

文章编号: 1000-8152(2010)05-0609-06

自适应递推核学习及在橡胶混炼过程在线质量预报的工业应用

刘毅¹, 张锡成², 朱可辉³, 王海清¹, 李平¹

(1. 浙江大学 工业控制技术国家重点实验室 工业控制研究所, 浙江 杭州 310027; 2. 杭州朝阳橡胶有限公司, 浙江 杭州 310018;
3. 青岛市工业信息化技术重点实验室, 山东 青岛 266045)

摘要: 实时测取混炼胶门尼粘度是橡胶和轮胎厂十分关心和亟待解决的问题。采用两阶段递推核学习建模方法, 按配方快速建立橡胶混炼过程门尼粘度的预报模型, 并对模型进行递推更新以适应过程的快速变化。结合混炼过程的特点, 提出一种适合门尼粘度的性能指标, 并推导了采用快速留一交叉验证法对核学习模型参数进行自适应选择, 避免人为选取参数的片面性。所研发的先进密炼信息集成与控制系统已在国内多家大型橡胶和轮胎厂上线应用。门尼粘度实时预报的工业应用结果表明了其实用和有效性, 对橡胶混炼过程具有重要的现实和经济意义。

关键词: 橡胶混炼过程; 门尼粘度; 核学习; 递推估计; 参数选择; 交叉验证

中图分类号: TP330.6; TP301.6 文献标识码: A

Adaptive recursive kernel learning with application to online quality prediction of industrial rubber mixing process

LIU Yi¹, ZHANG Xi-cheng², ZHU Ke-hui³, WANG Hai-qing¹, LI Ping¹

(1. State Key Laboratory of Industrial Control Technology, Institute of Industrial Process Control,
Zhejiang University, Hangzhou Zhejiang 310027, China;
2. Hangzhou Chaoyang Rubber Co. Ltd., Hangzhou Zhejiang 310018, China;
3. Key Laboratory of Industrial Information Technology, Qingdao Shandong 266045, China)

Abstract: Mooney viscosity having significant impact on the properties of the polymer is very difficult to be measured online. A new modeling method using two-stage recursive kernel-learning is proposed for online modeling and prediction of Mooney viscosity in the rubber mixing processes. The model can be established online for each recipe and recursively updated to adapt fast changes of the process. In the present method, a novel error evaluation index is formulated based on the mixing properties. The model parameters are online selected adaptively, using the fast leave-one-out cross validation criterion, to overcome the embarrassment of parameter selection. An industrial system named as Smart Mixing Information Integrated & Control System has been developed and successfully applied to several large-scale rubber and tire manufacturers in China. The results of Mooney viscosity online prediction show that the developed method is very efficient and thus has real economic importance for rubber mixing processes.

Key words: rubber mixing process; Mooney viscosity; kernel-learning; recursive estimation; parameter selection; cross validation

1 引言(Introduction)

橡胶混炼是轮胎加工的首道工序, 其目的是将生胶及各种添加剂混合成性能均匀一致的胶料。混炼胶的质量决定了后续工序的功效, 对产品性能影响很大。在混炼过程中, 主要通过控制其门尼粘度来保证混炼胶质量。因此, 实时测取混炼胶门尼粘度是橡胶和轮胎厂十分关心和亟待解决的问题^[1~3]。橡胶混炼过程属于典型的具有不可测扰动的快速、时变、非线性间歇过程。它存在以下显著特点:

1) 无可靠的机理模型, 过程的非线性、时变性和不确定性严重, 过程数据噪声大且变量相关性强。

2) 原材料随批次波动较大, 配方和工艺种类繁多且变换频繁。

3) 门尼粘度的质检费时费力且存在严重滞后(质检结果通常需6~8 h后才能得到), 由于采用抽检方式, 只能得到非常有限的质检结果。

因此, 传统的神经网络^[2]和多变量回归^[3]等基于数据的建模方法很难建立准确的、且能在线更新

收稿日期: 2008-12-22; 收修改稿日期: 2009-06-22。

基金项目: 国家科技支撑计划资助项目(2007BAF14B02); 教育部留学回国人员科研启动基金资助项目。

的模型适合门尼粘度的实时预报,因此大部分方法只停留在实验室阶段。支持向量机等核学习建模方法^[4,5]能在小样本情况下较好的处理非线性建模^[6]、监测^[7]和控制^[8]问题。结合橡胶混炼过程的特点,本文提出采用自适应递推核学习建模方法按配方快速建立门尼预报模型,并推导了快速留一交叉验证法^[9]自适应选择核学习模型参数,保证模型具有统计意义上较好的推广性能,避免人为选择参数的片面性。所研发的先进密炼信息集成与控制系统已在国内多家大型橡胶和轮胎厂上线应用。

2 自适应递推核学习建模理论(Adaptive recursive kernel learning modeling theory)

2.1 MIMO过程的核学习建模方法(Kernel learning modeling method for MIMO process)

非线性过程的辨识和软测量建模问题均可表示为用函数 $f: \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$ 来拟合测量序列 $\mathcal{S} = \{(\mathbf{x}_1, \mathbf{y}_1), \dots, (\mathbf{x}_N, \mathbf{y}_N)\} \subset \mathcal{X} \times \mathcal{Y}$,其中 \mathbf{x} 为自变量, \mathbf{y} 为因变量。核学习建模问题即利用非线性映射 $\phi(\mathbf{x})$: $\mathcal{X} \rightarrow \mathcal{H}$ 将数据集 \mathcal{S} 映射到高维线性特征空间 \mathcal{H} ,并在其中构建最优回归函数。核学习建模框架下的非线性MIMO模型为^[7]

$$\begin{aligned} y_{k,m} &= f(w_{k,m}, b_{k,m}, \mathbf{x}_k) + e_{k,m} = \\ &w_{k,m}^T \phi(\mathbf{x}_k) + b_{k,m} + e_{k,m}, \end{aligned} \quad (1)$$

式中: $f \in \mathcal{H}$ 为待求的模型; $y_{k,m}$ 为 k 时刻第 m 个输出的测量值, $m = 1, \dots, M$, M 为模型的总输出数量; \mathbf{x}_k 为模型的广义输入向量,由选定的输入变量及其延迟项组成; $w_{k,m}$ 和 $b_{k,m}$ 分别表示 k 时刻第 m 个子系统的权值向量和偏置; $e_{k,m}$ 为相应的噪声项。

采用MIMO形式的递推最小二乘支持向量机回归(recursive least squares support vector regression, RLSSVR)^[6]求解模型 f 便于后续比较:

$$\min J(w_{k,m}) = \frac{1}{2} \|w_{k,m}\|^2 + \frac{\gamma}{2} \|e_{k,m}\|^2, \quad (2)$$

$$\text{s.t. } \begin{aligned} y_{i,m} - w_{i,m}^T \phi(\mathbf{x}_i) - b_{i,m} - e_{i,m} &= 0, \\ i &= 1, \dots, k. \end{aligned} \quad (3)$$

式中: $e_{k,m} = [e_{1,m} \ e_{2,m} \ \dots \ e_{k,m}]^T$; $\|w_{k,m}\|^2/2$ 为正则化项。惩罚系数 $\gamma > 0$ 用于控制模型解的光滑度,其值越大代表对误差的惩罚力度越强。求解式(2)的等式约束优化问题可得如下线性方程组:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_k + \mathbf{I}_k / \gamma \mathbf{1}_k \\ \mathbf{1}_k^T \ 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_{k,m} \\ b_{k,m} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{y}_{k,m} \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (4)$$

式中: $\mathbf{y}_{k,m} = [y_{1,m} \ \dots \ y_{k,m}]^T$, $\mathbf{I}_k \in \mathbb{R}^{k \times k}$ 为单位阵, $\mathbf{1}_k = [1 \ \dots \ 1]^T \in \mathbb{R}^k$ 为全1向量; \mathbf{K}_k 为核矩阵,

由Mercer定理^[4,5],其元素可表示为 $K_k(i,j) = \langle \phi(\mathbf{x}_i), \phi(\mathbf{x}_j) \rangle, \forall i, j = 1, \dots, k$ 。记 $\mathbf{H}_k = \mathbf{K}_k + \mathbf{I}_k / \gamma$, $\mathbf{P}_k = \mathbf{H}_k^{-1}$,求解式(3)可得模型参数:

$$\begin{cases} \alpha_{k,m} = \mathbf{P}_k[\mathbf{y}_{k,m} - \frac{\mathbf{1}_k \mathbf{1}_k^T \mathbf{P}_k \mathbf{y}_{k,m}}{\mathbf{1}_k^T \mathbf{y}_{k,m} \mathbf{1}_k}], \\ b_{k,m} = \frac{\mathbf{1}_k^T \mathbf{P}_k \mathbf{y}_{k,m}}{\mathbf{1}_k^T \mathbf{y}_{k,m} \mathbf{1}_k}. \end{cases} \quad (5)$$

进而对 $k+1$ 时刻进行预报:

$$f(\mathbf{w}_{k,m}, \mathbf{x}_{k+1}) = \alpha_{k,m}^T \mathbf{k}_{k+1} + b_{k,m}. \quad (6)$$

式中: $\alpha_{k,m} = [\alpha_{k,m,1} \ \dots \ \alpha_{k,m,k}]^T$ 为 k 时刻第 m 个子系统的拉格朗日乘子, $\mathbf{w}_{k,m} = \sum_{i=1}^k \alpha_{k,m,i} \phi(\mathbf{x}_i)$; $\mathbf{k}_{k+1}(i) = \langle \phi(\mathbf{x}_i), \phi(\mathbf{x}_{k+1}) \rangle, \forall i = 1, \dots, k$ 为 $k+1$ 时刻相应的核向量。

2.2 模型参数自适应选择(Adaptive model parameter selection)

优选数学模型是提高混炼胶门尼粘度预报精度的有效措施。针对橡胶混炼过程,试图建立单一固定的模型是不现实的。只有根据过程的实际特性,对不同配方建立不同的模型进行预报才具有可行性。由于核函数及相关参数对核学习模型的性能有较大影响^[4,5],因此有必要建立模型参数能自适应选择的核学习模型,以适合橡胶混炼过程的工程需要。

传统的留一交叉验证法(leave-one-out, LOO)^[4,5]计算量大,只能用于离线参数选择。文献[9]提出一种快速LOO方法(fast LOO, FLOO)估计最小二乘支持向量机分类器的泛化误差,文献[6]首次将其用于递推模型的在线修剪。本文结合橡胶混炼过程的特点,提出一种适合门尼粘度的误差评价性能指标,并将FLOO用于递推模型参数的在线优化,在每次预报时能自适应的快速选择模型参数。

核学习模型需选择的参数有正则化参数 γ 和核函数参数 σ 。采用通用的Gaussian核 $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \exp(-\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|^2 / \sigma^2)$,记待选模型参数集为 $S_{\text{par}} = [\gamma_S, \sigma_S]$ 。设在 k 时刻模型有 N_k ($N_k \geq 1$)个节点,节点集记为 $\mathbf{N}_k = \{(\mathbf{x}_1, \mathbf{y}_1), \dots, (\mathbf{x}_{N_k}, \mathbf{y}_{N_k})\}$ 。为便于推导,将式(4)左边重新分为

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}_{N_k} + \mathbf{I}_{N_k} / \gamma \mathbf{1}_{N_k} \\ \mathbf{1}_{N_k}^T \ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_{11} & \mathbf{q}_1^T \\ \mathbf{q}_1 & \mathbf{Q}_1 \end{bmatrix} = \mathbf{Q}. \quad (7)$$

则相应的有式(8)和式(9)成立:

$$q_{11} \alpha_{1,m} + \mathbf{q}_1^T [\bar{\alpha}_{N_k,m}^T \ b_{N_k,m}]^T = y_{1,m}, \quad (8)$$

$$[\mathbf{q}_1 \ \mathbf{Q}_1] [\bar{\alpha}_{N_k,m}^T \ b_{N_k,m}]^T = [\bar{\mathbf{y}}_{N_k,m}^T \ 0]^T. \quad (9)$$

式中: $\bar{\alpha}_{N_k,m}$ 和 $\bar{\mathbf{y}}_{N_k,m}$ 分别表示 $\alpha_{N_k,m}$ 和 $\mathbf{y}_{N_k,m}$ 去掉

第1行, 即

$$\begin{aligned}\alpha_{N_k,m}^T &= \left[\alpha_{1,m} \bar{\alpha}_{N_k,m}^T \right]^T, \\ \mathbf{y}_{N_k,m}^T &= \left[y_{1,m} \bar{\mathbf{y}}_{N_k,m}^T \right]^T.\end{aligned}$$

当采用FLOO方法进行交叉验证时, 记第*i*次迭代后RLSSVR模型的参数变为 $\alpha_{N_k,m}^{(-i)}$ 和 $b_{N_k,m}^{(-i)}$, 则当第1个节点被排除时, 基于FLOO得到的新模型参数对第1个节点的估计值为(结合式(8)和式(9)推导)^[6]

$$\hat{y}_{1,m}^{(-1)} = y_{1,m} - \alpha_{1,m} (q_{11} - \mathbf{q}_1^T \mathbf{Q}_1^{-1} \mathbf{q}_1). \quad (10)$$

同时, 由分块矩阵的求逆定理^[10]有下式成立:

$$\begin{bmatrix} q_{11} & \mathbf{q}_1^T \\ \mathbf{q}_1 & \mathbf{Q}_1 \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} c^{-1} & -c^{-1} \mathbf{q}_1 \mathbf{Q}_1^{-1} \\ \mathbf{Q}_1^{-1} + c^{-1} \mathbf{Q}_1^{-1} \mathbf{q}_1^T \mathbf{q}_1 \mathbf{Q}_1^{-1} & -c^{-1} \mathbf{Q}_1^{-1} \mathbf{q}_1^T \end{bmatrix}, \quad (11)$$

其中 $c = q_{11} - \mathbf{q}_1^T \mathbf{Q}_1^{-1} \mathbf{q}_1$. 因此, 采用FLOO方法获得第1个节点的预报误差为

$$e_{1,m}^{\text{FLOO}} = y_{1,m} - \hat{y}_{1,m}^{(-1)} = \alpha_{1,m} / Q_{11}^{-1}. \quad (12)$$

注意到在求解式(4)的线性方程组时, 改变各方程的顺序不影响最终的解. 因此, 基于FLOO方法对第*i*个节点的预报误差可表示为^[6]

$$e_{i,m}^{\text{FLOO}} = y_{i,m} - \hat{y}_{i,m}^{(-1)} = \alpha_{i,m} / Q_{ii}^{-1}. \quad (13)$$

进一步, 对 \mathbf{Q} 采用分块矩阵的求逆公式^[10]可得 \mathbf{Q}^{-1} 和 \mathbf{P}_{N_k} 的关系:

$$\mathbf{Q}^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{P}_{N_k} + \mathbf{P}_{N_k} \mathbf{1}_{N_k} \mathbf{1}_{N_k}^T \mathbf{P}_{N_k} / o & -\mathbf{P}_{N_k} \mathbf{1}_{N_k} / o \\ -\mathbf{1}_{N_k}^T \mathbf{P}_{N_k} / o & 1/o \end{bmatrix}, \quad (14)$$

式中 $o = -\mathbf{1}_{N_k}^T \mathbf{P}_{N_k} \mathbf{1}_{N_k}$ 为标量. 因此, \mathbf{Q}^{-1} 和 \mathbf{P}_{N_k} 对角线上前 N_k 个元素满足下述关系:

$$Q_{ii}^{-1} = P_{N_k,ii} + s_i^2 / o, \quad i = 1, \dots, N_k, \quad (15)$$

式中 $\mathbf{s} = \mathbf{P}_{N_k} \mathbf{1}_{N_k} = [s_1 \dots s_{N_k}]^T$. 将式(15)代入式(13)可得

$$e_{i,m}^{\text{FLOO}} = \alpha_{i,m} / (P_{N_k,ii} + s_i^2 / o), \quad i = 1, \dots, N_k. \quad (16)$$

因此, 基于FLOO的全样本预报总误差为

$$E_{N_k}^{\text{FLOO}} = \prod_{i=1}^{N_k} e_i^{\text{FLOO}}, \quad (17)$$

式中 $e_i^{\text{FLOO}} = [e_{i,1}^{\text{FLOO}} \dots e_{i,M}^{\text{FLOO}}]^T$. 所提出的模型参数自适应选择方法就是找出基于FLOO的全样本预报总误差最小的参数对, 即 $\arg \min E_{N_k}^{\text{FLOO}}$. 由于 $\alpha_{i,m}$ 和 $P_{N_k,ii}$ 等项均已知, \mathbf{s} 和 o 的计算量很小, 因此, e_i^{FLOO} 的计算复杂度大约为 $\mathcal{O}(N_k)$. 基于FLOO

计算 $E_{N_k}^{\text{FLOO}}$ 时只有一次求逆运算(即求 \mathbf{P}_{N_k}), 计算量为普通LOO算法的 $1/N_k$.

门尼粘度的均一性对混炼胶非常重要, 仅考虑式(17)的性能指标会造成模型在预报时偏向于较大的方差(即某些车次过拟合或预报较为不准), 有必要结合过程特点对其进行修正. 考虑到橡胶混炼工业中往往以门尼粘度设定值在±3或者±5的百分比来衡量其均一性能. 因此, 以±3为例(记为E3P), 首先计算基于FLOO的预报误差在±3的百分比:

$$\text{E3P} = \frac{\sum (|e_i^{\text{FLOO}}| \leq 3)}{N_k}, \quad i = 1, \dots, N_k. \quad (18)$$

针对门尼粘度的预报性能提出如下改进指标:

$$E_{N_k}^{\text{FLOO}} = (1 - \text{E3P}) \prod_{i=1}^{N_k} e_i^{\text{FLOO}}. \quad (19)$$

该指标保证基于FLOO的全样本预报总误差尽量小, 且均一性能较好, 不会出现较大的方差. 炼胶过程的工业应用结果表明, 采用改进指标建立的模型在预报门尼时很少出现某些车次较大的偏差, 增加了预报的可信度, 取得了更好的效果.

2.3 两阶段递推更新(Two-stage recursive update)

为保证在工业应用中尽量减少计算量和存储空间, 并能及时将最新的质检结果融入模型, 使所建模型具有好的自适应能力, 当增加和删减模型的样本时, 均采用递推更新算法.

在 $k+1$ 时刻, 当 $[\mathbf{x}_{k+1}, \mathbf{y}_{k+1}]$ 加入模型(记相应节点为 $[\mathbf{x}_{N_{k+1}}, \mathbf{y}_{N_{k+1}}]$), 可对核学习模型进行更新. 注意到求解 $\alpha_{N_{k+1},m}$ 和 $b_{N_{k+1},m}$ 的关键在于求 $\mathbf{P}_{N_{k+1}}$ (参考式(4)和式(5), 区别在于此处的模型阶次为 N_k). 根据矩阵和的求逆公式可得 $\mathbf{P}_{N_{k+1}}$ 的递推式为^[10]

$$\mathbf{P}_{N_{k+1}} = \begin{bmatrix} \mathbf{P}_{N_k} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + \mathbf{r}_{N_{k+1}} \mathbf{r}_{N_{k+1}}^T z_{N_{k+1}}, \quad (20)$$

式中:

$$\begin{aligned}\mathbf{r}_{N_{k+1}} &= [\mathbf{V}_{N_{k+1}}^T \mathbf{P}_{N_k}, -1]^T, \\ z_{N_{k+1}} &= 1 / (v_{N_{k+1}} - \mathbf{V}_{N_{k+1}}^T \mathbf{P}_{N_k} \mathbf{V}_{N_{k+1}})\end{aligned}$$

和

$$v_{N_{k+1}} = \mathbf{K}(\mathbf{x}_{N_{k+1}}, \mathbf{x}_{N_{k+1}}) + 1/\gamma$$

为标量,

$$\mathbf{V}_{N_{k+1}} = [\mathbf{K}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_{N_{k+1}}) \dots \mathbf{K}(\mathbf{x}_{N_k}, \mathbf{x}_{N_{k+1}})]^T.$$

因此, 模型在节点增长时 $\mathbf{P}_{N_{k+1}}$ 可由 \mathbf{P}_{N_k} 递推求得, 无需求逆. 每增加一个节点, 运算复杂度由原来的 $\mathcal{O}(N_k^3)$ 减至 $\mathcal{O}(N_k^2)$.

考虑到混炼过程的原料经常波动, 配方和工艺变

换较为频繁, 必须对模型进行有效更新以保证其适应性; 另一方面, 当模型节点集(即样本长度)增长到一定程度时, 有必要对其进行修剪控制复杂度, 以满足混炼过程的实时性要求。

传统的模型修剪方法或去掉最旧的样本^[7], 或去除 $|\alpha|$ 值较小的样本^[5], 但都无法保证去掉的样本给原有模型造成的损失最小。由2.2节推导可知删除第*i*个节点后的预报误差与原模型存在式(16)的关系, 而不仅仅和 $\alpha_{i,m}$ 有关。文献[6]从在线更新模型的角度出发, 提出了一种基于FLOO^[9]的修剪算法, 即找出被删除后基于FLOO预报误差最小的节点:

$$\arg \min \prod_{m=1}^M e_{i,m}^{\text{FLOO}}, i = 1, \dots, N_k.$$
 它能保证修剪后的模型获得最好的推广性能, 且计算简单, 有效克服了普通方法随意删减样本的缺点。

于是, 当混炼过程工况变化较大(原胶、工艺配方、混炼规程变化等)或节点数 $N_k > N$ 时对模型进行自适应修剪; 当获得最新的质检结果则进行模型节点的向前递推学习, 两阶段更新交替进行。当获得每一班次的质检结果后自适应递推更新模型参数。因此, 自适应递推核学习方法在线建立和预报混炼胶的门尼粘度始终能快速适应过程的变化。

3 工业应用: 混炼胶门尼在线建模与预报(Industrial application: Mooney viscosity online modeling and prediction of rubber mixing process)

3.1 先进密炼信息集成与控制系统(Smart mixing information integrated & control system)

为了解决当前混炼过程存在的门尼粘度等重要质量指标无法在线测量和质量控制效果不理想等问题, 研发了先进密炼信息集成与控制系统(smart mixing information integrated & control system, SMS), 并在国内多个轮胎厂进行了现场应用。限于篇幅, 本文主要讨论SMS的建模和预报功能。对门尼粘度进行在线建模与预报:

1) 提供产品的终端质量和批次间的过程信息, 给操作人员和工艺工程师丰富的过程变化信息;

2) 减少对质量检测设备(如门尼仪)的投入, 降低企业成本, 减轻各阶段质检的工作强度和压力。

图1给出了先进密炼信息集成与控制系统的整体界面, 主要包括生产计划、生产监控、先进控制、生产管理、配方工艺、模型引擎等多个模块, 集成了整个炼胶过程的全部信息。其中, 模型引擎模块主要用于实现建模和预报功能。

如图2所示, 系统的模型引擎是按配方定制的。由于橡胶配方种类繁多, 无法建立单一固定的模型, 只

有根据过程的特性建立不同的模型进行预报才具有可行性。在模型引擎中可根据工艺经验和配方特点制定模型广义输入变量, 自适应优化模型参数建立模型, 保证门尼预报在大多数情况下的效果。

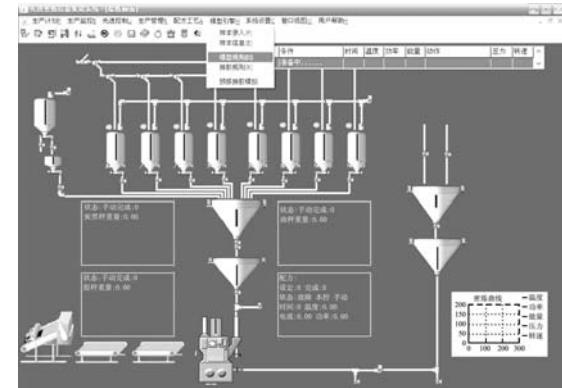


图1 先进密炼信息集成控制系统界面和模型引擎模块

Fig. 1 SMS and its advanced model module

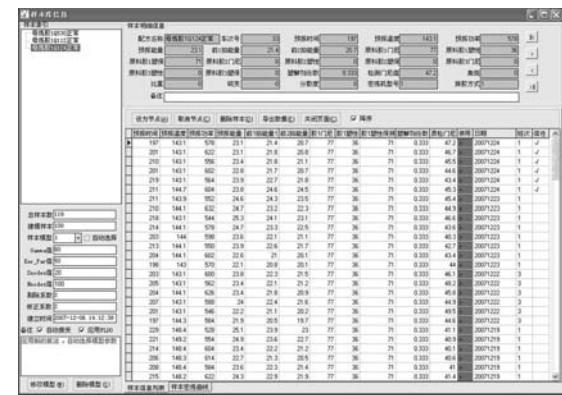


图2 先进密炼信息集成控制系统模型库信息

Fig. 2 Advanced model store of SMS

3.2 门尼粘度模型建立和在线预报(Online modeling and prediction of Mooney viscosity)

图3给出了门尼粘度在线预报的流程图。该系统执行非常方便, 只需要少量的建模样本(2至3个班次, 20个左右)即可启动门尼在线建模与预报功能。

建立混炼胶的自适应递推核学习门尼粘度模型和在线预报按如下步骤执行:

Step 1 自适应建立预报模型: 录入1个班次的门尼质检数据, 系统会自动查询模型库得到最近几个班次的质检数据和相应的广义输入变量; 选择1组模型参数进行向前递推学习(式(20)), 获得模型和相应的总预报误差评价(式(19)); 依次评价备选模型参数的总预报误差, 最终获得最优参数的预报模型;

Step 2 在线预报: 实时采集过程变量, 对门尼粘度进行在线预报;

Step 3 当混炼过程工况发生较大变化或节点数 $N_k > N$ 时, 进行模型自适应修剪;

Step 4 获得新班次的质检数据时, 执行Step1.

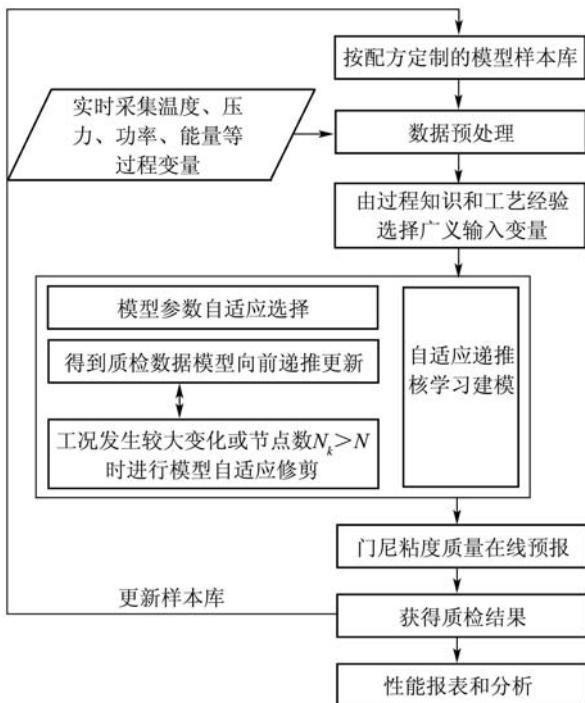


图3 门尼粘度在线预报流程图

Fig. 3 Mooney viscosity online prediction flowchart

3.3 现场应用效果(Industrial application results)

所开发的先进密炼信息集成与控制系统已经在国内多家大型橡胶和轮胎厂进行了现场应用, 系统的门尼预报模块完全满足橡胶混炼过程的在线运行要求。系统于2007年12月至2008年1月在国内某橡胶厂1#和2#密炼机上线运行, 实现了6个配方、近2千车混炼胶的门尼在线预报。经过400多车次质检结果的对比, 表明了采用自适应递推核学习方法建立混炼胶门尼的在线预报模型能够取得很好的效果。

以母炼胶配方1Q510的应用效果为例对在线预报性能作出综合评估, 并验证自适应参数选择方法的有效性。密炼机型号为F370, 采用UCAN的门尼粘度仪进行质检, 2007年12月份共获得120车有效质检。表1主要列出了自适应参数选择方法和其他3种现场运行效果较好且有代表性参数对的在线预报比较结果, 性能指标主要包括最大绝对误差(maximal error, ME)、预报均方误差(root mean square error, RMSE)、预报相对均方误差(relative RMSE, RE)、预报绝对误差在2个和3个门尼内的百分比(分别记为E2P和E3P)。

从表1的各性能指标分析可知自适应参数选择能获得稳定且最好的预报性能, RMSE为2.08个门尼, 仅为门尼粘度均值的5.23%, 该精度能满足实际生产中后续橡胶加工的工艺要求。经过多个配方

上千车次的现场应用发现, 人工选择的参数虽然针对个别配方在工况较稳定的少数班次能获得不错的效果, 但混炼过程不确定性严重, 不同班次间经常会有大的波动, 一旦原材料或工艺配方等变化较大, 人为选择的模型参数无法自适应更新以适应过程的变化, 从而导致预报结果不稳定。在每班次运行FLOO算法自适应选择参数, 能保证相应的递推核学习模型克服各种原因导致过程班次间的波动, 从而更准确的实时预报门尼粘度。

表1 1Q510在线质量预报性能比较

Table 1 Online quality prediction performance comparison of recipe 1Q510

(γ, σ^2)	性能指标				
	RMSE	RE/%	ME	E2P/%	E3P/%
FLOO	2.08	5.23	6.69	70.8	83.3
(100,20)	2.80	6.83	7.15	64.6	76.0
(10,100)	2.15	5.40	7.00	66.7	83.3
(500,2)	3.34	8.26	8.82	43.8	63.5

图4给出了1Q510门尼粘度的在线预报和误差情况, 整体应用效果获得厂方认可。在第1班次应用时, 少数车次预报误差偏大; 从第2班次开始, 随着模型的自适应更新, 误差明显减少, 且比较稳定; 后续阶段预报效果越来越好。由表1结合图4可知在2007年12月的现场应用中, 大部分门尼预报的绝对误差均在3个门尼内。这反映了递推核学习建模算法不仅具有较好的建模能力, 且自学习能力很强, 能够将过程的信息及时融合到模型中提高模型的预报能力。

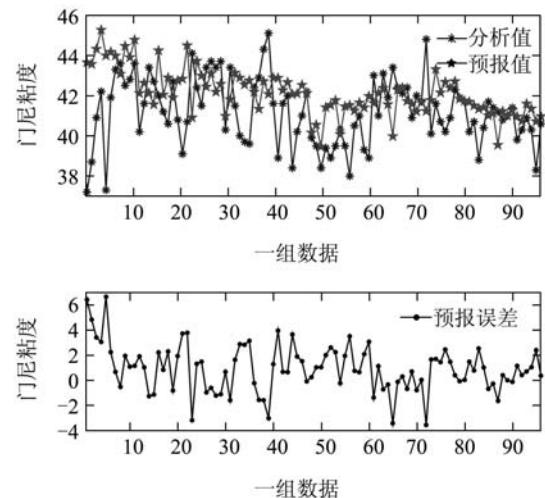


图4 门尼粘度在线预报结果

Fig. 4 Mooney viscosity online prediction result

图5给出了SMS门尼粘度在线预报的现场运行界面(应厂方要求略去部分配方信息)。每车次结束后,

系统能够立即提供该车次的门尼粘度值;如果过程发生大的变化,在线预报还会给出相应的提示信息供中控室人员和工艺人员参考.因此,现场应用充分验证了采用FLOO算法进行参数选择的自适应递核学习模型能够对门尼粘度进行准确的实时预报,满足了橡胶混炼过程的实际需求.

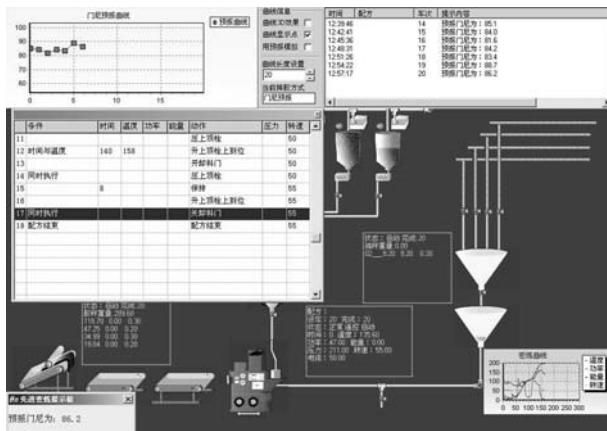


图5 门尼粘度在线预报现场运行界面

Fig. 5 Industrial application interface of Mooney viscosity online prediction

4 结论(Conclusion)

橡胶混炼过程原料随批次的波动大,配方和工艺变换频繁,非线性、时变性和不确定性严重,且只能得到有限的质检结果,传统的神经网络和多变量回归等方法难以准确预报门尼粘度等重要的质量指标.所提出的自适应递推核学习建模方法适合橡胶混炼过程质量的在线预报,能提供产品的终端质量和批次间的过程信息,减少质检设备的投入,降低企业的成本,减轻质检的工作强度和压力.所研发的先进密炼信息集成与控制系统在国内多家大型橡胶和轮胎厂的工业应用表明了其有效性和实用性,对橡胶混炼过程具有重要的现实和经济意义.

参考文献(References):

- [1] MARK J E, ERMAN B, EIRICH F R. *The Science and Technology of Rubber*[M]. San Diego, CA: Elsevier Academic Press, 2005.
- [2] MARCOS A G, ESPINOZA A V P, ELIAS F A, et al. A neural network-based approach for optimising rubber extrusion lines[J]. *International Journal of Computer Integrated Manufacturing*, 2007, 20(8): 828 – 837.

- [3] 宋凯, 王海清, 李平. 折息递推PLS算法及其在橡胶混炼质量控制中的应用[J]. 化工学报, 2004, 55(6): 942 – 946.
(SONG Kai, WANG Haiqing, LI Ping. Discounted-measurement rpls algorithm and its application to quality control of rubber mixing process[J]. *Journal of Chemical Industry and Engineering (China)*, 2004, 55(6): 942 – 946.)
- [4] SCHOLKOPF B, SMOLA A J. *Learning with Kernels*[M]. Cambridge, MA: The MIT Press, 2002.
- [5] SUTKENS J A K, VAN GESTEL T, DE BRABANTER J, et al. *Least Squares Support Vector Machines*[M]. Singapore: World Scientific, 2002.
- [6] 刘毅, 陈坤, 王海清, 等. 选择性递推LSSVR及其在过程建模中的应用[J]. 高校化学工程学报, 2008, 22(6): 1043 – 1048.
(LIU Yi, CHEN Kun, WANG Haiqing, et al. Selective recursive LSSVR and its applications in process modeling[J]. *Journal of Chemical Engineering of Chinese Universities*, 2008, 22(6): 1043 – 1048.)
- [7] WANG H Q, LI P, SONG Z H, et al. Kernel classifier with adaptive structure and fixed memory for process diagnosis[J]. *AICHE Journal*, 2006, 52(10): 3515 – 3531.
- [8] 刘毅, 王海清, 李平. 采用Brent优化的核学习单步预测控制算法[J]. 控制理论与应用, 2009, 26(1): 107 – 110.
(LIU Yi, WANG Haiqing, LI Ping. Kernel learning one-step-ahead predictive control algorithm using Brent optimization[J]. *Control Theory & Applications*, 2009, 26(1): 107 – 110.)
- [9] CAWLEY G C, TALBOT N L C. Preventing over-fitting during model selection via Bayesian regularisation of the hyperparameters[J]. *Journal of Machine Learning Research*, 2007, 8(4): 841 – 861.
- [10] GOLUB G H, VAN LOAN C F. *Matrix Computations*[M]. Baltimore: The John Hopkins University Press, 1996.

作者简介:

刘毅 (1982—), 男, 博士, 讲师, 研究领域为核学习自适应建模与控制及工业应用等, E-mail: yliu@iipc.zju.edu.cn;

张锡成 (1950—), 男, 高级工程师, 研究领域为橡胶和轮胎工业先进技术装备等, E-mail: zxc0501@163.com;

朱可辉 (1977—), 男, 软件架构师, 研究领域为橡胶行业网络信息系统等, E-mail: zhukh@mesnac.com;

王海清 (1974—), 男, 博士, 副教授, 研究领域为工业过程的统计学习建模、监测与故障诊断等, E-mail: hqwang@iipc.zju.edu.cn. 本文通讯作者;

李平 (1954—), 男, 博士, 教授, 研究领域为复杂工业过程建模与控制等, E-mail: pli@iipc.zju.edu.cn.