

文章编号: 1001-0920(2011)04-0629-04

基于矢量基学习的浸出过程在线建模

胡广浩^a, 毛志忠^{a,b}, 何大阔^{a,b}

(东北大学 a. 信息科学与工程学院, b. 流程工业综合自动化教育部重点实验室, 沈阳 110819)

摘要: 传统的支持向量回归算法因基于批量训练方法而无法适应浸出过程在线建模实时性的要求. 在分析研究一种基于矢量基学习的支持向量回归算法的基础上, 提出了基于矢量基学习的浸出过程在线建模方法. 利用贝叶斯证据框架优化模型参数, 分析新样本矢量与矢量空间的夹角, 从而推导出该样本是否为基矢量. 将该方法应用于浸出过程浸出率的预测, 实验结果表明, 该方法不但能很好地跟踪浸出率的变化趋势, 而且显著地缩短了运算时间.

关键词: 支持向量回归; 矢量基; 在线建模; 浸出过程

中图分类号: TP301.6; TF803.21

文献标识码: A

Online modeling method for leaching process based on vector base learning

HU Guang-hao^a, MAO Zhi-zhong^{a,b}, HE Da-kuo^{a,b}

(a. College of Information Science and Engineering, b. Key Laboratory of Integrated Automation of Process Industry of Ministry of Education, Northeastern University, Shenyang 110819, China. Correspondent: HU Guang-hao, E-mail: guanghao5566@126.com)

Abstract: Traditional support vector regression(SVR) algorithm based on batch training can't satisfy the real-time requirement of online modeling for leaching process. Therefore, with the analysis of a support vector regression algorithm based on the vector base learning, an online modeling method for leaching process is proposed. Bayesian evidence framework is used to optimize the model parameters. By calculating the angle between the new sample vector and the vector space, the criteria for determining whether the measurement vector is one of the BVS is derived. The method is adopted in the prediction of leaching rate, and tested by experiment. The experiment result shows that the proposed method can track the trend of the leaching rate, and reduce the operation time effectively.

Key words: support vector regression; vector base; online modeling; leaching process

1 引言

近代工业湿法冶金浸出工艺诞生于上世纪 70 年代^[1]. 近年来, 随着高品位矿石的逐渐减少, 以及人们对环保意识的增强, 湿法冶金工业及其浸出过程已开始受到一定的关注^[2-4]. 浸出过程为间歇性非稳态操作, 其动态和非线性特性较连续过程更为显著; 浸出过程的很多重要变量通常无法在线测量, 且没有准确的机理模型可利用. 因此, 研究如何及时获得生产过程的状态信息/模型, 对保障浸出生产的产品质量, 以及进一步对其实施先进控制和操作优化均具有重要意义. 神经网络(NN)和主元回归等都曾用于间歇过程的建模^[5-6], 然而并不能很好地满足实际生产的需

求, 并且这些建模方式均为离线建模, 所建立数学模型的鲁棒性较差. 支持向量回归机(SVR)由于采用了结构风险最小化原则, 避免了 NN 存在的几大问题, 具有更好的推广性能^[7].

针对常规 SVR 用于在线建模时存在的问题, 受文献[8]的启发, 本文在支持向量机稀疏解算法-矢量基学习算法(VBL)基础上, 提出一种基于 VBL 的在线支持向量回归机(OL-VBL-SVR)的浸出过程建模方法, 通过判别新样本是否可由该矢量空间近似表示来决定新数据是否冗余. 如果新数据是支撑数据, 则修正模型本身, 以提高模型的实时性和鲁棒性. 将所提出的方法用于浸出过程对浸出率预测的问题, 取得

收稿日期: 2010-03-31; 修回日期: 2010-06-08.

基金项目: 国家 863 计划项目(2006AA060201).

作者简介: 胡广浩(1983-), 男, 博士生, 从事工业过程建模与优化的研究; 毛志忠(1961-), 男, 教授, 博士生导师, 从事复杂过程建模与优化等研究.

了满意的效果。

2 支持向量回归机

2.1 算法简介

尽管最早 SVR 的提出是针对分类问题的,但是通过引入损失函数的概念可以推广到函数回归的问题上,这为解决一些非线性建模问题提供了一种新的思路,而且随着对支持向量机研究的深入,利用其进行建模的优势越来越明显,尤其是在小样本、非线性、高维数、局部极小点等实际系统建模领域。

对于一个非线性回归问题, SVM 的数学描述为:假设给定拟合数据 (x_i, y_i) , $i = 1, 2, \dots, n$, $x \in R^d$, $y \in R$, 所求函数具有如下形式:

$$f(x) = \sum_{i=1}^n (a_i - a_i^*) K(x_i, x) + b. \quad (1)$$

其中: a_i, a_i^* 为 Lagrange 乘子; $K(x_i, x_j)$ 为核函数矩阵; b 为偏置值. a_i, a_i^* 可通过求解如下对偶优化问题得到:

$$\begin{aligned} \max L(a, a^*) = & \\ -\varepsilon \sum_{i=1}^n (a_i + a_i^*) + \sum_{i=1}^n y_i (a_i - a_i^*) - & \\ \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n (a_i - a_i^*) (a_j - a_j^*) (x_i, x_j); & \quad (2) \\ \text{s.t. } \sum_{i=1}^n (a_i - a_i^*) = 0, & \\ 0 \leq a_i, a_i^* \leq c, i = 1, 2, \dots, n. & \quad (3) \end{aligned}$$

其中: ε 为松弛因子, c 为平衡因子, $(a_i - a_i^*) \neq 0$ 所对应的 x_i 为支持向量. b 可通过 KKT (Karush-Kuhn-Tucker) 条件计算。

2.2 应用常规 SVR 在线建模存在的问题

实际过程中,系统工作域的迁移往往使得离线数据样本所建立的模型并不能准确描述系统的实际状况.为使模型能够准确反映系统的当前状态,应不断利用所获得的最新数据建立新模型.然而常规的 SVR 学习算法并不直接支持增量式学习,当有新样本加入时,往往抛弃历史的训练结果,直接将新样本加进来重新开始训练.这种方法抛弃了历史的训练结果,增加了不必要的计算量,在新增样本很大的情况下训练速度非常慢.本文在对新增样本进行分析的基础上,提出一种新的 SVR 在线建模方法。

3 在线 SVR 建模

3.1 矢量基

3.1.1 矢量基理论^[8]

定义 1 设存在一组矢量 v_i , $i = 1, 2, \dots, l$, $l \leq$

n , 其高维空间映射为 $\psi(v_i)$, 这些矢量的线性组合为

$$\omega = \delta(\psi^T(v_1), \dots, \psi^T(v_l)). \quad (4)$$

如果 ω 线性无关, 则称矢量 v_i 为基矢量 (BV).

定义 2 由基矢量 $v_i (i = 1, 2, \dots, l, l \leq n)$ 组成的集合, 称为基矢量集 (BVS).

定义 3 在 SVR 建模中, 由支持向量基矢量集张成的子空间称为该模型的矢量空间。

定理 1 已知支持向量回归模型由一组基矢量样本 $(v_1, y_1), \dots, (v_l, y_l)$ 构成, 如果这些基矢量集的映射 $\psi(v_i) (i = 1, 2, \dots, l)$ 张成的矢量空间为 $\Gamma = (\lambda_1, \dots, \lambda_l)(\psi(v_1), \dots, \psi(v_l))^T$, 则对于一个新样本 $\psi(x_{n+1}) (l \leq n)$, 该样本与 Γ 的夹角 θ 可表示为

$$\theta = \arcsin(\sqrt{\sigma_{\text{Lid}}/h_{n+1}}). \quad (5)$$

其中

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{Lid}} &= h_{n+1} - H_{n+1}^T H_l^{-1} H_{n+1}, \\ h_{n+1} &= K(x_{n+1}, x_{n+l}), H_l = K(v_i, v_j), \\ H_{n+1} &= K(x_{n+1}, v_i), i, j = 1, 2, \dots, l. \end{aligned}$$

定理 2 如果 $\sigma_{\text{Lid}} \geq h_{n+1} \sin^2 \theta$, 则新样本不可以由 BV 近似线性表示。

3.1.2 基于 VBL 算法的新增样本训练分析

引入新的样本, 根据定理 2, 如果 $\sigma_{\text{Lid}} \geq h_{n+1} \times \sin^2 \theta$, 则新样本不可以由 BV 近似线性表示, 应将该样本引入 BVS; 反之, 则不引入。

由此可知, 新增样本中只有符合 $\sigma_{\text{Lid}} \geq h_{n+1} \times \sin^2 \theta$ 条件的样本才可能包含新的信息. 因此, 算法可首先检验其是否符合 $\sigma_{\text{Lid}} \geq h_{n+1} \sin^2 \theta$ 的条件. 如果不符合, 则说明新增样本中所包含的信息在原支持向量机中都有, 因而不需要重新对新增样本进行学习; 反之, 则说明新增样本中包含原支持向量机所没有的新信息, 此时需要对新增样本重新学习. 因此, 该方法能有效限制在线建模的样本数量, 避免重复训练。

3.2 参数的自适应调整

大量经验表明, 高斯核函数具有良好的学习能力, 因此本文选择如下高斯核函数:

$$K(x, x_i) = \exp(-|x - x_i|^2 / 2\sigma^2), \quad (6)$$

其中 σ 为核参数. 在 SVR 中, 平衡因子 c 和核参数 σ 是非常重要的参数, 本文采用 Mackay 提出的贝叶斯证据框架来自适应调整支持向量机的参数^[9]. 其基本思想是最大化参数分布的后验, 而最佳参数值是在参数分布后验最大化的情况下得到的. 贝叶斯证据框架在支持向量机中的应用分为 3 个准则的推断: 准则 1 可以推断参数 a_i 和 b ; 准则 2 可估计正则化参数 c ; 准则 3 可估计核参数 σ .

3.3 基于 OL-VBL-SVR 算法的在线建模流程

将 OL-VBL-SVR 算法应用于浸出过程在线建模, 其算法流程如图 1 所示.

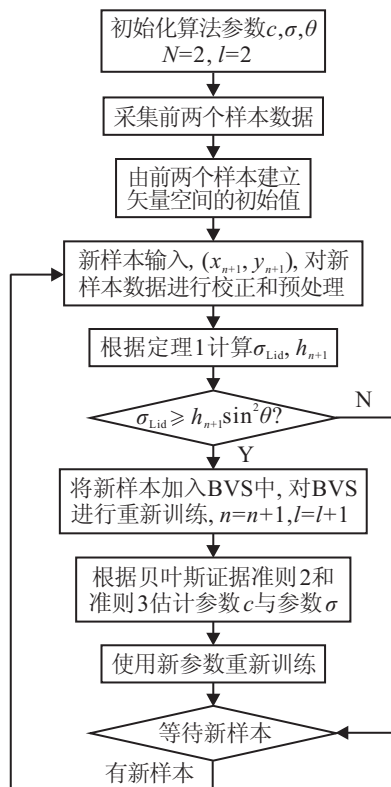


图 1 OL-VBL-SVR 算法流程图

4 基于 OL-VBL-SVR 算法的浸出过程在线建模

4.1 浸出过程

浸出过程是指用化学试剂将矿石或精矿中的有用组分转化为可溶性化合物, 得到含金属的溶液, 实现有用组分与杂质组分的分离过程. 本文以某湿法冶炼厂为背景, 主要生产钴的化合物, 浸出过程采用常压加热搅拌的方式, 可以在线检测温度、二氧化硫流量及硫酸流量, 离线检测浸出率. 整个过程为间歇式浸出, 在反应过程中, 矿与硫酸、二氧化硫反应生成硫酸盐.

预测系统在某工厂实现. 整个系统包括上位机, PLC 和现场传感变送等部分. 浸出过程检测系统主要由二氧化硫流量检测、硫酸流量检测和温度检测构

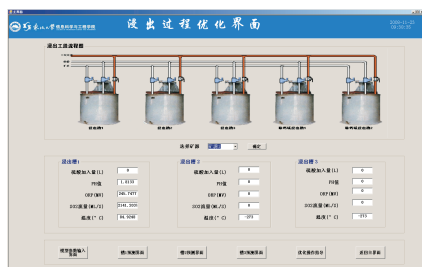


图 2 浸出过程预测系统主界面

成. 整个系统运行在 Core 2 DELL 计算机上, Window XP 操作系统, 采用 C#.net 软件实现界面功能. 浸出过程预测系统主界面 (监控界面) 如图 2 所示.

4.2 应用结果及讨论

浸出的整个生产过程用时为 6 h, 上位机每 3 min 读取 1 次检测数据, 实验人员每 30 min 采集矿渣进行化验, 计算其对应的浸出率; 之后计算该时间段内检测测量的均值, 并以此作为该时间段内的检测值. 采用预测控制算法建立如下模型来预测未来 P 步的浸出率:

$$\hat{y}(k+P) = f(x|_k) = f(y(k-1), u(k-1), u(k), u(k+1), \dots, u(k+P-1)). \quad (7)$$

其中: $u = [u_1, u_2, u_3]$, u_1 为施加的温度值, u_2 为硫酸流量, u_3 为二氧化硫流量, $u(k)$ 为 k 时刻 u_1, u_2, u_3 的施加值; $y(j)$ 为在第 j 步时的实际浸出率; P 为建模的关键参数. P 值增大, 会增加模型的复杂度; P 值减小, 虽然能增加模型的动态响应速度, 但却降低了模型的稳定性和鲁棒性. 考虑到本过程采样点较少 (12 个), P 不宜选择过大, 故取 $P = 1$.

初始化算法的参数: $\varepsilon = 0.0126, c = 103, \sigma = 5.3, \theta = 15, P = 1$. 为更好地说明 OL-VBL-SVR 算法的性能, 将本文算法与传统的在线 SVR (OL-SVR) 算法进行比较. 图 3, 图 4 分别为第 5, 第 20 批次的预测结果. 图 5 为两种算法训练时间的比较. 表 1 列出了两种算法的均方根误差 (RMSE) 及最大误差 (MAXE).

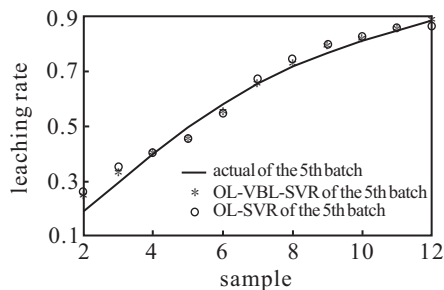


图 3 第 5 批次的预测结果

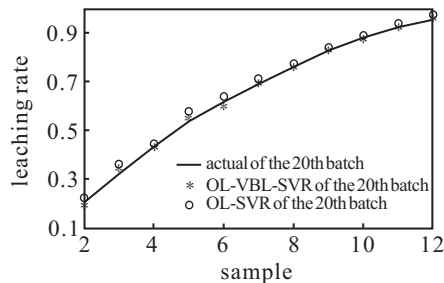


图 4 第 20 批次的预测结果

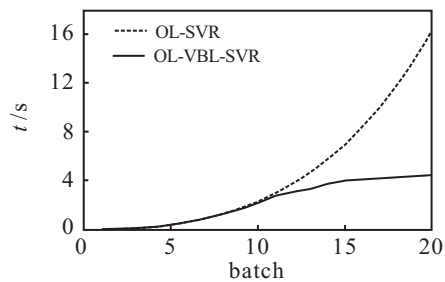


图5 两种算法的训练时间

表1 两种方法的比较

批次	指标	OL-SVR	OL-VBL-SVR
batch 2	RMSE	0.0699	0.0699
	MAXE	0.1133	0.1133
batch 5	RMSE	0.0304	0.0229
	MAXE	0.0617	0.0446
batch 13	RMSE	0.0253	0.0174
	MAXE	0.0339	0.0206
batch 20	RMSE	0.0284	0.0149
	MAXE	0.0321	0.0116

从图3,图4可以看出,随着批次样本数目的增加,从第5批次到第20批次的预测结果逐渐变好.由于前几个批次的样本基本上都被放入基矢量集中,两种算法的预测效果相差不多;随着新样本的不断加入,OL-VBL-SVR算法的预测优势逐渐显现出来,每个批次的预测结果都好于OL-SVR算法.

从图5可以看出,OL-SVR算法的计算时间呈指数增长;在大约第10批次后,由于受到定理2的限制,基矢量集的样本数量不再继续大规模增加,OL-VBL-SVR算法的计算时间增加的趋势开始逐渐放缓,并趋于平稳,因此OL-VBL-SVR算法非常适合在线建模.

由表1和图5可以看出,浸出过程在应用OL-VBL-SVR算法进行在线建模后,不仅提高了预测精度,而且缩短了建模时间,真正实现了实时建模和实时预测.

5 结论

通过分析在线建模时遇到的问题,本文将矢量基学习SVR算法应用于在线建模中.所提出的算法通过判断新样本是否为基矢量来决定是否将新样本加

入训练集中;随着数据的不断更新,算法根据贝叶斯证据不断优化模型参数,使算法具有自适应性.该方法被应用于浸出过程在线建模,预测结果表明,该方法预测精度很高,计算时间短,是在线建模的一种有效方法.

参考文献(References)

- [1] 马荣骏.湿法冶金新发展[J].湿法冶金,2007,26(1):1-12.
(Ma R J. New development of hydrometallurgy[J]. Hydrometallurgy of China, 2007, 26(1): 1-12.)
- [2] Breed A W, Hansford G S. Modeling continuous bioleach reactors[J]. Biotechnology and Bioengineering, 1999, 64(6): 671-677.
- [3] Veglio F, Trifoni M, Toro L. Leaching of manganiferous ores by glucose in a sulfuric acid solution: Kinetic modeling and related statistical analysis[J]. American Chemical Society, 2001, 40(18): 3895-3901.
- [4] Crundwell F K. Modeling, simulation, and optimization of bacterial leaching reactors[J]. Biotechnology and Bioengineering, 2000, 71(4): 255-265.
- [5] Bakshi B R, Locher G, Stephanopoulos G. Analysis of operating data for evaluation, diagnosis, and control of batch operations[J]. J of Process Control, 1994, 4(4): 179-194.
- [6] Warnes M R, Glassey J, Montague G A, et al. On data-based modelling techniques for fermentation processes[J]. Process Biochemistry, 1996, 31(2): 147-155.
- [7] Vapnik V N. The nature of statistical learning theory[M]. New York: Springer, 1995: 20-41.
- [8] 陈爱军,宋执环,李平.基于矢量基学习的最小二乘支持向量机建模[J].控制理论与应用,2007,24(1):1-5.
(Chen A J, Song Z H, Li P. Modeling method of least squares support vector regression based on vector base learning[J]. Control Theory & Applications, 2007, 24(1): 1-5.)
- [9] Mackay D J C. Probable network and plausible predictions - A review of practical Bayesian methods for supervised neural networks[J]. Network: Computation in Neural Systems, 1995, 6(3): 469-505.