文章编号:1001-0920(2012)08-1261-04

基于网格聚类LS-SVM 的铝电解生产过程极距软测量

郭 俊,桂卫华

(中南大学信息科学与工程学院,长沙410083)

摘 要:针对铝电解生产过程的复杂性,建立了基于网格共享近邻聚类(GNN)最小二乘支持向量机(LS-SVM)的 铝电解生产过程极距软测量模型.该模型采用GNN算法将训练集分成具有不同聚类中心的子集,对各子集分别 采用LS-SVM进行训练并建立子模型,同时通过参数转化实现模型对新数据样本的动态学习.仿真结果表明,基 于GNN最小二乘方法建立的铝电解极距软测量模型具有精度高、泛化性能好等特点,能够为铝电解生产过程操作 优化提供实时准确的信息.

关键词: 铝电解生产过程; 极距软测量; 基于网格的共享近邻聚类; 最小二乘支持向量机 中图分类号: TP393 文献标识码: A

Soft-sensing of polar distance for aluminum electrolysis production process based on grid-based clustering LS-SVM

GUO Jun, GUI Wei-hua

(School of Information Science and Engineering, Central South University, Changsha 410083, China. Correspondent: GUO Jun, E-mail: gjljh12200903@163.com)

Abstract: Aiming at the complexity of the aluminum electrolysis production process, a soft measurement model of polar distance is proposed based on grid-based shared nearest neighbor(GNN) clustering algorithm and least square support vector machine(LS-SVM). In this model, GNN is used to separate a whole training data set into several clusters with different centers, each subset is trained by LS-SVM and sub-models are developed to fit different hierarchical properties of the process. New sample data that represent new operation information are introduced in the model, so the model can be updated on-line. The simulation results show that the soft-sensing of polar distance based on GNN LS-SVM model can supply real-time and accurate information for the operating optimization in the aluminum electrolysis production process.

Key words: aluminum electrolysis process; polar distance soft measurement; grid-based shared nearest neighbor; least square support vector machine

1 引 言

目前铝电解槽控制技术朝着精确化方向发展,而 国内铝电解控制水平受到装备水平和维护条件的限 制,电解槽的精细控制仍存在较多不足,在极距控制 方面表现尤为突出.极距控制是槽控机控制电解槽热 平衡的主要手段,如果不能实现有效控制则会直接影 响到电解槽的生产效率^[1].

在预焙铝电解槽中,由于极距层由熔融电解质 组成,具有高温和腐蚀的特性,插入其中的探头维持 不久即会被腐蚀,直接测量极距的难度很大,加上铝 液界面的波动难以跟踪^[2-4],极距分布的信息不能在 线获取,极距的均一性也无法得到保证.可见,利用 软测量技术预测极距并加以控制是实现极距均一性 的保障.电解铝厂记录的大量现场数据为基于数据 驱动的建模方法提供了前提条件.Suykens采用结构 风险最小化原则和核技术提出了最小二乘支持向量 机(LS-SVM),表现出比神经网络等传统方法更好的 性能^[5-9].另一方面,铝电解生产过程通常是多阶段的 复杂物理化学反应过程,如果其输入输出关系仅通过 一个没有自适应性的模型来描述,则模型的泛化能力 会很差,随着时间的推移,过程参数会发生变化,模型 将不再适应新的工况而出现老化现象^[10],因此需要采 取一些方法对软测量模型进行校正.

收稿日期: 2010-12-28; 修回日期: 2011-09-07.

基金项目: "十一五"国家支撑计划项目(2009BAE85B00).

作者简介: 郭俊(1982-), 男, 博士生, 从事非线性系统建模与优化的研究; 桂卫华(1950-), 男, 教授, 博士生导师, 从事 大系统理论、复杂工业过程建模与优化等研究.

基于上述背景,本文提出一种基于网格聚类的 LS-SVM的自适应建模方法,首先应用网格GNN方 法将数据样本集准确分类;然后利用LS-SVM对各数 据子集建立子模型,找到回归函数,同时,为了提高模 型泛化性,通过参数转化实现模型对新数据样本的动 态更新;最后,将所提出的方法用于铝电解生产过程 极距的预测.基于实际铝电解生产过程数据的仿真验 证了该方法的有效性.

2 电解铝工艺

铝电解过程是一个多变量、多物理场、非线性时 变的工业生产过程,其主要工艺参数,如极距、分子 比、电解质温度、铝水平、阳极效应系数等,随时间不 断变化,且各参数之间相互影响,耦合性强.其中,极 距的调整和变化与其他主要参数均息息相关,同时极 距还是影响铝电解槽热平衡的主要因素.但是,极距 的无法在线测量和各参数间的强耦合性,决定了难以 建立极距的精确理论模型. 若要准确地把握极距的大 小和变化趋势, 软测量技术则是较好的选择. 为了实 现极距的自适应软测量,本文针对铝电解工业过程的 特点,考虑到建模过程中工艺参数的测量周期各不相 同,利用统一的数据提取周期克服时变的影响;考虑 到各参数数据样本的残缺冗余性,利用GNN方法对 样本进行准确分类;考虑到铝电解过程的非线性,利 用LS-SVM方法完成非线性回归;考虑到模型容易老 化,利用参数转化增强了软测量模型的自适应性.

3 算法描述

算法结构如图1所示. X 为训练集; $D_i(i = 1, 2, ..., m)$ 为分类后的数据子集, m 为子集的数目. 每一 类分别采用LS-SVM 进行训练并得到相应的回归函 数 $f_i(i = 1, 2, ..., m)$. 预测过程中, 对于每个新增样 本 $(x_s + 1, y_s + 1)$, 首先采用 GNN 算法计算 x_i 对于每 一类的模糊隶属度函数, 并利用模糊隶属度值最大的 那一类的回归函数进行预测; 然后对该子模型进行动 态学习得到新的回归函数, 实现模型的自适应.



4 GNN 算法

GNN聚类算法的基本思想是:首先将数据空间 S划分为网格单元,并将数据集V映射到网格单元中, 计算非空的网格单元数 GridNum 和网格单元中点数 的最大值 Max-Grid,利用密度阈值处理方法计算出密度阈值 MinPts.根据密度阈值判断各网格单元是否为高密度单元,对高密度单元利用网格中心点技术计算其中心点,对低密度单元中的数据点进行边界点提取或作为噪声数据处理.根据用户输入的共享点数 sharedpoints,近邻数 k 和聚类阈值 Min 对高密单元的中心点使用共享近邻算法进行聚类,并对聚类结果进行检查,将类中数据点个数小于 Min 的聚类作为噪声数据处理.

GNN 算法流程如下:

Step 1: 调用网格中心点处理过程 center().

Step 2: for(i = 1; $i \leq H$ density; i + +). 查找 Center(i) k个近邻中心点集合 k-neighbour(center[i]).

Step 3: 对于任意 k – neighbour(center[i]) 和 k – neighbour(center[j]). 如果

 $|k - neighbour(center[i]) \bigcap$

k - neighbour(center[j])| > sharedpoints,

则 center[*i*] 和 center[*j*] 聚为一类, 对应的第*i* 个高密度 单元和第*j* 个高密度单元中的数据点也归为一类.

Step 4: 检查各类 C, $|C| \ge Min, 则该类为所得 的最终聚类; 否则将 <math>C$ 中数据点作为噪声数据处理.

5 LS-SVM

在支持向量机回归法中, 给定训练样本集 $S = (x_i, y_i)$. 其中: $i = 1, 2, \dots, N$; m 维输入 $x_i \in R^m$, 一 维输出 $y_i \in R$. 利用非线性映射函数将样本非线性地 映射到高维特征空间, 即可将原样本空间中的非线性 函数估计问题转化为高维特征空间中的线性函数估 计问题, 即

$$f(x) = w^{\mathrm{T}}\phi(x) + b. \tag{1}$$

这一回归问题可根据结构风险最小化原理表示 为如下一个等式约束的优化问题:

$$\min_{w,b,e} J(w,e) = \frac{1}{2} w^{\mathrm{T}} w + \frac{C}{2} \sum_{i=1}^{N} e_i^2,$$

s.t. $y_i = w^{\mathrm{T}} \phi(x_i) + b + e_i, \ i = 1, 2, \cdots, N.$ (2)

为了求解上述优化问题,需建立拉格朗日等式, 将约束优化问题转化为如下无约束优化问题:

$$L(w, b, e, a) = J(w, e) - \sum_{i=1}^{N} a_i(w^T \phi(x_i)) + b + e_i - y_i), \quad (3)$$

其中 $a_i(i = 1, 2, \dots, N)$ 为拉格朗日乘子. 根据KKT 条件得到

$$\frac{\partial L}{\partial w} = 0 \to w = \sum_{i=1}^{N} a_i \phi(x_i),$$

$$\frac{\partial L}{\partial b} = 0 \rightarrow \sum_{i=1}^{N} a_i = 0,$$

$$\frac{\partial L}{\partial e_i} = 0 \rightarrow a_i = Ce_i,$$

$$\frac{\partial L}{\partial a_i} = 0 \rightarrow w^{\mathrm{T}} \phi(x_i) + b + e_i - y_i = 0.$$
(4)

再根据 Mercer 条件定义

$$k(x_i, y_i) = \phi(x_i)\phi(x_j).$$
(5)

从式 (4) 中消去
$$e_i$$
和 w 可以得到

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & k(x_1, x_1) + \frac{1}{C} & \dots & k(x_1, x_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & k(x_N, x_1) & \dots & k(x_N, x_N) + \frac{1}{C} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b \\ a_1 \\ \vdots \\ a_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & y_1 & \dots & y_N \end{bmatrix}^{\mathrm{T}}.$$
(6)

由式(6)可知, LS-SVM的训练问题可归结为一 个线性方程组的求解问题,而不是求解一个二次型规 划问题,从而使得LS-SVM计算简单快速.采用最小 二乘法求得式(6)的系数*a_i*和*b*,并代入式(1),得到支 持向量机的输出为

$$f(x) = \sum_{i=1}^{N} a_i k(x, x_i) + b.$$
 (7)

采用LS-SVM建立的软测量模型, 在投入现场 运行后, 随时间的推移会出现模型老化现象, 即随着 时间的推移, 过程参数会发生变化, 原来的软测量 模型不再适应新的工况, 因此需要采取一些方法对 式 (7) 进行动态学习, 实现模型的在线更新, 提高模型 适应工况变化的能力. 定义 $Q_s = \Omega_s + C^{-1}I$. 其中: $Q_s \in R^{s \times s}$; Ω 为一个方阵, 其第 i 列 j 行的元素为 Q_{ij} = $K(x_i, x_j) = \phi(x_i)^{\mathrm{T}} \phi(x_j)$, $i, j = 1, 2, \dots, s$. 由 式 (4) 可得

$$I^{\mathrm{T}} \times a = 0, \ I \times b + Q_s \times a = y, \tag{8}$$

求解可得

$$b = \frac{I^{\mathrm{T}}Q_s^{-1}y}{I^{\mathrm{T}}U_s^{-1}y}, \ a = Q_s^{-1}(y - I \times b).$$
(9)

 ${\B : } a = [a_1, a_2, \cdots, a_N]^{\rm T}, y = [y_1, y_2, \cdots, y_N]^{\rm T}.$

由式(9)可知,计算出 Q_s^{-1} 即可以确定 $a \pi b$,得 到式(8)的函数模型.将带有新过程信息的样本添加 到 Q_s 中,同时消去同等数量的旧样本,可以不断更新 Q_s^{-1} ,得到新的 $a \pi b$,实现模型的在线更新.

6 基于网格聚类 LS-SVM 的极距软测量

在铝电解生产过程中,电解质分子比和电解质 温度的变化会引起电导率的变化,从而影响槽压,导 致极距的调整.槽控机无法准确采集阳极实际动作 时间也会造成极距调整出现偏差.电解质水平和铝 水平影响热平衡,进而影响极距的变化.阳极效应降 低铝电解的电流效率,极距的调整可以提高电流效率.综上所述,最终确定极距软测量模型的输入变量为:分子比 x₁,电解质温度 x₂,电解质水平 x₃,铝水平 x₄,阳极动作时间 x₅,阳极效应系数 x₆.采用基于GNN的LS-SVM 软测量方法可以得到极距的预测值.

为了检验软测量模型的有效性,本文以某铝厂4 个月的铝电解实际生产数据为对象进行研究.考虑到 输入变量相关数据的记录时间各有不同,为了减弱慢 时变的影响,本文统一以8h为周期提取各变量的生 产数据,形成模型的数据集.在初步剔除部分记录不 全及记录异常的数据后,保留320组数据,其中200组 作为训练集,50组数据作为选择LS-SVM中的参数 的测试样本集,利用70组生产数据构建检验样本集, 对基于GNN的LS-SVM软测量模型进行实验仿真验 证.

验证测试中,将基于GNN的LS-SVM与普通 LS-SVM进行了对比.普通LS-SVM核函数为径向基 函数(RBF), σ²为10, *C*为100.

图2为LS-SVM与GNNLS-SVM在不同样本集下的均方差.从图2可以看出,基于LS-SVM的软测量模型预测误差会随时间的推移逐渐增大,模型精度逐渐降低,预测曲线在后期开始偏离实际值曲线,表明模型开始失效.基于GNN的LS-SVM软测量模型能够适应工况的变化,在整个样本区间内模型精度都比较高.由此可见,样本数据通过网格聚类后,改善了LS-SVM的性能,提高了预测精度.



图 2 LS-SVM 与 GNNLS-SVM 仿真结果对比

为了更好地表明基于 GNN 的 LS-SVM 的自适应 性,表1给出了基于 GNN 的 LS-SVM 模型和普通 LS-SVM 模型在不同规模测试集上的预测均方差结果. 由表1可见,随着测试样本数量的增加,基于普通 LS-SVM 的软测量模型的预测均方差逐渐增大,基于 GNN 的 LS-SVM 的软测量模型的预测均方差则变化 不大.这是由于基于 GNN 的 LS-SVM 的软测量模型 根据测试样本进行了动态学习,每一个新样本加入后 模型都会进行在线校正,随着时间推移,其模型能够 适应工况变化,表现出较好的泛化能力.

表1 LS-SVM与GNNLS-SVM在不同样本集下的均方差

样本集	LS-SVM		GNNLS-SVM	
杆平朱	X	S	GNNLS-SVM X 0.009 7 0.0 0.011 7 0.0 0.013 5 0.0 0.015 8 0.0 0.019 1 0.0	S
10	0.013 1	0.023 5	0.0097	0.0117
30	0.0159	0.0249	0.0117	0.0124
50	0.0223	0.0333	0.0135	0.0161
60	0.0312	0.0461	0.0158	0.0193
70	0.0426	0.0612	0.019 1	0.0240

7 结 论

铝电解过程是一个非线性、多变量耦合、时变和 大时滞的工业过程体系,极距等关键参数在线检测 困难,影响了铝电解过程操作优化的有效实施.为此, 本文在深入研究铝电解生产过程机理的基础上,采 用 GNN LS-SVM 的方法实现了极距的软测量.首先 采用 GNN 算法对训练集进行分类,然后对每一类分 别用 LS-SVM 进行训练,并求出相应的回归函数.在 预测过程中,对于每一个新增样本,首先计算其对每 一类的模糊隶属度函数,并用模糊隶属度最大的那一 类回归函数对其进行预测;然后对该 LS-SVM 子模型 进行动态学习获得新的回归函数,实现模型的在线更 新.将所提出的建模方法用于铝电解生产过程极距的 预测,实验结果表明,该方法能够有效地提高模型对 不同工况的适应能力,改善模型的泛化性能,提高模 型的预测精度.

参考文献(References)

- Panaitescu A, Moraru A. Research on the instabilities in the aluminum electrolysis cell[M]. San Diego, 2003: 359-366.
- [2] Urata N. Magnetics and metal pad instability[M]. New York, 1985: 581-589.

- [3] Kurenkov A, Thess A, Zikanov O. Stability of aluminum reduction cell with mean flow[J]. Magneto Hydro Dynamics, 2004, 40(2): 3-13.
- [4] Li He-song, Mei Chi, Zhou Nai-jun. Diagnosis of working conditions of an aluminum reduction cell based on wavelet packets and fuzzy neural network[J]. Chemical Engineering and Processing, 2006, 45(12): 1074-1080.
- [5] 刘庆华,张为公,龚宗洋.广义回归神经网络在汽车换档 机械手运动轨迹测量中的应用[J]. 仪器仪表学报,2008, 29(2): 361-364.

(Liu Q H, Zhang W G, Gong Z Y. Application of general regression neural network(GRNN) in motion track measurement of auto mobile gear shifting manipulator[J]. Chinese J of Scientific Instrument, 2008, 29 (2): 361-364.)

- [6] Vapnik V N. An overview of statistical learning theory[J]. IEEE Trans on Neural Networks, 1999, 10(5): 988-999.
- [7] Suykens J A K, Vandew Alle J. Least squares support vector machine classifiers[J]. Neural Processing Letters, 1999, 9(3): 293-300.
- [8] Suykens J A K, Brabanter De J. Least squares support vector machines[M]. Singapore: World Scientific Publishing Co Pte Lte, 2002: 97-106.
- [9] Stasiak Magdalena, Sikora Jan. Principal component analysis and artificial neural network approach to electrical impedance tomography problems approximated by multiregion boundary element method[J]. Engineering Analysis with Boundary Elements, 2007, 31(8): 713-720.
- [10] Liu Y, Wang H Q, Li P. Adaptive local learning based least squares support vector regression with application to online modeling[J]. J of Chemical Industry and Engineering, 2008, 59(8): 2052-2057.

下 期 要 目

基于 Choquet 积分的模糊数直觉模糊数多属性决策方法 ······	陶长3	琪, 凌和	良
一种目标监测的移动传感器网络覆盖分布式优化算法	;	涂志亮,	等
简化蚁群算法······	• • • į	张兆军,	等
基于自学习采样粒子滤波器的不完备故障空间交互诊断方法	••••	余伶俐,	等
基于谱分析的无线传感器网络模块度分簇算法	•••;	刘逵,	等
基于微粒群算法和网格模型的参数优化方法 ····································	••••	李文启,	等
脉冲变时滞车辆纵向跟随系统的群指数稳定性与控制	••• †	徐晓惠,	等
一种改进的多目标粒子群优化算法及其应用 · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	;	冯琳,	等