

研究论文

一种基于多模型融合软测量建模方法

唐志杰, 唐朝晖, 朱红求

(中南大学信息科学与工程学院, 湖南 长沙 410083)

摘要: 针对锌湿法冶炼净化过程中钴离子浓度 LS-SVM 软测量建模方法精度低的问题, 将最小二乘支持向量机 (LS-SVM) 和自回归滑动平均模型 (ARMA) 融合建立钴离子浓度融合软测量模型, 首先通过离子浓度序列的小波变换获得序列的低频和低频子序列, 对各子序列分别进行相空间重构, 并在相空间中分别建立最小二乘支持向量机模型, 然后将各模型的输出利用小波重构整合得到钴离子基于 LS-SVM 软测量结果, 利用自回归滑动平均模型对基于 LS-SVM 模型输出误差信息进行建模, 通过对两个模型的融合, 获得融合模型的软测量估计值。将该方法应用于锌液净化除钴段入口钴离子浓度的软测量, 结果表明该方法比单一的 LS-SVM 方法具有更好的泛化性能和测量精度, 显示出良好的应用潜力。

关键词: 小波变换; 相空间重构; 多模型融合; 软测量; 锌净化

DOI: 10.3969/j.issn.0438-1157.2011.08.028

中图分类号: TP 273

文献标志码: A

文章编号: 0438-1157 (2011) 08-2248-05

A multi-model fusion soft sensor modeling method

TANG Zhijie, TANG Zhaohui, ZHU Hongqiu

(School of Information Science and Engineering, Central South University, Changsha 410083, Hunan, China)

Abstract: As for low forecast accuracy of cobalt ion concentration by least square support vector machine (LS-SVM) method in the purification process of zinc hydrometallurgy, a multi-model fusion soft sensor modeling method based on combination LS-SVM with ARMA model was introduced in purification of zinc. Firstly the series of cobalt ion concentration was decomposed by wavelet transform, the decomposed sub-sequences were reconstructed by phase space reconstruction. Each sub-sequence was modeled by LS-SVM method in phase space, then the output of each model was integrated by wavelet reconstruction. Secondly correction was made for error of LS-SVM modeling output in ARMA model. Finally the output of two models were integrated, the integration value was the estimated value of cobalt ion concentration. The method was applied in prediction of cobalt ion concentration in the entrance of purification process of zinc hydrometallurgy. The results showed that this method had better generalization performance and high prediction accuracy than LS-SVM method, which showed good potential for application.

Key words: wavelet transform; phase space reconstruction; multi-model fusion; soft sensor model; purification of zinc

2011-04-28 收到初稿, 2011-05-08 收到修改稿。

联系人及第一作者: 唐志杰 (1985—), 男, 硕士研究生。

基金项目: 国家高技术研究发展计划项目 (2009AA04Z124);

国家自然科学基金重点项目 (60634020)。

Received date: 2011-04-28.

Corresponding author: TANG Zhijie, tangzhijie2005@126.com

Foundation item: supported by the High-tech Research and Development Program of China (2009AA04Z124) and the National Natural Science Foundation of China (60634020).

引言

在实际复杂工业生产中,经常存在一些非常重要但实际上却难以在线检测的过程变量,软测量技术可以有效解决此类问题。如何建立软测量模型是软测量技术中一个重要的环节。由于实际生产工艺复杂特殊以及现场工作环境恶劣,实现关键工艺参数的在线检测尤为困难,现场一般通过人工化验分析的方法对工艺参数进行检测。目前主要采用单一的软测量建模方法,无法全面地描述工业系统的全局特性,因此将多个模型通过一定的方式融合以提高模型预测精度和泛化能力的思想应运而生^[1]。

自 1969 年 Bates 等^[2]提出通过将几个模型相加来提高模型预测精度和鲁棒性的思想以来,基于多模型的预测方法已取得长足的进展,并且在工业中得到了成功的应用。文献[3]提出了一种基于仿射聚类、高斯过程和贝叶斯决策的多模型软测量建模方法。文献[4]提出了一种基于模糊 C 均值聚类(FCM)和增量支持向量机(ISVM)的混合软测量模型。但这些方法存在聚类算法不能实时地根据各个模型的精度变化调整权值的问题。文献[5]提出了一种基于时序误差补偿的动态软测量建模方法。

本文将小波分析和相空间重构技术引入基于支持向量机建立的拟稳态过程的软测量模型中,结合自回归滑动平均模型对动态误差信息进行建模,最后通过对两个模型结果的一定权值线性融合,获得最终融合后模型的输出结果。将该方法应用于锌液净化除钴段入口钴离子浓度的软测量建模工业实例中,结果表明本文所提出的方法具有更好的泛化性能和预测精度。

1 小波分析

自从 1989 年 Mallat 将多分辨率分析的思想^[6]引入小波变换,提出了塔式多分辨率分解与重构的算法,并给出了正交小波的构造方法以及正交小波变换的快速算法——Mallat 分解和重构算法,小波分析得到突破性发展。给定一个单变量时间序列信号 $X = \{x_i \mid i=1, 2, \dots, N\}$, 一维的 Mallat 分解算法如下

$$\begin{cases} c_{j+1} = Hc_j \\ d_{j+1} = Gc_j \end{cases}, j = 0, 1, \dots, J \quad (1)$$

式中 c_0 定义为原始信号 X , J 为最大分解层数,

H 、 G 分别为低通滤波器和高通滤波器。低频信号反映了原始信号的内在变化规律,高频信号则反映了外来随机扰动的影响。

Mallat 重构算法如下

$$C_j = H^* C_{j+1} + G^* D_{j+1}, \quad j = J-1, J-2, \dots, 0 \quad (2)$$

式中 H^* 和 G^* 分别是 H 和 G 对应的对偶算子。

由于 Mallat 分解算法在信号分解过程中会使得信号点数依次减半,而重构算法则可以恢复信号点数使之与原始信号一致。

2 相空间重构

相空间重构^[7]的思想是:系统中任一分量的演化都是由与之相互作用的其他分量所决定的,这些分量的信息就隐含在任一分量的发展过程中,因此可以通过重构一个等价的状态空间,考察一个分量,并将它在某些固定的时间延迟点的测量作为新维处理来确定多维状态空间中的一点,同样可以还原出原系统的反应动力学形态。

根据 Takens 嵌入定理,对于一个单变量时间序列 $\{x_i \mid i=1, 2, \dots, N\}$,若能适当地选择好嵌入维数 d 和延迟时间 τ ,则重构的相空间中点的个数为 $n=N-(d-1)\tau$,则重构出对应的相空间向量 $\mathbf{Y}_i (i=1, 2, \dots, n)$ 如下

$$\mathbf{Y}_i(d) = (x_i, x_{i+\tau}, \dots, x_{i+(d-1)\tau}) \quad (3)$$

3 最小二乘支持向量机

最小二乘支持向量机是基于正则化理论对标准支持向量机的改进,它是将传统 SVM 中的不等式约束改为等式约束,且将误差平方和损失函数作为训练集的经验损失,这样把解二次规划问题转化为求解线性方程组问题,从而提高求解问题的速度和收敛精度^[8-9]。

在支持向量机回归法中,对于给定的训练样本集 $S=(x_i, y_i)$, ($i=1, 2, \dots, N$) (其中, m 维输入 $x_i \in R^m$, 一维输出 $y_i \in R$)。利用非线性映射函数 $\phi(x)$ 可将样本非线性地映射到高维特征空间,这样就将原样本空间中的非线性函数估计问题转化成高维特征空间中的线性函数估计问题

$$f(x) = \mathbf{w}^T \phi(x) + b \quad (4)$$

这一回归问题可根据结构风险最小化原理表示为一个等式约束的优化问题

$$\min_{\mathbf{w}, b, e} J(\mathbf{w}, e) = \frac{1}{2} \mathbf{w}^T \mathbf{w} + \frac{C}{2} \sum_{i=1}^N e_i^2$$

$$\text{s. t. } y_i = \mathbf{w}^T \phi(x_i) + b + e_i \quad (i = 1, \dots, N) \quad (5)$$

为求解上述优化问题, 需建立拉格朗日等式, 把约束优化问题变为无约束优化问题

$$L(\mathbf{w}, b, e, a) = J(\mathbf{w}, e) - \sum_{i=1}^N a_i (\mathbf{w}^T \phi(x_i) + b + e_i - y_i) \quad (6)$$

式中 $a_i (i=1, \dots, N)$ 为拉格朗日乘子。

根据 KKT 条件得到

$$\begin{cases} \frac{\partial L}{\partial \mathbf{w}} = 0 \rightarrow \mathbf{w} = \sum_{i=1}^N a_i \phi(x_i) \\ \frac{\partial L}{\partial b} = 0 \rightarrow \sum_{i=1}^N a_i = 0 \\ \frac{\partial L}{\partial e_i} = 0 \rightarrow a_i = C e_i \\ \frac{\partial L}{\partial a_i} = 0 \rightarrow \mathbf{w}^T \phi(x_i) + b + e_i - y_i = 0 \end{cases} \quad (7)$$

再根据 Mercer 条件定义

$$k(x_i, x_j) = \phi(x_i) \phi(x_j) \quad (8)$$

从方程组 (7) 中消去 e_i 、 $\mathbf{w}$ 后, 可以得到

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & k(x_1, x_1) + 1/C & \cdots & k(x_1, x_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & k(x_N, x_1) & \cdots & k(x_N, x_N) + 1/C \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b \\ a_1 \\ \vdots \\ a_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_N \end{bmatrix} \quad (9)$$

由式(9)可知, 最小二乘支持向量机的训练问题可归结为一个线性方程组的求解问题, 而不是求解一个二次型规划问题, 从而使得 LS-SVM 的计算简单快速。

采用最小二乘法求得式(9)的系数 a_i 、 b , 并代入式(4), 得到支持向量机的输出

$$f(x) = \sum_{i=1}^N a_i k(x, x_i) + b \quad (10)$$

4 ARMA 模型

ARMA 模型描述系统在时刻 t 的响应 X_t 不仅与其以前时刻的自身值有关, 而且还与其以前时刻进入系统的扰动存在一定的依存关系。ARMA(m, n) 模型^[10]可以表示为

$$X_t - \sum_{k=1}^m \phi_k X_{t-k} = a_t - \sum_{k=1}^n \theta_k a_{t-k} \quad (11)$$

在这里引入后向算子 B , 它的运算有 $BX_t = X_{t-1}$, $B^2 X_t = X_{t-2}$, 依此类推, 那么式(11)可以变换为

$$\Phi(B)X_t = \Theta(B)a_t \quad (12)$$

式中 a_t 为白噪声序列, $\Phi(B)$ 和 $\Theta(B)$ 分别为后

向算子 B 的 m 和 n 阶多项式

$$\begin{aligned} (1 - \phi_1 B - \cdots - \phi_m B^m) &= \Phi(B) \\ (1 - \theta_1 B - \cdots - \theta_n B^n) &= \Theta(B) \end{aligned} \quad (13)$$

应用希尔伯特空间上线性算子的基本理论, 即用一个 ARMA($n, n-1$) 模型可以将任意一个平稳随机系统逼近到任意精度。 n 以 2 为递增量, 用递增法逐步逼近, 直到找到最合适的 n 值。

5 软测量建模

首先对经预处理后的钴离子时间序列信号 X 利用 Mallat 算法进行分解, 设分解尺度为 J , 则获得低频子序列信号 c_J 和高频子序列信号 $d_1, d_2, \dots, d_J$; 为了使分解的信号点数与原信号一致, 对其利用 Mallat 重构算法进行重构, 将重构后的子序列分别计算其相空间延迟时间和最佳嵌入维数, 从一维拓展到高维的相空间分别进行相空间重构; 选择最佳嵌入维数为各子序列进行支持向量机建模的模型最佳建模维数, 对各子序列相空间中相点选择不同结构参数分别建立最小二乘支持向量机模型; 最后将各子序列模型输出再进行小波重构获得钴离子的软测量模型输出值。将该模型的输出值 $\hat{y}_m$ 与真实值 y_m , 得到训练输出值误差 Δy_m 的时间序列值, 利用 ARMA($n, n-1$) 对该时间序列进行 ARMA 建模, 得到关于软测量预测误差的 ARMA 模型, 将两个模型结合进行钴离子浓度估计, LSSVM 模型输出值减去 ARMA 模型输出值, 即最终的钴离子浓度的软测量结果。

图 1 为软测量模型结构框图。

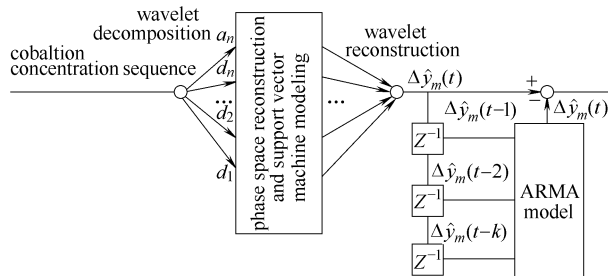


图 1 软测量模型结构框图

Fig. 1 Block diagram of soft sensor model

具体的建模步骤如下。

(1) 构建离子浓度时间序列, 应用小波变换对离子浓度序列进行分解, 设定分解尺度。

(2) 将分解得到的各子序列采用相空间重构技术扩展到高维的相空间, 根据不同的子序列特征并用不同的参数支持向量机建模, 获得每一个子模型

的输出,最后利用小波重构获得当前向量机模型的输出。

(3) 选择高斯径向基核函数 (RBF)。

$$K(x, x_i) = \exp\left(-\frac{\|x - x_i\|^2}{2\sigma^2}\right) \quad (14)$$

设定模型的初始化参数 (σ, C) , $\sigma = [0, 10]$, $C = [0, 100]$ 。利用训练集样本进行 LS-SVM 训练。

(4) 利用测试集中样本对模型参数进行优化,利用验证集中的样本对模型进行检验,采用均方误差作为评价指标,返回步骤 (2),直至检验结束。

$$\text{MSE} = \frac{1}{N} \sum_{m=1}^N [y_m - \hat{y}(t)] \quad (15)$$

其中, y_m 为真值, $\hat{y}(t)$ 为模型输出值。

(5) 由 LS-SVM 模型得到一组模型输出 $\hat{y}_m$ 与真实值 y_m , 得到训练输出值误差 Δy_m 的时间序列值,对该时间序列进行 ARMA 建模,确定 ARMA $(n, n-1)$ 模型阶数,找到最佳 n 值。

(6) 利用上述两个模型对验证样本以相同步骤进行计算,获得软测量模型的最终输出值 $\hat{y}(t) = \hat{y}_m(t) - \Delta \hat{y}_m(t)$ 。

6 工业应用实例

锌湿法冶炼过程主要由焙烧、浸出、净化和电解 4 道工序组成。净化工序的主要目的是除去中性上清液中的各种杂质离子,为电解提供合格的新液;各种杂质中尤以钴离子对电解效率和产品质量的影响最大,因此建立锌液净化过程中杂质关键组分——钴离子的软测量模型,对锌液除钴操作具有重要的指导作用,对提高企业生产效率具有重要意义。

由于净化除铜段其他的工艺数据离线检测间隔长,且对净化 II 段入口钴离子浓度影响甚微,通过这些工艺参数来实现对入口钴离子浓度的软测量估计效果不理想;考虑工厂净化段入口钴离子浓度采用每小时人工化验一次的时序特点,将这些有序的不同时刻的离子浓度运用时间序列思想形成一个离子浓度时间序列,并运用小波变换和相空间重构技术,建立基于 LS-SVM 与 ARMA 模型相结合的软测量模型。其中分解尺度为 3, $\delta = 3$, $C = 50$; ARMA 模型参数为: $m = 5$, $n = 4$ 。

为验证所提出的基于 LS-SVM 与 ARMA 融合软测量模型的在线估计性能,选取其中的 400 组数

据作为样本集,训练在线估计的软测量模型,50 组数据作为测试集,优化模型参数的选择型,50 组数据作为验证集,验证建立的软测量模型的精度和性能。图 2 给出了基于 LS-SVM 与 ARMA 融合软测量模型的估计结果,图 3 给出了单一的 LS-SVM 模型的估计结果。

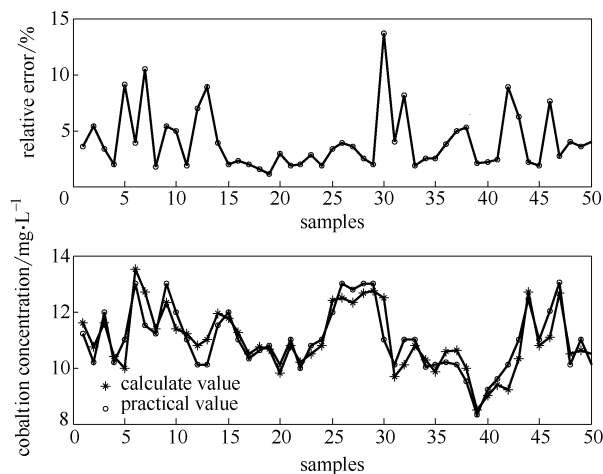


图 2 基于 LS-SVM 与 ARMA 融合软测量模型预测结果

Fig. 2 Multi-modeling fusion predictions based on LS-SVM and ARMA method

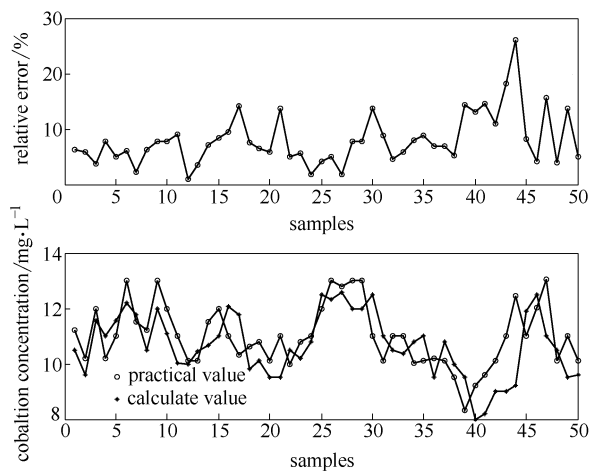


图 3 基于单一 LS-SVM 软测量模型预测结果

Fig. 3 Soft sensor model predictions based on a single LS-SVM method

通过比较图 2 和图 3 可以得出,其中基于 LS-SVM 与 ARMA 融合软测量模型的均方差为 0.3573,基于单一的 LS-SVM 模型均方差为 1.2613。基于 LS-SVM 与 ARMA 融合软测量模型比基于单一的 LS-SVM 模型对实际钴离子浓度的逼近效果更为理想,相对误差更小,前者基本低于 5% 的相对误差,能更好地反映钴离子浓度的变化

趋势,并具有更好的泛化性能。

7 结 论

本文根据锌湿法冶炼净化过程的工艺特点,对钴离子浓度进行时间序列分析,将小波分析与相空间重构技术引入基于 LS-SVM 的钴离子浓度软测量建模中,并将其与 ARMA 建模融合的方法来实现对钴离子浓度的在线软测量。应用现场数据进行验证分析,结果表明基于 LS-SVM 与 ARMA 融合模型比单一的 LS-SVM 模型具有更高的预测精度,为钴离子净化过程锌粉和铈盐的添加量的优化控制提供了重要的实时指导依据。

References

- [1] Li Wei, Zhang Yin. Dynamic integration of heterogeneous multi-model study and application of soft sensor [J]. *Control and Instruments in Chemical Industry*, 2010, **37** (8): 42-45
- [2] Bates J M, Granger C W J. The combination of forecasts [J]. *Operations Research Quarterly*, 1969, **20**: 319-325
- [3] Li Xiuliang, Su Hongye, Chu Jian. Multiple model soft sensor based on affinity propagation, Gaussian process and Bayesian committee machine [J]. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 2009, **17** (1): 96-99
- [4] Fu Yongfeng, Su Hongye, Zhang Ying. Adaptive soft sensor modeling algorithm based on FCM ISVM and its application in PX adsorption separation process [J]. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 2008, **16** (5): 746-751
- [5] Du Wenli (杜文莉). Dynamic soft sensor modeling based on time series error compensation [J]. *CIESC Journal* (化工学报), 2010, **61** (2): 439-443
- [6] Mallat S. A theory for multiresolution signal decomposition [J]. *IEEE Transactions on Pattern and Machine Intelligence*, 1989, **11** (7): 674-693
- [7] Li Tianshu (李天舒). Chaotic time series analysis research and application [D]. Harbin: Harbin Engineering University, 2006
- [8] Suykens J A K, Vandewalle J, Moor B D. Optimal control by least squares support vector machines [J]. *Neural Networks*, 2001, **14** (1): 23-25
- [9] Lin S W, Ying K C, Chen S C, *et al.* Particle swarm optimization for parameter determination and feature selection of support vector machines [J]. *Expert Systems with Applications*, 2008, **35** (4): 1817-1824
- [10] Jia Suling, Chen Danyang. A model of economic prediction based on time series of short or middle periods [J]. *Journal of Beijing University of Aeronautics and Astronautics*, 2007, **20** (4): 9-12