

文章编号: 1671-7848 (2009) 04-0475-03

## 基于 Bootstrap多神经网络的软测量方法

周 长<sup>1</sup>, 张 杰<sup>2</sup>, 吕文祥<sup>1</sup>, 刘先广<sup>3</sup>, 黄德先<sup>1</sup>

(1. 清华大学 自动化系, 北京 100084; 2. 纽卡斯尔大学 化工与先进材料学院, 英国 纽卡斯尔 NE17RU;  
3. 北京清大腾飞公司, 北京 100084)



**摘 要:** 针对原油蒸馏过程常规软测量模型难以适应原油进料性质变化的问题, 提出 Bootstrap多神经网络的非线性软测量处理策略。通过 Bootstrap算法复制出训练集样本空间上的多个样本子空间, 训练出多神经网络模型, 避免了单个神经网络易于陷入局部最优及过度训练的弱点, 具有较高的准确率和泛化能力。本处理策略用于建立常压塔一线干点的软测量模型, 仿真结果表明模型预测准确率和鲁棒性较好, 对原油性质变化具有较好的适应性。该方法将会改进实际蒸馏过程在进料性质变化情况下的产品质量指标的软测量精度。

**关 键 词:** 原油蒸馏; 软测量; Bootstrap; 多神经网络

**中图分类号:** TP 183 **文献标识码:** A

## Soft-sensor Based on Bootstrap Aggregated Neural Network

ZHOU Chang<sup>1</sup>, ZHANG Jie<sup>2</sup>, LV Wen-xiang<sup>1</sup>, LIU Xian-guang<sup>3</sup>, HUANG De-xian<sup>1</sup>

(1. Department of Automation, Tsinghua University, Beijing 100084, China;

2. School of Chemical Engineering and Advanced Materials, Newcastle University, Newcastle upon Tyne NE1 7RU, UK;

3. Beijing Techfly Company, Beijing 100084, China)

**Abstract:** A nonlinear soft-sensing strategy with bootstrap aggregated neural network is proposed to solve the poor adaptability of conventional soft-sensor methods when feedstock varies in crude oil distillation. A bootstrap aggregated neural network shows better accuracy and generalization capability than a single neural network which can be trapped in a local minimum or over-fitted the training data. The proposed strategy is used for developing a soft-sensor for the end point of kerosene product of a simulated atmospheric tower. The simulation results show that the bootstrap aggregated neural network soft-sensor possesses high predictive accuracy and robustness and the proposed soft-sensor gives good performance even under severe feedstock variations. It is helpful to improve the soft-sensor precision of product quality index when feedstock varies in crude oil distillation.

**Key words:** crude oil distillation; soft-sensor; Bootstrap; multiple neural network

### 1 引 言

原油蒸馏过程是生产非常重要的分馏过程, 它将原油根据沸点高低分离成各种符合一定质量指标的石油产品。目前获得产品质量指标实时数据的一个有效的办法是软测量估计方法<sup>[1]</sup>, 但一般的软测量只在进料性质变化比较小的情况下可以得到较好的效果, 对于进料切换或掺炼频繁发生的情况下, 难以达到工程需要的精度要求。本文提出了一种基于 Bootstrap多神经网络的常压塔非线性软测量模型建立方法, 通过 Bootstrap方法复制多份训练样本集用于训练多神经网络, 多个神经网络的输出组合起来作为预测结果。通过常压塔一线航煤干点软测量

应用, 对所提出的方法进行验证和评价, 并和 BP单神经网络方案以及基于偏最小二乘的线性建模方案进行了比较。

本文通过流程模拟软件模拟原油变化的常减压分馏生产过程, 为研究改进原料成份变化时软测量方法改进提供客观、方便的仿真实验环境。

### 2 流程模拟

文献[2]通过流程模拟软件 Hysys搭建了一个虚拟的常减压装置, 比较真实地模拟了常减压装置原油变化对软测量泛化能力的影响和进行了软测量方法的改进。

通过 HYSYS流程模拟软件模拟 3种原油作为

收稿日期: 2009-03-16; 收修定稿日期: 2009-04-18

基金项目: 国家 863 高技术研究计划基金资助项目 (2007AA04Z193; 2006AA04Z168)

作者简介: 周 长 (1983-), 男, 江苏盐城人, 研究生, 主要研究方向为流程工业过程的建模与软测量等; 黄德先 (1958-), 男, 教授, 博士生导师。

常减压装置的不同性质原油进料, 以下根据原油的轻重称为轻油、常油和重油。通过 3 个流量控制回路来分别控制这 3 种原油的进料流量。

下面以常油为例来说明常减压生产装置的模拟实现过程。

首先在进行流程模拟时, 需要通过打开常油进料的阀门并设定常油进料的流量, 同时关闭另外 2 种原油进料的阀门。通过调节相关的控制器和阀门以使得各侧线产品质量满足一定的指标, 并且达到期望的稳态工作点。为了得到常油稳态软测量的样本数据, 每隔一个小时调节一次操纵变量, 并在基本稳定时采集过程数据样本。

实验中一共选取了 6 个这样的操纵变量, 包括原油进料流量设定值、常压塔进料温度设定值、塔顶冷回流流量设定值、一线抽出流量设定值、二线抽出流量设定值、常一中流量设定值。每个操纵变量共有 3 种设定值, 6 个操纵变量可以定出 36 个稳态, 加上初始状态, 共计产生 730 个稳态样本。

本文用同样的方法生成另外 2 种原油进料的稳态样本, 这样共得到了 730 × 3 个样本。

从流程模拟获得的数据是稳态且无噪声干扰的, 为了更好地模拟实际情况, 在模拟的过程数据中加入测量噪声。流量测量数据加入零均值、方差为 30 kg/h 的高斯白噪声; 温度测量数据加入零均值、方差为 0.3 的高斯白噪声; 压力测量数据加入零均值、方差为 0.3 kPa 的高斯白噪声。

最后将每种原油对应的样本集分为训练样本集和测试样本集, 其中训练样本个数为 1 095, 测试样本个数为 1 095, 各占 50 %, 分别用于软测量建模和验证。

由于原油性质的变化对常压塔模型的工作点影响较大, 生产过程非线性严重。如果采用线性建模方法如 PLS 等进行软测量建模拟合精度较低, 需要考虑非线性建模方案。

### 3 Bootstrap 多神经网络

目前用样本数据进行非线性软测量建模的方法大都采用神经网络模型, 大量文献提出各种方法来选择最优的或次优的网络结构, 或最适宜的训练参数来获得更好的模型预测精度。理论上说, 若对网络的规模不加限制且有充足的训练数据, 基于神经网络的建模总能得到一个令人满意的拟合精度<sup>[3]</sup>。然而神经网络由于容易陷入局部最优和过拟合, 模型的鲁棒性较差, 单个神经网络模型的质量或者适应性很大程度上决定于其用于训练模型的训练数据的数量和分布。

提高神经网络模型准确率的一个改进方法是组合多个神经网络模型, 每个神经网络在整体训练数

据集上的子集上训练得到。如熊智华等<sup>[4]</sup>将样本数据经 Kmeans 聚类方法分成多组训练数据, 每组数据建立一个单神经网络模型, 再通过 PCR 方法连接起来得到整个模型的输出, 从而显著地提高模型的精确度和鲁棒性。类似的工作还有很多<sup>[3, 5, 6]</sup>。尽管构造一个完美的神经网络模型是比较困难的, 神经网络的鲁棒性和可靠性却可以通过组合多个不是很完美的神经网络显著地提高<sup>[7-8]</sup>。

Brieman 通过 Bootstrap 复制训练集数据的方法构造多模型, 又称 Bagging 算法<sup>[9]</sup>。Bootstrap 每次复制后的样本数量与原始样本集样本数量相同, 每个样本从原始样本集的样本里随机选取。每次复制后的样本集用于训练单个模型, 这样重复多次就可以得到在原始样本集子空间上训练出来的多个模型。张杰等将 Bootstrap 多神经网络方法用于解决分类判决和回归建模问题, 表明了该方法具有良好准确性和泛化能力<sup>[5-6]</sup>。

多神经网络拓扑图, 如图 1 来所示。

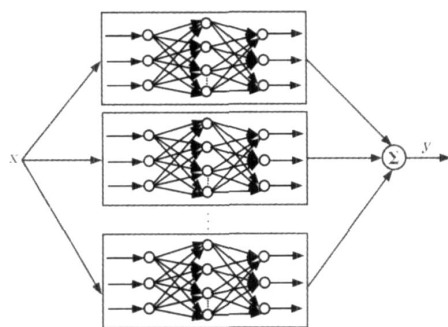


图 1 Bootstrap 多神经网络拓扑图

Fig. 1 Bootstrap aggregated neural network topology

多神经网络的输出值是单个神经网络的加权值, 表述如下:

$$f(X) = \sum_{i=1}^n w_i f_i(X) \quad (1)$$

式中,  $f(x)$  是多神经网络模型;  $f_i(X)$  指的是第  $i$  个神经网络模型;  $w_i$  是第  $i$  个神经网络输出的加权系数;  $X$  是神经网络的输入变量;  $n$  代表单个神经网络的个数。

加权系数可以通过许多方法给出。最简单的方法是给单个神经网络取相同的权系数。Perrone 和 Cooper 提出可以将训练和测试集上性能较好的一半神经网络组合起来的方法<sup>[10]</sup>, 在回归问题中这种性能的表现通常指累积误差平方和。

可用于组合多神经网络的方法有很多, 本文主要考虑了 4 种组合方案, 加上要对比的单神经网络方案, 共 5 种方案, 如下。

单个神经网络输出。所有 20 个神经网络输出取中值作为总输出。训练误差较低的 10 个神经网络输出取中值作为总输出。所有 20 个神经网络

络输出求平均作为总输出。 训练误差较低的 10 个网络输出求平均作为总输出。

4 仿真实例分析

干点是航空煤油的一个重要的质量指标。影响航空煤油干点的因素很多，包括原油性质、侧线温度和流量、中段回流取热等。

在分析了该化工过程机理的基础上，选取了 13 个过程变量及二次变量作为辅助变量，包括一线温度、一线抽出比率、塔顶冷回流比率、塔顶温度、常一中取热比率等。流量换算成对应进料流量的比率可以增强模型对由于进料流量变化导致的装置负荷干扰影响的鲁棒性<sup>[11]</sup>。

方案 的单神经网络及方案 ~ 的多神经网络中的每个单神经网络都是通过带有早期停止的 Levenberg-Marquardt 优化算法训练得到。权系数和偏置值通过较小的随机数初始化，每个神经网络都是单隐层前向神经网络，隐层和输出层的神经元的激活函数分别为 Sigmoid 和 Purelin 函数。为了方便处理不同幅度的输入输出数据，需要归一化样本集。

用于每个神经网络建模的样本集需要被分为训练数据、交叉检验数据和测试数据。为方便计，每个神经网络取相同的结构。隐层神经元数目通过交叉检验方法得到，测试误差最低的神经网络被认为是最好的网络结构。最终在本实验中选用 13-10-1 的前向神经网络，用 Bootstrap 复制 20 个训练样本集训练出 20 个这样的单神经网络。

为了考察该方法建立的软测量模型的预测准确度和可信度。训练过程中通过给单神经网络赋不同初始权值和阈值的方法，重复了 20 次实验（即建立了 20 个这样的多神经网络）。

上述 5 种方案运行了 20 次各建立的 20 个软测量模型在测试集上的均方根误差，如图 2 所示。

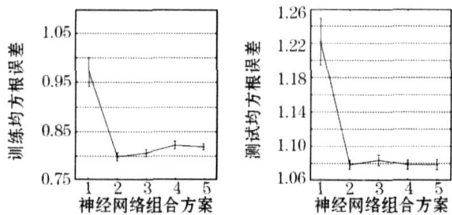


图 2 运行 20 次软测量模型测试误差  
Fig. 2 Predictive RMSE of soft-sensors in 20 run

可以看出，方案 即单神经网络建立的软测量模型性能明显弱于多神经网络的 种方案，在第 8，14 次运行中该模型预测误差较大。

由此可见，多神经网络建立的软测量模型鲁棒性要优于单个网络。

5 种方案模型的训练和测试平均误差及 95 %

置信区间，如图 3 所示。

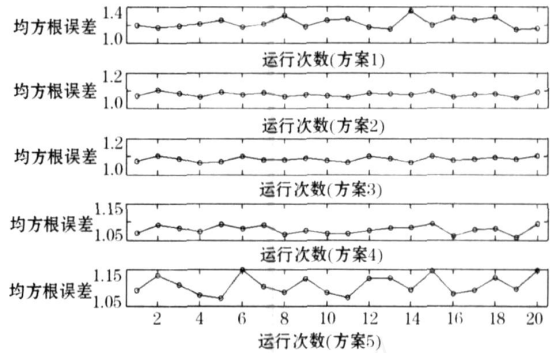


图 3 平均均方根误差及 95 % 置信区间

Fig. 3 Mean RMSE with 95 % confidence intervals

在平均误差上后 4 种多神经网络方案要比第一种单神经网络方案低 0.2 左右。在平均误差的 95 % 置信区间上的表现后 4 种多神经网络方案远较第一种单神经网络方案优秀，多神经网络预测误差的置信区间宽度不仅远小于单神经网络，且前者置信区间的上界都要远低于后者的下界。这表明无论在平均误差还是置信区间上，Bootstrap 多神经网络软测量方案的表现较单神经网络方案要好很多，具有出色的鲁棒性。

3 种软测量方案用于预报航煤干点的测试均方根误差 (RMSE), 见表 1。

表 1 三种软测量模型测试均方根误差

Table 1 Testing RMSE for 3 soft-sensors

Model	PLS	BP	Bootstrap-BP
RMSE	1.79	1.22	1.07

每个模型的训练集都相同，训练集的样本数为 1 095。建立好的 3 个模型在相同的测试集上进行测试，测试样本个数也为 1 095。

第 1 种方案采用偏最小二乘 (PLS) 的线性软测量方案，建模过程中隐变量个数通过交叉检验方式确定为 10 个 (输入变量为 13 个)，最终在测试集上计算测试均方根误差为 1.79。

第 2 和第 3 种方案为上述 BP 单神经网络及多神经网络方案，由图 3 可知多神经网络的 4 种方案性能差别不太大，这里可选用组合方案 4，即采用输出求平均方案。这 2 种方案通过运行 20 次得到的测试均方根误差的平均值分别为 1.22 和 1.07。

由表 1 可知，针对该进料性质变化的原油蒸馏过程进行软测量建模，采用 BP 非线性方法的软测量模型预测精度要比线性方法 PLS 高出近 0.6，性能提高了 32 %。

而采用了 Bootstrap 多神经网络的软测量模型更进一步提高了模型精度，并且由前面的分析可知，Bootstrap 多神经网络平均误差置信区间小，模型的鲁棒性要好很多。

(下转第 506 页)

表 3 计算结果

Table 3 computing results

合同 路径	方法	炼钢 负荷 率 / %	连铸 负荷 率 %	热轧 负荷 率 / %	平均 负荷 率 %	目标 函数值
1	本文	62.1	67.2	96.5	59.4	20 426
	人工	55.0	54.7	90.0	53.2	38 045
2	本文	66.3	69.4	98.3	62.6	18 402
	人工	61.6	64.9	93.0	58.4	36 960
3	本文	66.4	70.5	98.7	63.1	16 630
	人工	60.1	65.0	95.0	58.7	35 736

由表 3 可以看出, 本文方法编制结果明显优于人工方法编制结果; 从 3 条不同生产路径条件下采用本文方法编制的合同计划来看, 生产路径 1 条件下编制的合同计划的平均负荷率最低且函数目标值最大, 而生产路径 3 条件下编制的合同计划工序平均负荷率最高且函数目标值最小。其中, 平均负荷率比生产路径 1 提高了 3.7%, 目标函数值比生产路径 1 减小了 18.6%, 显然确定生产路径 3 为 2 000 块合同板坯最终选择的生产路径最为合理。

## 7 结 语

在钢铁企业 MTO 管理模式下, 分析了质量设计与合同计划间的关系。在生产路径具有柔性条件下, 提出了一种考虑生产路径柔性的合同计划编制的新方法, 建立了以设备能力均衡利用为主要目标的合同计划编制模型, 并设计了求解模型的改进变邻域搜索算法。仿真实验表明, 合同生产路径的确定直接影响合同计划编制结果, 本文方法可编制高效合同计划, 对钢铁生产实际有重要的指导意义。

(上接第 477 页)

## 5 结 语

本文主要介绍基于 Bootstrap 多神经网络的进料性质变化的原油蒸馏过程非线性软测量建模。单神经网络 BP 软测量模型预报性能总体上要优于 PLS 方法, 但由于过拟合和局部最优的缺点其预测模型稳定性较差。而 Bootstrap 多神经网络方法通过在子空间上学习多个模型来消除了单个神经网络的缺陷, 取得了不错的预报效果。该方法将会改进实际蒸馏过程在进料性质变化情况下的产品质量指标的软测量精度。

## 参考文献 (References):

[1] 李海青, 黄志尧. 软测量技术原理及应用 [M]. 北京: 化学工业出版社, 2000. (Li Haiqing, Huang Zhiyao. Soft-sensor technique and its application [M]. Beijing: Publishing House of Chemical Industry, 2000.)

[2] 陆辽琼, 黄德先, 金以慧. 虚拟蒸馏装置及软测量方法研究 [J]. 控制工程, 2003, 10 (4): 312-314. (Lu Liaoqiong, Huang Dexian, Jin Yihui. Research of virtual crude unit construction and soft measurement [J]. Control Engineering of China, 2003, 10 (4): 312-314.)

## 参考文献 (References):

[1] Redwin C N, Wisner D A. A mixed integer programming model for scheduling orders in a steel mill [J]. J. of optimization Theory and applications, 1974, 14 (3): 305-318.

[2] 张涛, 王梦光, 唐立新. 钢厂合同计划的模型与算法 [J]. 控制理论与应用, 2000, 17 (5): 711-715. (Zhang Tao, Wang Mengguang, Tang Lixin. The model and algorithm for the order planning of the steel plant [J]. Control Theory and Application, 2000, 17 (5): 711-715.)

[3] Liu S X, Tang J F, Song J H. Order planning model and algorithm for manufacturing steel sheets [J]. Production Economics, 2006, 100 (1): 30-43.

[4] Tang L X, Liu G L. A mathematical programming model and solution for scheduling production orders in Shanghai Baoshan Iron and steel complex [J]. Operational Research, 2007, 182 (3): 1453-1468.

[5] 刘士新, 宋健海, 王梦光. 钢铁企业按订单生产模式下合同池优化 [J]. 控制理论与应用, 2005, 22 (4): 653-656. (Liu Shixin, Song Jianhai, Wang Mengguang. Order pool optimization for made-to-order production in steel plant [J]. Control Theory and Application, 2005, 22 (4): 653-656.)

[6] 周山长. 钢铁企业 MES 若干优化问题的研究 [D]. 沈阳: 东北大学, 2005. (Zhou Shanchang. Study of some optimization problems of manufacturing execution system in iron-steel enterprise [D]. Shenyang: Northeastern University, 2005.)

[7] 徐端, 舒真, 冯水华. 钢铁企业质量管理体系研究与开发 [J]. 控制工程, 2005, 12 (6): 557-561. (Xu Duan, Shu Zhen, Feng Shuihua. Design of quality management system for iron and steel enterprise [J]. Control and Engineering of China, 2005, 12 (6): 557-561.)

[8] Hansen P, Mladenovic N. Variable neighborhood search [J]. Computers in Operations Research, 1997, 24 (11): 1097-1100.

[9] 李青, 宁树实, 莫宝民. 用进化变邻域搜索算法求解闭环供应链选址问题 [J]. 辽宁工程技术大学学报, 2007, 26 (6): 922-925. (Li Qing, Ning Shushi, Mo Baomin. Application of evolutionary variable neighborhood search algorithm to location-allocation problem in close-loop supply chain [J]. Journal of Liaoning Technical University, 2007, 26 (6): 922-925.)

[10] Fleszar K, Osman L H, Hindi K S. A variable neighbourhood search algorithm for the open vehicle routing problem [J]. Operational Research, 2009, 195 (3): 803-809.

[3] 仲蔚, 俞金寿. 基于模糊 C 均值聚类的多模型软测量建模 [J]. 华东理工大学学报, 2000, 26 (1): 83-87. (Zhong Wei, Yu Jinshou. Study on soft sensing modeling via FCM based multiple models [J]. Journal of East China University of Science and Technology, 2000, 26 (1): 83-87.)

[4] 熊智华, 王雄, 徐用懋. 一种利用多神经网络结构建立非线性软测量模型的方法 [J]. 控制与决策, 2000, 15 (2): 173-176. (Xiong Zhihua, Wang Xiong, Xu Yongmao. Nonlinear soft-sensor modeling using multiple neural network [J]. Control Decision, 2000, 15 (2): 173-176.)

[5] Ahmad Z, Zhang J. Selective combination of multiple neural networks for improving model prediction in nonlinear systems modeling through forward selection and backward elimination [J]. Neurocomputing, 2009, 72 (4-6): 1198-1204.

[6] Zhang J. Developing robust non-linear models through bootstrap aggregated neural networks [J]. Neurocomputing, 1999, 25 (1-3): 93-113.

[7] Jacobs R A, Jordan M I, et al. Adaptive mixtures of local experts [J]. Neural Computation, 1991, 3 (1): 79-87.

[8] Jordan M I, Jacobs R A. Hierarchical mixtures of experts and the EM algorithm [J]. Neural Computation, 1994, 6 (2): 181-214.

[9] Brieman L. Bagging predictors [J]. Mach Learn, 1996, 24 (2): 123-140.

[10] Perrone M P, Cooper L N. When networks disagree: ensemble methods for hybrid neural networks [C]. Chapman & Hall, London: Artificial Neural Networks for Speech and Vision, 1993.

[11] 吕文祥, 黄德先, 金以慧. 常压蒸馏产品质量软测量改进方法及应用 [J]. 控制工程, 2004, 11 (4): 296-298. (Lu Wenxiang, Huang Dexian, Jin Yihui. Improved soft-sensor method and its applications to crude unit product quality [J]. Control Engineering of China, 2004, 11 (4): 296-298.)