

基于CJS-SLLE降维与即时学习的转炉炼钢终点碳温软测量方法

赵安^{1,2}, 刘辉^{1,2†}, 陈甫刚³, 刘旭琛^{1,2}, 张大锦^{1,2}

(1. 昆明理工大学 信息工程与自动化学院, 云南 昆明 650500; 2. 昆明理工大学 云南省人工智能重点实验室, 云南 昆明 650500;

3. 云南昆钢电子信息科技有限公司, 云南 昆明 650500)

摘要: 转炉炼钢中碳温的准确检测是终点判断的关键, 基于数据驱动的终点碳温软测量方法是一种有效途径, 但转炉炼钢生产过程数据存在高维度、非线性和数据波动大的问题. 针对这一问题, 本文提出一种降维与即时学习的终点碳温软测量(CJS-SLLE)算法用于过程数据的监督降维. 通过在距离度量中引入量化后的碳温标签信息, 从而构造了一种带有监督信息的度量方式实现类内类间方差的调整, 然后在带标签信息的基础上引入数据间方向信息, 从而实现了样本标签、方向和距离三者信息融合的一种新型(CJS)相似性度量策略, 应用到局部线性嵌入中获得高维训练样本低维坐标; 其次, 提出一种自适应局部线性投影策略用于无标签待测样本, 实现其低维坐标中同样包含标签信息; 最后, 根据即时学习算法选取样本子集建立偏最小二乘局部回归模型对终点碳温预测. 在实际转炉炼钢生产过程数据仿真下, 碳含量在 $\pm 0.02\%$ 误差范围内预测精度达到90%, 温度在 $\pm 10^\circ\text{C}$ 误差范围内预测精度达到87%.

关键词: 转炉炼钢; 即时学习; 相似性度量; 预测分析; 降维

引用格式: 赵安, 刘辉, 陈甫刚, 等. 基于CJS-SLLE降维与即时学习的转炉炼钢终点碳温软测量方法. 控制理论与应用, 2023, 40(10): 1839 – 1850

DOI: 10.7641/CTA.2022.20346

Soft sensor method of endpoint carbon content and temperature of BOF steelmaking based on CJS-SLLE and just-in-time learning

ZHAO An^{1,2}, LIU Hui^{1,2†}, CHEN Fu-gang³, LIU Xu-chen^{1,2}, ZHANG Da-jin^{1,2}

(1. Faculty of Information Engineering & Automation, Kunming University of Science and Technology, Kunming Yunnan 650500, China;

2. Yunnan Key Laboratory of Artificial Intelligence, Kunming University of Science and Technology, Kunming Yunnan 650500, China;

3. Yunnan Kunming Steel Electronic Information Technology Co., Ltd, Kunming Yunnan 650500, China)

Abstract: Accurate detection of carbon temperature in basic oxygen furnace (BOF) steelmaking is the key to end point judgment, and the data-driven end point carbon temperature soft sensor method is an effective way, but the data in BOF steelmaking production process has problems of high dimension, nonlinearity and large data fluctuation. In response to this problem, a Cosine similarity and Jensen Shannon divergence supervised local linear embedding (CJS-SLLE) dimensionality reduction algorithm is proposed for supervised dimensionality reduction of process data. By introducing the quantified carbon temperature label information into the distance measurement, a measurement method with supervision information is constructed to adjust the variance between classes within a class. Then the direction information between data is introduced on the basis of the label information, so as to achieve A novel CJS similarity measurement strategy based on the fusion of sample label, direction and distance information is combined with local linear embedding to obtain low-dimensional coordinates of training samples; Secondly, a new method is proposed. The adaptive local linear projection strategy is used for unlabeled samples to be tested. Their low-dimensional coordinates also contain label information; Finally, a partial least squares local regression model is established to predict the endpoint carbon temperature by selecting a subset of samples according to the just-in-time learning algorithm. Under the data simulation of the actual BOF steelmaking production process, the carbon content has an accuracy of 90% within the error range of $\pm 0.02\%$, and the temperature has an accuracy of 87% within the error range of $\pm 10^\circ\text{C}$.

Key words: BOF steelmaking; JITL; similarity measure; predictive analytics; dimensionality reduction

Citation: ZHAN An, LIU Hui, CHEN Fugang, et al. Soft sensor method of endpoint carbon content and temperature of BOF steelmaking based on CJS-SLLE and just-in-time learning. *Control Theory & Applications*, 2023, 40(10): 1839 – 1850

收稿日期: 2022-05-05; 录用日期: 2022-12-21.

†通信作者. E-mail: liuhui621@126.com; Tel.: +86 871-65916596.

本文责任编辑: 阳春华.

国家自然科学基金项目(62263016, 61863018), 云南省科技厅应用基础研究项目(202001AT070038)资助.

Supported by the National Natural Science Foundation of China (62263016, 61863018) and the the Applied Basic Research Programs of Yunnan Science and Technology Department (202001AT070038).

1 引言

转炉炼钢是我国最主要的炼钢方法,尤其是中国经济的繁荣发展对钢铁需求的增加,促进了钢铁业的进一步发展^[1].炼钢中,关键在于对转炉炼钢终点的碳温检测,即钢水中碳含量达到所炼钢种的控制范围,出钢温度能保证顺利进行精炼、浇注^[2].因此,实现转炉炼钢终点碳温的准确实时预报,能够有效控制出钢时间,减少补吹次数,对提高冶炼效率、降低冶炼成本和绿色发展具有重要意义.

近年来,基于数据驱动的软测量建模方法常被用于解决实际工业中关键变量难以测量的问题^[3].转炉炼钢生产过程中,终点熔池内钢水碳含量、温度与炼钢过程中加入的各种原料、吹氧量等具有关联性,通过数据间的内在联系构建终点碳温预测模型能够有效提高转炉冶炼效率.针对炼钢熔池内碳温与多变量间存在的严重非线性关系而无法在线连续测量的问题,柴天佑等人^[4]采用径向基函数(radial basis function, RBF)神经网络建立炼钢过程数据终点预报模型,实现了转炉炼钢终点碳温的预报,但是由于炼钢过程中加入的原材料等输入特征较多,数据维度较高,影响预测精度;而针对数据维度高不利于快速精确预测终点碳温的问题,Wang等人^[5]利用机制分析与互信息计算实现转炉炼钢过程数据特征选择,构建基于变量加权极限学习机(extreme learning machine, ELM)预测终点碳温并取得了较好的效果.而在实际炼钢生产中,炉次样本间由于数据波动较大,全局单一预测模型不具有普适性.针对这一问题,熊倩等人^[6]提出一种基于密度聚类的加权集成软测量模型,Qi等人^[7]在即时学习(just-in-time learning, JITL)下提出一种vMF(von-Mises Fisher)混合模型的相似性度量准则与加权极限学习机结合构建局部模型,均有效提高了终点碳温的预测精度.

JITL是被广泛用于工业复杂数据建模的一种学习策略,思想即“相似输入对应相似输出”,本地模型训练样本为历史样本中与查询样本最相似的部分样本,一旦查询样本预测完成模型即被丢弃,JITL将创建一个新的本地模型预测下个查询样本.在JITL软测量建模中最关键和最重要的一步是实现样本间的相似性度量,而相似性度量的难点在于有效的相似性评价.由于生产过程数据具有高维度、非线性的特点,直接对高维数据进行相似性度量较为困难,因此往往先采用降维的方式进行特征提取解决数据维度过高的问题.Chen和Ye^[8]提出一种改进的工业软传感器JITL方法,应用自动编码器(auto-encoder, AE)通过多层神经网络将高维数据编码为低维特征,进而度量相似样本子集实现相关变量预测;Li等人^[9]提出一种基于核主成分分析(kernel principal component analysis, KPCA)

和JITL结合的策略先进行数据的降维,然后在JITL下建立局部模型实现齿轮泵剩余使用寿命(remaining useful life, RUL)的预测;He和Zhang^[10]将主元分析与反向传播(back propagation, BP)神经网络相结合,利用PCA方法对数据降维后输入到BP神经网络中实现转炉炼钢终点磷含量的有效预测;张成等人^[11]提出一种密度标准误差方法应用于局部保持投影(local pre-serving projection, LPP)对高维过程数据进行维数约简,有效提高了多模态过程的故障检测率;Wang等人^[12]采用等距映射算法用于光谱数据的降维,结合甲虫触角搜索优化BP神经网络(beetle antennae search-BP, BAS-BP)算法实现了汽油辛烷值的准确预测.以上方法均通过降维方式提取重要低维特征提升了模型预测性能,然而这类方法由于没有考虑到输出标签信息在降维中的监督作用,性能提升有限,为了解决这一问题,Qu等人^[13]提出一种监督判别等距映射(supervised discriminant-Isomap, SD-Isomap)算法,通过最大化不同流形数据点之间的距离来增强判别能力,达到维数约简的目的;Li等人^[14]提出一种基于监督局部线性嵌入投影(supervised locally linear embedding projection, SLLEP)的机械故障诊断方法,结合标签类别判别信息引入欧式距离中实现有监督降维,有效实现后续模型的预测,此类标签信息引入方式适用于分类模型中的监督判别,然而面向回归问题时需要计算样本特征与输出值之间的定量映射关系,从而使预测模型具有更好的拟合精度.

因此,本文针对转炉炼钢生产过程数据中存在高维度、非线性和数据波动大的问题,提出一种降维与即时学习的终点碳温软测量(cosine similarity and Jensen Shannon divergence-supervised local linear embedding, CJS-SLLE)方法.根据生产过程数据特性,主导变量标签和数据间方向信息在评判样本间相似度中起到关键作用,通过在距离度量中引入量化后的碳温标签信息从而实现带有监督信息的度量方式,然后兼顾数据间方向因素在监督度量基础上引入数据间方向信息构造出一种符合过程数据特性的新型CJS相似性度量策略,应用到局部线性嵌入中实现训练样本的监督降维,建立低维特征与主导变量间的关联性,在保留高维训练样本标签信息与局部几何结构信息的同时提取低维特征.其次,通过一种自适应局部线性投影算法快速获取新增待测样本蕴含监督信息的低维坐标.经上述监督降维算法,得到过程数据相应的低维数据集,根据JITL算法在低维训练样本中采用灰色关联度选出与待测样本关联性最强的样本子集输入到偏最小二乘回归局部模型中实现终点碳温预报.实验结果表明,本文所提方法可准确实时预测转炉炼钢终点碳含量和温度.

2 局部线性嵌入算法

局部线性嵌入(local linear embedding, LLE)是一种针对数据维度过高、低维嵌入保留其局部几何结构信息的一种非线性降维算法,该算法通过对高维数据的局部结构保持,寻找高维与低维两种特征空间下共同的映射关系,将数据从高维空间映射到低维空间。

LLE算法基本步骤如下:

步骤 1 确定样本 x_i 的 k 近邻.采用 k 近邻算法为样本点 $x_i(i = 1, 2, 3, \dots, n)$ 选取 k 个距离最近的相似点 $x_j(j = 1, 2, 3, \dots, k)$,选取近邻点的方法一般是欧式距离进行度量。

步骤 2 求解权值矩阵.根据距离计算 x_i 的 k 近邻点 x_j ,通过 $x_i = w_{i1}x_1 + w_{i2}x_2 \dots + w_{ik}x_k$ 拟合其近邻样本的线性关系, w_{ik} 表示近邻点 x_j 的权值,线性表示的权值之和为1,通过最小化样本点与其线性表示间的误差,获得拟合效果最佳的权值矩阵。

步骤 3 获得低维空间嵌入坐标.在LLE降维中,高维特征空间下的权值系数线性表示关系在低维特征空间中同样符合,从而令低维样本近邻点通过得到的权值矩阵线性表示对应的低维坐标,最小化低维特征空间下样本与其线性表示间的误差得到每个样本点对应的低维嵌入坐标。

3 本文CJS-SLLE算法

LLE降维是通过寻找 k 近邻点局部线性表示样本点,然后根据权值矩阵映射关系得到低维坐标,该算法以欧式距离作为相似性度量准则,而高维情况下数据间的欧式距离是失效的,并且映射得到的低维特征缺少监督信息,仅靠高维数据特征之间的局部线性结构关系获得,无法映射到准确相关的邻域信息.据已有研究表明,在高维数据降维过程中引入样本标签信息得到的低维特征更利于数据建模^[15-16],但是目前引入标签信息的方式单一且仅适用于分类问题,标签信息的引入需要更深入地反映样本特征与输出值间的定量映射关系,从而应用于回归问题。

针对以上存在的问题,本文面向转炉炼钢生产过程数据特性,提出一种CJS-SLLE监督降维算法在JITL建模前提取高维样本的低维特征.具体为:1)构造一种融合距离、碳温标签和数据间方向信息的新CJS相似性度量准则;2)基于CJS相似性度量结合局部线性嵌入映射得到蕴含标签与方向信息的低维特征;3)面向待测样本时,结合已知高维与低维训练集通过自适应局部线性投影策略映射得到蕴含标签信息的低维待测样本。

3.1 CJS相似性度量策略

局部线性嵌入降维过程中,关键在于数据间局部邻域信息的合理保留,即 k 近邻点对相应样本在低维

嵌入中的信息表征.其难点在于寻找 k 近邻点中高维样本间的相似性度量,因此,能够准确反映样本点局部邻域信息的相似性度量至关重要。

其中,KL散度(Kullback Leibler divergence, KL)是一种度量两个单独概率 $P(x)$ 和 $Q(x)$ 分布差异的方式,假设 $x \in \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ 有 n 种可能的状态,而 $p(x)$ 与 $q(x)$ 表示随机离散变量 x 不同取值的两种概率分布,那么KL散度量方法计算如下:

$$D_{\text{KL}}(P, Q) = \sum_{i=1}^n p(x_i) \log \frac{p(x_i)}{q(x_i)}, \quad (1)$$

KL散度表示两个概率分布信息熵的差值, $D_{\text{KL}}(P, Q)$ 值越小,表示两个分布越接近.但是,KL散度具有不对称性,即 $D_{\text{KL}}(P, Q) \neq D_{\text{KL}}(Q, P)$,而且KL散度的另一个性质是不满足三角不等式,即 $D_{\text{KL}}(P, Q) > D_{\text{KL}}(P, R) + D_{\text{KL}}(R, Q)$,其性质不满足作为距离度量的要求。

而JS散度(Jensen Shannon divergence, JS)^[17]是基于KL散度改进之上的度量方法,解决了KL散度不对称的问题,主要用于度量两个随机变量概率分布之间的差别(或相似度),具有非负性、对称性、满足三角不等式的特点,所以实际意义上可以作为样本间距离度量的方法,JS散度量方法计算如下:

$$D_{\text{JS}}(P, Q) = \frac{1}{2} \text{KL}\left(P, \frac{P+Q}{2}\right) + \frac{1}{2} \text{KL}\left(Q, \frac{P+Q}{2}\right), \quad (2)$$

其中: P 和 Q 分别代表需要度量的两个样本数据, $\text{KL}(\cdot)$ 是KL散度。

采用JS散度作为一种距离度量方式能够有效避免传统欧式距离度量不准确的问题,更确切地判别样本间的差异性。

3.1.1 引入标签信息度量

相似性度量的目的在于衡量样本间的相似程度,即两个样本的标签越接近,那么样本相似程度也应该越大,但是工业数据往往具有复杂多变的非线性特点,单纯的距离度量难以准确衡量样本间的相关程度.而样本标签作为一种关键信息在传统相似性度量中很少被利用,因此,本文方法根据转炉炼钢生产过程数据特性,在JS散度距离度量中引入样本碳温标签信息,尽可能地缩小相近标签值样本的距离,而增大差异度高的标签值样本的距离,调整类内类间方差,从而合理选择样本 x_i 的 k 近邻点,使得映射得到的低维嵌入与样本标签信息联系紧密。

由于在转炉炼钢生产过程数据中碳含量与温度的单位和尺度不一致,无法直接引入度量中,因此在引入JS散度前需进行统一量化.根据生产过程数据特性,碳含量最小单位为 $10^{-2}\%$,统一保留为小数点后两位,

以0.01%进行递增;而温度单位是 $^{\circ}\text{C}$,以 1°C 进行递增.因此如下定义1将其量化为统一最小正整数的标签信息.

定义1 假设转炉炼钢终点碳含量或温度标签值为 $B = [b_1 \ b_2 \ \cdots \ b_n]$,将碳含量和温度标签值如式(3)所示统一量化为标签信息 k_i ,即

$$k_i = \begin{cases} (b_i + 1) - \min(B), & c = 0, \\ ((b_i + \frac{1}{10^c}) - \min(B))10^c, & c > 0, \end{cases} \quad (3)$$

其中: b_i 为样本 x_i 对应的碳温标签值, c 为样本标签值的小数位数, k_i 为样本对应的量化后标签信息.

式(3)的目的是将数据的碳含量和温度标签值进行统一量化.式中 c 作为标签值的小数位数可判断该标签值是碳含量还是温度,进而分两种情况进行量化.

当 $c = 0$ 时,代表属于温度标签.其中, $(b_i + 1)$ 的功能是避免标签信息为0的情况,然后与最小的标签值 $\min(B)$ 做差值,从而量化为标签以最小单位1递增的标签信息.

当 $c > 0$ 时,代表属于碳含量标签.其中, $\frac{1}{10^c}$ 为碳含量最小单位值, $(b_i + \frac{1}{10^c})$ 的功能同样是避免标签信息为0的情况,然后与最小的标签值 $\min(B)$ 做差值,最后乘以 10^c 的功能是统一量化为最小正整数的标签信息.经过以上操作,合理地将碳温标签值量化为统一的标签信息,从而将其引入后续的降维过程中.

进一步将统一量化后的碳温标签信息 k_i ,引入JS散度距离度量中重构度量函数,有监督信息的度量计算公式如下:

$$D_{\text{JSL}}(P, Q) = \frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^n (p(x_i))^{k_p} \log \frac{2(p(x_i))^{k_p}}{(p(x_i))^{k_p} + (q(x_i))^{k_q}} \right) + \frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^n (q(x_i))^{k_q} \log \frac{2(q(x_i))^{k_q}}{(p(x_i))^{k_p} + (q(x_i))^{k_q}} \right), \quad (4)$$

其中 k_p 和 k_q 分别代表度量样本 $p(x_i)$ 和 $q(x_i)$ 相应量化后的标签信息.根据式(4)可知,将标签信息以指数的形式引入到JS散度中可以进一步拉近相似标签的样本,而差异较大标签的样本相似度进一步增大.

3.1.2 引入方向信息度量

引入标签信息的JS散度属于数据间标签信息和距离上的度量,而数据间不仅有标签与距离上的衡量,方向相似度也是一种考量方式,两组数据在方向上越一致,其相关程度也越大.受传统欧式距离加角度度量策略^[18-19]启发,将衡量样本间方向的余弦相似度算法引入到蕴含标签信息的JS散度度量策略中,使样本间的方向关系作为影响衡量数据间相似度一种因素,使得度量出的相近样本点具有距离、标签和方向三者

信息的联合近似,为线性重构提供合适的 k 近邻点.度量样本之间的余弦相似度如下:

$$\cos \theta = \frac{\sum_{i=1}^n p(x_i)q(x_i)}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (p(x_i))^2} + \sqrt{\sum_{i=1}^n (q(x_i))^2}}, \quad (5)$$

其中余弦相似度 $\cos \theta$ 取值范围在 $[-1, 1]$ 之间,越接近于1,代表相似度越高.

因此利用衡量样本间方向的余弦相似度与引入碳温标签的JS散度相似性度量,构建一种新型CJS相似性度量方法应用于监督降维中 k 近邻点的选择.

定义2 在CJS相似度方法中, $(1 - \cos \theta)$ 统一将余弦相似度量在 $[0, 2]$ 之间,将包含监督信息的 $D_{\text{JSL}}(P, Q)$ 与方向度量结合,以整体取 e^{-x} 的形式得到数据间相似度CJS,如下所示:

$$D_{\text{CJS}}(P, Q) = e^{-(D_{\text{JSL}}(P, Q) + D_{\text{JSL}}(P, Q)^{(1 - \cos \theta)})}, \quad (6)$$

由此得到的 $D_{\text{CJS}}(P, Q)$ 相似度值越大,代表样本间相似度越高.

式(6)的目的是在相似度中融合距离、标签和方向3种信息,从而形成最终的新型CJS相似性度量策略.其中: $(1 - \cos \theta)$ 的功能是将标签距离和方向度量与样本间相关度正反比关系相统一,使得该值越小样本越相似; $D_{\text{JSL}}(P, Q)^{(1 - \cos \theta)}$ 的功能是在标签距离度量的基础上引入方向信息,与之前蕴含标签信息的距离度量相加,融合为包含距离、标签和方向3种信息的度量形式.

当面对含有碳温标签值的高维样本时,通过提出的CJS度量策略计算样本点 x_i 与其他样本点的相似度选择其特征间距离、方向和标签更接近的 k 近邻点,进而利用权值系数线性表示所有样本点获得高维到低维空间的映射函数实现数据监督降维.

3.2 基于CJS的有监督降维

CJS-SLLE降维方法的目的就是在样本碳温标签和数据间方向信息的引导下将高维空间的数据映射到低维空间获得其低维坐标,使得低维坐标保留原始高维数据包含标签方向信息的局部几何结构,调整类内类间方差实现维度精简.

假设有转炉炼钢生产过程原始高维训练数据集 $X = [x_1 \ x_2 \ \cdots \ x_n]$, $X \in \mathbb{R}^{D \times n}$;而目标低维嵌入数据集为 $Y = [y_1 \ y_2 \ \cdots \ y_n]$, $Y \in \mathbb{R}^{d \times n}$,其中的 D 和 d 代表变量数, n 代表样本个数.由于特征间单位和尺度差异会影响降维过程,因此先将原始高维数据进行最大最小归一化处理使每一维特征在 $[0, 1]$ 之间.归一化处理的方法如下:

$$x^* = \left(\frac{x - x_{\min}}{x_{\max} - x_{\min}} \right). \quad (7)$$

降维过程中关键在于样本点 x_i 寻找到较优的 k 近邻点进而实现线性重构. 该阶段采用第3.1节构建的融合样本碳温标签和数据间方向信息的新型CJS相似性度量策略计算原始训练数据中样本点与其他样本点的相似度, 选择与当前样本相似度最大的 k 个样本点作为该样本的近邻点.

由此得到每个样本点 x_i 的 k 近邻点, 进而通过 k 近邻点以权值的方式线性表示样本点 x_i , 然后最小化式(8)中的误差函数计算其局部重构权值系数.

$$\min_{w_{ij}} \sum_{i=1}^n \|x_i - \sum_{j \in Q_i} w_{ij} x_j\|^2, \quad (8)$$

约束条件为 $\sum_{j \in Q_i} w_{ij} = 1$, 其中 Q_i 为 x_i 的 k 近邻下标集合, 易知 x_i 与 x_j 是已知的训练样本, 可得到局部协方差矩阵 $C_{jk} = (x_i - x_j)^T(x_i - x_k)$, 通过拉格朗日乘子法, 则最优权值 w_{ij} 的解如下:

$$w_{ij} = \frac{\sum_{k \in Q_i} C_{jk}^{-1}}{\sum_{l \in Q_i} C_{ls}^{-1}}. \quad (9)$$

由于局部线性嵌入算法高维空间和低维空间下的权值系数是保持不变的, 所以 x_i 对应的低维嵌入样本 y_i 可由式(10)目标函数求得

$$\min_{y_i} \sum_{i=1}^n \|y_i - \sum_{j \in Q_i} w_{ij} y_j\|^2 =$$

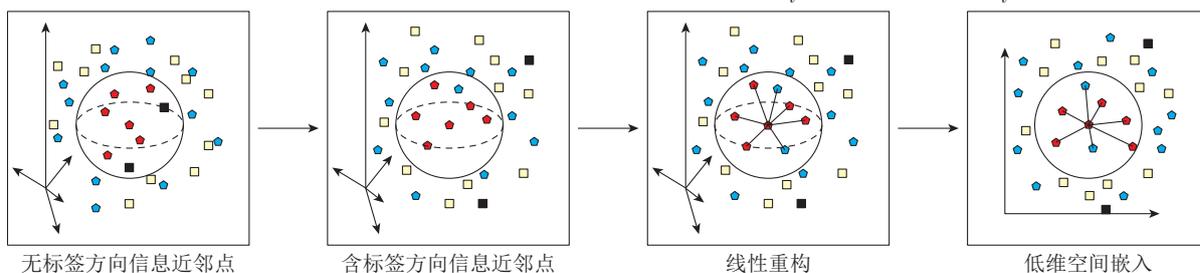


图 1 基于CJS的有监督降维算法示意图

Fig. 1 Schematic diagram of supervised dimension reduction algorithm based on CJS

3.3 面向待测样本的自适应局部线性投影

训练样本集 X 通过有监督的CJS局部线性嵌入降维可得到其低维数据集 Y , 但是面向待测样本 $X_{\text{new}} = [x_{\text{new}1} \ x_{\text{new}2} \ \cdots \ x_{\text{new}m}]$, $X_{\text{new}} \in \mathbb{R}^{D \times m}$ 时, 数据标签信息是未知的, 无法像上述方法进行有监督的降维, 针对这一难点, 采用一种自适应局部线性投影算法, 利用待测样本与已知的高维与低维训练样本建立高维到低维的映射关系, 得到待测样本的低维嵌入坐标 $Y_{\text{new}} = [y_{\text{new}1} \ y_{\text{new}2} \ \cdots \ y_{\text{new}m}]$, $Y_{\text{new}} \in \mathbb{R}^{d \times m}$. 其实现步骤如下.

$$\begin{aligned} & \min_{y_i} \sum_{i=1}^n \|Y I_i - Y W_i\|^2 = \\ & \min_{y_i} \sum_{i=1}^n \|Y (I_i - W_i)\|^2. \end{aligned} \quad (10)$$

通过优化误差函数求解 y_i , 目标低维坐标是 $Y = [y_1 \ y_2 \ \cdots \ y_n]$, $Y \in \mathbb{R}^{d \times n}$, 将 w_{ij} 构造为权值矩阵 $W = [w_{ij}]_{n \times n}$, 由此定义一个稀疏、对称的半正定矩阵 M 如下:

$$M = (I - W)^T(I - W), \quad (11)$$

其中 I 是单位矩阵, 则式(10)变成式(12)形式为

$$\min_Y \text{tr}(Y M Y^T), \quad (12)$$

约束条件为: $Y Y^T = I$. 根据Lagrange乘子法计算, $L(Y) = Y M Y^T - \varphi(Y Y^T - I)$, 对式 Y 求偏导最小化 $L(Y)$ 可得

$$\frac{\partial L}{\partial Y} = 2 M Y^T - 2 \varphi Y^T = 0, \quad (13)$$

因此可以得到 $M Y^T = \varphi Y^T$, 即求得 M 的特征向量等价于得到低维嵌入坐标 Y . 经过特征值分解计算得到 M 矩阵前 d 个最小非零特征值所对应的特征向量构成的矩阵就是 X 的低维空间坐标矩阵 Y , 其中 d 是舍弃掉第一个最接近于0的特征值的 d 个对应特征值的特征向量. 由此实现高维训练样本到低维空间的嵌入, 保留样本间局部几何结构信息. 基于CJS的有监督降维算法有无标签方向信息的区别如图1所示.

● x_i 相近标签样本点 ● x_i 初始相近标签近邻点
 □ x_i 相异标签样本点 ■ x_i 初始相异标签近邻点

首先, 通过不包含标签信息的CJS相似性度量策略计算待测样本 $x_{\text{new}i}$ 与原始高维训练样本中所有样本 x_i 的相似度 S_{i_i} , 对 S_{i_i} 从大到小进行排序, 通过自定义设定阈值的方式确定与当前待测样本相似度最接近的样本点.

定义 3 选取前 n 个与原始高维训练样本最大相似度 S_{i_i} 的均值作为选取 l 个相似样本的阈值, 从而自适应地确定相似样本的个数, 自定义设定相似度的阈值 St 如下所示:

$$St = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n S_{i_i}, \quad (14)$$

其中: $n = 30$, 得到原始训练样本中与当前待测样本 l 个最近似点 $X_l = [x_1 \ x_2 \ \dots \ x_l]$, $X_l \in \mathbb{R}^{D \times l}$. 另外, 根据第3.2节监督降维结果已知 X_l 对应的低维坐标.

其次, 寻求相应近邻点高维数据与低维数据间映射矩阵 $A = [a_1 \ a_2 \ \dots \ a_d]^T$, 使其满足映射关系 $Y_l = AX_l$, 其中 $Y_l = [y_1 \ y_2 \ \dots \ y_l]$, $Y_l \in \mathbb{R}^{d \times l}$ 是待测样本 $x_{\text{new}i}$ 对应的近邻点 X_l 的低维空间坐标. a_j 的解可通过岭回归法求解式(15)中正则化最小二乘目标函数得到

$$a_j = \min_a \left(\sum_{i=1}^l (a^T x_i - y_i^j)^2 + \beta \|a\|^2 \right), \quad (15)$$

其中: $1 \leq j \leq d$, y_i^j 代表 y_i 的第 j 个元素, $\beta > 0$ 是正则化参数. a_j 的求解化简为如下形式:

$$a_j = (X X^T + \beta I)^{-1} X y^j, \quad (16)$$

其中 I 表示 $D \times D$ 的单位矩阵. 另外, 由噪声量值 δ^2 确定 β 值, 因为岭回归法就是将每一个 D 维样本点用近邻点线性表示投影到 d 维嵌入空间的同时剔除该低维空间的噪声, 采用特征分析法如下所示:

$$\beta = \delta^2 = \frac{1}{l-d} \sum_{i=d+1}^l \gamma_i, \quad (17)$$

其中 γ_i 代表 $X X^T$ 的从小到大排序的非零特征值.

最后, 由上述方法计算每个待测样本 $x_{\text{new}i}$ 对应的近邻点在高维空间与低维空间下的映射矩阵 A , 因此可通过映射矩阵 A , 计算待测样本 $x_{\text{new}i}$ 相应的低维嵌入坐标 $y_{\text{new}i}$, 计算方法如下所示:

$$Y_{\text{new}} = A X_{\text{new}}. \quad (18)$$

经上述算法步骤, 最终获得低维空间下的训练样本集 Y 与测试样本集 Y_{new} , 为后续基于数据驱动终点碳温软测量 JITL 下的建模奠定了基础. 本文提出的 CJS-SLLE 降维算法流程如图2所示.

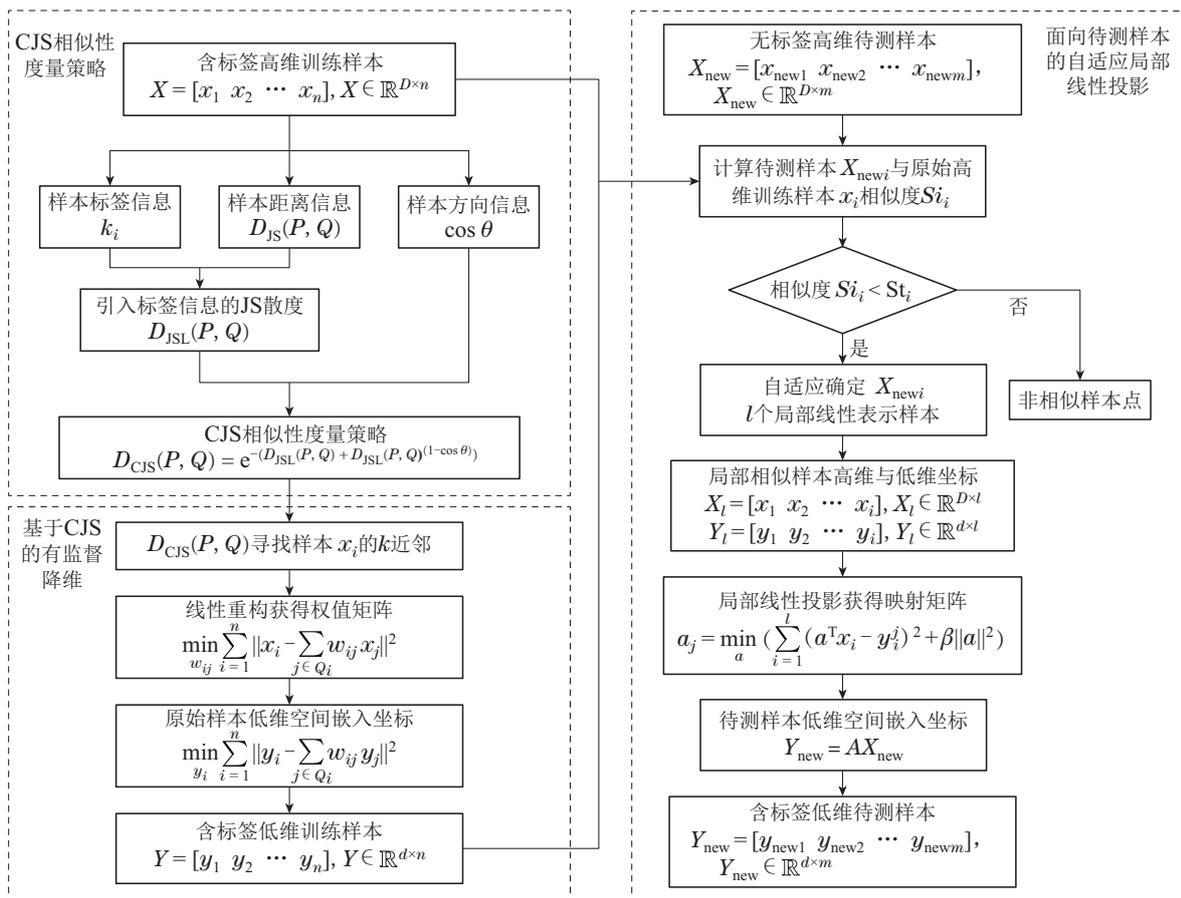


图2 CJS-SLLE降维算法流程图

Fig. 2 CJS-SLLE dimensionality reduction algorithm flow

显然, 原始高维数据通过在距离度量中引入样本碳温标签和方向信息的CJS-SLLE算法进行特征提取, 使无监督的LLE变成有监督的过程, 数据的标签信息对降维的低维特征表示具有一定的引导作用, 并且综合考虑了样本间方向信息, 使得类内方差减小, 类间

方差增大. 另外, 对于待测样本, 采用的自适应局部线性投影算法, 不需要每一次将原始训练样本与待测样本综合起来进行降维, 而是通过原始高维训练样本与其对应的已降维后的低维坐标, 寻找当前待测样本与之对应的局部映射关系, 从而一方面简化了高维待测

样本的降维复杂度, 另一方面寻找的映射关系得到的低维嵌入坐标同样具有隐含的内在标签信息, 解决了高维待测样本无标签信息而进行监督降维的难题。

4 即时学习终点碳温软测量建模

转炉炼钢生产过程数据存在高维、非线性的问题, 针对这一问题, 采用提出的CJS-SLLE降维算法对高维训练样本和测试样本进行降维, 得到了保留原样本局部结构与标签信息的低维空间坐标, 使得对终点碳温的预测具备合适的低维训练集和测试集。其次, 针对数据波动性大, 全局单一模型难以准确预测终点碳温的问题, 采用即时学习(JITL)的方法建立局部模型, 对于待测样本 Y_{new} , 利用灰色关联分析(grey relational analysis, GRA)计算当前测试样本与训练样本的灰色关联度, 为每一个测试样本构建一个相似样本子集作为新的训练子集, 最后将训练样本子集与测试样本输入到偏最小二乘回归模型中, 输出预测终点碳温值。其中, JITL构造训练样本子集的步骤如下:

步骤 1 已知低维训练集 Y 和测试集 Y_{new} , 确定分析数列, 其中当前待测样本 y_{new} 为参考数列, 所有的训练样本 y_i 为比较数列。其中:

参考数列: $y_{new} = y_{new}(k) | k = 1, 2, \dots, n$;

比较数列: $y_i = y_i(k) | i = 1, 2, \dots, m$ 。

步骤 2 计算关联系数, 计算参考数列与比较数列的差值, 令 $\Delta_{y_{new}, y_i}(k) = |y_{new}(k) - y_i(k)|$, 则灰色关联系数为

$$\varphi_i(k) = \frac{\min_i \min_k \Delta_{y_{new}, y_i}(k) + \rho \max_i \max_k \Delta_{y_{new}, y_i}(k)}{\Delta_{y_{new}, y_i}(k) + \rho \max_i \max_k \Delta_{y_{new}, y_i}(k)}, \quad (19)$$

式中: ρ 通常取0.5, $\varphi_i(k)$ 为比较数列与参考数列在各

个 k 点关联系数。

步骤 3 计算关联度值。通过式(20)计算当前参考数列 y_{new} 与比较数列 y_i 的关联度值。

$$D_{GRA, i} = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \varphi_i(k), \quad k = 1, 2, \dots, n, \quad (20)$$

其中 $D_{GRA, i}$ 为比较数列与参考数列在各个 k 点关联系数(即关联程度值)的平均值。

步骤 4 关联度排序。将参考数列 y_{new} 与所有比较数列 y_i 计算得到的关联度值进行排序, $D_{GRA, i}$ 越大, 说明与参考数列越相关。

当前待测样本与所有训练样本通过GRA分析得到前 S 个相似训练样本子集后, 将选定的当前待测样本与训练样本子集输入到偏最小二乘回归预测模型中, 分别对转炉炼钢生产过程数据碳含量和温度进行预测输出, 然后当下一个待测样本到来时, 即丢弃前一个样本子集, 利用上述JITL方法更新样本子集预测下一个待测样本碳含量和温度。

5 实验仿真及结果

5.1 实验平台及数据介绍

本文实验环境为MATLAB仿真验证, 实验样本来自于国内某钢厂实际转炉炼钢生产过程中, 原始数据包括炼钢过程中加入的原材料, 如: 装入铁水量、装入生铁量、铁水MN、铁水P等, 还包括吹氧量、吹氧时间等影响因素, 综合起来有126维原始特征。由于原始数据中部分特征有全零列或者零居多, 以及其中氧枪位置和氧压位置过程数据较多, 经过数据清洗和特征筛选, 最终得到30维关键生产过程数据作为实验的辅助(输入)变量, 而终点碳含量和温度作为对应的输出变量。其数据变量如表1所示。

表 1 转炉炼钢生产过程数据变量表

Table 1 Data variable table of converter steelmaking production process

| 输出变量 | 辅助变量 | | |
|-----------------------------|-------|-------------|---------|
| 终点钢水温度(°C) | 装入铁水量 | 铁水ASN | 硅锰时间 |
| | 装入生铁量 | 化验时间到兑铁时长 | 硅锰量 |
| | 装入废钢量 | 兑铁时长 | 硅铁时间 |
| | 转入总量 | 兑铁结束到开氧时间 | 硅铁量 |
| | 铁水温度 | 兑铁开始与上炉出钢时长 | 硅钙钡时间 |
| | 铁水C | 石灰第1次量 | 硅钙钡量 |
| 终点钢水碳含量(10 ⁻² %) | 铁水SI | 菱镁球时间 | 第1次吹氧时间 |
| | 铁水MN | 菱镁球量 | 第1次吹氧量 |
| | 铁水S | 高碳锰铁时间 | 平均氧枪位置 |
| | 铁水P | 高碳锰铁量 | 平均氧压 |

实验中, 转炉炼钢生产过程数据样本共采集有1100炉次, 特征维度30维, 分为1000炉次训练样本和100炉次测试样本。所采用的预测性能评价指标为: 预

测精度(prediction accuracy, PA)、均方根误差(root mean square error, RMSE)和平均绝对百分比误差(mean absolute percentage error, MAPE), 其计算公式如下所

示:

$$PE_i = \begin{cases} 1, & |y_{test,i} - y_{pre,i}| \leq Th, \\ 0, & |y_{test,i} - y_{pre,i}| > Th, \end{cases}$$

$$i = 1, 2, \dots, N_{test}, \quad (21)$$

$$PA = \frac{\sum_{i=1}^{N_{test}} PE_i}{N_{test}} 100\%, \quad (22)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N_{test}} \sum_i (y_{test,i} - y_{pre,i})^2}, \quad (23)$$

$$MAPE = \frac{1}{N_{test}} \sum_i \left| \frac{y_{test,i} - y_{pre,i}}{y_{test,i}} \right| 100\%, \quad (24)$$

其中: $y_{test,i}$ 和 $y_{pre,i}$ 分别代表真实值和预测值; N_{test} 为测试样本的数量; PE_i 表示预测误差是否命中, i 表示当前待测样本的序号, 如果误差在误差范围内即为命中, 记为1, 否则记为0. 其中, 碳含量的预测误差范围在 $Th = 0.02\%$, 温度的预测误差范围为 $Th = 10^\circ C$, PA 表示碳含量和温度在误差范围内的预测精度, 该值越大预测效果越好; $RMSE$ 和 $MAPE$ 反映了模型整体预测误差的大小, 二者值越小代表预测效果越好.

5.2 参数变化对CJS-SLLE模型的影响实验

实验中, 参数的合理选择对最终的预测结果影响至关重要, 本文实验在CJS-SLLE降维方法和即时学习方法建模流程中, 共存在以下几个关键的参数: 1) CJS-SLLE降维中低维嵌入维度 d 的确定; 2) CJS-SLLE降维中近邻点个数 k 值的确定; 3) 即时学习样本子集中样本个数 S 的确定.

各全局最优参数选择方式如下, 实验仿真中, 首先, 设置低维嵌入维度 d 以1为步长, 在[5, 11]区间内作为第1层循环遍历; 其次, 在每一维度 d 下, 设置近邻点 k 值以1为步长, 在[10, 20]区间内作为第2层循环遍历; 然后, 在每一维度下的每一个近邻点 k 值下, 设置样本子集中样本个数 S 以1为步长, 在[5, 100]区间内作为第3层循环遍历, 最后根据预测精度作为最佳参数选择的评价指标, 通过3层循环遍历的方式, 实验验证了3个参数下所有可能的组合情况, 共计循环遍历6336次从而验证出全局最优参数.

5.2.1 CJS-SLLE降维中低维嵌入维度 d 的验证

转炉炼钢数据共有30维特征, 仿真中关键在于前期降维阶段, 合适的低维特征既可以保留足够关键的样本信息, 又可以去除不相关的冗余信息, 因此实验中以1为步长, 在[5, 11]区间内进行维度 d 的选择. 经过实验验证, 其他参数设置最优的情况下, 碳含量输入变量维度 $d = 10$, 温度输入变量维度 $d = 7$ 时, 可得到最优的预测结果. 碳含量和温度预测中不同维度 d 及各参数取值对比如图3所示.

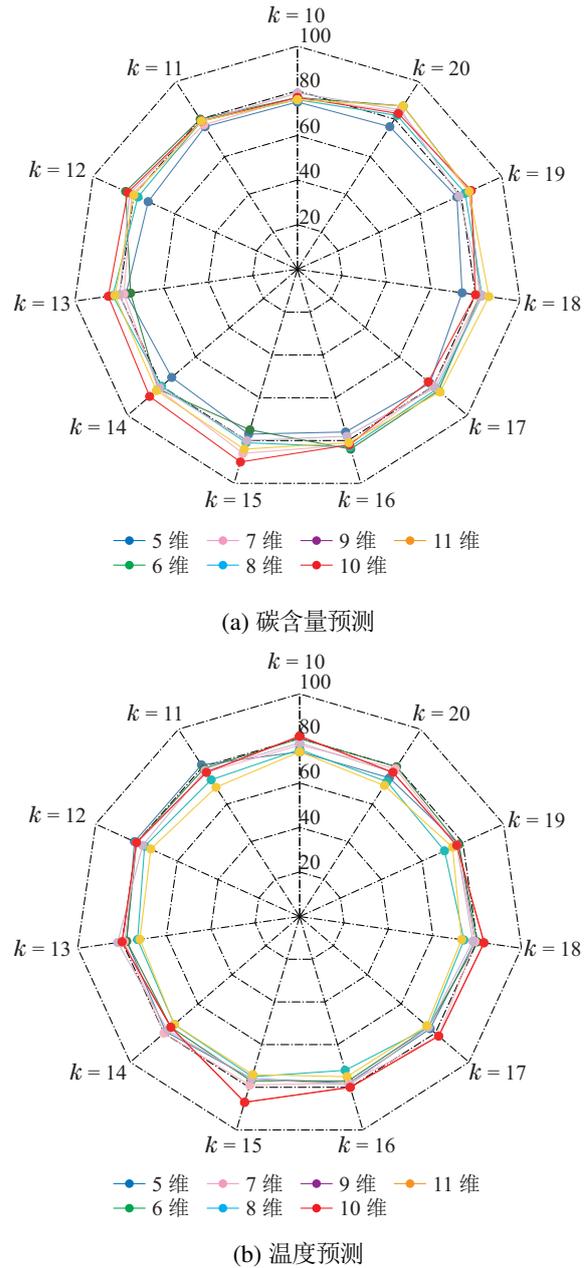


图3 不同维度 d 及各参数对比图

Fig. 3 Comparison of different dimensions d and various parameters

5.2.2 CJS-SLLE降维中近邻点个数 k 值的验证

在CJS-SLLE降维中, 样本点局部领域信息的合理映射是其关键, 选取合适的近邻点数可以最优线性表示样本点与领域的局部关系, 使降维后的低维特征保留高维样本下的局部结构信息. 因此, 本实验以1为步长, 在[10, 20]区间内进行验证近邻点 k 值的选择. 经过实验验证, 其他参数最优的情况下, 碳含量预测在近邻点 $k = 15$, 温度预测在近邻点 $k = 15$ 时, 可得到最优的预测结果. 对应维度最佳时, 碳含量和温度预测不同近邻点 k 值对比如图4所示.

5.2.3 即时学习样本子集中样本个数 S 的验证

在即时学习局部建模中, 关键在于选取与待测样

本最相关的样本子集, 通过选出最相关的样本子集输入到局部预测模型中可以更好地对待测样本进行分析预测, 本文实验以1为步长, 在[5, 100]区间内验证最优样本子集个数. 经过实验验证, 其他参数最优的

情况下, 碳含量预测在样本子集个数 $S = 38$, 温度预测在样本子集个数 $S = 63$ 时, 可得到最优的预测结果. 碳含量和温度预测不同样本子集 S 取值对比如图5所示.

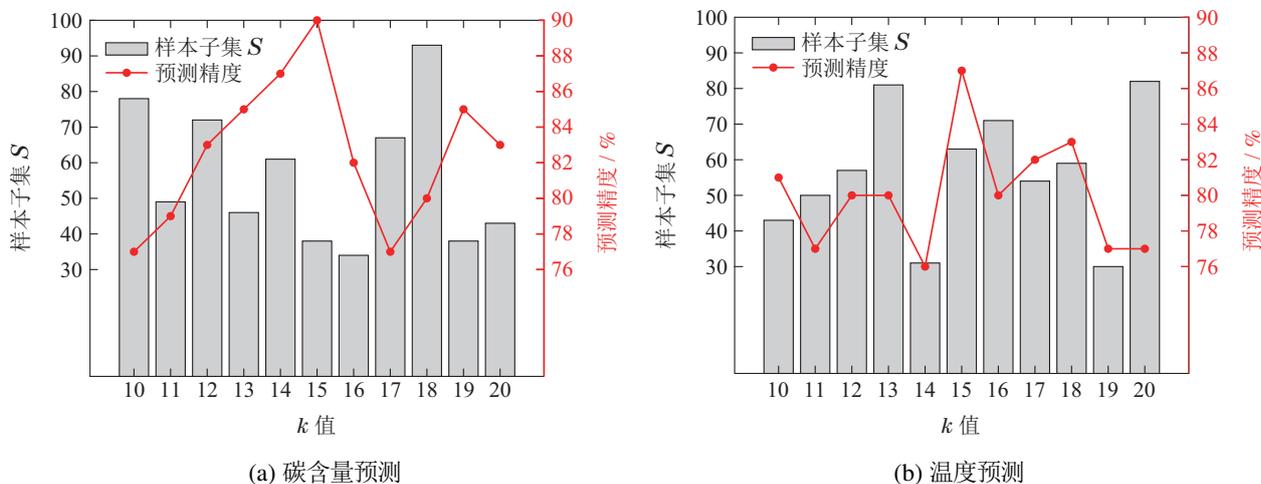


图 4 不同 k 值预测精度验证对比图

Fig. 4 Comparison chart of prediction accuracy verification for different k value

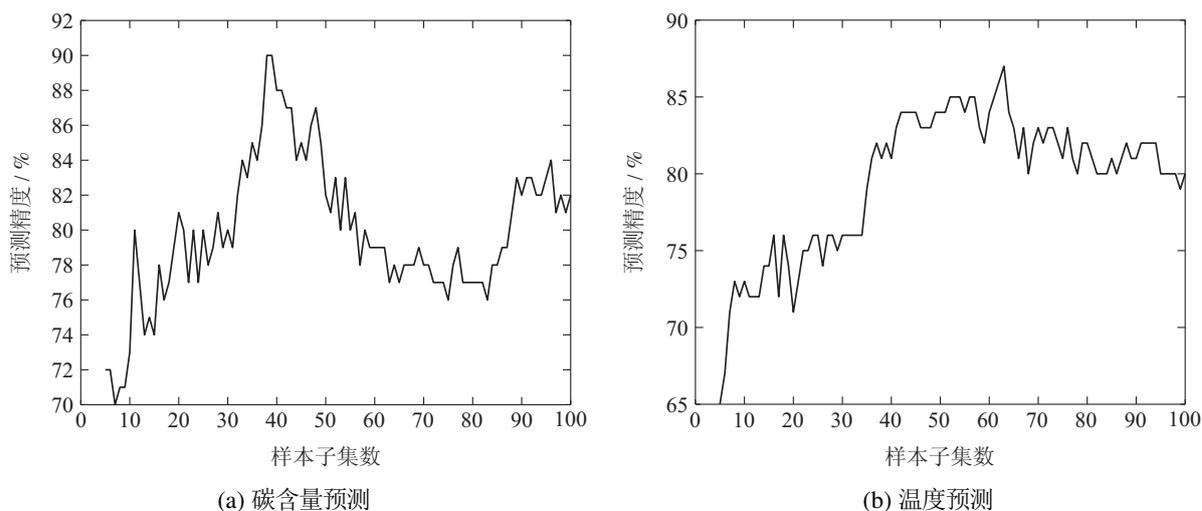


图 5 不同样本子集 S 下预测精度对比图

Fig. 5 Comparison of prediction accuracy under different sample subsets S

通过以上部分各参数的实验验证, 表明不同维度 d 、近邻点 k 值和样本子集 S 值的选取对实验预测性能影响较大, 维度的不同主要体现在降维结果对高维数据关键信息的保留程度, 近邻点个数的不同主要反映了样本点领域信息的选取范围, 而样本子集的选择主要针对局部模型输入训练集与测试集的相关程度. 本文实验综合3个关键参数进行各参数下的对比验证, 最终, 各参数在不同取值下实验验证结果对比见表2.

5.3 CJS-SLLE模型与不同模型的对比

该小节旨在验证本文所提CJS-SLLE降维方法与其他降维方法在终点碳含量和温度实验中预测性能优劣的对比, 针对降维的有效性, 将传统LLE降维方

法^[20]与无降维过程的JITL方法对比验证其降维方式的有效性; 针对融合方向标签信息监督降维的有效性, 将本文CJS-SLLE降维方法与无监督LLE降维方法对比验证其有效性. 另外, 降维方式根据保持数据间的局部结构和全局结构关系可分为全局、局部和全局加局部降维3种方式, 因此, 实验中进一步做了如下对比:

- 1) 全局降维方式: 核主成分分析(kernel principal component analysis, KPCA)降维^[21]、等度量映射(isometric mapping, ISOMAP)降维^[22]方法;
- 2) 局部降维方式: Hessian局部线性嵌入(Hessian LLE, HLLE)降维^[23]、随机邻近嵌入(stochastic neighbor embedding, SNE)降维^[24]、随机逼近嵌入(stoc-

hastic proximity embedding, SPE)降维^[25]和局部保持投影LPP降维^[26]方法;

3) 全局加局部降维方式: 局部切线空间对齐(local tangent space alignment, LTSA)降维^[27]方法.

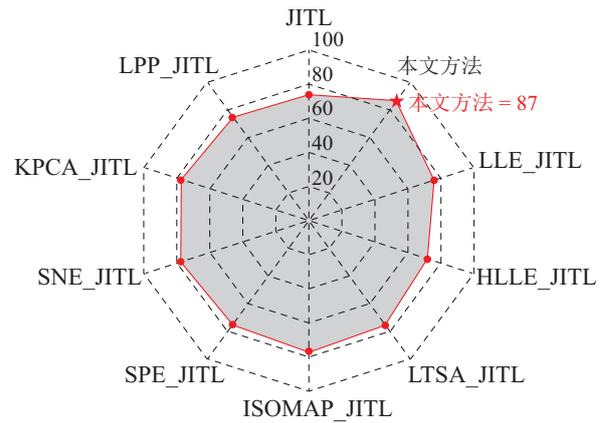
表2 本文方法各参数验证实验对比结果

Table 2 Comparison results of verification experiments for various parameters of the method in this paper

| 输出变量 | 维度 d | 近邻 k | 样本子集 S | PA/% | RMSE | MAPE |
|----------------------------|--------|--------|----------|------|--------|--------|
| 钢水碳含量($10^{-2}\%$) | 5 | 17 | 42 | 78 | 0.0167 | 0.1616 |
| | 6 | 16 | 40 | 84 | 0.0147 | 0.1421 |
| | 7 | 15 | 96 | 86 | 0.0144 | 0.1391 |
| | 8 | 13 | 41 | 83 | 0.0156 | 0.1459 |
| | 9 | 20 | 36 | 85 | 0.0147 | 0.1366 |
| | 10 | 15 | 38 | 90 | 0.0139 | 0.1350 |
| | 11 | 20 | 25 | 87 | 0.0149 | 0.1398 |
| 钢水温度($^{\circ}\text{C}$) | 5 | 12 | 36 | 81 | 8.7113 | 0.0042 |
| | 6 | 18 | 36 | 80 | 9.0210 | 0.0044 |
| | 7 | 15 | 63 | 87 | 8.5422 | 0.0042 |
| | 8 | 17 | 19 | 82 | 8.9939 | 0.0044 |
| | 9 | 12 | 62 | 76 | 8.5688 | 0.0042 |
| | 10 | 16 | 87 | 79 | 8.6826 | 0.0043 |
| | 11 | 17 | 37 | 75 | 9.2486 | 0.0044 |

经过实验验证, 在3个评价指标上本文方法都能达到最优的预测性能指标, 证明了本文CJS-SLLE降维方法的有效性. 其中终点碳含量和温度预测精度的对比如图6所示, 根据雷达图, 可以清晰分明地看出本文方法的有效性. 表3展示的是在维度 d , 样本子集 S 等参数最优的情况下, 各方法在终点碳含量和温度预测实验中预测性能指标的对比, 根据预测结果的预测精度、均方根误差和平均绝对百分比误差可知, 本文CJS-SLLE方法均能够最优实现终点碳温的预测.

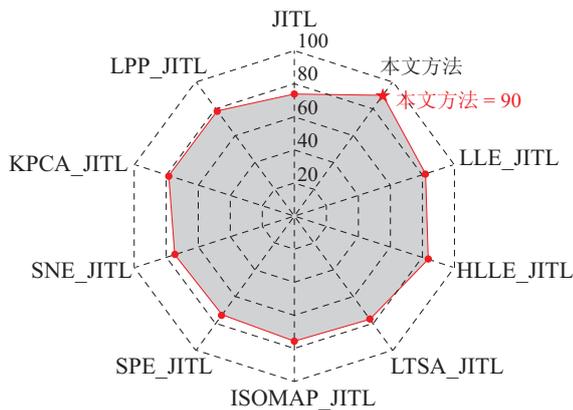
根据表3各方法的实验结果可知, 在转炉炼钢生产过程数据终点碳含量和温度的预测上, 本文基于CJS-SLLE降维与即时学习的方法在预测精度、RMSE和MAPE上均表现最优, 表明该方法通过融合标签及方向信息监督降维的优越性, 能够最大程度地保留原始高维数据的关键信息, 从而解决过程数据维度高、非线性的问题.



(b) 温度预测

图6 本文方法与其他方法终点碳温预测精度对比图

Fig. 6 Comparison of the end point carbon temperature prediction accuracy between this method and other methods



(a) 碳含量预测

1) 为了验证降维算法在转炉炼钢生产过程数据上的有效性, 将训练集和测试集均使用高维数据的JITL算法的局部预测模型与经过无监督降维的LLE_JITL算法进行对比, 根据实验性能指标分析, 采用降维方式碳温预测精度分别提升了8%和3%, 其RMSE和MAPE性能也比无降维的情况下更优;

2) 由于无监督降维方式对于预测性能的提升有限, 进一步对比本文方法与LLE_JITL, JITL方法以验证监督降维方式的优越性, 根据图6和表3分析可知, 本文CJS-SLLE降维方式在碳温实验预测精度上较无降维情况下分别提升了16%和13%, 较无监督降维情况下分别又提升了8%和10%, 从而体现出本文方法将

标签和方向信息引入降维过程的有效性;

3) 针对不同数据的结构保持形式的降维方法中, 本文实验还分别对比了全局降维方式中经典的 KPCA 和 ISOMAP 降维算法、局部降维方式中的 HLLC, SNE, SPE 和 LPP 降维算法、全局加局部降维方式

中的 LTSA 降维算法, 根据表3可以看出将本文 CJS-SLLE降维方法引入转炉炼钢终点碳温软测量建模中, 无论是在预测精度 PA 上, 还是在 RMSE 和 MAPE 上, 其预测性能都是最优的, 能够较好的对转炉炼钢终点碳温进行实时准确预测。

表 3 本文方法与其他方法实验对比结果

Table 3 Experimental comparison results of this method and other methods

| 输出变量 | 不同模型 | 维度 d | 样本子集 S | PA/% | RMSE | MAPE |
|----------------------------|-----------------------------|--------|----------|------|--------|--------|
| 钢水碳含量($10^{-2}\%$) | JITL | | 28 | 74 | 0.0198 | 0.1793 |
| | LPP_JITL ^[26] | 7 | 45 | 78 | 0.0165 | 0.1605 |
| | KPCA_JITL ^[21] | 6 | 59 | 78 | 0.0161 | 0.1558 |
| | SNE_JITL ^[24] | 6 | 47 | 75 | 0.0157 | 0.1449 |
| | SPE_JITL ^[25] | 10 | 28 | 74 | 0.0181 | 0.1768 |
| | ISOMAP_JITL ^[22] | 8 | 49 | 76 | 0.0164 | 0.1559 |
| | LTSA_JITL ^[27] | 10 | 53 | 77 | 0.0157 | 0.1507 |
| | HLLC_JITL ^[23] | 6 | 24 | 84 | 0.0151 | 0.1409 |
| | LLE_JITL ^[20] | 9 | 31 | 82 | 0.0158 | 0.1484 |
| | 本文方法 | 10 | 38 | 90 | 0.0139 | 0.1350 |
| 钢水温度($^{\circ}\text{C}$) | JITL | | 82 | 74 | 9.5827 | 0.0046 |
| | LPP_JITL ^[26] | 9 | 69 | 75 | 9.2704 | 0.0047 |
| | KPCA_JITL ^[21] | 8 | 57 | 78 | 9.0069 | 0.0042 |
| | SNE_JITL ^[24] | 7 | 70 | 78 | 9.2083 | 0.0045 |
| | SPE_JITL ^[25] | 9 | 35 | 75 | 9.2665 | 0.0045 |
| | ISOMAP_JITL ^[22] | 7 | 37 | 77 | 9.1139 | 0.0042 |
| | LTSA_JITL ^[27] | 8 | 39 | 76 | 9.0533 | 0.0044 |
| | HLLC_JITL ^[23] | 9 | 38 | 73 | 9.2833 | 0.0046 |
| | LLE_JITL ^[20] | 9 | 50 | 77 | 8.7284 | 0.0042 |
| | 本文方法 | 7 | 63 | 87 | 8.5422 | 0.0042 |

6 结论

本文针对转炉炼钢生产过程数据维度高、非线性和数据波动大的问题, 根据主导变量碳含量和温度标签信息以及样本间方向信息, 提出一种基于CJS-SLLE降维与即时学习的转炉炼钢终点碳温软测量建模方法, 具体内容如下:

1) 根据过程数据特性, 在距离度量中引入量化后的碳温标签信息实现了度量中监督信息的保留, 兼顾数据间方向因素引入方向信息构造出一种符合过程数据特性的新型CJS相似性度量策略, 使得LLE降维变成具有标签和方向信息引导的有监督过程。

2) 通过一种自适应局部线性投影算法在原始训练样本中自适应寻找可局部线性表示当前待测样本的样本点及其对应低维坐标, 在二者之间寻找相应的映射矩阵, 解决了待测样本降维时无标签信息的难点。

3) 面向转炉炼钢生产过程数据, 通过提出的CJS-SLLE算法分别实现训练样本和待测样本的有监督降维, 进而将有监督降维方法与即时学习策略相结合构造局部模型建立转炉炼钢终点碳温软测量模型,

实现了碳含量和温度的实时准确预报。

通过低维特征建立的局部预测模型实验仿真, 验证了所提算法对高维生产过程数据监督降维的有效性, 相比于无降维JITL方法、LLE降维方法及其他非线性降维方法有更好的预测性能。说明基于数据监督降维与即时学习软测量建模方法为转炉炼钢生产过程终点碳温预测建模提供了较好的研究方向, 对实际转炉炼钢应用具有一定的价值。

参考文献:

- [1] HAN Min, ZHAO Yao, YANG Xilin, et al. Endpoint prediction model of basic oxygen furnace steelmaking based on robust relevance-vector-machines. *Control Theory & Applications*, 2011, 28(3): 343 – 350.
(韩敏, 赵耀, 杨溪林, 等. 基于鲁棒相关向量机的转炉炼钢终点预报模型. *控制理论与应用*, 2011, 28(3): 343 – 350.)
- [2] LI Jianchao, QI Suci. *Converter Steelmaking Production*. Beijing: Chemical Industry Press, 2011: 12 – 95.
(李建朝, 齐素慈. *转炉炼钢生产*. 北京: 化学工业出版社, 2011: 12 – 95.)
- [3] QIAO Junfei, SUN Zijian, TANG Jian. Overview of concept drift detection for industrial process soft sensor modeling. *Control Theory &*

- Applications*, 2021, 38(8): 1159 – 1174.
(乔俊飞, 孙子健, 汤健. 面向工业过程软测量建模的概念漂移检测综述. 控制理论与应用, 2021, 38(8): 1159 – 1174.)
- [4] CHAI Tianyou, XIE Shuming, DU Bin, et al. Endpoint prediction of converter steelmaking based on RBF neural network. *The Chinese Journal of Nonferrous Metals*, 1999, 9(4): 868 – 872.
(柴天佑, 谢书明, 杜斌, 等. 基于RBF神经网络的转炉炼钢终点预报. 中国有色金属学报, 1999, 9(4): 868 – 872.)
- [5] WANG X Z, HAN M. Applying input variables selection technique on input weighted support vector machine modeling for BOF endpoint prediction. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, 2010, 23(6): 1012 – 1018.
- [6] XIONG Qian, LIU Hui, LIU Xuchen. Based on LNN-DPC weighted integrated learning method for soft measurement of carbon temperature of converter steelmaking end point. *Computer Integrated Manufacturing System*, 2022, 28(12): 3886 – 3898.
(熊倩, 刘辉, 刘旭琛. 基于LNN-DPC加权集成学习的转炉炼钢终点碳温软测量方法. 计算机集成制造系统, 2022, 28(12): 3886 – 3898.)
- [7] QI L, LIU H, XIONG Q, et al. Just-in-time-learning based prediction model of BOF endpoint carbon content and temperature via vM-F mixture model and weighted extreme learning machine. *Computers & Chemical Engineering*, 2021, 154: 107488.
- [8] CHEN Y, YE T. An improved just-in-time-learning based soft sensor method using dimensionality reduction analysis. *Journal of Physics: Conference Series*. 2021, 1955: 012095.
- [9] LI Z, JIANG W, ZHANG S, et al. Research on prediction method of hydraulic pump remaining useful life based on KPCA and JITL. *Applied Sciences*, 2021, 11(20): 9389.
- [10] HE F, ZHANG L. Prediction model of end-point phosphorus content in BOF steelmaking process based on PCA and BP neural network. *Journal of Process Control*, 2018, 66: 51 – 58.
- [11] ZHANG Cheng, GUO Qingxiu, LI Yuan, et al. Fault detection strategy based on density standard error associated with locality preserving projections. *Control Theory & Applications*, 2020, 37(8): 1757 – 1765.
(张成, 郭青秀, 李元, 等. 基于密度标准误差的局部保持投影故障检测策略. 控制理论与应用, 2020, 37(8): 1757 – 1765.)
- [12] WANG S, LIU S, ZHANG J, et al. Feasibility study on prediction of gasoline octane number using NIR spectroscopy combined with manifold learning and neural network. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2020, 228: 117836.
- [13] QU H, LI L, LI Z, et al. Supervised discriminant isomap with maximum margin graph regularization for dimensionality reduction. *Expert Systems with Applications*, 2021, 180: 115055.
- [14] LI B W, ZHANG Y. Supervised locally linear embedding projection (SLLEP) for machinery fault diagnosis. *Mechanical Systems and Signal Processing*, 2011, 25(8): 3125 – 3134.
- [15] ZHANG S Q. Enhanced supervised locally linear embedding. *Pattern Recognition Letters*, 2009, 30(13): 1208 – 1218.
- [16] ZHAO C, WANG C, HUA L, et al. Recognition of control chart pattern using improved supervised locally linear embedding and support vector machine. *Procedia Engineering*, 2017, 174: 281 – 288.
- [17] WEI J, HE Z, WANG J, et al. Fault detection based on multi-dimensional KDE and Jensen-Shannon divergence. *Entropy*, 2021, 23(3): 266.
- [18] LI Kang, WANG Fuli, HE Dakuo, et al. A data-based compensation method for optimal setting of hydrometallurgical process. *Acta Automatica Sinica*, 2017, 43(6): 1047 – 1055.
(李康, 王福利, 何大阔, 等. 基于数据的湿法冶金全流程操作量优化设定补偿方法. 自动化学报, 2017, 43(6): 1047 – 1055.)
- [19] YIN S, GAO H, QIU J, et al. Fault detection for nonlinear process with deterministic disturbances: A just-in-time learning based data driven method. *IEEE Transactions on Cybernetics*, 2016, 47(11): 3649 – 3657.
- [20] ROWEIS S T, SAUL L K. Nonlinear dimensionality reduction by locally linear embedding. *Science*, 2000, 290(5500): 2323 – 2326.
- [21] NGUYEN V H, GOLINVAL J C. Fault detection based on kernel principal component analysis. *Engineering Structures*, 2010, 32(11): 3683 – 3691.
- [22] MOUSVAI N M, GIRONACCI E, REZANIA M, et al. Stochastic modelling of crack propagation in materials with random properties using isometric mapping for dimensionality reduction of nonlinear data sets. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 2018, 113(4): 656 – 680.
- [23] DONOHO D L, GRIMES C. Hessian eigenmaps: Locally linear embedding techniques for high-dimensional data. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2003, 100(10): 5591 – 5596.
- [24] WANG P, ZHANG G, LI Y, et al. Stochastic neighbor embedding algorithm and its application in molecular biological data. *Current Bioinformatics*, 2020, 15(9): 963 – 970.
- [25] AGRAFIOTIS D K, XU H, ZHU F, et al. Stochastic proximity embedding: Methods and applications. *Molecular Informatics*, 2010, 29(11): 758 – 770.
- [26] HE X F, NIYOGI P. Locality preserving projections. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2003: DOI: 10.1016/j.patcog.2011.05.014.
- [27] ZHANG Z Y, ZHA H Y. Nonlinear dimension reduction via local tangent space alignment. *International Conference on Intelligent Data Engineering and Automated Learning*. Berlin: Springer, 2003: 477 – 481.

作者简介:

赵安 硕士研究生, 研究方向为机器学习、数据挖掘、图像处理, E-mail: 1304134016@qq.com;

刘辉 教授, 硕士生导师, 研究方向为机器学习、数据挖掘、图像处理, E-mail: liuhui621@126.com;

陈甫刚 工程师, 研究方向为数据挖掘、图像处理、工业信息处理, E-mail: 357319154@qq.com;

刘旭琛 硕士研究生, 研究方向为机器学习、数据挖掘、图像处理, E-mail: 724604772@qq.com;

张大锦 硕士研究生, 研究方向为机器学习、数据挖掘、图像处理, E-mail: 2328668736@qq.com.