

文章编号: 1005-0523(2008)05-0067-04

基于 RBF 网络的醋酸乙烯聚合率软测量研究

汤 琴

(华东交通大学 电气与电子工程学院 江西 南昌 330013)

摘要: 针对目前聚乙烯醇生产过程中醋酸乙烯(VAC)聚合率难以在线检测的情况,提出利用RBF神经网络建立VAC聚合率软测量模型,并运用大量实测数据对RBF神经网络进行了训练和仿真。仿真结果表明该方法是有效的,所建模型具有较高的精度和良好的泛化能力。

关键词: VAC聚合率; RBF神经网络; 软测量; 建模
中图分类号: TP274 文献标识码: A

我国是聚乙烯醇的生产大国,聚乙烯醇生产过程中参数的检测和自动控制是实现生产稳定、安全、高效、优质和低耗的基本条件和重要保证,也是提高企业整体素质的有效手段。但目前聚乙烯醇生产的检测和自动化水平还存在很大问题,如目前国内大部分工厂的实际情况是聚乙烯醇生产过程中关键参数聚合率没有在线测量的手段,需人工每隔4h一次采集样本到实验室,进行离线分析,这样得到的结果往往严重滞后且人为分析带来误差,不能准确地反映实际工况和产品质量的变化,不能及时调整控制策略,造成产品质量下降,而用于估计过程系统中难以在线测量的变量的软测量技术却能较好的解决这些问题。

软测量是根据某种最优准则,选择一组既与主导变量(即待测变量)密切联系而又容易测量的变量,称为辅助变量,通过构造某种数学模型(即软测量模型),用计算机软件实现对主导变量的估计^[1]。软测量具有动态响应迅速,能连续给出主导变量信息,且投资低,维护保养简单等优点。诸多软测量建模方法中人工神经网络无需对象的先验知识,根据对象的输入输出数据直接建模,具有自学习、自适应和非线性逼近等功能,所以在解决高度非线性和严重不确定性系统建模方面有很大潜力,被作为解决复杂系统过程参数软测量问题的理想方法。基于工艺机理先验知识和过程数据,用RBF神经网络建立聚合率的测量模型,利用MATLAB对模型进行仿真验证,仿真结果显示该方法具有良好的测量性能。

1 聚乙烯醇生产过程中 VAC 聚合过程简介

在聚乙烯醇生产过程中,VAC聚合过程是以精制后的单体醋酸乙烯(VAC)为原料,以甲醇(MeOH)作溶剂,以偶氮二异丁腈(AIBN)为引发剂,控制好一定的聚合率,制成高分子化合物聚醋酸乙烯(PVAC)。聚合率(G)是指聚合物PVAC与未聚合单体VAC加聚合物PVAC之和的百分比,即

$$G = \frac{\text{聚合物 PVAC}}{\text{聚合物 PVAC} + \text{未聚合单体 VAC}} \times 100\% \quad (1)$$

聚合率是表征产量的一个重要参数,它反映了VAC聚合进行的程度,对生产过程的安全性、经济性和产品品质具有重要影响。当聚合率过高时,会造成聚合体系粘度急剧增加,严重时会出现“爆聚”,对安全生产构成严重威胁,也不利于料液的输送;当聚合率过低时,则生产设备利用率降低,产量降低,同时还加重后续

收稿日期: 2008-06-17

基金项目: 江西省自然科学基金资助项目(0611006)

作者简介: 汤 琴(1985-),女,安徽安庆人,硕士研究生,研究方向为化工过程在线检测与优化控制。

分离装置的负担,不经济;当聚合率波动大时,会造成产品平均聚合度分布变差,甚至造成平均聚合度不合格,影响到产品品质.为此,开发适用的聚合率在线检测技术是实现实时控制和优化控制的前提和基础,对于提高生产过程的安全性和经济性就具有重要的现实意义.

2 应用 RBF 神经网络建立 VAC 聚合率软测量模型

2.1 辅助变量的选取

影响 VAC 聚合率的因素很多,主要包括引发剂添加率、甲醇配比(对醋酸乙烯)、聚合时间、聚合温度、原材料(包括精 VAC、聚合甲醇、引发剂、回收 VAC、再使用液等)质量、聚合系统氧含量等^[2].

根据聚乙烯醇聚合反应的工艺机理、现场生产过程监测数据及辅助变量的选择原则,咨询现场的工艺操作人员,确定引发剂添加率 x_1 、甲醇配比 x_2 、聚合温度 x_3 、VAC 活性度 x_4 (VAC 的质量主要是通过活性度来反映的) 作为辅助变量,则 VAC 聚合率软测量模型可以描述为:

$$G = f\{x_1, x_2, x_3, x_4, \omega\} \quad (2)$$

式中: ω 为其他影响聚合率的变量; $f\{\cdot\}$ 为输入、输出间复杂的多变量非线性函数.

2.2 VAC 聚合率的 RBF 神经网络软测量模型结构

径向基函数 RBF (Radial Basic Function) 神经网络是一种具有单隐层的三层前向网络,包括输入层、隐层和输出层.其输入到输出的映射是非线性的,而隐层空间到输出空间的映射是线性的,从而大大加快了学习速度并避免了局部极小问题. RBF 神经网络能以任意精度逼近任意连续函数.

用上述 4 个辅助变量作为输入, VAC 聚合率作为输出,用 RBF 神经网络来拟合它们之间的非线性关系 $f\{\cdot\}$ 从而建立 VAC 聚合率的软测量模型,如图 1 所示.

网络输入节点数等于所选辅助变量个数 $n=4$; 隐层径向基函数选用高斯函数作为激励函数. 隐层节点个数 m 由训练结果确定. 则隐层第 i 个神经元的输出为:

$$R_i(x) = \Phi(\|x - c_i\|) = \exp\left[-\frac{(x - c_i)^2}{2\sigma_i^2}\right], \quad i=1, 2, \dots, m \quad (3)$$

式中: $x = [x_1, x_2, x_3, x_4, x_5]^T$ 是输入向量; c_i 和 σ_i 分别为 RBF 神经网络的中心点和宽度. RBF 神经网络输出为聚合率 G :

$$G = \sum_{i=1}^m w_i R_i(x) \quad (4)$$

其中 w_i 是第 i 个隐层节点到输出节点的连接权值.

2.3 RBF 神经网络模型参数确定

训练 RBF 网络所需要确定的参数主要有: (1) 网络隐层节点数 m ; (2) 径向基函数的隐层中心 c_i 和宽度 σ_i ; (3) 隐层到输出层的连接权值 w_i . 在本设计中采用 K-均值聚类算法确定隐层中心及宽度,网络输出权值采用递推最小二乘法来实现.

2.3.1 网络中心及宽度的确定

用 K-均值聚类算法确定 RBF 网络中心的具体步骤如下:

(1) 初始化聚类中心 $c_i (i=1, 2, \dots, m)$. 一般是从输入样本 $x_j (j=1, 2, 3, \dots, n)$ 中选取 m 个样本作为聚类中心.

(2) 将输入样本按最邻近规则分组,即将 $x_j (j=1, 2, 3, \dots, n)$ 分配给中心为 $c_i (i=1, 2, \dots, m)$ 的输入样本聚类集合 $\Gamma_i (i=1, 2, 3, \dots, m)$, 亦即 $x_j \in \Gamma_i$, 且满足

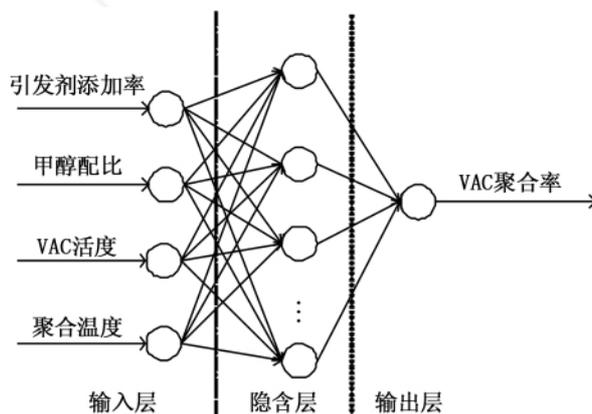


图1 VAC 聚合率的 RBF 神经网络模型结构

$$d_i = \min \| x_j - c_i \| \quad (j=1, 2, 3, \dots, n; i=1, 2, 3, \dots, m) \quad (5)$$

式中: d_i 表示最小欧式距离.

(3) 计算 Γ_i 中样本的平均值(即聚类中心 c_i)

$$c_i = \frac{1}{M_i} \sum_{x_j \in \Gamma_i} x_j \quad (6)$$

式中, M_i 是聚类集合 Γ_i 中的输入样本数. 按以上步骤计算, 直到聚类中心的分布不再发生变化, 就可以确定 RBF 网络的中心了.

根据各聚类中心之间的距离确定各隐节点的宽度, 可用下式计算:

$$\sigma_i = \min \| c_i - c_j \|, \quad i=1, 2, \dots, m; j=1, 2, \dots, m; i \neq j \quad (7)$$

式中, $\min \| c_i - c_j \|$ 表示第 i 个中心向量与其他中心向量间的最小距离.

2.3.2 隐层到输出层的权值调整^[3]

网络中心确定之后, 就可以对网络的隐含层到输出层的权值 w_j 进行调整. 权值调整采用递推最小二乘法, 具体步骤为:

(1) 给定初始权值矢量 $W_j(0) \in R_m$ ($j=1, 2, \dots, m$), 逆相关矩阵初始值 $P(0) \in R^{m \times m}$, 误差能量初始值 $J(0) \in R$, 一般选一个比较大的值, 误差能量迭代终止值 $\varepsilon \in R$.

(2) 按下式计算 $P(k)$ ($k=1, 2, \dots$) 的值:

$$g(k) = P(k-1) R(k) [\lambda + R^T(k) P(k-1) R(k)]^{-1} \quad (8)$$

$$P(k) = \frac{1}{\lambda} [P(k-1) - g(k) R^T(k) P(k-1)] \quad (9)$$

式中 $R(k) \in R^m$ 为隐节点输出, $\lambda \in R$ 为遗忘因子(在学习过程中一般取 $0.9 < \lambda < 1$).

(3) 更新网络权值

$$W_j(k_1) = W_j(k_1 - 1) + g(k_1) [y_j(k_1) - R^T(k_1) W_j(k_1 - 1)] \quad (10)$$

(4) 计算累积误差能量

$$J(k_1) = \lambda \cdot J(k_1 - 1) + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N [y_j(k_1) - R^T(k_1) W_j(k_1 - 1)]^2 \quad (11)$$

若 $|J(k_1) - J(k_1 - 1)| < \varepsilon$, 学习结束, 否则转到第(2)步继续.

这里的 k_1 是训练的次数, $y_j(k_1)$ 为网络期望输出, 对应于聚乙烯醇生产过程中 VAC 聚合率的实际测量值.

3 仿真验证

本文从江西化纤化工公司聚乙烯醇的生产过程采集 180 组样本数据(即主导变量 VAC 聚合率及相应的四个辅助变量的数据), 由于测量的数据有着不同的工程单位, 各变量的大小之间在数值上也相差几个数量级, 直接使用原始测量数据进行网络训练可能丢失信息和引起数值计算上的不稳定, 因此必须对输入和目标数据进行归一化处理, 将网络的输入数据限制在 $[0, 1]$ 区间内.

本文进行数据归一化的变换式为

$$\bar{X}_i = \frac{X_i - X_{i\min}}{X_{i\max} - X_{i\min}} \quad (12)$$

式中 X_i 为未经处理的输入(或目标)值, \bar{X}_i 为经过归一化处理后的数值, $X_{i\min}$, $X_{i\max}$ 分别为对应输入量(或目标值)的最小值和最大值.

数据经归一化处理后, 选取前 100 组数据作为训练样本, 另外 80 组数据作为测试样本. 使用 MATLAB 软件的神经网络工具箱中 NEWRB 函数来建立该径向基函数网络, 设置目标误差 $goal = 0.01$, 扩展常数 $spread = 1.0$. 经训练得到隐层神经元个数为 19, 仿真结果如图 2、图 3 所示^[4,5].

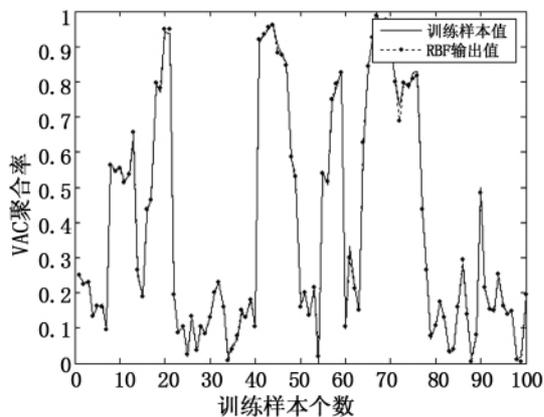


图2 VAC聚合率软测量模型的训练曲线

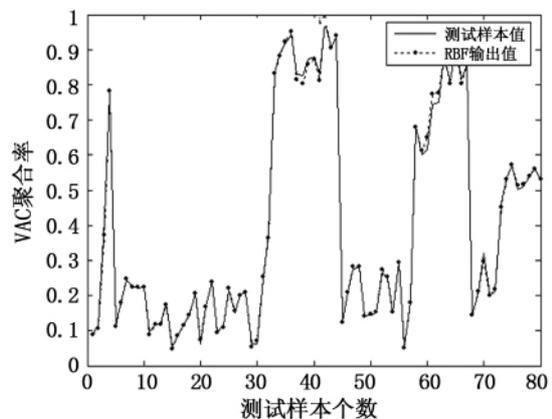


图3 VAC聚合率软测量模型的测试曲线

模型性能评价指标为最大正误差 MPE,最大负误差 MNE,均方根误差 RMSE 和误差平方和 SSE,采用这些指标来衡量模型的可靠性,各性能指标如表 1 所示.

表 1 RBF 网络建模结果的性能指标

训练结果				测试结果			
MPE	MNE	RMSE	SSE	MPE	MNE	RMSE	SSE
0.024 4	-0.033 1	0.008 5	0.007 2	0.042 0	-0.030 9	0.009 2	0.006 8

从图 2 的训练结果和图 3 的测试结果可以看出模型的输出值基本可以跟踪真实样本的变化.从建模结果的性能指标可以看出模型的测量误差很小,符合聚合率的测量要求,具有较高的拟合精度和预测性能,即该模型具有精确的逼近能力和具有很强的泛化能力,该模型是有效的、可行的.

4 结束语

本文针对聚乙烯醇生产过程中醋酸乙烯聚合率无法在线测量的实际问题,充分利用现场数据,依据生产工艺合理选取输入输出变量,利用 RBF 神经网络建立了醋酸乙烯聚合率的软测量模型,仿真实验结果表明所建模型具有较高的精度和良好的泛化能力.本文的工作为实现聚乙烯醇生产过程的实时控制和优化控制打下了基础.

参考文献:

- [1] 李海青,黄志尧.软测量技术原理及应用[M].北京:化学工业出版社,2000.
- [2] 邓秀江,李娜.PVA 聚合工序 VAC 聚合率波动的原因分析及对策[J].科学技术与工程,2006,6(15):2297-2300.
- [3] 杨辉,谭明皓,柴天佑.基于神经网络的多元稀土萃取组分含量的软测量[J].中国稀土学报,2003,21(4):425-430.
- [4] 飞思科技产品研发中心.神经网络理论与 MATLAB R2007 实现[M].北京:电子工业出版社,2007.
- [5] 王阳萍,朱正平.MATLAB 在 RBF 径向神经网络仿真中的应用[J].甘肃科技,2004,20(10):54-55.

A Research on the Soft – Sensing Method of Vinyl Acetate Polymerization Rate Based on RBF Neural Network

TANG Qin

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

Abstract: Aiming at the difficulty in measuring the vinyl acetate (VAC) polymerization rate on-line in the process of polyvinyl alcohol production, a VAC polymerization rate soft-sensing model is established based on RBF neural network in this paper. The RBF neural network is trained and simulated by tons of practical data, the simulation results show that the method is effective and the established model offers high accuracy and excellent capability of generalization.

Key words: VAC polymerization rate; RBF neural network; soft-sensing; modeling

(责任编辑:周尚超)