

DOI: 10.7641/CTA.2013.00000

金氰化浸出过程实时优化

张俊^{1†}, 毛志忠^{1,2}, 贾润达^{1,2}

(1. 东北大学 信息科学与工程学院, 辽宁 沈阳 110819;

2. 东北大学 流程工业综合自动化国家重点实验室, 辽宁 沈阳 110819)

摘要: 本文以某湿法冶炼厂金氰化浸出过程为背景, 建立了动态机理模型, 为提高模型参数辨识精度, 提出了基于Tikhonov正则化思想利用含噪声的浓度测量数据估计动力学反应速度的策略. 为减小模型与实际过程不匹配对实时优化结果的影响, 提出了基于对数-线性障碍-罚函数和输出反馈的直接输入自适应方法, 加入障碍-罚函数后, 该方法可以解决含有不等式约束的优化问题, 将其应用到金氰化浸出过程实时优化中, 仿真结果表明在输出测量值无噪声时, 该方法能很快地局部收敛到实际过程的最优设定值; 而当测量噪声较小或对目标函数影响较小时, 该方法也显示出了优越的性能, 而且只需要过程标称模型和实际输出, 不要求实际过程数据梯度, 受测量噪声影响较小, 更易于实际实施, 这为湿法冶金全流程优化控制的顺利实施奠定了重要基础.

关键词: 氰化浸出; 机理建模; Tikhonov正则化; 模型不确定性; 实时优化; 邻域极值控制; 输出反馈; 直接输入自适应

中图分类号: TP301.6 文献标识码: A

Real-time optimization for gold cyanidation leaching process

ZHANG Jun^{1†}, MAO Zhi-zhong^{1,2}, JIA Run-da^{1,2}

(1. College of Information Science and Engineering, Northeastern University,

Liaoning Shenyang 110819, China;

2. State Key Laboratory of Synthetical Automation for Process Industries, Northeastern University,

Liaoning Shenyang 110819, China)

Abstract: Based on the gold cyanidation leaching process in some hydrometallurgy plant, a dynamic mechanism model is established. The Tikhonov regularization method is used to estimate the unavailable kinetic reaction rates with concentration measurements, which aims at improving the identification accuracy of model parameters. To reduce the impact resulted from the mismatch between model and actual process, the direct input adaptation method based on logarithmic-linear barrier-penalty function and output feedback is proposed and applied to gold cyanidation leaching process, which can solve the optimization problem with inequality constraints. The simulation results show that if the measurement noise is negligible, the input can converge locally to the optimal set point of the actual process without estimating the measurement gradients and only the nominal model as well as output measurements are necessary, which is easier to be implemented in practice and has laid an important foundation for the successful implementation of the plant-wide optimization and control for hydrometallurgy process.

Key words: cyanidation leaching; mechanism modeling; Tikhonov regularization; model uncertainty; real-time optimization; neighboring-extremal control; output feedback; direct input adaptation

1 引言(Introduction)

作为当今世界湿法提金最主要的方法, 金氰化浸出过程主要利用氰化物(通常是氰化钠)的水溶液将金从矿石原料中提取并分离出来, 其设计及生产成本较低, 贵金属回收率高, 而且对矿石的类型要求较低, 目前已得到了广泛的应用^[1-5]. 浸出过程是整个湿法冶金流程最重要的生产工序, 其性能直接影响后续各工序的质量. 浸出率是衡量浸出过程性能优劣的最重要指标, 一般要求在满足全流程指定

的浸出率指标前提下, 浸出生产过程的生产成本最低^[2-4]. 为实现上述目的, 通常需要对浸出过程实施优化控制, 即确定使生产成本最低的浸出过程各浸出槽氰化钠添加量的设定值, 使浸出过程作为湿法冶金全流程的子工序达到全流程优化控制所要求的最佳运行状态.

对浸出过程实施优化控制, 前提是准确建立过程模型^[6]. 金氰化浸出过程的动态机理模型由金、氰离子守恒方程和相应的动力学反应速度模型组成.

收稿日期: xxxx-xx-xx; 收修改稿日期: xxxx-xx-xx.

†通信作者. Tel.: +8613998240211.

基金项目: 国家863计划项目(2011AA060204);国家自然科学基金(61203103);中央高校基本科研业务费(N110304006).

而由于动力学内部复杂的反应机理, 影响因素众多, 对于不同的矿石原料及工艺条件, 经验的动力学模型参数很难准确描述实际浸出过程特性, 其参数必须依靠有限的实际过程数据辨识, 而在辨识之前最关键的是基于含测量噪声的实际测量数据尽可能准确地估计未知的动力学反应速度, 这是一个不适定逆问题^[7], 为了减小浓度测量噪声对估计结果的影响, 本文提出了金氰化浸出过程动力学反应速度的Tikhonov正则化估计策略, 在无动力学模型和浓度存在测量噪声的情况下该方法可以较准确地估计动力学反应速度。

由于无法准确获得动力学反应速度, 基于含噪声实际测量数据的估计值仍有一定偏差, 进而导致动力学模型参数的辨识结果存在偏差, 即: 所建过程模型与实际过程不能完全匹配, 模型具有一定的不确定性, 这导致基于上述模型的实时优化(RTO)结果不是实际过程的最优设定, 有时甚至是不可行的。为此, 本文提出了基于输出反馈的金氰化浸出过程实时优化直接输入自适应策略以降低模型失配对最优性的影响, 该方法只需要过程标称模型及实际输出, 不需要估计实际输出对输入的梯度, 可有效减少由测量噪声引起的梯度估计误差对算法收敛性及最优性的影响, 更便于实际过程应用。

2 金氰化浸出过程建模(Modeling for gold cyanidation leaching process)

本文以某湿法冶炼厂金氰化浸出过程为背景, 该浸出是一连续浸出过程, 浸出反应器为四个溢流连接的气力浸出槽, 浸出剂为氰化钠, 通过风机不断地向浸出槽中通入压缩空气, 这一方面提供浸出过程所需的溶解氧, 另一方面产生一定的气力搅拌作用使浸出过程反应更充分, 该浸出过程的原理示意图如图1所示。

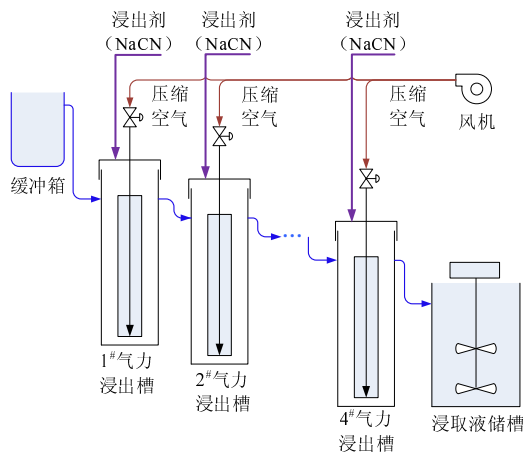
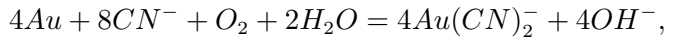


图1 金氰化浸出过程原理示意图

Fig. 1 Schematic diagram of gold cyanidation leaching process

2.1 动态机理模型(Dynamic mechanism model)

金氰化浸出过程可由如下的化学反应方程式表示^[1-4]:



即: 矿浆固相中难溶的金与氰化钠、氧气、水反应生成可溶于水的金氰络合离子 $[Au(CN)_2]^-$, 进而进入矿浆液相与固相分离。

金氰化浸出过程是一个典型的化工过程, 各级浸出过程的动态机理模型分别由固相、液相金守恒方程、液相氰离子守恒方程及相应的金溶解速度模型、氰离子消耗速度模型组成, 如式(1)–(5)所示:

$$\frac{Q_s}{M_s}(C_{s0} - C_s) - r_{Au} = \frac{dC_s}{dt}, \quad (1)$$

$$\frac{Q_l}{M_l}(C_{l0} - C_l) + \frac{M_s}{M_l}r_{Au} = \frac{dC_l}{dt}, \quad (2)$$

$$\frac{Q_l}{M_l}(C_{CN0} - C_{CN}) + \frac{Q_{CN}}{M_l} - r_{CN} = \frac{dC_{CN}}{dt}, \quad (3)$$

$$r_{Au} = k_1 C_{CN}(C_s - C_{s\infty})^2, \quad (4)$$

$$r_{CN} = k_2 + k_3 C_{CN}, \quad (5)$$

其中: Q_s 、 M_s 、 C_{s0} 、 C_s 分别为矿浆固相流速、浸出槽中固相的滞留质量、固相金初始品位、金品位, Q_l 、 M_l 、 C_{l0} 、 C_l 分别为矿浆液相流速、浸出槽中液相的滞留质量、液相金初始品位、金品位, Q_{CN} 、 C_{CN0} 、 C_{CN} 分别为浸出槽中氰化钠的添加流量、液相氰离子初始浓度、氰离子浓度, r_{Au} 、 r_{CN} 分别为金和氰离子的动力学反应速度, k_1 、 k_2 、 k_3 为相应的动力学模型参数, 其经验值分别为0.0055、3.43、0.0147, 在理想的条件下, 浸出后残留在矿石中的金的最小品位为 $C_{s\infty}$, 其是矿石平均粒径 d 的函数, 由式(6)确定^[2-4]:

$$C_{s\infty} = 0.357(1 - 1.49e^{-0.017d}). \quad (6)$$

2.2 模型参数辨识(Model parameters identification)

为了辨识 k_1 、 k_2 、 k_3 , 需要已知模型输出 r_{Au} 、 r_{CN} , 而在实际应用中无法获得 r_{Au} 、 r_{CN} , 因此, 在辨识参数之前必须基于含测量噪声的实际测量数据尽可能准确地估计 r_{Au} 、 r_{CN} , 这是一个不适定逆问题, 浓度测量数据中的测量噪声通过机理模型式(1)–(3)等号右边的求导必然会被放大和传递, 为了减小浓度测量噪声对估计结果的影响, 本文提出了金氰化浸出过程动力学反应速度的Tikhonov正则化估计策略, 在无动力学模型和浓度存在测量噪声的情况下该方法可以较准确地估计动力学反应速度。此外, 在机理模型式(1)–(3)等号左边仍然存在浓度测量值, 为了同时减小所有浓度测

量噪声对估计结果的影响, 将式(1)、(3)改写为:

$$r_{Au}(t) = \frac{d\bar{C}_s(t)}{dt}, \quad (7)$$

$$r_{CN}(t) = \frac{d\bar{C}_{CN}(t)}{dt}, \quad (8)$$

其中: $\bar{C}_s(0) = 0$, $\bar{C}_{CN}(0) = 0$, $\bar{C}_s(t) = \int_0^t r_{Au}(t)dt = \frac{Q_s}{M_s}C_{s0}t - \frac{Q_s}{M_s} \int_0^t C_s(t)dt - C_s(t) + C_{s0}$, $\bar{C}_{CN}(t) = \int_0^t r_{CN}(t)dt = \frac{Q_l}{M_l}C_{CN0}t - \frac{Q_l}{M_l} \int_0^t C_{CN}(t)dt + \frac{1}{M_l} \int_0^t Q_{CN}(t)dt - C_{CN}(t) + C_{CN0}$.

不失一般性, 这里以如下的估计模型为例:

$$r(t) = \frac{d\bar{C}(t)}{dt}, \quad (9)$$

上式经过分部积分可变为:

$$\bar{C}(t) = \int_0^t (t - \tau)g(\tau)d\tau + \bar{C}(0) + t \cdot r(0), \quad (10)$$

其中: $g(t) = \frac{dr(t)}{dt}$.

在实际的浸出生产过程中, 由于不连续测量浓度, 故采用上式的离散形式:

$$\bar{C}_i = \bar{C}(0) + t_i r(0) + \sum_{\bar{t}_j=0}^{\bar{t}_j=t_i} b_{ij}(t_i - \bar{t}_j)g_j \Delta \bar{t}, \quad (11)$$

其中: $i = 1, 2, \dots, N$, $j = 1, 2, \dots, M$, N 、 M 分别为采样点和离散点个数, \mathbf{b} 是用数值积分离散方法近似方程(10)中积分项时的系数矩阵, 根据Simpson's 1/3准则确定^[8].

考虑所有的浓度采样点, 将式(11)改写为向量形式, 并与实际值 \bar{C}^* 做差后得到 \bar{C} 的拟合误差向量为:

$$\mathbf{e} = \bar{C}^* - D\bar{C}(0) - E\mathbf{r}(0) - F\mathbf{g}, \quad (12)$$

其中: $\mathbf{g} = [g_1, g_2, \dots, g_M]^T$, D 、 E 、 F 分别是系数向量、矩阵. 为了减小测量噪声对估计结果的影响, 本文利用Tikhonov正则化思想, 即同时考虑拟合误差($\mathbf{e}^T \mathbf{e}$)与平滑性(\mathbf{g} 二阶导数的加权和)来求解 \mathbf{g} 和 $\mathbf{r}(0)$, 即:

$$\min_{\mathbf{g}, \mathbf{r}(0)} \phi = \mathbf{e}^T \mathbf{e} + \alpha \mathbf{g}^T \beta^T \beta \mathbf{g}, \quad (13)$$

其中: α 是正则化参数, 用来权衡拟合误差与平滑性, β 是用有限差分近似 \mathbf{g} 二阶导数时的系数矩阵. \mathbf{g} 与 $\mathbf{r}(0)$ 可通过求解上述优化问题得到, 再对 \mathbf{g} 数值积分可得 \mathbf{r} . 由于积分是一个平滑过程, 并不放大及传递噪声, 该方法可有效减小 $\bar{C}(t)$ 中测量噪声对估计结果的影响.

有了 r_{Au} 、 r_{CN} , 便可以采用非线性最小二乘参数辨识方法辨识未知参数 k_1 、 k_2 、 k_3 .

3 金氰化浸出过程实时优化(RTO for gold cyanidation leaching process)

作为生产设备决策层次结构中最核心的一层, 在实时优化层, 通常以小时或天为单位, 基于非线性稳态过程模型不断地执行过程级的优化, 以保证过程在初始状态、产品需求及经济条件改变时仍能工作在最优设定点, 优化目标为生产成本, 优化结果即, 过程关键控制回路的最优设定值被传送到模型预测控制层^[9-11].

3.1 优化模型(Optimization model)

浸出过程的稳态优化模型为:

$$\begin{aligned} \min_{Q_{CNi}} J = & \left(\sum_{i=1}^4 Q_{CNi} + C_{CN0}Q_l \right) P_{CN} \\ & + (Q_l C_{CN4}) P_{CNd} + (Q_s C_{s4}) P_{Au}, \quad (14) \\ \text{s.t. } a = & \frac{C_{s0} - C_{s4}}{C_{s0}} \geq a^*, \\ & Q_{CNmin} \leq Q_{CNi} \leq Q_{CNmax}, \end{aligned}$$

浸出过程稳态机理模型,

其中: Q_{CNi} 为 $i^{\#}$ 浸出槽氰化钠的添加流量, 其上、下限分别为 Q_{CNmax} 、 Q_{CNmin} , C_{CN4} 、 C_{s4} 分别为 $4^{\#}$ 浸出槽中, 即浸出后氰离子浓度和固相金品位, a 、 a^* 分别为浸出率和全流程优化的浸出率指标值, J 为浸出过程生产成本, 第一项表示购买氰化钠成本, 第二项表示处理浸出后残留的氰化钠成本, 最后一项表示矿浆中未浸出的金损失, P_{CN} 、 P_{CNd} 、 P_{Au} 分别为相应价格系数. 本文利用GA+SQP混合优化方法求解非线性规划问题(14), 即首先利用GA搜索, 将搜索结果作为SQP初值, 这样不但降低了单独使用SQP方法陷入局部极值的可能, 也加快了单独使用GA方法的收敛速度, 兼具上述两种优化方法的优点.

3.2 基于输出反馈的实时优化直接输入自适应策略(RTO direct input adaptation based on output feedback)

在金氰化浸出实际生产过程中, 由于生产工艺、成本及测量噪声的种种限制, 不可能建立与实际过程完全匹配的过程模型, 即模型具有一定的不确定性, 因此, 基于模型优化所得的RTO结果并不是实际过程的最优设定点, 只是次优的, 甚至是不可行的. 为此, 本文提出了基于对数-线性闸-罚函数和输出反馈的实时优化直接输入自适应策略, 利用过程实际测量值信息使决策变量在有限的迭代次数内收敛到实际过程最优值, 该方法将优化问题巧妙地转化为与优化关系密切的某些变量的控制问题, 仅仅基于实际过程数据通过反馈控制直接调节过程输入, 只需要离线设计控制器, 不像模型参数自适

应方法^[9,16]和修正项自适应方法^[17-19]要求数据丰富及估计目标函数及实际过程输出对输入的梯度,同时,由于不需要反复在线求解过程优化问题,大大缩短了计算时间,降低了计算复杂度,更便于实际应用^[12-15].

3.2.1 基于输出反馈的优化控制(Optimizing control based on output feedback)

只含有等式约束的稳态优化问题如下式所示:

$$\min_{\mathbf{u}} J(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}) \quad (15)$$

$$\text{s.t. } \mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}) = \mathbf{0}. \quad (16)$$

其中: J 是可导的标量目标函数, \mathbf{u} 是 m 维输入向量, \mathbf{x} 是 n 维状态向量, $\boldsymbol{\theta}$ 是 n_{θ} 维不确定性参数向量, \mathbf{F} 是 n 维系统稳态模型方程.

1) 最优性必要条件

优化问题(15)、(16)所对应的拉格朗日函数为:

$$L(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\lambda}) = J(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}) + \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}), \quad (17)$$

其中: $\boldsymbol{\lambda}$ 是拉格朗日乘子向量, 优化问题(15)和(16)的一阶最优性必要条件(NCO)为:

$$L_{\mathbf{u}} = J_{\mathbf{u}} + \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{F}_{\mathbf{u}} = \mathbf{0}, \quad (18)$$

$$L_{\mathbf{x}} = J_{\mathbf{x}} + \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{F}_{\mathbf{x}} = \mathbf{0}, \quad (19)$$

$$L_{\boldsymbol{\lambda}} = \mathbf{F}^T = \mathbf{0}, \quad (20)$$

其中: 符号 L_c 表示 $\partial L / \partial c$, 假设 $\mathbf{F}_{\mathbf{x}}$ 是可逆的, 那么式(18)–(19)可等价转化为:

$$L_{\mathbf{u}} = J_{\mathbf{u}} - J_{\mathbf{x}} \mathbf{F}_{\mathbf{x}}^{-1} \mathbf{F}_{\mathbf{u}} = \frac{dJ}{d\mathbf{u}} = \mathbf{0}, \quad (21)$$

其中: $\frac{dJ}{d\mathbf{u}}$ 可以看作是目标函数对输入的总梯度, 既考虑了输入 \mathbf{u} 对 J 的直接影响, 又考虑了输入 \mathbf{u} 通过状态 \mathbf{x} 对 J 的间接影响.

2) 基于梯度的优化方法

当系统存在扰动时, 为保证系统仍能运行在最优工作点, 系统输入应满足(21), 典型的实现方法是基于梯度的优化, 其输入更新方程为:

$$\mathbf{u}_{k+1} = \mathbf{u}_k - \left(\frac{d^2 J}{d\mathbf{u}^2} \right)_{\mathbf{u}_k}^{-1} \frac{dJ}{d\mathbf{u}} \Big|_{\mathbf{u}_k}, \quad (22)$$

其中 k 为迭代次数, 在 \mathbf{u}_k 附近增加摄动, 通过实验的方法可以获得梯度 $\frac{dJ}{d\mathbf{u}} \Big|_{\mathbf{u}_k}$ 和Hessian矩阵 $\frac{d^2 J}{d\mathbf{u}^2} \Big|_{\mathbf{u}_k}$, 但计算后者的代价太大, 通常利用标称模型的最优工作点对其估计, 因此, 输入更新方程变为:

$$\mathbf{u}_{k+1} = \mathbf{u}_k - \left(\frac{d^2 J}{d\mathbf{u}^2} \right)_{\mathbf{u}_{nom}}^{-1} \frac{dJ}{d\mathbf{u}} \Big|_{\mathbf{u}_k}, \quad (23)$$

其中 \mathbf{u}_{nom} 表示标称模型的最优工作点.

3) 基于邻域极值控制的优化方法

基于梯度的优化方法需要增加摄动通过实验估计梯度及Hessian矩阵, 而这通常是不允许的或成本

太高, 为此, 将邻域极值控制(Neighboring-extremal control-NEC)方法^[20]引入到该优化问题中, 在系统存在扰动时, NEC方法基于NCO的变化来维持过程的最优性, 只需要过程标称模型与实际测量值.

当模型参数为标称值 $\boldsymbol{\theta}_{nom}$ 时, 过程最优工作点为 \mathbf{u}^* , 系统状态为 \mathbf{x}^* , 且满足 $\mathbf{F}(\mathbf{x}^*, \mathbf{u}^*, \boldsymbol{\theta}_{nom}) = \mathbf{0}$. 假设参数不确定性为常值扰动 $\delta\boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\theta}_{nom}$, $\delta\mathbf{u}_k = \mathbf{u}_k - \mathbf{u}^*$ 为在第 k 次迭代时为保证过程最优性而实施的输入增量, $\delta\boldsymbol{\theta}$ 与 $\delta\mathbf{u}_k$ 引起的状态改变量 $\delta\mathbf{x}_k = \mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*$, 这些增量由模型方程(16)的全微分方程联系在一起, 即:

$$\mathbf{F}_{\mathbf{x}} \delta\mathbf{x}_k + \mathbf{F}_{\mathbf{u}} \delta\mathbf{u}_k + \mathbf{F}_{\boldsymbol{\theta}} \delta\boldsymbol{\theta} = \mathbf{0} \quad \forall k. \quad (24)$$

在第 k 次迭代后, 如 $\delta\boldsymbol{\theta}$ 致使过程在非最优工作点运行, 那么下一次迭代的输入 \mathbf{u}_{k+1} 应具有使系统重新回到最优工作点的能力, \mathbf{u}_{k+1} 由式(25)确定:

$$\mathbf{u}_{k+1} = \mathbf{u}^* + \mathbf{K} \delta\boldsymbol{\theta}, \quad (25)$$

其中:

$$\begin{aligned} \mathbf{K} = & -(L_{\mathbf{u}\mathbf{u}} - L_{\mathbf{u}\mathbf{x}} \mathbf{F}_{\mathbf{x}}^{-1} \mathbf{F}_{\mathbf{u}} - \mathbf{F}_{\mathbf{u}}^T \mathbf{F}_{\mathbf{x}}^{-T} L_{\mathbf{x}\mathbf{u}} \\ & + \mathbf{F}_{\mathbf{u}}^T \mathbf{F}_{\mathbf{x}}^{-T} L_{\mathbf{x}\mathbf{x}} \mathbf{F}_{\mathbf{x}}^{-1} \mathbf{F}_{\mathbf{u}})^{-1} (L_{\mathbf{u}\boldsymbol{\theta}} - L_{\mathbf{u}\mathbf{x}} \mathbf{F}_{\mathbf{x}}^{-1} \\ & \mathbf{F}_{\boldsymbol{\theta}} - \mathbf{F}_{\mathbf{u}}^T \mathbf{F}_{\mathbf{x}}^{-T} L_{\mathbf{x}\boldsymbol{\theta}} + \mathbf{F}_{\mathbf{u}}^T \mathbf{F}_{\mathbf{x}}^{-T} L_{\mathbf{x}\mathbf{x}} \mathbf{F}_{\mathbf{x}}^{-1} \mathbf{F}_{\boldsymbol{\theta}}), \end{aligned} \quad (26)$$

$L_{..}$ 由式(17)求导而得^[20]. 由方程(25)可知, 计算 \mathbf{u}_{k+1} 需要 $\delta\boldsymbol{\theta}$, 而 $\delta\boldsymbol{\theta}$ 是未知的, 假设不确定参数的个数不大于系统状态的个数, 则 $\delta\boldsymbol{\theta}$ 可由式(24)估计, 即:

$$\delta\boldsymbol{\theta} = -\mathbf{F}_{\boldsymbol{\theta}}^{\dagger} (\mathbf{F}_{\mathbf{x}} \delta\mathbf{x}_k + \mathbf{F}_{\mathbf{u}} \delta\mathbf{u}_k). \quad (27)$$

其中: $\mathbf{F}_{\boldsymbol{\theta}}^{\dagger}$ 为 $\mathbf{F}_{\boldsymbol{\theta}}$ 的广义逆, 将式(27)代入到式(25)中得:

$$\mathbf{u}_{k+1} = \mathbf{u}^* + \mathbf{K}^x \delta\mathbf{x}_k + \mathbf{K}^u \delta\mathbf{u}_k, \quad (28)$$

其中: $\mathbf{K}^x = -\mathbf{K} \mathbf{F}_{\boldsymbol{\theta}}^{\dagger} \mathbf{F}_{\mathbf{x}}$, $\mathbf{K}^u = -\mathbf{K} \mathbf{F}_{\boldsymbol{\theta}}^{\dagger} \mathbf{F}_{\mathbf{u}}$.

定理 1 基于状态反馈的输入更新方程(28)是基于梯度的输入更新方程(22)的一阶近似^[15].

方程(28)是基于全状态反馈的, 而这通常是不可实现的, 为此, 将其转化为基于输出反馈的输入更新策略, 假设系统输出方程为:

$$\mathbf{y} = \mathbf{M}(\mathbf{x}), \quad (29)$$

其中: \mathbf{y} 是 q 维输出向量, 在第 k 次迭代时方程(29)的一阶线性化形式为:

$$\delta\mathbf{y}_k = \mathbf{M}_{\mathbf{x}} \delta\mathbf{x}_k, \quad (30)$$

由式(30)可得: $\delta\mathbf{x}_k = \mathbf{M}_{\mathbf{x}}^{\dagger} \delta\mathbf{y}_k$, 将其代入到输入更新方程(28)并化简得:

$$\mathbf{u}_{k+1} = \mathbf{u}^* + \boldsymbol{\kappa}^y \delta\mathbf{y}_k + \boldsymbol{\kappa}^u \delta\mathbf{u}_k, \quad (31)$$

其中: $\boldsymbol{\kappa}^y = -\mathbf{K} \mathbf{F}_{\boldsymbol{\theta}}^{\dagger} \mathbf{F}_{\mathbf{x}} \mathbf{M}_{\mathbf{x}}^{\dagger}$, $\boldsymbol{\kappa}^u = \mathbf{K}^u = -\mathbf{K} \mathbf{F}_{\boldsymbol{\theta}}^{\dagger} \mathbf{F}_{\mathbf{u}}$, 式(31)为基于输出反馈的实时优化直接输入自

适应更新方程, 特别地, 当输出方程为 $\mathbf{y} = \mathbf{x}$, 即 $\mathbf{M}_x = \mathbf{I}$ 时, 基于输出反馈的输入更新方程(31)等价于基于状态反馈的输入更新方程(28).

定理 2 当系统模型参数存在不确定性时, 如果实际过程输出测量值中无噪声, 且满足 $\mathbf{M}^\dagger \mathbf{M} = \mathbf{I}$, 其中: $\mathbf{M} = -\mathbf{M}_x \mathbf{F}_x^{-1} \mathbf{F}_\theta$, 那么基于输出反馈的输入更新策略(31)能在最多两次迭代内局部收敛到实际过程的最优值^[15].

如果测量噪声对目标函数值的影响比参数不确定性大得多, 那么该方法的收敛性能将大大降低, 输入不能局部收敛到实际过程的最优值. 将 $\delta \mathbf{x}_k = \mathbf{M}_x^\dagger \delta \mathbf{y}_k$ 代入到方程(27)可得: $\delta \boldsymbol{\theta} = \mathbf{M}^\dagger (\delta \mathbf{y}_k + \mathbf{M}_x \mathbf{F}_x^{-1} \mathbf{F}_u \delta \mathbf{u}_k)$, 因此, 定理2中的条件 $\mathbf{M}^\dagger \mathbf{M} = \mathbf{I}$ 是对估计 $\delta \boldsymbol{\theta}$ 的可行性而言的, 只有满足 $\mathbf{M}^\dagger \mathbf{M} = \mathbf{I}$, 才能基于 $\delta \mathbf{y}_k$ 估计 $\delta \boldsymbol{\theta}$, 因此要求模型不确定参数的个数不能超过可测过程输出变量的个数.

3.2.2 对数-线性 闸-罚函数(Logarithmic-linear barrier-penalty function)

3.2.1节所述的基于输出反馈的优化控制方法是基于NCO的, 只能解决含有等式约束的优化问题, 而在大多数的实际生产过程中, 必然存在不等式约束, 如: 决策变量的最大、最小值约束, 产品的质量约束, 生产的安全约束等等. 为了将其应用到金氰化浸出过程实时优化中, 本文提出了含有不等式约束的基于输出反馈的优化控制方法, 即在优化问题的目标函数中增加对数-线性 闸-罚函数项, 以解决不等式约束问题, 含有不等式约束的稳态优化问题为:

$$\min_{\mathbf{u}} J(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}) \quad (32)$$

$$s.t. \mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}) = \mathbf{0}, \quad (33)$$

$$\mathbf{G}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}) \leq \mathbf{0}. \quad (34)$$

对于对数 闸函数 $\ln(-\mathbf{G}_j)$ (其中 \mathbf{G}_j 表示第 j 个不等式约束), 当某个不等式约束起作用或不满足时, 即 $\mathbf{G}_j \geq 0$, 对数 闸函数无意义, 而在基于NCO的跟踪控制中由于测量噪声的影响, 在收敛的过程中违反约束是不可避免的; 而对于线性罚函数 $\max(0, \mathbf{G}_j)$, 在不等式约束起作用时不可导, 无法求取目标函数梯度, 进而不能应用到NEC中, 为此, 综合考虑上述两种 闸-罚函数, 将其适当变换, 上述优化问题变为:

$$\min_{\mathbf{u}} J(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}) + \gamma \sum_j \psi_{B,j}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}) + \rho \sum_j \psi_{P,j}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}), \quad (35)$$

$$s.t. \mathbf{F}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}) = \mathbf{0}, \quad (36)$$

其中^[21]:

$$\psi_{B,j}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}) = \begin{cases} -\ln(-\mathbf{G}_j/\epsilon), & \mathbf{G}_j \leq -\epsilon \\ 0, & \mathbf{G}_j > -\epsilon \end{cases}$$

$$\psi_{P,j}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}) = \begin{cases} 0, & \mathbf{G}_j \leq -\epsilon \\ \mathbf{G}_j + \epsilon, & \mathbf{G}_j > -\epsilon \end{cases}$$

其中: $\gamma > 0$, $\rho > 0$ 为惩罚系数, $\epsilon > 0$ 为阈值. 当 $\mathbf{G}_j = -\epsilon$ 时, 闸函数值与罚函数值都为0, 能够保证对数-线性 闸-罚函数的连续性, 如 $\rho = \gamma/\epsilon$, 能够保证对数-线性 闸-罚函数的一阶导数连续性, 而最重要的是, 当 $\mathbf{G}_j \geq 0$ 时, 对数-线性 闸-罚函数是有效且可导的, 进而能够应用到NEC中.

定理 3 μ_{max}^* 为优化问题(32)–(34)中不等式约束 $\mathbf{G} \leq \mathbf{0}$ 所对应的拉格朗日乘子向量所有元素中的最大值, 当 $\rho = \gamma/\epsilon$ 时, 如果 $\epsilon < \frac{\gamma}{2\mu_{max}^*}$, 那么当 $\gamma \rightarrow 0$ 时, 优化问题(35)–(36)的解 \rightarrow 优化问题(32)–(34)的解^[21].

4 仿真结果(Simulation results)

4.1 动力学模型参数辨识(Kinetic model parameters identification)

用模型参数为动力学经验参数值的机理模型式(1)–(5)模拟实际浸出过程, 每隔3h测量过程输出, 并加入均值为零、标准差为模拟的实际数据值5%的正态随机噪声, 共产生21个样本点, 将所得数据应用2.2节Tikhonov正则化方法及传统的有限差分方法估计动力学反应速度 r_{Au} 、 r_{CN} , 估计结果如图2所示.

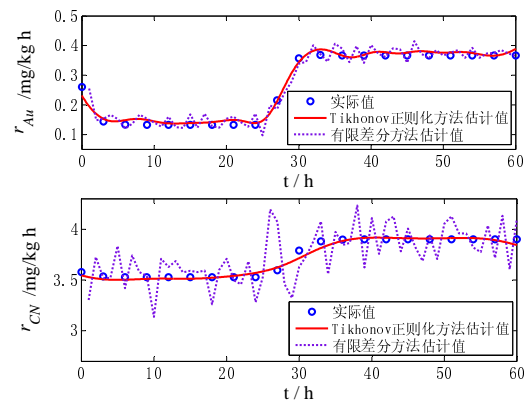


图2 动力学反应速度估计结果

Fig. 2 Estimation results of kinetic reaction rate

图2说明, 由于加入了正则项及模型变换, Tikhonov正则化方法可以有效地抑制测量噪声放大及传递, 和传统的有限差分方法相比, 其估计结果受测量噪声的影响大大降低, 也间接改善了动力学模型参数 k_1 、 k_2 、 k_3 的辨识精度.

在得到 r_{Au} 、 r_{CN} 估计值后, 分别以 r_{Au} 和 r_{CN} 为输出, 分别以影响它们的 C_s 、 C_{CN} 和 C_{CN} 为输入, 采用非线性最小二乘参数辨识方法辨识动力学模型参数 k_1 、 k_2 、 k_3 , 辨识结果为 $k_1 = 0.0045$ 、 $k_2 = 3.4$ 、 $k_3 = 0.011$.

4.2 金氰化浸出过程实时优化(RTO for gold cyanidation leaching process)

4.1节的辨识结果表明, 模型参数辨识值与实际值之间存在偏差, 为此, 将3.2节基于输出反馈的直接输入自适应策略应用到金氰化浸出过程的实时优化中, 利用以动力学模型参数经验值为动力学模型参数的稳态过程模型模拟实际浸出过程, 而将以4.1节动力学模型参数辨识值作为动力学模型参数的稳态过程模型作为所建过程模型, 以产生模型的不确定性, 系统输入为各浸出槽中氰化钠的添加量 Q_{CNi} , 其初值为基于所建模型的优化结果, 系统状态和输出为 C_s 、 C_l 、 C_{CN} , 参数 $a^* = 95\%$, $\gamma = 0.01$, $\rho = 50$, $\varepsilon = \gamma/\rho$, 基于输出反馈的直接输入自适应策略仿真结果如图3所示.

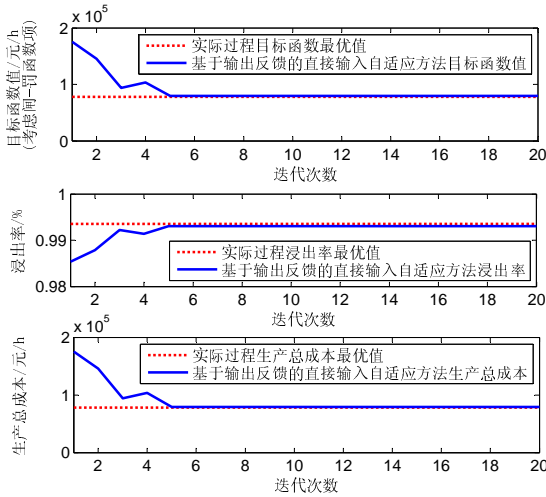


图3 仿真结果1(无噪声)
Fig. 3 Simulation result 1(no noise)

图3说明, 由于模型不确定性的存在, 基于该标称模型的实时优化结果不是模拟的实际过程最优设定点, 如图第1-2次迭代所示, 其浸出率低于最优浸出率, 由于金的损失导致对应的生产成本大大高于生产成本最优值, 而从第3次迭代开始, 将本文提出的基于输出反馈的直接输入自适应策略加入到金氰化浸出过程的实时优化中, 这使得系统输入不断向着最优工作点逼近, 在第5次迭代时, 系统输入收敛到模拟的实际过程最优设定点附近, 最优性损失主要因为该方法只是最优解的一阶近似, 同时, 引入对数-线性-罚函数以及模拟实际浸出过程时求解非线性过程模型的计算误差对最优性也有一定的影响, 但从图中无法清晰分辨出目标函数值(考虑-罚

函数项)与生产总成本的差异, 最优性损失很小, 可以忽略不计, 这极大降低了模型不确定性对实时优化结果的影响, 为湿法冶金全流程优化控制的顺利实施奠定了重要基础.

将零均值, 标准差分别为测量值5%、10%的正态随机噪声加入到模拟的实际过程输出测量值 C_s 、 C_l 、 C_{CN} 中以验证测量噪声对该方法的影响, 相应的仿真结果分别如图4、图5所示.

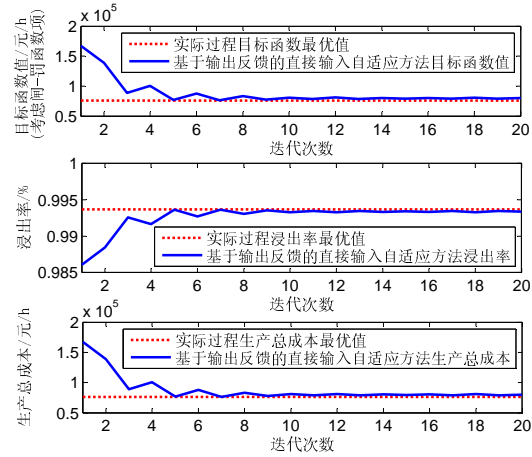


图4 仿真结果2(5%噪声)
Fig. 4 Simulation result 2(5% noise)

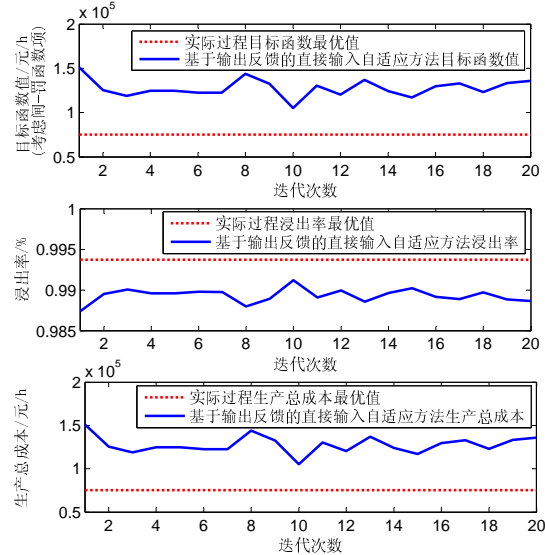


图5 仿真结果3(10%噪声)
Fig. 5 Simulation result 3(10% noise)

由图4、图5可知, 当模拟的实际过程输出测量值中含有较小(5%)的测量噪声时, 模型参数不确定性对目标函数值的影响远大于测量噪声对目标函数值的影响, 此时, 该自适应方法仍然具有很好的收敛性能, 只是收敛时间比无噪声时略长, 但与不加入输入更新策略相比(初始迭代点), 仍极大减小了模型不确定性的影响, 减少了生产成本, 产生了巨大的经济效益, 为湿法冶金全流程优化控制在实际浸出过程

的顺利实施奠定了重要基础. 而当模拟的实际过程输出测量值中含有较大(10%)的测量噪声时, 与模型参数不确定性相比, 测量噪声对目标函数值的影响起了主要作用, 输入无法收敛到模拟的实际过程最优设定点, 此时, 该自适应方法失效了, 对参数不确定性不起作用.

5 结论(Conclusion)

对于复杂的金氰化浸出过程实施常规过程控制之上的实时优化能带来巨大的经济效益, 而这前提是建立准确的过程模型, 本文以某湿法冶炼厂金氰化浸出过程为背景, 基于金、氰离子守恒方程及其相应的动力学反应速度模型建立了金氰化浸出过程的动态机理模型. 在实际生产过程中由于动力学反应速度不可测, 同时, 又为了减小测量噪声对估计结果的影响, 本文提出了基于Tikhonov正则化思想估计金氰化浸出过程动力学反应速度的策略, 并利用上述估计结果采用非线性最小二乘参数辨识方法辨识动力学模型中的未知参数. 为了降低模型失配对实时优化结果的影响, 本文简略分析了三类实时优化自适应策略的优缺点, 并基于实际浸出过程的特点提出了基于对数-线性闸-罚函数和输出反馈的直接输入自适应方法, 由于闸-罚函数的加入, 该方法可以解决含有不等式约束的优化问题, 将其应用到金氰化浸出过程实时优化中, 仿真结果表明在输出测量值中无噪声的情况下, 该方法能很快地局部收敛到模拟的实际过程最优设定点; 而当测量噪声较小或对目标函数影响较小时, 该方法也显示出了优越的性能, 而且只需要过程标称模型和实际输出, 不要求实际过程数据梯度, 受测量噪声影响较小, 更便于实际应用, 这为湿法冶金全流程优化控制的顺利实施奠定了重要基础.

参考文献(References):

- [1] 孙戡. 金银冶金[M]. 北京: 冶金工业出版社, 2008: 129-159. (SUN Jin. Gold and silver metallurgy[M]. Beijing: Metallurgical Industry Press, 2008: 129-159.)
- [2] LIMA L R P, HODOUIN D. Simulation study of the optimal distribution of cyanide in a gold leaching circuit[J]. *Minerals Engineering*, 2006, 19(13): 1319-1327.
- [3] LIMA L R P. Some remarks on the reactor network synthesis for gold cyanidation[J]. *Minerals Engineering*, 2006, 19(2): 154-161.
- [4] LIMA L R P, HODOUIN D. Optimization of reactor volumes for gold cyanidation[J]. *Minerals Engineering*, 2005, 18(7): 671-679.
- [5] 吴敏, 桂卫华. 锌浸出过程的专家控制和故障诊断方法[J]. 控制理论与应用, 2001, 18(6): 861-866. (Wu M, Gui W. An expert control and fault diagnosis scheme for the leaching zinc process[J]. *Control Theory & Applications*, 2001, 18(6): 861-866.)
- [6] 贾润达, 毛志忠, 常玉清, 周俊武. 基于投影寻踪的非线性鲁棒偏最小二乘法及应用[J]. 控制理论与应用, 2010, 27(3): 391-394. (Jia R, Mao Z, Chang Y and Zhou J. Nonlinear robust partial least squares based on projection pursuit and its application[J]. *Control Theory & Applications*, 2010, 27(3): 391-394.)

- [7] YEOW Y L, WICKRAMASINGHE S R, HAN B, LEONG Y K. A new method of processing the time-concentration data of reaction kinetics[J]. *Chemical Engineering Science*, 2003, 58(16): 3601-3610.
- [8] DAVIS P J, RABINOWITZ P. Methods of numerical integration: Second Edition[M]. New York: Dover Publications, 2007: 231-250.
- [9] CHACHUAT B, SRINIVASAN B, BONVIN D. Adaptation strategies for real-time optimization[J]. *Computers and Chemical Engineering*, 2009, 33(10): 1557-1567.
- [10] ZHANG Y, MONDER D, FRASER FORBES J. Real-time optimization under parametric uncertainty: a probability constrained approach[J]. *Journal of Process Control*, 2002, 12(3): 373-389.
- [11] DARBY M L, NIKOLAOU M, JONES J and NICHOLSON D. RTO: An overview and assessment of current practice[J]. *Journal of Process Control*, 2011, 21(6): 874-884.
- [12] FRANÇOIS G, SRINIVASAN B, BONVIN D. Equivalence between Neighboring-Extremal Control and Self-Optimizing Control for the Steady-State Optimization of Dynamical Systems[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2014, 53(18): 7470-7478.
- [13] JÄSCHKE J, SKOGESTAD S. NCO tracking and self-optimizing control in the context of real-time optimization[J]. *Journal of Process Control*, 2011, 21(10): 1407-1416.
- [14] MARCHETTI A, ZUMOFFEN D. On the links between real-time optimization, neighboring-extremal control, and self-optimizing control[C]//2013 Control Conference (ECC). Switzerland: IEEE, 2013: 4466-4471.
- [15] GROS S, SRINIVASAN B, BONVIN D. Optimizing control based on output feedback[J]. *Computers and Chemical Engineering*, 2009, 33(1): 191-198.
- [16] ROBERTS P D. An algorithm for steady-state system optimization and parameter estimation[J]. *International Journal of Systems Science*, 1979, 10(7): 719-734.
- [17] MARCHETTI A, CHACHUAT B, BONVIN D. Modifier-adaptation methodology for real-time optimization[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2009, 48(13): 6022-6033.
- [18] GAO W, ENGELL S. Iterative set-point optimization of batch chromatography[J]. *Computers and Chemical Engineering*, 2005, 29(6): 1401-1409.
- [19] CHACHUAT B, MARCHETTI A, BONVIN D. Process optimization via constraints adaptation[J]. *Journal of Process Control*, 2008, 18(3): 244-257.
- [20] GROS S. Neighboring Extremals in Optimization and Control[D]. Lausanne: École Polytechnique Fédérale de Lausanne(EPFL), 2007.
- [21] SRINIVASAN B, BIEGLER L T, BONVIN D. Tracking the necessary conditions of optimality with changing set of active constraints using a barrier-penalty function[J]. *Computers and Chemical Engineering*, 2008, 32(3): 572-579.

作者简介:

张俊 (1986—), 男, 2008年于沈阳工业大学获得学士学位, 2010年于东北大学获得硕士学位, 现为东北大学博士研究生, 主要研究方向为复杂工业系统过程建模与优化, E-mail: zhangjun-roger@163.com;

毛志忠 (1961—), 男, 1982年于哈尔滨电工学院获得学士学位, 1984年、1991年于东北大学分别获得硕士、博士学位, 现为东北大学信息学院自动化研究所所长、教授、博士生导师, 主要研究方向为复杂工业系统建模、控制与优化, E-mail: maozhizhong@ise.neu.edu.cn;

贾润达 (1981—), 男, 2004年、2007年分别于大连理工大学获得学士学位、硕士学位, 2011年于东北大学获得博士学位, 现为东北大学讲师, 主要研究方向为复杂系统过程建模与软测量, E-mail: jiarunda@yahoo.com.cn.