

文章编号: 1001-0920(2002)02-0143-05

# 利用模糊满意聚类建立 pH 中和过程模型

李 柠, 李少远, 席裕庚  
(上海交通大学 自动化研究所, 上海 200030)

**摘要:** 利用模糊聚类方法建立 pH 中和过程模型。针对模糊聚类中普遍存在的聚类个数需事先给定和收敛速度慢等问题, 在原有聚类方法的基础上提出一种模糊满意聚类算法。该算法能快速确定系统的模糊划分数目, 进而对应聚类个数建立相应的 TS 局部线性化模型。以典型 pH 中和过程为研究对象, 利用上述方法建立其系统模型, 取得了良好的仿真效果, 验证了该聚类算法的快速性和有效性。

**关键词:** 模糊聚类; 满意划分; pH 中和过程; TS 模型

中图分类号: TP 273

文献标识码: A

## Modeling of pH neutralization processes using fuzzy satisfactory clustering

LI Ning, LI Shao-yuan, XI Yu-geng

(Institute of Automation, Shanghai Jiaotong University, Shanghai 200030, China)

**Abstract:** The modeling of pH processes via fuzzy satisfactory clustering algorithm is concerned. A fuzzy clustering algorithm is presented to solve the commonly existed problems in fuzzy clustering algorithm, such as giving clustering number in advance and slow convergence. Using satisfactory clustering algorithm, a nonlinear system can be quickly divided into several fuzzy parts. Regarding cluster number as rule number, TS fuzzy model can be built. According to typical pH processes, satisfied simulation results are obtained by the proposed modeling method. The prompt and effective performance of the modified clustering algorithm is evaluated simultaneously.

**Key words:** fuzzy clustering; satisfactory division; pH neutralization process; TS model

## 1 引 言

pH 中和过程是具有严重非线性和大滞后的复杂工业过程, 广泛存在于化工和污水处理等工艺中。其控制问题一直是工业过程控制的难题, 原因在于 pH 中和滴定曲线的严重非线性, pH 反应的滞后性以及外部干扰的复杂性。人们曾尝试多种控制方案, 如 PID、自适应和模糊控制等<sup>[1-3]</sup>。获得满意的 pH

模型是进行有效控制的重要前提, 一般说, 好的模型应能反映 pH 系统的本质特征, 并且便于为控制方案所采用。Buchholt 等<sup>[1]</sup>和 Pajunen<sup>[2]</sup>分别以线性差分方程作为系统模型, Bhat 等<sup>[4]</sup>建立了系统的神经网络模型, Nie 等<sup>[5]</sup>则利用模糊神经网络来描述 pH 过程。

本文利用模糊聚类来辨识 pH 过程。首先针对模糊聚类中普遍存在的聚类个数难以事先给定和收

收稿日期: 2000-11-13; 修回日期: 2001-03-27

基金项目: 国家自然科学基金项目(60074004, 69934020); 上海市曙光计划项目

作者简介: 李柠(1974—), 女, 山东淄博人, 博士生, 从事复杂工业过程建模与控制、预测控制等研究; 席裕庚(1946—), 男,

© 1994-2011, CNKI 教授, 博士生导师, 从事预测控制、大系统和智能机器人等研究。rights reserved. <http://www.cnki.net>

敛速度慢等问题,在原有算法的基础上提出一种模糊满意聚类算法,该算法能快速确定系统的模糊划分数目;然后以聚类数目作为规则数,构建系统的 TS 型模型;最后结合 pH 过程进行仿真研究,通过与已有建模结果进行比较,验证了算法的可行性和有效性。

## 2 pH 中和过程机理描述

pH 过程通过反应物(碱液/酸液)对流入物(酸液/碱液)进行中和,并检测流出物获取反应器中溶液的 pH 值。虽然由于物料所含成分不同以及反应器装置不同,使得实际 pH 过程呈现复杂多变的特质,但仍可用数学动态模型来解释 pH 过程在连续搅拌式反应器(CSTR)中的主要特性<sup>[4,5]</sup>。

### 2.1 单输出

假设 CSTR 中处处等温且物料完全混合。McAvoy 给出了 pH 动态数学模型<sup>[5]</sup>。设进入 CSTR 的物流有两种:流入物(酸液)和反应物(碱液)。其中酸液流量为  $F_a$ ,所含成分浓度为  $C_a$ ;相应地,碱液流量为  $F_b$ ,所含成分浓度为  $C_b$ 。则 CSTR 的动态模型可描述为

$$V \frac{dw_a}{dt} = F_a C_a - (F_a + F_b) w_a \quad (1)$$

$$V \frac{dw_b}{dt} = F_b C_b - (F_a + F_b) w_b \quad (2)$$

其中,  $V$  为反应器的容积,  $w_a$  和  $w_b$  分别为酸液和碱液的浓度。式(1)和(2)反映了  $w_a$  和  $w_b$  随流量  $F_a$  和  $F_b$  的变化。若获得流出物料中的 pH 值,则需通过反映  $w_a$  和  $w_b$  与 pH 之间关系的中和滴定曲线来完成。为此,考虑弱酸(HAC)强碱(NaOH)中和过程,其中和滴定曲线方程为

$$w_b + 10^{-\text{pH}} - 10^{\text{pH}-14} - \frac{w_a}{1 + 10^{pK_a - \text{pH}}} = 0 \quad (3)$$

其中,  $w_a = [\text{HAC}] + [\text{AC}^-]$ ,  $w_b = [\text{Na}^+]$ ,  $K_a$  为弱酸电离常数,且  $pK_a = -\lg K_a$ 。图 1 清晰地反映了系统非线性特征:在中和点附近灵敏度很高,在远离

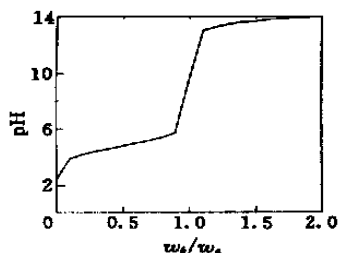


图 1 弱酸强碱中和滴定曲线

中和点处的灵敏度却很低。

### 2.2 双输出

考虑一包含 3 股反应物流的系统:  $\text{HNO}_3$ ,  $\text{NaOH}$  和  $\text{NaHCO}_3$ , 该系统同时有两个输出: CSTR 中的液位  $h$  和流出物的 pH 值<sup>[5]</sup>。分别以流量  $F_a$ ,  $F_b$  和  $F_f$  表示上述 3 种反应物,并定义

$$w_a = [\text{H}^+] - [\text{OH}^-] - [\text{HCO}_3^-] - 2[\text{CO}_3^{2-}]$$

$$w_b = [\text{H}_2\text{CO}_3] + [\text{HCO}_3^-] + [\text{CO}_3^{2-}]$$

$$K_w = [\text{H}^+][\text{OH}^-]$$

$$pK_1 = -\lg K_{a1}$$

$$K_{a1} = \frac{[\text{HCO}_3^-][\text{H}^+]}{[\text{H}_2\text{CO}_3]}$$

$$K_{a2} = \frac{[\text{CO}_3^{2-}][\text{H}^+]}{[\text{HCO}_3^-]}$$

$$pK_2 = -\lg K_{a2}$$

则静态滴定曲线函数为<sup>[5]</sup>

$$w_a - 10^{-\text{pH}} + 10^{\text{pH}-14} + w_b \frac{1 + 2 \times 10^{\text{pH}-pK_2}}{1 + 10^{pK_1-\text{pH}} + 10^{\text{pH}-pK_2}} = 0 \quad (4)$$

系统机理模型的动态部分表示为如下状态方程

$$dx/dt = f(x) + g(x)u + p(x)d \quad (5)$$

$$c(x, y) = 0 \quad (6)$$

其中,  $x = [x_1 \ x_2 \ x_3]^T$ ,  $x_1 = h$ ,  $x_2$  和  $x_3$  为中间变量,  $u = [F_a, F_b]^T$ ,  $d = F_f$ ,  $y = [h, \text{pH}]^T$ ,  $c = [c_1, c_2]$ , 而

$$f(x) = \left[ -\frac{cvx_1^{1/2}}{A} \quad 0 \quad 0 \right]^T \quad (7)$$

$$g(x) = \begin{bmatrix} 1/A & 1/A \\ \frac{1}{Ax_1}(w_{aa} - x_2) & \frac{1}{Ax_1}(w_{ba} - x_2) \\ \frac{1}{Ax_1}(w_{ab} - x_3) & \frac{1}{Ax_1}(w_{bb} - x_3) \end{bmatrix} \quad (8)$$

$$p(x) = \left[ \frac{1}{A} \quad \frac{1}{Ax_1}(w_{fa} - x_2) \quad \frac{1}{Ax_1}(w_{fb} - x_3) \right]^T \quad (9)$$

$$c_1(x, y) = y_1 - x_1 \quad (10)$$

$$c_2(x, y) = 0 \quad (11)$$

其中,  $c_2(x, y)$  由式(4)定义,  $cv$  是阀门参数,  $h$  代表液位;  $w_{aa}$ ,  $w_{ba}$ ,  $w_{fa}$  和  $w_{ab}$ ,  $w_{bb}$ ,  $w_{fb}$  表示反应常数。该过程可看作一两输入( $F_a, F_b$ )两输出( $h, \text{pH}$ )系统,而  $\text{NaHCO}_3$  则可看作系统的扰动。

## 3 基于模糊满意聚类 TS 模型

缺乏足够先验知识的系统而言, 其辨识过程往往较为困难。采用聚类辨识其前提部分是一种可行的方法。聚类主要用于将数据集按一定的相似性准则划分成多个子集, 以表征系统的不同性征。它分为硬聚类和模糊聚类两种, 前者主要用于聚类间边界明显的情况, 而对于聚类边界不十分清晰的系统则常采用后者。Gustafson-Kessel (GK) 算法<sup>[6]</sup> 是模糊聚类方法中非常有效的一种, 它通过聚类协方差矩阵, 采用自适应的距离度量进行模糊聚类。

模糊聚类算法一般要事先给定聚类个数  $c$ , 这往往成为制约其应用的一个因素。目前较常见的  $c$  确定方法有两种<sup>[7]</sup>: 比较法和融合法。前者利用某种度量指标来评价聚类的质量, 即将样本集进行若干次聚类,  $c \in [2, N]$ ,  $N$  表示样本个数, 其中对应于最小度量指标的聚类个数即被视为最佳的聚类数目; 后者从某较大的聚类个数  $c_{\max}$  开始聚类,  $c \in [2, c_{\max}]$ , 陆续合并相近或相似的聚类中心, 以减少聚类数目。由于聚类个数本质上依赖于系统所呈现的非线性程度, 一般只能采用试凑比较的方法来逐步确定聚类个数, 这无疑会增加计算负担。

由此提出基于 GK 的模糊满意聚类算法。该算法规定初始聚类个数  $c = 2$ , 根据用户关心的性能指标确定是否增加新的聚类 ( $c \in [2, c^*]$ )。若聚类效果尚未令人满意, 则在样本集中找出一个与聚类中心  $v_1 \sim v_c$  最不相似的样本作为新的聚类中心  $v_{c+1}$ , 并以  $v_1 \sim v_{c+1}$  为初始聚类中心。在此基础上计算新的非随机隶属度矩阵  $U$ , 并用 GK 算法重新对系统进行  $c + 1$  类划分。按性能指标的要求重复上述步骤, 直到得出令人满意的结果。此时所得的聚类个数原则上一定是满足要求的聚类数目。由于  $c^* \in [2, c_{\max}]$

$N$ , 且计算过程中无需重新初始化随机的聚类中心和隶属度矩阵, 计算量大大降低, 算法收敛速度明显加快。

考虑一 MISO 系统, 其样本集由系统的输入输出数据组成。假设其样本表示为  $(\mathcal{Q}, y_j)$ ,  $j = 1, 2, \dots, N$ ,  $\mathcal{Q}$  表示影响系统输出的递推向量, 一般选择系统当前及以往的输入输出作为其分量,  $y_j$  是系统输出。定义  $z_j = [\mathcal{Q}, y_j]^T$ , 则样本集可表示为  $Z = [z_1, \dots, z_N]$ ,  $z_j \in R^{d+1}$ 。假定样本集  $Z$  被分成  $c$  个聚类  $\{Z_1, Z_2, \dots, Z_c\}$ , 则系统可由  $c$  条规则  $\{R_1, R_2, \dots, R_c\}$  表征。

基于 GK 模糊满意聚类的模型构造方法如下:

Step1: 令初始聚类个数 / 规则数  $c = 2$ 。

Step2: 由初始隶属度矩阵  $U_0$ , 利用 GK 算法对

样本集合  $Z$  进行分类, 得出隶属度矩阵  $U = [\mu_{i,j}]_{c \times N}$ ; 然后根据每组样本所属各子集的隶属度选取最大值进行分类, 将  $Z$  分为  $c$  个子集  $\{Z_1, Z_2, \dots, Z_c\}$ 。

Step3: 对聚类后生成的每个子集, 采用稳态 Kalman 滤波器迭代算法<sup>[8]</sup> 辨识各规则结论部分参数, 借助 Step2 中生成的隶属度矩阵  $U$ , 易得参数集  $P = [p_0^1, \dots, p_0^c, p_1^1, \dots, p_1^c, \dots, p_d^1, \dots, p_d^c]^T$ , 则对应各聚类中心的规则可描述为

$$\begin{aligned} R_1: & \text{if } (\mathcal{Q}, y_j) \in Z_1, \text{ then} \\ & y^1 = p_0^1 + p_1^1 \mathcal{Q}(1) + \dots + p_d^1 \mathcal{Q}(d) \\ R_c: & \text{if } (\mathcal{Q}, y_j) \in Z_c, \text{ then} \\ & y^c = p_0^c + p_1^c \mathcal{Q}(1) + \dots + p_d^c \mathcal{Q}(d) \end{aligned} \quad (12)$$

Step4: 计算出来的隶属度矩阵  $U = [\mu_{i,j}]_{c \times N}$ , 可直接作为输入  $z_j$  隶属于第  $j$  条规则的程度, 则对应输入  $z_j$  的系统输出为

$$\hat{y} = \frac{\sum_{i=1}^c \mu_{ij} y_i}{\sum_{i=1}^c \mu_{ij}} \quad (13)$$

Step5: 计算给定的系统性能指标  $S$  的当前值  $S_c$ , 对于系统建模而言, 往往通过模型的均方根误差指标

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - y_i)^2} \quad (14)$$

来衡量模型拟合效果。若  $S_c \leq S_{\text{TH}}$ ,  $S_{\text{TH}}$  为用户认为满意的性能指标阈值, 则认为模型构建结束, 否则转 Step6。

Step6: 在样本集中, 根据隶属度矩阵  $U$  并按

$$n = \arg \min_{i,j} (\mu_{ni} - \mu_{nj}) \quad (15)$$

找出一个与各子集均不相似样本  $z_n$ ,  $n = 1, 2, \dots, N$ 。为避免噪声, 一般应找出几个类似的样本, 求其平均值作为新的聚类中心  $v_{c+1}$ 。

Step7: 以  $v_1, \dots, v_c, v_{c+1}$  为新的聚类初始中心, 计算相应的新的初始隶属度矩阵  $U_0$ , 而非比较法中重新初始化的随机矩阵。

Step8: 令  $c = c + 1$ , 转 Step2。

GK 模糊满意聚类算法避免了聚类融和方法中根据系统非线性特征确定  $c_{\max}$ , 而直接采用  $c = 2$  为初始化条件, 使算法有了确定的初始聚类个数。并且除初次聚类外, 以后聚类初始化参数(如聚类中心和隶属度矩阵)可基本确定, 而不必从随机量开始重新聚类, 因此计算量大大降低, 算法收敛速度明显加快, 对于大样本量的数据集, 性能改善将更为明显。

## 4 仿真研究

### 4.1 弱酸强碱中和过程

考虑式 (1) ~ (3) 描述的弱酸强碱中和过程。给定酸液流量  $F_a$ , 则系统输入输出分别为碱液流量  $F_b$  和流出物的 pH 值。样本集  $(F_b, y_{pH})$  可通过机理模型 (1) ~ (3) 得到。在  $F_b$  中加入  $[-51.5, +51.5]$  范围内的变化量, 并由此产生 300 组样本。

#### 4.1.1 两个模型输入

设 TS 模型包含两个输入量, 则模型表达为

$$\hat{y}_{pH}(t) = \Psi(F_b(t-1), y_{pH}(t-1)) \quad (16)$$

其中  $\hat{y}_{pH}$  和  $y_{pH}$  分别表示模糊模型和实际系统的输出。

从 300 组输入输出样本集  $(F_b(t-1), y_{pH}(t-1), y_{pH}(t))$  出发, 采用本文提出的基于模糊满意聚类的建模方法辨识该过程, 结果如图 2 所示。其模糊聚类个数为 4, RMSE 为 0.312 1, 优于文献[5] 所得结果(见表 1)。

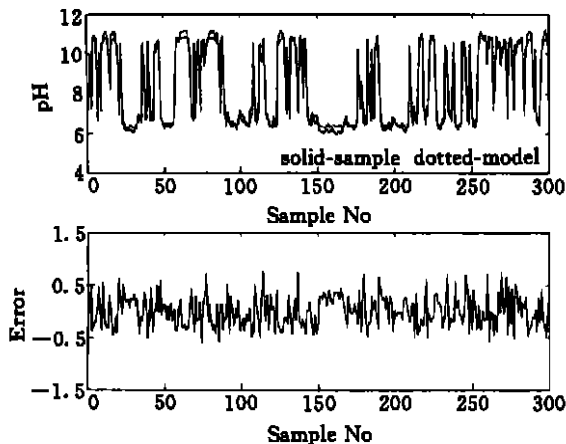


图 2 弱酸强碱过程两输入 TS 模型辨识结果

表 1 建模效果比较

| 模型参数 | 弱酸强碱                  |       | 两输出 pH 过程 |       |       |
|------|-----------------------|-------|-----------|-------|-------|
|      | 两输入                   | 三输入   | pH        | $h$   |       |
| 规则数  | USOCPN <sup>[5]</sup> | 71    | 123       | 44    | 44    |
|      | 本文方法                  | 4     | 5         | 10    | 10    |
| RMSE | SSOCPN <sup>[5]</sup> | 0.748 | 0.512     | 0.217 | 0.114 |
|      | 本文方法                  | 0.312 | 0.261     | 0.105 | 0.023 |

#### 4.1.2 三个模型输入

适当增加模糊模型的输入变量个数, 可在一定程度上提高模型辨识精度, 这是因为系统的输出往往依赖于当前及以往几个时刻的输入和输出信号。实际上, 由于缺乏系统的求解方法, 往往采用试验法

来选取模型的输入变量。本例采用三个模型输入来辨识弱酸强碱中和系统, 即  $F_b(t-1), F_b(t-2)$  和  $y_{pH}(t-1)$ 。模型表达式为

$$y_{pH}(t) = \Gamma(F_b(t-1), F_b(t-2), y_{pH}(t-1)) \quad (17)$$

采用 4.1.1 节样本构造方法, 建立输入输出样本集为  $(F_b(t-1), F_b(t-2), y_{pH}(t-1), y_{pH}(t))$ 。仿真研究表明, 当聚类个数大于 5 时, 采用本文方法能获得良好的建模效果。图 3 给出了当  $c=7$  时的模型辨识误差曲线, RMSE = 0.233 6(详见表 1)。本例表明, 虽然模型辨识精度较两模型输入确有提高, 但规则数由 4 增加至 5, 其代价也不可忽视。

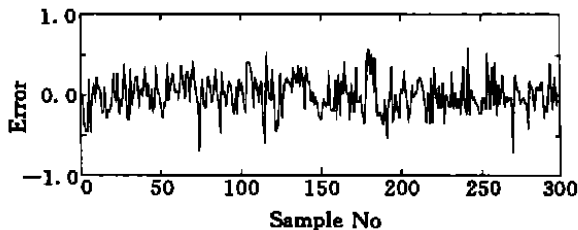


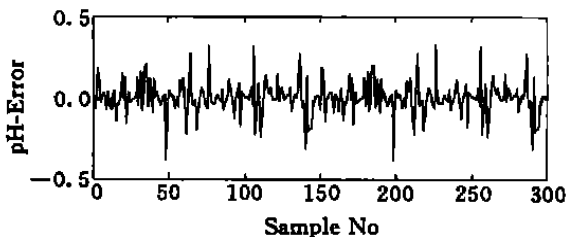
图 3 弱酸强碱过程三输入模型辨识误差曲线

### 4.2 两输出中和过程

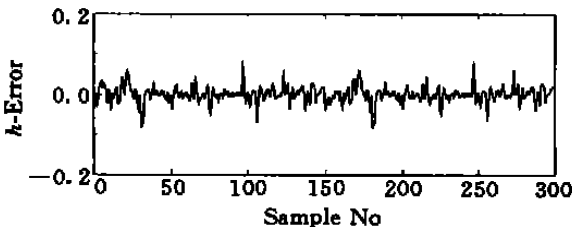
对于如式 (5) 和 (6) 所描述的两输出变量中和过程, 采用文献[5] 提供的系统参数, 系统的输入输出函数关系可表示为

$$y_{pH}(t) = \Psi_{pH}(F_a(t-1), F_b(t-1), F_{bf}(t-1), y_h(t-1), y_{pH}(t-1)) \quad (18)$$

$$y_h(t) = \Psi_h(F_a(t-1), F_b(t-1), F_{bf}(t-1), y_h(t-1), y_{pH}(t-1)) \quad (19)$$



(a) pH 通道



(b)  $h$  通道

图 4 双输出中和过程 TS 模型辨识误差曲线

显然, 由于 pH 与各模型输入之间的非线性关系以及与另一通道之间的耦合, 使得其模型辨识更加困难。给定系统流入溶液的流量变化为

$$F_a(t) = 16 + 4\sin(2\pi t/15) \quad (20)$$

$$F_b(t) = 16 + 4\cos(2\pi t/25) \quad (21)$$

$$F_{\text{eff}}(t) = 0.55 + 0.055\sin(2\pi t/10) \quad (22)$$

图 4 给出了采用本文建模方法, 聚类个数为  $c = 10$  时两通道辨识结果的误差曲线。由于 pH 的强非线性,  $h$  通道误差远远小于 pH 通道。pH 和  $h$  模型的 RMSE 分别为 0.105 0 和 0.022 8, 优于文献[5]方法(见表 1)。

## 5 结 语

本文从系统输入输出数据出发, 利用模糊聚类辨识 pH 过程, 提供了一种新型的模型描述方法。文中提出一种模糊满意聚类算法, 该算法能快速确定系统的模糊划分数目, 并以聚类数目作为规则数, 构建系统的 TS 型模型。对 pH 过程的仿真研究验证了采用基于模糊聚类的 TS 模型描述强非线性复杂系统的合理性和有效性。值得注意的是: 本文方法不仅解决了聚类方法本身存在的问题, 也为 TS 规则个数的选取以及进一步解决多模型策略中的关键问题——模型集确立与优化提供了可行思路。

## 参考文献(References):

- [1] Buchholt F, Kummel M. Self-tuning control of a pH-neutralization process[J]. Automatica, 1979, 15(6): 665-671.
- [2] Pajunen G A. Comparison of linear and nonlinear adaptive control of a pH process[J]. IEEE Control Systems Magazine, 1987, 7(1): 39-44.
- [3] Karr C L, Gentry E J. Fuzzy control of pH using genetic algorithms [J]. IEEE Trans on Fuzzy Systems, 1993, 1(1): 46-53.
- [4] Bhat N V, Minderman P A, Jr Macvoy T, et al. Modeling chemical process systems via neural computation [J]. IEEE Control Systems Magazine, 1990, 10(3): 24-30.
- [5] Nie J H, Loh A P, Hang C C. Modeling pH neutralization processes using fuzzy-neural approaches[J]. Fuzzy Sets and Systems, 1996, 78(1): 5-22.
- [6] Gustafson D, Kessel W C. Fuzzy clustering with a fuzzy covariance matrix [A]. Proc of IEEE CDC [C]. San Diego, 1979. 761-766.
- [7] Murray S R, Johansen T A. Multiple model approaches to modeling and control [M]. London: Taylor and Francis, 1997.
- [8] Takagi T, Sugeno M. Fuzzy identification of systems and its applications to modeling and control [J]. IEEE Trans on SMC, 1985, 15(1): 116-132.

(上接第 142 页)

## 参考文献(References):

- [1] 张德干, 赵海. 小波变换用于沙漠化土地景观格局的分析[J]. 东北大学学报(J of Northeastern Univ), 2001, 22(1): 25-28.
- [2] Vaidyanathan P P, Huong P Q. Lattice structures for optimal design and robust implementation of two-channel perfect-reconstruction QMF banks[J]. IEEE Trans on ASSP, 1997, 36(1): 81-94.
- [3] 张德干. 小波变换在数字图像处理中的应用研究[D]. 沈阳: 东北大学, 2000.
- [4] G Strang. Creating and comparing wavelets [A]. Numerical Analysis [C]. Singapore: World Scientific, 1996.
- [5] A Cohen, I Daubechies, J C Feauveau. Bi-orthogonal bases of compactly supported wavelets [J]. Commun Pure Appl Math, 1992, 45: 485-560.
- [6] A Cohen, I Daubechies, P Vial. Wavelets on the interval and fast wavelet transforms[J]. Appl Comput Harmon Anal, 1993, 1: 54-81.
- [7] Wickerhauser M V. Adapted wavelet analysis from theory to software[M]. New York: SIAM, 1994, 442-462.
- [8] Chen H L. Periodic orthogonal quasi-wavelet bases[J]. Chinese Science Bulletin, 1996, 41(7): 552-554.
- [9] Geronimo J S. Fractal functions and wavelet expansions based on several scaling functions[J]. J Approx Theory, 1996, 78: 373-401.
- [10] 张德干, 赵海. 一种基于快速傅立叶变换的小波变换方法[J]. 东北大学学报(J of Northeastern Univ), 2000, 21(6): 598-602.