 1, 2, \dots, m \quad (11)$$

Rezultaty rzutowania (1) nazywamy *Składnikami podstawowymi/głównymi*

a_j - **Principal Component (PC)** (Składnik podstawowy/główny) $a_j \in A$

Analizy dokonujemy poprzez odpowiedni dobór składników podstawowych (PCs).

Wprowadzenie do Analizy Składników Podstawowych:

Po dokonaniu redukcji danych (kompresji), musimy być w stanie dokonać za pomocą PCs, procesu odwrotnego, czyli odtworzyć wektor X :

Najpierw tworzymy zbiór projekcji wektor projekcji:

$$\vec{a} = [\vec{a}_1, \vec{a}_1, \dots, \vec{a}_m]^T = [\vec{x}^T \vec{q}_1, \vec{x}^T \vec{q}_2, \dots, \vec{x}^T \vec{q}_m]^T$$

W postaci macierzowej:

$$\vec{a} = \vec{Q}^T \vec{x} \quad (12)$$

Mnożąc lewostronnie przez Q , otrzymamy:

$$\vec{Q}\vec{a} = \vec{Q}\vec{Q}^T \vec{x} = \vec{x}$$

Otrzymujemy zrekonstruowany zbiór X :

$$\vec{x} = \sum_{j=1}^m a_j \vec{q}_j \quad (13)$$

gdzie q_j stanowią wektory bazowe syntezy wektora X .

Wprowadzenie do Analizy Składników Podstawowych:

$$\vec{x} = \sum_{j=1}^m a_j \vec{q}_j$$

Powyższe stanowi transformację współrzędnych według której, punkt x w przestrzeni danych jest transformowany do odpowiadającego mu punktu a w przestrzeni cech

gdzie q_j stanowią wektory bazowe syntezy wektora X .

Wprowadzenie do Analizy Składników Podstawowych:

Przykład:

Dane losowe a, b o rozkładzie normalnym:

$$a = 10 * \text{randn}(1000, 1);$$

$$b = \text{randn}(1000, 1);$$

Dane a, b obrócone o 75 stopni

Macierz transformacji (obrotu) T:

$$T =$$

$$\begin{bmatrix} \cos(75) & -\sin(75) \\ \sin(75) & \cos(75) \end{bmatrix}$$

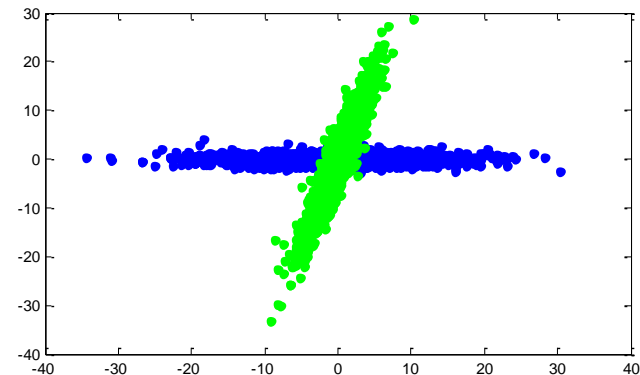
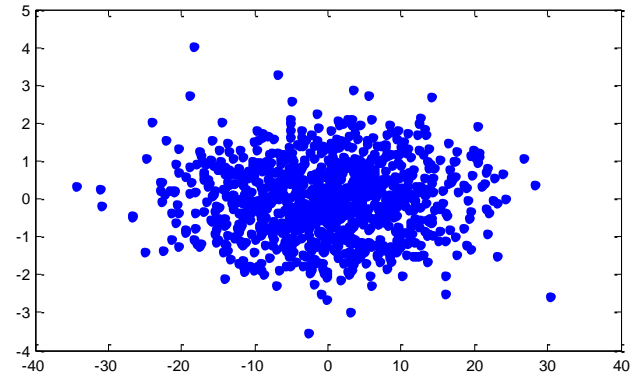
$$T =$$

$$\begin{bmatrix} 0.2588 & 0.9659 \\ 0.9659 & -0.2588 \end{bmatrix}$$

Składowe podstawowe (PCs):

$$\text{COEFF} =$$

$$\begin{bmatrix} 0.2550 & 0.9669 \\ 0.9669 & -0.2550 \end{bmatrix}$$



Wprowadzenie do Analizy Składników Podstawowych:

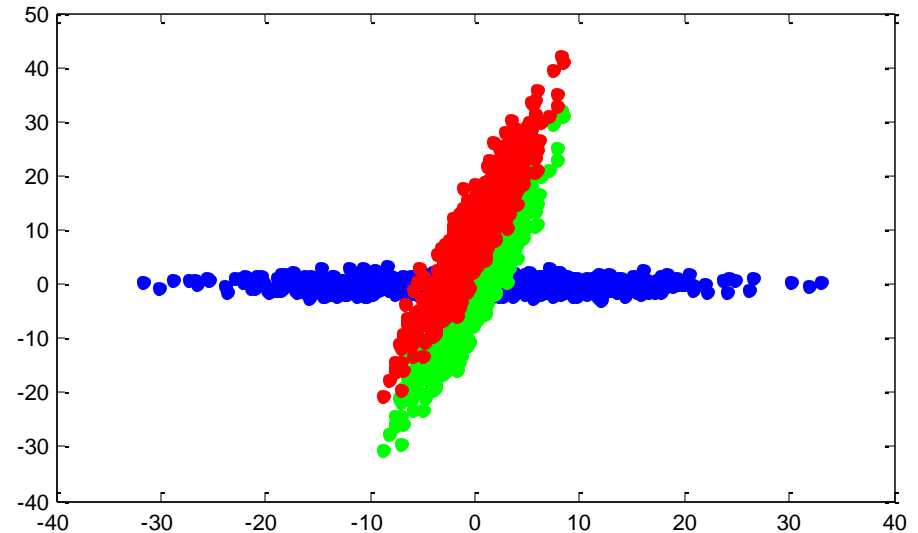
Przykład:

Dane „przesunięte” o 10:

```
a= 10*randn(1000,1) + 10;  
b= randn(1000,1);
```

Składowe podstawowe (PCs):

```
COEFF1 =  
    0.2550    0.9669  
    0.9669   -0.2550
```



Przesunięcie danych nie zmienia składników podstawowych

```
COEFF =  
    0.2550    0.9669  
    0.9669   -0.2550
```

Wprowadzenie do Analizy Składników Podstawowych:

Redukcja rozmiaru danych

Przy pomocy PCA możemy dokonać efektywnej redukcji rozmiaru danych poprzez eliminację tych liniowych kombinacji (z *r-nia 13*) które posiadają niską wariancję.

Niech λ_1 do λ_l oznaczają największe wartości własne macierzy korelacji R ;

Możemy aproksymować X poprzez odrzucenie składników $l+1$ do m :

$$\vec{\hat{x}} = \sum_{j=1}^l a_j \vec{q}_j \quad l \leq m \quad (14)$$

Dokonując transformacji wektora X (m -wymiarowego) do przestrzeni l wymiarowej (osobną sprawą jest wybór l), poprzez projekcję X na wektory bazowe q .

Wprowadzenie do Analizy Składników Podstawowych:

Aproksymacja wektora X :

$$\vec{\hat{x}} = [\vec{q}_1, \vec{q}_2, \dots, \vec{q}_l] \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_l \end{bmatrix} \quad l \leq m \quad (14a)$$

Korzystając z (11) możemy rozpisać wektor składników podstawowych:

$$\begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_l \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vec{q}_1^T \\ \vec{q}_2^T \\ \vdots \\ \vec{q}_l^T \end{bmatrix} \vec{x} \quad l \leq m \quad (15)$$

Rozmiary macierzy:

$$\vec{X} = \begin{bmatrix} \quad \end{bmatrix}_{[1,m]}$$

$$\vec{q} = \begin{bmatrix} \quad \end{bmatrix}_{[m,l]}$$

$$a = \begin{bmatrix} \quad \end{bmatrix}_{[1,l]}$$

Wprowadzenie do Analizy Składników Podstawowych:

Liniowa projekcja (15) z przestrzeni danych do przestrzeni cech ($R^m \rightarrow R^l$)

Wektor
danych
wejściowych

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix}$$

Encoder

$$\begin{bmatrix} \vec{q}_1^T \\ \vec{q}_2^T \\ \vdots \\ \vec{q}_l^T \end{bmatrix}$$

Wektor
składników
podstawowych

$$\begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_l \end{bmatrix}$$

$$l \leq m$$

q_1 do q_m zastępujemy zerami !!!:

Wprowadzenie do Analizy Składników Podstawowych:

Transformacja z przestrzeni z przestrzeni cech do przestrzeni danych ($R^l \rightarrow R^m$)

*Wektor
składników
podstawowych*

$$\begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_l \end{bmatrix}$$

\Rightarrow

Dekoder

$$\begin{bmatrix} \vec{q}_1^T \\ \vec{q}_2^T \\ \vdots \\ \vec{q}_l^T \end{bmatrix}$$

\Rightarrow

*Wektor
danych
zrekonstruowanych*

$$\begin{bmatrix} \vec{\hat{x}}_1 \\ \vec{\hat{x}}_2 \\ \vdots \\ \vec{\hat{x}}_m \end{bmatrix}$$

Wprowadzenie do Analizy Składników Podstawowych:

Błąd popełniany podczas aproksymacji:

$$\vec{e} = \vec{x} - \hat{\vec{x}} \quad (16)$$

Podstawiając (13) i (14) do (16) otrzymujemy:

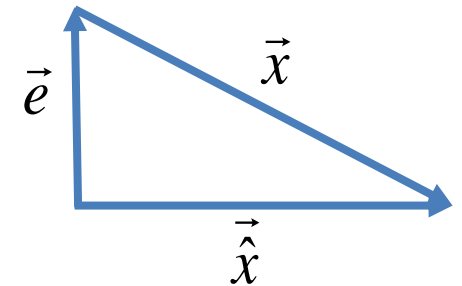
$$\vec{x} = \sum_{j=1}^m a_j \vec{q}_j$$

$$\hat{\vec{x}} = \sum_{j=1}^l a_j \vec{q}_j$$

$$\vec{e} = \sum_{j=1}^m a_j \vec{q}_j - \sum_{j=1}^l a_j \vec{q}_j \quad l \leq m$$

więc:

$$\vec{e} = \sum_{j=l+1}^m a_j \vec{q}_j$$



Błąd e jest ortogonalny do aproksymacji X :

$$\vec{e}^T \hat{\vec{x}} = \sum_{i=l+1}^m a_i \vec{q}_i^T \cdot \sum_{j=1}^l a_j \vec{q}_j = \sum_{i=l+1}^m \sum_{j=1}^l a_i a_j \vec{q}_i^T \vec{q}_j = 0$$

Wprowadzenie do Analizy Składników Podstawowych:

Wariancja całkowita wektora X (m - elementowego):

$$\sum_{j=1}^m \sigma_j^2 = \sum_{j=1}^m \lambda_j$$

σ_j^2 jest wariancją j -tego składnika głównego a_j

Wariancja całkowita wektora $\vec{\hat{x}}$ (l - elementowego):

$$\sum_{j=1}^l \sigma_j^2 = \sum_{j=1}^l \lambda_j$$

Wariancja całkowita elementów $m-l$ wektora X (elementów „odrzuconych”):

$$\sum_{j=l+1}^m \sigma_j^2 = \sum_{j=l+1}^m \lambda_j$$

Mean Square Error (MSE) =
 Square Prediction Error (SPE) =
 Sumie kwadratów a_j (Zscores)

**Taki błąd popełniamy przy redukcji wymiaru
wektora X do l istotnych elementów !!**

Procedura budowy modelu PCA

- Przyjmujemy, że dane zapisywane są w postaci macierzy X zawierającej N obserwacji (pomiarów w kolejnych chwilach czasu), o rozmiarze M (zmiennych)

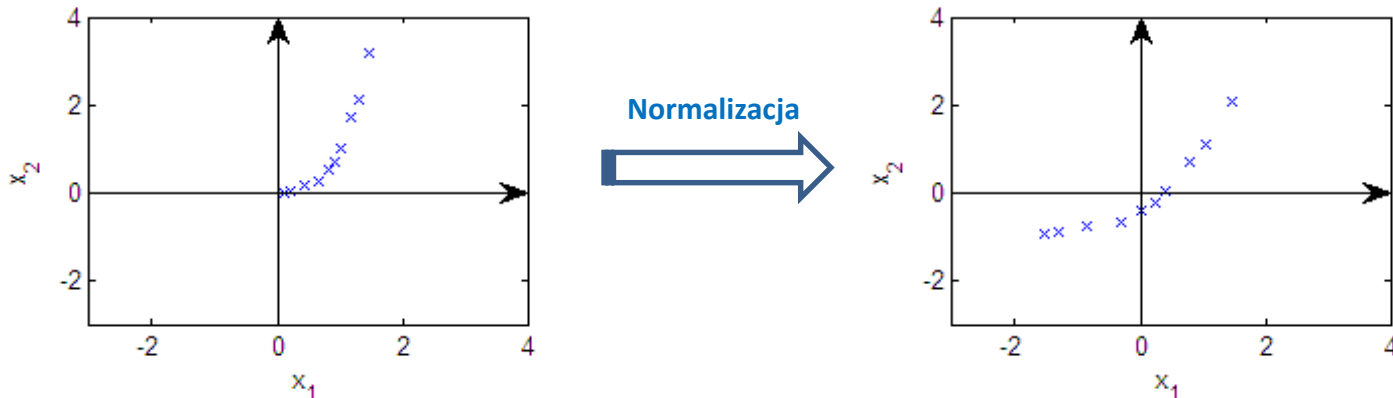
Kolejne zmienne

$$X = \begin{bmatrix} x_{1,1} & \cdots & x_{1,M} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{N,1} & \cdots & x_{N,M} \end{bmatrix}$$

Kolejne pomiary

każdy element $x_{i,j}$ stanowi j -tą zmienną dla i -tej obserwacji.

- Dokonyjemy normalizacji danych - zmienne w modelu stają się są równorzędne w sensie statystycznym



Procedura budowy modelu PCA

- normalizacja danych c.d.

$$X_{Norm} = (X - I \cdot X^{mean}) \cdot \Sigma^{-1}$$

$$X^{mean} = [x_1^{mean}, \dots, x_j^{mean}, \dots, x_M^{mean}]$$

$$x_j^{mean} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_{i,j}$$

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \sigma_M \end{bmatrix}$$

$$\sigma_j = \sqrt{\left(\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2 \right)}$$

gdzie:

I – wektor jednostkowy o rozmiarze $[N \times 1]$;

Σ – Macierz diagonalna odchyłeń standardowych poszczególnych kolumn macierzy X ;

X^{mean} – wektor średnich wartości poszczególnych kolumn macierzy X

W rezultacie otrzymujemy macierz w której wartości każdej kolumny mają średnią równą zero i wariancję równą jedną.

Procedura budowy modelu PCA:

- Wyznaczamy macierz korelacji danych:

$$R = \frac{1}{N-1} X_{Norm}^T X_{Norm}$$

... przypomnienie:

wariancja:

$$\text{var}(X) = \sigma^2 = E\{X^2\} - [E\{X\}]^2$$

kowariancja:

$$\text{cov}(x, y) = E\{x, y\} - E\{x\}E\{y\}$$

Związek pomiędzy wariancją i kowariancją:

$$\text{corr}(x, y) = \frac{\text{cov}(x, y)}{\sqrt{\text{var}(x) \text{var}(y)}}$$

Dla danych znormalizowanych (macierzą odchyleń standardowych) macierz korelacji równa jest macierzy kowariancji.

Procedura budowy modelu PCA:

$$R = \frac{1}{N-1} X_{Norm}^T X_{Norm}$$

Element r_{ij} tej macierzy zawiera się zawsze w zbiorze $\langle -1, 1 \rangle$ i określa poziom zależności (korelacji) liniowej pomiędzy zmiennymi i oraz j .

Wartość R równa 1 odpowiada idealnej liniowej dodatniej zależności, analogicznie -1 odpowiada idealnej liniowej ujemnej zależności.

Wartość wskaźnika bliska zero, nie musi wcale oznaczać, że zmienne są całkowicie niezależne – nie są bowiem brane pod uwagę zależności nieliniowe.

Procedura budowy modelu PCA:

- Wyznaczamy wartości własne λ_j macierzy R rozwiązując równanie macierzowe

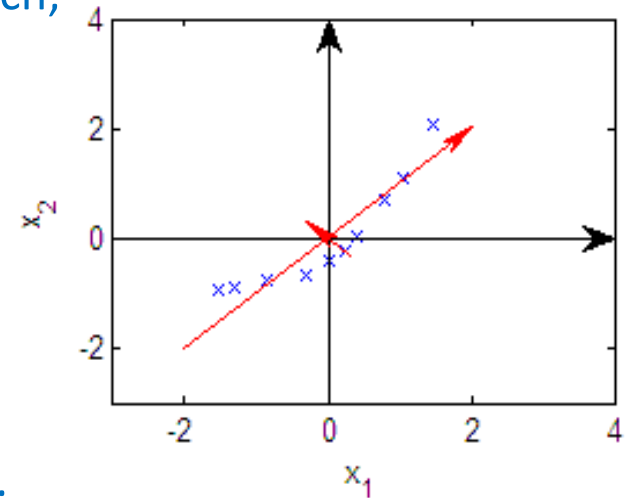
$$\det(R - \lambda \cdot I) = 0$$

oraz wektory własne v_j odpowiadające tym wartościom własnym na podstawie:

$$(R - \lambda_j \cdot I) \cdot v_j = 0 \quad j \in \vec{1}, \vec{N}$$

Interpretacja:

- wektory własne określają składniki główne stanowiące nowy ortonormalny układ współrzędnych;
- wartości własne określają jak bardzo odpowiadające im wektory własne są skorelowane z pozostałymi wektorami własnymi: im większa wartość, tym mniejsza korelacja, a więc tym cenniejsza jest informacja, którą przechowuje odpowiadający mu składnik;
- wartości własne określają również wariancję procesu wzdłuż skorelowanego składnika głównego.



Procedura budowy modelu PCA:

Kolumnowe wektory tworzą macierz, zwaną macierzą przeładowań

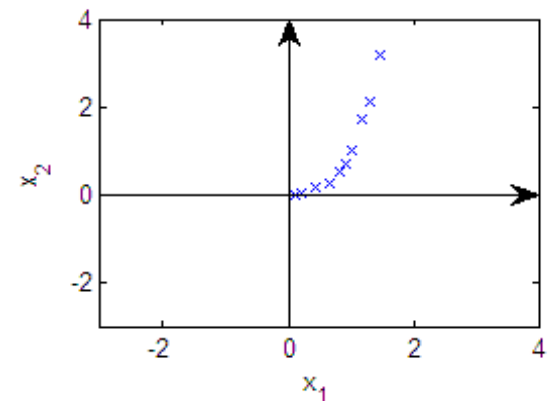
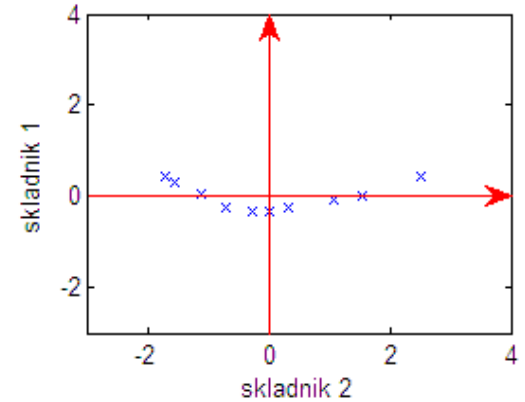
$$V = [v_1, v_2, \dots, v_M]$$

Macierz ta umożliwia „przeładowanie” (transformacja liniowa) danych wejściowych X_{norm} do przestrzeni składników głównych czyli określenie ich współrzędnych w nowej przestrzeni wyznaczonej przez V :

$$X_{Norm}^{PCA} = X_M \cdot V$$

Możemy również dokonać transformacji odwrotnej:

$$X_M = X_{Norm}^{PCA} \cdot V^{-1}$$



Procedura budowy modelu PCA:

- Odrzucamy składniki główne, które nie niosą istotnych informacji.

Dla znormalizowanego zestawu danych zasada ta może zostać uproszczona do ogólnego stwierdzenia mówiącego, aby pozostawić jedynie te składniki, których wartości własne są większe od 1.

Inną z metod doboru ilości istotnych składników głównych jest metoda oparta o „uchwyconą wariancję” (captured variance) procesu.

$$cv(PC_i) = \frac{\lambda_i}{\sum_{j=1}^M \lambda_j} \cdot 100\% \geq k\%$$

Metoda ta polega na wyborze tylu PCs aby opisywały one co najmniej $k\%$ informacji o procesie. Powyższe można zapisać jako:

Procedura budowy modelu PCA:

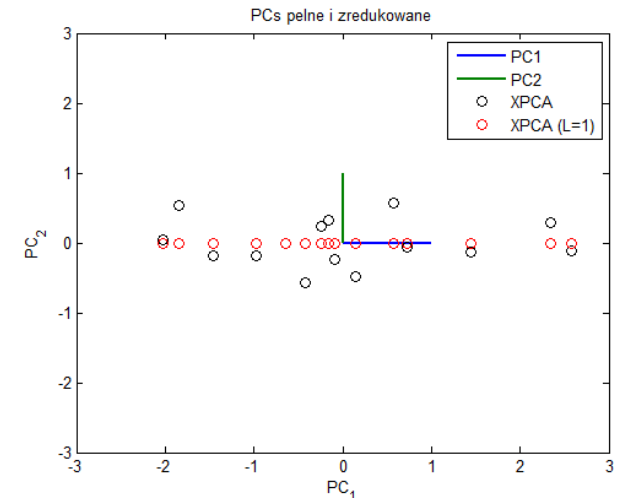
Do przeładowania danych z przestrzeni obserwacji do zredukowanej, L -wymiarowej przestrzeni składników tworzymy zredukowaną macierz przeładowań V' zawierającą jedynie te kolumnowe wektory własne, które odpowiadają pozostawionym wartościom własnym:

$$V' = [v_1, v_2, \dots, v_L] \quad L \leq M$$

Elementy od L do M (w tym przypadku kolumny) macierzy V' uzupełniamy zerami.

Przeładowanie do zredukowanej wymiarowej przestrzeni odbywa się analogicznie jak poprzednio:

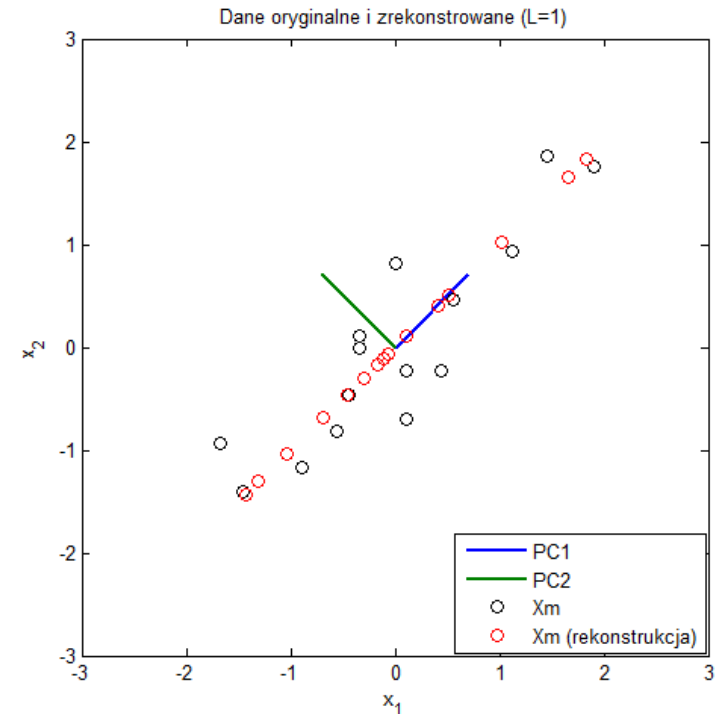
$$X_{Norm}^{PCA(L)} = X_M \cdot V'$$



Procedura budowy modelu PCA:

Redukując $M-L$ składników, którym odpowiadają niezerowe wartości własne, tracimy pewną część informacji. Przy przetładowaniu odwrotnym tj. z przestrzeni składników do przestrzeni obserwacji otrzymujemy dane obarczone pewnym niezerowym błędem rekonstrukcji.

$$X_m^{rekonstrukcja} = X_{Norm}^{PCA(L)} \cdot V^{-1}$$



Monitoring procesu

Utworzony model pozwala nam na wykorzystanie go do monitoringu procesu. W związku z tym należy zaproponować miarę/miary określające w jakim stopniu aktualny stan systemu koresponduje (wpisuje się) w model PCA utworzony przy użyciu danych treningowych

Najczęściej stosowanymi miarami są:

- T^2 - nazywana miarą Hotellinga;
- SPE - ang. Squared Prediction Error;
- Różne kombinacje powyższych.

Monitoring procesu

Miara SPE (Square Prediction Error - często nazywana również *Q statistic*)

Miara ta określa błąd rekonstrukcji danych i można ją wyznaczyć jako:

$$SPE = \|x_T \cdot (V - V')\|^2$$

gdzie:

x_T - wektor o wymiarze [1xm] dla którego wyznaczamy miarę SPE,

V' - zredukowana macierz przeładowań o wymiarze [mxm] (od L do m występują zera).

Miara ta stanowi nieważoną sumę kwadratów euklidesowej odległości obserwacji od ich projekcji na L-wymiarową przestrzeń rozpiętą przez istotne składniki główne:

$$SPE = \|X_M^{PCA} - X_M^{PCA(L)}\|^2$$

SPE określa zatem, „jakość” procesu nie reprezentowanego przez model

Monitoring procesu

Uzasadnienie wykorzystania tej miary do diagnostyki procesowej jest następujące:

- SPE określa w jakim stopniu dana próbka wpisuje się w zależności reprezentowane przez model PCA.
- Model ten na etapie treningu jest budowany w taki sposób, aby optymalnie odzwierciedlić strukturę danych treningowych.
- Wysoka wartość SPE, sygnalizująca duży błąd rekonstrukcji, oznacza, że bieżąca próbka nie spełnia zależności zidentyfikowanych w danych treningowych, co sugeruje wystąpienie anomalii.

Monitoring procesu

W przypadku klasycznego PCA norma SPE kontroluje jedynie czy spełnione są liniowe zależności wynikające z danych treningowych. Nie umożliwia ona wyciągnięcia wniosków dotyczących samych wartości parametrów.

Tutaj pomocna okazuje się druga z przytoczonych miar, a mianowicie miara T^2 . Jest ona ważoną odwrotnością uchwyconej wariancji, sumą kwadratów euklidesowej odległości o punktu przecięcia się osi PCs, przeładowanej serii pomiarów:

$$T^2 = X_M \cdot V' \cdot \lambda^{-1} \cdot V'^T \cdot X_M^T$$

Czyli:

$$T^2 = X_{Norm}^{PCA(L)} \lambda^{-1} X_{Norm}^{PCA(L)T}$$

Punkty o jednakowej wartości T^2 tworzą hipereliptyczne powierzchnie o promieniach proporcjonalnych do rozłożonych wzdłuż nich wariancji sygnału.

Monitoring procesu

Graniczne miary: SPE oraz T²

Wprowadźmy graniczne wartości miar SPE oraz T², po przekroczeniu których uznajemy iż aktualny stan procesu/obiektu „nie pasuje” do danego modelu PCA.

$$\text{SPE}_{\alpha}^{\text{limit}} = \Theta_1 \left[\frac{n_{\alpha} \sqrt{2\Theta_2 h_0^2}}{\Theta_1} + \frac{\Theta_2 h_0 (h_0 - 1)}{\Theta_1^2} + 1 \right]^{h_0}$$

$$\Theta_i = \sum_{j=l+1}^m \lambda_j^i \qquad h_0 = 1 - \frac{2\Theta_1\Theta_3}{3\Theta_2^2}$$

gdzie:

m= ilość zmiennych, l - ilość istotnych składników w modelu, n_{α} - unormowana zmienna losowa o rozkładzie normalnym, odpowiadająca górnemu kwantylowi $(1-\alpha)$. α – poziom ufności.

Monitoring procesu

Graniczne miary: SPE oraz T^2

$$T_{\text{lim}}^2 = \frac{M(N-1)}{N-M} F(\alpha, M, N-M)$$

M – ilość (rozmiar) zmiennych pomiarowych (liczba stopni swobody licznika);

N – ilość danych pomiarowych (liczba stopni swobody mianownika);

α – przedział ufności danych;

F – funkcja rozkładu gęstości prawdopodobieństwa

Algorytm budowy modelu PCA

- 1. Normalizacja danych:**
 - Odjęcie wartości średniej;
 - Dzielenie przez odchylenie standardowe (opcjonalnie);
- 2. Wyznaczamy macierz korelacji danych (lub kowariancji dla danych nienormalizowanych wariancją);**
- 3. Wyznaczamy wartości własne macierzy kowariancji;**
- 4. Wyznaczamy wektory własne macierzy kowariancji;**
- 5. Sortujemy wartości własne od największych do najmniejszych;**
- 6. Obliczamy jaką ilość informacji o danych niosą ze sobą kolejne wartości własne;**
- 7. Wybieramy pierwsze L wektorów własnych skojarzonych z pierwszymi L wartościami własnymi (na podstawie analizy „pożyteczności” kolejnych wartości własnych);**
- 8. Tworzymy zredukowaną macierz przeladowań;**
- 9. Dokonujemy projekcji danych na nową przestrzeń;**
- 10. Obliczamy miary określające stopień wpasowania danych w model np. SPE, T^2 oraz ich wartości graniczne;**
- 11. Sprawdzamy czy dane spełniają granice opisane wybranymi miarami.**

Matlab

Macierz kowariancji

$$C = \text{cov}(X);$$

Wartości i wektory własne

$$[V, D] = \text{eigs}(X, N, 'lm', \text{opts})$$

V – wektory własne

D – wartości własne

N – rozmiar wejścia

'lm' – uszeregowane malejąco

Graniczne miary T^2

$$T2lim = M * (N - 1) / (N - M) * \text{finv}(\alpha, M, N - M)$$

np.: przy 15 pomiarach o rozmiarze wektora danych 2 i przyjętym przedziale ufności danych = 95%:

$$T2lim = M * (N - 1) / (N - M) * \text{finv}(0.95, M, N - M)$$

Graniczne miary SPE

$$n_{\alpha} = \text{norminv}(P, \mu, \sigma)$$

gdzie:

P – poziom prawdopodobieństwa (0 - 1);

μ – średnia;

σ – odchylenie standardowe

np. $n_{0.95} = \text{norminv}(0.95, 0, 1)$

Dziękuję za uwagę