

کاربرد یادگیری ماشین برخط در پیش‌بینی میزان هدررفت NaOH و Al_2O_3 در فرایند سیلیس زدایی مجتمع آلومینای جاجرم

رضا منصفی*، مصطفی محمودیان، نیما صالحی مقدم

دانشکده مهندسی، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد، ایران

چکیده: در این پژوهش از ابزارهای یادگیری ماشین استفاده شد تا اثر عامل‌های گوناگون بر هدررفت سود کاستیک (NaOH) و آلومینا (Al_2O_3) و افزایش آلودگی سدیم کربنات (Na_2CO_3) در مرحله نخست فرایند بایر مورد بررسی قرار گیرد. پارامترهای مورد بررسی در این مطالعه عبارت‌اند از غلظت Na_2O ، Na_2O و Na_2O و Al_2O_3 در فاز محلول خروجی به واحد آسیای تر است. عامل‌های مورد بررسی نیز شامل شدت جریان جرمی و آنالیز شیمیایی ترکیب‌های گوناگون موجود در بوکسیت و آهک مصرفی، شدت جریان و آنالیز شیمیایی محلول سدیم آلومینات ورودی و آنالیز شیمیایی محلول سدیم آلومینات خروجی از واحد به صورت روزانه برای ۳۰۱۶ روز متوالی بوده است. در این مطالعه از دو روش کاهش گرادیان برخط فوری (FOGD) و کاهش گرادیان برخط نیستروم (NysGD) برای مدل‌سازی فرایند یادشده استفاده شد. نتیجه‌ها نشان‌دهنده دقت و سرعت یادگیری بیش‌تر روش FOGD نسبت به روش NysGD است. این نتیجه‌ها نشان می‌دهند می‌توان با استفاده از دو روش با دقت بالایی فرایند مورد بررسی را مدل‌سازی نمود.

واژگان کلیدی: فرایند بایر، آلومینا، سود کاستیک، سدیم کربنات، یادگیری ماشین برخط، FOGD، NysGD

KEYWORDS: Bayer Process, Alumina, Caustic soda, Sodium carbonate, Machine learning, FOGD, NysGD.

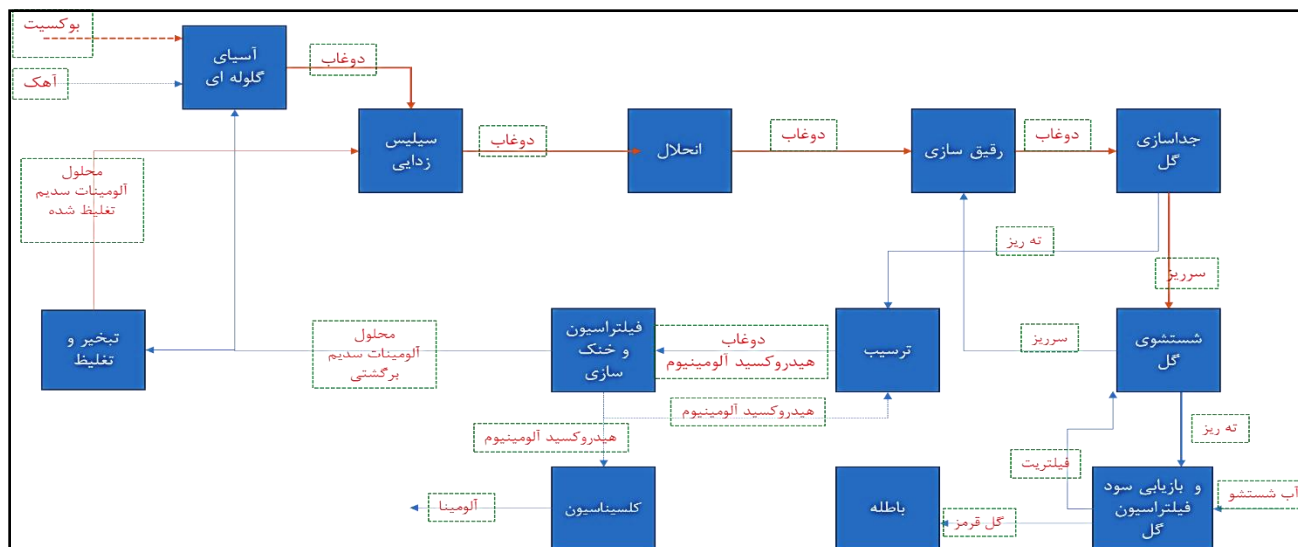
مقدمه

فرایند تولید آلومینا در مجتمع آلومینای جاجرم در دما و فشار بالا انجام می‌شود. در این فرایند بوکسیت دیاسپوری کم‌عیار به عنوان منبع آلومینا مورد استفاده قرار می‌گیرد. افزون بر بوکسیت، آهک و محلول سدیم آلومینات برگشتی از خط تولید نیز در این فرایند استفاده می‌شود. این مواد به‌صورت هم‌زمان با نسبت‌های خاص وارد آسیاب شده، مرحله‌های سیلیس زدایی و استخراج آلومینا را طی کرده، دوغاب به دست آمده که دارای آلومینای حل‌شده در فاز مایع است، برای ادامه فرایند تولید به مرحله‌های جداسازی گل قرمز و ترسیب آلومینیوم هیدروکسید از محلول سدیم آلومینات و در آخر مرحله تکلیس و تولید آلومینا ارسال می‌شود [۱،۲]. در شکل ۱ این فرایند نشان داده شده است. در فرایند یادشده خوراک ورودی و به ویژه بوکسیت دارای ترکیب‌های متنوعی است که باعث شده است در طی مرحله‌های تولید و در شرایط عملیاتی حاکم بر آن‌ها، واکنش‌های شناخته شده و ناشناخته بسیاری به‌صورت موازی با واکنش اصلی استخراج آلومینا صورت گیرد. این واکنش‌ها در معادله‌های (۱) تا (۱۲) نشان داده شده است [۴].

فرایند تولید آلومینا در مجتمع آلومینای جاجرم در دما و فشار بالا انجام می‌شود. در این فرایند بوکسیت دیاسپوری کم‌عیار به عنوان منبع آلومینا مورد استفاده قرار می‌گیرد. افزون بر بوکسیت، آهک و محلول سدیم آلومینات برگشتی از خط تولید نیز در این فرایند استفاده می‌شود. این مواد به‌صورت هم‌زمان با نسبت‌های خاص وارد آسیاب شده، مرحله‌های سیلیس زدایی و استخراج آلومینا را طی کرده، دوغاب به دست آمده که دارای آلومینای حل‌شده در فاز مایع است، برای ادامه فرایند تولید به مرحله‌های جداسازی گل قرمز

*E-mail: monsefi@um.ac.ir

*عهدہ‌دار مکاتبات

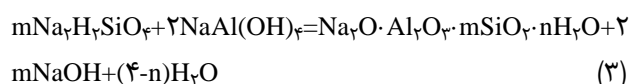
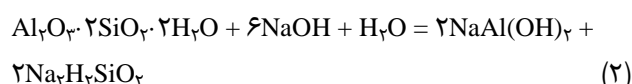
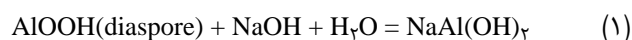


شکل ۱ - فلوجارت فرایند تولید آلومینا به روش بایر [۳]

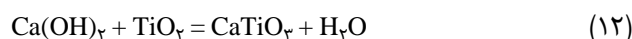
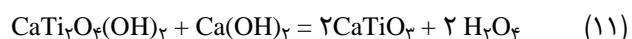
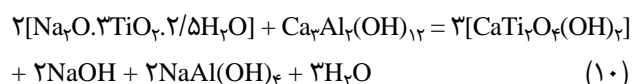
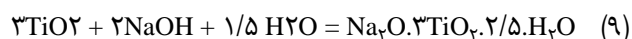
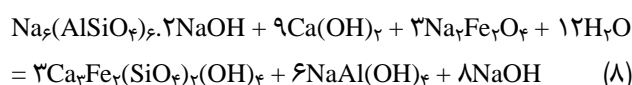
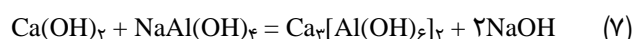
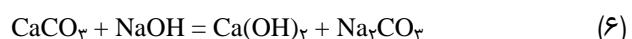
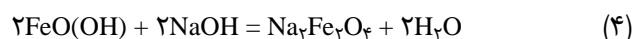
سود کاستیک و نیز افزایش میزان آلودگی‌هایی همچون کربنات، سدیم سولفات و آلودگی‌های آلی در محلول سدیم آلومینات در چرخه فرایند شود [۱۰،۱۱]. به هر حال واکنش‌های پیچیده و فراوان انجام شده در فرایند بایر می‌تواند موجب هدر رفت آلومینا [۱۲] و سود کاستیک [۱۳،۱۴] و افزایش میزان آلودگی‌های در سامانه شود [۱۰،۱۱].

هدر رفت آلومینا در فرایند بایر اثر مستقیمی بر میزان تولید دارد. از سوی دیگر انحلال آلومینا در فرایند بایر در بستری از محلول سود کاستیک صورت می‌گیرد و کاهش غلظت آن در فرایند بایر می‌بایست با تزریق مداوم NaOH به سامانه جبران شود تا فرایند انحلال آلومینا از بوکسیت با راندمان مناسبی صورت گیرد که این خود موجب تحمیل هزینه‌های بسیار زیادی به سامانه خواهد شد. افزایش غلظت کربنات در محلول سدیم آلومینات موجب هدر رفت سود می‌شود. افزون بر آن سدیم کربنات می‌تواند موجب افزایش در دمای جوش محلول سدیم آلومینات و افزایش میزان رسوب در تجهیزهای خط تولید شود که می‌تواند فرایند تغلیظ محلول سدیم آلومینات را با مشکل فراوانی رو به رو کند [۱۵-۱۸]. این آلودگی‌ها همچنین می‌توانند موجب افزایش در آلودگی فرآورده آلومینای تولیدی و بسیاری از تاثیرهای بد دیگر در فرایند بایر باشد [۱۵-۲۱].

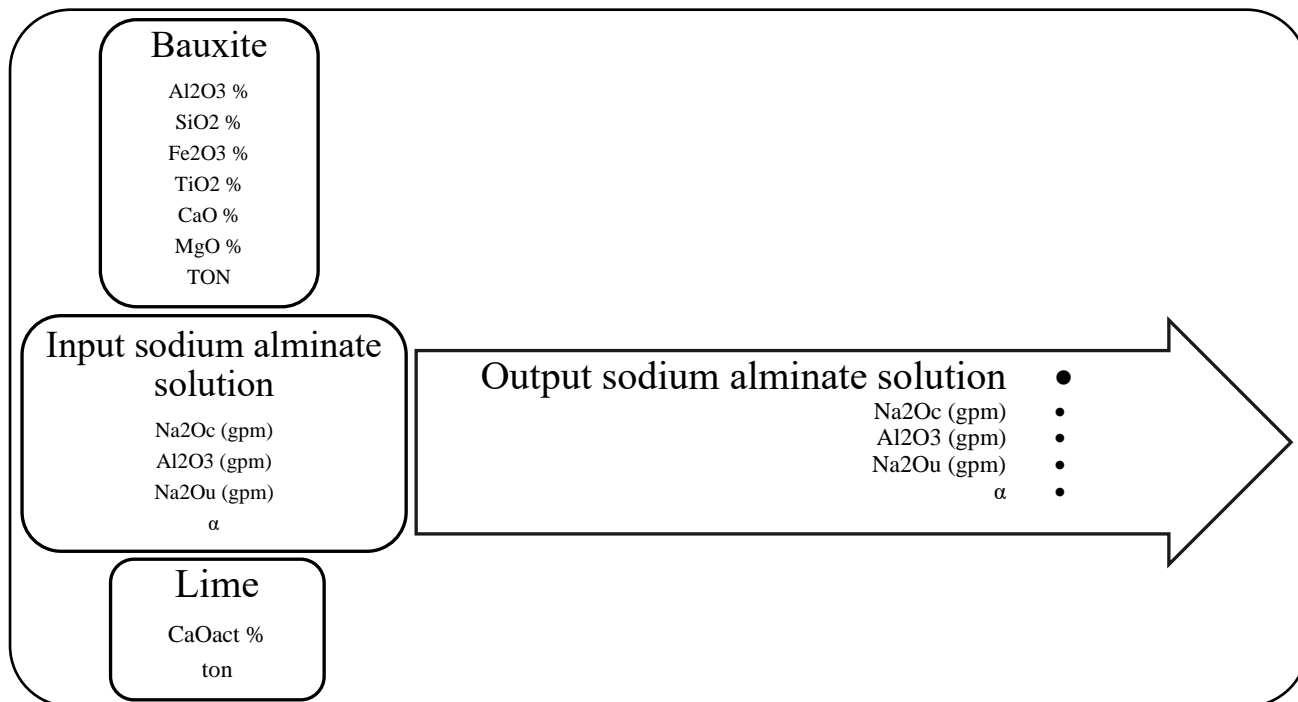
اثرهای منفی هدر رفت آلومینا و سود و نیز افزایش آلودگی‌هایی همچون کربنات، اکزالات، سولفات و اهمیت موضوع مورد بحث، باعث شده است تا کارهای گوناگونی در کاهش هدر رفت سود و آلومینا انجام گیرد. برای نمونه گلاسیون/وستاپ و همکاران در سال ۲۰۰۹ میلادی با استفاده از افزایش پایداری محلول سدیم آلومینات



برخی دیگر از واکنش‌های انجام شده در فرایند بایر به صورت زیر در پژوهش‌های بسیار مورد استفاده قرار گرفته است [۵، ۶].



انجام چنین واکنش‌هایی به ویژه به دلیل عیار پایین بوکسیت و حضور کانی‌های سیلیکاته می‌تواند موجب هدر رفت آلومینا و



شکل ۲ - داده‌های ورودی و خروجی به مدل پیشنهادی

و با بررسی عامل‌های گوناگون، دلیل‌های اصلی حذف آلومینا و سود و افزایش ناخالصی را از میان ترکیب‌های و کانی‌های بسیار ورودی به این فرایند جستجو کند. هدف این پژوهش بررسی عامل‌های مؤثر بر هدر رفت سود کاستیک و آلومینا و افزایش ناخالصی‌ها در همان مرحله نخست تولید آلومینا می‌باشد. چرا که بیش‌تر واکنش‌های مرتبط با اهداف این مطالعه در همین مرحله و پیش از ورود به مرحله‌های انحلال و جداسازی گِل قرمز صورت می‌گیرد. برای این منظور نخست با بررسی فرایند موجود، همه ورودی‌ها و خروجی‌ها به اولین مرحله تولید آلومینا تعیین شد. داده‌های مورد نیاز برای بررسی از آزمایشگاه و فرایند تولید جمع‌آوری و تجزیه و تحلیل شد. در شکل ۲ داده‌های ورودی و خروجی به مدل نشان داده شده است.

استفاده از فناوری‌های دانش داده‌ها و یادگیری ماشین در تعیین دلایل بروز مشکل‌ها در علوم پایه و مهندسی متناسب با افزایش در تعداد و پیچیدگی داده‌ها، بسیار فراگیر شده است [۲۸]. در این دوره زمانی تمامی علوم پایه و مهندسی که شامل مهندسی شیمی نیز می‌شود به دلیل منابع جدید داده به دست آمده از آزمایش‌ها، مشاهده‌ها و شبیه‌سازی‌ها در حال تغییر و دگرگونی می‌باشد [۲۹]. روش‌های یادگیری ماشین می‌تواند کاربردهای فراوانی در مهندسی شیمی و در فرایندهای شیمیایی داشته باشد. مانتورینگ هوشمند

تلاش در کاهش هدر رفت آلومینا داشته‌اند [۲۲]. بررسی اثر آهن بر تولید هیدروگارانته و هدر رفت آلومینا [۲۳] از دیگر کارهای انجام شده در این زمینه بوده است. همچنین کارهای بسیاری برای کاهش هدر رفت سود کاستیک در فرایند بایر انجام شده است. استفاده از آهک در بازیابی آن از گل قرمز باطله [۲۴] و نیز پژوهش انجام گرفته توسط پیراکو که با نرم‌کردن بیش‌تر گِل قرمز و استفاده از آهک، راندمان بازیابی سود را تا میزان ۷۰٪ افزایش داد [۲۵] کنترل مناسب مرحله‌های سیلیس‌زدایی و شستشوی گِل قرمز نیز با هدف کاهش هدر رفت سود در فرایند بایر در سال ۱۹۹۶ میلادی توسط هار/تو و همکاران انجام شده است [۲۶].

حذف آلودگی‌های کربنات و اکزالات نیز موضوع تعداد بسیاری از پروژه‌های پژوهشی در سال‌های اخیر بوده است. برای مثال استیون روزنبرگ و همکارانش تلاش‌های زیادی را در کاهش غلظت سولفات در محلول سدیم آلومینات انجام داده‌اند [۱۰]. همچنین روش‌های به کار رفته توسط استفن/اوستاپ برای حذف آلودگی‌های کربناته و آلی [۱۱-۲۷] تنها نمونه‌های کمی از کارهای انجام گرفته در این زمینه است. اهمیت موضوع باعث شد، پژوهشی تازه تعریف شود تا بتواند در راستای مشکل‌های مطرح شده اثرگذاری مثبتی داشته باشد. این پژوهش قصد دارد با استفاده از روش‌های یادگیری ماشین و داده‌های فراوان موجود در فرایند بایر

جرمی بوکسیت و آهک مصرفی، شدت جریان حجمی و مشخصه‌های محلول ورودی و خروجی به مرحله اول تولید در طی سال‌های ۱۳۸۸ تا ۱۳۹۶ و به صورت روزانه بوده است که در جدول‌های ۱ تا ۴ و شکل‌های ۲ و ۳ نشان داده شده است.

مقایسه آنالیز محلول ورودی و خروجی به این واحد (جدول‌های ۱ و ۴) نشان می‌دهد غلظت Na_2O_c به‌طور میانگین به‌میزان $11/5 \text{ g/L}$ کاهش داشته است. این میزان کاهش به دلیل واکنش‌های بسیار انجام شده به ویژه واکنش‌های (۲) و (۶) در کل فرایند بوده است. از سویی غلظت Al_2O_3 نیز به‌میزان $14/7 \text{ g/L}$ کاهش داشته است. این میزان هدر رفت در آلومینا را می‌توان با واکنش‌های انجام گرفته با ترکیب‌های سیلیکاته و نیز کلسیم هیدروکسید موجود در فضای واکنش (واکنش‌های (۳) و (۷) تفسیر نمود. افزایش در میزان کربنات (Na_2O_u) موجود در محلول نیز تقریباً $5/25 \text{ g/L}$ بود این مقدار از واکنش سدیم هیدروکسید با ترکیب‌های کربناته موجود در خوراک ورودی (کلسیت و دولومیت) به ویژه در آهک مصرفی به دست آمده است. کاهش در Na_2O_t به مقدار $6/2$ در لیتر بوده. تغییر در میزان Na_2O_t نشان‌دهنده خروج سود از فاز محلول به فاز جامد بوده است. در حالی که تغییر در Na_2O_c نشان‌دهنده میزان واکنش این ترکیب و تبدیل به ترکیبی جدید در فاز مایع Na_2O_u و یا انتقال به فاز جامد به‌صورت $\text{Na}_2\text{O} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot m\text{SiO}_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ است. به عبارتی به‌طور دقیق مشخص نمی‌کند چه میزان از سدیم هیدروکسید موجود در محلول به فاز جامد و چه میزان در همان فاز مایع به ترکیبی دیگر تبدیل شده است. با این وجود از مجموع تغییرها در Na_2O_t و Na_2O_c می‌توان نتیجه گرفت، در این فرایند به‌تقریب به میزان 54% کل هیدروکسید ورودی به فاز جامد منتقل شده است. نتیجه‌های آنالیز بوکسیت خروجی در جدول ۵ نشان می‌دهد سود کاستیک به فاز جامد وارد شده است. همچنین این نتیجه‌ها نشان می‌دهد درصد آهک نیز به دلیل اختلاط آهک و بوکسیت در آغاز این فرایند افزایش داشته است.

مقایسه نتیجه‌های آنالیز XRD نمونه پیش و پس از ورود به این فرایند نشان‌دهنده تغییر در ساختار و کانی‌های موجود در بوکسیت بوده است. از بررسی‌های انجام‌شده مشخص می‌شود میزان ترکیب‌هایی مانند Kaolinite کم و به مقدار ترکیب‌هایی همانند Sodalite افزوده شده است. این تغییرها در میزان Calcite به دلیل میزان زیاد آهک ورودی به این فرایند به‌صورت دقیق قابل دیدن نیست.

جدول ۱ - دبی و غلظت میانگین محلول ورودی

شدت جریان محلول	Na_2O_c	Al_2O_3	Na_2O_t	Na_2O_u	α
m^3/day	g/L				
۵۲۳۷	۱۳۹/۱	۷۶/۱۳	۱۶۱/۸۳	۲۲/۷۱	۳/۰۳

جدول ۲ - دبی و آنالیز میانگین بوکسیت مصرفی

m^3	Al_2O_3	SiO_2	Fe_2O_3	TiO_2	Modulus
ton/day	%				
۲۰۶۹	۴۷/۴۳	۱۱/۴۸	۲۱/۳۶	۵/۰۲	۴/۱۳
m.	CaO	MgO	Na_2O	L.O.I	
ton/day	%				
۲۰۶۹	۱/۰۳	۰/۴۱	۰	۱۱/۷۳	

جدول ۳ - دبی و آنالیز میانگین آهک مصرفی

m.	CaOact
ton/day	%
۲۰۹/۴	۸۱/۴۴

جدول ۴ - غلظت میانگین محلول خروجی

Na_2O_c	Al_2O_3	Na_2O_t	Na_2O_u	A
g/L	g/L	g/L	g/L	
۱۲۷/۶۵	۶۱/۴۱	۱۵۵/۶۱	۲۷/۹۶	۳/۴۱

جدول ۵ - آنالیز نمونه‌ای از بوکسیت خروجی از مرحله اول تولید

Al_2O_3	SiO_2	Fe_2O_3	TiO_2	CaO	MgO	Na_2O
%	%	%	%	%	%	%
۴۱	۹۰/۳۱	۲۳/۱۷	۵/۵۹	۹/۷۵	۱/۲۲	۱/۴

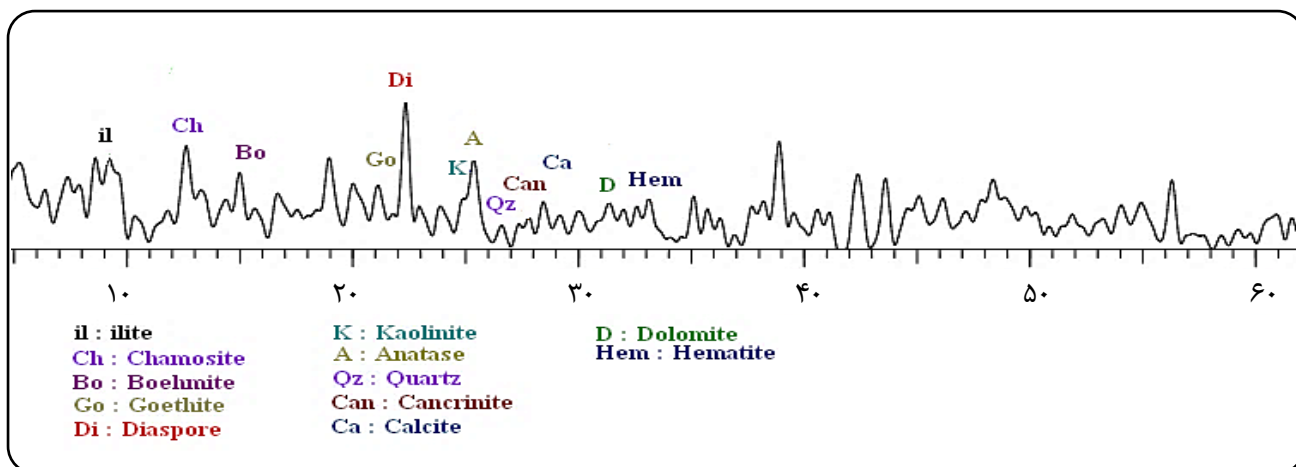
فرایند تولید [۳۰، ۳۱]، کشف خطا و تشخیص همزمان عیب در هر قسمت از سیکل تولید [۳۲، ۳۳]، استخراج دانش [۳۴، ۳۵]، بهینه‌سازی دینامیک [۳۶-۳۸]، کنترل خود بهینه‌سازی [۳۹، ۴۰]، مدل‌سازی و بهینه‌سازی واکنش‌های شیمیایی [۴۱-۴۳] از جمله کاربردهای با اهمیت آن در فرایندهای شیمیایی است.

بخش نظری

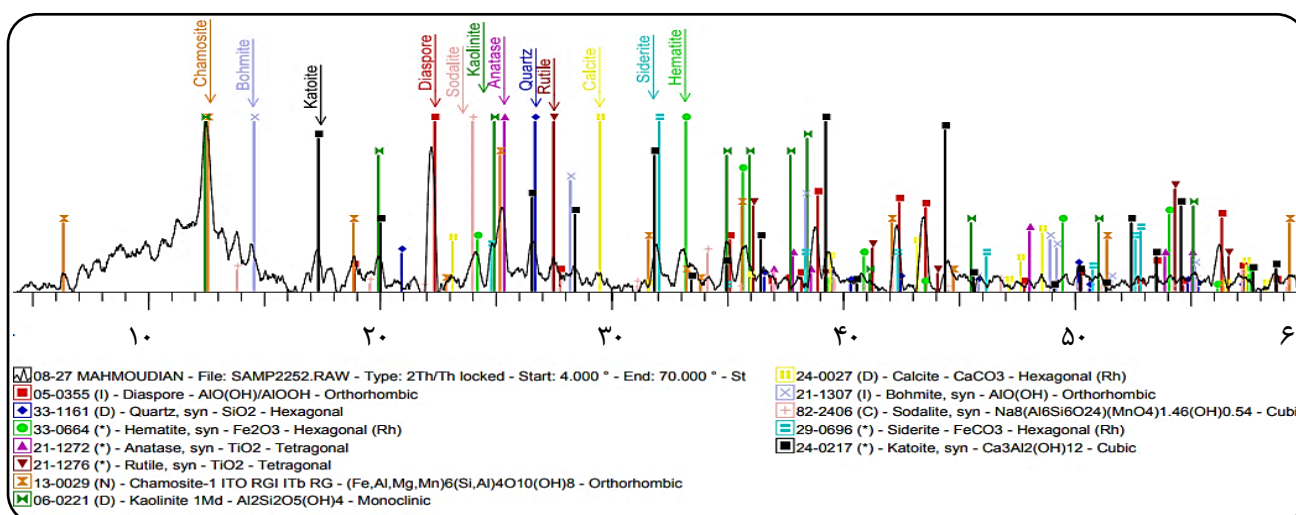
داده‌های تجربی

در این پژوهش داده‌های لازم برای انجام این بررسی‌ها از اطلاعات موجود در واحدهای عملیاتی و نیز آنالیزهای انجام گرفته در آزمایشگاه جمع‌آوری شده است. این داده‌ها شامل آنالیز و شدت جریان

(۱) Self-optimizing control



شکل ۳ - آنالیز XRD بوکسیت جاجرم



شکل ۴ - آنالیز XRD بوکسیت خروجی از مرحله اول تولید

تجمعی بالاتر از این خطاها است. برای داشتن مقایسه‌ای عادلانه بین روش‌ها، پارامترها به شرح زیر تنظیم و انتخاب شدند. اندازه بوجه B، روش‌ها برابر با ۱۰۰ و مقدار عرض تابع کرنل گوسی برابر ۸ در نظر گرفته شده است. نرخ یادگیری ۰.۰۰۶ انتخاب شد. تعداد ویژگی‌های فوریه تصادفی روش FOGD برابر ۱۰۰۰ و ۲۰ مقدار ویژه بزرگ برای الگوریتم NysGD در نظر گرفته شد. همچنین، از تابع زیان $\epsilon - HL$ استفاده شد که تابع زیانی پرکاربرد در مسئله‌های برازش است. روش اعتبارسنجی متقطع‌های ۱۰ تایی^۴ برای ارزیابی الگوریتم‌ها انتخاب شده است. همچنین، بدون از دست دادن کلیت مسئله، ترتیب دنباله داده‌های آموزش به صورت تصادفی در هر فولده^۵ به هم ریخته شد

معیارهای ارزیابی عملکرد پیش‌بینی

در این پژوهش برای ارزیابی عملکرد روش‌های گوناگون در پیش‌بینی و مدل‌سازی در فرایند مذکور از خطای انباشته^۱ (Cu_Er) ، خطای آموزش^۲ (Tr_Err) و خطای آزمون^۳ (Te_Err) برای اندازه‌گیری کارایی الگوریتم‌ها در کنار زمان اجرا (Runtime) استفاده شده است. خطای تجمعی به صورت $\sum_{t=1}^T (y_t - \hat{y}_t)^2$ تعریف می‌شود و نشان‌دهنده خطای مدل یادگیر در دنباله داده‌های آموزش در گذر زمان است. خطای تجمعی به طور معمول بیش‌تر از خطاهای آموزش و آزمون است، از آنجایی که در مرحله‌های اولیه، پیش‌بینی اولیه وزن‌ها منجر به پیش‌بینی اشتباه می‌شود، از این رو خطای

(۱) Cumulative error

(۳) Teste

(۵) Fold

(۲) Training error

(۴) 10-Fold cross-validation

```

Input: the number of Fourier components  $D$ , step size  $\eta$ , kernel function  $k$ ;
Initialize  $w_1 = 0$ .
Calculate  $p(u)$  for kernel  $k$  as (2).
Generate random Fourier components:  $u_1, \dots, u_D$  sampled from distribution  $p(u)$ 
for  $t = 1, 2, \dots, T$  do
  Receive  $x_t$ ;
  Construct new representation:
   $z_t(x_t) = (\sin(u_1^T x_t), \cos(u_1^T x_t), \dots, \sin(u_D^T x_t), \cos(u_D^T x_t))^T$ 
  Predict  $\hat{y}_t = \text{sgn}(w_t^T z(x_t))$ ;
  Receive  $y_t$  and suffer loss  $\ell(w_t^T z(x_t); y_t)$ ;
  if  $\ell(w_t^T z(x_t); y_t) > 0$  then
     $w_{t+1} = w_t - \eta \nabla \ell(w_t^T z(x_t); y_t)$ .
  end if
end for

```

شکل ۵ - الگوریتم گردایان کاهشی آنلاین فوریه

که در ادامه به توضیح مختصر آن‌ها پرداخته شده است.

الگوریتم گردایان کاهشی آنلاین فوریه-FOGD

الگوریتم گردایان کاهشی آنلاین فوریه [۳] به دنبال حل مسئله پهنه‌سازی (معادله ۱۳) برای به دست آوردن W_t به صورت برخط است به طوری که $\phi(x_t)$ از معادله (۱۴) به دست آید و t نشان دهنده زمان است.

$$f_t(x_t) = w_t^T \phi(x_t) \quad (13)$$

$$\min_w R_{inst}(w, \lambda, t) = \ell(f_t(x_t), y_t) + \frac{\lambda}{2} \|w\|^2 \quad (14)$$

به منظور حل مسئله گردایان کاهشی آنلاین فوریه (معادله ۱۴)) از روش حل گردایان کاهشی تصادفی استفاده می‌کند. قانون به‌روزرسانی تخمین وزن‌های تابع تصمیم را به صورت معادله (۱۵) به دست می‌آید.

$$w_{t+1} = (1 - \mu\lambda)w_t - \mu \ell'(f_t(x_t), y_t) \phi(x_t) \quad (15)$$

که در آن تابع زیان MSE به صورت زیر تعریف شده است

$$\ell'(f_t(x_t), y_t) = (y_t - f_t(x_t))^2 \quad (16)$$

با قراردادن معادله‌های بالا، معادله قانون به‌روزرسانی وزن‌ها به صورت زیر به دست می‌آید.

$$w_{t+1} = w_t + \mu(y_t - f_t(x_t)) \phi(x_t) \quad (17)$$

الگوریتم این روش در شکل ۵ نشان داده شده است. در این الگوریتم نمونه‌های آموزش تک تک به ترتیب وارد الگوریتم می‌شوند و وزن‌های مدل با گذشت زمان به‌روزرسانی می‌شود.

الگوریتم گردایان کاهشی برخط نیستروم-NysGD

در الگوریتم NOGD، همانند الگوریتم FoGD است، با این تفاوت که نخست الگوریتم گردایان کاهشی را تا رسیدن به تعداد B نمونه

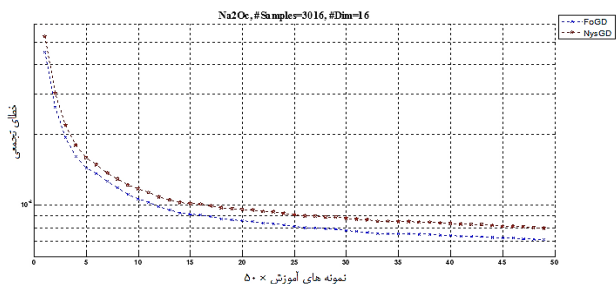
(یعنی، داده‌ها با ترتیب نامنظم وارد الگوریتم‌ها می‌شوند). پارتیشن‌بندی و توالی داده‌ها در همه فولدها در همه روش‌ها یکسان در نظر گرفته شد. با توجه به استفاده از روش 10-Fold-Cross-Validation در نتیجه‌ها ۹۰٪ داده به عنوان آموزش-اعتبارسنجی و ۱۰٪ به عنوان نمونه آزمون انتخاب شده است.

پیچیدگی زمانی قانون به‌روزرسانی (به‌روزرسانی مدل بدون در نظر گرفتن زمان محاسبه نگاشت ویژگی و با توجه به این‌که این مدل در هر لحظه تنها یک نمونه را می‌بیند) در الگوریتم NysGD برابر $O(kB)$ است که در آن k ، تعداد مقادیرهای ویژه بزرگ ماتریس است که ما در این مقاله ۱۰ در نظر گرفتیم و B اندازه بودجه است و در روش FOGD مقدار R یا بعد فضای ویژگی است که ما آن را ۱۰۰۰ فرض کردیم. بدون در نظر گرفتن زمان محاسبه نگاشت ویژگی الگوریتم NysGD سریع‌تر از FOGD است ولی در مجموع با در نظر گرفتن پیچیدگی فضایی و محاسباتی روش‌ها الگوریتم FOGD سریع‌تر از NysGD است. همچنین تعداد حدس و خطا در این روش‌ها برابر تعداد نمونه‌های آموزشی است برای رسیدن هر نمونه قانون به‌روزرسانی وزن‌های بار اجرا می‌شود.

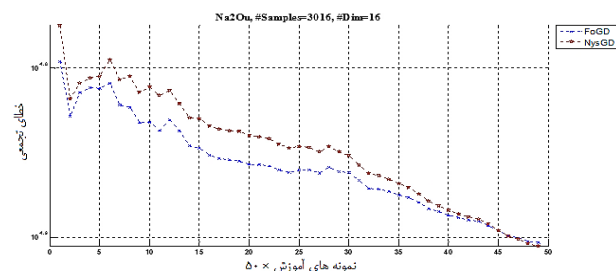
برای داشتن مقایسه‌ای عادلانه بین روش‌ها، پارامترها به شرح زیر تنظیم و انتخاب شدند. سایز بودجه روش‌ها برابر با ۱۰۰ و $\sigma = 8$ برای هسته گوسی در نظر گرفته شده است. نرخ یادگیری 0.002 انتخاب شد. تعداد RFFsها برای الگوریتم FoGD برابر ۱۰۰۰ و ۱۰ مقدار ویژه بزرگ اول برای NysGD انتخاب شد. پیش از این‌که داده‌ها وارد مدل‌ها شوند احتیاج داریم آن‌ها را به دو دسته آموزشی و داده‌های آزمون تقسیم نماییم. به این منظور از روش اعتبارسنجی متقابل ۱۰ تایی [۱،۲] استفاده می‌شود.

شرح روش‌های FOGD و NysGD

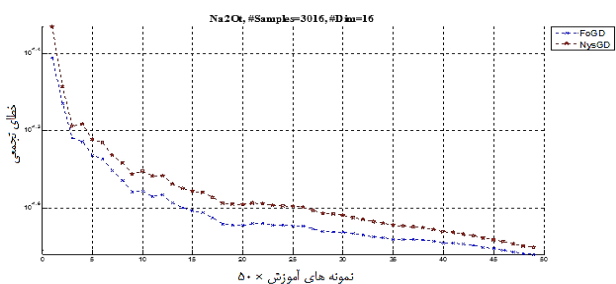
به‌تازگی، روش‌های یادگیری هسته دسته‌ای با الگوریتم‌های یادگیری برخط ترکیب شده‌اند تا برای حل مسائل برخط در مقیاس بزرگ به طور چشمگیری، کارآمدتر و مقیاس‌پذیرتر شوند. این الگوریتم‌ها با نام "یادگیری هسته برخط" شناخته می‌شوند که برخلاف روش‌های یادگیری هسته دسته‌ای، تک‌گذر بوده و از بازآموزی رنج نمی‌برند، از این رو، در بسیاری از کاربردهای دنیای واقعی می‌توان از آن‌ها استفاده نمود. همه این روش‌ها از مشکل به اصطلاح "نفرین هسته" [۴۹] رنج می‌برند. دو الگوریتم که برای رفع این مشکل‌ها به وجود آمده‌اند عبارت‌اند از (۱) الگوریتم گردایان کاهشی برخط فوریه و (۲) الگوریتم گردایان کاهشی برخط نیستروم،



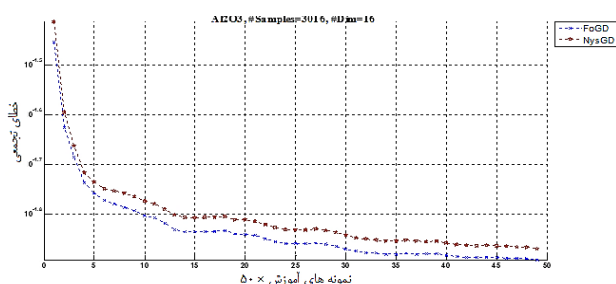
شکل ۷ - مقدارهای خطای تجمعی در تخمین میزان Na_2O_e



شکل ۸ - مقدارهای خطای تجمعی در تخمین میزان Na_2O_u



شکل ۹ - مقدارهای خطای تجمعی در تخمین میزان Na_2O_t



شکل ۱۰ - مقدارهای خطای تجمعی در تخمین میزان Al_2O_3

در شکل‌های ۷ تا ۱۰ نشان داده شده است. محور افقی تعداد داده‌های آموزش دریافت شده به همراه عامل مقیاس را نشان می‌دهد. عامل مقیاس، محور افقی را به ۵۰ قسمت مساوی تقسیم می‌کند. محور عمودی، میانگین خطای تجمعی بر روی دنباله داده‌های آموزش است. این منحنی‌ها میزان Cu_{ERT} در پیش‌بینی پارامترهای مورد بررسی را در گذر زمان نشان می‌دهد. با افزایش تعداد نمونه‌های آموزشی

```

Input: the budget  $B$ , step size  $\eta$ , rank approximation  $k$ .
Initialize support vector set  $S_1 = \emptyset$ , and model  $f_1 = 0$ .
while  $|S_t| < B$  do
    Receive new instance  $x_t$ ;
    Predict  $\hat{y}_t = \text{sgn}(f_t(x_t))$ ;
    Update  $f_t$  by regular Online Gradient Descent (OGD);
    Update  $S_{t+1} = S_t \cup \{t\}$  whenever loss is nonzero;
     $t = t + 1$ ;
end while
Construct the kernel matrix  $\hat{K}_t$  from  $S_t$ .
 $[V_k, D_k] = \text{eigs}(\hat{K}_t, k)$ , where  $V_k$  and  $D_k$  are Eigenvectors and Eigenvalues of  $\hat{K}_t$ .
Initialize  $w_t^1 = [\alpha_1, \dots, \alpha_B](D_k^{-0.5}V_k^T)^{-1}$ .
Initialize the instance index  $T_0 = t$ ;
for  $t = T_0, \dots, T$  do
    Receive new instance  $x_t$ ;
    Construct the new representation of  $x_t$ :
     $z(x_t) = D_k^{-0.5}V_k^T(k(x_t, \hat{x}_1), \dots, k(x_t, \hat{x}_B))^T$ .
    Predict  $\hat{y}_t = \text{sgn}(w_t^1 z(x_t))$ ;
    Update  $w_{t+1} = w_t - \eta \nabla \ell(w_t^1 z(x_t); y_t)$ .
end for
    
```

شکل ۶ - الگوریتم NysGD

SVs اجرا می‌کند. سپس، روش نیستروم تقریب نگاشت ویژگی صریح را به صورت زیر

$$z(\cdot) = D_k^{-0.5}V_k^T(k(\hat{x}_1, \cdot), k(\hat{x}_2, \cdot), \dots, k(\hat{x}_B, \cdot))^T \quad (18)$$

به دست می‌آورد. در این روش ماتریس قطری مقدارهای ویژه D_k و ماتریس بردارهای ویژه V_k پس از این مرحله ثابت در نظر گرفته شدند. به عبارت دیگر، پارامترهای نگاشت ویژگی تنها برای نمونه‌های اولیه تغییر می‌کند و پس از آن، پارامترها برای سایر نمونه‌ها ثابت است.

پس از این مرحله الگوریتم که در شکل ۶ نشان داده شده است، مشابه الگوریتم FoGD است، با این تفاوت که از نگاشت ویژگی مبتنی بر نیستروم استفاده می‌کند و همچنین، با توجه به این که الگوریتم گرادین کاهشی برخط هسته‌ای برای t نمونه رسیده تاکنون اجرا شده است، وزن اولیه این الگوریتم برخلاف روش FoGD که مخالف صفر است، برابر با معادله (۱۹) است.

$$w = [a_1, \dots, a_B](D_k^{-0.5}V_k^T)^{-1} \quad (19)$$

نتیجه‌ها و بحث

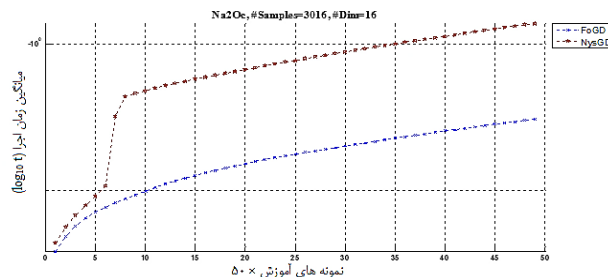
همان‌گونه که پیش‌تر اشاره شد، در این مقاله از دو روش FOGD و NysGD [۴۷] پدر پیش‌بینی تغییرهای غلظت Na_2O_e ، Na_2O_t ، Na_2O_u و Al_2O_3 در فاز محلول خروجی از مرحله نخست (آسیای تر) فرایند بایر شرکت آلومینای جاجرم استفاده شده است. نتیجه‌های روش ارزیابی اعتبارسنجی متقاطع ۱۰ تایی شامل میانگین خطای انباشته، آموزش و آزمون در کنار میانگین زمان اجرا به ثانیه در جدول‌های ۶ تا ۹ آورده شده است. همچنین به منظور نمایش فرایند یادگیری، منحنی‌های یادگیری روش‌های یادشده

یکی از پارامترهای مهم در استفاده از روش‌های برخط یادگیری ماشین، سرعت یادگیری الگوریتم می‌باشد. برای بررسی این مورد، مقدار میانگین زمان اجرا در پیش‌بینی تغییرهای غلظت Na_2O_c ، Na_2O_u ، Na_2O_t و Al_2O_3 با استفاده از روش‌های FOGD و NysGD اندازه‌گیری و مقایسه شد. نمودار میانگین زمان اجرا در شکل‌های ۱۱ تا ۱۴ نشان داده شده است. نتیجه‌ها نشان می‌دهند در همه مدل‌های تهیه شده برای پارامترهای مورد بررسی سرعت یادگیری FOGD بیش‌تر از NysGD بوده است؛ و این در کنار دقت بالاتر FOGD نشان می‌دهد این روش برای پیش‌بینی‌های مورد مطالعه بهتر بوده است. علت آن این است که الگوریتم FOGD از نگاهت‌های فوریه تصادفی برای تقریب کرنل استفاده می‌کند، در صورتی که الگوریتم NysGD برای تقریب کرنل از تجزیه مرتبه پایین استفاده می‌کند که به نسبت FOGD زمان‌برتر است [۴۷].

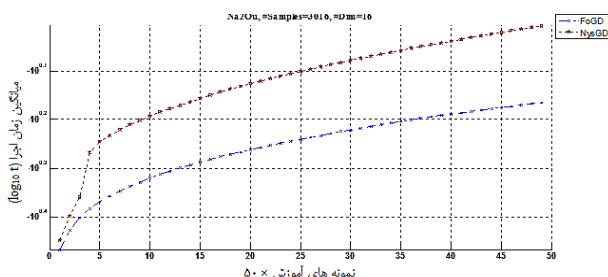
در جدول‌های ۶ تا ۹، میانگین خطای آموزش، خطای آزمون و خطای انباشته و میانگین زمان اجرا روش اعتبارسنجی متقاطع‌های ۱۰ تایی نشان داده شده‌اند. این نتیجه‌ها تأکیدکننده سرعت بیش‌تر یادگیری روش FOGD نسبت به روش NysGD است. همچنین با مقایسه Cu_Err در جدول‌ها می‌توان دید که Cu_Err روش FOGD بهتر در ۳ مورد از خطای NysGD کم‌تر است. با مقایسه سایر خطاها می‌توان دید که به تقریب روش NysGD خطای بهتری نسبت به روش FOGD دارد و این امر طبیعی است زیرا روش FOGD برای تقریب کرنل مستقل از داده است و نگاهت ویژگی را مستقل از داده‌ها به دست می‌آورد، در صورتی که روش NysGD تقریب کرنل را وابسته به داده‌ها با زمان بیش‌تری به دست می‌آورد. به اصطلاح می‌توان گفت عمومیت‌پذیری روش NysGD نسبت به FOGD بهتر است.

نتیجه‌گیری

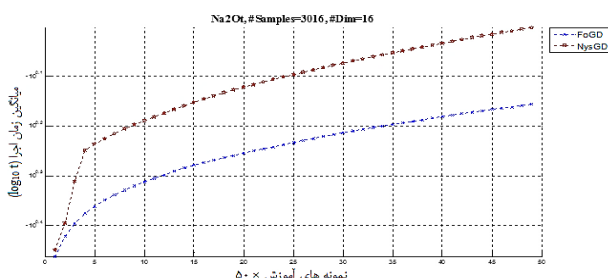
همان‌گونه که از مطالعه‌های انجام شده در گذشته مشخص بود، واکنش‌های زیادی موجب هدر رفت آلومینا و سود کاستیک و نیز افزایش آلودگی سدیم کربنات در فرایند بایر می‌شود. وجود واکنش‌های پیچیده و ناشناخته نیاز به مدل‌سازی بر پایه داده‌های واقعی را موجب شد. برای مدل‌سازی تهیه شده از این فرایند از روش‌های FOGD، NysGD استفاده شد. نتیجه‌ها نشان‌دهنده مدل‌سازی موفق این روش‌ها برای این فرایند بوده است. نمودار



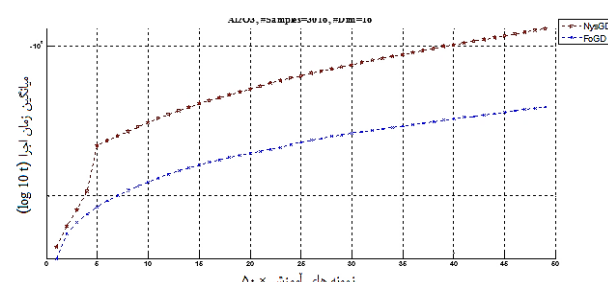
شکل ۱۱ - مقدارهای میانگین زمان اجرا در تخمین میزان Na_2O_c



شکل ۱۲ - مقدارهای میانگین زمان اجرا در تخمین میزان Na_2O_u



شکل ۱۳ - مقدارهای میانگین زمان اجرا در تخمین میزان Na_2O_t



شکل ۱۴ - مقدارهای میانگین زمان اجرا در تخمین میزان Al_2O_3

میزان خطا کاهش یافته است. نتیجه‌ها همچنین نشان می‌دهند دقت پیش‌بینی با الگوریتم‌های مورد استفاده به ترتیب برای پارامترهای Na_2O_c ، Na_2O_u ، Al_2O_3 و Na_2O_t به دست آمده است. همچنین نمودارهای خطای تجمیع شده نشان می‌دهند الگوریتم FOGD عملکرد بهتری در کاهش خطا نسبت به NysGD داشته است.

(۱) Generality

خطای آموزش نشان می‌دهد با افزایش تعداد نمونه‌های آموزشی بیشتر، خطای آموزش به میزان چشم‌گیری کاهش پیدا کرده است. هرچند نتیجه‌ها حکایت از موفقیت هر دو روش در تخمین غلظت Na_2O_c ، Na_2O_u ، Na_2O_t و Al_2O_3 در فازمحلول خروجی از واحد آسیای تر داشته است، ولی مدل به دست آمده از الگوریتم FOGD دارای خطای کم‌تری در مرحله آموزش است ولی عمومیت‌پذیری کم‌تری نسبت به NysGD دارد. همچنین سرعت آموزش بیشتر روش FOGD نسبت به NysGD را نشان می‌دهد که فاکتوری تعیین‌کننده در انتخاب روش‌های مبتنی بر یادگیری ماشین برای فرایندهای پیچیده و شامل مرحله‌های بسیار می‌باشد.

فهرست نمادها

Na_2O_c	غلظت سود کاستیک در فاز محلول بر حسب Na_2O
Na_2O_t	غلظت مجموع Na_2O_c و Na_2O_t در فاز محلول بر حسب Na_2O
Na_2O_u	غلظت سود کربناته در فاز محلول بر حسب Na_2O
Al_2O_3 (A)	غلظت آلومینا در فاز محلول و جامد
α	نسبت غلظت مولی سود کاستیک به آلومینا در فاز محلول
CaO_{act}	درصد آهک فعال
Moist	درصد رطوبت
Modulus	نسبت درصد جرمی آلومینا به سیلیس در بوکسیت
L.O.I	Loss On Ignition (%)

جدول ۶ - پارامترهای مدل‌های به دست آمده و خطای آموزش، آزمون و تجمیع شده در تخمین Al_2O_3

الگوریتم	خطای آزمون	خطای آموزش	زمان اجرا (ثانیه)	الگوریتم
NysGD	۰/۰۱۰۹۸	۰/۰۱۰۹	۰/۱۲۰۹	NysGD
FoGD	۰/۰۱۱۰۶	۰/۰۱۱۰۴	۰/۰۴۷۷	FoGD

جدول ۷ - پارامترهای مدل‌های به دست آمده و خطای آموزش، آزمون و تجمیع شده در تخمین Na_2O_c

الگوریتم	خطای آزمون	خطای آموزش	زمان اجرا (ثانیه)	الگوریتم
NysGD	۰/۰۰۶۰۸	۰/۰۰۵۹۸	۰/۱۲۴۸	NysGD
FoGD	۰/۰۰۵۹۱	۰/۰۰۵۸۸	۰/۰۳۷۸	FoGD

جدول ۸ - پارامترهای مدل‌های به دست آمده و خطای آموزش، آزمون و تجمیع شده در تخمین Na_2O_u

الگوریتم	خطای آزمون	خطای آموزش	زمان اجرا (ثانیه)	الگوریتم
NysGD	۰/۰۰۹۴۹	۰/۰۰۹۶	۰/۰۹۷۰	NysGD
FoGD	۰/۰۱۰۳۶	۰/۰۱۰۴	۰/۰۳۴۸	FoGD

جدول ۹ - پارامترهای مدل‌های به دست آمده و خطای آموزش، آزمون و تجمیع شده در تخمین Na_2O_t

الگوریتم	خطای آزمون	خطای آموزش	زمان اجرا (ثانیه)	الگوریتم
NysGD	۰/۰۱۶۰۵	۰/۰۱۶۲۴	۰/۰۹۹۶	NysGD
FoGD	۰/۰۱۷۶۴	۰/۰۱۷۶۴	۰/۰۳۷۲	FoGD

تاریخ دریافت: ۱۳۹۸/۰۷/۳۰؛ تاریخ پذیرش: ۱۳۹۸/۱۰/۰۲

مراجع

- [1] Technoexport Praha. *Alumina Plant Jajarm Process and Operating Manual*. (1997).
- [2] Kaußen F.M., Friedrich B., *Methods for Alkaline Recovery of Aluminum from Bauxite Residue*. *Journal of Sustainable Metallurgy*, **2**: 353–364 (2016)
- [3] Yousry L. Sidrak., *Dynamic Simulation and Control of the Bayer Process*, *Ind. Eng. Chem. Res.*, **40**: 1146-1156 (2001).
- [4] Liang W.T., Couperthwaite S.J., Kaur G., Yan C., Johnstone D.W., Millar G.J., *Effect of Strong Acids on Red Mud Structural and Fluoride Adsorption Properties*, *Journal of Colloid and Interface Science*, **423**: 158–165 (2014).
- [5] Peter S., “*Reactions of Lime under High Temperature Bayer Digestion Conditions*”, *10th International Alumina Quality Workshop*; 273-381, 19-23 April, Western Australia (2015).
- [6] Gerald R., Dunstan D.G., Charmaine R.G. William., *Method for the Causticisation of Bayer Process Solutions*, *EP06704821A* (2006).

- [7] Power G., Gräfe M., Klauber C., [Bauxite Residue Issues: I. Current Management, Disposal and Storage Practices](#), *Hydrometallurgy*, **108**: 33–45 (2011).
- [8] Radomirovic T., Smith P., Southam D., Tashi S., Jones F., [Crystallization of Sodalite particles under Bayer-Type Conditions](#), *Hydrometallurgy*, **137**: 84–91 (2013).
- [9] Xu B., Smith P., Wingate C., De Silva L., [The Effect of Calcium and Temperature on the Transformation of Sodalite to Cancrinite in Bayer Digestion](#), *Hydrometallurgy*, **105**: 75–81 (2010).
- [10] Rosenberg S.P., Tichbon W., Wilson D.J., Heath C.A., [Process for the Removal of Oxalate and/or Sulphate from Bayer Liquors](#), *United States Patent 72444040* (2007).
- [11] Ostap S., Bartok D., [Removal of Sodium Carbonate and Sodium Sulfate from Bayer Solutions](#). *US3508884A* (1967).
- [12] Peter S., [The Processing of High Silica Bauxites—Review of Existing and Potential Processes](#). *Hydrometallurgy*, **98**: 162–176 (2009).
- [13] Piga L., Pochetti F., Stoppa L., [Recovering Metals from Red Mud Generated during Alumina Production](#), *JOM*, **45**: 54–59 (1993).
- [14] McGill W.B., Paul E.A., [Fractionation of Soil and 15 N Nitrogen to Separate the Organic and Clay Interactions of Immobilized](#), *Canadian Journal of Soil Science*, **56**: 203–212 (1976).
- [15] Shin H.J., Lee S.O., Kim S.J., Tran T., Kim M.J., [Study on the Effect of Humate and its Removal on the Precipitation of Aluminum Trihydroxide from the Bayer Process](#), *Minerals Engineering*, **17**: 387–391 (2004).
- [16] Brady J. P., [“An examination of the Applicability of Hydrotalcite for Removing Oxalate Anions from Bayer Process Solutions”](#), Masters by Research Thesis, Queensland University of Technology, (2011).
- [17] Armstrong L., Hunter J., McCormick K., Warren. H., [Bound Soda Incorporation during Hydrate Precipitation-Effects of Caustic, Temperature, and Organics](#), *Light Metals*, 37–40 (1993).
- [18] Grocott S.C., Rosenberg S.P., [“Possible Mechanisms for Soda Incorporation in Smelter Grade Alumina”](#), *1st International Alumina Quality Workshop*, 271–287 (1998).
- [19] Hind A.R., Bhargava S.K., Grocott S.C., [The Surface Chemistry of Bayer Process Solids](#), *Journal of Colloids and Surfaces*, **146**: 359–374 (1999).
- [20] Atkins P., Grocott S.C., [Impact of Organic Impurities on the Product of Refined Alumina](#). *Proceedings of Science, Technology and Utilisation of Humic Acids*. CSIRO Division of Coal and Energy Technology, Australia, 85–94 (1988).
- [21] Zhang Y.F., Cao S.T., Zhang Y., Zheng S.L., [Method for Producing Alumina from Bauxite](#). *China patent, Appl. No.: 200810227930.5* (2008).
- [22] Stopa G.G., Brandão A.A.C., Prasad S., [Improving the Bayer Process Productivity – An Industrial Case Study](#), *Minerals Engineering*, **22**: 1130–1136 (2009).
- [23] Solymar K., Orban M., Zoldi J., Baksa G., [Methods for Reducing NaOH Losses in the Hungarian Alumina Plants](#), *Travaux ICSOBA*, **13**: 377–390 (1983).

- [24] Baksa G., Vallo F., Sitkei F., Zoldi J., Solymar K., “Complex Causticization: An Effective Means for the Reduction of NaOH Losses in an Alumina. Light Metals”, New Orleans, LA USA, 75–80 (1986).
- [25] Picaro T., Red Mud Processing, WO9729992-A, (2000).
- [26] Harato T., “The Development of a New Bayer Process that Reduces the Desilication Loss of Soda by 50% Compared to the Conventional Process”, *Fourth International Alumina Quality Workshop*, Darwin, N. T: 311–320 (1996).
- [27] Armstrong L., Richter K., Taylor D., Mitchell V., Fane T., Glastras M., “A New Membrane Process to Purify Bayer Liquors”, *6th International Alumina Quality Workshop* (2002).
- [28] Zachary T.W., Nikolaos, V.S., *The ALAMO Approach to Machine Learning*, *Computers and Chemical Engineering*, **106**: 785-795 (2017).
- [29] Beck A.C.D., *Data Science: Accelerating Innovation and Discovery in Chemical Engineering*, *AIChE Journal.*, **62**: 1402-1416 (2016).
- [30] Shokry h., Vicente P., Escudero G., Pérez-Moya M., Graells M., Espuña A., *Data-Driven Soft-Sensors for Online Monitoring of Batch Processes with Different Initial Conditions*, *Computers and Chemical Engineering*, **118**: 159-179 (2018).
- [31] Han H., Zhu S., Qiao J., Guo M., *Data-Driven Intelligent Monitoring System for Key Variables in Wastewater Treatment Process*, *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 1-9 (2018).
- [32] Onel M., Kieslich C.A., Guzman Y.A., Floudas C. A., Pistikopoulos E.N., *Big Data Approach to Batch Process Monitoring: Simultaneous Fault Detection and Diagnosis Using Nonlinear Support Vector Machine-based Feature Selection*, *Computers and Chemical Engineering*, 1-47 (2018).
- [33] Garcia G.M., Munaro C.J., *Isolation of Plant-Wide Faults using Causality Detection Methods*, *IFAC-Papers OnLine*, **49**: 13–18 (2016).
- [34] Tsai Y., Lu Q., Rippon L., Lim S., Tulsyan A., Gopaluni B., *Pattern and Knowledge Extraction using Process Data Analytics: A tutorial*, *IFAC-PapersOnLine*, **51**: 13–18 (2018).
- [35] Cheng Y., Chen K., Sun H., Zhang Y., Tao F., *Data and Knowledge Mining with Big Data Towards Smart Production*, *Journal of Industrial Information Integration*, **9**: 1–13 (2018).
- [36] Clerget C.H., Grimaldi J.P., Ch`ebre M., Petit N., *An Iterative Algorithm for Dynamic Optimization of Systems with Input-Dependent Hydraulic Delays*, *IFAC-PapersOnLine*, **51(18)**: 7–12 (2018).
- [37] Houben C., Lapkin A.A., *Automatic Discovery and Optimization of Chemical Processes*, *Current Opinion in Chemical Engineering*, **9**: 1–7 (2015).
- [38] Schweidtmann A.M., Clayton A.D., Holmes N., Bradford E., Bourne R.A., Lapkin A.A., *Machine learning Meets Continuous Flow Chemistry: Automated Optimization Towards the Pareto Front of Multiple Objectives*, *Chemical Engineering Journal.*, **352**: 277–282 (2018).
- [39] Ye L., Cao Y., Skogestad S., *Global Self-Optimizing Control for Uncertain Constrained Process Systems*, *IFAC-Papers OnLine.*, **50**: 7672–7677 (2017).

- [40] Vazan P., Janikova D., Tanuska P., Kebisek M., Cervenanska Z., [Using Data Mining Methods for Manufacturing Process Control](#), *IFAC-Papers OnLine.*, **50(1)**: 6178–6183 (2017)
- [41] Zhou Zhenpeng., Li X., Zare R.N., [Optimizing Chemical Reactions with Deep Reinforcement Learning](#), *ACS Cent. Sci.*, **3**: 1337–1344 (2018).
- [42] Tan P., Xia J., Zhang C., Fang Q., Chen G., [Modeling and Optimization of NOX Emission in a Coal-Fired Power Plant using Advanced Machine Learning Methods](#), *Energy Procedia*, **61**: 377 – 380 (2014).
- [43] Wei X., “Modeling and Optimization of Wastewater Treatment Process with a Data-Driven Approach”, Ph.D. Theses. University of Iowa. (2013).
- [44] Cregan V., Lee W.T., Clune L., [A Soft Sensor for the Bayer Process](#), *Journal of Mathematics In Industry*, 7-17 (2017).
- [45] Chelgani S.C., Jorjani E., [Artificial Neural Network Prediction of Al₂O₃ Leaching Recovery in the Bayer Process—Jajarm Alumina Plant \(Iran\)](#), *Hydrometallurgy.*, **97(1-2)**: 105-110 (2009).
- [46] Mahmoudian M., Ghaemi A., Hashemabadi H., Shahhosseini S., [Comparing the Capability of Various Models for Predicting the Bayer Process Parameters](#), *Journal of Advanced Materials and Processing*, **6**: 71-86 (2018).
- [47] Lu J., [Large Scale Online Kernel Learning](#), *The Journal of Machine Learning Research*, **17(1)**: 1613-1655 (2016).
- [48] Alpaydin E., “[Introduction to Machine Learning](#). 2nd ed.: Cambridge, Mass”, MIT Press, (2010).
- [49] Wang Z., Crammer k., Vucetic S., [Breaking the Curse of Kernelization: Budgeted Stochastic Gradient Descent](#), *Journal of Machin Learning Research*, **13(1)**: 3103-3131 (2012).
- [50] LU J., Hoi S.C., [Large Scale Online Kernel Learning](#), *Journal of Machin Learning Research*, **17(1)**: 1-43 (2016).
- [51] Kivinen J., [Online Learning with Kernels](#), *IEEE Transactions on Signal Processing*, **52**: 2165-2176 (2004).