

基于改进教学算法优化 BP 神经网络的催化剂碳含量预测模型

张凌波, 宰娜, 顾幸生

(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: 为提高待生催化剂碳含量预测的准确性, 提出一种基于改进的教学算法(MTLBO)来优化 BP 神经网络的预测模型. 针对基础教学算法全局搜索能力差的问题, 在教师阶段前后增加了预习和复习过程, 并在学生阶段采用量子方式进行更新. 测试结果表明, 该改进能够提高教学算法全局探索和局部改良能力, 利用改进教学算法可优化 BP 神经网络的权值和阈值, 并进行待生催化剂碳含量预测. 仿真结果表明, 改进后预测模型的预测精度和泛化能力均有一定程度的提高.

关键词: 改进教学算法; BP 神经网络; 催化剂碳含量; 全局最优化

中图分类号: TP301

文献标志码: A

Predictive model for catalyst carbon content based on MTLBO-BP

ZHANG Ling-bo, ZAI Na, GU Xing-sheng

(Key Laboratory of Advanced Control and Optimization for Chemical Process of Ministry of Education, East China University of Science and Technology, Shanghai 200237, China. Correspondent: ZHANG Ling-bo, E-mail: zlb@ecust.edu.cn)

Abstract: To improve the prediction accuracy of the carbon content, a predictive model based on the improved BP neural network(BPNN) is presented by using the modified teaching-learning-based optimization(MTLBO) algorithm. In order to improve the global optimization ability of the basis teaching-learning-based optimization(TLBO) algorithm, a preview phase and a review phase are added in the MTLBO algorithm. The quantum-behaved learning strategy is adopted in the learning phase. Test results show that the MTLBO algorithm is valid to solve the global and local optimization problems. The MTLBO algorithm is used to optimize the weights and thresholds of the BPNN for the prediction of catalyst carbon content of the catalytic reforming unit. The simulation results show that the predictive precision and generalization ability of the proposed method have a certain degree of improvement.

Keywords: MTLBO; BP neural network; catalyst carbon content; global optimization

0 引言

催化重整是原油的二次加工过程之一, 在炼化过程中占有重要的地位. 催化重整反应以低辛烷值石脑油为原料, 在重整催化剂的作用下发生复杂的重整反应^[1], 而重整积碳是催化重整装置中不可避免的副反应之一. 随着芳烃的缩合反应以及脱氢反应, 催化剂表面及其里面的孔道结构内会产生积碳. Myers 等^[2]研究了催化重整反应中催化剂积碳的机理, 研究表明, 在进料和操作条件保持稳定的前提下, 催化剂上积碳含量的增多将导致芳烃含量下降, 产品辛烷值降低. 因此, 待生催化剂的碳含量是催化重整装置中必须监控的一个指标, 可直接反应出产品的液收率和生成氢

气的纯度. 另外, 它还影响着催化剂再生系统的操作参数和再生周期.

待生催化剂的碳含量不能够直接使用在线测量仪表来测量, 一般只能通过定期采样分析的手段分析得出. 人工分析的滞后性将会严重影响对待生催化剂碳含量的实时监测. 在催化重整过程中, 预测对象为非线性系统, 难以建立准确的机理模型. 目前, 关于催化重整过程的软测量建模已有很多方法, 其中利用神经网络较强的非线性拟合能力进行软测量建模已成为近年来研究的热点之一. 虽然 BPNN 结构简单, 算法成熟, 具有精确寻优、非线性学习能力强大等优点, 但是依然存在较多的缺陷. 首要的一个缺陷就是初始

收稿日期: 2015-07-31; 修回日期: 2015-11-19.

基金项目: 中央高校基本科研业务费专项基金项目; 上海市重点学科项目(B504).

作者简介: 张凌波(1974—), 男, 副教授, 博士, 从事工业过程建模、控制与优化、智能优化算法等研究; 宰娜(1991—), 女, 硕士生, 从事工业过程建模与优化的研究.

权值和阈值的随机性,会导致训练速度的不确定性和训练结果的不收敛^[3-4]. 教学优化算法是于 2011 年提出的一种新的群智能优化算法,与其他群智能优化算法相比,具有参数少、算法简单易理解、求解速度快、精度高等特点,非常适合求解大规模高维复杂问题^[5]. TLBO 算法从提出至今已经引起很多学者的关注,并且得到了广泛的应用. Rao 等于 2012 年提出一种基于精英策略改进的 ETLBO 算法来加强算法的搜索能力^[6],随后又于 2013 年提出一种改进的 MTLBO 算法, MTLBO 允许教师的个数超过 1 个,并且提出一种自适应的教学因子以及增加自我驱动的学习方式^[7]. Satapathy 等^[8]于 2013 年提出一种加权的教学优化算法来增加收敛速率. 邹峰等^[9]于 2015 年通过在教师阶段和学生阶段引入一个向其他学生学习的随机学习率,提出了 LETLBO 算法. TLBO 算法最初应用于机械设计与机械处理问题的优化^[5,10],随后在数据聚类^[11]、环境/经济调度^[12]、多目标优化^[7-8]、大规模连续非线性优化问题^[13]、平面钢框架的优化设计^[14]等方面得到了广泛的应用.

基础教学优化算法仍然存在容易陷入局部最优、全局性能较差等缺陷. 本文对基础教学优化算法进行了改进: 1) 实行了分组策略; 2) 在教师阶段前后分别增加了预习阶段和复习阶段; 3) 在学生阶段采用了量子的方式进行更新. 然后用改进的教学优化算法解决 BP 神经网络的权值优化问题,建立待生催化剂碳含量预测模型的新方法. 预测结果表明,基于改进的教学优化算法优化的 BP 神经网络对待生催化剂碳含量具有更好的预测效果.

1 算法改进

1.1 改进 TLBO 算法

在传统的教学算法中,分为教师阶段和学生阶段. 学生的学习成绩主要由教师的教导和学生之间的交流来决定. 在教师阶段,所有的学生通过相同的教师和平均成绩的差异来学习,随着迭代次数的增加,学生的相似度降低,容易陷入局部最优. 另外,在求解高维复杂问题时,存在全局搜索能力差等缺点. 因此,本文在基础的教学优化算法上作了以下改进,以提高教学算法的全局探索能力和局部改良能力.

1) 分组.

在早期改进的教学算法中,“分组”概念已经被引入,通过将学生平均分成几个小组来增加种群的多样性. 本文依然沿用文献 [15] 的分组方法. 首先,所有的学生根据其适应度值按照升序(最小化问题)排列,排在第 1 的学生被指定为班级的教师;其次,计算其

他学生与教师的欧氏距离,根据求得的欧氏距离,将这些学生按照升序排列;再次,选出排在前面的 m 个学生作为一个小组,在这 m 个学生中排第 1 的学生被认定为组长,将这 m 个学生从当前的学生中移除;最后,重复前一个过程,直到所有的学生都完成分组. 其中 m 是每个小组的成员个数.

2) 增加预习阶段和复习阶段.

在传统的教学环境中,一个成绩好的学生除了接受教师的知识传授和与同学们交流外,还要进行课前预习及课后复习. 因此,本文在教学阶段前后分别增加了预习阶段和复习阶段,使得每个学生可以在小范围内学习,不会过早地向全局最优点聚集,从而增强学生之间的学习能力,能够有效保持学生的多样性,保证了算法的全局搜索能力.

在预习阶段,每个小组的学生通过小组的平均成绩的差异和组长的传授来学习,即

$$\begin{aligned} \text{Difference}(i) = \\ \text{GroupTeacher}(i) - T_f \text{GroupMean}, \end{aligned} \quad (1)$$

$$X_{\text{new},i} = X_{\text{old},i} + \text{Difference}(i). \quad (2)$$

其中: GroupTeacher 代表组长, GroupMean 为小组的平均成绩, T_f 仍为教学因子. 当教学阶段完成后,根据适应度值重新选择新的组长,每个小组的小组成员由新选的组长带领他们采用与预习阶段相同的方式复习,即

$$\begin{aligned} \text{Difference}(i) = \\ \text{GroupTeacher}(i) - T_f \text{GroupMean}, \end{aligned} \quad (3)$$

$$X_{\text{new},i} = X_{\text{old},i} + \text{Difference}(i). \quad (4)$$

3) 引入量子法.

在学生阶段,采用量子法进行改进,从而增加种群的多样性,提高收敛速度. 更新方式如下所示: 对于学生 X_i , 有

$$\text{temp}X_i = \phi \text{GroupMean}(i) + (1 - \phi) X_{\text{teacher}}; \quad (5)$$

$$\begin{cases} X_{\text{new},i} = \text{temp}X_i + \beta |\text{GroupMean}(i) - X_i| \ln(1/u), \\ \quad u \in \{0.5, 1\}; \\ X_{\text{new},i} = \text{temp}X_i - \beta |\text{GroupMean}(i) - X_i| \ln(1/u), \\ \quad u \in \{0, 0.5\}. \end{cases} \quad (6)$$

如果 $X_{\text{new},i}$ 的适应度值更好,则接受 $X_{\text{new},i}$. 其中, $u = \text{rand}(0, 1)$.

4) 具体的算法流程.

Step 1: 初始化种群以及算法参数.

Step 2: 分组,计算每个个体的适应度值,并对种

群实行分组策略,每个小组有 m 个成员.

Step 3: 预习阶段,对每个小组里面的学生采用式(1)和(2)的方式完成预习阶段并更新.

Step 4: 教师阶段,对所有个体采用基础教学算法中的方式进行教学并更新.

Step 5: 复习阶段,重新选择组长,对每个小组里的学生采用式(3)和(4)的方式完成复习阶段并更新.

Step 6: 学生阶段,采用式(5)和(6)的方法进行相

互学习阶段并更新.

Step 7: 若满足终止条件则结束,否则转 Step 2 继续.

综上,MTLBO 的流程如图 1 所示.

1.2 实验仿真测试

本文选取了表 1 所示的 8 个测试函数测试改进教学算法的有效性. 算法参数设置为: 种群数 $N = 50$, 小组个数 $n = 10$, 小组成员个数 $m = 5$, 最大迭代次数 $itermax = 1000$, $D = 50$. 两种算法都独立运行 50 次. 各测试函数的结果如表 2 所示.

由表 2 给出的优化结果可以看出,改进的 TLBO 算法在 8 个高维复杂函数上都达到了较高的精度,尤其在函数 f_1 、 f_2 、 f_3 、 f_6 都能达到全局最优解,而基础 TLBO 算法仅在 f_6 达到了全局最优解,其余都陷入了局部最优解. 这说明本文算法在求解大规模复杂优化问题上具有较强的搜索能力. 图 2 描述了改进前后 TLBO 教学算法在 f_6 中 50 次独立运行的平均收敛曲线对比情况. MTLBO 在第 6 代时收敛到最优值,而 TLBO 在第 60 代时才收敛到最优值. 可看出,MTLBO 算法收敛速度有显著提高并且能够跳出局部最优,达到预期的效果.

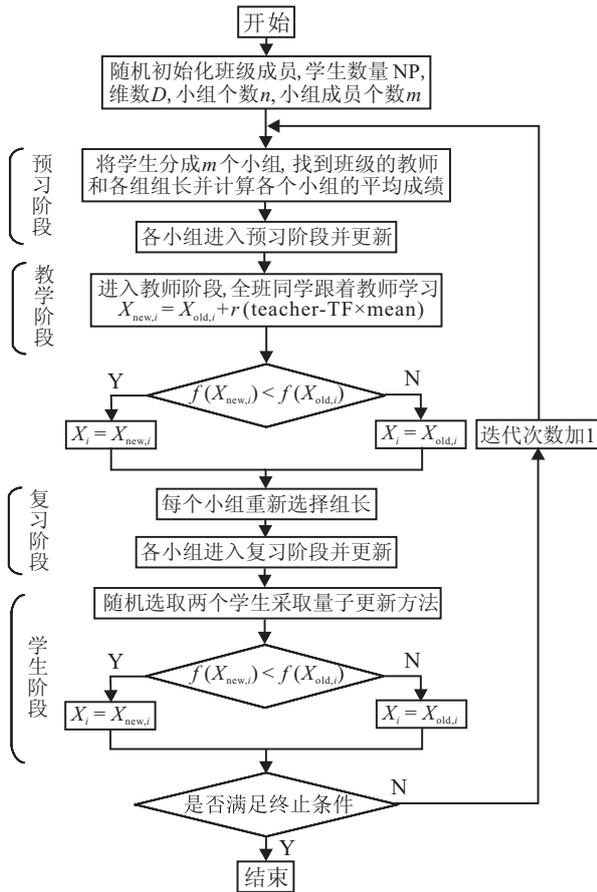


图 1 MTLBO 流程

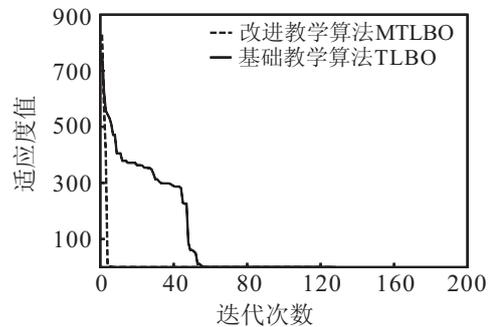


图 2 Rastrigin 函数收敛曲线

表 1 测试函数

函数表达式	函数名	变量范围	最优值
$f_1 = \sum_{i=1}^D x_i^2$	Sphere	$[-100,100]$	0
$f_2 = \sum_{i=1}^D x_i^2 + \left(\sum_{i=1}^D 0.5ix_i\right)^2 + \left(\sum_{i=1}^D 0.5ix_i\right)^4$	Zakharov	$[-10,10]$	0
$f_3 = \sum_{i=1}^D ix_i^2$	Sum square	$[-10,10]$	0
$f_4 = \sum_{i=1}^D \left(\sum_{j=1}^i x_j\right)^2$	Quadric	$[-10,10]$	0
$f_5 = \sum_{i=1}^{D-1} [100(x_i^2 - x_{i+1})^2 + (x_i - 1)^2]$	Rosenbrock	$[-2.048,2.048]$	0
$f_6 = \sum_{i=1}^D (x_i^2 - 10 \cos(2\pi x_i) + 10)$	Rastrigin	$[-5.12,5.12]$	0
$f_7 = 20 - 20 \exp\left(-\frac{1}{5} \sqrt{\frac{1}{D} \sum_{i=1}^D x_i^2}\right) - ss \exp\left(\frac{1}{D} \sum_{i=1}^D \cos(2\pi x_i)\right) + e$	Ackley	$[-32.77,32.77]$	0
$f_8 = \sum_{i=1}^D \frac{x_i^2}{4000} - \prod_{i=1}^n \cos\left(\frac{x_i}{\sqrt{i}}\right) + 1$	Griewank	$[-600,600]$	0

表 2 优化结果比较

测试函数	TLBO		MTLBO	
	平均差	标准差	平均差	标准差
f_1	1.895 3e-193	0	0	0
f_2	5.118 3e-197	0	0	0
f_3	1.455 4e-198	0	0	0
f_4	2.558 7	0.002 7	0.002 2	8.840 1e-05
f_5	48.528 5	3.431 6e-11	48.516 8	3.431 6e-11
f_6	0	0	0	0
f_7	4.440 9e-15	0	8.881 8e-16	0
f_8	76.469 3	1.147 9e-13	8.095 9	0.009 0

1.3 MTLBO 优化 BP 神经网络的预测算法

在开始训练前, BP 神经网络将各层的连接初始权重及阈值随机初始化为 [0,1] 之间的值. 这种随机性会导致训练速度的不确定和训练结果的不收敛^[3], 还容易使得最终结果为非最优解. MTLBO 算法由于具有较强的全局搜索能力和快速收敛性, 其对种群个体逐代择优, 最终获得最优个体. 采用 MTLBO 算法对 BP 神经网络的初始权重和阈值分布进行优化, 将 MTLBO 算法得到的最优个体对 BP 神经网络初始权重和阈值进行赋值, 然后利用 BP 神经网络预测模型进行局部寻优, 从而得到具有全局最优解的 BP 神经网络预测值.

2 待生催化剂碳含量预测模型的建立

2.1 重整反应机理分析

典型的 UOP 第 3 代超低压重整工艺如图 3 所示, 其中 1 为第 1 反应器, 2 为第 2 反应器, 3 为第 3 反应器, 4 为第 4 反应器, 5 为第 1 反应加热炉, 6 为第 2 反应加热炉, 7 为第 3 反应加热炉, 8 为第 4 反应加热炉, 9 为催化剂收集器, 10 为置换加热器, 11 为重整进料换热器. 该工艺采用较苛刻的反应条件, 使催化剂的活性得到充分的发挥. 将由预处理部分传输来的精制石脑油与循环氢气混合, 与重整反应产物换热并由第 1 反应加热炉加热至一定温度, 进入第 1 反应器顶部, 与反应器中自上而下流动的催化剂接触并进行反应, 然后由第 1 反应器底部去第 2 反应加热炉加热, 再进入第 2 反应器顶部... 直至到达第 4 反应器. 重整反应中的大部分反应都是吸热反应, 在反应的过程中, 反应物的温度会不断下降. 为了使反应能够充分进行, 需要设置多台反应器和加热炉, 根据工艺要求一般设置为 3 或 4 台. 反应产物由第 4 反应器出来后与进料换热, 换热后的反应产物经冷却后进入重整产物分离罐进行气液分离. 在重整反应的同时, 来自第 4 反应器结焦的待生催化剂进入催化剂收集器内, 在提

升气的作用下进入再生器进行催化剂再生, 再生后的催化剂送入第 1 反应器继续进行重整反应, 一直循环进行.

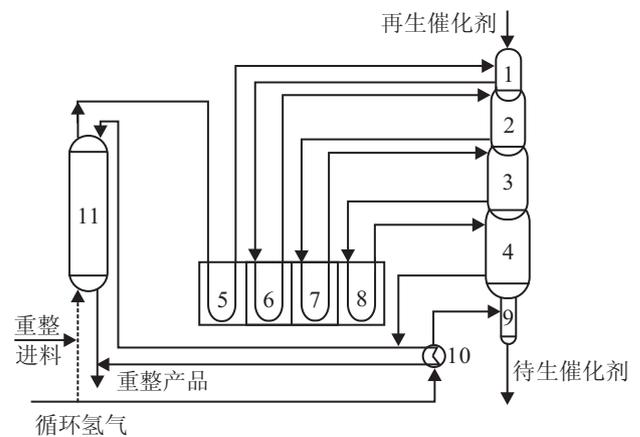


图 3 典型的 UOP 第 3 代超低压重整工艺图

2.2 辅助变量的确定及数据预处理

影响催化剂积碳的因素有很多, 通过基于催化重整的机理分析以及实际经验, 初步确定以下变量作为待生催化剂碳含量模型的辅助变量: 1) 4 个反应器的入口温度; 2) 4 个反应器的出口温度; 3) 4 个反应器的进出口压差; 4) 第 4 个反应器的入口压力; 5) 重整进料流量; 6) 重整循环氢流量; 7) 空速; 8) 氢油比. 由于其包含的指标众多, 且在实际应用中, 众多影响因素之间通常存在着线性相关性. 从简化建模复杂性的角度出发, 采用主元分析方法对原始输入变量进行重组, 构造出一组相互独立的输入变量. 去除原始变量中的某些相关性, 从而减少输入变量的个数, 进行降维处理^[16-17], 最终得到第 1、第 2、第 3、第 4 反应器的主成分, 将此作为 BP 神经网络的输入变量, 输出变量为待生催化剂碳含量. 为了说明本文算法的有效性, 在 Matlab2013b 环境下, 构建 3 种预测模型: 1) 基础的教学算法优化 BP 神经网络待生催化剂碳含量预测模型 (TLBO-BP 模型); 2) 模拟退火遗传算法优化 BP 神经网络的待生催化剂碳含量预测模型 (SAGA-BP 模型); 3) MTLBO 优化 BP 神经网络的待生催化剂碳含量预测模型 (MTLBO-BP 模型). 根据 Kolmogorov 定理和实际调试分析将隐层节点设为 12, 隐层神经元传递函数采用 S 型正切函数 Tansig, 输出层神经元传递函数采用线性函数 Purelin, 训练函数采用 L-M 优化算法 Trainlm. 具体设置参数为: 训练目标为 0.000 001, 学习率为 0.1, 训练次数为 1 000, 种群数为 50, 进化次数取 50 次, 小组成员个数为 5.

待生催化剂的碳含量在实际生产中分析频次为 3 次/周, 本文将 2013-01-28~2014-01-13 的采样时间作为参照, 对其前后 20 min 数据进行了均值处理,

并采用 3σ 准则剔除了误差比较大的数据, 最终得到了 171 组数据用于建模. 选取前 130 组数据作为训练样本, 后 41 组数据作为检验样本, 实际预测的均方误差为

$$\text{MSE} = \frac{1}{\text{num}} \sum_{k=1}^{\text{num}} (\mu_i^p - \mu_i)^2. \quad (7)$$

其中: num 为预测样本的数目, μ_i^p 为第 i 个样本的待生催化剂碳含量的预测值, μ_i 为第 i 个样本待生催化剂碳含量的实际值. 3 种预测模型的测试结果分别如图 4~图 6 所示.

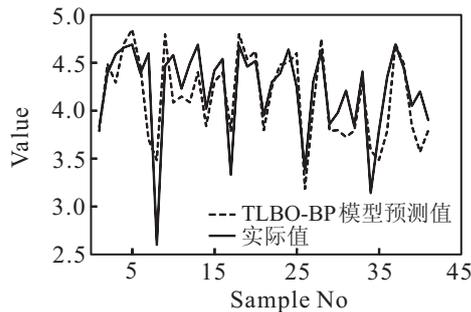


图 4 待生催化剂碳含量 TLBO-BP 模型测试效果

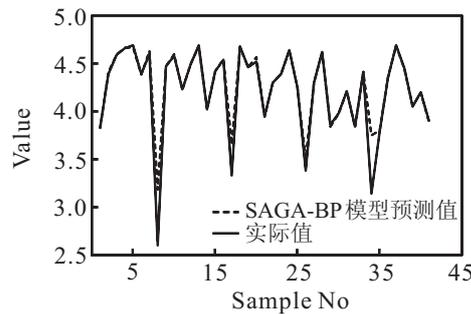


图 5 待生催化剂碳含量 SAGA-BP 模型测试效果

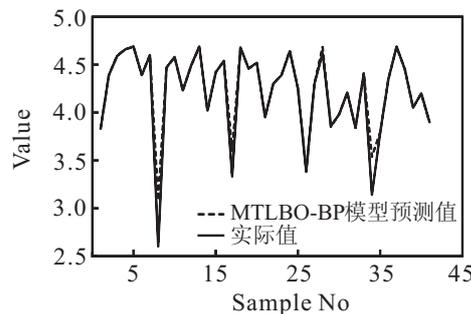


图 6 待生催化剂碳含量 MTLBO-BP 模型测试效果

经计算, 采用 TLBO 优化 BP 神经网络预测模型时, $\text{MSE} = 0.3232$; 采用 SAGA 优化 BP 神经网络预测模型时, $\text{MSE} = 0.1432$; 采用 MTLBO 优化 BP 神经网络预测模型时, $\text{MSE} = 0.1077$.

相比较 TLBO-BP 模型和 SAGA-BP 模型, 实际生产过程中采用 MTLBO-BP 模型在待生催化剂碳含量方面具有更高的预测精度, 使用 MTLBO 算法优化的 BP 神经网络能有效地减少极小值现象的发生.

3 结 论

本文提出了一种改进的教学优化算法, 该算法实行分组策略, 增加了种群的多样性, 在教师阶段分别增加预习阶段和复习阶段, 增强了局部搜索能力, 提高了收敛速度; 同时, 在学生阶段采用量子的方式进行更新, 提高了全局搜索能力. 8 个函数优化的仿真结果表明, 改进算法收敛速度显著提高, 并且能够跳出局部最优, 对求解大规模复杂优化问题具有较强的搜索能力.

本文将改进后的算法与 BP 网络相结合, 建立了 MTLBO-BP 待生催化剂碳含量软测量模型, 并与 TLBO-BP 软测量模型、SAGA-BP 软测量模型进行了比较. 仿真结果表明, MTLBO-BP 神经网络预测模型具有较高的精度, 泛化能力较好, 对待生催化剂碳含量实时监测具有一定的实际意义.

参考文献(References)

- [1] 张敬文. 催化重整技术的探究[J]. 中国化工贸易, 2015, 7(7): 111.
(Zhang J W. Study on catalyst of catalytic reforming technology[J]. China Chemical Trade, 2015, 7(7): 111.)
- [2] Mayer M W. Catalytic reforming[P]: USA: 2335684. 1943-11-30.
- [3] 李志华, 朱卉, 潘月. 混合粒子群算法优化 BPNN 在模拟电路故障诊断中的应用[J]. 控制工程, 2014, 21(3): 28-32.
(Li Z H, Zhu H, Pan Y. The application of genetic algorithm particle swarm optimization algorithm optimize the BPNN in analog circuit fault diagnosis[J]. Control Engineering of China, 2014, 21(3): 28-32.)
- [4] 王洪远, 史国栋. 人工神经网络技术及其应用[M]. 北京: 中国石化出版社, 2002: 34-36.
(Wang H Y, Shi G D. Artificial neural networks and its applications[M]. Beijing: China Petrochemical Press, 2002: 34-36.)
- [5] Rao R V, Savsani V J, Savsani V, Vakharia D P. Teaching-learning-based optimization: A novel method for constrained mechanical design optimization problems[J]. Computer-Aided Design, 2011, 43(3): 303-315.
- [6] Rao R V, Patel V. An elitist teaching-learning-based optimization algorithm for solving complex constrained optimization problems[J]. Int J of Industrial Engineering Computations, 2012, 3(4): 535-560.
- [7] Rao R V, Patel V. Multi-objective optimization of two stage thermos electric coolers using a modified teaching-learning-based optimization algorithm[J]. Engineering

- Applications of Artificial Intelligence, 2013, 26(1): 430-445.
- [8] Suresh Chandra, Satapathy Anima, Naik Parvathi K. Weighted teaching-learning-based optimization for global function optimization[J]. Applied Mathematics, 2013, 4(3): 429-439.
- [9] Feng Zou, Lei Wang, Xinhong Hei, et al. Teaching-learning-based optimization with learning experience of other learners and its application[J]. Applied Soft Computing, 2015, 37: 725-736.
- [10] Rao R V, Savsani V J. Mechanical design optimization using advanced optimization techniques[M]. London: Springer-Verlag, 2012.
- [11] Satapathysc, Naika. Data clustering based on teaching-learning-based optimization[C]. Proc of the 2nd Int Conf On Swarm, Evolutionary, and Memetic Computing. Berlin: SpringerVerlag, 2011: 148-156.
- [12] Panigrahi B K. Application of multi-objective teaching-learning based algorithm to an economic load dispatch problem with incommensurable objectives[C]. Proc of the 2nd Int Conf on Swarm Evolutionary and Memetic Computing. Berlin: Springer-Verlag, 2011: 697-705.
- [13] Rao R V, Savsani V J, Vakharia D P. Teaching-learning-based optimization: An optimization method for continuous non-linear large scale problems[J]. Information Sciences, 2012, 183(1): 1-15.
- [14] Vedat Togan, Design of planar steel frames using teaching-learning based optimization[J]. Engineering Structures, 2012, 34(1): 225-232.
- [15] Feng Zou, Lei Wang, Xinhong Hei, et al. Teaching-learning-based optimization with dynamic group strategy for global optimization[J]. Information Sciences, 2014, 273(20): 112-131.
- [16] 王伟, 吴敏, 雷琪, 等. 炼焦生产过程综合生产指标的改进神经网络预测方法[J]. 控制理论与应用, 2009, 12: 1419-1424.
(Wang W, Wu M, Lei Q, et al. An improved neural network method for the prediction of comprehensive production indices in coking process[J]. Control Theory & Applications, 2009, 26(12): 1419-1424.)
- [17] 李允公, 张金萍, 吴宁祥, 等. 基于主元分析的频谱整体识别方法[J]. 东北大学学报: 自然科学版, 2008, 29(9): 1322-1325.
(Li Y G, Zhang J P, Wu N X, et al. A PCA-based integrative spectrum identification method[J]. J of Northeastern University: Natural Science, 2008, 29(9): 1322-1325.)

(责任编辑: 孙艺红)