

研究论文

一种基于时序误差补偿的动态 软测量建模方法

杜文莉, 官振强, 钱 锋

(华东理工大学化工过程先进控制和优化技术教育部重点实验室, 上海 200237)

摘要: 针对目前静态软测量建模方法无法反映工业过程动态信息, 造成预测模型精度低、鲁棒性差等问题, 提出了一种基于最小二乘支持向量机 (LS-SVM) 和自回归-滑动平均模型 (ARMA) 的软测量建模方法。首先, 建立了基于 LS-SVM 的软测量模型, 利用 ARMA 模型对预测误差的动态估计, 通过增加动态校正环节, 实现了对静态模型的动态校正以改善系统动态响应特性。最后将上述方法用于乙烯精馏过程中乙烷浓度的软测量建模, 仿真结果表明: 与单一使用 LSSVM 模型相比, 该方法具有跟踪性能好、泛化能力强等优点, 是一种有效的软测量建模方法。

关键词: 最小二乘支持向量机; ARMA 模型; 软测量; 时间序列; 动态校正

中图分类号: TP 273

文献标识码: A

文章编号: 0438-1157 (2010) 02-0439-05

Dynamic soft sensor modeling based on time series error compensation

DU Wenli, GUAN Zhenqiang, QIAN Feng

(Key Laboratory of Advanced Control and Optimization for Chemical Processes, Ministry of Education,
East China University of Science and Technology, Shanghai 200237, China)

Abstract: Because static soft sensor modeling can not reflect the dynamic information of industrial processes, which lead to worse estimation precision and robustness. A dynamic soft sensor modeling based on least square vector machine (LS-SVM) and ARMA time series prediction modeling was presented. A static soft sensor model based on LS-SVM was established firstly, and then dynamic correction in the static model was made by using the dynamic estimation of prediction error in ARMA to improve the dynamic response characteristics. Finally, the proposed LSSVM-ARMA was used to predict the concentration of ethane in ethylene distillation. Simulation indicated that this method featured good approximation and good generalization ability as compared with LSSVM, and could be used in soft sensor.

Key words: least square SVM; ARMA model; soft sensor; time series; dynamic correction

引 言

软测量建模方法通过借助于可测辅助变量, 实

现不可测主导变量的在线实时连续估计, 并通过构造主要生产性能指标的控制实现对过程的优化控制^[1], 这已在石化、化工、冶金等行业得到了广

2009-10-22 收到初稿, 2009-10-30 收到修改稿。

联系人: 钱锋。第一作者: 杜文莉 (1974—), 女, 副研究员。

基金项目: 国家自然科学基金项目 (606253202, 60704028); 国家重点基础研究发展计划项目 (2009CB320603); 长江学者和创新团队发展计划项目 (IRT0721); 高等学校学科创新引智计划项目 (B08021); 上海市重点学科建设项目 (B504); 上海市科技启明星计划项目 (08QA14021)。

Received date: 2009-10-22.

Corresponding author: Prof. QIAN Feng, fqian@ecust.edu.cn

Foundation item: supported by the National Natural Science Foundation of China (606253202, 60704028) and the National Basic Research Program of China (2009CB320603).

泛应用。但目前的软测量建模方法大都基于工业过程的静态/拟稳态假设，因为实际生产过程中的难测主导变量普遍采取离线化验方式给出，而且采样频度低，通常在一个过渡过程中可能只有有限几个数据，因此建模所需的样本是与时间无关的离散数据；然而一般的工业过程都是动态的，利用静态建模方法建立的软测量模型无法反映工业过程的动态信息，造成模型的预测精度低、鲁棒性差、无法长期使用。因此如何建立动态软测量模型成为解决该问题的关键^[2-5]。

目前动态软测量方法的研究主要集中在：(1) 神经网络动态建模方法^[4-5]，即在静态神经网络的输入层加入时延单元，将时间信号表示为空间状态，以静态网络结构描述了动态建模过程；(2) 基于激励信号的动态建模方法^[6]，该方法是基于卷积模型建立动态的软测量模型，将脉冲响应参数作为主要的辨识对象，产生一组脉冲响应模板以及模板参数约束范围，使用优化方法辨识脉冲响应模板参数，实现动态软测量模型的优化求解。

本文针对支持向量机建模方法具有较好的学习和泛化能力等特点，建立基于最小二乘支持向量机 (least square-support vector machine, LS-SVM) 的拟稳态过程软测量模型；采用自回归-滑动平均模型 (autoregression-moving average, ARMA) 对误差时间序列进行建模，通过将该动态误差信息加入到静态软测量模型中，实现静态模型的动态校正。该动态建模方法的实现结构简单，运算复杂度低，适合于实时应用场合。

1 最小二乘支持向量机方法

支持向量机是 Vapnik 等根据统计学理论提出的一种机器学习新方法。最小二乘支持向量机是标准支持向量机在二次损失函数下的一种拓展形式，它采取求解线性方程算法得到支持向量，取代了二次规划求解优化问题，求解速度快^[7-8]。

给定 l 个样本数据： $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_l, y_l) \in R^n \times R$ ，其中 x_k 为样本输入， y_k 为样本输出。支持向量机利用非线性映射核函数 $\phi(x)$ 将输入向量从原空间 R^n 映射到一个高维特征空间，将非线性函数估计问题转化为高维特征空间中的线性函数问题。设构造的最优决策函数具有如下形式

$$f(x) = \omega^T \phi(x_k) + b \quad (1)$$

求解目的就是利用结构风险最小化原则，寻找

参数 ω^T 和 b ，使得对于样本外的输入 x ，有 $|y - \omega^T \phi(x_k) - b| \leq \epsilon$ 。寻找 ω^T 和 b 等价于求解下面的优化问题

$$\min J = \frac{1}{2} \|\omega\|^2 + cR_{\text{emp}} \quad (2)$$

其中 $\|\omega\|^2$ 是置信区间； $c > 0$ 是误差惩罚函数； R_{emp} 为经验风险，即 ϵ 不敏感损失函数。标准支持向量机优化目标中的损失函数为误差 ξ_i (允许错分的松弛变量)，而最小二乘支持向量机则选择了误差 ξ_i 的二次项，其优化问题为

$$\min_{\omega, b} J = \frac{1}{2} \omega^T \omega + \frac{1}{2} c \sum_{i=1}^l \xi_i^2$$

$$\text{s. t. : } y_i = \omega^T \phi(x_i) + b + \xi_i, \quad i = 1, 2, \dots, l \quad (3)$$

通过式 (3) 的对偶形式可以求它的最优解，对偶形式可以根据目标函数和约束条件建立拉格朗日函数

$$L(\omega, b, \xi, \alpha) = \frac{1}{2} \omega^T \omega + \frac{1}{2} c \sum_{i=1}^l \xi_i^2 - \sum_{i=1}^l \alpha_i [\omega^T \phi(x_i) - y_i + b + \xi_i] \quad (4)$$

根据优化条件

$$\frac{\partial L}{\partial \omega} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial b} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial \xi} = 0, \quad \frac{\partial L}{\partial \alpha} = 0 \quad (5)$$

可得

$$\omega - \sum_{i=1}^l \alpha_i \phi(x_i) = 0, \quad \sum_{i=1}^l \alpha_i = 0, \quad \alpha_i = c\xi_i, \quad \omega^T \phi(x_i) + b + \xi_i - y_i = 0 \quad (6)$$

定义核函数 $K(x, x_i) = \phi(x) \phi(x_i)$ 代替非线性映射，根据式 (6) 可得求解的优化问题转化为求解线性方程

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & K(x_1, x_1) + \frac{1}{c} & \dots & K(x_1, x_l) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & K(x_l, x_1) & \dots & K(x_l, x_l) + \frac{1}{c} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b \\ \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_l \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_l \end{bmatrix} \quad (7)$$

最后得非线性模型

$$f(x) = \sum_{i=1}^l \alpha_i K(x, x_i) + b \quad (8)$$

其中核函数 $K(x, x_i)$ 是满足 Mercer 条件的任意对称函数。

2 时间序列分析

2.1 ARMA 模型^[9]

通常时间序列 ARMA 模型具有以下一般形式

$$x_t - \phi_1 x_{t-1} - \dots - \phi_p x_{t-p} =$$

$$a_t - \theta_1 a_{t-1} - \dots - \theta_q a_{t-q} \quad (9)$$

通常用 B^k 表示 k 步线性推移算子, $B^k x_t = x_{t-k}$, $B^k a_t = a_{t-k}$, $B^k c = c$ (c 为常数)。

令: $\phi(B) = 1 - \phi_1 B - \phi_2 B^2 - \dots - \phi_p B^p$, $\theta(B) = 1 - \theta_1 B - \theta_2 B^2 - \dots - \theta_q B^q$, 则式 (9) 可以表示为

$$\phi(B)x_t = \theta(B)a_t \quad (10)$$

式中 x_t 为平稳、正态、零均值的时间序列; a_t 为白噪声序列, B 是延迟算子, $\phi(B)$ 和 $\theta(B)$ 是算子多项式。模型称为 p 阶自回归、 q 阶滑动平均模型, 记作 ARMA(p, q)。

2.2 ARMA($n, n-1$) 模型与定阶

希尔伯特空间上的线性算子的基本理论可以证明, 用一个 ARMA($n, n-1$) 模型可以把任意一个平稳随机系统逼近到任意精度。对于模型阶数 n 的确定, 采用递增法逐步逼近, 找到最合适的 n 值。 n 以 2 为递增量, 避免对烦琐的 ARMA(p, q) ($q \neq p-1$) 模型的讨论, 减小了计算量^[10]。

在 ARMA($n, n-1$) 模型的定阶过程中, 依次采用 F 检验准则判断模型阶次增加是否合适。设 $H_0: \phi_{2n+2} = 0, \theta_{2n+1} = 0$, Q_0 为 ARMA($2n+2, 2n+1$) 模型残差平方和, Q_1 为 ARMA($2n, 2n-1$) 模型残差平方和, 则

$$F = \frac{Q_1 - Q_0}{s} \bigg/ \frac{Q_0}{n-r} \quad (11)$$

其中, s 为被检验参数的个数; r 为模型参数的总个数; n 为样本长度。

若 $F > F_\alpha$, 则 H_0 不成立, 模型可继续拓展阶数; 否则, ARMA($2n, 2n-1$) 是合适的模型。对于预先给定的置信度 α , 由 F 分布表, 可以得到 F_α 的值。

3 基于 LS-SVM 和 ARMA 时间序列预测的软测量建模

首先利用最小二乘支持向量机建立软测量模型, 将该模型训练输出值 \hat{y}_m 与真实测量 y_m 值相减, 得到一个关于输出值误差 Δy_m 的时间序列值, 利用 ARMA($n, n-1$) 模型对该时间序列进行建模, 得到关于预测误差的 ARMA 模型。将以上两个模型相结合进行模型预测时, LS-SVM 模型输出值减去 ARMA 模型预测的误差值, 即得到主导变量的预测结果。图 1 给出了该模型结构框图。

具体的建模步骤如下。

(1) 选择 $M \times N$ 维的输入输出变量 $\mathbf{X} =$

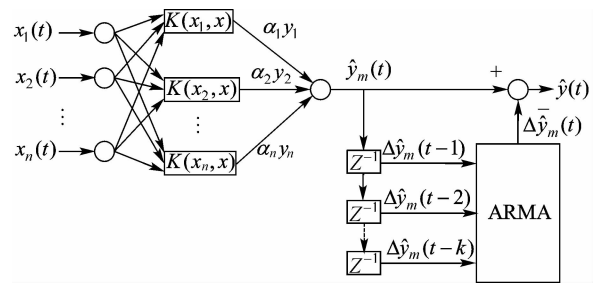


图 1 基于 LS-SVM 和 ARMA 的软测量模型结构

Fig. 1 Soft sensor model structure based on LS-SVM and ARMA

(x_{ij}) $_{M \times N}$, $i = 1, 2, \dots, M, j = 1, 2, \dots, N$, M 为样本维数, N 为辅助变量维数, 利用 3σ 法剔除异常数据, 并对样本进行标准化处理, 即

$$X_j^* = [X_j - E(X_j)] / [\text{var}(X_j)]^{1/2} \quad (12)$$

式中 $E(X_j)$ 为 \mathbf{X} 第 j 列样本均值, $\text{var}(X_j)$ 为样本均方差。处理后的数据变换为均值为 0、方差为 1 的标准数据集 \mathbf{X}^* 。

(2) 选择高斯核函数作为最小二乘支持向量机的核函数, 规定误差惩罚参数集 $S_c = \{50, 25, 10, 5, 1, 0.5, 0.25, 0.1\}$, 核参数集 $S_\delta = \{5, 3, 1, 0.5, 0.2, 0.1, 0.05, 0.01\}$ 。并分别从中选取参数进行交叉组合, 利用所选取的参数进行 LS-SVM 训练。

(3) 利用测试集样本对 LS-SVM 进行检验, 返回 (2), 直至检验结束。

(4) 预测结果优劣采用均方误差 (mean squared error, MSE) 作为评价指标: $MSE = \frac{\sum (\hat{y}_m - y_m)^2}{n}$, 其中 y_m 为真值, \hat{y}_m 为模型输出值, 选取泛化均方误差最小的模型作为 LS-SVM 预测模型。

(5) 将训练样本集带入上述 (4) 中确定的 LS-SVM 预测模型中, 由 LS-SVM 模型得到一组模型输出 \hat{y}_m , 与真实测量值 y_m 相减, 得到关于训练输出值误差 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。模型阶数 n 的确定采用递增系列法逐步逼近, 找到最合适的 n 值。

(6) 利用上述两个模型对测试样本进行仿真, 软测量模型最终的输出值即为 $\hat{y}(t) = \hat{y}_m(t) - \Delta \hat{y}_m(t)$ 。

4 仿 真

乙炔精馏塔在整个乙烯生产装置中是成品乙烯

的最后环节，对成品乙烯起决定性的作用。由于塔顶乙烯产品中的乙烷含量 8 h 人工分析一次，为保证产品质量合格，现场操作人员经常采用加大回流比的方法，质量分析滞后影响到生产能耗水平。因此，建立产品中少数关键组分——乙烷浓度的软测量模型，对于解决产品的“卡边”控制问题具有重要意义。

本文选择适当的过程变量：塔顶压力、回流比等作为输入变量，对应时刻的乙烷浓度分析仪表的值作为模型输出变量，建立 LS-SVM 与 ARMA 模型结合的软测量模型。对现场采集样本数据进行采集，并剔除了病态数据、异常工况数据（开、停车），共采集了 2474 组数据。经过预处理的数据一部分用作训练样本（1980 组），用于模型的建立；其余部分则用于模型预测，检验模型的泛化能力。根据交叉选择，最后选定正则化参数为 25，核参数为 1。ARMA 模型的参数经比较确定为 ARMA (6, 5)。

图 2 给出了 LSSVM 模型训练值、预测值与人工分析值对比曲线。

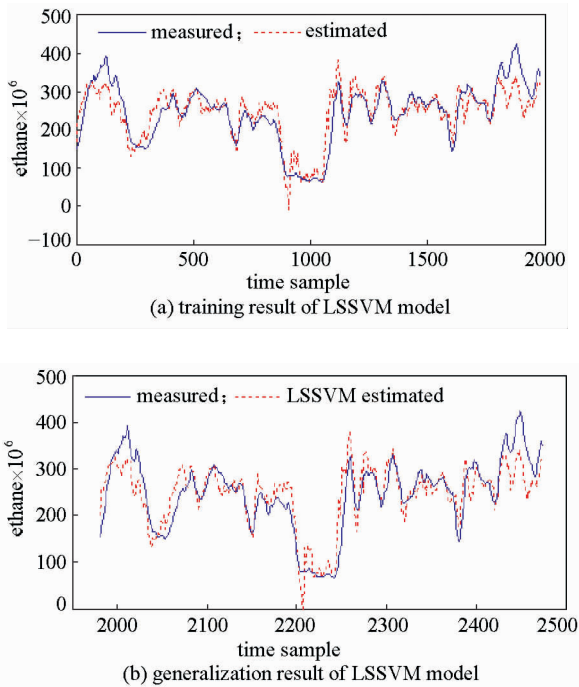


图 2 LSSVM 模型训练与预测值与人工分析值对比
Fig. 2 Learning and generalization result using LSSVM model

图 3 (a) 给出了 LSSVM-ARMA 模型预测曲线。从图中可以看出，LSSVM-ARMA 模型与 LSSVM 模型相比，估计结果更加精确，误差更

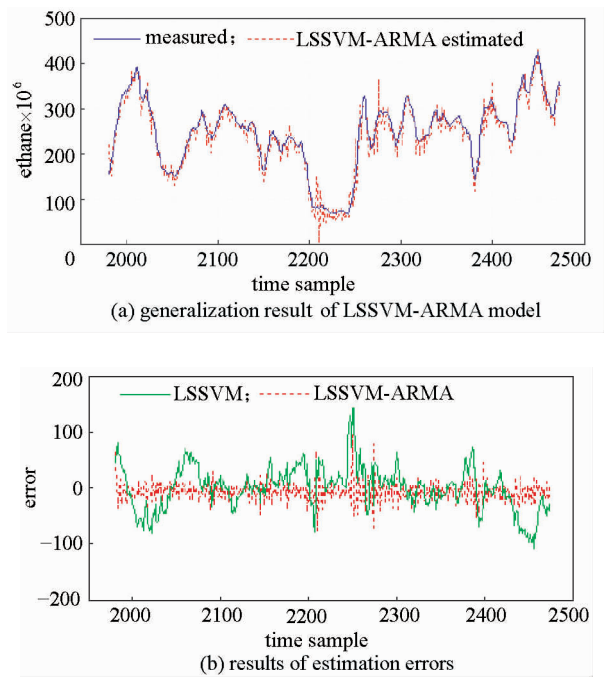


图 3 LSSVM-ARMA 预测曲线与预测误差对比曲线
Fig. 3 Generalization result using LSSVM-ARMA model and estimation error of two models

小，较好地反映了乙烷浓度的变化趋势。其中采用 LSSVM 模型学习均方差为 0.00323，泛化均方差为 0.00322；采用 LSSVM-ARMA 模型泛化均方差为 0.00077，较单一使用 LSSVM 模型，显示出更强的泛化能力。图 3 (b) 是 LSSVM-ARMA 预测和 LSSVM 预测相对误差曲线对比，LSSVM-ARMA 模型相对误差更小。

5 结 论

本文利用 LSSVM 和 ARMA 方法相结合实现系统动态过程的软测量建模，利用 ARMA 模型实现对预测误差的动态估计，并对静态模型进行动态校正，利用了前几时刻的值对当前时刻的影响，反映了过程的动态特性。通过将该软测量建模方法应用于乙烯精馏过程乙烷浓度的预测，仿真结果验证了该方法与单一的 LSSVM 软测量模型相比，有更高的预测精度。

References

[1] Bao Lin, Bodil Recke, Philippe Renaudat, Jørgen Knudsen, Sten Bay Jørgensen. A systematic approach for soft sensor development. *Computers and Chemical Engineering*, 2007, **31** (5/6): 419-425

[2] Li Chuan, Wang Shilong. Dynamic soft sensor modeling

- based on multiple least-squares support vector machines// Proceedings of the 7th World Congress on Intelligent Control and Automation. Chongqing, 2008
- [3] Mao Shuai (毛帅), Xiong Zhihua (熊智华), Xu Yongmao (徐用懋). Dynamic soft-sensor model of diesel oil solidifying point on a crude distillation unit. *Control Engineering of China* (控制工程), 2005, **12** (4): 342-345
- [4] Luo Jianxu (罗健旭), Shao Huihe (邵惠鹤). Developing dynamic soft sensors using multiple neural networks. *Journal of Chemical Industry and Engineering (China)* (化工学报), 2003, **54** (12): 1770-1773
- [5] Ma Yong (马勇), Huang Dexian (黄德先), Jin Yihui (金以慧) Discussion about dynamic soft-sensing modeling. *Journal of Chemical Industry and Engineering (China)* (化工学报), 2005, **56** (8): 1516-1519
- [6] Zhao Yongping, Sun Jianguo. Recursive reduced least squares support vector regression. *Pattern Recognition*, 2009, **42** (5): 837-842
- [7] Lu Zhao, Sun Jing. Non-Mercer hybrid kernel for linear programming support vector regression in nonlinear systems identification. *Applied Soft Computing*, 2009, **9** (1): 49-60
- [8] Xu Ye (徐晔), Du Wenli (杜文莉), Qian Feng (钱锋). Soft sensor modeling based on KPCA and least square SVM. *Journal of System Simulation*, 2007, **19** (17): 3873-3875
- [9] Wang Haiyan (王海燕), Lu Shan (卢山). *Nonlinear Time Series Analysis and Its Application*. Beijing: Science Press, 2006
- [10] Jia Suling (贾素玲), Chen Dangyang (陈当阳). A model of economic prediction based on time series of short or middle periods. *Journal of Beijing University of Aeronautics and Astronautics*, 2007, **20** (4): 9-12