

文章编号: 0258-0926(2018)06-0156-05; doi:10.13832/j.jnpe.2018.06.0156

蚁群优化最小二乘支持向量机 在测量数据拟合中的应用

蒋波涛¹, Hines J. Wesley², 赵福宇³

1. 西安工程大学电子信息学院, 西安, 710048; 2. 田纳西大学核工系, 诺克斯维尔, 田纳西, 37996;
3. 西安交通大学核科学与技术学院, 西安, 710049

摘要: 针对传统数据拟合方法存在依赖用户经验, 需预先确定估计拟合函数等缺点, 提出一种基于蚁群优化最小二乘支持向量回归机 (ACO-LSSVR) 的数据拟合方法。该方法采用蚁群优化 (ACO) 对最小二乘支持向量回归机 (LSSVR) 的参数进行优化, 获取最优参数, 从而建立数据拟合模型。将该方法与传统回归拟合方法用于核工程的 2 个测量数据拟合实例中, 得到堆芯功率曲线和熔融液滴在冷却剂中运动特性曲线, 将 2 条曲线的拟合结果进行了比较。结果表明, ACO-LSSVR 具有较高的拟合精度且无需对数据分段确定拟合函数。

关键词: 数据拟合; 核工程; 蚁群优化 (ACO); 最小二乘支持向量回归机 (LSSVR)

中图分类号: TL48 **文献标志码:** A

Application of Ant Colony Optimization Least Squares Support Vector Machine in Measurement Data Fitting

Jiang Botao¹, Hines J. Wesley², Zhao Fuyu³

1. School of Electronics and Information, Xi'an Polytechnic University, Xi'an, 710048, China;
2. Department of Nuclear Engineering, University of Tennessee, Knoxville, 37996, USA;
3. School of Nuclear Science and Technology, Xi'an Jiaotong University, Xi'an, 710049, China

Abstract: Aiming at the disadvantages of traditional data fitting methods, such as relying on the user's experience and needing to predetermine the estimated fitting function, a data fitting method based on Ant colony least squares support vector regression (ACO-LSSVR) is proposed. The method uses ant colony optimization (ACO) to optimize the parameters of least squares support vector regression machine (LSSVR) and obtain the optimal parameters to establish a data fitting model. This method is used to fit the measured data of nuclear engineering with the traditional regression fitting method. The core power curve and the melt droplet movement characteristic curve in coolant are obtained. The fitting results of the two curves are compared. Results show that ACO-LSSVR has high fitting accuracy and does not need to determine the fitting function of data segments.

Key words: Data fitting, Nuclear engineering, Ant colony (ACO), Least squares support vector regression (LSSVR)

0 引 言

传统的数据拟合方法需要依赖经验预先获取

样本数据变量间的关系, 然后再设定合适的模型
拟合这种关系。回归拟合是最常用的一种传统拟

收稿日期: 2018-06-30; 修回日期: 2018-10-08

基金项目: 国家自然科学基金青年项目 (11705135); 中国国家留学基金资助项目 (201508610045); 陕西省教育厅专项科研计划项目 (15JK1297); 西安工程大学博士科研启动基金项目 (BS1339)

作者简介: 蒋波涛 (1982—), 男, 讲师, 博士研究生, 主要从事核电厂状态监测及故障诊断方面的研究

合方法,主要有线性和非线性回归 2 类,其中线性回归包括多元线性回归和单自变量线性回归,而非线性回归包括对数回归、指数模型、幂指数模型、双曲线模型、Logistic 模型。然而,在实际核工程领域,预先给定的函数模型往往不能准确地反映样本数据变量之间的关系,而智能技术的快速发展为数据拟合提供了一种新途径。最小二乘支持向量回归机 (LSSVR) 作为一种先进的智能方法具有目标函数简单、参数个数少等优点。因此,本文提出了 1 种蚁群优化最小二乘支持向量回归机 (ACO-LSSVR) 数据拟合方法。为了验证该方法的有效性,将拟合结果与实验样本数据进行了对比,并与传统回归拟合方法进行了比较。

1 ACO-LSSVR

1.1 LSSVR

LSSVR 是^[1-2]是支持向量回归机 (SVR) 算法的一种变型,也是将低维空间的输入映射到高维空间中,并在高维空间中构建线性回归函数 $f(x)$ 为:

$$f(x) = \mathbf{w}^T \varphi(x) + b \quad (1)$$

式中, \mathbf{w} 为权值向量; $\varphi(x)$ 为非线性映射函数; b 为偏置向量。LSSVR 与 SVR 的区别在于 LSSVR 具有与 SVR 不同的目标函数和约束条件, LSSVR 的目标函数和约束条件分别如式 (2) 和式 (3) 所示:

$$\min_{\mathbf{w}, b, \xi} J(\mathbf{w}, \xi) = \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2 + \frac{1}{2} \gamma \sum_{i=1}^l \xi_i^2 \quad (2)$$

$$y_i = \mathbf{w}^T \varphi(x_i) + b + \xi_i, \quad i=1, 2, \dots, l \quad (3)$$

式中, J 为惩罚函数,由二次误差累加项和 1 个调节项构成; x_i 为第 i 个输入变量; y_i 为第 i 个输出变量; γ 为惩罚参数; l 为样本数据个数; ξ 为松弛变量; ξ_i 为第 i 个松弛变量。

对式 (2) 和式 (3) 引入拉格朗日函数和库恩塔克条件 (KKT), 并对相关参数求偏导, 最终转化为对偶问题求解, 因此式 (1) 可表示为:

$$f(x) = \sum_{i=1}^l \alpha_i K(x_i, x) + b \quad (4)$$

式中, α_i 为拉格朗日因子; $K(x_i, x)$ 被称为满足 Mercer's 条件的核函数。

1.2 核函数选择

式 (4) 中关于核函数 $K(x_i, x)$ 的选择决定了特征空间的结构和模型最终性能。实际上, $K(x_i, x)$ 可表示为:

$$K(x_i, x) = \varphi(x_i) \cdot \varphi(x) \quad (5)$$

一般情况下, 在数据拟合应用中, 输入输出都直接存在高度的非线性关系, 因此选取径向基函数 (RBF) 作为 LSSVR 的 $K(x_i, x)$, 其表达式为:

$$K(x_i, x) = \exp\left(-\frac{\|x_i - x\|^2}{2\sigma^2}\right) \quad (6)$$

式中, σ 为核函数的宽度参数。

1.3 ACO 优化 LSSVR 参数

建立 LSSVR 拟合模型, 首先需要确定 LSSVR 的最优参数。本文通过 ACO 算法迭代搜索最优的目标函数 F 值, 以获得最优参数组合 (γ, σ) , F 为:

$$F = \min(\gamma, \sigma) = \frac{1}{l} \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i) \quad (7)$$

约束条件为:

$$\begin{cases} \gamma \in [\gamma_{\min}, \gamma_{\max}] \\ \sigma \in [\sigma_{\min}, \sigma_{\max}] \end{cases}$$

式中, y_i 和 \hat{y}_i 分别为第 i 个样本的实际值和拟合值; N 为样本的个数; γ_{\min} 为惩罚参数最小值; γ_{\max} 为惩罚参数最大值; σ_{\min} 为核函数的宽度参数最小值; σ_{\max} 为核函数的宽度参数最大值。

ACO 算法^[3]是一种模拟蚂蚁搜寻食物的进化算法。其用于优化 LSSVR 参数的主要过程为:

(1) 参数初始化。设蚁群规模为 m , 最大循环次数为 t_{\max} , 在 $\gamma \in [\gamma_{\min}, \gamma_{\max}]$ 和 $\sigma \in [\sigma_{\min}, \sigma_{\max}]$ 的范围内计算第 i 个蚂蚁的初始信息素浓度 $\tau_e(t)$ 为:

$$\tau_e(t) = \exp[-F(X_i)] \quad (8)$$

式中, X_i 为第 i 个蚂蚁的初始位置向量; $\tau_e(t)$ 为信息素浓度; $F(X_i)$ 为适应度; t 为时间计数器。

(2) 蚂蚁路径转移规则。设初始时刻 $t=0$, m 只蚂蚁位于起始点, 第 k 只蚂蚁的概率转移规则移动表达式为:

$$P_{e,i}^k(t) = \frac{[\tau_e(t)]^\alpha [\eta_e]^\beta}{\sum_{e \in i^+(t)} [\tau_e(t)]^\alpha [\eta_e]^\beta} \quad (9)$$

式中, $P_{e,i}^k(t)$ 为转移概率; η_e 为蚂蚁选择该路径的期望, 又称路径的可见度或启发函数, $\eta_e = 1/F(X)$; α 为启发因子, 反映信息函数重要程度; β 为期望启发因子, 反映启发函数的重要程度; $e \in i^+(t)$ 为随机非零值集合。

(3) 信息素更新规则。当所有蚂蚁完成一次搜索后, 根据每只蚂蚁所选择的参数进行计算训练后的输出误差, 并记录当前所选参数中的最优解, 路径上的信息素将按式 (10) 更新:

$$\tau_e(t+1) = \rho \tau_e(t) + \sum_{k=1}^m \Delta \tau_e^k(t+1) \quad (10)$$

式中, $\Delta \tau_e^k(t+1)$ 为在 $(t+1)$ 次循环时的信息素增量, 当第 k 只蚂蚁 $(t+1)$ 次循环中在边界 e 上时, $\Delta \tau_e^k(t+1) = Q/F(X_i)$, 否则为 0; Q 为信息素强度; $F(X_i)$ 为第 k 只蚂蚁的目标函数值, 由式 (6) 确定; ρ 是信息素挥发系数, $\rho \in [0, 1]$ 。

(4) 终止规则。重复步骤 (2) 和 (3) 直到所有蚂蚁都收敛于 1 条路径或达到最初设定的循环条件, 算法结束, 输出最优路径对应的 γ 和 σ 。

2 ACO-LSSVR 数据拟合模型

2.1 数据归一化处理

不同评价标准往往会产生不同的量级和单位, 进而会影响到数据分析的结果。为了能够解决数据指标直接的量级影响和其不可比性问题, 需要对原始数据进行归一化处理, 表达式为:

$$x_i' = \frac{x_i - x_{\min}}{x_{\max} - x_{\min}} \quad (11)$$

式中, x_i' 为某一输入变量归一化后的数值; x_i 为输入变量原始数据; x_{\max} 和 x_{\min} 分别为 x_i 中的最大值和最小值。最后, 对得到的拟合结果进行反归一化处理, 得到具有量纲单位的拟合值。

2.2 评价指标

为了使算法的拟合结果更具说服力, 采用传统回归拟合方法作为对比模型进行比较, 选用误差均方根 (E_{RMSE}) 和相关系数 (R^2) 作为模型

性能评价指标, E_{RMSE} 和 R^2 的计算公式分别为:

$$E_{\text{RMSE}} = \sqrt{\frac{1}{l} \sum_{i=1}^l (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (12)$$

$$R^2 = \frac{\left(l \cdot \sum_{i=1}^l \hat{y}_i y_i - \sum_{i=1}^l \hat{y}_i \sum_{i=1}^l y_i \right)^2}{\left[l \sum_{i=1}^l \hat{y}_i^2 - \left(\sum_{i=1}^l \hat{y}_i \right)^2 \right] \left[l \sum_{i=1}^l y_i^2 - \left(\sum_{i=1}^l y_i \right)^2 \right]} \quad (13)$$

2.3 数据拟合流程

基于 ACO-LSSVR 的数据拟合及参数优化流程如图 1 所示。

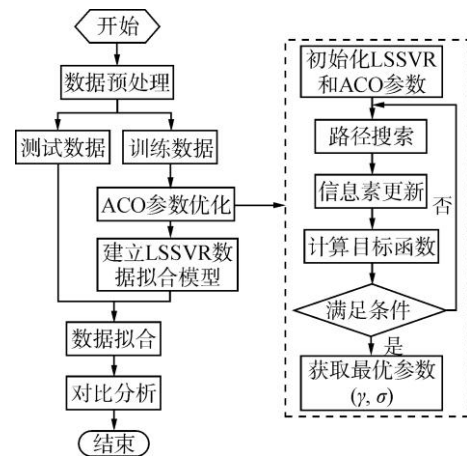


图 1 数据拟合及参数优化流程图

Fig. 1 Flowchart of Data Fitting and Parameters Optimization

3 数据拟合应用实例

3.1 数据来源

本文通过 2 个应用实例来验证 ACO-LSSVR 的数据拟合性能。实例 1 是关于堆芯功率分布曲线拟合的应用; 实例 2 是关于熔融液滴在冷却剂中的运动特性曲线拟合的应用。

实例 1 中的数据来自于秦山核电厂二期的三维堆芯功率分布数据^[4]。该堆芯有 121 组燃料组件, 其中有 38 根测管通道, 每个测管要沿轴向上进行 46 个测点的测量。测量数据的获取步骤为: ①从堆芯内部的探测器探测出数据; ②数据采集系统对探测到的数据进行数据处理、转化、计算后得到 $11 \times 11 \times 46$ 的堆芯功率分布数据; ③再采

用覆盖区平均值法将其转化为 $11 \times 11 \times 16$ 的功率三维分布数据。实例 1 中所使用的数据来自于 D3 测管。 $11 \times 11 \times 46$ 的堆芯功率分布数据作为训练集对 ACO-LSSVR 模型进行训练, $11 \times 11 \times 16$ 的数据作为测试集对其进行测试。ACO 的初始参数分别为: $m=30$ 、 $t_{\max}=100$ 、 $\rho=0.82$ 、 $\alpha=1.2$ 、 $\beta=4.6$ 、 $Q=113$, 不同蚁群数量和迭代组合下的优化结果见表 1。由表 1 可知, 当 $m=15$ 、 $t_{\max}=60$ 时, E_{RMSE} 值的误差最小, 因此对应的最优参数为: $\gamma=7.34$ 、 $\sigma=0.36$ 。

表 1 不同组合下的参数优化结果 (实例 1)

Table 1 Parameters Optimization Results under Different Combinations (First Example)

m	t_{\max}	$E_{\text{RMSE}}/\%$	γ	σ
1	1	1.846	6.78	0.83
5	20	1.658	9.76	0.76
10	40	1.584	5.36	0.53
15	60	1.265	7.34	0.36
20	80	1.283	6.98	0.57
25	100	1.276	6.77	0.61
30	120	1.304	7.12	0.58

实例 2 中的数据来自于熔融液滴在冷却剂中运动特性的实验数据^[5]。该实验分析了不同温度 ($T_d=143.5$ 、239、334、428℃) 下的熔融液滴在同一温度 ($T_w=80^\circ\text{C}$) 的冷却剂中的运动特性曲线。以 $T_d=143.5$ 、239、334℃ 的实验数据作为训练集对 ACO-LSSVR 模型进行训练, 并以 $T_d=428^\circ\text{C}$ 的实验数据作为测试集对其进行测试。ACO 的初始参数分别为: $m=20$ 、 $t_{\max}=100$ 、 $\rho=0.61$ 、 $\alpha=0.8$ 、 $\beta=3.1$ 、 $Q=71$, 不同蚁群数量和迭代组合下的优化结果见表 2。由表 2 可知, 当 $m=8$ 、 $t_{\max}=40$ 时, E_{RMSE} 值具有最小误差。因此得到的最优参数为: $\gamma=13.36$ 、 $\sigma=2.23$ 。

3.2 结果与分析

实例 1 和实例 2 中 ACO-LSSVR 数据拟合法

表 2 不同组合下的参数优化结果 (实例 2)

Table 2 Parameters Optimization Results under Different Combinations (Second Example)

m	t_{\max}	$E_{\text{RMSE}}/\%$	γ	σ
1	1	2.346	18.78	4.83
4	20	2.058	16.76	3.96
8	40	1.921	13.36	2.23
12	60	2.165	13.74	3.46
16	80	1.948	12.98	3.17
20	100	2.097	13.17	3.15

及传统回归拟合方法与实际样本点的对比结果分别如图 2 和图 3 所示, 相应的评价指标对比分析结果分别如表 3 和表 4 所示。

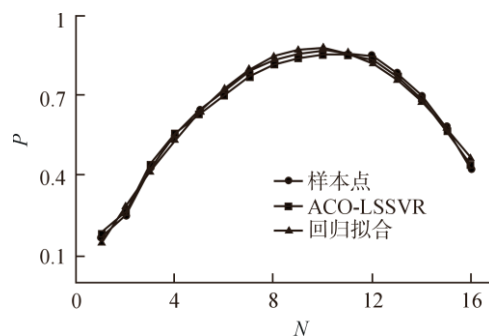


图 2 拟合结果 (实例 1)

Fig. 2 Fitting Results (First Example)

P —相对功率输出值; N —轴向节块位置点个数

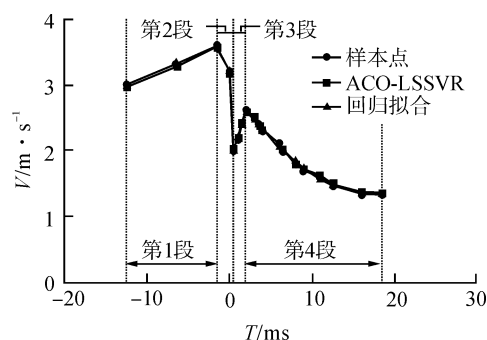


图 3 拟合结果 (实例 2)

Fig. 3 Fitting Results (Second Example)

T —时间, 时间为负值时表示液滴进入冷却剂液面之前的时间;
 V —速度

表 3 拟合结果精度分析 (实例 1)

Table 3 Precision Analysis of Fitting Results (First Example)

方法	回归拟合	ACO-LSSVR
表达式	$P=-0.8803\cos(0.055N+1.653)$	—
$E_{\text{RMSE}}/\%$	2.41	1.33
相关系数 $R^2/\%$	98.73	99.84

从图 2 和图 3 可以看出, ACO-LSSVR 拟合法和回归拟合法都能较好地拟合自变量和因变量的非线性关系, 所得的拟合曲线与样本曲线也较为吻合, 曲线趋势也基本一致。从表 3 可以看出, 回归拟合法需要依赖经验设定余弦函数作为拟合模型进行拟合, 而 ACO-LSSVR 无需人为设定模型且具有较高的 R^2 值和较低的 E_{RMSE} 值。从表 4 可以看出, 回归拟合法无法根据经验对整体下落曲线设定某种函数模型。为了得到较高的拟合结

表 4 拟合结果精度分析 (实例 2)

Table 4 Precision Analysis of Fitting Results (Second Example)

方法	回归拟合				ACO-LSSVR
	第 1 段	第 2 段	第 3 段	第 4 段	全段
表达式	$V=0.054T+3.67$	$V=-1.07T^2-1.87T+3.2$	$V=0.4T+1.8$	$V=-3.6\times 10^{-5}T^3+0.004T^2-0.18T+2.96$	—
$E_{RMSE}/\%$	1.28	2.04×10^{-4}	2.71×10^{-4}	0.86	2.54
$R^2/\%$	99.73	100	100	99.57	99.93

果, 回归拟合需要先对样本数据进行分段, 然后再设定每段合适的函数模型。因此, 在某些段上回归拟合方法相比较于 ACO-LSSVR 具有较高的 R^2 值 (第 2 段和第 3 段) 和较小的 E_{RMSE} (第 1 段和第 4 段)。此外, 回归拟合法还具有一定的不确定性, 如图 3 第 2 段, 存在线性模型和二次多项式模型均可作为拟合函数的可能性, 这就给整段样本点的拟合带来不确定性。而 ACO-LSSVR 拟合法不需要对数据先分段再设定函数模型, 却仍具有较高的拟合精度。由以上分析可以看出, 相比较于回归拟合法, ACO-LSSVR 拟合法在数据拟合应用中不需要人为预先设定拟合函数模型, 完全从数据内部出发, 用少量带有信息的数据 (支持向量) 来描述整段样本点, 充分体现了在数据拟合方面的优势。

4 结 论

针对传统回归拟合方法所存在的缺点, 提出了一种基于 ACO-LSSVR 的数据拟合法, 采用 ACO 优化 LSSVR 参数提高了其泛化能力并降低

了拟合误差。用 2 个应用实例对模型进行了可靠性验证, 并与传统回归拟合方法进行了比较。结果表明, 模型的拟合结果与样本值较接近, 具有较高的拟合精度; 另外, 由于 ACO-LSSVR 拟合法无需人为预先分段设立函数模型, 完全从数据内部关系出发而获取有价值的信息。因此, 该模型可作为数据拟合的一种替代方法应用于核工程的其他领域中。

参考文献:

- [1] Suykens J A K, Vandewalle J. Least squares support vector machine classifiers[J]. Neural processing letters, 1999, 9(3): 293-300.
- [2] Suykens J A K, Van Gestel T, De Brabanter J. Least squares support vector machines[M]. World Scientific, 2002, 81-102.
- [3] Dorigo M. Optimization, learning and natural algorithms [D]. Italy: Politecnico di Milano, 1992.
- [4] 范岩成. 反应堆堆芯核测量数据在线处理方法研究[D]. 黑龙江: 哈尔滨工程大学, 2005.
- [5] 李良星, 李会雄, 陈听宽. 熔融液滴在冷却剂中的运动特性实验[J]. 核动力工程, 2007, 28(05): 36-41.

(责任编辑: 杨灵芳)