

基于支持向量机和粒子群算法的软测量建模

刘瑞兰¹, 牟盛静², 苏宏业³, 褚健³

(1. 南京邮电大学自动化学院, 江苏南京 210003; 2. 新加坡高性能计算研究所, 新加坡 117528;

3. 浙江大学先进控制研究所, 工业控制技术国家重点实验室, 浙江杭州 310027)

摘要: 针对PX氧化过程中的4-CBA浓度的估计问题, 提出了基于支持向量机和粒子群算法来估计机理模型参数的方法. 用支持向量机回归来提取特征样本, 这些少量的特征样本估计机理模型参数可以减少计算时间, 同时避免了人工随机试凑法选择训练样本的盲目性. 采用粒子群算法来估计非线性机理模型的参数, 可以避免传统方法对初始点和样本的依赖. 工业实例表明, 本文提出的方法是有效的.

关键词: 支持向量机; 特征样本; 粒子群优化算法; PTA氧化过程; 软测量

中图分类号: TP274 文献标识码: A

Modeling soft sensor based on support vector machine and particle swarm optimization algorithms

LIU Rui-lan¹, MU Sheng-jing², SU Hong-ye³, CHU Jian³

(1. College of Automation, Nanjing University of Post & Telecommunication, Nanjing Jiangsu 210003, China;

2. Institute of High Performance Computing, 117528, Singapore;

3. National Laboratory of Industrial Control Technology, Institute of Advanced Process Control, Zhejiang University, Hangzhou Zhejiang 310027, China)

Abstract: The estimation of 4-CBA (carboxybenzaldehyde) concentration in industrial PTA (purified terephthalic acid) oxidation process is of fundamental importance in process monitoring, advanced control and optimization. The support vector machine (SVM) and particle swarm optimization (PSO) algorithms are used to estimate the parameters of the first principle model. The training set for estimating the parameters is the feature subset selected by SVM regression algorithm, which overcomes the drawback of the trial-and-error method. Parameter estimation method based on the PSO algorithm is also used to avoid dependence on initial parameters and training samples. By use of real industrial data, the simulation results show that the presented method is effective for modeling the soft sensor of 4-CBA concentration in industrial PTA oxidation process.

Key words: support vector machine; feature subset; particle swarm optimization algorithm; PTA(purified terephthalic acid)oxidation process; soft sensor

1 引言(Introduction)

PTA(purified terephthalic acid, 精对苯二甲酸)是工业上生产聚酯纤维的主要原料之一. 在AMOCO化学公司的PX液相空气氧化专利技术中, PTA是由PX(paraxylene, 对二甲苯)和氧气在溶剂醋酸、钴锰催化剂存在的条件下经液相氧化反应得到的产物, 该氧化反应过程很复杂, 涉及到气液相的传热、传质和固体结晶等化学工程问题. 在过去的10年内, 关于PX氧化过程及其氧化反应器的研究已经获得了30多个专利技术^[1]. 对于高温常压下的氧化反应机理研究也取得了很多进展^[2,3]. Lindahl, et al.^[2]

给出了一系列关于第一结晶器耗氧、氧化反应器尾气中二氧化碳浓度与4-CBA(4-Carboxybenzaldehyde, 4-羧基苯甲醛)含量的经验关联式专利模型. 但是经验模型需要大量的标定工业数据来回归模型参数, 而且由于经验关联式没有包含过程本质的信息, 因而仅能适用于一个很有限的区域内, 泛化性能不好. Liu, et al.^[4]提出了用模糊神经网络方法对PX氧化过程进行建模, 扩大了模型对实际工业过程的预测范围. 陈渭泉等人^[5]则先利用贝叶斯方法和多项式基函数进行辅助变量及模型结构的选择, 并结合最小二乘法建立了PX氧化过程中4-CBA含量

的软测量模型. 同样地, 这些完全基于数据的建模方法需要大量的工业数据作为训练样本, 而且计算复杂, 此外在一定程度上也和纯经验模型那样具有泛化性能不足的缺陷.

王丽军^[6]提出了一个基于实验小试结果的氧化反应机理模型, 并对反应温度, 催化剂浓度, 停留时间, 反应器尾气浓度对反应物浓度的影响进行了研究. 由于实验室机理模型是基于小试结果建立的, 因而不能直接应用于工业对象, 虽然相同的反应过程具有相同的机理模型结构形式, 但是反应装置的大小, 反应条件的变化等因素都会使得机理模型的参数发生改变, 因此在实际应用前需要先用工业数据修正模型中的某些参数, 由于机理模型本身包含了过程本质的信息, 因此在修正模型参数的时候仅需少量的工业样本即可.

对模型的参数进行修正需要有合适的工业样本和合适的修正算法, 牟盛静^[7]提出了改进的LM (levenberg-marquardt) 阻尼非线性最小二乘算法, 虽然该改进算法较传统LM算法更为鲁棒和快速, 但需要事先设置阻尼因子和自适应调节系数, 并且对初始值有一定的依赖性; 而用于模型修正的工业样本是在不同操作状况的数据中随机选择的, 建模的时候需要对不同样本组进行反复试凑才能确定一组较优的参数解.

为了避免试凑法选择特征样本的盲目性以及传统参数估计方法对初始值的依赖性, 本文以小试结果的氧化机理模型为基础, 提出了基于支持向量机的特征样本的提取方法, 然后借用粒子群算法的群体寻优能力对模型参数进行修正.

2 支持向量机和粒子群算法(Support vector machine and particle swarm optimization algorithms)

2.1 支持向量机回归(Support vector machine regression)

20世纪90年代中期, Vapnik V等提出了支持向量机方法^[8], 能有效解决高维、非线性及有限样本下的模式识别问题. 支持向量机方法是建立在统计学习理论的VC维理论和结构风险最小原理基础上的, 根据有限的样本信息在模型的复杂性和学习能力之间寻求最佳折衷, 以期获得最好的推广能力.

给定 l 个样本 (x_i, y_i) , $x_i \in \mathbb{R}^n$, $y_i \in \mathbb{R}$, $l = 1, 2, \dots, l$. 根据以上样本, 寻求一个最优函数 $f(x) = (w \cdot x) + b$, 使得预测的期望风险函数 $R[f]$ 最小^[9,10]:

$$R[f] = \frac{1}{2} \|w\|^2 + C \cdot R_{\text{emp}}^\varepsilon[f]. \quad (1)$$

其中: $\|w\|^2$ 称为结构风险, 代表模型的复杂度; $R_{\text{emp}}^\varepsilon[f]$ 通常采用 ε -不灵敏区函数(如图1所示), 定义如下:

$$R_{\text{emp}}^\varepsilon[f] = \begin{cases} 0, & |y_i - f(x_i)| < \varepsilon, \\ \frac{1}{l} \sum_{i=1}^l |y_i - f(x_i)| - \varepsilon, & \text{其他}, \end{cases} \quad (2)$$

称为经验风险, 代表回归模型的误差, C 为平衡因子, 用于在结构风险和经验风险之间进行平衡. 最小化式(2)等价于下面的二次规划问题:

$$\begin{cases} \min J = \frac{1}{2} \|w\|^2 + C \frac{1}{l} \sum_{i=1}^l (\xi_i + \xi_i^*), \\ \text{s.t.} \begin{cases} y_i - ((w \cdot x_i) + b) \leq \varepsilon + \xi_i, \\ (w \cdot x_i) + b - y_i \leq \varepsilon + \xi_i^*, \\ \xi_i, \xi_i^* \geq 0, \quad i = 1, \dots, l. \end{cases} \end{cases} \quad (3)$$

其中: ξ_i, ξ_i^* 为松弛变量, $|y_i - ((w \cdot x_i) + b)| \leq \varepsilon$ 的区域为回归间隔.

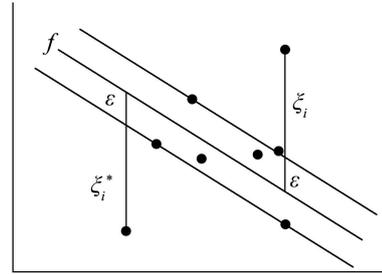


图1 ε -不灵敏函数

Fig. 1 ε -insensitive function

引入Lagrange系数 α_i, α_i^* , 将式(3)优化问题转化为其对偶问题:

$$\begin{cases} \max W = \sum_{i=1}^l (\alpha_i - \alpha_i^*) y_i - \varepsilon \sum_{i=1}^l (\alpha_i + \alpha_i^*) - \\ \quad \frac{1}{2} \sum_{i,j} (\alpha_i - \alpha_i^*) (\alpha_j - \alpha_j^*) \cdot (x_i \cdot x_j), \\ \text{s.t.} \begin{cases} \sum_{i=1}^l (\alpha_i - \alpha_i^*) = 0, \\ 0 \leq \alpha_i, \alpha_i^* \leq C, \quad i = 1, \dots, l. \end{cases} \end{cases} \quad (4)$$

求解式(4), 得到最优的Lagrange系数 α_i, α_i^* 以及阈值 b . $\alpha_i, \alpha_i^* > 0$ 所对应的样本称为支持向量(support vector, SV), 回归函数 $f(x)$ 完全由其决定,

$$f(x) = \sum_{i \in SV_s} (\alpha_i - \alpha_i^*) (x_i \cdot x) + b. \quad (5)$$

在非线性的情况下, 可以通过适当的非线性变换将输入空间映射到一个高维特征空间, 然后在这个空间中构造最优函数使得定义的风险函数最小, 根据Mercer条件^[11], 存在映射 φ 和核函数 $K(x_i \cdot x_j)$, 使得 $K(x_i \cdot x_j) = \varphi(x_i) \cdot \varphi(x_j)$, 引入核函数后, 非线性

回归函数可以表示为

$$f(x) = \sum_{i \in SV_s} (\alpha_i - \alpha_i^*) K(x_i \cdot x_j) + b. \quad (6)$$

常用的核函数有线性核 $K(x_i \cdot x_j) = x_i \cdot x_j$, 多项式核 $K(x_i \cdot x_j) = ((x_i \cdot x_j) + 1)^d$, 高斯径向基核 $K(x_i \cdot x_j) = \exp(-p\|x_i - x_j\|^2)$ 等.

2.2 粒子群算法原理(Particle swarm optimization algorithm)

粒子群优化算法(PSO)是一种进化计算技术, 最初由Kennedy, et al. 提出^[12], 源于对鸟群捕食的行为研究, 已经被证明是一种很好的优化方法^[13]. 设想这样一个场景: 一群鸟在随机搜索食物, 在这个区域内只有一块食物, 所有的鸟都不知道食物在哪里, 但是它们知道当前位置离食物还有多远. 那么找到食物的最简单有效的策略就是搜寻目前离食物最近的鸟的周围区域.

PSO从这种模型中得到启示并用于解决优化问题. PSO中的每个优化问题的解都是搜索空间中的一只鸟, 称之为“粒子”, 在搜索空间中以一定的速度飞行, 这个速度根据它本身的飞行经验和同伴的飞行经验来动态调整. 每个粒子的坐标为 $X_i = (x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{iD})$, 每个粒子的飞行速度 $V_i = (v_{i1}, v_{i2}, \dots, v_{iD})$, 每个粒子都有一个由优化目标函数决定的适应值(fitness value), 对于第*i*个粒子, 其所经过的历史最好位置记为 $P_i = (p_{i1}, p_{i2}, \dots, p_{iD})$, 也称为个体极值 p_{best} ; 到目前为止整个群体中所有粒子发现的最好位置记为 $P_g = (g_1, g_2, \dots, g_D)$, 也称为全局极值 g_{best} . 粒子就是根据这两个极值来不断更新自己的速度和位置:

$$\begin{cases} v_{ij}(k+1) = wv_{ij}(k) + r_1c_1(p_{ij} - x_{ij}(k)) + \\ \quad r_2c_2(g_j - x_{ij}(k)), \\ x_{ij}(k+1) = x_{ij} + v_{ij}(k+1). \end{cases} \quad (7)$$

其中: $i = 1, 2, \dots, m$, m 表示粒子的总个数; $j = 1, 2, \dots, D$, D 表示一个粒子的总维数, 根据具体的优化问题而定; r_1, r_2 为[0,1]之间的随机数; c_1, c_2 为权重因子; w 表示惯性权重函数.

3 基于粒子群算法的PX氧化过程建模(PSO algorithm based PX oxidation process model development)

3.1 过程描述(Process description)

PX氧化反应步骤机理流程^[3,6]如图2所示, 从图中可以看出, PX氧化反应主要由4个反应组成, 除原料PX和最终产品TA外, 还有其他中间产物: TALD(对甲基苯甲醛)、PT(对甲基苯甲酸)和4-

CBA(对羟基苯甲醛). 文献[6]提出了如下简化的动力学方程组:

$$r_i = -k_i \frac{f_i}{\sum_{j=1}^4 k_j c_j + \varepsilon} c_i^\beta, \quad i = 1, \dots, 4. \quad (8)$$

其中: $c_i (i = 1, \dots, 4)$ 分别为图2中除TA外各组分的浓度, 单位为mol/kgHAc; $k_i (i = 1, \dots, 4)$ 为各反应速率常数, 是温度和氧浓度的函数, 且有 $k_2 \gg k_4 > k_1 > k_3$, 即生成中间产物4-CBA的反应速度最慢, 是整个氧化反应的控制步骤; $f_i (i = 1, \dots, 4)$ 为催化剂 Co^{2+} 浓度的函数, 单位为min; ε 为一正小数, 一般可取0.01~0.02. 在此基础上, 并假设工业反应器操作为理想的全混流操作, 提出了工业PX氧化反应器的数学模型^[6,7]:

$$\begin{cases} C_{1,0} - C_1 + \tau \cdot r_1 = 0, \\ C_{2,0} - C_2 + \tau \cdot (r_2 - r_1) = 0, \\ C_{3,0} - C_3 + \tau \cdot (r_3 - r_2) = 0, \\ C_{4,0} - C_4 + \tau \cdot (r_4 - r_3) = 0, \\ C_{5,0} - C_5 - \tau \cdot r_4 = 0. \end{cases} \quad (9)$$

其中: $C_{i,0} (i = 1, 2, \dots, 5)$ 为PX等各组分初始进料浓度, 单位为mol/kgHAc; $C_i (i = 1, 2, \dots, 5)$ 分别为5个反应物PX, TALD, PT酸, 4-CBA和TA的出口浓度, 单位为mol/kgHAc; τ 为反应器的停留时间, 单位为min.

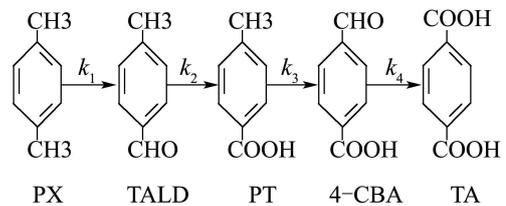


图2 PX氧化反应的简化网络

Fig. 2 Simplified network of PX oxidation reaction

公式(8)和(9)组成的非线性方程包含22个模型参数, 求解过程非常复杂, 为了问题的简化, 文献[7]提出了求取装置因数的方法, 也就是将以上22个模型参数保持常值不变(这些常值都是在实验室条件下设计出来的), 另外提出6个装置因数, 分别补偿反应速率常数、停留时间、进料PX浓度和反应速率等参数的变化, 并用实际工业数据对这6个参数进行回归, 这样处理进一步减少了对样本的需求, 同时简化了问题的求解.

以上公式中的变量, 如反应器温度、催化剂浓度、尾气浓度、反应速率、进料浓度等都可以直接或间接通过过程变量来表示, 这些过程变量

包括氧化反应器溶剂、氧化反应器物料进料流量、催化剂浓度、液位、反应器温度、氧化反应器尾氧含量、第4冷凝器排出水量、第1结晶器温度约束、第1结晶器尾氧含量共计9个。

图3显示了某化纤厂33万吨PTA装置氧化过程流程图。对二甲苯(PX)、醋酸、促进剂(HBr)和催化剂(Co+Mn)以及循环母液分别连续地泵入混合罐。混合罐出料泵入氧化反应器,同时空气从反应器底部进入。PX氧化反应分两级进行,即先后在氧化反应器和第1结晶器进行氧化。PX氧化反应是放热反应,反应器汽化蒸汽通过多级冷凝器后进行冷凝,一部分冷凝出来的醋酸和水被抽出反应系统以控制反应器中水浓度和反应器温度,其他冷凝液返回反应系统。

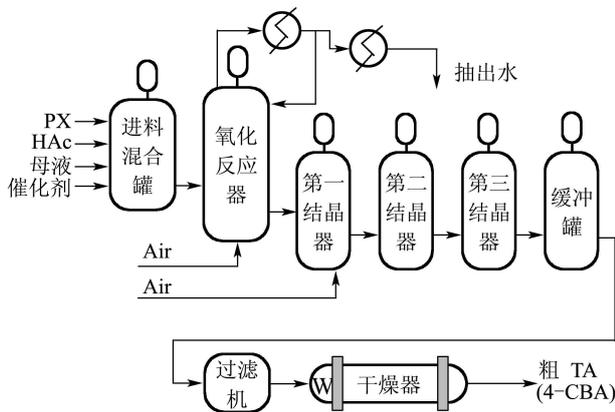


图3 PX氧化过程

Fig. 3 PX oxidation process

反应器出口产物流股经过由3个结晶器进行一系列的减压和冷却蒸发结晶。此外在第1结晶器还进行PX和中间反应产物的二次氧化反应,以得到较纯的对苯二甲酸(TA)。经过结晶的TA浆料再进行过滤和干燥,得到的粗TA固体进入精制单元进一步纯化,最后得到精对苯二甲酸。

由于反应是步进行的,所以TA中不可避免地会含有中间产物PT酸(P-Toluic Acid, 对甲基苯甲酸)和4-CBA。4-CBA含量是PTA产品中的主要杂质及重要质量指标。根据文献[1,2]对反应机理的研究,4-CBA含量过低,则氧化反应程度加深,副反应加剧,能耗及醋酸、PX单耗增加。为了节能降耗,并保证PTA的产品纯度,对氧化反应单元的4-CBA含量实时监控是非常重要的。

由于4-CBA含量无法在线测量,离线分析又滞后数小时,因此需要引入软测量技术实现对4-CBA含量的实时估计。本文采用机理模型作为软测量模型结构。

3.2 特征样本的选取(Feature subset selection)

虽然支持向量机方法用于非线性系统建模时具有很好的泛化性能,但是它仍然是一种基于数据驱动的建模方法,它的良好泛化性能只能适用于由训练样本所体现的工作点附近的区域,一旦过程的工作点发生了较大的变化,用支持向量机方法建立的非线性回归模型仍然得不到很好的泛化性能的。而机理模型的适用范围要大得多,这是因为机理模型本身一些结构参数和一些物性参数就包含了丰富的先验信息。

用实际工业数据建模的时候,数据或多或少总存在噪声,如果拿所有的训练样本来修正机理模型参数,会导致相当大的计算量和较大的误差等问题。前面提到过,用支持向量机建模时只有支持向量才对回归模型起作用。也就是说,支持向量可以代表所有训练样本,是训练样本特征的概括。因此可以采用比训练样本个数少得多的支持向量来修正模型参数,以减小模型的误差和计算量。同时也减少了随机反复试凑选择样本方式的盲目性。

3.3 PSO算法求解PX氧化过程模型参数(Using PSO algorithm to solve parameters of PX oxidation process model)

建立PX氧化过程模型的主要目的是估计4-CBA含量,将4-CBA含量作为模型输出,则公式(8)(9)非线性方程组引入装置因数后可以写成如下形式:

$$F(X, y, C, \theta) + e = 0. \quad (10)$$

其中: X 为现场可以直接测量的过程变量, y 为4-CBA含量, C 为物性常数, θ 为待估计的模型装置因数, e 是均值为0、方差为 δ^2 的白噪声。

由于公式(10)所示的函数 F 结构是已知的,要估计模型装置因数,可以根据已知的输入输出观测数据 $(X_i, y_i)(i = 1, 2, \dots, n)$,求出使得误差平方和最小小时对应的 θ 值:

$$\min J(\theta) = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2. \quad (11)$$

其中 \hat{y}_i 是根据式(10)计算出的4-CBA含量估计值。从公式(11)可以看出,模型参数的估计问题实质上是一个非线性函数的优化问题。可以采用传统的非线性最小二乘迭代算法来求解,但是传统的迭代算法实际上是一种单点迭代算法,对初始值比较敏感,初始值选择不好,可能造成算法不收敛。为此,本文利用PSO算法来估计非线性模型的参数,以克服传统方法求解的不足。

本文用来估计PX氧化过程模型参数的数据全部来源于工业现场,从2002年9月到2002年12月共采集

到了171组数据,用支持向量机回归方法提取出9个特征样本,核函数为高斯核, $p = 0.05$, $C = 100$, $\varepsilon = 0.1$. 结果如图4所示,图(a)中的实线表示4-CBA含量的实际分析化验值;虚线表示基于支持向量机的回归模型的估计值;“o”表示用支持向量机回归方法选择到的特征样本(即支持向量). 从图4可以看出,支持向量机回归模型的估计效果较好. 图(b)表示用支持向量机回归模型预测2003年4~7月份的4-CBA含量,可以看出预测效果很差.

根据图4所示的9个特征,采用粒子群算法来估计机理模型(8)和(9)中的装置因数. PSO参数取为:粒子个数 $m = 20$; $w = 0.9 \sim 0.4$ 表示惯性权重从0.9逐渐衰减到0.4;权重因子 $c_1, c_2 = 1$;由于本文需要估计6个装置因数,故粒子的维数 $D = 6$. 待估计的参数的定义区间为 $[0, 2]$.

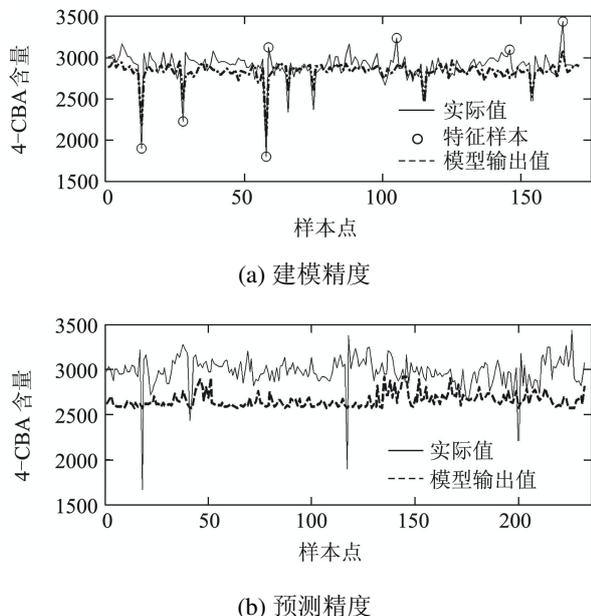


图4 用支持向量机算法选择的特征样“o”以及所得到模型的建模精度(图a)和预测精度(图b)比较
Fig. 4 Feature subset (denoted by “o” in Figure a) selected by SVM method and the comparisons of its modeling results (Fig. a) and predict results (Fig. b)

图5显示了用不同估计方法得到的模型对2003年4~7月份的4-CBA含量的预测结果. 其中图(a)表示采用PSO算法的模型预测结果,相对均方误差为0.0547,训练样本为图4中所对应的特征样本;图(b)表示采用改进的LM阻尼非线性最小二乘算法得到的模型的预测值,相对均方误差为0.0780,图(b)对应的训练样本为试凑法选择的. 用图4的特征样本作为训练样本,采用改进的LM阻尼非线性最小二乘算法来估计模型的装置因数,结果不收敛. 因为该方法是牛顿法的修正方法,为了解决二阶导数

不正定的情况. 牛顿法本身对初始值的选择是比较敏感的,初始值选择得不好,会造成结果不收敛.

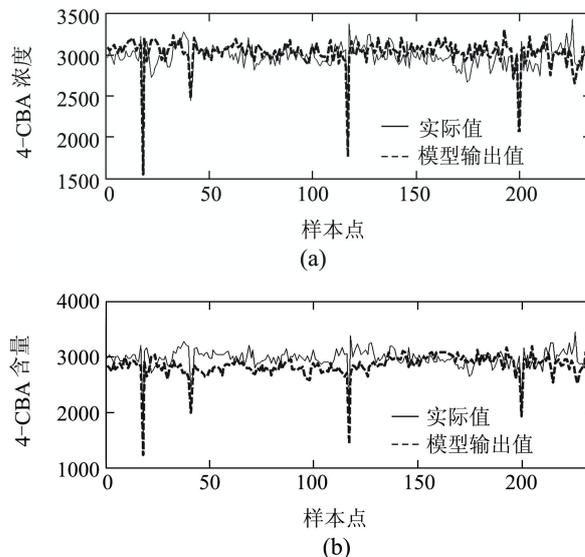


图5 由PSO算法和改进LM算法参数估计得到的模型预测结果比较
Fig. 5 Comparison of model predict results between the PSO method and modified LM method

用PSO参数估计方法得到的模型预测结果要比用改进的LM阻尼非线性最小二乘算法得到的模型预测结果好2个百分点. 经过多次反复试验发现,用粒子群算法总能得到一个收敛的解,这是因为PSO算法是一种多点迭代算法,初始点不只一个,在多点的迭代过程中总能找到较好的解.

虽然从精度来看PSO算法较好,但是从算法的速度来看,改进的LM阻尼非线性最小二乘算法比PSO快,基于多点迭代的PSO算法通过牺牲速度来达到精度的要求,因此该算法不适合在线估计模型参数. 实际上由于本文的软测量模型是机理模型,泛化能力较强,不需要经常来改变模型的参数,针对本文的工业对象在线建模没必要,正如图5所示的那样,用2002年的数据建立的模型来预测2003年的数据,效果仍然很好. 随着工况的变化,可以根据情况来离线更新模型.

4 结论(Conclusion)

本文提出了基于支持向量机和粒子群算法来估计机理模型参数的方法,用支持向量机回归方法来提取特征样本,用这些少量的特征本来估计机理模型参数,可以减少计算时间,同时避免了人工随机试凑法选择训练样本的盲目性. 采用粒子群算法来估计非线性机理模型的参数,可以避免传统方法对初始点和样本的依赖. 工业实例表明,本文提出的方法是有效的.

- [9] 陈捷, 钱清泉, 王宁. 适用于非线性对象的神经元非模型控制方法[J]. 西南交通大学学报, 1998, 33(2): 188 – 191.
(CHEN Jie, QIAN Qingquan, WANG Ning. Neuron model free control of nonlinear processes[J]. *J. of Southwest Jiao tong University*, 1998, 33(2): 188 – 191.)
- [10] PARIS A M, JOHN B T. A recurrent fuzzy-neural model for dynamic system identification[J]. *IEEE Trans on System, Man and Cybernetics. Part B: Cybernetics*, 2002, 32(2): 176 – 189.
- [11] 田杰, 龚至豪, 任雪梅. 纯滞后系统的单神经元Smith预测控制[J]. 计算机仿真, 2001, 18(1): 40 – 42.
(TIAN Jie, GONG Zhihao, REN Xuemei. Single neuron with Smith predictor control of the dead-time systems[J]. *Computer Simulation*, 2001, 18(1): 40 – 42.)

作者简介:

韩敏 (1959—), 女, 工学博士, 教授, 博士生导师, 从事神经网络、混沌系统、3S系统等研究, E-mail: minhan@dlut.edu.cn;

韩冰 (1981—), 男, 博士研究生, 从事神经网络及预测控制研究.

(上接第899页)

参考文献(References):

- [1] 李希, 谢刚, 华卫琦. PTA技术国产化中的主要化学工程问题及其研究思路[J]. 聚酯工业, 2001, 40(1): 1 – 7.
(LI Xi, XIE Gang, HUA Weiqi. Key problems and research program for PTA process domestic development[J]. *Polyester Industry*, 2001, 40(1): 1 – 7.)
- [2] LINDAHL H A, ABRAMS K J, STARK L E, et al. Method and apparatus for controlling the manufacture of terephthalic acid to control the level and variability of the contaminant content and the optical density: US, 4835307[P]. 1989.
- [3] CAP G, SERVIDA A, PISU M, et al. Kinetics of p-Xylene liqui-phase catalytic oxidation[J]. *AIChE J*, 1994, 40(6): 1156 – 1166.
- [4] LIU Ruilan, SU Hongye, MU Shengjing, et al. Fuzzy neural network model of 4-CBA concentration for industrial PTA oxidation process[J]. *Chinese J of Chemical Engineering*, 2004, 12(2): 234 – 239.
- [5] 陈渭泉, 刘瑞兰, 苏宏业, 等. 基于贝叶斯方法的4-CBA含量的软测量研究[J]. 化工自动化及仪表, 2003, 30(5): 49 – 51.
(CHEN Weiquan, LIU Ruilan, SU Hongye, et al. The research on soft sensor of the concentration of 4-CBA based on bayesian approach[J]. *Control and Instruments in Chemical Industry*, 2003, 30(5): 49 – 51.)
- [6] 王丽军. PX氧化动力学研究及氧化反应器模拟[D]. 杭州: 浙江大学, 2001.
(WANG Lijun. *Studies on the kinetics of p-Xylene oxidation and the reactor simulation*[D]. Hangzhou: Zhejiang University, 2001.)
- [7] 牟盛静. 石化工业过程建模与优化若干问题研究[D]. 杭州: 浙江大学, 2004.
(MU Shengjing. *The studies of process modeling and optimization in petrochemical industry*[D]. Hangzhou: Zhejiang University, 2004.)
- [8] VAPNIK V. *The Nature of Statistical Learning Theory*[M]. New York: Springer, 1995.
- [9] VAPNIK V. *Statistical Learning Theory*[M]. New York: Springer, 1998.
- [10] CORTES C, VAPNIK V. Support vector networks[J]. *Machine Learning*, 1995, 20(4): 273 – 297.
- [11] GUYON I, WESTON J, BARNHILL S, et al. Gene selection for cancer classification using support vector machines[J]. *Machine Learning*, 2002, 46(6): 389 – 422.
- [12] KENNEDY J, EBERHART R C. Particle swarm optimization[C]// *Proc of IEEE Int Conf on Neural Networks*. Piscataway, NJ: IEEE Press, 1995: 1942 – 1948.
- [13] PARSOPOULOS K E, VRAHATIS M N. Recent approach to global optimization problems through particle swarm optimization[J]. *Natural Computing*, 2002, 1(2/3): 235 – 306.

作者简介:

刘瑞兰 (1972—), 女, 博士, 研究方向为工业建模与先进控制、智能软测量等, E-mail: ruilanl@sina.com;

牟盛静 (1977—), 男, 博士, 研究方向为石化工业、环境工程建模、先进控制与优化等;

苏宏业 (1969—), 男, 教授, 博士生导师, 研究方向为时滞系统控制理论、鲁棒控制、先进过程建模与控制等;

褚健 (1963—), 男, 教授, 博士生导师, 研究方向为现代控制理论、现场总线控制系统等.