

基于小波和 LS-SVM 的软测量建模方法

向峥嵘, 陈庆伟

(南京理工大学 自动化学院, 江苏 南京 210094)

摘要:针对工业过程中某些重要过程变量难以实现在线检测的问题,提出了一种基于小波和最小二乘支持向量机(LS-SVM)的软测量建模方法. 首先通过小波变换把样本数据序列分解为不同频段的子序列,然后对这些子序列分别采用 LS-SVM 进行建模,最后通过小波重构得到主导变量的估计值. 其中采用量子粒子群算法(PSO)来优化选取 LS-SVM 参数. 通过仿真实验验证此方法,实验结果表明所提出的方法具有估计精度高、泛化能力强等优点.

关键词:软测量;最小二乘支持向量机;小波分析;量子粒子群优化

中图分类号: TP274 **文献标识码:** A **文章编号:** 1673-4785(2010)01-0063-04

An approach to soft sensor modeling based on wavelets and a least square support vector machine

XIANG Zheng-rong, CHEN Qing-wei

(School of Automation, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing 210094, China)

Abstract: Some industrial process variables are very difficult to measure. To overcome this problem, a soft sensor modeling, based on wavelets and a least square support vector machine (LS-SVM), was proposed. Initially, a stream of sample data was decomposed into sub-sequences with different frequencies. This was done on the basis of wavelet transform. Then the respective sub-sequences were modeled by appropriate SVMs. Finally, estimated values for the primary variables were obtained by wavelet reconstruction. A quantum particle swarm optimization (QPSO) algorithm was employed to select parameters for the LS-SVM and the kernel function. Simulation results confirmed that the proposed method has high precision and good generalization ability.

Keywords: soft sensing; least square support vector machine (LS-SVM); wavelet; quantum particle swarm optimization (QPSO)

工业过程中存在一些由于技术或经济等原因难以在线测量而又十分重要的过程参数,软测量技术为解决这一问题提供了新的途径^[1-2]. 其核心是建立软测量的数学模型,以实现辅助变量对主导变量的最佳估计. 近年来,支持向量机(SVM)作为一种小样本学习理论^[3],由于其具有良好的泛化能力,且训练时总能找到全局最优解,因而在工业领域得到了广泛的应用^[4-8]. 目前已有学者采用 SVM 或改进的 SVM 进行软测量建模^[9-12],然而其建模精度和泛化能力有待进一步提高.

小波分析作为一种数学工具,其在时域和频域具有同样良好的局部化性质,可以对信号的任意细节加以提取和分析,正被广泛地应用于信号处理、图

象处理、模式识别等领域中. 本文将小波分析引入到软测量建模中,提出了一种基于小波和 LS-SVM 的软测量建模方法. 利用小波分析独特的“聚焦”特性,将样本数据信号分解成多个频段,对子序列分别采用最小二乘支持向量机进行建模,并利用量子粒子群算法(particle swarm optimization, PSO)选取最佳 LS-SVM(least square support vector machine)参数. 仿真结果表明该方法可有效地提高 LS-SVM 软测量模型的精度和泛化能力.

1 小波分析

考虑时间函数 $v(t) \in L^2(\mathbf{R})$, $\phi(t)$ 为小波母函数, $v(t)$ 的连续小波变换^[13]可定义为

$$W_s v(t) = \frac{1}{\sqrt{|s|}} \int_{-\infty}^{\infty} \bar{\phi}\left(\frac{t-b}{s}\right) dt = \langle v, \phi_{s,t} \rangle. \quad (1)$$

收稿日期: 2008-10-08.

基金项目: 江苏省自然科学基金资助项目(BK2007210).

通信作者: 向峥嵘. E-mail: xiangzr@mail.njust.edu.cn.

设 V^N 表示分解的低频部分 v^N (上标表示分解尺度), W^N 表示分解中的高频部分 w^j ($j=1,2,3,\dots,N$), 则 W^N 是 V^N 在 V^{N-1} 中的正交补, 即 $V^N \oplus W^N = V^{N-1}$. 显然, $V^j \oplus W^j \oplus \dots \oplus W^{j-m-1} = V^{j-m}$, 则多分辨的子空间可以用有限个子空间来逼近, 即有

$$V^0 = V^1 \oplus W^1 = V^2 \oplus W^2 \oplus W^1 = \dots = V^N \oplus W^N \oplus W^{N-1} \oplus \dots \oplus W^1. \quad (2)$$

令 $v^N \in V^N$ 代表分辨率为 2^N 的函数 $v(t) \in L^2(\mathbf{R})$ 的逼近, $w^j \in W^j$ 代表逼近的误差, 式(2)可表示为

$$v^0 = v^1 \oplus w^1 = v^2 \oplus w^2 \oplus w^1 = \dots = v^N \oplus w^N \oplus w^{N-1} \oplus \dots \oplus w^1. \quad (3)$$

因为 $v(t) = v^0$, 表明任何时刻的 $v(t) \in L^2(\mathbf{R})$ 都可以根据相应的低频部分 v^N 和高频部分 w^j ($j=1,2,\dots,N$) 完全重构.

令 s 为采样得到的信号, 利用多分辨分析算法, s 与低通分解滤波器 $h(k)$ 经过卷积运算可得到尺度 1 上的低频分量; s 与高通分解滤波器 $g(k)$ 经过卷积运算可得到尺度 1 上的高频分量.

在下一步分解中, 用同样的方法可把低频系数分成 2 部分, 即 a_1 和 d_1 , 用 a_1 代替 s , 可得尺度 2 上的低频系数 a_2 和高频系数 d_2 , 依此类推. 任何函数 $f \in L^2(\mathbf{R})$ 都可以根据分辨率为 2^{-N} 时 f 的低频部分 (“粗糙像”) 和分辨率为 2^{-j} ($1 \leq j \leq N$) 下 f 的高频部分 (“细节”部分) 完全重构, 这就是 Mallat 塔式重构算法的思想.

2 最小二乘支持向量机(LS-SVM)

设训练样本集 $D = \{(\mathbf{x}_k, y_k) \mid k=1,2,\dots,l\}$, $\mathbf{x}_k \in \mathbf{R}^N$ 是第 k 个样本的输入模式, $y_k \in \mathbf{R}$ 是对应于第 k 个样本的期望输出, l 为训练样本数. LS-SVM 取如下形式:

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

式中: $\Phi(\mathbf{x}) : \mathbf{R}^N \rightarrow \mathbf{R}^{N_c}$, 将输入数据映射到高维特征空间. 对于 LS-SVM, 优化问题描述为

$$\min_{\mathbf{w}, b, \mathbf{e}} J(\mathbf{w}, \mathbf{e}) = \frac{1}{2} \mathbf{w}^T \mathbf{w} + \frac{1}{2} \gamma \sum_{k=1}^l e_k^2,$$

$$\text{s. t. } y_k = \mathbf{w}^T \Phi(\mathbf{x}_k) + b + e_k, \quad k=1,\dots,l. \quad (5)$$

式中: 权向量 $\mathbf{w} \in \mathbf{R}^{N_c}$ (原始空间); 误差变量 $e_k \in \mathbf{R}$; b 为偏差量; γ 为正规化参数.

根据式(4)可定义其拉格朗日函数:

$$L(\mathbf{w}, b, \mathbf{e}; \alpha_k) = J(\mathbf{w}, b, \mathbf{e}) - \sum_{k=1}^l \alpha_k [\mathbf{w}^T \Phi(\mathbf{x}_k) + b + e_k - y_k]. \quad (6)$$

式中: 拉格朗日乘子 $\alpha_k \in \mathbf{R}$ ($k=1,\dots,l$) 对式(6)进

行优化, 得

$$\begin{cases} \partial L / \partial \mathbf{w} = 0 \rightarrow \mathbf{w} = \sum_{k=1}^l \alpha_k \Phi(\mathbf{x}_k), \\ \partial L / \partial b = 0 \rightarrow \sum_{k=1}^l \alpha_k = 0, \\ \partial L / \partial e_k = 0 \rightarrow \alpha_k = \gamma, \\ \partial L / \partial \alpha_k = 0 \rightarrow \mathbf{w}^T \Phi(\mathbf{x}_k) + b + e_k - y_k = 0. \end{cases} \quad (7)$$

消除变量 \mathbf{w}, e_k , 可得以下矩阵方程:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{Z}^T \\ \mathbf{Z} & \mathbf{K} + \mathbf{D} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b \\ \boldsymbol{\alpha} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{y} \end{bmatrix}. \quad (8)$$

式中: $\mathbf{y} = [y_1 \ y_2 \ \dots \ y_l]^T$, $\mathbf{Z} = [1 \ \dots \ 1]$, $\boldsymbol{\alpha} = [\alpha_1 \ \dots \ \alpha_l]^T$, $\mathbf{D} = \text{diag}(\gamma^{-1} \ \dots \ \gamma^{-1})$, $\mathbf{K} = \{K_{ij} = K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)\}_{i,j=1}^l$.

通过式(8) 求解出 α_k 和 b , 得到样本数据的非线性模型:

$$y(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^l \alpha_k K(\mathbf{x}, \mathbf{x}_k) + b. \quad (9)$$

核函数的选取对于系统的泛化能力影响较大. 常用的核函数有: 1) 多项式核函数; 2) 径向基核函数; 3) Sigmoid 核函数.

3 基于小波和 LS-SVM 的软测量建模

软测量的原理就是根据某种最优准则, 选择一组与被估计变量 (主导变量) 相关的一组辅助变量, 通过建立以辅助变量为输入, 被估计变量的最优估计为输出的数学模型. 软测量器的估计值作为控制系统的被控变量或反映过程特征的工艺参数, 为优化控制与决策提供重要信息. 在软测量器中, 可测变量 X 对象的控制输入 u 、对象可测输出变量 y 作为软测量器的输入变量, 被估计变量的最优估计 \hat{Y} 为输出. 基于小波和 LS-SVM 的软测量建模方法分为 3 个步骤: 1) 对样本数据序列进行小波分解; 2) 利用 LS-SVM 分别对各尺度域上的小波序列进行建模和估计; 3) 对各尺度域上的软测量值, 利用小波重构算法生成最终的主导变量估计值.

在将样本数据序列进行小波分解过程中, 选择合适的尺度是极其重要的. 若所选尺度较少时, 不能有效地分析信号的特性; 若尺度较多时, 建模过程更复杂, 对预测精度也会有影响. 经过多次仿真结果表明, 一般选取 3 层较为合适. 本文提出的软测量模型结构如图 1 所示.

在 LS-SVM 软测量建模时, 需要确定正规化参数 γ 和径向基核函数参数 σ , 本文采用 QPSO (quantum particle swarm optimization) 算法^[14-16] 选出最佳的参数组合作为模型的最终参数.

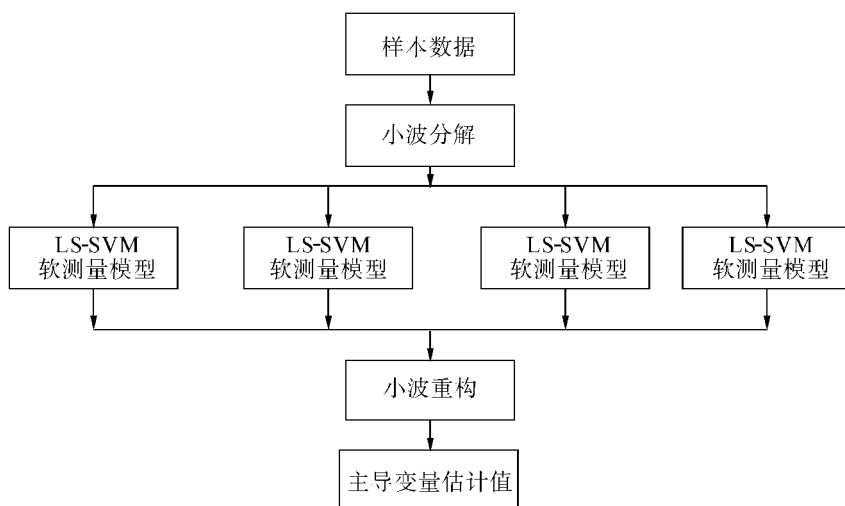


图1 基于小波-LS-SVM 软测量模型

Fig.1 Soft-sensor based on wavelet and LS-SVM

4 仿真研究

稀土串级萃取分离过程具有强非线性、时变、大滞后等特点,元素的组分含量难以在线测量.根据某稀土公司需求,要从含 $Y_2O_3 > 40\%$ 的离子型稀土矿中分离提取高纯钇^[9,17].按照萃取生产过程工艺控制要求,选择萃取段某级作为工艺控制监测点检测水相中钇组分含量.监测点水相中钇组分含量样本通过现场取样送化验室分析化验获得,对应地从工艺操作数据中收集有机溶剂流量 V_o 、水相料液流量 V_F 、水相洗涤液流量 V_w 和料液组分 X_F 4 个辅助变量的样本数据.从萃取生产过程采集 150 组输入/输出数据作为样本,其中前 100 组数据用于组分含量软测量模型训练样本,后 50 组数据用于组分含量软测量模型测试样本.

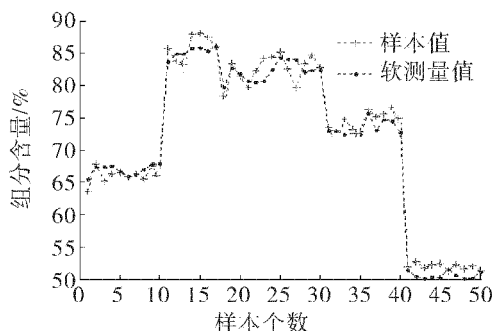


图2 组分含量样本值和软测量值

Fig. 2 Measurement value and true value of component content

对于训练样本数据,采用基于 QPSO 的 LS-SVM 软测量建模方法建立了钇含量的软测量模型.组分含量样本测量值和软测量模型输出值比较曲线见图 2.其中测试样本的均方根误差 $\sigma_{avg} = 1.7858$,最大绝对误差 $\sigma_{max} = 3.17$.图 2 表明用所提出的软测量

模型估计的组分含量的精度及跟踪性能取得了较好的效果.

5 结束语

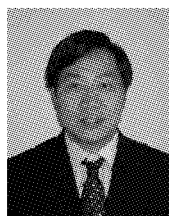
将小波分析和最小二乘支持向量机相结合,提出了一种新的软测量建模方法,并将该方法应用于稀土串级萃取分离过程.与目前的软测量建模方法不同的是该文利用小波分析对采样数据进行分解,有效提取数据的非线性特征分量,然后再用 LS-SVM 进行建模,仿真结果表明其可有效地提高 LS-SVM 软测量模型的精度和泛化能力.

参考文献:

- [1] 徐敏,俞金寿. 软测量技术[J]. 石油化工自动化, 1998, 2: 1-3.
XU Min, YU Jinshou. Soft-sensing technique[J]. Automation in Petro-Chemical Industry, 1998, 2: 1-3.
- [2] GONZALEZ G D. Soft sensors for processing plants[C]// Proceedings of the Second International Conference on Intelligent Processing and Manufacturing of Materials. Honolulu, Hawaii, USA, 1999: 59-69.
- [3] VAPNIK V N. The nature of statistical learning theory [M]. New York: Springer-Verlag, 1995: 123-180.
- [4] 张莉,席裕庚. 基于支持向量机的可分离非线性动态系统辨识[J]. 自动化学报, 2005, 31(6): 965-969.
ZHANG Li, XI Yugeng. Identification of separable variable nonlinear dynamical system based on SVMs[J]. Acta Automatica Sinica, 2005, 31(6): 965-969.
- [5] SUYKENS J A K. Nonlinear modeling and support vector machines[C]//Proceedings of Technology of the 18th IEEE Instrumentation and Measurement Conference. Budapest, Hungary, 2001, 1: 287-294.
- [6] 陈念贻,陆文聪. 支持向量机算法在化学化工中的应用

- [J]. 计算机与应用化学, 2002, 19(6): 674-676.
- CHEN Nianyi, LU Wencong. Support vector machine applied to chemistry and chemical technology[J]. Computer and Applied Chemistry, 2002, 19(6): 674-676.
- [7] SUYKENS J A K, VANDEWALLE J. Least squares support vector machine classifiers[J]. Neural Processing Letters, 1999, 9(3): 293-300.
- [8] SUYKENS J A K, VAN GESTEL T, DE BRABANTER J, et al. Least squares support vector machines[M]. Singapore: World Scientific Press, 2002: 308-342.
- [9] XIANG Zhengrong, LIU Songqing. Component content soft-sensor in rare-earth extraction based on PSO and LS-SVM[C]//The 4th International Conference on Natural Computation (ICNC'08). Jinan, China, 2008, 6: 392-395.
- [10] 徐 晔, 杜文莉, 钱 锋. 基于核主元分析和最小二乘支持向量机的软测量建模[J]. 系统仿真学报, 2007, 19(17): 3873-3875.
- XU Ye, DU Wenli, QIAN Feng. Soft sensor modeling based on KPCA and least square SVM[J]. Journal of System Simulation, 2007, 19(17): 3873-3875.
- [11] 张 英, 苏宏业, 褚 健. 基于模糊最小二乘支持向量机的软测量建模[J]. 控制与决策, 2005, 20(6): 621-624.
- ZHANG Ying, SU Hongye, CHU Jian. Soft sensor modeling based on fuzzy least squares support vector machines[J]. Control and Decision, 2005, 20(6): 621-624.
- [12] 阎威武, 朱宏栋, 邵惠鹤. 基于最小二乘支持向量机的软测量建模[J]. 系统仿真学报, 2003, 15(10): 1494-1496.
- YAN Weiwu, ZHU Hongdong, SHAO Huihe. Soft sensor modeling based on support vector machines[J]. Journal of System Simulation, 2003, 15(10): 1494-1496.
- [13] 刘 涛, 曾祥利, 曾 军. 实用小波分析入门[M]. 北京: 国防工业出版社, 2006: 116-131.
- [14] SUN Jun, XU Wenbo, FENG Bin. A global search strategy of quantum-behaved particle swarm optimization[C]//Proceedings of IEEE Conference on Cybernetics and Intelligent Systems. Singapore, 2004: 111-116.
- [15] SUN Jun, FENG Bin, XU Wenbo. Particle swarm optimization with particles having quantum behavior[C]//Proceedings of 2004 Congress on Evolutionary Computation. Piscataway, USA, 2004: 325-331.
- [16] CHAPPELLE O, VAPNIK V, BOUSQUET O, et al. Choosing multiple parameters for support vector machines[J]. Machine Learning, 2002, 46(1): 131-159.
- [17] 许勇刚, 杨 辉. 基于 RBF 网络的稀土萃取过程组分含量软测量[J]. 稀土, 2007, 28(5): 19-22.
- XU Yonggang, YANG Hui. Component content soft-sensor based on RBF neural network in rare earth countercurrent extraction process[J]. Chinese Rare Earths, 2007, 28(5): 19-22.

作者简介:



向峥嵘,男,1969年生,副教授、博士,IEEE会员,中国人工智能学会会员.主要研究方向为非线性系统、鲁棒控制、智能控制、数据挖掘等.主持及承担了多项国家自然科学基金、省自然科学基金及国防预研项目.2002—2006年曾多次到香港城市大学和香港理工大学做合作研究,发表学术论文90余篇.



陈庆伟,男,1963年生,教授、博士生导师,中国自动化学会空间及运动体控制委员会委员,中国自动化学会智能自动化委员会委员,江苏省自动化学会理事,《兵工学报》编委.主要研究方向智能控制、非线性系统、交流伺服系统、网络控制等.主持及承担了多项国家自然科学基金及国防预研项目的研究工作,发表学术论文50余篇.