

文章编号: 1005-0523(2008)01-0123-04

基于支持向量机的稀土萃取过程建模方法

陆荣秀

(华东交通大学 电气与电子工程学院 江西 南昌 330013)

摘要: 支持向量机算法用于软测量建模能较好地解决小样本、非线性、高维数、局部极值等问题。本文针对稀土萃取过程组分含量在线检测的难题,将具有径向基(RBF)核函数的支持向量机算法应用于稀土萃取过程组分含量软测量建模,并讨论了模型参数的选择及其对模型的影响。通过某稀土公司生产过程实际采集数据的仿真试验,结果表明基于支持向量机算法的组分含量软测量模型具有较高的泛化能力和较快的预测速度,是实现稀土萃取过程组分含量软测量的一种有效方法。

关键词: 支持向量机; 软测量; 稀土萃取

中图分类号: TP273

文献标识码: A

0 引言

稀土萃取过程是一个具有多变量、强耦合、强非线性、时变及大滞后等特点的生产过程,要实现稀土萃取过程控制首先必须解决萃取过程中稀土元素组分含量的在线检测。目前实现对稀土萃取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^[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^[4]尝试了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。本文采用一种基于支持向量机(Support Vector Machine, 简记SVM)算法的建模方法,对稀土萃取过程组分含量进行软测量建模。通过对某公司稀土萃取生产过程现场采集数据进行仿真实验研究,结果表明该方法具有很好的拟合精度和预测效果,能较好地解决稀土萃取过程组分含量软测量建模问题。

1 支持向量机建模方法

支持向量机是上个世纪90年代初由Vapnik等人提出的一种新型机器学习方法^[5],是根据有限的样本信息在模型的复杂性和学习能力之间寻求最佳折衷,以期获得最好的推广能力。它的基本思想是将实际问题通过非线性变换映射到高维的特征空间,然后在这个高维空间中进行函数拟合,其算法复杂度与样本维数无关,可得到有限样本信息下的全局最优解。

对于 n 个数据 $\{x_i, y_i\} \quad i=1, 2, \dots, n$, $x_i \in R^d$, $y_i \in R$, 如果能用回归函数 $f(x) = w \cdot \phi(x) + b$ 来拟和这些数据,并假设所有训练数据都可以在精度 ε 下无误差地拟合,其中 ϕ 为非线性映射函数,代表控制拟合精度的不敏感参数,定义为

$$L(y, f(x)) = L(y - f(x)) = \begin{cases} 0, & |y - f(x)| \leq \varepsilon \\ |y - f(x)| - \varepsilon, & \text{others} \end{cases} \quad (1)$$

根据结构风险最小化(SRM)原则,要保证 f 的平坦,必须寻找最小的 ω ,即在(1)式的约束条件下求解凸优化问题:

$$\min \frac{1}{2} \|w\|^2 \quad (2)$$

收稿日期: 2007-12-07

基金项目: 江西省教育厅项目(赣教技字[2006]183号 赣教技字[2007]185号); 华东交通大学科研基金项目(06ZKDQ02)

作者简介: 陆荣秀(1976-),女,广西桂林人,硕士,讲师,主要从事工业过程建模与优化控制研究。

为了处理函数 f 在 ε 精度不能估计的数据,引入(非负)松弛变量 ξ, ξ_i^* 和惩罚因子 C, C 越大表示对超出误差的样本的惩罚力度越强. 因此式(1)和式(2)就转化为:

$$\min \frac{1}{2} \|w\|^2 + C \sum_{i=1}^n (\xi_i + \xi_i^*) \quad (3)$$

$$s. t. \begin{cases} y_i - w \cdot x_i - b \leq \varepsilon + \xi_i \\ w \cdot x_i + b - y_i \leq \varepsilon + \xi_i^* \\ \xi_i, \xi_i^* \geq 0 \end{cases} \quad (4)$$

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

$$\max_{\alpha, \alpha^*} \{ W(\alpha, \alpha^*) = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (\alpha_i - \alpha_j^*) (\alpha_j - \alpha_i^*) K(x_i, x_j) - \varepsilon \sum_{i=1}^n (\alpha_i + \alpha_i^*) + \sum_{i=1}^n (\alpha_i + \alpha_i^*) \} \quad (5)$$

$$s. t. \begin{cases} \sum_{i=1}^n (\alpha_i - \alpha_i^*) = 0 \\ 0 \leq \alpha_i \leq C \quad i = 1, 2, \dots, n \\ 0 \leq \alpha_i^* \leq C \end{cases} \quad (6)$$

解带有式(6)约束的式(5), 即可得到拉格朗日乘子 α, α^* , 则

$$w = \sum_{i=1}^n (\alpha_i - \alpha_i^*) x_i \quad (7)$$

$$b = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n [(\alpha_i - \alpha_i^*) (K(x_i, x_i) + K(x_i, x_i))]]$$

代入 $f(x)$ 即可得到拟合函数.

2 支持向量机的组分含量软测量建模及其实现

2.1 支持向量机的组分含量软测量模型结构

将上述的支持向量机建模方法用于稀土萃取过程, 其建模结构如图1所示.

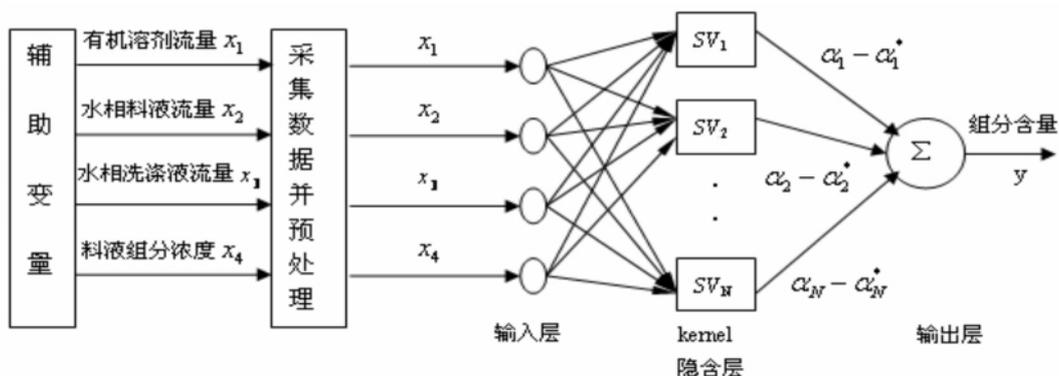


图1 基于标准SVM的软测量模型结构

图中 SV_1, SV_2, \dots, SV_N 是支持向量, N 为支持向量数; kernel 为核函数; $\alpha_i - \alpha_i^*$ 为网络权重. 输出变量 y 为萃取段某级的工艺控制监测点的组分含量, 输入变量即可测变量为有机溶剂流量 x_1 、水相料液流量 x_2 、水相洗涤液流量 x_3 和料液组分浓度 x_4 . 根据图1的模型结构, 从某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, 将经过处理的数据分成两部分, 前100组数据作为稀土萃取组分含量软测量建模所需的训练样本集, 后50组数据作为测试模型泛化能力的样本集.

根据SVM的建模思想, 在具体建立软测量模型的时候, 常常是直接确定满足 Mercer 条件的核函数, 而不需要知道非线性变换的具体形式; 然后根据选定的核函数寻找最佳的模型参数搭配.

2.2 SVM 模型参数的影响与选择

本文是以常用的高斯径向基(RBF)函数为核函数

$$k(x, x_i) = \exp(-\|x - x_i\|^2 / 2\sigma^2) \quad (8)$$

式中 x, x_i 都为4维向量. 在整个SVM建模过程中, 需要调整的参数有不敏感系数 ε , 惩罚系数 C 和核函数参数 σ , 寻找这些参数的最佳搭配就是选择最佳模型的问题.

不敏感系数 ε 反应模型对输入变量所含噪声的敏感程度, 用以控制模型拟合精度. 调整值的大小可以控制支持向量的个数, 从而改变模型的复杂程度, 改变模型对数据集维数的依赖程度. 表1是取 $C = 50, \sigma = 0.2$ 时, 值的大小对支持向量个数的影响(以100组训练数据情况为例).

表 1 ε 的大小与 SV 数量的关系

ε	0.005	0.01	0.012	0.02	0.03	0.05	0.08	0.1
SV 个数	92	86	80	66	47	32	27	18

由表可知,随着 ε 值的减小,模型所需支持向量的个数在逐渐增多,模型的复杂程度在增大,即 ε 值越大,拟合精度越低,模型所需支持向量个数越少,模型的复杂程度越低,但是模型的学习和泛化能力在不断下降.反之, ε 值越小,拟合精度越高,模型的支持向量个数越多,模型的复杂程度也就越高,而模型学习能力和泛化能力却更好.故一个合适的 ε 应该能够在模型复杂度和学习推广能力之间取得平衡,其值的选择也是在能够达到解决具体问题目的的情况下,通过不断调整得到的,在此选取 $\varepsilon = 0.012$.

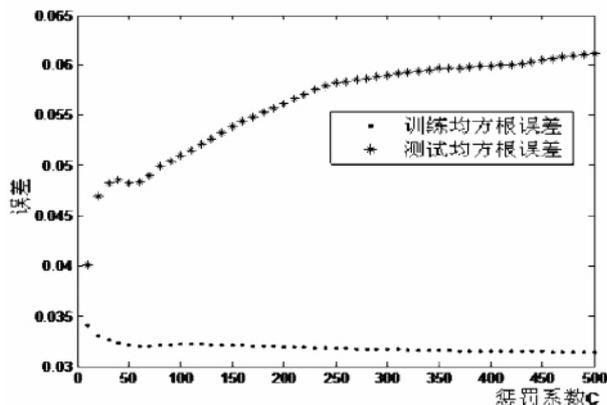


图 2 惩罚系数对训练误差和预测误差的影响

惩罚系数 C 值的大小决定着由训练样本产生的经验风险对模型的影响大小, C 值越大表示对超出误差的样本的惩罚力度越强,即优化目标(3)式中的第 2 部分所占数值越大,经验风险越大,当 C 值为无穷大时,结构风险最小化也就退变为经验风险最小化;相反, C 值越小,经验风险也就越小,但若 C 值过于微小,则由于没有得到大量的训练数据信息,所建立的模型也就失去了解决具体问题的能力.图 2 是取 $\varepsilon = 0.012$, $\sigma = 0.2$ 时稀土萃取过程组分含量软测量模型的拟合误差和预测误差随 C 变化的情况.

由图 2,当 C 增大到 50 后,训练误差渐趋稳定,当 C 过大时,会出现过拟合现象,即预测误差增大.因此,可选惩罚系数 $C = 50$,此时的预测误差相对较小.

因模型选取核函数为 RBF 核函数,核参数主要有中心向量 x_i 和宽度系数 σ ,中心向量通常是由训练得到的支持向量,即每一个中心对应一个支持向

量.核宽度的取法与 RBF 神经网络相同,当 σ 较小时,RBF 核函数的拟合性能较好,但过小时会使得泛化能力较差.在 SVM 中,当 σ 较小时,惩罚系数 C 可取得小些,即所需的惩罚力度可减小.图 3 是取 $\varepsilon = 0.012$, $C = 50$ 时稀土萃取过程组分含量软测量模型的拟合误差和预测误差随 σ 变化的情况.

由图 3 可知,随着 σ 增大,测试误差单调下降,而训练误差则逐渐上升,当 σ 大于 0.25 时,训练误差和预测误差都趋于稳定,且训练误差开始大于预测误差.权衡模型的学习和泛化能力,取 $\sigma = 0.2$.

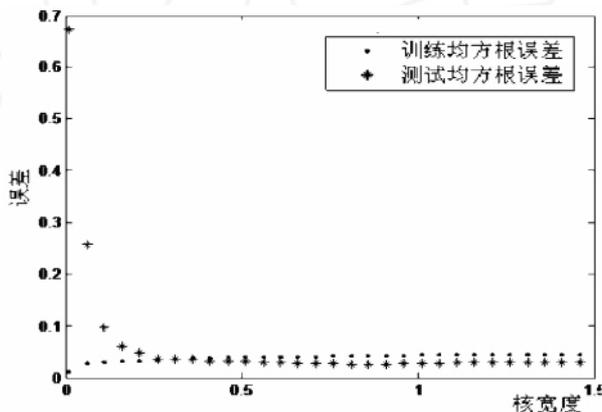


图 3 核函数宽度系数对训练误差和预测误差的影响

为确保稀土萃取分离过程组分含量的 SVM 软测量模型有优良的学习和泛化能力,经多次考察和尝试,对 SVM 参数分别选取如下值: $\varepsilon = 0.012$, $C = 50$, $\sigma = 0.2$.

3 支持向量机的组分含量软测量模型实验结果

采用上述选定的 SVM 参数进行建模仿真,模型的实验结果如图 4 所示.

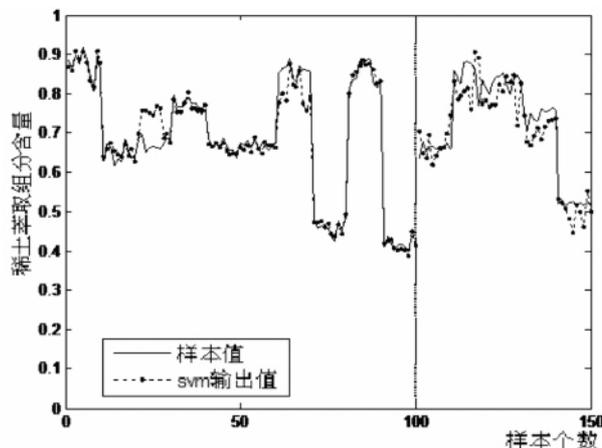


图 4 SVM 模型的拟合及预测输出曲线

其中前 100 个样本是模型的训练数据,后 50 个样本是模型的测试数据,整个建模过程用时 2.8 秒,模型的各项性能指标如表 2 所示,其中 MPE 为最大正误差, MNE 为最大负误差, RMSE 为均方根误差, SSE 为误差平方和。

表 2 SVM 建模结果的性能指标

性能指标	训练结果	测试结果
MPE	0.0963	0.1243
MNE	-0.1004	-0.1282
RMSE	0.0332	0.0510
SSE	0.1040	0.1303

从图 4 和表 2 可以看出,模型的输出值可以跟踪真实样本的变化,建模速度相对较快,能满足稀土萃取分离生产过程工艺监测和控制要求。

4 结论

本文采用支持向量机方法建立了稀土萃取过程组分含量的软测量模型,并进一步研究了选用 RBF 核函数时,模型参数的选择及其对模型的影响。将支

持向量机方法用于组分含量软测量建模具有结构简单,易于实现,有较好的综合辨识能力,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(第二版,上册) [M]. 北京:冶金工业出版社,1995
- [2] T. Y. Chai and H. Yang 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, TIANYOU Chai. Neural networks based component content soft - sensor in countercurrent Rare - earth extraction [J]. Journal of Rare Earth, 2003 21(6): 691 - 696.
- [4] 杨辉,许勇刚. 稀土萃取过程组分含量的 RBF 神经网络软测量方法 [A]. Proceedings of the 6th World Congress on Control and Automation [C]. 大连:大连理工大学,2006.
- [5] Vapnik VN. The Nature of Statistical Learning Theory [M]. New York: Springer, 1995

Modeling of Rare Earth Countercurrent Extraction Process Based on SVM

LU Rong - xiu

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

Abstract: The problems of small sample, non - linearity, high dimensions and local minimal value can be well solved by supporting vector machine in soft - sensor modeling. In consideration of the online measurement of the component content in rare earth countercurrent extraction separation process, algorithm of SVM with RBF kernel is applied to the modeling of the rare earth extraction separation process. The selection and effect of model - parameters are discussed. Through the simulations of the model, it shows that the component content soft - sensor model based on SVM has both preferable generalization and high velocity. SVM is an effective method for rare earth extracting process soft - sensor.

Key words: SVM; Soft - Sensor; rare earth extraction

(责任编辑:周尚超)