

分布式 RBF 神经网络及其在软测量方面的应用*

王旭东 邵惠鹤 罗荣富

(上海交通大学自动化研究所·上海, 200030)

摘要: 本文首先改进了竞争学习算法, 并且在此基础上提出了递阶聚类的思想, 然后利用这种思想得到了一种分布式 RBF (Radial basis function) 神经网络. 文章最后将这种网络应用于建立精馏塔成分估计的软测量模型. 利用精馏塔的操作数据进行仿真, 效果很好.

关键词: 竞争学习; 聚类; RBF 神经网络; 软测量; 精馏塔

1 前 言

在过程控制中, 存在两类重要问题. 一类是过程输出变量的估计. 许多工业过程由于受工艺和技术的限制, 输出变量难以检测出来, 例如精馏塔的产品浓度、发酵罐的菌体浓度等. 这给过程的控制和监测造成了很大困难. 软测量是解决这个问题的有效手段^[1,2], 因此研究建立软测量模型对过程控制具有很重要的作用.

另一类是过程输出变量的预报. 在大型企业中, 将过程控制融合在现代化的生产管理中, 提高企业的生产效率和市场竞争力非常有意义. 例如某钢铁厂冷轧分厂的发货预报系统要求根据生产计划对产品的成材率进行预报, 提前完成成品的运输调度, 以减少产品的库存时间. 而要完成成材率的预报, 必须根据历史的生产数据建立预报模型.

上述两类问题具有同样的实质: 首先需要建立过程输入输出模型, 并且可以获取的输入输出数据是离散的, 因为不同采样点上的数据不具有因果关系. 例如当过程输出不可测时, 采样得到的数据通常是物理或化学分析值, 由于分析时间较长, 分析得到的数据必然是离散的. 同样不同时间内产品的产出量也是离散的. 因此要建立上述两类问题的输入输出模型必须从离散的输入输出数据出发. 本文针对这类问题提出了分布式径向基函数 (RBF) 神经网络, 并且利用这种网络建立软测量模型.

分布式 RBF 网络建立的过程如下: 首先以竞争学习为基础, 利用递阶聚类的思想将学习样本分解成子类, 然后针对每个子类利用 OLS (Orthogonal least squares) 算法^[3]构造并学习 RBF 神经网络.

将学习样本空间聚类分解主要有两个原因. 一是由于工业应用的需要. 为了较好地反映实际过程, 在建立软测量模型时需要收集较多的样本数据. 当样本数目大时, 只用一个网络会造成网络结构庞大, 学习时间长. 如果先对样本聚类, 将样本集划分成较小的子样本集, 这样每个子样本学习的速度快而且子网络的结构比较紧凑. 同时子网络学习的总时间也远远低于只用一个网络学习的时间, 这可以从神经网络的学习算法中看出. 二是由于实际工业过程的复杂性, 输入输出样本数据会出现如下情况: 某两对输入数据, 在距离意义上是较为邻近的, 而它们对应的输出在距离意义上却相距很远. 这样的数据虽然仍可以用单个神经网络学习, 但是学习之后网络的泛化性能 (Generalization) 很差. 而如果将这些数据先聚类, 分别用不同的网络处理, 那么就可避免出现这种问题, 学习之后神经网络的性能就很好.

* 国家自然科学基金资助项目 (69574018).

本文于 1996 年 2 月 5 日收到. 1996 年 10 月 15 日收到修改稿.

2 竞争学习与递阶聚类

2.1 竞争学习算法的改进

竞争学习是一种自适应的 K-means 聚类算法,主要有 UCL (Unsupervised competitive learning), FSCL (Frequency sensitive competitive learning)^[4], RPCL (Rival penalized competitive learning)^[5]以及采用模糊技术实现的 FCL (Fuzzy competitive learning)^[6]等方法。

UCL 具有 Winner-Take-All 的特点,它存在某些单元不能充分利用(Under-utilized)或死点(deadunit)问题,人们提出了 Leaky 学习^[7]等方法,其中最大的改进是引进所谓“良心”^[8]的思想,即获胜次数多的单元其将来的获胜机会应当减少,而获胜少的单元将来的获胜机会应当增加。基于这种思想,得到了 FSCL 方法^[4]。FSCL 很好地解决了死点问题,但是它与 UPCL 都存在同样一个问题,即学习算法都事先假定参加学习的竞争单元数目与最终的聚类数目相等,这在许多情况下是不理想的。针对这个问题,Xu Lei 等^[5]提出了 RPCL 方法。这种方法的基本思想是:不仅获胜单元必须修正以适应输入样本,而且竞争的次胜者必须受到惩罚,使其远离输入样本。如下所示:

针对学习样本集 $D = \{x_k, k = 1, \dots, N\}$, 寻找 c 个竞争单元 $\{m_i | i = 1, \dots, c\}$ 使以下函数最小:

$$J = \sum_{k=1}^N \sum_{i=1}^c W_{ki} D_{ki}, \quad (1)$$

那么 PRCL 的学习律为:

$$W_{ki} = \begin{cases} 1, & \text{if } i = c, \gamma_i D_{ki} = \min_l \gamma_l D_{kl}, \\ -1, & \text{if } i = r, \gamma_i D_{ki} = \min_{l \neq c} \gamma_l D_{kl}, \\ 0, & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (2)$$

$$m_i(t+1) = \begin{cases} m_i(t) + \zeta(x_k - m_i), & \text{if } i = c, \gamma_i D_{ki} = \min_l \gamma_l D_{kl}, \\ m_i(t) - \eta(x_k - m_i), & \text{if } i = r, \gamma_i D_{ki} = \min_{l \neq c} \gamma_l D_{kl}, \\ m_i(t), & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (3)$$

其中 $1 > \zeta \gg \eta > 0$, $\gamma_i = n_i / (\sum_{i=1}^c n_i)$, n_i 是第 i 个单元获胜的次数。

RPCL 方法是一种较为有效的竞争学习方法。但是由于 RPCL 方法中蕴含着 FSCL 法,这会造成学习中存在一定的矛盾性。FSCL 方法的主要思想是增加获胜机会少的竞争单元进一步获胜的机会,而 RPCL 方法的思想是让竞争次胜者远离最终的聚类点,从而剔除多余单元。因此如果将二者融合在一个算法中,就会造成 RPCL 法的惩罚效果不明显,竞争的次胜单元经常转化成获胜单元。这样多余的单元在远离最终聚类点一段距离后又重新回来,并且始终处于这种振荡之中,因此多余的竞争单元数目不能剔除,造成竞争学习得不到正确的结果。文献[9]以实例说明了这个问题。为了解决 RPCL 方法存在的问题,提出如下的改进方法:

- 1) 先用 FSCL 法解决死点问题,将竞争单元的位置调整到比较恰当的位置;
- 2) 利用 RPCL 方法中次胜者受罚的思想,使多余的竞争单元远离最终的聚类点;
- 3) 如果多余点较多,可以先剔除其中一点,然后重复 1)、2);
- 4) 如果多余点都已剔除,则终止。

文献[9]的仿真结果表明改进的竞争学习方法具有很好的效果,下一小节的递阶聚类就采用这种方法。

2.2 递阶聚类

理论证明利用神经网络可以实现对于给定学习样本的拟合,而且学习的精度可以非常高.但是如果学习样本非线性非常严重,或者存在某种矛盾性,那么利用神经网络完成拟合是很困难的.即使能够实现也会造成网络非常庞大,学习时间长,运算复杂性高,并且网络的性能差.因此应该将学习样本集合进行分类,然后利用神经网络学习每类学习样本.对于给定的样本集合,每个样本的类属往往不明确,因此要一步完成整个样本集的分类是有困难的.为了解决这个问题,提出递阶分类的方法.

假定样本集为 $S = \{X_i, i = 1, \dots, N\}$, X_i 是样本, N 是样本数目. 首先采用改进的竞争学习方法将 S 分解成 M 个子类 $S_i = \{X_{ij}, j = 1, \dots, N_i\}, i = 1, \dots, M, N_j$ 是第 j 个子类的样本数. 这是第一级的分解; 然后将其中的一些子类继续进行第二级的分解, 如此递阶就是递阶聚类的方法. 判断某一级的子类是否应该继续分解需要根据 RBF 网络的学习情况而定. 如果某一类能够容易地应用 RBF 神经网络拟合, 那么该类就不再分解, 否则继续分解. 这种分解中止的判断是易于操作的, 这和 RBF 神经网络的特点和学习方法有关. 因为 RBF 神经网络的 OLS 训练方法可以自动地寻找网络隐含层的神经元数, 而且不存在局部极小化问题. 因此 RBF 神经网络学习某个样本集时不需要加入人为的调节. 同时在我们改进的 RBF 神经网络训练方法中^[10], 为了提高网络的综合性能, 网络训练的中止条件加入了防止过拟合的约束条件, 而不单单看网络的训练精度. 这样如果 RBF 神经网络学习某个子类后精度不够, 那么这个子类就需进一步的分解, 否则该子类不必分解. 这种方法已经利用软件实现.

递阶聚类的思想如图 1 所示.

在聚类之前需要将样本数据归一化, 归一化的方法如下;

对样本序列 $X = \{X_1, X_2, \dots, X_N\}$. 归一化后为

$$X' = \{X'_1, X'_2, \dots, X'_N\},$$

$$X'_i = (X_i - \min(X)) / (\max(X) - \min(X)). \quad (4)$$

其中 \min, \max 分别为最小值函数和最大值函数.

3 分布式 RBF 神经网络

利用递阶聚类的思想将 RBF 神经网络的学习样本进行分类后, 每一类样本可以利用 RBF 神经网络完成学习任务, 因此当整个样本集都完成学习之后, 一个完整的分布式 RBF 神经网络就确定了下来.

一种好的神经网络理论必须遵循如下准则^[11]:

- 1) 完成网络的设计任务 (Perform network design task);
- 2) 学习鲁棒性 (Robustness in learning);
- 3) 学习快速性 (Quickness in learning);
- 4) 学习有效性 (Efficiency in learning);
- 5) 学习泛化性 (Generalization in learning).

由于 OLS 算法^[3]是一种构造性算法, 神经网络的结构在训练中确定, 并用 RBF 网络具有输出与权值成线性的关系, 所以 OLS 算法实现的 RBF 神经网络能够较好的满足这些准则. 因此对每一个聚类分解后的样本子集(子类)可以采用 OLS 算法完成学习.

由于这里神经网络采用分布式实现, 因此如何将子网络进行综合使整个分布式网络形成完整模型, 需要采取一些措施. 图 2 是其中一种方法. 图中的模糊分类器是网络综合的工具, 对于一个新的过程输入, 模糊分类器首先确定这个输入对于每个网络的隶属度, 根据隶属度将每

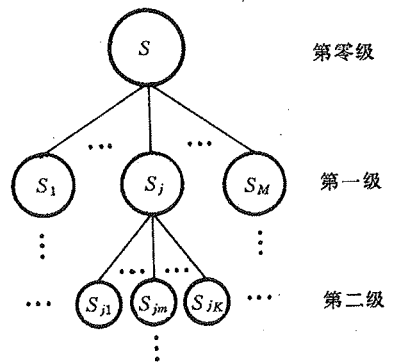


图 1 递阶聚类的思想

个网络的输出综合就可得到整个分布式网络的输出. 这样分布式 RBF 神经网络就完成了在该输入作用下对过程输出的估计.

假定图 2 中分布式网络具有 M 个子网络 $\{RBF_i, i = 1, \dots, M\}$, 新的过程输入 X 对每个子网络的隶属度为 $\{\mu_i, i = 1, \dots, M\}$, 那么整个网络的输出 Y 为

$$Y = \sum_{i=1}^M \mu_i \cdot f_{RBF_i}(X). \quad (5)$$

输入 X 对每个子网络隶属度可以采用下述方法确定: 首先确定输入 X 对学习样本集中每一个样本 X_i 的隶属度, 然后根据这些隶属度确定输入 X 对每个子网络的隶属度.

选定性能指标

$$J = \sum_i^N \eta_i d_i, \quad (6)$$

并且满足 $\sum_i^N \eta_i = 1, \eta_i \in [0, 1], d_i = \|X - X_i\|^2$.

η_i 的确定可以通过(6)式最小化求出, 利用 Lagrangian(拉格朗日) 乘子法可以解出 η_i , 即

$$\begin{cases} \eta_i = 1, \eta_{j \neq i} = 0, & \text{if } d_i = 0, i = 1, \dots, N, \\ \eta_i = \left(\frac{1}{d_i} \right) / \left(\sum_{i=1}^N \frac{1}{d_i} \right), & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (7)$$

输入 X 对子网络 RBF_i 的隶属度为

$$\mu_i = \sum_j^{N_i} \eta_j. \quad (8)$$

式中 N_i 是第 i 个子网络的学习样本数目.

4 软测量模型的建立

利用上述的分布式 RBF 神经网络可以建立精馏塔产品成分估计的软测量模型.

图 3 是某炼油厂精馏塔的结构图.

图 3 中塔 A 塔底产品 B 中主要成分是丙烷, 而塔 B 塔顶产品 D 中主要成分是丙烯. 为了估计 B 中的丙烷含量 C_B 及 D 中的丙烯含量 C_D , 利用分布式 RBF 神经网络建立软测量模型.

建立软测量模型之前要选择好二次变量. 二次变量的选择需要对生产工艺了解, 并且必须运用一些有效的方法^[1,2]才能达到建立软测量的要求. 根据对该精馏塔系统的了解和分析, 选择二次变量为塔 A 的温差 ΔT_A , 塔 B 的温差 ΔT_B 以及塔 B 顶部的压力

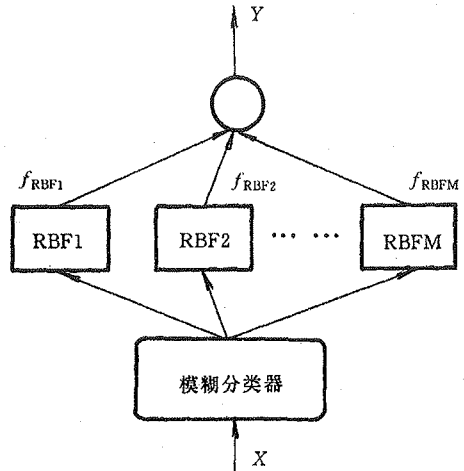


图 2 分布式 RBF 神经网络的结构

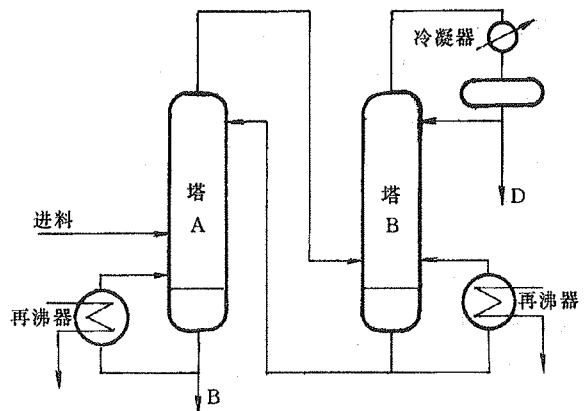


图 3 精馏塔的结构图

p , 因此软测量模型的一般表达式为

$$C_B = f_1(\Delta T_A, \Delta T_B, p), \quad C_D = f_2(\Delta T_A, \Delta T_B, p). \quad (9)$$

从炼油厂的操作数据及产品分析报表中收集建立软测量模型的样本数据. 例如 C_B, C_D 从分析报表中收集, 然后对应地从操作数据中收集 $\Delta T_A, \Delta T_B, p$ 的数据. 由于产品分析每隔两小时进行一次, 一天的数据较少, 因此选择一个月的操作数据及分析值作为学习样本.

根据样本归一化公式(4)可以对上述五个变量归一化. 根据归一化的学习样本, 以过程的输出变量为基准, 将学习样本进行递阶分类. 图 4 是学习样本集第一次聚类后的结果.

第一次聚类将学习样本分成 5 类, 然后继续将这 5 类分别聚类, 如此递阶执行, 得到了 25 个子类, 这 25 个子类分别用 25 个 RBF 神经网络去学习. 图 5 是第一次聚类后第五个子类二次聚类的结果. (注意: 图 4 和图 5 所示的数据是经过归一化的.)

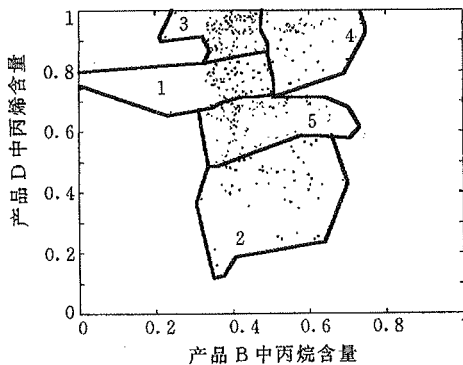


图 4 学习样本输出变量第一级分类的结果

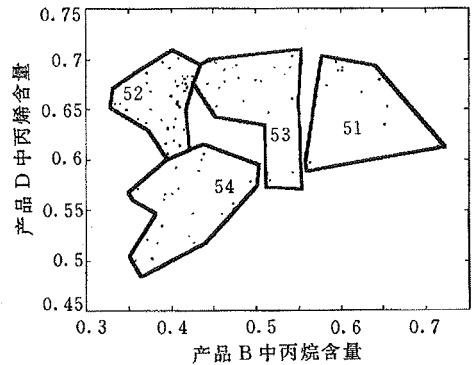


图 5 一阶分类后第五类的再聚类结果

通过对学习样本聚类和学习之后, 得到了分布式 RBF 神经网络. 然后在这个分布网络中加入模糊分类器将网络进行综合. 这个综合的分布式 RBF 神经网络不但能够重现学习数据, 而且给定新的过程输入可以较为理想地估计过程的输出. 为了检验分布式 RBF 神经网络软测量的效果, 用标准方差进行检验和比较. 标准方差的计算方法如下:

假设工业过程输出变量 Y 有 N 个值 Y_1, Y_2, \dots, Y_N , 其估计值为 Y'_1, Y'_2, \dots, Y'_N , 那么其标准方差为

$$\sqrt{\sum_{i=1}^N (Y_i - Y'_i)^2 / N}. \quad (10)$$

根据(10)式, 计算标准方差, 表 1 是分布式神经网络估计器的标准方差. 而表 2 是基于卡尔曼滤波器实现的估计器的标准方差.

表 1 分布式 RBF 神经网络软测量的标准方差

输出变量	标准方差
D 中的丙烯含量 C_D	0.0133% (摩尔分数)
B 中的丙烷含量 C_B	1.0755% (摩尔分数)

表 2 基于卡尔曼滤波器实现的估计器的标准方差

输出变量	标准方差
D 中的丙烯含量 C_D	0.2028% (摩尔分数)
B 中的丙烷含量 C_B	1.9310% (摩尔分数)

由表 1 及其表 2 的比较可知利用分布式 RBF 网络建立的软测量模型可以较为理想地完成对精馏塔产品成分的估计.

5 结 论

本文提出递阶聚类的思想, 并且以此为基础建立了分布式 RBF 神经网络, 在设计软测量

模型方面得到较好的结果,同样这种方法也可应用于建立过程输出的预报模型。

本文提出的网络可以进行实时校正。如果软测量模型的输出与实际值偏差较大,可以将这组新的数据加入学习样本,然后以样本集中的输入变量为基准剔除与这组新的样本矛盾的样本,最后重新训练新样本所属的 RBF 神经网络。

本文利用分布式 RBF 神经网络建立软测量模型的方法即将投入工业过程的实际应用。

参 考 文 献

- 1 罗荣富,邵惠鹤. 软测量方法及其工业应用. 中国自动化学会第六届过程控制科学报告会论文集,苏州,Oct.,1993
- 2 Luo Rongfu, Shao Huihe and Zhang Zhongjun. Fuzzy-neural net-based inferential control for a high-purity distillation column. *Control Engineering Practice*, 1995, 3(1): 31-40
- 3 Chen, S., Cowan, C. F. N. and Grant, P. M.. Orthogonal least squares learning algorithm for radial basis function networks. *IEEE Trans. Neural Networks*, 1991, 2(2): 302-309
- 4 Ahalt, S. C., et al.. Competitive learning algorithms for vector quantization. *Neural Networks*, 1990, 3(3): 277-291
- 5 Xu Lei, et al.. Rival penalized competitive learning for clustering analysis, RBF net and curve detection. *IEEE Trans. Neural Networks*, 1993, 4(4): 636-649
- 6 Chung Fulai and Lee Tong. Fuzzy competitive learning. *Neural Networks*, 1994, 7(3): 539-551
- 7 Rumelhart, D. E. and Zipser, D.. Feature discovery by competitive learning. *Cognitive Science*, 1985, 9(1): 9-75
- 8 Desieno, D.. Adding a conscience to competitive learning. *Proc. IEEE Int. Conf. Neural Networks*, 1988, 1(2): 117-124
- 9 王旭东. RBF 神经网络及其在过程控制中的应用. 上海交通大学博士学位论文, 上海, 1997
- 10 Wang Xudong and Shao Huihe. Modeling of nonlinear systems based on the radial basis function neural network. *Control Theory and Applications*, 1997, 14(1): 59-66 (in chinese)
- 11 Asim Roy, et al.. An algorithm to generate radial basis function (RBF)-like nets for classification problems. *Neural Networks*, 1995, 8(2): 179-201

The Distributed RBF Neural Network and Its Application in Soft Sensor

WANG Xudong, SHAO Huihe and LUO Rongfu

(Institute of Automation, Shanghai Jiaotong University · Shanghai, 200030, PRC)

Abstract: This paper first improves the competitive learning algorithm, then a method of hierarchy clustering is proposed. Furthermore, a kind of distributed RBF neural network is constructed and then applied in the designing of a soft sensor model for a distillation column. Simulation results have shown the effectiveness of the new network.

Key words: competitive learning; clustering; RBF neural network; soft sensor; distillation column

本文作者简介

王旭东 1971 年生. 1992 年毕业于上海交通大学电机系, 1995 年于上海交通大学获硕士学位, 现为上海交通大学自动化系博士生. 主要研究方向是过程控制, 智能控制等.

邵惠鹤 1936 年生. 现为上海交通大学自动化系教授, 博士生导师. 上海交通大学自动化研究所副所长. 主要研究方向是过程控制, 生化控制, 智能控制, 管控一体化等.

罗荣富 1968 年生. 上海交通大学自动化系副教授. 现在美国得克萨斯大学奥斯汀分校作访问研究. 主要研究方向是过程控制, 生化控制和智能控制.