

RUANCELIANG JISHU YUANLI YU YINGYONG

软测量技术

原理与应用

潘立登 李大字 马俊英 编著



中国电力出版社

www.cepp.com.cn

RUANCELIANG JISHU YUANLI YU YINGYONG

软测量技术

原理与应用

潘立登 李大字 马俊英 编著



中国电力出版社

www.cepp.com.cn

内 容 提 要

本书根据目前软测量技术在控制理论研究和实践中尚未形成系统的理论这一现状而编写。主要内容包括数据处理理论——小波分析,主元分析法,非线性多元回归法,逐步回归法,主元分析,主元回归,部分最小二乘法等主要建模方法以及系统辨识法和机理建模法。此外,本书还采用大量篇幅详细介绍了神经网络的原理及其应用、优化算法在软测量技术中的应用等。

全书语言简洁,实例丰富、实践性强。可供自动化、检测技术、机电装备及计算机应用类本科生、硕士研究生和相关教师使用,也可供从事相关领域的科研人员和工程技术人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

软测量技术原理与应用 / 潘立登, 李大字, 马俊英编著. —北京: 中国电力出版社, 2008
ISBN 978-7-5083-7955-5

I. 软… II. ①潘…②李…③马… III. 技术测量 IV. TG806

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2008) 第 153249 号

责任编辑: 夏华香

责任校对: 崔燕菊

责任印制: 郭华清

书 名: 软测量技术原理与应用

编 著: 潘立登 李大字 马俊英

出版发行: 中国电力出版社

地址: 北京市三里河路 6 号 邮政编码: 100044

电话: (010) 68362602 传真: (010) 68316497

印 刷: 北京市同江印刷厂

开本尺寸: 185mm × 260mm 印 张: 23 字 数: 572 千字

书 号: ISBN 978-7-5083-7955-5

版 次: 2009 年 1 月北京第 1 版

印 次: 2009 年 1 月第 1 次印刷

印 数: 0001—3000 册

定 价: 39.80 元

敬 告 读 者

本书封面贴有防伪标签, 加热后中心图案消失

本书如有印装质量问题, 我社发行部负责退换

版 权 专 有 翻 印 必 究

Preface

前言

工业企业的需求以及控制理论和计算机技术的发展是先进控制技术发展强有力的推动力。先进控制算法,都要求有系统的数学模型,或带有人工智能的性质。这些要求需要系统建模技术。先进控制算法的实施,使过程控制更平稳,有条件实现更严格的卡边条件在线优化控制,从而带来显著的经济效益。而卡边条件的实现,往往需要软测量技术的应用。本书正是在这种需求的背景下,较全面地阐述系统建模方法和软测量技术,其中包括小波分析,主元分析,部分最小二乘,系统辨识技术,以及人工智能理论中的神经网络技术和优化算法等。

软测量技术本质上也是一个建模问题,即通过构造某种数学模型,描述可测量的关键操作变量,被控变量和扰动变量与产品质量之间的函数关系,以过程操作数据为基础,获得产品质量的估计值。

软测量技术发展至今,由于采用的理论工具和所针对的实际对象的不同,因此形成了多种软件测量方法。其中应用最多的是统计回归方法,主要适用于生产工况较为平稳的场所。针对一些复杂的系统,人们又提出了非线性软测量方法,如机理建模,神经元技术,主元分析,部分最小二乘,系统辨识和模式识别等,用这些技术或这些技术的结合来建立质量模型和收率优化模型等软仪表。这些软仪表不仅解决了许多检测难题,而且具有下列优点:一是不像某些成分仪表那样需要精心维护;二是动态响应迅速;三是能够连续地给出指示数。在软测量方法中,辅助变量的类型、数目、测点位置的选择,过程数据的采集与处理等因素都会严重影响软仪表的性能。随着对象特性的变化和工作点的漂移,在使用过程中,还需对软仪表进行校正以适应新的工况。北京化工大学自动化系十多年来已在软测量技术方面积累了很多经验,如建立常压塔装置的脱空度和干点软仪表、聚合过程质量软仪表等。软测量技术虽然已在控制理论研究和实践中取得了广泛的成果,但目前尚未形成系统的理论。《软测量技术原理与应用》这本书就是为了填补这方面的空白,该门课程已经是第8次开课了,每次讲课,内容都有不同程度的充实,这是第7次修改稿。

本书的第2章和第4章由潘立登编写,第1章、第6章和第7章由潘立登和李大字合写,第3章和第5章由潘立登和马俊英合写。一些例题选自研究生论文。全书由潘立登统稿。

本书在编写过程中得到北京化工大学信息科学与技术学院赵恒永教授、朱群雄教授、王建林教授、靳其兵教授、曹柳林教授和相关人员的热情支持、关怀和指导,及对本书提出的宝贵意见。此外,还得到北京化工大学研究生教材建议立项的资助,作者借此表示衷心地感谢。

作 者

2008年10月

Contents

目 录

前 言

第 1 章 软测量技术概述	1
1.1 软测量技术	1
1.1.1 软测量的辅助变量选择	1
1.1.2 软测量的数据选择与处理	2
1.1.3 软测量的模型辨识与验证	2
1.2 建模的目的和基本方法	3
1.2.1 建立数学模型的主要目的	3
1.2.2 建立模型的基本方法	3
1.3 小波分析及其应用	4
1.4 多变量统计建模方法及其在软测量中的应用	5
1.4.1 相关分析和回归分析	5
1.4.2 主元分析法	6
1.4.3 部分最小二乘法	6
1.5 建模与系统辨识	6
1.6 人工神经网络及其应用	7
1.7 优化算法及其在软测量技术中的应用	8
1.8 软测量的实施	9
1.9 软测量的在线校正	9
第 2 章 小波算法用于数据处理	10
2.1 傅里叶变换	10
2.2 小波变换	13
2.2.1 函数空间和广义空间	14
2.2.2 小波变换原理	14
2.2.3 傅里叶变换、加窗傅里叶变换和小波变换的比较	16
2.3 一维连续小波变换	18
2.4 高维连续小波变换	20
2.5 一维离散小波变换	20
2.5.1 离散小波变换	20
2.5.2 二进制小波变换	21
2.6 多分辨分析	22
2.7 一维 Mallat 算法	26

2.8	提升小波变换	27
2.9	几种常用的小波基函数	30
2.10	小波分析在信号处理中的应用	34
2.10.1	仿真信号	34
2.10.2	一维连续小波分析	35
2.10.3	一维离散小波分析	35
2.10.4	用小波分析进行信号的消噪	37
2.10.5	小波滤波的在线实现	43
2.10.6	用小波分析进行信号的奇异性检测	45
2.10.7	用小波分析进行信号的压缩	47
2.10.8	用小波分析进行信号的发展趋势识别	47
2.10.9	用小波分析进行信号的抑制与衰减	48
2.10.10	用小波分析进行某频率区间信号的识别	49
2.10.11	用小波分析进行信号的自相似性检测	50
2.10.12	结论	51
2.10.13	Matlab 程序	51
	思考题与习题	78

第3章 多变量统计建模方法及其在软测量中的应用80

3.1	相关分析	80
3.1.1	相关系数计算公式	81
3.1.2	相关系数 r 的特点	81
3.1.3	判断变量间相关程度的原则	81
3.1.4	线性化方法	81
3.1.5	现场数据的处理结果	82
3.2	多元统计回归分析	83
3.2.1	多元线性回归分析	83
3.2.2	F 检验和 t 检验	84
3.2.3	在非线性系统中的应用	86
3.2.4	多元线性回归方法的原理	86
3.2.5	多元线性回归计算的主要参数	87
3.2.6	多元线性回归方程的检验	87
3.2.7	多元线性回归法的应用示例	88
3.2.8	喷射塔中 SO_2 吸收传质系数的软测量	89
3.2.9	多元线性回归程序说明及源程序	92
3.3	多元逐步回归方法	96
3.3.1	逐步回归法的概念	96
3.3.2	多元逐步回归方法计算步骤	98
3.3.3	逐步回归法存在的问题	100
3.3.4	应用示例	100
3.3.5	逐步回归程序说明及源程序	101
3.4	主元分析法	106
3.4.1	概述	106
3.4.2	主元分析方法	107

3.4.3	NIPALS 方法	108
3.4.4	主元的主要性质	108
3.4.5	主元回归方法	109
3.4.6	主元回归方法程序说明及源程序	110
3.4.7	多尺度主元分析	115
3.4.8	递推主元分析	117
3.4.9	协方差矩阵的递推求解	118
3.4.10	基于秩-1 更新的递推主元分析	120
3.4.11	更新主元个数与控制限	123
3.5	部分最小二乘法	123
3.5.1	概述	123
3.5.2	部分最小二乘回归法原理	124
3.5.3	部分最小二乘回归法的计算方法推导	126
3.5.4	部分最小二乘回归法的计算步骤	129
3.5.5	部分最小二乘回归模型的检验	130
3.5.6	部分最小二乘回归模型的性质	131
3.5.7	部分最小二乘法 PLS 程序说明及源程序	131
3.5.8	正交信号修正的部分最小二乘法	136
3.5.9	应用示例	138
3.5.10	PLS 与 PCR 的比较	139
3.5.11	部分最小二乘递推算法	141
3.6	基于 Chebyshev 多项式的部分最小二乘法	143
3.6.1	Chebyshev 多项式	143
3.6.2	基于 Chebyshev 多项式改进的非线性 PLS 方法	143
3.6.3	基于 Chebyshev 多项式改进的部分最小二乘算法程序说明及源程序	144
3.7	五种建模方法比较	152
	思考题和习题	155

第 4 章 系统辨识及其在软测量技术中的应用 156

4.1	建立数学模型的方法	156
4.1.1	概述	156
4.1.2	辨识建模	157
4.2	最小二乘法	158
4.2.1	模型结构	159
4.2.2	最小二乘格式	161
4.2.3	最小二乘法的解	163
4.3	最小二乘参数估计的递推算法	173
4.4	最小二乘法的遗忘因子法	178
4.4.1	“数据饱和”现象	178
4.4.2	最小二乘遗忘因子法的一次完成算法	179
4.4.3	最小二乘遗忘因子法的递推算法	179
4.5	按模型阶次增加的递推算法	182
4.6	增广最小二乘法	214
4.6.1	增广最小二乘法的一次完成法	215

4.6.2	增广最小二乘法的递推算法	216
4.7	广义最小二乘法	219
4.7.1	广义最小二乘法的一次完成法	220
4.7.2	广义最小二乘法的递推算法	225
4.8	多步最小二乘法	229
4.8.1	估计权序列	230
4.8.2	估计模型的参数	230
4.8.3	噪声模型参数的估计	230
4.9	各种最小二乘法的比较	235
4.10	传递函数模型辨识	236
4.10.1	闭环系统辨识方法	236
4.10.2	NLJ 优化算法	237
4.10.3	MPSEIVI 方法对象模型辨识的求解过程	239
	思考题与习题	242

第 5 章 化学反应器的机理模型 243

5.1	混合理想的釜式反应器	243
5.1.1	一级反应	244
5.1.2	平衡反应	245
5.2	混合理想的级联反应器系列	246
5.3	容量可变、混合理想的等温釜式反应器的动态特性	248
5.4	容量可变、混合理想的等温釜式反应器的调节	249
5.5	处于绝热状态下的固定床催化反应器	251
5.5.1	模型方程	251
5.5.2	静态特性	252
5.5.3	动态特性	253
5.5.4	信息流程图	254
5.5.5	稳定条件	255
5.6	有冷却的混合理想反应器	256
5.7	通过调整冷却水流量控制反应器	257
5.8	实例	259
5.8.1	实例 1: 反应器的温度调节	259
5.8.2	实例 2: 丙烯水合反应器的优化控制	262
5.8.3	实例 3: 聚丙烯腈工序质量指标的软测量技术	265
	思考题与习题	267

第 6 章 人工神经网络理论及其在建模中的应用 268

6.1	人工神经网络	268
6.2	BP 神经网络及其应用	270
6.2.1	BP 网络结构	270
6.2.2	BP 算法	271
6.2.3	BP 算法的软件实现	273
6.2.4	BP 算法的性能和问题	273
6.2.5	BP 网络的应用	274

6.2.6	例子	274
6.3	RBF 神经网络及其应用	275
6.3.1	RBF 网络结构及工作过程	275
6.3.2	RBF 网络的学习方法	277
6.3.3	RBF 网络的算法	282
6.3.4	用 RBF 神经网络建立系统模型	285
6.3.5	RBF 网络的编程实现	287
6.3.6	用 RBF 网络建立油品黏度和闪点的软仪表模型	287
6.3.7	乙醛氧化制醋酸氧化塔收率软仪表的 RBF 模型	290
6.3.8	用多神经网络提高软测量性能	292
6.4	用 PCA-RBFN 建立可侦破故障的反应器自校正模型	294
6.4.1	概述	294
6.4.2	PCA-RBFN 自校正模型	294
6.4.3	用 PCA-ANN 建立可侦破故障的反应器自校正模型	296
6.4.4	结论	297
6.5	B 样条神经网络	297
6.5.1	B 样条函数的构成及其性质	297
6.5.2	B 样条神经网络	299
6.5.3	B 样条网络的性质	300
6.5.4	B 样条网络的训练	300
6.5.5	建立聚合反应分子量分布静态模型	300
6.7	用支持向量机构建软仪表	305
6.7.1	概述	305
6.7.2	最小二乘支持向量机算法	306
6.7.3	床层温度拟定态模型	307
	思考题与习题	309

第 7 章 优化算法及其在软测量技术中的应用 310

7.1	概述	310
7.1.1	遗传算法	310
7.1.2	粒子群算法	311
7.1.3	蚁群算法	311
7.1.4	群智能的特点和优点	312
7.2	遗传算法	312
7.2.1	基本遗传算法	312
7.2.2	自适应遗传算法	314
7.2.3	实数编码遗传算法与优化分布交叉操作	318
7.2.4	遗传算法用于模型优化	324
7.3	粒子群优化算法	327
7.3.1	PSO 算法基本原理	327
7.3.2	PSO 算法的改进	329
7.3.3	PSO 算法的发展	330
7.3.4	离散三群粒子群优化算法	332
7.3.5	工业现场的软测量应用	334

7.4 蚁群算法的基本原理	337
7.4.1 蚁群算法概述	337
7.4.2 蚁群算法的基本原理	339
7.4.3 蚁群算法基本模型的改进技术	342
7.4.4 蚁群算法在连续优化问题中的应用	344
7.4.5 蚁群算法在重油热裂解模型参数估计中的应用	346
7.4.6 尚需深入研究的问题	346
思考题与习题	347
附录 A F 分布值表	348
附录 B t 分布表	349
参考文献	350

软测量技术概述

随着我国经济体制的转变及加入 WTO 后,国内的众多过程工业企业日益感受到国际间竞争所带来的压力和挑战。在这种大的背景下,积极开发和应用先进控制和实时优化以提高企业经济效益,进而增强自身的竞争力是过程工业迎接挑战的重要对策。

现代控制理论和人工智能几十年来的发展已为先进控制奠定了应用理论基础,而控制计算机尤其是集散控制系统(DCS)的普及与提高,则为先进控制的应用提供了强有力的硬件和软件平台。先进控制涉及到较多领域,例如现代控制理论,建模技术,软测量技术,系统辨识技术,数据预处理技术以及人工智能理论等。这本教材对系统模型化与软测量技术的内容做一些基本介绍,其中包括系统辨识技术、数据预处理技术以及人工智能理论中的神经网络技术等。

工业企业的需求以及控制理论和计算机技术的发展是先进控制发展强有力的推动。先进控制是对那些不同于常规单回路控制,并具有比常规 PID 控制更好的控制效果的控制策略的统称,而非专指某种计算机控制算法。通常这种算法,都要求有系统的数学模型,或带有人工智能的性质。这些要求需要系统建模技术。先进控制的实施,使过程控制更平稳,有条件实现更严格的卡边条件在线优化控制,从而带来显著的经济效益。而卡边条件的实现,往往需要软测量技术的应用。本书正是在这种需求的背景下,较全面地阐述系统建模方法和软测量技术。

1.1 软测量技术

在过程控制中,一些需要控制的过程变量,如聚合物溶液的黏度、聚合物平均分子量、精馏塔的塔顶和塔底产品的某些组分、发酵过程的转化率及许多涉及产品质量的变量,在现有的技术条件下难以直接测量或不易快速在线测量,只能通过控制其他可测变量,间接地保证质量要求。

软测量技术本质上也是一个建模问题,即通过构造某种数学模型,描述可测量的关键操作变量,被控变量和扰动变量与产品质量之间的函数关系,以过程操作数据为基础,获得产品质量的估计值。软测量辨识过程的基本方块图如图 1-1 所示。

1.1.1 软测量的辅助变量选择

软测量的目的是利用所有易于获取的可测信息,通过计

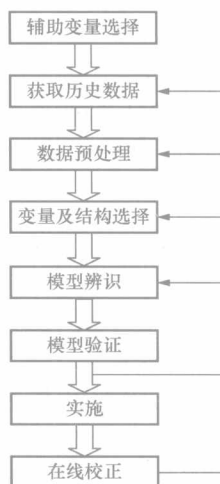


图 1-1 软测量辨识基本过程方块图

算来实现对被测变量的估计。其中可利用的信息包括：可测控制输入，可测干扰输入，可测主导变量和可测辅助变量。在软测量方法中，辅助变量的类型、数目、测点位置的选择，过程数据的采集与处理等因素都会严重影响软仪表的性能。

辅助变量的选择分为数量、类型和检测点位置的选择。变量数量的选择和过程的自由度、测量噪声和模型的不确定性等有关。其下限值为被估计主导变量的个数。变量类型的选择有如下原则。

- (1) 灵敏性：对过程输出或不可测扰动能快速反应。
- (2) 过程适用性：工程上易于获取并具有一定的测量精度。
- (3) 特异性：对过程输出或不可测扰动之外的干扰不敏感。
- (4) 准确性：能够满足精度要求。
- (5) 鲁棒性：对模型误差不敏感。

由于原始辅助变量数目、类型很多，为方便起见，可根据以上原则，进行适当的降维处理，以减少变量个数。可采用奇异值分解或工业控制仿真软件等方法进行检测点的选取，在使用软测量技术时，检测位置对模型的动态特性有一定影响。因此，对输入中间辅助变量各个检测点的检测方法、位置和仪表精确度等有一定要求。

1.1.2 软测量的数据选择与处理

软测量是通过过程测量数据经过数值计算而实现的，为了保证其准确性和有效性，对采集来的数据在选择数据时，要注意数据的“信息”量，均匀分配采样点，尽量拓宽数据的涵盖范围，减少信息重叠，避免信息冗余。另外，由于仪表精度及环境噪声等随机因素的影响，对输入数据的预处理也是软测量技术不可缺少的一部分。输入数据的有效性直接关系到软仪表的精度。输入数据预处理包括数据变换和误差处理两方面。数据变换对模型的精度，非线性映射能力都有重要作用，数值变换包括标度、转换和全函数三部分。标度用于克服测量数据的数值数量级相关太大的问题，以改善算法的精度和稳定性。转换用于降低对象的非线性特性，其方法有直接转换和寻找新变量代替原变量。权函数则用于实现对变量动态特性的补偿。误差处理是保证输入数据准确、有效的必要手段，误差的存在导致数据的失效，而任何数据的失效都可能导致软测量性能的下降。误差可分为随机误差和过失误差两大类。随机误差是受随机因素（操作过程的微小扰动和测量信号的噪声等）的影响，一般不可避免，但符合一定统计规律，可采用数字滤波方法来消除，例如算术平均滤波、中值滤波和阻尼滤波等。小波分析作为一种较新的信号分析技术，也应用到软测量领域。过失误差将极大地影响软测量的在线运行精度，为此及时剔除和校正这类数据是十分必要的，常用方法有随机搜索法、神经网络等。

1.1.3 软测量的模型辨识与验证

由上可见软测量技术的核心是模型辨识。辨识得到的模型直接关系到软测量的结果。软测量技术发展至今，由于其采用的理论工具和所针对的实际对象的不同，而形成了多种软件测量方法。其中应用最多的是统计回归方法，主要适用于生产工况较为平稳的场所。针对一些复杂的系统，人们又提出了非线性软测量方法，如模式识别，机理建模，神经元技术，用这些技术来建立质量模型和收率优化模型等软仪表。软测量大体有以下四种方法。

- (1) 基于工艺机理模型的方法。在对过程工艺机理深刻认识的基础上，通过对象的机理

分析,找出不可测主导变量与可测辅助变量之间的关系。这类机理模型大多是静态的,为了反映动态响应,可引入动态修正项。

(2) 基于回归模型的方法。通过实验或仿真结果的数据处理,可以得到回归模型。

(3) 基于状态估计的方法。如果把待测的变量看做状态变量,把可测的变量看做输出变量,那么依据可测变量去估计待测变量的问题就是控制理论中典型的状态观测或估计命题。采用 Kalman 滤波器是一种可取的手段。

(4) 基于知识的方法。近年来,人工智能与相关领域发展很快,特别是人工神经网络,可以很好地复现各种非线性特性。尽管 ANN 不是习惯意义上的数学模型,仍然可取辅助变量作为网络的输入,将主导变量作为其输出,通过网络的学习来解决不可测变量的软测量问题。另外,还有基于模式识别、模糊数学等的软测量建模方法。在实际应用中,可以根据对具体过程特点的分析,综合以上两种或多种方法进行建模。

软测量模型辨识出来后需要进行模型的验证。其主要目的是确认模型是否能够满足预期的使用要求。

1.2 建模的目的和基本方法

数学模型分为静态模型和动态模型。静态模型描述的是系统在稳态下的运行规律;动态模型描述的是系统在动态情况下的运行规律。

描述工业过程的数学模型,按连续性可分为:连续系统模型、离散系统模型;按模型结构可分为:输入/输出模型、状态空间模型,而其中的输入/输出模型又划分为时域模型和频域模型两大类。在控制系统的设计时,可以根据实际情况选择合适的数学模型表达式。

1.2.1 建立数学模型的主要目的

建立数学模型的主要目的如下。

- (1) 制订工业过程优化操作方案。
- (2) 制订控制系统的设计方案,利用数学模型进行仿真研究。
- (3) 完成先进控制器设计和系统的调试。

1.2.2 建立模型的基本方法

建立工业过程数学模型的基本方法有:机理分析法和实验法,或者是将这两种方法结合起来的半经验半实验的方法。

1. 机理分析法

机理分析法通常需要通过分析过程的运动规律,运用一些已知的定理、定律和原理(如化学动力学原理、生物学定律、牛顿定理、物料平衡和能量平衡方程、传热传质原理等),建立起过程的数学模型。这种方法也称理论建模。

机理分析法只能用于简单过程的建模,对于比较复杂的实际生产过程来说,这种建模方法有很大的局限性。这是因为进行理论建模时,为了降低问题的复杂性,往往对所研究的对象提出合理的简化假定,然而这些假定并不一定能符合实际情况,何况实际过程的机理有时也并非完全知道。另外,过程的某些因素也在不断变化,而又难以精确描述,单纯用机理分析法建立过程的数学模型就目前技术水平来说还是相当困难的。

2. 实验法

实验法也称测试法。过程的输入/输出信号一般总是可以测量的, 由于过程的动态特性必然表现在输入/输出数据之中, 那么就可以利用输入/输出数据所提供的信息来建立过程的数学模型, 常用的建模手段是系统辨识。

某种意义上讲, 实验法较机理法有一定的优越性, 因为它无需深入了解过程的机理, 但这也不是绝对的。实验法的关键之一是必须选择合适的模型结构并设计一个合理的实验, 以获得过程所含的最大信息量, 这点往往又是非常困难的。

3. 机理建模和实验建模相结合

上面讲述的机理分析法和实验法在不同的场合各有千秋, 实际应用时, 两种方法应该互相补充。即将理论建模和实验建模两种方法结合起来使用: 机理已知的部分采用机理建模, 机理未知的部分采用系统辨识建模。这将充分发挥两种方法各自的优点。

4. 其他方法

用上述方法对一些慢时变、非线性、大滞后对象建立非线性模型, 会遇到很大的困难, 有时甚至无能为力。近年来, 应用人工神经网络建立复杂系统的模型引起了人们的兴趣, 并逐渐在工业过程中得到广泛应用。

应用人工神经网络建模, 实际上也是一种实验的方法, 在对系统有了一定的了解(主要是了解影响输出的因素)以后, 选择合适的网络结构和网络数学描述, 用有效的样本来训练网络, 得到网络模型。系统的输入/输出特性就隐含在网络的连接权中。

1.3 小波分析及其应用

自从法国大科学家傅里叶(Fourier)提出傅里叶分析以来, 它就成为频谱分析最有效的数学工具。一种称为小波的数学理论和方法正在科学技术界引起一场轩然大波。小波分析(Wavelet Analysis)是针对傅里叶分析不能做局部分析的缺点而提出来的。由于其分析时间-频率局部化的卓越效果而誉满全球。从此, 小波分析成为信号处理、信息获取与处理等许多领域首选的数学分析工具, 在国内外形成一次又一次研究高潮。它与分形理论、神经网络联合互补, 对当今的自然科学已产生巨大的冲击力和推动作用。

小波分析的最大特点有两个: 一是“自适应性”, 它能根据被分析的对象自动调整有关参数; 二是“数学显微镜”性质, 它能依据观察的对象自动“调焦”, 以取得令人满意的最佳效果。

1981年, 法国物理学 Morlet 在分析地质数据时基于群论首先提出了小波分析这一概念。1985年, 法国大数学家 Meyer 首次提出光滑的小波正交基, 后被称为 Meyer 基, 对小波理论做出了重要贡献。1988年, 年轻的女数学家 Daubechies 提出了具有紧支集的光滑正交小波基——Daubechies 基, 为小波应用研究增添了催化剂。后来, 信号分析专家 Mallat 提出了多分辨率分析的概念, 给出了构造正交小波基的一般方法。Mallat 受金字塔算法的启发, 以多分辨率分析为基础提出了著名的快速小波算法——Mallat 算法, 这是小波理论突破性的成果。Mallat 算法的提出, 宣告了小波从理论研究走向宽广的应用研究。

小波分析方法是一种窗口大小(即窗口面积)固定但其形状可改变, 时间窗和频率窗都可改变的时频局部化分析方法。即在低频部分具有较高的频率分辨率和较低的时间分辨率, 在高频部分具有较高的时间分辨率和较低的频率分辨率, 被誉为数学显微镜。正是这种特性,

使小波变换具有对信号的自适应性。

小波分析是调和分析这一数学领域半个世纪以来的工作结晶,已经和必将广泛地应用于信号处理、图像处理、机械故障诊断与监控、分形以及数字电视等科技领域。原则上讲,传统上使用傅里叶分析的地方,都可以用小波分析取代。小波分析优于傅里叶变换的地方是,它在时域和频域同时具有良好的局部化性质。由于小波理论处理问题的特殊技巧和特殊效果,小波分析不仅为纯数学与应用数学提供了新的强有力的工具,而且是多媒体、信息高速公路某些核心技术的理论保证。小波分析在图像数据压缩、流体力学、故障诊断、语音信号处理、地质勘探、线性系统、神经网络以及数学、物理和工程中都已得到广泛应用。北京化工大学自动化研究所也正在开展小波分析方面的工作,用小波算法进行信号处理,识别故障数据,以为后续建模和控制提供准确信号等工作。

通常小波分析均采用离线处理,但其处理结果表明,小波滤波的效果远远优于传统的滤波方法。然而,工业过程中小波滤波的在线实现才具有真正的意义和价值。过去,由于缺少精准的过程模型,人们通常用线性滤波器来实现在线滤波。而这些滤波器都是单尺度的,只适合校正那些有用数据和噪声数据具有相同的时间和频率分辨率的信号。对于多尺度信号,一般的线性滤波器只能以牺牲有用信号来达到滤除噪声的目的。

目前已经有人提出基于阈值决策的小波滤波正是针对过程信号的多尺度性质的,并且提出了在线多尺度滤波(on-line multiscale(OLMS) filtering)算法,成功地实现了在线多尺度滤波,也就是通过在一个移动的数据窗口内应用小波阈值滤波以达到降低随机噪声水平的目的。理论和仿真实例表明,在线多尺度滤波算法不仅可以滤除多尺度信号中含有的噪声,而且克服了离线小波滤波的缺陷,完全可以在线使用。

1.4 多变量统计建模方法及其在软测量中的应用

一个复杂工业过程,由于过程内部和过程之间紧密关联,使得过程之间存在着较强的相关性。如果能用少量不相关的变量携带足够的信息来反映大量过程变量所包含的关于过程运行状况的信息,那么,只要通过对这少量不相关的量进行分析和处理,就可以达到对整个过程进行控制的目的。源于统计过程控制的多变量统计建模方法,通过主元分析 PCA、主元回归(Principal Component Regression, PCR)、部分最小二乘 PLS 等多元统计方法,可以从生产过程相关的历史数据中提炼统计信息,建立统计模型(如 PCA 模型、PLS 模型),并根据统计模型将存在相关关系的多个过程变量投影到有少量隐变量定义的低维空间中去,用少量变量反映多个变量的综合信息,实现对模型的输入简化以及输入数据的故障侦破,为过程建模、软测量技术和落实过程先进控制以及优化控制打好基础,并使生产过程的监控、故障检测和诊断以及一些相关的研究工作得以简化。

1.4.1 相关分析和回归分析

在对过程系统进行分析时,需要收集大量表现系统特征和运行状态的数据信息。这些原始数据往往样本点数量巨大,用于刻画系统特征的指标变量众多,并且带有动态特性,从而形成了规模巨大、复杂难辨的“数据海洋”。利用统计学和数学方法,对多维复杂数据进行科学分析,就可简明扼要地把握系统的本质特征。

相关分析是要对两个随机变量之间的关系给出数值上的量度,两个样本之间的这种数值

上的量度就定义为相关系数 r 。相关系数的大小反映了研究变量间相互影响关系的强弱。

回归分析主要用来具体判定相关变量间的数值变化关系，它包括多元线性回归和非线性回归。

1.4.2 主元分析法

在一个复杂工业过程中，由于过程内部和过程之间紧密关联，使得过程之间存在着较强的相关性。如果能用少量不相关的变量携带足够的信息来反映大量过程变量所包含的关于过程运行状况的信息，那么，只要通过对这少量不相关的量进行分析和处理，就可以达到对整个过程进行控制的目的。

在过程控制中，模型准确是保证各种控制手段成功实施的最重要基础。自 20 世纪 80 年代以来，先进过程控制和优化控制在化工过程特别是在炼油化工生产中的广泛应用，对建模的精度提出了较高的要求。建模时，必须依靠完备可靠的数据。

主元分析 (Principal Component Analysis, PCA) 的方法可用来处理过程的输入数据，实现对模型的输入简化以及输入数据的故障侦破，为过程建模、落实过程先进控制和优化控制打好基础。

主元分析法是多元统计分析中最重要的方法之一。主元分析的主要任务是使一个维数很大的数据矩阵降维，将生产过程中存在的大量高度相关的变量通过多元统计投影映射到用少部分隐变量定义的低维空间（主元空间）中去，从而揭示它的主要结构。

从代数观点看，主成分就是 p 个变量 $x_1, x_2, \dots, x_p$ 的一些特殊线性组合。而在几何上，这些线性组合正是把 $x_1, x_2, \dots, x_p$ 构成的坐标系旋转产生的新坐标系。新坐标轴代表了具有最大变差的方向，同时提供了协方差阵结构的简洁表示。主元分析所做的数据处理工作实际上是在一个 p 维样本 X 中确定了由 p_i ($i=1, 2, \dots, m$) 决定的一个 m 维子空间 T ，在空间 T 中前 A ($A \ll p$) 个坐标上集中了 X 中信息的大部分。主成分仅依赖于 $x_1, x_2, \dots, x_p$ 的协方差阵 Σ (或相关矩阵 P)，并不要求分布是多元正态的。

主元回归 (PCR) 就是利用主元分析的方法建立回归方程。PCR 试图寻找过程输入数据矩阵 X 与输出数据矩阵 Y 间的线性关系。由于实际数据往往是共线性的，因此数据矩阵可能是一个病态矩阵，直接针对原始数据进行多元线性回归将会碰到很大的困难。注意到主元矩阵的非病态性，如果对投影矩阵进行线性回归，就能避免这一问题。可见 PCR 首先对 X 进行主元分析，然后将 Y 对投影矩阵进行回归。

1.4.3 部分最小二乘法

前述 PCR 由两步组成，先对 X 进行主元分析，得到主元矩阵 T ，再让 Y 对 T 进行回归。在提取信息时，主元分析对 X 的分解是独立进行的，没有考虑 Y 。显然对信息的利用有所遗漏。PLS 在 PCA 的基础上同时考虑了输入/输出数据集，对 X 、 Y 同时进行正交分解，使 PLS 能从较少的负荷矢量中得到尽可能多的信息。

1.5 建模与系统辨识

数学模型是描述控制对象运动过程的数学表达式，它是研究自动控制系统的基本依据，没有一个确切的数学模型，就不可能对系统进行定量的分析研究。常用的数学模型有微分方

程表达式（或差分方程），传递函数表达式，状态空间表达式。建模的方法基本有两种。机理分析法通过分析过程的运动规律，运用一些已知的定律、定理和原理，来建立过程的数学模型。但是它只能用于比较简单的过程，对于复杂的实际生产过程，有时很难对过程机理进行精确描述，这时就需要利用测试法，即系统辨识。

系统辨识就是通过测取研究对象在人为输入作用下的输出响应，或正常运行时的输入/输出数据记录，加以必要的数据处理和数学计算，估计出对象的数学模型。系统辨识的方法有很多种，非参数模型（经典）辨识方法包括阶跃响应法、脉冲响应法、频率响应法、相关分析法和谱分析法等。它假定过程是线性的，不必事先确定模型的具体结构，因而这类方法可适用任意复杂的过程，在工程上至今仍被广泛使用。参数模型（现代）辨识方法包括最小二乘法、梯度校正法和极大似然法等。它必须假定一种模型结构，通过极小化模型与过程之间的误差准则函数来确定模型的参数。根据计算机与过程之间的不同连接方式，辨识又分为离线辨识和在线辨识。离线辨识采用成批处理的算法，它占用内存容量比较大。而在线辨识通常在正常运行工况下进行，它采用实时处理的算法，占用内存量较小，尤其对时变过程的辨识或自适应控制问题，它较离线辨识方法具有更大的优越性。

1.6 人工神经网络及其应用

人工神经网络（Artificial Neural Network, ANN）是对生物神经网络的一种模拟与近似。人工神经网络是一个并行和分布式的信息处理网络结构，一般由多个神经元组成，每个神经元有一个单一的输出，它可以连接到很多其他的神经元，其输入有多个连接通路，每个连接通路对应一个连接权系数。

神经网络的研究已有较长的历史，最早的研究是 20 世纪 40 年代心理学家 McCulloch 和数学家 Pitts 合作提出的兴奋与抑制型神经元模型和 Hebb 提出的神经元连接强度的修改规则，他们的研究成果至今仍是许多神经网络模型研究的基础。20 世纪五、六十年代的代表性工作是 Rosenblatt 的感知机和 Widrow 的自适应线性元件 Adaline。1969 年，Minsky 和 Papert 合作发表了颇有影响的 Perceptron 一书，得出了消极悲观的观点，致使 20 世纪 70 年代人工神经网络的研究处于低潮，进入 20 世纪 80 年代后，传统的 Von Neumann 数字计算机在模拟视听觉的人工智能方面遇到了物理上不可逾越的极限。与此同时，Rumelhart 与 McClelland 以及 Hopfield 等人在神经网络领域取得了突破性进展，神经网络的热潮再次掀起。至今为止，已有近 50 多种神经网络模型发表在各种文献中，其中最具代表性的有 MP 模型、Perceptron 感知机、Adaline、Hopfield 网络、BP 网络、Boltzmann 机及高阶 Boltzmann 机、ART、SOM、CMAC、BMAC、RBF、动态 BP 网络、Elman 网络、Jordan 网络等。

神经网络以其独特的非传统表达方式和固有的学习能力，引起了控制界的普遍重视，并在很短的时间内，取得了一系列重要成果。迄今神经网络的应用已渗透到自动控制领域的各个方面，包括系统建模与辨识、智能控制、内模控制、预测控制、自适应控制、非线性系统控制、PID 参数的整定、极点配置、模糊控制、优化控制及控制系统的故障诊断与容错控制等。

神经网络系统辨识实质上是选择一个适当的神经网络模型来逼近实际系统。由于神经网络对非线性函数具有任意逼近和自学习能力，所以神经网络系统辨识为非线性系统的辨识提供了一种简单而有效的一般性方法。与传统的基于算法的辨识方法比较，神经网络系统辨识