

DOI:10.3880/j.issn.1006-7647.2008.04.002

OSC-PLS 法在大坝安全监控模型中的应用

李 波^{1,2}, 顾冲时^{1,2}, 李智录³, 柳利利³

(1. 河海大学水利水电工程学院, 江苏 南京 210098; 2. 河海大学水资源高效利用与工程安全国家工程研究中心, 江苏 南京 210098; 3. 西安理工大学水利水电学院, 陕西 西安 710048)

摘要: 为了提高 PLS 大坝监控模型的可解释性, 引入一种数据预处理方法——正交信号修正(OSC)法, 对原始自变量进行预处理, 去除和因变量无关的信号, 再建立 PLS 监控模型。实例分析表明, OSC-PLS 法只需要 1 个主成分就可以建立监控模型, 与 PLS 模型相比, 该模型的回归系数具有明确的物理意义, 因子的重要性指标更合理。因此, OSC-PLS 大坝安全监控模型结构更简单, 解释性更好, 具有一定的推广价值。

关键词: 正交信号修正; 偏最小二乘回归法; 大坝安全; 监控模型

中图分类号: TV640.3 **文献标识码:** A **文章编号:** 1006-7647(2008)04-0004-04

Application of OSC-PLS method in dam safety monitoring//LI Bo^{1,2}, GU Chong-shi^{1,2}, LI Zhi-lu³, LIU Li-li³ (1. College of Water Conservancy and Hydropower Engineering, Hohai University, Nanjing 210098, China; 2. National Engineering Research Center of Water Resources Efficient Utilization and Engineering Safety, Hohai University, Nanjing 210098, China; 3. College of Water Conservancy and Hydroelectric Engineering, Xi'an University of Technology, Xi'an 710048, China)

Abstract: The PLS (partial least squares) model for dam safety monitoring has excellent stability and interpretability. However, when excessive noise exists in the original data, the interpretability of the model is lessened. In order to improve the interpretability of the PLS model, the orthogonal signal correction (OSC) data preprocessing method is introduced, then the OSC-PLS model for dam safety monitoring, which can preprocess original independent variables and remove signals unrelated to dependent variables, is proposed. A case study shows that the OSC-PLS model needs only a single principal component to be established. Compared with the regression coefficients of the PLS model, those of the proposed model have clear physical meanings, and the importance index of factors is more reasonable. Therefore, the OSC-PLS model for dam safety monitoring, with a simpler structure and better interpretability, has a certain popularized value.

Key words: orthogonal signal correction; partial least squares; dam safety; monitoring model

1949 年以来, 我国的水利水电事业已经取得了举世瞩目的成就。但是, 由于水文、地质、施工质量、材料老化、运行管理等多种原因, 部分大坝存在安全问题。因此, 分析大坝原型观测资料, 建立大坝安全监控模型, 是值得深入研究的课题^[1]。

常用的大坝安全监控模型有统计模型、确定性模型及混合模型, 其中统计模型是当前最常用的。统计模型中, 一般采用最小二乘法求得各个系数的无偏估计值, 最小二乘法估计的一个前提是自变量因子间没有密切的相关性, 但是, 在不少情况下, 大坝的主要影响因素(如各库水头因子)之间存在着严重的多重相关性。因此, 这种相关性会对最小二乘回归模型产生较大的影响, 如结构不稳定, 解释性

差^[2]。Wold 在 1983 年提出了偏最小二乘回归 (partial least squares regression, PLS) 法^[3], 该方法可以有效地消除自变量因子间严重的多重相关性, 经过 20 多年的发展, 该方法已经日趋成熟, 在国内各个方面已经得到了广泛的应用。为此, 一些学者已将 PLS 法引入到大坝安全监控模型中, 并取得了不错的效果^[4-6]。运用 PLS 法建模时, 最理想的效果是只需要提取 1 个主成分, 就能够对因变量作出合理的解释。但是, 分析大坝观测资料时, 由于自变量因子选择不合理等因素的存在, 过多的噪声会引入到模型中, 为了让 PLS 模型达到较好的拟合效果, 一般是提取较多的主成分, 这样, 势必会降低模型的可解释性。

基金项目: 国家自然科学基金重点基金(50539010)、国家自然科学基金(50539110)、雅砻江水电开发联合研究基金(50539030-1-3)、国家科技支撑计划(2006BAC14B03)、国家自然科学基金(50579010)、中国水电工程顾问集团公司科技项目(CHC-KJ-2007-02)

作者简介: 李波(1980—), 男, 湖北天门人, 博士研究生, 从事水工结构与大坝安全监控研究。E-mail: lb007403@hhu.edu.cn

Wold 等^[7]在 1998 年提出了正交信号修正 (orthogonal signal correction, OSC) 法, 它是一种数据预处理方法, 可以消除自变量因子中与因变量正交的信号, 即过滤掉原始数据中的噪声。这种方法在化学计量学领域已经得到了一定的应用^[8-9], 本文将 OSC 与 PLS 相结合的 OSC-PLS 法运用到大坝安全监控中, 以此来改善传统的 PLS 模型。

1 PLS 法

PLS 法是一种新型的多元统计数据分析方法, 研究多因变量(包括单因变量)对多自变量的回归建模, 通过对主成分的提取, 确保模型精度不受因子多重相关性的影响, 从而使 PLS 模型分离出的因子有效地对实测变量作出合理解释。本文只涉及单因变量偏最小二乘回归^[3], PLS 法的基本步骤如下:

a. 标准化处理。记 F_0 是因变量 y 的标准化矩阵, E_0 是自变量集合 $X = \{x_1, \dots, x_p\}$ 的标准化矩阵, 标准化处理的目的是使样本点的集合重心与坐标原点重合。

b. 主成分提取。从 E_0 中提取第 1 个主成分 t_1 , $t_1 = E_0 w_1$, w_1 是 E_0 的第一权向量, $w_1 = \frac{E_0^T F_0}{\|E_0^T F_0\|}$ 并且 $\|w_1\| = 1$ 。分别求 E_0 和 F_0 对 t_1 的 2 个回归方程:

$$E_0 = t_1 p_1^T + E_1 \quad F_0 = t_1 r_1^T + F_1 \quad (1)$$

其中

$$p_1 = \frac{E_0^T t_1}{\|t_1\|^2} \quad r_1 = \frac{F_0^T t_1}{\|t_1\|^2} \quad (2)$$

式中: p_1, r_1 分别为回归系数向量; E_1, F_1 分别为 2 个回归方程的残差矩阵。

其次, 用残差矩阵 E_1 和 F_1 取代 E_0 和 F_0 , 用同样的方法求第 2 个权向量 w_2 以及第 2 个主成分 t_2 , 依次计算下去。如果进行 m 次运算, 则会有

$$E_0 = t_1 p_1^T + t_2 p_2^T + \dots + t_m p_m^T + E_m \quad (3)$$

$$F_0 = t_1 r_1^T + t_2 r_2^T + \dots + t_m r_m^T + F_m$$

式中 E_m, F_m 均为残差矩阵。

由于 t_1, \dots, t_m 均可表示成 E_{01}, \dots, E_{0p} 的线性组合, 因此, 式(3)可还原成 $y^* = F_0$ 关于 $x_j^* = E_{0j}$ 的回归方程形式, 即

$$y^* = \alpha_1 x_1^* + \dots + \alpha_p x_p^* + F_m \quad (4)$$

式中 $\alpha_1, \dots, \alpha_p$ 为回归系数。

最后, 经过初始化处理后, 得到原始因变量 y 关于原始自变量集合 $X = \{x_1, \dots, x_p\}$ 的回归方程:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \dots + \beta_p x_p + \mu \quad (5)$$

式中: β_0, \dots, β_p 为回归系数; μ 为残差矩阵。

PLS 法一般不需要选用全部的主成分进行回归建模, 而是采用截尾的方式, 选用前 m 个主成分 t_1, t_2, \dots, t_m 就可以得到预报性能良好的模型。 m 的选取可以采用交叉有效性法。记 y_i 为原始数据, \hat{y}_{hi} 是使用全部样本点并取 t_1, t_2, \dots, t_h 个主成分回归建模后第 i 个样本点的拟合值。 $\hat{y}_{h(-i)}$ 是在建模时删去第 i 个样本点, 取 t_1, t_2, \dots, t_h 个主成分回归建模后, 再用此模型计算的 y_i 的拟合值。记

$$\begin{cases} E_{SS_h} = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_{hi})^2 \\ E_{PRESS_h} = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_{h(-i)})^2 \\ Q_h^2 = 1 - \frac{E_{PRESS_h}}{E_{SS_{h-1}}} \end{cases} \quad (6)$$

式中: E_{SS_h} 为误差平方和; E_{PRESS_h} 为预测误差平方和。

当 $Q_h^2 \geq 0.0975$ 时, 成分 t_h 会对模型的预测能力有明显的改善作用。否则, 可以认为增加新的主成分 t 对减少模型的预测误差无明显的改善作用。

2 OSC-PLS 法

OSC 法作为一种数据预处理方法, 已经出现了许多改进的方法。目前, 常用的一种改进的 OSC 法^[10]可直接由 NIPALS (nonlinear iterative partial least squares) 算法得到正交成分。对预处理后的数据, 再用 PLS 法建立模型, 即 OSC-PLS 法。对新样本进行预测时, 同样要先进行正交信号修正。OSC-PLS 法具体算法如下:

a. 首先将原始自变量矩阵 X 和因变量矩阵 y (单因变量) 进行标准化处理, 分别得到矩阵 E_0 和 F_0 。

b. 计算权值向量: $w = E_0^T F_0 / \|E_0^T F_0\|$ 。

c. 计算得分向量: $t = E_0 w$ 。

d. 计算载荷向量: $p = E_0^T t / (t^T t)$ 。步骤 a ~ d 与 NIPALS 算法的步骤相同。

e. 计算正交成分的权值向量: $w_{\perp} = p - w$ 。

f. 将得到的 w_{\perp} 归一化: $w_{\perp} = w_{\perp} / \|w_{\perp}\|$ 。

g. 计算正交成分的得分向量: $t_{\perp} = E_0 w_{\perp}$ 。

h. 计算正交成分的载荷向量: $p_{\perp}^T = t_{\perp}^T E_0 / (t_{\perp}^T t_{\perp})$ 。

i. 从 E_0 中去除正交成分, 得到修正后的数据: $E_0^{osc} = E_0 - t_{\perp} p_{\perp}^T$ 。保存得到的正交参数: $P_{\perp} = [P_{\perp}, p_{\perp}]$, $W_{\perp} = [W_{\perp}, w_{\perp}]$ 。用 E_0^{osc} 代替 E_0 , 重复步骤 c ~ i, 直到去除所有的正交成分。

j. 将经正交信号修正的矩阵 E_0^{osc} 作为新矩阵,

再用 PLS 法建立模型。

进行预测时,对于新样本 X_{new} ,采用如下步骤进行修正:

a. 进行标准化处理,得到新的自变量矩阵

E_{0new} 。

b. 令 $k = 1$ 。

c. 从 w_{\perp} 中取出第 k 列作为 w_{\perp} , $t_{new} = E_{0new}^T w_{\perp}$ 。

d. 从 P_{\perp} 中取出第 k 列作为 p_{\perp} , $E_{0new}^{osc} = E_{0new} - t_{new} p_{\perp}$ 。如果还有正交成分, $E_{0new} = E_{0new}^{osc}$, $k = k + 1$ 重复步骤 c~d,直到去除所有的正交成分。

e. 根据前面求得的 OSC-PLS 模型,对新样本进行预测。

去除的正交成分个数的选择主要是采用交叉有效性法。本文采用的方法是:分析步骤 e 中的正交权重 w_{\perp} 与载荷向量 p 的模的比值,若比值较大,说明 E_0 中仍包含明显的正交成分,需要进行 OSC 最终使比值趋近于零。可以作出该比值对于正交成分个数的曲线,通过观察该曲线直观地得到最后应去除的正交成分个数。

3 工程实例

3.1 统计模型的选择

选用某土石坝的 1 支渗压计 2004 年 3 月 26 日至 12 月 30 的观测数据,共 280 个样本,前 230 个样本作为训练集,后 50 个样本作为预测集。根据实测资料,选取的渗流水压力统计监控模型如下:

$$P = a_0 + a_1 H + \sum_{i=1}^6 b_i \bar{H}_{5i} + \sum_{i=1}^6 c_i \frac{\Delta H}{\Delta t} \Big|_{\Delta t=5i} + d_1 \theta + d_2 \ln \theta \quad (7)$$

式中: P 为渗流水压力; H 为当日库水头; \bar{H}_{5i} 为前期平均库水头; $\frac{\Delta H}{\Delta t} \Big|_{\Delta t=5i}$ 为前期平均库水头升降速率,其中 $i = 1, 2, 3, 4, 5, 6$; t 为时间; θ 为天数,从起始日算,每增加 1 d, θ 增加 0.01; $a_0, a_1, b_i, c_i, d_1, d_2$ 为系数。

3.2 OSC-PLS 模型建立及分析

首先采用 PLS 法对训练集直接建立回归模型,然后对预测集进行预测,各复相关系数和剩余标准差如表 1 所示。再应用 OSC 法对数据进行预处理,去除正交成分,通过图 1,确定去除的正交成分个数为 8,然后对修正后的数据采用 PLS 法建立回归模型,最后对预测集进行预测。

从表 1 中可以看出:直接采用 PLS 法建立模型时,PLS 主成分数为 4,训练集的复相关系数和剩余

表 1 正交信号修正法预处理样本前后的 PLS 结果

OSC 成分数	PLS 主成分数	训练集		预测集	
		复相关系数	剩余标准差	复相关系数	剩余标准差
0	4	0.9929	0.0304	0.9607	0.0472
1	3	0.9952	0.0143	0.9600	0.0480
2	3	0.9952	0.0143	0.9600	0.0480
3	3	0.9952	0.0143	0.9600	0.0480
4	3	0.9994	0.0047	0.9605	0.0475
5	3	0.9994	0.0047	0.9605	0.0475
6	2	0.9994	0.0047	0.9605	0.0475
7	1	0.9994	0.0047	0.9605	0.0475
8	1	0.9995	0.0045	0.9605	0.0475
9	1	0.9995	0.0045	0.9605	0.0475
10	1	0.9995	0.0045	0.9605	0.0475
11	1	0.9995	0.0045	0.9605	0.0475
12	1	0.9995	0.0045	0.9604	0.0474
13	1	0.9995	0.0045	0.9604	0.0474
14	1	0.9995	0.0045	0.9604	0.0474

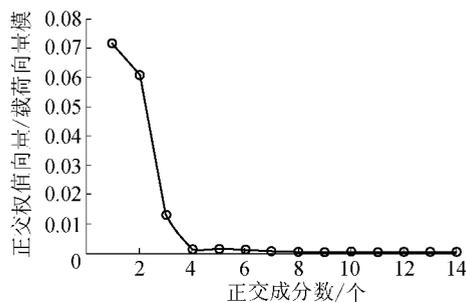


图 1 每个正交成分的正交权重向量与载荷向量模的比值标准差分别为 0.9929 和 0.0304,预测集的复相关系数和剩余标准差分别为 0.9607 和 0.0472,拟合与预测的精度都很高;当采用 OSC 法对数据进行预处理之后,随着去除的正交成分数的增加,PLS 回归所提取的主成分个数大致呈减少趋势,模型拟合精度与预测精度都有增加的趋势,最后趋于稳定;当选取 OSC 成分数为 8 时,通过比较复相关系数和剩余标准差,与 PLS 模型相比,OSC-PLS 模型的拟合效果较好,预测效果则基本不变,而 PLS 主成分数由 4 变为 1,模型结构得到简化。

对 2 种模型的回归系数进一步分析。图 2 和图 3 分别为 PLS 模型和 OSC-PLS 模型的回归系数柱状图。在两图中,因子数分别与式(7)中的自变量因子相对应,1 表示当日库水头,2~7 为前 5 d 平均库水

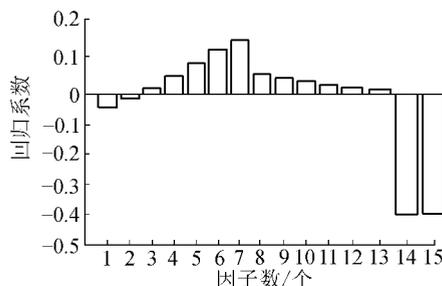


图 2 PLS 模型回归系数

头至前 30 d 平均库水头 $8 \sim 13$ 为库水头的变化率, 14 ~ 15 为时效。

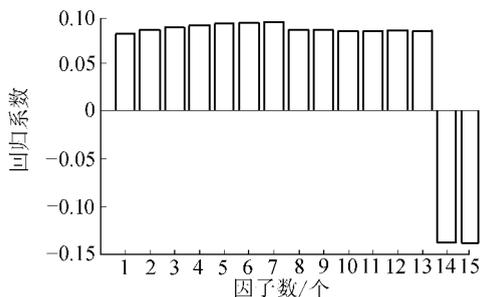


图 3 经过 OSC 的 PLS 模型回归系数

从图 2 可以看出, 当日库水头与前 5 d 平均库水头和渗压值呈负相关性, 这不符合实际, 因此, 直接应用 PLS 法建立的模型与实际是不相符的。这主要是由于所选的渗压模型并非最佳, 为了达到一定的精度, 应用 PLS 法求解时, 提取过多主成分的同时引入了过多的噪声, 导致 PLS 模型的可解释性降低。

从图 3 可以看出, 库水头与渗压值都呈正相关性, 并且各库水头的回归系数随着天数的增加逐渐递增, 这正好反映了库水头对渗压有滞后影响。因此, 先用 OSC 法去除与渗压无关的信号, 再进行 PLS 回归得到的模型与直接进行 PLS 回归得到的模型回归系数相比具有明确的物理意义, 解释性更好。

此外, 2 种模型时效分量的回归系数均为负数, 并且绝对值很大, 说明在分析时段内该测点处的防渗效果在增强。

由于 OSC-PLS 模型具有更好的解释能力, 可进一步分析该模型中各因子的重要性指标 V_j (j 为因子个数), 来了解各因子对渗压的影响程度, 本文采用的是一种改动的 V_j , 详见文献 [2]。图 4 为 OSC-PLS 模型各因子重要性指标分布, 通过图 4 可以清楚地看出各因子对渗压的影响大小, 同时, 可以算出在分析时段内该测点处的库水头因子对渗压的影响占 41.08%, 库水头变化率因子占 31.59%, 时效因子占 27.33%。

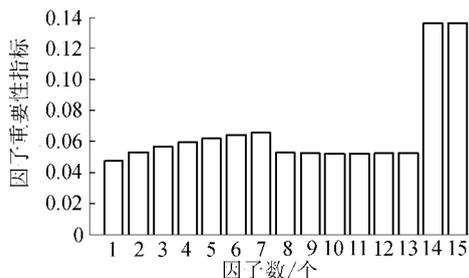


图 4 OSC-PLS 模型各因子重要性指标分布

4 结 语

a. PLS 法是一种优良的回归分析法, 所建立模

型的整体性和可解释性明显优于最小二乘回归模型。但是, 当模型中存在过多噪声时, PLS 模型的解释性会降低。

b. OSC 法是一种新的数据预处理方法, 它可以去除自变量因子中与因变量正交的信号。对预处理后的数据应用 PLS 法建立回归模型, 使模型得到简化, 易于解释和理解。

c. 将 OSC-PLS 法应用于大坝渗压建模, 得到的模型只有 1 个主成分且精度不受影响, 而且模型的回归系数具有明确的物理意义, 可以让各因子重要性指标更加合理化。因此, OSC-PLS 法在大坝安全监控建模中可得到广泛的应用。

参考文献:

- [1] 吴中如. 水工建筑物安全监控理论及其应用 [M]. 北京: 高等教育出版社, 2003.
- [2] 李智录. 大坝安全监控模型研究 [D]. 西安: 西安理工大学, 2006: 46-76.
- [3] 王惠文. 偏最小二乘回归方法及其应用 [M]. 北京: 国防工业出版社, 1999.
- [4] 邓念武, 徐晖. 单因变量的偏最小二乘回归模型及其应用 [J]. 武汉大学学报: 工学版, 2001, 34(2): 14-16.
- [5] 杨杰, 胡德秀, 吴中如. 大坝安全监控模型因子相关性及其不确定性研究 [J]. 水利学报, 2004, 35(12): 99-105.
- [6] 李智录, 李波. 基于 PLSR 的静态灰色模型在大坝安全监控中的应用 [J]. 大坝与安全, 2006(6): 48-51.
- [7] WOLD S, ANTTI H, LINDGREN F, et al. Orthogonal signal correction of near-infrared spectra [J]. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 1998, 44: 175-185.
- [8] 张海东, 赵杰文, 刘木华. 基于正交信号校正和偏最小二乘 (OSC/PLS) 的苹果糖度近红外检测 [J]. 食品科学, 2005, 26(6): 189-192.
- [9] 任芊, 解国玲, 董守龙. OSC-PLS 算法在近红外光谱定量分析中应用的研究 [J]. 北京理工大学学报, 2005, 26(6): 189-192.
- [10] 李春富, 王桂增, 叶昊. 正交信号修正法及其在软测量中的应用 [J]. 信息与控制, 2004, 33(4): 500-503.

(收稿日期: 2007-10-31 编辑: 方宇彤)

