

Titre: Développement de capteurs virtuels à base de réseaux de neurones récurrents pour un four pilote de réduction d'ilménite
Title: recurrents pour un four pilote de réduction d'ilménite

Auteur: Antony Gareau-Lajoie
Author:

Date: 2025

Type: Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

Référence: Gareau-Lajoie, A. (2025). Développement de capteurs virtuels à base de réseaux de neurones récurrents pour un four pilote de réduction d'ilménite [Mémoire de maîtrise, Polytechnique Montréal]. PolyPublie.
Citation: <https://publications.polymtl.ca/65759/>

 **Document en libre accès dans PolyPublie**
Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: <https://publications.polymtl.ca/65759/>
PolyPublie URL:

Directeurs de recherche: Moncef Chioua
Advisors:

Programme: Génie chimique
Program:

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL

affiliée à l'Université de Montréal

**Développement de capteurs virtuels à base de réseaux de neurones récurrents
pour un four pilote de réduction d'ilménite**

ANTONY GAREAU-LAJOIE

Département de génie chimique

Mémoire présenté en vue de l'obtention du diplôme de *Maîtrise ès sciences appliquées*
Génie chimique

Mai 2025

POLYTECHNIQUE MONTRÉAL
affiliée à l'Université de Montréal

Ce mémoire intitulé :

**Développement de capteurs virtuels à base de réseaux de neurones récurrents
pour un four pilote de réduction d'ilménite**

présenté par **Antony GAREAU-LAJOIE**
en vue de l'obtention du diplôme de *Maîtrise ès sciences appliquées*
a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de :

Gregory PATIENCE, président
Moncef CHIOUA, membre et directeur de recherche
Michel PERRIER, membre

DÉDICACE

*À Réjeanne et Thérèse, mes feus exemples
de force, de bienveillance et de résilience ...*

REMERCIEMENTS

L'expérience d'étude au deuxième cycle que je suis venu vivre à Polytechnique Montréal n'aurait pas été la même sans l'encadrement exemplaire de mon directeur de recherche, Moncef. On m'a présenté à ce professeur en raison de ses compétences de recherche reconnues dans le domaine du contrôle des procédés. Il m'a accueilli dans son groupe avec mes idées de partenariat industriel et d'applications de l'apprentissage automatique dans les procédés. Mes souhaits sont devenus des réalités grâce à cette personne d'exception qui a tout mis en œuvre pour que j'atteigne mes objectifs académiques et de développement personnel et professionnel. Le monde de la recherche a besoin de plus de personnes comme mon directeur. Pour ta passion, ta bienveillance et tes lumières, je te dois les plus sincères remerciements, Moncef.

Tout le travail qui suit repose sur la confiance qui m'a été accordée par l'équipe du Centre de technologie et minéraux critiques de Rio Tinto Fer et Titane – Opérations Québec. Je remercie énormément Marie-Ève pour avoir répondu favorablement à mon appel d'intérêt pour faire un projet de recherche avec leurs données d'usine. Elle m'a présenté à des experts qui m'ont appris avec patience et rigueur les bases des opérations pyrométallurgiques essentielles à l'avancement de mon projet. Je tiens à remercier particulièrement Daniel pour tout le travail réalisé ensemble sur toute la durée du projet. Merci pour tes rétroactions constructives et le partage de tes réflexes pour approcher un problème touchant des données de procédé.

Une expérience de recherche, c'est aussi une expérience de groupe. La petite famille que nous formons avec des personnes partageant nos intérêts techniques au sein du groupe de recherche permet une connexion difficile à retrouver ailleurs. Je remercie Benjamin pour ses réflexions toujours enrichissantes, Chrysler pour ses intuitions remarquables, Wiebke pour la grande qualité de ses conseils, Rohan pour sa générosité, Mahdi pour le partage de ses expériences et Flavie pour m'avoir permis de développer mes propres aptitudes de supervision. Vous avez été présents aux étapes importantes de mon parcours, et ce, toujours avec le sourire.

Je dois aussi remercier mon association étudiante pour m'avoir permis de vivre pleinement l'expérience étudiante à Polytechnique Montréal en tant que Délégué du département de génie chimique 2024-2025. Apprendre le fonctionnement de l'institution avec tous ses comités a été un privilège et ce fut une fierté de pouvoir y contribuer. Cette expérience a été très agréable parce que j'étais accompagné de personnes engagées et inspirantes. Merci à Camille, Gaëlle, William, Dorianda, Mohammad, Jérôme, Andrés, Floriane, Camille, Marie-Claude, Christine, Alexandre, Alfa, Bruno, Jason et à tous les autres pour avoir contribué à rendre

la vie étudiante vibrante pour notre communauté.

Merci à ma famille, Lorraine, Sylvain, Ana et Sam, pour votre précieux soutien et pour avoir trouvé les mots pour m'encourager, me rassurer et m'inspirer. Le plus grand cadeau que vous m'ayez fait est d'incarner les valeurs d'amour, de travail et de curiosité qui guideront chaque pas de ma vie.

Emma, Cam, Mariane, Sim, Oli, Kim, Jason, Simon et Étienne, merci de m'avoir aidé à trouver l'équilibre entre le temps investi dans mes études et le temps mis dans les autres sphères importantes de ma vie dont vous faites partie.

Je remercie finalement l'organisation Mitacs et mon partenaire industriel Rio Tinto – Opérations Québec pour avoir accepté de financer mon projet de recherche dans le cadre de la bourse Accélération Mitacs.

RÉSUMÉ

La première priorité des opérateurs de fours à arc électrique est la sécurité de leurs opérations. Ces fours peuvent servir à l'enrichissement de minéraux tel que l'ilménite, une espèce minérale riche en titane. Leur utilisation nécessite une grande quantité de réactifs et d'énergie, représentant des gains de productivité potentiels importants. L'amélioration des opérations de ces procédés est donc prioritaire pour les industries utilisant ce type de four.

Lorsque des essais doivent être menés en dehors des plages opérationnelles habituelles, il est possible de les réaliser sur un procédé de taille pilote pour limiter les risques pour la sécurité des employés, l'intégrité du four et/ou la qualité des produits. Malgré ces efforts, les fours à arc électrique de taille pilote demeurent des équipements comportant des risques importants, notamment, en ce qui concerne les hautes températures du bain de matière en fusion qu'ils contiennent et la dégradation des briques réfractaires si elles viennent en contact direct avec le bain en fusion. La surveillance de ce procédé est réalisée à l'aide de nombreux thermocouples et à l'aide de mesures manuelles de la largeur de bain : une variable de substitution à l'épaisseur de matière solide protégeant la paroi interne du four. À chacune des coulées, une analyse de la composition chimique de la scorie, phase riche en titane, est réalisée en laboratoire. Des analyses ponctuelles entre les coulées sont aussi réalisées.

L'article 1 de ce mémoire par articles porte sur le développement de capteurs virtuels destinés à améliorer la sécurité de l'opération d'un four pilote de réduction d'ilménite. Deux modèles sont proposés : (1) un prédicteur de température de la paroi du four et (2) un estimateur de la largeur de bain. Tous deux sont basés sur une architecture de réseaux de neurones récurrents permettant une prédiction à partir d'autres signaux mesurés sur le procédé : les mesures de température et les consignes d'opération pour les boucles de contrôle de la puissance, de l'alimentation en minerai et de l'alimentation en agent réducteur. Une discussion de l'article est proposée et porte sur l'impact du partitionnement des données en jeux de calibration et de validation sur les performances du modèle de largeur de bain.

L'article 2 du présent mémoire propose le développement d'un capteur virtuel permettant d'estimer en ligne la composition en dioxyde de titane de la scorie dans le four à partir de signaux de procédé. Le choix des algorithmes et des fonctionnalités intégrées à l'architecture du modèle d'apprentissage automatique proposé tient compte des phénomènes de transferts thermiques et des phénomènes thermochimiques de la réduction de l'ilménite. Une analyse comparative avec un modèle autorégressif de type ARMA est conduite afin de comparer les performances de la méthode proposée dans le chapitre de discussion de l'article.

Dans les deux articles, des réseaux de neurones récurrents de types *long short-term memory* et *gated recurrent unit* sont utilisés pour le développement des capteurs virtuels. Ce type d'algorithme d'apprentissage automatique a la capacité de capturer les non-linéarités, les phénomènes transitoires et les dépendances sur le long terme présents dans le four de réduction d'ilménite à l'étude dans ce projet. Leurs performances sont mesurées à l'aide de plusieurs indicateurs (MAPE, MSE, RMSE et R^2). Une méthode systématique de sélection des hyperparamètres est mise en place pour mener à bien le développement de tous les capteurs virtuels.

ABSTRACT

The top priority for electric arc furnace operators is the safety of their operation. These furnaces are used to upgrade ore, such as ilmenite, a mineral rich in titanium. Their operation requires large amounts of reagents and energy, representing significant potential productivity gains. Therefore, improving the operations of these units is a priority for industries using this type of furnace.

As an effort to improve the understanding of the process and finding productive operation conditions outside the normal operating ranges, pilot-scale units are often used to limit the inherent risks that come with unusual operations. While being smaller in size, pilot-scale electric arc furnaces are still equipment that requires the operator's attention in terms of safety. Concerns about the high molten bath's temperature are to be taken into account as well as the sidewall's refractory bricks wear in order to ensure safe operations. Monitoring of temperature is done using thermocouples and a proxy variable for the amount of frozen material protecting the refractory bricks, called the bath size, is measured manually at every tap. At the end of every tapping cycle, the titanium dioxide content in the slag bath, the titania-rich phase, is measured from a sample of molten material in the laboratory.

Article 1, the first contribution of this thesis, discusses the development of soft sensors aiming at enhancing process safety. Two models are proposed: (1) a furnace sidewall temperature predictor, (2) a bath size estimator. Both model architecture relies on recurrent neural networks using as input sidewall temperatures measurements and control loop setpoints for the electrical power, ore charge and reducing agent charge. A discussion related to the impact of the calibration-validation split on model performances is included for the sidewall temperature model.

Article 2, the second contribution of this thesis, details the development of a soft sensor aiming at enhancing product quality. A model for the on-line estimation of the titanium dioxide content of the slag bath is proposed. The proposed model architecture is based on machine learning algorithms able to account for the complex thermal and thermochemical phenomena related to ilmenite reduction. A comparative analysis of the proposed model with an autoregressive moving average mode is conducted to benchmark the performance of the proposed solution.

In both articles, long short-term memory and gated recurrent unit recurrent neural networks are used for soft sensors' development. These machine learning algorithms can capture process nonlinear dynamics and long-term dependencies identified in the pilot-scaled ilmenite

electric arc furnace under study in the present work. Models' performance is evaluated using several error metrics (MAPE, MSE, RMSE and R^2). A systematic hyperparameter's selection is conducted for the development of soft sensors.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE	iii
REMERCIEMENTS	iv
RÉSUMÉ	vi
ABSTRACT	viii
TABLE DES MATIÈRES	x
LISTE DES TABLEAUX	xiii
LISTE DES FIGURES	xiv
LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS	xviii
LISTE DES ANNEXES	xx
CHAPITRE 1 INTRODUCTION	1
CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE	3
2.1 Apprentissage automatique	4
2.1.1 Réseaux de neurones artificiels	5
2.1.2 Entraînement d'un réseau de neurones	6
2.1.3 Réseaux de neurones récurrents pour les séries temporelles	9
2.1.4 Évaluation des performances d'un modèle d'apprentissage automatique	9
2.2 Estimation et prédiction de variables de procédé - Four à arc électrique . . .	10
2.2.1 Opération d'un four à arc électrique	10
2.2.2 Variables de fours à arc électrique liées aux températures	11
2.2.3 Variables de fours à arc électrique liées à l'état des phases	15
2.2.4 Variables liées à la composition des phases	17
2.3 Synthèse de la revue de littérature et objectifs de recherche	19
CHAPITRE 3 MÉTHODOLOGIE ET ORGANISATION	21
3.1 Méthodologie associée aux objectifs	21
3.2 Organisation du mémoire	24

3.3 Librairies Python	24
CHAPITRE 4 ARTICLE 1. SAFETY SOFT SENSOR DEVELOPMENT FOR PILOT- SCALE ILMENITE ELECTRIC ARC FURNACE USING LSTM-BASED ARCHI- TECTURE	26
4.1 Abstract	26
4.2 Introduction	27
4.3 Pilot-scale ilmenite reducing electric arc furnace	29
4.4 Methods	32
4.4.1 Feature selection	32
4.4.2 LSTM-based model	32
4.4.3 Performance evaluation methods	35
4.4.4 Blocked cross-validation method	37
4.4.5 Hyperparameter selection	37
4.4.6 Data preprocessing	38
4.5 Industrial case study	39
4.5.1 Dataset description	39
4.5.2 Sidewall temperature prediction	40
4.5.3 Bath size estimation	48
4.6 Discussion	53
4.6.1 Sidewall temperature prediction	53
4.6.2 Bath size estimation	54
4.7 Conclusion and future work	54
CHAPITRE 5 ARTICLE 1. DISCUSSION	56
5.1 Analyse de l'interdépendance des mesures collectées sur des données du four pilote de réduction d'ilménite	56
5.1.1 Analyse par composantes principales sur les températures	58
5.1.2 Analyse de la présence de relations dynamiques dans les données uti- lisées par le modèle d'estimation de largeur de bain du four pilote de réduction d'ilménite	60
5.2 Impact du partitionnement calibration-validation sur les performances du mo- dèle d'estimation de largeur de bain du four pilote de réduction d'ilménite .	61
CHAPITRE 6 ARTICLE 2. TITANIUM DIOXIDE CONTENT SOFT SENSOR DEVELOPMENT FOR PILOT-SCALE ILMENITE ELECTRIC ARC FURNACE USING BILSTM & BIGRU RECURRENT NEURAL NETWORKS	64

6.1	Abstract	64
6.2	Introduction	64
6.3	Pilot-scale ilmenite electric arc furnace	67
6.3.1	Unit description	67
6.4	Methods	68
6.4.1	Machine learning algorithms	68
6.4.2	Model training	72
6.4.3	Data preprocessing	73
6.5	Industrial case study	74
6.5.1	Ilmenite EAF unit semibatch operation	74
6.5.2	Thermochemical phenomena	76
6.5.3	Titanium dioxide content model training	76
6.6	Results and discussion	78
6.7	Conclusion	82
CHAPITRE 7 ARTICLE 2. DISCUSSION		84
7.1	Développement d'un modèle ARMA de prédiction du dioxyde de titane	84
7.2	Comparaison des modèles ARMA et BiLSTM de dioxyde de titane	88
7.3	Évaluation de l'impact du jeu de validation sur les performances du modèle BiLSTM	90
CHAPITRE 8 CONCLUSION		93
8.1	Synthèse des travaux	93
8.2	Limitations de la solution proposée	94
8.3	Améliorations futures	94
8.4	Mot de la fin	95
RÉFÉRENCES		96
ANNEXES		104

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 3.1	Sections associées aux sous-objectifs du premier objectif principal	23
Tableau 3.2	Sections associées aux sous-objectifs du deuxième objectif principal	23
Tableau 3.3	Sections associées aux sous-objectifs du troisième objectif principal	23
Table 4.1	Confusion matrix for three classes.	37
Table 4.2	Ilmenite EAF process and quality variables used for model development.	40
Table 4.3	Preprocessing, model and optimizer hyperparameter selection for the sidewall temperature prediction model.	43
Table 4.4	Evaluation of the sidewall temperature predictor using AMAPE, AMSE and ARMSE error metrics.	44
Table 4.5	Confusion matrix for performance evaluation of the temperature predictor with $\Delta T_{min} = 0.08$	47
Table 4.6	Preprocessing, model and optimizer hyperparameter selection for the bath size estimation model.	50
Table 4.7	Evaluation of the bath size estimator using MAPE, MSE and RMSE error metrics.	52
Table 4.8	Confusion matrix for performance evaluation of the bath size estimator with $\Delta B_{min} = 0.08$	53
Tableau 5.1	Comparaison des performances des modèles d'estimation de la largeur de bain selon le partitionnement calibration-validation.	62
Table 6.1	Ilmenite EAF process and quality variables used for model development.	68
Table 6.2	Summary of the preprocessing, model and regularization hyperparameter tuning for the titanium dioxide content estimation model.	79
Table 6.3	Hyperparameter tuning with ten candidate models for titanium oxide content estimation.	80
Table 6.4	Evaluation of the titanium dioxide content BiLSTM model using MSE, RMSE and R^2 error metrics.	80
Tableau 7.1	Comparaison de performances des modèles de dioxyde de titane mesuré en fin de coulée seulement. Partitionnement calibration-validation 80 %-20 %.	89
Tableau 7.2	Comparaison des performances des modèles BiLSTM de dioxyde de titane en fonction du partitionnement calibration-validation.	91
Tableau A.1	Clé de positionnement des thermocouples dans les parois du four pilote.	106

LISTE DES FIGURES

Figure 2.1	Arbre de synthèse des méthodes d'estimation et de prédiction des variables de procédé importantes d'un four à arc électrique. Articles de revue ¹ , mémoires et thèses ² , publication industrielle ³ . Références sur la réduction d'ilménite . ML : <i>Machine Learning</i> ou apprentissage automatique, DD : <i>Data Driven model</i> ou modèle piloté par les données. Certaines de ces références peuvent porter sur des travaux réalisés sur plus d'une branche de l'arbre.	3
Figure 2.2	Contextualisation des articles à la frontière de l'intelligence artificielle et de la modélisation des procédés.	5
Figure 2.3	Composantes internes d'un perceptron.	5
Figure 2.4	Topologie d'un réseau de neurones à une couche (gauche) et d'un réseau de neurones multicouches (droite).	6
Figure 4.1	Electric arc furnace main element locations. (1) Ore and reagent inlet; (2) Graphite electrodes; (3, 4) Molten bath composed of slag bath (3) and metal bath (4); (5) Freeze lining; (6a, 6b, 6c) Thermocouples at various heights and depths; (7) Refractory bricks; (8, 9) Tap-holes for products I and II; (10) furnace roof; (11) Gas outlet. (Reprinted with permission from [1])	30
Figure 4.2	LSTM cell internal structure. (Adapted from [2])	33
Figure 4.3	Sequence-to-sequence LSTM architecture topology. (Adapted from [3]) . . .	34
Figure 4.4	Sequence-to-one LSTM architecture topology. (Adapted from [3]) . .	34
Figure 4.5	Blocked cross-validation split for time series.	38
Figure 4.6	Process variables (x_i) formatting in sequences of length <i>lookback</i> (l) over the entire of the dataset (0 h to 978 h) (t).	39
Figure 4.7	Sequence-to-sequence LSTM architecture topology for the sidewall temperature predictor.	42
Figure 4.8	Optuna hyperparameter selection for the sidewall temperature predictor using the AMSE loss metric with 31 pruned trials.	44
Figure 4.9	Scaled sidewall temperature increment predictions over the entire dataset (0 h to 978 h). Dashed lines indicate the validation dataset. . . .	45
Figure 4.10	40-Hour period scaled sidewall temperature increment predictions. . .	45
Figure 4.11	Scaled sidewall temperature predictions over the entire dataset (0 h to 978 h). Dashed lines indicate the validation dataset. . . .	46

Figure 4.12	40-hour period scaled sidewall temperature predictions.	46
Figure 4.13	Sidewall temperature trend label attribution over 40 hours.	47
Figure 4.14	Input tensor for bath size estimation.	48
Figure 4.15	Sequence-to-one LSTM architecture topology for the bath size predictor.	49
Figure 4.16	Optuna hyperparameter selection for the bath size estimator using the MSE loss metric with 34 pruned trials.	49
Figure 4.17	Scaled bath size predictions over the entire dataset (0 h to 978 h). . .	51
Figure 4.18	40-hour period scaled bath size predictions.	51
Figure 4.19	Scaled bath size trend labels attribution over the entire dataset. . . .	52
Figure 5.1	Évolution des mesures de température obtenues par 23 des 33 thermocouples disponibles sur le four pilote de réduction d'ilménite. Les températures sont groupées selon leur position. Les faces est (vert), sud (bleu), ouest (jaune) et nord (rouge) de l'équipement sont instrumentées. Les thermocouples analysés dans la discussion (T_0 , T_2 , T_4 , T_9 , T_{22}) sont identifiés.	57
Figure 5.2	Colinéarité des mesures des 33 thermocouples.	58
Figure 5.3	Contribution des composantes principales de températures.	59
Figure 5.4	Graphiques d'autocorrélation.	60
Figure 5.5	Partitionnements des données de calibration (noir) et de validation (rouge).	61
Figure 5.6	Boîtes à moustaches représentant les propriétés statistiques des périodes de collecte de données utilisées pour les partitionnements. . . .	62
Figure 6.1	Electric arc furnace main element locations. Ore and reagent inlet (1); graphite electrodes (2); molten bath composed of slag bath (3) and metal bath (4); thermocouples at various heights and depths (5a, 5b, 5c); refractory bricks (6); Tap-holes for the slag bath (7) and for the metal bath (8); furnace roof (9); gas outlet (10); titanium dioxide to be estimated (TiO_2). (Adapted from [1])	67
Figure 6.2	LSTM cell internal structure. (Adapted from [2])	69
Figure 6.3	GRU cell internal structure. (Adapted from [2])	70
Figure 6.4	Bidirectional recurrent neural network (BiRNN) structure unfolded in time for three time steps (k). (Adapted from [4])	71

Figure 6.5	Semibatch operation detailed with the slag bath represented by the upper yellow rectangle and the metal bath as the lower red rectangle: (a) Start of the slag tapping cycle; (b) Filling period; (c) End of the tapping cycle; (d) Slag tap; (e) Second filling period; (f) End of the tapping cycle; (g) Second slag tap; (h) Metal tap.	75
Figure 6.6	Evolution of (a) the titanium dioxide content of the slag bath over the course of 700 hours of operation. (b) Example of 3 out of the 33 thermocouples located at the same height but at different depths. From shallowest to deepest: black, blue, green. Control system setpoints for (c) the electric power, (d) the ore charge and (e) the reducing agent charge. All signals were preprocessed.	77
Figure 6.7	Evolution of the titanium dioxide content measurements of the slag bath (black dot) over the course of 700 hours of operation with its continuous estimation from the trained model at every time steps (pink line) including at the same time steps as measurements (red dot). Validation measurements within tapping cycles are indicated (black circle).	81
Figure 6.8	Evolution of the titanium dioxide content measurements and estimations for a period of high model performances (b), and a period of low model performances (a).	81
Figure 6.9	Evolution of the titanium dioxide content and model inputs. Low (red) and high (blue) model performances periods.	82
Figure 6.10	(a) Convergence curve of the titanium dioxide content model using the lowest MSE yielding set of hyperparameters. Loss (MSE) is evaluated on the calibration (solid line) and validation datasets (dashed line). (b) Estimated titanium dioxide content vs. actual titanium dioxide content.	83
Figure 7.1	Étude d'autocorrélation montrant qu'une autocorrélation est présente dans les mesures de dioxyde de titane et que les valeurs des paramètres du modèle ARMA sont : $q=3$ et $p=1$	85
Figure 7.2	Prédictions du modèle ARMA de dioxyde de titane mesuré en fin de coulée seulement. Partitionnement 80 %-20 %.	87
Figure 7.3	Analyse des résidus sur le jeu de validation du modèle de largeur de bain ARMA.	88
Figure 7.4	Prédictions du modèle ARMA (rouge) et les estimations du modèle BiLSTM (bleu) de dioxyde de titane mesuré de fin de coulée seulement. Partitionnement 80 %-20 %.	89

Figure 7.5	Deux partitionnements calibration-validation. Partitionnement 80 %-20 % (après le trait pointillé). Partitionnement avec les mesures de validation intracoulées (encerclées).	90
Figure 7.6	Estimations en validation du modèle BiLSTM de dioxyde de titane mesuré en fin de coulée seulement. Partitionnement 80 %-20 %.	91
Figure A.1	<i>Loading plot</i> pour les 33 thermocouples (a) et pour les 22 thermocouples localisés dans les parois selon leur hauteur (b), leur profondeur (c) ou leur orientation (d).	104
Figure A.2	<i>Score plot</i> pour les observations des 33 thermocouples.	105
Figure B.1	Prédictions d'un modèle ARMA (rouge) et estimations d'un modèle BiLSTM (bleu) de dioxyde de titane excluant les mesures intracoulées. Calibration avant le trait pointillé et validation après le trait pointillé.	107
Figure B.2	Autocorrélation des résidus du prédicteur ARMA de dioxyde de titane.	108
Figure B.3	Autocorrélation partielle des données allant de 0 h à 700 h.	108
Figure B.4	Estimations d'un modèle BiLSTM de dioxyde de titane incluant les mesures intracoulées. Calibration avant le trait pointillé et validation après le trait pointillé.	109
Figure B.5	Impact de l'intégration des mesures intracoulées sur la fréquence d'acquisition de la mesure de dioxyde de titane.	109

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

Mémoire

ADAM	<i>Adaptive Moment Estimation</i>
ARMA	<i>Autoregressive Moving Average</i>
CV	<i>Cross-validation</i>
EAF	<i>Electric Arc Furnace</i>
GRU	<i>Gated Recurrent Unit</i>
IA	Intelligence artificielle
LSTM	<i>Long Short-Term Memory</i>
MAE	<i>Mean Absolute Error</i>
MAPE	<i>Mean Absolute Percentage Error</i>
AMAPE	<i>Average Mean Absolute Percentage Error</i>
ML	<i>Machine Learning</i>
MLP	<i>Multilayer Perceptron</i>
MSE	<i>Mean Squared Error</i>
FeO	Oxyde ferreux
Fe ₂ O ₃	Oxyde ferrique
PSO	<i>Particle Swarm Optimization</i>
RBF	<i>Radial Basis Function</i>
RMSE	<i>Root Mean Squared Error</i>
ARMSE	<i>Average Root Mean Squared Error</i>
RNN	<i>Recurrent neural network</i>
SIA	Systèmes d'intelligence artificielle
SGD	<i>Stochastic Gradient Descent</i>
SVM	Machine à vecteurs de support
TiO ₂	Dioxyde de titane

Article 1

LOCF	<i>Last observation carried forward</i>
OC	<i>Ore charge setpoint</i>
PV	<i>Process variables</i>
RAC	<i>Reducing agent charge setpoint</i>
SHAP	<i>SHapley Additive exPlanations</i>

SP	<i>Control loop setpoints</i>
XAI	<i>Explainable artificial intelligence</i>

Article 2

BiRNN	<i>Bidirectional recurrent neural networks</i>
BiGRU	<i>Bidirectional gated recurrent unit</i>
BiLSTM	<i>Bidirectional long short-term memory</i>
CSM	<i>Critical and strategic minerals</i>

LISTE DES ANNEXES

Annexe A	Complément à la discussion de l'article 1	104
Annexe B	Complément à la discussion de l'article 2	107

CHAPITRE 1 INTRODUCTION

Les données : l’or de l’ère de l’information Les données sont considérées comme des ressources précieuses, à l’ère de l’avènement de l’intelligence artificielle (IA) qui refaçonnera plusieurs industries. L’exploitation des données est souvent comparée à une nouvelle ruée vers l’or. La terminologie de l’IA emprunte parfois au monde minier, comme c’est le cas pour le forage de données ou *data mining*. Cette activité correspond au processus de recherche et d’analyse identifiant des corrélations cachées ou des informations nouvelles, ou encore, de dégager certaines tendances [5].

L’industrie minière, avec ses procédés métallurgiques complexes, s’intéresse beaucoup à la valorisation de ses données de procédé. Les projets visant à améliorer les performances opérationnelles sont nombreux, car ces procédés sont très instrumentés et que leurs données sont systématiquement archivées. Des projets de valorisation de données peuvent se décliner en plusieurs variantes. Que ce soit pour améliorer les modèles de conception à l’aide de réseaux de neurones informés par la physique ou pour mettre en place des systèmes de maintenance prédictive plus performants, ces données représentent la matière première permettant de générer une valeur ajoutée. On peut mesurer l’impact de ce type de projet par la réduction de l’énergie ou des ressources utilisées par un procédé ou par une réduction des temps d’arrêt imprévus. Dans un contexte compétitif, les gains rendus possibles par des initiatives de valorisation des données représentent une longueur d’avance que peut prendre une entreprise intégrant ces techniques modernes à ses opérations.

La réalisation de ces projets repose sur deux axes importants. D’une part, le succès de ces approches dépend de la quantité et de la qualité des données disponibles. Le prétraitement des données brutes est une étape capitale pouvant prendre la majorité du temps dédié au projet. Le scénario *garbage-in garbage-out* [5; 6], craint des scientifiques de données, est évitable grâce à une préparation des données bien exécutée. D’autre part, les algorithmes retenus forment le cœur de la solution numérique du projet. Le choix de la méthode doit être inspiré du principe du rasoir d’Ockham pour arrimer la complexité du problème à celle de la solution. Le modèle le plus performant et le plus simple est à privilégier. Cela étant, plusieurs procédés requièrent des outils numériques sophistiqués pour être en mesure de prédire l’évolution de ces systèmes complexes et empreints d’incertitudes.

L’intelligence artificielle utilisée avec prudence L’avancement rapide des systèmes d’intelligence artificielle (SIA) amène naturellement à se poser des questions quant au degré

de maturité de ses technologies. Ce sujet est abordé en détail dans la déclaration de Montréal pour un développement responsable de l'intelligence artificielle qui énonce dix principes en lien avec l'utilisation des SIA [7]. Les principes de prudence et de responsabilité s'appliquent dans les contextes de projets d'amélioration des procédés. Il est important de bien comprendre les limites de ces algorithmes avant de les utiliser, notamment dans des contextes d'amélioration de la sécurité des opérations. C'est en tenant compte de ces considérations légitimes que le projet, mené en partenariat industriel, a été conduit.

Rio Tinto Fer et Titane – Opérations Québec Ce projet repose sur la collaboration entre Polytechnique Montréal et le Centre de technologie et minéraux critiques de Rio Tinto Fer et Titane – Opérations Québec. La culture importante d'investissement en recherche et développement chez Rio Tinto est le moteur de sa stratégie de croissance. L'équipe d'experts issus de plusieurs domaines scientifiques et technologiques permet à cette entreprise de réaliser le processus complet de recherche partant du laboratoire, passant par l'usine pilote et finissant à l'exploitation commerciale qui est mené sur place, année après année. C'est justement sur le procédé pilote du four de réduction d'ilménite du Centre de technologie et minéraux critiques que le projet de recherche présenté dans ce mémoire a été accompli.

Plan du mémoire Les chapitres du mémoire respecteront l'ordre suivant :

- Le chapitre 2 sert à introduire les principes d'apprentissage automatique utilisés pour le développement des trois modèles proposés ainsi qu'une revue de littérature sur des travaux de modélisation de températures, d'états des phases et de composition des phases réalisés pour des fours à arc électriques.
- Le chapitre 3 correspond à la méthodologie ayant mené à l'atteinte des objectifs et à l'organisation du mémoire.
- Le chapitre 4 présente le premier article scientifique intitulé «Safety soft sensor development for pilot-scale ilmenite electric arc furnace using LSTM-based architecture».
- Le chapitre 5 est une discussion de l'article 1.
- Le chapitre 6 présente le deuxième article scientifique intitulé «Titanium dioxide content soft sensor development for pilot-scale ilmenite electric arc furnace using BiLSTM & BiGRU recurrent neural networks».
- Le chapitre 7 est une discussion de l'article 2.
- Le chapitre 8 conclut ce mémoire en faisant la synthèse des travaux, en discutant des limitations et en identifiant des opportunités de travaux futurs.

CHAPITRE 2 REVUE DE LITTÉRATURE

Cette section sert à établir les bases fondamentales et opérationnelles des fours à arc électrique en plus d'introduire les notions d'apprentissage automatique utilisées dans les articles 1 et 2. Ces deux publications proposent des modèles d'aide à la décision qui se veulent des preuves de concept d'approches pouvant être déployées en ligne, dans un contexte industriel.

Une première section couvre les algorithmes d'apprentissage automatique utilisés.

Une seconde section décrit le fonctionnement général d'un four à arc électrique suivi des approches proposées dans la littérature pour faire la modélisation de ces systèmes en tenant compte des températures, de l'état et de la composition des phases présentes dans l'unité.

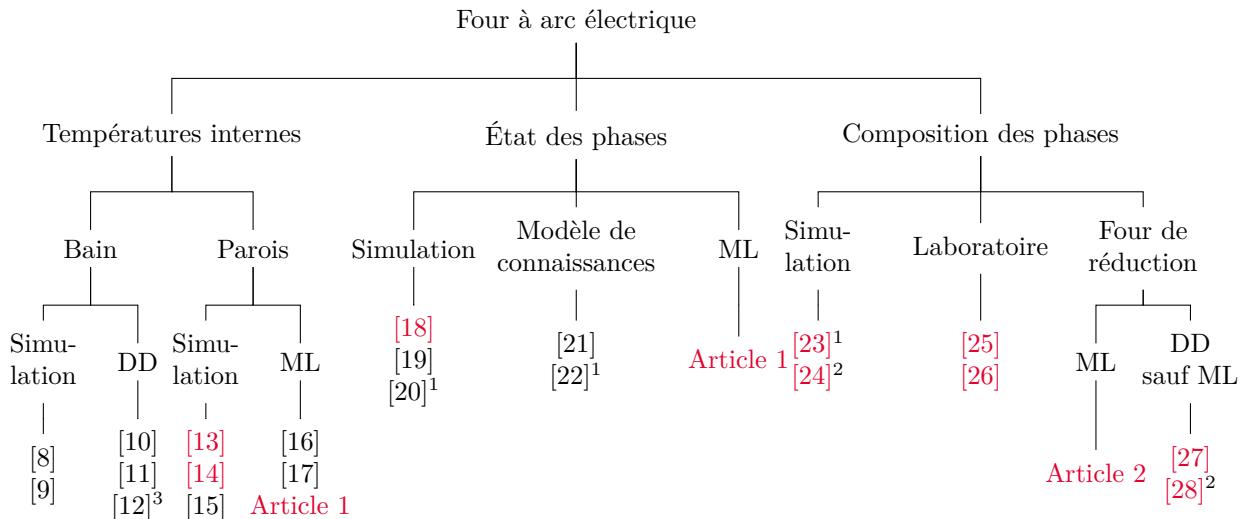


FIGURE 2.1 Arbre de synthèse des méthodes d'estimation et de prédiction des variables de procédé importantes d'un four à arc électrique. Articles de revue¹, mémoires et thèses², publication industrielle³. Références sur la **réduction d'ilménite**. ML : *Machine Learning* ou apprentissage automatique, DD : *Data Driven model* ou modèle piloté par les données. Certaines de ces références peuvent porter sur des travaux réalisés sur plus d'une branche de l'arbre.

La Figure 2.1 représente, sous la forme d'un arbre de synthèse, les méthodes d'estimation et de prédiction des variables de procédé importantes d'un four à arc électrique qui ont fait l'objet de publication. Trois branches principales divisent les variables modélisées par les capteurs virtuels proposés dans ce mémoire : les températures dans l'unité, état des phases et composition des phases. Finalement, les publications sont répertoriées selon la méthode

de modélisation.

Ces travaux accomplis par des chercheuses et chercheurs sont la fondation du développement des modèles proposés dans les articles 1 et 2. La discussion porte également sur la modélisation de procédés pyrométallurgiques autres que les fours de réduction d'ilménite du fait de certaines similarités avec le procédé à l'étude.

2.1 Apprentissage automatique

L'intelligence artificielle (IA) est définie comme : « [le] domaine d'étude ayant pour objet la reproduction artificielle des facultés cognitives de l'intelligence humaine dans le but de créer des systèmes ou des machines capables d'exécuter des fonctions relevant normalement de celle-ci » [5]. Plusieurs catégories de méthodes ont été utilisées depuis près d'une décennie dans plusieurs domaines d'application, notamment les méthodes d'apprentissage automatique ou *machine learning* (ML).

Les techniques ML sont définies comme : « [le] mode d'apprentissage par lequel un agent évalue et améliore ses performances et son efficacité sans que son programme soit modifié, en acquérant de nouvelles connaissances et aptitudes à partir de données et/ou en réorganisant celles qu'il possède déjà » [5]. Les données utilisées par ce type d'algorithme pour réaliser ses fonctions peuvent être de divers formats et provenances. Lorsque les données sont des exemples étiquetés, les techniques ML formulent des règles et ajustent leurs propositions selon la tâche à accomplir. Il est alors question d'apprentissage supervisé [5]. Des données étiquetées sont des données où les entrées (x_i) et les sorties (y_i) observées du modèle sont connues, permettant l'entraînement du modèle.

L'apprentissage supervisé permet, typiquement, de réaliser des tâches de régression et de classification. Une démarche de valorisation de données industrielles à des fins d'entraînement de modèles ML est détaillée dans les prochaines sections. La suite de la revue de littérature démontre l'intérêt croissant pour l'application des techniques ML dans les contextes de modélisation des procédés, particulièrement pour la surveillance des variables de procédé de fours à arc électrique. La Figure 2.2 représente la jonction entre les sujets discutés dans les articles 1 et 2.

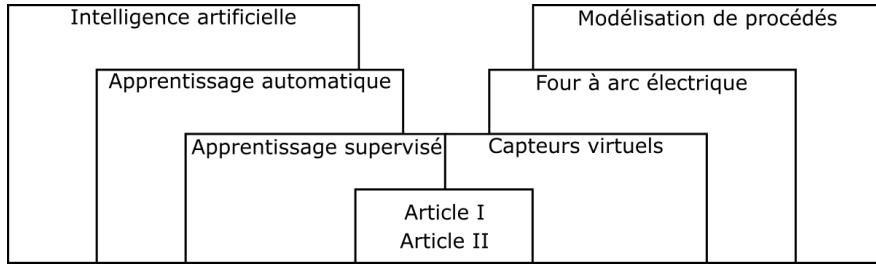


FIGURE 2.2 Contextualisation des articles à la frontière de l'intelligence artificielle et de la modélisation des procédés.

2.1.1 Réseaux de neurones artificiels

Unité de base : le perceptron

Un perceptron est : « [un] modèle de neurone artificiel dans lequel les signaux reçus sont d'abord pondérés, puis additionnés et enfin transformés collectivement, à l'aide d'une formule mathématique, en un signal unique émis à la sortie » [5]. Les poids et les biais sont les paramètres du neurone. La Figure 2.3 représente un perceptron, l'unité de base d'un réseau de neurones. Elle a été proposée en 1958 en établissant un modèle probabiliste inspiré du fonctionnement des neurones biologiques [29].

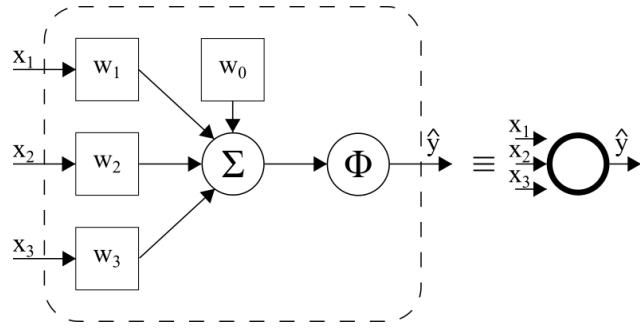


FIGURE 2.3 Composantes internes d'un perceptron.

$$\hat{y} = \Phi \left(\sum_{i=1}^n x_i \cdot w_i + w_0 \right) \quad (2.1)$$

Un perceptron peut avoir plusieurs variables d'entrées notées x_i . Ces entrées sont multipliées par leur poids w_i respectifs avant d'être additionnées à un biais w_0 . La quantité résultante est alimentée à une fonction d'activation notée Φ . La fonction Φ est souvent une fonction sigmoïde comme la tangente hyperbolique ou la fonction logistique. Le signal de sortie \hat{y} de cette fonction représente la prédiction du modèle. La notation simplifiée du perceptron

utilisée dans ce mémoire est un cercle vide. Un processus d'optimisation permet d'estimer les poids permettant une erreur réduite entre l'observation étiquetée et la prédiction du modèle. Ce principe général d'estimation des paramètres reste valide, quelle que soit la complexité du modèle ML supervisé.

Les observations ordonnées dans le temps, relatives à une grandeur, forment une série temporelle [5]. Elles sont utilisées dans divers domaines pour le développement de modèles permettant la prédiction ou l'estimation de différentes grandeurs. Les signaux d'instruments de mesure et de logique de contrôle des procédés industriels sont des séries temporelles. Des modèles peuvent utiliser ces séries temporelles pour effectuer la prédiction de certaines variables de procédé difficiles à mesurer. Par exemple, des variables mesurées par une analyse d'échantillon faite en laboratoire, comme dans le cas de la mesure de dioxyde de titane de l'article 2.

2.1.2 Entrainement d'un réseau de neurones

Un réseau de neurones ou *neural networks* sont constituée de couches de nœuds, ou neurones artificiels : une couche d'entrée, une ou plusieurs couches cachées et une couche de sortie [30]. Le réseau de neurones à une couche est le réseau de neurones le plus simple. Lorsque plusieurs couches sont présentes, il est question d'un réseau de neurones multicouches ou *multilayer perceptron* (MLP). La Figure 2.4 illustre ces deux types de réseaux de neurones.

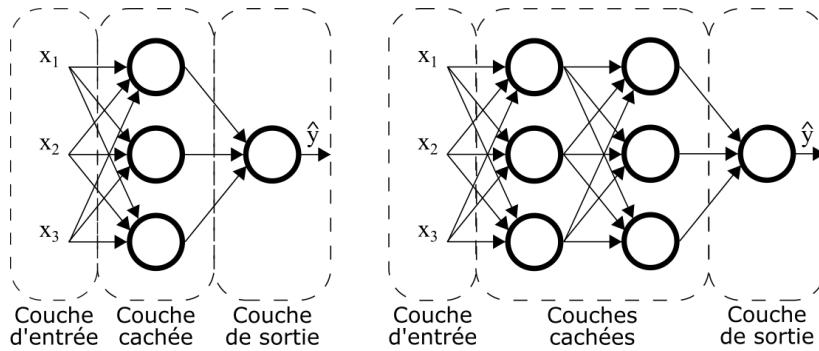


FIGURE 2.4 Topologie d'un réseau de neurones à une couche (gauche) et d'un réseau de neurones multicouches (droite).

Les réseaux de neurones à plusieurs couches, appelés réseaux de neurones profonds ou *deep*, permettent d'augmenter, à volonté, la quantité de relations mathématiques utilisées afin de générer une prédiction. La quantité de neurones à utiliser dépend de la complexité du système à modéliser.

Rétropropagation pour l'entraînement du modèle

Le mécanisme permettant l'adaptation des poids et des biais de tous les neurones d'un réseau de neurones s'appelle la rétropropagation. Elle consiste en quatre étapes [2; 30] et représente la fondation de l'entraînement des réseaux de neurones [31] :

1. **La passe avant** correspond à la prédiction du perceptron dont les poids n'ont pas été ajustés afin de calculer l'erreur.
2. **Le calcul de l'erreur** effectué avec une fonction de coût J peut prendre plusieurs formes dont deux les plus souvent utilisées :
 - L'erreur absolue moyenne ou *mean absolute error* (MAE) représentée à l'Équation 2.2.

$$\text{MAE}(y, \hat{y}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i| \quad (2.2)$$

- L'erreur quadratique moyenne ou *mean squared error* (MSE) à l'Équation 2.3.

$$\text{MSE}(y, \hat{y}) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (2.3)$$

3. **La passe arrière** calcule la contribution des poids et biais à l'erreur. Elle est réalisée en différenciant la J par rapport à chacun des paramètres w du réseau de neurones.

$$w' = w + \alpha * \frac{\partial J}{\partial w} \quad (2.4)$$

4. **La descente du gradient** permet la mise à jour des poids et des biais. À la dérivation partielle de J par rapport à w est multipliée un pas d'apprentissage ou *learning rate* α qui établit la grandeur de la modification faite à un paramètre w pour le mettre à jour (w') après un passage (Équation 2.4).

L'optimisation de la fonction coût utilise en pratique des variantes modernes de l'algorithme de descente de gradient. Deux algorithmes sont disponibles dans les librairies libres de droits : les algorithmes *stochastic gradient descent* (SGD) et *adaptive moment estimation* (ADAM).

Les quatre étapes du mécanisme de rétropropagation ou *epoch* sont répétées plusieurs fois lors de l'entraînement d'un réseau de neurones. L'arrêt peut être déterminé par une limite imposée à J ou par un nombre de passages maximum. Un paramètre dont la valeur, déterminée à l'avance par l'utilisateur, influence la capacité de l'algorithme à apprendre est appelé hyperparamètre [5]. Les hyperparamètres d'un modèle ML sont ajustés afin d'en améliorer les performances.

Régularisation pour contrer le surapprentissage

Un risque important rencontré lors de l’entraînement de réseaux de neurones est le surapprentissage ou *overfitting*. En règle générale, la régularisation consiste à réduire marginalement la précision de l’entraînement pour augmenter la généralisabilité [30]. La généralisabilité est le mode de raisonnement qui permet de déduire des principes généraux à partir de données spécifiques [5]. Autrement dit, l’objectif de la régularisation est de rendre le modèle proposé le plus robuste possible, c’est-à-dire, que ces performances dépendent le moins possible du jeu de données sur lequel il est entraîné.

Le partitionnement des données en jeux de calibration et de validation est une étape menant à la quantification de la robustesse du modèle. Généralement, l’entraînement est effectué en alimentant au modèle les données de calibration, plus nombreuse que les données de validation, afin d’effectuer l’ajustement des paramètres du réseau de neurones. Le *graphique de convergence* montre l’évolution de l’erreur en calibration et en validation en fonction du nombre de passages effectués.

Quelques exemples de méthodes de régularisation sont :

- La validation croisée ou *cross-validation* (CV) consiste à séparer en plusieurs sous-ensembles le jeu de données servant à l’entraînement et de moyenner leurs performances afin de faire la sélection des hyperparamètres.
- Le taux d’abandon ou *dropout rate* pour réduire la co-adaptation des neurones.
- La diminution progressive du taux d’apprentissage pour accélérer la convergence.
- Le nombre de couches et de neurones par couche pour arrimer la complexité du modèle à celle de la tâche de prédiction.
- L’élagage ou *pruning* sert à réduire la taille d’un réseau de neurones de manière à ne conserver que les neurones utiles à la prédiction. Le modèle gagne alors en rapidité d’exécution.

Hyperparamétrisation pour un réglage de précision

Le réglage des hyperparamètres d’un réseau de neurones est une tâche expérimentale complexe et est l’objet d’étude dans les dernières années [32]. Elle a pour postulat initial que plusieurs valeurs d’hyperparamètres peuvent affecter les performances du modèle et qu’une «bonne» combinaison d’hyperparamètres peut améliorer les performances et la robustesse du modèle entraîné. La Section 3.3 détaille une structure de calcul permettant d’optimiser les ressources computationnelles dédiées à cette tâche.

2.1.3 Réseaux de neurones récurrents pour les séries temporelles

Les réseaux de neurones récurrents ou *recurrent neural networks* (RNNs) sont en mesure de faire de la reconnaissance des formes ou *pattern recognition* en plus de capturer les comportements non linéaires dynamiques des systèmes pouvant contribuer à améliorer de la performance des modèles d'estimation ou de prédiction. Les réseaux de neurones de type *long short-term memory* (LSTM) et *gated recurrent unit* (GRU) sont présentés dans l'article 2 à la Section 6. Cette même section introduit également la fonctionnalité bidirectionnelle pouvant être ajoutée aux réseaux de neurones récurrents afin de tenir compte des délais entre les entrées et la sortie du modèle.

2.1.4 Évaluation des performances d'un modèle d'apprentissage automatique

Plusieurs indicateurs peuvent être utilisés afin d'évaluer les performances d'un modèle ML. En plus du MAE et du MSE, d'autres indicateurs sont utilisés :

- La racine de l'erreur quadratique *root mean squared error* (RMSE) présentée à l'Équation 2.5. Le RMSE a l'avantage d'être exprimé dans les unités d'ingénieries de la variable à modéliser [2].

$$\text{RMSE}(y, \hat{y}) = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (2.5)$$

- L'erreur absolue exprimée en pourcentage ou *mean absolute percentage error* (MAPE) est présenté à l'Équation 2.6. Le MAPE est facilement interprétable du fait qu'il est exprimé en pourcentage d'échelle, mais il ne peut pas être utilisé lorsque la variable à modéliser prend une valeur proche de zéro [33].

$$\text{MAPE}(y, \hat{y}) = \frac{100 \%}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{y_i - \hat{y}_i}{y_i} \right| \quad (2.6)$$

- Le coefficient de détermination (R^2) est présenté à l'Équation 2.7 avec : la moyenne des observations de la variable de sortie notée \bar{y} , la variance totale ou *total sum of squares* (SST) et la somme de la variance expliquée par la régression ou *error sum of squares* (SSE) [34]. Le R^2 est facile à interpréter, mais est peu fiable lorsque vient le temps d'évaluer le surapprentissage. Il est également remis en question lorsque la variance est différente entre les jeux de calibration et de validation [34; 35].

$$R^2(y, \hat{y}, \bar{y}) = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \equiv \frac{\text{SSE}}{\text{SST}} \quad (2.7)$$

2.2 Estimation et prédition de variables de procédé - Four à arc électrique

2.2.1 Opération d'un four à arc électrique

Les fours à arc électrique ou *electric arc furnaces* (EAFs), aussi appelés simplement «fours» dans ce mémoire, sont des fours utilisés dans le processus de transformation et de purification de nombreux minerais. Les fours sont alimentés en minerai et en réactif afin de permettre leur transformation chimique et leur fonte. L'énergie est alimentée à ce système via des électrodes desquelles sont produits des arcs électriques. Les composantes de ces équipements peuvent varier selon leur alimentation en énergie. Ils peuvent utiliser un courant continu ou un courant alternatif [13; 36]. Les électrodes peuvent être submergées sous le bain de matière en fusion [15] ou être mobiles au-dessus du bain en fusion [37].

Ces procédés sont opérés à haute température pour assurer la fonte de leur contenu et permettre l'écoulement de la matière transformée hors de l'équipement. Une étape est appelée *la coulée*. Cette coulée peut être réalisée en perçant la paroi du four ou en inclinant l'équipement en entier, selon sa conception.

Les températures d'opération des fours à arc électrique dépendent du type de minerai traité. Une surveillance des températures à différents endroits de l'équipement est réalisée de manière à prévenir une surchauffe [1; 8; 10; 16; 17; 28]. Une surchauffe locale peut engendrer des situations dangereuses comme la dégradation des briques réfractaires si elles viennent en contact direct avec le bain en fusion et l'infiltration de matière en fusion à travers la paroi du four. Une opération sécuritaire requiert l'accumulation d'une certaine épaisseur de matière solide ou *freeze lining* sur la paroi interne du four.

En plus de la surveillance de variables de procédé liées à la sécurité de l'opération, le maintien de la qualité du produit obtenu nécessite des outils de suivi dédiés. Pour les fours de réduction d'ilménite, le suivi de la composition en titane de la sortie de l'équipement est le principal critère de qualité à respecter. La fonte et la réduction du minerai d'ilménite à l'aide d'un agent réducteur permettent une séparation en deux phases de la matière fondue dans le four : un bain de scorie riche en titane ou *slag bath* et un bain métallique riche en fer ou *metal bath*. Le suivi de la composition en dioxyde de titane (TiO_2) dans la scorie est réalisé à l'aide d'échantillons analysés en laboratoire. La composition en TiO_2 dépend, entre autres, du taux de conversion des oxydes de fer présents dans le concentré d'ilménite ainsi que de la température d'opération de l'équipement.

Ainsi, l'opération d'un four à arc électrique est complexe puisqu'elle doit respecter des impératifs de sécurité et de qualité. La recherche appliquée menant au développement d'outils de support à la décision en ligne est donc importante afin de composer avec cette complexité.

2.2.2 Variables de fours à arc électrique liées aux températures

Modèles de la température du bain

Simulation numérique de la température du bain La température du bain est une variable de procédé importante, mais difficile à mesurer du fait que les fours de réduction d'ilménite sont typiquement opérés à des températures allant de 1600 °C à 1700 °C [23]. Les approches par simulation numérique [8; 9] forment la première branche de la Figure 2.1 portant sur la prédiction de la température de bain d'un four à arc électrique.

Cette difficulté de mesure et le désir de mieux comprendre les phénomènes dynamiques de ce système ont motivé des travaux de recherche visant à développer un simulateur fiable d'un four de réduction d'ilménite [8]. Pour ce faire, une approche par sous-modèles (sous-modèle de paroi, sous-modèle de croûte et sous-modèle du four) est proposée. Des investigations concernant les effets des changements des paramètres opérationnels sur la scorie et de l'épaisseur de matière solidifiée à l'intérieur de l'équipement ont pu être menées. Les profils de température dans la paroi du four, dans l'épaisseur de matière solidifiée et dans le bain en fusion ont pu être simulés.

Une autre approche de simulation dynamique est proposée pour un four électrique de recyclage de résidus métalliques en utilisant le langage *Modelica* [9]. Cette approche consiste en quatre sous-modèles (sous-modèle de l'état des phases, sous-modèle du système électrique triphasé, sous-modèle de régulation des électrodes et sous-modèle de gestion des gaz).

L'ensemble de ces sous-modèles sert au suivi de la fonte, de la phase solide et à établir les profils de températures à travers les phases, notamment en lien avec le bain en fusion.

Ces deux approches, bien que comparées à d'autres modèles de simulations, n'ont pas été comparées à des données d'usine.

Modèles pilotés par les données pour la température du bain Lorsque des données d'usine sont disponibles, d'autres approches comme celles de modèles pilotées par les données peuvent être envisagées pour réaliser l'estimation et la prédiction de variables de procédé. Les approches pilotées par les données [10; 11; 12] forment la deuxième branche de la Figure 2.1 portant sur la prédiction de la température de bain d'un four à arc électrique.

Le développement d'un capteur virtuel pour un four électrique de recyclage de résidus métalliques réalisé à l'aide de modèles flous ou *fuzzy models* [10]. Le modèle flou [10] est basé sur les connaissances fondamentales du système quant à ses phénomènes de transferts thermiques.

La sortie du modèle correspond à l'estimation continue de la variation de la température du

bain. Il est alors possible de recaler sur la dernière mesure de température cette estimation afin de générer la température du bain estimée à partir des autres variables de procédé.

Une autre approche faisant appel à un algorithme d'apprentissage automatique pour prédiction de la température de coulée d'un four à arc électrique destiné à la production d'acier inoxydable a été également étudiée [11]. Le développement du modèle a été mené à l'aide de 53 variables de procédé liées : aux poids de chargement, aux volumes de chargement, aux puissances électriques, aux températures mesurées sur le four, au temps d'attentes et à des informations spécifiques sur les caractéristiques de l'alimentation et la qualité de la sortie du procédé.

Une comparaison de la performance entre plusieurs modèles de régression a été réalisée :

- Une régression linéaire.
- Des régressions pénalisées : Lasso et Ridge.
- Des variantes de l'algorithme de machine à vecteurs de support (SVM) utilisant les fonctions : linéaires, polynomiales et de base radiale ou *radial basis function* (RBF).

L'implémentation en usine de la solution numérique développée a pu être réalisée. La comparaison entre les performances manuelles et automatiques a montré une réduction de la variabilité des températures de coulées lors du déploiement de la solution menée sur cinq mois d'opération.

Un autre projet où la température de fonte d'un four destiné à la production d'acier était estimée à partir d'autres variables de procédé mesurées a été partagé par la division de recherche et développement de la compagnie ABB sur son site web [12]. Ce projet vient répondre au problème récurrent de la prise de mesure de hautes températures (1630°C) dans les fours. C'est dans un contexte de recherche en amélioration opérationnelle qu'un modèle de réseaux de neurones profonds prenant en entrées la température de l'eau de refroidissement des parois a été proposé. Ce modèle sert à prédire la température de fonte des coulées. Ils appellent ce type de modèle un estimateur de température non invasif. Les performances de ce type de modèle mènent la compagnie à travailler sur son implantation dans ses plateformes de contrôle.

Les exemples précédents [10; 11; 12] de projet sur des fours à arc électrique mettent en lumière le besoin de suivi de la température de bain. Cependant, la difficulté de la prise de mesure de cette température rend difficile le développement des modèles.

Alternativement, la température mesurée à la paroi est une autre variable de grand intérêt qui est, elle, mesurée en continu afin d'assurer la sécurité des opérations.

Modèles de température à la paroi

Simulation numérique de température à la paroi Les simulations numériques des articles [13; 14; 15] forment la première branche de la Figure 2.1 portant sur la prédiction de la température des parois d'un four à arc électrique. Ces fours sont des équipements consommant énormément d'énergie. C'est pourquoi plusieurs types de conceptions de fours (alimentation à courant continu ou alternatif) sont développés notamment pour la production de ferrochrome [15]. Ces modèles servent à quantifier l'impact de leurs différences sur leur consommation énergétique à l'aide du logiciel ANSYS Fluent [38]. Cette étude quantifie l'impact du changement des paramètres opératoires électriques sur la température à la paroi du four.

Quelques études présentent le développement de simulation des fours de réduction d'ilménite spécifiquement. L'objectif de ces modèles est d'améliorer la compréhension des phénomènes favorisant une usure prématuée des briques réfractaires formant les parois de l'équipement [13]. Ce modèle de simulation a pour particularité d'intégrer un système de refroidissement de la paroi. Le profil de température dans la paroi du four est simulé pour des conditions d'opérations normales et pour des conditions d'opérations extrêmes. La solution proposée est également comparée à une simulation correspondant aux standards industriels.

D'autres simulations numériques prennent en considération la génération d'un champ électromagnétique et ses effets sur les profils de vitesse et de température dans un four de raffinage du titane [14].

Les approches par simulation numérique [13; 14; 15] peuvent nécessiter plusieurs heures pour compléter leur exécution, selon les ressources computationnelles disponibles (200 hours [15]). Ainsi, ce type de modèle n'est pas envisageable pour des applications de support à la prise de décision opérationnelle qui requièrent une exécution en ligne.

Des approches utilisant les algorithmes d'apprentissage automatique nécessitent typiquement moins de puissance de calcul, rendant possibles les applications industrielles en ligne.

Modèle d'apprentissage automatique de température à la paroi Étant donné que les fours à arc électrique sont des procédés très instrumentés, la quantité appréciable d'états mesurés permet d'envisager l'utilisation d'algorithmes d'apprentissage automatique pour générer des prédictions. La deuxième branche de la Figure 2.1 regroupe des exemples de prédiction de la température à la paroi d'un four à arc électrique à l'aide d'algorithmes d'apprentissage automatique. L'article 1 s'inscrit dans cette branche, avec l'unicité d'être appliqué à un contexte de four de réduction d'ilménite.

Un four à arc électrique servant à la production de ferronickel de la compagnie Cerro Matoso S.A. a été l'objet de deux études [16; 17] visant le développement de prédicteurs de température de paroi à base de réseau de neurones profonds.

Une première étude [17] ciblait la valorisation des variables de procédé mesurées. Ces mesures comprenaient :

- L'alimentation en minerai (1)
- Le courant aux électrodes (3)
- La tension aux électrodes (3)
- La position relative des électrodes (3)
- La présence d'arc aux électrodes (3)
- La puissance alimentée au four (1)
- La composition chimique de l'alimentation (15)
- La température mesurée dans la paroi du four (16)

Ces mesures sont échantillonnées à une période de 15 minutes sur 416 jours d'opération. Après une étape de prétraitement des données, l'entraînement de plusieurs variantes de réseaux de neurones récurrents a été mené. Six architectures combinant les algorithmes de GRU, de LSTM et de couches convolutives ont été développées pour identifier laquelle permettait les meilleures performances. Toutes les architectures comprennent une couche complètement connectée ou *dense layer* afin de fixer les dimensions de sortie du modèle.

Le modèle à base d'une seule couche GRU a été identifié comme étant le plus performant pour la prédiction de la température de la paroi de l'équipement. Le modèle prédit les valeurs de la température de la paroi sur un horizon de deux heures. Une erreur en RMSE de 1.19 °C est suffisamment faible pour envisager la surveillance de l'intégrité structurelle du four à l'aide de ce modèle.

Les travaux de [17] ont été repris dans une autre étude [16] afin d'effectuer des analyses supplémentaires, notamment celle de l'impact de l'horizon de prédiction du modèle sur la qualité de ses prédictions. Il a été possible de confirmer la dégradation de la qualité des prédictions de température à la paroi pour une prédiction de six heures dans le futur. Une variante de l'algorithme de prédiction a également été proposée en intégrant un mécanisme d'attention dans l'architecture du modèle. Quatre architectures ont été étudiées : LSTM, GRU, LSTM avec mécanisme d'attention et GRU avec mécanisme d'attention. Les auteurs rapportent qu'en utilisant ce mécanisme, les dépendances présentes dans les données du four de production de ferronickel sur le long terme étaient mieux captées par le modèle.

Les méthodes proposées dans [17] et [16] ont inspiré l'approche utilisée pour la prédiction

de la température de la paroi du four pilote présentée dans ce mémoire. L'applicabilité de la méthode à un four pilote de réduction d'ilménite plutôt qu'à un four à arc électrique de production ferronickel sera présentée dans l'article 1 à la Section 4.

2.2.3 Variables de fours à arc électrique liées à l'état des phases

Simulation numérique de l'état des phases Les modèles de simulation numérique de fours sont utilisés pour expliquer les changements de phases qui se produisent à l'intérieur. La formation d'une épaisseur de matière solidifiée au pourtour interne d'un four est un phénomène qui dépend de la composition de l'alimentation et des conditions d'opération du four. Le suivi de cette variable de procédé est important parce qu'elle affecte l'intégrité des parois de l'équipement. Les publications portant sur la simulation numérique [18; 19; 20] forment la première branche de la Figure 2.1 portant sur la prédiction de l'état des phases d'un four à arc électrique.

Une approche par éléments finis a été proposée dans [18] pour la simulation d'un four de réduction d'ilménite. Une attention particulière est portée à l'interaction entre les phases liquides présentes à haute température dans l'unité : le bain de scorie et le bain métallique. Lors d'opérations normales, la température du bain métallique est inférieure de 150 °C à celle du bain de scorie menant à une solidification partielle à l'interface de ces phases.

La solidification de matière à l'interface entre le bain en fusion et la paroi d'un four électrique servant au raffinage du nickel a été l'objet d'étude en simulation [19]. Des études paramétriques ont été menées afin d'observer l'effet des conditions opératoires sur la solidification à la paroi. [19] établit également une relation entre la température moyenne dans l'équipement et l'épaisseur de matière solidifiée sur la paroi. De plus, les auteurs ont démontré l'influence de la composition chimique du bain sur le processus de solidification à la paroi. Ceci soutient l'approche proposée dans le présent travail qui considère la température de la paroi, la largeur de bain liée à la solidification à la paroi et la composition du bain comme des paramètres clefs de l'opération du four à arc électrique.

L'article de revue [20] répertorie les différences entre les modèles utilisés pour réaliser les simulations des fours à arc électrique de production d'acier. [20] souligne les contributions liées à la mécanique des fluides numérique, aux analyses par éléments finis et aux modèles de thermodynamiques. Plusieurs opportunités d'avancement de la recherche ont été identifiées comme le développement de plus de modèles pilotés par les données.

Aucun modèle piloté par les données (de prédiction ou d'estimation) de l'état des phases d'un four de réduction d'ilménite n'a été trouvé dans la littérature. Le modèle d'estimation de

largeur de bain proposé dans l'article 1 s'inscrit dans ce champ. Des modèles de connaissances ont été identifiés et offrent des informations utiles pour réaliser le développement du modèle de largeur de bain de l'article 1.

Modèles de connaissances Beaucoup d'efforts ont été mis en œuvre par les scientifiques afin de mieux comprendre les mécanismes expliquant le processus de raffinage de l'ilménite. Ces travaux sont regroupés dans la deuxième branche de la Figure 2.1 portant sur la prédiction de l'état des phases d'un four à arc électrique à l'aide de modèles de connaissances.

Une étude portant sur l'influence de la température sur ces mécanismes [21] permet de faire l'étude cinétique des réactions chimiques gouvernant la transformation de l'ilménite dans un four de réduction à l'aide du logiciel FactSage [39]. Mieux comprendre ces réactions aide à interpréter les phénomènes se produisant à l'interface entre la paroi des fours de réduction et la matière en fusion se solidifiant à la paroi. La procédure expérimentale décrite dans [21] réplique le fonctionnement d'un four de réduction, avec quelques centaines de grammes de minerai et à différentes températures. La réaction de réduction en jeu est présentée à l'Équation 2.8. Cette équation montre que l'oxyde ferreux (FeO), issu du minerai d'ilménite, est réduit par le carbone issu du récipient de graphite pour former le fer métallique qui migre vers le bain métallique. Cette réaction est influencée par la température.



Les expériences menées dans [21] montrent que l'ilménite est rapidement réduite dans les 15 premières min de la réaction où la température de la scorie était respectivement de 1550 °C, 1600 °C et 1650 °C. Cette information est utile pour le projet de recherche de ce mémoire pour déterminer l'ordre de grandeur des cinétiques chimiques en jeu dans le four pilote de réduction d'ilménite.

L'article de revue [22] rassemble les connaissances actuelles sur les phénomènes de solidification de matière dans les procédés métallurgiques servant à protéger les briques réfractaires formant la paroi des équipements. Parmi les méthodes expérimentales servant à l'investigation des phénomènes de solidification, l'étude la plus utile au projet de recherche de ce mémoire est celle portant sur les mécanismes de formation macroscopiques de la solidification de matière ou *freeze lining*. Des expériences basées sur des mécanismes thermiques soulignent les effets de changements de paramètres opératoires comme la puissance alimentée aux équipements et la variation dans le flux de minerai ou d'agent réducteur alimenté.

La valorisation des données d'un four pilote de réduction d'ilménite, en tenant compte de ces connaissances fondamentales, est le fondement du travail accompli pour le modèle de largeur

de bain de l'article 1 présenté à la section 6.

2.2.4 Variables liées à la composition des phases

Modélisation et simulation thermochimiques Une autre approche d'investigation de variation de paramètres d'opération d'un procédé de réduction d'ilménite est la simulation thermochimique. La première branche de la Figure 2.1 concernant cette variable regroupe les approches par modèles de simulation qui prédisent la composition des phases d'un four de réduction d'ilménite.

Une investigation a été menée sur l'effet de la proportion élémentaire de titane, de fer et d'impuretés présentes dans les bains de scorie et de métal lors du raffinage de l'ilménite [23]. Le logiciel FactSage sert à calculer ces proportions. Une comparaison avec des mesures publiées dans la littérature montrent les performances des méthodes de thermochimie computationnelle. L'Équation 2.9 est tirée de cette étude et elle représente la réduction et la distribution des espèces à travers la phase de scorie entre parenthèses et la phase métallique entre crochets.



Cette étude souligne l'impact significatif de la température d'opération sur la composition des phases. La composition en TiO_2 dans la scorie peut passer de 77 % pour une température de 1600 °C à 95 % pour une température de 1750 °C, en proportions massiques. Cette information est cruciale pour le développement du modèle d'estimation du dioxyde de titane de l'article 2, car elle lie la température à la composition.

L'étude des interactions thermochimiques entre les phases lors de la réduction de l'ilménite est une thématique complexe qui a fait l'objet de plusieurs travaux de recherche, dont une thèse de doctorat [24]. Ce travail contient des explications détaillées portant sur le fonctionnement des différents types de fours de réduction d'ilménite. Les calculs thermochimiques sont exécutés avec le logiciel FactSage.

La simulation dynamique développée permet d'étudier la réponse des états du système à des changements de paramètres opératoires comme : la puissance alimentée, la composition chimique de la scorie et la proportion d'agent réducteur alimenté.

Expérimentation au laboratoire Les études expérimentales menées dans des laboratoires forment la deuxième branche de la Figure 2.1 portant sur la production de la composition des phases d'un four de réduction d'ilménite.

Des travaux [40] montrent l'effet d'une étape d'oxydation du minerai réalisée avant la réduction de l'ilménite. L'intérêt de la préoxydation de l'ilménite est la formation de structures poreuses avant son alimentation au four de réduction [40].

Des essais expérimentaux ont été menés dans un microréacteur instrumenté permettant d'étudier les différentes phases du mécanisme de réduction de l'ilménite [25]. Des essais comparatifs ont été menés sur un concentré d'ilménite brute et sur un concentré d'ilménite préoxydé. L'influence de la température sur les cinétiques réactionnelles des différentes étapes (phases) de la réaction a également été étudiée. La première phase montre un taux de conversion qui accélère rapidement par rapport aux deux autres phases.

En plus de l'influence de la température et de la préoxydation du minerai sur le processus de réduction, des chercheurs se sont penchés sur l'influence d'additifs sur ce processus [26]. La réduction de l'ilménite en présence de carbonate de sodium (Na_2CO_3) a été étudiée et comparée à une réduction sans cet additif [26]. Un four en silicium-molybdène de laboratoire a été utilisé afin d'effectuer la réduction d'un concentré d'ilménite composé de 43 % d'oxyde ferrique (Fe_2O_3) et de 46 % de TiO_2 en proportions massiques.

Il est établi qu'à une température supérieure à 1423 K, la majorité de la réduction se produit dans les 30 premières min de l'expérience. Le degré d'avancement de la réaction change très peu par la suite.

L'étape de préoxydation mène à une accélération de 50 % du temps requis pour que la réaction atteigne l'équilibre : 200 min pour le minerai préoxydé et 400 min pour le minerai brut. Ces résultats sont valides pour une température d'opération de 1223 K.

La connaissance des temps requis pour atteindre l'équilibre chimique en fonction de la température est utile au développement de l'estimateur de la teneur en dioxyde de titane de l'article 2.

Modèles empiriques issus de l'étude d'équipements industriels Finalement, la dernière branche de la Figure 2.1 correspond aux travaux de prédiction de la composition des phases pour des équipements industriels. Les études portant sur la composition des phases d'un procédé de réduction d'ilménite ne sont que très rarement comparé à de mesures provenant d'unités industrielles. Les deux publications suivantes montrent le potentiel de développement de modèles pilotés par les données.

Le four pilote de réduction d'ilménite du centre de recherche Outotec de Pori en Finlande est une unité qui a été étudiée conjointement à un procédé de production du minerai dans un four rotatif [27]. Dans cette étude, une investigation a été menée sur l'effet de la production

du minerai avant son alimentation au four à arc électrique. Il a été montré qu'une diminution de 27 % de l'énergie requise pour effectuer la réduction de l'ilménite était atteignable en effectuant la préréduction du minerai avant de l'alimenter au four de réduction. De plus, cette étude décrit brièvement le développement d'un modèle d'inférence basé sur la mesure d'un spectromètre à émission optique qui analyse les pics d'émission élémentaires du titane et du fer émis par l'arc plasma. Le modèle de calibration linéaire permet la prédiction de l'oxyde ferreux FeO présent dans la scorie grâce à un R^2 rapporté de 0.57.

La prédiction de variable critique des fours de réduction d'ilménite est une thématique qui a fait l'objet d'un mémoire de maîtrise détaillant le développement de modèles de la teneur en FeO dans la scorie provenant de plusieurs fours de réduction d'ilménite de taille industrielle [28]. Ce projet de recherche a été possible grâce à la collaboration de la compagnie Q.I.T. Fer et Titane devenue aujourd'hui Rio Tinto Fer et Titane – Opérations Québec. Le caractère dynamique de la composition chimique est établi par une analyse d'autocorrélation. L'auteur propose l'utilisation de modèles (linéaires) de type autorégressifs à moyennes mobiles ou *autoregressive moving average* (ARMA) pour la prédiction de teneur en FeO de la scorie à la prochaine coulée du four de réduction d'ilménite. Le modèle d'estimation du TiO₂ proposé dans l'article 2 diffère du modèle de [28] du fait qu'il est composé d'un RNN (non linéaire).

Le modèle ARMA de [28] prédit la prochaine valeur de FeO de la scorie. Il n'estime donc pas en façon continue entre les mesures comme le propose l'estimateur de TiO₂ de l'article 2. Ainsi, seul le modèle proposé à l'article 2 permet la considération de changements opérationnels se produisant entre deux mesures de TiO₂ sur son estimation. Il est à noter que l'évaluation du FeO ou du TiO₂ informe tout deux sur le degré de réduction de l'ilménite.

De plus, les entrées des modèles représentent une autre différence entre la solution proposée dans l'article 2 (mesures de températures de la paroi et consigne de puissance, de débits de minerai et d'agent réducteur) et le modèle ARMA de [28] (mesures précédentes de FeO).

2.3 Synthèse de la revue de littérature et objectifs de recherche

Cette revue de littérature établit que la littérature ne proposent pas de solution de prédiction de la prédiction de la température de la paroi pour un four de réduction d'ilménite ni de solutions d'estimation de la largeur de bain et d'estimation de la teneur en dioxyde de titane pouvant être déployés en ligne. Il s'en suit :

Un prédicteur de température de la paroi Le développement de ce prédicteur de séries de températures de la paroi d'un four de réduction d'ilménite spécifiquement pour plusieurs incrément de temps dans le futur. La méthodologie utilisé est expliquée à la Section 4.

Un estimateur de largeur de bain Ce modèle d'estimation répond à un besoin de déploiement en ligne pour supporter les opérations. Il se distingue aussi des autres modèles fondamentaux d'état des phases par le fait qu'il est piloté par les données issues de la prise de mesure effectuées sur le four. Le développement de l'estimateur est détaillé dans la Section 4.

Un estimateur de composition en dioxyde de titane Ce modèle estime en continu de valeurs de dioxyde de titane à partir de mesures prises sur le four. Cette caractéristique distingue ce modèle des autres modèles de composition des phases publiés. L'entraînement du modèle sur des analyses de laboratoire de fin de cycle (à la coulée) et intracoulées le distingue également des précédents modèles. Le développement de ce modèle est présenté dans la Section 6.

CHAPITRE 3 MÉTHODOLOGIE ET ORGANISATION

3.1 Méthodologie associée aux objectifs

Ce projet de recherche a pour objectif de démontrer la faisabilité du développement de capteurs virtuels destinés à la surveillance en ligne de l'opération d'un four pilote de réduction d'ilménite. Cette surveillance de variables de sécurité et de qualité est possible grâce à la valorisation de données de procédé issues de capteurs physiques et d'analyses manuelles. Le dépouillement des données brutes, premier objectif principal, est requis pour le développement des modèles. Le deuxième objectif principal de ce mémoire est le développement des modèles de sécurité capables d'estimer et/ou de prédire des variables clefs, dont la surveillance garantissant la sécurité de fonctionnement du procédé : la température de la paroi et la largeur de bain du four. Finalement, le troisième objectif est le développement d'un modèle de surveillance de la composition en dioxyde de titane de la scorie.

- **Premier objectif principal** : Réaliser le dépouillement de données collectées sur un procédé pilote industriel.

S.O.1 : Réaliser le prétraitement des données servant à la modélisation.

1. Effectuer un prétraitement des signaux (instruments de mesure et des logiques de contrôle) en gérant des valeurs manquantes ou aberrantes dans le jeu de données, de la mise à l'échelle et le formatage en séquences.
2. Effectuer un rééchantillonage des signaux.

S.O.2 : Explorer les données du four pilote de réduction d'ilménite.

1. Analyser l'interdépendance des mesures collectées sur des données du four pilote de réduction d'ilménite.
2. Visualiser des signaux représentant les variables de procédé pour valider l'exécution du prétraitement des données.

- **Deuxième objectif principal** : Développer des capteurs virtuels pilotés par les données pour les variables de sécurité du procédé pilote que sont la température de la paroi et la largeur de bain du four.

S.O.1 : Élaboration d'une stratégie de modélisation.

1. Sélectionner les variables d'entrée des modèles de température de la paroi et de largeur de bain du four.
2. Sélectionner l'algorithme approprié pour le développement d'un capteur virtuel piloté par les données d'un système dynamique.

S.O.2 : Effectuer l'entraînement des modèles de température de la paroi et de largeur de bain du four.

1. Programmer l'exploration de l'espace des hyperparamètres des modèles.
2. Programmer l'architecture du réseau de neurones pour la température de la paroi à l'aide de la librairie Keras.
3. Programmer l'architecture du réseau de neurones pour la largeur de bain du four à l'aide de la librairie Keras.

S.O.3 : Réaliser l'évaluation de la performance des modèles obtenus en S.O.2.

1. Évaluer les performances des modèles à l'aide d'indicateurs quantitatifs.
2. Évaluer les performances des modèles à l'aide d'indicateurs qualitatifs.

S.O.4 : Évaluer l'impact de la sélection du jeu de validation sur les performances du modèle de largeur de bain.

— **Troisième objectif principal :** Développer des capteurs virtuels pilotés par les données pour la variable de qualité du procédé pilote qu'est la composition en dioxyde de titane de la scorie.

S.O.1 : Élaboration d'une stratégie de modélisation pour la composition en dioxyde de titane de la scorie.

1. Sélectionner les variables d'entrée du modèle de composition en dioxyde de titane de la scorie.
2. Sélectionner l'algorithme approprié pour le développement d'un capteur virtuel piloté par les données d'un système dynamique.

S.O.2 : Effectuer l'entraînement du modèle de largeur de bain du four.

1. Programmer l'exploration de l'espace des hyperparamètres du modèle de composition en dioxyde de titane de la scorie..

2. Programmer l'architecture du réseau de neurones à l'aide de la librairie Keras.

S.O.3 : Réaliser l'évaluation de la performance du modèle de composition en dioxyde de titane de la scorie à l'aide d'indicateurs quantitatifs.

S.O.4 : Évaluation comparative des performances du modèle de titane proposé.

1. Réaliser l'analyse comparative du modèle de composition en dioxyde de titane proposé avec un modèle (ARMA) proposé dans la littérature.
2. Évaluer l'impact de la sélection du jeu de validation sur les performances du modèle de composition en dioxyde de titane de la scorie.

TABLEAU 3.1 Sections associées aux sous-objectifs du premier objectif principal

Sous-objectif	Méthodologie	Section du mémoire
S.O.1.1	Sélection de l'algorithme de prétraitement	Sections 4 et 6 (article 1 et 2)
S.O.1.2	Rééchantillonnage des signaux	Sections 4 et 6 (articles 1 et 2)
S.O.2.1	Analyse de l'interdépendance des signaux	Section 5
S.O.2.2	Visualisation temporelle des signaux	Section 6 (article 2)

TABLEAU 3.2 Sections associées aux sous-objectifs du deuxième objectif principal

Sous-objectif	Méthodologie	Section du mémoire
S.O.1.1	Sélection des variables d'entrée	Section 4 (article 1)
S.O.1.2	Sélection de l'algorithme de modélisation	Section 4 (article 1)
S.O.2.1	Réglage des hyperparamètres	Section 4 (article 1)
S.O.2.2	Entraînement du modèle de température	Section 4 (article 1)
S.O.2.3	Entraînement du modèle de largeur de bain du four	Section 4 (article 1)
S.O.3.1	Indicateurs de performances quantitatifs	Section 4 (article 1)
S.O.3.2	Indicateurs de performances qualitatifs	Section 4 (article 1)
S.O.4	Évaluation de l'impact du jeu de validation	Section 5

TABLEAU 3.3 Sections associées aux sous-objectifs du troisième objectif principal

Sous-objectif	Méthodologie	Section du mémoire
S.O.1.1	Sélection des variables d'entrée	Section 6 (article 2)
S.O.1.2	Sélection de l'algorithme de modélisation	Section 6 (article 2)
S.O.2.1	Réglage des hyperparamètres	Section 6 (article 2)
S.O.2.2	Entraînement du modèle de dioxyde de titane	Section 6 (article 2)
S.O.3	Indicateurs de performances quantitatifs	Section 6 (article 2)
S.O.4.1	Analyse comparative avec un modèle ARMA	Section 7
S.O.4.2	Évaluation de l'impact du jeu de validation	Section 7

3.2 Organisation du mémoire

Deux articles et les discussions de ces derniers forment le corps de ce mémoire. Les résultats présentés dans ces deux articles ont permis de répondre aux objectifs et sous-objectifs présentés à la Section 3.1. Les Tableaux 3.1, 3.2 et 3.3 indiquent la section du mémoire traitant des objectifs correspondants.

3.3 Librairies Python

Scikit-learn

Scikit-learn ou sklearn est une librairie Python populaire et libre de droits souvent utilisés pour réaliser les étapes de prétraitements de données dans les projets en science de données [41]. Cette librairie a été utilisée à de multiples occasions au cours de ce projet de recherche pour accélérer le développement des solutions numériques proposées :

- **Mise à l'échelle des données** : Les fonctionnalités de mise à l'échelle et de stockage des paramètres nécessaires à la transformation des données permettent d'accélérer le développement des solutions numériques en prenant en charge ces considérations.
- **Division en jeux de données de validation** : La division des données en sous-ensembles de validation adaptée aux séries temporelles a été faite rapidement à l'aide d'un module offert par cette librairie.
- **Matrice de confusion** : La matrice de confusion a été calculée pour faire l'évaluation qualitative des performances des modèles de l'article 1 grâce à un module supporté par cette librairie.
- **Indicateur de performances** : À certaines occasions, cette librairie a permis le calcul des indicateurs de performances quantitatifs servant à l'évaluation des modèles des deux articles.

Plotly

Une mention à la librairie Python de visualisation Plotly nous paraît importante étant donné son rôle majeur dans le rendu visuel de tous les résultats du projet de recherche. Cette entreprise a vu le jour à Montréal en 2013 et son siège social s'y trouve toujours. La grande variété d'options permettant la représentation graphique de projets liés à la science des données a motivé l'utilisation de cette librairie libre de droits pour ce projet [42].

Keras

Keras est une librairie Python libre de droits qui offre des fonctions utiles au développement de modèles d'apprentissage automatique, particulièrement de réseaux de neurones profonds. Cette librairie est intégrée à la librairie Tensorflow, développée par Google, qui permet la construction de ces modèles. Le niveau d'abstraction élevé de Keras permet le développement rapide de modèles tout en permettant une vaste gamme de personnalisation. Typiquement, le choix de type de couches configurables, de fonctions d'activation, de fonction de coût et d'algorithme d'optimisation fait de cet outil un grand facilitateur de développement scientifique. L'ensemble des modèles du projet ont été générés à l'aide de Keras. L'entraînement des modèles est effectué localement [43].

Optuna

Optuna est une librairie Python libre de droits qui offre une structure de programmation permettant l'ajustement des hyperparamètres de modèles. Cette librairie a été mise au point afin de répondre à un besoin récurrent lors du développement de modèles piloté par les données : l'optimisation des nombreux hyperparamètres. Le nombre élevé de leviers à ajuster pour améliorer les performances des modèles d'apprentissage automatique implique que l'espace des hyperparamètres à explorer est très grand et requiert donc beaucoup de ressources computationnelles. Ainsi, cette librairie permet d'améliorer automatiquement l'efficacité de cette recherche en comparaison avec une recherche exhaustive. Cette amélioration est due à l'optimisation bayésienne et à une stratégie combinant les modèles de mélange gaussiens et les estimateurs par arbre de Parzen. Des critères d'élagages sont aussi mis en place pour limiter le temps de calcul accordé à des combinaisons d'hyperparamètres peu prometteuses. Ainsi, le temps d'exploration de l'espace des hyperparamètres est réduit [32].

CHAPITRE 4 ARTICLE 1. SAFETY SOFT SENSOR DEVELOPMENT FOR PILOT-SCALE ILMENITE ELECTRIC ARC FURNACE USING LSTM-BASED ARCHITECTURE

Auteur.e.s : Antony Gareau-Lajoie, Daniel Rodrigues, Marie-Ève Gosselin, Moncef Chioua

Date de soumission : Le 1^{er} avril 2025

Journal : The Canadian Journal of Chemical Engineering

Mots-clés : Electric arc furnace, Data-driven modeling, Long short-term memory, Pyrometallurgy, Soft sensor, Temperature prediction

4.1 Abstract

Ilmenite electric arc furnaces (EAFs) smelt titanium-iron oxide ore above 1500 °C by generating electrical arcs to produce titanium slag and pig iron. As these EAFs units are increasingly pushed to their limits, ensuring a safe and reliable operation becomes challenging. The main identified risk in ilmenite EAF operation is molten material leaking out of the unit, a scenario known as run-outs. Run-out results from the degradation of the EAF sidewalls due to a direct contact with high temperature molten material. To ensure a safe operation, ilmenite EAF sidewall temperature profile and the thickness of solid material protecting the sidewall is closely monitored by process operators. Operators commonly monitor this using temperature sensors and manual measurements of the molten metal bath size, which they conduct at each tapping cycle of the ilmenite EAF. Knowledge of the ilmenite EAF sidewall temperature prediction and the estimation of thickness of solid material protecting the ilmenite EAF sidewall between tapping cycles are valuable information that can support operators' decision-making process and help avoid run-outs. The present work proposes two data-driven models: (1) an ilmenite EAF sidewall temperature prediction model and (2) an ilmenite EAF bath size estimation model. Both models are trained solely on historical process data using long short-term memory (LSTM) and Gate Recurrent Unit (GRU) neural networks. The selected models achieve acceptable accuracy with an AMAPE of 0.29% for the sidewall temperature model and a MAPE of 9.5% of the bath size model.

4.2 Introduction

Safe operations are essential in metallurgical processes using electric arc furnaces (EAFs). EAF operators are exposed to inherent risks that have led to accidents in the past. Work detailed in [44] reports twenty serious EAF-related accidents due to steam explosions are reported from 1994 to 2016 in Australia, Germany, and North America . Across all accidents, 68 workers were injured, and 16 were killed. Improved monitoring of EAF operation could help prevent such events. A current topic of research addressing this problem is machine learning based data-driven monitoring of process variables [45; 46; 47].

Risks arise from the EAF process, where a large amount of energy is transferred from graphite electrodes to the ore fed to the unit. Lab-scale and pilot-scale EAFs are typically operated at hundreds of kilowatts. Active power is reported to reach values between 400 kW and 600 kW in lab-scale units [27]. Industrial-scale units generally require orders of magnitude more electric power see e.g., [48] where the active power is 75 MW. The energy required to bring the fed material to high temperature and up to fusion depends on the type of ore fed to the EAF. For ilmenite, a titanium-iron oxide mineral, the reported operating temperature ranges for slag are between 1650 °C and 1700 °C, and for the metal bath, between 1500 °C and 1550 °C [27]. Sidewall temperature readings of ilmenite EAFs can vary with the thickness of refractory bricks, the depth of the thermocouple, and efficiency of the cooling system. [13] reports a 400 °C design limit to ensure structural integrity of copper sidewall coolers, while indicating that the typical refractory lining temperature limit is lower. Operators commonly use EAF sidewall temperature profiles to monitor molten bath temperature and prevent structural decay. Temperatures are measured using thermocouples located inside the EAF sidewall.

A major incident that can occur at high temperatures is *bath infiltration* in the refractory brick walls of the EAF [49]. Depending on operating conditions, this bath infiltration can lead to molten material leaking out of the unit. This event is referred to as a *run-out* [50]. Run-outs can occur at any sidewall level that is directly exposed to the molten bath. They are considered events of high severity. To prevent direct sidewall exposure, the overall high temperature of the molten bath must allow a certain amount of material to solidify on the surface of refractory bricks. This solid material layer is called the *freeze lining* [22]. The freeze lining acts as both a protective layer and an insulation layer. Note that an excess of solidified material can make the opening of tap-holes difficult [51] and reduce the operational volume of the EAF, which is undesirable. Adequate EAF temperature profile monitoring could prevent run-outs.

While temperature sensors can monitor the current sidewall temperature, operators require models to predict future sidewall temperatures. Such predictions can support the EAF operators avoid run-outs at an early stage as this allows for corrective actions to adjust the predicted temperature trajectory, thereby preventing overheating and run-outs. Moreover, sidewall temperature prediction is valuable to EAF operators due to the presence of a significant lag between the measured sidewall temperature variation and the molten bath temperature variations. Authors propose in [17] a prediction model of the furnace lining temperature in a ferronickel production process. The proposed model is based on the gated recurrent unit (GRU) neural network. For this same process, additional work detailed in [16] predicts the temperature in an EAF lining using long short-term memory (LSTM) and GRU networks with *attention mechanism* [52]. Authors in [1] propose LSTM-based sidewall temperature predictor for a pilot-scale EAF in an ilmenite smelting production process. These studies demonstrate that machine learning algorithms have potential for predicting EAF sidewall temperatures. Such models can be considered as an "alert generator" indicating to the EAF process operator the direction of change in sidewall temperature before reaching critical operation temperatures.

Freeze lining thickness is another critical variable in the EAF operation. This variable is not directly measured. Nevertheless, EAF operators can benefit from its continuous estimation. In [19], authors present a modeling framework that simulates freeze lining formation and its dependency on operating conditions in an electric nickel matte smelting furnace. This study shows a direct relationship between temperature in the refractory wall and freeze lining thickness. [8] developed a freeze lining model for an ilmenite EAF using heat transfer, solidification and melting in the freeze lining and furnace wall models. Although these freeze lining thickness models offer insights about phenomena occurring inside ilmenite EAFs, their high level of complexity and computational cost prevent their on-line deployment as operator support systems.

In industrial practice, *bath size* is used as a proxy variable of freeze lining thickness. Operators calculate bath size from the mass they collect after a tap and the bath descent, which provides information about the volume occupied by the tapped material. Authors in [1] proposes an LSTM-based ilmenite EAF bath size estimator capable of achieving a mean absolute percentage error of 13.5% that has been trained on a three-day test period.

Secrecy surrounding ilmenite smelting technology explains the lack of related published information related to on-line estimation and prediction of process variables like temperature and bath size from the early 2000s [24]. Even two decades later, the authors of this paper corroborate this fact. This research aims to tackle these modeling challenges in sidewall

temperature prediction and bath size estimation by applying a systematic machine learning framework that could be adapted to EAFs other than the one considered in the present work.

The current work extends the analysis and interpretation of the preliminary LSTM-based model presented in [1]. To the authors' best knowledge, our previous work published in [1] is the only available contribution proposing an on-line sidewall temperature predictor for ilmenite EAFs. Additionally it also is the only available contribution proposing a method for on-line bath size estimation for ilmenite EAF processes. This study differs from [1] in the following ways:

- Systematic hyperparameter selection using the *Optuna* framework and the *keras* Python library.
- Addition of a blocked cross-validation feature adapted to time series allowed by a larger calibration and validation datasets (6 weeks vs. 3 days).
- Model performance evaluation with additional metrics: mean squared error, root mean squared error and confusion matrix.

The sidewall temperature predictor design methodology has been refined in this work and more details regarding the increment intermediate predictions are offered. Refinement of both methodologies previously presented makes the contribution of this paper twofold:

1. Development of an ilmenite EAF sidewall temperature predictor using a sequence-to-sequence LSTM-based architecture and engineered input features.
2. Development of a multiple-input ilmenite EAF bath size estimator using a sequence-to-one LSTM-based architecture using measured process variables.

The remainder of the paper is structured as follows: Section 4.3 presents an ilmenite EAF key elements and operations procedure. Section 4.4 covers feature selection, LSTM-based model, hyperparameters selection and performance evaluation methods used for the sidewall temperature predictor and the bath size estimator. Section 4.5 details the dataset collected from the pilot-scale unit and the preprocessing steps. The development of the sidewall temperature model and the bath size is also described in Section 4.5. Section 4.6 discusses the findings. Finally, Section 4.7 summarizes the results and discusses the limitations of the proposed models.

4.3 Pilot-scale ilmenite reducing electric arc furnace

Ilmenite EAFs are used to upgrade ore to the desired titanium oxide content by melting it and exposing it to a reducing agent. The reduction reaction converts iron oxides to their metallic state, and lowers the overall temperature of the molten bath because of its endothermic

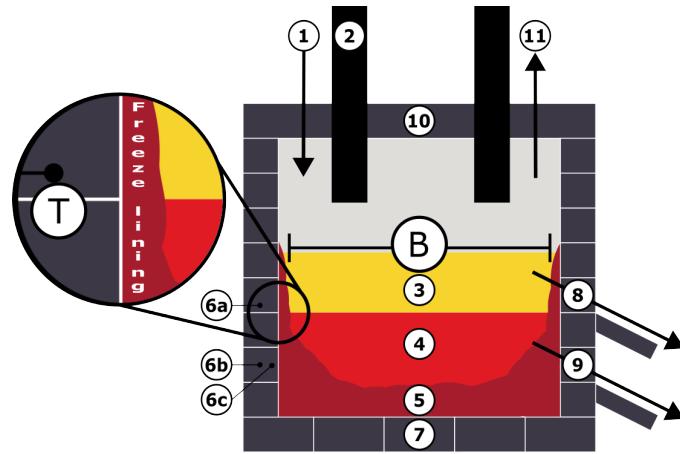


Figure 4.1 Electric arc furnace main element locations. (1) Ore and reagent inlet; (2) Graphite electrodes; (3, 4) Molten bath composed of slag bath (3) and metal bath (4); (5) Freeze lining; (6a, 6b, 6c) Thermocouples at various heights and depths; (7) Refractory bricks; (8, 9) Tap-holes for products I and II; (10) furnace roof; (11) Gas outlet. (Reprinted with permission from [1])

nature [24]. The metallic iron sinks to the metal bath. The feed of an ilmenite EAF is composed of ground ilmenite rich concentrate mixed with a reducing agent [28]. Ilmenite EAFs operate in a semibatch mode: while their feed is continuous, only a fraction of the molten content is extracted from the unit at the end of every cycle called *tapping cycle*. The pilot-scale ilmenite EAF main element locations are indicated in Figure 4.1.

Electric energy is discharged into the ilmenite EAF by an open plasma arc generated between graphite electrodes and the molten bath. The amount of energy transferred to the molten bath depends on its distance to the graphite electrodes. This distance varies over time as electrodes are consumed at their tip [24]. The electric power input of the ilmenite EAF dictates the tapping cycle rate due to the finite volume of the unit. If energy enters the ilmenite EAF faster, ore and the reducing agent must also be fed at a higher rate, increasing the tapping cycle rate.

Control strategies active in ilmenite EAF operations include a control loop for electric power (P), a control loop for ore charge (OC), and a control loop for reducing agent charge (RAC). The three control loops have the following role in the ilmenite EAF operations:

- Electric power input (P) control loop influences the tapping cycles rate.
- Ore Charge (OC) control loop influences the molten bath temperature and the bath size.
- Reducing Agent Charge (RAC) control loop influences bath compositions and, because

of the endothermic reduction reaction, the molten bath temperature and the bath size. The bath slag bath and metal bath are extracted through *tap-holes*. Tap-holes are parts of the ilmenite EAF structure that can be pierced to allow molten material flow. Once the desired bath is collected, the corresponding tap-hole is closed by pushing clay plugs [24]. Each bath, slag and metal, has its own tap-hole.

In ilmenite EAF operations, a delicate balance must be maintained between the amount of energy transferred to the molten bath and the amount of ore and reducing agent fed to the unit. Imbalances in energy and material can lead to freeze lining issues. Excess energy relative to the fed material will cause the freeze lining to become too thin, leading to accelerated wear of the refractory bricks, bath infiltration, and possible run-outs. A lack of energy relative to the fed material will make the freeze lining too thick, leading to difficulty in tap-hole opening and limited operational volume. At each cycle, operators adjust the electric power, the ore charge, and the reducing agent charge to reach a specified slag composition, while maintaining the structural integrity of the ilmenite EAF.

The freeze lining thickness cannot be measured directly. Bath size (B) is a proxy variable of freeze lining. Bath size is estimated using two manual measurements: the bath descent after a tap (Δl) and the mass of collected material after a tap (m_{tap}).

$$B = \frac{m_{tap}}{\Delta l} \quad (4.1)$$

For the pilot-scale ilmenite EAF considered in this work, the bath size measurement obtained at each tap allows tracking the ratio of tapped material volume over bath descent value: for a given bath descent, an increase of bath size reflects a decrease of freeze lining thickness. While this bath size measurement method has a high degree of uncertainty, literature reports its common adoption in industrial practice [53].

The process data used in this work corresponds to six weeks of operation of the pilot-scale ilmenite EAF. Three or four tapping cycles occur daily. Each tapping cycle follows this procedure:

1. Feed the desired amount of ore into the unit.
2. Open the tap-hole corresponding to the metal bath or the slag bath, extract and the molten material then close the tape-hole.
3. Collect the molten material and close the tap-hole using clay plugs.
4. Measure the mass of collected material manually.
5. Collect samples for laboratory analysis.

4.4 Methods

4.4.1 Feature selection

Ilmenite EAF's process variables listed in Table 4.2 were selected for their known effect on the predicted variables validated through discussions with the pyrometallurgy team at the industrial partner site.

Sidewall temperature prediction uses past sidewall temperature measurements as model inputs reflecting the linked to past measurements of the sidewall temperature variable.

For the bath size estimator, sidewall temperature measurements were selected because of their relationship to the molten bath temperature, known to be correlated with the bath size. Electric power setpoint (P) and ore charge setpoint (OC) are also known to affect molten bath temperature. Both influence the amount of energy per mass of material, directly affecting molten bath temperature. Reducing agent charge (RAC) setpoint is another variable selected for bath size prediction because of its influence on the endothermic reduction reaction rate that affects the molten bath temperature.

4.4.2 LSTM-based model

Recurrent Neural Networks (RNNs) are neural networks able to extract temporal dependencies. RNNs suffer from convergence issues like vanishing and exploding gradient [54]. Long short-term memory (LSTM) networks have been proposed in the literature to avoid such issues [55].

LSTM-based models have been used for industrial process variable prediction and estimation [56; 57; 58].

In the present work, LSTM networks are used for regression tasks as they are able to capture the nonlinear and dynamic characteristics of the ilmenite EAF process. Figure 4.2 depicts the details of a single LSTM cell where y_k is defined by the Equation 4.2.

$$y_k = h_k = o_k \odot \tanh(c_k) \quad (4.2)$$

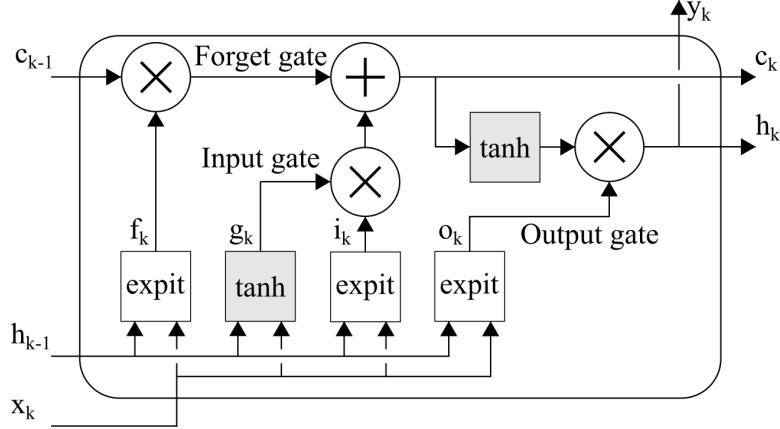


Figure 4.2 LSTM cell internal structure. (Adapted from [2])

with:

$$o_k = \text{expit}(\mathbf{w}_{\mathbf{x}\mathbf{o}} \cdot x_k + \mathbf{w}_{\mathbf{h}\mathbf{o}} \cdot h_{k-1} + \mathbf{b}_o) \quad (4.3)$$

$$c_k = f_k \odot c_{k-1} + i_k \odot g_k \quad (4.4)$$

$$f_k = \text{expit}(\mathbf{w}_{\mathbf{x}\mathbf{f}} \cdot x_k + \mathbf{w}_{\mathbf{h}\mathbf{f}} \cdot h_{k-1} + \mathbf{b}_f) \quad (4.5)$$

$$g_k = \tanh(\mathbf{w}_{\mathbf{x}\mathbf{g}} \cdot x_k + \mathbf{w}_{\mathbf{h}\mathbf{g}} \cdot h_{k-1} + \mathbf{b}_g) \quad (4.6)$$

$$i_k = \text{expit}(\mathbf{w}_{\mathbf{x}\mathbf{i}} \cdot x_k + \mathbf{w}_{\mathbf{h}\mathbf{i}} \cdot h_{k-1} + \mathbf{b}_i) \quad (4.7)$$

In Equations (4.3) and (4.5) to (4.7), x_k is the input sequences, c_{k-1} , h_{k-1} are respectively the cell and the hidden states that are updated for each element of x_k . f_k , g_k , i_k , o_k are outputs of the internal gates of the LSTM cell. During the training phase, \mathbf{w} and \mathbf{b} are weights and biases updated once a batch passes through the network. Main LSTM hyperparameters are the number of layers and the number of nodes. Optimal value of these hyperparameters highly depends on the dataset at hand. LSTM based dynamic models of industrial processes ranges from a single layer [17] to four layers [59].

Gated recurrent units (GRUs) are another type of RNNs. GRUs are reported as being more compact and more accurate than LSTM by [60]. GRUs have been proposed for the development of soft sensors in industrial processes applications [16]. LSTM and GRU are compared for sidewall temperature prediction and bath size estimation.

Sequence-to-sequence model for sidewall temperature prediction

Figure 4.3 represents sequence-to-sequence (seq2seq) and LSTM-based model architecture used for sidewall temperature prediction. In this architecture, sequences of values of process variables pass first through a single LSTM layer then through a dense layer that shapes the network output as imposed by the selected prediction horizon.

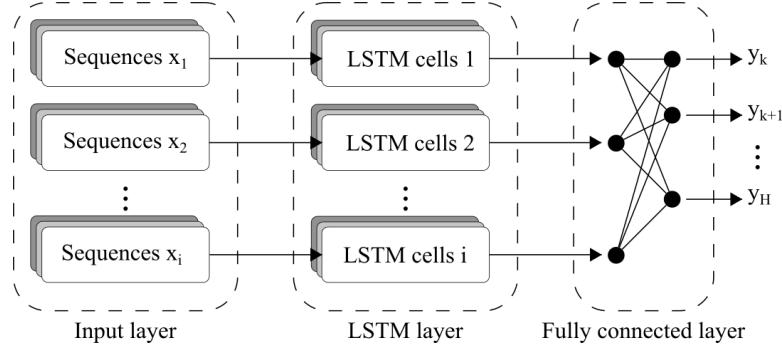


Figure 4.3 Sequence-to-sequence LSTM architecture topology. (Adapted from [3])

Sequence-to-one model for bath size estimation

Sequence-to-one LSTM-based model architecture is used in this work for bath size estimation. Sequence-to-one architecture differs from sequence-to-sequence models at the fully connected layer level. As shown in Figure 4.4, the output of a sequence-to-one model is a scalar, whereas the output of a sequence-to-sequence models is a vector.

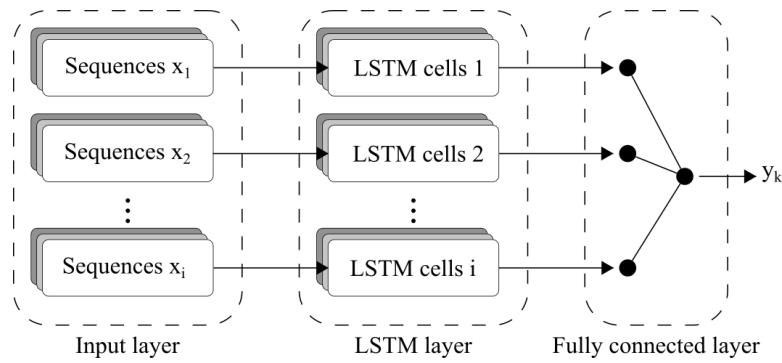


Figure 4.4 Sequence-to-one LSTM architecture topology. (Adapted from [3])

4.4.3 Performance evaluation methods

Different performance metrics are used depending on the model objective. Values predicted over the prediction horizon are compared to measurements in the case of sidewall temperature prediction. A single estimation is compared to its corresponding measurement in the case of bath size estimation.

Both models are evaluated on their ability to discriminate between stationary, increasing, and decreasing intervals.

Quantitative evaluation

A metric commonly used for the evaluation of the regression model's performance is the mean squared error (MSE) [2]. Equation 4.8 presents this metric.

$$\text{MSE}(y, \hat{y}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (4.8)$$

In Equation 4.8, y and \hat{y} are vectors of process variables measurement values and process variables predicted values, respectively. N is the number of samples in these vectors. y_i and \hat{y}_i are samples corresponding to the time index i . The MSE metric penalizes large errors such as those corresponding to outliers. Outlier detection and removal should therefore be done prior to MSE evaluation. In this study, outlier removal relies on the exclusion of samples falling outside four standard deviations of a measured process variable. A accurate model accuracy has a low MSE value.

The averaged MSE (AMSE) is used to evaluate errors over a prediction horizon. Equation 4.9 shows how this metric is computed. H is the length of the prediction horizon. The index j corresponds to the position of the sample in the predicted horizon of size H . i corresponds to the time index of the first element of the prediction horizon.

$$\text{AMSE}(y, \hat{y}) = \frac{1}{NH} \sum_{j=1}^H \sum_{i=1}^N (y_{i,j} - \hat{y}_{i,j})^2 \quad (4.9)$$

The root mean squared error (RMSE) is another metric used for model evaluation. Equation 4.10 presents this metric.

$$\text{RMSE}(y, \hat{y}) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (4.10)$$

Similarly to the MSE, an average RMSE (ARMSE) can be defined as the average RMSE to account for predicted sequences. This metric is presented in Equation 4.11.

$$\text{ARMSE}(y, \hat{y}) = \frac{1}{H} \sum_{j=1}^H \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_{i,j} - \hat{y}_{i,j})^2} \quad (4.11)$$

The mean absolute percentage error (MAPE) is a relative error metric that has the useful property of being easily interpretable since it is calculated as a ratio and expressed as a percentage. A smaller MAPE corresponds to a higher model performance. This metric is shown in Equation 4.12

$$\text{MAPE}(y, \hat{y}) = \frac{100\%}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{y_i - \hat{y}_i}{y_i} \right| \quad (4.12)$$

The averaged MAPE (AMAPE) is obtained by applying the MAPE calculation to each predicted value in a prediction horizon, as shown in Equation 4.13.

$$\text{AMAPE}(y, \hat{y}) = \frac{100\%}{NH} \sum_{j=1}^H \sum_{i=1}^N \left| \frac{y_{i,j} - \hat{y}_{i,j}}{y_{i,j}} \right| \quad (4.13)$$

For confidentiality reasons, in the present work, MSE, AMSE, RMSE, and ARMSE calculations are based on scaled values while relative MAPE and AMAPE are used to assess the model's performance.

Qualitative evaluation

A qualitative evaluation of the model's performance is also proposed in the present work. This qualitative evaluation aims to analyze the ability of the model to discriminate between stationary, increasing, and decreasing intervals. This approach resembles evaluating the performance of a classification problem and can therefore be accomplished by computing confusion matrices.

Table 4.1 shows a multi-class confusion matrix that indicates true positives (TP), misclassifications (M), and proportions (P) for each class. Ideally, TP should be maximized (100%), M should be minimized (0%) and P should be equally distributed among all classes. If proportions among classes are significantly different, the dataset is imbalanced, which might negatively affect model performance. Multi-class confusion matrices are used in this work to qualitatively evaluate the performance of prediction and estimation models.

A significant variation threshold, ΔPV_{min} , derived from an estimated signal-to-noise ratio. The estimated signal-to-noise ratio is used to discriminate between stationary intervals, in-

Table 4.1 Confusion matrix for three classes.

	Class 1 (%)	Class 2 (%)	Class 3 (%)	Proportion (%)
Class 1	TP	M _{1,2}	M _{1,3}	P ₁
Class 2	M _{2,1}	TP	M _{2,3}	P ₂
Class 3	M _{3,1}	M _{3,2}	TP	P ₃

creasing intervals and decreasing intervals. The signal standard deviation (σ) is computed over a time period during which the signal is stationary for the sidewall temperature and bath size process variables.

$$\Delta PV_{min} = n \cdot \sigma \quad (4.14)$$

Equation 4.14 shows how The method computes a threshold ΔPV_{min} using the standard deviation σ and a tuning factor n . ΔPV_{min} distinguishes stationary time intervals, $\Delta PV < \Delta PV_{min}$, from non-stationary time intervals, $|\Delta PV| > \Delta PV_{min}$.

4.4.4 Blocked cross-validation method

The use of cross-validation (CV) techniques is particularly useful when process data availability is limited, as in this study. CV is used during machine learning model development to prevent overfitting and for hyperparameter selection [61]. The CV step was performed as the first training step for both the sidewall temperature model and the bath size model.

This work uses a variation of k-fold cross-validation called blocked cross-validation *blocked cross-validation* [62]. Blocked cross-validation suits time series data because it accounts for temporal dependencies in the predicted variables. [17] use blocked cross validation for the development of a lining temperature predictor of an EAF in ferronickel production process. Figure 4.5 depicts the dataset splitting method for blocked cross-validation during hyperparameter selection. Each subset includes training data (black) and testing data (red). The training data length increases with each subset, while the testing data length remains constant.

4.4.5 Hyperparameter selection

Hyperparameter selection of LSTM-based models was performed using Optuna, an open-source framework. This framework uses Bayesian optimization with a tree-structured Parzen estimator algorithm and Gaussian mixture models to ensure efficient sampling and a pruning

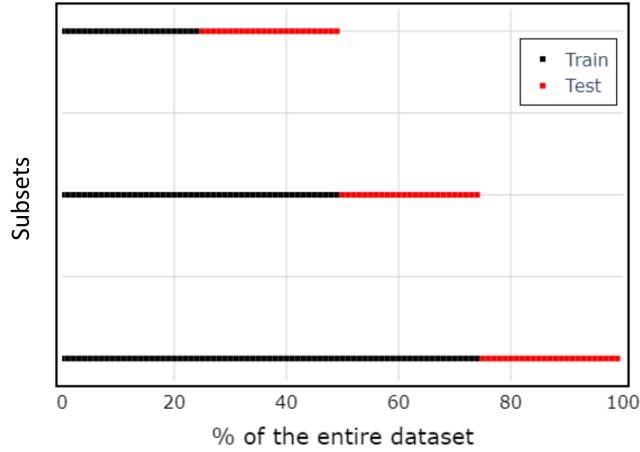


Figure 4.5 Blocked cross-validation split for time series.

algorithm to make the hyperparameter selection cost-effective. The Optuna framework is described in detail in [32].

After hyperparameter selection and blocked cross-validation, a second training is conducted to generate the final model. This final model is trained using the first 80% of the dataset and validated on the remaining 20%.

4.4.6 Data preprocessing

Missing values handling

Missing values in process measurements were handled using the last observation carried forward (LOCF) method [63; 64]. This method repeats the last available measurement value and works effectively for non-consecutive missing values.

Downsampling

In the present work, downsampling consists of using process variable values averaged over a 10-minute window. This choice is justified by the slow process dynamics (hours) dominated by heat transfer as indicated in [24]. After downsampling, the dataset contains 41 variables \times 5,853 samples.

Outlier handling

Outliers are detected using a four sigma (σ) rule and replaced by the closest sample in time.

Data scaling

Data scaling improves numerical stability in neural network training [65]. Scaling helps the neural network account for variability across process variables. The standard scaling method centers and scales each variable.

Formatting of models inputs and outputs

The raw dataset forms a two-dimensional array of timestamps and process values. This dataset requires formatting before model training. Each process value vector is augmented using past measurements over a *lookback window*. Figure 4.6 illustrates how a matrix of three process variables can be augmented with past process measurement values over a lookback window. This augmentation allows sequences of past process variable samples to be used as model inputs.

Similarly, process measurements must form sequences matching the *prediction horizon* length.

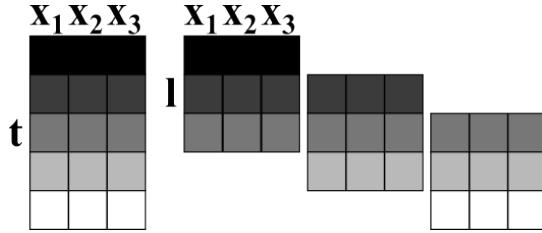


Figure 4.6 Process variables (x_i) formatting in sequences of length *lookback* (l) over the entire of the dataset (0 h to 978 h) (t).

4.5 Industrial case study

4.5.1 Dataset description

The dataset used in this work consists of data collected during six weeks. Two types of data are used: measurements of process variables (PV) and control loop setpoints (SP) both obtained from the process historian system, along with quality measurements obtained from laboratory reports. Process variable measurements and quality variable measurements are listed in Table 4.2 with their corresponding symbol and unit.

Table 4.2 Ilmenite EAF process and quality variables used for model development.

Variable	Symbol	Unit
Sidewall temperatures (33)	T	K
Electric power input (PV, SP)	P	W
Ore charge (PV, SP)	OC	kg/s
Reducing agent charge (PV, SP)	RAC	kg/s
Bath descent	Δl	m
Mass collected at each tap*	m_{tap}	kg
Bath size**	B	kg/m

*Laboratory report.

**Evaluated using Equation 4.1.

Process measurements

Process measurements were obtained during two measurement campaigns conducted several months apart. Datasets collected during both measurement campaigns are merged into a single dataset, yielding a total of 978 hours of operation data for model training.

Table 4.2 lists the 39 process variables used for model development. These process variables include: (1) 33 sidewall temperature measurements at various heights and depths in the ilmenite EAF, (2) process measurements and setpoints of electric power input, ore charge and reducing agent charge, (3) measured bath descent and (4) mass of molten material collected at each tap.

Temperatures, control loops PVs and SPs are originally collected at a period of 1 second. All signals are resampled at a period of 10 minutes.

Bath size measurement

Bath size value is available after each tapping cycle from the mass collected and the bath descent. In the present work, 184 tapping cycles are used for model development. Bath size values are aligned at the closest sampling period of 10-minute to align them with process variable measurements.

4.5.2 Sidewall temperature prediction

This section details the sidewall temperature prediction model. Using past temperature measurements, the model predicts sidewall temperature evolution over a 90-minute horizon.

Input, output, architecture and training of the temperature prediction model

The model input comprises nine sidewall temperature increments ΔT , representing 90 minutes of historical operation. ΔT derives from temperatures at a single sidewall location in the ilmenite EAF. Each temperature increment ΔT_k equals the difference between current T_k and previous T_{k-1} measurement (Equation 4.15).

$$\Delta T_k = T_k - T_{k-1} \quad (4.15)$$

The complete set of increments $\Delta T = \{\Delta T_1, \Delta T_2, \dots, \Delta T_k\}$ where $\Delta T_i \in \mathbb{R}$, represents all temperature changes.

Using temperature increments rather than absolute values improved model performance. This improvement likely stems from: (1) limited training samples, and (2) temperature increments exhibiting less nonlinearity than absolute values, reducing data requirements.

The output of the sidewall temperature prediction (\hat{T}) model is a sequence of 9 samples of sidewall temperature increments $\hat{\Delta T}$ corresponding to a prediction horizon (H) of 90 minutes sampled at 10 minutes.

Absolute temperature is reconstructed using (Equation 4.16).

$$\hat{T}_{k,h} = T_{k-1} + \sum_{i=k}^{k+h} \hat{\Delta T}_i \quad (4.16)$$

Each prediction $\hat{T}_{k,h}$ is a scalar value calculated iteratively from T_{k-1} and $\hat{\Delta T}_k$ to \hat{T}_{k+H} across the H-length horizon.

The complete prediction set is denoted as $\hat{T} = \{\hat{T}_k, \hat{T}_{k+1}, \dots, \hat{T}_{k+H}\}$ with $\hat{T} \in \mathbb{R}^H$.

Sequence-to-sequence model for sidewall temperature prediction

Figure 4.7 illustrates the sequence-to-sequence (seq2seq) LSTM-based architecture used for temperature prediction.

This architecture processes past temperature increments through an LSTM layer followed by a dense layer, outputting a vector of length H (prediction horizon).

At each time step, the model generates H predicted temperature increments.

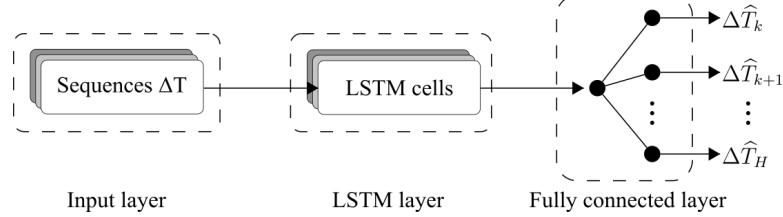


Figure 4.7 Sequence-to-sequence LSTM architecture topology for the sidewall temperature predictor.

During model training, the AMSE is computed using Equation 4.17.

$$\text{AMSE}(\Delta T, \Delta \hat{T}) = \frac{1}{NH} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^H (\Delta T_{i,j} - \Delta \hat{T}_{i,j})^2 \quad (4.17)$$

The weights and biases are then adjusted for every batch to minimize the AMSE. Hyperparameters selection is performed using the *Optuna* framework [32] with a three-fold blocked cross-validation. Finally, a model training and validation using the selected hyperparameters are conducted with an 80%-20% split.

Sidewall temperature prediction results analysis

Training the final model on an Intel Core i9 CPU (32 GB RAM) completed all trials in 30 minutes. The resulting model size is 4.04 megabytes.

Hyperparameter selection is done using the *Optuna* framework with 50 trials. Table 4.3 summarizes hyperparameters, their search ranges, and optimal values. The number of LSTM units, the number of LSTM layers, the dropout rate and the learning rate values were allowed to vary between trials. Downsampling, lookback and prediction horizon were to values consistent with the pilot ilmenite EAF dynamics.

Bayesian optimization of hyperparameters targeted three modeling objectives:

1. Determining optimal model complexity for a specified level of accuracy.
2. Identifying optimizer hyperparameters for efficient training. The learning rate is a hyperparameter that affects the performance of the optimizer.
3. Mitigating model overfitting. Adjusting the dropout rate helps mitigate model overfitting by reducing co-adaptation, thus lowering generalization errors [66].

Figure 4.8 represents the AMSE obtained for 50 trials. The set of hyperparameters leading to the lowest AMSE (0.096) is located in the first band of the histogram. Pruning underper-

Table 4.3 Preprocessing, model and optimizer hyperparameter selection for the sidewall temperature prediction model.

	Hyperparameter	Range	Value
Preprocessing	Normalization	-	Standard
	Downsampling	-	10 min
	Lookback	-	90 min
	Pred. horizon	-	90 min
Model	LSTM units*	$2^6, \dots, 2^9$	2^9
	LSTM layers*	[1, 2]	1
	Dropout rate*	0, 0.1, ..., 0.3	0.1
Optimizer	Learning rate*	$[10^{-4}, 10^{-3}]$	10^{-3}
	CV-folds	-	3

*Value obtained by Bayesian optimization using the *Optuna* framework

forming trials allows decreasing the computational load. Red bands in Figure 4.8 indicate that 31/50 trials were pruned.

Figure 4.9 depicts sidewall temperature increments calculated from measurements (black dots), and the sidewall temperature increments (red dots). The sidewall temperature increment model is calibrated on hours 0–783 and validated on hours 784–968. Figure 4.9 shows that predictions closely match measurements in both calibration and validation periods.

Figure 4.10 shows the sidewall temperature increments (black dots) and the sidewall temperature increments (red dots) for 40 hours of operation.

Figure 4.11 shows that temperature predictions follow actual measurements for the entire dataset (0 h to 978 h).

Figure 4.12 depicts the measured sidewall temperature measurements (black dots) and the predicted sidewall temperature (red dots) for 40 hours of operation. Figure 4.10. Predicted sidewall temperatures \widehat{T}_k are computed as shown in Equation 4.16.

In Figure 4.12 sidewall temperature prediction generally decreases with increasing prediction steps. Sidewall temperature is estimated in "open loop" over the prediction horizon (Equation 4.16), estimation errors therefore accumulate until the next sidewall temperature measurement is available.

Performance evaluation of the sidewall temperature model is detailed in Table 4.4. Table 4.4 indicates good performances both in calibration and in the validation datasets with the AMAPE and AMSE error metrics. The good sidewall temperature predictor performance

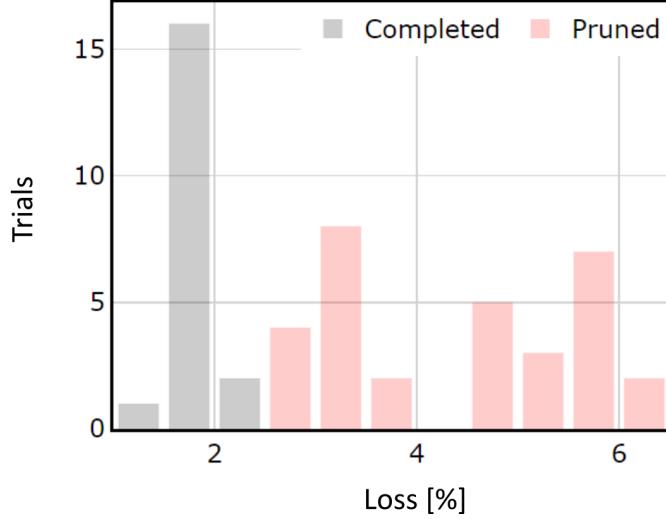


Figure 4.8 Optuna hyperparameter selection for the sidewall temperature predictor using the AMSE loss metric with 31 pruned trials.

could be explained by the slow thermal dynamics of the ilmenite EAF. Slow temperature variation leads to a locally valid linear approximation of the predicted sidewall temperature. Additionally, the large thermal inertia of the ilmenite EAF implies that the trend of variation of the sidewall temperature over the past 90 minutes (lookback of 9 samples) extrapolates the sidewall temperature variations over the next 10 minutes (the first prediction of the 9-sample prediction horizon). As scaled temperature increment values are close to zero, the AMAPE is not used.

Table 4.4 shows no significant difference between the LSTM and the GRU models with hyperparameters selection.

Table 4.4 Evaluation of the sidewall temperature predictor using AMAPE, AMSE and ARMSE error metrics.

		LSTM		GRU	
		Cal.	Val.	Cal.	Val.
Temperature	AMAPE (%)	-	-	-	-
increment	AMSE	0.28	0.09	0.30	0.08
	ARMSE	0.53	0.29	0.55	0.29
Temperature	AMAPE (%)	0.52	0.29	0.51	0.28
	AMSE	0.019	0.002	0.020	0.002
	ARMSE	0.14	0.04	0.14	0.04

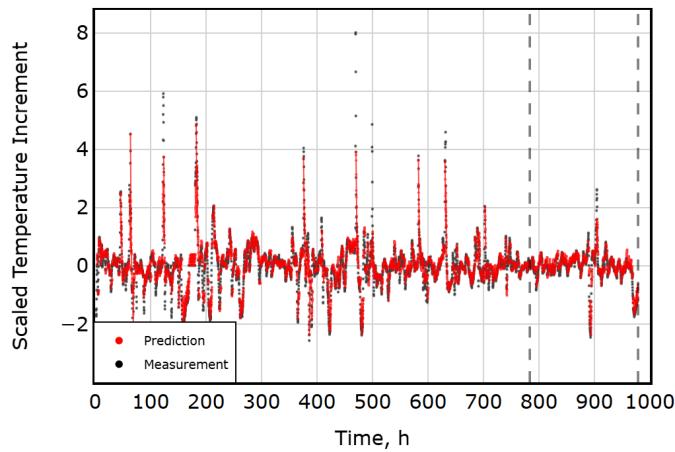


Figure 4.9 Scaled sidewall temperature increment predictions over the entire dataset (0 h to 978 h). Dashed lines indicate the validation dataset.

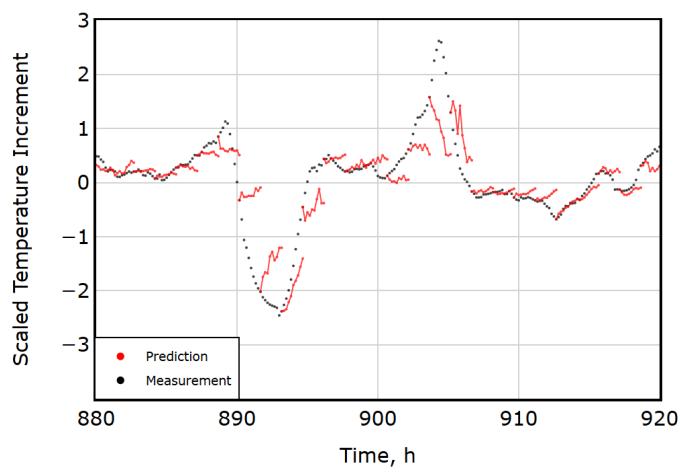


Figure 4.10 40-Hour period scaled sidewall temperature increment predictions.

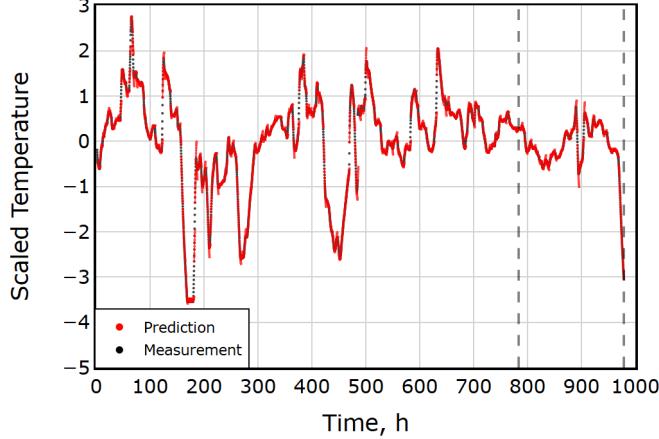


Figure 4.11 Scaled sidewall temperature predictions over the entire dataset (0 h to 978 h). Dashed lines indicate the validation dataset.

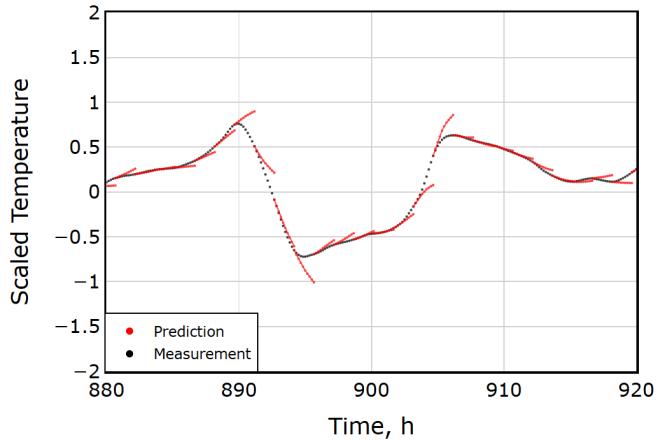


Figure 4.12 40-hour period scaled sidewall temperature predictions.

In addition to the performance metrics in Table 4.4, we propose to qualitatively evaluate the model performance. Motivated by the fact that process operators can benefit from the knowledge of the direction of change of sidewall temperatures, we qualitatively evaluate the model performance metrics.

To discriminate between increasing, decreasing and stationary temperature trends, we use the sign of the slope of the sidewall (direction of change). Temperature variations less than ΔT_{\min} are considered stationary trends while variations greater than ΔT_{\min} are considered decreasing or increasing trends depending on the sign of the temperature variation. The value of the threshold ΔT_{\min} is estimated based on the standard deviation ($\sigma = 0.161$) computed over a stationary time interval.

$$\Delta T_{\min} = n \cdot \sigma \quad (4.18)$$

A threshold ΔT_{\min} of 0.08 is obtained with an adjustment factor $n = 0.5$. Figures 4.13 depicts the sidewall temperature using the proposed approach and Equation 4.18, the sidewall temperature is segmented into increasing intervals (red dots), decreasing intervals (blue dots) and stationary intervals (black dots).

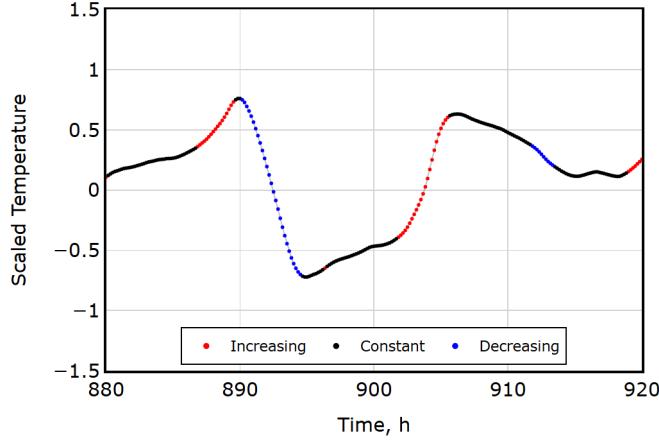


Figure 4.13 Sidewall temperature trend label attribution over 40 hours.

Table 4.5 shows that for a threshold of 0.08, 88% of temperature increases, 87% of temperature decreases and 96% of stationary temperatures are correctly predicted. Increasing sidewall temperature trends are better captured by the LSTM model than the GRU model.

Table 4.5 Confusion matrix for performance evaluation of the temperature predictor with $\Delta T_{\min} = 0.08$.

	Increasing (%)	Stationary (%)	Decreasing (%)	Proportion (%)
LSTM				
Increasing	88	12	0	6
Stationary	3	96	1	83
Decreasing	0	13	87	11
GRU				
Increasing	76	24	0	6
Stationary	1	98	1	83
Decreasing	0	13	87	11

4.5.3 Bath size estimation

The bath size model uses control loops' setpoints of the electric power input, ore charge and reducing agent charge as well as sidewall temperature measurements to estimate the current bath size.

Input, output and architecture of the bath size estimation model

Figure 4.14 shows a total of thirty-six process variables are used as inputs to the bath size estimation model: 1 electric power input setpoint (P), 1 ore charge setpoint (OC), 1 reducing agent charge setpoint (RAC) and 33 sidewall temperature measurements (T^i).

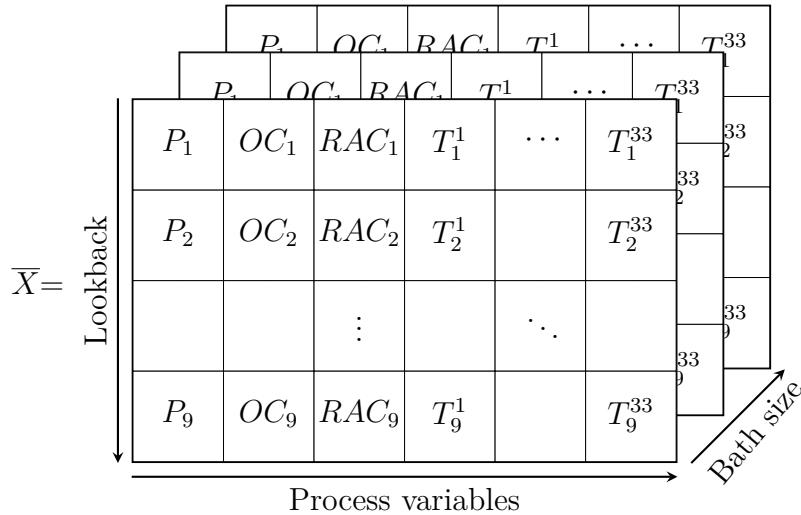


Figure 4.14 Input tensor for bath size estimation.

The bath size estimator model input tensor \bar{X} has dimensions $(36 \times 9 \times 184)$. The first dimension represents the number of measured process variables (36). The second dimension represents the number of past process measurement samples used as lookback (9) while the third dimension represents the number of bath size manual measurements (184).

The model architecture used for the proposed bath size estimator is represented in Figure 4.15. Sequences from past measurements \bar{X} are used as inputs. Each cell consists of two layers. LSTM cells are connected to a dense layer allowing the reshaping of the final output. The output of the model B_k is the estimated bath size value at the current time step.

In the training step, MSE is calculated according to Equation 4.19 where \hat{B} is the estimated bath size, B is the bath size measurement and N the number of manual bath size

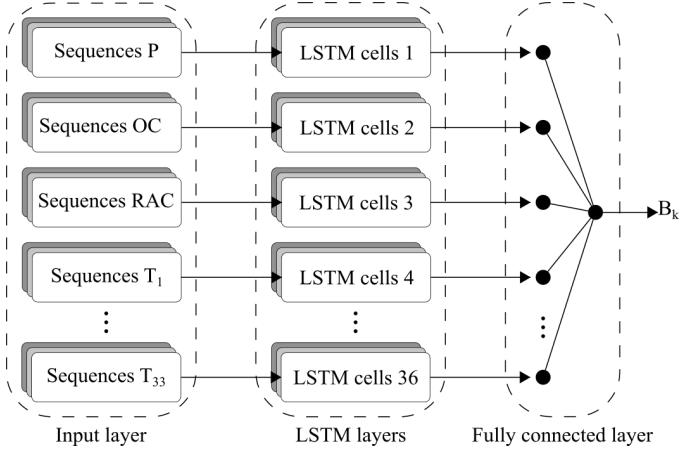


Figure 4.15 Sequence-to-one LSTM architecture topology for the bath size predictor.

measurements.

$$\text{MSE}(B, \hat{B}) = \frac{100\%}{N} \sum_{k=1}^N (B_k - \hat{B}_k)^2 \quad (4.19)$$

Bath size estimation results analysis

The bath size model was trained using an Intel Core i9 CPU (memory = 32 gigabits), with training trials completed in 15 minutes. The resulting model size is 0.23 megabytes.

Hyperparameter selection used *Optuna* framework with 50 trials. Table 4.6 lists the hyperparameters and their ranges of variation when applicable. Tuned parameters included LSTM units/layers, dropout rate, and learning rate. Downsampling and lookback were set to values consistent with the pilot ilmenite EAF dynamics.

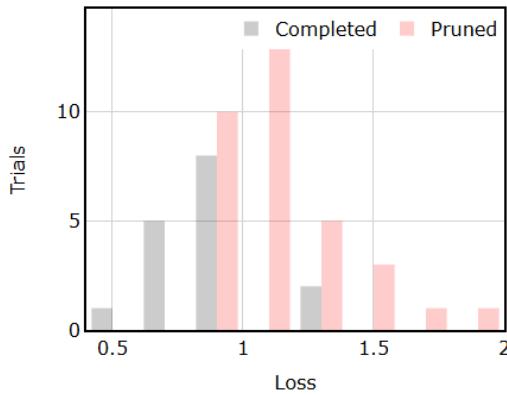


Figure 4.16 Optuna hyperparameter selection for the bath size estimator using the MSE loss metric with 34 pruned trials.

Table 4.6 Preprocessing, model and optimizer hyperparameter selection for the bath size estimation model.

	Hyperparameter	Range	Value
Preprocessing	Normalization	-	Standard
	Downsampling	-	10 min
	Lookback	-	90 min
	Pred. horizon	-	90 min
Model	LSTM units*	$2^5, \dots, 2^7$	2^6
	LSTM layers*	[1, 2]	2
	Dropout rate*	0, 0.1, ..., 0.2	0.1
Optimizer	Learning rate*	$[10^{-3}, 5 \cdot 10^{-3}]$	10^{-3}
	CV-folds	-	3

*Value obtained by Bayesian optimization using the *Optuna* framework

Figure 4.16 represents the MSE of 50 trials. The set of hyperparameters leading to the lowest MSE (0.59) is located in the first band of the histogram. Red bands represent the pruned trials that were stopped before completion, leading to higher computational efficiency. The high number of pruned trials indicates that most explored hyperparameter values led to underperforming models and emphasizes the importance of adequate hyperparameter selection for bath size modeling. The search explored hyperparameter ranges from Table 4.6. Using the selected hyperparameters, the model calibrated on data from hours 0-800 and validated on data (the next available tap) from hours 803-962 the proposed model has a MSE of 0.24 in calibration and 0.54 in validation. Note that the calibration-validation split is different from the model presented in Section 4.5.2 because the split is computed using the model output variable's timestamps.

Figure 4.17 compares the measured (black dots) and estimated bath size in the period in which manual measurement is not available (red curve) over a time span of the entire dataset (0 h to 978 h).

Figure 4.18 focuses on a period of 40 hours during which it can be observed that the general trend of bath size variations is relatively well captured.

Table 4.7 shows the MAPE performance metric of the bath estimation model value of 6.6% for the calibration dataset and of 9.5% for the validation dataset (time interval in between the dashed black line). Comparing bath size model validation accuracy (9.5%) to bath size variation over two consecutive batch cycles (22% in average with peaks up to 60%) indicates that bath size estimation could help operators in selecting the appropriate corrective action

to be applied on the ilmenite EAF process, mostly for large variations of bath size. MSE and RMSE metrics show the same trend with a calibration performance of 0.24 and 0.49 respectively and a validation performance of 0.54 and 0.73. Model performances are compared to a GRU model, after rigorous hyperparameter selection. Results are presented in Table 4.7 and shows better general performances for the LSTM model for the MAPE, the MSE and the RMSE metrics. Note that the obtained performance metrics values can vary with the selected validation interval.

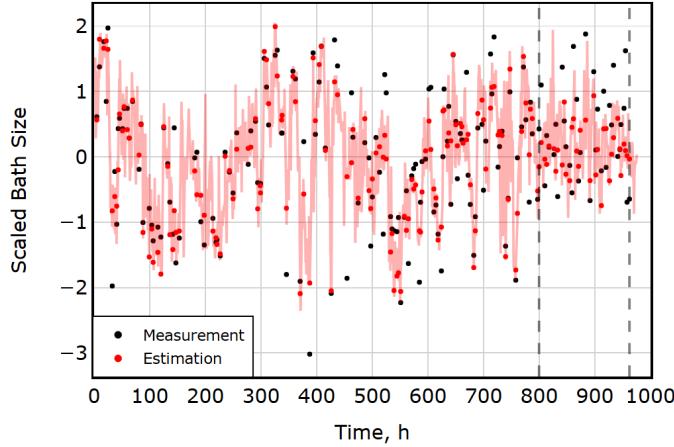


Figure 4.17 Scaled bath size predictions over the entire dataset (0 h to 978 h).

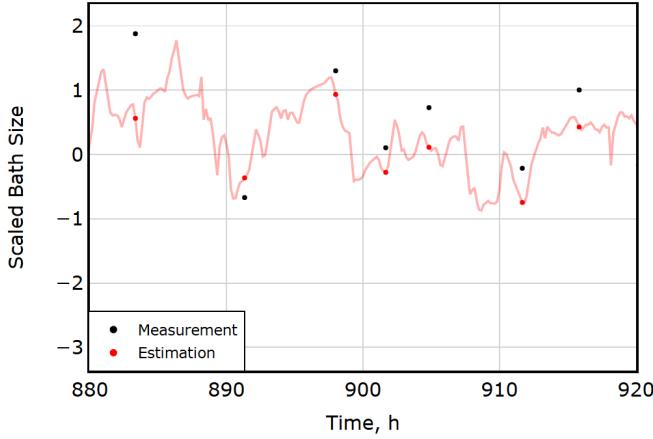


Figure 4.18 40-hour period scaled bath size predictions.

Figure 4.19 shows the bath size direction of change (increasing, stationary and decreasing) obtained using the method detailed in Section 4.4. Using Equation 4.20, a threshold $\Delta B_{min} = 0.08$ is obtained using a standard deviation ($\sigma = 0.163$) computed over data from hours 86-121 (constant trend) and an adjustment factor $n = 0.5$.

Table 4.7 Evaluation of the bath size estimator using MAPE, MSE and RMSE error metrics.

	LSTM		GRU	
	Cal.	Val.	Cal.	Val.
MAPE (%)	6.6	9.5	9.9	11.0
MSE	0.24	0.54	0.56	0.72
RMSE	0.49	0.73	0.75	0.85

$$\Delta B_{min} = n \cdot \sigma \quad (4.20)$$

Table 4.8 shows that, using a threshold $\Delta B_{min} = 0.08$, 29% of bath size increases, 38% of bath size decreases and 50% of stationary bath size values are correctly estimated for the validation dataset. The GRU model showed performances for the same threshold for correct prediction of 29% for bath size increases, of 38% for bath size decreases and of 50% for stationary bath size. A correct estimation of bath size increases and decreasing is useful information for the process operator. Nevertheless, bath size increases can lead to critical safety events as a large bath size may lead to a thin freeze lining that causes premature wear of sidewall refractory bricks.

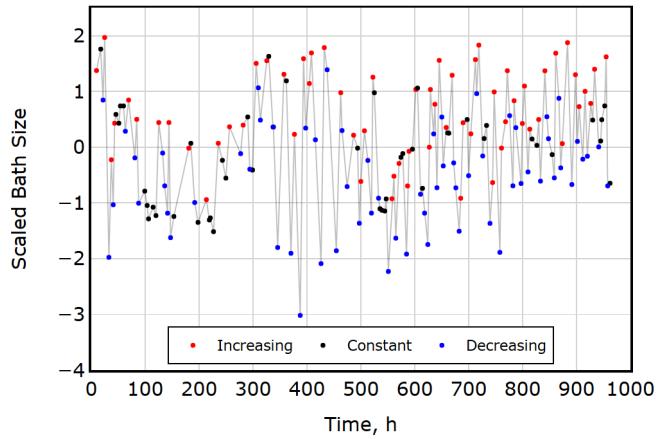


Figure 4.19 Scaled bath size trend labels attribution over the entire dataset.

Table 4.8 Confusion matrix for performance evaluation of the bath size estimator with $\Delta B_{min} = 0.08$.

	Increasing (%)	Stationary (%)	Decreasing (%)	Proportion (%)
LSTM				
Increasing	29	64	7	40
Stationary	25	50	25	23
Decreasing	15	46	38	37
GRU				
Increasing	43	43	14	40
Stationary	12	62	25	23
Decreasing	15	62	23	37

4.6 Discussion

4.6.1 Sidewall temperature prediction

The sidewall temperature predictor described in Section 4.5.2 shows high performances, for the validation subset (0.29% AMAPE, 0.0016 AMSE, 0.040 ARMSE) over a 90-minute prediction horizon. These results are consistent with those presented in [17] and [16] where a soft sensor of sidewall temperature in a ferronickel EAF is proposed. In [17] and [16], the proposed sidewall temperature predictors are able to achieve an RMSE of respectively 1.2 °C and 1.6 °C over a prediction horizon of 120 minutes.

The sidewall temperature prediction model is validated on a dataset where sidewall temperature values are located in a narrower interval than those encountered in the calibration dataset. For instance, large temperature increases observed around hours 350, 390, 420 and 450 in the calibration subset have no equivalent in the validation subset.

Section 4.5.2 highlights the high performance of the proposed model in predicting temperature increases (88% of true positive) and decreases (87% of true positive). Additionally, it can be noted that the model does not invert temperature increase and temperature decreases.

Fast temperature changes are more difficult to predict by the proposed model, as seen in Figure 4.12 at hours 890, 895 and 905. This could indicate that the past sidewall temperature measurements do not contain the required information to predict fast temperature changes. Tests not shown in this paper model included as input P, OC and RAC setpoints did not allow to capture information useful to increase accuracy.

Considering the current performance of the sidewall temperature model, the proposed mod-

eling approach could be used for other pyrometallurgical processes like ferronickel EAF, stainless steel EAF or scrap melting EAF. The LSTM model would require to be trained on the unit temperature measurement signal and proper selection of the lookback window and prediction horizon length should be performed.

4.6.2 Bath size estimation

The bath size estimator described in Section 4.5.3 shows acceptable performances (9.5% MAPE, 0.54 MSE, 0.73 RMSE). Bath size nonlinear and dynamic nature makes its modeling challenging when limited training and validation datasets are available. Irregular sampling of bath size measurements limits number of adequate estimation methods [67].

Table 4.8 also shows that increasing bath size periods are better estimated from the GRU model and that the decreasing bath size periods are better estimated LSTM. In both cases, since the correct estimation of both increasing and decreasing periods were below 50%, the LSTM model was deemed more useful as its quantitative performances were greater.

A possible explanation for low bath size model performance could be the low bath size measurement quality. Bath size depends on two manual measurements (see Equation 4.1). The current manual measurement method leads to high variability and randomness compared to measurement obtained from sensors. Thus, higher variability and randomness could prevent the current model architecture to properly capture the governing dynamics of the pilot-scale ilmenite EAF.

Large estimation errors are observed for large bath size values. One reason for this large estimation error could be the limited number of bath size observations above 1.3 (only 6 over 37 observations in the validation dataset and 15 over 147 in the calibration dataset).

4.7 Conclusion and future work

Soft sensors are crucial for supporting ilmenite EAF process operators ensuring a reliable and safe operation. This paper demonstrated how modern ML architectures like LSTM and GRU networks could be used to capture dynamic information from process variable times series. The proposed sidewall temperature predictor could be used for process monitoring and the bath size estimator could be used for process monitoring.

The LSTM-based seq2seq sidewall temperature predictor reaches an AMAPE of 0.29% over a prediction horizon of 90 minutes. Hyperparameter selection is conducted using the Optuna framework. Direction of change of sidewall temperature trends are correctly predicted for 88%

of temperature increases, 87% of temperature decreases and 96% of stationary temperatures. The LSTM-based sequence-to-one bath size estimator tuned with the Optuna framework reached MAPE of 9.5% for the validation dataset. Direction of change of the bath size trends are correctly predicted for 29% of bath size increases, 38% of bath size decreases and 50% of stationary bath sizes.

For both developed models, and despite the efforts made to avoid hyperparameter values impact on the drawn conclusions, the current methodology is vulnerable to hyperparameter ranges used in the Optuna framework. The selected hyperparameter ranges could benefit from being extended and further discretized.

LSTM and GRU architectures used in this work are black box models that are difficult to interpret by non-experts. Future work could include an explainable artificial intelligence (XAI) analysis [68]. The SHapley Additive exPlanations (SHAP) algorithm is a state-of-the-art method well suited for this task that could be considered [69].

Acknowledgements

The authors would like to acknowledge the financial support from Rio Tinto Iron and Titanium Quebec Operations and Mitacs through the Mitacs Accelerate program grant IT36371.

CHAPITRE 5 ARTICLE 1. DISCUSSION

Le premier objectif de ce chapitre est de détailler les étapes de dépouillement des données collectées sur le four pilote de réduction d'ilménite opéré chez Rio Tinto Fer et Titane - Opérations Québec, à Sorel-Tracy. Ces étapes d'analyse non incluses dans l'article 1 nous ont guidés dans le choix des variables explicatives et du type de modèle à utiliser pour la prédiction de la température de la paroi et l'estimation de la largeur de bain du four. Plus spécifiquement, nous procémons à : (1) la vérification de l'interdépendance des mesures collectées sur le four, (2) la vérification de la possibilité de réduire la dimension de ce jeu de données à l'aide d'une méthode linéaire (analyse par composantes principales), (3) l'analyse de la présence de relations dynamiques dans les données utilisées par le modèle d'estimation de largeur de bain du four pilote de réduction d'ilménite.

Le second objectif de ce chapitre est d'analyser l'influence du partitionnement calibration-validation sur les performances du modèle d'estimation de la largeur de bain et ainsi d'évaluer sa robustesse.

5.1 Analyse de l'interdépendance des mesures collectées sur des données du four pilote de réduction d'ilménite

La Figure 5.1 illustre 23 des 33 signaux de thermocouples utilisés par les modèles de largeur de bain. Ces 23 signaux sont particulièrement intéressants à comparer puisque leur positionnement est précisément connu et réparti dans l'équipement à différentes profondeurs. Les autres thermocouples étaient à une seule profondeur dans le four et plus éloignée des parois (voûte ou base de l'unité), rendant leur interprétation spatiale moins évidente. La Figure 5.1 indique une augmentation de la température mesurée en fonction de la position du thermocouple dans la paroi. Les graphiques de gauche correspondent aux mesures de température à la surface des parois, ceux du centre à une profondeur intermédiaire et ceux de droite à une profondeur importante. Les différentes couleurs indiquent sur laquelle des quatre faces de l'unité pilote la mesure a été réalisée. Le thermocouple *T9* sert de référence dans l'article 1 pour le développement du prédicteur de température de la paroi.

La Figure 5.1 montre des changements simultanés dans les mesures de température. Afin de quantifier la corrélation de ces signaux, les coefficients de corrélation de Pearson [34] sont calculés selon l'Équation 5.1.

$$\rho_{X,Y} = \frac{\sigma_{X,Y}}{\sigma_X \sigma_Y} \quad (5.1)$$

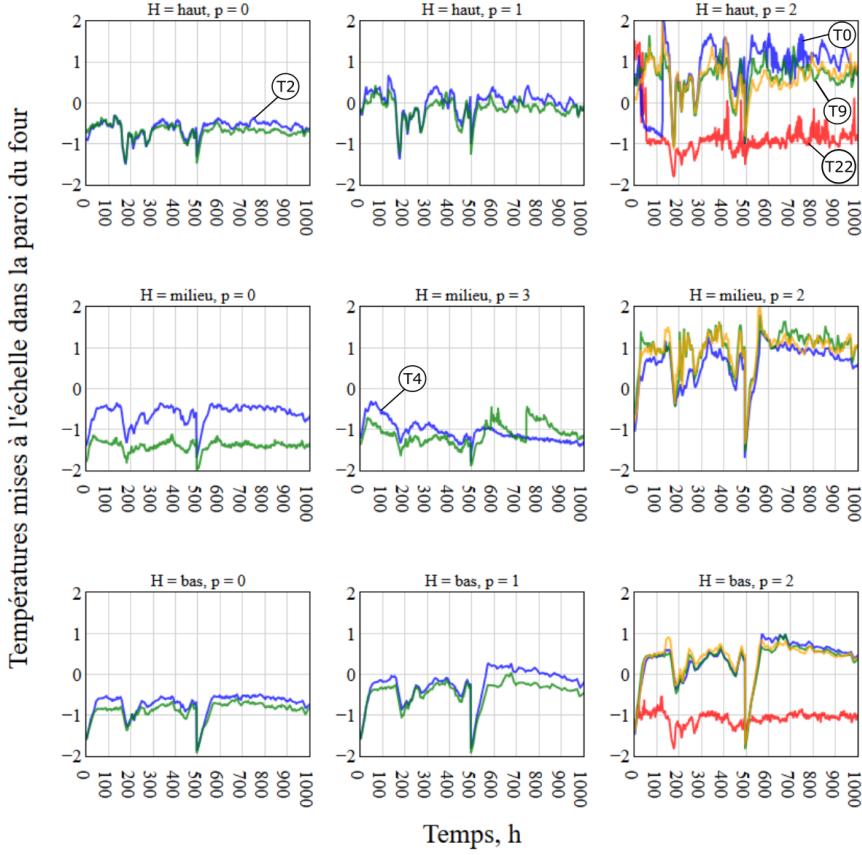


FIGURE 5.1 Évolution des mesures de température obtenues par 23 des 33 thermocouples disponibles sur le four pilote de réduction d’ilménite. Les températures sont groupées selon leur position. Les faces est (vert), sud (bleu), ouest (jaune) et nord (rouge) de l’équipement sont instrumentées. Les thermocouples analysés dans la discussion (T_0 , T_2 , T_4 , T_9 , T_{22}) sont identifiés.

La Figure 5.2 illustre que la majorité des thermocouples sont corrélés positivement. Les thermocouples T_4 et T_{22} se distinguent par une corrélation de signe opposé aux autres thermocouples. L’explication pour le thermocouple T_{22} est qu’il est situé sur la face nord qui est moins instrumentée et où les thermocouples sont placés différemment par rapport aux électrodes. Une hypothèse concernant le thermocouple T_4 est qu’il serait vis-à-vis d’une accumulation de matière solidifiée, rendant le profil de température dans la paroi différent à cet endroit.

Cette analyse de corrélation des mesures de température montre que la majorité des thermocouples sont positivement corrélés, mais que des différences, en lien avec l’environnement local où la mesure est effectuée, rend difficile la sélection de seulement certaines mesures de température pour le développement du modèle de largeur de bain.

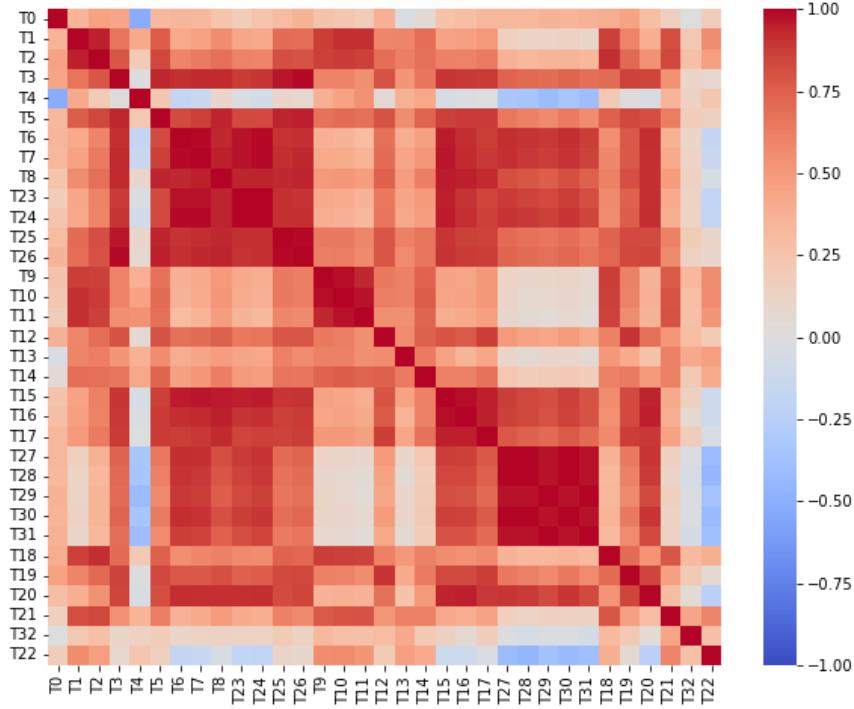


FIGURE 5.2 Colinéarité des mesures des 33 thermocouples.

5.1.1 Analyse par composantes principales sur les températures

L'analyse précédente ayant permis d'établir des corrélations entre les mesures de températures, nous avons effectué une représentation avec un jeu de données de dimension plus réduite. L'analyse en composantes principales ou *principal component analysis* (PCA) est une technique de réduction dimensionnelle qui est utilisée pour y parvenir. Cette technique est utilisée dans l'étape d'exploration des données et offre une vue d'ensemble du jeu de données constitué par l'ensemble des 23 mesures de température de paroi du four pilote de réduction d'ilménite.

Le jeu de données utilisé pour effectuer une réduction dimensionnelle est composé des 33 mesures de températures du four de réduction d'ilménite. La Figure 5.3 montre le nombre de composantes principales, c'est-à-dire de projection dans des dimensions permettant de maximiser la variance du jeu de données, atteignant une limite raisonnable de 80 %. Les deux premières composantes expliquent 81,6 % de la variance des mesures des 33 thermocouples. Cela confirme la corrélation importante entre les mesures de températures et met en lumière les deux composantes principales permettant la capture de 81,6 % de la variance. Ces deux composantes principales pourraient donc être utilisées pour alimenter le modèle de largeur de bain, plutôt que les 33 mesures de température.

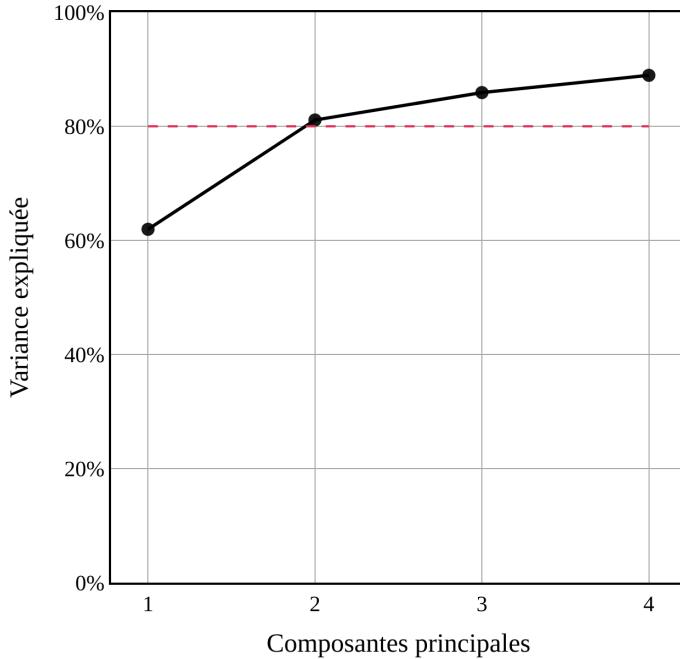


FIGURE 5.3 Contribution des composantes principales de températures.

Nous avons comparé la précision obtenue par deux modèles d'estimation de largeur de bain où les entrées sont :

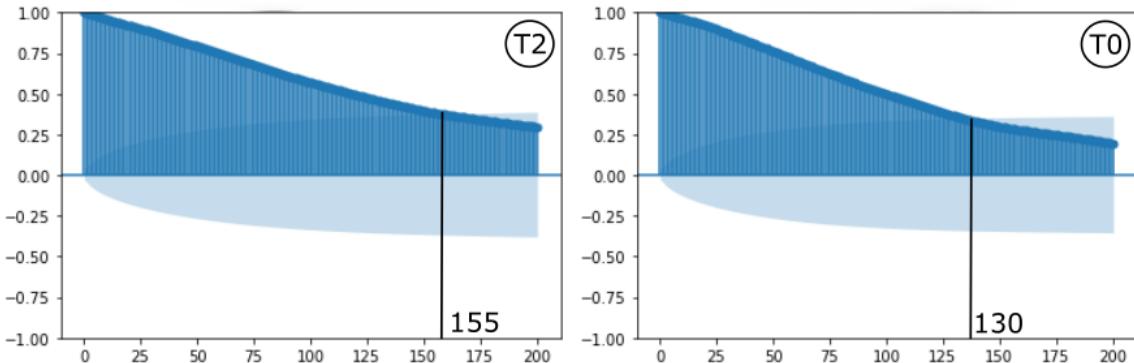
- Les 33 mesures de températures et les consignes de puissance électrique, de débit de minerai et de débit d'agent réducteur
- Les deux premières composantes principales de la température et les mêmes trois consignes d'opération.

Une précision similaire et une différence non significative en termes de temps de calcul ont été observées. L'étape de réduction dimensionnelle par la méthode PCA n'a donc pas été retenue pour le développement du modèle d'estimation de largeur de bain. Par ailleurs, l'utilisation des composantes principales en modélisation nécessiterait des validations supplémentaires pour confirmer la linéarité des relations entre les variables du procédé lors du développement de modèles [70]. Cet exercice n'a pas été réalisé, compte tenu de l'impact limité de l'intégration d'une étape de réduction dimensionnelle au développement du modèle de largeur de bain.

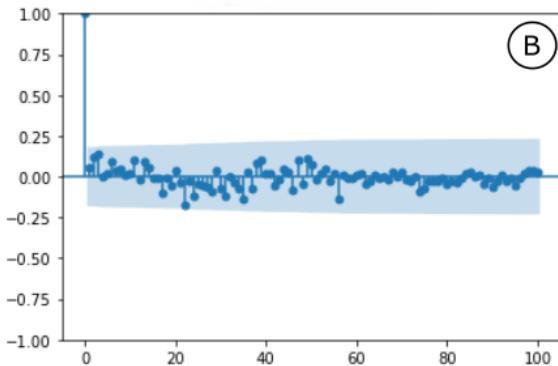
Les *loading plots* et les *score plots* disponibles en Annexe A permettent des analyses complémentaires sur l'évolution des modes opératoires et le regroupement des températures selon leur positionnement.

5.1.2 Analyse de la présence de relations dynamiques dans les données utilisées par le modèle d'estimation de largeur de bain du four pilote de réduction d'ilménite

L'évaluation de l'autocorrélation est faite en comparant les coefficients de Pearson, voir Équation 5.1 après l'application de différentes valeurs de décalage au signal de largeur de bain.



(a) Autocorrélation d'un thermocouple à la surface extérieure du four (T_2) et à une profondeur importante dans la paroi du four (T_0). La période d'échantillonnage est de 10 minutes.



(b) Autocorrélation des mesures de la largeur de bain (B). La période d'échantillonnage irrégulière a une médiane de 4,75 heures.

FIGURE 5.4 Graphiques d'autocorrélation.

L'analyse de l'autocorrélation d'un signal permet d'identifier des corrélations entre ses échantillons successifs. Ceci justifie l'utilisation de modèles dynamique pour leur modélisation. La Figure 5.4a montre qu'un thermocouple positionné profondément dans la paroi (T_0) présente une autocorrélation plus faible que celle du thermocouple positionné à la surface de l'équipement (T_2). Les différences d'épaisseur des couches de matière entre la source d'énergie (arcs

électriques) et les sites de mesure (T_0 et T_2) influencent l'inertie thermique, expliquant la différence d'autocorrélation des mesures de T_0 et T_2 observée à la Figure 5.4a.

La Figure 5.4b montre que le signal de largeur de bain ne présente aucune caractéristique autorégressive. Le choix fait dans l'article 1 d'utiliser d'autres signaux de procédé pour réaliser l'estimation est, en partie, justifié ainsi. Une approche autorégressive était donc à éviter pour la largeur de bain.

5.2 Impact du partitionnement calibration-validation sur les performances du modèle d'estimation de largeur de bain du four pilote de réduction d'ilménite

L'article 1 faisait mention du partitionnement du jeu de données en 80 % servant à la calibration et 20 % réservé pour la validation. L'utilisation des données les plus anciennes pour former le jeu de calibration permet d'éviter la fuite d'information ou *information leakage* lors de l'entraînement. Ce phénomène peut influencer la performance des modèles développés pour des systèmes présentant des dépendances temporelles.

Bien que cette façon de faire permette d'éviter la fuite d'information, lorsque moins de données sont disponibles, elle remet en question la robustesse des modèles. Un modèle robuste verra ses performances se maintenir lors de l'évaluation de nouvelles données tandis qu'un modèle peu robuste aura une performance dépendante de son jeu de validation.

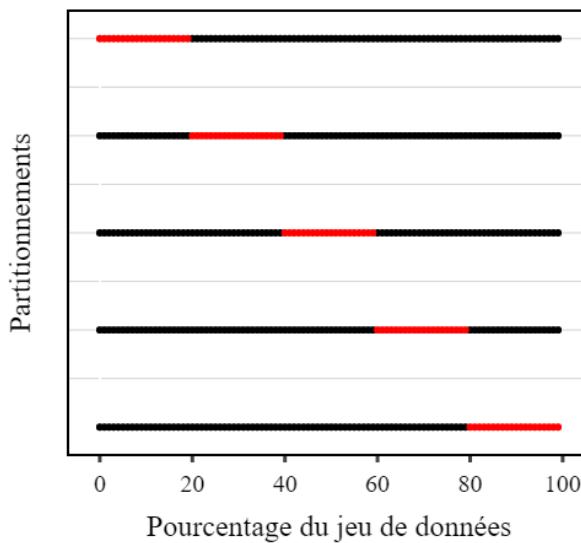


FIGURE 5.5 Partitionnements des données de calibration (noir) et de validation (rouge).

Cinq estimateurs de largeur de bain ont été entraînés avec cinq partitionnements différents du

jeu de données. La Figure 5.5 présente le partitionnement de 20 % des données en validation, où ce bloc de 20 % est chronologiquement séparé de cinq manières différentes des données de calibration.

Le Tableau 5.1 présente les performances de modèles entraînés sur les différents partitionnements de la Figure 5.5. La combinaison d'hyperparamètres conduisant au modèle le plus précis (article 1) a été utilisée pour chacun des partitionnements pour les cinq modèles.

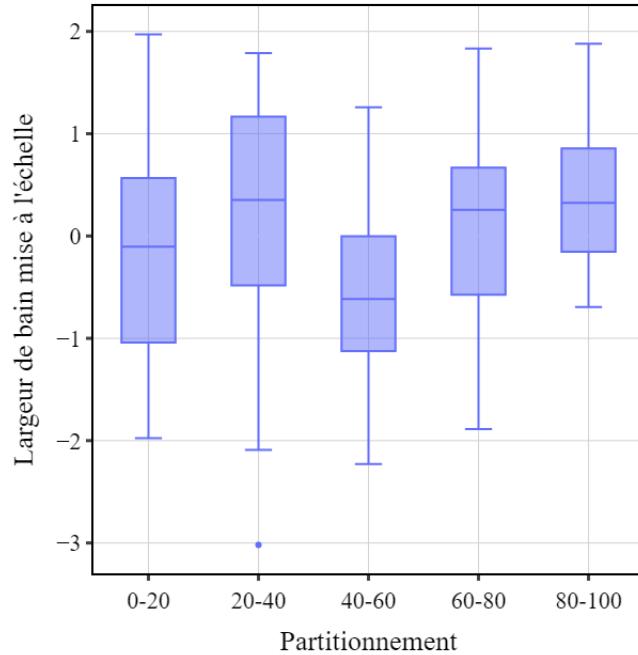


FIGURE 5.6 Boîtes à moustaches représentant les propriétés statistiques des périodes de collecte de données utilisées pour les partitionnements.

Le modèle présentant les meilleures performances sur son jeu de validation est la partition 80 – 100. La Figure 5.6 montre, pour ce jeu de données, une plus petite variance. De plus, la plage contenant ces valeurs de largeur de bain a déjà été rencontrée pendant la calibration.

TABLEAU 5.1 Comparaison des performances des modèles d'estimation de la largeur de bain selon le partitionnement calibration-validation.

	0-20		20-40		40-60		60-80		80-100	
	Cal.	Val.	Cal.	Val.	Cal.	Val.	Cal.	Val.	Cal.	Val.
MAPE [%]	5.3	13.0	5.4	16.0	5.5	14.0	6.2	11.0	6.6	9.5
MSE	0.16	0.90	0.16	1.20	0.19	0.74	0.21	0.76	0.24	0.54
RMSE	0.40	0.95	0.40	1.10	0.43	0.86	0.46	0.87	0.49	0.73

Le modèle présentant les moins bonnes performances sur son jeu de validation est la partition 20 – 40. Une grande variance relative aux autres périodes de partitionnement est observable. Des valeurs généralement plus élevées que dans le reste du jeu de calibration sont rencontrées sur la période de validation 20–40 ce qui peut expliquer, en partie, les difficultés de prédiction.

Ainsi, les modèles pilotés par les données sont effectivement susceptibles de voir leurs indicateurs de performance être dépendants de leur jeu de validation. Dans cet exemple, l'indicateur MAPE en validation passe de 9.5 % à 16.0 %. En tenant compte de la variation consécutive moyenne de la largeur de bain (22 %), l'étude d'impact du partitionnement montre que pour deux des cinq partitionnements, l'erreur du modèle est assez faible pour le rendre utilisable dans un contexte d'opération.

Les analyses présentées dans ce chapitre ont permis de vérifier l'interdépendance des mesures de températures et l'exploration d'une avenue non retenue de modélisation incluant une étape de réduction dimensionnelle. L'analyse des relations dynamiques dans les données a permis de justifier la sélection des algorithmes RNNs utilisés dans l'article 1 étant donné les dépendances temporelles importantes dans les mesures de température. Toutefois, un modèle autorégressif n'a pas été intéressant à explorer dans le développement de l'estimateur de la largeur de bain comme ces mesures ne sont pas autocorrélées.

Finalement, il a été possible de déterminer que le partitionnement calibration-validation avait un impact sur les performances des modèles, montrant l'attention particulière qui doit être portée à cette étape du développement des capteurs virtuels.

CHAPITRE 6 ARTICLE 2. TITANIUM DIOXIDE CONTENT SOFT SENSOR DEVELOPMENT FOR PILOT-SCALE ILMENITE ELECTRIC ARC FURNACE USING BILSTM & BIGRU RECURRENT NEURAL NETWORKS

Auteur.e.s : Antony Gareau-Lajoie, Daniel Rodrigues, Marie-Ève Gosselin, Moncef Chioua

Date de soumission : Le 31 mars 2025

Journal : Metallurgical and Materials Transactions B

Mots-clés : Chemical composition estimation, Data-driven modeling, Electric arc furnace monitoring, Gated recurrent unit, Long short-term memory, Soft sensor, Pyrometallurgy

6.1 Abstract

Electric arc furnaces (EAFs) are central to various metallurgical processes for melting and upgrading ore. These furnaces use a significant amount of energy and consumables to operate, which suggests substantial potential for gains in operational efficiency. In this study, we propose a proof of concept for estimating a pilot-scale ilmenite smelting electric arc furnace critical quality variable: the titanium dioxide content of the slag bath. This quality variable is estimated using a soft sensor based on a data-driven machine learning (ML) model. The proposed ML model is trained using EAF sidewall temperatures, electric power, ore charge and reducing agent charge values. To account for the nonlinear and dynamic nature of the semibatch process, models based on long short-term memory (LSTM) and gated recurrent unit (GRU) neural networks architectures are tested and evaluated. A systematic hyperparameter tuning approach allowed obtaining good estimation performance with an MSE of 0.23, an RMSE of 0.48 and an R^2 of 0.78.

6.2 Introduction

Quebec's subsoil comprises a variety of critical and strategic minerals (CSMs) that are indispensable to the province's energy transition by contributing to the decarbonization of the economy [71]. Quebec has established a list of 22 CSMs which are among the priorities of the federal government [72], including ilmenite, a titanium rich ore.

Electric arc furnace (EAF) smelting is one of the main processing routes used to upgrade ilmenite concentrate into a suitable feedstock for other processes to produce titanium based

pigment or sponges. Ilmenite EAFs allow iron oxides contained in ilmenite to be exposed to a reducing agent at high temperatures to transform the oxides to their metallic product [27]. When using a carbon-based reductant, a complex set of carbothermic reactions describes the reduction of ilmenite [23; 26]. Specifically, this endothermic process yields two products: a titania-rich slag, called the *slag bath*, and iron-rich molten phase called the *metal bath* [73]. An ilmenite EAF used for ilmenite smelting is fed continuously with ore and reducing agent. The extraction of molten material from the unit is called a *tap*.

As EAFs require large amounts of energy to operate, optimizing their operational parameters represents a great potential to reduce waste. Nevertheless, optimization of EAF operation requires the development of models able to quantify the relationships between operating parameters and energy consumption, yield and end product composition.

Thermodynamic models of ilmenite EAFs enable evaluation of the impact of operating parameters on the composition of the slag bath and the metal bath in ilmenite smelting [23]. These models, only valid at equilibrium (steady state), are static models and neglect reactions kinetics of reactions or non-equilibrium conditions between metal, slag, and gas. Therefore, their use as process operator assistance systems is restricted to process variables setpoint recommendation.

Alternatively, studies on ilmenite smelting in transient state have been conducted on experimental lab-scale set-ups. In [26], the authors show that for ilmenite smelting with operating temperatures above 1423 K, most of the reduction occurs within the first 30 minutes. In other words, ilmenite smelting is a process with fast dynamics. In [25], the authors found that the ilmenite reduction reaction completion time decreases by 50% when using pre-oxidized ilmenite as opposed to raw ilmenite. Note that studies [25] and [26] are conducted on lab-scale set-ups and are limited to ilmenite EAF process dynamics originating from the ilmenite reduction kinetics.

Plant models used for the estimation of process variables are known as soft sensors [74]. These models use easy-to-measure variable information to provide continuous real-time estimates for quality variables and difficult-to-measure variables [75]. Soft sensors based on deep learning neural networks were proposed in [16; 17] to predict lining temperature in a ferronickel EAF and monitor equipment structural health. Thermocouples measure temperatures in the lining of an EAF, at high sampling frequency.

Deep learning recurrent neural network (RNN) algorithms require large and rich datasets enable to obtain precise predictions. However, a large quantity of labeled data is rarely available in an industrial process, an issue known as *data scarcity*. For instance in stainless steel EAF plants, bath temperature only measured at tap is used by the operators to adjust

the electrical power fed to the EAF [11]. The authors of [11] propose estimating the tap bath temperature using support vector regression model. Recently, authors in [10] proposed using Takagi–Sugeno fuzzy modeling to predict molten bath temperature in a steel scrap recycling EAF.

Recent scientific publications regarding soft sensors specifically designed for ilmenite EAFs could not be found by the authors despite an intensive bibliographic search. Secrecy surrounding ilmenite smelting technology may explain why no open scientific publications have appeared since the early 2000s [24]. The most recent identified contribution in dynamic modeling of ilmenite EAF is [18] where the authors propose a finite element model of an ilmenite EAF that includes freeze lining formation and considers slag-metal interface. While finite element model methods provide accurate offline simulations, their computation time makes them unsuitable for online implementation.

In [27], the authors propose estimating ferrous oxide (FeO) online in the slag bath of a pilot-scale ilmenite EAF. An optical emission spectrometer analyzes the elemental titanium and iron peaks emitted from the plasma arc to obtain the online FeO estimation. While [27] reports good results, harsh operating conditions might make using and maintaining an optical emission spectrometer in an industrial ilmenite EAF difficult. Alternatively, an online composition monitoring solution that relies solely on ilmenite EAF process variable measurements, such as temperature, power input, or ore feed, would better suit industrial ilmenite EAF operating conditions. In [28], the authors propose an ARMA-based online model able to predict the titanium dioxide (TiO_2) content of the next tap. Inputs of the ARMA model are the past measurement of TiO_2 from previous taps. Nevertheless, the model proposed in [28] is unable to estimate the titanium dioxide (TiO_2) content of the ongoing tap, a vital information that allows process operators implementing corrective actions and reaching the titanium dioxide (TiO_2) content before the end of the ongoing tap.

The present work proposes a method for the development of a soft sensor to estimate the titanium dioxide (TiO_2) content of the slag bath in a pilot scale ilmenite EAF. The sampling frequency for the titanium dioxide (TiO_2) content of the slag bath is low and irregular.

The contribution of this paper is the development of a soft sensor able to continuously i.e., during the evolution of a tap, estimate the value of the TiO_2 content of the slag bath. The proposed soft sensor uses a sequence-to-one BiLSTM architecture, a recurrent neural network that extracts long-term dependencies from historical process data [4].

The remainder of the paper is structured as follows: Section 6.3 describes the key elements of an ilmenite EAF. Section 6.4 covers the selected modeling algorithms principles, data preprocessing and model training procedures used in the present work. Section 6.5 details the

operation of the pilot-scale ilmenite EAF, the thermochemical phenomena occurring between molten baths and the collected dataset. Section 6.6 discusses the performance of the proposed soft sensor. Finally, Section 6.7 summarizes the results and discusses the limitations of the proposed solution.

6.3 Pilot-scale ilmenite electric arc furnace

6.3.1 Unit description

Ilmenite EAFs are designed to upgrade the incoming ore to the desired TiO_2 content by melting it and exposing it to a reducing agent. The pilot-scale ilmenite EAF studied in this work is illustrated in Figure 6.1 with its main element identified by (1) to (11).

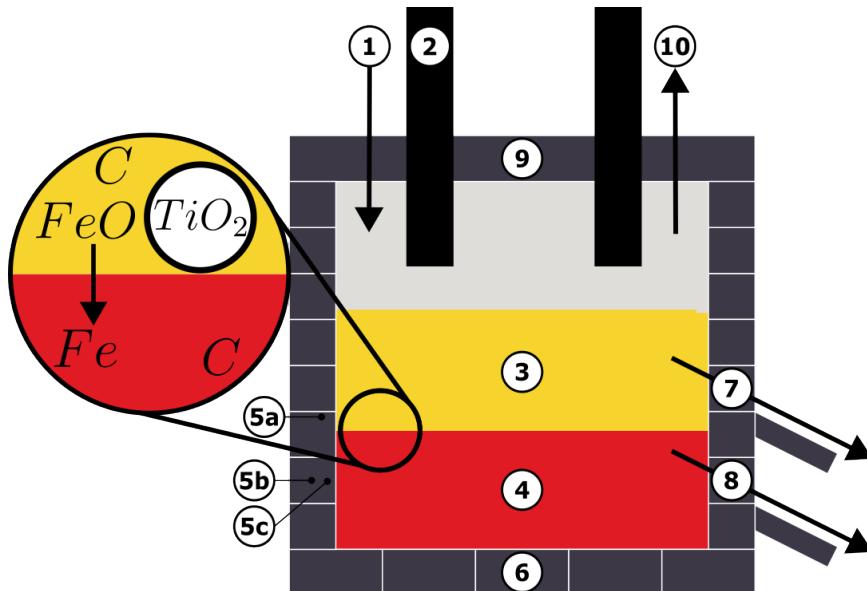


Figure 6.1 Electric arc furnace main element locations. Ore and reagent inlet (1); graphite electrodes (2); molten bath composed of slag bath (3) and metal bath (4); thermocouples at various heights and depths (5a, 5b, 5c); refractory bricks (6); Tap-holes for the slag bath (7) and for the metal bath (8); furnace roof (9); gas outlet (10); titanium dioxide to be estimated (TiO_2). (Adapted from [1])

Figure 6.1 illustrates the feed of an ilmenite EAF (1) which is composed of grinded ilmenite rich concentrate mixed with a reducing agent. The ore charge (OC) and the reducing agent charge (RAC) setpoints are adjusted to ensure a safe ilmenite EAF operation [1] and to reach the target TiO_2 composition. Electrical power heats the unit, generating a plasma arc

between the tips of the two electrodes (2) and the molten bath [24]. The setpoint of this electric power (P) setpoint can also be adjusted by the human operator. Three material phases occur in the ilmenite EAF: the slag bath (3), the metal bath (4), and the *freeze lining* (5). A temperature gradient between the refractory and the molten bath, caused by heat loss to the environment, forms the freeze lining [21]. A sufficiently thick freeze lining protects the ilmenite EAF sidewall. The amount of material in each phase varies as a result of periodic taps, and temperature fluctuation, leading to freeze lining thickness variation. Refractory bricks (7) form the structure of the ilmenite EAF and are covered by the freeze lining, in normal operation conditions. Temperature (T) fluctuations are monitored using thirty-three thermocouples located at different heights and depths (6a, 6b, 6c) to monitor the temperature profile and therefore the ilmenite EAF structural integrity. The unit is fed continuously and partially emptied through tap-holes (8, 9). Significant heat is lost from the EAF unit because of the proximity of the plasma arc to the furnace roof (10). A dedicated outlet collects gas generated by ilmenite reduction (11).

Table 6.1 presents the estimation model target (TiO_2) together with the selected model inputs. Model inputs are sampled every second. Slag TiO_2 content is available once or twice every cycle leading to a tap.

Table 6.1 Ilmenite EAF process and quality variables used for model development.

Variable	Symbol	Unit
Slag TiO_2 content*	TiO_2	% m/m
Temperature measurements (33)	T	K
Electric power setpoint	P	W
Ore charge setpoint	OC	kg/s
Reducing agent charge setpoint	RAC	kg/s

*Laboratory report.

6.4 Methods

6.4.1 Machine learning algorithms

Long short-term memory

Long short-term memory (LSTM) neural networks have been proposed as a solution to the *vanishing gradient problem* [54; 55] and are used in various fields including the dynamic modeling of industrial processes [76]. LSTM neural networks are able to capture dynamic characteristics from time series or sequential data [58; 77; 78; 79].

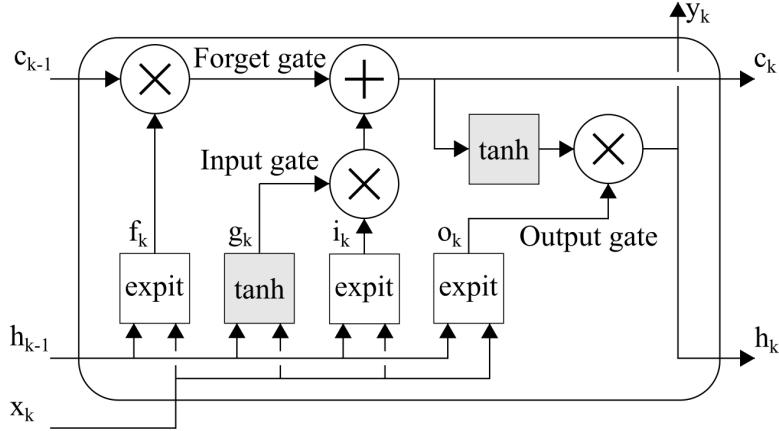


Figure 6.2 LSTM cell internal structure. (Adapted from [2])

Figure 6.2 depicts the architecture of an LSTM cell where y_k is defined by the Equation 6.1. The long-term state c_{k-1} passes through the network from left to right, dropping some information through the *forget gate* and adding some information from the *input gate*. The resulting value goes through a hyperbolic tangent (\tanh) function and is multiplied by the *output gate* resulting in the short-term state h_k [2]. Initial information enters the cell through x_k corresponding to the first element of the input vector of past measurements. The next element of the input vector enters the cell at the next folding with c_k and h_k . $y_k, c_k, f_k, g_k, i_k, o_k$ are defined in Equations (6.1) to (6.6) with expit, hyperbolic tangent functions, weights (\mathbf{w}) and biases (\mathbf{b}) which are updated in the training process. The expit, or inverse-logit function, is the sigmoid function.

$$y_k = h_k = o_k \odot \tanh(c_k) \quad (6.1)$$

with:

$$c_k = f_k \odot c_{k-1} + i_k \odot g_k \quad (6.2)$$

$$f_k = \text{expit}(\mathbf{w}_{\mathbf{x}\mathbf{f}} \cdot x_k + \mathbf{w}_{\mathbf{h}\mathbf{f}} \cdot h_{k-1} + \mathbf{b}_f) \quad (6.3)$$

$$g_k = \tanh(\mathbf{w}_{\mathbf{x}\mathbf{g}} \cdot x_k + \mathbf{w}_{\mathbf{h}\mathbf{g}} \cdot h_{k-1} + \mathbf{b}_g) \quad (6.4)$$

$$i_k = \text{expit}(\mathbf{w}_{\mathbf{x}\mathbf{i}} \cdot x_k + \mathbf{w}_{\mathbf{h}\mathbf{i}} \cdot h_{k-1} + \mathbf{b}_i) \quad (6.5)$$

$$o_k = \text{expit}(\mathbf{w}_{\mathbf{x}\mathbf{o}} \cdot x_k + \mathbf{w}_{\mathbf{h}\mathbf{o}} \cdot h_{k-1} + \mathbf{b}_o) \quad (6.6)$$

Gated recurrent unit

Gated recurrent unit (GRU) networks were first proposed as an alternative to LSTM architecture, in the area of statistical machine translation systems [60]. GRUs have been used in dynamic modeling of industrial processes due to their ability to capture long-term memory properties, a feature commonly encountered in signals collected from industrial processes. GRUs have been used in several applications to model process variables in various industries process systems including chemical reactors predictive control [80], industrial hydrocracking process modeling [81], and pulp paper press modeling [82].

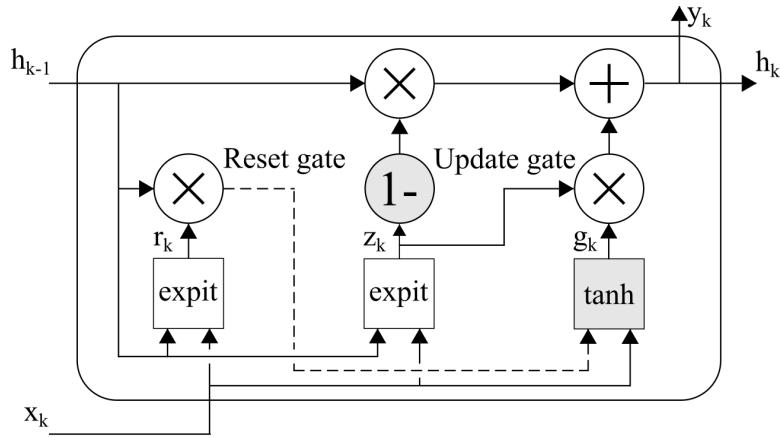


Figure 6.3 GRU cell internal structure. (Adapted from [2])

Figure 6.3 depicts the internal structure of a GRU cell and summarizes the relations between inputs h_{k-1}, x_k , internal states r_k, z_k, g_k and outputs y_k, h_k defined in Equation 6.7. Equations (6.7) to (6.10) define these variables that are a function of weights (**w**) and biases (**b**) updated while training the model. Information is passed to the cell through x_k corresponding to the first element of the input vector of past measurements. The next element of the input vector enters the cell at the next folding with a second input: h_k . The *update gate* is the part of the cell capturing long-term dependencies [83] while the *reset gate* determines what past information should be forgotten [84].

$$y_k = h_k = (1 - z_k) \odot h_{k-1} + z_k \cdot g_k \quad (6.7)$$

with:

$$r_k = \text{expit}(\mathbf{w}_{\mathbf{xr}} \cdot x_k + \mathbf{w}_{\mathbf{hr}} \cdot h_{k-1} + \mathbf{b}_r) \quad (6.8)$$

$$z_k = \text{expit}(\mathbf{w}_{\mathbf{xz}} \cdot x_k + \mathbf{w}_{\mathbf{hz}} \cdot h_{k-1} + \mathbf{b}_z) \quad (6.9)$$

$$g_k = \tanh(\mathbf{w}_{\mathbf{xg}} \cdot x_k + \mathbf{w}_{\mathbf{hg}} \cdot (r_k \odot h_{k-1})) \quad (6.10)$$

Bidirectional recurrent neural networks

Bidirectional recurrent neural networks (BiRNNs) were initially proposed to overcome RNNs limitations such as optimal delay search in a given data/network structure combination to minimize the objective function [4]. All future and past information around the current time step are available and do not depend on a predefined delay parameter with BiRNNs architectures [4]. A general BiRNN architecture is presented in Figure 6.4.

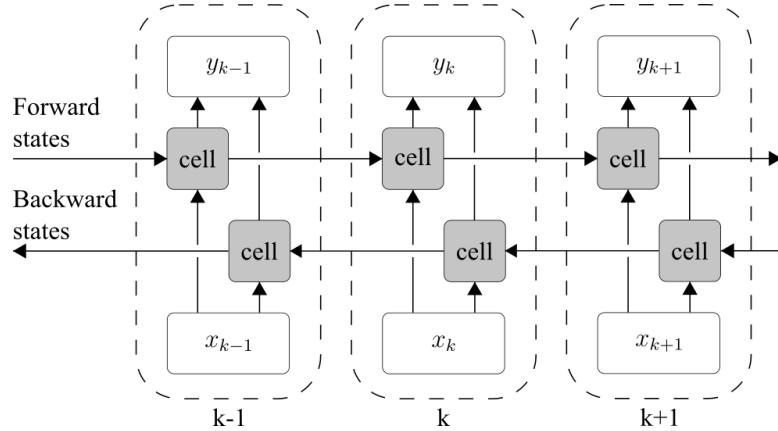


Figure 6.4 Bidirectional recurrent neural network (BiRNN) structure unfolded in time for three time steps (k). (Adapted from [4])

In the process industry, BiRNNs have been proposed for the development of soft sensors: a debutanizer column process isobutane concentration prediction [85], a hot rolling process simulation product quality prediction [86; 87], a batch processes simulation quality prediction [88].

Both LSTM and GRU architectures can be adapted to include bidirectional features, resulting in BiLSTM and BiGRU architectures, respectively. These architectures can be used as a *sequence-to-one* model, which is a type of model that processes a sequential input (e.g., time series) and produces a single output.

The bidirectional feature is especially indicated in the present work because of the presence of a delay between process setpoints (ore charge and reducing agent charge) and the target

(TiO_2).

6.4.2 Model training

Hyperparameter tuning

The identification of the optimal set of hyperparameters of a machine learning model requires the exploration of its hyperparameters space. A grid search consists in an exhaustive testing of all combinations within a predefined grid. This approach is conducted for the hyperparameters listed at Table 6.2.

Each set of hyperparameters is computed twice to account for the stochastic nature of the proposed approach of this paper, yielding to a total of 576 training trials.

Validation dataset

Collected data are usually split into 70% for model training and 30% for model validation [76; 82; 85].

However, in the present work, as the number of target measurements is limited and is possible only once or twice a tapping cycle, not all the operation modes are covered when using the first 70% of the dataset to train the model. To enrich the training and validation datasets, the proposed model is trained on tap measurements dataset (78%) and measurement in between taps (22%) are used for validation.

Cross-validation

In order to take into account the dynamic nature of the model under development, a modified k-fold cross-validation (CV) called *blocked cross-validation* (blocked CV) [62] is used in the present work. Blocked CV can yield more robust error estimates compared to standard CV [62]. For each model training, a dynamic blocked CV has been conducted using three calibration-validation ratios: 25%-25%, 50%-25%, and 75%-25%.

Regularization techniques

To enhance computational efficiency and model accuracy, regularization techniques are used during model training:

1. **Early stopping** is a technique used to prevent overfitting in deep learning models by stopping the training process when the validation loss stops improving [89].

2. **Learning rate decay** can be coupled to early stopping to regularize later training epochs. The motivation for decaying learning rate integration is to improve the learning of complex patterns, and the effect of an initially large learning rate is to avoid memorization of noisy data [90].
3. **Kernel initialization** of the neural network's weights are initialized with a Gaussian distribution. This technique has shown potential for faster convergence [91; 92].

Model performance metrics

The root mean squared error (RMSE) is a performance metric for ML model evaluation [2]. In Equations (6.11) to (6.13), y and \hat{y} are respectively vectors of measured and predicted variables. N is the number of samples in these vectors. y_i and \hat{y}_i are samples corresponding to the time index i .

$$\text{RMSE}(y, \hat{y}) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (6.11)$$

The mean squared error (MSE) (Equation 6.12) is the preferred metric to minimize while training machine learning models. MSE is more sensitive than RMSE to large prediction error values, but it is allowing greater computational efficiency [2].

$$\text{MSE}(y, \hat{y}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (6.12)$$

The coefficient of determination R^2 is an error metric often used in the field of soft sensors development [76; 85; 86; 88; 93]. The expression of R^2 is presented in Equation 6.13 with \bar{y} corresponding to the mean of the measurements of y_i .

$$R^2(y, \hat{y}, \bar{y}) = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2} \quad (6.13)$$

6.4.3 Data preprocessing

Missing values handling

The last observation carried forward (LOCF) method is commonly used in process monitoring and soft sensors development [64; 94] to deal with missing samples of measured process variables. This method allows for the completion of each vector of measured process variables.

Outlier detection

A generic method for outlier handling consisting in rejecting observations falling outside three standard deviations of the entire dataset for each process variable is applied.

Downsampling

Adequate sampling rate selection allows reducing computational cost while ensuring that main process dynamics are captured. Ilmenite EAF dynamics are dominated by heat transfer, which typically occurs on the order of hours [24]. In a lab-scale silicon molybdenum furnace experiment, ilmenite reduction occurs within the first 30 minutes at high temperatures [26]. Considering heat transfer and ilmenite reduction dynamics, the present work uses a downsampling modifying the sampling rate from 1-second to 10-minute based on a moving average (MA) algorithm.

Data scaling

Data scaling improves numerical stability of the model training algorithm [65]. Standard data scaling [41] used in the present work, relies on estimated statistical parameters of the collected data distribution.

6.5 Industrial case study

6.5.1 Ilmenite EAF unit semibatch operation

As depicted in Figure 6.1, ore and reducing agent are fed to the ilmenite EAF unit while a plasma arc is generated in its upper region using carbon-based electrodes. Fresh ore is continuously fed to the unit. This raw material starts to melt, forming the molten bath. A partial emptying of the unit, a tap, is periodically performed.

A balance must be maintained between the amount of ore and reagent fed to the ilmenite EAF and the applied electric power. An imbalance can lead to two scenarios: for a fixed electric power input, (1) not enough material is fed to the unit, leading to a too-thin freeze lining and a possibility of structural damage, and (2) too much material is fed to the unit, leading to too thick freeze lining. The second scenario can imply a reduced volume of operation and difficult tap-hole opening.

Three process variables are regulated using closed-loop feed back control:

- The electric power input (P) control loop influences the tapping cycles rate.

- The ore charge (*OC*) control loop influences the molten bath temperature.
- The reducing agent charge (*RAC*) control loop influences baths chemical composition and, due to the occurrence of an endothermic reduction reaction, the molten bath temperature.

The operational procedure used by our industrial partner require applying changes to set-points values for all three loops. These changes are applied to maintain operational safety and to reach desired output TiO_2 content.

Figure 6.5 illustrates the sequence of steps occurring during the ilmenite EAF operation. (a, b, c) first EAF filling, (d) first slag tap, (e, f) second ilmenite EAF filling until the unit is ready to be emptied (yellow slag bath (g) and red metal bath(h)). Note that the growth rates of both the slag and metal baths depend on the initial titanium and iron oxides ratio in the ilmenite concentrate. In Figure 6.5 this ratio is 2:1, in terms of quantities collected after taps: two slag bath taps (d, g) and one metal bath tap (h).

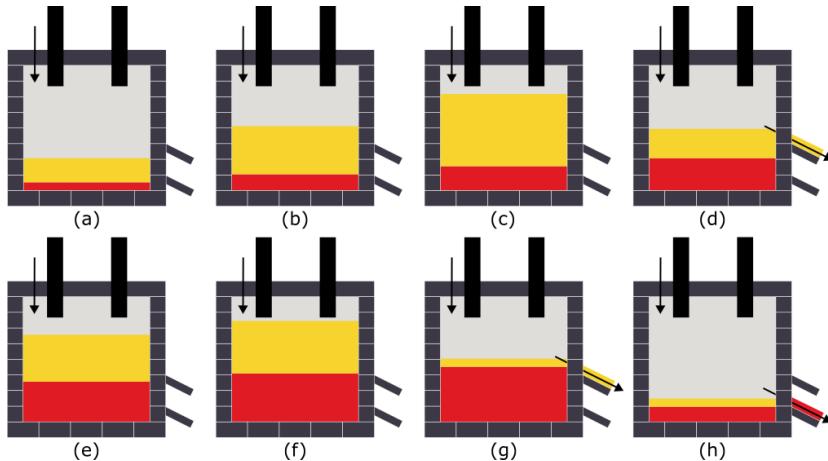


Figure 6.5 Semibatch operation detailed with the slag bath represented by the upper yellow rectangle and the metal bath as the lower red rectangle: (a) Start of the slag tapping cycle; (b) Filling period; (c) End of the tapping cycle; (d) Slag tap; (e) Second filling period; (f) End of the tapping cycle; (g) Second slag tap; (h) Metal tap.

Operators periodically extract a fraction of the molten bath from the ilmenite EAF through tap-holes [24] resulting in a semibatch operation of the ilmenite EAF. The operation period between two taps is called *tapping cycle*. A higher tap-hole is punctured to collect the slag bath, and a lower tap-hole is punctured to collect the metal bath.

The semibatch nature of the ilmenite EAF's operation leads to nonlinear dynamics that must be accounted for when selecting an adequate modeling algorithm. The transient nature of the states of the system must be accounted for in the selection of the modeling algorithm.

6.5.2 Thermochemical phenomena

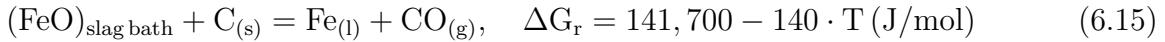
Ilmenite reduction consists in a complex set of carbothermic reactions involving ilmenite concentrate (FeTiO_3) and a carbon-based reducing agent (C) described in [23; 26].

Equation 6.14 illustrates how titanium slag is produced by carbothermic smelting of ilmenite or titaniferous ores, where iron oxides are reduced to liquid iron in an electric furnace [23]. Parentheses () and brackets [] denote the slag bath and metal bath.



Equation 6.14 explains the causal effect of the ore charge and the reducing agent on the slag bath TiO_2 content and justifies the use of these two process variables in the ilmenite EAF control structure. As iron oxides migrate to the metal bath, the TiO_2 content in the slag bath increases.

Equation 6.15 details the influence of temperature on reaction kinetics [21].



This endothermic reaction acts as heat sink [24]. According to the literature, ilmenite EAF are operated at temperatures between 1600 °C and 1700 °C [23] to ensure a negative Gibbs free energy and therefore a spontaneous reaction. Additionally, the nonlinear effect of temperature on ilmenite reduction must be accounted for when selecting an adequate modeling algorithm [26].

6.5.3 Titanium dioxide content model training

The TiO_2 content model extracts patterns from input sequences of thirty-three temperature sensors and three process setpoints: the ore charge setpoint (OC), the reducing agent charge setpoint (RAC) and the electric power setpoint (P). Figure 6.6 illustrates the time trend of the TiO_2 and of the model input variables over 700 hours of operation.

Process operators dynamically adjust the three control loops' setpoints to avoid structural damage to the unit and to maintain TiO_2 content on target. Downward peaks in the electric power (P) setpoint signal and in the ore charge (OC) setpoint signal are the result of respectively the loss of the ilmenite EAF, and a stop in the incoming ore feed.

Figure 6.6 indicates that electric power setpoint is manually adjusted less often than ore and reducing agent charge setpoints. The reason being that, in order to increase the bath

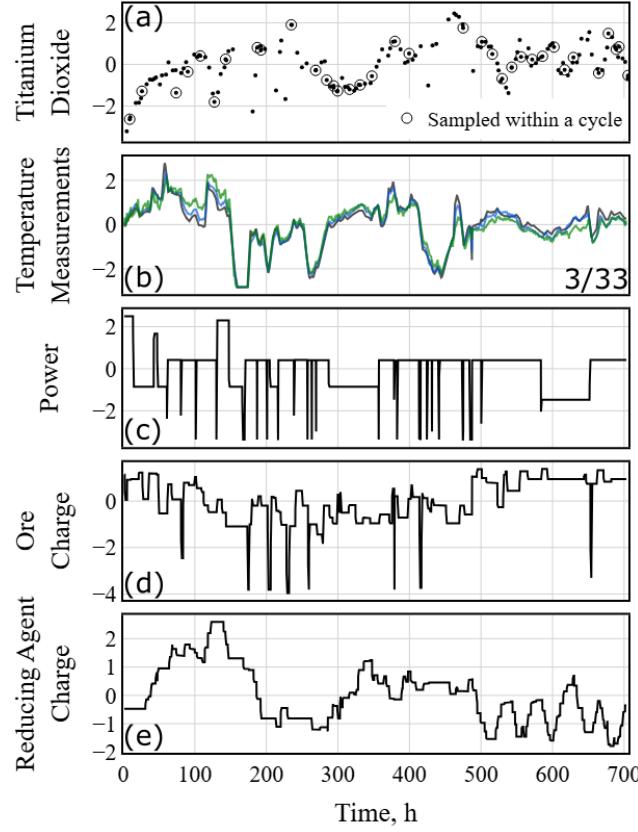


Figure 6.6 Evolution of (a) the titanium dioxide content of the slag bath over the course of 700 hours of operation. (b) Example of 3 out of the 33 thermocouples located at the same height but at different depths. From shallowest to deepest: black, blue, green. Control system setpoints for (c) the electric power, (d) the ore charge and (e) the reducing agent charge. All signals were preprocessed.

temperature, either electric power setpoint can be increased or the ore charge can be reduced. As ore charge is easier to control, it is adjusted more frequently by process operators.

The model inputs are obtained by stacking past values of sidewall temperatures, power input setpoints, ore charge setpoints and reducing agent charge setpoints at each time step k . This TiO_2 sequence-to-one model uses a three-dimension tensor as input. In the present work, these dimensions are time step, input variables and lookback sequence. A lookback window of 24 samples (four hours) length is used.

All input sequences are of the same length and equal to a lookback fixed value. The RNN model is trained using the results of laboratory analysis of samples collected during a slag or metal tap as labels.

The proposed estimation model uses past process measurements as inputs. At every time

step k , sequences are generated using a fixed lookback length. These sequences are fed to an RNN to estimate a single scalar: the current TiO_2 content of the slag bath.

In the present work, model labels (TiO_2 content values) are available at the end of each tapping cycle. For some tapping cycles, TiO_2 content values are also obtained during the tapping cycle. Labels obtained at the end of tapping cycles (78% of the dataset) are used for model training while labels obtained during tap cycles (22% of the dataset) are used to validate the model. The objective of this split is to verify the validity of the obtained model independently of the level of completion of the current tapping cycle.

6.6 Results and discussion

Training the final TiO_2 model on an Intel Core i9 CPU (32 GB RAM) completed all trials in 45 minutes. The resulting model size is 26 megabytes.

The hyperparameter selection process in Table 6.2 generated multiple model candidates. Model development is conducted using the *keras* Python package [43]. Table 6.3 presents the 10 highest-performing models along with their cross-validation MSE loss values.

Upon completion of the hyperparameter tuning, the set of hyperparameters that presents the best performances is retained and the model is generated accordingly. A model training step is then completed using all titanium dioxide measurements (158): measurements done at a tap (123) as the calibration dataset and measurements done in between taps (35) as the validation dataset.

Hyperparameters selected for the grid search are identified to address several modeling challenges:

1. The required model complexity for acceptable performance is unknown at first. Neural networks complexity can be increased with the cell unit and layer counts.
2. The optimal optimizer hyperparameters for fast, efficient training were unknown. The learning rate is this hyperparameter selected to adjust the optimizer efficiency.
3. The overfitting of the calibration dataset. Include to the architecture a dropout rate was proven to help mitigate this challenge by reducing co-adaptation by making and making the presence of other hidden units unreliable [66].
4. The uncertainties related to how past process signal information is valuable to make an estimation. The lookback period is allowed to vary to include information up to 24 samples (2 hours).
5. The uncertainties about the magnitude of the delay between input features and the

Table 6.2 Summary of the preprocessing, model and regularization hyperparameter tuning for the titanium dioxide content estimation model.

	Hyperparameter	Range	Retained value
Preprocessing	Normalization	-	Standard
	Downsampling	-	10 min
	Lookback*	[6, 12, 24]	24 samples
Model	Cells type*	[GRU, LSTM]	LSTM
	Bidirectional feature*	[True, False]	True
	Layer count*	[1, 2]	1
	Units count*	[$2^7, 2^8, 2^9$]	2^9
	Dropout rate*	[0.0, 0.1]	0.0
Regularization	Learning rate: initial value*	[$10^{-3}, 5 \cdot 10^{-3}$]	10^{-3}
	Learning rate: decay start	-	25
	Learning rate: decay rate	-	0.9
	Early stopping: patience	-	25
	Early stopping: limit	-	10^{-3}
	Kernel initialization: mean	-	0
	Kernel initialization: standard deviation	-	1
	Maximum epoch count	-	75
	CV folds	-	3

*Values obtained after grid search completion.

target to estimate. The bidirectional feature is allowed to be included as it is a technique used to address the search of the optimal delay in RNN modeling [4].

Table 6.3 indicates that LSTM architectures deliver the best performance in nine out of ten cases. Additionally, the best performance is obtained with a single layer of architecture. The other explored hyperparameters did not converge to a value within their selected ranges. This could be explained by a lesser impact of these parameters when compared to the layer type and the number of layers. The bidirectional feature's low importance suggests negligible delay between model input (sidewall temperatures, power input setpoints, ore charge setpoints and reducing agent charge setpoints) and output (TiO_2 content in the slag bath).

Evaluation metrics are presented in Table 6.4. The retained set of hyperparameters (see the first line of Table 6.3) was used for the construction of the evaluated model. The calibration

Table 6.3 Hyperparameter tuning with ten candidate models for titanium oxide content estimation.

Loss (MSE)	Lookback (sample)	Layer type	Layer count	Unit count	Bidirectional feature	Dropout rate (%)	Learning rate
0.55	24	LSTM	1	9	True	0	0.001
0.55	12	LSTM	1	8	False	10	0.005
0.59	24	LSTM	1	7	True	0	0.005
0.60	6	LSTM	1	7	False	10	0.005
0.62	24	LSTM	1	8	False	10	0.005
0.64	6	GRU	1	9	False	0	0.001
0.66	12	LSTM	1	7	False	10	0.001
0.67	12	LSTM	1	9	False	0	0.001
0.68	24	LSTM	2	7	False	10	0.005
0.73	24	LSTM	2	7	True	0	0.005

Table 6.4 Evaluation of the titanium dioxide content BiLSTM model using MSE, RMSE and R^2 error metrics.

	Calibration	Validation
MSE	0.03	0.23
RMSE	0.16	0.48
R^2	0.97	0.78

and validation datasets both rendered low MSE and RMSE showing good performances. R^2 values are high for both calibration and validation datasets, which also suggests good performances. Consistent differences between the validation and the calibration datasets are observed.

Figure 6.7 compares estimated and measured value of TiO_2 over 700 hours of operation. Figure 6.8 focuses on a time interval of 40 hours where TiO_2 estimations performance is corresponding to measured TiO_2 and are the performance is degraded (b).

Figure 6.8-(b) shows good estimation of the TiO_2 content of the slag bath over 50 hours. Figure 6.9 highlights (blue) the period showing a good model performance.

Figure 6.8-(a) illustrates a time interval where model performance is degraded. During this period, both RAC and temperatures reached their upper ranges, potentially indicating a model limitation. More observations in this operating range may enhance model performance when conditions are in this zone. Figure 6.9 highlights (red) the period showing a lower model performance.

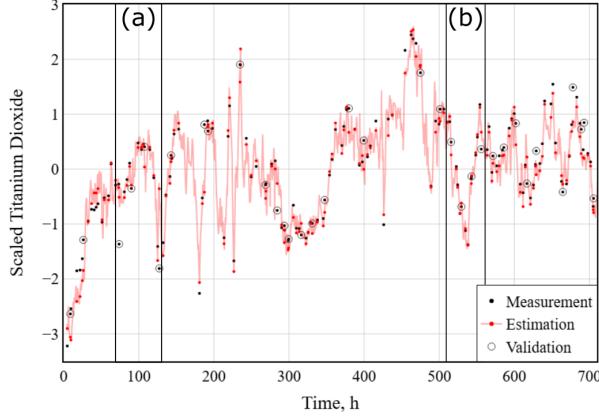


Figure 6.7 Evolution of the titanium dioxide content measurements of the slag bath (black dot) over the course of 700 hours of operation with its continuous estimation from the trained model at every time steps (pink line) including at the same time steps as measurements (red dot). Validation measurements within tapping cycles are indicated (black circle).

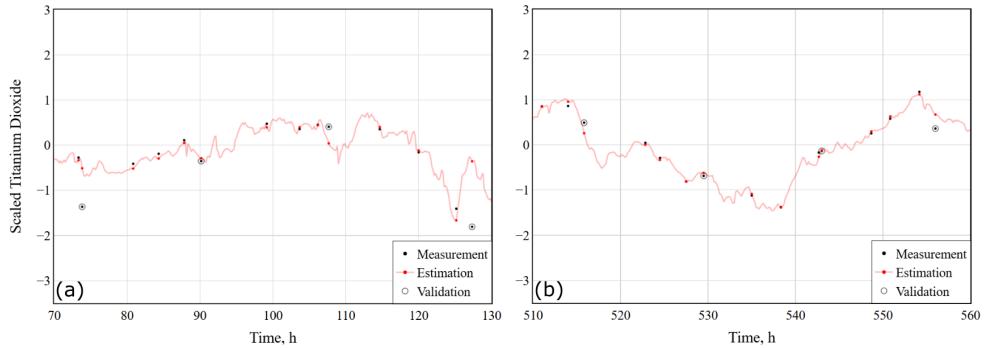


Figure 6.8 Evolution of the titanium dioxide content measurements and estimations for a period of high model performances (b), and a period of low model performances (a).

Potential overfitting has been investigated and is illustrated in Figure 6.10-(a) showing the convergence curve of the training stopped before overfitting. Training beyond nine epochs would have yielded only marginal validation improvements while risking overfitting to the calibration data.

Figure 6.10-(b) illustrates the performance of the TiO_2 content BiLSTM model on the validation dataset. Prediction performance does not depend on the TiO_2 value. Samples of TiO_2 with high estimation error are distributed over the observation range, around -1.8 and 0.9.

The model achieves globally acceptable performance with an R^2 value of 0.78. Potential for the use of the proposed model to monitor TiO_2 in the slag bath is identified.

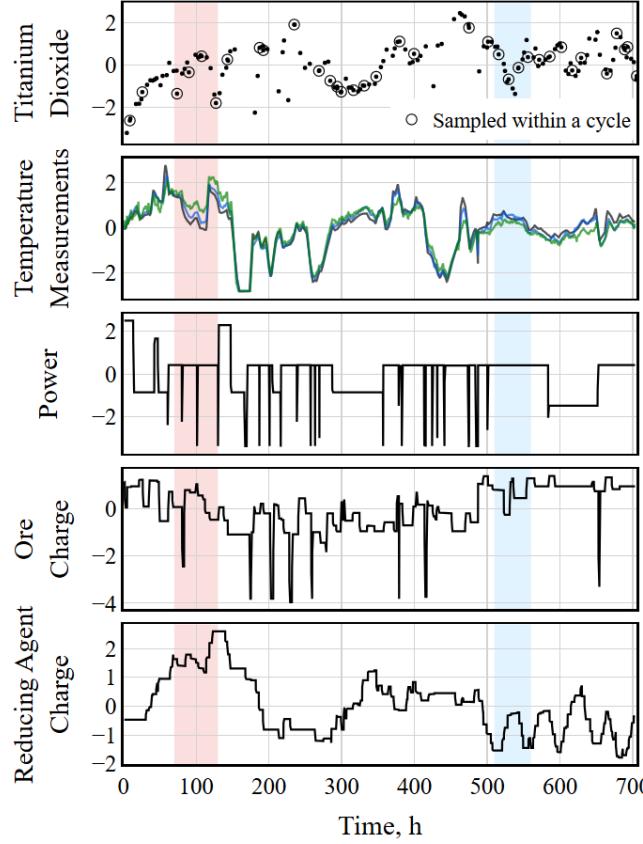


Figure 6.9 Evolution of the titanium dioxide content and model inputs. Low (red) and high (blue) model performances periods.

6.7 Conclusion

This work proposes a soft sensor to estimate titanium dioxide content in the slag bath of a pilot-scale ilmenite electric arc furnace. Several machine learning algorithms (LSTM, BiLSTM, GRU, BiGRU) with hyperparameter selection are used for the proposed model's adjustment.

Using a BiLSTM model allowed estimating TiO_2 content with good accuracy ($\text{MSE}=0.23$, $\text{RMSE}=0.48$ and $R^2=.78$). The BiLSTM architecture accurately estimates TiO_2 in the slag bath by processing thirty-three sidewall temperature signals along with electric power, ore charge, and reducing agent charge setpoints. Considering the current performances of the proposed TiO_2 estimator, the model could be used for process monitoring.

A degradation of the model performance in terms of accuracy is observed when the ilmenite EAF is operated at high sidewall temperatures and high ore charge. The training dataset's underrepresentation of these operating conditions likely explains the performance degrada-

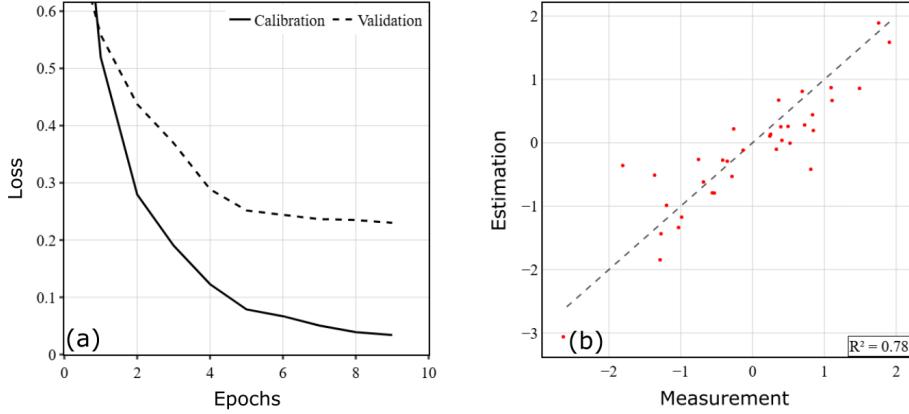


Figure 6.10 (a) Convergence curve of the titanium dioxide content model using the lowest MSE yielding set of hyperparameters. Loss (MSE) is evaluated on the calibration (solid line) and validation datasets (dashed line). (b) Estimated titanium dioxide content vs. actual titanium dioxide content.

tion. Additional data samples at high sidewall temperatures and high ore charge once available should be used to retrain the model.

Future work could incorporate include TiO_2 measurements from previous tap cycles alongside current temperature measurements and electric power, ore charge and reducing agent charge setpoints. As the TiO_2 content measurements are not available at the same sampling rate as process measurements and setpoints, integration of lower sampling rate information as an additional model input would require the use of alternative RNN architectures. Flexible clockwork RNN [95] and multiple timescale RNN [96] architectures appear promising for further investigation.

Acknowledgements

The authors would like to acknowledge the financial support from Rio Tinto Iron and Titanium Quebec Operations and Mitacs through the Mitacs Accelerate program grant IT36371.

CHAPITRE 7 ARTICLE 2. DISCUSSION

Le premier objectif de ce chapitre est de reproduire, pour la prédiction de TiO_2 , la solution de prédiction de la teneur en FeO de la prochaine coulée proposée dans la littérature [28].

Le second objectif de ce chapitre est de comparer les performances du modèle d'estimation de TiO_2 développé dans l'article 2 au modèle de prédiction de la teneur en FeO [28]. Ce modèle, de type ARMA, possède l'avantage d'être linéaire et donc interprétable. Il ne peut cependant pas fournir d'estimation de dioxyde de titane pour des temps précédant la coulée, ce que l'estimateur de l'article 2 peut réaliser.

Le troisième objectif de ce chapitre est d'évaluer l'impact du jeu de validation sur les performances du modèle d'estimation du TiO_2 . Les détails de la valorisation des mesures de TiO_2 intracoulées à des fins de validation du modèle sont expliqués.

7.1 Développement d'un modèle ARMA de prédiction du dioxyde de titane

Le four pilote de réduction d'ilménite étudié dans ce mémoire a été construit afin de répliquer les fours de tailles industrielles de Rio Tinto Fer et Titane - Opérations Québec. Les travaux de recherche [28] réalisés sur ces fours industriels ont montré le potentiel des modèles autorégressifs à moyenne mobile pour une application de prédiction de la prochaine teneur en FeO dans la scorie.

L'évaluation du FeO ou du TiO_2 informe sur le degré de réduction de l'ilménite étant donné que si moins de FeO est présent, c'est que cette espèce a été réduite et que le fer la composant a migré vers le bain métallique. De ce fait, la teneur en TiO_2 augmente puisque cette espèce reste dans la scorie. L'Équation 2.9 illustre bien ce concept. La méthode d'ajustement de Box-Jenkins du modèle ARMA décrite dans ce mémoire [97] a été reprise afin d'effectuer la prédiction du TiO_2 au four pilote. La méthode de modélisation ARMA se résume en ces quatre étapes :

1. Évaluer l'autocorrélation du signal à prédire pour justifier l'approche autorégressive.
2. Vérifier la stationnarité de la série temporelle. Au besoin, dériver la série temporelle pour obtenir une série temporelle stationnaire.
3. Sélection des valeurs potentielles des paramètres p et q à l'aide des graphiques d'autocorrélation et d'autocorrélation partielle.
4. Vérifier que la distribution des résidus est normale et que la variance des résidus est

stationnaire. Au besoin, adapter les paramètres p et q .

Les mesures de TiO_2 sont effectuées soit sur un échantillon pris lors d'une coulée ou sur un échantillon prélevé pendant un cycle (intracoulée). Les mesures de TiO_2 intracoulées ne sont pas effectuées systématiquement à chaque cycle. Afin de répondre à la nécessité d'utiliser une fréquence d'échantillonnage constante, seuls les échantillons de mesure de TiO_2 obtenus lors de coulées sont utilisés pour le développement du modèle ARMA de prédiction de TiO_2 permettant une comparaison équitable avec le modèle de l'article 2. L'impact de l'intégration des mesures intracoulées sur la fréquence d'acquisition est disponible à l'Annexe B.

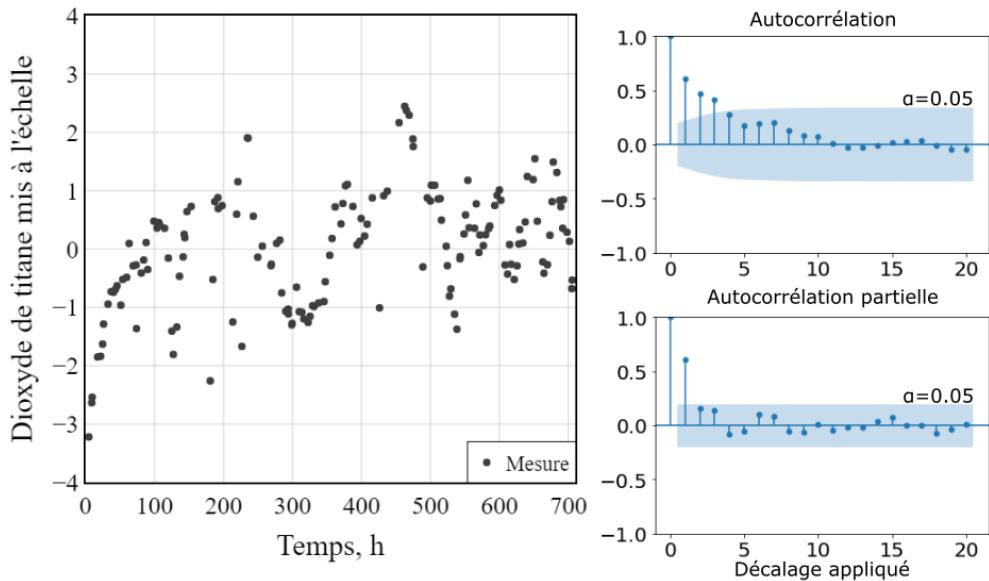


FIGURE 7.1 Étude d'autocorrélation montrant qu'une autocorrélation est présente dans les mesures de dioxyde de titane et que les valeurs des paramètres du modèle ARMA sont : $q=3$ et $p=1$.

1. Évaluer l'autocorrélation L'analyse de l'autocorrélation sert à déterminer si un modèle autorégressif est approprié pour prédire une variable. La Figure 7.1 illustre l'évolution temporelle des mesures de TiO_2 . Pour le développement de l'estimateur de TiO_2 , 700 heures des 1000 heures du jeu de données ayant une alimentation en minerai homogène ont été utilisées.

La Figure 7.1 montre aussi l'autocorrélation de la mesure de TiO_2 . On y voit que les trois mesures de TiO_2 précédant la mesure actuelle sont des prédicteurs statistiquement significatifs ($\alpha = 0.05$). L'autocorrélation partielle sert à évaluer la corrélation conditionnelle d'une variable pour un retard donné, en excluant l'effet des retards intermédiaires. Elle montre

que pour la mesure de TiO_2 , une seule valeur précédant la mesure de TiO_2 actuelle, évaluée indépendamment des autres mesures, dépasse le seuil statistique ($\alpha = 0.05$).

2. Vérification de la stationnarité La stationnarité d'une série temporelle se définit par des propriétés statistiques qui demeurent constantes sur toute la durée des observations. La stationnarité des données est requise pour le développement d'un modèle ARMA. Le test statistique de Dickey-Fuller [98] permet de déterminer si la série temporelle est stationnaire. Plus précisément, elle permet de déterminer si un processus est à racine unitaire. Une racine unitaire indique la non-stationnarité de la série temporelle. Le test de Dickey-Fuller augmenté est adapté aux séries temporelles autocorrélées comme c'est le cas pour les mesures de TiO_2 .

Test Dickey-Fuller de stationnarité

- H_0 : La série contient une racine unitaire.
- H_1 : La série ne contient pas de racine unitaire.

La valeur p ou $p\text{-value}$ obtenue étant de $7.3 \cdot 10^{-7}$ l'hypothèse nulle peut être rejetée sur la base d'un seuil statistique α ($\alpha = 0.05$), impliquant que la racine n'est pas égale à 1, menant à la stationnarité de la série temporelle de TiO_2 . Elle peut donc être utilisée directement pour le développement du modèle ARMA.

3. Sélection des paramètres p et q La Figure 7.1 permet la visualisation des décalages engendrant un effet significatif ($\alpha = 0.05$). Une des nombreuses approches de sélection des paramètres p et q consiste à déterminer les décalages significatifs pour ces deux graphiques, en l'occurrence : $q = 3$ et $p = 1$.

Afin de mettre à l'épreuve le modèle sur des données n'ayant pas servi à construire le modèle, un partitionnement des données en calibration (80 %) et validation (20 %) est effectué.

4. Effectuer l'analyse des résidus La dernière étape du développement du modèle ARMA est : l'analyse des résidus à partir des prédictions (Figure 7.2). La Figure 7.3 représente les résidus du modèle ARMA de prédiction de TiO_2 ainsi que les seuils statistiques d'une distribution normale pour la série temporelle des résidus (gauche) et sous la forme d'un histogramme (droite).

Deux évaluations peuvent être conduites à l'aide de test statistique. Le test de Shapiro-Wilk permet d'évaluer la normalité des résidus. Il est souhaitable que les résidus du modèle présentent des propriétés statistiques les plus proches possibles d'un bruit blanc. Dans le cas contraire, la validité du modèle pourrait être compromise, puisqu'une partie de l'information se retrouve dans les résidus, plutôt que de contribuer à améliorer la prédiction. Les résultats

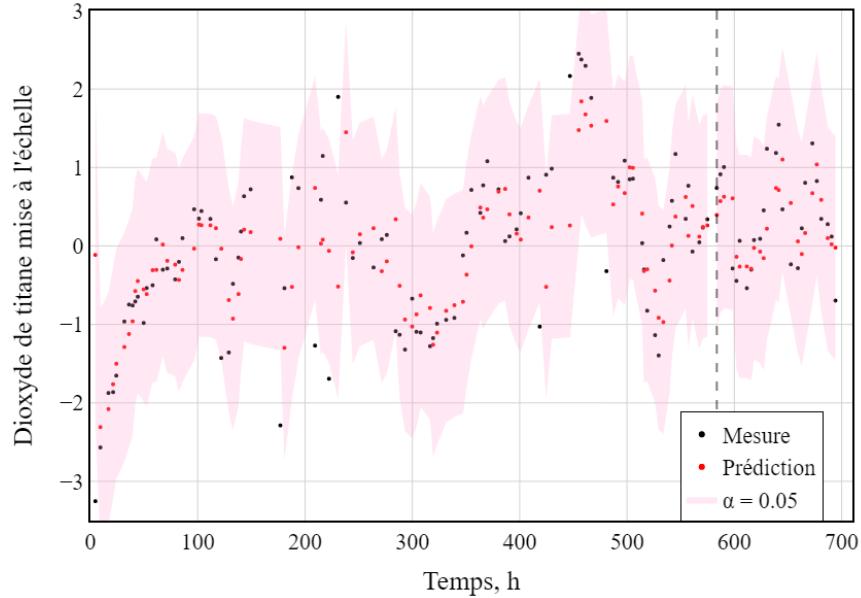


FIGURE 7.2 Prédictions du modèle ARMA de dioxyde de titane mesuré en fin de coulée seulement. Partitionnement 80 %-20 %.

d'une analyse portant sur l'autocorrélation des mesures de TiO_2 sont fournis en Annexe B.

Test Shapiro-Wilk de normalité

- H_0 : Les données suivent une distribution normale.
- H_1 : Les données ne suivent pas une distribution normale.

La *p-value* obtenue étant de 0.55 l'hypothèse nulle ne peut être rejetée ($\alpha = 0.05$), impliquant que la distribution des résidus suit une loi normale.

Enfin, il est également important d'évaluer la constance de la variance sur la durée des observations, aussi appelée homoscédasticité. Un changement dans le temps de la variance, ou hétéroscélasticité, des résidus compromettrait la validité du modèle. Un test statistique permet de conduire cette évaluation :

Test Breusch-Pagan d'hétéroscélasticité

- H_0 : Les données présentent une homoscédasticité.
- H_1 : Les données présentent une hétéroscélasticité.

La *p-value* obtenue étant de 0.96 l'hypothèse nulle ne peut être rejetée ($\alpha = 0.05$), impliquant que la variance est constante sur toute la durée des observations.

Ces tests statistiques de normalité et d'hétéroscélasticité des résidus montrent la validité du modèle ARMA de prédiction du TiO_2 proposé.

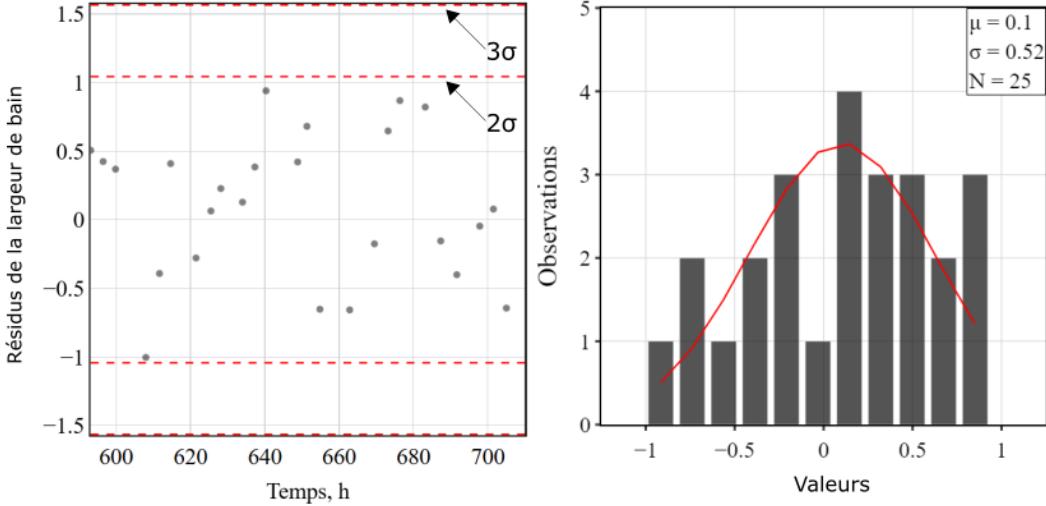


FIGURE 7.3 Analyse des résidus sur le jeu de validation du modèle de largeur de bain ARMA.

7.2 Comparaison des modèles ARMA et BiLSTM de dioxyde de titane

Les performances au modèle BiLSTM d'estimation du TiO_2 de l'article 2 et du modèle ARMA développé en utilisant l'approche proposée dans [28] sont comparés. Pour comparer la performance de ces deux modèles de manière équitable, les mêmes échantillons de mesure de TiO_2 sont utilisés pour l'entraînement des deux modèles. Comme le modèle ARMA utilise uniquement les échantillons de mesure de TiO_2 obtenus lors de coulées, ces mêmes échantillons sont utilisés pour l'entraînement du modèle BiLSTM.

La Figure 7.4 montre la prédiction de TiO_2 obtenue par le modèle ARMA sur le jeu de validation et les estimations du modèle BiLSTM. Les prédictions et estimations de TiO_2 sur le jeu de calibration et de validation se retrouvent à l'Annexe B.

Le Tableau 7.1 montre que les deux modèles arrivent à des performances comparables, avec de meilleures performances pour le modèle BiLSTM sur tous les indicateurs. Il est à noter que le modèle BiLSTM tend à présenter des caractéristiques de surapprentissage, ce qui n'est pas le cas du modèle ARMA. Néanmoins, les données de validation restent des observations jamais vues par les modèles, rendant la difficulté de la tâche de modélisation équitable pour les deux modèles. Dans ces circonstances, le modèle BiLSTM proposé dans l'article 2 réalise de meilleures estimations. De plus, le modèle BiLSTM permet l'ajustement des paramètres opératoires en cours de progression d'un cycle menant à une coulée.

Notons que les échantillons intracoulés de mesure de TiO_2 utilisés pour l'entraînement du modèle proposé dans l'article 2 sont obtenus lors de la dernière phase d'un cycle : à de la coulée. Ainsi, le modèle proposé n'est pas entraîné sur des échantillons de mesure de TiO_2

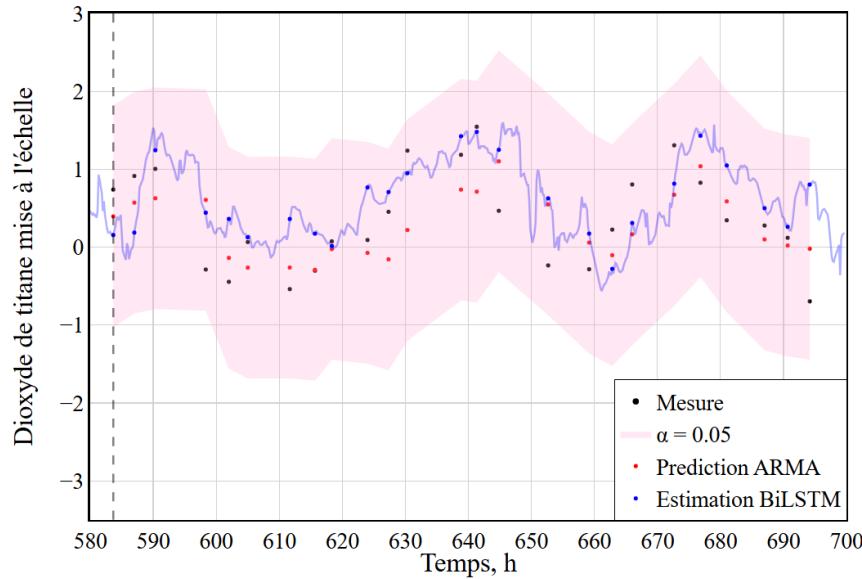


FIGURE 7.4 Prédictions du modèle ARMA (rouge) et les estimations du modèle BiLSTM (bleu) de dioxyde de titane mesuré de fin de coulée seulement. Partitionnement 80 %-20 %.

TABLEAU 7.1 Comparaison de performances des modèles de dioxyde de titane mesuré en fin de coulée seulement. Partitionnement calibration-validation 80 %-20 %.

	ARMA		BiLSTM	
	Cal.	Val.	Cal.	Val.
MSE	0.68	0.28	0.01	0.26
RMSE	0.82	0.53	0.10	0.51
R^2	0.40	0.26	0.98	0.32

correspondant à la phase initiale de la coulée, le rendant moins fiable durant cette période.

Tel que présenté à la Figure B.5, le jeu de données utilisé pour cette comparaison est celui sans les mesures de TiO_2 intracoulées. De ce fait, la prise de mesure n'est réalisée que lorsque l'équipement est prêt à être vidangé, donc, relativement plein. Cette information est importante du point de vue de l'inertie thermique, affectant la composition chimique des phases, qui est plus grande à ce moment. Cela a pour effet de rendre l'estimation qualitativement «plus fidèle» lorsque l'unité est dans les mêmes conditions que lors de la prise des données d'entraînement, c'est à dire, à la fin d'un cycle menant à une coulée.

Il est également à noter que, lors de l'intervalle de temps précédent une coulée, peu de changements de larges amplitudes des consignes de puissance, de quantités de minérais ou d'agent réducteur alimentés au four sont observés dans les données. Le modèle, durant cette

période, serait donc évalué seulement pour des scénarios de faibles changements de la valeur de ses entrées. Cet aspect pourrait limiter son domaine de validité. Un jeu de données de test incluant des échantillons de mesure de TiO_2 durant des intervalles présentant de larges variations de consignes pourrait éclaircir ce point.

7.3 Évaluation de l'impact du jeu de validation sur les performances du modèle BiLSTM

À la différence de la section précédente, le jeu de données de validation de l'article 2 est exclusivement composé des mesures de TiO_2 intracoulées.

Dans cette section le modèle BiLSTM est développé en utilisant un partitionnement 80 %-20 % d'un jeu de données constitué des mesures intracoulées de TiO_2 et des mesures de TiO_2 obtenues lors de coulées. La Figure 7.6 présente les estimations de ce modèle en validation. Le partitionnement de calibration-validation sur les mesures intracoulées est présenté à la Figure 7.5 en comparaison au partitionnement 80 %-20 %.

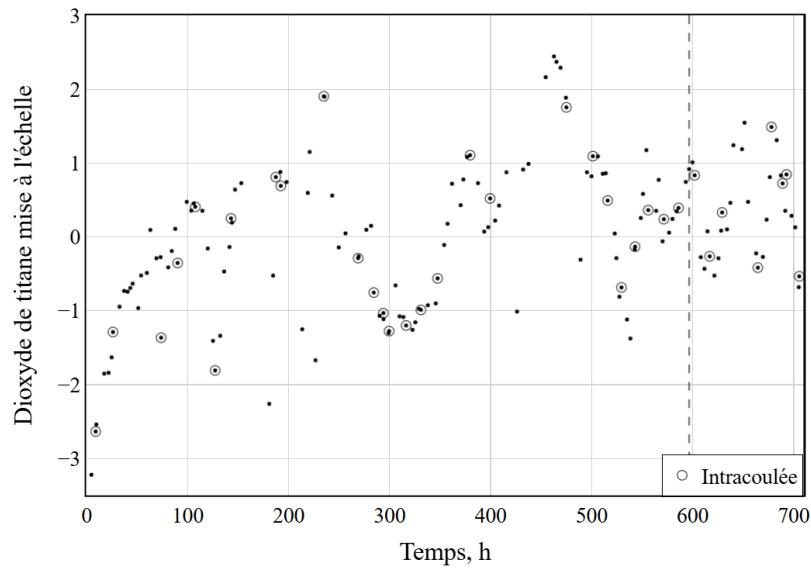


FIGURE 7.5 Deux partitionnements calibration-validation. Partitionnement 80 %-20 % (après le trait pointillé). Partitionnement avec les mesures de validation intracoulées (encerclées).

Le Tableau 7.2 compare la performance du modèle BiLSTM de TiO_2 de l'article 2 (*), entraîné avec un partitionnement 80 %-20 %, à celle du modèle BiLSTM de TiO_2 entraîné avec un partitionnement prenant les mesures de TiO_2 intracoulées en validation. Le Tableau 7.2 indique que le modèle utilisant les mesures intracoulées en guise de jeu de validation performe mieux du point de vue de tous les indicateurs.

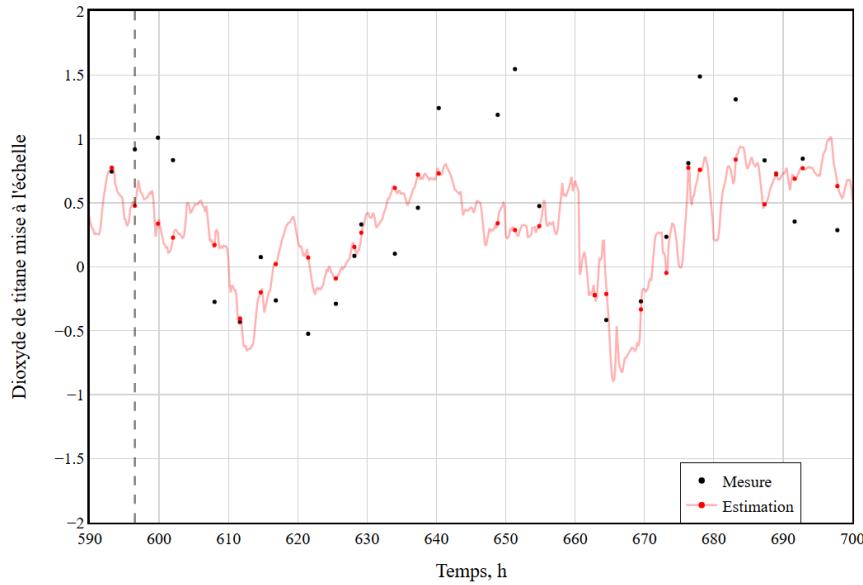


FIGURE 7.6 Estimations en validation du modèle BiLSTM de dioxyde de titane mesuré en fin de coulée seulement. Partitionnement 80 %-20 %.

TABLEAU 7.2 Comparaison des performances des modèles BiLSTM de dioxyde de titane en fonction du partitionnement calibration-validation.

	Intracoulée*		80 %-20 %	
	Cal.	Val.	Cal.	Val.
MSE	0.03	0.23	0.01	0.31
RMSE	0.16	0.48	0.10	0.56
R^2	0.97	0.78	0.98	0.23

*Article 2.

Les mesures intracoulées sont prises à des moments où des changements significatifs de consignes sont effectués durant la première phase du cycle menant à une coulée. De plus, le choix de conserver ces données pour effectuer la validation du modèle BiLSTM permet d'utiliser les données de fin de cycle qui ont eu lieu sur l'ensemble du jeu de données. Ainsi, plus de modes d'opération sont couverts (0 h à 700 h). C'est en partie ce qui explique les meilleures performances du modèle de l'article 2.

Une autre explication des meilleures performances du modèle validé sur les mesures intracoulées serait une possible fuite d'information de calibration. Une fuite d'information correspond, dans le cas présent, à des observations temporellement proches de TiO_2 , l'une appartenant au jeu de calibration et l'autre appartenant au jeu de validation. Pour ces observations, si

les températures mesurées et les consignes de puissance électrique et de débits de minerai et d'agent réducteur ne varient pas ou peu, cela implique que la même information utilisée pour la calibration se retrouve dans le jeu de validation. Ce qui peut expliquer une augmentation artificielle des performances.

Par ailleurs, le nombre de données du jeu de validation reste peu élevé (33 observations). Ainsi, chacune des observations a un impact important sur l'indicateur de performance.

La comparaison des tableaux 7.1 et 7.2 pour le cas du modèle BiLSTM permet d'évaluer l'effet de la prise en compte des mesures intracoulées de TiO₂. On observe une diminution des performances avec l'ajout des mesures intracoulées (*RMSE* passe de 0,51 à 0,56). L'estimation de la valeur de la composition en TiO₂ aux instants de prise de mesures intracoulée est différente de la majorité des observations en calibration, compte tenu des phénomènes transitoires plus influents pour ces observations.

L'ajout des observations intracoulées au processus d'entraînement des modèles est souhaitable pour attester de la qualité des performances en estimation entre les coulées du modèle proposé. C'est pourquoi toutes les mesures intracoulées disponibles ont été utilisées pour la validation dans l'article 2.

CHAPITRE 8 CONCLUSION

8.1 Synthèse des travaux

Le projet de recherche est né du fait que plusieurs états du procédé ne sont pas disponibles lors de l’opération du four pilote de réduction d’ilménite au Centre de technologie et minéraux critiques de Rio Tinto Fer et Titane – Opérations Québec. Le projet vise à utiliser les données générées par des mesures de variables de procédés disponibles sur le four pilote de réduction d’ilménite afin de développer des modèles de la température de la paroi, de la largeur de bain et de la teneur en dioxyde de titane dans la scorie. Des algorithmes d’apprentissage automatique ont été sélectionnés afin de réaliser cette tâche.

Le premier objectif était d’effectuer le dépouillement des données issues de collectes de données sur le four pilote de réduction d’ilménite. Il a été possible d’atteindre le **S.O.1** qui consistait à effectuer le prétraitement des données servant à l’entraînement des modèles. Les étapes de gestion des valeurs manquantes, de rééchantillonnage, de gestion des valeurs aberrantes et de mise à l’échelle ont permis l’entraînement des modèles. Conjointement à cette étape, l’exploration des données de procédé, le **S.O.2**, a été réalisé en effectuant la visualisation des séries temporelles et l’étude de l’intercorrélation et de l’autocorrélation des variables de procédé.

Le deuxième objectif était d’utiliser les données prétraitées afin de faire la synthèse de deux capteurs virtuels destinés à la prédiction de variables de procédés liées à la sécurité. Pour ce faire, il a d’abord fallu élaborer une stratégie permettant de mettre en lien les variables mesurées aux variables à estimer ou prédire. Le **S.O.1** s’est résumé au choix de l’algorithme répondant aux caractéristiques du système à modéliser ainsi que des entrées utiles à la prédiction, en se basant sur les connaissances physiques du système. La structure d’entraînement des modèles de prédiction de température de la paroi et de prédiction de la largeur de bain a été programmée pour atteindre le **S.O.2** tout en intégrant l’algorithme d’ajustement des hyperparamètres. Enfin, les **S.O.3** et **S.O.4** ont été accomplis en évaluant les performances quantitatives et qualitatives des modèles et en évaluant la robustesse des modèles par une analyse du partitionnement des jeux de calibration et de validation.

Le troisième objectif était d’utiliser les données prétraitées afin de faire la synthèse d’un capteur virtuel pour une variable de qualité importante à l’opération du four pilote : la teneur en titane dans la scorie notée TiO_2 . Similairement au second objectif, des étapes de choix de l’algorithme adapté à la tâche d’estimation (**S.O.1**), d’entraînement du modèle en

recherchant un bon jeu d'hyperparamètres (**S.O.2**), d'évaluation de la performance du modèle sur des données de validation (**S.O.3**) et d'évaluation de l'impact du partitionnement des jeux de validation et de calibration sur les performances des modèles (**S.O.4**) ont été effectuées. Une analyse mettant en avant les avantages du modèle BiLSTM proposé en comparaison à un modèle ARMA, utilisé pour une application similaire dans la littérature [28].

Les trois variables du procédé à modéliser (température, largeur de bain et TiO_2) ont des caractéristiques et des procédures de mesure différentes, rendant une approche omnivalente inadéquate. Plusieurs ajustements, décrits dans les précédentes sections, ont dû être mis en place afin de permettre la synthèse des trois capteurs virtuels proposés.

8.2 Limitations de la solution proposée

Une limitation identifiée pour le prédicteur de température de la paroi du four est que, lorsque la pente de la température de la paroi vient à changer relativement rapidement, on observe de plus grands écarts entre les mesures et les prédictions. Il était attendu que, plus la prédiction est lointaine, plus elle risquera d'accumuler l'erreur des prédictions la précédent. Autrement dit, le modèle opère en boucle ouverte. De ce fait, la qualité de la prédiction vient à réduire, lorsque des changements de pente rapides surviennent.

Pour ce qui est du modèle de largeur de bain, une limitation pouvant affecter sa robustesse est le nombre réduit de mesures disponibles pour son entraînement. De plus, les valeurs de largeur de bain nécessitant deux prises de mesure manuelles sont sujettes à de larges incertitudes.

La précision de l'estimateur de teneur en dioxyde de titane proposé diminue pour des plages d'opération à haute température de paroi et de larges valeurs de l'alimentation en minerai. De plus, les travaux portant sur le partitionnement du jeu de calibration et de validation sur la performance de l'estimateur de TiO_2 soulignent l'impact important que peut avoir le choix du jeu de validation sur les métriques de performance.

8.3 Améliorations futures

Pour l'article 1, l'application de notions issues du jeune champ de recherche appelé *explainable artificial intelligence* (XAI) pourrait être pertinente compte tenu de la nature boîte noire des modèles proposés. Les techniques issues de ce champ, comme l'algorithme *SHapley Additive exPlanations* (SHAP) [69] et l'algorithme *local interpretable model-agnostic explanations* (LIME) [99], ont pour objectifs d'attribuer des niveaux d'importances à leurs variables d'entrées par rapport à leur prédiction. Ce faisant, plus d'information est connue sur la façon

dont le modèle utilise les données pour faire sa prédiction. Avoir ces outils d’interprétation peut aider à mieux comprendre le modèle, en particulier celui de la largeur de bain, étant donné les relations complexes et imbriquées expliquant les phénomènes chimiques, thermiques et de changement de phase caractérisant le système. L’utilisation de ces algorithmes est certainement une avenue intéressante qui reste à être explorée, car elle augmente le degré de confiance de l’opérateur de procédé et réduit ainsi le risque de voir la solution désactivée.

Pour l’article 2, la performance du prédicteur de teneur en dioxyde de titane dans la scorie pourrait être améliorée de différentes façons. Une source d’information n’a pas été valorisée dans l’article 2 : la ou les dernières mesures de dioxyde de titane dans la scorie. En effet, l’autocorrélation identifiée dans le signal de teneur en dioxyde de titane dans la scorie indique que l’utilisation de cette variable à l’entrée du modèle d’estimation pourrait avoir un effet bénéfique sur la performance du modèle. Cependant, étant donné que les entrées du modèle proposé dans l’article 2 sont toutes échantillonnées à une fréquence plus élevée que la mesure de teneur en dioxyde de titane, alors une architecture différente permettant l’alimentation de signaux à fréquence d’acquisition variable devra être envisagée. Les réseaux de neurones récurrents de type *flexible clockwork* [95] ou les réseaux de neurones à échelles de temps multiples [96] sont des algorithmes permettant ce genre d’applications.

Pour tous les modèles proposés, l’approche par réseau de neurones récurrent offre des avantages intéressants en comparaison à d’autres méthodes pilotées par les données qui ne permettraient pas la capture de non-linéarités, de phénomènes dynamiques ou de reconnaissances de formes sur le long terme. Cependant, cette approche nécessite de larges quantités de données pour être en mesure d’apprendre les relations entre ses entrées et ses sorties et, ainsi, de bien performer. L’utilisation de plus d’observations couvrant différents modes d’opérations permettrait de répondre à ce besoin et représente une amélioration à envisager pour le futur.

8.4 Mot de la fin

C’est avec de grandes attentes que j’ai intégré Polytechnique Montréal pour entreprendre mes études à la maîtrise en génie chimique. Je n’aurais jamais cru que toutes ces attentes seraient satisfaites et que bien d’autres rencontres, expériences et apprentissages auraient été possibles pendant mes études. Cette institution de renom, qui vient de souffler ses 150^e bougies, a été un espace d’épanouissement personnel et scientifique pour moi et pour des milliers d’étudiants qui deviendront les ingénieurs de demain. C’est dans ce contexte vibrant que ce mémoire a été rédigé et qu’il vous a été présenté. J’espère que le travail accompli servira à la progression de la recherche appliquée aux industries pour continuer la quête centenaire de réduction du gaspillage et de l’amélioration de la sécurité opérationnelle.

RÉFÉRENCES

- [1] A. Gareau-Lajoie, D. Rodrigues, M.-E. Gosselin et M. Chioua, “Towards Pilot-Scale Electric Arc Furnace Temperature Prediction & Bath Size Estimation with Long Short-Term Memory Networks,” *IFAC-PapersOnLine, 12th IFAC Symposium on Advanced Control of Chemical Processes ADCHEM 2024*, vol. 58, n°. 14, p. 265–270, 2024.
- [2] A. Géron, *Hands-on machine learning with Scikit-Learn and TensorFlow : concepts, tools, and techniques to build intelligent systems.* Sebastopol, CA : O'Reilly Media, 2017.
- [3] K. Zarzycki et M. Ławryńczuk, “Advanced predictive control for GRU and LSTM networks,” *Information Sciences*, vol. 616, p. 229–254, 2022.
- [4] M. Schuster et K. Paliwal, “Bidirectional recurrent neural networks,” *IEEE Transactions on Signal Processing*, vol. 45, n°. 11, p. 2673–2681, 1997.
- [5] “Office québécois de la langue française,” 2025, consulté le 15/03/2025.
- [6] A. V. Muntin, P. Y. Zhikharev, A. G. Ziniagin et D. A. Brayko, “Artificial Intelligence and Machine Learning in Metallurgy. Part 1. Methods and Algorithms,” *Metallurgist*, vol. 67, n°. 5, p. 886–894, sept. 2023.
- [7] Forum IA Québec, “Déclaration de Montréal pour un développement responsable de l'intelligence artificielle,” 2018.
- [8] J. H. Zietsman et P. C. Pistorius, “Modelling of an ilmenite-smelting DC arc furnace process,” *Minerals Engineering*, vol. 19, n°. 3, p. 262–279, 2006, selected papers from Pyrometallurgy '05, Cape Town, South Africa, March 2005.
- [9] F. Opitz et P. Treffinger, “Physics-Based Modeling of Electric Operation, Heat Transfer, and Scrap Melting in an AC Electric Arc Furnace,” *Metallurgical and Materials Transactions B*, vol. 47, p. 1489–1503, 2016.
- [10] A. Blažič, I. Škrjanc et V. Logar, “Soft sensor of bath temperature in an electric arc furnace based on a data-driven Takagi–Sugeno fuzzy model,” *Applied Soft Computing*, vol. 113, p. 107949, 2021.
- [11] S. W. Choi, B.-G. Seo et E.-B. Lee, “Machine Learning-Based Tap Temperature Prediction and Control for Optimized Power Consumption in Stainless Electric Arc Furnaces (EAF) of Steel Plants,” *Sustainability*, 2023.
- [12] S. Desgupta, V. Jana et D. Patil, “Measuring the melt,” *ABB Corporate Research Process Automation Bangalore India, Innovation and technology news*, 2024.

- [13] H. J. Joubert et H. Kotzé, “Design of sidewall lining/cooling systems for AC or DC ilmenite smelting furnaces,” *Journal of The South African Institute of Mining and Metallurgy*, vol. 120, p. 97–104, 2020.
- [14] H.-n. Cui, T. Li, C.-g. Bai, M. Tan et Y.-l. Zhu, “Numerical simulation of coupling multi-physical field in electrical arc furnace for smelting titanium slag,” *Journal of Iron and Steel Research International*, vol. 30, n°. 11, p. 2194–2209, nov. 2023.
- [15] Y. Yu, B. Li, Z. Liu, F. Qi, C. Z. Liu, W. Rong et S. Kuang, “Analysis of Electrical Energy Consumption in a Novel Direct Current Submerged Arc Furnace for Ferrochrome Production,” *Metallurgical and Materials Transactions B*, vol. 54, p. 2370–2382, 2023.
- [16] D. F. Godoy-Rojas, J. X. Leon-Medina, B. Rueda, W. Vargas, J. Romero, C. Pedraza, F. Pozo et D. A. Tibaduiza, “Attention-Based Deep Recurrent Neural Network to Forecast the Temperature Behavior of an Electric Arc Furnace Side-Wall,” *Sensors*, vol. 22, n°. 4, 2022.
- [17] J. X. Leon-Medina, J. Camacho, C. Gutierrez-Osorio, J. E. Salomón, B. Rueda, W. Vargas, J. Sofroney, F. Restrepo-Calle, C. Pedraza et D. Tibaduiza, “Temperature Prediction Using Multivariate Time Series Deep Learning in the Lining of an Electric Arc Furnace for Ferronickel Production,” *Sensors*, vol. 21, n°. 20, 2021.
- [18] A. Mabentsela et A. N. Mainza, “Numerical investigation into slag solidification inside an ilmenite DC arc furnace using a finite element method approach,” *Journal of the Southern African Institute of Mining and Metallurgy*, 2023.
- [19] C. M. G. Rodrigues, M. Wu, A. Ishmurzin, G. Hackl, N. Voller, A. Ludwig et A. Kharicha, “Modeling Framework for the Simulation of an Electric Smelting Furnace Considering Freeze Lining Formation,” *Metallurgical and Materials Transactions B*, vol. 54, n°. 2, p. 880–894, avr. 2023.
- [20] M. M. Abadi, H. Tang et M. M. Rashidi, “A review of simulation and numerical modeling of electric arc furnace (EAF) and its processes,” *Heliyon*, vol. 10, n°. 11, p. e32157, 2024.
- [21] D. H. Kim, T. S. Kim, J. Heo, H. S. Park et J. H. Park, “Influence of Temperature on Reaction Mechanism of Ilmenite Ore Smelting for Titanium Production,” *Metallurgical and Materials Transactions B*, p. 1–11, 2019.
- [22] I. Bellemans, J. Zietsman et K. Verbeken, “Fundamental and Formation Aspects of Slag Freeze Linings : A Review,” *Journal of Sustainable Metallurgy*, vol. 8, 02 2022.
- [23] E. Moosavi-Khoonsari, A. A. Siahboumi, S. Y. Kwon, R. Jones et S. Mostaghel, “Thermodynamic Modeling of Ilmenite Smelting and Impurity Distribution,” *JOM*, 2024.
- [24] J. H. Zietsman, “Interactions between freeze lining and slag bath in ilmenite smelting,” Thesis, University of Pretoria, 2004, accepted : 2013-09-07T15 :11 :30Z.

- [25] Y. Zhang, J. Zhao, X. Ma, M. Li, Y. Lv et X. Gao, "Isothermal Reduction Kinetics and Mechanism of Pre-oxidized Ilmenite," *Mining, Metallurgy & Exploration*, p. 1–13, 2019.
- [26] X. Lv, D. Chen, Y. Xin, W. Lv, J. Dang et X. Lv, "Isothermal kinetics of carbothermic reduction of ilmenite concentrate with the addition of sodium carbonate," *Powder Technology*, vol. 392, p. 14–22, 2021.
- [27] S. Pisilä, P. Palovaara, A. de Jong et M. Aula, "Ilmenite Smelting In A Pilot Scale DC Furnace," dans *The Fourteenth International Ferroalloys Congress*, 2015, p. 202.
- [28] B. Girard, "Application de l'analyse des séries temporelles à l'amélioration de l'opération des fours de réductions d'ilménite," Mémoire de maîtrise, Université Laval, 1996.
- [29] F. Rosenblatt, "The perceptron : a probabilistic model for information storage and organization in the brain." *Psychological Review*, vol. 65, p. 386–408, 1958.
- [30] "IBM - IA et apprentissage automatique," 2025, consulté le 15/03/2025.
- [31] D. E. Rumelhart, G. E. Hinton et R. J. Williams, "Learning internal representations by error propagation," 1988.
- [32] T. Akiba, S. Sano, T. Yanase, T. Ohta et M. Koyama, "Optuna : A Next-generation Hyperparameter Optimization Framework," dans *Proceedings of the 25th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*, 2019, p. 2623–2631.
- [33] A. de Myttenaere, B. Golden, B. Le Grand et F. Rossi, "Mean Absolute Percentage Error for regression models," *Neurocomputing*, vol. 192, p. 38–48, 2016, advances in artificial neural networks, machine learning and computational intelligence.
- [34] R. E. Walpole, R. H. Myers, S. L. Myers et K. Ye, *Probability and Statistics for Engineers and Scientists*. Pearson, 2012.
- [35] H. Kaneko, "Beware of R² even for test datasets : Using the latest measured y-values (R²LM) in time series data analysis," *Journal of Chemometrics*, vol. 33, n°. 2, p. e3093, 2019, e3093 CEM-18-0118.R1.
- [36] He-Nan Cui and Tao Li and Chenguang Bai and Zhengxue Jiang and Min Tan and Xu-dong Gao and Yulin Zhu, "Numerical Simulation of the Interaction Between Arc Plasma and Molten Slag in Electric Arc Furnace for High-Titania Slag Smelting," *Metallurgical and Materials Transactions B*, vol. 54, p. 1687–1704, 2023.
- [37] L. Rippon, I. Yousef, B. Hosseini, A. Bouchoucha, J. Beaulieu, C. Prévost, M. Ruel, S. Shah et R. Gopaluni, "Representation learning and predictive classification : Application with an electric arc furnace," *Computers & Chemical Engineering*, vol. 150, p. 107304, 2021.
- [38] ANSYS. (2016) ANSYS Fluent - CFD Software | ANSYS.

- [39] C. W. Bale, E. Bélisle, P. Chartrand, S. A. Dechterov, G. Eriksson, A. E. Gheribi, K. Hack, I. H. Jung, Y. B. Kang, J. Melançon, A. D. Pelton, S. Petersen, C. Robelin, J. Sangster, P. Spencer et M.-A. V. Ende. (2010-2016) FactSage Thermochemical Software and Databases.
- [40] X. Zhang, Z. Du, Q. Zhu, J. Li et Z. Xie, “Enhanced reduction of ilmenite ore by pre-oxidation in the view of pore formation,” *Powder Technology*, vol. 405, p. 117539, 2022.
- [41] F. Pedregosa, G. Varoquaux, A. Gramfort, V. Michel, B. Thirion, O. Grisel, M. Blondel, G. Louppe, P. Prettenhofer, R. Weiss, R. J. Weiss, J. Vanderplas, A. Passos, D. Cournapeau, M. Brucher, M. Perrot et E. Duchesnay, “Scikit-learn : Machine Learning in Python,” *ArXiv*, vol. abs/1201.0490, 2011.
- [42] “Plotly Technologies Inc. - Collaborative data science,” Montreal, QC, 2015, consulté le 15/03/2025.
- [43] F. Chollet *et al.*, “Keras,” 2015, consulté 15/03/2025.
- [44] S. Ferguson et N. Zsamboky, “Electric arc furnace explosions : A deadly but preventable problem,” *Iron and Steel Technology*, vol. 14, p. 30–35, 01 2017.
- [45] X. Yuan, N. Xu, L. Ye, K. Wang, F. Shen, Y. Wang, C. Yang et W. Gui, “Attention-Based Interval Aided Networks for Data Modeling of Heterogeneous Sampling Sequences With Missing Values in Process Industry,” *IEEE Transactions on Industrial Informatics*, vol. 20, n°. 4, p. 5253–5262, 2024.
- [46] L. Ma, M. Wang et K. Peng, “A two-phase soft sensor modeling framework for quality prediction in industrial processes with missing data,” *Journal of Process Control*, vol. 129, p. 103061, 2023.
- [47] X. Zhu, S. K. Damarla, K. Hao, B. Huang, H. Chen et Y. Hua, “ConvLSTM and Self-Attention Aided Canonical Correlation Analysis for Multioutput Soft Sensor Modeling,” *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement*, vol. 72, p. 1–10, 2023.
- [48] J. Janzen, T. Gerritsen, N. Voermann et C. Matoso, “Integrated furnace controls : Implementation on a covered-arc (shielded arc) furnace at cerro matoso,” dans *Tenth International Ferroalloys Congress*, 2004, p. 659.
- [49] R. Trevor Jones, “Fundamental Aspects of Alloy Smelting in a DC Arc Furnace,” Thèse de doctorat, University of the Witwatersrand, 2015.
- [50] K. Sharma, “Analysis of Non-destructive Testing for Improved Inspection and Maintenance Strategies,” *The e-Journal of Nondestructive Testing*, 2023.
- [51] L. Jinfa et Z. Baojun, “Phase equilibrium studies of titanomagnetite and ilmenite smelting slags,” *International Journal of Minerals, Metallurgy and Materials*, vol. 29, n°. 12, p. 2162–2171, 2022.

- [52] A. Vaswani, N. M. Shazeer, N. Parmar, J. Uszkoreit, L. Jones, A. N. Gomez, L. Kaiser et I. Polosukhin, “Attention is All you Need,” dans *Neural Information Processing Systems*, 2017, p. 1.
- [53] D. Rodrigues et M.-E. Gosselin, Personal Communication About Bath Size Industrial Practices, 2023.
- [54] S. Hochreiter, “The Vanishing Gradient Problem During Learning Recurrent Neural Nets and Problem Solutions,” *Int. J. Uncertain. Fuzziness Knowl. Based Syst.*, vol. 6, p. 107–116, 1998.
- [55] S. Hochreiter et J. Schmidhuber, “Long short-term memory,” *Neural computation*, vol. 9, n°. 8, p. 1735–1780, 1997.
- [56] K. Wang, R. B. Gopaluni, J. Chen et Z. Song, “Deep Learning of Complex Batch Process Data and Its Application on Quality Prediction,” *IEEE Transactions on Industrial Informatics*, vol. 16, n°. 12, p. 7233–7242, 2020.
- [57] T. Bikmukhametov et J. Jäschke, “Combining machine learning and process engineering physics towards enhanced accuracy and explainability of data-driven models,” *Computers & Chemical Engineering*, vol. 138, p. 106834, 2020.
- [58] W. Zhu, I. Castillo, Z. Wang, R. Rendall, L. H. Chiang, P. Hayot et J. A. Romagnoli, “Benchmark study of reinforcement learning in controlling and optimizing batch processes,” *Journal of Advanced Manufacturing and Processing*, vol. 4, n°. 2, p. e10113, 2022.
- [59] N. Sitapure et J. S.-I. Kwon, “Machine learning meets process control : Unveiling the potential of LSTMc,” *AIChe Journal*, p. e18356, 2024.
- [60] K. Cho, B. van Merriënboer, Çaglar Gülgahre, D. Bahdanau, F. Bougares, H. Schwenk et Y. Bengio, “Learning Phrase Representations using RNN Encoder–Decoder for Statistical Machine Translation,” dans *Conference on Empirical Methods in Natural Language Processing*, 2014, p. 1.
- [61] T. Hastie, R. Tibshirani et J. Friedman, *The Elements of Statistical Learning*, ser. Springer Series in Statistics. New York, NY, USA : Springer New York Inc., 2001.
- [62] C. Bergmeir et J. M. Benítez, “On the use of cross-validation for time series predictor evaluation,” *Information Sciences*, vol. 191, p. 192–213, 2012, data Mining for Software Trustworthiness.
- [63] X. Jin, S. Wang, B. Huang et F. Forbes, “Multiple model based LPV soft sensor development with irregular/missing process output measurement,” *Control Engineering Practice*, vol. 20, n°. 2, p. 165–172, 2012.

- [64] W. K. Teh, H. Zabiri, Y. Samyudia, S. S. Jeremiah, B. Kamaruddin, A. A. A. M. Amiruddin et N. M. Ramli, “An Improved Diagnostic Tool for Control Valve Stiction Based on Nonlinear Principle Component Analysis,” *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2018.
- [65] M. Kuhn et K. Johnson, *Applied Predictive Modeling*. Springer, 2013.
- [66] N. Srivastava, G. Hinton, A. Krizhevsky, I. Sutskever et R. Salakhutdinov, “Dropout : A Simple Way to Prevent Neural Networks from Overfitting,” *Journal of Machine Learning Research*, vol. 15, n°. 56, p. 1929–1958, 2014.
- [67] J. Wang, Y. Alipouri et B. Huang, “Multirate Sensor Fusion in the Presence of Irregular Measurements and Time-Varying Time Delays Using Synchronized, Neural, Extended Kalman Filters,” *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement*, vol. 71, p. 1–9, 2022.
- [68] R. Saleem, B. Yuan, F. Kurugollu, A. Anjum et L. Liu, “Explaining deep neural networks : A survey on the global interpretation methods,” *Neurocomputing*, vol. 513, p. 165–180, 2022.
- [69] S. M. Lundberg et S. Lee, “A unified approach to interpreting model predictions,” *CoRR*, vol. abs/1705.07874, 2017.
- [70] J. MacGregor et T. Kourti, “Statistical process control of multivariate processes,” *Control Engineering Practice*, vol. 3, n°. 3, p. 403–414, 1995.
- [71] Government of Québec, “Critical and strategic minerals,” 2025.
- [72] K. F. Dossa, F. G. Vodouhe et D. P. Khasa, “Social Acceptability of Critical and Strategic Minerals (CSMs) Development : A Systematic Review with a Particular Focus on Quebec, Canada,” *Mining*, vol. 5, n°. 1, 2025.
- [73] P. C. Pistorius, “Ilmenite smelting : The basics,” *Journal of The South African Institute of Mining and Metallurgy*, vol. 108, p. 35–43, 2008.
- [74] L. Fortuna, S. Graziani, A. Rizzo et M. G. Xibilia, “Soft Sensors for Monitoring and Control of Industrial Processes,” *Advances in Industrial Control*, 2007.
- [75] N. P. Lawrence, S. K. Damarla, J. W. Kim, A. Tulsyan, F. Amjad, K. Wang, B. Chachuat, J. M. Lee, B. Huang et R. Bhushan Gopaluni, “Machine learning for industrial sensing and control : A survey and practical perspective,” *Control Engineering Practice*, vol. 145, p. 105841, 2024.
- [76] J. Zhou, X. Wang, C. Yang et W. Xiong, “A Novel Soft Sensor Modeling Approach Based on Difference-LSTM for Complex Industrial Process,” *IEEE Transactions on Industrial Informatics*, vol. 18, n°. 5, p. 2955–2964, 2022.

- [77] K. Wang, R. B. Gopaluni, J. Chen et Z. Song, “Deep Learning of Complex Batch Process Data and Its Application on Quality Prediction,” *IEEE Transactions on Industrial Informatics*, vol. 16, n°. 12, p. 7233–7242, 2020.
- [78] N. Sitapure et J. S.-I. Kwon, “Machine learning meets process control : Unveiling the potential of LSTMc,” *AIChe Journal*, p. e18356, 2024.
- [79] N. Mohajerin et S. L. Waslander, “Multistep Prediction of Dynamic Systems With Recurrent Neural Networks,” *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*, vol. 30, n°. 11, p. 3370–3383, 2019.
- [80] K. Zarzycki et M. Ławryńczuk, “LSTM and GRU Neural Networks as Models of Dynamical Processes Used in Predictive Control : A Comparison of Models Developed for Two Chemical Reactors,” *Sensors*, vol. 21, n°. 16, 2021.
- [81] X. Yuan, N. Xu, L. Ye, K. Wang, F. Shen, Y. Wang, C. Yang et W. hua Gui, “Attention-Based Interval Aided Networks for Data Modeling of Heterogeneous Sampling Sequences With Missing Values in Process Industry,” *IEEE Transactions on Industrial Informatics*, vol. 20, p. 5253–5262, 2024.
- [82] B. C. Mateus, M. Mendes, J. T. Farinha, R. Assis et A. M. Cardoso, “Comparing LSTM and GRU Models to Predict the Condition of a Pulp Paper Press,” *Energies*, vol. 14, n°. 21, 2021.
- [83] G. Rebala, A. Ravi et S. Churiwala, “An Introduction to Machine Learning,” 2019.
- [84] W. Xiong, “A Time-Series Model of Gated Recurrent Units Based on Attention Mechanism for Short-Term Load Forecasting,” *IEEE Access*, vol. 12, p. 113 918–113 927, 2024.
- [85] Y. Huang, L. Wang, L. Ye et Z. Yang, “A Bidirectional Attention-Based LSTM Model for Multi-Step Ahead Prediction in Dynamic Soft Sensors,” dans *2024 IEEE 13th Data Driven Control and Learning Systems Conference (DDCLS)*, 2024, p. 1964–1969.
- [86] L. Ma, M. Wang et K. Peng, “Bidirectional Minimal Gated Unit-Based Nonlinear Dynamic Soft Sensor Modeling Framework for Quality Prediction in Process Industries,” *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement*, vol. 72, p. 1–9, 2023.
- [87] ——, “A Novel Bidirectional Gated Recurrent Unit-Based Soft Sensor Modeling Framework for Quality Prediction in Manufacturing Processes,” *IEEE Sensors Journal*, vol. 22, n°. 19, p. 18 610–18 619, 2022.
- [88] E. Sui, J. Wang, J. Li, W. Wang, X. Zhou et Z. Zhang, “Soft Sensor Based on Causal Secondary Variable Selection for Multimode Batch Processes,” *IEEE Sensors Journal*, vol. 24, n°. 23, p. 39 352–39 362, 2024.

- [89] B. M. Hussein et S. M. Shareef, "An Empirical Study on the Correlation between Early Stopping Patience and Epochs in Deep Learning," *ITM Web of Conferences*, 2024.
- [90] K. You, M. Long, M. I. Jordan et J. Wang, "Learning Stages : Phenomenon, Root Cause, Mechanism Hypothesis, and Implications," *CoRR*, vol. abs/1908.01878, 2019.
- [91] X. Glorot et Y. Bengio, "Understanding the difficulty of training deep feedforward neural networks," dans *International Conference on Artificial Intelligence and Statistics*, 2010.
- [92] K. He, X. Zhang, S. Ren et J. Sun, "Delving Deep into Rectifiers : Surpassing Human-Level Performance on ImageNet Classification," dans *2015 IEEE International Conference on Computer Vision (ICCV)*, 2015, p. 1026–1034.
- [93] W. Wang, C. Yang, J. Han, W. Li et Y. Li, "A soft sensor modeling method with dynamic time-delay estimation and its application in wastewater treatment plant," *Biochemical Engineering Journal*, vol. 172, p. 108048, 2021.
- [94] X. Jin, S. Wang, B. Huang et F. Forbes, "Multiple model based LPV soft sensor development with irregular/missing process output measurement," *Control Engineering Practice*, vol. 20, n°. 2, p. 165–172, 2012.
- [95] S. Chang, X. Chen et C. Zhao, "Flexible Clockwork Recurrent Neural Network for multirate industrial soft sensor," *Journal of Process Control*, vol. 119, p. 86–100, 2022.
- [96] N. L. Jian, H. Zabiri et M. Ramasamy, "Control of the Multi-Timescale Process Using Multiple Timescale Recurrent Neural Network-Based Model Predictive Control," *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 62, n°. 15, p. 6176–6195, avr. 2023, publisher : American Chemical Society.
- [97] G. E. Box, G. M. Jenkins, G. C. Reinsel et G. M. Ljung, *Time Series Analysis : Forecasting and Control*, 5^e éd. Hoboken, NJ : John Wiley & Sons, 2015.
- [98] D. Dickey et W. Fuller, "Distribution of the Estimators for Autoregressive Time Series With a Unit Root," *JASA. Journal of the American Statistical Association*, vol. 74, 06 1979.
- [99] M. T. Ribeiro, S. Singh et C. Guestrin, ""why should I trust you?" : Explaining the predictions of any classifier," *CoRR*, vol. abs/1602.04938, 2016.

ANNEXE A COMPLÉMENT À LA DISCUSSION DE L'ARTICLE 1.

Complément à la discussion de l'article 1 - Analyse en composantes principales
 L'étude des *loading plots* n'a pas permis d'établir de groupements logiques attendus. Les thermocouples auraient pu se retrouver dans des regroupements visibles en traçant les *loadings* les deux premières composantes principales avec les étiquettes de hauteur, de profondeur et d'orientation, mais ça n'a pas été le cas, comme présenté à la Figure A.1.

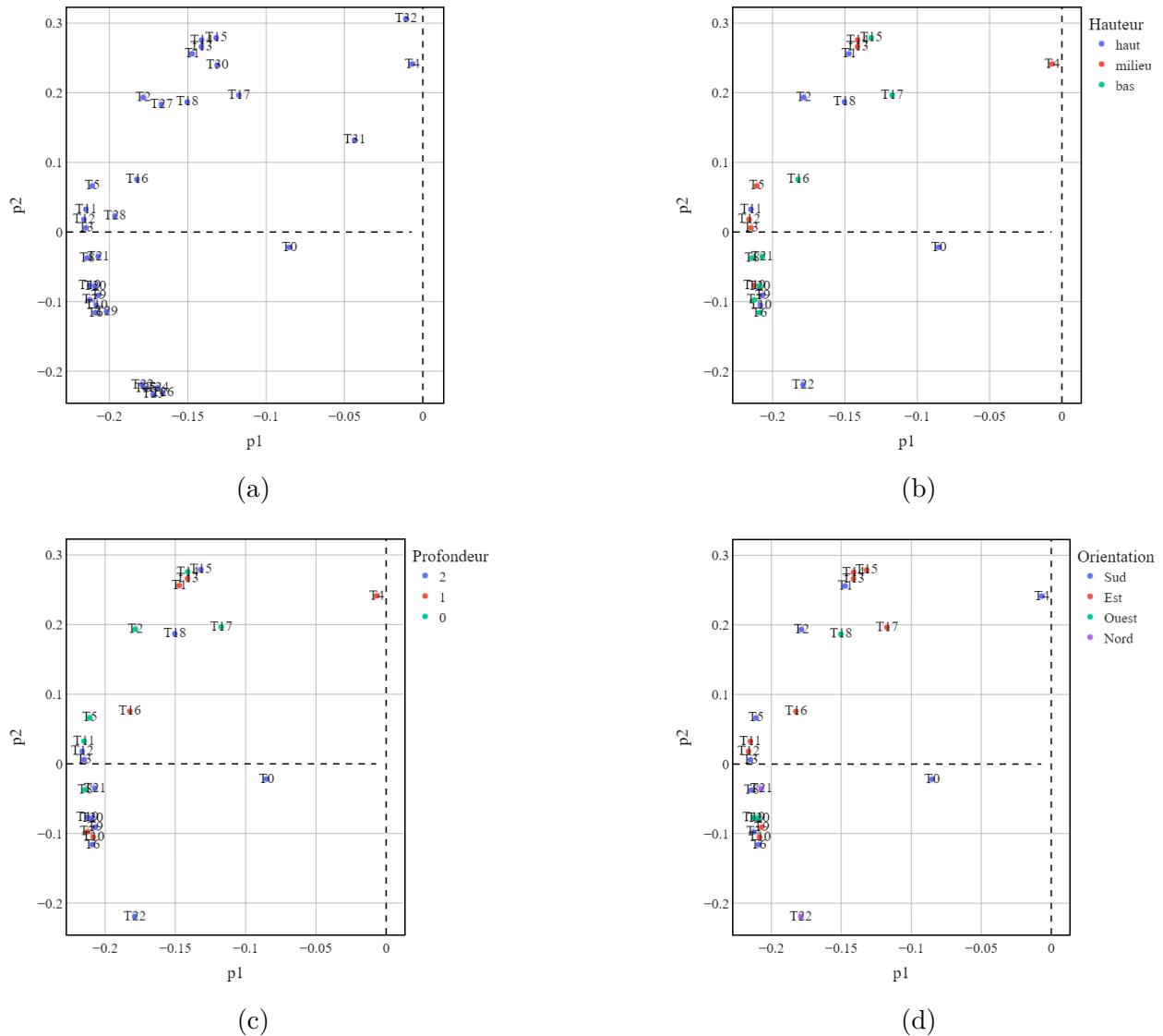


FIGURE A.1 *Loading plot* pour les 33 thermocouples (a) et pour les 22 thermocouples localisés dans les parois selon leur hauteur (b), leur profondeur (c) ou leur orientation (d).

La Figure A.2 d'observer des modes d'opération différents au cours de l'opération du four pilote de réduction d'ilménite. Le démarrage (1), l'opération normale (2) et la fin de la campagne de mesure (3) sont facilement distinguables. Entre les heures 400 et 600, on voir un égarement dans le quatrième quadrant. La Figure 5.6 permet d'identifier que la largeur de bain est généralement plus basse à ce moment.

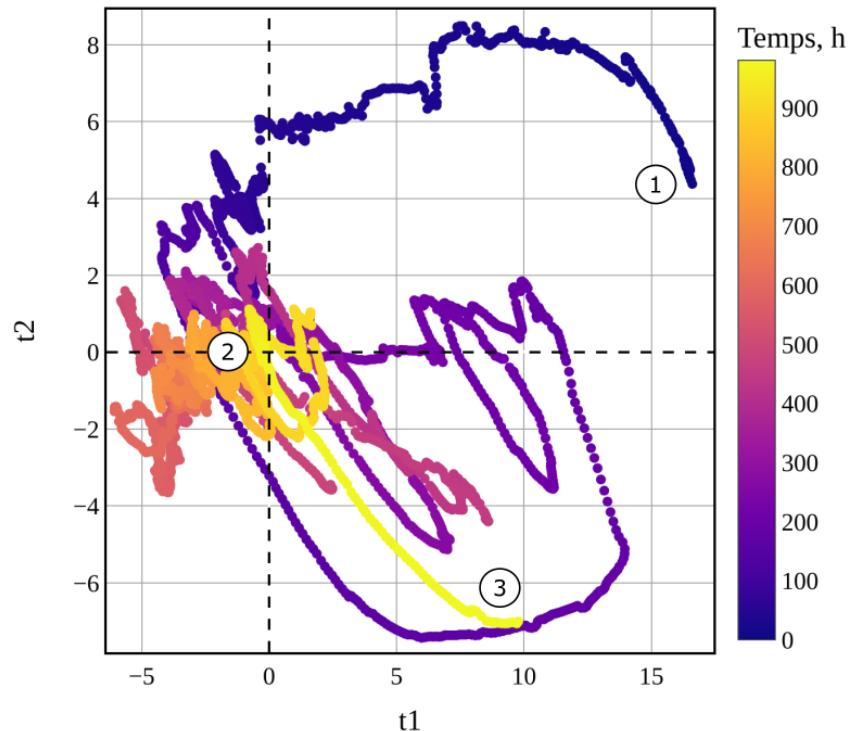


FIGURE A.2 *Score plot* pour les observations des 33 thermocouples.

Clé de positionnement des thermocouples La clé permettant l'association entre les thermocouples et leur positionnement sur l'équipement est présentée au Tableau A.1.

TABLEAU A.1 Clé de positionnement des thermocouples dans les parois du four pilote.

ID	Hauteur	Profondeur	Orientation
T0	haut	2	Sud
T1	haut	1	Sud
T2	haut	0	Sud
T3	milieu	2	Sud
T4	milieu	1	Sud
T5	milieu	0	Sud
T6	bas	2	Sud
T7	bas	1	Sud
T8	bas	0	Sud
T9	haut	2	Est
T10	haut	1	Est
T11	haut	0	Est
T12	milieu	2	Est
T13	milieu	1	Est
T14	milieu	0	Est
T15	bas	2	Est
T16	bas	1	Est
T17	bas	0	Est
T19	milieu	2	Ouest
T20	bas	2	Ouest
T21	bas	2	Nord
T22	haut	2	Nord

ANNEXE B COMPLÉMENT À LA DISCUSSION DE L'ARTICLE 2

Complément à la discussion de l'article 2 - Modèles ARMA et BiLSTM La Figure B.2 montre que les résidus du prédicteur ARMA de TiO_2 de la discussion de l'article 2 sont à la limite du seuil de signification statistique. Selon la valeur que prend le seuil, l'autocorrélation des résidus peut être rejetée, de justesse ($\alpha = 0.01$), ou elle peut être confirmée ($\alpha = 0.05$). Cette ambiguïté est à considérer. C'est pourquoi plusieurs autres tests statistiques ont été conduits, à la Section 7.2, menant à une vue globale accordant une confiance acceptable dans le modèle ARMA proposé.

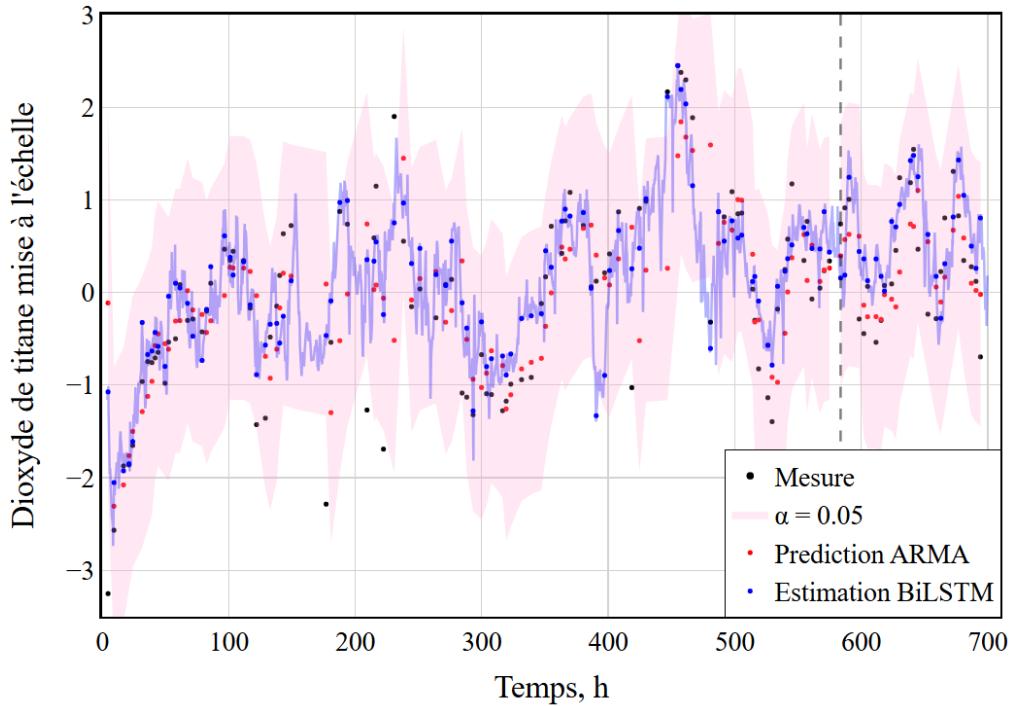


FIGURE B.1 Prédictions d'un modèle ARMA (rouge) et estimations d'un modèle BiLSTM (bleu) de dioxyde de titane excluant les mesures intracoulées. Calibration avant le trait pointillé et validation après le trait pointillé.

La Figure B.3 permet l'identification d'une saisonnalité après 10 décalages (100 minutes). L'ensemble des données (0 h à 700 h) de l'exemple de la section 7 ont été utilisées pour faire cette analyse. L'ajout du jeu de validation, par rapport au graphique d'autocorrélation partielle de la Figure 7.1, induit une saisonnalité. Plus d'observations dans ce mode d'opération serait nécessaires avant de tenir compte de cette information dans le développement du modèle.

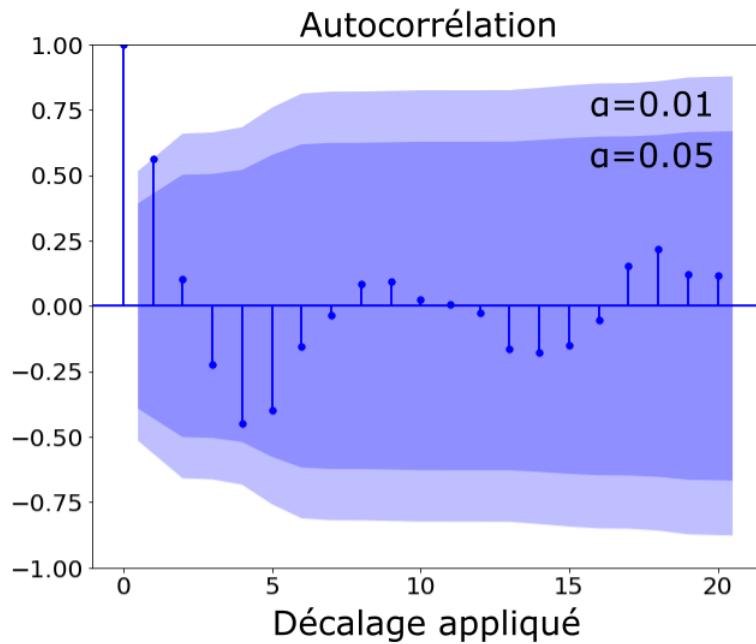


FIGURE B.2 Autocorrélation des résidus du prédicteur ARMA de dioxyde de titane.

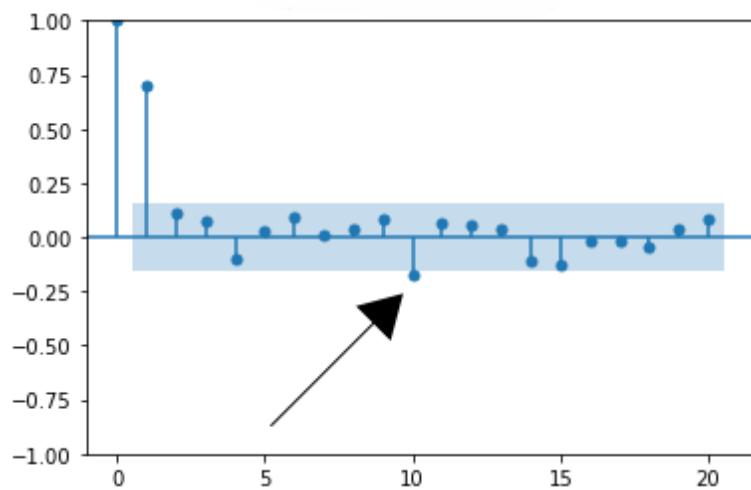


FIGURE B.3 Autocorrélation partielle des données allant de 0 h à 700 h.

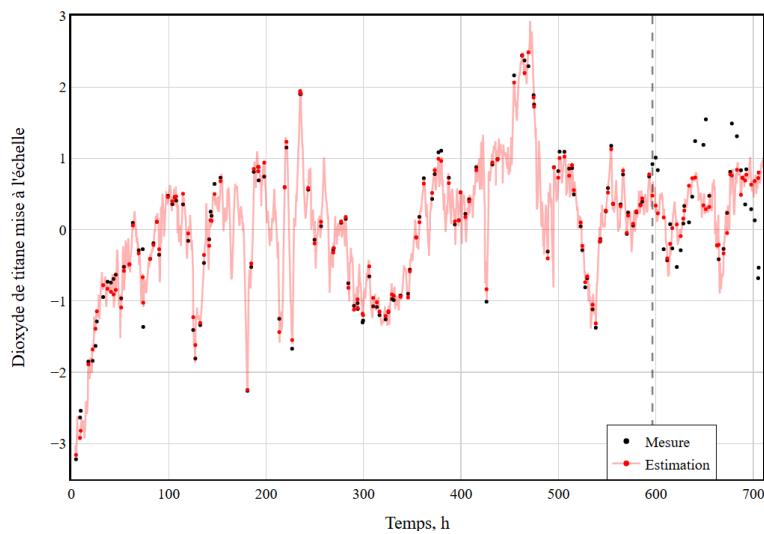


FIGURE B.4 Estimations d'un modèle BiLSTM de dioxyde de titane incluant les mesures intracoulées. Calibration avant le trait pointillé et validation après le trait pointillé.

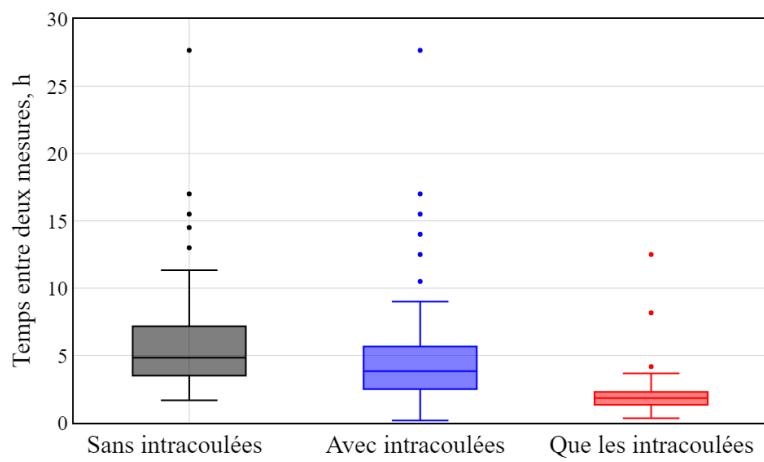


FIGURE B.5 Impact de l'intégration des mesures intracoulées sur la fréquence d'acquisition de la mesure de dioxyde de titane.