

文章编号: 1000-8152(2006)05-0744-05

自适应变异差分进化算法估计软测量参数

颜学峰, 余娟, 钱锋

(华东理工大学 自动化研究所, 上海 200237)

摘要: 提出一种自适应变异差分进化算法 (ADE), 能根据搜索进展情况自适应地确定变异率, 使算法在初期保持个体的多样性, 避免早熟; 在后期逐步降低变异率, 保留优良信息, 避免最优解遭到破坏, 增加搜索到全局最优值的概率。与传统的差分进化算法 (DE) 相比较, ADE 算法的离线性能和在线性能都有较大的改进, 搜索到全局最优解的概率获得较大提高, 对算法参数的敏感性低。本文将 ADE 算法应用于对苯二甲酸中对羧基苯甲醛含量软测量模型的参数估计, 获得了满意的结果。

关键词: 差分进化算法; 自适应; 对苯二甲酸; 对羧基苯甲醛; 参数估计

中图分类号: TP18, TQ 015 文献标识码: A

Adaptive mutation differential evolution algorithm and its application to estimate soft sensor parameters

YAN Xue-feng, YU Juan, QIAN Feng

(Automation Institute, East China University of Science and Technology, Shanghai 200237, China)

Abstract: A novel adaptive mutation differential evolution (ADE) algorithm containing the adaptive mutation operator, in which the mutation probability is determined according to the evolved generations, is proposed in this paper. The adaptive mutation operator makes the individuals diversity in the population at the initial generations to overcome the premature, and reduces the mutation probability gradually during the evolutionary process to preserve the excellent individuals and enhance the probability of obtained the global optimal solution. To compare the performances of ADE with those of the traditional differential evolution (DE), ADE and DE are applied to search the global optimal solution of analytical function. The results demonstrate that both ADE's on-line and off-line performances are superior to those of DE, the probability of obtained the global optimal solution is larger than that of DE, and that the parameter sensitivity degree of ADE is lower than that of DE. Furthermore, ADE is applied to estimate the model parameters of 4-carboxybenzaldehyde (4-CBA) soft sensor, and satisfactory results are obtained.

Key words: differential evolution; adaptive; terephthalic acid; 4-carboxybenzaldehyde; estimate parameter

1 引言(Introduction)

遗传算法 (genetic algorithm, GA) 是在20世纪70年代初期由美国密执根大学的Holland教授发展起来的, 主要借用生物进化中“适者生存”的规则^[1]。GA在求解问题时是从多个解组成集合开始的, 然后通过一定的法则进行逐步迭代以产生新的解的集合。这个解的集合称为群体 $P(t)$, t 表示迭代步, 称为进化代数。一般 $P(t)$ 中的元素个数在整个进化过程中是不变的, 将此称为群体的规模, 记为 N_p ; $P(t)$ 中的元素称为个体或染色体, 记为 $x_1^t, x_2^t, \dots, x_{N_p}^t$ 。算法的主要步骤有: 优化问题的解的编码, 适应函数的

构造和应用, 种群选取, 染色体的杂交和变异等。差分进化算法^[2] (differential evolution, DE) 是以遗传算法作为基本的框架, 针对实数编码^[3~6]的遗传个体设计了差分操作, 并利用该操作实现了遗传算法中的杂交和变异; 主要算法参数有: 杂交参数和变异率。DE 算法的优点是速度快、鲁棒性好、在实数域上搜索能力强, 算法在许多经典的优化问题上试验后取得了较好的结果, 因此在提出后迅速引起了国内外学者的广泛关注。

DE 算法的搜索性能与其变异操作密切相关。变异率太大, DE 算法在寻优过程中最优解易遭到破坏,

算法搜索效率低下, 求得全局最优解的概率低; 变异率太小, 搜索过程中种群的多样性降低, 易陷入局部最优解出现早熟收敛现象. 因此DE算法在具体实施过程中很容易出现“早熟”或求解时间太长. 为此, 提出自适应变异差分进化算法 (adaptive mutation DE, ADE), ADE算法采用自适应变异算子, 能根据算法的搜索进展情况, 自适应地确定变异率, 在算法初期保持种群多样性避免早熟, 随着算法进展逐步降低变异率使种群中的优秀个体免遭破坏, 增加了搜索到全局最优解的概率.

2 自适应变异差分进化算法(Adaptive mutation differential evolution algorithm)

2.1 差分进化算法(Differential evolution algorithm)

在DE算法中, 每个优化参数当作一个位基因直接处理, 设优化参数为 x_1, x_2, \dots, x_n 共 n 个, 则在DE算法中个体或染色体可以用 n 维矢量 $\mathbf{x} = [x_1 \ x_2 \ \dots \ x_n]$ 表示. 设 $\mathbf{x}_i^G (i = 1, \dots, N_p)$ 是第 G 代的 N_p 个个体, 这些个体组成了第 G 代的种群 $P(G)$.

设优化问题表述为

$$\begin{aligned} & \min f(x_1, x_2, \dots, x_n) \\ & a_i \leq x_i \leq b_i, \quad i = 1, 2, \dots, n. \end{aligned} \quad (1)$$

其中 $a_i, b_i, i = 1, 2, \dots, n$ 是 x_i 的上下限, $\{(a_i, b_i), i = 1, 2, \dots, n\}$ 构成了 n 维优化参数定义空间 S_0 .

DE算法的基本步骤如下:

步骤1 初始化操作: 用 n 维优化参数定义空间 S_0 中随机数初始化种群 $\mathbf{x}_i^0 (i = 1, \dots, N_p)$, 确定变异率 F , 确定杂交参数 C_R , 确定最大进化代数 epochs, 令 $G = 0$.

步骤2 对第 G 代的个体 $\mathbf{x}_i^G (i = 1, 2, \dots, N_p)$, 执行3到5步的操作来生成第 $G + 1$ 代的个体.

步骤3 变异操作: 在该操作中将根据如下公式生成变异个体 $\hat{\mathbf{x}}_i^{G+1}$:

$$\hat{\mathbf{x}}_i^{G+1} = \mathbf{x}_p^G + F(\mathbf{x}_j^G - \mathbf{x}_k^G). \quad (2)$$

其中: j, k, p 是 1 到 N_p 中随机选取的相异整数, 变异率 F 是一个实数, 用来控制对差分量 $(\mathbf{x}_j^G - \mathbf{x}_k^G)$ 进行放大和缩小控制. 需要说明的是, \mathbf{x}_p^G 是从第 G 代中随机选择的个体, 用来生成 $\hat{\mathbf{x}}_i^{G+1}$, 而 $\hat{\mathbf{x}}_i^{G+1}$ 与 \mathbf{x}_i^G 没有任何关系.

步骤4 杂交操作: 该操作的目的是为了增大新种群的离散程度. 其实现过程如下, 将在步

骤3中生成的 $\hat{\mathbf{x}}_i^{G+1} = [\hat{x}_1, \hat{x}_2, \dots, \hat{x}_n]_i^{G+1}$ 和当前的个体 $\mathbf{x}_i^G = [x_1, x_2, \dots, x_n]_i^G$ 进行二项分布杂交生成杂交个体 $\bar{\mathbf{x}}_i^{G+1}$, 即

$$\bar{\mathbf{x}}_i^{G+1} = \begin{cases} \mathbf{x}_{ki}^G, & P_c > C_R, \\ \hat{\mathbf{x}}_i^{G+1}, & \text{其他}, \end{cases} \quad k = 1, \dots, n. \quad (3)$$

其中: $C_R \in [0, 1]$ 为杂交参数, P_c 是 $[0, 1]$ 之间的随机数.

步骤5 竞争操作: 将步骤4中生成的 $\bar{\mathbf{x}}_i^{G+1}$ 与 \mathbf{x}_i^G 进行竞争, 当 $\bar{\mathbf{x}}_i^{G+1}$ 对应的目标函数值优于 \mathbf{x}_i^G 目标函数值, 即 $f(\bar{\mathbf{x}}_i^{G+1}) \leq f(\mathbf{x}_i^G)$ 时, $\bar{\mathbf{x}}_i^{G+1}$ 将代替 \mathbf{x}_i^G ; 否则 \mathbf{x}_i^G 将保留到下一代:

$$\mathbf{x}_i^{G+1} = \begin{cases} \bar{\mathbf{x}}_i^{G+1}, & f(\bar{\mathbf{x}}_i^{G+1}) \leq f(\mathbf{x}_i^G), \\ \mathbf{x}_i^G, & \text{其他}, \end{cases} \quad (4)$$

步骤6 $G = G + 1$.

步骤7 重复步骤2到7直到求得最优解或 $G >$ epochs.

2.2 自适应变异算子(Adaptive mutation operator)

DE算法在搜索过程中变异率 F 一般选取一个0到2之间的固定实数, 用来控制对差分量 $(\mathbf{x}_j^G - \mathbf{x}_k^G)$ 进行放大和缩小控制. 算法在具体实施过程中存在变异率 F 难以确定的缺点, 变异率太大, DE算法近似随机搜索, 算法搜索效率低下, 求得全局最优解的精度低; 变异率太小, 种群的多样性降低, 易出现“早熟”现象. 为此, 提出自适应变异算子, 能根据算法的搜索进展情况, 自适应地确定变异率, 使算法在初期有较大的变异率保持个体的多样性, 避免早熟; 在后期逐步降低变异率, 保留优良信息, 避免最优解遭到破坏, 增加了搜索到全局最优解的概率.

自适应变异算子设计如下:

$$F = F_0 * 2^{(1 - \frac{\text{epochs}}{\text{epochs} + 1 - G})}, \quad (5)$$

其中: F_0 是变异参数, epochs 是最大进化代数, G 是当前进化代数. 自适应变异算子在算法开始变异率为 $F = 2F_0$, 具有较大的变异率, 从而保持个体的多样性; 随着算法进展变异率逐步降低, 到了算法后期变异率接近 F_0 , 从而避免最优解遭到破坏.

在ADE算法中, 变异率 F 由自适应变异算子 (即公式(5)) 确定.

2.3 自适应变异差分进化算法整体性能分析(Performance of adaptive mutation differential evolution algorithm)

为了检验和说明ADE在求解全局最优问题的性

能及其优越性, 分别采用ADE和DE对以下典型的数学优化问题进行寻优:

$$\min_{\mathbf{x}} S(\mathbf{x}) = \frac{1}{10} \sum_{i=1}^{10} (x_i^4 - 16x_i^2 + 5x_i), \\ -10 < x_i < 100, i = 1, 2, \dots, 10. \quad (6)$$

优化问题的目标函数在10维可行域内有 $2^{10} - 1$ 个局部最优解, 1个全局最优解, 全局最优解为 $x_i = -2.9035, i = 1, 2, \dots, 10$, 最优目标函数值为-78.3323.

2.3.1 算法参数敏感程度分析(Parameter sensitivity degree analysis)

对两种算法设置相同的操作参数, 包括相同的初始群体, 群体规模为 $N_p = 100$, 杂交参数为 $C_R = 0.9$, 变异率 F (或变异参数 F_0)依次分别取值为0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0, 1.2, 1.4, 1.6, 1.8, 2.0, 最大进化代数为1000. 变异率 F (或变异参数 F_0)每取一个值, 分别对10种随机产生的不同的初始群体, 对等地执行这两种算法. 然后分析ADE算法和DE算法在10次寻优过程中求得的最优解次数, 结果如图1所示.

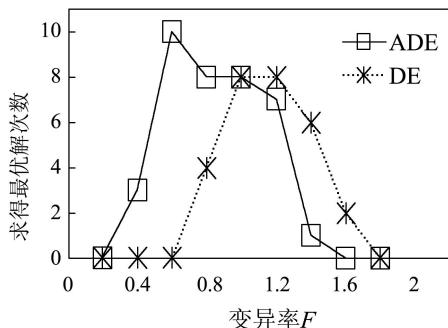


图1 ADE算法和DE算法求得最优解次数比较

Fig. 1 Obtained best value times of ADE versus DE

图中横坐标表示变异率 F (或变异参数 F_0), 纵坐标表示求得最优解次数; 图中方形表示ADE算法在不同变异参数 F_0 下求得最优解次数, 星形表示DE算法在不同变异率 F 下求得最优解次数. 从图中可以看出, ADE算法在 $F_0 = 0.6$ 时达到最佳的寻优效果, 10次都求得最优解, 求得最优解的比率为100%; DE算法在 $F = 1$ 和1.2时达到最佳的寻优效果, 8次求得最优解, 求得最优解的比率为80%, ADE算法求得全局最优解的概率高于DE算法; 并且在仿真实验中DE算法在 $F = 1.2$ 时, 求得的最优解的精度高于 $F = 1$. 同时, 从图1中还可以看出, ADE算法在 $F_0 = 0.6 \sim 1.2$ 之间都有较好的寻优性能; DE算法仅在 $F = 1 \sim 1.2$ 之间有较好的寻优性能, ADE算法对变异率参数的敏感程度明显低于DE算法.

2.3.2 寻优性能分析(Searching performance analysis)

将算法的离线性能 $v^{\text{off-line}}$ 和在线性能 $v^{\text{on-line}}$ 分别定义为

$$v^{\text{off-line}} = \frac{1}{t_a} \sum_{t=1}^{t_a} v^*(t), \quad (7)$$

$$v^{\text{on-line}} = \frac{1}{N_p} \sum_{i=1}^{N_p} v_i. \quad (8)$$

其中: t_a 为当前的进化代数, $v^*(t)$ 为进化至第 t 代后所求得的最优目标函数值; N_p 为群体规模, v_i 为当前这一代群体中第 i 个个体的目标函数值. 离线性能 $v^{\text{off-line}}$ 反映了算法搜索最优函数值的演变过程, 而在线性能 $v^{\text{on-line}}$ 则反映了一代种群的总体性能.

分别求得在2.3.1节中ADE和DE算法在各自最佳操作参数下(即ADE算法变异参数 $F_0 = 0.6$, DE算法变异率 $F = 1.2$)10次寻优的离线性能和在线性能的平均值. 它们随着进化代数的变化情况如图2、图3所示. 从图中可以看出ADE算法的在线性能与离线性能均显著地优于DE算法, 这表明ADE算法使群体的平均适应度和最优适应度都有较大的提高.

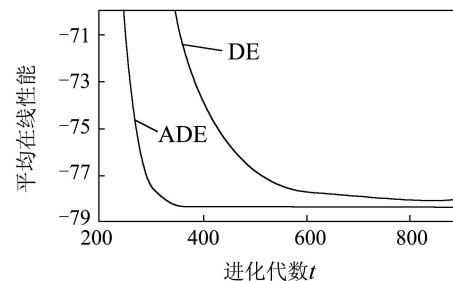


图2 ADE算法与DE算法平均在线性能比较曲线

Fig. 2 Mean on-line performance of ADE versus DE

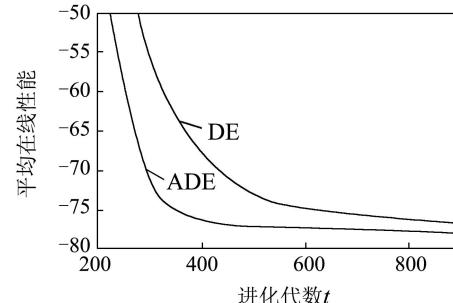


图3 ADE算法与DE算法平均离线性能比较曲线

Fig. 3 Mean off-line performance of ADE versus DE

3 4-CBA软测量模型参数估计(Estimate 4-CBA soft sensor parameters)

精对苯二甲酸(pure terephthalic acid, PTA)是合成聚酯纤维和塑料的重要原料, 主要用来合成聚酯的中间体苯二甲酸乙二醇酯(PET)^[7,8].

PTA的生产工艺大部分采用AMOCO化学公司专利技术,该专利技术由两部分组成:氧化和精制。图4是AMOCO工艺氧化单元对二甲苯(*p*-xylene, PX)液相催化氧化反应过程流程图,即PX首先在氧化反应器中进行一次氧化,接着反应器的出料进入第一结晶器进行二次氧化生成对苯二甲酸,其中对羧基苯甲醛(4-carboxybenzaldehyde, 4-CBA)是反应的一个重要中间产物,它能与氧化单元产品粗对苯二甲酸(crude TA, CTA)共结晶而随CTA产品析出。由于4-CBA会影响PTA向PET转化时链的增长,其在精制单元中被加氢还原成对甲基苯甲酸(*p*-toluic acid, PT酸)而基本除去。由于精制单元加氢能力有限,因此CTA中4-CBA含量必须严格控制,4-CBA含量是CTA产品重要质量指标。

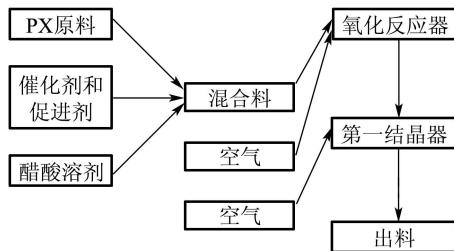


图4 PX氧化反应过程流程框图

Fig. 4 Flow chart of PX oxidation

3.1 4-CBA软测量模型(4-CBA soft sensor)

在生产过程中4-CBA含量是无法实时测量,只能人工取样分析。由于人工分析值不可避免存在延迟,这为实时、有效地控制CTA产品的4-CBA含量带来困难。Amoco专家通过对氧化反应生产过程进行分析发现,在保证进料中对二甲苯浓度和第一结晶器尾氧浓度不变的情况下(实际的生产过程也是如此),CTA产品中4-CBA含量 $m_{4\text{-CBA}}$ (%,质量百分比)是氧化反应器进料流量 F_m (kg/h)和第一结晶器空气流量 F_{air} (NM³/h)的函数,并有

$$m'_{4\text{-CBA}} = a \times \frac{\left(\frac{F_{\text{air}}}{b}\right)^c}{\left(\frac{F_m}{d}\right)^e}. \quad (9)$$

其中: $m'_{4\text{-CBA}}$ 是4-CBA含量软测量模型估算值; a , b , c , d , e 是4-CBA含量软测量模型待估参数,可通过采集不同生产工况下氧化反应器进料流量 F_m ,第一结晶器空气流量 F_{air} ,以及对应的CTA产品中4-CBA含量 $m_{4\text{-CBA}}$,形成样本进行估计。

3.2 模型参数的最优估计(Optimal model parameters)

设样本容量为 l ,第*i*个样本为 F_m^i , F_{air}^i , $m_{4\text{-CBA}}^i$ 。在模型参数已知时,由模型式(9)可计算CTA产

品中4-CBA含量 $m_{4\text{-CBA}}$ 的估算值 $m'_{4\text{-CBA}}$,它与 $m_{4\text{-CBA}}^i$ 的相对误差绝对值为

$$E_i = \left| \frac{m_{4\text{-CBA}}^i - m'_{4\text{-CBA}}}{m_{4\text{-CBA}}^i} \right|, \quad (10)$$

所有样本数据的相对误差平方和均值为

$$E = \frac{1}{l} \times \sum_{i=1}^l E_i^2. \quad (11)$$

估计模型参数的原则就是使式(11)的相对误差平方和均值 E 达到最小,这是优化的目标函数。

应用ADE算法估计式(9)的5个模型参数,样本从实际生产过程中采集,共采集了462组数据,随机挑选其中345组作为样本数据,即 $l = 345$,剩余的117组数据形成校验样本。ADE算法的参数设置为:群体规模 $N_p = 100$,杂交参数为 $C_R = 0.9$,变异参数 $F_0 = 0.6$,最大进化代数epoch=1000,并以式(11)的相对误差平方和均值 E 作为目标函数。求得最优目标函数值为:0.001804,相应的模型参数为: $a=0.15538$, $b=49.9931$, $c=0.6898$, $d=1513.8469$, $e=0.40$,当模型参数确定,4-CBA软测量模型也就确定。

应用4-CBA软测量模型对校验样本进行预测,预测的相对误差平方和均值仅为0.00364。以样本序号为横坐标,以CTA产品中4-CBA含量为纵坐标作图,结果如图5所示,图中虚线表示预测值,实线表示分析值。从图5中可以看出,实线与虚线几乎重叠在一起,即模型良好预测CTA产品中4-CBA含量,通过该软测量模型可以根据生产操作条件实时地预测CTA产品中4-CBA含量,为工艺操作参数的及时地调整,提供指导。

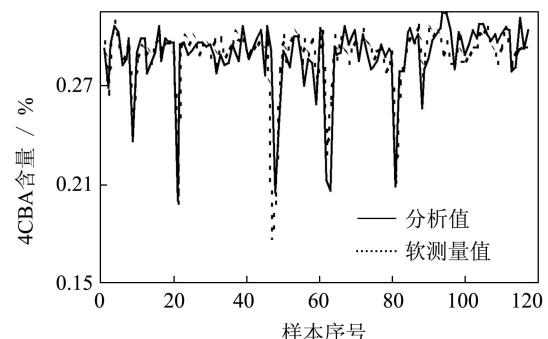


图5 CTA中4-CBA含量预测值与分析值对比

Fig. 5 Predict value of 4-CBA content versus analysis value

4 结论(Conclusion)

自适应变异差分进化算法(ADE)采用自适应变异算子,能根据ADE算法的搜索进展情况,自适

应地确定变异率,使算法在初期有较大的变异率保持个体的多样性,避免早熟;在后期逐步降低变异率,保留优良信息,避免最优解遭到破坏,增加了搜索到全局最优解的概率。通过ADE算法和DE算法对典型数学优化问题寻优分析,ADE算法的离线性能和在线性能都有较大的改进,搜索到全局最优解的概率获得较大提高,对算法参数的敏感性低。应用ADE算法获得4-CBA含量软测量模型参数全局最优估计值,其对应的软测量模型对校验样本的预测误差平方和均值仅为0.00364,模型准确预测CTA产品中4-CBA含量。

参考文献(References):

- [1] HOLLAND J H. *Adaptation in Natural and Artificial Systems*[M]. Michigan: The University of Michigan Press, 1975.
- [2] WANG F S, CHIOU J P. Optimal control and optimal time location problems of differential-algebraic systems by differential evolution[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 1997, 36(1): 5348 – 5357.
- [3] MICHALEWICZ Z, JANIKOW C Z, KRAWCZYK J B. A modified genetic algorithm for optimal control problems[J]. *Computer Math Applications*, 1992, 23(12): 83 – 94.
- [4] WRIGHT A H. *Genetic Algorithms for Real Parameter Optimization. Foundations of Genetic Algorithms*[M]. Rawlins G J E, EDS CA: Morgan Kaufmann, 1991: 205 – 218.
- [5] YAN X F, CHEN D Z, HU S X. Chaos-genetic algorithms for optimizing the operating conditions based on RBF-PLS Model[J]. *Computers and Chemical Engineering*, 2003, 27(12): 1393 – 1404.
- [6] YAN X F, DU W L, QIAN F. Development of a kinetic model for industrial oxidation of p-Xylene by RBF-PLS and CGA[J]. *AIChE Journal*, 2004, 50(6): 1169 – 1176.
- [7] RAGHAVENDRACHAR P, RAMACHANDRAN S. Liquid-phase catalytic oxidation of p-xylene[J]. *Ind Eng Chem Res*, 1992, 31(2): 453 – 462.
- [8] 刘建新,白鹏.对苯二甲酸工艺技术及生产[J].化工科技,2000,8(3): 64 – 67.
(LIU Jianxin, BAI Peng. Technology of terephthalic acid and its production [J]. *Science and Technology Chemical Industry*, 2000, 8(3): 64 – 67.)

作者简介:

- 颜学峰 (1972—),男,副研究员,博士,研究方向为化工系统工程、智能信息处理,E-mail: yan.xuefeng@hotmail.com;
余娟 (1973—),女,助理研究员,研究方向为系统工程;
钱锋 (1961—),男,教授,博士生导师,研究方向为化工系统工程、智能控制。

(上接第743页)

参考文献(References):

- [1] VAPNIK V N. *The Nature of Statistical Learning Theory*[M]. New York: Springer-Verlag, 1995.
- [2] SMOLA A J, SCHOLKOPF B. *A tutorial on support vector regression*[R]. NeuroCOLT2 Technical Report NC2-TR-1998-030. London: Royal Holloway College, University of London, 1998.
- [3] SANCHEZ A D. Advanced support vector machines and kernel methods[J]. *Neurocomputing*, 2003, 55(1): 5 – 20.
- [4] CHAPPELLE O, VAPNIK V, BOUSQUET O, et al. Choosing multiple parameters for support vector machines[J]. *Machine Learning*, 2002, 46(1): 131 – 160.
- [5] CHEN Pengwei, WANG Jungying, LEE Hahnming. Model selection of SVMs using GA approach[C] // *Proc of 2004 IEEE Int Joint Conf on Neural Networks*. Piscataway, NJ: IEEE Press, 2004: 2035 – 2040.
- [6] ZHENG Chunhong, JIAO Licheng. Automatic parameters selection for SVM based on GA[C] // *Proc of the 5th World Congress on Intelligent Control and Automation*. Piscataway, NJ: IEEE Press, 2004: 1869 – 1872.
- [7] KENNEDY J, EBERHART R. Particle swarm optimization[C] // *Proc of IEEE Int Conf on Neural Networks, Perth, Australia*. Piscataway, NJ: IEEE Press, 1995: 1942 – 1948.
- [8] EBERHART R, KENNEY J. A new optimizer using particle swarm theory[C] // *Proc of the Sixth International Symposium on Micro Ma-*
- [9] VANDEN B F, ENGELBRECHT A P. Training product unit networks using cooperative particle swarm optimizers[C] // *Proc of the Third Genetic and Evolutionary Computation Conference (GECCO), San Francisco, USA*. Piscataway, NJ: IEEE Press, 2001: 126 – 132.
- [10] 杨慧中,张素贞,陶振麟.聚丙烯腈质量指标软测量混合模型的应用[J].化工自动化及仪表,2002,29(6): 11 – 13.
(YANG Huizhong, ZHANG Suzheng, TAO Zhenlin. The application of soft measurement hybrid model for the quality performance of polyacrylonitrile[J]. *Control and Instruments in Chemical Industry*, 2002, 29(6): 11 – 13.)
- [11] 邵信光,杨慧中,石晨曦. ε -不敏感支持向量回归在化工数据建模中的应用[J].东南大学学报,2004,34(增刊): 215 – 218.
(SHAO Xinguang, YANG Huizhong, SHI Chenxi. Chemical process data modeling based on ε -insensitive support vector regression[J]. *Journal of Southeast University*, 2004, 34(Suppl): 215 – 218.)

作者简介:

- 邵信光 (1981—),男,主要从事机器学习、支持向量机、智能建模的研究,E-mail: shaoxinguang@yahoo.com.cn;
杨慧中 (1955—),女,教授,博士生导师,主要从事复杂过程建模和优化控制的研究,E-mail: yhz_jn@163.com;
陈刚 (1972—),男,工程师,主要从事过程控制研究。