

响应面法和一维卷积神经网络优化微波碳热还原低品位钛精矿工艺的研究

杨彪^{1,2,3*}, 母其海^{1,3}, 朱娜^{1,3}, 邓卓^{1,3}, 刘志邦^{1,3}

- (1.昆明理工大学信息工程与自动化学院, 云南昆明 650500;
2.昆明理工大学非常规冶金教育部重点实验室, 云南昆明 650093;
3.昆明理工大学云南省人工智能重点实验室, 云南昆明 650500)

摘要:微波碳热还原低品位钛精矿过程中铁金属化率受到诸多因素的影响,其工艺参数难以寻优。针对微波碳热还原低品位钛精矿工艺过程中配碳量、还原温度、保持时间对铁金属化率的影响,采用响应面法和神经网络建立相应的响应面优化模型和一维卷积神经网络预测模型,对还原过程进行分析及工艺参数寻优。研究表明,铁金属化率随还原温度和保持时间的增加而增大,配碳量对还原铁金属化率的影响呈现先增加后降低的趋势。响应面法得出最佳工艺操作条件为还原温度 1 091℃、保持时间 76 min、配碳量 10%,此条件下铁金属化率为 97.672 5%。在工艺参数范围内,一维卷积神经网络模型能有效预测结果,为后续生产过程提供理论指导。

关键词:微波;钛精矿;响应面法;神经网络;优化

中图分类号:TF111;TD98

文献标志码:A

文章编号:0253-4320(2021)S-0134-05

DOI:10.16606/j.cnki.issn.0253-4320.2021.S.027

Optimization of microwave carbothermal reduction of low-grade ilmenite concentrate by response surface method and one-dimensional convolution neural network

YANG Biao^{1,2,3*}, MU Qi-hai^{1,3}, ZHU Na^{1,3}, DENG Zhuo^{1,3}, LIU Zhi-bang^{1,3}

- (1.Faculty of Information Engineering and Automation, Kunming University of Science and Technology, Kunming 650500, China; 2.The Key Laboratory of Unconventional Metallurgy of The Ministry of Education, Kunming University of Science and Technology, Kunming 650093, China; 3.Yunnan Provincial Key Laboratory of Artificial Intelligence, Kunming University of Science and Technology, Kunming 650500, China)

Abstract:The conversion rate of iron in the process of microwave carbothermal reduction of low-grade ilmenite concentrate is affected by many factors, and the process parameters are difficult to be optimized. In view of the influences of the proportion of coke, reduction temperature and holding time on the metallization rate of iron in the process of microwave carbothermic reduction of low-grade ilmenite concentrate, a response surface optimization model and a one-dimensional convolution neural network predictive model are respectively built by means of response surface method and neural network, and used to analyze the reduction process and optimize the process parameters. Results show that the metallization rate of iron increases with the increase of reduction temperature and holding time. With the increasing proportion of coke, the metallization rate of iron increases first and decreases then. The optimum operating conditions obtained from response surface method are as follows: the reduction temperature is at 1,091℃, the holding time is 76 min and the proportion of coke is 10%, under which the metallization rate of iron can reach 97.672 5%. Within the ranges of process parameters, using one dimensional convolutional neural network can effectively predict the results and provide theoretical guidance for the subsequent production process.

Key words: microwave; ilmenite concentrate; response surface method; neural network; optimization

微波加热具有快速高效和绿色节能环保等优点,在材料处理、化工、食品、制药和冶金等领域得到广泛应用。其中应用于冶金领域涉及微波煅烧和烧结、微波干燥^[1]、微波还原以及微波浸出等多个方面。微波碳热还原低品位钛精矿过程中,铁金属化

率受到还原温度、氧化条件、钛精矿的粒度、添加剂种类、配碳量和保持时间等诸多因素影响^[2],为了提高低品位钛精矿的综合利用率,选取合适的还原工艺参数至关重要。在碳热还原工艺参数允许的范围内,如何选取一组最优参数组合是微波碳热还原

收稿日期:2021-01-12;修回日期:2021-04-09

基金项目:国家自然科学基金资助项目(61863020)

作者简介:杨彪(1974-),男,博士,教授,主要从事复杂过程的优化和控制、多智能体的协调输出与分布式协同控制、微波能等新能源的优化与评估、多物理场耦合软测量及数值计算等研究,通讯联系人,ybiaocn@163.com。

低品位钛精矿生产富钛料过程中的重要工作。传统方法的实验过程需要操作人员根据经验反复调整参数,造成时间和资源的浪费且工艺参数难以寻优。因此,为了获得高转化率、高效率的还原工艺,针对微波碳热还原低品位钛精矿过程中对铁金属化率影响较大的还原温度、保持时间和配碳量3个参数进行优化是必要的。

响应面法(RSM)能对各种工艺过程进行分析,寻找最佳条件以提供理想的响应并减少实验次数,是融合建模和过程优化、应用于工程问题建模和分析的数学统计技术,在诸多领域得到广泛应用^[3-6]。在生产过程中,工艺参数和输出响应之间往往具有复杂的映射关系,对回归模型的精度要求较高,否则难以开展进一步的参数优化。机器学习领域中的一些算法,如神经网络及其遗传算法等智能优化算法对解决这种复杂映射下的回归问题提供了新的思路。采用机器学习方法预测工艺参数已成为一种趋势^[7-15]。一些研究者采用响应面法和神经网络结合对微波萃取蓝莓花青素^[16]、微波干燥富硒渣^[17]、同轴送粉激光熔覆^[18]等工艺进行优化研究,取得一定成果。

本文基于RSM和一维卷积神经网络(1D CNN)模型对微波碳热还原低品位钛精矿工艺参数进行预测和优化研究。采用RSM定量描述铁金属化率与工艺参数(还原温度、保持时间和配碳量)之间的关系并建立RSM优化模型,得出最佳操作条件;采用1D CNN模型预测还原过程的铁金属化率,并与RSM优化模型预测结果进行对比。

1 实验部分

1.1 实验材料

采用攀枝花地区某选矿厂的低品位钛精矿作为实验材料,主要包含钛铁矿、铁氧化物以及脉石,其主要化学成分如表1所示。

表1 钛精矿主要化学成分

| 成分 | TiO ₂ | TFe | Fe ₂ O ₃ | FeO |
|--------|------------------|-------|--------------------------------|--------------------------------|
| 质量分数/% | 38.36 | 27.36 | 5.48 | 30.27 |
| 成分 | CaO | MgO | SiO ₂ | Al ₂ O ₃ |
| 质量分数/% | 4.32 | 6.03 | 10.02 | 1.76 |

1.2 实验方法

向钛精矿粉中加入5%~15%的煤粉和5%~10%的水玻璃进行混合。在直径1 000 mm、边高150 mm的圆盘造球机上将上述含碳钛精矿磨为球

状,球团直径为20 mm,于150℃下对球团进行烘干。将含碳钛精矿球团放入能变功率自动控温的微波管式炉中进行加热还原,该实验环境的保护气氛为氮气,馈入的微波功率为3 kW,并采用热电偶对温度进行测量。微波管式炉的工作连接图如图1所示。

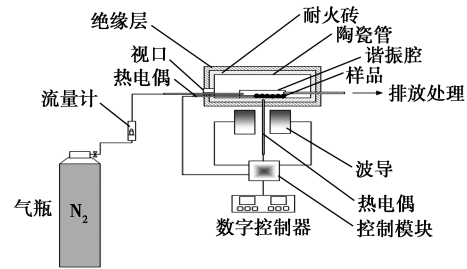


图1 还原装置工作连接图

1.3 铁金属化率的计算

铁金属化率用式(1)计算。

$$\eta_{\text{Fe}} = (M_{\text{Fe}}/T_{\text{Fe}}) \times 100\% \quad (1)$$

式中: M_{Fe} 为还原产物中金属铁的含量,%; T_{Fe} 为还原产物中全铁的含量,%。

1.4 基于中心组合方法的实验设计

采用Design Expert 7.1.3软件,以还原温度(A)、保持时间(B)、配碳量(C)作为自变量,铁金属化率(Y)为响应值,由中心组合实验设计原理设计3因素5水平RSM分析实验,表2为影响因素各因子水平表。

表2 RSM分析因子和水平表

| 主要影响因素 | 代号 | 水平 | | | | |
|----------|----|--------|-----|------|------|-------|
| | | -1.682 | -1 | 0 | 1 | 1.682 |
| 还原温度/℃ | A | 832 | 900 | 1000 | 1100 | 1168 |
| 保持时间/min | B | 26.4 | 40 | 60 | 80 | 93.6 |
| 配碳量/% | C | 6.6 | 8 | 10 | 12 | 13.4 |

2 结果与讨论

2.1 RSM优化模型

2.1.1 回归模型的建立与分析

按表2实验因素水平的取值范围,获得20组实验样本,结果见表3。

表3 中心组合设计实验的变量和对应测量结果

| 实验号 | 还原温度(A)/℃ | 保持时间(B)/min | 配碳量(C)/% | 铁金属化率(Y)/% |
|-----|-----------|-------------|----------|------------|
| 1 | 832.00 | 60.00 | 10.00 | 78.00 |
| 2 | 1000.00 | 60.00 | 10.00 | 90.00 |
| 3 | 1168.00 | 60.00 | 10.00 | 94.00 |

续表

| 实验号 | 还原温度 (A)/°C | 保持时间 (B)/min | 配碳量 (C)/% | 铁金属化率 (Y)/% |
|-----|----------------|-----------------|--------------|----------------|
| 4 | 1000.00 | 60.00 | 10.00 | 90.00 |
| 5 | 1100.00 | 40.00 | 12.00 | 82.00 |
| 6 | 1000.00 | 60.00 | 10.00 | 90.00 |
| 7 | 1100.00 | 40.00 | 8.00 | 86.00 |
| 8 | 900.00 | 40.00 | 8.00 | 61.00 |
| 9 | 1000.00 | 60.00 | 10.00 | 90.00 |
| 10 | 900.00 | 80.00 | 12.00 | 80.00 |
| 11 | 1000.00 | 93.60 | 10.00 | 95.00 |
| 12 | 1000.00 | 60.00 | 6.60 | 71.00 |
| 13 | 1000.00 | 26.40 | 10.00 | 68.00 |
| 14 | 1100.00 | 80.00 | 12.00 | 96.00 |
| 15 | 1000.00 | 60.00 | 10.00 | 90.00 |
| 16 | 900.00 | 80.00 | 8.00 | 84.00 |
| 17 | 900.00 | 40.00 | 12.00 | 63.00 |
| 18 | 1000.00 | 60.00 | 10.00 | 90.00 |
| 19 | 1100.00 | 80.00 | 8.00 | 93.00 |
| 20 | 1000.00 | 60.00 | 13.40 | 86.00 |

通过对表 3 数据的分析,得到铁金属化率对还原温度、保持时间和配碳量的多重二次回归方程如式(2)所示。

$$Y = -370.1097 + 0.45562A + 2.50372B + 21.26934C - 0.0011875AB + 0.000625AC + 0.003125BC - 0.000160197A^2 - 0.00798239B^2 - 1.0634C^2 \quad (2)$$

表 4 为对铁金属化率回归方程的方差分析及显著性检验,表 5 为模型可信度分析结果。由表 4 的方差分析结果可知,该模型的适用显著值为 14.47,表明采用二次项模型分析实验数据可信度好^[19]。

表 4 铁金属化率二次模型方差分析

| 来源 | 平方和 | 自由度 | 均方差 | F 值 | P 值 | 显著性 |
|----------------|---------|-----|--------|----------|---------|-----|
| 模型 | 1969.33 | 9 | 218.81 | 14.47 | 0.0001 | ** |
| 还原温度(A) | 673.54 | 1 | 673.54 | 44.54 | <0.0001 | ** |
| 保持时间(B) | 829.09 | 1 | 829.09 | 54.83 | <0.0001 | ** |
| 配碳量(C) | 36.17 | 1 | 36.17 | 2.39 | 0.1530 | |
| AB | 45.12 | 1 | 45.12 | 2.98 | 0.1148 | |
| AC | 0.13 | 1 | 0.13 | 0.008266 | 0.9294 | |
| BC | 0.13 | 1 | 0.13 | 0.008266 | 0.9294 | |
| A ² | 36.98 | 1 | 36.98 | 2.45 | 0.1489 | |
| B ² | 146.92 | 1 | 146.92 | 9.72 | 0.0109 | * |
| C ² | 260.75 | 1 | 260.75 | 17.24 | 0.0020 | * |
| 残差 | 151.22 | 10 | 15.12 | | | |
| 失拟项 | 151.22 | 5 | 30.24 | | | |
| 纯误差 | 0 | 5 | 0 | | | |

注:P 值是方差齐性检查结果,**表示差异极显著(P<0.0001),*表示差异显著(P<0.05)。

表 5 模型可信度分析

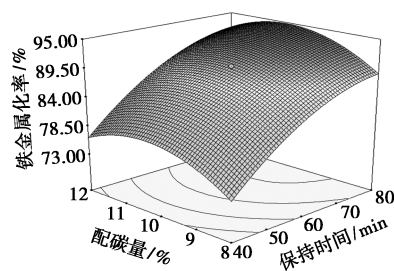
| 参数 | 数值 |
|--|--------|
| 决定系数(R ²) | 0.9287 |
| 调整决定系数(R ² _{adj}) | 0.8645 |
| 模型精密性(Adeq precision) | 12.690 |
| 变异系数(CV)/% | 4.64 |

由表 4、表 5 可知,A、B 的 P 值均小于 0.0001,为极显著变量;B²、C² 的 P 值均小于 0.05,为显著变量;C、AB、AC、BC、A² 的 P 值均大于 0.1,为较不显著变量。3 个因素对铁金属化率的影响显著性按大小排序依次为还原温度>保持时间>配碳量。3 个因素之间交互作用都不显著,表明变量独立性较强。模型的决定系数(R²)为 0.9287,调整决定系数(R²_{adj})为 0.8645,变异系数(CV)为 4.64%(<10%),精密性(Adeq precision)为 12.69(>4),说明该模型具有较高的可信度和精密性,反映了预测值与实验值之间具备较好的相关性。综上,使用该模型对微波碳热还原低品位钛精矿工艺的实验条件进行优化分析是精确有效的。

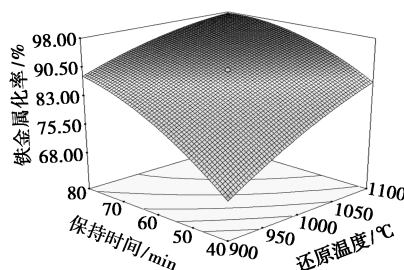
2.1.2 响应曲面分析与优化

图 2 所示为根据实验回归方程得到模型的响应曲面及其等高线图。

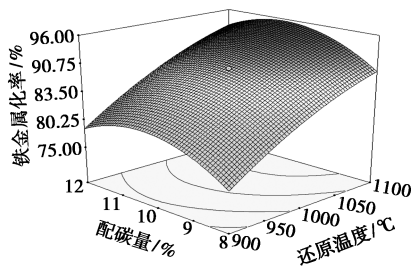
图 2(a)~2(c)直观反映了 3 个变量间的交互作用及其对铁金属化率的影响。等高线越密集,拟合曲面坡度越大说明该因素的影响越显著^[20]。由图 2(a)可知,在恒定还原温度和保持时间条件下,铁金属化率随配碳量的增加呈现先增加后减少的趋



(a) 保持时间和配碳量的交互关系



(b) 还原温度和保持时间的交互关系



(c) 还原温度和配碳量的交互关系

图 2 微波碳热还原过程中铁金属化率的响应曲面图

势,铁金属化率受配碳量影响较不显著;由图 2(b)、图 2(c)可知,当还原温度和配碳量保持一定时,铁金属化率随着保持时间的增加而增加,在一定的保持时间和配碳量条件下,铁金属化率随着还原温度的升高而增加,铁金属化率受还原温度与保持时间影响显著。获得较高铁金属化率需要还原温度与保持时间均处于较高水平。

在自变量因素水平范围内对二次回归方程进行分析可得铁金属化率的最佳操作条件为还原温度 1 091℃、保持时间 76 min、配碳量 10%,此条件下铁金属化率为 97.672 5%。

2.2 基于 1D CNN 的铁金属化率预测模型

卷积神经网络(CNN)是一种能较好地处理非线性问题从输入到输出的非线性映射。相比全连接神经网络,卷积神经网络具有模型复杂度低、训练时间短等优点。

1D CNN 结构包括输入层、卷积层、池化层、全连接层和输出层等部分。神经网络通过交替使用卷积层和池化层,从输入信号中自动逐层提取特征,最后将提取的特征送入全连接层和输出层。

2.2.1 1D CNN 模型结构

图 3 为根据输入数据构造的 1D CNN 模型结构图,其中 C1、C2 为卷积层,由于特征较少故无须采用池化层,D1、D2 为全连接层。输入数据经 C1、C2 层卷积后将数据平铺为一维数据,依次输入全连接层 D1、D2,并引入激活函数 ReLU 使网络具有逼近非线性函数的能力,最后获得对微波碳热还原过程的铁金属化率预测值。

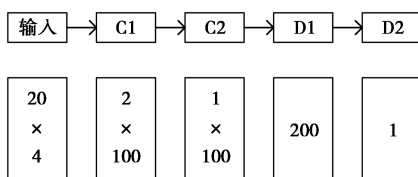


图 3 1D CNN 模型结构

2.2.2 实验结果及分析

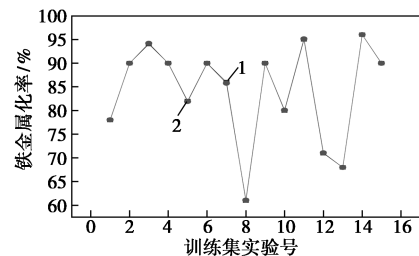
选取表 3 RSM 得出的 20 组实验数据作为数据集,训练集采用前 15 组样本数据,测试集采用后 5 组数据。C1、C2 卷积层的卷积核数量均为 100,大小分别为 2 和 1,全连接层神经元的个数为 200,优化器选用 adam,训练时 batch-size 设置为 4,epoch 为 10 000,将样本数据输入模型进行训练。分析 1D CNN 预测模型,以均方根误差(RMSE)来反映实验值与预测值间的误差;用 R^2 评价预测模型,其数值大小表示模型预测值与实验值间的相似程度,反映了模型预测值与实验值的符合程度^[21]。RMSE 的值越小, R^2 的值约接近 1,则预测效果越好。RMSE 和 R^2 用式(3)、式(4)表达。

$$RMSE = [(1/n) \sum_{i=1}^n (Y_{i,pre} - Y_{i,exp})^2]^{1/2} \quad (3)$$

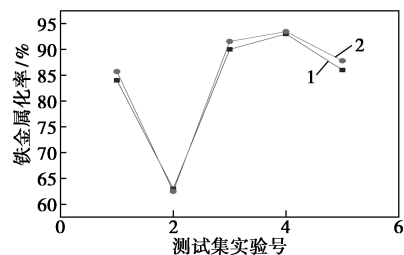
$$R^2 = 1 - [\sum_{i=1}^n (Y_{i,exp} - Y_{i,pre})^2] / [\sum_{i=1}^n (Y_{i,exp} - \bar{Y}_{i,exp})^2] \quad (4)$$

式中: n 为实验点数量; $Y_{i,exp}$ 为实验值; $Y_{i,pre}$ 为模型预测值; $\bar{Y}_{i,exp}$ 为实验值的均值。

对数据集的训练集和测试集的实验值与预测值进行对比分析,如图 4 所示。



(a) 训练集



(b) 测试集

1—铁金属化率实验值;2—1D CNN 模型铁金属化率预测值

图 4 数据集的预测结果

由式(3)、式(4)计算可得 1D CNN 模型测试集测试结果的 R^2 和 RMSE 分别为 0.984 7 和 1.304 6;结合图 4 可知,预测值能够较好地逼近实验值。综上所述,使用该预测模型在微波碳热还原低品位钛精矿工艺过程中对铁金属化率进行预测有良好的适

性和准确性。

将 1D CNN 模型的预测结果与 RSM 优化模型预测结果进行对比,如图 5 所示。图 5 对比结果表明,采用 1D CNN 预测模型研究保持时间、还原温度和配碳量对铁金属化率的影响与 RSM 分析结果一致,验证了 RSM 的二次型优化结果的准确性。且 1D CNN 模型和 RSM 模型的 R^2 分别为 0.984 7、0.935 6,表明 1D CNN 预测模型可以对还原过程进行预测且比 RSM 模型效果更佳。

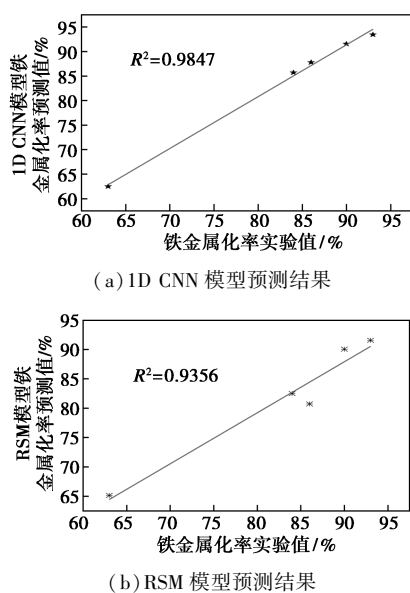


图 5 1D CNN 和 RSM 模型预测结果对比图

3 结论

(1)采用 RSM 优化模型的最佳操作条件为还原温度 1 091℃、保持时间 76 min、配碳量 10%,此条件下铁金属化率为 97.672 5%。在优化模型下,铁金属化率的 R^2 为 0.929,说明综合考虑各因素的组合,RSM 可以在更大的范围内对实验条件进行优化。

(2)1D CNN 模型预测结果与 RSM 分析结果一致,验证了 RSM 模型二次型优化结果的准确性,且 1D CNN 模型和 RSM 模型的 R^2 分别为 0.984 7、0.935 6,1D CNN 模型预测效果比 RSM 模型更佳,表明该模型能有效预测结果,为后续生产过程提供理论指导。

参考文献

[1] Yang B, Liang G, Peng J, *et al.* Self-adaptive PID controller of microwave drying rotary device tuning on-line by genetic algorithms [J]. *Journal of Central South University*, 2013, 20 (10): 2685-2692.

[2] 雷鹰,李雨,彭金辉,等.微波碳热还原攀枝花低品位钛精矿[J].*钢铁钒钛*,2010,(4):5-10.

[3] 鲁玉莹,余黎明,杨加可,等.响应曲面法优化制备 LDHs-CRMA 复合改性沥青及其表征[J].*化工学报*,2020,71(3):1362-1369.

[4] Hendrawan Y, Damayanti R, Khotimah R A H, *et al.* Modeling and optimization of total phenol of tamarillo seed extract using response surface method [C]. *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*, 2020.

[5] Hendrawan Y, Putranto A, Fauziah T R, *et al.* Modeling and optimization of tensile strength of arrowroot bioplastic using response surface method [C]. *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*, 2020.

[6] Shanavas S, Dhas J E R. Parametric optimization of friction stir welding parameters of marine grade aluminium alloy using response surface methodology [J]. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, 2017, 27 (11): 24-34.

[7] Li Y, Peng J, Liu B, *et al.* Prediction model of ammonium uranyl carbonate calcination by microwave heating using incremental improved back-propagation neural network [J]. *Nuclear Engineering and Design*, 2011, 241 (5): 1909-1913.

[8] 李鑫,史振宇,蒋森河,等.神经网络预测刀具磨损和切削力[J].*控制理论与应用*,2018,35(12):30-36.

[9] 范伟,林瑜阳,李钟慎.遗传算法优化的 BP 神经网络压电陶瓷蠕变预测[J].*电机与控制学报*,2018,22(7):91-96.

[10] Liang W, Wang G, Ning X, *et al.* Application of BP neural network to the prediction of coal ash melting characteristic temperature [J]. *Fuel*, 2020, 260: 1-8.

[11] 梁爽,唐晓,江磊,等.GA-BP 神经网络预测钛合金表面粗糙度[J].*机械设计与制造*,2019,(8):265-268.

[12] 王晨阳,段倩倩,周凯,等.基于遗传算法优化卷积长短记忆混合神经网络模型的光伏发电功率预测[J].*物理学报*,2020,69(10):143-149.

[13] 韩林洁,石春鹏,张建超.基于一维卷积神经网络的轴承剩余寿命预测[J].*制造业自动化*,2020,42(3):10-13.

[14] 季宁,张卫星,于洋洋,等.基于最优拉丁超立方抽样方法和 NSGA-II 算法的注射成型多目标优化[J].*工程塑料应用*,2020,48(3):72-77.

[15] 汪海晋,尹宗宇,柯臻铮,等.基于一维卷积神经网络的螺旋铣刀具磨损监测[J].*浙江大学学报(工学版)*,2020,54(5):931-939.

[16] 薛宏坤,刘成海,刘钊,等.响应面法和遗传算法-神经网络模型优化微波萃取蓝莓中花青素工艺[J].*食品科学*,2018,39(16):287-295.

[17] Li Y, Peng J, Liang G, *et al.* Optimization of processing parameters for microwave drying of selenium-rich slag using incremental improved back-propagation neural network and response surface methodology [J]. *Journal of Central South University of Technology*, 2011, 18 (5): 1441-1447.

[18] 赵凯,梁旭东,王炜,等.基于 NSGA-II 算法的同轴送粉激光熔覆工艺多目标优化[J].*中国激光*,2020,47(1):88-97.

[19] 蒋绍阶,冯欣蕊,李晓恩,等.响应曲面法优化制备 PAC-PDM-DAAC 杂化絮凝剂及其表征[J].*化工学报*,2014,65(2):731-736.

[20] 孙志成,韩进,张明杨,等.机械转盘联合超声破解剩余污泥[J].*化工学报*,2016,67(12):5229-5236.

[21] 李莉,张赛,何强,等.响应曲面法在实验设计与优化中的应用[J].*实验室研究与探索*,2015,34(8):41-45. ■