

文章编号: 1001-0920(2005)04-0417-04

M ISO 系统的混合核函数 LS-SVM 建模

朱燕飞, 伍建平, 李琦, 毛宗源

(华南理工大学 自动化科学与工程学院, 广东 广州 510640)

摘 要: 将 LS-SVM 非线性建模思想应用于锌钡白转窑煅烧过程的 M ISO 系统建模。研究发现, 系统选取不同的核函数, 对模型的拟合性能和预测(泛化)性能有很大的影响。采用基于混合核函数的 LS-SVM 建模方法解决上述问题, 该方法可使系统具有满意的模型拟合输出, 能有效抑制局部核函数所引起的预测输出波动, 取得了良好的综合辨识效果。

关键词: 最小二乘支持向量机; 建模; 核函数; 锌钡白

中图分类号: TP18 **文献标识码:** A

Modeling of LS-SVM based on mixtures of kernels for M ISO systems

ZHU Yan-fei, WU Jian-ping, LI Qi, MAO Zong-yuan

(College of Automation Science and Engineering, South China University of Technology, Guangzhou 510640, China. Correspondent: ZHU Yan-fei, E-mail: yanfei_zhu@163.com)

Abstract: Least squares support vector machines (LS-SVM) is used to solve the multi-input and single output (M ISO) modeling problem of lithopone calcination process in rotary kiln. The modeling research discovers that the kernels of LS-SVM have deep influence on fitting and prediction (generalization) performance. To solve this problem, a new kind of LS-SVM based on mixtures of kernels is proposed. This new method not only makes the system get a satisfied fitting output, but also effectively restrains the fluctuation of the prediction output caused by local kernels.

Key words: LS-SVM; modeling; kernels; lithopone

1 引 言

锌钡白转窑煅烧过程是锌钡白生产中的关键工艺过程, 它通过煅烧温度和煅烧转速的调节, 创造良好的过程煅烧条件, 以提高煅烧产品的质量^[1]。由于转窑煅烧温度很高, 内部流场变化复杂, 并且检测点数量极少以及转窑的封闭性等不利条件, 建立此类过程的模型非常困难^[2,3]。

近年发展起来的支持向量机(SVM)方法, 为解决这类复杂过程的建模问题提供了一条新的途径。SVM 是建立在统计学习理论基础上的—种机器学习算法^[4]。它采用结构风险最小化原则代替传统基

于大样本的经验风险最小化原则, 在机器学习中具有更强的理论依据和更好的泛化能力^[5]。作为 SVM 的扩展, 最小二乘支持向量机(LS-SVM)^[6]解决了大样本量数据建模和 SVM 运算速度慢的问题。

煅烧过程实际所需煅烧转速的大小受到转窑多个参量的共同影响^[2]。本文通过提取过程煅烧温度、干燥温度、排风温度、煅烧转速、进料量等多个关键参量的实测数据, 进行过程 LS-SVM 的 M ISO 建模。研究发现, LS-SVM 核函数 $K(X_i, X_j)$ 的类型对模型的特性有重要影响, 不同的核函数, 其模型的拟合性能或预测(泛化)性能都有自身不足之处。为此, 采用

收稿日期: 2004-05-31; 修回日期: 2004-07-30

基金项目: 广东省科技厅工业攻关项目(C10909); 广州市科技局工业攻关项目(2003Z3-D0091)。

作者简介: 朱燕飞(1976—), 女, 广东罗定人, 博士生, 从事工业过程控制、智能控制的研究; 毛宗源(1936—), 男, 浙江江山人, 教授, 博士生导师, 从事工业自动化及建模、智能控制等研究。

一种基于混合核函数^[7]的LS-SVM建模方法,它由两种典型的全局核函数(Polynomial函数)和局部核函数(RBF函数)组合构成。这样既能取得良好的模型拟合和预测效果,又能有效地抑制局部核函数所引起的预测输出波动,较好地解决了煅烧过程MISO的建模问题。

2 LS-SVM的MISO建模

SVM的非线性建模是将非线性问题经某个非线性变换 $\Phi(x)$,转化成高维特征空间的线性问题。其变换由满足Mercer条件的核函数 $K(x_i, x_j)$ 确定^[8],有 $K(x_i, x_j) = \Phi(x_i) \Phi(x_j)$ 。对于MISO系统,系统的输入由矩阵 X 的形式给出,相应的变换函数及核函数表示为 $\Phi(X)$ 和 $K(X_i, X_j)$ 。

LS-SVM作为SVM的扩展,采用最小二乘线性系统代替二次规划方法实现学习问题。在精度要求范围内,LS-SVM比SVM有更快的学习速度,并且结构简单,算法简练。

对有 m 个输入的MISO系统, X 和 y 分别为系统输入和输出,其最优化目标函数为

$$\min_{w, b, e} \left[\frac{1}{2} w^T w + \gamma \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n e_i^2 \right],$$

$$\text{s.t. } y_i [w^T \Phi(X_i) + b] = 1 - e_i \quad (1)$$

其中 $X_i = [x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{im}]$, $i = 1, 2, \dots, n$, n 为样本量大小, m 为系统输入维数。

构造拉格朗日函数求解,有

$$\max_{\alpha} \min_{w, b} \left\{ L = \frac{1}{2} w^T w + \gamma \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n e_i^2 - \sum_{i=1}^n \alpha_i \{ y_i [w^T \Phi(X_i) + b] - 1 + e_i \} \right\},$$

$$i = 1, 2, \dots, n \quad (2)$$

依据Karush-Kuhn-Tucker最优条件,求得最优解

$$\frac{\partial L}{\partial w} = 0 \quad w = \sum_{i=1}^n \alpha_i y_i \Phi(X_i), \quad (3)$$

$$\frac{\partial L}{\partial b} = 0 \quad \sum_{i=1}^n \alpha_i y_i = 0, \quad (4)$$

$$\frac{\partial L}{\partial e_i} = 0 \quad \alpha_i = \gamma e_i, \quad (5)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \alpha} = 0 \quad y_i [w^T \Phi(X_i) + b] - 1 + e_i = 0 \quad (6)$$

转化为线性矩阵方程,有

$$\begin{bmatrix} 0 & Y^T \\ Y & ZZ^T + \gamma^{-1} I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b \\ \alpha \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ I \end{bmatrix}. \quad (7)$$

其中

$$Z = [\Phi(X_1)y_1, \dots, \Phi(X_n)y_n],$$

$$Y = [y_1, y_2, \dots, y_n],$$

$$I = [1, 1, \dots, 1],$$

$$e = [e_1, e_2, \dots, e_n],$$

$$\alpha = [\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n],$$

$$X_i = [x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{im}]$$

利用最小二乘法可解上述线性系统。

3 混合核函数

核函数用内积运算代替高维特征空间的复杂运算,解决了高维特征空间计算带来的“维数灾难”问题。特征空间的维数决定了能构造的线性分类面的最大VC维,通过调节不同的核参数,隐式地改变特征空间的维数,便决定了线性分类面能达到的最小经验误差^[9]。因此,核函数及核参数的选取对SVM的建模性能有很大影响。

本文针对锌钡白化工生产煅烧过程的建模问题,选取多种核函数进行SVM建模,发现在各种核函数中,有的具有良好的拟合性能,但预测(泛化)性能较弱;有的预测(泛化)性能良好,但拟合精度不高。二者不能同时兼具。

Smits和Jordaan通过研究两种具有代表性的全局核函数(Polynomial核函数)和局部核函数(RBF核函数)的映射特性,将二者组合构成一种混合核函数SVM^[7]。本文将混合核函数与LS-SVM结合起来,提出一种基于混合核函数的LS-SVM建模方法。该方法不仅具有良好的模型拟合精度,而且能有效抑制局部核函数所引起的预测输出波动,解决了煅烧过程中MISO的建模问题。

按照Mercer定理,核函数在任意有限点集上定义的核矩阵是半正定的对称阵。它满足一定数目的闭性质,即允许从简单的构件块创立复杂的核^[5]。

命题1 令 K_1 和 K_2 是在 $X \times X$ 上的核, $X \subseteq R^n$, $f(\cdot)$ 是 X 上的一个实值函数。则下面的函数仍是核函数:

- 1) $K(X, Z) = p(K_1(X, Z))$,
- 2) $K(X, Z) = K_1(X, Z) + K_2(X, Z)$,
- 3) $K(X, Z) = K_1(X, Z)K_2(X, Z)$,
- 4) $K(X, Z) = f(X)f(Z)$ 。

依据上述命题,可在已知核函数的基础上导出新的核函数。

支持向量机使用的多种核函数,归纳起来可分为全局核函数和局部核函数两类。对于全局核函数,距测试点 x_i 越远的点对核函数值产生的作用越大;对于局部核函数,距测试点 x_i 越近的点对核函数值产生的作用越大^[7,10]。建模中,这种特性直接反映在系统对模型的学习性能和预测性能上。

Polynomial函数和RBF函数是两种典型的全局核函数和局部核函数,分别为

$$K(x, x_i) = [(xx_i) + 1]^q, \quad (8)$$

$$K(x, x_i) = \exp\left[-\frac{|x - x_i|^2}{2\sigma^2}\right] \quad (9)$$

依据命题 1, 由两种核函数组合构成混合核函数, 即

$$K_{\text{mix}} = \rho K_{\text{Poly}} + (1 - \rho) K_{\text{RBF}} \quad (10)$$

其中: K_{Poly} 和 K_{RBF} 分别为 Polynomial 核函数和 RBF 核函数, 系数 ρ ($0 < \rho < 1$) 为调节两种核函数作用大小的常数。下节煅烧过程实测数据的建模仿真体现了混合核函数在 LS-SVM 建模中的应用价值。

4 建模仿真分析

4.1 煅烧过程的 M ISO 建模

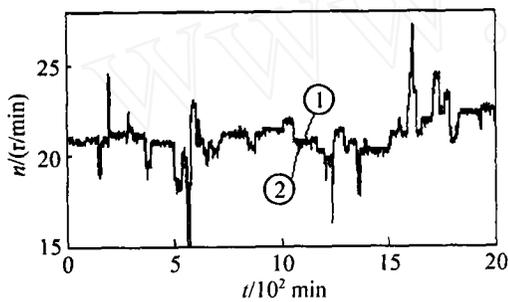
采样转窑煅烧过程多个输入变量的实测数据, 建立过程的 LS-SVM 模型。选取过程煅烧温度、干燥温度、排风温度、煅烧转速、进料量 5 种变量, 建立煅烧转速随其他 4 种变量的变化模型。数据选取中假定物料在窑内流动均衡、平稳, 可忽略窑身长带来的进料量时滞。每分钟采样一次, 剔除异常数据, 并经平滑、内插等预处理后^[11], 取得转窑连续运行 3 天

的实测数据 4 000 组, 前 2 000 组数据作为拟合数据, 后 2 000 组数据作为预测数据。

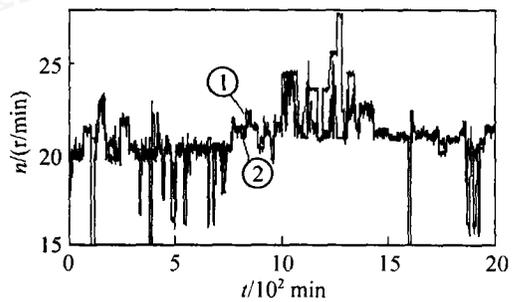
调节 LS-SVM 系统参数: $q = 1.0, \sigma^2 = 2.0, \rho = 0.95$ 分别采用 RBF 核函数、Polynomial 核函数及混合核函数, 得出的煅烧过程转速拟合输出和预测输出如图 1 所示, 其中曲线 ① 为实际输出, 曲线 ② 为拟合(预测)输出。表 1 给出了相应的误差比较情况。

表 1 不同核函数 LS-SVM 拟合误差及预测误差比较

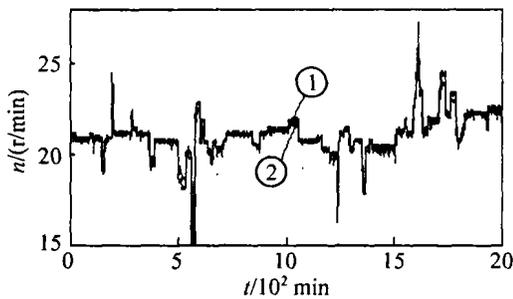
核函数	核参数值	拟合误差		预测误差	
		MAXE	ME	MAXE	ME
RBF 函数	$\sigma^2 = 2.0$	3.048 8	0.111 2	6.962 9	0.946 7
Polynomial 函数	$q = 1.0$	8.110 0	0.208 0	10.986 1	0.359 2
混合核函数	$\sigma^2 = 2.0$ $q = 1.0$ $\rho = 0.95$	4.661 8	0.145 6	9.541 7	0.488 8



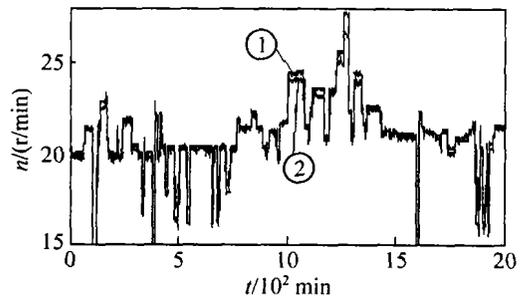
(a) RBF 核函数拟合 ($\sigma^2 = 2.0$)



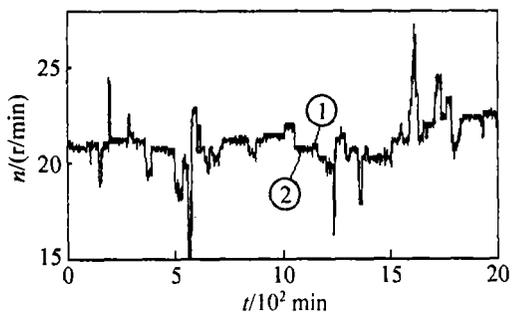
(b) RBF 核函数预测 ($\sigma^2 = 2.0$)



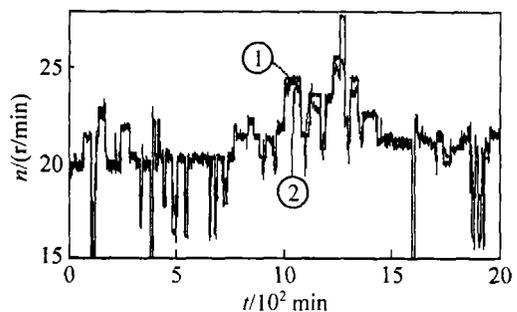
(c) Polynomial 核函数拟合 ($q = 1.0$)



(d) Polynomial 核函数预测 ($q = 1.0$)



(e) 混合核函数拟合 ($\sigma^2 = 2.0, q = 1.0, \rho = 0.95$)



(f) 混合核函数预测 ($\sigma^2 = 2.0, q = 1.0, \rho = 0.95$)

图 1 不同核函数 LS-SVM 拟合及预测输出

图1(a)单独采用RBF核函数,拟合效果令人较为满意;图1(b)预测输出的波动过大,调节 σ^2 越小,这种波动越严重,甚至出现煅烧转速为零的现象,但增加 σ^2 值又会造成拟合精度下降;图1(c)采用Polynomial核函数,拟合精度较RBF核函数有所降低,但其预测输出(图1(d))相对RBF核函数要平稳得多;图1(e)采用混合核函数,拟合效果良好,较Polynomial核函数有很大的提高,最大拟合误差不超过5 r/min(见表1),并且由于Polynomial核函数的加入,很好地抑制了RBF核函数造成的预测输出波动,其预测输出(图1(f))虽不如图1(d)平稳,但已达到实际过程预测的需要,混合核函数的参数调节裕度也相对较宽

4.2 ρ 值的调节作用

在混合核函数公式中,两种核函数作用大小通过系数 ρ 来调节。 ρ 值越接近于1,Polynomial核函数作用越大,RBF核函数作用越小; ρ 值越接近于0,Polynomial核函数作用越小,RBF核函数作用越大

对于上述LS-SVM模型拟合和预测系统,选取不同的 σ^2 和 q 值,调节混合核参数 ρ 值的大小,其煅烧转速拟合及预测误差如表2所示

表2 ρ 值变化下LS-SVM拟合误差及预测误差比较

σ^2, q	ρ	拟合误差		预测误差	
		MAXE	ME	MAXE	ME
$\sigma^2 = 5.0$ $q = 1.0$	0.95	5.299 8	0.149 4	8.789 6	0.467 0
	0.5	3.304 8	0.127 3	7.932 9	0.482 1
	0.15	3.284 9	0.124 5	7.727 9	0.491 3
$\sigma^2 = 2.0$ $q = 1.0$	0.95	4.661 8	0.145 6	9.541 7	0.488 8
	0.5	3.110 9	0.114 7	9.046 5	0.516 6
	0.15	3.067 3	0.109 7	8.961 5	0.524 2
$\sigma^2 = 0.5$ $q = 1.0$	0.95	4.435 2	0.134 0	10.374 8	0.448 5
	0.5	2.207 0	0.077 0	10.169 9	0.495 8
	0.15	2.120 4	0.067 4	10.137 5	0.506 9

从ME值看,当核参数 σ^2 和 q 固定不变,调节 ρ 值由0.95逐渐降低时,LS-SVM的拟合误差减小,预测误差增大,反映了RBF核函数作用增强,Polynomial核函数作用减弱的特性。当 σ^2 值减小到0.5时,系统的拟合ME已降低到0.01的数量级,从实际煅烧过程的建模精度要求看,已没有太大必要。另外,系统加入Polynomial核函数,即使 ρ 值选取较小,系统的预测输出仍较平稳,预测效果较单独采用RBF核函数好得多,体现了Polynomial核函数对输出波动具有良好的抑制作用

从表2预测误差的MAXE可以看出,系统预测

输出的一些测点存在一定的抖动,MAXE不够稳定,因此需要对建模系统及实际煅烧过程作进一步分析

4.3 SVM与LS-SVM对系统训练速度的影响

利用LS-SVM将二次规划问题转变为线性矩阵方程求解,并应用矩阵分解技术,每次只需更新拉格朗日乘子的一个分量,简化了计算复杂性,极大地提高了运算速度。这在大样本量数据的锌钡白煅烧过程建模中更能体现其优势

表3给出了SVM与LS-SVM对不同样本量的训练时间对比。系统参数选取如下: $q = 1.0, \sigma^2 = 2.0, \rho = 0.95$ 。由于系统核函数的选取对训练时间的影响不大,表3只给出了采用混合核函数时的对比结果

表3 SVM与LS-SVM训练时间对比

样本量	训练时间/s	
	SVM	LS-SVM
200	62.3	0.6
300	102.4	1.4
400	171.3	2.8

从表3可以看出,SVM的训练时间比LS-SVM平均大1或2个数量级,在小样本量的模型拟合中还可应用,但当样本量较大时(> 500),这种训练速度将无法容忍;而LS-SVM则能很好地完成训练任务

5 结论

混合核函数的支持向量机建模方法,综合了全局核函数和局部核函数的优点。本文提出一种基于混合核函数的LS-SVM建模方法,并将其应用于锌钡白转窑煅烧过程的MISO建模,建模速度快,辨识效果良好

LS-SVM的模型拟合及预测性能受混合核参数的影响较大。 σ^2 值的大小可控制模型的拟合精度,对预测输出造成的波动主要由Polynomial核函数来弥补,两种函数的作用比率则由 ρ 值来调节。可依据实际建模和控制的需要,调节各核参数的值

在取得良好建模效果的同时,这一方法还存在一些需要改善之处。例如在核参数的选取上,对Polynomial核参数选取 $q = 1.0$,即体现了线性函数的形式,当选择其他值时,容易造成煅烧过程模型输出的波动;另外,混合核函数的构成除采用两种典型的全局核函数和局部核函数外,采用其他函数构成是否仍有同样的效果,是需要深入研究的课题

(下转第425页)

系统(13)的一个性能上界是 $J^* = x_0^T P x_0 = 59.95$.

5 结 论

本文分别利用单 Lyapunov 和多 Lyapunov 函数法研究一类不确定线性系统的混杂状态反馈保成本控制问题. 当任何单一连续的控制器的设计, 无法满足保成本控制, 而系统可以在有限个控制器之间切换时, 分别利用单 Lyapunov 函数法和多 Lyapunov 函数法给出系统满足保成本控制的充分条件及混杂状态反馈保成本控制器的设计, 是对一般意义下保成本控制问题的一种拓展.

参考文献(References)

- [1] Nie H, Zhao J. Hybrid state feedback H_∞ robust control for a class of linear systems with norm-bound uncertainty [A]. *Proc of the ACC Denver* [C]. Colorado, 2003: 4-6
- [2] Gollu A, Varaiya P P. Hybrid dynamical system [A]. *Proc 28th IEEE Conf Decision and Control* [C]. FL, 1989: 2708-2712
- [3] Jeon D, Tomizuka M. Learning hybrid force and position control of robot manipulators [J]. *IEEE Trans on Robotics Automat*, 1993, 9(4): 423-431
- [4] Lam H K, Leung Fran H F, Tam Peter K S. A switching controller for uncertain nonlinear systems [J]. *IEEE Control System Magazine*, 2002, 22(1): 7-14
- [5] Chang S S L, Peng T K C. Adaptive guaranteed cost control of system with uncertain parameters [J]. *IEEE Trans on Automatic Control*, 1972, 17(4): 474-483
- [6] Li Y, Chu J. An LM I approach to guaranteed cost control of linear uncertain time-delay systems [J]. *Automatica*, 1999, 35(6): 1155-1159
- [7] Park J H. Robust guaranteed cost control for uncertain linear differential systems of neutral type [J]. *Applied Mathematics and Computation*, 2003, 140(2-3): 523-535

(上接第 420 页)

参考文献(References):

- [1] 陈朝华, 丘康奎, 陈广, 等. 立德粉 硫酸锌生产与应用技术问答[M]. 北京: 化学工业出版社, 2000
- [2] 刘咏平. 锌钡白干燥煅烧窑炉过程控制系统的研制 [D]. 广州: 华南理工大学, 2002
- [3] 黄然婷, 刘咏平, 毛宗源, 等. 锌钡白生产转窑控制系统的实现[J]. *华南理工大学学报*, 2003, 31(12): 42-45.
(Huang R T, Liu Y P, Mao Z Y, et al. Realization of process control system for lithopone kiln and calcinator [J]. *J of South China University of Technology*, 2003, 31(12): 42-45.)
- [4] Vapnik V N. *The nature of statistical learning theory* [M]. New York: Springer-Verlag, 1995
- [5] Bernhard S, Alexander J S. *Learning with kernels-support vector machines, regularization, optimization and beyond* [M]. Cambridge: The MIT Press, 2003
- [6] Suykens J A, Vandewalle J. Least squares support vector machine classifiers [J]. *Neural Processing Letters*, 1999, 9(3): 293-300
- [7] Smits G F, Jordan E M. Improved SVM regression using mixtures of kernels [A]. *IEEE Proc of the 2002 Int Joint Conf on Neural Networks* [C]. Honolulu, 2002, 3: 2785-2790
- [8] Smola A J, Scholkopf B. *A tutorial on support vector regression* [R]. London: University of London, 1998
- [9] Smola A J. *Learning with kernels* [D]. Berlin: Informatik der Technischen Universität, 1998
- [10] Scholkopf B, Mika S, Burges C J C, et al. Input space versus feature space in kernel-based methods [J]. *IEEE Trans on Neural Networks*, 1999, 10(5): 1000-1017.
- [11] 黄然婷, 刘咏平, 狄争, 等. 锌钡白干燥窑炉过程控制系统的研制(II)——测量数据预处理技术[J]. *华南理工大学学报*, 2002, 30(4): 52-55.
(Huang R T, Liu Y P, Di Z, et al. Development of process control system for lithopone and calcinator (II) — Preprocessing technology of sampling data [J]. *J of South China University of Technology*, 2002, 30(4): 52-55.)