

文章编号: 1001-0920(2009)05-0687-05

基于 Bagging 的多模型钢水温度预报

田慧欣^a, 毛志忠^{a,b}

(东北大学 a. 信息科学与工程学院, b. 流程工业综合自动化教育部重点实验室, 沈阳 110004)

摘要: 针对 LF(Ladle Furnace) 冶炼特点及现有钢水温度预报方法存在的不足, 提出一种基于 Bagging 的多模型预报方法. 该方法利用 Bagging 思想, 有效地将智能方法与机理方法相结合, 在提高智能方法预报精度的同时使得机理模型与智能模型的优势得到互补, 克服了单纯机理模型参数获得不够准确以及单纯智能模型缺乏工艺指导的不足. 另外, 该方法还对 Bootstrap 采样后的子训练数据集进行了主成分分析(PCA), 有效地克服了集成算法固有的子学习机精度与数据集多样性不能兼顾的问题.

关键词: Bagging; 多模型; 主成分分析; 机理模型; 智能模型; 极限学习机

中图分类号: TP206

文献标识码: A

Multi-model prediction of molten steel temperature based on Bagging

TIAN Hui-xin^a, MAO Zhi-zhong^{a,b}

(a. School of Information Science and Engineering, b. Key Laboratory of Integrated Automation of Process Industry of Ministry of Education, Northeastern University, Shenyang 110004, China. Correspondent: TIAN Hui-xin, E-mail: icedew@163.com)

Abstract: A multi-model prediction method based on Bagging is proposed for ladle furnace, aiming at the characters of ladle furnace metallurgic process and the disadvantages of traditional prediction methods. In this method, the Bagging method is used to combine the intelligent method with the mechanism method efficiently. The new method can improve the accuracy of intelligent model and overcome the disadvantages of intelligent model and mechanism method. Furthermore the principal component analysis (PCA) is ingeniously integrated into the new multi-model method for the Bootstrapped data. The problem of ensemble algorithm about ensuring the accuracy of learner and the diversity of data set simultaneously is solved efficiently by using PCA.

Key words: Bagging; Multi-model; Principal component analysis (PCA); Mechanism model; Intelligent model; Extreme learning machine (ELM)

1 引言

随着钢铁工业的不断发展,二次精炼在整个冶炼过程中所占的地位不断提升. LF 炉精炼过程是二次精炼的重要环节,它可以提高钢的质量、扩大品种,在转炉-连铸流程中可以调节转炉与连铸的生产节奏,实现多炉连浇. LF 炉的主要目的是调节钢水的温度及成分,进而控制钢的质量,确保连铸操作的顺利进行,以达到缩短冶炼时间、降低成本、节约能源、提高精度的目的. 在 LF 精炼过程中,钢水温度的准确预报是保证质量、提高效率的关键因素.

目前,国内外开发的钢水温度预报模型主要分

为机理模型和智能模型两大类. 在机理建模方面 Camdali 等利用热力学第二定律对 LF 炉冶炼过程中的能量变化进行分析,得到了钢液的温度变化,进而实现钢水终点温度的预报^[1,2];文献[4,5]从能量变化的角度对 LF 炉进行分析,将对钢水温度的预报转换为对 LF 炉能量变化的计算;武拥军等提出了基于能量平衡的钢水温度预报模型^[3]. 这些机理建模方法可以直观地反映冶炼过程中钢液能量的变化,但由于 LF 精炼过程是一个高温物理化学反应过程,有许多参数在实际生产中无法准确得到,这便使得机理模型无法实现在线温度预报,难以应用于

收稿日期: 2008-04-21; 修回日期: 2008-06-23.

基金项目: 国家自然科学基金项目(60374003).

作者简介: 田慧欣(1978—),女,辽宁抚顺人,博士生,从事复杂工业过程建模、软测量的研究;毛志忠(1961—),男,山东莱州人,教授,博士生导师,从事复杂工业过程建模与控制等研究.

实际生产中,随着人工智能技术的飞速发展,在LF炉钢水预报领域也出现了智能预报模型,该建模方法主要是将与终点温度变化有关的量作为输入,采用神经网络等智能算法形成“黑箱”,从而得到终点温度^[6,7].智能模型可以有效地克服机理模型参数难以确定的缺陷,实现在线预报,但这种模型也存在缺乏工艺指导,过分依赖数据等不足.这些不足严重影响了智能模型的预报精度,使得单纯“黑箱”方法难以为生产现场所采用.

本文针对上述两类钢水温度预报模型的特点及不足,提出一种基于Bagging的多模型钢水温度预报方法.该方法可以有效地将多个模型融合起来,在提高智能方法预报精度的同时使得各个机理模型与智能模型之间的优势得到互补.

2 基于 Bagging 的多模型

基于Bagging的多模型钢水温度预报方法,运用Bagging的思想,根据传统智能模型和机理模型的特点将多个智能模型和机理模型进行融合,从而得到最优的预报结果.下面首先介绍基于LF精炼过程能量平衡的机理模型的建立;然后介绍基于ELM智能模型的建立;最后用Bagging的思想将这些机理模型与智能模型相融合,并在此过程中使用主成分分析(PCA)方法,在保证子学习机多样性的同时确保子学习机的精度,最终得到多模型预报模型.

2.1 机理模型

LF炉精炼过程是一个高温物理化学反应过程.本文以宝钢300吨LF炉冶炼过程为研究对象,从能量平衡的角度出发建立机理模型^[5].以钢水和炉渣为研究体系,利用能量守恒定律计算LF炉的能量平衡,进而得到温度的变化.钢水和炉渣能量的变化主要包括以下几部分:电极输入的电能,炉壁散热,加入合金及渣料对能量的影响和熔池表面(渣面)、炉盖的热损失.

2.1.1 电极输入能量

LF冶炼过程中,熔池通过电极与钢水之间产生的电弧获取能量,钢液表面的炉渣对电弧的埋弧操作保证了熔池能量的获取,即电极加热进入钢液的能量由电极加热功率决定,这部分能量对温度的影响可表示为

$$T_{\text{arc}} = P. \quad (1)$$

式中:为钢液能量吸收系数, P 为电极总加热功率.

2.1.2 炉壁散热

炉壁散热可视为一维非稳态导热过程,有:

初始条件

$$t = 0, T_{\text{Wall}} = T_{\text{Preht}};$$

边界条件

$$t = t, T_{\text{Wall}} = T_{\text{LiqSt}},$$

$$C_p \frac{dT_{\text{Wall}}}{dt} = h(T_{\text{Wall}} - T). \quad (2)$$

式中: T_{Preht} 为炉衬预热后的温度, T_{LiqSt} 为钢水温度, T 为环境温度,为钢水密度(kg/m^3), C_p 为钢液的比热($\text{J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$), h 为传热系数($\text{J}/\text{m}^2 \cdot \text{s}$).由此可得到炉壁散热对钢水温度的影响 T_{Wall} .

2.1.3 合金渣料对能量的影响

合金渣料对能量的影响可表示为

$$T_{\text{add}} = \sum_i W_i Q_i. \quad (3)$$

式中: i 表示一种加入的合金或渣料, W_i 表示加入的第*i*种合金或渣料的重量(kg), Q_i 表示1kg第*i*种合金或渣料的加入对钢水温度的影响(温降系数/ kg). Q_i 可根据表1计算.

表1 300吨LF炉加渣料与合金的温降系数

10 ⁻² / kg			
种类	温降系数	种类	温降系数
高碳铬铁	- 0.95	低碳铬铁	- 0.65
高碳锰铁	- 0.9	低碳锰铁	- 0.75
钼铁	- 0.75	硅铁	+ 0.9
渣料	- 1.0	碳粉	- 2.5
Al	+ 5.0	Ni	- 0.5
FeNb	- 0.35	FeTi	- 0.4
CaSi	- 1.05	FeAl	+ 1.0
HCZl	- 1.0	Al-D	- 0.5
CaO	- 1.0	LCCR	- 0.65

2.1.4 熔池表面(渣面)和炉盖热损失

熔池表面的热损失主要考虑渣面辐射热损失,而渣面的辐射热损失主要由渣的温度、渣量和渣面的表面积决定.这里LF冶炼过程中的渣量(由于包括前一工序中钢包剩余渣量和LF冶炼过程中加入渣量)很难准确得到,渣的温度在传统的机理模型中均用钢水温度代替,同时LF冶炼过程中钢水温度又是一个不断变化的量,因此传统的机理模型很难准确计算熔池表面的热损失.本文将渣面散热与炉盖散热视为一体,通过对炉盖冷却水能量变化的计算得到渣面与炉盖的热量损失.这里冷却水的能量变化与渣面散热有着密切的关系,但不能简单地用冷却水的能量变化代替渣面与炉盖的热量损失.因此,该部分所引起的温度变化可由下式得出:

$$T_{\text{Surf}} = \frac{f_{\text{Surf}} C_w Q_w T_w}{C_p W}. \quad (4)$$

式中: f_{Surf} 为渣面与炉盖的热损失系数, C_w 为冷却水的比热, Q_w 为冷却水的流量, T_w 为冷却水的温

度变化, W 为钢水重量. 这里 f_{Surf} 为经验系数.

2.1.5 总温度变化

可以得到总的钢水和炉渣能量的变化, 从而得到钢水温度的变化

$$T = T_{\text{arc}} + T_{\text{wall}} + T_{\text{add}} + T_{\text{Surf}}. \quad (5)$$

2.2 智能模型

从能量守恒的角度出发, 可将整个 LF 炉冶炼过程视为一个能量守恒系统. 通常, LF 精炼过程是指从钢包进站到钢包出站时间段内的冶炼过程. 但是, 由于钢包进站后初始温度的测量有许多是在供电开始后进行的, 为确保整个系统的能量平衡, 这里将供电前钢水温度的最后一次测量值作为初始温度. 该次测量的时刻作为 LF 炉精炼能量守恒系统的开始时刻. 同样, 终点温度为该系统中最后一次测量的钢水温度, 该测量时刻为 LF 炉精炼的结束时刻. 因此, 从开始时刻到结束时刻所用的时间为 LF 炉精炼的冶炼时间. 分析该时间段内 LF 炉精炼能量平衡系统的能量变化(参考 2.1 节所进行的分析), 可得到能量的变化主要是由电弧加热、LF 炉的热损失以及合金和渣料的加入造成的. 其中电弧加入的能量直接由电弧功率决定; LF 炉的热损失主要是由 LF 炉与周围环境的热交换造成的, 这部分能量损失随着时间的增加而增加, 因此可由冶炼时间间接地反映出来; 合金及渣料造成的能量变化可取其重量通过表 1 计算得到. 综上分析, 可得出影响钢水温度的主要因素为: 冶炼时间、合金及渣料吸放热、初始温度、总的加热电能和钢水重量. 将这些因素作为智能模型的输入, 输出为终点温度.

模型中的智能算法选择 ELM(extreme learning machine)^[8], 是由 Huang 等不久前提出的一种针对单隐含层前馈神经网络(SLFNs)的新算法. 在 ELM 中, 隐含层节点参数(连接输入节点和隐含层节点的权值和隐含层节点的阈值)可以随机产生, 然后分析确定 SLFNs 的输出权值. 在隐含层节点参数被随机选择后, SLFNs 可视为一个线性系统, 这样输出权值便可通过对隐含层输出矩阵的广义逆操作得到.

假设要训练一个 SLFNs, 它有 K 个隐含层节点, 激活函数为 $g(x)$, 训练样本为任意 N 个 (x_i, t_i) . 这里 $x_i = [x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{im}]^T \in R^m, t_i = [t_{i1}, t_{i2}, \dots, t_{in}]^T \in R^n$, 则存在

$$H = T. \quad (6)$$

其中: $H = \{h_{ij}\} (i = 1, \dots, N, j = 1, \dots, K)$ 为隐含层输出矩阵, $h_{ij} = g(w_j \cdot x_i + b_j)$ 为隐含层第 j 个节点的输出; $w_j = [w_{j1}, w_{j2}, \dots, w_{jm}]^T$ 为输入节点到隐含层第 j 个节点的连接权值, b_j 为该节点的阈值;

$w_j \cdot x_i$ 为 w_j 与 x_i 的内积; $W = [w_1, w_2, \dots, w_K]^T$ 为输出权值向量, $b_j = [b_{j1}, b_{j2}, \dots, b_{jm}]^T (j = 1, \dots, K)$ 表示隐含层第 j 个节点到输出节点的权值; $T = [t_1, t_2, \dots, t_N]^T$ 为输出矩阵.

在实际应用中, 隐含层节点数 K 通常比训练样本数 N 小得多. 因此, 训练误差不能精确到零, 但可以逼近一个非零的训练误差. SLFNs 的隐含层节点参数 w_j 和 b_j (输入权值和阈值) 在训练过程中不需调整, 可简单地取随机值. 这样, 式(6)便变成一个线性系统, 输出权值可由下式得到:

$$W = H^+ T, \quad (7)$$

式中 H^+ 表示隐含层输出矩阵 H 的 Moore-Penrose 广义逆.

研究表明, ELM 具有很好的全局搜索能力和简单易行的特点. 在 ELM 中许多非线性激活函数都可以使用, 如 S 型函数、正弦函数和复合函数等. 在 ELM 中还可使用不可微函数, 甚至可以使用不连续的函数作为激活函数. 与传统的梯度学习算法(如 BP 算法)和 SVM 相比, ELM 的学习速度更快, 可以克服传统梯度算法常有的局部极小、过拟合以及学习率选择不合适等问题, 并具有更好的泛化能力. 同时, 使用 ELM 不需要繁琐地确定参数的过程, 这样既可以节省前期准备时间, 又可以很容易地得到合适的参数, 从而提高精度.

2.3 Bagging 多模型

Bagging(Bootstrap Aggregating) 是 Breiman 于 1996 年提出的一种集成技术^[9], 其基础是可重复取样(Bootstrap Sampling), 主要过程如图 1 所示. 每次从训练样本中随机有放回地取出一定数目的样本, 这些样本组成一个新的训练样本集(又称一个袋(Bag)), 重复 T 次后, 用这 T 个样本集训练出 T 个学习机, 最后用投票的方法集成这些学习机.

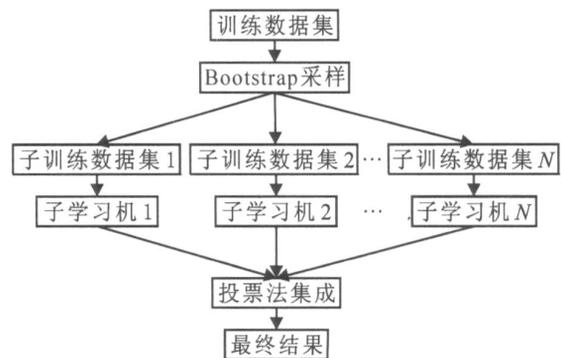


图 1 Bagging 集成算法示意图

传统的 Bagging 算法通常采用相同的学习机, 通过集成来提高单个学习机的性能^[10,11]. 本文将多模型的思想运用于 Bagging 集成建模, 即将机理模

型和智能模型一起作为 Bagging 的子学习机. 这样可以在提高单个子学习机性能的同时将机理模型与智能模型的优势进行互补, 同时可以克服单纯机理模型参数获得不够准确和单纯智能模型缺乏工艺指导的不足. 然而, 在使用集成算法时人们不得不面对这样的问题: 怎样使组成集成算法的子学习机在具有较高精度的同时能保证具有较好的多样性. 本文针对该问题引入了主成分分析方法, 对 Bootstrap 采样后的子训练数据集进行主成分分析, 并保留所有的主成分. 这样既可以在不同的子学习机选择了同样的子训练数据集时, 避免获得同样的主成分系数, 进而鼓励子学习机的多样性; 又能确保每一个子学习机具有较高的精度.

Bagging 多模型建模的具体过程如下:

1) 确定训练数据集. 机理模型数据集 $C = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^N$ 对每个 (x_i, y_i) 都有 n 个输入和 1 个输出, 即 $x \in \mathbb{R}^n, y \in \mathbb{R}$; 智能模型数据集 $D = \{(x_i, y_i)\}_{i=1}^N$ 对每个 (x_i, y_i) 都有 m 个输入和 1 个输出, 即 $x \in \mathbb{R}^m, y \in \mathbb{R}$.

2) 分别确定作为子学习机的机理模型个数 K 和智能模型的个数 L .

3) 用 Bootstrap 方法分别从原数据集 C 和 D 中抽取样本 E_l 和 F_j , 每个子数据集的大小为原数据集的 75%, 这样的子数据集共取 $K+L$ 个, 即 $l = 1, 2, \dots, K, j = 1, 2, \dots, L$.

4) 对每个 E_l 和 F_j 进行 PCA 变换, 并保留所有主成分, 得到新的特征集 E_l 和 F_j .

5) 分别用 E_l 和 F_j 训练对应的子学习机.

6) 用投票法对训练结果进行集成, 得到最终的结果.

该方法可以将多种模型作为子学习机, 在初始化阶段根据模型对训练数据学习的差别确定每个模型作为子学习机的个数. 在前面提到的钢水温度预报问题中, 由于机理模型没有学习功能, 同样作为子学习机的机理模型个数要远小于智能模型的个数. 将 PCA 方法巧妙地运用于该 Bagging 多模型方法中, 因为它分别针对每个子训练集进行 PCA, 而不是针对整个训练数据集使用 PCA, 从而保证了数据集的多样性. 另外, 因为它在 PCA 特征提取的过程中保留了所有的主成分, 因此还可以确保每个子学习机的精度.

3 实验

取宝钢 300 吨 LF 炉 2006 年 6 ~ 11 月的 400 炉生产数据, 随机选取 350 炉数据用来训练模型, 50 炉数据用来检验模型的预报精度. 由于机理模型不具有学习能力, 没有必要选择过多的机理模型作为子学习机. 智能模型子学习机个数的选择需通过实验确定. 经过反复实验, 最终确定 Bagging 多模型中参数 $K=2, L=8$, 即作为子学习机的机理模型为 2

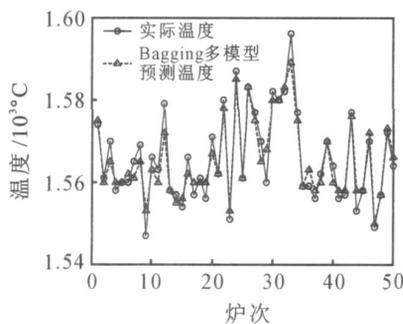


图2 多模型预报温度与实际温度的比较

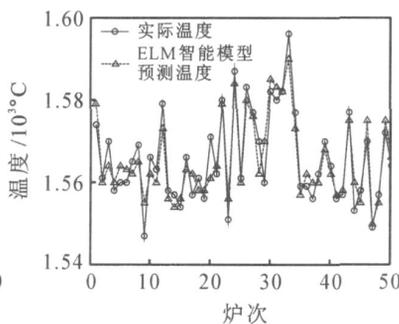


图3 ELM智能模型预报温度与实际温度的比较

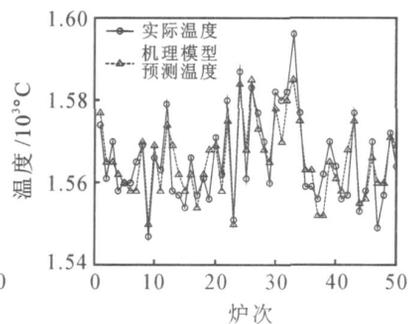


图4 机理模型预报温度与实际温度的比较

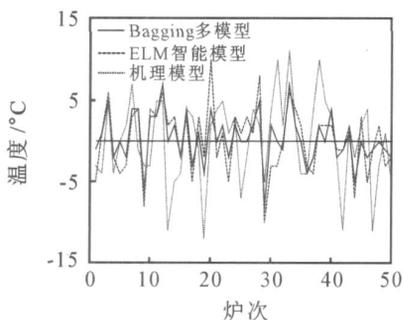


图5 3种方法预报误差的比较

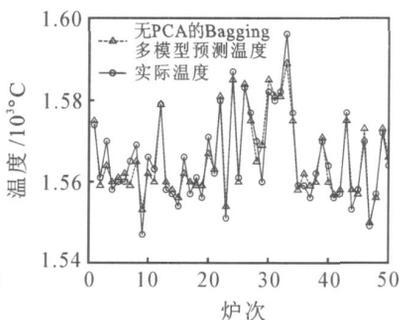


图6 未加入PCA的多模型预报温度与实际温度的比较

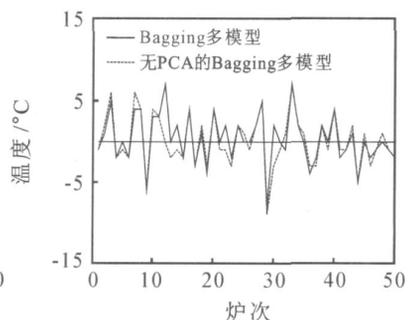


图7 加入PCA与未加入PCA的Bagging多模型预报误差的比较

个,智能模型为 8 个.智能算法 ELM 中隐含层节点个数为 10,激活函数选择 S 型函数.将该方法分别与单纯的机理模型和 ELM 智能模型进行比较,图 2 ~ 图 4 分别为多模型预报方法、单纯 ELM 智能模型预报方法及机理模型预报方法对钢水温度的预报结果和实际温度的比较.图 5 为 3 种钢水温度预报方法预报误差的比较.此外,加入 PCA 的 Bagging 多模型与未加入 PCA 的 Bagging 多模型之间也进行了比较,如图 6,图 7 及表 2 所示.结果表明,PCA 的使用在鼓励子学习机多样性的同时确保了每一个子学习机精度,因此它的加入可以提高整个模型的泛化能力.表 2 为 3 种方法预报钢水温度的比较,用来衡量预报模型的标尺为预报精度和误差均方根 (RMSE),即

$$\text{精度} = N_c / N, \tag{8}$$

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - y_i)^2}. \tag{9}$$

式中: N_c 为检验结果中预报温度与实际温度相差在 ± 5 以内的炉次数, N 为用来检验模型的炉次数.结果表明,基于 Bagging 的多模型钢水温度预报方法的性能远好于传统的智能方法和机理方法,预报误差不大于 ± 5 的炉次大于 90%,完全可以满足实际生产的需要.

表 2 3 种方法对宝钢 300 吨 LF 炉生产数据实验的统计

模 型	精度 / %	RMSE
基于 Bagging 的多模型	92	3.0984
未加入 PCA 的多模型	90	3.1780
ELM 智能模型	86	4.0915
机理模型	82	5.3085

4 结 论

本文针对 LF 炉高温冶炼及物理化学反应复杂的特点,分析了现有的两类钢水温度预报方法(智能方法和机理方法)存在的不足,提出了基于 Bagging 的多模型钢水温度预报方法,并针对集成算法固有的子学习机精度与数据集多样性不能兼顾的问题,在建模过程中巧妙地将 PCA 运用到 Bootstrap 采样后的子训练数据集上.该方法利用 Bagging 思想有效地将智能方法与机理方法结合在一起,在提高智能方法预报精度的同时使得机理模型与智能模型的优势得到互补,克服了单纯机理模型参数获得不够准确和单纯智能模型缺乏工艺指导的不足.PCA 的巧妙使用使得整个算法在保证数据集的多样性的同时能够确保每一个子学习机具有较高的精度.取

宝钢 300 吨 LF 炉 2006 年 6 ~ 11 月 400 炉生产数据对该方法进行了检验,结果表明该方法的性能优于传统的智能模型和机理模型,预报结果完全可以满足实际生产的需要.这种将智能方法与机理方法相结合的多模型思想,还可以运用到存在类似问题的工业过程中.

参考文献(References)

- [1] Unal Camdali, Murat Tunc, Feridun Dikec. A thermodynamic analysis of a steel production step carried out in the ladle furnace [J]. Applied Thermal Engineering, 2001, 21(6): 643-655.
- [2] Unal Camdali, Murat Tunc. Energy and exergy analysis of a ladle furnace[J]. Canadian Metallurgical Quarterly, 2003, 42(4): 439-446.
- [3] 武拥军,姜周华,姜茂发. LF 精炼过程钢水温度预报技术[J]. 东北大学学报, 2002, 23(3): 247-250.
(Wu YJ, Jiang Z H, Jiang M F. Prediction of molten steel temperature in LF refining[J]. J of Northeastern University, 2002, 23(3): 247-250.)
- [4] Unal Camdali, Murat Tunc. Steady state heat transfer of ladle furnace during steel production process[J]. J of Iron and Steel Research, 2006, 13(3): 18-20, 25.
- [5] Nath N K, Mandal K, Singh A K, et al. Ladle furnace on-line reckoner for prediction and control of steel temperature and composition [J]. Ironmaking and Steelmaking, 2006, 33(2): 140-150.
- [6] Sun Y G, Wang D X, Tao B S, et al. An intelligent ladle furnace control system[C]. Proc of the 3th World Congress on Intelligent Control and Automation. Hefei, 2000: 330-334.
- [7] Zabadal J R S, Vilhena I M T M B, Bogado Leite S Q. Heat transfer process simulation by finite differences for online control of ladle furnaces [J]. Ironmaking and Steelmaking, 2004, 31(3): 227-234.
- [8] Huang G B, Zhu Q-Y, Siew C-K. Extreme learning machine: A new learning scheme of feedforward neural networks [C]. Proc of Int Joint Conf on Neural Networks (IJCNN2004). Budapest, 2004, 2: 985-990.
- [9] Breiman L. Bagging predictors[J]. Machine Learning, 1996, 24(2): 123-140.
- [10] Duffy N, Helmbold D. Boosting methods for regression[J]. Machine Learning, 2002, 47(2/3): 153-200.
- [11] Croux C, Joossensa K, Lemmensb A. Trimmed bagging [J]. Computational Statistics and Data Analysis, 2006, 52(9): 362-368.