

DOI: 10.11830/ISSN.1000-5013.201711038



# KPCA-KPLS 方法在 pH 中和过程建模中的应用

朱瑞鹤, 李军

(兰州交通大学 自动化与电气工程学院, 甘肃 兰州 730070)

**摘要:** 针对化工过程中的具有严重非线性、不确定性、时变性的复杂 pH 中和过程系统建模问题, 提出一种基于核主元分析(KPCA)与核偏最小二乘(KPLS)相结合的建模方法. 在高维特征空间内, 该方法通过 KPCA 有效地提取输入数据的非线性主元, 利用 KPLS 方法将输入变量投影在潜在变量上, 再用输入与输出变量之间的协方差信息提取潜在特征建立 pH 中和过程模型. 为验证其有效性, 将 KPCA-KPLS 方法应用到弱酸强碱中和过程、强酸强碱中和过程实例中, 并与核偏最小二乘、核主元分析\_支持向量机(KPCA-SVM)、核极限学习机(KELM)、极限学习机(ELM)、最小二乘支持向量机(LSSVM)、SVM 等方法进行比较. 实验结果表明: KPCA-KPLS 方法具有很高的动态建模精度.

**关键词:** pH 中和过程; 核主成分分析; 核偏最小二乘; 系统建模

**中图分类号:** TP 273.5 **文献标志码:** A **文章编号:** 1000-5013(2018)03-0401-07

## Research on Modeling Method for pH Neutralization Process Using KPCA-KPLS

ZHU Ruihe, LI Jun

(School of Automation and Electrical Engineering, Lanzhou Jiaotong University, Lanzhou 730070, China)

**Abstract:** In terms of pH neutralization process modeling problem with serious nonlinearity, uncertainty and time variability in chemical process, a modeling method via kernel principal component analysis (KPCA) and kernel partial least squares (KPLS) is proposed. This method via KPCA extracts nonlinear principal element of input data in the high-dimensional feature space effectively, and then use the KPLS method project input variable to the latent variables, and extract potential characteristics of the covariance information between input and output variables to establish the pH process model. In order to validity the effectiveness of the proposed kernel-based modeling method, KPCA-KPLS method is applied to the pH neutralization processes instances which including weak acid-strong base process and strong acid-strong base process, and is compared with kernel principal component analysis-support vector machine (KPCA-SVM), kernel extreme learning machine (KELM), extreme learning machine (ELM), least squares support vector machine (LSSVM), support vector machine (SVM) methods etc. The experimental results show that the KPCA-KPLS method has a high dynamic modeling accuracy.

**Keywords:** pH neutralization process; kernel principal component analysis; kernel partial least squares; system modeling

**收稿日期:** 2017-10-13

**通信作者:** 李军(1969-), 男, 博士, 教授, 主要从事计算智能与复杂非线性系统建模及控制的研究. E-mail: lijun691201@mail.lzjtu.cn.

**基金项目:** 国家自然科学基金资助项目(51467008)

pH 中和过程是具有强非线性和不确定的化工过程,其广泛存在于石油化工、污水处理等工业过程中.良好控制流出 pH 值的前提是获取精确地 pH 中和过程模型.近年来,神经网络和模糊逻辑系统等计算智能方法已被广泛应用于 pH 中和过程建模中<sup>[1-2]</sup>,并取得了较好的应用效果. Abdelhadi 等<sup>[3]</sup>比较了径向基函数和局部线性模型两种网络对非线性 pH 中和过程辨识的性能好坏.文献[4-5]采用 Hammerstein 及 Wiener 模型对 pH 中和过程进行研究.吕游等<sup>[6]</sup>将非线性偏最小二乘应用到了 pH 中和过程辨识中.王宏伟等<sup>[7]</sup>提出一个基于 GK(gustafson-kessel)模糊聚类 and 递推最小二乘的 pH 中和过程辨识模型. Li 等<sup>[8]</sup>将动态极限学习机应用到了具有大滞后的非线性 pH 中和过程系统辨识中.目前,支持向量机(SVM)等基于核学习的方法已引起了研究者的广泛关注<sup>[9-22]</sup>,被成功应用于过程建模与辨识中.鉴于核主元分析(KPCA)与核偏最小二乘(KPLS)等核学习方法在过程建模中的成功应用,本文结合 KPCA 与 KPLS 方法各自优点,针对复杂的非线性 pH 中和过程,提出一种新的建模方法,并将其应用于典型 pH 中和过程实例中,以进一步提高复杂非线性化工过程的建模精度及计算效率.

## 1 核主元分析

KPCA 是一种先进的数据处理技术,通过非线性映射将原始数据映射到高维特征空间后再进行 PCA(principal component analysis)处理.若给定训练输入数据  $\mathbf{x}_i(i=1,2,\cdots,l;\mathbf{x}_i\in\mathbf{R}^n)$ ,通过非线性映射  $\phi:\mathbf{x}\in\mathbf{R}^n\rightarrow\phi(\mathbf{x})\in F\subseteq\mathbf{R}^N$  将训练数据映射到  $N$  维特征空间中,构成  $l\times N$  维的矩阵  $\mathbf{X}=[\phi(\mathbf{x}_1)\phi(\mathbf{x}_2)\cdots\phi(\mathbf{x}_l)]^T$ .

定义核矩阵  $\mathbf{K}$  为

$$\mathbf{K}=\mathbf{X}\mathbf{X}^T.$$

(1)

式(1)中: $\mathbf{K}$  的元素为  $K_{i,j}=k(\mathbf{x}_i,\mathbf{x}_j)=\phi(\mathbf{x}_i)^T\phi(\mathbf{x}_j)$ .

核矩阵  $\mathbf{K}$  的协方差矩阵  $\mathbf{\Sigma}$  为

$$l\mathbf{\Sigma}=\mathbf{X}^T\mathbf{X}.$$

(2)

式(2)中: $\mathbf{\Sigma}$  为  $\Sigma_{s,t}=\frac{1}{l}\sum_{i=1}^l\phi(\mathbf{x}_i)_s\phi(\mathbf{x}_i)_t,s,t=1,\cdots,N$ .

对  $\mathbf{K}$  进行中心化处理可得

$$\hat{\mathbf{K}}=\mathbf{K}-\frac{1}{l}\mathbf{I}_l\mathbf{I}_l^T\mathbf{K}-\frac{1}{l}\mathbf{K}\mathbf{I}_l\mathbf{I}_l^T+\frac{1}{2}(\mathbf{I}_l^T\mathbf{K}\mathbf{I}_l)\mathbf{I}_l\mathbf{I}_l^T.$$

(3)

式(3)中: $\mathbf{I}_l$  是元素为 1,长度为  $l$  的列向量.

对  $\mathbf{\Sigma}$  及  $\hat{\mathbf{K}}$  进行特征值分解可得:

$$\hat{\mathbf{K}}=\mathbf{V}\mathbf{\Lambda}_l\mathbf{V}^T,\quad l\mathbf{\Sigma}=\mathbf{U}\mathbf{\Lambda}_N\mathbf{U}^T.$$

(4)

式(4)中:正交矩阵  $\mathbf{V}$  的列  $\mathbf{v}_i$  为  $\hat{\mathbf{K}}$  的特征向量,正交矩阵  $\mathbf{U}$  的各列形成的向量  $\mathbf{u}_i$  为  $l\mathbf{\Sigma}$  的特征向量.

由于  $\hat{\mathbf{K}}$  与  $l\mathbf{\Sigma}$  对称,则  $l\mathbf{\Sigma}$  的任意特征向量  $\mathbf{u}$  与特征值  $\lambda$  可变为  $\hat{\mathbf{K}}$  所对应的特征向量  $\mathbf{X}\mathbf{u}$  与特征值  $\lambda$ .令  $t=\text{rank}(\mathbf{X}\mathbf{X}^T)=\text{rank}(\mathbf{X}^T\mathbf{X})\leqslant\min(N,l)$ ,则  $\mathbf{U}$  的前  $t$  列特征向量构成的矩阵  $\mathbf{U}_t$  可表示为

$$\mathbf{U}_t=\mathbf{X}^T\mathbf{V}_t\mathbf{\Lambda}_t^{-\frac{1}{2}}.$$

(5)

式(5)中: $\hat{\mathbf{K}}$  假定与  $l\mathbf{\Sigma}$  的前  $t$  个非零特征值是按降序排列的.

由式(5)可知: $l\mathbf{\Sigma}$  的第  $j$  个特征向量  $\mathbf{u}_j$  具有一种相应的对偶表示,可由核矩阵  $\hat{\mathbf{K}}$  的相应特征向量  $\mathbf{v}_j$  乘以尺度化因子系数  $\lambda_j^{-\frac{1}{2}}$ ,即

$$\mathbf{u}_j=\lambda_j^{-\frac{1}{2}}\sum_{i=1}^l(\mathbf{v}_j)_i\phi(\mathbf{x}_i)=\sum_{i=1}^l\alpha_i^j\phi(\mathbf{x}_i),\quad j=1,\cdots,t.$$

(6)

式(6)中:向量  $\mathbf{u}_j$  的对偶变量  $\boldsymbol{\alpha}^j=\lambda_j^{-\frac{1}{2}}\mathbf{v}_j,\mathbf{v}_j,\lambda_j$  分别为  $\hat{\mathbf{K}}$  的第  $j$  个特征向量及对应的特征值.

由式(6),若定义  $\mathbf{U}_d$  是特征空间中由前  $d$  个特征向量  $\mathbf{u}_d$  所形成的子空间,训练数据  $\phi(\mathbf{x})$  在该子空间上的  $d$  维向量投影为

$$P\mathbf{U}_d(\phi(\mathbf{x}))=(\mathbf{u}_j^T\phi(\mathbf{x}))_{j=1}^d=((\sum_{i=1}^l\alpha_i^j\phi(\mathbf{x}_i),\phi(\mathbf{x})))_{j=1}^d=((\sum_{i=1}^l\alpha_i^jk(\mathbf{x}_i,\mathbf{x})))_{j=1}^d.$$

(7)

式(7)中: $(\cdot)$  是内积符号; $\alpha_i^j$  为第  $j$  个主元的第  $i$  个元素.将特征值  $\lambda$  按照降序排列,可选取前  $d$  个主

元( $d \leq l$ ). KPCA 中使用最常见的高斯核函数, 其形式为

$$k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \exp \left\{ -\frac{\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2}{2\sigma^2} \right\}. \quad (8)$$

式(8)中:  $\sigma(\sigma > 0)$  为高斯核函数的核宽度参数.

## 2 核偏最小二乘

最小二乘(PLS)方法利用输入变量和输出变量之间的协方差提取数据的潜在特征, 能够克服数据之间存在的多重共线性, 可以实现观测变量多于观测数据的情形. 与主成分分析方法相比, PLS 方法同时利用输入  $\mathbf{X}$  和输出  $\mathbf{Y}$  的协方差选择潜在特征向量. 若给定训练数据  $\{\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i\} \in \mathbf{R}^n \times \mathbf{R}^v, i=1, 2, \dots, l$ , 可构建矩阵  $\mathbf{X} \in \mathbf{R}^{l \times n}, \mathbf{Y} \in \mathbf{R}^{l \times v}$ , PLS 的回归模型描述如下, 即

$$\hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{X}\mathbf{W}. \quad (9)$$

式(9)中:  $\hat{\mathbf{Y}}$  为模型的输出,  $\mathbf{W}$  是维数为  $n \times v$  的回归系数矩阵.

若潜在特征数目为  $L$ , PLS 方法的算法实现有以下 6 个步骤.

1) 初始化, 计算  $\mathbf{X}$  的均值  $\mathbf{X}_1$ .

2) 令  $\hat{\mathbf{Y}} = 0$ , for  $j=1$ , 投影方向向量  $\mathbf{u}_j$  取为  $\mathbf{X}_j^T \mathbf{Y}$  的第 1 列,  $\mathbf{u}_j = \frac{\mathbf{u}_j}{\|\mathbf{u}_j\|}$ .

3) 重复计算  $\mathbf{u}_j = \mathbf{X}_j^T \mathbf{Y} \mathbf{Y}^T \mathbf{X}_j \mathbf{u}_j, \mathbf{u}_j = \frac{\mathbf{u}_j}{\|\mathbf{u}_j\|}$ , 直至  $\mathbf{u}_j$  收敛.

4) 计算  $\mathbf{p}_j = \frac{\mathbf{X}_j^T \mathbf{X}_j \mathbf{u}_j}{\mathbf{u}_j^T \mathbf{X}_j^T \mathbf{X}_j \mathbf{u}_j}, \mathbf{c}_j = \frac{\mathbf{Y}_j^T \mathbf{X}_j \mathbf{u}_j}{\mathbf{u}_j^T \mathbf{X}_j^T \mathbf{X}_j \mathbf{u}_j}$ .

5) 计算输出  $\hat{\mathbf{Y}} = \hat{\mathbf{Y}} + \mathbf{X}_j \mathbf{u}_j \mathbf{c}_j, \mathbf{X}_{j+1} = \mathbf{X}_j (\mathbf{I} - \mathbf{u}_j \mathbf{p}_j^T), j = j + 1$ , 返回步骤 2), 直至  $j=L$  为止.

6) 计算回归系数矩阵  $\mathbf{W} = \mathbf{U}(\mathbf{P}^T \mathbf{U})^{-1} \mathbf{C}^T$ , 给出模型输出  $\hat{\mathbf{Y}}$ .

对 KPLS 方法而言, 定义特征空间中的投影方向向量为  $\boldsymbol{\beta}_j, \boldsymbol{\beta}_j$  是原空间的投影方向向量  $\mathbf{u}_j$  的对偶向量. 相应地, 向量  $\mathbf{c}_j$  在特征空间的对偶表示为  $\boldsymbol{\tau}_j$ , 记核矩阵为  $\mathbf{K}^1$ .

KPLS 的核函数采用线性核, 其形式为

$$k^1(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j. \quad (10)$$

为了消除回归模型中偏置项的影响, 还应对映射至特征空间中的数据进行中心化处理, 需要进行如下变换, 即

$$\mathbf{K}^1 = \left( \mathbf{I} - \frac{1}{l} \mathbf{I}_l \mathbf{I}_l^T \right) \tilde{\mathbf{K}}^1 \left( \mathbf{I} - \frac{1}{l} \mathbf{I}_l \mathbf{I}_l^T \right). \quad (11)$$

式(11)中:  $\tilde{\mathbf{K}}^1$  为未进行中心化的数据核矩阵, 维数为  $l \times l$ .

与 PLS 方法的算法实现相对应, KPLS 方法的算法实现有如下 6 个步骤.

1) 初始化, 定义  $\mathbf{K}_{i,j}^1 = k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j), i, j = 1, \dots, l$ , 计算  $\mathbf{K}^1, \mathbf{K}_1^1 = \mathbf{K}^1, \hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{Y}$ .

2) 进入循环, for  $j=1$ , 在特征空间的投影方向向量  $\boldsymbol{\beta}_j$  取为  $\hat{\mathbf{Y}}$  的第 1 列,  $\boldsymbol{\beta}_j = \frac{\boldsymbol{\beta}_j}{\|\boldsymbol{\beta}_j\|}$ .

3) 重复计算  $\boldsymbol{\beta}_j = \hat{\mathbf{Y}} \hat{\mathbf{Y}}^T \mathbf{K}_j^1 \boldsymbol{\beta}_j, \boldsymbol{\beta}_j = \frac{\boldsymbol{\beta}_j}{\|\boldsymbol{\beta}_j\|}$ , 直至  $\boldsymbol{\beta}_j$  收敛.

4) 计算  $\boldsymbol{\beta}_j = \mathbf{K}_j^1 \boldsymbol{\beta}_j, \mathbf{c}_j = \frac{\mathbf{Y}_j^T \mathbf{X}_j \mathbf{u}_j}{\mathbf{u}_j^T \mathbf{X}_j^T \mathbf{X}_j \mathbf{u}_j} = \frac{\hat{\mathbf{Y}}^T \boldsymbol{\tau}_j}{\boldsymbol{\tau}_j^T \boldsymbol{\tau}_j} = \frac{\hat{\mathbf{Y}}^T \boldsymbol{\tau}_j}{\|\boldsymbol{\tau}_j\|^2}$ .

5) 计算输出  $\hat{\mathbf{Y}} = \hat{\mathbf{Y}} - \boldsymbol{\tau}_j \mathbf{c}_j, \mathbf{K}_{j+1}^1 = \left( \mathbf{I} - \frac{\boldsymbol{\tau}_j \boldsymbol{\tau}_j^T}{\|\boldsymbol{\tau}_j\|^2} \right) \mathbf{K}_j^1 \left( \mathbf{I} - \frac{\boldsymbol{\tau}_j \boldsymbol{\tau}_j^T}{\|\boldsymbol{\tau}_j\|^2} \right), j = j + 1$ , 返回到步骤 2), 直至  $j = L$  为止.

6) 定义矩阵  $\mathbf{B} = [\boldsymbol{\beta}_1, \dots, \boldsymbol{\beta}_L], \mathbf{T} = [\boldsymbol{\tau}_1, \dots, \boldsymbol{\tau}_L]$ , 计算特征空间上的回归系数矩阵  $\boldsymbol{\alpha}$ , 则有  $\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{B}(\mathbf{T}^T \mathbf{K}^1 \mathbf{B})^{-1} \mathbf{T}^T \mathbf{Y}$ .

提取前  $L$  个潜在变量, 在非线形特征空间中, 可将 KPLS 回归模型解释为线性 PLS 回归模型, 有

$$\hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{K} \boldsymbol{\alpha}. \quad (12)$$

3 基于 KPCA-KPLS 的仿真实验

3.1 弱酸强碱中和过程模型

假定 CSTR 处处等温且物料完全混合,设流入物和反应物的流量分别为  $F_a$  和  $F_b$ ,所含浓度分别为  $C_a$  和  $C_b$ ,则其动态模型可表示为

$$V \frac{d\omega_a}{dt} = F_a C_a - (F_a + F_b) \omega_a, \tag{13}$$

$$V \frac{d\omega_b}{dt} = F_b C_b - (F_a + F_b) \omega_b. \tag{14}$$

式(13),(14)中: $V$  为反应器容积; $\omega_a$  为反应器中酸液浓度; $\omega_b$  为反应釜中碱液浓度.

在该模型的基础上,进一步由  $\omega_a, \omega_b$  与 pH 值之间的中和滴定曲线获取流出物的 pH 值.考虑中和的弱酸强碱过程,其中和滴定曲线方程为

$$\omega_b + 10^{-pH} - 10^{pH-14} - \frac{\omega_a}{1 + 10^{pK_a - pH}} = 0. \tag{15}$$

式(15)中: $\omega_a = [HAC] + [AC^-]$ ;  $\omega_b = [Na^+]$ ; 弱酸电离常数  $K_a = \frac{[AC^-][H^+]}{[HAC]}$ ;  $pK_a = -\log_{10} K_a$ .

由式(15)的中和滴定曲线方程可知:pH 值的变化与输入存在着严重的非线性.弱酸强碱中和滴定曲线图,如图 1 所示.由图 1 可知:在 pH=7 附近,该过程对反应釜中再加入的酸碱量的灵敏度极高;测试数据集上的建模输出与真实输出的结果对比具有较好的逼近能力.根据弱酸弱碱中和过程输入数据的构造不同,分为结构 1 和结构 2 两种情况.

结构 1. 给定流入物流量  $F_a$ ,以反应物流量  $F_b$  控制流出物 pH 值的系统.在输入  $F_b$  的稳态值基础上,叠加 $[-51.5, +51.5]$ 范围内均匀变化的随机信号  $\xi$  作为过程的输入信号,且系统参数的取值同文献[1].由式(13)~(15)所描述的机理模型及  $F_b$ ,得到 600 组数据,前 300 组为训练数据集,其余作为测试数据集.模型输入选择  $F_b$  和 pH 值,其辨识模型为

$$\hat{y}_{pH}(t) = \psi(F_b(t-1), y_{pH}(t-1)). \tag{16}$$

式(16)中: $\hat{y}_{pH}$  和  $y_{pH}$  分别表示模型和实际系统的输出.

由交叉验证法确定不同核学习方法的辨识模型参数.KP-CA-KPLS 方法中,KPCA 采用高斯核函数,核宽度  $\sigma=1$ ;KPLS 采用高斯核函数,核宽度  $\sigma=1$ ,潜在变量数目  $L=15$ ;KPCA-SVM 中,SVM 取线性核函数,选取非线性主元数目为 15;LSSVM 中的正则化参数  $C^2=8$ ;SVM 方法使用 Libsvm 软件完成,惩罚因子  $C=100, \epsilon=0.1$ ;ELM 方法中,隐含层节点数目为 50.在训练数据集与测试数据集上的不同方法的建模性能评价,如表 1 所示.由表 1 可知:KPLS 方法的建模精度均明显占优.

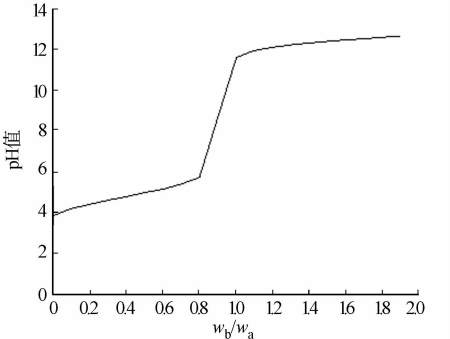


图 1 弱酸强碱中和滴定曲线  
Fig.1 Neutralization titration curve  
of weak acid and strong base

表 1 pH 中和过程建模性能比较

Tab.1 Comparison of pH neutralization process modeling performance

算法	弱酸强碱中和过程						强酸强碱中和过程	
	结构 1(2 个输入)		结构 1(3 个输入)		结构 2		训练 MSE	测试 MSE
	训练 MSE	测试 MSE	训练 MSE	测试 MSE	训练 MSE	测试 MSE		
ELM	0.027 4	0.140 1	0.009 6	0.110 3	0.010 2	0.101 4	0.010 9	0.130 1
SVM	0.009 4	0.090 1	0.005 3	0.075 2	0.005 7	0.089 3	0.007 3	0.072 0
LSSVM	0.009 0	0.087 2	0.003 4	0.061 0	0.006 1	0.078 8	0.005 2	0.059 8
KPCA-SVM	0.007 9	0.073 0	0.003 0	0.053 0	0.005 1	0.072 2	0.004 6	0.060 4
KELM	0.003 8	0.032 4	0.001 1	0.009 8	0.003 1	0.042 8	0.003 3	0.055 1
KPLS	0.003 5	0.012 1	$5.564\ 1 \times 10^4$	0.007 0	0.001 9	0.025 8	0.002 0	0.032 3
KPCA-KPLS	$7.006\ 1 \times 10^4$	0.003 0	$1.416\ 9 \times 10^4$	$9.364\ 0 \times 10^4$	$5.789\ 4 \times 10^4$	0.002 3	$8.625\ 4 \times 10^4$	0.001 7

考虑到增加模型的输入变量可在一定程度上提高建模的精度,可采取具有三个输入的动态辨识模型,即

$$\hat{y}_{pH}(t) = \Gamma(F_b(t-1), F_b(t-2), y_{pH}(t-1)). \tag{17}$$

利用 KPCA - KPLS 对该模型进行辨识,不同方法的参数选取不变. 辨识精度见表 1,测试输出及测试误差如图 2,3 所示. 由图 2,3 可知:对同一方法而言,3 个输入的情形下的建模精度更好一些. 因此,适当增加模型的输入变量能在一定程度上提高建模精度.

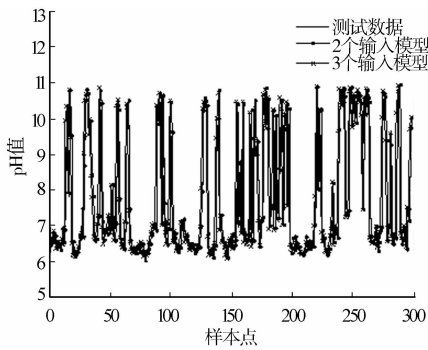


图 2 结构 1 测试输出

Fig. 2 Test output of structure 1

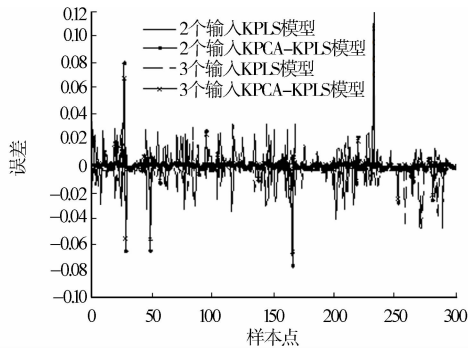


图 3 结构 1 测试误差

Fig. 3 Test error of structure 1

结构 2. 给定流入物流量  $F_a$ ,若建模考虑  $F_b$  为时变输入信号的情形,则

$$F_b(t) = \begin{cases} 51.5 + 51.5\sin(2\pi t/25), & t \leq 150, \\ 51.5 + 25.75\sin(2\pi t/25) + 25.75(2\pi t/10), & t > 150. \end{cases} \tag{18}$$

由式(13)~(15)所描述的机理模型及式(18),可得到 600 组数据,前 300 组为训练数据集,其余作为测试数据集. 针对该过程,模型输入选择  $F_b$  和 pH 值,其辨识模型同式(16).

KPCA - KPLS 方法中,KPCA 采用高斯核函数,核宽度  $\sigma = 15$ ;KPLS 采用高斯核函数,核宽度  $\sigma = 15$ ,潜在变量数目  $L = 35$ ;KPCA - SVM 中,SVM 取线性核函数,选取非线性主元数目为 35;LSSVM 中的正则化参数  $C^2 = 4$ ;SVM 方法使用 Libsvm 软件完成,惩罚因子  $C = 1, \epsilon = 0.1$ ;ELM 方法中,隐含层节点数目为 60.

由建模精度的数值比较(表 1)可知:KPCAS - KPLS 方法的建模精度明显占优. 在训练数据集上 KPCA - KPLS,KPLS 方法的辨识模型输出,如图 4 所示. 由图 4 可知:模型能够较好地适应时变信号输入所引起的输出变化. KPCA - KPLS 方法在测试数据集上的辨识输出,如图 5 所示. 进一步给出在测试数据集上所有方法的测试误差,如图 6 所示. 由图 4~6 可知:文中方法在训练和测试上均具有很好的建模精度.

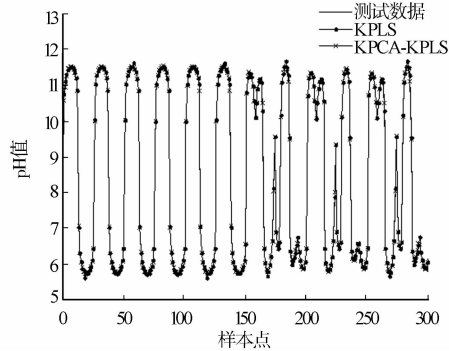


图 4 结构 2 训练输出

Fig. 4 Train output of structure 2

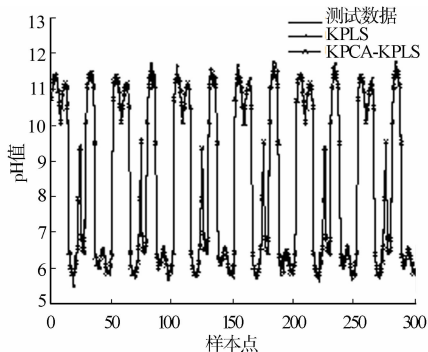


图 5 结构 2 测试输出

Fig. 5 Test output of structure 2

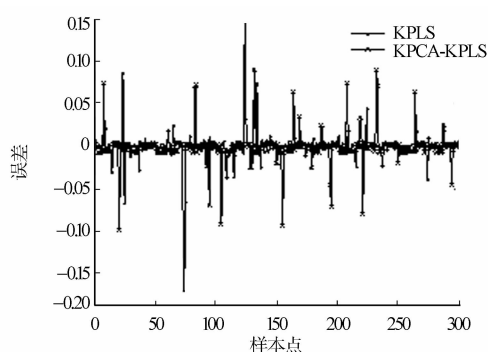


图 6 结构 2 测试误差

Fig. 6 Test error of structure 2

3.2 强酸强碱中和过程模型

HCl 和 NaOH 的强酸强碱过程的中和滴定曲线方程为

$$w_b - w_a + 10^{-pH} - 10^{pH-14} = 0.$$
 (19)

式(19)中: $w_a=[Cl^-]$ , $w_b=[Na^+]$ .

给定流入物流量  $F_a$ , 考虑  $F_b$  为式(18)的时变输入信号情形, 由式(13), (14)所描述的机理模型及式(19), 得到 600 组数据, 前 300 组为训练数据, 其余作为测试数据. 系统参数的取值同文献[1], 辨识模型采用式(16).

实验中, 通过交叉验证方法选取 KPCA-KPLS, KPLS, KPCA-SVM 的核参数  $\sigma=5$ . KPCA-KPLS 方法中, KPLS 采用线性核函数, 潜在变量数目  $L=30$ . KPCA-SVM 中, SVM 取线性核函数, 选取非线性主元数目为 30; LSSVM 中的正则化参数  $C^2=8$ ; SVM 的惩罚因子  $C=200, \epsilon=0.01$ ; ELM 方法中, 隐含层节点数目为 80.

KPCA-KPLS 模型在测试数据集上的各点输出, 如图 7 所示. 所有方法的测试误差比较, 如图 8 所示. 由图 7, 8 可知: 核学习方法具有很好的建模性能. 进一步给出了在同等条件(表 1)下, 由不同方法的建模性能指标对比可知: KPCA-KPLS 方法的建模精度均明显占优, 提高一个数量级以上.

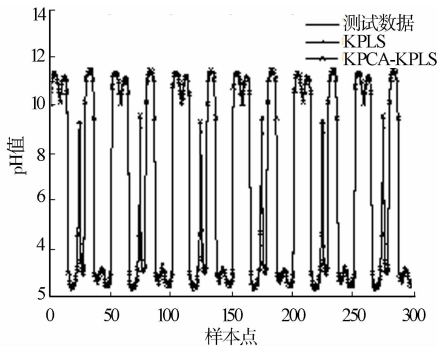


图 7 强酸强碱过程测试输出

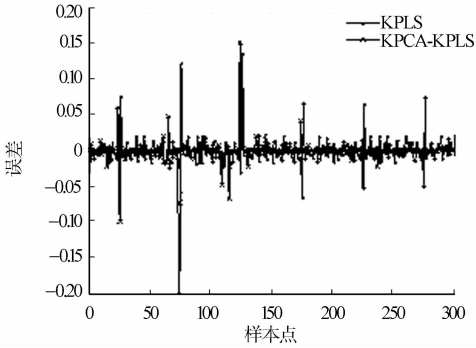


图 8 强酸强碱过程测试误差

Fig. 7 Test output of strong acid-strong base process Fig. 8 Test error of strong acid-strong base process

4 结束语

KPCA 适合解决非线性特征提取问题, 相比 PCA 能够提取更多的主元数目和更多的主元质量, 可以最大限度地提取非线性主元, 消除了输入数据的噪声. KPLS 方法通过引入核变换技术, 克服了高维特征空间特征向量的多重相关性, 可以有效地处理非线性回归建模问题. 将 KPCA 与 KPLS 方法相结合建立了 pH 中和过程模型, 提供了一种新的模型描述方法. 仿真实验表明: 不同情形下, 与其他方法相比, 无论是弱酸强碱还是强酸强碱 pH 中和过程, KPCA-KPLS 方法具有良好的建模精度, 为难以得到精确数学模型的复杂工业过程建模提供新的思路.

参考文献:

[1] NIE J, LOH A P, HANG C C. Modeling pH neutralization processes using fuzzy-neural approaches[J]. Fuzzy Sets and Systems, 1996, 78(1): 5-22. DOI:10.1016/0165-0114(95)00118-2.

[2] 韩敏, 贾小劲. 基于通用学习网络的 pH 控制过程辨识[J]. 大连理工大学学报, 2003, 43(1): 119-123. DOI:10.3321/j.issn:1000-8608.2003.01.025.

[3] ABDELHADI A, GOMM J B, Yu D L, et al. Comparison of RBF and local linear model networks for nonlinear identification of a pH process[C]// Ukacc International Conference on Control. Loughborough: IEEE Press, 2014: 361-366. DOI:10.1109/CONTROL.2014.6915167.

[4] 齐海龙, 王琪, 刘立业, 等. 一种改进人工蜂群算法的 Wiener 模型分步辨识法[J]. 中国科技论文, 2015(14): 1671-1676. DOI:10.3969/j.issn.2095-2783.2015.14.014.

[5] ABINAYADHEVI P, PRASADS J S. Identification of pH process using hammerstein-wiener model[C]// Interna-

- tional Conference on Intelligent Systems and Control, Coimbatore, IEEE Press, 2015; 1-5. DOI: 10. 1109/ISCO. 2015. 7282297.
- [6] 吕游, 刘吉臻, 杨婷婷. 基于非线性偏最小二乘回归的软测量建模及应用[J]. 高校化学工程学报, 2014(4): 818-824. DOI: 10. 3969/j. issn. 1003-9015. 2014. 04. 020.
- [7] 王宏伟, 夏浩. 非均匀多采样率非线性系统的模糊辨识[J]. 控制与决策, 2015(9): 1646-1652. DOI: 10. 3969/j. issn. 1003-9015. 2014. 04. 020.
- [8] LI Dazi, KANG Tianjiao, ZHOU Jinglin, *et al.* Dynamic extreme learning machine identification for nonlinear system with long time delay[C]//中国控制会议. Dalian: [s. n.]. 2017; 2094-2098.
- [9] WANG Qingchao, ZHANG Jianzhong. Wiener model identification and nonlinear model predictive control of a pH neutralization process based on Laguerre filters and least squares support vector machines[J]. Journal of Zhejiang University Science C, 2011, 12(1): 25-35. DOI: 10. 1631/jzus. C0910779.
- [10] 林毅, 蔡福营, 袁宇熹, 等. PCA-SVM模型在几丁质酶最适温度建模中的应用[J]. 华侨大学学报(自然科学版), 2008, 29(2): 236-240. DOI: 10. 11830/ISSN. 1000-5013. 2008. 02. 0236.
- [11] 杨希, 钱锋, 张兵, 等. 基于核函数主元分析的SVM建模方法及应用[J]. 华东理工大学学报(自然科学版), 2007, 33(2): 259-262. DOI: 10. 3969/j. issn. 1006-3080. 2007. 02. 024.
- [12] 王强, 田学民. 基于KPCA-LSSVM的软测量建模方法[J]. 化工学报, 2011, 62(10): 2813-2817. DOI: 10. 3969/j. issn. 0438-1157. 2011. 10. 020.
- [13] 李鸿坤, 陈坚红, 盛德仁, 等. 热力参数的KPCA-RBF网络建模及传感器故障诊断方法[J]. 振动、测试与诊断, 2016, 36(6): 1044-1049. DOI: 10. 16450/j. cnki. issn. 1004-6801. 2016. 06. 002.
- [14] 李军, 常燕芝. 基于KPCA-KMPMR的短期风电功率概率预测[J]. 电力自动化设备, 2017, 37(2): 22-28. DOI: 10. 16081/j. issn. 1006-6047. 2017. 02. 004.
- [15] 熊伟丽, 王肖, 陈敏芳, 等. 基于加权LS-SVM的青霉素发酵过程建模[J]. 化工学报, 2012, 63(9): 2913-2919. DOI: 10. 3969/j. issn. 0438-1157. 2012. 09. 038.
- [16] 李军, 董海鹰. 基于小波核偏最小二乘回归方法的混沌系统建模研究[J]. 物理学报, 2008, 57(8): 4756-4765. DOI: 10. 3321/j. issn: 1000-3290. 2008. 08. 019.
- [17] 汤健, 柴天佑, 余文, 等. 在线KPLS建模方法及在磨机负荷参数集成建模中的应用[J]. 自动化学报, 2013, 39(5): 471-486. DOI: 10. 3724/SP. J. 1004. 2013. 00471.
- [18] 吕游, 刘吉臻, 杨婷婷, 等. 基于PLS特征提取和LS-SVM结合的NO<sub>x</sub>排放特性建模[J]. 仪器仪表学报, 2013, 34(11): 2418-2424. DOI: 10. 19650/j. cnki. cjsi. 2013. 11. 003.
- [19] 莫小琴, 李钟慎. 混沌时间序列的LSSVM预测方法[J]. 华侨大学学报(自然科学版), 2014(4): 373-377. DOI: 10. 11830/ISSN. 1000-5013. 2014. 04. 0373.
- [20] WANG Guicheng, XU Bing, JIANG Wenping. SVM modeling for glutamic acid fermentation process[C]//Control and Decision Conference. Yinchuan: IEEE Press, 2016; 5551-5555. DOI: 10. 1109/CCDC. 2016. 7531989.
- [21] 李炜, 徐鸿飞, 倪源. 基于核函数的PLS丁苯橡胶聚合转化率软测量[J]. 传感器与微系统, 2012, 31(3): 143-146. DOI: 10. 3969/j. issn. 1000-9787. 2012. 03. 042.
- [22] 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. DOI: 10. 3969/j. issn. 1004-731X. 2007. 17. 002.

(责任编辑: 陈志贤      英文审校: 刘源岗)