

冶金/反应/工程/丛书
金/应/学/书

化工冶金过程

人工智能优化

冶金工业出版社

国家自然科学基金资助

冶金反应工程丛书

化工冶金过程人工 智能优化

刘洪霖 包 宏 著

北 京
冶金工业出版社

1999

内 容 简 介

本书推荐一种新发展的化工冶金过程人工智能优化策略。书中解释样本模式空间变换基本概念,阐述分类模式识别、人工神经网络、遗传算法原理与计算步骤,介绍基于上述算法的工艺过程优化新技术,剖析多个成效显著的应用实例。本书可供研究过程优化的工程技术人员和科研人员阅读,也可作为有关专业本科生和研究生教学参考书。

图书在版编目(CIP)数据

化工冶金过程人工智能优化/刘洪霖,包宏著. —北京:
冶金工业出版社,1999.1
(冶金反应工程学丛书)
ISBN 7-5024-2258-7

I. 化… II. ①刘… ②包… III. 人工智能-应用-化学
冶金-过程控制:最佳控制 IV. TP11

中国版本图书馆 CIP 数据核字(98)第 22339 号

出版人 卿启云(北京沙滩嵩祝院北巷 39 号,邮编 100009)

责任编辑:刘小峰 杨传福 美术编辑:王耀忠 责任校对:侯 珊

北京市顺义兴华印刷厂印刷;冶金工业出版社发行;各地新华书店经销

1999 年 1 月第 1 版,1999 年 1 月第 1 次印刷

850mm×1168mm 1/32;8.375 印张;210 千字;250 页;1-2000 册

26.00 元

(本社图书如有印装质量问题,本社发行部负责退换)

序 言

冶金学是研究人类从自然资源中提取有用金属和制造材料的科学。从人类最早使用金属到今天，已有数千年历史。在近一百多年的现代工业生产发展中，冶金工业作为一门基础材料工业，发挥了重大作用。本世纪上半叶以来，许多冶金学家应用化学热力学知识，对冶金过程中气体-熔渣-金属间的反应平衡和熔体的物理化学性质进行了大量的测定和研究，这些研究成果促进了现代冶金工艺的发展。冶金学也逐步完善为一门主要以热力学为理论基础的、独立的专业学科。

近几十年来，冶金学知识体系和结构，随着冶金技术的发展和相关学科的进步，也在发生变化。计算机技术的发展和广泛应用，使冶金学理论和工艺的研究方法、冶金生产及其控制技术发生了重大变革。由传统冶金学和传统冶金工艺学所构成的知识体系和结构，已不能完全满足现代冶金工艺发展和理论研究的需要。因此，诸如，对微观宏观过程的认识、单元过程或现象的定量解析、反应过程的数学物理模拟、反应和生产速率的预测、反应器的仿真研究和设计、人工智能技术的应用以及反应器运行和整体生产过程的控制等等，均逐渐成为现代冶金学必须包括的内容。近二三十年中，许多冶金学者努力学习相关学科，如现代化学工程学、计算流体力学（CFD）、传输理论等方面的知识，积极利用数

CAA46/03

学解析方法和计算技术,来定量分析和解决冶金学理论和工艺方面的问题,并获得重要进展。日本学者鞭岩、濑川清等根据上述冶金学内容和研究方法的新进展,于70年代提出冶金反应工程学概念,并分别出版了《冶金反应工程学》和《铁冶金反应工程学》等专著。

我国在冶金学上述新兴内容的研究方面,起步于70年代末。近二十多年,国内许多冶金学者根据现代冶金学发展的趋势,吸收国外先进经验,注意促进多学科知识的交叉,逐步将传输理论、反应工程学的方法以及计算技术引入冶金学的理论研究和工艺开发中,并取得较大的进展。为及时总结冶金学近几十年的发展成果,增进国内外学术交流,改善专业教学、基础研究和工艺发展的条件,中国金属学会冶金反应工程学学术委员会决定组织我国冶金领域内的专家学者,并争取国外学者的参与或合作,编辑出版一套《冶金反应工程学丛书》。

本套丛书可大致分为介绍冶金反应工程学理论的著作(一部分为高校教材或教学参考书)和介绍冶金反应工程学知识应用成果和经验的专著两类。第一批著作于1996年开始出版发行。欢迎国内外冶金学者参加《冶金反应工程学丛书》书目的著述。

《冶金反应工程学丛书》的编委会,由下列学者组成(按姓氏笔画排列,带*号者为执行小组成员):

- 干 勇 (冶金部钢铁研究总院)
- * 曲 英 (北京科技大学)
- 任崇信 (冶金工业出版社)
- 仲增墉 (中国金属学会)
- 杨天钧 (北京科技大学)
- 张丙怀 (重庆大学)
- 李尚诣 (冶金工业部科技司)
- 贺友多 (包头钢铁学院)
- 柯家骏 (中国科学院化工冶金研究所)
- 徐德龙 (西安建筑科技大学)

梅 炽 (中南工业大学)

* 萧泽强 (东北大学)

赫冀成 (东北大学)

* 蔡志鹏 (中国科学院化工冶金研究所)

戴永年 (昆明理工大学)

魏季和 (上海大学)

由于《冶金反应工程丛书》内容涉及面较宽,编写工作量大,且系初次组织,经验不足,错误和不足之处在所难免,请读者批评指正。

《冶金反应工程学丛书》编委会

1996年5月

前言

对生产过程进行优化是人工智能技术的重要应用之一。由于化工冶金过程的周期长，因素多，波动大，反应机理复杂，人工智能在该领域大有用武之地。诸如高炉炼铁和石油裂解等融进各种优化模型的专家系统很早就在化工冶金企业出现，人工智能优化正在使这些领域传统的生产过程焕然一新。

类似人类认识事物可分为从本质出发分析推理和综合表现现象总结判断两种方式一样，优化方法也可分为机理型和经验型两类。前者从物理化学知识出发研究反应机理，推导过程的热力学和动力学方程，借助经验参数求解这些方程，从而达到指导生产的优化目的。后者则通过收集生产数据，将工艺参数作为输入，生产效果作为输出，应用数学方法研究输入与输出信息的关系，借以调整输入而达到最佳输出的效果。相对而言，机理型优化的生产过程透明清澈，可使操作者对生产过程了如指掌；经验型优化却视生产过程如同一个黑盒子，只求获得预想结果而不求弄清反应细节。显然，机理型优化令人神往。然而生产过程往往如此复杂，影响因素如此之多，以致于人们不可能仅凭其反应机理来达到优化生产过程的目的。在这种情况下，经验型优化就大有作为。

人工智能优化属于经验型优化，本质上是一种信号处理方法。因此，它具有如下特点：（1）与生产过程紧密相关，在掌握了计

算软件后，优化的惟一条件仅仅是需要大量生产数据，同时，所建立的优化方案可直接由生产过程检验，因而上马容易，见效迅速；（2）主要通过工艺参数调节达到优化目的，而不是依赖于设备改造，实施优化措施，可离线，可在线，投资可大可小，选择离线优化，可做到小投资，大收益；（3）随着生产发展，在积累新的数据之后，可进行新一轮优化，如此循环，反复优化，不断提高生产效果。

实际上，很难对人工智能优化下一个严格的定义。依作者浅见，人工智能优化是指将模式识别、人工神经网络和专家系统技术以及其他可以模拟人类思维的算法发展成优化策略，从而改进生产过程，达到人们预期的目的。由于所用具体技术不同，优化过程的智能水平也不尽相同，书中介绍的有些应用实例，也许只能称为“半智能”，但是，它们采用了与以往不同的优化方法而达到了改进工艺的目的。本书介绍的这些例子，可作为入门指导，对了解智能优化的发展，应有所裨益。

应该指出，从理论上讲，属于经验型优化的人工智能优化可把所优化对象视为黑盒子，但是实践表明，这并不意味着对于生产过程的了解可有可无。在进行智能优化时，如输入信息遗漏了重要的工艺参数，结果必将一事无成；对工艺知识如一知半解，则作为计算输出的具体优化目标也必然无从确定；由于智能水平不同，有时可能给出若干优化方案，确定优化实施何种方案时，工艺知识多寡也至关重要。因此，那种认为有了优化软件就万事大吉的想法，是不切合实际的。虽然本书是介绍原理、技术及其应用的专著，然而仍恳请读者应将优化技术和工艺知识结合，方能使调优工作事半功倍。

为了帮助读者不仅理解书中介绍的算法原理，而且能应用于优化工艺过程，取得实际成效，书中对涉及复杂算法的章节，特将数学符号列表说明，详细解释公式物理意义和计算机程序化步骤，以便于读者编制程序；同时提供原始生产数据及计算结果，可供核对程序之用；另外，还介绍优化结论分析细节，供新项目优

化时参考。

本书第1章介绍智能优化的基本概念和所涉及的数理统计知识,第2章介绍传统分类模式识别的算法,第3章介绍人工神经网络与遗传算法,第4章介绍基于上述算法发展的优化策略及其若干应用,第5~8章详细介绍四个综合应用实例。本书总结了作者从实验室新材料优化设计到工业第一线调优的经验,以及对工程技术人员与研究生讲授人工智能优化的体会,力求深入浅出,着眼于实用。本书除介绍化工冶金领域的应用,还特举个别新材料实验研究优化设计的算例,以便其他领域读者可由此举一反三,拓宽智能优化应用范围。

本书主要内容是我们和同事们共同承担国家自然科学基金资助项目的研究工作,借此机会向陈念贻研究员、许志宏研究员和其他支持、帮助过我们的师长同仁表达谢意。同时感谢李士琦教授和程素森博士审阅全书,提出宝贵修改意见,并感谢丛书编委会萧泽强教授、曲英教授和蔡志鹏研究员对本书写作和出版过程的关心和指导。

书中第3章3.1、3.2节和第8章由包宏执笔,其他由刘洪霖执笔,全书由刘洪霖总纂定稿。有关计算机软件和项目应用问题,如果需要,可与作者联系。

人工智能优化方法及其在化工冶金过程的应用是一个新领域,内容丰富,发展迅猛,本书仅能抛砖引玉而已。由于水平所限,书中不足之处,欢迎批评指教。

刘洪霖 包 宏

1998年1月

目 录

1 基本知识	(1)
1.1 基本概念	(1)
1.1.1 术语解释	(1)
1.1.2 训练样本与空间变换的数学表达	(5)
1.1.3 样本距离	(7)
1.2 人工智能工业优化步骤	(8)
1.2.1 优化步骤	(8)
1.2.2 优化框图	(9)
1.3 样本采集	(10)
1.3.1 优化目标的确定	(10)
1.3.2 变量的确定	(12)
1.3.3 原始数据的可靠性	(13)
1.3.4 训练样本数量	(14)
1.4 样本标准化	(14)
1.4.1 自标准化	(15)
1.4.2 范围标准化	(16)
1.5 过滤噪音	(16)
1.5.1 离群样本有噪音之嫌	(17)
1.5.2 应用类型隶属度排除迷途样本	(17)
1.5.3 应用相对特征 - 目标匹配度识别噪音	(19)

1.5.4	类相似独立模型	(20)
1.6	选取特征变量	(20)
1.6.1	变量相关性	(21)
1.6.2	变量对目标的贡献	(22)
1.6.3	变量正交组合	(24)
1.7	模式空间的势和分类图	(25)
1.7.1	模式空间的势	(25)
1.7.2	模式空间分类图	(26)
	参考文献	(27)
2	传统分类模式识别计算方法	(28)
2.1	主成分分析(PCA)	(28)
2.1.1	主成分原理	(28)
2.1.2	主成分的性质	(30)
2.1.3	主成分的贡献率	(32)
2.1.4	主成分算法步骤	(33)
2.1.5	计算实例——炼焦配煤的主成分模式识别	(33)
2.2	最优判别平面(ODP)	(39)
2.2.1	ODP 原理	(39)
2.2.2	讨论	(42)
2.2.3	ODP 算法步骤	(44)
2.2.4	计算实例——电镀工艺的 ODP 映照	(44)
2.3	偏最小二乘法(PLS)	(50)
2.3.1	主成分的 NIPALS 算法	(51)
2.3.2	PLS 算法步骤和原理	(54)
2.3.3	PLS 的若干性质	(56)
2.3.4	PLS 预报步骤	(58)
2.3.5	PLS 成分数目的确定	(58)
2.3.6	计算实例——加热炉节能 PLS 计算	(60)
2.4	非线性映照(NLM)	(65)
2.4.1	线性映照的困难	(65)
2.4.2	NLM 原理	(65)
2.4.3	PCA-NLM 和 PLS-NLM	(66)

2.4.4	NLM 计算步骤	(67)
2.4.5	应用实例——钎合金零件断裂诊断和质量改进	(68)
2.5	SIMCA	(69)
2.5.1	SIMCA 的基本原理	(70)
2.5.2	SIMCA 信息分析	(71)
2.5.3	SIMCA 计算步骤	(73)
2.5.4	应用实例——新钢种加工性能 SIMCA 分析	(74)
2.6	最近邻法(KNN)与共享最近邻法(SKNN)	(74)
2.6.1	KNN 方法	(74)
2.6.2	SKNN 方法	(75)
2.6.3	计算实例——炼焦配煤训练样本的 SKNN 计算	(75)
	参考文献	(79)
3	两种人工神经网络算法和遗传算法	(81)
3.1	人工神经网络算法的一些基本概念	(81)
3.1.1	人工神经网络节点的组成	(82)
3.1.2	人工神经网络的拓扑结构	(84)
3.1.3	人工神经网络的运行	(86)
3.1.4	人工神经网络的性质	(86)
3.1.5	人工神经网络的应用	(88)
3.1.6	人工神经网络的学习与训练	(88)
3.2	反传人工神经网络算法	(90)
3.2.1	误差逆传播学习算法	(90)
3.2.2	广义 Delta 规则算法	(94)
3.3	自组织特征映照(SOFM)	(97)
3.3.1	SOFM 模拟	(97)
3.3.2	SOFM 算法原理	(97)
3.3.3	SOFM 计算步骤	(100)
3.3.4	SOFM 计算实例	(102)
3.4	遗传算法(GA)	(104)
3.4.1	遗传算法原理	(105)
3.4.2	染色体的编码	(106)

3.4.3	遗传操作	(107)
3.4.4	GA 计算步骤	(107)
	参考文献	(109)
4	优化策略	(111)
4.1	优化方向	(112)
4.1.1	主图优化方向可视分析	(112)
4.1.2	无人工干预的优化方向分析	(114)
4.1.3	计算步骤	(117)
4.1.4	应用实例——烧结矿节能优化	(117)
4.2	优化区及其数学模型	(121)
4.2.1	多边形	(122)
4.2.2	十字形	(123)
4.2.3	回归建模	(124)
4.2.4	应用实例——初轧加热炉节能的工艺模型	(125)
4.3	可探优化区与逆映照方法	(126)
4.3.1	可探优化区	(126)
4.3.2	非线性逆映照(NLIM)	(127)
4.3.3	线性逆映照(LIM)	(128)
4.3.4	以迭代正映照解决逆映照	(130)
4.3.5	多目标的可探优化点的定位	(131)
4.3.6	应用实例之一——炼焦配煤的模式识别优化	(132)
4.3.7	应用实例之二——铋系高温超导体制备条件的优化	(133)
4.3.8	应用实例之三——VPTC 材料多目标优化设计	(137)
4.4	类中心	(141)
4.4.1	传统类中心	(141)
4.4.2	近邻加权类中心	(142)
4.4.3	类中心簇	(143)
4.4.4	类中心的应用	(145)
4.5	自平衡降维网络建模	(146)
4.5.1	克服过拟合的变元最经济原则	(147)

4.5.2	模式识别-人工神经网络优化策略	(148)
4.5.3	应用实例——镍氢电池阴极材料的 PLS-BPN 优化设计	(149)
4.6	类相似独立网络模型化(INMCA)	(154)
4.6.1	INMCA 过滤噪音与预测类型	(154)
4.6.2	INMCA 特征选择与特征分类能力	(156)
4.6.3	INMCA 非线性类中心	(157)
4.7	最优点的遗传算法设计和模式识别检验	(158)
4.7.1	反传神经网络和遗传算法的结合(BP-GA)	(158)
4.7.2	最优样本的模式识别检验	(159)
	参考文献	(159)
5	综合应用实例之一——热轧硅钢片成品率的优化	(162)
5.1	概况	(162)
5.2	数据采样	(162)
5.3	牌号优化	(163)
5.3.1	训练样本预处理	(163)
5.3.2	模式空间变换	(164)
5.3.3	PLS-BPN 建模	(166)
5.4	板形优化	(169)
5.4.1	训练样本集	(169)
5.4.2	优化计算	(170)
5.4.3	类中心信息	(170)
5.5	硅钢退火炉前智能指导系统	(174)
5.5.1	问题的提出	(174)
5.5.2	标准退火曲线	(174)
5.5.3	指导系统的运行过程	(175)
5.5.4	系统的硬件设备	(175)
	参考文献	(177)
6	综合应用实例之二——16Mn 钢板材力学性能的 优化	(178)
6.1	概况	(178)
6.2	训练样本集	(178)

6.3	单目标变量优化	(179)
6.3.1	样本分类	(179)
6.3.2	PLS 映照信息	(179)
6.4	综合目标优化	(183)
6.4.1	样本综合分类	(183)
6.4.2	优化方向	(184)
6.4.3	遗传算法-神经网络最优化	(186)
6.5	终轧温度预报系统	(187)
6.5.1	知识表达	(187)
6.5.2	运行过程	(188)
	参考文献	(189)
7	综合应用实例之三——制苯过程芳烃抽提工艺的 优化	(190)
7.1	概况	(190)
7.2	数据集 A	(191)
7.2.1	数据预处理	(191)
7.2.2	主要因素和优化方向	(193)
7.2.3	二维模式空间映照	(195)
7.2.4	讨论	(195)
7.3	数据集 B	(197)
7.3.1	数据预处理	(197)
7.3.2	优化方向	(197)
7.3.3	讨论	(198)
7.4	结论	(199)
	参考文献	(199)
8	综合应用实例之四——网络型高炉专家系统	(200)
8.1	概述	(200)
8.1.1	高炉过程简述	(200)
8.1.2	高炉过程静态数学模型	(201)
8.1.3	高炉动力学模型	(202)
8.1.4	高炉热状态模型	(203)
8.2	高炉控制	(206)

8.2.1	过程信息采集·····	(207)
8.2.2	高炉检测技术·····	(208)
8.2.3	高炉的计算机控制·····	(209)
8.2.4	专家系统在高炉上的应用简况·····	(211)
8.2.5	劳塔鲁基钢铁公司拉赫厂高炉专家系统·····	(216)
8.3	实时高炉网络型智能炉况监控及预报系统·····	(220)
8.3.1	系统软件总体结构·····	(220)
8.3.2	高炉炉况异常预报的方法研究·····	(225)
8.3.3	生铁硅含量预报方法·····	(231)
8.3.4	运行情况·····	(235)
8.3.5	小结·····	(236)
	参考文献·····	(237)
	附录 综合应用实例数据·····	(239)
	索引·····	(248)



基本知识

本书让工程技术人员进入一个新的领域,他们将和计算机智能算法的许多概念和术语初次见面。本章旨在入门引路,介绍人工智能优化的基本概念、工作梗概和优化步骤,它是全书的基础知识。

1.1 基本概念^[1~3]

1.1.1 术语解释

模式:泛指图形、花样、模型、样本等,概而言之,我们可把研究对象的个体看成是一个模式。例如,将一个指纹或一个汉字看成一个模式,将一个工艺过程看成一个模式,将包含一组化学成分的一种配方看成一个模式,等等。本书常将一个工艺过程作为一个样本,称为一个样本模式。

模式矢量:任何一个模式都可以用一组适当的数据表示,这一组数据构成线性代数中的一个矢量(一维矩阵)。例如,各种工艺参数,如温度、压力、流量、时间等物理量,表示一个工艺过程,即含多个元素的一个矢量表示工艺过程的一个模式。有些复杂的模式,用一个矢量难以表示,要用二维矩阵表示。本书所讨论的人工智能优化,仅涉及模式矢量。

模式识别:简而言之,模式识别是对许多模式进行辨认。通过对许多表示模式的矢量进行比较、分析,找出它们之间相似与差异的规律,就可以识别哪一些模式相似,可归成一类,哪一些归于另一类。对于用矢量表示的工艺过程,相对于某个生产目标而言,有的模式是好的,有的是坏的,掌握这些模式相似与差异的规律,进而能够识别它们,就是通常说的模式识别。大多数模式识别问题可归结于对表达模式的矢量或矩阵的识别,即可用统计数学方法处