

研究论文

群智能优化 LSSVM 最优聚丙烯熔融指数预报

蒋华琴, 赵成业, 刘兴高

(浙江大学控制系, 工业控制技术国家重点实验室, 浙江 杭州 310027)

**摘要:** 提出了群智能优化 AC\_ICPSO (ant colony and immune clone particle swarm optimization) 算法, 融合蚁群算法与粒子群算法进行动态群体搜索, 设计交叉算子和变异算子、群体多次编码、迭代选择等, 来提高数据搜索的范围、精度和收敛的效率, 避免早熟, 降低算法的复杂度。然后利用 AC\_ICPSO 方法对最小二乘支持向量机预报模型 (LSSVM) 进行参数寻优, 得到最优的 AC\_ICPSO\_LSSVM 预报模型。以实际聚丙烯生产的熔融指数预报作为实例进行研究, 结果表明所提出的 AC\_ICPSO\_LSSVM 方法有效, 具有良好的预报精度。

**关键词:** 群智能优化; 最小二乘支持向量机; 熔融指数预报; 参数寻优

DOI: 10.3969/j.issn.0438-1157.2012.09.019

中图分类号: TP 273

文献标志码: A

文章编号: 0438-1157 (2012) 09-2794-05

Melt index prediction of propylene polymerization based on LSSVM  
using swarm intelligence optimization

JIANG Huaqin, ZHAO Chengye, LIU Xinggao

(State Key Laboratory of Industrial Control Technology, Control Department, Zhejiang University,  
Hangzhou 310027, Zhejiang, China)

**Abstract:** A novel swarm intelligence optimization AC\_ICPSO (ant colony and immune clone particle swarm optimization) algorithm is proposed. It combines ACO (ant colony optimization) and PSO (particle swarm optimization) to conduct dynamic swarm query. According to introducing crossover and mutation operator, encoding repeatedly, iterative choice, etc., it leads to widen data range, improves search precision and convergence efficiency, avoids premature convergence, and reduces complexity of the conventional ACO or PSO algorithm. Then AC\_ICPSO is used to optimize the parameters of LSSVM (least square support vector machines) to predict the melt index of polypropylene, so the best model AC\_ICPSO\_LSSVM is obtained. The detailed researches on the optimized model are carried out based on the data from a real plant, and the result shows that the proposed approach has great prediction accuracy and effectiveness.

**Key words:** swarm intelligence optimization; LSSVM; melt index prediction; parameter optimization

2012-06-13 收到初稿, 2012-06-20 收到修改稿。

联系人: 刘兴高。第一作者: 蒋华琴 (1984—), 女, 硕士。

基金项目: 国家自然科学基金项目 (U1162130); 国家高技术研究发展计划项目 (2006AA05Z226); 浙江省杰出青年科学基金项目 (R4100133)。

Received date: 2012-06-13.

Corresponding author: Prof. LIU Xinggao, liuxg@ipc.zju.edu.cn

Foundation item: supported by the National Natural Science Foundation of China (U1162130), the High-tech Research and Development Program of China (2006AA05Z226) and the Zhejiang Province Outstanding Youth Science Fund Project (R4100133).

## 引言

聚丙烯是工业三大塑料之一,用途十分广泛。熔融指数是决定聚丙烯产品牌号,衡量其是否合格的重要质量指标。对于这个指标的监控,目前大多采用离线化验分析的方法获得,但在聚合釜高黏度高温高压的环境下,测量精度不高,且存在 2~4 h 的滞后,无法满足实时控制的要求<sup>[1]</sup>。因此,设计一个准确、可靠的熔融指数实时预报模型对熔融指数进行有效预测,对提高聚丙烯产品质量,减少经济损失,提升聚丙烯生产自控水平有着重要意义。

国内外研究者已提出了大量基于数据驱动的软测量方法。如王桂增等<sup>[2-3]</sup>提出了具有鲁棒自适应功能的 RBF 网络等方法;孔薇等<sup>[4]</sup>提出结合 PCA、PLS 和 RBF 的模型;Han 等<sup>[5]</sup>研究比较了 SVM、PLS 和神经网络三种模型;Shi 等<sup>[6-8]</sup>提出了基于多尺度分析的模型;Zhang 等<sup>[9]</sup>提出基于 Bootstrap 多神经网络的软测量方法。

这些方法极大提高了聚丙烯生产熔融指数的预报水平,然而其中参数选择的随机性,也影响了这些方法的使用和预报性能,因此本文提出了一种将 AC 与 PSO 相融合的最优熔融指数预报方法。

## 1 最小二乘支持向量机与群智能算法

### 1.1 最小二乘支持向量机 (LSSVM)

设训练样本  $\{x_k, y_k\}_{k=1}^n$ , 其中,  $x_k$  是输入数据,  $y_k$  是输出数据。利用高维特征空间中的线性函数

$$y(x) = w^T \phi(x) + b \quad (1)$$

来拟合样本集。非线性映射  $\phi(\cdot)$  把数据集从输入空间映射到特征空间,使输入空间中的非线性拟合问题变成高维特征空间中的线性拟合问题。目标是使回归模型在模型推广能力和经验风险之间找到最佳平衡点,即结构风险最小<sup>[10]</sup>。

最小二乘支持向量机 (LSSVM) 是 Suykens 等<sup>[11]</sup>首次提出,它把不等式约束改成等式约束,并把经验风险由偏差的一次方改为二次方,提高了学习速度。LSSVM 的函数优化目标为

$$\min_{w, b, \xi} J(w, \xi) = \frac{1}{2} w^T w + \frac{1}{2} C \sum_{i=1}^n \xi_i^2 \quad (2)$$

满足约束条件

$$y_i = w^T \phi(x_i) + b + \xi_i \quad (i = 1, 2, \dots, N) \quad (3)$$

式中  $w^T w$  是控制模型的复杂度,  $\xi_i$  是误差变量,  $C$  是误差惩罚参数,  $J$  是误差控制函数。

根据式(2),可定义拉格朗日函数,并根据 KKT 优化条件,可得以下矩阵方程

$$\begin{bmatrix} 0 & \mathbf{1} & \cdots & \mathbf{1} \\ \mathbf{1} & K(x_1, x_1) + \frac{1}{C} & \cdots & K(x_1, x_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{1} & K(x_1, x_n) & \cdots & K(x_n, x_n) + \frac{1}{C} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b \\ \alpha \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} \quad (4)$$

式中  $\alpha = [\alpha_1, \dots, \alpha_n]^T$  是拉格朗日乘子,  $\mathbf{1}_n$  是  $n$  维单元矩阵。由此确定 LSSVM 的输出为

$$f(x) = \sum_{i=1}^n \alpha_i K(x, x_i) + b \quad (5)$$

其中,  $K = \phi(x_i)^T \phi(x_j) = K(x_i, x_j)$  为核函数,用 RBF 核,  $K(x_i, x_j) = \exp[-\|(x_i - x_j)\|^2 / \sigma^2]$ ,  $\sigma$  为核宽度。

### 1.2 蚁群优化算法

蚁群 (ant colony optimization, ACO) 算法是一种基于蚂蚁群居模型的仿生算法<sup>[12]</sup>。蚂蚁在运动过程中,能够在它所经过的路径上留下一种称之为信息素的物质,而且蚂蚁在运动过程中能感知到这种物质的存在及其强度,蚂蚁个体之间就是通过这种信息的交流达到搜索最短路径的目的。随着时间推移,信息素不断更新。最优路径上的信息素浓度越来越大。

为了改进 ACO 算法在连续空间上的寻优,对蚂蚁先进行局部搜索,每只蚂蚁都在自己的附近寻找更优解。完成后整个蚁群再进行全局搜索。

### 1.3 免疫粒子群优化 (ICPSO) 算法

标准 PSO 算法以其简单易行及快速收敛的特性得到了快速发展,但也存在容易陷入局部最优的问题,且搜索速度有待进一步提高<sup>[13]</sup>。免疫 PSO (immune clone particle swarm optimization) 算法是将免疫特性结合到 PSO 算法中,既保留了高适应度个体,也保留了个体的多样性,能避免早熟现象<sup>[14]</sup>。

本文采用基于浓度机制的多样性保持策略,使得新一代粒子中,各适应度层次的粒子维持在一定浓度。第  $i$  个粒子的适应度定义如下

$$F(x_i) = \sum_{j=1}^n (y_j - \bar{y}_i)^2 / 2 \quad (6)$$

则基于粒子适应度的个体概率选择公式为

$$P(x_i) = \beta_1 E \frac{1 - F(x_i)}{F(gbest)} + \beta_2 \frac{F(x_i)}{F(gbest)} \quad (7)$$

式中  $\bar{y}_i$  为预测值;  $\beta_1$ 、 $\beta_2$  是  $[0, 1]$  之间的随机数;  $F(x_i)$  是第  $i$  个粒子的适应度;  $F(gbest)$  是全局最优解的适应度;  $E$  是抗体浓度, 即具有相近适应度的抗体个数与群体中抗体总数的比值。

#### 1.4 基于 AC-ICPSO 优化的 LSSVM 的模型

现有 LSSVM 的参数选择方法大多是建立在经验和试凑的基础上<sup>[8,15]</sup>, 耗时且缺乏通用性。群智能优化 (AC-ICPSO) 算法基本思想就是充分利用两种算法的优点, 克服各自的缺点, 优势互补, 找到最优解。AC-ICPSO 算法首先利用 ACO 产生一条全局最优路径, 然后将其转化为 PSO 的初始个体最优粒子, 减小了粒子群搜索的盲目性, 缩减了 PSO 的搜索空间, 该混合算法弥补了单一算法的缺陷。本文把 AC-ICPSO 算法引入 LSSVM, 对其惩罚参数  $C$  和核函数参数  $\sigma^2$  进行优化。适应度函数就取为能直接反映 LSSVM 回归性能好坏的误差平方。

AC-ICPSO-LSSVM 模型的算法步骤如下。

(1) 蚁群初始化。

(2) 移动蚂蚁, 更新信息素。同时对蚂蚁进行局部搜索和全局搜索。

(3) 迭代次数  $t = t + 1$ 。如果  $t$  达到设定值, 则终止迭代, 否则转到步骤 (2) 继续执行。

(4) 用 ACO 算法找到的最佳蚂蚁作为初始个体最优粒子, 取适应度最优的粒子的位置定位群体的初始最优粒子。

(5) 更新每个粒子的速度和位置, 计算每个粒子的适应度, 更新个体最优粒子。

(6) 生成免疫粒子, 计算免疫粒子的适应度, 将更优粒子放入记忆库。用式 (6) 计算新粒子的选择概率, 依概率大小选择新粒子替换原来适应度较差的粒子, 克隆适应度较好的粒子形成新一代粒子群体。

(7) 更新群体最优粒子。

(8) 迭代次数  $K$  加 1, 若达到最大迭代次数或群体最优解符合条件, 则终止迭代, 否则转到步骤 (5) 继续执行。

(9) 将得到的群体最优解作为参数  $C$ 、 $\sigma^2$ , 建立 AC-ICPSO-LSSVM 模型进行预报。

#### 1.5 优化算法性能

为了比较前述优化算法的性能, 本节进行了基

表 1 基准测试函数

Table 1 Benchmark functions

Function	Search space	Minimum
$f_1(x) = \sum_{i=1}^D x_i^2$	$[-100, 100]^{30}$	0
$f_2(x) = \sum_{i=1}^{D-1} [100(x_{i+1} - x_i^2)^2 + (x_i - 1)^2]$	$[-10, 10]^{30}$	0
$f_3(x) = \sum_{i=1}^D [x_i^2 - 10 \cos(2\pi x_i) + 10]$	$[-5, 12.5, 12]^{30}$	0
$f_4(x) = \frac{1}{4000} \sum_{i=1}^D x_i^2 - \prod_{i=1}^D \cos(x_i / \sqrt{i}) + 1$	$[-600, 600]^{30}$	0

准测试, 基准测试函数见表 1。其中前 2 个基准测试函数具有单峰特性, 后 2 个函数为多峰特性。

算法的优化结果见表 2, 表中分别列出每个算法在每个优化函数上经过 10 次独立运算得到的优化值平均值。从表中可以看出, AC-ICPSO 在所有基准测试函数上都有较好的优化精度, 表明本文提出的 AC-ICPSO 优化算法的有效性。

表 2 优化算法结果

Table 2 Results of optimization algorithm

Functions	ACO	ICPSO	AC-ICPSO
$f_1$	$1.16 \times 10^{-10}$	$1.47 \times 10^{-11}$	$3.83 \times 10^{-15}$
$f_2$	28.98	20.07	4.10
$f_3$	30.51	6.39	0.58
$f_4$	0.94	0.15	0.022

## 2 熔融指数预报上的应用

图 1 为聚丙烯生产中典型的 Hypol 工艺流程。根据图中所示的流程工艺和反应机理, 选择 9 个过程变量作为模型的输入变量, 它们分别是温度、压力、液位、氢气气相百分数、3 股丙烯进料流速和 2 股催化剂进料流速。以某石化厂聚丙烯实际生产过程的生产数据作为建模和预报数据。

首先, 对数据进行预处理, 然后将数据分为训练数据集、验证数据集和推广数据集, 三者取自不

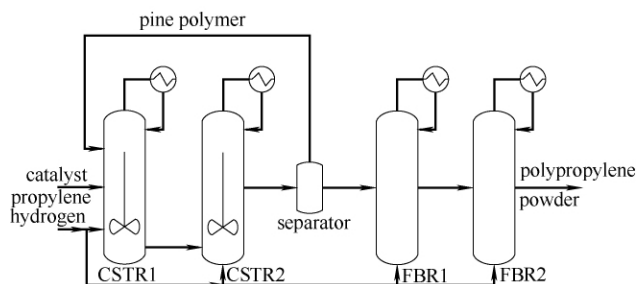


图 1 丙烯聚合工艺流程

Fig. 1 Schematic diagram of propylene polymerization

同的生产批次。以训练数据集训练 LSSVM 模型,得到初始的预报模型。再利用群智算法对 LSSVM 的两个参数进行寻优,得到优化后的 AC\_ICPSO\_LSSVM 预报模型。利用验证数据集对新模型的预报效果进行检验。比较结果见表 3。其中,4 个指标分别是平均绝对误差 (MAE)、平均相对误差 (MRE)、均方根误差 (RMSE)、标准差 (STD)。

表 3 预报模型对验证数据集的预报结果

Table 3 Predictive result of proposed models on test data set

Model	MAE	MRE/%	RMSE	STD
LSSVM	0.0820	3.12	0.1255	0.1108
PSO_LSSVM	0.0590	2.24	0.1041	0.0943
AC_ICPSO_LSSVM	0.0518	1.97	0.0938	0.0913

由表 3 可以看出,经过群智算法优化后的 LSSVM 预报模型对验证数据集的预报误差要明显小于初始 LSSVM 模型,而 PSO 算法优化的模型预报结果介于中间。平均绝对误差由初始 LSSVM 预报模型的 0.0820 降为 0.0518,降低了 32.6%;平均相对误差由 3.12% 降为 1.97%,降低了 36.9%;均方根误差由 0.1255 降到 0.0938,降低了 25.3%;标准差由 0.1108 降到 0.0913,降低了 17.6%。

为了进一步验证模型的推广性,表 4 给出了优化前后的 LSSVM 预报模型对推广数据集的预报结果。从 4 个指标量同样可以看出,优化后的模型比初始模型得到的预报结果更加接近真实值,而且群智优化算法 AC\_ICPSO 比纯 PSO 算法优化效果要好。平均绝对误差由初始 LSSVM 预报模型的 0.0828 降为 0.0411,降低了 50.4%;平均相对误差由 3.45% 降为 1.72%,降低了 50.1%;均方根误差由 0.1054 降到 0.0545,降低了 48.3%;标准差由 0.1087 降到 0.0560,降低了 48.5%。

表 4 模型对推广数据集的预报结果

Table 4 Result of proposed models on generation data set

Model	MAE	MRE/%	RMSE	STD
LSSVM	0.0828	3.45	0.1054	0.1087
PSO_LSSVM	0.0574	2.40	0.0746	0.0773
AC_ICPSO_LSSVM	0.0411	1.72	0.0545	0.0560

图 2 给出了优化前后 LSSVM 模型对验证数据和推广数据的预报结果。可以看到经过优化后的 LSSVM 模型跟踪性能得到明显改善,更加接近真

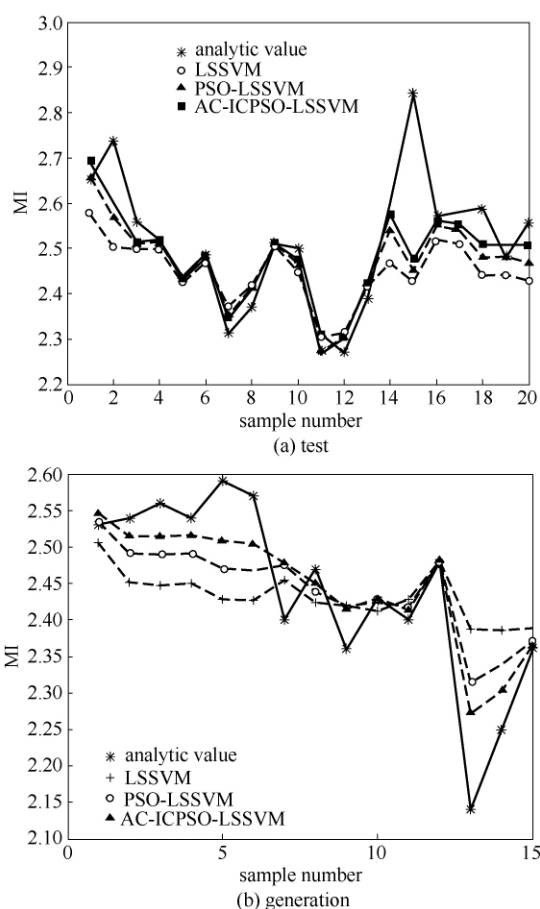


图 2 模型对验证数据和推广数据的预报结果

Fig. 2 Predictive result of proposed models on test data set and generation data set

实值。AC\_ICPSO 算法通过生成免疫粒子和基于粒子适应度的概率选择等过程,保持了粒子的多样性,更好地避免了 PSO 算法易陷于局部最优的问题。图 2 也证明了 AC\_ICPSO\_LSSVM 模型比 PSO\_LSSVM 算法的优化效果更佳,预报值更加接近真实值。从推广数据图 2(b) 来看,AC\_ICPSO\_LSSVM 模型的泛化能力更好。

### 3 结 论

为克服 PSO 算法的易陷于局部最优的缺陷,本文利用免疫系统的免疫信息处理机制,结合 ACO、GA 的优势,提出群智能粒子群算法 (AC\_ICPSO)。比较优化前后的 LSSVM 模型,说明了 AC\_ICPSO 优化算法提高了模型的预报精度和泛化能力。工业生产实例研究表明,AC\_ICPSO\_LSSVM 方法建立的聚丙烯熔融指数预报模型具有有效性和可靠性,对于聚丙烯生产的实际工业控制具有重要意义。

## References

- [1] Bafna S S, Beall A M. A design of experiments study on the factors affecting variability in the melt index measurement [J]. *J. Appl. Polym. Sci.*, 1997, **65** (2): 277-288
- [2] Cao Jin (曹劲), Wang Guizeng (王桂增), Xu Bowen (徐博文). Prediction of polypropylene melt index based on robust and adaptive RBF networks [J]. *Control and Decision* (控制与决策), 1999, **14** (4): 339-343
- [3] Li Chunfu (李春富), Wang Guizeng (王桂增), Xu Bowen (徐博文). Soft measurement of polypropylene MFR [J]. *Control and Instruments in Chemical Industry* (化工自动化及仪表), 2002, **29** (5): 22-25
- [4] Kong Wei (孔薇), Yang Jie (杨杰). Prediction of polypropylene melt index based on RBF neural networks [J]. *Journal of Chemical Industry and Engineering (China)*(化工学报), 2003, **54** (8): 1160-1163
- [5] Han In-Su, Han Chonghun, Chung Chang-Bock. Melt index modeling with support vector machines, partial least squares, and artificial neural networks [J]. *Journal of Applied Polymer Science*, 2005, **95** (4): 967-974
- [6] Shi Jian, Liu Xinggao, Sun Youxian. Melt index prediction by neural networks based on independent component analysis and multi-scale analysis [J]. *Neurocomputing*, 2006, **70** (1/2/3): 280-287
- [7] Shi J, Liu X G. Melt index prediction by neural soft-sensor based on multi-scale analysis and principal component analysis [J]. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 2005, **13** (6): 849-852
- [8] Shi J, Liu X G. Melt index prediction by weighted least squares support vector machines [J]. *Journal of Applied Polymer Science*, 2006, **101** (1): 285-289
- [9] Zhang J, Jin Q B, Xu Y M. Inferential estimation of polymer melt index using sequentially trained bootstrap aggregated neural networks [J]. *Chemical Engineering and Technology*, 2006, **29** (4): 442-448
- [10] Vapnik V N. The Nature of Statistical Learning Theory [M]. New York: Springer Verlag, 1995
- [11] Suykens J A K, Vandewale J. Least squares support vector machine classifiers [J]. *Neural Processing Letters*, 1999, **9** (3): 293-300
- [12] Dorigo M, Maniezzo V, Colorni A. Ant system: optimization by a colony of cooperating [J]. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics*, 1996, **26** (2): 29-41
- [13] Niknam T, Mojarad H D, Meymand H Z. A novel hybrid particle swarm optimization for economic dispatch with valve-point loading effects [J]. *Energy Conversion and Management*, 2011, **52** (4): 1800-1809
- [14] Afshinmanesh F, Marandi A, Rahimi-Kian A. A novel binary particle swarm optimization method using artificial immune system//Proceedings of Control and Intelligent Processing Center of Excellence [C]. Tehran, Iran: IEEE, 2005: 217-220
- [15] Ari S, Hembram K, Saha G. Detection of cardiac abnormality from PCG signal using LMS based least square SVM classifier [J]. *Expert Systems with Applications*, 2010, **37** (12): 8019-8026