

队伍编号	mathorcup905160
题号	D

## 钢水“脱氧合金化”配料方案的优化

### 摘 要

在全球制造业以信息化促进工业化发展的背景下，作为我国重要基础产业的钢铁工业发展智能制造技术，对钢铁生产过程实施有效的运行控制，将成为钢铁企业实现“降本增效”、提升核心竞争力的重要手段之一。随着钢铁行业中高附加值钢种产量的不断提高，如何通过历史数据对脱氧合金化环节建立数学模型，在线预测并优化投入合金的种类及数量，在保证钢水质量的同时最大限度地降低合金钢的生产成本，是各大钢铁企业提高竞争力所要解决的重要问题。

针对问题一，本文在剔除附件 1 中记录缺失及记录明显错误的的数据后，计算得到有效数据中 C 的收得率及 Mn 的收得率，将数据中 4 种不同的钢号进行分类讨论，确定反映系统行为特征的参考数列，对有效数据进行灰色关联分析，可知其在不同钢号条件下的主要影响因素。

针对问题二，本文采用案例推理、RBF 神经网络等方法建立合金元素收得率的预报模型，将 140 组有效数据用于仿真，其中前 119 组数据用于构建初始案例库，后 21 组数据用于预报仿真，计算仿真结果误差，验证模型准确性并进行优化。同时，为了提高预报的精准度，我们还引入粒子群优化，对神经网络模型进行优化，加快运算速度，提高准确率。

针对问题三，本文首先通过问题二中的模型给出合金料投入量与合金收得率的关系，进而将各项投入量与 C、Mn 两种元素最终含量挂钩，通过国标规定的含量范围确定约束条件，并以合金料成本为目标函数，采用模拟退火算法编程计算，最终对 140 组数据均给出了使成本最低的全局最优解，经校验计算，本文构建的算法和模型能够使钢水脱氧合金化的单位成本降低 4.8929 元/吨。

针对问题四，本文从合金收得率数据收集与预测的角度给出合理意见，并就钢水脱氧合金化过程中所投入合金料的成本优化问题提出建议。

**关键词：**灰色关联分析；案例推理；RBF 神经网络；粒子群算法；合金收得率预测优化模型；模拟退火算法；最优配料模型

# 目 录

一、问题重述.....	1
二、数据预处理和模型假设.....	1
2.1 数据预处理.....	1
2.2 模型假设.....	1
三、符号说明.....	2
四、问题 1 的求解.....	3
4.1 问题分析.....	3
4.2 C、Mn 元素收得率计算.....	3
4.3 合金收得率主要影响因素的分析.....	3
五、问题 2 的求解.....	8
5.1 问题分析.....	8
5.2 合金收得率预测模型.....	8
5.3 合金收得率预测结果.....	11
5.4 粒子群优化算法的引入.....	14
六、问题 3 的求解.....	18
6.1 问题 3 的分析.....	18
6.2 问题 3 的建模和求解.....	18
6.3 问题 3 的结果分析.....	20
七、问题 4 的求解.....	23
八、模型评价与分析.....	24
8.1 模型的优点.....	24
8.2 模型的缺点.....	24
8.3 模型的可推广性分析.....	24
九、参考文献.....	25
十、附录.....	26

## 一、问题重述

问题 1：题中给出钢号、转炉终点温度、钢水净重、各元素的转炉终点和连铸正样、各合金的投入量等历史数据以及合金收得率的定义和计算方法，要求在对数据进行初步预处理的基础之上，首先求出 C、Mn 两种元素的历史收得率，并进一步筛选和剔除不合理的数据，利用剩余的有效数据，分析各项因素对历史收得率的影响，厘清其与历史收得率的关联程度，进而提取其中的主要因素。

问题 2：要求根据问题 1 中所得到的影响 C、Mn 收得率的主要因素，构建数学模型，量化各项因素对历史收得率的影响，并对此模型加以检验，将 C、Mn 两种元素收得率的预测结果与实际历史数据进行比对，估计其准确率；并在此基础上进一步对模型加以改进，优化算法，尽可能提高这两种元素收得率的预测准确率。

问题 3：脱氧合金化过程中所加入合金的种类和质量不同，将直接影响钢水脱氧合金化的成本以及脱氧合金化后钢水中各元素的含量。问题 3 要求根据问题 2 中得到的预测模型，搭建合金料投入量与 C、Mn 元素收得率的关系，进而搭建合金料投入量与脱氧合金化后 C、Mn 元素含量的关系，并依据国家标准列出各项合金料投入量的约束条件，以合金料成本为目标函数，采用合适的算法，给出成本最优时投入合金配料的方案。

问题 4：要求根据前三问的研究过程及结论，联系工程实际，从合金收得率数据收集与预测的角度给出合理意见，并就钢水脱氧合金化过程中所投入合金料的成本优化问题提出建议。

## 二、数据预处理和模型假设

### 2.1 数据预处理

经过对表格内容的观察和比对，小组基于以下几种原则删除了附件一中不合理的数据组：

- (1) 数值残缺，或者显示值为错误的数据；
- (2) 整组数值几乎全部为 0 的影响因素数据；
- (3) 转炉终点 5 种元素含量均为 0 的数据；
- (4) 在转炉终点温度、钢水净重等数据组中异常显示为 0 的数据；
- (5) 合金收得率计算结果大于 1 或者小于 0 的数据。

## 2.2 模型假设

为了建立简化的模型，小组在建模的过程中，对模型的各个参与量进行了如下的简化处理：

（1）假设加入合金料的质量远小于脱氧合金化前钢水的净重，即不考虑钢水在吸收前后的质量改变；

（2）假设不同钢号的钢水在脱氧合金化过程中，具备不同的关联特性，各个影响因素的作用程度不同，需要分开研究；

（3）假设除了模型中考虑选取的主要影响因素外，其他次要的影响因素均不再对脱氧合金化过程中的元素含量产生任何影响；

（4）假设成本优化过程中所考虑的三项合金投入量的成本可代表所有合金投入量的成本。

## 三、符号说明

符号	含义	符号	含义
$\eta_M$	合金 M 元素收得率	$Y_c = Y(k),$ $k = 1, 2 \dots n$	灰色关联分析参考数列
$\omega[M]_{\text{连铸正样}}$	脱氧合金化后钢水中 M 元素含量	$X_i = X_i(k)$ $k = 1, 2 \dots n;$ $i = 1, 2 \dots m$	灰色关联分析比较数列
$\omega[M]_{\text{转炉终点}}$	脱氧合金化前钢水中 M 元素含量	Q	加入合金料的成本
$\omega[M]_{\text{合金}}$	合金 M 元素含量	A	冷却率
$m_{M\text{合金}}$	合金 M 元素加入质量	$x_5$	钢水净重
$\xi_i(k)$	关联系数	$x_6$	钒铁(FeV50-B)质量
$r_i$	关联度	$x_7$	石油焦增碳剂质量
$k$	炉号	$x_8$	锰硅合金 FeMn68Si18(合格块)质量

## 四、问题 1 的求解

### 4.1 问题分析

问题 1 分为前后两问，其一为合金收得率的计算，只需要联系定义，根据表中的数值进行计算即可求解，值得注意的是，合金收得率有其上下限，因此这一步的计算有助于我们对数据进行更加充分的预处理，剔除不合理的数据；其二为收得率影响因素的探究，这实际上是一个数据关联度分析的问题，我们采用灰色关联分析的方法，给出各项可能的影响因素与收得率的灰色关联度，并选择其中的主要因素进行分析。

### 4.2C、Mn 元素收得率计算

由题目可知，合金收得率指脱氧合金化时被钢水吸收的合金元素的重量与加入元素总质量之比，即：

合金元素收得率

$$\eta_M = \frac{\omega[M]_{\text{连铸正样}} - \omega[M]_{\text{转炉终点}}}{m_{\text{合金}} \times \omega[M]_{\text{合金}}} \times \text{钢水净重} \times 100\%$$

合金加入量

$$m_{\text{合金}} = \frac{\omega[M]_{\text{连铸正样}} - \omega[M]_{\text{转炉终点}}}{\omega[M]_{\text{合金}} \times \eta_M} \times \text{钢水净重}$$

将附件 1 中的有效数据导入至 MATLAB 中进行上述计算，可得历史数据 C 元素和 Mn 元素的收得率，经过数据筛选和剔除后的详细表格见附录一。

### 4.3 合金收得率主要影响因素的分析

#### 4.3.1 灰色关联分析

灰色关联分析<sup>[1]</sup>是指对一个系统发展变化态势的定量描述和比较的方法，其基本思想是通过确定参考数据列和若干个比较数据列的几何形状相似程度来判断其联系是否紧密，它反映了曲线间的关联程度。通常可以运用此方法来分析各个因素对于结果的影响程度，也可以运用此方法解决随时间变化的综合评价类问题，其核心是按照一定规则确立随时间变化的参考序列，把各个评估对象随时间的变化作为比较序列，求各个比较序列与参考序列的相关程度，依照相关性大小得出结论。

灰色关联分析的具体计算步骤如下

#### (1) 确定分析数列

确定反映系统行为特征的参考数列和影响系统行为的比较数列。反映系统行为特征的数据序列，称为参考数列。影响系统行为的因素组成的数据序列，称比较数列。

参考数列为 $Y = Y(k) / k = 1, 2 \dots n$

比较数列为 $X_i = X_i(k) / k = 1, 2 \dots n; i = 1, 2 \dots m$

## (2) 变量的无量纲化

由于系统中各因素列中的数据可能因量纲不同，不便于比较或在比较时难以得到正确的结论。因此在进行灰色关联度分析时，一般都要进行数据的无量纲化处理。主要有以下两种方法：

初值化处理： $x_i(k) = \frac{x_i(k)}{x_i(1)}, k = 1, 2 \dots n; i = 0, 1, 2 \dots m$

均值化处理： $\bar{x}_i(k) = \frac{x_i(k)}{\bar{x}_i}, k = 1, 2 \dots n; i = 0, 1, 2 \dots m$

其中  $k$  对应时间段， $i$  对应比较数列中的一行。

## (3) 计算关联系数

$$\xi_i(k) = \frac{\min_i \min_k / y(k) - x_i(k) / + \rho \max_i \max_k / y(k) - x_i(k) /}{/ y(k) - x_i(k) / + \rho \max_i \max_k / y(k) - x_i(k) /}$$

其中  $\rho$  称为分辨系数， $\rho$  越小，分辨力越大，一般  $\rho$  的取值区间为  $(0, 1)$  具体取值可视情况而定。当  $\rho \leq 0.5463$  时，分辨力最好，通常取  $\rho = 0.5$

## (4) 计算关联度

因为关联系数是比较数列与参考数列在各个时刻（即曲线中的各点）的关联程度值，所以它的数不止一个，而信息过于分散不便于进行整体性比较。因此有必要将各个时刻（即曲线中的各点）的关联系数集中为一个值，即求其平均值，作为比较数列与参考数列间关联程度的数量表示，关联度  $r_i$  公式如下：

$$r_i = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \xi_i(k), k = 1, 2 \dots n$$

## (5) 关联度排序

关联度按大小排序，如果  $r_1 < r_2$ ，则参考数列  $y$  与比较数列  $x_2$  更相似。

在算出  $X_i(k)$  序列与  $Y(k)$  序列的关联系数后，计算各类关联系数的平均值，平均值  $r_i$  就称为  $Y(k)$  与  $X_i(k)$  的关联度。

### 4.3.2 问题求解

首先依据对元素收得率的计算，于之前数据筛选的基础上，再剔除合金收得率大于 1 或者小于 0 的数据，并将各项数据按照钢号分类，共得 191 组数据，各种钢号的数据样本容量如下所示：

钢号	HRB400B	HRB400D	HRB500D	Q345B
----	---------	---------	---------	-------

数据容量/组	140	30	15	6
--------	-----	----	----	---

根据上述灰色关联分析的方法, 本文将有效数据中不同钢号数据分类讨论, 以低合金 HRB400B 钢材为例, C 元素的收得率设为参考数列  $Y_C = Y(k) / k = 1, 2 \dots n, n = 140$ , Mn 元素的收得率设为参考数列  $Y_{Mn} = Y(k) / k = 1, 2 \dots n, n = 140$ , 将可能存在的影响因素均设置为比较数列, 分别为  $X_i = X_i(k) / k = 1, 2 \dots 140, i = 1, 2 \dots 14, i1 - i14$ , 分别表示转炉终点温度、转炉终点 C、转炉终点 Mn、转炉终点 S、转炉终点 P、转炉终点 Si、钢水净重、钒氮合金(进口)、钒铁(FeV50-B)、硅铝钙、硅锰面(硅锰渣)、石油焦增碳剂、锰硅合金 FeMn68Si18(合格块)、碳化硅(55%)等。

对 14 种因素分别对 C 和 Mn 做灰色关联度分析, 结果如表 1 所示:

表 1 钢号 HRB400B 各项因素与收得率的灰色关联度

钢号 HRB400B		
	r(与 C 的收得率)	r(与 Mn 的收得率)
转炉终点温度	0.945855059	0.930844789
转炉终点 C	0.848269124	0.854705014
转炉终点 S	0.884526696	0.890424359
转炉终点 Si	0.873163541	0.869426469
钢水净重	0.958097845	0.974232018
钒铁(FeV50-B)	0.828030168	0.817617746
石油焦增碳剂	0.890447768	0.884053679
锰硅合金 FeMn68Si18(合格块)	0.881100762	0.873518067
碳化硅(55%)	0.741870742	0.730074774
转炉终点 Mn	0.772499312	0.763513281
转炉终点 P	0.588711594	0.583262979
钒氮合金(进口)	0.72016902	0.732644545
硅铝钙	0.723865033	0.716167699
硅锰面(硅锰渣)	0.735236217	0.734989288

同样方法可得钢号为 HRB400D (选择 15 种影响因素)、HRB500D (选择 11 种影响因素)、Q345B (选择 11 种影响因素) 的灰色关联分析结果, 分别如表 2、3、4 所示

表 2 钢号 HRB400D 各项因素与收得率的灰色关联度

钢号 HRB400D		
	r(与 C 的收得率)	r(与 Mn 的收得率)
转炉终点温度	0.94691073	0.96081717
转炉终点 C	0.899530321	0.90059732
转炉终点 Mn	0.791042315	0.765963644
转炉终点 S	0.885250381	0.843658913
转炉终点 P	0.732540122	0.709297369
转炉终点 Si	0.895490635	0.908782768
钢水净重	0.941687279	0.971166409

钒氮合金(进口)	0.873836811	0.899756909
钒铁(FeV50-B)	0.886006593	0.935625898
硅铝合金 FeAl30Si25	0.554963321	0.587173225
硅锰面(硅锰渣)	0.745718628	0.770712622
石油焦增碳剂	0.858802581	0.902715694
锰硅合金 FeMn68Si18(合格块)	0.934520298	0.898678417
碳化硅(55%)	0.869892609	0.905961065
硅铝钙	0.728996679	0.738336597

表 3 钢号 HRB500B 各项因素与收得率的灰色关联度

钢号 HRB500D		
	r(与 C 的收得率)	r(与 Mn 的收得率)
转炉终点温度	0.909915765	0.948673846
转炉终点 C	0.756180242	0.751217608
转炉终点 Mn	0.785218761	0.776104043
转炉终点 S	0.616261254	0.568899168
转炉终点 P	0.73573293	0.741956112
转炉终点 Si	0.919513898	0.931468479
钢水净重	0.924397813	0.958854136
钒氮合金(进口)	0.890941595	0.952275781
硅铝合金 FeAl30Si25	0.793304658	0.790351701
硅铁 FeSi75-B	0.818293637	0.765572737
石油焦增碳剂	0.815626924	0.827161657
锰硅合金 FeMn68Si18(合格块)	0.923553451	0.940988852

表 4 钢号 Q345B 各项因素与收得率的灰色关联度

钢号 Q345B		
	C 的收得率	Mn 的收得率
转炉终点温度	0.885693505	0.938261555
转炉终点 C	0.84561503	0.89015317
转炉终点 Mn	0.887489853	0.888414379
转炉终点 S	0.903697723	0.906313278
转炉终点 P	0.867030451	0.798234482
转炉终点 Si	0.816821634	0.866220417
钢水净重	0.886057013	0.940197337
钒氮合金(进口)	0.88986821	0.933252063
硅铝合金 FeAl30Si25	0.639133247	0.641252826
石油焦增碳剂	0.717343529	0.72966361
锰硅合金 FeMn68Si18(合格块)	0.87145424	0.919622192

依据以上的分析结果，小组给出以下结论：

(1) 四种钢号的数据都能表明，转炉终点温度与钢水净重是与合金收得率关联度最高的两项影响因素；



(2) 其他因素对合金收得率的影响程度大小, 因钢号的不同而有所差异, 为了后续问题的解答, 小组针对钢号 **HRB400B** 和 **HRB400D** 分别抽取了 8 项关联度最高的影响因素, 具体每种钢号的主要因素如下:

**HRB400B** : 转炉终点温度、转炉终点 C、转炉终点 S、转炉终点 Si、钢水净重、钒铁(FeV50-B)、石油焦增碳剂、锰硅合金 FeMn68Si18(合格块)

**HRB400D** : 转炉终点温度、钢水净重、转炉终点 C、转炉终点 Si、钒氮合金(进口)、钒铁(FeV50-B)、石油焦增碳剂、锰硅合金 FeMn68Si18(合格块)

(3) 由于钢号为 **HRB500D** 和 **Q345B** 的样本容量仅为 14 组和 6 组, 分析结果不具备广泛性和代表性, 因此小组没有对这两种钢号的分析结果进行更多的影响因素提取工作。

## 五、问题 2 的求解

### 5.1 问题分析

问题 2 要求根据给出的各项数据以及问题 1 中计算出的各项主要影响因素，建立起一个预测模型，用于对给定影响因素下的 C 元素和 Mn 元素合金收得率进行预测。这实际上是一个给定数据样本，提取特征量进行预测的问题，小组考虑，可以用 RBF 神经网络的方法搭建模型，构造问题 1 中的八个输入量与两个输出量（C 元素和 Mn 元素合金收得率）之间的关系，通过训练所搭建的模型，给出一个合理预测手段。

同时我们也意识到由于 RBF 是一种前馈型的神经网络，其激励函数一般是高斯函数，通过对输入与函数中心点的距离来算权重，这就会导致其复杂度大增加，结构过于庞大，从而运算量也有所增加，使得 RBF 算法效率并不高。为此，小组成员拟提出一种引入粒子群优化算法的 RBF 神经网络模型，从而优化模型，加快计算速度，提高元素收得率的预测准确率。

### 5.2 合金收得率预测模型

#### 5.2.1 案例推理

基于案例推理（CBR）<sup>[2]</sup>是人工智能领域中的一个重要范畴，旨在利用已有的案例去解决新问题。CBR 是以案例或累积经验作为存储知识的基础，针对新的问题加以定义及描述，以便选取及应用，并以“模拟”、“转换”、“调整”、“合并”等手段修改原有的解决方案以便适用于新情况。由于 CBR 的方法模拟人类解决问题的过程，即从自己或者他人以往的经验去处理出现的新问题，送种方法大大缩短了解决问题的时间从而减少了相应的消耗。其主要过程分为以下三个步骤：

（1）建立案例库：案例库是 CBR 系统工作的基础，所以要将已有的知识或者经验表示成一个案例库。一个案例一般可以被表示成一个特征向量的形式。

（2）案例检索与匹配：在常用的匹配策略中，主要采用的是加权最近相邻算法计算相似度，本文定义钢水“脱氧合金化”过程的当前运行工况为  $C_n$ ，可描述为：

$$F = (f_1, f_2, \dots, f_i)$$

定义  $C_n$  的解为：

$$F_s = (f_{s1} - f_{s2})$$

定义案例库中案例为  $C_k (k = 1, 2, \dots, m)$ ，定义其工况描述为

$$F_k = (f_{s,1}, f_{s,2}, \dots, f_{s,i})$$

当前工况  $C_n$  与特征库中案例工况  $C_k (k = 1, 2, \dots, m)$  描述特征  $f_i$  与  $f_{k,i}$  的相似度函数为：

$$\text{sim}(f_1, f_{k,i}) = 1 - \frac{|f_1 - f_{k,i}|}{\max(f_1, f_{k,i})}, (k = 1, 2, \dots, m)$$

当前工况 $C_n$ 与特征库中案例工况 $C_k (k = 1, 2, \dots, m)$ 间相似度函数如下：

$$\text{SIM}(C_n, C_k) = \frac{\sum_{i=1}^i \omega_1 \text{sim}(f_1, f_{k,i})}{\sum_{i=1}^i \omega_1}, (k = 1, 2, \dots, m)$$

(3) 案例相似度阈值的确定：通过上述计算，可以得到当前工况案例与案例库间的相似度。在进行案例匹配之前应确定案例相似度阈值 $\text{SIM}_y$ ，可以取 $\text{SIM}_y = 0.85$ 。当 $\text{SIM}(C_n, C_k) \geq \text{SIM}_y$ 时，认为库中案例与当前案例匹配。

### 5.3 RBF 神经网络

RBF 神经网络<sup>[3]</sup>属于前向型网络，由三层结构组成。第一层是由输入信息组成的输入层组成；第二层是由神经元节点组成的隐含层，节点数视需要而定；第三层是由输出信息组成的输出层。RBF 神经网络的拓扑结构图如图所示：

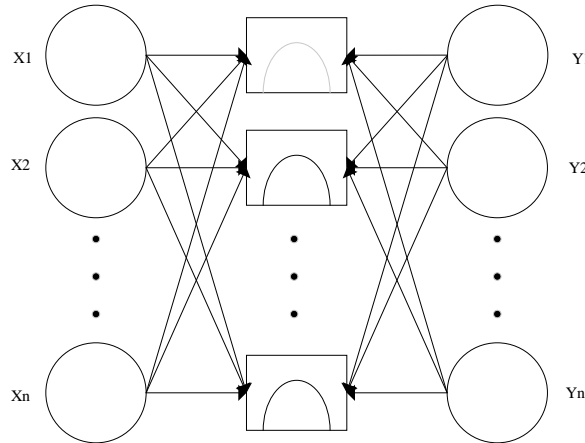


图 1 RBF 神经网络拓扑结构图

RBF 神经网络输入层的作用就是传输信号，其与隐含层之间的连接权值通常为 1。隐含层通常采用非线性优化策略对激活函数的参数进行调整，因此学习速度较慢。而输出层采用线性优化策略对线性权值进行调整，因此学习的速度快。

RBF 神经网络学习算法要求解的重要参数为：径向基函数的中心、方差及隐含层到输出层的权值。RBF 神经网络中常用的径向基函数是高斯函数，此时 RBF 神经网络的激活函数可以表示为：

$$R(x_p - C_i) = \exp(-\frac{1}{2\sigma^2} \|x_p - C_i\|^2)$$

其中， $\|x_p - C_i\|$ 为欧几里得范数； $C_i$ 为高斯函数的中心； $\sigma$ 为方差。可以得出，神经网络的输出值为：

$$y_i = \sum_{j=1}^h \omega_{ij} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} \|x_p - c_i\|^2\right) \quad j = 1, 2, \dots, h$$

式中,  $x_p = (x_1^p, x_2^p, \dots, x_n^p)^T$  为第  $p$  个输入样本,  $p=1, 2, \dots, P$ ,  $P$  为样本总数;  $\omega_{ij}$  为隐含层到输出层的权值,  $i=1, 2, \dots, h$  为隐含层节点数。设样本的期望输出为  $d$ , 则高斯径向基函数的方差为:

$$\sigma^2 = \frac{1}{p} \sum_j^m \|d_j - y_j c_i\|^2$$

本文选取自组织选取径向基函数中心的学习方法, 其流程如下图所示:

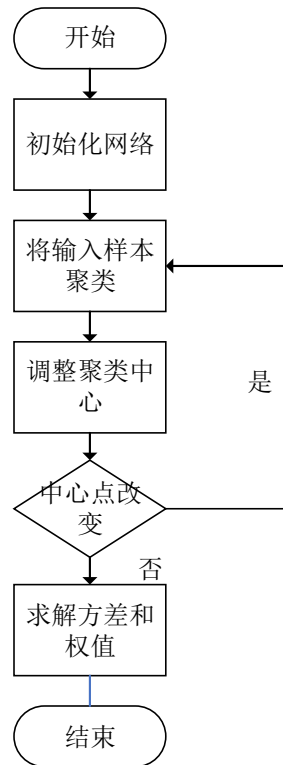


图 2 自组织学习流程图

其中, 求解方差公式为

$$\sigma_i = \frac{c_{max}}{\sqrt{2h}} \quad i = 1, 2, \dots, h$$

式中,  $c_{max}$  是所选取中心之间的最大距离。采用最小二乘法计算隐含层与输出层之间的权值:

$$\omega = \exp\left(\frac{1}{c_{max}^2} \|x_p - c_i\|^2\right) \quad i = 1, 2, \dots, h; p = 1, 2, \dots, P$$

### 5.2.2 问题 2 神经网络的搭建

在本组建模中, 小组通过对第 1 问影响因素的关联度计算, 针对 HRB400B 号钢拟定了主要的 8 项主要因素, 中间隐藏层选择为 10 层, 输出层为 C 和 Mn 的合金收得率,

从而构建了如图所示的神经网络框架：

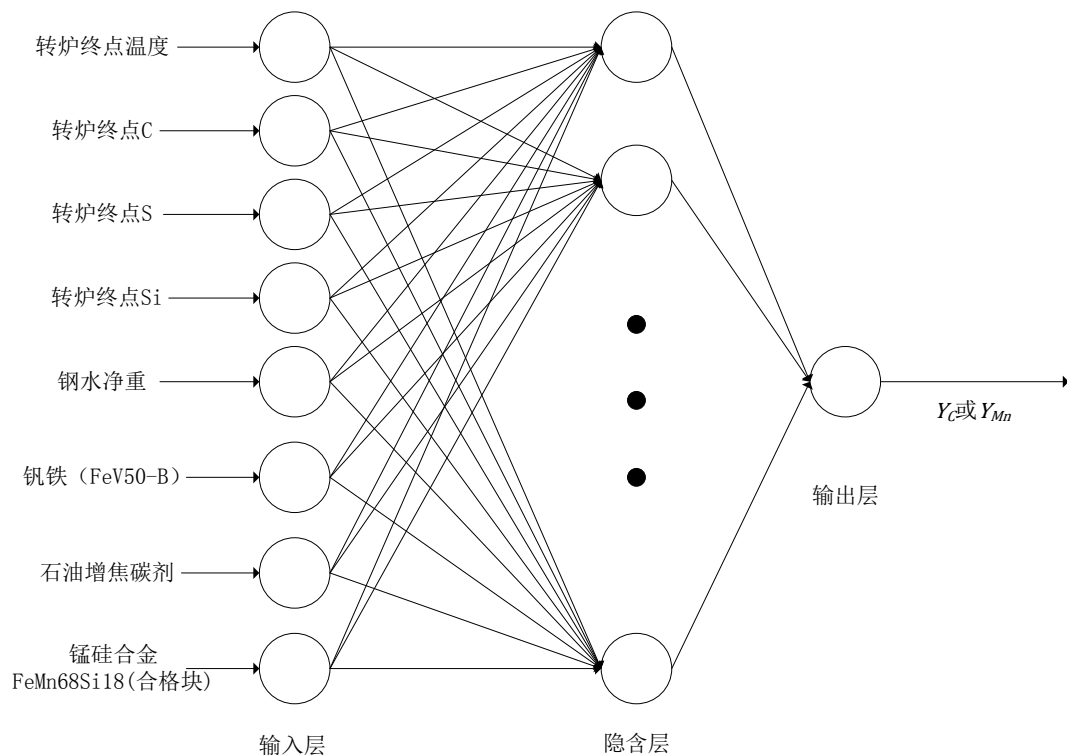


图 3 神经网络模型搭建

### 5.3 合金收得率预测结果

小组成员利用神经网络模型，首先对容量为 140 组的 HRB400B 号钢进行了模型的求解和预测，由于神经网络中隐藏层的构建属于黑箱，无法直接获取和观测，因此小组首先分别仅对 C 元素和 Mn 元素的合金收得率单独进行了训练，然后将 C、Mn 元素结合起来作为目标量整体训练。其中训练模型、确认模型和预测检验模型使用的数据量比例为 70:15:15，即其中的 98 组数据用于训练，21 组用于确认模型，21 组用于检测模型预测的准确率。

衡量模型给出的预测准确率，我们主要采用两个常用参数，一是 MSE，即均方误差，是指参数估计值与参数实际值之差平方的期望值，数值越小，表示估计值和实际值的差异越小；另一个是回归 R 值，表征的是要求的输出和实际值之间的相关性。R 值为 1，表示关系密切，R 值为 0，表示二者关系随机，没有相关性，因此预测结果的 R 值越高，表示预测准确率越好。

#### 5.3.1 单独分析

分别将 C 元素收得率和 Mn 元素收得率设置为神经网络输出端的唯一目标值，提取的 C 元素收得率和 Mn 元素收得率分析的预测结果预测水平如下表：

单独分析		
	C 的收得率预测	Mn 的收得率预测
均方误差	0.0013372	0.00045217
回归 R 值	0.90033	0.80307

具体的均方误差曲线和预测结果分布如下图所示

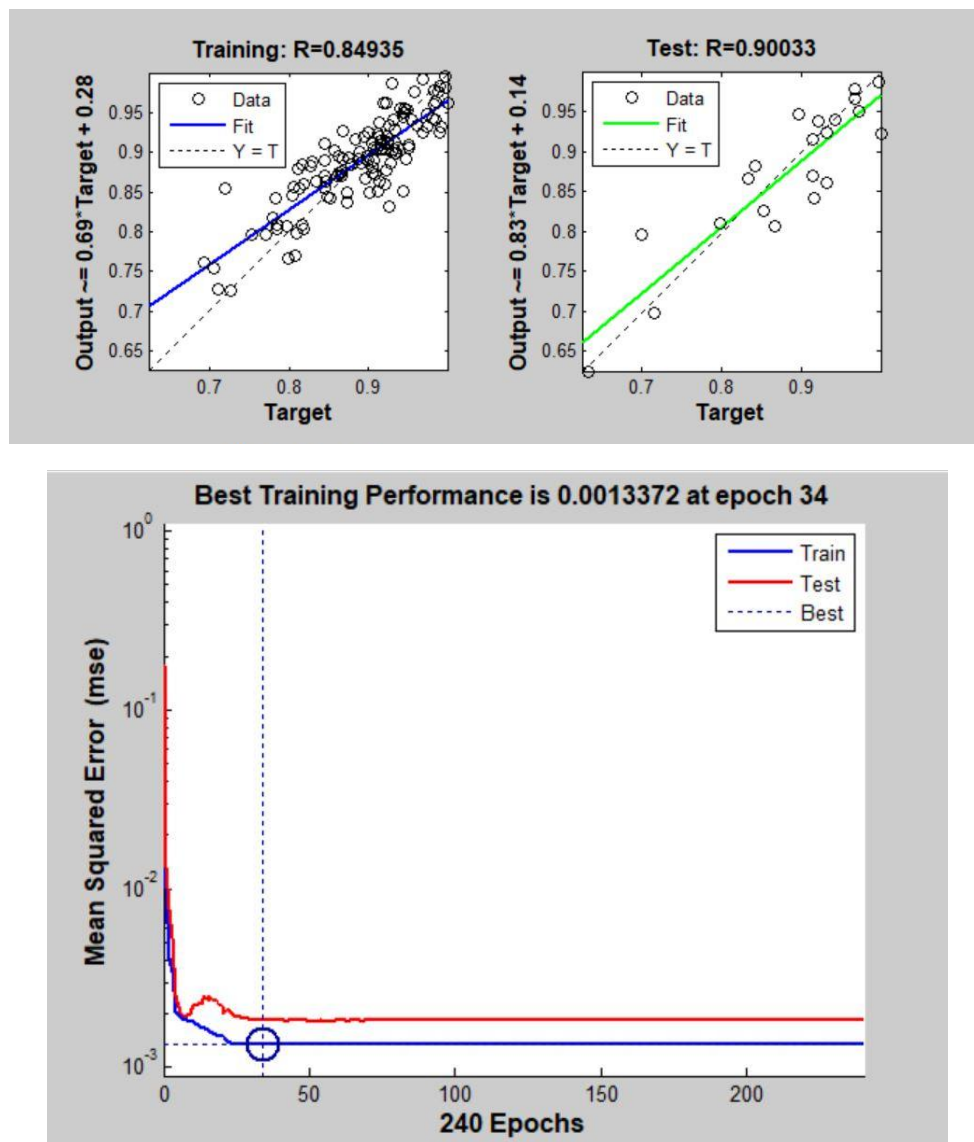


图 4 单输出量 RBF 神经网络预测的 C 元素收得率准确情况

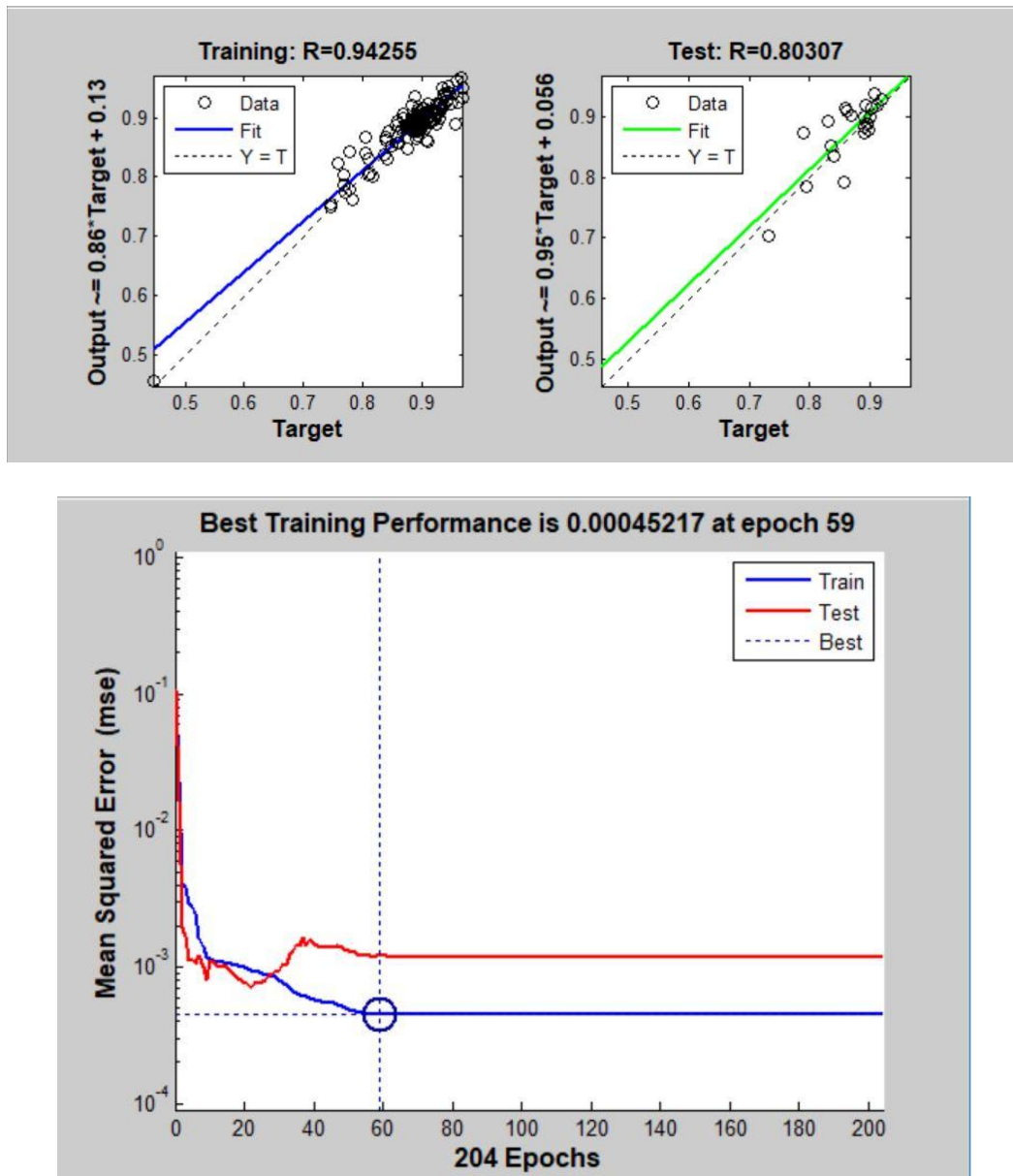


图 5 单输出量 RBF 神经网络预测的 Mn 元素收得率准确情况

### 5.3.2 合并分析

考虑到后续问题的求解过程中需要同时考虑 C 元素和 Mn 元素的收得率，并将建立的模型运用于优化成本中，我们认为还是应当将 C、Mn 两种元素的收得率放到一起进行讨论，给出二者合一的输出模型。

神经网络对 C、Mn 元素收得率的预测效果如图所示：

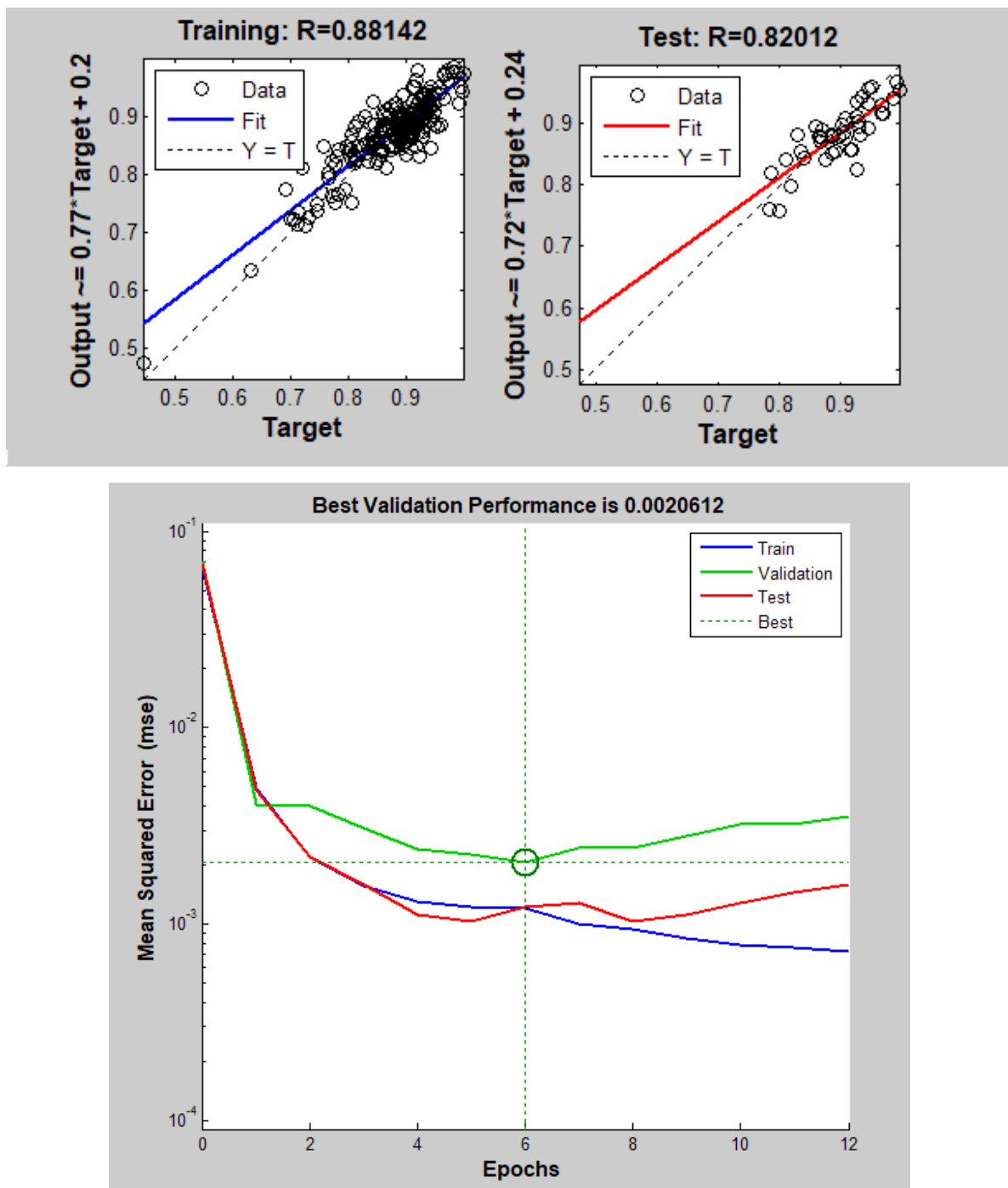


图 6 RBF 神经网络预测的 C、Mn 元素收得率准确情况

## 5.4 粒子群优化算法的引入

### 5.4.1 粒子群算法

粒子群算法(particles warm optimization, PSO)<sup>[4]</sup>是对 Hepper 模拟鸟群运动模型进行了修正, 以使粒子能够飞向解空间, 并在最好解处降落, 从而得到了粒子群优化算法。这种算法同遗传算法类似, 也是一种基于群体叠代的, 但并没有遗传算法用的交叉以及变异, 而是粒子在解空间追随最优的粒子进行搜索。



在粒子群算法中，每个寻优的问题解都被当作一只“鸟”，称为“粒子”，这些粒子都在一个  $D$  维空间进行搜索，且都通过一个 **fitness-function** 确定的适应值来判断目前的位置好坏。这些粒子都拥有记忆功能，可以记住所搜寻到的最佳位置。此外每一个粒子还有一个速度以决定飞行的距离和方向。这个速度根据它本身的飞行经验以及同伴的飞行经验进行动态调整。

假设在  $D$  维的空间中，共有  $m$  个粒子，我们将粒子的位置和速度都在连续的实数空间内进行取值，其中粒子  $i$  位置为  $x_i=(x_{i1},x_{i2},\dots,x_{iD})$ ，粒子  $i$  速度为  $v_i=(v_{i1},v_{i2},\dots,v_{iD})$ ， $(1\leq i\leq m, 1\leq d\leq D)$ ，粒子  $i$  经历过的历史最好位置为  $p_i=(p_{i1},p_{i2},\dots,p_{iD})$ ，群体内（或领域内）所有粒子所经历过的最好位置为  $p_g=(p_{g1},p_{g2},\dots,p_{gD})$ 。

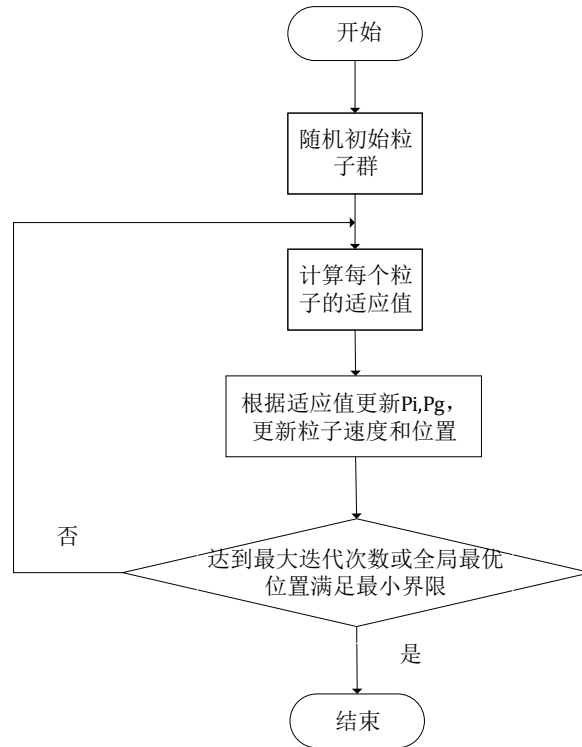


图 7 基本粒子群算法流程图

关于每个粒子的更新速度和位置的公式如下：

粒子  $i$  的第  $d$  维速度更新为

$$V_{id}^{k+1} = \omega V_{id}^k + c_1 r_1 (p_{id}^k - x_{id}^k) + c_2 r_2 (p_{gd}^k - x_{gd}^k)$$

粒子  $i$  的第  $d$  维位置更新为

$$X_{id}^{k+1} = X_{id}^k + V_{id}^{k+1}$$

其中， $c_1$ ， $c_2$ 为学习因子，一般为正值常数，通常取为 2， $r_1$ ， $r_2$ 为随机函数，通常在  $[0,1]$  范围内取值，是该区间内均匀分布的伪随机数， $V_{\max}$ 为粒子速度可以达到的最大

值,  $V_{id}^k$  为第  $k$  次迭代粒子  $i$  飞行速度矢量的第  $d$  维分量,  $X_{id}^k$  为第  $k$  次迭代粒子  $i$  位置矢量的第  $d$  维分量。

$\omega$  为惯性因子, 其值为非负, 用来调节对解空间的搜索能力, 其值较大时, 全局寻优能力强, 局部寻优能力弱; 其值较小时, 全局寻优能力弱, 局部寻优能力强,

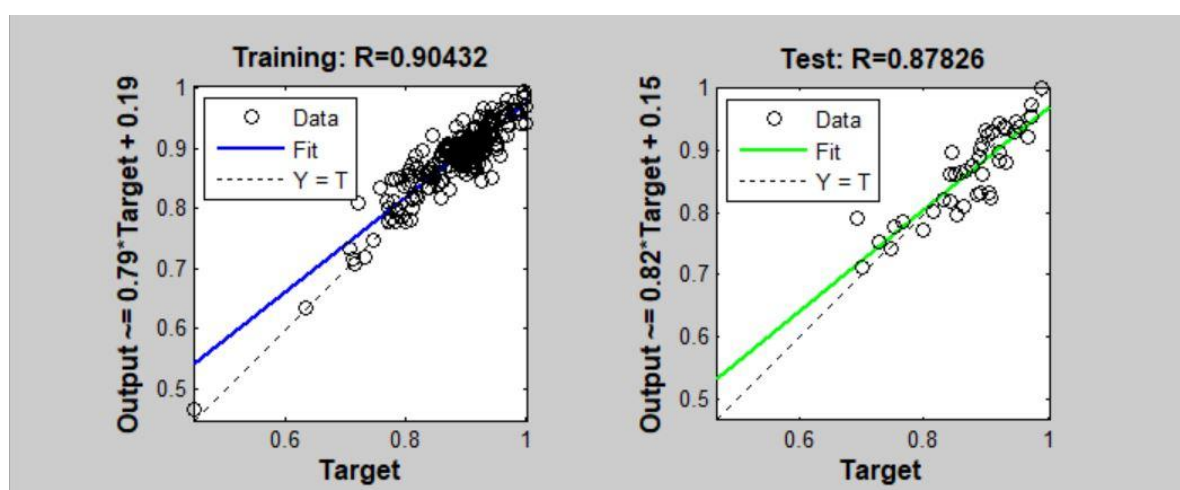
动态  $\omega$  能获得比固定值更好的寻优结果。动态  $\omega$  可在 PSO 搜索中线性变化, 也可以根据 PSO 性能的某个测度函数动态改变。目前采用较多的是线性递减权值 (Linearly Decreasing Weight, LDW) 策略:

$$\omega^{(t)} = \frac{(\omega_{ini} - \omega_{end})(G_k - g)}{G_k} + \omega_{end}$$

式中:  $G_k$  为最大迭代次数,  $\omega_{ini}$  为初始惯性权值,  $\omega_{end}$  为迭代至最大进化代数时的惯性权值, 典型权值为  $\omega_{ini} = 0.9$ ,  $\omega_{end} = 0.4$ ,  $\omega$  的引入, 使 PSO 算法性能有了很大提高, 针对不同的搜索问题, 可以调整全局和局部搜索能力, 也使 PSO 算法更能与实际问题的匹配。

#### 5.4.2 引入粒子群优化后的预测结果

通过引入粒子群优化, 小组对所编的程序进行了修改, 优化后再次运算后得到的 C、Mn 合金收得率数据训练及预测情况如图所示, 可以发现这一结果相比之前有了较大的提升, 误差大幅下降, 预测结果和真值的相关度也有了进步。



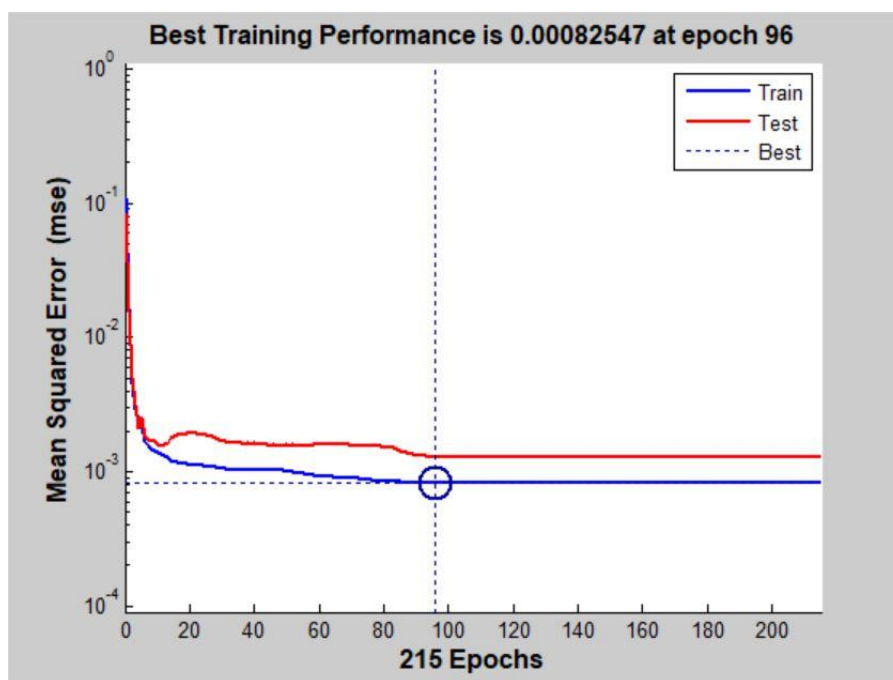


图 8 C、Mn 合金收得率优化后预测结果

小组还将 21 组预测的结果与实际的合金收得率数值进行比较，于是得到如图所示的对照曲线。

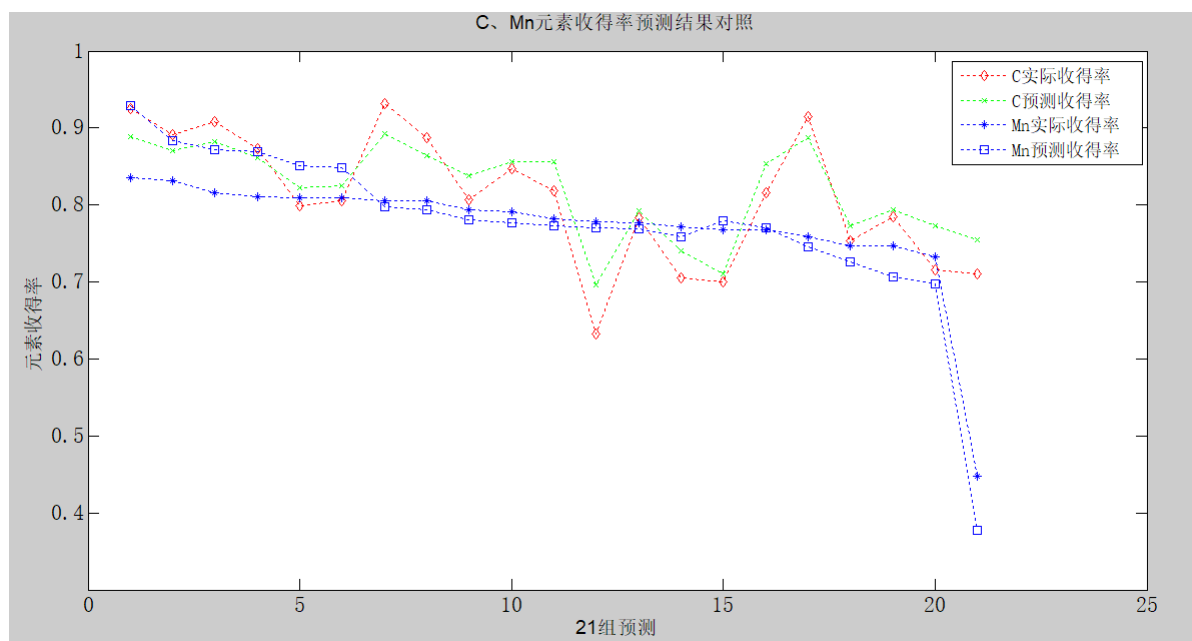


图 9 C、Mn 合金收得率预测结果与实际值的比较

结合图例，我们不难发现，对 C 元素合金收得率的预测值与真实值始终在一定阈值内相互波动，大体能够反映其变化趋势；而 Mn 元素合金收得率的预测则已经能在很大程度上契合实际值的需要，预测效果良好。

## 六、问题 3 的求解

### 6.1 问题 3 的分析

问题 3 是一个比较常见的目标函数优化问题，从问题 2 中的预测模型来看，由于脱氧合金化以后钢品中 C、Mn 元素的连铸正样必须控制在国标之内，因此这就对各项合金料的加入量提出了约束条件，从约束条件出发构建合适的模型，即可求得目标函数的最优解，即使炼钢成本最低的一组各种合金料的加入量。

本题的特别之处在于自变量中，合金料的加入量虽然是直接与目标函数挂钩，但是其约束条件却并不简单，这是因为其中糅合了问题 2 中的预测模型，在给定脱氧合金化进行前钢炉内各项影响条件的前提下，必须把合金收得率作为跳板，构建合金加入量与脱氧合金化过程完成后 C、Mn 元素连铸正样的关系，从而利用连铸正样的元素含量范围作为约束。

### 6.2 问题 3 的建模和求解

#### 6.2.1 目标函数和约束条件的建立

以问题 2 中所求得的 8 项影响钢号为 HRB400B 的 C、Mn 收得率的主要因素作为自变量，可得 C、Mn 收得率分别为：

$$\eta_C = F_1(x_1, x_2, \dots, x_8)$$

$$\eta_{Mn} = F_2(x_1, x_2, \dots, x_8)$$

式中，各自变量的含义如下

$x_1$ : 转炉终点温度

$x_2$ : 转炉终点 C

$x_3$ : 转炉终点 S

$x_4$ : 转炉终点 Si

$x_5$ : 钢水净重

$x_6$ : 钒铁(FeV50-B)质量

$x_7$ : 石油焦增碳剂质量

$x_8$ : 锰硅合金 FeMn68Si18(合格块)质量

事实上，在钢水脱氧合金化之前  $x_1, x_2, x_3, x_4, x_5$  均为已知量，因此上述收得率函数关系可简化为合金收得率与合金料加入量之间的关系，即：

$$\eta_C = f_1(x_6, x_7, x_8)$$

$$\eta_{Mn} = f_2(x_6, x_7, x_8)$$

钢水脱氧合金化之后，C、Mn 元素的含量

$$\omega[C]_{\text{连铸正样}} = \frac{\eta_C \times m_C}{m_{\text{钢水}}} + \omega[C]_{\text{转炉终点}}$$

$$\omega[Mn]_{\text{连铸正样}} = \frac{\eta_{Mn} \times m_{Mn}}{m_{\text{钢水}}} + \omega[Mn]_{\text{转炉终点}}$$

其中， $m_C$ 、 $m_{Mn}$  分别为所加入的合金中 C、Mn 元素的质量，即

$$m_C = 0.0031 \times x_6 + 0.96 \times x_7 + 0.017 \times x_8$$

$$m_{Mn} = 0.664 \times x_8$$

根据钢号为 HRB400B 的主要合金元素含量国家标准

钢号	标准	元素含量				
		C	Si	Mn	P	S
HRB400B	内控区间	0.19-0.25	0.50-0.65	1.30-1.60	≤0.045	≤0.045
	目标值	0.23	0.55	1.45	0.04	0.04

钢水脱氧合金化之后， $\omega[C]_{\text{连铸正样}}$ 、 $\omega[Mn]_{\text{连铸正样}}$  需满足：

$$0.19\% \leq \omega[C]_{\text{连铸正样}} \leq 0.25\%$$

$$1.30\% \leq \omega[Mn]_{\text{连铸正样}} \leq 1.60\%$$

综上，所须满足的约束条件如下

$$\left\{ \begin{array}{l} \eta_C = f_1(x_6, x_7, x_8) \\ \eta_{Mn} = f_2(x_6, x_7, x_8) \\ m_C = 0.0031 \times x_6 + 0.96 \times x_7 + 0.017 \times x_8 \\ m_{Mn} = 0.664 \times x_8 \\ \omega[C]_{\text{连铸正样}} = \frac{\eta_C \times m_C}{m_{\text{钢水}}} + \omega[C]_{\text{转炉终点}} \\ \omega[Mn]_{\text{连铸正样}} = \frac{\eta_{Mn} \times m_{Mn}}{m_{\text{钢水}}} + \omega[Mn]_{\text{转炉终点}} \\ 0.19\% \leq \omega[C]_{\text{连铸正样}} \leq 0.25\% \\ 1.30\% \leq \omega[Mn]_{\text{连铸正样}} \leq 1.60\% \end{array} \right.$$

目标函数为所加入合金的成本：

$$Q = 205000 \times x_6 + 4600 \times x_7 + 8150 \times x_8$$

## 6.2.2 模拟退火算法在模型中的运用

从目标函数中我们可以看到，自变量的总数为 3 个，分别指的是主要影响因素钒铁 (FeV50-B)、锰硅合金 FeMn68Si18(合格块)、石油焦增碳剂等合金料的加入质量，在模型求解时，我们利用模拟退火算法<sup>[5]</sup>的原理，搭建了如下的流程框图：

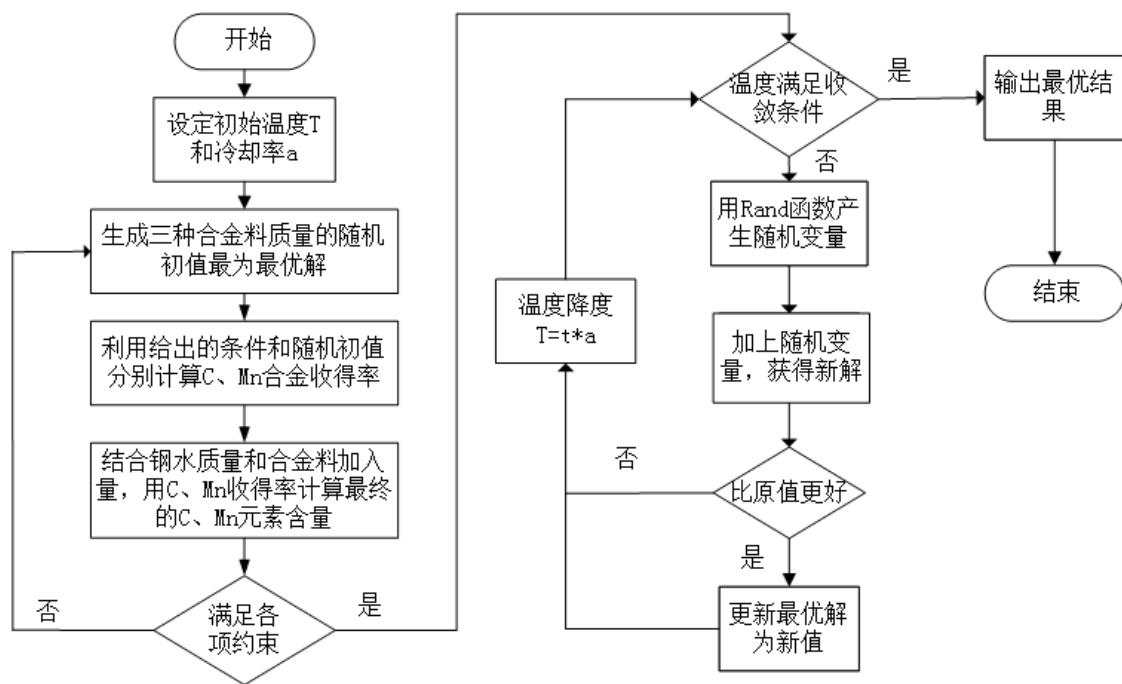


图 10 模拟退火算法原理流程图

### 6.3 问题 3 的结果分析

MATLAB 给出一组针对 140 个历史数据的最优解，其中钒铁(FeV50-B)、石油焦增碳剂、锰硅合金 FeMn68Si18(合格块)分别如下折线图所示：

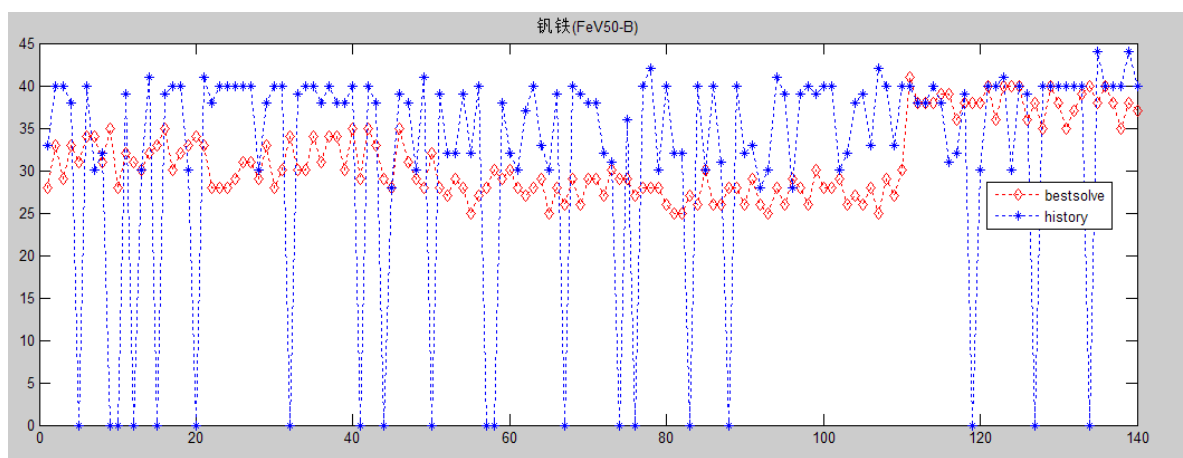


图 11 钒铁(FeV50-B)实际值与最优配料模型结果对比

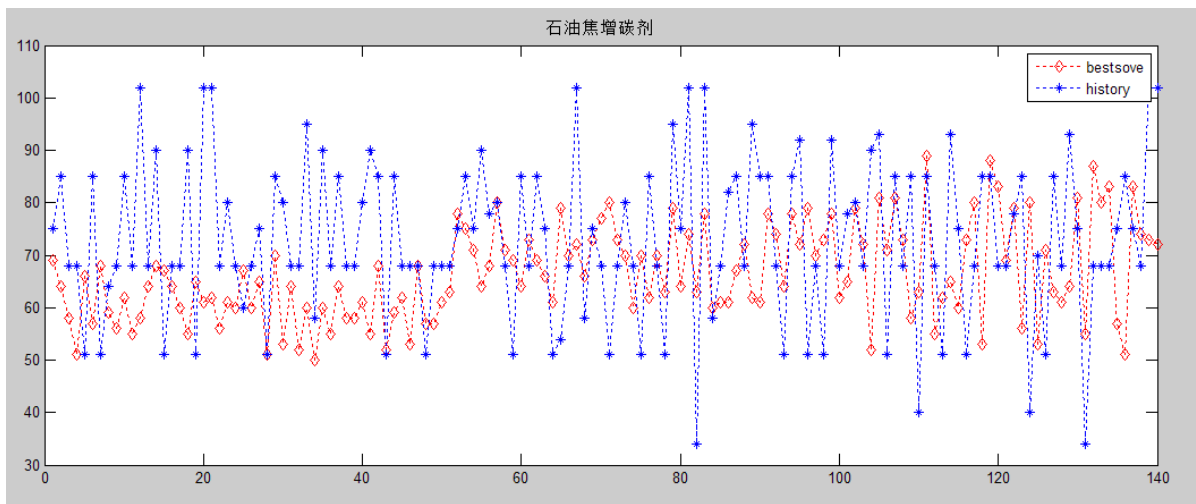


图 12 石油焦增碳剂实际值与最优配料模型结果对比

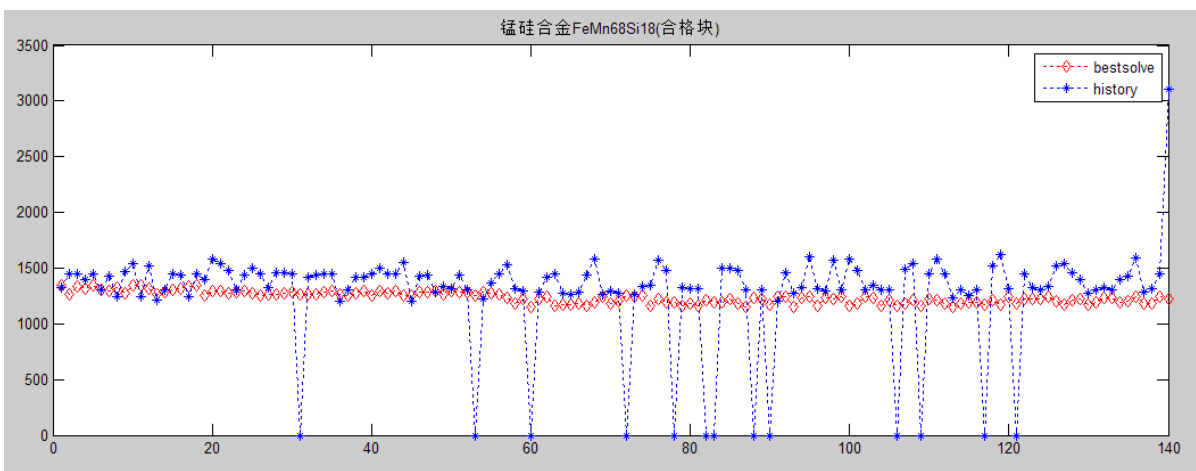


图 13 锰硅合金 FeMn68Si18(合格块)实际值与最优配料模型结果对比

分别观察最优解的合金料投入量，可以发现，三种合金料的用量都比历史数据有了明显的减少，可以认为模拟退火算法给出的最优解符合要求，是可取的。

同时，依据最优解的合金投入量，小组成员还对三种合金投入量优化前后的炼钢总成本进行了计算和对比，140 组炉号的计算结果如下图所示：

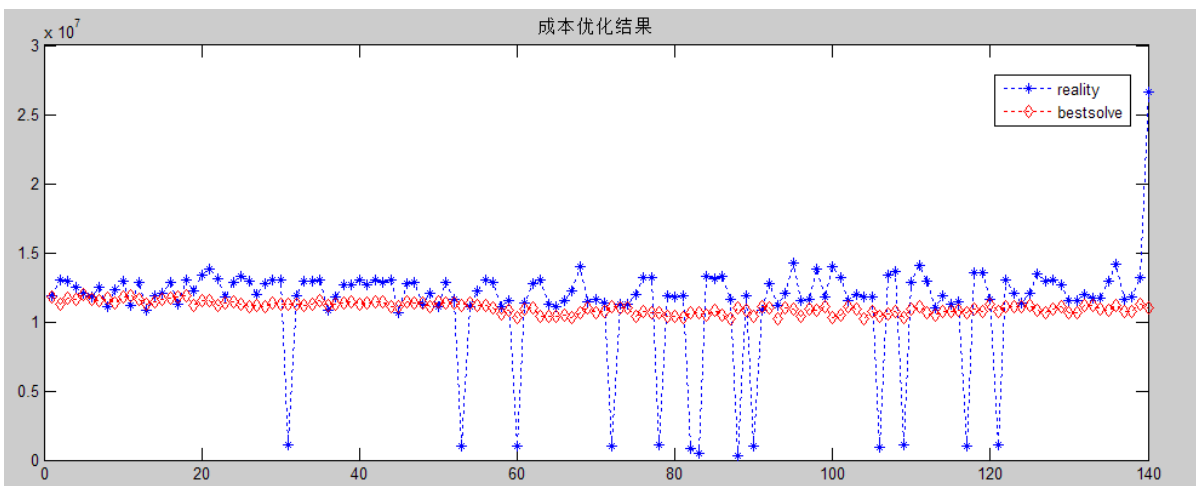


图 14 成本实际值与最优配料模型结果对比

将总成本化为单位钢品的脱氧合金化成本，优化之前三组合金料的成本为

$$Q1 = \frac{\sum_i^{140} 205000 \times m_{\text{钒铁}}(i) + 4600 \times m_{\text{锰硅合金}}(i) + 8150 \times m_{\text{石油焦增碳剂}}(i)}{\sum_1^{140} m_{\text{钢水质量}}(i)}$$

$$= 157.7016 \text{ 元/吨}$$

优化后的成本单价为

$$Q2 = \frac{\sum_i^{140} 205000 \times x_6(i) + 4600 \times x_7(i) + 8150 \times x_8(i)}{\sum_1^{140} m_{\text{钢水质量}}(i)} = 152.8087 \text{ 元/吨}$$

生产每吨钢品所需投入的合金料成本降低了

$$Q1 - Q2 = 157.7016 - 152.8087 = 4.8929 \text{ 元/吨}$$

可见，模拟退火算法根据所建模型的约束条件和目标函数，给出的最优解是有实际意义的，能在合金收得率预测模型的基础上，针对合金料投入成本作出优化。



## 七、建议信

尊敬的炼钢厂领导：

您好！

我们在查阅资料后了解到，脱氧合金化是钢铁冶炼中的重要环节，随着钢铁行业中高附加值钢种含量的提高，为了提高行业竞争力，企业需要通过历史数据，对脱氧合金化所需投入合金的种类和数量进行预测和优化，在保证钢水质量的同时最大限度地降低合金钢的生产成本。我们对贵厂所提供的历史数据进行了分析和研究，以下是我们的研究结果以及几点建议，希望对贵厂今后的发展有所帮助。

首先，我们对贵厂提供的历史数据进行了预处理，将一些错漏数据剔除后，对剩余的 191 组有效数据样本按不同钢号分为四类。为了使研究具有较强的可靠性，我们选取样本容量较大的钢号为 HRB400B（140 组数据）和 HRB400D（30 组数据）的钢来进行研究。通过灰色关联分析，我们得到影响上述两种钢的 C、Mn 收得率的主要因素。

随后，我们基于案例推理和 RBF 神经网络构建了数学模型，根据上述主要影响因素对 C、Mn 的收得率进行了预测。为了提高收得率的预测准确率，我们引入粒子群算法对模型进行了优化。

此外，我们对钢号 HRB400B 进行了重点研究。为了使所投入合金料的成本最低，我们对影响钢号 HRB400B 中 C、Mn 收得率的三种主要合金料投入量进行了优化，采用模拟退火算法得到一组最优解。经检验，贵厂提供的历史数据中，上述三种合金投入的成本为 157.7016 元/吨，而该组最优解中，上述三种合金投入的成本为 152.8087 元/吨，比原始成本节省了 4.8929 元/吨。

经过以上研究，我们总结出以下几点建议供您参考：

1. 建议贵厂提高检测设备的稳定性，使各项历史数据更加完整和准确，避免出现过多数据缺失与数据错误的情况，以便实现总结、研究和生产优化工作；

2. 建议贵厂建立动态数据库，不断更新历史数据，提高合金元素收得率预测的准确性，从而更好地为今后的生产实践提供指导；

3. 根据我们建立的成本优化模型及优化算法给出的结果，从宏观的数据分布来看，为了达到国家标准中对 C、Mn 元素含量的要求，建议贵厂在脱氧合金化的过程中适当减少钒铁(FeV50-B)的投入量，更多地投入石油焦增碳剂和锰硅合金 FeMn68Si18(合格块)，以实现成分调配及成本优化。

感谢贵厂对我们研究的信任和支持。

## 八、模型评价与分析

### 8.1 模型的优点

1、将有效数据中不同钢号的钢材聚类讨论，利用灰色关联度分析分开讨论判断其主要影响因素，使得运算结果更加具有针对性，更加贴合生产实际。

2、通过案例推理（CBR）和 RBF 神经网络建立合金收得率预测模型，将有效数据按 14: 3: 3 的比例，分别用于建立案例库训练模型，模型确认和预测结果检验。此外本文继续运用粒子群算法（PSO）对该模型进行优化，进一步加快了计算速度并提高了元素收得率的预测准确率。

3、运用模拟退火算法对多目标优化问题进行求解，对给出的初值不敏感，可以在约束内使用随机变量进行搜索，经过足够次数的迭代能得到比较稳定的全局最优解。

### 8.2 模型的缺点

1、在合金收得率预测模型中，对有效数据样本容量具有较高要求，对于样本容量较为充足的低合金 HRB400B、HRB400D 等型号钢材，具有较强的鲁棒性，可以较好地预测，而样本容量不足甚至无样本的普碳 Q235 等型号钢材则无法较好地推断。

2、在最优配料模型中，只考虑到 C、Mn 两种元素对应合金料来优化计算投入成本，因此可能对 Si 元素的含量产生一定的影响，与国家标准产生一定的偏差。

### 8.3 模型的可推广性分析

1、本文根据灰色关联度分析得出的影响元素合金收得率的主要因素，可以对厂家的生产实际给予指导作用。

2、本文提出的关于合金收得率预测模型在经过粒子群算法优化后，预测结果检验满足案例相似度阈值的比例达到 90% 以上，可以推广到炼钢厂的规划调度中。

3、本文给出的最优配料模型，可以实现在满足国家标准对钢材各元素含量要求的前提下，实现成分调配及成本优化，达到钢厂利润最大化的目的。

## 九、参考文献

- [1]杨凌志,王学义,王志东,王振祥.基于收得率动态库的合金加料优化模型[J].北京科技大学学报,2014,36(S1):104-109.
- [2]樊悦.LF 炉合金添加系统的建模与优化[D].东北大学,2013.
- [3]徐喆.钢包精炼炉合金添加量的优化设定与应用[D].东北大学,2012.
- [4]付攀文,庞科旺.粒子群优化 RBF 神经网络谐波电流检测方法研究[J].信息技术,2019(03):79-82.
- [5]蒋美云.基于模拟退火算法优化的 BP 神经网络预测模型[J].软件工程,2018,21(07):36-38.

## 十、附录

附录一 C Mn 元素合金收得率计算结果（见附件）

附录二 模型建立过程中用到的 matlab 代码