doi: 10.20237/j.issn.1007-7545.2026.11.010

融合ANN增强机理和SVM残差补偿的锡-铅-锑真空分离含量预测

谢慧[1,2], 李根根[1], 戴卫平[2], 余勇[2], 李建春[1], 张发祥[1], 杨春曦[1]

(1. 昆明理工大学 机电工程学院 复杂机电系统智能控制研究所, 昆明 650500;
2. 昆明鼎邦科技股份有限公司, 昆明 650033)

摘要: 在锡-铅-锑多元合金真空蒸馏过程中, 液相中锡、铅、锑的实时含量是评价分离效果与冶金效率的关键指标, 但目前工业中仅能通过离线检测获取, 这种数据反馈的大滞后导致真空炉无法及时调整工艺参数, 从而影响生产过程的稳定性与总体经济效益。因此, 本文提出一种融合人工神经网络(Artificial Neural Network, ANN)增强机理与支持向量机(Support Vector Machine, SVM)残差补偿的混合建模方法(AMM-SVM), 实现上述含量的软测量。该方法首先利用ANN优化机理模型的关键参数, 以克服原有模型在复杂工况下刻画非线性动力学行为的不足; 随后通过SVM构建残差补偿机制, 进一步提升预测精度。同时, 采用Adam优化器和粒子群优化算法(Particle Swarm Optimization, PSO)分别优化ANN与SVM的超参数。最后, 以云南某企业生产的DBLL11-10型多功能锡铅锑合金真空分离电阻炉在二十多个锡冶炼厂的实际运行数据为例, 验证了所提模型的有效性。对比试验结果表明, AMM-SVM模型在预测性能上表现最优。

关键词: 有色金属; 锡-铅-锑合金; 真空冶金工艺; 混合建模; 残差补偿; 超参数优化

中图分类号: TF815; TF803.11 **文献标志码:** A **文章编号:** 1007-7545(2026)11-2388-10

引用格式: 谢慧, 李根根, 戴卫平, 等. 融合ANN增强机理和SVM残差补偿的锡-铅-锑真空分离含量预测[J]. 有色金属(冶炼部分), 2026(11): 2388-2397. DOI: 10.20237/j.issn.1007-7545.2026.11.010.

Xie Hui, Li Gengen, Dai Weiping, et al. Prediction of the Content of Tin-Lead-Antimony in Vacuum Separation Based on the Fusion of ANN Enhancement Mechanism and SVM Residual Compensation[J]. Nonferrous Metals (Extractive Metallurgy), 2026(11): 2388-2397. DOI: 10.20237/j.issn.1007-7545.2026.11.010.

1 研究背景及意义

锡铅锑合金的真空蒸馏技术, 是有色金属精炼、二次资源回收及高纯度材料制备中的关键提纯技术, 在资源循环与高端材料生产中具有重要应用价值。实现对该过程产品关键成分(如锡、铅、锑)含量的准确预测, 是提升整体效益的关键, 直接关系到最终产品的质量、工艺运行的稳定性以及资源利用效率。因此, 通过对目标元素和杂质含量的精确预测与调控, 可有效确保产品纯度[1], 为高质量生产提供可靠支撑。

2 国内外研究现状分析

当前, 相关研究主要遵循三条技术路径发展: 基于热力学理论的机理模型、基于过程数据的数据驱动模型, 以及融合二者优势的混合建模方法。

基于热力学与气-液平衡(Vapor-liquid equilibrium, VLE)的机理模型研究旨在从物理化学本质出发, 通过建立描述合金体系VLE的热力学模型来预测分离行为与产物含量。其研究核心在于精确计算合金组元的活度, 这是决定挥发分离效果的关键热力学性

收稿日期: 2026-01-13 **修回日期:** 2026-03-06 **录用日期:** 2026-03-11

基金项目: 云南省重大科技专项项目(202302AD080005); 云南省基础研究计划项目(202301BE070001-064)

作者简介: 谢慧(1986—), 女, 硕士研究生, 工程师; **通信作者:** 杨春曦(1976—), 男, 教授, 博士生导师

©Nonferrous Metals (Extractive Metallurgy) Editorial Department 2026. This is an open access article under the CC-BY-NC-ND 4.0 License.

质。早期研究多采用简化模型或经验公式,但针对复杂的锡基多元合金体系,精度有限。近年来,分子相互作用体积模型(Molecular interaction volume model, MIVM)成为该领域的研究热点和重要理论工具。MIVM仅需二元体系的无限稀活度因子作为参数,即可预测多元非理想溶液体系组元的活度,进而计算其气相分压、挥发率和平衡组成,有效克服了传统模型需要大量试验数据或难以处理多元体系的缺点。大量研究证实了MIVM在锡基合金真空蒸馏中的适用性与准确性。例如,孔令鑫等[2-3]系统地将MIVM应用于锡-锌、锡-铋、锡-铟等二元及多元合金的真空蒸馏分离预测,计算结果与试验结果吻合良好。李一夫[4]、王安祥等[5-6]进一步将MIVM成功应用于锡-锑合金的深度脱锑过程,为确定最佳工艺参数提供了理论依据。任佳琦等[7]也基于MIVM等模型,对锡-铅-锑等多元体系的组元活度及气-液平衡进行了系统预测与评估。伍美珍等[8]对铟-锡合金的气-液平衡研究,延续了这一理论路径。这些研究从理论层面为不同成分锡合金的真空蒸馏分离极限、产物含量趋势提供了可靠的预测工具,具有明确的物理意义和较好的外推能力。然而,纯粹的机理模型通常基于理想化的平衡假设,对实际工业过程中复杂的非平衡态、传质动力学效应以及设备运行状态难以精确刻画,导致在线预测精度受限。

为克服机理模型在工业实时应用中的局限,研究者们转向不依赖于过程内部机理、直接从运行数据中学习输入输出关系的数据驱动方法。这类研究主要目标是建立软测量模型,利用易于在线测量的过程变量(如各段温度、系统压力、进料速率等)来实时预测难以在线检测的关键质量指标(如粗锡中的铅、锑含量)。以昆明理工大学团队为代表的研究工作在此方向取得了显著进展。李家文等[9]和申孟亚[10]的研究最具代表性,他们针对焊锡真空脱铅炉,采集工业现场数据,采用ANN等机器学习算法,构建了粗锡含铅量的软测量模型,并基于实验室虚拟仪器工程工作台(Laboratory virtual instrument engineering workbench, LabVIEW)实现了模型的在线部署与实时监测。这类模型能够很好地捕捉生产过程中复杂的非线性关系,具有自适应和学习能力,为实现含量的在线闭环监控奠定了基础。此外,蒲正浩等[11]采用响应曲面法对粗锡真空蒸馏工艺进行优化,本质上也是一种基于试验数据的数据驱动建模方法,通过建立工艺参数(温度、时间等)与分离效率/含量之间的显式数学关系,来寻找最优操作区间。数据驱动方法的优势在于其强大的拟合能力和对实时数据的适应性,非常适合处理实际工业过程的复杂性与不确定性。但其高度依赖训练数据的质量与数量,模型的可解释性差,且外推性能弱,当原料成分或操作条件大幅偏离训练数据范围时,预测可靠性会显著下降。

为了兼顾模型的物理可解释性与对实际工况的适应性,结合机理与数据驱动的混合建模思想在过程优化控制中早有体现,但在含量预测方面的直接融合尚处发展阶段。早期的研究主要体现在优化控制策略的层面上。例如,何宁[12]、冯丽辉等[13-14]在分析真空蒸馏过程机理(如蒸发动力学)的基础上,结合实时数据构建优化目标函数,实现了对多台真空炉的实时最优控制与调度。尽管这些方法不是直接建立预测模型,但其控制指令的生成依赖于对过程走向的预估,隐含了“机理框架下的数据驱动优化”思想。更直接的混合建模趋势在于,将机理模型作为先验知识或约束,与数据驱动模型进行融合。上述文献中尚未有完全成熟的此类混合预测模型的详细报道,但这无疑是值得深入研究的方向之一,其旨在构建兼具预测精度、泛化能力和物理一致性的下一代智能模型。

3　研究内容及主要创新点

基于将机理模型作为先验知识或约束,与数据驱动模型进行融合。本文提出了一种混合模型用于预测液相中锡、铅、锑的含量。该模型的创新性主要体现在两个方面:一是构建了融合机理知识与数据驱动的人工神经网络(Artificial neural network, ANN)增强机理模型,通过人工神经网络学习生产数据与机理参数间的隐含关系,形成具有物理可解释性的基础预测模型;二是引入支持向量机(Support vector machine, SVM)对模型的残差进行补偿学习,有效捕获系统中未被机理模型描述的非线性动态与非理想效应,从而显著提升锡、铅、锑含量待优化函数的理论依据与决策支持。

4　问题的提出

4.1　真空蒸馏炉工艺简介

粗锡精炼是锡冶金关键环节,核心为脱除砷、锑、铅、铋等杂质以获取高纯度锡产品。传统精炼依赖“加铝除砷锑”“结晶机除铅铋”等多道分散工序,存在辅料消耗大、流程长、能耗高及资源利用率低等

问题，制约行业绿色高效发展。真空炉蒸馏技术作为革新性方案，其工艺流程与核心优势对推动粗锡精炼升级意义重大。真空蒸馏工艺流程基于杂质与锡的蒸气压差异，在高温真空环境下，使粗锡中蒸气压较高的砷、锑、铅、铋等杂质优先挥发为气相，经冷凝区分级回收；蒸气压较低的锡留存为高品位粗锡，后续精制可得高纯度产品，实现集成化挥发—冷凝分离[15]。真空蒸馏优势显著，可弥补传统工艺不足：1)能集成化脱杂，同步完成多杂质脱除，替代传统多道工序，推动流程集约化；2)无需化学试剂，从源头避免铅渣产生，降低辅料与环保成本，提升锡直收率，兼具绿色经济性；3)流程紧凑可连续操作，热能利用率高，还能富集回收铅、铋等有价成分，提高资源利用率。真空蒸馏炉工艺流程图及实物图如图1所示。

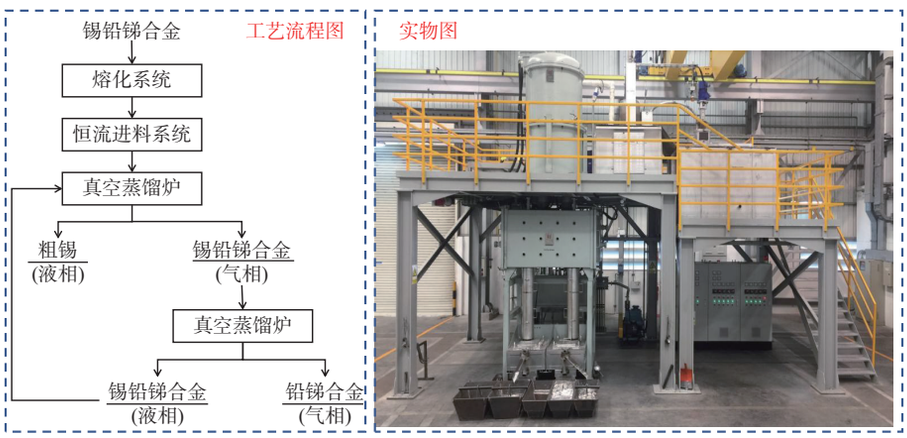


图1 真空蒸馏炉工艺流程图及实物图

Fig. 1 Process flow diagram and physical picture of vacuum distillation furnace

4.2 液相中锡、铅、锑含量计算的机理模型

假设合金为锡铅锑三元系合金，在气液相平衡条件下，液相中锡、铅、锑的含量可用如下数学公式[16]表达：

$$\omega_{Sn}=\frac{P_{Sn}/(\gamma_{Sn}\times p^{*}_{Sn})}{P_{Sn}/(\gamma_{Sn}\times p^{*}_{Sn})+P_{Pb}/(\gamma_{Pb}\times p^{*}_{Pb})+P_{Sb}/(\gamma_{Sb}\times p^{*}_{Sb})} \tag{1}$$

$$\omega_{Pb}=\frac{P_{Pb}/(\gamma_{Pb}\times p^{*}_{Pb})}{P_{Sn}/(\gamma_{Sn}\times p^{*}_{Sn})+P_{Pb}/(\gamma_{Pb}\times p^{*}_{Pb})+P_{Sb}/(\gamma_{Sb}\times p^{*}_{Sb})} \tag{2}$$

$$\omega_{Sb}=\frac{P_{Sb}/(\gamma_{Sb}\times p^{*}_{Sb})}{P_{Sn}/(\gamma_{Sn}\times p^{*}_{Sn})+P_{Pb}/(\gamma_{Pb}\times p^{*}_{Pb})+P_{Sb}/(\gamma_{Sb}\times p^{*}_{Sb})} \tag{3}$$

式中，ω_{Sn}、ω_{Pb}、ω_{Sb}分别表示液相中锡、铅、锑的质量分数(%)；P_{Sn}、P_{Pb}、P_{Sb}分别表示气相中锡、铅、锑的质量分数(%)；γ_{Sn}、γ_{Pb}、γ_{Sb}分别表示组元锡、铅、锑的活度因子，其计算公式见参考文献[16]，p^{*}_{Sn}、p^{*}_{Pb}、p^{*}_{Sb}分别表示组元锡、铅、锑的纯金属的蒸气压(Pa)，其计算公式[1]为：

$$\lg p^{*}_{Sn}=A_{Sn}T^{-1}+B_{Sn}\lg T+C_{Sn}T+D_{Sn} \tag{4}$$

$$\lg p^{*}_{Pb}=A_{Pb}T^{-1}+B_{Pb}\lg T+C_{Pb}T+D_{Pb} \tag{5}$$

$$\lg p^{*}_{Sb}=A_{Sb}T^{-1}+B_{Sb}\lg T+C_{Sb}T+D_{Sb} \tag{6}$$

式中，A_{Sn}、B_{Sn}、C_{Sn}、D_{Sn}分别表示锡的蒸发常数；A_{Pb}、B_{Pb}、C_{Pb}、D_{Pb}分别表示铅的蒸发常数；A_{Sb}、B_{Sb}、C_{Sb}、D_{Sb}分别表示锑的蒸发常数；T表示温度(K)。

上述机理模型虽能描述锡铅锑真空蒸馏的基本物理过程，但在工业应用中存在明显局限：1)模型依赖理想化假设和难以精确获取的热力学参数，导致建模复杂，甚至失败；2)其静态框架难以适应实际生产的动态波动与复杂工况，致使预测适用性受限。

因此，为解决上述问题，本文提出了一种融合ANN增强机理和SVM残差补偿(AMM-SVM)的混合建模新方法，致力于突破纯机理模型的固有限制，构建兼具高精度与强泛化能力的预测模型，从而为生产过程的动态优化与实时调控提供决策依据。

5 AMM-SVM混合模型

5.1 所提模型框架

本文构建的AMM-SVM混合模型框架如图2所示，其核心在于采用ANN数据模型增强机理模型，并辅以残差补偿策略。

首先，采用ANN参数化机理模型中的质量分数、活度因子和蒸气压参数，并用Adam优化器优化该网络的权值和偏置参数。其次，引入了基于SVM的数据驱动残差补偿策略，建模增强机理模型的残差，进一步提升模型的预测性能，并且利用粒子群优化算法(Particle swarm optimization，PSO)对SVM模型的超参数进行寻优。所提框架涉及的各项技术细节，在后续子节详细展示。

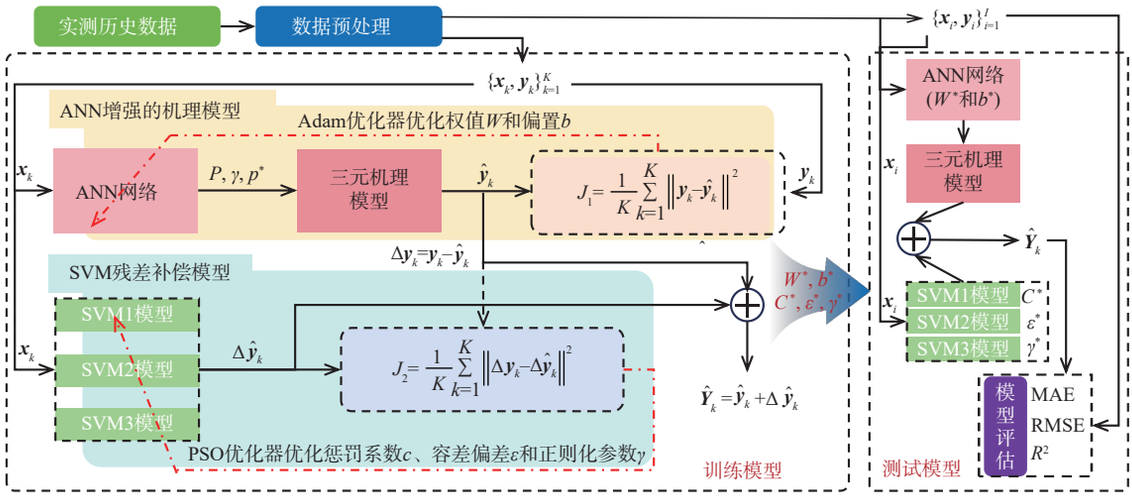


图 2　AMM-SVM 混合模型架构

Fig. 2　Architecture of the AMM-SVM hybrid model

5.2　ANN 增强的机理模型

考虑到简单的 ANN 依然具有较强的模型表达能力，如多层感知器(Multi-layer perceptron，MLP)，本文采用 MLP 增强前述机理模型。MLP 架构由三层组成，分别是输入层、隐藏层和输出层，其数学描述[17]如下：

$$\hat{y}_k=\boldsymbol{W}_{\mathrm{O}}\sigma(\boldsymbol{W}_{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}_k+\boldsymbol{b}_{\mathrm{H}})+\boldsymbol{b}_{\mathrm{O}} \tag{7}$$

式中，$\hat{y}_k$ 表示第 k 个样本标签的预测值，$\boldsymbol{x}_k$ 表示第 k 个样本的特征向量，$\boldsymbol{W}_{\mathrm{H}}$ 和 $\boldsymbol{W}_{\mathrm{O}}$ 分别表示隐藏层和输出层权重矩阵，$\boldsymbol{b}_{\mathrm{H}}$ 和 $\boldsymbol{b}_{\mathrm{O}}$ 分别表示隐藏层和输出层偏置向量，$\sigma(\cdot)$ 表示激活函数。本文使用学习效率较高的带泄漏的整流线性单元(Leaky rectified linear unit，LeakyReLU)激活函数，即：

$$\sigma(z)=\begin{cases}z, z\geqslant 0\\ \alpha_1 z, z<0\end{cases} \tag{8}$$

其中，α_1 为可学习的标量参数，一般取 0.01。

根据真空蒸馏炉工艺，本文选择原料含量、加热功率、进料系数等作为 MLP 模型的输入特征向量，而将机理模型中的质量分数(ω_{Sn}、ω_{Pb}、ω_{Sb})、活度因子(γ_{Sn}、γ_{Pb}、γ_{Sb})和蒸气压(p^*_{Sn}、p^*_{Pb}、p^*_{Sb})共 9 个参数作为其预测目标，如图 3 所示。

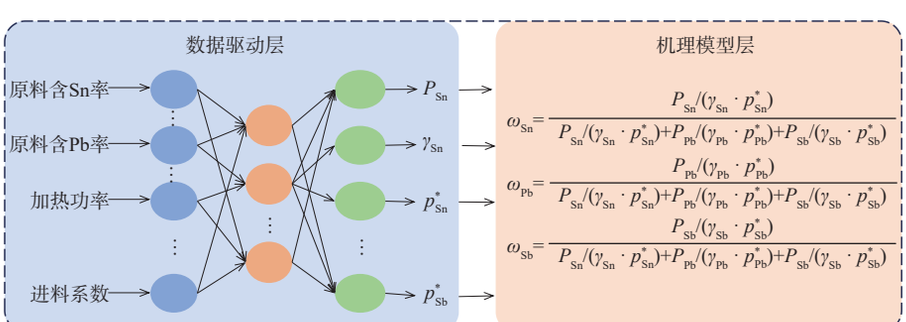


图 3　ANN 增强机理模型框图

Fig. 3　Block diagram of ANN enhancement mechanism model

在 MLP 模型中，权重矩阵 $\boldsymbol{W}_{\mathrm{H}}$、$\boldsymbol{W}_{\mathrm{O}}$ 和偏置向量，$\boldsymbol{b}_{\mathrm{H}}$、$\boldsymbol{b}_{\mathrm{O}}$ 是待优化的模型参数。

5.3　SVM 残差补偿模型

本文采用 3 个支持向量回归(Support vector regression，SVR)对增强机理模型输出的 3 个变量的预测残差进行补偿。SVR 是一种基于数据驱动的非线性回归技术，具有强大的泛化能力[18]。它引入核函数将非线性数据映射至高维特征空间，从而实现复杂的非线性回归。同时，它采用不敏感损失函数界定允许的预测误差范围，并借助结构风险最小化技术提升模型的泛化能力。SVR 的数学模型[19]如下：

$$\Delta\hat{y}_k=f(x_k)=\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\phi}(x_k)+\boldsymbol{b} \tag{9}$$

其中，$\Delta\hat{y}_k$ 表示机理模型的某元素含量的预测残差，$\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}$ 表示回归系数向量，$\boldsymbol{\phi}(\cdot)$ 非线性映射函数，而 $\boldsymbol{b}$ 代表偏置向量。为了确保模型的准确性，SVR 会尽可能多地在数据 x_k 样本中保留容差偏差 ε 以及松弛变

量(ξ_k, ξ_k^*)。因此,支持向量机回归的优化问题可表述如下:

$$\min J=\min\frac{1}{2}\|\boldsymbol{W}\|^2+C\sum_{i=1}^{K}\left(\xi_k+\xi_k^*\right) \tag{10}$$

$$\text{s.t.}\begin{cases}f\left(x_k\right)-\Delta\hat{y}_k\leqslant\varepsilon+\xi_k\\ \Delta\hat{y}_k-f\left(x_k\right)\leqslant\varepsilon+\xi_k^*\\ \xi_k\geqslant0,\xi_k^*\geqslant0,i=1,2,...,n\end{cases} \tag{11}$$

其中,C是惩罚系数,其作用是在处理训练数据时,既保证模型能够较好地拟合数据,又防止模型出现过拟合现象,K是训练集样本容量。构造拉格朗日函数如下:

$$L=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{K}\sum_{j=1}^{K}(a_i-a_j^*)(a_j-a_j^*)\Phi(x_i,x_j)-\sum_{i=1}^{n}(a_i-a_i^*)(y_i-\varepsilon) \tag{12}$$

$$\text{s.t.}\begin{cases}\sum_{i=1}^{K}(a_i-a_i^*)=0\\ 0\leqslant a_i\leqslant C,0\leqslant a_i^*\leqslant C\end{cases} \tag{13}$$

其中,α_i、α_i^*、a_j和α_j^*和代表拉格朗日乘数,而$\Phi(x_i,x_j)$代表核函数。考虑到径向基函数(Radial basis function,RBF)具备处理非线性数据的能力,并且具有较高的鲁棒性,故本文选择RBF作为核函数,即:

$$\Phi\left(x_i,x_j\right)=\exp\left(-\frac{\|x_i-x_j\|^2}{2\gamma^2}\right) \tag{14}$$

其中,γ是RBF的正则化参数,它会影响模型的运行速度及其泛化能力。因此,SVR的输出可表示为:

$$\Delta\hat{y}_k=\sum_{i=1}^{K}\left(a_i-a_i^*\right)\Phi\left(x_i,x_k\right)+C \tag{15}$$

在SVR中,需要确定的模型超参数包括惩罚系数C、容差偏差ε和正则化参数γ。由于采用了3个SVR模型,故需要优化3组参数:C_1、ε_1、γ_1、C_2、ε_2、γ_2和C_3、ε_3、γ_3,且$\Delta\hat{y}_k=\left[\Delta\hat{y}_k^{\mathrm{Sn}}\quad\Delta\hat{y}_k^{\mathrm{Pb}}\quad\Delta\hat{y}_k^{\mathrm{Sb}}\right]$,其中$\Delta\hat{y}_k^{\mathrm{Sn}}$,$\Delta\hat{y}_k^{\mathrm{Pb}}$和$\Delta\hat{y}_k^{\mathrm{Sb}}$分别表示锡、铅、锑的标签误差预测值。

5.4 模型优化

MPL和SVR模型均存在待确定的模型参数,由于MLP模型能够提供代价函数的梯度信息,故采用Adam优化器优化。相反,SVR只能提供函数值信息,因此使用PSO优化其模型超参数。

5.4.1 Adam优化MPL

在MLP优化中,构建如下均方误差目标函数:

$$J_1\left(\boldsymbol{W}_{\mathrm{H}},\boldsymbol{W}_{\mathrm{O}},\boldsymbol{b}_{\mathrm{H}},\boldsymbol{b}_{\mathrm{O}}\right)=\frac{1}{K}\sum_{k=1}^{K}\|y_k-\hat{y}_k\|^2 \tag{16}$$

其中,y_k为实际值,$\hat{y}_k$为ANN模型的预测值,K为样本数。该损失函数用于计算Adam优化器的梯度。Adam算法结合了自适应梯度算法(Adaptive gradient algorithm,AdaGrad)与均方根传播算法(Root mean square propagation,RMSProp)的优点,属于自适应梯度估计技术。它是一种高效的随机优化方法,仅需一阶梯度信息,且对内存的需求也很低[20]。Adam算法的具体实现方式表述如下:

$$\boldsymbol{m}_{k+1}^{\theta}=\beta_1\boldsymbol{m}_k^{\theta}+\left(1-\beta_1\right)\nabla_{\theta}\boldsymbol{J}_1\left(\boldsymbol{\theta}_k\right) \tag{17}$$

$$\boldsymbol{s}_{k+1}^{\theta}=\beta_2\boldsymbol{s}_k^{\theta}+\left(1-\beta_2\right)\cdot\nabla_{\theta}\boldsymbol{J}_1\left(\boldsymbol{\theta}_k\right)\odot\nabla_{\theta}\boldsymbol{J}_1\left(\boldsymbol{\theta}_k\right) \tag{18}$$

$$\hat{\boldsymbol{m}}_{k+1}^{\theta}=\boldsymbol{m}_{k+1}^{\theta}/\left(1-\beta_1^k\right) \tag{19}$$

$$\hat{\boldsymbol{s}}_{k+1}^{\theta}=\boldsymbol{s}_{k+1}^{\theta}/\left(1-\beta_2^k\right) \tag{20}$$

$$\boldsymbol{\theta}_{k+1}=\boldsymbol{\theta}_k-\alpha\hat{\boldsymbol{m}}_{k+1}^{\theta}/\left(\sqrt{\hat{\boldsymbol{s}}_{k+1}^{\theta}}+\epsilon\right) \tag{21}$$

其中,$\boldsymbol{\theta}$代表需要被更新的模型参数,可以是$\boldsymbol{W}_{\mathrm{H}}$、$\boldsymbol{W}_{\mathrm{O}}$、$\boldsymbol{b}_{\mathrm{H}}$或$\boldsymbol{b}_{\mathrm{O}}$,$\boldsymbol{m}^{\theta}$和$\boldsymbol{s}^{\theta}$分别是$\boldsymbol{\theta}$的一阶矩估计和二阶矩估计。$\nabla_{\theta}\boldsymbol{J}_1(\cdot)$是待优化函数$J_1(\cdot)$关于$\boldsymbol{\theta}$的梯度。$\beta_1$和$\beta_2$是指数衰减率,其默认值分别为0.9和0.999。$\alpha$是学习率,默认值为0.001。$\epsilon$是一个用于保证数值稳定性的小常数,其默认值是$10^{-8}$。此外,$\odot$是两个大小相同的矩阵的哈达玛积(Hadamard product)。达到预设迭代次数,输出$\boldsymbol{W}_{\mathrm{H}}^*$、$\boldsymbol{W}_{\mathrm{O}}^*$、$\boldsymbol{b}_{\mathrm{H}}^*$和$\boldsymbol{b}_{\mathrm{O}}^*$。

5.4.2 PSO优化SVM将ANN拟合的参数用到机理模型中

PSO的目标函数构建为:

$$J_2\left(C,\varepsilon,\gamma\right)=\frac{1}{K}\sum_{k=1}^{K}\|\Delta\boldsymbol{y}_k-\Delta\hat{\boldsymbol{y}}_k\|^2 \tag{22}$$

其中,C=[C_1, C_2, C_3],ε=[ε_1, ε_2, ε_3],γ=[γ_1、γ_2、γ_3]。

在第k次迭代中,对于第i个粒子,其位置、速度、局部最优位置以及整个种群的全球最优位置分别用$p_i(k)$、$v_i(k)$、$p_{\mathrm{L}}^{\mathrm{best}}(k)$和$p_{\mathrm{G}}^{\mathrm{best}}(k)$来表示。在每次运行中,$p_i(k)$和$v_i(k)$都会被更新,以便逐步逼近最佳位置。具体的更新规则[21]如下:

$$v_i\left(k+1\right)=wv_i\left(k\right)+c_1r\left[p_{\mathrm{L}}^{\mathrm{best}}\left(k\right)-p_i\left(k\right)\right]+c_2r_2\left[p_{\mathrm{G}}^{\mathrm{best}}\left(k\right)-p_i\left(k\right)\right] \tag{23}$$

$$p_i\left(k+1\right)=p_i\left(k\right)+v_i\left(k+1\right) \tag{24}$$

其中,$w\in[0.5,1]$,表示惯性权重,用于调节当前速度对其新速度的影响程度。c_1和c_2为加速系数,其范围一般在[0, 4]之间。r_1和r_1则是在[0, 1]上均匀分布的随机数,用于进行搜索操作。达到预设迭代次数,输出C^*、ε^*、γ^*。

6　试验结果与讨论

6.1　试验设备与环境介绍

试验所用硬件配置为Intel(R)Core(TM)i7-14650HX(2.20 GHz)，软件环境为64位Windows操作系统，模型使用Python 3.14编写，基于PyTorch 2.4.1框架及CUDA 11.8加速，开发工具为Spyder 6.1.0。

6.2　试验数据与参数配置

本研究数据来源于云南某企业生产的DBLL11-10型多功能锡铅锑合金真空分离电阻炉，涵盖2012年至今在二十余家锡冶炼厂的长期稳定运行数据。数据特征主要包括锡铅锑合金的原料成分、开炉功率及进料系数等关键参数。在数据预处理阶段，首先采用最小–最大归一化(Min-Max scaling，Min-Max)方法对所有输入特征进行归一化处理，使其值映射至[0，1]区间，以消除不同特征间因量纲差异所引起的数据偏差，从而提升模型的收敛效率与稳定性。随后，为保障训练集与测试集中数据分布的均衡性，采用分层随机划分策略，将归一化后的数据按7∶3的比例划分为训练集与测试集。此外，本研究中所使用的Adam与PSO优化器的具体参数配置详见表1。

表1　Adam和PSO优化器的参数配置

Table 1　Parameter configurations of Adam and PSO optimizers

参数	取值	参数	取值
学习率α	0.01	总训练轮数	100轮
学习率调度器	ϵ=20	初始参数C	[0.2，0.2，0.2]
参数ε	0.5	初始参数γ	[0.6，0.6，0.6]
PSO粒子数	80	PSO迭代轮数	20
PSO惯性权重(w)	0.8	PSO认知系数(c_1)	2
PSO社会系数(c_2)	2	搜索空间C	[1，4]
搜索空间ε	[0.01，0.1]	搜索空间γ	[1，4]

6.3　模型性能评价指标

本文使用3个常用指标从不同角度评估模型的性能，即平均绝对误差(Mean absolute error，MAE)、均方根误差(Root mean square error，RMSE)和决定系数(Coefficient of determination，R^2)，公式[22]分别为：

$$MAE=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\|y_i-\hat{Y}_i\|_1 \tag{25}$$

$$RMSE=\sqrt{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\|y_i-\hat{Y}_i\|^2} \tag{26}$$

$$R^2=1-\frac{\sum_{i=1}^{N}\|y_i-\hat{Y}_i\|^2}{\sum_{i=1}^{N}\|y_i-\bar{y}_i\|^2} \tag{27}$$

式中，N为样本总数，$\hat{y}_i$为预测值，y_i为真实值，$\bar{y}_i$为真实值的平均值。

MAE用于衡量预测值与真实值之间的平均绝对误差，反映了模型的平均预测精度。RMSE用于衡量预测值与真实值之间的标准差，其值越小，则预测效果越好。R^2用于评估模型对数据的解释能力，取值为0~1，R^2越接近1，说明模型的解释能力越强。

6.4　试验结果

为验证本文所提算法在锡铅锑真空分离过程组分含量预测任务中的有效性与可靠性，首先依据预设的优化器参数配置，完成了算法的全流程训练与独立测试。

图4呈现了锡铅锑真空分离过程中液相组分锡、铅、锑含量的真实值，以及算法在训练集与测试集上的预测结果。从数据趋势匹配度来看，无论是在模型训练阶段还是测试阶段，本文算法输出的预测值均能精准且紧密地跟随实际测量值的动态变化轨迹，无明显滞后或偏离现象，这一结果充分表明所提算法具备优异的拟合精度与良好的泛化能力，能够有效捕捉真空分离过程中液相各组分含量随工艺条件变化的内在规律。

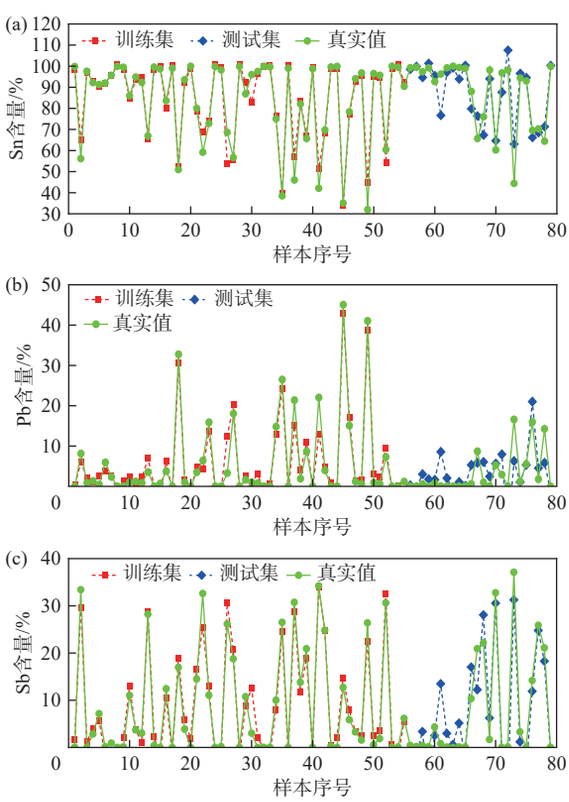


图4　本文所提出的方法在训练集和测试集上的预测值与实际值

Fig. 4　Predicted values and actual values of the proposed method on the training set and the test set in this pater

为进一步量化模型的预测稳定性，图5给出了模型预测误差的概率密度分布曲线与频率直方图。由图5可知，预测误差样本基本对称且均匀地分布于零误差线两侧，呈现出理想的正态分布特征；同时，随着误差绝对值的增大，其分布概率快速衰减，表明绝大多数预测误差集中在较小范围内，算法不存在系统性偏差，预测性能稳定可靠，能够满足锡铅锑真空分离过程液相组分含量精准预测的实际工程需求。

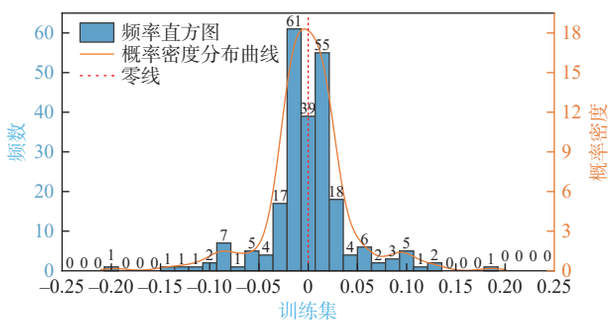


图5 本文所提出方法的预测误差概率分布及频率直方图

Fig. 5 Probability distribution and frequency histogram of prediction errors for the proposed method in this pater

这些初步结果说明，通过融合ANN增强的机理模型与SVM残差补偿策略，能够为液相中锡、铅、锑含量提供较为可靠的软测量估计。

然后，为了更充分验证所提算法的优越性，本文设计了多组对比试验，选取的对比算法及特性如下。

1)三元机理模型(3EMM)：对应4.2小节中锡铅锑三元系合金在气液相平衡假设下，预测液相中锡、铅、锑含量的机理模型，其核心依赖热力学平衡与实验室测得的模型参数。

2)支持向量机(SVM)：典型有监督学习算法，通过寻找最优超平面最小化数据点到平面的距离，实现回归预测，特点是对小样本数据适应性较好。

3)随机森林(RF)：集成学习算法，通过构建多棵独立决策树并以投票方式输出结果，优势在于降低过拟合风险、提升预测稳定性。

4)人工神经网络(ANN)：由输入层、隐藏层、输出层构成的模型，通过线性变换与非线性激活函数拟合复杂非线性关系，具备较强的特征学习能力。

5)ANN增强的机理模型(AMM)：将ANN拟合的参数用到机理模型中，利用ANN弥补机理模型的假设偏差与参数误差，实现“机理+数据”的初步融合。

6)ANN增强的机理模型+RF残差补偿模型(AMM-RF)：在AMM的基础上，引入RF对模型预测残差进行补偿，进一步修正预测误差。

7)ANN增强的机理模型+ANN残差补偿模型(AMM-ANN)：在AMM的基础上，引入ANN对模型预测残差进行补偿，进一步修正预测误差。

8)ANN增强的机理模型+SVM残差补偿模型(AMM-SVM)：在AMM的基础上，引入ANN对模型预测残差进行补偿，进一步修正预测误差。

以上不同算法的评价指标值见表2，分析可以发现：

表2 不同算法的评价指标值

Table 2 Evaluation index values of different algorithms

模型	MAE	RMSE	R^2
3EMM	—	—	—
SVM	0.093 9	0.105 6	0.931 7
RF	0.060 6	0.102 6	0.935 5
ANN	0.072 3	0.094 6	0.945 2
AMM	0.061 6	0.079 3	0.961 5
AMM-RF	0.059 9	0.099 4	0.939 4
AMM-NN	0.043 6	0.066 7	0.972 8
AMM-SVM	0.042 7	0.059 1	0.978 6

1)纯机理模型的局限性。表2中3EMM的各项指标均无法提供合理的软测量值，究其原因在于其过于理想化，现实生产工艺无法满足假设条件，且其模型参数由实验室测得，无法匹配实际工艺。

2)纯数据驱动模型的性能表现。SVM、RF、ANN等纯数据驱动模型均能输出合理的预测结果，相比3EMM有了质的提升，证明数据驱动方法能够捕捉实际生产中的复杂规律，其中性能最优的纯数据驱动模型为ANN，其性能指标为MAE=0.0723、RMSE=0.0946、R^2=0.9452，由此选择ANN与机理模型进行混合建模。

3)混合模型的性能增益。以AMM为基础的混合模型(AMM、AMM-RF、AMM-ANN、AMM-SVM)，性能均优于纯机理模型与多数纯数据驱动模型，例如AMM已超过SVM、RF、ANN的表现。而本文所构建的AMM-SVM模型性能最优：其MAE=0.0427、RMSE=0.0591、R^2=0.9786，这得益于“机理模型提供先验+ANN拟合偏差+SVM补偿残差”的多模块融合框架，既利用了机理模型的物理逻辑，又通过数据驱动方法修正了实际偏差，最终实现了预测精度与稳定性的双重提升。

以上不同算法的预测误差箱线图见图6，结合箱线图的分布特征可展开更细致的分析。本文所提的AMM-SVM模型的误差分布表现最优：其一，其“箱体”宽度显著窄于SVM、RF、ANN等模型，说明误差的核心分布区间更集中(25%~75%分位数的误差波动小)；其二，该模型的异常值点数明显少于RF、

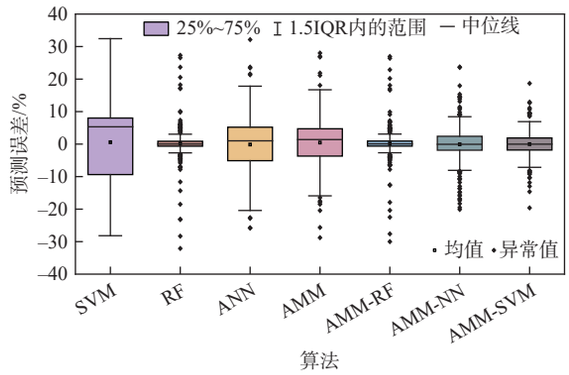


图6　不同算法的误差箱型图

Fig. 6　Error box plots of different algorithms

ANN、AMM等模型，仅存在少量偏离核心区间的点，极端误差的发生概率更低；其三，从箱体与中位数的位置可见，其误差分布呈现轻微的偏态(中位数略偏离均值)，但整体仍围绕0值附近集中分布，无明显的系统性偏差。

综上所述，与其他算法相比，本文所构建的AMM-SVM模型具有一定优越性，表现出较好的预测性能，能够实现锡铅锑真空分离过程对液相中锡、铅、锑含量的准确预测。

7　结论

1)针对锡铅锑真空分离工艺过程中液相含量检测的现存痛点—当前“在线采样+离线检测”的方式存在明显局限：检测存在数小时至数天的滞后性，无法在线反映工艺运行状态；离线检测的人力、时间成本较高，难以支撑工艺参数的动态调控，本文提出一种AMM-SVM混合模型，可用于在线预测液相中锡、铅、锑的含量。

2)该模型以锡铅锑三元系气液相平衡机理模型为基础框架：首先利用ANN拟合机理模型与实际工况的偏差，再引入SVM对融合后的预测残差进行二次修正，形成“机理先验+数据拟合+残差补偿”的多层精度提升结构。基于工业现场实测数据的验证结果显示：所提模型的预测性能优于纯机理模型、纯数据驱动模型及其他混合模型，其MAE=0.0427、RMSE=0.0591、R^2=0.9786的指标在对比算法中处于最优水平，同时误差分布更集中、异常值占比更低，充分体现了预测结果的精确性与可靠性。

3)这一模型的实用价值在于：一方面，可替代传统“采样-离线检测”模式，实现液相中锡、铅、锑含量的连续实时软测量；另一方面，其输出的高置信度含量数据，能够为真空分离工艺的功率、进料系统等关键参数的在线调整提供数据支撑，有助于提升工艺参数调整的自动化水平与产品成分的稳定性。

综上所述，本文提出的AMM-SVM混合模型，通过“机理先验+数据拟合+残差补偿”的多层结构，解决了锡铅锑真空分离过程液相含量检测的滞后性及高成本问题，实现了锡、铅、锑含量的精准在线预测，为工艺参数动态调控提供了高置信度的数据支撑。

参考文献

[1] 戴永年，杨斌. 有色金属材料的真空冶金[M]. 北京：冶金工业出版社，2000: 88-103.
Dai Yongnian, Yang Bin. Vacuum metallurgy of non-ferrous materials[M]. Beijing: Metallurgical Industry Press, 2000: 88-103.

[2] 孔令鑫，杨斌，李一夫，等. MIVM在真空蒸馏分离锡锌合金中的应用及实验研究[J]. 真空科学与技术学报，2013, 33(5): 483-489.
Kong Lingxin, Yang Bin, Li Yifu, et al. Modeling and experimental study of tin-zinc alloy separation by vacuum distillation[J]. Chinese Journal of Vacuum Science and Technology, 2013, 33(5): 483-489.

[3] 孔令鑫. 分子相互作用体积模型在锡基合金真空蒸馏中的应用研究[D]. 昆明：昆明理工大学，2013: 21-22.
Kong Lingxin. Study on the application of molecular interaction volume model in vacuum distillation of tin-based alloys[D]. Kunming: Kunming University of Science and Technology, 2013: 21-22.

[4] 李一夫. 复杂锡合金真空蒸馏分离提纯的研究[D]. 昆明：昆明理工大学，2015: 27-38.
Li Yifu. Study on separation and purification of complex tin alloys by vacuum distillation [D]. Kunming: Kunming University of Science and Technology, 2015: 27-38.

[5] 王安祥. 锡锑合金真空蒸馏分离的研究[D]. 昆明：昆明理工大学，2015: 24-26.
Wang Anxiang. Study on vacuum distillation separation of tin-antimony alloy[D]. Kunming: Kunming University of Science and Technology, 2015: 24-26.

[6] 王安祥，杨斌，李一夫，等. 分子相互作用体积模型在锡锑合金真空蒸馏深度脱锑中的应用[J]. 真空科学与技术学报，2015, 35(4): 502-507.
Wang Anxiang, Yang Bin, Li Yifu, et al. Simulation of removal of Sb from Sn-Sb alloy in vacuum with molecular interaction volume model[J]. Chinese Journal of Vacuum Science and Technology, 2015, 35(4): 502-507.

[7] 任佳琦，徐俊杰，孔令鑫，等. 锡基合金体系组元活度及气−液平衡的模型预测[J]. 中国有色金属学报，2020, 30(10): 2399-2409.
Ren Jiaqi, Xu Junjie, Kong Lingxin, et al. Model prediction of activity and vapor-liquid equilibrium of tin-based alloy system[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2020, 30(10): 2399-2409.

[8] 伍美珍，陈亮亮，贾元伟，等. 铟-锡合金真空蒸馏气-液平衡研究[J]. 有色金属工程，2023, 13(9): 42-47.
Wu Meizhen, Chen Liangliang, Jia Yuanwei, et al. Study on

vapor-liquid equilibrium of In-Sn binary alloy in vacuum distillation[J]. Nonferrous Metals Engineering, 2023, 13(9): 42-47.

[9] 李家文，赖华，冯丽辉. 基于神经网络与LabVIEW平台建立焊锡真空炉粗锡含铅量的软测量模型与在线监测研究[J]. 冶金分析, 2017, 37(2): 1-6.
Li Jiawen, Lai Hua, Feng Lihui. Research on soft measurement model and on-line monitoring of lead content in crude tin in solder vacuum furnace based on neural network and LabVIEW[J]. Metallurgical Analysis, 2017, 37(2): 1-6.

[10] 申孟亚. 基于LabVIEW的焊锡真空炉粗锡质量的软测量与模糊控制研究[D]. 昆明: 昆明理工大学, 2015: 37-43.
Shen Mengya. Research on soft sensing and fuzzy control of crude tin quality in solder vacuum furnace based on LabVIEW[D]. Kunming: Kunming University of Science and Technology, 2015: 37-43.

[11] 蒲正浩，韩继标，李一夫，等. 响应曲面优化粗锡真空蒸馏[J]. 过程工程学报, 2018, 18(3): 496-502.
Pu Zhenghao, Han Jibiao, Li Yifu, et al. Optimization of crude tin vacuum distillation by response surface methodology[J]. The Chinese Journal of Process Engineering, 2018, 18(3): 496-502.

[12] 何宁. 焊锡真空脱铅炉计算机优化控制策略研究[D]. 昆明: 昆明理工大学, 2001: 39-55.
He Ning. Research on computer-optimized control strategy for solder vacuum lead-removal furnaces[D]. Kunming: Kunming University of Science and Technology, 2001: 39-55.

[13] 冯丽辉. 多台焊锡真空蒸馏脱铅炉的优化控制与管理[J]. 工业仪表与自动化装置, 2002(6): 45-47.
Feng Lihui. The optimization control and management of multiple soldering vaccum furnaces based on DCS[J]. Industrial Instrumentation & Automation, 2002(6): 45-47.

[14] 冯丽辉，樊雪萍. 内热式多级连续真空炉实时最优控制[J]. 有色金属, 1999, 51(3): 67-69.
Feng Lihui, Fan Xueping. On-line optimizing control of inner-heating, multi-stage continuous vacuum furnace[J]. Nonferrous Metals, 1999, 51(3): 67-69.

[15] 速斌，邵丹，马祥亚. 一种锡铅锑砷合金真空蒸馏分离锡的方法: 201510060060.7[P]. 2015-05-27.
Su Bin, Shao Dan, Ma Xiangya, et al. A method for separating tin from tin-lead-antimony-arsenic alloy by vacuum distillation: CN 201510060060.7[P]. 2015-05-27.

[16] 孔令鑫. Pb-Sn-Sb三元合金气液相平衡研究[D]. 昆明: 昆明理工大学, 2016: 68-69.
Kong Lingxin. Study on gas-liquid equilibrium of Pb-Sn-Sb ternary alloy[D]. Kunming: Kunming University of Science and Technology, 2016: 68-69.

[17] 余东原，罗跃，梁大业，等. 基于机器学习方法预测地浸过程中铀浸出金属量的变化[J]. 有色金属(冶炼部分), 2024(2): 92-98.
Yu Dongyuan, Luo Yue, Liang Daye, et al. Predicting the variation of uranium leaching metal content in ground-leaching process based on machine learning methods[J]. Nonferrous Metals (Extractive Metallurgy), 2024(2): 92-98.

[18] 马朝君，彭巨擘，袁海滨，等. 基于灰狼优化支持向量机回归与SHAP值的锡冶炼能耗预测[J]. 有色金属(冶炼部分), 2024(2): 1-7.
Ma Chaojun, Peng Jobo, Yuan Haibin, et al. Energy consumption prediction of tin smelting based on grey wolf optimized support vector machine regression and SHAP values[J]. Nonferrous Metals (Extractive Metallurgy), 2024(2): 1-7.

[19] He Juanxia, Huang Liwen, Xiao Yao, et al. Prediction model of continuous discharge coefficient from tank based on KPCA-DE-SVR[J]. Journal of Loss Prevention in the Process Industries, 2024, 89: 105316. DOI: 10.1016/j.jlp.2024.105316.

[20] Kinga D, Ba J. Adam: a method for stochastic optimization[C]// Proceedings of the 3rd International Conference on Learning Representations (ICLR 2015). California, 2015. DOI: 10.48550/arXiv.1412.6980.

[21] Cunha L, Zhang Li, Sowan B, et al. Video deepfake detection using Particle Swarm Optimization improved deep neural networks[J].Neural Computing and Applications, 2024, 36(15): 8417-8453.

[22] Wu Long, Yang Chunxi, Zhang Xiufeng, et al. Prediction of cobalt ions concentration in zinc smelting purification section Ⅱ based on classification modeling[C]//2025 IEEE 14th Data Driven Control and Learning Systems, Wuxi, China. IEEE, 2025: 1054-1059.

Prediction of the Content of Tin-Lead-Antimony in Vacuum Separation Based on the Fusion of ANN Enhancement Mechanism and SVM Residual Compensation

Xie Hui[1,2], Li Gengen[1], Dai Weiping[2], Yu Yong[2], Li Jianchun[1], Zhang Faxiang[1], Yang Chunxi[1]

(1. Faculty of Mechanical and Electrical Engineering, Yunnan Key Laboratory of Intelligent Control and Application, Kunming University of Science and Technology, Kunming 650500, China;
2. Kunming Diboo Technology Co., Ltd., Kunming 650033, China)

Abstract: The vacuum distillation technology, with its advantages of short process, no pollution, low energy consumption and high resource utilization rate, provides an innovative solution for the green and efficient upgrading

of crude tin refining. The process of vacuum distillation is based on the vapor pressure differences between other elements and tin. By heating, arsenic, antimony, lead, bismuth, etc. are preferentially volatilized and separated through condensation, thereby efficiently purifying tin metal. In the vacuum distillation process of tin-lead-antimony alloys, the real-time content of tin, lead and antimony in the volatile substances directly reflects the effect of distillation separation, and is a key indicator for evaluating the quality of vacuum metallurgy. However, in current industrial production, the content of volatile substances can only be obtained by sampling the final product and conducting offline testing. This significant delay in data feedback prevents vacuum furnaces from promptly adjusting process parameters, thereby affecting the stability of the production process and overall economic benefits. Therefore, this paper proposes a hybrid modeling method (AMM-SVM) that integrates Artificial Neural Network (ANN) enhanced mechanism and Support Vector Machine (SVM) residual compensation for soft measurement of tin, lead, and antimony contents in volatile substances. Firstly, in response to the issue that the ternary system mechanism model of tin-lead-antimony can describe the equilibrium trend, but is difficult to accurately depict the nonlinear dynamic behavior under complex working conditions, the key parameters of the mechanism model are optimized through data-driven methods using ANN. Secondly, a residual compensation model based on SVM is constructed to further model and correct the prediction residuals of the previous model, thereby effectively enhancing the overall prediction accuracy of the hybrid model. Based on this, in order to fully utilize the advantages of different optimization algorithms, the adaptive learning rate optimization algorithm (Adam) and the particle swarm optimization algorithm (PSO) were adopted to optimize the hyperparameters of the ANN and SVM models respectively. In the Adam optimizer, the learning rate α was set to 0.01, the learning rate scheduler ϵ was set to 20, the parameter ε was set to 0.5, and the total number of training rounds was 100; In the PSO optimizer, the number of particles was set to 80, the number of iteration rounds was set to 20, the inertia weight w was set to 0.8, the cognitive coefficient c_1 was set to 2, and the social coefficient c_2 was set to 2. The key parameters C, ε, and γ of SVM were globally optimized within the search space [1, 4], [0.01, 0.1], and [1, 4] respectively. This hybrid optimization strategy takes into account the efficient gradient update ability of Adam and the global exploration advantage of PSO, thereby systematically improving the model performance and generalization ability. The AMM-SVM hybrid soft measurement model constructed in this study effectively solves the problem of real-time monitoring of volatile substances such as tin, lead, and antimony content in the vacuum distillation process through a multi-layer structure of "mechanism prior knowledge and ANN deviation fitting and SVM residual compensation". The verification results show that this model achieves the best performance in all indicators such as MAE (0.042 7), RMSE (0.059 1), and R^2 (0.978 6), significantly outperforming the pure mechanistic model (which cannot provide reasonable predictions), the pure data-driven model, and similar hybrid models. It demonstrates higher accuracy and reliability. This model can directly replace the lagging offline detection methods and provide reliable data support for the real-time regulation of process parameters and the stable improvement of product quality.

Key words: nonferrous metals; tin-lead-antimony alloy; vacuum metallurgy process; hybrid modeling; residual compensation; hyperparameter optimization

Received date: 2026-01-13 **Revised date:** 2026-03-06 **Accepted date:** 2026-03-11

Foundation item: Project(202302AD080005) supported by the Yunnan Provincial Major Science and Technology Special Project; Project(202301BE070001-064) supported by the Yunnan Provincial Basic Research Program Project

First author: Xie Hui; Tel: +86-15887812507; E-mail: 469793809@qq.com

Corresponding author: Yang Chunxi; Tel: +86-15571195216; E-mail: ycx@kmust.edu.cn