

基于 DRNN 及其相应算法的 非线性系统的状态预估*

赵英凯

蔡 宁

熊 辉

(南京化工大学自动化与计算机系 210009) (南京东方化工有限公司) (南京化工大学自动化与计算机系)

摘 要 基于 DRNN 网络结构与动态 BP 网络的加速算法, 研究磷酸羟胺法(HPO 法)己内酰胺生产过程中磷酸羟胺液的离子浓度与 pH 值的在线预估, 为进一步探索羟胺反应器的优化操作打下了基础。

关键词 己内酰胺, 磷酸羟胺法(HPO 法), 对角递归神经网络(DRNN), 建模与预估

分类号 O 211. 67

State Preestimate on Nonlinear System Based on DRNN and Its Corresponding Algorithm

Zhao Yingkai

Cai Ning

(Nanjing University of Chemical Technology) (Nanjing Oriental Chemical Industry Co. Ltd.)

Xiong Hui

(Nanjing University of Chemical Technology)

Abstract Based on the structure of DRNN and dynamic BP acceleration algorithm, the on-line preestimate of ionic concentrations and pH value in hyam phosphate solution is studied in HPO caprolactam production. These lay a foundation to further optimize the hyam reactor operation.

Key words caprolactam, hyam-phosphate oximation (HPO), diagonal recurrent neural network (DRNN), modeling and preestimate

1 引 言

磷酸羟胺的制备是己内酰胺生产的重要环节。它是由磷酸缓冲液经 H_2 或含氢的循环气催化还原生成。反应是在活性碳为载体的 Pt/Pd 催化剂作用下, 在反应温度 60 $^{\circ}C$, 压力 2.650kPa 及不断搅拌的情况下进行的。

影响羟胺反应的主要因素^[1]有催化剂的活性、羟胺反应器压力、温度、循环尾气流量以及磷酸缓冲液中的各离子浓度。在现场, 羟胺反应器压力与温度等都有专门的控制回路使其保持稳定, 而催化剂可通过添加活性剂及使 H_2 净化与干燥等一系列方法, 使之在较长时间内保持较高活性。反应生成物磷酸羟胺中的离子浓度与 pH 值则部分反映了整个羟胺反应器的反应情况, 也直接影响到环己酮肟的

质量、产量与原料消耗。由此可见, 羟胺反应器是一个十分复杂的 M M O 系统。通过常规方法或遵循现代控制理论的途径去寻求较佳的选择性与羟胺效率, 特别是根据羟胺反应器的众多输入去在线预估磷酸羟胺的离子浓度与 pH 值, 是十分困难的。

本文利用神经网络等智能处理方法, 根据生产过程所检测或在线分析得到的与磷酸羟胺离子浓度和 pH 值有密切关系的各种参数作为输入, 建立该复杂化工系统的神经网络模型, 并在线预估磷酸羟胺离子浓度与 pH 值, 以保证磷酸羟胺的质量与应有负荷, 从而达到己内酰胺稳产高质、降低原料与消耗之目的。该方法也可作为己内酰胺生产专家系统知识获取的手段, 是进一步优化操作, 构成己内酰胺智能控制系统的重要工具。

* 国家自然科学基金项目(59605008)

1998- 07- 17 收稿, 1998- 10- 21 修回

2 对角递归神经网络及其学习算法

对角递归神经网络^[2]是 Elman 网的一种简化形式。由于隐层的每一个神经元仅接受自己输出的反馈,而与其它神经元无反馈连接,因此它比完全递归的 Elman 网简单得多,但与传统的静态多层前馈网络相比,仍能实现动态映射,并具有动态记忆能力。

对角递归神经网络结构如图 1 所示。图中, $X = [X_1 X_2 \dots X_n]^T$ 为输入向量, $Y = [Y_1 Y_2 \dots Y_m]^T$ 为复杂化工对象的输出向量。

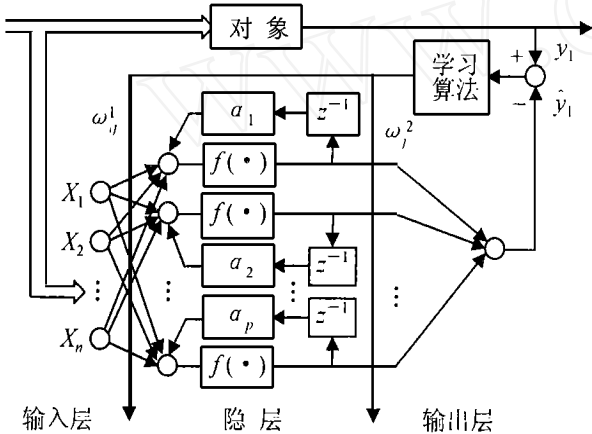


图 1 对角递归神经网络结构及学习算法

设具有 n 个输入节点的 DRNN, 其第 i 个输入为 $I_i^1(k) = x_i(k)$, 其中 $i = 1, 2, \dots, n$ 。隐层第 j 个递归神经元节点的输入和为

$$I_j^2(k) = \alpha_j h_j(k-1) + \sum_{i=1}^n \omega_{ij}^1 I_i^1(k) + \theta \quad (1)$$

其中, $j = 1, 2, \dots, p$, ω_{ij}^1 为输入层第 i 个节点与隐层第 j 个节点之间的权重, θ 为隐层第 j 个节点的阈值, α_j 为隐层该节点前一步输出 $h_j(k-1)$ 的自反馈系数。为简化计算, 此处暂设为常数。

隐层是以典型的 Sigmoid 函数作为激励函数, 即

$$h_j(k) = f[I_j^2(k)] = \frac{1}{1 + \exp[-I_j^2(k)]} \quad (2)$$

而网络输出层的第 1 个输出值为

$$\hat{y}_1(k) = \sum_{j=1}^p \omega_{j1}^2 h_j(k) + \gamma \quad (3)$$

应用改进的 BP 算法^[3,4], 网络按梯度下降法修改权值, 以使目标函数

$$J_1 = \frac{1}{2} [y_1(k) - \hat{y}_1(k)]^2 \quad (4)$$

最小。其中 $y_1(k)$ 为第 1 个实际输出值。由此可推得

权重与阈值的学习律

$$\Delta \omega_{ij}^1(k) = -\eta \frac{\partial J_1}{\partial \omega_{ij}^1} + \rho \Delta \omega_{ij}^1(k-1) \quad (5)$$

$$\Delta \omega_{j1}^2(k) = -\eta \frac{\partial J_1}{\partial \omega_{j1}^2} + \rho \Delta \omega_{j1}^2(k-1) \quad (6)$$

$$\Delta \theta_j(k) = -\eta \frac{\partial J_1}{\partial \theta_j} + \rho \Delta \theta_j(k-1) \quad (7)$$

$$\Delta \gamma(k) = -\eta \frac{\partial J_1}{\partial \gamma} + \rho \Delta \gamma(k-1) \quad (8)$$

其中 η 与 ρ 分别为学习因子与阻尼因子。一般说, 当 η 增大时, 易产生振荡; 当 η 减得太小时, 收敛速度过慢。学习因子太小的弊端可由学习因子自适应算法加以改善^[5,6]。其基本思想是: 当 ω_{ij} 远离学习要达到的目标点时, η 取较大值; 当其逼近目标点 ($E \rightarrow 0$) 时, η 取较小值。具体算法为

$$\eta(k+1) = \eta(k) \frac{E(k-1)}{E(k)} \quad (9)$$

其中 E 为全局输出平均误差。

引入 ρ 是为了避免 η 过大而引起振荡, 当误差值下降时, 取 $\rho > 1$; 反之, 若误差值不变或上升, 则取 $0 < \rho < 1$ 。这样, 利用 ρ 的自激作用, 使调整过程在好的趋势下快速到达最佳点。

本过程中采取这种学习因子自适应算法及动态处理方式, 加速了 BP 算法的收敛速度, 取得了较为明显的效果, 迭代次数由 1 000 次左右降至 500 次以下。

3 磷酸羟胺离子浓度与 pH 值的在线预估

现用以上神经网络模型与相应的学习算法, 寻求磷酸羟胺离子浓度与 pH 值的在线预估值。为寻求与磷酸羟胺离子浓度与 pH 值相关性较大的输入变量, 可采用逐步回归分析法确定相关量^[7]。本文根据现场专家提供的经验, 初步确定以下 13 个量作为该复杂化工对象的输入。它们分别是:

- X_1 —磷酸缓冲母液中 H^+ 浓度 (mmol/g)
- X_2 —磷酸缓冲母液中 NH_3OH^+ 浓度 (mmol/g)
- X_3 —磷酸缓冲母液中 $H_2PO_4^-$ 浓度 (mmol/g)
- X_4 —磷酸缓冲母液中 NH_4^+ 浓度 (mmol/g)
- X_5 —磷酸缓冲母液中 NO_3^- 浓度 (mmol/g)
- X_6 —磷酸缓冲母液中游离 H^+ 浓度 (mmol/g)
- X_7 —循环气 H_2 含量 (由在线分析仪测取) (%)
- X_8 —I.P.L 进料量 (磷酸缓冲母液流量) (m^3/h)

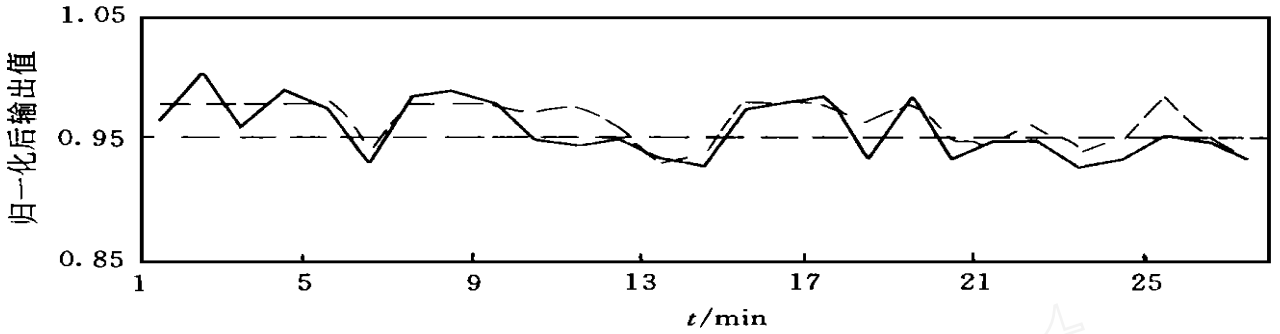


图 2 Y₂ 仿真结果

— 测量值 - - - 预测值

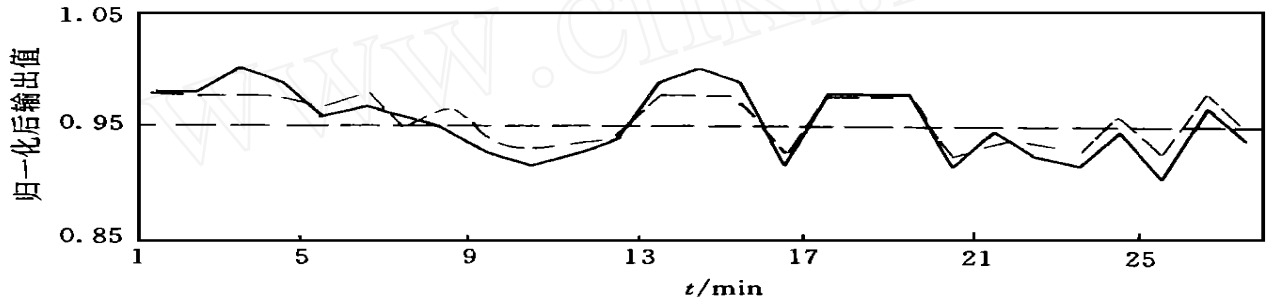


图 3 Y₁₀ 仿真结果

— 测量值 - - - 预测值

- X₉— 羟胺反应器压力(kPa)
- X₁₀— 羟胺反应器温度()
- X₁₁— 循环气流量(kNm³/h)
- X₁₂— 羟胺反应器压降(kPa)
- X₁₃— 高位槽液位(%)

对象输出为:

Y₂— 磷酸羟胺中NH₃OH⁺ 浓度(mmol/g)

Y₁₀— 磷酸羟胺中pH 值

利用现场大量的实测数据并经归一化处理, 对网络拓扑结构为 13—28—2 的神经网络进行离线学

表 1 归一化后的 Y₂ 值

测量值	预测值	测量值	预测值
0.961 905	0.976 450	0.971 429	0.978 224
1.000 000	0.977 261	0.976 191	0.978 545
0.957 143	0.977 387	0.980 952	0.978 502
0.985 714	0.977 399	0.933 333	0.958 427
0.971 429	0.977 438	0.980 952	0.978 445
0.928 572	0.937 406	0.933 333	0.946 400
0.980 952	0.977 400	0.947 619	0.948 185
0.985 711	0.977 243	0.947 619	0.958 693
0.976 191	0.977 276	0.923 810	0.938 826
0.947 619	0.967 382	0.933 333	0.949 192
0.942 857	0.977 272	0.952 381	0.978 632
0.947 619	0.957 559	0.947 619	0.948 535
0.933 333	0.928 312	0.933 333	0.938 682
0.928 572	0.938 164		

习训练(迭代次数为 500 次), 从而得到该复杂对象的神经网络模型, 再利用该模型对 Y₂ 与 Y₁₀ 的 27 批样本进行测试。测试结果见表 1, 表 2 与图 2, 图 3。可见, 结果是令人满意的。

表 2 归一化后的 Y₁₀ 值

测量值	预测值	测量值	预测值
0.978 495	0.978 350	0.989 247	0.976 386
0.978 495	0.976 933	0.913 979	0.927 624
1.000 000	0.976 945	0.978 495	0.977 331
0.989 247	0.976 933	0.978 495	0.976 722
0.956 989	0.966 911	0.978 495	0.976 862
0.967 742	0.976 797	0.913 979	0.923 416
0.956 989	0.946 787	0.946 237	0.936 516
0.946 237	0.966 293	0.924 731	0.937 591
0.924 731	0.936 445	0.913 979	0.927 369
0.913 979	0.926 496	0.946 237	0.957 858
0.924 731	0.936 114	0.903 226	0.927 537
0.935 484	0.939 190	0.967 742	0.977 265
0.989 247	0.979 416	0.935 484	0.947 433
1.000 000	0.976 563		

η 初值: 0.02; ρ 初值: 0.35; 误差限: 0.001。

4 网络模型的在线滚动修正

实践证明, 上述神经网络模型长期在线运行所得的磷酸羟胺离子浓度与 pH 值的在线估计值, 并不能始终令人满意。因为该过程是一个十分复杂的

化工过程,操作条件变化大,催化剂活性也有变化,故需对网络模型进行适时的滚动修正。

其方法有两种:

1) 人工介入调整模型: 根据对 Y_2 与 Y_{10} 在线预估的误差情况,人为使计算机停止对 Y_2 和 Y_{10} 的在线估计,转入对该网络模型的重新学习训练,从而获得符合新的操作条件与触媒活性的网络模型,并用以在线估计 Y_2 与 Y_{10} 。

2) 自动调整网络模型: 根据对 Y_2 与 Y_{10} 的在线估计误差情况或依据现场经验定时地自动切入,并对网络重新学习训练。采用这种在线滚动修正的方法,可适应工况的变化,从而使 Y_2 和 Y_{10} 的在线估计能够始终令人满意。

5 结 语

采用上述神经网络智能处理方法对复杂 MIMO 化工系统进行参数的预估与优化,是一项很有意义的工作。目前,基于这种算法的软件包已集成于工厂的生产工艺优化系统,并作为操作人员的开环指导。本文的工作只是初步的,一些改进算法也正在探讨之中,如“自适应 Elman 网的状态预估与优化”方法已开发出来。根据该算法对系统训练的经验,现做以下几点说明:

1) 对训练学习的样本数据,其分布要合理,应选所有相关性较大的参数作为网络学习的输入参数。这一工作需与现场工作师密切配合,是在线估计成功与否的关键之一。

2) 该化工过程是一个连续过程,故要求样本数据具有连续性,且各组数据之间的时间跨度不宜太大,以免工况与触媒活性出现大幅度变化。

3) 对隐层的层数,作者首先考虑选择一个隐层,并在能正确反映输入输出关系的原則下,尽量选择较小的隐层结点数。我们采用的是使隐结点数在一定范围内按递增方式离线自动搜索,从而获得较好的隐结点数。

4) 对隐节点数太多的情况,可考虑选择两个隐

层。为了达到相同映射关系,采用两个隐层的结点数常比只用一个隐层要少。

5) 对于对角递归神经网络中隐层自反馈系数 α_i ,也应进行搜索计算。

6) 在对磷酸羟胺的离子浓度与 pH 值在线预估的基础上,可进一步得到有关触媒活性、羟胺效率与选择性的在线预估值,进而开发对该工序的优化操作。

参 考 文 献

- 1 己内酰胺生产与应用编写组. 己内酰胺生产与应用. 北京: 轻工业出版社, 1988. 118—125
- 2 Ku C C, Lee K Y. Diagonal recurrent neural networks for dynamic systems control. IEEE Trans on NN, 1993, 6(1): 144_ 156
- 3 孙增圻, 张再兴, 邓志东. 智能控制理论与技术. 北京: 清华大学出版社, 1997. 135—138
- 4 陆系群, 余莫林. 前馈神经网络隐层节点的动态删除法控制理论与应用, 1997, 14(1): 101—104
- 5 罗小强, 王仁华. 学习常数自适应的反向传播算法. 见: 中国神经网络首届学术大会论文集, 上册. 北京: 1990. 60—65
- 6 杜坚, 何永保. 动态批处理方式加速BP网络的收敛性. 见: 中国神经网络首届学术大会论文集, 上册. 北京: 1990. 263—269
- 7 茆诗松. 回归分析及实验设计. 上海: 华东师范大学出版社, 1981. 74—101

作 者 简 介

赵英凯 男, 1945年生。1967年毕业于南京大学物理系, 现为南京化工大学自动化及计算机系教授。研究领域为现代控制理论与智能控制技术在工业过程控制中的应用。

蔡宁 男, 1968年生。1990年于南京化工学院过程自动化专业获学士学位, 现为南京东方化工有限公司计算机中心主任。研究方向为DCS高级控制算法。

熊辉 男, 1974年生。1997年于南京化工大学自动化系获学士学位, 现为该校自动化及计算机系硕士生。研究方向为工业过程的建模、控制与优化。