

基于改进粒子群优化 LSSVM 的水泥熟料 fCaO 软测量

蒋妍妍¹, 李洪林^{2*}

(1. 合肥工业大学计算机与信息学院, 安徽 合肥 230009;
2. 合肥水泥研究设计院, 安徽 合肥 230051)

摘要:针对水泥熟料 fCaO 含量难以在线实时测量, 提出了一种基于最小二乘支持向量机的软测量建模方法。针对最小二乘支持向量机模型的 2 个难点进行了改进: 首先利用样本间的马氏距离来衡量样本的相似程度, 删除样本中部分相似样本, 提高最小二乘支持向量机模型的稀疏性, 从而减小了模型的运算量。然后利用改进的粒子群优化算法对最小二乘支持向量机模型的 2 个重要参数进行迭代寻优, 克服了常规交叉验证法或网格搜索法等参数选择方法的盲目性。最后将基于粒子群最小二乘支持向量机软测量模型用于熟料 fCaO 含量的实例仿真。结果表明, 该方法具有收敛性好、预测精度高、泛化能力强等优点。

关键词:软测量; 最小二乘支持向量机; 稀疏性; 粒子群优化

中图分类号: TP273

文献标志码: A

文章编号: 0253-4320(2014)06-0152-04

Soft measurement of cement clinker fCaO by improved particle swarm optimization based LSSVM

JIANG Yan-yan¹, LI Hong-lin^{2*}

(1. School of Computer and Information, Hefei University of Technology, Hefei 230009, China;
2. Hefei Cement Research and Design Institute, Hefei 230051, China)

Abstract: It is difficult to accurately measure the content of cement clinker fCaO in online and real-time way. In this study, a soft sensor modeling method based on least squares support vector machine (LSSVM) is provided. The following improvements are made to connect two difficulties of LSSVM model. Firstly, the Mahalanobis distance between samples is used to measure the similarity of samples, which is followed by deleting some similar samples and improving the sparsity of LSSVM to improve the computation model. Secondly, the improved particle swarm optimization (PSO) algorithm is used to iteratively optimize two important parameters of LSSVM model, which can overcome the blindness of parameter selection method of conventional cross validation method or the grid search method. Finally, the clinker fCaO content is simulated by means of the PSO LSSVM soft measurement model. It indicates that the method has good convergence, high precision and strong generalization ability.

Key words: soft-sensing; least square support vector machine (LSSVM); sparsity; particle swarm optimization (PSO)

熟料 fCaO (游离氧化钙) 含量是新型干法水泥生产中衡量熟料质量的一个重要指标, 他表示生料煅烧中氧化钙与氧化铝、氧化硅、氧化铁等结合后剩余的程度。熟料中 fCaO 含量的高低不仅直接影响水泥的安定性和熟料强度, 而且还关系着烧成能耗的高低。目前, 熟料 fCaO 含量还不能在线实时检测, 只能由化验室每隔 1~4 h 人工取样后通过化学分析方法检测, 然后将化验结果通知生产人员对相关参数进行调整。离线检测的周期较长, 不能实时反映熟料生产的工况, 过程参数的调整存在较大滞后, 无法很好的保证熟料 fCaO 的含量在合格范围内。因此, 如何快速、准确的测量熟料 fCaO 的含量

对指导水泥生产有着至关重要的作用。

软测量技术的发展为熟料 fCaO 含量的在线实时检测提供了新思路。软测量的基本思想是选择一些容易测量的辅助变量, 通过建模来推断或者估计一些无法直接测量的重要变量。根据建模机理的不同, 基于最小二乘支持向量机 (LSSVM) 的预测模型在工业生产过程参数软测量中有着越来越多的应用^[1-6]。LSSVM 作为 SVM 的一种变形, 简化了计算过程, 提高了计算精度, 但同时也丧失了 SVM 的稀疏性, 使得模型结构复杂, 增大了计算量。同时 LSSVM 的参数选择对模型的预测精度和泛化能力都有着较大影响, 目前常用的交叉验证法存在着较

收稿日期: 2014-01-21

作者简介: 蒋妍妍 (1982-), 女, 博士研究生, 实验师, 主要研究方向为智能控制, lh4235@126.com; 李洪林 (1981-), 男, 硕士研究生, 工程师, 主要研究领域为过程控制, 通讯联系人, lh4235@126.com。

大的盲目性和运算费时等缺点。

针对熟料 fCaO 含量的预测,笔者将改进的粒子群算法(PSO)和 LSSVM 相结合,提出了一种基于改进粒子群最小二乘支持向量机的方法。该方法首先利用基于马氏距离判别的方法删除数据样本中的一些相似样本,改善了 LSSVM 的稀疏性,从而提高了预测模型的泛化能力和鲁棒性;然后利用改进惯性权重的 PSO 算法对 LSSVM 模型的参数进行优化,从而提高了模型的预测精确度。

1 LSSVM 回归算法

LSSVM 作为标准 SVM 算法的一种改进变形,两者的最大区别在于 LSSVM 以等式约束代替 SVM 的不等式约束,训练样本的损失函数采用误差平方和,以求解线性方程组代替 SVM 的二次规划问题,从而降低了计算复杂度,提高了求解速度和收敛精度。

对于训练样本 $(x_i, y_i) \in R^N \times R, i = 1, 2, \dots, N$, 利用 1 个非线性映射函数 $\phi(x)$ 将训练样本映射到 1 个高维特征空间,在高维特征空间里构造最优线性回归函数:

$$y(x) = w^T \phi(x) + b \tag{1}$$

式中, w 为权值向量, b 为偏置项。通过此函数将原来的非线性函数估计转化为高维特征空间的线性函数估计。

LSSVM 基于结构风险最小原则将回归问题转化为具有等式约束的优化问题:

$$\begin{cases} \min J(w, e) = 1/2w^T w + 1/2c \sum_{i=1}^N e_i \\ \text{s. t. } y_i = w^T \phi(x_i) + b + e_i \end{cases} \tag{2}$$

式中, c 为惩罚因子, e_i 为误差。

为求解上述优化问题,引入拉格朗日函数:

$$L(w, b, e, \alpha) = J(w, e) - \sum_{i=1}^N \alpha_i [w^T \phi(x_i) + b + e_i - y_i] \tag{3}$$

式中, α_i 为拉格朗日乘子,也称支持值。

为求得最优的 α 和 b , 根据 KKT 条件得:

$$\begin{cases} \partial L / \partial w = 0 \Rightarrow w = \sum_{i=1}^N \alpha_i \phi(x_i) \\ \partial L / \partial b = 0 \Rightarrow \sum_{i=1}^N \alpha_i = 0 \\ \partial L / \partial c = 0 \Rightarrow \alpha_i = ce_i \\ \partial L / \partial \alpha = 0 \Rightarrow w^T \phi(x_i) + b + e_i - y_i = 0 \end{cases} \tag{4}$$

定义核函数 $\Omega_{ij} = K(x_i, x_j) = \phi(x_i) \cdot \phi(x_j)$, 将式(2)转化为求解矩阵形式的线性方程组:

$$\begin{pmatrix} 0 & I^T \\ I & \Omega + I/c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ y \end{pmatrix} \tag{5}$$

式中, $I = (1, 1, \dots, 1)^T, \alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N)^T, y = (y_1, y_2, \dots, y_N)^T$ 。

求解式(5)可得 LSSVM 的回归函数模型:

$$y(x) = \sum_{i=1}^N \alpha_i K(x, x_i) + b \tag{6}$$

$K(x, x_i)$ 为核函数,选择不同的核函数,可以构成不同的支持向量机。笔者选取 RBF 核函数:

$$K(x_i, x) = \exp[-\|x_i - x\|^2 / 2\sigma^2] \tag{7}$$

式中, σ 为核宽度。

2 LSSVM 的稀疏性改进

根据式(4)中 $\alpha_i = ce_i$ 可知,由于估计误差 e_i 一般不可能为 0, LSSVM 中每个向量的支持值 α_i 都不为 0, 支持值大的样本对预测模型的贡献大, 支持值小的样本对模型的贡献小, 所有的训练样本都要参与运算, 从而降低了标准 SVM 的稀疏性, 增大了计算量。

为了改善 LSSVM 的稀疏性^[7-8], 很多学者提出了各种稀疏化方法, 其中以 Suykens 提出的剪枝算法最为常用。其基本原理是通过删除一定比例支持值小的训练本来获得 LSSVM 的稀疏性。但是这种方法需要求解线性方程组得到支持值 α_i , 计算量偏大, 影响模型的训练速度。

通过分析 SVM 的稀疏性发现, 支持向量往往是那些训练样本空间里变化比较剧烈的样本点。对比分析 LSSVM 也可以发现, 当样本空间的样本变化较大时, 支持值 α 较大; 当样本空间的样本变化较小时, 支持值 α 较小。可以用马氏距离来衡量样本的变化程度, 马氏距离小, 样本变化程度就小, 相应的支持值 α 也小, 从而可以删除这些样本点来改善 LSSVM 的稀疏性。

根据上述思想, 笔者提出了一种基于马氏距离的支持向量提取算法, 来简化 LSSVM 的回归模型。基本步骤如下:

(1) 计算样本的马氏距离;

$$\begin{cases} d(x_i, x_j) = [(x_i - x_j)^T S^{-1} (x_i - x_j)]^{1/2} \\ S = [1/(N-1)] \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})(x_i - \bar{x})^T \\ \bar{x} = (1/N) \sum_{i=1}^N x_i \end{cases} \tag{8}$$

式中, S 为样本协方差矩阵。

(2) 删除那些马氏距离 $d < \varepsilon$ (给定的 1 个正数) 的样本点, 利用剩余的样本进行 LSSVM 回归

训练。

3 基于改进 PSO 的 LSSVM 的参数优化

由 LSSVM 算法推导过程可知,对于采用 RBF 核函数 LSSVM 模型的预测能力、泛化能力主要取决于参数 c 和 σ 。惩罚因子 c 反映了模型拟合曲线精度, c 越大,训练数据样本点拟合值越符合实际值, c 减小会降低模型的复杂性;核宽度 σ 反映了模型拟合曲线的光滑度。

目前常用的 LSSVM 的参数选择方法有空间穷尽搜索法和交叉验证法等,这些方法具有一定的盲目性且费时,影响了 LSSVM 的预测精度和速度。笔者采用改进的 PSO 算法对 LSSVM 的 2 个参数进行寻优^[9-10],然后利用具有优化参数的 LSSVM 对 fCaO 含量进行预测。

PSO 算法的基本思想是通过初始随机粒子群进行多次迭代运算,从而得出最优解。在 D 维目标搜索空间中,有 m 个粒子组成 1 个群体,其中第 i 个粒子的位置向量为 $x_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{iD})$,速度向量为 $v_i = (v_{i1}, v_{i2}, \dots, v_{iD})$ 。第 i 个粒子迄今为止搜索到的最优位置为 $p_i = (p_{i1}, p_{i2}, \dots, p_{iD})$,整个粒子群搜索到的最优位置为 $p_g = (p_{g1}, p_{g2}, \dots, p_{gD})$,在迭代过程中,粒子通过跟踪这 2 个极值来更新自己:

$$\begin{cases} v_{id}(t+1) = \omega v_{id}(t) + c_1 r_1 (p_{id} - x_{id}(t)) + \\ c_2 r_2 (p_{gd} - x_{id}(t)) \\ x_{id}(t+1) = x_{id}(t) + v_{id}(t+1) \end{cases} \quad (9)$$

式中, $i = 1, 2, \dots, m, d = 1, 2, \dots, D, t$ 为迭代次数, ω 为惯性权重, c_1 和 c_2 为加速因子, r_1 和 r_2 为服从 $[0, 1]$ 上的均匀分布随机数。

惯性权重 ω 的取值大小对 PSO 算法性能有很大影响,如果 ω 的取值随着算法迭代的进行而减小,可明显改善算法的收敛性能。在迭代前期,取较大的 ω 值可增强算法的全局搜索能力,保持解的多样性;在迭代后期,取较小的 ω 值可增强算法的局部搜索能力。为了兼顾粒子全局和局部搜索能力,通过动态变化惯性权重来控制算法进程,笔者提出了一种非线性函数下降策略:

$$\omega(t) = (\omega_{ini} - \omega_{end}) \arctan[(T_{max} - t)/T_{max}] \quad (10)$$

式中, ω_{ini} 为初始惯性权重, ω_{end} 为最大迭代次数时的惯性权重, T_{max} 为最大迭代次数, t 为当前迭代次数。

基于改进 PSO 的 LSSVM 参数优化过程如下:

(1) 对 PSO 算法参数进行初始化:最大迭代次数 T_{max} ,惯性权重 ω_{ini} 和 ω_{end} ,加速因子 c_1 和 c_2 ,粒子群规模 m ,待优化参数 c 和 σ 映射为一粒子群的初

始位置和速度,将每个粒子的初始位置设为该粒子的最优位置 p_i ;

(2) 分别用每个粒子向量 (c, σ) 所对应的 LSSVM 模型对训练样本进行预测,得到训练样本的预测误差作为每个粒子的适应值,适应度函数:

$$f_i = (1/N) \sum_{j=1}^N |(y_{ij} - \hat{y}_{ij})/y_{ij}|$$

式中, N 为训练样本数据个数, y_{ij} 为第 i 个粒子所对应的 LSSVM 模型预测输出值, \hat{y}_{ij} 为训练样本实际输出值。

(3) 将每个粒子的当前适应值与自身最优适应值比较,若更优则更新该粒子的最优位置 p_i ;将群体中粒子的当前最优适应值与群体最优值比较,若更优则将该粒子位置设为群体最优位置 p_g ;

(4) 利用式(9)计算惯性权重,式(8)对粒子的位置和速度更新;

(5) 判断是否满足终止条件(达到最大迭代次数或小于预定精度),若满足则将全局最优粒子 (c, σ) 作为 LSSVM 模型的最优参数;若不满足则转入步骤(2)进行下一步迭代。

4 实例仿真分析

熟料质量主要取决于窑内煅烧情况的变化,根据新型干法水泥生产工艺分析,熟料的烧成过程就是生料、燃料和风温的相互作用过程。生料下料量的大小影响着熟料 fCaO 含量的变化,生料喂料量大,窑内物料不能充分反应,因此 fCaO 含量会增高。窑头温度最能反映并影响窑内物料的烧成情况,此外分解炉出口温度和烟室温度是窑尾距烧成带最近的温度测点,也能反映窑内物料的烧成情况。窑主机电流越大,说明物料越黏,窑内温度越高,相应的 fCaO 含量就越低。综合新型干法水泥生产工艺并结合现场实际情况,选取生料下料量、分解炉温度、烟室温度、窑头温度、窑主机电流和转速 6 个变量作为熟料 fCaO 含量软测量的辅助变量。

从熟料生产线 DCS 系统中选取 64 组数据作为样本数据,随机选择其中的 44 组数据作为训练样本,余下的 20 组数据作为测试样本。首先利用前述马氏距离稀疏化支持向量的方法,删除部分支持值小的样本,得到 30 组数据作为训练样本。

仿真开始时初始化 PSO 及 LSSVM 算法的相关参数:粒子种群规模 m 取 20,最大迭代次数 T_{max} 取 200,惯性权重初值 ω_{ini} 取 1.2,惯性权重终值 ω_{end} 取

0.3, 加速因子 c_1 和 c_2 取 2, 惩罚因子 c 初值取 0.1, 范围设为 $[0.1, 100]$, RBF 核宽度 σ^2 初值取 0.1, 范围设为 $[0.1, 100]$ 。

为验证改进 PSO-LSSVM 算法的有效性, 利用交叉验证法和改进粒子群算法分别对训练样本进行学习训练。通过交叉验证法得到 LSSVM 的 2 个参数 $c = 29.8784$, $\sigma^2 = 0.3067$, 通过 PSO 寻优后得到的 LSSVM 参数 $c = 93.1165$, $\sigma^2 = 0.1452$ 。分别利用上述 2 组参数的 LSSVM 模型对测试样本进行预测, 得到熟料 fCaO 的在线估计值。

利用交叉验证 LSSVM 建模方法得出的熟料 fCaO 含量预测值如图 1 所示。

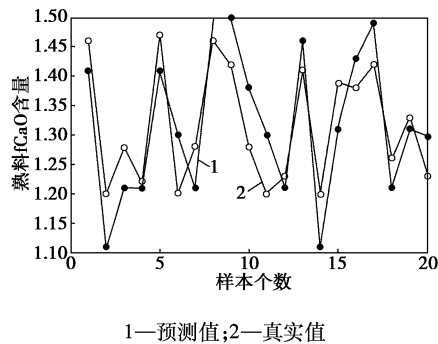


图 1 交叉验证 LSSVM 模型预测结果

利用粒子群优化 LSSVM 建模方法得出的熟料 fCaO 含量预测值如图 2 所示。

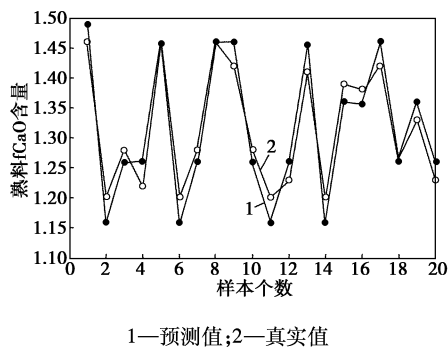


图 2 粒子群优化 LSSVM 模型预测结果

2 种建模方法得出的预测值的泛化结果对比如表 1 所示。

表 1 2 种建模方法预测性能指标

建模方法	RMSE	MAXE
交叉验证法	0.069	0.0832
粒子群优化法	0.0315	0.0349

表 1 中, RMSE 表示均方根误差, MAXE 表示最大相对误差, 表达式为:

$$\begin{cases} \text{RMSE} = [(1/N) \sum_{j=1}^N (y_j - \bar{y}_j)^2]^{1/2} \\ \text{MAXE} = \max_{j=1}^N [(y_j - \bar{y}_j)/y_j] \end{cases} \quad (11)$$

上述仿真结果表明, 基于改进 PSO-LSSVM 的软测量建模方法不仅寻优速度快、收敛性好, 而且具有更好的预测精度和泛化能力。

5 结论

将基于粒子群优化最小二乘支持向量机建模的方法应用于水泥生产中熟料 fCaO 含量的软测量中。该方法首先针对最小二乘支持向量机算法稀疏性差的缺点, 给出了 1 种基于马氏距离修剪支持向量的方法, 从而提高了最小二乘支持向量机模型的在线估计速度。然后针对最小二乘支持向量机算法 2 个重要参数选择的盲目性, 给出了 1 种基于改进粒子群算法的参数优化方法。工厂实例仿真结果表明笔者所提出的基于改进粒子群优化的最小二乘支持向量机的软测量模型具有预测精度高、寻优速度快和泛化能力强等优点, 为新型干法水泥生产过程中一些难以在线测量的重要参数测量提供了一种有效手段。

参考文献

- [1] 王卓, 苑明哲, 王宏, 等. 水泥熟料质量指标的软测量建模研究[J]. 化工自动化及仪表, 2006, 33(6): 53-54, 58.
- [2] 乔景慧, 周晓杰, 柴天佑, 等. 水泥熟料生产过程生料分解率软测量建模[J]. 控制工程, 2011, 18(4): 495-499.
- [3] 范磊, 张运陶. 基于 LSSVM 实现 CO₂ 转化率的软测量建模[J]. 计算机与应用化学, 2006, 23(1): 55-58.
- [4] 常玉清, 王福利, 王小刚, 等. 基于支持向量机的软测量方法及其在生化过程中的应用[J]. 仪器仪表学报, 2006, 27(3): 241-244, 271.
- [5] 陈如清, 俞金寿. 基于粒子群最小二乘支持向量机的软测量建模[J]. 系统仿真学报, 2007, 19(22): 5307-5310.
- [6] 李文莉, 李郁侠. 基于粒子群最小二乘支持向量机水文预测[J]. 计算机应用, 2012, 32(4): 1188-1190.
- [7] 王海峰, 胡德金. 最小二乘支持向量机的一种稀疏算法[J]. 计算机工程与应用, 2005, 33(3): 68-70.
- [8] 陈圣磊, 陈耿, 薛晖. 最小二乘支持向量机分类的稀疏化方法研究[J]. 计算机工程, 2011, 37(22): 145-147, 150.
- [9] 李炜, 石连生, 梁成龙. 基于粒子群优化的 VB-LSSVM 算法研究辛烷值预测建模[J]. 仪器仪表学报, 2009, 30(2): 335-339.
- [10] 贾嵘, 张云, 洪刚. 基于改进 PSO 的 LSSVM 参数优化在变压器故障诊断中的应用[J]. 电力系统保护与控制, 2010, 38(17): 121-124, 152. ■