

铝电解电流效率的模式识别 —神经网络研究方法^①

徐驰 谢刚 李正 陈念贻

(中国科学院上海冶金研究所)

冯乃祥 邱竹贤

(东北工学院)

摘 要

在总结铝电解过程中电流效率与电解工艺参数之间的关系的基础上,用模式识别的主成分分析方法对高维模式空间降维,寻找模式空间中电流效率较高的区域。然后用计算机模拟方法,从低维空间逆映照到高维空间,设计了若干组优化工艺条件。最后用人工神经网络拟合和预测这些设定的工艺条件可能达到的电流效率,从而找到了一组最优工艺条件。

关键词: 模式识别 神经网络 电流效率 优化

电流效率是工业铝电解中一项重要的技术经济指标,常用作评价铝电解生产最佳化的标志。在工业铝电解槽上,电流效率在87%~94%之间,影响电流效率的因素主要有:电解温度、分子比、氧化铝浓度和极间距等。本文通过实测值建立的电流效率与电解温度、氧化铝浓度、分子比和添加剂CaF₂+MgF₂之间的关系^[1],用模式识别的主成分分析方法对高维模式空间降维,寻找模式空间中电流效率较高的区域。用Monte Carlo法计算机模拟,从低维空间逆映照到高维空间,设计了6组优化工艺参数组合,最后用逆传播的B-P神经网络拟合、预测这些组合的工艺参数可能达到的电流效率,为试验和生产提供了有意义的信息。本文所述方法适用于冶金、化工生产过程的优化设计。

1 电流效率的测定

在工业铝电解槽上测定了同型号电解槽的

42批生产工艺参数作为研究样本,包括电解温度、Al₂O₃浓度、添加剂CaF₂+MgF₂量和电解质分子比NaF/AlF₃。同时测定了相应的阳极气体中CO₂的含量,根据电流效率与CO₂含量的关系^[2]

$$\eta = (1/2)(\text{CO}_2\%) + 50\% + 3.5\%$$

计算出相应的电流效率。

为便于模式识别分类,将42批测定值(即训练样本)分成三类:η>92%为第一类(较高电流效率组);η=91~92%为第二类;η<91%为第三类(较低电流效率组)。各类样本的生产技术参数和电流效率平均值如表1所示。

2 用模式识别寻找工艺优化区

用模式识别的主成分分析法^[2]对高维模式空间降维以寻找工艺优化区,主要步骤包括数据标准化、计算特征变量相关系数矩阵R、特征变量加权、求解R矩阵的特征值和特征向

表1 变量的均值和方差

样本	样本数	电解温度/℃	添加剂量/%	Al ₂ O ₃ /%	分子比	CO ₂ /%	η /%
第1类	13	938.0	6.446	3.554	2.715	78.33	92.67
第2类	18	938.1	6.200	3.390	2.644	75.92	91.46
第3类	11	937.7	6.247	3.286	2.550	72.87	89.94
总计	42	937.95	6.289	3.414	2.642	75.87	91.44
方差		1.345	0.346	0.344	0.098	-	-

量、选择合适的映照平面等，详见文献[4]。

电解温度、MgF₂+CaF₂量、Al₂O₃浓度和分子比分别记作 x₁、x₂、x₃、x₄。相关系数矩阵计算结果如下，可见这些变量之间没有明显的线性相关。

	x ₁	x ₂	x ₃	x ₄
x ₁	1.000 00			
x ₂	-0.018 15	1.000 00		
x ₃	0.257 08	0.014 23	1.000 00	
x ₄	0.002 62	-0.075 40	0.316 96	1.000 00

为了增加模式空间的可分性，突出某些特征变量的贡献，可对变量加权。权因子 W_i 取该变量的组间偏差 Σ' 与组内偏差 Σ'' 之比，即

$$W_i = \frac{\sum_{j < k}^N (x_{ji} - x_{ki})^2}{\sum_{j < k}'' (x_{ji} - x_{ki})^2}$$

$$(i = 1, 2, \dots, m; k = 1, 2, \dots, N)$$

权重分析 (W₁=1.914, W₂=1.997, W₃=2.075, W₄=3.925) 表明，电解质的分子比(x₄)的权因子最大，对电流效率的分类贡献亦最大。

用雅可比方法计算 R 阵的特征值 λ 和特征向量 L。将 λ 值按 λ₁>λ₂>...>λ_m 排列，所对应的特征向量分别记作 L₁、...、L_m。λ 值和特征向量 L 计算结果如下：

	L ₁	L ₂	L ₃	L ₄
λ	16.01	4.70	3.97	2.68
L ₁	0.019 67	0.679 95	-0.183 35	0.709 69
L ₂	-0.047 01	0.127 91	0.981 73	0.132 41
L ₃	0.216 43	0.703 22	0.010 07	-0.677 15
L ₄	0.974 97	-0.163 66	0.048 80	0.142 38

为了将高维模式空间中样本映照到二维平

面，可选择其中二个特征向量构成坐标，若选择的特征向量为 L₁、L₃，则各样本点在映照平面的坐标值为

$$Y_1 = L_1 W X, Y_3 = L_3 W X$$

以 Y₁ 和 Y₃ 构成的影射平面如图 1 所示。

图 1 表明 42 个样本大致布分在三个区域，即三类样本分布在不同的区域，自左下方到右上方，样本类别分别从第三类、到第二类、到一类。右上方区，电流效率较高，第一类样本密集区即为所寻找的工艺优化区。

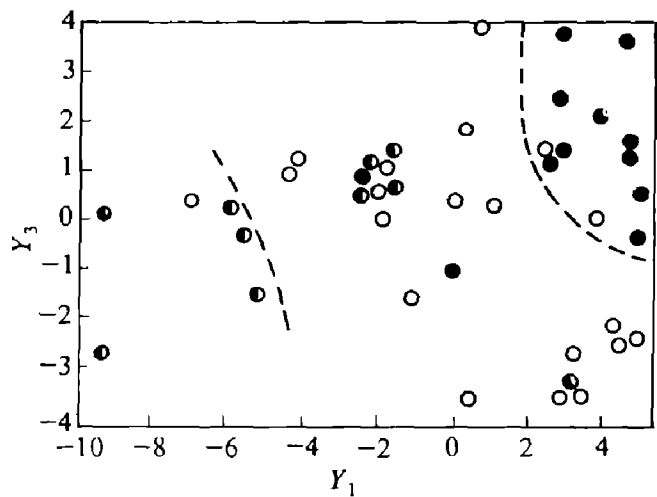


图 1 主成分分析结果(42个样本, 第1、3主成分)

●—1类; ○—2类; ◐—3类

3 Monte Carlo法模拟计算最佳工艺参数

在找到优化区后，可以用多种方法确定最佳工艺参数，如判别方程—线性规划求解^[3]法等。本文报道用 Monte Carlo 法模拟计算最佳工艺参数，即从映照平面的优化点求解高维模式空间中该点的位置。

以图 1 为例，在 Y₁-Y₃ 映照平面的优化区内先设定 O 点为优化点，O 点在 Y₁、Y₃ 方向的投影分别记作 O₁、O₃，如图 2 所示。同理，Y₁-Y₂ 映照平面和 Y₁-Y₄ 映照平面分别设定 O 点在 Y₂、Y₄ 方向的投影为 O₂、O₄，即 L₁WX=O₁, L₂WX=O₂, ..., L_mWX=O_m

显然，在设定 O₁~O_m 后，O 点在原始数据空间的位置是唯一确定的。虽然可用多种方

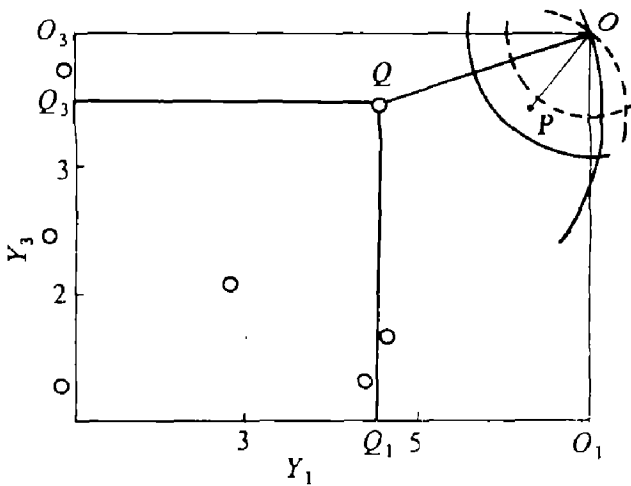


图2 Monte Carlo 模拟示意图

法求解上述联立方程, 但对于变量较多的情况下, 以及上述方程为不等式(如 $L_i W X > O_i$)时, 用 Monte Carlo 法模拟将大大加快计算速度, 并具有明确的物理意义。

根据 Monte Carlo 模拟方法, 设定了 5 组优化的工艺参数, 如表 2 所示, 结果输入神经网络预测其目标值。

4 神经网络算法拟合与预测工艺过程

人工神经网络是对生物神经网络的理论抽象。它是由大量基本信息处理单元通过相互连接而构成的非线性动力学系统, 其网络的构型、输入输出特性及连接方式决定了网络的功能。目前已发展了许多处理不同对象的人工神经网络^[4], 它们在图象识别、系统辩识、过程控制和函数拟合等方面得到了初步的应用。

4.1 逆传播(B-P)网络

逆传播(Back-Propagation)网络是目前应

用最广泛的一类人工神经网络, 如图 3 所示。 x_1, x_2, \dots, x_{N_x} 为网络的输入节点, y_1, y_2, \dots, y_{N_y} 为网络的输出节点, 中间若干隐蔽层中含有一些隐蔽节点。 W_{ij} 为各节点间的连接强度也称连接权, Q_i 为阈值。对每个节点有

$$O_i = f(\sum_j W_{ij} I_j - Q_i)$$

式中 I_j 为输入信息, O_i 为输出信息, f 为作用函数, 常用 Sigmoid 函数

$$f(x) = 1 / (1 + e^{-x})$$

是一种非线性激活函数。由此可见, B-P 网络是一种以有向图为拓扑结构的动态系统, 也可看作是一种高维空间的非线性映照。我们用 B-P 网络处理铝电解的电流效率。

4.2 计算方法

为了用 B-P 网络进行数据拟合, 首先需确定网络的拓扑结构, 然后确定连接权 W_{ij} 和阈值 Q_i , 目前常用误差反转算法^[4]的步骤为:

(1) 确定作用函数。为了使网络适合数值拟合对输出层有 $f(x) = x$, 对中间层设 $f(x) = 2 / (1 + e^{-x}) - 1$ 。这样使作用函数以零为中心, 正负对称输出, 这样较适合于标准化后的数据。

(2) 对连接权 W_{ij} 和阈值 Q_i 赋初值, 常采用随机数赋值。

(3) 输入训练样本 $\{x_i\}$ 和相应的目标输出 $\{d_i\}$ 。

(4) 计算各训练样本的实际输出值 $\{y_i\}$ 。

(5) 调整 W_{ij} 和 Q_i ,

$$W_{ij}(t+1) = W_{ij}(t) + \alpha \delta_j O_i + \beta [W_{ij}(t) - W_{ij}(t-1)]$$

式中 α 为学习速率, β 为加速收敛的动量项, O_i 为 i 节点的输出值。对输出层: $\delta_j = d_j - y_j$; 对中间层: $\delta_j = (1 - O_j^2) \sum_k \delta_k W_{jk} / 2$; k 为 j 的

表 2 模拟计算的优化工艺参数

优化点	优化点位置				模拟计算参数				工艺参数			
	O_1	O_2	O_3	O_4	x_1	x_2	x_3	x_4	x_1	x_2	x_3	x_4
1	6.0	2.5	4.0	1.5	1.217 1	2.099 8	1.018 4	1.486 1	939.6	7.015	3.764	2.787
2	5.5	2.0	4.5	1.5	0.962 5	2.330 2	0.768 4	1.430 0	939.3	7.095	3.678	2.782
3	6.0	1.5	4.5	1.5	0.888 2	1.999 5	0.657 4	1.568 2	939.2	6.981	3.640	2.795
4	6.0	2.0	4.5	1.5	0.982 3	1.988 3	0.838 0	1.467 2	939.9	6.977	3.702	2.785
5	5.5	2.5	4.5	1.5	1.181 2	2.068 5	0.879 6	1.339 6	939.5	7.005	3.716	2.773

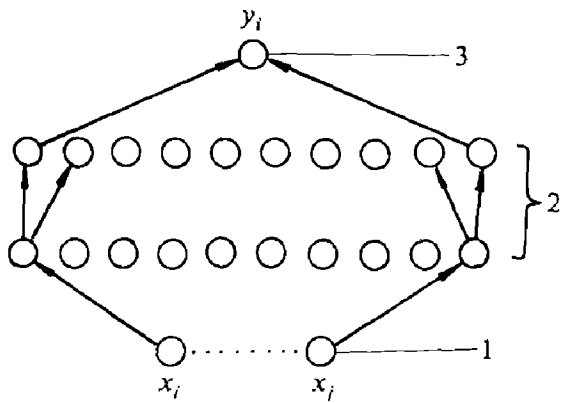


图3 逆传播 B-P 神经网络

1—输入节点; 2—隐蔽节点; 3—输出节点

上一层。

若在除输出层外的每一层增加一个恒等于1的节点, 则 Q_i 可看作 $-W_{i+1,j}$, 进行上述运算。

(6) 返回(4)进行迭代运算, 直至输出值和目标值的误差符合所需精度。

4.3 计算结果

对铝电解的电流效率, 构造网络如图4所示, 其输入端分别对应于四个生产技术参数, 输出端对应于电流效率。将42个试验样本随机抽取36个样本作为训练集, 对网络进行学习训练。经3000次以上的迭代运算, 以确定网络的 W_{ij} 和 Q_i , 再将剩下的6个样本输入网络, 以考核网络的可靠性, 考核结果如下:

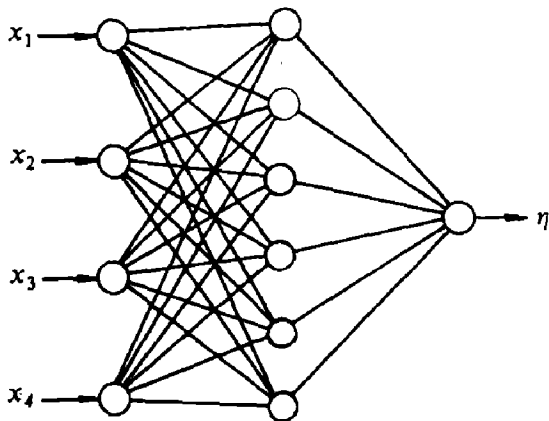


图4 拟合铝电解过程的 B-P 网络

样本号	1	2	3	4	5	6
实测 η 值 / %	92.45	92.47	91.14	91.38	90.86	91.17
预报 η 值 / %	92.23	92.36	92.34	91.08	90.96	90.63

由上可见, 用神经网络拟合和预报的 η 值有相当的可靠性。根据上述模型, 以表2所列5组工艺参数作为优化样本, 输入网络进行预测, 预测 η 值为:

样本号	1	2	3	4	5
η / %	93.13	93.01	92.99	93.07	93.06

可见, 样本1为最佳优化点, 其工艺条件为: 电解温度 939.6°C , $\text{MgCl}_2 + \text{CaCl}_2$ 添加量 7.015%, Al_2O_3 浓度 3.76%, $\text{NaF} / \text{AlF}_3$ 分子比 2.787, 电流效率可达 93.13%。

5 结论

用模式识别方法找到了铝电解电流效率的优化区。用 Monte Carlo 方法求出了若干组最优工艺参数, 最后用逆传播的神经网络拟合和预测电流效率, 找到了最佳优化点。

模式识别方法具有空间直观性, 物理意义明确, 容易得到优化趋势, 但不能作数值拟合。神经网络方法可以拟合多因子非线性问题, 但直观性差。两种方法互相结合、互为补充, 形成了拟合与优化的一种独特方法。它不仅适合于铝电解电流效率的优化, 也适合于其它冶金、化工生产过程的优化。

参考文献

- 1 邱竹贤. 预焙槽炼铝. 北京: 冶金工业出版社, 1980.
- 2 Mccade G P. Technometrics., 1984, 26: 137.
- 3 徐 驰, 张嘉法. 金属学报, 1988, 24(增刊 I): SB97.
- 4 Lippmann R P. IEEE ASSP MAGAZINE, 1987, 4: 4.