第 27 卷第 2 期 2010 年 4 月

文章编号:1005-0523(2010)02-0063-05

混合核函数支持向量机在系统建模中的应用

陆荣秀

(华东交通大学 电气与电子工程学院 江西 南昌 330013)

稀土产品纯度是稀土萃取分离过程中的关键参数,它直接关系到产品的质量,而要确保稀土萃取过程 两端出口产品的纯度,必须实现在线检测和控制检测点处稀土元素组分含量。稀土萃取过程由于稀土元 素间的化学性质相似,相互间分离系数较小,使得工业上普遍采用的萃取分离过程具有多变量、强耦合、强 非线性、时变及大滞后等特点,元素的组分含量难以在线检测。目前实现对稀土萃取分离过程组分含量在 线分析装置普遍投资大、结构复杂、系统连续运行可靠性不高、维护保养困难,且存在测量滞后^[1]等缺点, 难以满足稀土萃取过程组分含量在线检测的要求。由于软测量技术具有精确、可靠、经济和动态响应迅速 等特点,已成为解决稀土萃取过程组分含量在线估计的新途径^[2-3]。文献[4]将基于递阶遗传算法的 RBF 神经网络软测量方法用于稀土萃取分离过程元素组分含量的研究。文献[5]和文献[6]分别采用支 持向量机(Support Vector Machine SVM)和最小二乘 SVM 方法对稀土萃取分离过程组分含量进行软测量 建模研究。本文采用一种基于混合核函数的 SVM 建模方法,综合了典型的全局核函数(Polynomial 函数) SVM 和局部核函数(RBF函数) SVM 各自的优势,通过某公司稀土萃取分离过程的仿真实验研究,证明该 方法能较好地解决稀土萃取过程组分含量软测量建模问题。

1 稀土萃取分离过程简介

稀土萃取分离是将混合稀土溶液进行分离、富集、提取,得到所需纯度和收率的稀土产品。图1 是稀 土萃取分离生产流程图,自左至右依次为由 n 级混合澄清槽构成的萃取段和 m 级混合澄清槽构成的洗涤 段。图中 A 为易萃取组分 B 为难萃取组分 x_1 为稀土料液流量 x_2 为萃取剂流量 x_3 为洗涤剂流量 x_4 x_5 分别 为料液中组分 A B 的配分($x_4 + x_5 = 1$)。 y_B 为水相出口产品 B 的纯度 y_A 为有机相出口产品 A 的纯度 y_{B_k} , y_{A_k} 分别为萃取段工艺控制监测点水相中 B 组分含量和洗涤段工艺控制监测点有机相中 A 组分含量。

在分离过程中,由于稀土原料组分多,各组成元素变化大,元素间分离系数小,因此稀土萃取分离流程级数多(通常为几十到上百级)影响分离效果的因素多,萃取分离过程机理复杂。萃取液、洗涤液或料液流量等控制变量的调节作用通常要经过数小时甚至几十小时的逐级传递才能影响到两端出口产品纯度,为此在萃取过程两端出口附近设置过程监测点,通过监测和控制监测点处稀土组分含量(y_{B_k}, y_{A_k})以确保两端出口产品纯度(y_{B_k}, y_{A_k})。

收稿日期:2009-11-13

基金项目: 国家自然科学基金项目(60864004); 江西省教育厅科学技术研究项目(GJJ10137); 华东交通大学科学技术 研究项目(09DQ07)

作者简介: 陆荣秀(1976-) ,女 ,硕士 ,讲师 ,研究方向为工业过程建模与优化控制。

华东交通大学学报



图 1 稀土萃取分离生产流程图

2 SVM 建模

给定 n 个数据{ $x_i \in y_i$ } $i = 1, 2, \dots, n, x_i \in R^d \in R$,在精度误差 ε 的控制下 SVM 可以用式(1) 来拟和 这些数据,并对未知函数进行估计。

$$y(x) = w \cdot \phi(x) + b \tag{1}$$

2010年

式中非线性函数 $\phi(\cdot): R^n \rightarrow R$ 将输入空间映射为高维特征空间。 根据结构风险最小化(Structural Risk Minimization SRM) 原则 SVM 可以定义如下的凸二次优化问题:

$$\min \frac{1}{2} \|w\|^2 + C\sum_{i=1}^n (\xi_i + \xi_i^*)$$
(2)

s. t.
$$\begin{cases} y_i - w \cdot x_i - b \leq \varepsilon + \xi_i \\ w \cdot x_i + b - y_i \leq \varepsilon + \xi_i \\ \xi_i \xi_i^* \ge 0 \end{cases}$$
(3)

式中: $\xi_i \xi_i^*$ 是为了处理函数 $y \in \varepsilon$ 精度不能估计的数据而引入的松弛变量; *C* 是惩罚因子 , *C* 越大表示对 超出误差的样本的惩罚力度越强。

采用拉格朗日乘子法求解此二次优化问题 根据 KKT 条件 得到对偶优化问题为

$$\max_{\alpha \, \alpha^{*}} \left\{ W(\alpha \, \alpha^{*}) = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} (\alpha_{i} - \alpha_{i}^{*}) (\alpha_{j} - \alpha_{j}^{*}) K(x_{i} \, x_{j}) (-\varepsilon \sum_{i=1}^{n} (\alpha_{i} + \alpha_{i}^{*}) + \sum_{i=1}^{n} \gamma_{i} (\alpha_{i} - \alpha_{i}^{*}) - (4) \right\}$$

$$t. \quad \begin{cases} \sum_{i=1}^{i} (\alpha_i - \alpha_i) = 0 \\ 0 \leq \alpha_i^* \quad \alpha_i \leq C \qquad i = 1 \ 2 \ \cdots \ n \end{cases}$$
(5)

解带有式(5)约束的式(4)得到拉格朗日乘子 $\alpha \alpha^*$ 则

s

$$w = \sum_{i=1}^{n} (\alpha - \alpha^{*}) x_{i}$$

$$b = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} [(\alpha - \alpha^{*}) (K(x | x_{i}) + K(x_{i} | x))]$$
(6)

代入式(1)即可得到拟合函数。式中 $K(x_i, x_j) = \phi(x_i) \cdot \phi(x_j)$ 是满足 Mercer 条件的核函数。

3 混合核函数

核函数的选取在很大程度上影响着 SVM 模型的拟合性能和预测(泛化)性能。核函数用内积运算代 替高维特征空间的复杂运算,其计算量与特征空间的维数无关,避免了高维特征空间计算带来的"维数灾 难";通过调节不同的核参数,可以隐式地改变特征空间的 VC 维,从而决定线性分类面能达到的最小经验 误差^[7]。

Polynomial 核函数和 RBF 核函数是两种典型的全局核函数和局部核函数,分别如下

Polynomial 核函数:
$$k(x x_i) = [(x \cdot x_i) + c]^q$$
 (7)

RBF 核函数:
$$k(x x_i) = \exp(-|x - x_i|^2/2\sigma^2)$$
 (8)

将两类核函数混合起来。其形如

64

第2期

$$k_{\rm mix} = \rho k_{\rm poly} + (1 - \rho) k_{\rm rbf}$$
⁽⁹⁾

其中: k_{rely} , k_{rel} 分别为 Polynomial 核函数和 RBF 核函数; 系数 $\rho(\rho \in (0, 1))$ 为混合权重因子,可以调节两种 核函数的作用大小。

4 混合核函数 SVM 的建模仿真分析

4.1 混合核函数 SVM 的稀土萃取过程软测量建模

某稀土公司需从含 Y,O, >40% 的离子型稀土矿中分离提取钇。根据萃取生产过程工艺控制要求 ,为 了确保两端出口产品纯度目标要求 确定输出变量 γ为萃取段某级的工艺控制监测点 输入变量为与组分 含量关系密切且容易测量的参数: 有机溶剂流量 x1、水相料液流量 x2、水相洗涤液流量 x3和料液组分 x4, 它们存在如下关系:

$$y = f\{x_1 \ x_2 \ x_3 \ x_4 \ \omega\}$$
(10)

式中: $f(\cdot)$ 表示输入、输出间复杂的难以用数学解析式描述的非线性函数; ω 表示萃取剂浓度、料液浓度 和洗涤液酸度波动、温度变化等因素对组分含量的影响。

从该稀土公司的萃取过程采集 150 组数据 并对其进行归一化处理和标准化处理 将经过处理的数据 表示为 $\{x_{i}\} = \{x_{1i}, x_{2i}, x_{3i}, x_{4i}, y_i\}$ $i = 1, 2, \dots, 150, x \in \mathbb{R}^4$ $y \in \mathbb{R}$,并将其分成两部分,前 100 组数据作为 建模所需的训练样本集 后 50 组数据作为测试样本集。

1.0

0.9

0.8

调节 SVM 系统参数: $q = 4 \epsilon = 0.0125 c = 50$, $\rho = 0.95$ 。分别采用 Polynomial 核函数、RBF 核函数 及混合核函数建模,得出稀土萃取过程组分含量的 拟合输出和预测输出曲线如图 2 所示 表 1 给出了 相应的误差比较情况,其中 RMSE 是均方根误差, SSE 是误差平方和。

图 2(a) 是单独采用 Polynomial 核函数的模型输 出 拟合精度较低 但预测输出较平稳: (b) 是单独采 用 RBF 核函数的模型输出 拟合效果相对较好但预 测输出的波动太大 (c) 采用混合核函数的模型输 出,有较好的拟合效果而且预测效果也相对较满意, 这由表1的性能参数也可看出,而且各模型运行所 需时间相隔不大。





图 2 不同核函数 SVM 模型的拟合及预测输出曲线

150

66	
----	--

华东交通大学学报

2010 年

农工 不同核菌数 5 m 建铁时候差比较								
核函数	核参 数值	运行 时间	拟合误差		预测误差			
			RMSE	SSE	RMSE	SSE		
Polynomial 核函数	q = 4	2.5 s	0.032 2	0.104 0	0.028 9	0.041 8		
RBF 核函数	σ = 0. 2	2.8 s	0.023 6	0.0559	0.0510	0.1303		
混合 核函数	q = 4 $\sigma = 0.2$ $\rho = 0.95$	2.9 s	0.017 1	0.029 5	0.012 1	0.007 3		

€1 不同核函数 SVM 建模的误差比较

4.2 ρ 值的调节作用

在混合核函数公式中 ρ 值大小可以调节两个核函数的作用大小。当核参数 $q \sigma$ 固定不变 ,调节 ρ 值 大小时软测量模型的性能参数如表 2 所示。

<i>ρ</i> 值	拟合	误差	预测误差		
	RMSE	SSE	RMSE	SSE	
0.95	0.017 1	0.029 5	0.012 1	0.007 3	
0.8	0.015 5	0.025 4	0.013 8	0.016 1	
0.5	0.013 0	0.019 4	0.015 2	0.020 9	
0.3	0.011 9	0.014 4	0.017 6	0.030 2	

表 2 ρ 值变化时模型的输出误差比较

由表 2 可知,当ρ值由 0.95逐渐降低时 SVM 的拟合误差减小,预测误差增大,反映了 RBF 核函数作 用增强, Polynomial 核函数作用减弱的特性。从表 2 还可看出,系统加入 Polynomial 核函数,即使ρ值选取 较小,系统的预测输出仍然较平稳,预测误差较单独采用 RBF 核函数小得多,体现了 Polynomial 核函数对 输出波动良好的抑制作用。这说明采用混合核函数建立稀土萃取过程组分含量软测量模型的性能,要好 于单纯采用全局和局部核函数建立模型的性能。对参数ρ的调节过程,可以理解为调节混合核函数的特 性,使其更能适应特定过程的数据分布,相当于将过程的一些先验知识融入到参数调节中^[8]。

5 结论

针对稀土萃取分离过程的特点 将混合核函数 SVM 应用于稀土萃取过程组分含量软测量建模研究, 并与单纯全局核函数和单纯局部核函数的建模性能做了比较,结果表明:混合核函数 SVM 可用于稀土萃 取过程组分含量的在线预估和控制。同时,对于稀土萃取过程操作参数优化,提高企业生产效益具有一定 的指导意义。

参考文献:

[1] 徐光宪. 稀土: 上册 [M]. 2 版. 北京: 冶金工业出版社 ,1995.

- [2] CHAI T Y ,YANG H. Situation and developing trend of rare earth countercurrent extraction processes control [J]. Journal of Rare Earth 2004 22(5):590 – 596.
- [3] YANG HUI ,TAN MINGHAO ,CHAI TIANYOU. Neural networks based component content soft sensor in countercurrent Rare – earth extraction [J]. Journal of Rare Earth 2003 21(6):691 – 696.
- [4] 许勇刚 杨辉. 基于 RBF 网络的稀土萃取过程组分含量软测量方法 [J]. 稀土 2007 28(5): 19-22.
- [5] 陆荣秀. 基于支持向量机的稀土萃取过程建模方法 [J]. 华东交通大学学报 2008 25(1):123-126.
- [6] 向峥嵘,刘松青.基于 LS SVM 的稀土萃取组分含量软测量 [J]. 中国稀土学报 2009 27(1):132 136.
- [7] SMOLA A J. Learning with kernels [D]. Belin: Informatikder Technishen Universitat ,1998.
- [8] 王华忠,俞金寿. 基于混合核函数 PCR 方法的工业过程软测量建模 [J]. 化工自动化及仪表 2005 32(2):23-25

Lu Rongxiu

(School of Electrical and Electronic Engineering East China Jiaotong University Nanchang 330013 China)

Abstract: Mixed kernel function which has the characteristics of both local and global kernel function can adjust its role through the weight factor to achieve a good synthesized identification effect. Aiming at the problem of real – time online measurement of the component content in rare earth counter – current extracting and separating process the algorithm of SVM based on mixed kernel function is applied. The results of application indicate that the method based on mixed kernel function has both better fitting accuracy and satisfactory prediction effect , which can meet the online pre – estimating demands of component content in the rare – earth extracting process. **Key words**: rare – earth extraction; mixed kernel function; SVM; modeling

(责任编辑 刘棉玲)

(上接第56页)

[6] 宁滨. 轨道交通系统中的列车运行追踪模型及交通流特性研究 [D]. 北京: 北京交通大学 2005.

[7] 周华亮 高自友 李克平. 准移动闭塞系统的元胞自动机模型及列车延误传播规律的研究 [J]. 物理学报 2006 55(4): 1 706 – 1 710.

Simulation Development of Traffic Flow NaSch Model Based on OriginPro

Hu Hui

(1. Research Center of Enterprise Information ,School of Economics and Management ,East China Jiaotong University ,Nanchang , 330013 ,China; 2. Key Laboratory of Rail Traffic Control and Safety ,Beijing Jiaotong University ,Beijing ,100044 ,China)

Abstract: On the basis of analyzing Origin C language system and OriginPro assistant development tools ,NaSch model which is a classical one in the traffic flow models is secondarily developed. The main class of the model is designed using Origin C ,while the input dialog and output functions are built in OriginPro. Finally ,the two main simulation results including flow – density diagram and time – space diagram are implemented. Orientation of d further study is pointed out.

Key words: Origin C; OriginPro; NaSch model; simulation development

(责任编辑 刘棉玲)