

# Prédiction de la teneur finale en phosphore de l'acier dans le four à arc électrique (EAF) par l'application de réseaux de neurones artificiels

Par

Riadh AZZAZ

MÉMOIRE PRÉSENTÉ À L'ÉCOLE DE TECHNOLOGIE SUPÉRIEURE  
COMME EXIGENCE PARTIELLE À L'OBTENTION DE LA MAÎTRISE  
AVEC MÉMOIRE EN GENIE MECANIQUE  
M. Sc. A.

MONTREAL, LE 17 AOÛT 2024

ÉCOLE DE TECHNOLOGIE SUPÉRIEURE  
UNIVERSITÉ DU QUÉBEC



Riadh Azzaz, 2024



Cette licence [Creative Commons](https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/) signifie qu'il est permis de diffuser, d'imprimer ou de sauvegarder sur un autre support une partie ou la totalité de cette œuvre à condition de mentionner l'auteur, que ces utilisations soient faites à des fins non commerciales et que le contenu de l'œuvre n'ait pas été modifié.

**PRÉSENTATION DU JURY**  
**CE MÉMOIRE A ÉTÉ ÉVALUÉ**  
**PAR UN JURY COMPOSÉ DE :**

Mme. Moosavi Elmira, directrice de mémoire  
Département de Génie Mécanique à l'École de technologie supérieure

M. Mohammad Jahazi, co-directeur de mémoire  
Département de Génie Mécanique à l'École de technologie supérieure

M. Ali Ahmadi, président du jury  
Département de Génie Mécanique à l'École de technologie supérieure

M. Antoine Tahan, examinateur  
Département de Génie Mécanique à l'École de technologie supérieure

**IL A FAIT L'OBJET D'UNE SOUTENANCE DEVANT JURY ET PUBLIC**

**LE, 12 AOÛT 2024**

**À L'ÉCOLE DE TECHNOLOGIE SUPÉRIEURE**





## REMERCIEMENTS

Je tiens à exprimer mes plus sincères remerciements à ma directrice de recherche, la Professeure Elmira Moosavi, dont les conseils avisés, l'expertise inestimable et le soutien indéfectible ont été essentiels à la réussite de ce projet. Sa patience et sa disponibilité m'ont permis de progresser régulièrement et de surmonter les obstacles rencontrés en cours de route. Je suis particulièrement reconnaissant pour la confiance qu'elle m'a accordée.

Je souhaite également remercier chaleureusement mon co-directeur de recherche, le Professeur Mohammad Jahazi. Ses précieux conseils et son expertise approfondie dans le domaine ont été d'une aide inestimable. Sa présence bienveillante et ses encouragements m'ont permis de persévérer dans les moments difficiles et d'approfondir mes connaissances.

Ma gratitude va également à la Professeure Samira Ebrahimi et à mon collègue de recherche Pierre, pour leur aide précieuse durant ce projet. Leurs conseils éclairés et leur expertise m'ont permis de réaliser des progrès significatifs et d'approfondir mes compétences dans le domaine de l'apprentissage automatique. Leur patience et leur disponibilité ont été d'un grand soutien pour moi.

Je remercie chaleureusement mes collègues des groupes InTherm et CM2P pour leur camaraderie et leur soutien. J'ai particulièrement apprécié les discussions stimulantes et les moments de partage que nous avons vécus ensemble. Ma reconnaissance s'étend également au personnel de FinklSteel (Sorel Forge), notamment Mme. Paloma, M. Patrice, et Alexis, ainsi qu'à l'ensemble du personnel. Leur collaboration étroite et leur disponibilité ont été déterminantes pour le succès de ce projet de recherche.

Enfin, je tiens à exprimer ma profonde gratitude à mes parents et à mes frères et sœurs. Malgré la distance qui nous sépare, votre soutien moral permanent et vos encouragements constants ont été une source de force et de motivation pour moi. Je souhaite également remercier tous mes amis, proches et toutes les personnes qui, de près ou de loin, ont contribué à la réalisation

de ce travail, que ce soit par leurs conseils, leurs encouragements ou leurs critiques constructives.

# **Prédiction de la teneur finale en phosphore de l'acier dans le four à arc électrique (EAF) par l'application de réseaux de neurones artificiels**

Riadh AZZAZ

## **RÉSUMÉ**

Le four à arc électrique (EAF) basé sur la ferraille suscite un intérêt croissant dans la sidérurgie, car il réduit considérablement les émissions environnementales en recyclant l'acier, minimisant ainsi le besoin d'extraction de matières premières et les émissions de gaz à effet de serre associées aux procédés de sidérurgie traditionnels. Cependant, il présente des défis scientifiques et techniques, notamment dans la gestion des impuretés telles que le phosphore. Ce travail de recherche visait à développer un modèle prédictif robuste basé sur des techniques d'apprentissage automatique ou d'apprentissage profond pour estimer la teneur en phosphore de l'acier en fonction des paramètres du processus d'entrée à la fin du processus EAF. Plusieurs modèles ont été testés, et les réseaux de neurones artificiels (ANN) ont été sélectionnés pour leur haute précision dans la prédiction de la teneur en phosphore.

Tout d'abord, des données ont été collectées sur des paramètres clés tels que la composition chimique et le poids de la ferraille, la quantité de chaux ajoutée comme agent de flux, et le volume d'oxygène injecté. Les données ont été fournies par le partenaire industriel du projet, FinklSteel (Sorel Forge). Une fois collectées, les données ont été organisées et prétraitées pour être utilisées dans le développement du modèle. Plusieurs modèles d'apprentissage automatique ont été évalués, mais le modèle de réseau de neurones artificiels s'est avéré être le plus approprié pour le problème étudié. Ce modèle a été optimisé en ajustant divers hyperparamètres pour maximiser ses performances. La performance du modèle a été évaluée à l'aide de plusieurs métriques, y compris la MSE (0,00016), la RMSE (0,0049), et les coefficients de corrélation et de détermination R et R<sup>2</sup> (99% chacun).

L'un des défis des modèles de ANN est leur nature de "boîte noire", ce qui rend difficile l'interprétation de leurs prédictions. Pour surmonter cette limitation, des calculs thermodynamiques ont été appliqués pour mieux comprendre et interpréter les phénomènes physiques et chimiques de la déphosphoration. Ces calculs ont été effectués à l'aide du logiciel thermodynamique FactSage version 8.3, permettant de rendre plus compréhensible la relation entre les variables d'entrée et les résultats de déphosphoration. Les résultats démontrent que les ANN peuvent fournir des prédictions très précises, aidant à l'optimisation des opérations industrielles de déphosphoration. Cette étude contribue à l'avancement de l'élimination efficace du phosphore dans les EAF, améliorant la durabilité des processus de recyclage de l'acier.

**Mots clé :** Production d'acier, Four à arc électrique, Déphosphoration, Apprentissage automatique, Réseaux de neurones artificiels, FactSage, Calculs thermochimiques



# **Prediction of the Final Phosphorus Content in Steel in the Electric Arc Furnace (EAF) Using Artificial Neural Networks**

Riadh AZZAZ

## **ABSTRACT**

The scrap-based electric arc furnace (EAF) is of increasing interest in steelmaking as it significantly reduces environmental emissions by recycling steel, thereby minimizing the need for raw material extraction and lowering greenhouse gas emissions associated with traditional steelmaking processes. However, it faces scientific and technical challenges, particularly in managing impurities such as phosphorus. This research work aimed to develop a robust predictive model based on machine learning or deep learning techniques to estimate the phosphorus content of steel as a function of input process parameters at the end of the EAF process. Several models were tested, and an artificial neural network (ANN) was selected for its high prediction accuracy of phosphorus content. First, data were collected on key parameters such as the chemical composition and weight of the scrap, the amount of lime added as fluxing agent, and the volume of oxygen injected. The data were provided by the industrial partner of the project FinklSteel (Sorel Forge). Once collected, the data were organized and preprocessed for use in model development. Several machine learning models were evaluated, but the artificial neural network model proved to be the most suitable for the problem studied. This model was optimized by adjusting various hyperparameters to maximize its performance. The model's performance was evaluated using several metrics, including MSE (0.00016), RMSE (0.0049), and correlation and determination coefficients R and R<sup>2</sup> (99% each). The results demonstrate that ANNs can provide highly accurate predictions, aiding in the optimization of industrial dephosphorization operations. However, one of the challenges of ANN models is their "black box" nature, making it difficult to interpret their predictions. To overcome this limitation, thermodynamic calculations were applied to better understand and interpret the physical and chemical phenomena of dephosphorization. These calculations were performed using the thermodynamic software FactSage version 8.3 and its optimized databases, allowing the relationship between input variables and dephosphorization outcomes to be more comprehensible. The comparison between the FactSage calculations and the correlations obtained in this study elucidated the net effect of each input parameter on the thermodynamics and kinetics of the dephosphorization process. This study contributes to the advancement of efficient phosphorus removal in EAF, enhancing the sustainability of steel recycling processes.

**Keywords:** Steelmaking, Electric Arc Furnace, Dephosphorization, Machine Learning, Artificial Neural Networks, FactSage, Thermochemical Calculations



## TABLE DES MATIÈRES

	Page
INTRODUCTION .....	1
CHAPITRE 1 REVUE DE LITTÉRATURE.....	5
1.1 Fonctionnement du four.....	6
1.1.1 Chargement du four .....	6
1.1.2 Fusion de la ferraille .....	7
1.1.3 Affinage .....	8
1.1.4 Décrassage .....	10
1.1.5 Soutirage .....	11
1.2 Mécanisme du procédé de déphosphoration .....	12
1.3 Facteurs influençant l'efficacité de la déphosphoration .....	14
1.3.1 Basicité.....	14
1.3.2 Teneur en $\text{Fe}_2\text{O}_3$ .....	17
1.3.3 Température .....	18
1.4 Synthèse .....	19
1.5 L'apprentissage automatique et ses applications .....	19
1.5.1 Méthodes d'apprentissage automatique .....	20
1.5.2 Régression linéaire (LR) .....	20
1.5.3 Forêt aléatoire (RF).....	21
1.5.4 Machine à vecteur de support (SVM).....	24
1.5.5 Réseaux de neurones artificiels (ANN) .....	25
1.5.6 Réseau de neurones de rétropropagation .....	28
1.6 Travaux antérieurs sur l'application de l'apprentissage automatique dans l'industrie sidérurgique.....	29
1.7 Limitations et défis potentiels .....	32
CHAPITRE 2 MÉTHODOLOGIE.....	35
2.1 Collecte et préparation des données.....	35
2.1.1 Collecte de données de l'usine .....	36
2.1.2 Prétraitement des données.....	38
2.1.3 Normalisation.....	41
2.1.4 Séparation des données .....	41
2.2 Développement des modèles.....	42
2.2.1 Implémentation des modèles d'apprentissage automatique RF et SVM... ..	42
2.2.2 Réseau de neurones artificiels.....	43
2.2.3 Caractéristiques du présent modèle ANN.....	49
2.2.4 Métriques d'évaluation .....	49
2.3 Calculs thermodynamiques .....	51
2.3.1 Logiciel de calcul thermochimique et ses bases de données .....	52
2.3.2 Sélection des variables.....	54

CHAPITRE 3	ANALYSE DE RÉSULTATS DES MODÈLES D'APPRENTISSAGE AUTOMATIQUE .....	55
3.1	Distribution des paramètres de l'usine.....	55
3.2	Analyse de corrélation entre les variables d'entrée et la sortie .....	56
3.3	Forêt aléatoire (RF : Model 1) .....	59
3.4	SVM avec noyau RBF (Modèle 2) .....	60
3.5	Réseau de neurone profond (DNN : Modèle 3).....	61
3.6	Réseau de neurones artificiels (ANN) .....	63
3.6.1	ANN_16-8-sigmoid (Modèle 4) .....	63
3.7	Étapes d'optimisation de modèle ANN .....	68
3.7.1	Évolution des hyperparamètres -Étape 1 (Modèle 5) .....	68
3.7.2	Évolution des hyperparamètres - Étape 2 (Modèle 6) .....	70
3.7.3	Modification de l'ensemble des données d'entraînement .....	73
3.8	Comparaison du modèle ANN actuel (modèle 6 optimisé) avec les modèles développés antérieurement.....	75
CHAPITRE 4	LA DÉPHOSPHORATION DE L'ACIER À L'AIDE DES CALCULS THERMOCHIMIQUES .....	79
4.1	Teneur finale en phosphore de l'acier en fonction de variables opérationnelles.....	80
4.1.1	Relation entre la teneur finale en P de l'acier et les paramètres d'entrée du procédé .....	80
4.1.2	Relation entre la teneur finale en P de l'acier et la composition chimique du laitier .....	83
4.2	Coefficient de distribution P ( <b>L<sub>p</sub></b> ) en fonction de variables opérationnelles.....	91
4.2.1	Relation entre L <sub>p</sub> et les données d'entrée du procédé .....	92
4.2.2	Relation entre L <sub>p</sub> et la composition du laitier.....	93
CHAPITRE 5	DISCUSSION .....	101
5.1	Effet des paramètres d'entrée du procédé sur la teneur finale en P de l'acier .....	101
5.2	Effet de la composition du laitier sur la teneur finale en P de l'acier .....	107
5.3	Comparaison entre la teneur en P de l'acier, mesurée et calculée .....	110
CONCLUSIONS ET RECOMMANDATIONS.....		113
LISTE DE RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES .....		117



## LISTE DES TABLEAUX

	Page
Tableau 1-1      Le cycle moyen d'un tap to tap d'un EAF Tiré de Fruehan (1998) .....	6
Tableau 1-2      Composition représentative d'un laitier classique provenant d'un EAF Fruehan (1998).....	10
Tableau 1-3      La basicité optique des oxydes purs BERGMAN (1988).....	16
Tableau 2-1      Paramètres utilisés (entrées) pour développer les modèles d'apprentissage automatique.....	37
Tableau 2-2      Statistiques descriptives relatives aux différents paramètres utilisés dans l'apprentissage des modèles .....	39
Tableau 2-3      Hyperparamètre utilisé dans le présent modèle ANN.....	49
Tableau 2-4      Paramètres initiaux moyens de l'aciérie .....	54
Tableau 3-1      Valeurs des métriques d'évaluation du modèle RF .....	60
Tableau 3-2      Valeurs des métriques d'évaluation du modèle SVM-RBF .....	61
Tableau 3-3      Récapitulatif du modèle DNN (Modèle 3).....	62
Tableau 3-4      Récapitulatif du modèle ANN_16-8-sigmoid (Modèle 4) pour 12 paramètres .....	66
Tableau 3-5      Récapitulatif du modèle ANN_16-8 (modèle 4) avec 10 paramètres d'entrée .....	68
Tableau 3-6      Récapitulatif du modèle ANN_144-256-64-sigmoid (Modèle 5) pour 12 paramètres.....	70
Tableau 3-7      Récapitulatif des métriques des modèles de réseaux de neurones .....	75
Tableau 3-8      Récapitulation comparative des modèles antérieurs et du modèle proposé.....	76
Tableau 4-1      La basicité optique des oxydes purs Tiré de BERGMAN (1988) .....	85

Tableau 5-1	Corrélations du coefficient de Pearson ( $r$ ) entre la teneur finale en P de l'acier en fonction des données d'entrée du procédé et de la composition du laitier.....	102
-------------	--	-----

## LISTE DES FIGURES

Figure 1-1	Représentation schématique d'un four à arc électrique Tirée de Hay et al. (2021) .....	5
Figure 1-2	Capacité de phosphate par rapport à la basicité d'un laitier de EAF Tirée de Li et al. (2019) .....	15
Figure 1-3	Relation entre la capacité phosphatée du laitier EAF et sa basicité optique a) à 1550°C Tirée de BERGMAN (1988) et b) à 1650°C Tirée de Drain et al. (2018) .....	16
Figure 1-4	L'impact de la température sur (a) $\lg L_p$ , (b) $\lg P_{2O5}$ , (c) $\lg C_p$ dans le laitier, Tirée de Wang et al. (2023) .....	18
Figure 1-5	Structure simple d'un modèle de forêt aléatoire, Tirée de Koehrsen (2017) .....	22
Figure 1-6	Structure simple d'un modèle d'arbre de classification et de régression basé sur l'arbre de décision, Tirée de Jain et al. (2023) .....	23
Figure 1-7	Schéma de fonctionnement du noyau RBF, Tirée de Sidharth (2022) .....	25
Figure 1-8	Structure classique d'un modèle de réseau de neurones artificiels ANN Tirée de Wang et al. (2022) .....	26
Figure 1-9	Structure générale d'un modèle de réseau de neurones à rétropropagation, Tirée de Zou et al. (2022) .....	28
Figure 2-1	Caractéristiques clés de la boîte à moustaches Tirée de Galarnyk (2019) .....	40
Figure 2-2	Organigramme pour le développement d'un modèle ANN basé sur des données industrielles .....	44
Figure 2-3	Structure générale et fondamentale a) d'un neurone et b) d'un modèle de réseau de neurones Tirée de Gibson and Patterson (2018) .....	45

Figure 2-4	L'interface du logiciel FactSage version 8.3 utilisé pour les calculs thermochimiques.....	53
Figure 2-5	Bases de données utilisées dans cette étude.....	53
Figure 3-1	Diagramme en boîte pour divers paramètres d'entrée-sortie du procédé de fabrication de l'acier .....	55
Figure 3-2	(a) Coefficients de corrélation de Pearson (PCC) et (b) carte thermique entre la teneur finale en phosphore de l'acier (la variable cible) et les paramètres d'entrée .....	58
Figure 3-3	Nuage de points pour la teneur finale en phosphore de l'acier, prédite à partir du modèle RF (modèle 1) et mesurée.....	59
Figure 3-4	Nuage de points pour la teneur finale en phosphore de l'acier, prédite par le modèle DNN (modèle 3) et mesurée .....	62
Figure 3-5	(a) Nuage de points pour la teneur finale en phosphore de l'acier, prédite par le modèle ANN_16-8-sigmoïde (modèle 4) et mesurée, et (b) courbes d'apprentissage pendant l'entraînement et la validation du modèle.....	65
Figure 3-6	(a) Nuage de points pour la teneur finale en phosphore de l'acier, prédite par le modèle ANN_16-8-sigmoïde (modèle 4) pour 10 paramètres, comparée aux valeurs mesurées, et (b) courbes d'apprentissage pendant l'entraînement du modèle .....	67
Figure 3-7	(a) Nuage de points représentant la teneur finale en phosphore de l'acier, prédite par le modèle ANN_144-256-64-sigmoïde (modèle 5) et les valeurs mesurées, et (b) courbes d'apprentissage pendant l'entraînement et la validation du modèle.....	69
Figure 3-8	(a) Nuage de points montrant la teneur finale en phosphore de l'acier, prédite par le modèle ANN_128-128-128-64-sigmoïde (Modèle 6) et les valeurs mesurées, et (b) courbes d'apprentissage pendant l'entraînement et la validation du modèle .....	72
Figure 3-9	(a) un nuage de points illustrant la teneur finale en phosphore de l'acier, prédite par le modèle ANN_128-128-128-64-sigmoïde (Modèle 6) par rapport aux valeurs mesurées, et (b) les courbes d'apprentissage durant l'entraînement et la validation du modèle, avec une division des données de 80 % pour l'entraînement et 20 % pour le test.....	74

Figure 4-1	Corrélations entre le paramètre cible (la teneur finale en P de l'acier) et les paramètres d'entrée du procédé, calculées à partir des données d'entrée du procédé .....81
Figure 4-2	Variation de la teneur finale en P de l'acier en fonction de la masse d'O <sub>2</sub> injectée et de la teneur en S de la ferraille, calculée à partir des données d'entrée du procédé .....82
Figure 4-3	Variation de la teneur finale en P de l'acier en fonction de la teneur en Si et de la teneur en S de la ferraille, calculée par FactSage à partir des données d'entrée du procédé .....83
Figure 4-4	Corrélations entre le paramètre cible (la teneur finale en P de l'acier) et la composition chimique du laitier, calculées à partir des données d'entrée du procédé .....84
Figure 4-5	Teneur finale en P de l'acier en fonction des composants du laitier, calculées à partir des données d'entrée du procédé .....87
Figure 4-6	Teneur finale en P de l'acier en fonction des composants du laitier, calculées à partir des données d'entrée du procédé (la suite).....88
Figure 4-7	Variation de la teneur finale en P de l'acier en fonction (a) du rapport CaO/FeO, (b) de la basicité optique, calculées à partir des données d'entrée du procédé .....90
Figure 4-8	Variation de la teneur finale en P de l'acier en fonction (c) du rapport CaO/SiO <sub>2</sub> , et (d) du rapport FeO/SiO <sub>2</sub> , calculées à partir des données d'entrée du procédé .....91
Figure 4-9	Corrélation entre le rapport $L_p$ et les paramètres d'entrée du procédé, calculées par FactSage à partir des données d'entrée du procédé .....92
Figure 4-10	Corrélation entre le rapport $L_p$ et la composition chimique du laitier, calculées à partir des données d'entrée du procédé .....94
Figure 4-11	Variations de $L_p$ en fonction de la composition du laitier, (a) Wt% FeO, (b) Wt% CaO .....96
Figure 4-12	Variations de $L_p$ en fonction de la composition du laitier, (c) Wt% SiO <sub>2</sub> , (d) Wt% MnO et (e) Cr <sub>2</sub> O <sub>3</sub> , calculées sur la base des données d'entrée du procédé .....97
Figure 4-13	Variations de $L_p$ en fonction de rapport (a) CaO/FeO .....98
Figure 4-14	Variations de $L_p$ en fonction des rapports, (b) CaO/SiO <sub>2</sub> et (c) de la basicité optique, calculées sur la base des données d'entrée du procédé ...99

Figure 5-1	Diagramme d'Ellingham montrant l'oxydation sélective du Cr, du Mn, du Si et du C par rapport au P Tirée de Royes (2015).....	106
Figure 5-2	Variations de la teneur en $P_2O_5$ du laitier en fonction de sa teneur en MnO, calculées sur la base des données d'entrée du procédé .....	107
Figure 5-3	Diagramme de phase $SiO_2$ -CaO-FeO-12,5 MnO-15,5 $Cr_2O_3$ (en % en poids), calculé à 1600°C, les lignes (a) d'iso-activité du CaO et (b) de l'oxygène .....	109
Figure 5-4	Teneur finale en P de l'acier, prédite par FactSage par rapport aux données mesurées à l'usine.....	110

## LISTE DES ABRÉVIATIONS, SIGLES ET ACRONYMES

ACP	Principal Component Analysis (Analyse des composantes principales)
ANN	Artificial Neural Network (Réseau de neurones artificiels)
BPNN	Back Propagation Neural Network (Réseau de neurones à rétropropagation)
C	Carbone
CaF <sub>2</sub>	Fluorure de calcium
CaO	Oxyde de calcium (chaux)
CART	Classification and Regression Tree (Arbre de Classification et de Régression)
Cr	Chrome
Cr <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Oxyde de chrome (III)
$C_{PO_4^{3-}}$	Capacité de phosphate
D_P	Durée du procédé
EAF	(FAÉ) Electric Arc Furnace (Four à Arc Électrique)
Éner	Énergie consommée
Fe	Fer
FeO	Oxyde de fer
IA	Intelligence Artificielle
K	Constante d'équilibre
Lp	Coefficient de répartition du phosphore
LSTM	Long Short-Term Memory (Réseau de mémoire à long terme)
MgO	Oxyde de magnésium
Mn	Manganèse
MnO	Oxyde de manganèse
MSE	Mean Squared Error (Erreur quadratique moyenne)

P	Phosphore
$P_{O_2}$	Pression partielle d'oxygène (O <sub>2</sub> )
PCC	Pearson Correlation Coefficient (Coefficient de corrélation de Pearson)
P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	Pentoxyde de phosphore
$PO_4^{3-}$	Ion phosphate
Po_Fr	Poids de ferrailles
RF	Random Forest (Forêts aléatoires)
RBF	Radial Basis Function (Fonction de base radiale)
RMSE	Root Mean Squared Error (Erreur quadratique moyenne racine)
S	Soufre
Si	Silicium
SiO <sub>2</sub>	Dioxyde de silicium
SVM	Support Vector Machine (Machines à vecteurs de support)
T_Dé	Température de décrassage
T_Sou	Température de soutirage



## LISTE DES SYMBOLES ET UNITÉS DE MESURE

$\Lambda$	Basicité Optique
$r$	Coefficient de corrélation de Pearson
wt%	Pourcentage en poids
$(f)$	Fonction d'activation
%	Pourcentage
$W_{ji}$	Poids synaptique
$R^2$	Coefficient de détermination
$\text{Pi}^3$	Pied cube
$^{\circ}\text{C}$	Degré Celsius
$^{\circ}\text{K}$	Kelvin
lb	Livre
kW	Kilowatt
kg	Kilogramme



## INTRODUCTION

L'industrie sidérurgique est un acteur clé dans la transition vers une économie durable, notamment grâce à l'émergence des fours à arc électriques (EAF). Leur fonctionnement est basé sur la fusion de la charge de ferraille à l'aide d'un arc électrique généré entre les électrodes et le bain d'acier liquide (Janiszewski, Socha et Gryc 2013). Ce procédé permet de recycler efficacement les déchets d'acier, tout en réduisant considérablement les émissions de carbone par rapport aux hauts fourneaux traditionnels (Yang, Jiang et al. 2017), (Sohn 2020).

Bien que les EAFs offrent des avantages environnementaux, ils sont confrontés à des défis scientifiques et techniques complexes, notamment en ce qui concerne la gestion des impuretés présentes dans la ferraille, telles que le phosphore (Frueham 2001). Le phosphore a des effets négatifs sur les propriétés mécaniques de l'acier, tels qu'une fragilité accrue et une réduction de la ténacité et de la résistance à la corrosion. La présence de phosphore dans la charge des EAFs représente un défi majeur pour la fabrication d'un acier de haute qualité. En effet, il est nécessaire de réduire les niveaux de phosphore qui sont souvent supérieurs à 0,027% en poids dans les ferrailles à moins de 0,015% dans l'acier produit afin de répondre aux normes de qualité (P. Menard, communication personnelle, Janvier 2023). La variété de la composition des ferrailles utilisés comme alimentation rend toutefois cette tâche extrêmement difficile (Zhancheng 2009), (Drain, Monaghan et al. 2018) (Trivedi et Gupta 2019).

De nombreuses études basées sur différentes approches ont été menées pour comprendre le procédé complexe d'élimination du phosphore dans les EAFs (Lim, Lee et al. 2017) (Choi, Seo et Lee 2023), (Tomažič, Andonovski et al. 2022) (Zhang, Yang et al. 2023). Les méthodes purement empiriques sont longues, coûteuses et difficiles, en particulier à l'échelle industrielle. La modélisation et les simulations constituent une alternative. Les approches de modélisation traditionnelles se sont principalement appuyées sur des modèles physicochimiques et thermodynamiques pour prédire le comportement du phosphore dans le bain d'acier liquide (Lim, Lee et al. 2017). Ces modèles ont permis d'améliorer la compréhension des mécanismes de déphosphoration, mais leur complexité et leur dépendance à des hypothèses simplificatrices

(par exemple, l'état d'équilibre global dans le four) ont limité leur applicabilité dans les conditions réelles de production (Opitz et Treffinger 2016).

Face aux limites des modèles physiques, les chercheurs se sont tournés vers des approches de modélisation basées sur l'apprentissage automatique pour optimiser les opérations des EAFs (Choi, Seo et Lee 2023), (Tomažič, Andonovski et al. 2022). Les modèles d'apprentissage automatique, tels que les réseaux neuronaux artificiels et les forêts aléatoires, ont démontré leur capacité à capturer les relations complexes entre les paramètres du EAF et le procédé de déphosphoration, qui implique à la fois des aspects thermodynamiques et cinétiques (Zhang, Yang et al. 2023).

Ces modèles d'apprentissage automatique présentent plusieurs avantages : ils peuvent s'adapter aux changements dans la composition de la charge de ferraille et aux variations des conditions opératoires. De plus, ils offrent une meilleure prédiction des performances de déphosphoration par rapport aux modèles physiques traditionnels notamment les modèles cinétiques et les modèles dynamiques (Ek et al., 2012; Zhang et al., 2021). En outre, ils permettent d'identifier les paramètres les plus influents sur le procédé à l'aide de techniques d'interprétation telles que SHAP ou LIME (Guezennec, 2004), ce qui facilite la prise de décisions par les opérateurs (Li, Barui et al. 2022), (Carlsson, Samuelsson et Jönsson 2020).

Cependant, l'application de l'apprentissage automatique dans l'industrie sidérurgique, et plus particulièrement dans les EAFs, n'est pas sans défis. La disponibilité de données de qualité, la complexité du procédé sidérurgique et l'interprétabilité des modèles sont autant de défis à relever pour une mise en œuvre réussie de ces techniques (Nenchev et al., 2022), (Klimas & Grabowski, 2022).

La thèse de recherche de ce master s'inscrit dans le cadre d'un partenariat avec l'entreprise Finkl Steel Sorel, Québec, spécialisée dans la fabrication d'aciers pour matrices de forgeage, d'aciers pour moules plastiques, d'aciers pour outillages de moulage sous pression et de forges libres sur mesure, traitant plus de 200 000 tonnes d'acier chaque année. Le projet de recherche fait

partie d'une initiative plus vaste visant à mieux comprendre et à améliorer le procédé d'élimination du phosphore dans un contexte industriel chez Finkl Steel, à Sorel. L'objectif principal de ce programme de maîtrise est de mettre au point un modèle d'apprentissage automatique qui utilise les capacités de l'intelligence artificielle pour prévoir la teneur ultime en phosphore de l'acier en utilisant des variables cruciales du procédé d'entrée dans un EAF fonctionnant à base de ferraille. En conséquence, le modèle construit, lorsqu'il est combiné à la thermodynamique computationnelle, peut suggérer des améliorations au procédé de déphosphoration dans le EAF.

Le Chapitre I comprend une revue de la littérature visant à acquérir une compréhension plus approfondie du mode opérationnel du EAF, du mécanisme de déphosphoration et des paramètres influençant l'élimination du phosphore. De plus, les recherches précédentes sur l'application de modèles d'intelligence artificielle aux procédés sidérurgiques et les nouvelles approches utilisant l'apprentissage automatique pour améliorer les opérations des EAFs sont présentées.

Le Chapitre II donne un aperçu détaillé des méthodes utilisées dans cette étude. Tout d'abord, la méthode de traitement des données et d'apprentissage, la structure du modèle de réseau de neurones et l'évaluation correspondante seront présentées. En outre, le chapitre décrit l'approche adoptée pour les calculs thermodynamiques.

Le Chapitre III présente la corrélation entre les paramètres du procédé et la teneur finale en phosphore de l'acier, ainsi que les résultats des modèles d'apprentissage automatique. Les étapes d'optimisation du modèle seront également développées.

Le Chapitre IV traite de la sensibilité du procédé de déphosphoration aux variables opérationnelles chez Finkl Steel, réalisée à l'aide de calculs thermodynamiques. Ces calculs peuvent être utilisés pour fournir des orientations en vue d'optimiser les paramètres du procédé, servant de nouvelles entrées dans le modèle d'apprentissage automatique pour la prédiction et l'optimisation de la teneur finale en phosphore de l'acier.

Le Chapitre V expose les conclusions de ce travail de recherche. En outre, des recommandations pour les travaux futurs seront soulignées.

## CHAPITRE 1

### REVUE DE LITTÉRATURE

En 1889, Paul Héroult a inventé le four à arc électrique (EAF), initialement utilisé exclusivement pour la production d'aciers spécifiques avant de devenir l'une des principales techniques de fabrication de l'acier à la fin du vingtième siècle (Thomas Hay, 2020 SRI). La production d'acier par EAF est une méthode écologique qui recycle la ferraille en fin de vie et représente environ 30 % des 1,8 milliard de tonnes d'acier produites dans le monde (Son et al., 2021). Le laitier est essentiel dans le procédé de fabrication de EAF car il absorbe les impuretés telles que le soufre et le phosphore pendant la fusion du métal qui doivent être réduites autant que possible pour garantir une qualité élevée du produit final. Il protège également l'acier de la réoxydation et réduit les pertes de chaleur verticales dans l'atmosphère (Anderson, 2016). Une illustration schématique d'un EAF présenté dans la figure 1-1

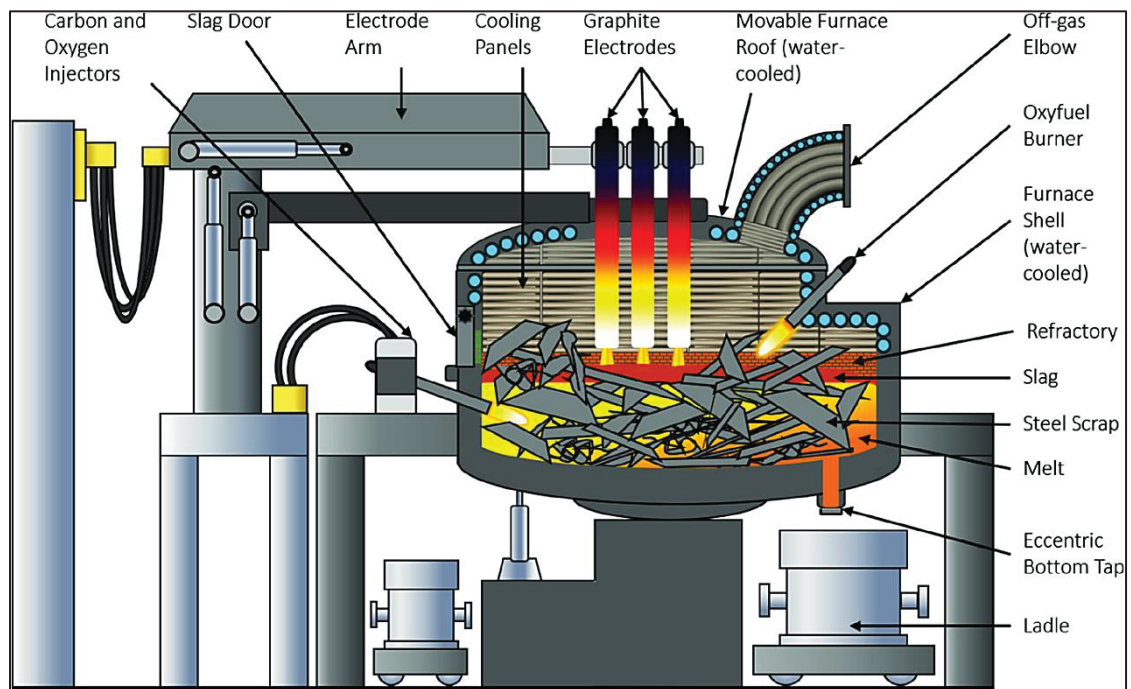


Figure 1-1 Représentation schématique d'un four à arc électrique  
Tirée de Hay et al. (2021)

## 1.1 Fonctionnement du four

Le cycle "tap-to-tap" décrit le fonctionnement d'un EAF. Il comprend les étapes suivantes : chargement du four, fusion, affinage, décrassage, tapping et retournement du four. Les opérations modernes visent à atteindre un temps de prise à prise de moins de 60 minutes. Le Tableau 1 répertorie le cycle "tap-to-tap" d'un EAF à titre d'exemple.

Tableau 1-1 Le cycle moyen d'un tap to tap d'un EAF  
Tiré de Fruehan (1998)

Première charge	3 minutes
Première fusion	20 minutes
Deuxième charge	3 minutes
Deuxième fusion	14 minutes
Affinage	10 minutes
Soutirage	3 minutes
Retournement	7 minutes
Total	60 minutes

### 1.1.1 Chargement du four

La première étape de la production d'acier implique la sélection méticuleuse du grade d'acier. La distribution de la ferraille dans la poche, basée sur sa taille et sa densité, favorise la formation rapide d'un bassin liquide dans le four, tout en protégeant les parois latérales et le toit contre le rayonnement de l'arc. Des facteurs tels que la prévention des effondrements de ferraille, qui pourraient endommager les électrodes, sont pris en compte. De nombreuses entreprises préfèrent combiner l'ajout de chaux et de carbone dans la poche de ferraille et compléter l'opération par l'injection de quantités supplémentaires si nécessaire (Maia & Onofri, 2022).

Le procédé de chargement consiste à soulever le toit et les électrodes, qui sont ensuite inclinés sur le côté pour permettre à la grue de chargement de positionner une benne à ferraille pleine



au-dessus du four. Généralement, le fond de la benne adopte une conception en forme de coquille, où deux segments se rétractent pour faciliter le déchargement de la ferraille dans le four. Une autre solution consiste à utiliser le concept de "peau d'orange". Une fois la ferraille déposée dans le four, la grue retire la benne, puis le toit et les électrodes sont replacés dans leur position initiale au-dessus du four. Le toit est alors abaissé et les électrodes sont réglées pour produire un arc électrique avec la ferraille, ce qui déclenche la phase de fusion du cycle. Le nombre de godets de chargement de la ferraille nécessaires à la production d'acier dépend principalement du volume du four et de la densité de la ferraille. La conception des fours modernes vise à minimiser le rechargement, car le procédé de chargement constitue un temps d'arrêt pendant lequel le four est inactif et ne participe donc pas aux opérations de fusion. La réduction de ces temps d'arrêt optimise la productivité du four. En outre, chaque fois que le toit est ouvert, de l'énergie est perdue, généralement entre 10 et 20 kWh par tonne d'acier produite. Par conséquent, la plupart des entreprises visent une fourchette de 2 à 3 bennes de ferraille par chaleur et essaient de mélanger les matériaux de ferraille en conséquence pour répondre à cette exigence. Dans certains cas, les entreprises parviennent à charger un seul bac. Les méthodes de chargement continu telles que Consteel et le four à cuve Fuchs contournent le paradigme du cycle de chargement conventionnel (Fruehan, 1998).

### **1.1.2 Fusion de la ferraille**

Le procédé EAF a évolué pour devenir un appareil de fusion efficace, les conceptions modernes mettant l'accent sur l'augmentation de la capacité du four. La fusion dans le four est réalisée grâce à une source d'énergie, qui peut être de nature électrique ou chimique. L'énergie électrique, principalement fournie par des électrodes en graphite, constitue la source d'énergie prédominante dans les opérations de fusion (Singh, 2020).

Au départ, un réglage de tension intermédiaire est sélectionné jusqu'à ce que les électrodes pénètrent suffisamment dans la ferraille. Ensuite, alors que les électrodes pénètrent plus profondément dans la ferraille, un réglage de haute tension est activé pour développer un arc long et stable, maximisant le transfert de chaleur vers la ferraille et facilitant la formation d'une piscine de métal liquide dans la sole du four (Singh, 2020).

Toutefois, lorsque la température du four augmente, l'arc se stabilise, ce qui se traduit par un apport de puissance plus régulier. L'énergie chimique est également utilisée par le biais de brûleurs oxy-combustibles et de lances à oxygène, la combustion du gaz naturel fournissant de la chaleur par rayonnement et convection de la flamme. En outre, l'injection d'oxygène par les lances facilite le découpage de la ferraille et favorise les réactions exothermiques avec divers composants du bain, contribuant ainsi au processus de fusion (Singh, 2020).

Lorsque la quantité de ferraille fondue est suffisante pour les charges suivantes, le procédé de chargement est répété jusqu'à ce que la dernière charge de ferraille soit entièrement fondue. À ce stade, des mesures sont prises pour protéger les parois du four du rayonnement intense de l'arc, soit en réduisant la tension, soit en enfouissant l'arc sous une couche de laitier mousseuses. Cela permet non seulement de protéger la coque du four, mais aussi d'améliorer l'efficacité énergétique en retenant plus d'énergie dans le laitier, qui est ensuite transférée au bain (Singh, 2020).

Une fois que le bain est plat et que sa température est mesurée, l'analyse chimique du bain guide les opérations d'affinage ultérieures, notamment le soufflage d'oxygène et l'ajout d'alliages en vrac. Ces étapes sont finalisées après la période d'affinage, ce qui garantit un contrôle et un affinage optimaux du procédé de production de l'acier (Singh, 2020).

### **1.1.3 Affinage**

Après avoir obtenu des conditions de bain plat dans le EAF, la phase suivante est celle de l'affinage. Tout au long de cette phase, des ajustements méticuleux sont effectués pour gérer les éléments souvent présents en surplus tels que le phosphore, le silicium et le chrome. Ainsi, la manipulation de la composition et de la température du bain est menée avec précision pour respecter les spécifications prédéterminées de l'acier. Le procédé d'affinage comprend notamment l'élimination sélective du phosphore, du soufre, de l'aluminium, du silicium, du manganèse et du carbone, l'accent étant mis sur l'élimination du carbone en raison de son importance primordiale. En outre, compte tenu de l'utilisation croissante de l'oxygène, des mesures de contrôle strictes sont instituées pour réguler la teneur finale en oxygène, ainsi qu'en

d'autres gaz tels que l'azote et l'hydrogène. Il est d'usage que la composition finale soit maintenue en dessous des niveaux spécifiés, les ajouts d'alliages étant facilités dans la poche de coulée pour élever la composition aux seuils souhaités lorsque cela est nécessaire (Rathaba, 2004).

Une fois la charge complètement fondue, la température et la composition du bain sont rapidement vérifiées. Ensuite, un échantillon représentatif de l'acier fondu est prélevé et soumis à une analyse chimique en laboratoire. Il convient de noter que la composition chimique de l'échantillon peut être rapportée rapidement dans un délai de trois minutes entre le moment de l'extraction et l'analyse, à condition qu'il n'y ait pas de retard de l'opérateur ou de dysfonctionnement de l'équipement, comme cela a été documenté (Elkoumy et al., 2019).

Une grande partie de l'élimination des éléments indésirables du bain est facilitée par des procédés d'oxydation. L'introduction d'oxygène par injection commence avant que les conditions du bain ne soient stabilisées. Par conséquent, une partie des réactions de raffinage commence avant l'intervention de l'opérateur, après l'établissement de l'analyse du bain et du contrôle de la température (Rathaba, 2004).

Les éléments excédentaires, notamment le phosphore, le soufre, le silicium, l'aluminium et le chrome, sont partiellement éliminés par leur transfert vers la phase de laitier. En particulier, les rapports de partition à l'équilibre entre les phases métal et laitier dépendent de la composition et de la température du laitier, qui jouent un rôle déterminant dans ce processus de transfert. Dans les EAFs, le laitier présente généralement une basicité plus faible que celle observée dans les procédés de convertisseur basique à oxygène. En outre, le rapport laitier/acier est généralement plus faible dans les EAFs. Par conséquent, la capacité d'élimination des impuretés dans le EAF est limitée de manière inhérente. La composition représentative d'un laitier classique est décrite dans le tableau 1-2 (Fruehan, 1998).

Tableau 1-2 Composition représentative d'un laitier classique provenant d'un EAF  
Fruehan (1998)

Composante	Source	Intervalle de composition
CaO	Chargé	40-60%
SiO <sub>2</sub>	Produit d'oxydation	5-15
FeO	Produit d'oxydation	10-30%
MgO	Chargé en tant que dolomite	3-8%
CaF <sub>2</sub>	Fluidificateur du laitier chargé	-
MnO	Produit d'oxydation	2-5%
S	Absorbé de l'acier	-
P	Produit d'oxydation	-

Le phosphore subit une oxydation pour former du P<sub>2</sub>O<sub>5</sub> et ensuite transféré dans le laitier. La capacité de phosphate du laitier est principalement influencée par la présence de composants CaO et MgO dans la matrice du laitier (Fruehan, 1998). En outre, des facteurs tels que la température, la teneur en FeO et la basicité ont un impact significatif sur la rétention du phosphore dans le laitier, avec des températures plus basses, des teneurs en FeO plus élevées et une basicité accrue favorisant la rétention du phosphore. Par conséquent, l'étape initiale de décrassage revêt une importance critique pour éliminer des quantités substantielles de phosphore, généralement réalisée dans les premières étapes de raffinage avant que les températures n'atteignent des niveaux propices à une réversion potentielle du phosphore dans le bain (Chakrabarti, 2006).

#### 1.1.4 Décrassage

Durant les étapes de fusion et d'affinage, certains constituants indésirables du bain, tels que le phosphore, subissent une oxydation, ce qui conduit à leur incorporation dans la phase du laitier. Ces composants indésirables s'accumulant dans le laitier sont éliminés via l'étape de décrassage

du four. À cette étape, le four est incliné vers l'arrière, ce qui facilite l'évacuation du laitier par la porte désignée. L'élimination du laitier atténue efficacement le risque de réversion du phosphore lorsque la température est augmentée à d'autres fins de raffinage (par exemple, la désulfuration) ou pendant l'étape de moussage du laitier (Fruehan, 1998), (Busa, 2023).

Au cours des procédures de moussage du laitier, l'injection de carbone dans le laitier facilite la réduction de l'oxyde de fer en fer métallique, générant simultanément du monoxyde de carbone, ce qui contribue au moussage du laitier. Cependant, dans les cas où un laitier à haute teneur en phosphore n'a pas été éliminé auparavant, le phénomène de réversion du phosphore peut se produire. De plus, dans le contexte des opérations de moussage du laitier, il existe un risque de débordement du laitier au-delà du niveau du seuil dans le EAF, conduisant à son déversement par la porte du laitier (Busa, 2023), (Fruehan, 1998).

### **1.1.5 Soutirage**

Le soutirage du métal en fusion d'un four est une étape critique, et toute défaillance au cours de ce processus nécessite un arrêt complet. La reprise de l'ensemble des opérations du four ne peut se faire qu'après un taraudage réussi (Kadkhodabeigi, 2011). La vitesse et la durée du taraudage (appelées taux de taraudage et temps de taraudage) sont les facteurs les plus importants à contrôler au cours de cette opération. Cependant, il est important de noter que le four n'est pas complètement vidé pendant le taraudage. Une petite quantité de métal en fusion reste toujours à l'intérieur lorsque le trou de coulée est fermé. Étant donné que les différentes conditions internes du four et les choix opérationnels influencent considérablement la vitesse et le temps de taraudage (Kadkhodabeigi et al., 2009), l'identification et la compréhension de ces facteurs sont très importantes pour les applications industrielles. La pression du cratère du four, la hauteur du métal et la perméabilité des matériaux internes sont considérés comme les principaux facteurs physiques affectant le débit (Kadkhodabeigi et al., 2011).

## 1.2 Mécanisme du procédé de déphosphoration

Le phénomène de déphosphoration peut être défini en deux parties (Yang et al., 2016). Tout d'abord, le phosphore dans les fondus à base de fer est oxydé par  $Fe_tO$  pour générer du  $P_2O_5$  via la réaction suivante, Equation. (1-1) :



Ensuite,  $CaO$  stabilise le phosphore extrait ( $P_2O_5$ ) dans les laitiers à base de  $CaO$ , ce qui entraîne la formation de phosphate ( $3CaO \cdot P_2O_5$ ) via la réaction ci-dessous, Eq. (1-2) :



La réaction de déphosphoration peut également être représentée sous sa forme ionique, Eq. (1-3) (Yang et al., 2016) :



Où  $[P]$  et  $[O]$  sont le phosphore et l'oxygène, respectivement, et  $O^{2-}$  et  $PO_4^{3-}$  représentent l'ion oxyde et le phosphate, respectivement.

Deux concepts, le coefficient de partition du phosphore ( $L_p$ ) et la capacité de phosphate ( $C_{PO_4^{3-}}$ ) ont été développés pour quantifier le procédé de déphosphoration. Ces concepts sont décrits ci-dessous (Drain et al., 2018).

Le paramètre  $L_p$  peut être décrit comme suit :

$$L_p = \frac{(\% P)}{[\% P]} \quad (1-4)$$

Où  $(\%P)$  et  $[\%P]$  représentent les concentrations de phosphore dans le laitier et dans l'acier, respectivement. Le paramètre  $L_p$  varie entre 5,0 et 15,0. En général, la teneur en phosphore est réduite d'environ 20 à 50 % au cours du traitement dans le EAF. Cependant, étant donné la

faible teneur en phosphore de la ferraille par rapport au métal chaud (produit à partir du traitement du minerai de fer dans le haut-fourneau), ce degré d'élimination est considéré comme satisfaisant (Fruehan, 1998).

Le paramètre  $L_p$  entre le laitier et l'acier liquide est couramment utilisée pour évaluer la capacité de déphosphoration du laitier en raison de sa facilité de mesure aussi bien dans les études de laboratoire que dans la production commerciale (Yang et al., 2016). Néanmoins, il est impératif de noter que ce rapport ne peut être utilisé comme mesure comparative entre différentes compositions de laitier que si la pression partielle d'oxygène ( $P_{O_2}$ ) est équivalente dans les systèmes comparés (Nassaralla & Fruehan, 1992).

Wagner a proposé le concept de capacité de phosphate ( $C_{PO_4^{3-}}$ ) pour décrire le potentiel de déphosphoration du laitier en utilisant une réaction d'équilibre laitier-gaz. La  $C_{PO_4^{3-}}$  intègre l'influence de la  $P_{O_2}$ , ce qui en fait une mesure essentielle pour l'évaluation comparative de divers systèmes de laitier. La réaction laitier-gaz et la  $C_{PO_4^{3-}}$  sont présentées par les équations (1-5) et (1-6), respectivement : (Nassaralla & Fruehan, 1992)



$$C_{PO_4^{3-}} = \frac{(\%PO_4^{3-})}{P_{P_2}^{1/2}P_{O_2}^{5/4}} = \frac{K_{(2)}(a_{O^{2-}})^{3/2}}{\gamma_{PO_4^{3-}}^\circ} \quad (1-6)$$

Où  $\%PO_4^{3-}$  est le pourcentage en poids de  $PO_4^{3-}$  dissous dans le laitier.  $P_{O_2}$  est la pression partielle d'oxygène à l'interface laitier-gaz, et  $P_{P_2}$  est la pression partielle de phosphore en équilibre. Dans les cas où la concentration de  $PO_4^{3-}$  est notablement faible, il est admissible de remplacer l'activité par les concentrations correspondantes de  $(\%PO_4^{3-})$  et le paramètre critique  $\gamma_{PO_4^{3-}}^\circ$ , représentant le coefficient d'activité à la concentration de dilution infinie.  $K_{(2)}$  est la constante d'équilibre de la réaction (5).

La  $C_{PO_4^{3-}}$  présente une corrélation directe avec  $L_p$  comme le montre l'équation (1-7) :  
(Nassaralla & Fruehan, 1992)

$$C_{PO_4^{3-}} = \frac{L_p k_p}{f_p P_{O_2}^{5/4}} \quad (1-7)$$

Dans laquelle  $k_p$  correspond à la constante d'équilibre de la dissolution du phosphore dans le fer ( $\frac{1}{2}P_{2(g)} = [P]$ ) (Nassaralla & Fruehan, 1992).

L'efficacité de la déphosphoration dans le laitier de l'EAF est influencée par l'activité de  $FeO$  et de  $CaO$  dans le laitier. Le composant  $CaO$  fournit des ions d'oxygène libres ( $O^{2-}$ ) et  $FeO$  augmente la  $P_{O_2}$  dans le laitier. De nombreuses études (Hamano & Tsukihashi, 2005), (Lee & Fruehan, 2005), (Li et al., 2005) ont montré que la présence de  $CaO$  et de  $FeO$  dans le laitier renforce la capacité de déphosphoration. Cependant, un excès de l'un ou l'autre composant entraîne une diminution de l'efficacité de la déphosphoration. Par exemple, un excès de  $FeO$  dans le laitier entraîne une dilution de la concentration en  $CaO$  et une réduction de la  $C_{PO_4^{3-}}$  du laitier (Basu et al., 2007), (Oh & Park, 2021).

### 1.3 Facteurs influençant l'efficacité de la déphosphoration

De nombreux facteurs influencent l'efficacité de la déphosphoration dans le EAF tout au long du processus de fusion. Parmi les paramètres majeurs qui ont un impact considérable sur l'élimination du phosphore figurent la composition chimique du laitier, la température, la basicité et la teneur en  $FeO$  (Liu et al., 2021).

#### 1.3.1 Basicité

La basicité du laitier est généralement représentée par le rapport molaire des oxydes basiques (comme  $CaO$ ) aux oxydes acides (comme  $SiO_2$ ). La basicité du laitier joue un rôle crucial dans la sidérurgie, car elle influence les propriétés du laitier telles que la capacité à absorber les impuretés telles que le phosphore, la viscosité et le point de fusion (Vieira et al., 2016). La



Figure 1-2 montre la relation entre la capacité de déphosphoration d'un laitier de EAF et sa basicité.

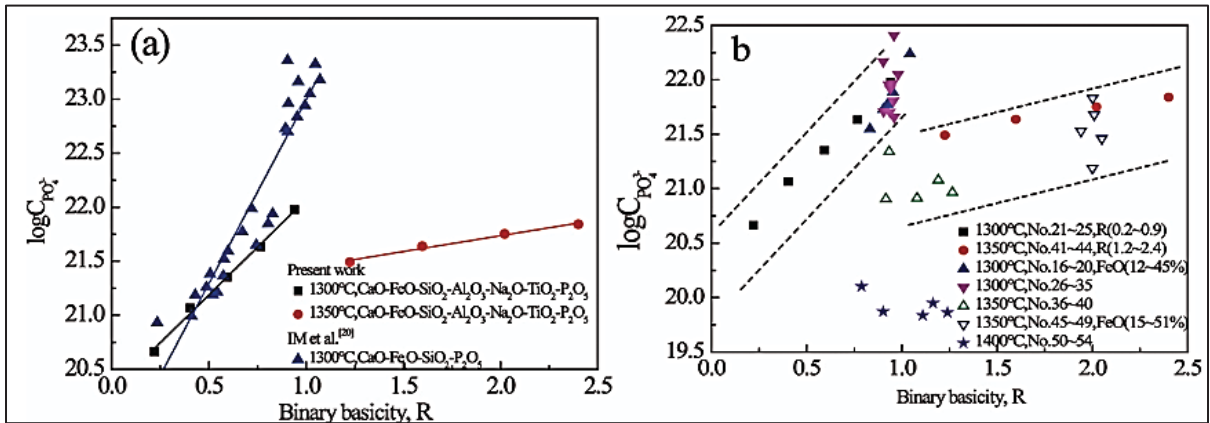


Figure 1-2 Capacité de phosphate par rapport à la basicité d'un laitier de EAF  
Tirée de Li et al. (2019)

Parfois, la basicité optique ( $\Lambda$ ) est utilisée à la place de la basicité. Alors que la basicité se concentre sur la composition chimique et les rapports molaires des oxydes dans un laitier, la basicité optique prend en compte les propriétés optiques et la structure électronique des composants oxydes pour évaluer leur basicité dans le système de laitier (BERGMAN, 1988).

Il convient toutefois de noter que les basicités optiques calculées indiquées dans le tableau 3-1 sont basées sur les électronégativités de Pauling. La basicité optique ( $\Lambda$ ) d'un laitier, comprenant divers composants d'oxyde, peut être définie à l'aide de l'équation (1-8) :

$$\Lambda = \sum \frac{m_i x_i}{\sum m_i x_i} \Lambda_i \quad (1-8)$$

Dans laquelle  $m_i$  représente la quantité d'atomes d'oxygène dans l'oxyde  $i$ , et  $\Lambda_i$  désigne la basicité optique théorique de l'oxyde respectif, comme détaillé dans le tableau 1-3 (Ray & Pal, 2004).

Tableau 1-3 La basicité optique des oxydes purs  
BERGMAN (1988)

Oxyde	CaO	MgO	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	MnO	FeO	SiO <sub>2</sub>	P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>
Basicité optique	1	0,78	0,605	0,59	0,51	0,48	0,4

La relation entre la  $C_{PO_4^{3-}}$  et la  $\Lambda$  du laitier est donnée dans l'équation (1-9) : (Wang et al., 2023), (BERGMAN, 1988)

$$\text{Log } C_p = 21,55 \Lambda + 32,912/T - 27,90 \quad (1-9)$$

La figure 3-1 illustre la relation entre la capacité de déphosphoration d'un laitier de EAF et sa basicité optique, à deux températures différentes : a) 1550 °C et b) 1650 °C.

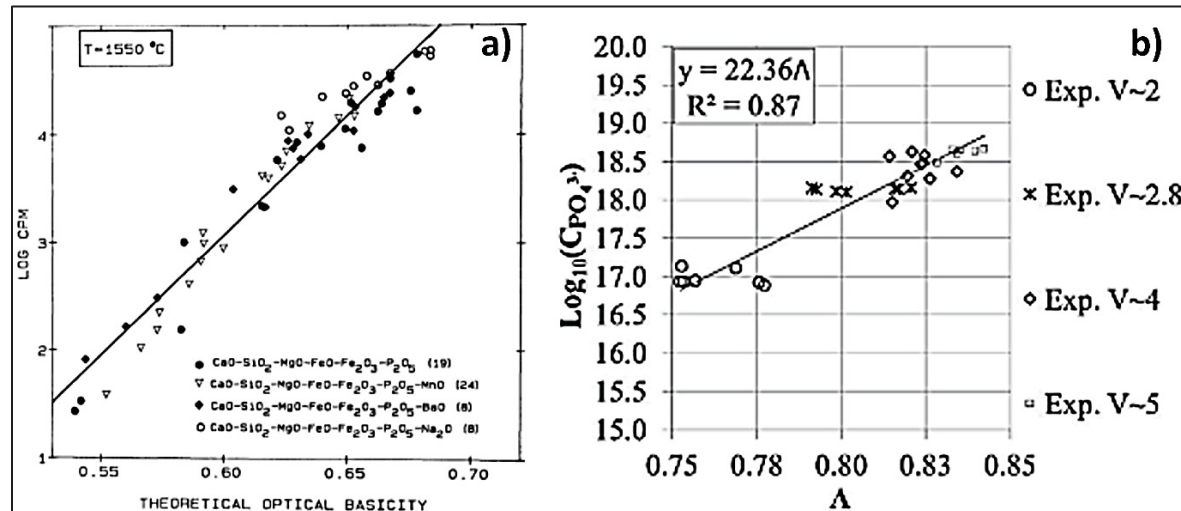


Figure 1-3 Relation entre la capacité phosphatée du laitier EAF et sa basicité optique a) à 1550°C

Tirée de BERGMAN (1988) et b) à 1650°C Tirée de Drain et al. (2018)

L'augmentation de la nature basique du laitier, obtenue grâce à des concentrations plus élevées en oxydes basiques, notamment le CaO, est reconnue pour améliorer l'efficacité de la déphosphoration en raison de la diminution de la stabilité du  $\text{P}_2\text{O}_5$  dans le laitier et de sa

stabilisation sous forme de  $4\text{CaO} \cdot \text{P}_2\text{O}_5$  aux températures de fabrication de l'acier. Cependant, des augmentations excessives de la basicité du laitier peuvent compromettre cette efficacité. Cet effet négatif provient de l'élévation consécutive du point de fusion du laitier induite par une basicité excessivement élevée, ce qui entrave la fusion complète des particules de CaO dans la phase du laitier. Par conséquent, l'augmentation résultante de la viscosité du laitier réduit le coefficient de diffusion du phosphore dans le laitier, retardant ainsi la réaction de déphosphoration à l'interface entre l'acier liquide et le laitier, entraînant une diminution de l'efficacité de la déphosphoration (Dong et al., 2013).

### 1.3.2 Teneur en $\text{Fe}_t\text{O}$

L'efficacité de la déphosphoration dans les laitiers à base de CaO est liée à la présence d'oxyde de fer (II) ( $\text{Fe}_t\text{O}$ ), qui agit comme un oxyde acide ou basique en fonction de la composition du laitier et du potentiel d'oxygène dominant. Lee et Fruehan (Lee & Fruehan, 2005) ont observé une augmentation du Lp entre le laitier  $\text{CaO-SiO}_2\text{-MgO-FeO}$  avec une teneur croissante en FeO (allant de 3 à 10 % en masse) et le fer liquide saturé en carbone et à des températures allant de 1823 K à 1853 K (1550 °C à 1580 °C) sous une atmosphère d'Ar. Hamano et Tsukihashi (Hamano & Tsukihashi, 2005) ont constaté que le Lp entre les laitiers  $\text{CaO-SiO}_2\text{-Fe}_t\text{O-MgO}_{\text{sat}}$  ( $-\text{B}_2\text{O}_3$ ) et le Fe fondu contenant 0,005 pct de masse de P présentait un point maximum à une teneur en  $\text{Fe}_t\text{O}$  d'environ 45 pct de masse dans une large gamme de concentrations de  $\text{Fe}_t\text{O}$  ( $\text{FeO} + \text{Fe}_2\text{O}_3 = 20$  à 70 pct de masse) à 1873 K (1600 °C) sous une atmosphère de CO- $\text{CO}_2$  et d'Ar. Une tendance similaire a été confirmée par le même groupe de recherche (Li et al., 2005), dans lequel la capacité de phosphatation des laitiers  $\text{CaO-SiO}_2\text{-Fe}_t\text{O-MgO}_{\text{sat}}$  ( $-\text{Al}_2\text{O}_3, \text{Na}_2\text{O}$ ), sous une atmosphère de CO- $\text{CO}_2$ , a montré une augmentation avec la teneur en FeO jusqu'à 40 pct en masse à des températures de 1823 K et 1873 K (1550 °C et 1600 °C), suivie d'une diminution après avoir dépassé une teneur en FeO de 40 pct en masse. Cette diminution de l'efficacité de la déphosphoration dans les laitiers à base de CaO avec une teneur en FeO a été attribuée à la dilution de la teneur en CaO, qui joue un rôle central dans la déphosphoration, entraînant une réduction de l'activité du CaO. Il est donc impératif de

garantir une teneur optimale en  $\text{Fe}_t\text{O}$  dans les laitiers à base de  $\text{CaO}$  pour une déphosphoration efficace (Heo & Park, 2018).

### 1.3.3 Température

La température a une double influence sur la performance de la réaction de déphosphoration. D'une part, les températures élevées peuvent entraver le processus de déphosphoration en raison de sa nature exothermique prononcée. D'autre part, des températures plus élevées facilitent la fusion de la chaux, améliorant ainsi la basicité du laitier. Ceci, à son tour, favorise la distribution du phosphore dans la phase du laitier et améliore la valeur de  $L_p$ , ce qui améliore l'efficacité de la déphosphoration. De plus, les températures élevées augmentent la cinétique du processus d'élimination du phosphore (Dong et al., 2013).

Figure 1-4 illustre l'influence de la température sur trois indicateurs clés de la déphosphoration :  $\lg L_p$ ,  $\lg \gamma_{P_2O_5}$  et  $\lg C_p$  dans un convertisseur d'oxygène. Pour étudier la dépendance de la déphosphoration par rapport à la température, la composition du laitier ( $\text{CaO-Fe}_t\text{O-SiO}_2\text{-MnO-MgO}$ ) est restée constante tandis que les températures variaient entre  $1200^\circ\text{C}$  et  $1600^\circ\text{C}$ . En outre, pour discerner l'impact de la température sur la déphosphoration à différents niveaux de basicité ( $R$ ), la basicité a été maintenue à des valeurs fixes de 1, 2 et 3 (Wang et al., 2023).

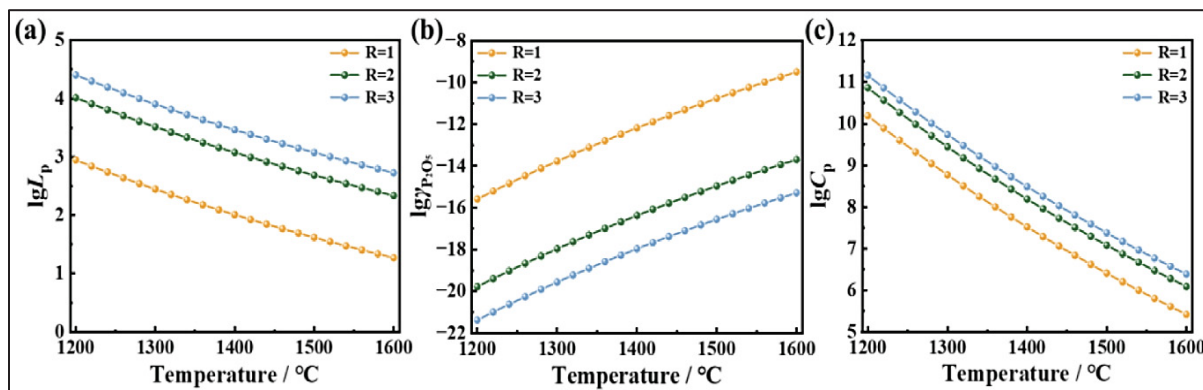


Figure 1-4 L'impact de la température sur (a)  $\lg L_p$ , (b)  $\lg \gamma_{P_2O_5}$ , (c)  $\lg C_p$  dans le laitier, Tirée de Wang et al. (2023)

## 1.4 Synthèse

L'efficacité de la déphosphoration dans un four à arc électrique dépend de plusieurs facteurs clés, notamment la composition chimique du laitier (c'est-à-dire la basicité et la teneur en oxydes de fer) ainsi que la température. Ces facteurs sont complexes et interconnectés, nécessitant une gestion minutieuse pour optimiser le procédé et garantir une qualité élevée du produit final. Les progrès récents dans la conception des EAF et les techniques de contrôle du procédé continuent d'améliorer l'efficacité de la déphosphoration. Cela se traduit par une production accrue d'acier de haute qualité avec des niveaux réduits de phosphore. Toutefois, la littérature scientifique ne semble pas avoir exploré de manière détaillée la déphosphoration dans les EAF fonctionnant exclusivement avec de la ferraille, un procédé entièrement recyclable. Bien que la thermodynamique de la déphosphoration soit cohérente entre les différents procédés, la cinétique peut varier de manière significative.

## 1.5 L'apprentissage automatique et ses applications

L'apprentissage automatique a prouvé son pouvoir prédictif dans une variété de contextes industriels à grande échelle, tels que l'industrie sidérurgique, bio-informatique, la cybersécurité ... avec des succès notables documentés dans plusieurs études (Saxen et al., 2012), (Zhai & Chen, 2023). Shi et al. présentent une étude sur l'application des méthodologies de la science des données, en particulier de l'apprentissage automatique, dans l'industrie sidérurgique, avec un accent particulier sur les opérations dans les hauts fourneaux. La publication fournit une analyse détaillée de nombreux modèles basés sur l'IA utilisés pour la modélisation prédictive dans les hauts fourneaux. Elle offre une revue complète de diverses questions allant de la gestion des données aux stratégies de modélisation dans ce domaine. (Calix et al., 2023).

Conformément au théorème "No Free Lunch", il est reconnu qu'il n'existe pas d'algorithme d'apprentissage automatique universellement optimal applicable a priori à tous les domaines de problèmes. Par conséquent, dans le cadre d'une étude, une série de modèles d'apprentissage automatique doivent être utilisés pour tenir compte de la diversité et de la spécificité inhérentes aux problèmes étudiés (Ruiz et al., 2021).

L'apprentissage automatique englobe deux principaux types de modèles : la classification, qui traite les réponses appartenant à des classes discrètes, et la régression, qui traite les variables de réponse continues. Sélectionner un modèle d'apprentissage automatique approprié peut être complexe en raison de la multitude d'options disponibles, chacune offrant des méthodologies d'apprentissage distinctes. Ce processus nécessite une évaluation approfondie de divers compromis, notamment la vitesse, la précision, l'interprétabilité et la complexité du modèle. Souvent, il implique une expérimentation itérative et un raffinement afin de déterminer le modèle le plus adapté à un problème donné (mathworks, 2024).

### **1.5.1 Méthodes d'apprentissage automatique**

Différents modèles d'apprentissage automatique ont été développés et sont expliqués ci-dessous. Le choix de ces modèles est basé sur le type et la complexité du problème, en commençant par le modèle le plus simple qui traite les problèmes linéaires, jusqu'à des modèles plus complexes tels que les réseaux de neurones. Ce sont les modèles les plus connus. Ils vont de la régression linéaire aux modèles non linéaires tels que la forêt aléatoire, les machines à vecteurs de support, les réseaux neuronaux artificiels et les réseaux de neurones à rétropropagation. Le réseau de neurones récurrents avec architecture LSTM (Long Short-Term Memory) est un autre modèle puissant qui appartient à la famille des réseaux de neurones mentionnée dans l'introduction. Il est conçu pour traiter des données séquentielles ou des séries temporelles. Ce dernier n'a pas été mis en œuvre dans cette étude en raison des limitations de temps.

### **1.5.2 Régression linéaire (LR)**

Le modèle linéaire a servi d'outil fondamental dans l'analyse statistique au cours des trois dernières décennies et continue d'être d'une importance capitale (Montgomery et al., 2021). La régression linéaire, une technique de premier plan dans le domaine de la modélisation linéaire, facilite l'examen de la relation entre une variable de réponse scalaire et une ou plusieurs variables explicatives, également appelées variables dépendantes et indépendantes, respectivement. Dans le contexte de la régression linéaire, ces relations sont encapsulées dans

des fonctions prédictives linéaires, les paramètres du modèle étant estimés à partir des données disponibles. Grâce à l'utilisation de la régression linéaire, la détermination de la sortie unique du modèle, désignée sous le nom de  $\hat{y}_j$ , à travers l'équation (1-10) (Tomažič et al., 2022) :

$$\hat{y}_j = x_j^T \hat{\beta}^T \quad (1-10)$$

Dans ce cas,  $x_j^T = [x_1, x_2, \dots, x_p]_j$  représente un vecteur de régression, où  $j = 1, \dots, m$  ;  $m$  étant le nombre total d'échantillons de test et  $p$  indiquant le nombre total de variables indépendantes. En conséquence,  $\hat{\beta}^T = [\hat{\beta}_1, \hat{\beta}_2, \dots, \hat{\beta}_p]$  désigne le vecteur des coefficients linéaires. Il est d'usage d'inclure la variable constante 1 dans le vecteur  $x_j^T$  et d'incorporer  $\hat{\beta}_0$  dans le vecteur de coefficients  $\hat{\beta}$ , exprimant ainsi le modèle linéaire sous forme de vecteur comme un produit intérieur, l'équation (1-11) :

$$\hat{y}_j = \hat{\beta}_0 + \sum_{i=1}^p x_i \hat{\beta}_i \quad (1-11)$$

Le terme  $\hat{\beta}_0$  signifie l'intercept, souvent appelé biais dans l'apprentissage automatique (Freedman, 2009).

### 1.5.3 Forêt aléatoire (RF)

La Forêt Aléatoire (RF) est une méthode d'apprentissage en ensemble introduite par Breiman en 2001, fondée sur les principes des arbres de décision. RF fonctionne en construisant plusieurs arbres de décision, chacun formé sur un sous-ensemble aléatoire des données d'entraînement et un sous-ensemble aléatoire des caractéristiques. Les prédictions des arbres individuels sont ensuite agrégées pour faire une prédiction finale. RF introduit de l'aléatoire dans le processus de prise de décision en bootstrapant les données d'entraînement et en sélectionnant aléatoirement des sous-ensembles de caractéristiques pour chaque arbre. Cette variabilité entre les arbres réduit la corrélation et favorise la diversité, aboutissant à un modèle plus robuste et précis. RF est connue pour sa grande précision prédictive, même avec des

ensembles de données volumineux et complexes, et sa capacité à manipuler une large gamme de variables d'entrée sans surajustement (Biau, 2012). La Figure 1-5 montre une structure simple d'un modèle de RF.

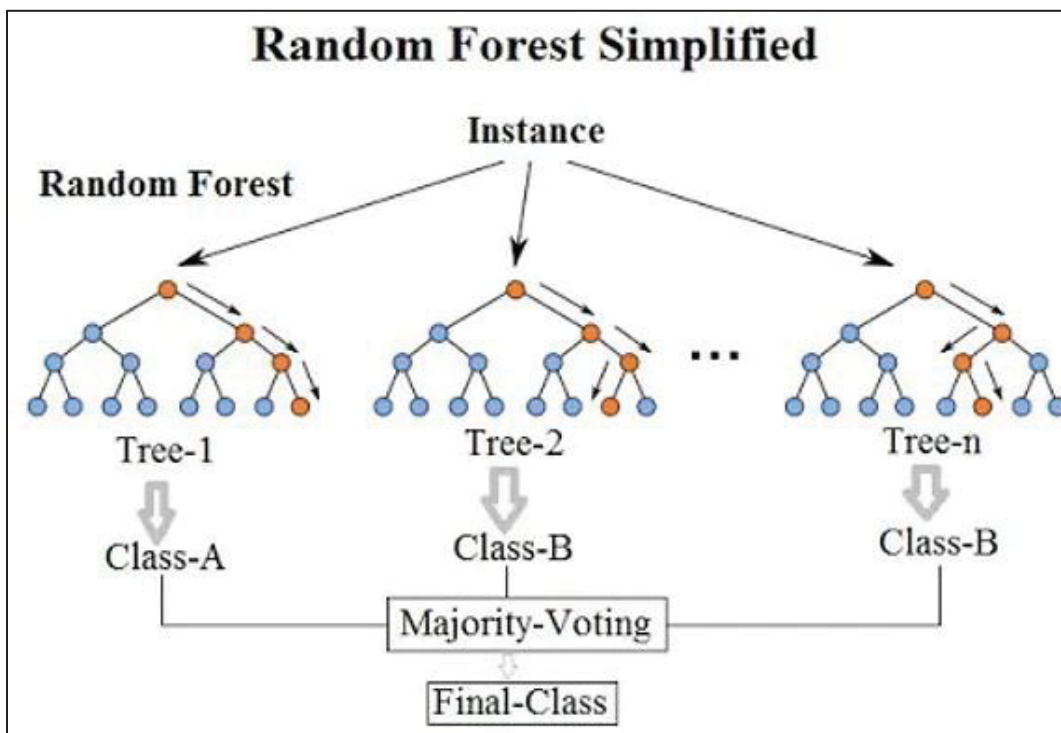


Figure 1-5 Structure simple d'un modèle de forêt aléatoire,  
Tirée de Koehrsen (2017)

L'Arbre de Classification et de Régression (CART) est également un algorithme basé sur les arbres de décision introduit par Breiman en 1984. CART fonctionne en partitionnant de manière récursive l'ensemble de données en sous-ensembles basés sur les valeurs des variables d'entrée, ce qui conduit finalement à la création d'une structure d'arbre binaire. À chaque nœud, CART prend des décisions pour diviser les données, visant à maximiser la pureté (pour les tâches de classification) ou à minimiser l'erreur (pour les tâches de régression) (Breiman, 2017). La structure d'un modèle CART est illustrée par la figure 1-6.



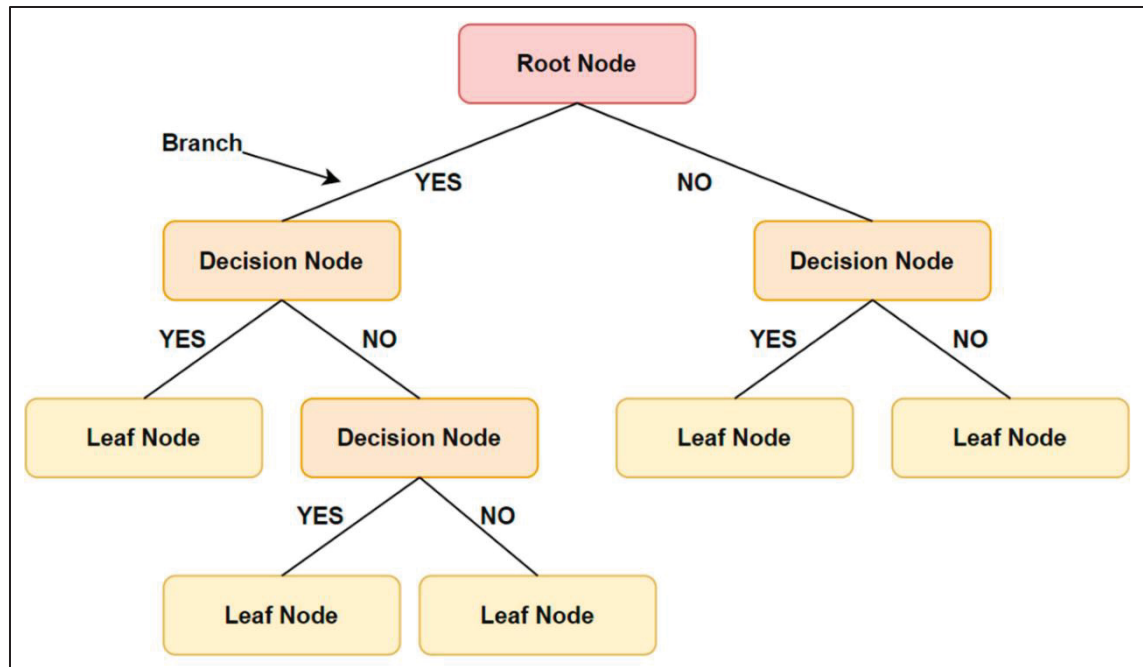


Figure 1-6 Structure simple d'un modèle d'arbre de classification et de régression basé sur l'arbre de décision,  
Tirée de Jain et al. (2023)

Tant CART que RF sont des algorithmes basés sur les arbres de décision utilisés pour les tâches de classification et de régression. CART est plus simple et plus interprétable en raison de sa nature à un seul arbre, ce qui facilite la compréhension des règles de décision sous-jacentes. Cependant, RF tend à surpasser CART en termes de précision prédictive, surtout pour des ensembles de données complexes, grâce à son approche en ensemble. Alors que CART peut souffrir de surajustement, RF atténue ce problème en agrégeant les prédictions de plusieurs arbres, aboutissant à un modèle plus généralisé. De plus, RF est plus coûteux en termes de calcul que CART en raison de l'entraînement de plusieurs arbres, mais il offre des performances et une robustesse supérieure, notamment pour les ensembles de données volumineux et les espaces de caractéristiques à haute dimensionnalité. Dans l'ensemble, le choix entre CART et RF dépend des besoins spécifiques de la tâche, CART étant privilégié pour sa simplicité et son interprétabilité, et RF étant préféré pour sa précision prédictive et sa robustesse (Laha et al., 2015).

#### 1.5.4 Machine à vecteur de support (SVM)

Les machines à vecteurs de support (SVM), une approche d'apprentissage supervisé applicable aux tâches de classification et de régression, ont été largement adoptées (Sharifzadeh et al., 2019), (Raj & Ananthi, 2019), (Rostamzadeh-Renani et al., 2022). L'une des principales applications des SVM consiste à organiser les points de données, un plan de séparation étant identifié pour séparer dans l'espace les points les plus éloignés les uns des autres. Ce plan de séparation sert de frontière entre les points de données, deux plans étant positionnés à équidistance du plan de séparation et servant de délimiteurs pour la frontière. L'objectif est de maximiser la marge entre ces plans limites, qui sont orthogonaux au plan central, afin d'optimiser le processus de classification ou de régression. Les points situés sur ces plans limites sont appelés vecteurs de support (Laha et al., 2015).

Les SVM peuvent être mis en œuvre à l'aide de méthodologies linéaires et non linéaires pour les tâches de classification et de régression. Dans la variante linéaire des SVM, le plan de séparation suit une équation linéaire, tandis que les SVM non linéaires utilisent des transformations non linéaires, telles que des polynômes gaussiens, pour délimiter les frontières entre les points. Cela facilite l'obtention des résultats souhaités en matière de classification ou de régression (Rostamzadeh-Renani et al., 2023).

Le noyau de fonction de base radiale (RBF) est un noyau important et largement utilisé dans le cadre de la machine à vecteur de support (SVM). Il sert à transformer les données dans un espace de dimension supérieure, les rendant ainsi linéairement séparables et facilitant l'identification d'un hyperplan qui sépare efficacement les données. Le noyau RBF a le statut par défaut dans l'algorithme de classification SVM implémenté dans la bibliothèque sklearn (Thurnhofer-Hemsi et al., 2020). Il est caractérisé par un hyperparamètre, gamma, dont la manipulation permet d'affiner le comportement du noyau. Compte tenu de sa polyvalence et de son efficacité, le noyau RBF trouve de nombreuses applications dans les tâches de classification par machine à vecteur de support. La figure 1-7 présente un schéma de fonctionnement du noyau RBF (Wang et al., 2004).

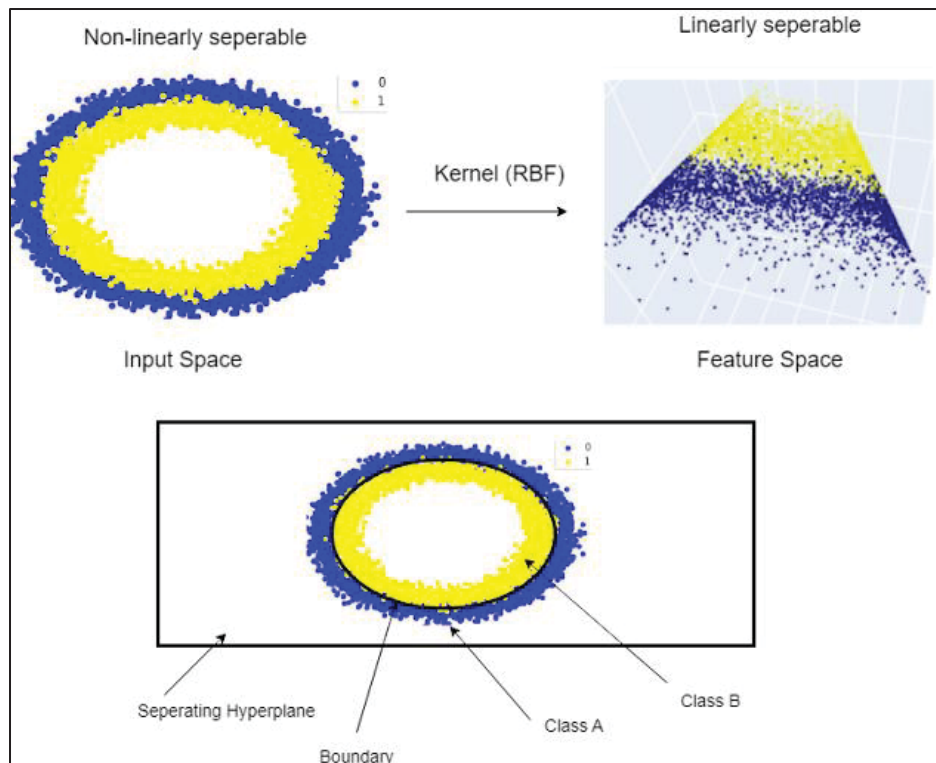


Figure 1-7 Schéma de fonctionnement du noyau RBF,  
Tirée de Sidharth (2022)

### 1.5.5 Réseaux de neurones artificiels (ANN)

Les réseaux neuronaux artificiels (ANN), une famille d'algorithmes d'apprentissage automatique, peuvent décrire la non-linéarité en transformant les entrées en sorties à travers des connexions entre les neurones dans une séquence de couches. Le neurone est l'élément le plus simple d'un modèle ANN (Zou et al., 2022). La Figure 1-8 montre la structure globale d'un modèle de réseau de neurones artificiels à titre d'exemple.

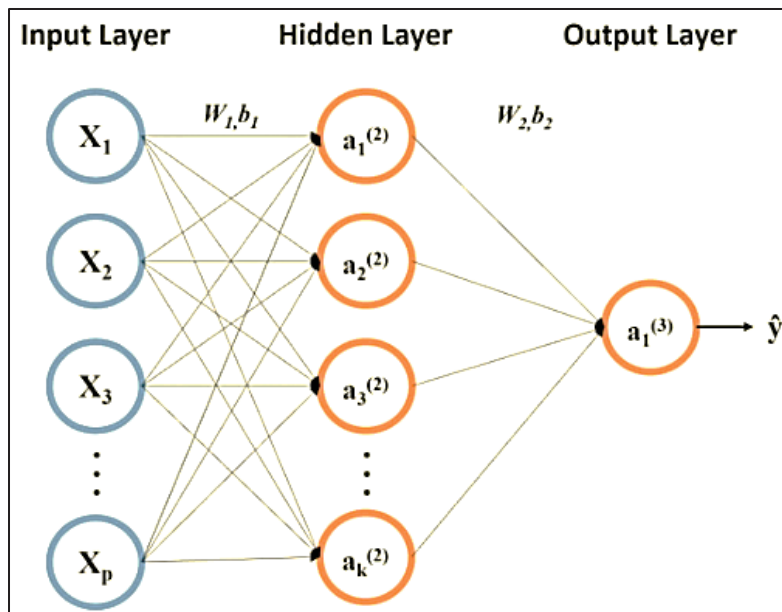


Figure 1-8 Structure classique d'un modèle de réseau de neurones artificiels ANN  
Tirée de Wang et al. (2022)

Le ANN utilisé est un réseau de type feedforward multicouche supervisé, formé à l'aide des algorithmes de rétropropagation à gradient conjugué échelonné (Liang & Bose, 1996). La connexion entre les nœuds d'entrée et de sortie est facilitée par des unités cachées. Le processus de calcul peut être exprimé à l'aide de l'équation (1-12) :

$$h_j = f\left(\sum W_{ji} X_i + \theta_{ji}\right) \quad (1-12)$$

Chaque variable d'entrée, désignée par  $X_i$ , est multipliée par les poids correspondants  $W_{ji}$  assignés à un nœud caché  $h_j$ . Les produits résultants sont ensuite additionnés, en incorporant une valeur de biais  $\theta_{ji}$ , et soumis à une fonction d'activation appropriée ( $f$ ) (Mohanty et al., 2011).

Le processus est exécuté de manière itérative pour différentes quantités d'unités cachées afin de déterminer une structure de réseau adaptée. Les couches cachées jouent un rôle dans les nœuds de sortie résultants, désignés par  $Y$ , comme le montre l'équation (1-13) :

$$Y = (\sum w_j h_j + \theta') \quad (1-13)$$

Avec  $w_j$  et  $\theta'$  sont les nouveaux ensembles de poids et de valeurs de biais. Au cours de l'acquisition des connaissances, l'erreur entre la production estimée ou calculée et la production réelle est diffusée rétroactivement pour rectifier l'ensemble des paramètres de pondération et de biais (Mohanty et al., 2011).

La technique des réseaux de neurones est généralement employée en deux étapes distinctes, à savoir la phase d'entraînement et la phase de validation. Pour garantir un niveau de précision plus élevé, la structure de l'architecture du réseau neuronal est prédéterminée, notamment en ce qui concerne le nombre de couches cachées et le nombre de neurones (nœuds) dans chaque couche.

Ensuite, les fonctions d'activation doivent être sélectionnées, et les paramètres inconnus, y compris les poids et les biais, doivent être estimés. De nombreux algorithmes sont disponibles pour déterminer les paramètres du réseau. Ensuite, les paramètres liés à l'algorithme d'apprentissage, tels que le seuil d'erreur souhaité et la limite supérieure du nombre d'époques (itérations), entre autres, sont définis. À cette étape, l'algorithme d'apprentissage est lancé (Bilel & Taoufik, 2022).

En général, trois catégories de données (entrées) sont utilisées : l'ensemble d'entraînement, l'ensemble de validation et l'ensemble de test. L'ensemble d'entraînement est une collection de valeurs qui contiennent des informations pertinentes concernant la fonction cible pour l'entraînement du réseau. L'ensemble de validation est spécifiquement désigné pour la technique d'arrêt précoce. Tout au long de la phase d'entraînement, l'erreur de validation est soigneusement surveillée afin d'éviter le surapprentissage du réseau. De manière conventionnelle, l'ensemble de test est uniquement utilisé pour évaluer les performances du réseau après l'entraînement. Par convention, 60 % des données sont allouées à l'entraînement du réseau, tandis que les 40 % restants sont également divisés pour valider et tester le réseau sur des entrées non apprises (Bilel & Taoufik, 2022; Hamdi et al., 2016).

### 1.5.6 Réseau de neurones de rétropropagation

Le réseau neuronal à rétropropagation (BPNN) est un exemple classique de réseau de neurones multicouche à propagation avant, capable d'approximer des fonctions continues et des correspondances non linéaires. Sa configuration architecturale comprend des couches d'entrée, cachées et de sortie. Chaque neurone des couches adjacentes est entièrement interconnecté, tandis que les neurones d'une même couche ne sont pas connectés (Zou et al., 2022). Le principe fondamental qui sous-tend les réseaux de neurones BP implique l'étude et l'ajustement des poids de connexion et des seuils entre les neurones sur la base des relations entrée-sortie des échantillons fournis, ce qui facilite l'approximation par le réseau de la relation de mappage entre les variables d'entrée et de sortie. Le processus de formation implique la propagation de l'information vers l'avant à travers le réseau, suivie d'une rétropropagation de l'erreur. Le modèle BP démontre sa capacité à traiter des problèmes non linéaires complexes, à faire preuve d'une solide tolérance aux pannes et à disposer d'une forte mémoire associative (He & Zhang, 2018). La figure 1-8 illustre la structure typique d'un réseau de neurones à rétropropagation.

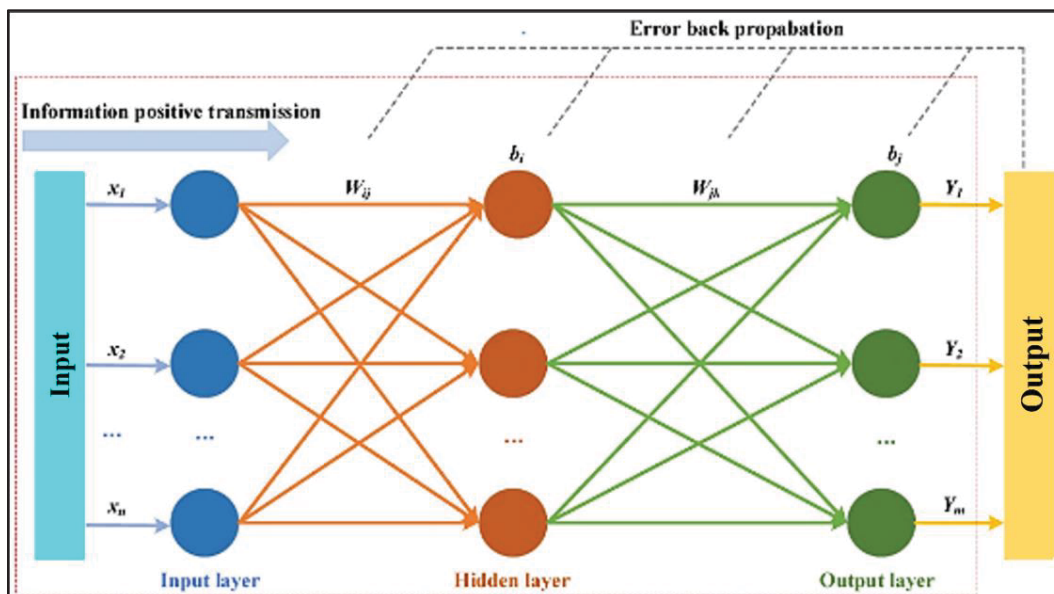


Figure 1-9 Structure générale d'un modèle de réseau de neurones à rétropropagation,  
Tirée de Zou et al. (2022)

## 1.6 Travaux antérieurs sur l'application de l'apprentissage automatique dans l'industrie sidérurgique

L'application des réseaux de neurones aux procédés sidérurgiques est très récente et de ce fait peu de publications sont disponibles dans la littérature scientifique. Zou et al. (2022) ont développé un modèle de réseau de neurones BP pour étudier la relation entre les données de processus et la teneur finale en phosphore (P) de l'acier dans le EAF. Sur la base d'une analyse théorique, les facteurs influents présentant des corrélations importantes ont été sélectionnés. Le modèle de prédiction du contenu en P, couplé aux données de procédé et à la teneur finale en P, est établi. Comparés aux données de production pratiques, les résultats indiquent que le taux de réussite du modèle optimisé est de 87,78% et de 75,56% lorsque les erreurs de prédiction se situent dans  $\pm 0,004$  et  $\pm 0,003$  de la teneur en phosphore.

He et al. (2018) ont proposé un modèle prédictif pour la teneur en phosphore à la fin du procédé dans le convertisseur basique à oxygène (CBO), basé sur l'ACP et le réseau de neurones BP. L'ACP est utilisée pour réduire la dimensionnalité des facteurs ayant un impact sur la teneur en phosphore à la fin du procédé et pour éliminer la corrélation entre ces facteurs. Ensuite, les composantes principales obtenues sont utilisées comme vecteurs d'entrée dans le réseau neuronal BP. De plus, les auteurs ont mené plusieurs essais pour comparer le modèle de régression linéaire multiple (MLR), le modèle de réseaux de neurones à rétropropagation assistée par l'analyse en composantes principales (PCA) et le modèle de réseau neuronal BP, tous basés sur des données de production réelles. Enfin, un système de prédiction en ligne de la teneur en phosphore à la fin du procédé dans le CBO a été développé et mis en œuvre, en utilisant le modèle de réseau neuronal PCA-BP dans un procédé de production réel. Les coefficients de corrélation entre les valeurs prédites et réelles des différents modèles sont les suivants : 0,7911 pour le modèle PCA-PB, alors que les modèles MLR et BP sont respectivement de 0,5308 et 0,6199.

Vaso et al. (2022) ont utilisé diverses techniques d'apprentissage automatique (par exemple, réseau de neurones artificiels ANN, XGBoost, RF, SVM) et de traitement des données pour évaluer les paramètres d'efficacité énergétique du procédé du EAF. L'ensemble de données a

été collecté sur cinq ans dans une aciérie, comprenant 42 caractéristiques telles que (temp tap-to-tap (Durée du procédé), l'injection d'oxygène, types de la ferraille, composition chimique de la charge) Ces données ont été divisées en ensembles d'entraînement et de test, utilisés respectivement pour l'entraînement et l'évaluation. Il a été constaté que les modèles sélectionnés présentaient des performances similaires, mais que les ANN faisaient preuve d'une plus grande flexibilité lorsqu'il s'agissait de modifier la cible. Les modèles offrent une très grande capacité de prédiction, avec un coefficient de détermination  $R^2$  de 0,901 pour le modèle SVM-RBF et de 0,88 pour le modèle RF, et de 0,894 et 0,897 pour les modèles XGBoost et ANN, respectivement.

Son et al. (2021) ont développé un modèle de capteur flexible utilisant des réseaux de mémoire à court et long terme (LSTM) basés sur l'apprentissage automatique pour corrélérer les variables de procédé influentes avec la hauteur de moussage du laitier. Les performances du modèle développé ont été évaluées à l'aide d'un ensemble de données réelles sur la fabrication de l'acier, avec des mesures telles que l'erreur quadratique moyenne (RMSE), le coefficient de détermination ( $R^2$ ) et le coefficient de corrélation. Pour la nuance d'acier au carbone SS400, les valeurs de ces paramètres étaient respectivement de 42,3, 0,905 et 0,963. De plus, les chercheurs ont évalué l'applicabilité du modèle développé à d'autres nuances d'acier telles que A615 et S355. Les résultats ont montré que le modèle développé répondait aux normes de référence, ce qui indique son potentiel d'application sur une large gamme de nuances d'acier.

Calix et al. (2023) ont utilisé l'apprentissage automatique associé à la dynamique des fluides computationnelle (CFD) pour modéliser le haut fourneau en aciérie, un système très vaste et très complexe. L'inconvénient des méthodes de simulation basées sur la CFD est qu'elles ont souvent été très lentes à générer des données. La mise en œuvre de la méthode CFD seule peut ne pas être assez rapide pour la prise de décision en temps réel. Pour résoudre ce dilemme, les auteurs ont proposé d'utiliser des techniques d'apprentissage automatique pour former et évaluer des modèles construits sur la base des données générées par la simulation CFD. Des modèles de régression basés sur des réseaux de neurones sont associés à des modèles d'optimisation basés sur des arbres. Plus précisément, ces approches permettent de modéliser



de nombreuses régions (c'est-à-dire la tuyère, le chemin de roulement et le puits) du haut fourneau. L'analyse basée sur le coefficient de détermination  $R^2$  montre que les modèles sont efficaces avec une prédiction qui varie entre 90 et 99%.

Zou et al. (2020) ont examiné les facteurs d'impact de la teneur en phosphore dans le revêtement Ni-P sur la surface de l'acier sous pression Cr12MoV en utilisant la technique d'ajustement de surface. Les auteurs ont considéré la température, le pH, la concentration d'hypophosphite de sodium et la concentration d'acide lactique comme paramètres d'entrée du réseau neuronal BP, avec la teneur en phosphore comme paramètre de sortie. Le modèle de réseau neuronal BP a été optimisé par l'algorithme d'optimisation par essaim de particules (PSO), et la précision de prédiction du modèle a été validée. Le modèle PSO-BP démontre une meilleure précision de prédiction, même lorsque la taille de l'échantillon est limitée. Dans de tels cas, l'erreur quadratique moyenne (MSE) de la prédiction est précisément de 0,0792.

Mohanty et al. (2011) ont utilisé des modèles de ANN pour établir des corrélations entre les propriétés mécaniques (limite d'élasticité, résistance à la traction, allongement) des tôles d'acier sans interstices laminées à froid (IF) et leur composition ainsi que leurs paramètres de traitement. Les résultats montrent un coefficient de corrélation  $R$  de 0,95 et 0,805 pour la prédiction de la limite d'élasticité et de l'allongement, respectivement. Ces modèles visaient à déterminer l'importance relative des différentes variables. Dans cette étude particulière, des efforts ont été déployés pour identifier un équilibre optimal entre la résistance et la ductilité des tôles d'acier IF laminées à froid en utilisant un algorithme génétique (GA). Les fonctions objectives de cette étude sont dérivées des modèles ANN développés. Grâce à l'optimisation multi-objectifs, les solutions de Pareto non dominées sont examinées pour comprendre le rôle des variables dans l'obtention de solutions optimales.

Un nouvel algorithme hybride présenté par Wang et al. (2022) est conçu pour prédire la température du point final, le carbone et le phosphore basé sur le bilan de chaleur et de masse et une technique axée sur les données. Trois catégories des modèles (modèle statique) ont été développées dans le cadre de cette étude. La première catégorie consistait en des modèles

théoriques formulés sur la base d'entrées spécifiées par l'utilisateur, utilisant l'équilibre de la masse et de l'énergie. La deuxième catégorie impliquait le développement de réseaux de neurones artificiels (ANN) pour prédire les points finaux. Enfin, un modèle hybride a été proposé, qui échangeait les résultats entre les modèles théoriques et les réseaux de neurones artificiels. Pour garantir la généralisation des prédictions du modèle, la validation du modèle d'apprentissage automatique a été effectuée à l'aide d'une validation croisée quintuple. Les réseaux neuronaux artificiels (ANNs) ont fait preuve d'une précision prédictive supérieure à celle des modèles théoriques pour les trois points finaux. Toutefois, leur application directe dans les aciéries est limitée par les variations potentielles de conditions de production (Wang et al., 2022).

Ces travaux démontrent l'efficacité de l'apprentissage automatique dans divers domaines de l'industrie sidérurgique, offrant des solutions robustes pour la prédiction et l'optimisation de problèmes complexes, en particulier pour la prédiction et l'optimisation des procédé de déphosphoration dans les EAFs. Elle souligne l'importance de sélectionner le modèle approprié à chaque problème spécifique afin d'obtenir les meilleurs résultats prédictifs.

## 1.7 Limitations et défis potentiels

Plusieurs contraintes et obstacles potentiels peuvent survenir lors de l'utilisation de l'apprentissage automatique dans l'industrie sidérurgique, en particulier dans le contexte des EAFs.

- **Données limitées ou de mauvaise qualité :** L'un des principaux défis réside dans la disponibilité de données limitées ou de qualité médiocre pour entraîner les modèles. Des données insuffisantes peuvent conduire à des prédictions peu fiables et à des modèles peu performants.
- **La complexité du procédé sidérurgique :** La complexité du procédé de fabrication de l'acier peut poser des défis lors de l'utilisation de l'apprentissage automatique pour

la modélisation. Les corrélations complexes entre les variables et les paramètres des fours à arc constituent autant des obstacles à la création de modèles fiables.

- **Maintenance et adaptabilité :** Maintenir et adapter les modèles d'apprentissage automatique pour garantir leur pertinence dans un environnement en constante évolution peut être un défi majeur. La capacité de ces modèles à s'adapter aux changements dans le processus de production de l'acier est absolument nécessaire.
- **Interprétabilité du modèle :** La question de l'interprétabilité des modèles d'apprentissage automatique, en particulier des réseaux de neurones, peut poser des difficultés pour comprendre les mécanismes et les phénomènes physiques derrière les prédictions. Ce manque de compréhension peut entraver les progrès dans des secteurs critiques tels que l'industrie sidérurgique.

En conclusion, malgré leurs limites, les méthodes d'apprentissage automatique dans l'industrie sidérurgique, notamment pour la déphosphoration dans les EAF, représentent une voie prometteuse pour améliorer l'efficacité et la précision du procédé. Divers modèles, allant de la régression linéaire aux réseaux de neurones artificiels, ont montré des capacités prédictives significatives dans différents contextes industriels. Cependant, leur performance dépend fortement de la nature des données et du choix des paramètres du procédé étudié. Par conséquent, une approche multi-modèle, prenant en compte la diversité et la spécificité des problèmes, est recommandée. L'optimisation et l'évaluation rigoureuse des modèles sont essentielles pour obtenir des résultats fiables et améliorer les procédés industriels complexes, tels que ceux rencontrés dans la déphosphoration de l'acier dans les EAF.



## **CHAPITRE 2**

### **MÉTHODOLOGIE**

Ce chapitre est divisé en deux sections principales : (1) le développement d'un modèle d'intelligence artificielle (IA) pour prédire la teneur finale en phosphore de l'acier provenant de l'opération du four électrique à arc (EAF) à Fink Steel Sorel et (2) la réalisation de calculs thermodynamiques pour améliorer la compréhension de l'impact des paramètres du procédé sur la déphosphoration.

Lors du développement d'un modèle d'apprentissage automatique, la première étape cruciale est la collecte, l'organisation et le prétraitement des données, qui est commune à tous les modèles d'IA adaptés ou développés dans cette thèse et qui sera présentée en premier. Ensuite, la méthodologie impliquant l'adaptation de deux modèles d'apprentissage automatique (Random Forest et Support Vector Machine (SVM) avec noyau Radial Basis Function (RBF)) mis en œuvre à l'aide de la bibliothèque Python Scikit-learn sera discutée. Ensuite, les modèles de réseaux neurones d'apprentissage profond et artificiels avec différentes architectures développées dans cette recherche sera élaboré. Après la discussion du modèle ANN, les étapes impliquées dans la réalisation des calculs thermodynamiques seront présentées.

#### **2.1 Collecte et préparation des données**

Les données impliquent la collecte de données historiques provenant de coulées industrielles précédentes pour divers paramètres. Ensuite, les données sont organisées, et les valeurs manquantes sont éliminées ou remplacées. Par la suite, les données subissent un prétraitement en éliminant les valeurs aberrantes et en nettoyant les données brutes, reconnaissant l'importance d'avoir un ensemble de données de qualité. La mise à l'échelle des données est également cruciale car elle permet une analyse et une comparaison significatives en les standardisant. Cette technique de mise à l'échelle permet de comprendre en profondeur la distribution et de la variation de l'ensemble de données, aidant le modèle à identifier les corrélations entre les paramètres indépendants et la cible de manière plus efficace et fiable.

Après avoir préparé l'ensemble de données, il est divisé en trois ensembles (ensemble d'entraînement, ensemble de test et ensemble de validation) et utilisé comme entrée pour le modèle d'apprentissage automatique.

### **2.1.1 Collecte de données de l'usine**

Plus de 1700 coulées ont été recueillies auprès de Finkl Steel Sorel, y compris les propriétés chimiques de la ferraille et les paramètres du procédé. Le tableau 2-1 énumère les paramètres utilisés pour développer le modèle ANN ainsi que le symbole du paramètre utilisé dans le modèle ANN et la raison de la sélection de l'un ou l'autre des paramètres. Au total, 12 paramètres ont été recueillis sur la base de la théorie métallurgique, de la thermodynamique et des pratiques de production actuelles. Ces paramètres comprennent le poids de ferraille, la composition de la ferraille (C, Mn, Cr, Si et S), la quantité d'oxygène injectée, la consommation d'énergie, la température de décrassage, la température de coulée et la durée du procédé.

Tableau 2-1 Paramètres utilisés (entrées) pour développer les modèles d'apprentissage automatique

Facteurs d'influence	Abréviation	Symbole du facteur	Raison de la sélection
Poids de ferraille (lb)	Po_Fr	X <sub>1</sub>	Matière première du EAF (source de P)
Teneur en C dans la ferraille (wt%)	C	X <sub>2</sub>	Éléments de la ferraille affectant la déphosphoration
Teneur en Mn dans la ferraille (wt%)	Mn	X <sub>3</sub>	
Teneur en Cr dans la ferraille (wt%)	Cr	X <sub>4</sub>	
Teneur en Si dans la ferraille (wt%)	Si	X <sub>5</sub>	
Teneur en S dans la ferraille (wt%)	S	X <sub>6</sub>	
Consommation d'oxygène (Pi <sup>3</sup> )	O <sub>2</sub>	X <sub>7</sub>	Oxydant
Consommation de chaux (lb)	CaO	X <sub>8</sub>	Agent de déphosphoration
Consommation d'énergie (kW)	Éner	X <sub>9</sub>	Paramètres du procédé
Température de décrassage (°C)	T_Déc	X <sub>10</sub>	
Température de soutirage (°C)	T_Sou	X <sub>11</sub>	
Durée du procédé	D_P	X <sub>12</sub>	

### 2.1.2 Prétraitement des données

L'efficacité d'un modèle d'apprentissage automatique dépend fortement de la qualité et de la préparation adéquate des données d'apprentissage. Le prétraitement des données est divisé en plusieurs étapes, dont (1) le traitement des valeurs manquantes, (2) l'élimination des valeurs aberrantes, (3) la normalisation et (4) le fractionnement des données. Dans la section suivante, nous expliquerons les mesures prises pour prétraiter l'ensemble de données avant de l'utiliser dans les modèles IA.

De plus, l'outil de programmation Python et ses nombreuses bibliothèques, telles que Pandas, NumPy et Seaborn étaient couramment utilisés pour la manipulation et l'analyse des données. Les fonctions spécifiques de ces bibliothèques utilisées pour chaque étape de prétraitement sont également discutées ci-dessous.

#### Traitement des données manquantes

Traitement des données manquantes, soit en supprimant les lignes ou les colonnes contenant des valeurs manquantes, soit en les imputant avec des valeurs appropriées telles que la moyenne, la médiane ou le mode. Le tableau 2-2 présente les statistiques descriptives des différents paramètres. Les valeurs minimales et maximales ainsi que la valeur moyenne et l'écart-type de chaque paramètre sont indiqués.



Tableau 2-2 Statistiques descriptives relatives aux différents paramètres utilisés dans l'apprentissage des modèles

Type de caractéristiques	Caractéristique	Valeur minimale	Valeur maximale	Moyenne	Écart-type
<b>Point final</b>	<b>Teneur en P au point final</b>	0,003	0,018	0,0098	0,0028
<b>Chimie principale de la ferraille</b>	<b>Teneur en C</b>	0,058	0,345	0,2747	0,0489
	<b>Teneur en Mn</b>	0,577	3,58	0,7980	0,0992
	<b>Teneur en Cr</b>	0,112	1,878	0,7456	0,2646
	<b>Teneur en Si</b>	0,128	0,79	0,2345	0,0362
	<b>Teneur en S</b>	0,004	0,08	0,0127	0,0033
<b>Paramètres du procédé</b>	<b>Consommation d'oxygène (Pi<sup>3</sup>)</b>	2750	10240	6323	1058
	<b>Consommation de chaux (lb)</b>	2150	4300	2310	565
	<b>Consommation d'énergie (kW)</b>	18008	23398	20702	941
	<b>Température de décrassage (°C)</b>	2764	3060	1599,04	55
	<b>Température de Soutirage (°C)</b>	2929	3084	1652,2	27
	<b>Poids de la ferraille (lb)</b>	91140	96360	94077	783

## Nettoyage des données

Le nettoyage des données consiste à supprimer les valeurs aberrantes, les caractéristiques non pertinentes ou le bruit du jeu de données pour garantir de meilleures performances du modèle. Dans cette étude, l'approche couramment utilisée est la méthode de la boîte à moustaches, qui a été utilisée pour identifier les valeurs aberrantes (Dovoedo & Chakraborti, 2015). Dans cette méthode, les valeurs situées en dehors des moustaches de la boîte sont identifiées comme des valeurs aberrantes potentielles. Cependant, il est crucial de faire preuve de prudence et de mener des évaluations approfondies avant de prendre des décisions finales, car cette méthode est très sensible aux valeurs extrêmes. La visualisation des données est nécessaire avant de commencer le prétraitement pour avoir une idée de la distribution des données. Par exemple, dans ce travail, la variation de la quantité de chaux se situe entre 2150 et 4300. Lors de l'application de cette technique, elle a automatiquement exclu les valeurs de 4300, même si elles n'étaient pas aberrantes. La figure 2-1 montre plusieurs caractéristiques clés de la boîte à moustaches.

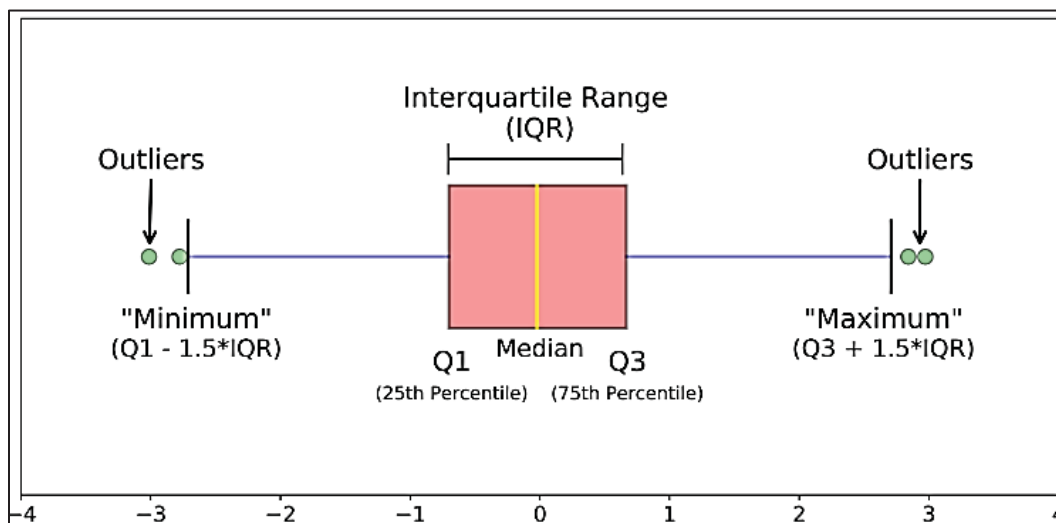


Figure 2-1 Caractéristiques clés de la boîte à moustaches  
Tirée de Galarnyk (2019)

### 2.1.3 Normalisation

De multiples paramètres, chacun avec des valeurs et des unités distinctes, sont utilisés dans le modèle ANN. Par conséquent, Il est extrêmement important de représenter ces données dans un format qui simplifie la tâche d'apprentissage et assure une convergence rapide du modèle tout en évitant tout biais causé par des échelles différentes. Les fonctionnalités sont mises à l'échelle au même niveau, ce qui accélère la convergence du modèle pendant l'entraînement. L'approche de normalisation Min-Max est utilisée, ce qui signifie généralement que les valeurs sont repositionnées dans une plage de  $[0,1]$ . Il s'agit de la méthode de mise à l'échelle la plus simple (Son et al., 2021), comme le montre l'équation 2-1

$$z_i = \frac{x_i - \min(x)}{\max(x) - \min(x)} \quad (2-1)$$

En utilisant la bibliothèque Scikit-Learn en Python, nous pouvons mettre en œuvre cette fonction de mise à l'échelle sans avoir à coder manuellement les formules mathématiques. Les divers attributs de mise à l'échelle sont commodément regroupés dans le paquet complet Scikit-Learn preprocessing.

### 2.1.4 Séparation des données

En essence, trois types d'ensembles de données (entrées) sont utilisés : ensembles d'entraînement, de validation et de test. Cette division garantit que le modèle est évalué sur des données qu'il n'a pas rencontrées lors de l'entraînement.

- Ensemble d'entraînement : Cet ensemble contient des informations sur la fonction cible utilisée pour entraîner le réseau.
- Ensemble de validation : Il est associé à la technique d'arrêt précoce. L'erreur de validation est surveillée pendant la phase d'entraînement pour éviter que le modèle ne surapprenne les données d'entraînement.

- Ensemble de test : Cet ensemble de données est conservé pour évaluer la performance du modèle.

Dans la plupart des cas, 60 % des données sont utilisées pour entraîner le modèle. Les 40 % restants sont répartis entre les ensembles de validation et de test. Parmi ceux-ci, 20 % des données sont allouées à la validation, et les 20 % restants sont utilisés pour un test de généralisation complètement indépendant du modèle ANN. Pour éviter tout biais involontaire envers l'ensemble de test, l'ensemble de validation est sélectionné aléatoirement à partir de l'ensemble d'entraînement.

## **2.2 Développement des modèles**

Après le prétraitement des données, trois modèles ont été développés pour prédire la teneur finale en phosphore de l'acier. Dans les sections suivantes, nous expliquons d'abord comment les deux modèles d'apprentissage automatique (RF et SVM) ont été mis en œuvre. Ensuite, nous détaillons les particularités du modèle ANN développé dans le cadre de cette recherche.

### **2.2.1 Implémentation des modèles d'apprentissage automatique RF et SVM**

Après le traitement et la préparation des données, la première étape consiste à importer la bibliothèque Sklearn. En utilisant la bibliothèque Sklearn, les données ont été divisées en ensembles d'entraînement et de test. Ensuite, il est nécessaire de s'assurer que nos données sont prêtes et chargées dans un DataFrame Pandas. L'étape suivante a été l'implémentation du modèle RF et son apprentissage à partir de ces deux fonctions :

- `rf_model = RandomForestRegressor(n_estimators=100, random_state=42)`, (création de modèle).
- `rf_model.fit(X_train, y_train)`, (l'apprentissage de modèle)

Une fois l'apprentissage du modèle terminé, des prédictions ont été effectuées à l'aide des données de test. Enfin, l'étape finale permet d'évaluer l'erreur du modèle.

En ce qui concerne le modèle SVM, il suit les mêmes étapes jusqu'à l'étape correspondant à son implémentation, au cours de laquelle la fonction et certains paramètres du modèle changent, comme le montre la fonction suivante :

```
- svm_model = SVR(kernel='rbf', C=100, gamma=0.1, epsilon=0.1)
```

Ensuite, on procède à l'apprentissage du modèle, suivi de phases de prédiction et d'évaluation. Certains paramètres, tels que C, gamma et epsilon, doivent être optimisés afin d'assurer une meilleure précision de la prédiction.

### 2.2.2 Réseau de neurones artificiels

La figure 2-2 illustre toutes les étapes du développement du modèle ANN dans cette étude. Ce procédé peut être divisé en plusieurs étapes :

- Collecte des données, Prétraitement et Normalisation : Ces étapes sont expliquées à la section 2.1.
- Fractionnement des données : Les données sont divisées en ensembles de formation, de test et de validation.
- Apprentissage du modèle : Il s'agit de choisir une architecture de réseau neuronal adaptée aux données et d'identifier les hyperparamètres du modèle. Les hyperparamètres clés comprennent le nombre de couches, le nombre de neurones par couche et la fonction d'activation.
- Évaluation du modèle : Les performances du modèle sont évaluées et divers hyperparamètres sont optimisés pour améliorer le modèle.
- Prédictions : Enfin, le modèle fait des prédictions. Si les prédictions ne sont pas exactes, les points faibles doivent être identifiés afin d'améliorer la précision des prédictions.

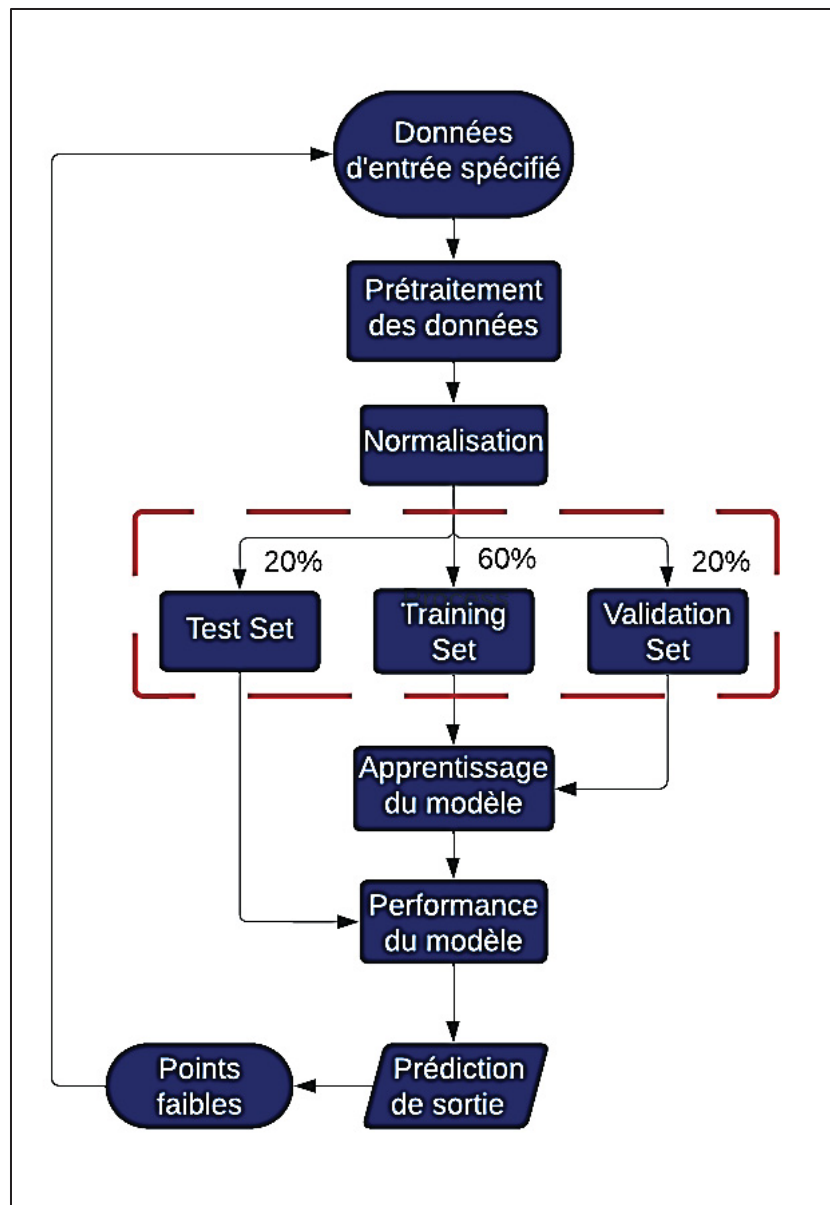


Figure 2-2 Organigramme pour le développement d'un modèle ANN basé sur des données industrielles

### Architecture du modèle

La structure générale d'un modèle de ANN comprend le nombre de couches et de neurones dans chaque couche. La Figure 2-3 illustre la structure générale et de base d'un modèle ANN.

Il explique comment l'information circule dans le réseau, de l'entrée à la sortie, au cours de la transmission.

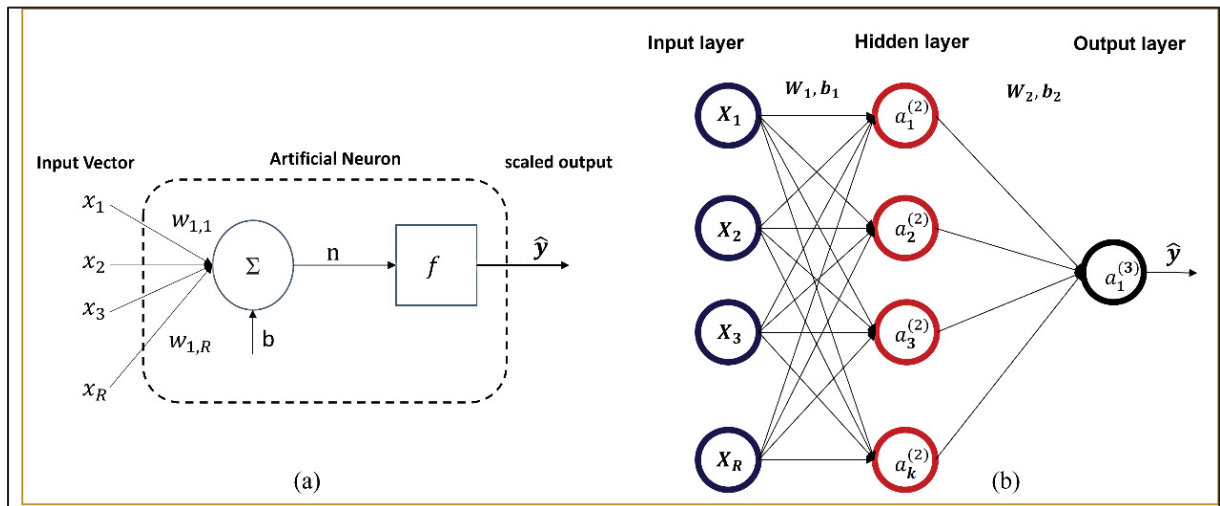


Figure 2-3 Structure générale et fondamentale a) d'un neurone et b) d'un modèle de réseau de neurones  
Tirée de Gibson and Patterson (2018)

Un réseau de neurones artificiels simple est composé de trois éléments clés :

- Couche d'entrée : Elle reçoit les informations d'entrée.
- Couche de sortie : Elle prédit la variable cible.
- Couches cachées (une ou plusieurs) : Elles consistent en une série d'unités de traitement interconnectées par des poids et des biais.

$$a = f \left[ \sum_{i=1}^n x_i w_i + b \right] \quad (2-2)$$

Dans cette couches,  $w_i$  et  $b$  représentent respectivement les valeurs des poids et des biais,  $x$  représente les entrées et  $f []$  désigne la fonction d'activation. La fonction de chaque couche au sein d'un réseau de neurones est d'apprendre des poids spécifiques qui sont ajustés à la fin du processus d'apprentissage. Les neurones et les connexions sont également des unités de

traitement de base dans un réseau de neurones artificiels et ils sont interconnectés à travers des connexions pondérées.

### Fonctions d'activations

Les fonctions d'activation sont des équations mathématiques qui déterminent la sortie d'un modèle de réseau de neurones. Elles introduisent de la non-linéarité dans le modèle, lui permettant d'apprendre des motifs complexes dans les données. Parmi les fonctions d'activation couramment utilisées, tangente hyperbolique (tanh), Unité Linéaire Rectifiée (ReLU), ReLU avec fuite (Leaky ReLU), Sigmoid et fonction Softmax, on choisit la fonction sigmoïde comme indiquée dans l'équation (2-3).

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad (2-3)$$

Cette fonction convient parfaitement aux tâches de classification binaire grâce à sa non-linéarité et à sa plage de sortie de 0 à 1. Bien que son gradient variable la rende adaptée à la technique de descente de gradient, son efficacité diminue lorsque les valeurs d'entrée s'éloignent de zéro, ce qui entraîne un problème de disparition du gradient (Marcu & Grava, 2021).

### Fonctions de perte

Une fonction de perte mesure l'erreur entre les prédictions du modèle et les valeurs cibles réelles pendant le processus d'apprentissage. Elle est utilisée pour guider l'algorithme d'optimisation dans la mise à jour des paramètres du modèle afin de minimiser cette erreur.

Pour les modèles de régression, les fonctions de perte les plus courantes sont l'erreur quadratique moyenne (MSE), la racine de l'erreur quadratique moyenne (RMSE) et l'erreur absolue moyenne (MAE) (Ciampiconi et al., 2023).



L'erreur quadratique moyenne (MSE) est probablement la mesure la plus couramment utilisée pour évaluer l'exactitude des prédictions du modèle. Elle est définie par l'équation (2-4) :

$$MSE = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (y_j - \hat{y}_j)^2 \quad (2-4)$$

Où :

$y_j$  est la  $j$ ème valeur réelle de  $y$

$\hat{y}_j$  est la  $j$ ème valeur prédite de  $y$

$\Sigma$  représente la somme sur tous les  $i$

$N$  est le nombre total d'échantillons

Un MSE plus faible indique une meilleure précision de prédiction. Cependant, l'étendue du MSE dépend de la variable cible, qui dans ce cas sert de point final (valeur à prédire) (Chicco et al., 2021).

### **Algorithme d'optimisation**

L'algorithme d'optimisation est utilisé pour minimiser la fonction de perte et mettre à jour les poids du réseau pendant l'entraînement. Il s'agit d'une étape cruciale dans le processus d'apprentissage. L'optimiseur Adam est utilisé pour déterminer un taux d'apprentissage adaptatif pour chaque paramètre du modèle. Contrairement à la descente de gradient stochastique classique, Adam gère des taux d'apprentissage uniques pour chaque paramètre, lui permettant d'atteindre la convergence plus rapidement et de s'adapter aux variations des données d'entraînement (Iiduka, 2021), (Reyad et al., 2023)

### **Hyperparamètres**

Les hyperparamètres comprennent le taux d'apprentissage, la taille du lot, le nombre d'époques et l'architecture du réseau. Ces paramètres doivent être ajustés pendant l'apprentissage du modèle afin d'obtenir des performances optimales et d'éviter des problèmes tels que le

surajustement ou le sous-ajustement (Kadhim et al., 2022). Dans l'architecture d'un modèle de ANN, trois couches sont généralement présentes : X-Y-Z.

- X correspond à la couche d'entrée, où les paramètres d'entrée sont introduits.
- Y représente la couche cachée, où les calculs et transformations sont effectués.
- Z désigne la couche de sortie, qui présente les résultats finaux ou la cible recherchée.

Dans le contexte de l'optimisation des hyperparamètres pour un modèle ANN, deux approches courantes sont la recherche exhaustive (grid search) et la recherche aléatoire (random search). Cependant, l'un des principaux problèmes associés à la recherche par grille est le temps considérable qu'elle nécessite. Par conséquent, de nombreux praticiens optent pour un réglage manuel. En revanche, la recherche aléatoire peut parfois offrir une alternative plus rapide et tout aussi efficace.(Hinz et al., 2018).

**Taille du lot.** Cela fait référence au nombre d'exemples d'entraînement utilisés dans une itération. Lors de l'entraînement d'un réseau de neurones, les données sont divisées en lots, et chaque lot est traité par le réseau. La taille du lot détermine combien d'échantillons sont traités avant de mettre à jour les paramètres du modèle. Une taille de lot plus grande entraîne généralement un entraînement plus rapide mais nécessite plus de mémoire (Lin, 2022).

**Nombre d'époques.** Une époque correspond à un passage complet à travers l'ensemble du jeu de données d'entraînement. Le nombre d'époques définit combien de fois l'ensemble du jeu de données est traité pendant l'entraînement. Augmenter le nombre d'époques permet au modèle de voir les données plusieurs fois, ce qui peut améliorer les performances, surtout pour les jeux de données complexes. Cependant, un entraînement sur trop d'époques peut entraîner un surapprentissage si le modèle commence à mémoriser les données d'entraînement au lieu d'apprendre des motifs généraux (Dar et al., 2024).

### 2.2.3 Caractéristiques du présent modèle ANN

Dans cette étude, les hyperparamètres ont été sélectionnés par essais et erreurs (recherche aléatoire), en testant plusieurs valeurs comme indiqué dans le tableau 2-3. Les hyperparamètres pour chaque modèle ont été choisis en fonction de la combinaison qui a conduit à la plus faible perte de validation (MSE).

Tableau 2-3 Hyperparamètre utilisé dans le présent modèle ANN

<b>Hyperparamètres</b>	<b>Model 3 (DNN) 12-32-32-64-64- 128-64-32-1</b>	<b>Model 4 (ANN) 12-16-8-1</b>	<b>Model 5 (ANN) 12- 144-256-64- 1</b>	<b>Model 6 (ANN) 12-128-128- 128-64-1</b>
Nombre de neurones	416	24	464	448
Nombre de couches	7	2	3	4
Nombre d'époques	500	1000	100	500
Taille du lot	1000	50	50	50

Après avoir optimisé les hyperparamètres, la structure du modèle a été déterminée. Le modèle ANN actuel est composé de 4 couches cachées, 448 neurones, 500 époques et 50 lots. Cette architecture a été implémentée en utilisant la bibliothèque TensorFlow.

### 2.2.4 Métriques d'évaluation

Les métriques d'évaluation sont utilisées pour évaluer les performances d'un modèle formé sur des données inédites, généralement une fois le procédé de formation terminé. Contrairement aux fonctions de perte, les métriques d'évaluation ne sont pas directement utilisées dans le

procédé d'optimisation, mais servent à évaluer l'efficacité du modèle formé dans des applications réelles (Chicco et al. 2021).

**Racine de l'erreur quadratique moyenne (RMSE) :** Cette métrique est également choisie comme mesure d'évaluation pour les prédictions du point final du modèle, qui est déterminée par l'équation 2-5 :

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (y_j - \hat{y}_j)^2} \quad (2-5)$$

RMSE permet de résoudre certains problèmes associés au MSE. Elle offre une meilleure interprétabilité, une sensibilité accrue aux valeurs aberrantes et facilite la comparaison entre différents ensembles de données, des avantages que le MSE ne fournit pas directement.

**Coefficient de détermination ( $R^2$ ) :** Ce concept est d'une importance significative. Il sert à quantifier la mesure dans laquelle les variables indépendantes expliquent la variabilité de la variable dépendante. Essentiellement, le  $R^2$  mesure la proportion de la variance de la variable dépendante qui peut être attribuée aux variables indépendantes, et il est décrit par l'équation (2-6) :

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^m (X_i - Y_i)^2}{\sum_{i=1}^m (\bar{Y} - Y_i)^2} \quad (2-6)$$

Sachant que  $X_i$  est la  $i$ -ème valeur prédite et l'élément  $Y_i$  représente la  $i$ -ème valeur réelle.

**Corrélation ( $R$ ) :** La corrélation est une méthode statistique permettant de mesurer la force de la relation entre deux variables. Elle s'applique aux données quantifiables. Combinée à la régression linéaire, elle fait partie des techniques d'apprentissage automatique supervisé. La

formule mathématique de la corrélation est présentée dans l'équation (2-7), (Pandey et al., 2015)

$$R = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}} \quad (2-7)$$

- La valeur de la corrélation peut être de  $0 < R \leq 1$  (corrélation positive), montre une forte corrélation positive, ce qui signifie que ces deux variables ont tendance à augmenter en même temps.
- La valeur 0 signifie qu'il n'y a pas de corrélation, ce qui signifie que les variables x et y ne présentent aucune relation.
- La valeur corrélation négative ( $-1 \leq R < 0$ ) montre une corrélation négative, à savoir que si une variable augmente, l'autre diminue.

En effet, la corrélation, associée à la meilleure droite d'ajustement, est efficace pour représenter la relation linéaire entre les variables quantitatives.

### 2.3 Calculs thermodynamiques

La thermodynamique computationnelle peut être une approche rentable et rapide pour fournir des informations précieuses pour l'optimisation et le développement de procédés, à condition de disposer de bases de données thermodynamiques précises et évaluées de manière critique. Cette approche permet de réduire considérablement le nombre d'essais et d'erreurs en limitant les expérimentations nécessaires à la validation. Bien que la cinétique des réactions et le non-équilibre entre le métal, le laitier et le gaz ne puissent être pris en compte par cette approche, les calculs d'équilibre fournissent des informations utiles sur l'étendue des réactions telles que la déphosphoration de l'acier en fonction de variables de procédé importantes (à savoir, composition, température, oxygène injecté et chaux). A partir d'un ensemble de valeurs d'entrée (conditions initiales et paramètres du procédé), prédéfinies sur la base de la connaissance du procédé, la masse et la composition de l'acier, du laitier et du gaz peuvent être

calculées. Les étapes importantes des calculs thermodynamiques sont décrites dans les sections suivantes.

### 2.3.1 Logiciel de calcul thermochimique et ses bases de données

Au cours des dernières années, plusieurs bases de données thermodynamiques précises et cohérentes ont été développées pour diverses applications. Ces bases de données ont ensuite été intégrées à des logiciels de thermodynamique computationnelle équipés de minimiseurs d'énergie libre de Gibbs tels que FactSage (Bale et al., 2002), Thermocalc (Andersson et al., 2002), MTDATA (National Physical Laboratory, Royaume-Uni), Pandat ([www.computherm.com](http://www.computherm.com)), Mat-Calc ([www.matcalc-engineering.com](http://www.matcalc-engineering.com)) et MPE (CSIRO, Australie). Ces logiciels thermochimiques permettent d'effectuer des analyses thermodynamiques approfondies des équilibres de phases et des réactions chimiques dans un système chimique donné, à condition de disposer de bases de données thermodynamiques optimisées et cohérentes.

Dans ce travail, l'analyse thermodynamique de la déphosphoration a été réalisée à l'aide du logiciel thermochimique FactSage™ version 8.3 (Bale et al., 2002). L'interface du logiciel est illustrée à la figure 2-4. FactSage est composé de plusieurs modules tels que Equilib et Phase Diagram, qui ont été utilisés de manière préliminaire dans cette étude.

Le comportement thermodynamique du laitier (solide et liquide) a été calculé à l'aide de la base de données FToxid et de ses paramètres de modèle. La phase de solution d'acier a été décrite à l'aide de la base de données FTmisc. Les propriétés thermodynamiques de la phase gazeuse ont été calculées à l'aide de la base de données FactPS. La figure 2-5 illustre l'interface de la base de données FactSage utilisée dans le cadre de ce travail.

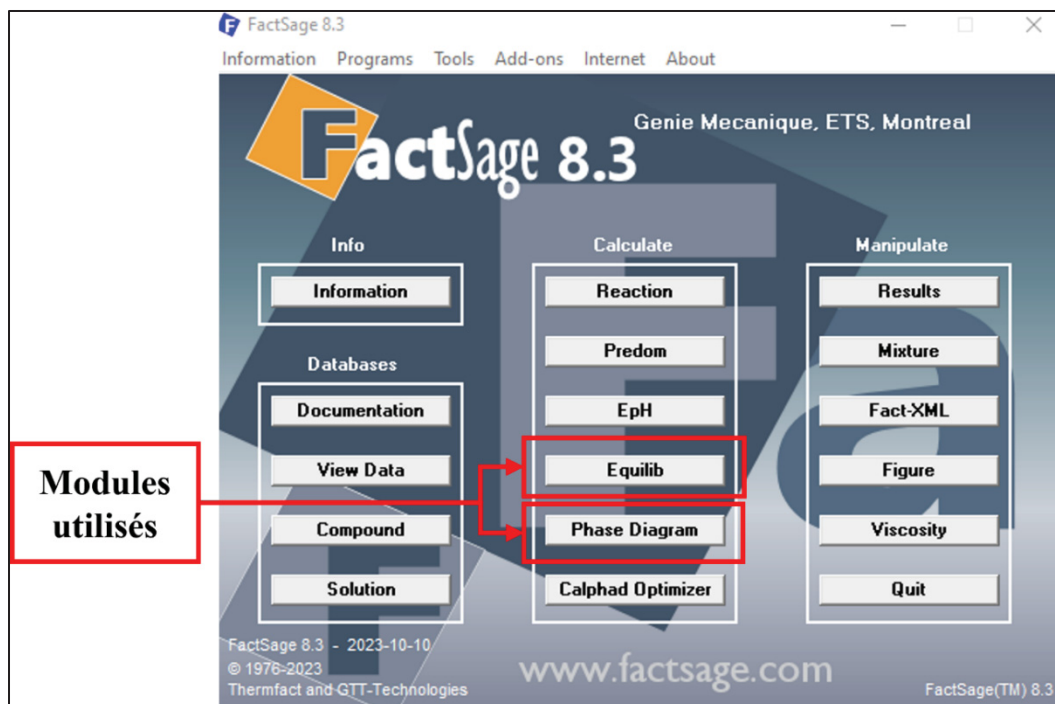


Figure 2-4 L'interface du logiciel FactSage version 8.3 utilisé pour les calculs thermochimiques

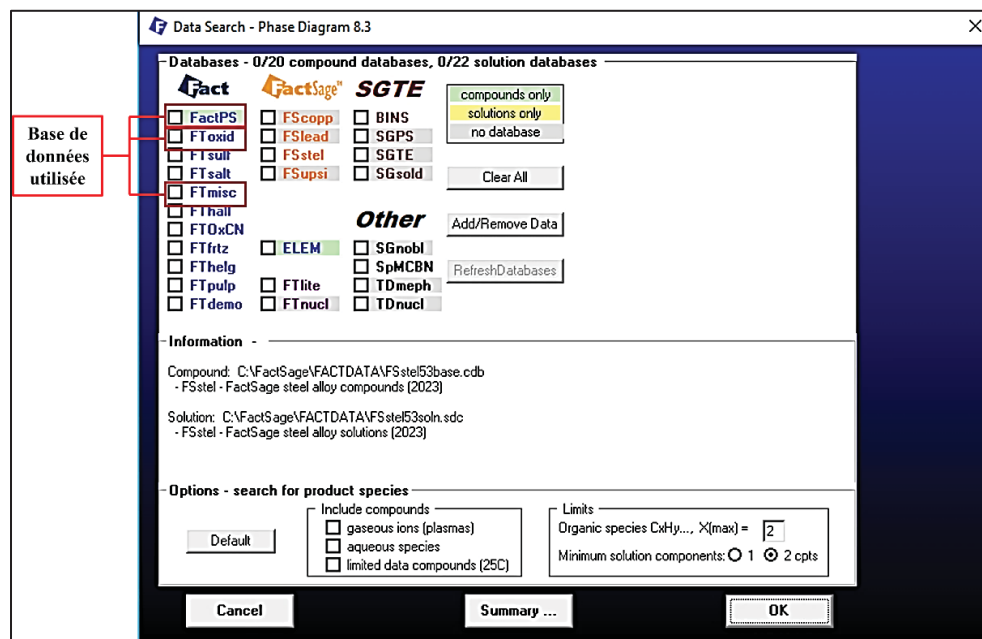


Figure 2-5 Bases de données utilisées dans cette étude

### 2.3.2 Sélection des variables

Des données provenant de plus de 1000 coulées avec différents paramètres ont été utilisées afin de calculer la masse et la composition de l'acier, du laitier et du gaz. Les quatre principales variables utilisées dans les calculs sont l'oxygène injecté, la température et la chaux ajoutée, ainsi que les composants chimiques clés de la ferraille. Le tableau 2-4 présente les paramètres principaux, leurs valeurs moyennes et leurs écarts types de l'aciérie.

Tableau 2-4 Paramètres initiaux moyens de l'aciérie

	<b>T</b> (°C)	<b>C</b> (Kg)	<b>Mn</b> (Kg)	<b>S</b> (kg)	<b>Si</b> (kg)	<b>Cr</b> (kg)	<b>P</b> (kg)	<b>Fe (kg)</b>	<b>CaO</b> (kg)	<b>O<sub>2</sub></b> (kg)
<b>Moyenne</b>	1600	116,5	337,1	5,37	106,8	315,9	7,1	40324,9	1048	512
<b>Écart-type</b>	30,68	21,1	21,13	1,05	14,75	112,9	2,18	1754,6	256,64	85,6

Les ferrailles de l'aciérie sont constituées de plusieurs types (à savoir : Frag, retours, moules, bilette, ...) et chaque catégorie de ferraille a sa propre composition chimique. Le composant principal est le fer, mais la teneur en d'autres éléments varie, tels que le carbone, le manganèse, le chrome, le silicium, etc. Pour chaque coulée, le poids de chaque type de ferraille est donc déterminé en fonction de la qualité d'acier requise. Certaines catégories ont moins d'impuretés mais sont un peu plus chères, tandis que les moules sont un peu plus riches en carbone que d'autres.



## CHAPITRE 3

### ANALYSE DE RÉSULTATS DES MODÈLES D'APPRENTISSAGE AUTOMATIQUE

#### 3.1 Distribution des paramètres de l'usine

Avant de traiter les données, il est important de comprendre la distribution des données, y compris la tendance centrale, la dispersion et les valeurs aberrantes potentielles pour prendre des décisions éclairées. Le diagramme en boîte donne un aperçu de ces caractéristiques. La distribution de plusieurs paramètres d'entrée de l'usine liés au procédé de fabrication de l'acier avant le prétraitement des données dans ce travail est illustrée sous forme de diagramme en boîte dans la Figure 3-1.

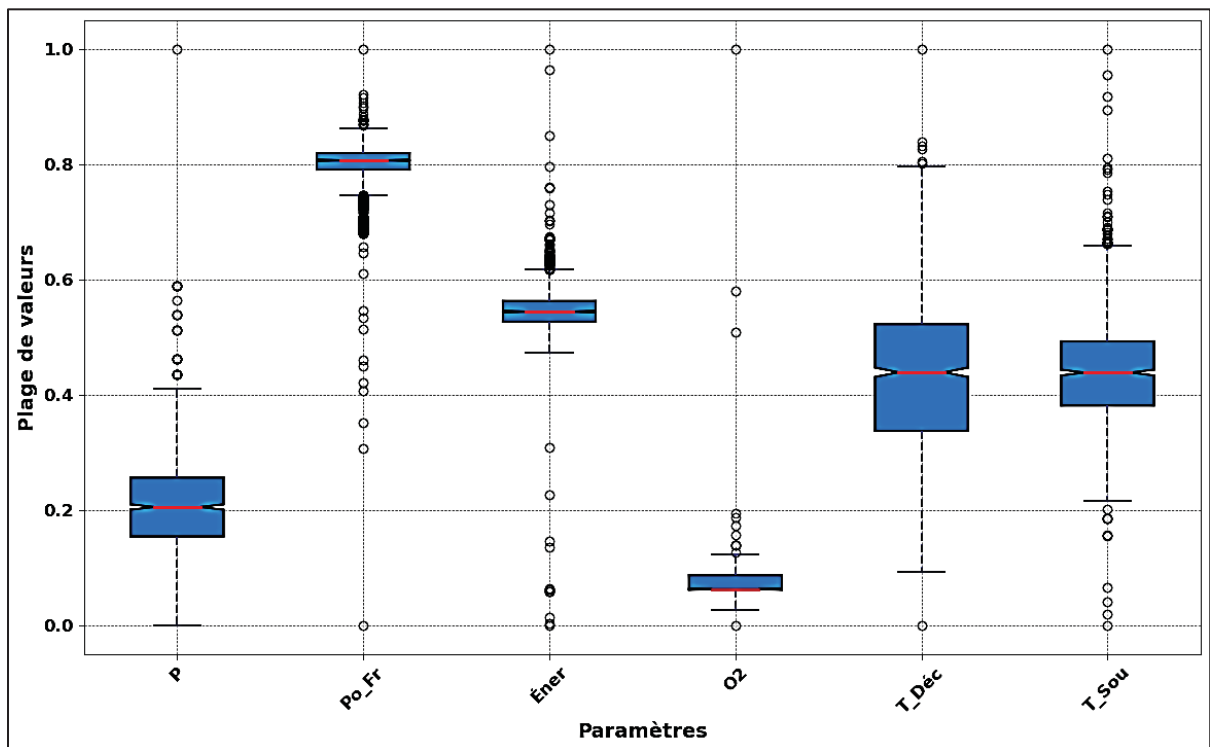


Figure 3-1 Diagramme en boîte pour divers paramètres d'entrée-sortie du procédé de fabrication de l'acier

Ce diagramme en boîte illustre la variabilité de certains paramètres du procédé de fabrication de l'acier. Par exemple, les paramètres T\_Déc et T\_Sou montrent une variabilité significative, ce qui pourrait refléter des variations dans le processus ou des conditions d'opération différentes. La distribution du paramètre P est concentrée autour d'une valeur médiane basse, avec une plage de valeurs restreinte, tandis que plusieurs valeurs aberrantes sont présentes. Les paramètres Po\_Fr et Éner affichent une distribution légèrement décalée vers des valeurs plus élevées, avec une plage interquartile (IQR) réduite et un nombre important de valeurs aberrantes. En ce qui concerne l'O<sub>2</sub>, sa distribution est très resserrée, avec une médiane basse, suggérant que la majorité des valeurs sont très proches les unes des autres.

Ces caractéristiques peuvent indiquer des opérations instables ou des anomalies fréquentes dans les données collectées. Les valeurs extrêmes identifiées doivent être examinées de près, car elles pourraient nécessiter un traitement spécifique, tel que leur élimination ou transformation, pour éviter qu'elles n'influencent négativement les modèles prédictifs. Cette analyse préliminaire de la distribution des données est essentielle pour prendre des décisions éclairées lors du prétraitement des données.

### **3.2 Analyse de corrélation entre les variables d'entrée et la sortie**

Dans le contexte de l'apprentissage automatique et des mesures statistiques, les mesures d'association sont utilisées pour évaluer la relation entre les variables d'entrée et la variable de sortie. Elles peuvent être utilisées à plusieurs fins, telles que la sélection des caractéristiques, l'interprétation du modèle et la compréhension des données. Une mesure d'association très courante pour les variables continues est le coefficient de corrélation de Pearson (PCC), qui indique la force et la direction de la relation, avec des valeurs allant de -1 à 1. Une valeur de 1 indique une association positive parfaite, -1 indique une association négative parfaite, et 0 indique aucune association. Le PCC quantifie la relation linéaire entre les variables continues. En sélectionnant les caractéristiques ayant des valeurs de PCC élevées, les modèles d'apprentissage automatique peuvent se concentrer sur les informations les plus pertinentes pour effectuer des prédictions. De plus, les modèles d'apprentissage automatique, en particulier

les modèles complexes comme les réseaux de neurones, manquent souvent d'interprétabilité. L'analyse des valeurs du PCC permet d'obtenir des informations sur la relation entre les caractéristiques individuelles et la variable cible, en l'occurrence la teneur finale en phosphore de l'acier, ce qui améliore l'interprétabilité du modèle.

De plus, une carte thermique peut représenter visuellement la force et la direction de l'association entre les variables en colorant chaque cellule en fonction de l'ampleur du PCC. Les cellules avec des coefficients plus élevés peuvent être représentées avec des couleurs plus chaudes (par exemple, le rouge) pour indiquer une association plus forte, tandis que les cellules avec des coefficients plus bas peuvent être représentées avec des couleurs plus froides (par exemple, le bleu) pour indiquer une association plus faible.

La Figure 3-2 montre les PCCs entre la teneur en phosphore final de l'acier, la variable cible, et les paramètres d'entrée. Les paramètres d'entrée comprennent D\_pro, Cr, Po\_Fr, T\_Sou, Si, C, T\_Dé, Éner, CaO, Mn, S et O<sub>2</sub>.

Les valeurs de PCC vont de -0,2 à 0,3. La variable "Durée du pro" présente la valeur de PCC la plus élevée, légèrement supérieure à 0,25, indiquant une association positive relativement forte. O<sub>2</sub>, Cr et S se classent respectivement deuxième, troisième et quatrième, avec des PCC de -0,18, 0,165 et -0,11. Les PCC pour Mn, Po\_Fr, CaO, Éner et T\_Dé étaient respectivement de -0,07, -0,07, -0,06, -0,05 et -0,05. Les PCC les plus faibles appartiennent à T\_Sou, Si et C, avec des PCC de -0,025, -0,025 et  $\ll 0,01$ , respectivement.

L'association positive indique qu'avec l'augmentation des variables d'entrée, la teneur en phosphore final de l'acier augmente. En revanche, l'association négative signifie qu'avec l'augmentation des variables d'entrée, la teneur en phosphore final de l'acier diminue. La teneur en phosphore final de l'acier augmente avec une augmentation de "Durée du Pro", Cr et Poids\_Fr. D'autre part, la majorité des autres variables présentent des valeurs de PCC négatives, indiquant que la teneur en phosphore final de l'acier diminue avec une augmentation de ces variables d'entrée.

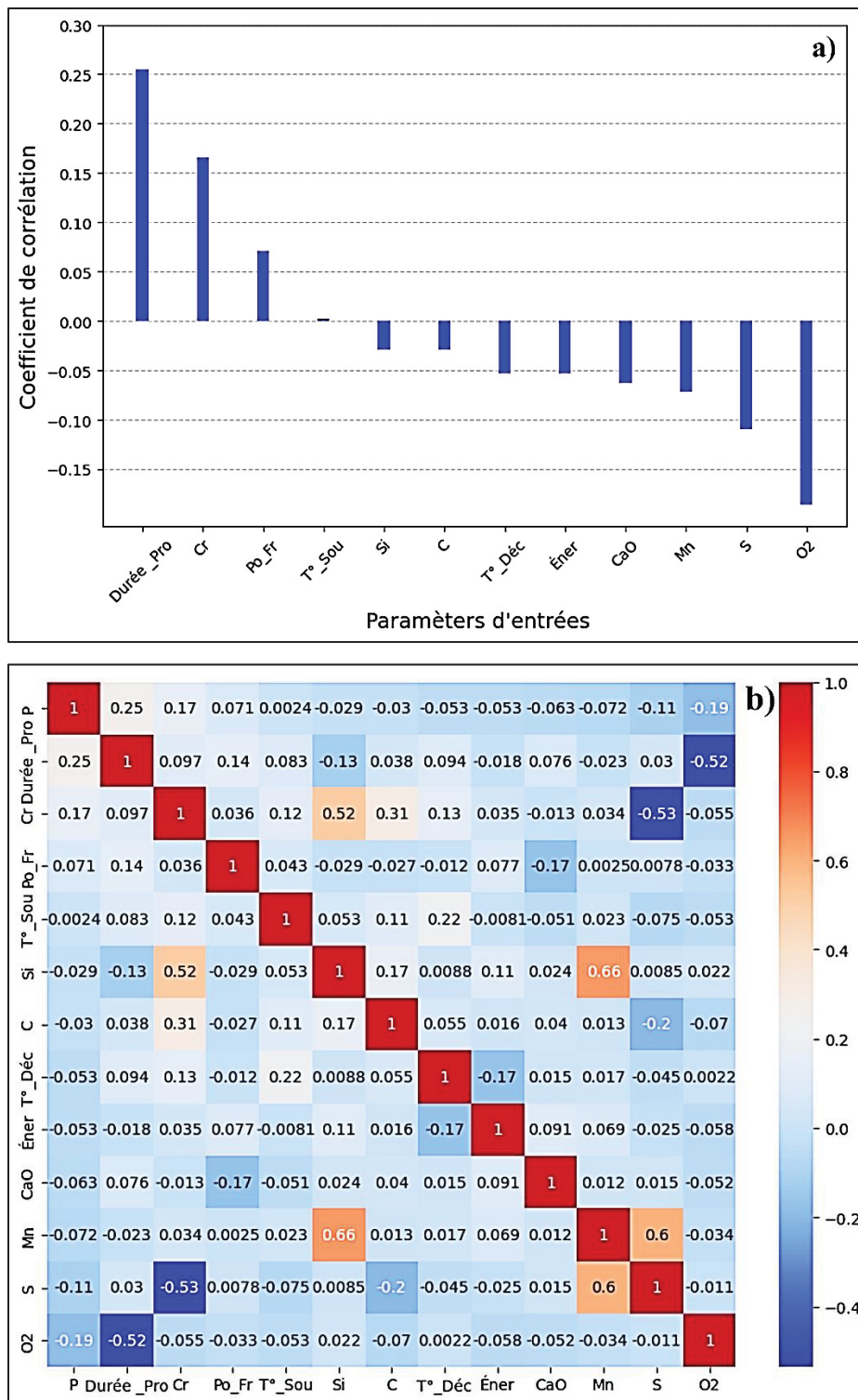


Figure 3-2 (a) Coefficients de corrélation de Pearson (PCC) et (b) carte thermique entre la teneur finale en phosphore de l'acier (la variable cible) et les paramètres d'entrée

### 3.3 Forêt aléatoire (RF : Model 1)

La Figure 3-3 illustre le graphique de dispersion pour la teneur en phosphore final de l'acier, prédite à partir du modèle RF (axe des y), et mesurée (axe des x). La plage de valeurs représentée se situe entre 0,002 et 0,018. Chaque point bleu représente une prédiction individuelle du modèle pour une valeur réelle correspondante. La dispersion des points montre la variation des prédictions par rapport aux valeurs mesurées. Idéalement, si les prédictions étaient parfaites, tous les points se situeraient au voisinage de la première bissectrice, où les valeurs prédites seraient égales aux valeurs réelles. Plusieurs facteurs peuvent expliquer ces résultats, et une analyse détaillée de ces possibilités sera effectuée dans les sections suivantes.

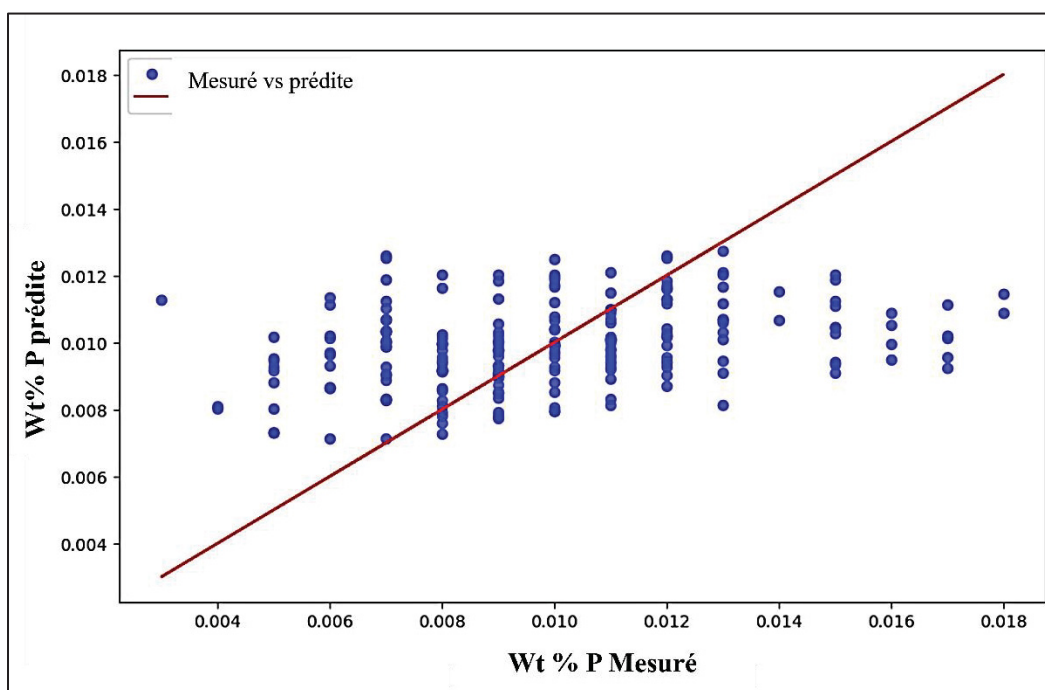


Figure 3-3 Nuage de points pour la teneur finale en phosphore de l'acier, prédite à partir du modèle RF (modèle 1) et mesurée

Le tableau 3-1 répertorie les métriques d'évaluation du modèle RF. Le MSE a été calculé à  $7,903364 \times 10^{-6}$ . Le RMSE,  $R^2$  (apprentissage),  $R^2$  (validation) et  $R^2$  (test) ont été calculés à 0,0028, 0,87, 0,10 et 0,09, respectivement.  $R^2$  (apprentissage) est nettement plus élevé que  $R^2$  (validation). Si la valeur de  $R^2$  est élevée sur l'ensemble d'entraînement mais faible sur

l'ensemble de validation, cela suggère que le modèle surajuste les données d'entraînement. Le surajustement se produit lorsque le modèle apprend à capturer le bruit ou les fluctuations aléatoires dans les données d'entraînement plutôt que les schémas ou les relations sous-jacentes. En conséquence, le modèle fonctionne bien sur les données d'entraînement mais ne se généralise pas bien aux nouvelles données non observées. Parmi les causes possibles, on peut citer :

- **Complexité du modèle :** Si le nombre d'arbres ou la profondeur de chaque arbre est trop élevé, le modèle peut devenir trop complexe et mémoriser les données d'entraînement, au lieu d'apprendre des motifs généralisables.
- **Sélection des hyperparamètres :** Des hyperparamètres mal optimisés peuvent entraîner un surajustement. Parmi ceux-ci figurent le nombre d'arbres, la profondeur maximale des arbres, le nombre minimal d'échantillons requis pour diviser un nœud, ainsi que le nombre minimal d'échantillons par feuille.

Tableau 3-1 Valeurs des métriques d'évaluation du modèle RF

<b>MSE</b>	7,903364 e-06
<b>RMSE</b>	0,0028
<b>R<sup>2</sup> (apprentissage)</b>	0,87
<b>R<sup>2</sup> (validation)</b>	0,10
<b>R<sup>2</sup> (test)</b>	0,09

### 3.4 SVM avec noyau RBF (Modèle 2)

Les valeurs des paramètres d'évaluation du modèle SVM sont présentées dans le tableau 3-2. Un RMSE de 0,17 et un MSE de 0,03 sont relativement élevées, ce qui indique également que les erreurs de prédiction sont élevées. Toutefois, les valeurs de RMSE et de MSE doivent être interprétées en fonction de l'échelle des données. Une valeur de 0,17 pour le RMSE indique que le modèle explique seulement 17% de la variance des données d'entraînement. Cela suggère que le modèle n'est pas très performant pour s'ajuster aux données d'entraînement. Les R<sup>2</sup> pour l'apprentissage, la validation et le test ont été calculés comme étant respectivement de 0,17, 0,09 et 0,08. Les faibles valeurs de R<sup>2</sup> pour les ensembles d'apprentissage, de validation

et de test indiquent que le modèle SVR avec noyau RBF ne saisit pas bien la relation entre les variables d'entrée et la variable cible. Cela suggère que le modèle n'est pas performant.  $R^2$  (test) signifie que le modèle explique 8 % de la variance des données de test. Ceci vient confirmer que le modèle ne se généralise pas bien aux nouvelles données.

Tableau 3-2 Valeurs des métriques d'évaluation du modèle SVM-RBF

<b>MSE</b>	0.03
<b>RMSE</b>	0.17
<b><math>R^2</math> (apprentissage)</b>	0.17
<b><math>R^2</math> (validation)</b>	0.09
<b><math>R^2</math> (test)</b>	0.08

### 3.5 Réseau de neurone profond (DNN : Modèle 3)

La figure 3-4 illustre le graphique de dispersion pour la teneur en phosphore final de l'acier, prédite par le modèle DNN et mesurée. Il est évident que le modèle n'explique qu'une petite partie de la variance dans la teneur en P final de l'acier. Cela suggère que le modèle DNN pourrait ne pas capturer adéquatement les relations complexes présentes dans les données.

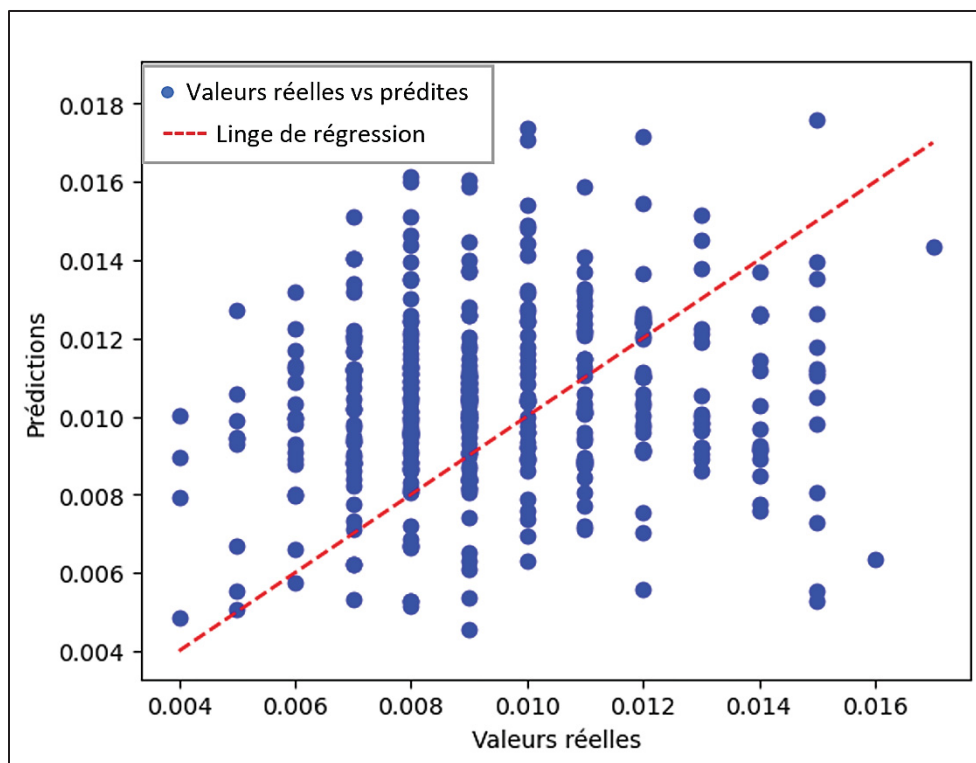


Figure 3-4 Nuage de points pour la teneur finale en phosphore de l'acier, prédite par le modèle DNN (modèle 3) et mesurée

Le tableau 3-3 présente l'architecture du modèle, la valeur de la fonction de perte (MSE) et les métriques d'évaluation du modèle DNN (Modèle 3). L'architecture du modèle est 32-32-64-64-128-64-32-sigmoid. Il comprend 7 couches cachées et 416 neurones. Le MSE a été calculé à  $7,62021181799355e-06$ . Le RMSE, R,  $R^2$  ont été calculés à 0,0028, et 0,07, respectivement.

Tableau 3-3 Récapitulatif du modèle DNN (Modèle 3)

Architecture	32-32-64-64-128-64-32-sigmoid
MSE	7,903364 e-06
RMSE	0,0028
R	-
$R^2$	7 %



Les modèles DNN consistent généralement en des architectures de réseaux neurones avec une pile profonde de couches cachées, ce qui leur permet d'apprendre des représentations complexes des données (Reyad et al., 2023). Cependant, dans le contexte du présent travail, le modèle DNN n'a pas réussi à capturer les motifs sous-jacents dans l'ensemble de données. Cette divergence peut être attribuée au fait que les modèles DNN sont généralement mieux adaptés aux ensembles de données très volumineux, tels que ceux contenant plus de 100 000 échantillons (El Bilali et al., 2022). La taille relativement plus petite de l'ensemble de données utilisé dans cette étude 1005 a peut-être limité la capacité du modèle DNN à apprendre et à généraliser efficacement à partir des données disponibles.

### **3.6 Réseau de neurones artificiels (ANN)**

Comme discuté précédemment, le modèle DNN relativement complexe a eu du mal à prédire avec précision les motifs dans l'ensemble de données actuel. Par conséquent, des modèles de réseaux neurones artificiels plus simples ont été développés et testés. Les architectures de ces trois modèles seront présentées dans la section suivante.

#### **3.6.1 ANN\_16-8-sigmoid (Modèle 4)**

Le ANN\_16-8-sigmoid (Modèle 4) comportait 2 couches cachées et 24 neurones avec une architecture de 16-8. La figure 3-5(a) illustre un graphique de dispersion avec une ligne de régression, démontrant la corrélation entre les données prédites par le modèle (axe y) et les données mesurées (axe x). Ces valeurs vont de 0 à 1, indiquant une normalisation des données. Chaque point bleu représente une paire de valeurs (mesurée, prédite). Le nombre de paramètres d'entrée était de 12 comme indiqué dans le Tableau 2-1.

La ligne rouge (ligne de régression) représente la tendance idéale où les valeurs prédites sont égales aux valeurs mesurées. La pente de cette ligne est de 1, ce qui serait le cas dans un scénario de prédiction parfaite. La dispersion des points autour de la ligne de régression indique la précision des prédictions du modèle par rapport aux valeurs mesurées. Plus les points sont proches de la ligne de régression, plus les prédictions sont précises. De plus, la ligne de

régression aide à visualiser si le modèle présente un biais systématique (par exemple, s'il sous-estime ou surestime systématiquement les valeurs). Dans ce cas, la ligne semble bien s'aligner avec la diagonale, suggérant un faible biais global, bien que des déviations locales soient présentes.

La figure 3-5(b) illustre les courbes d'apprentissage du modèle ANN\_16-8-sigmoid (Modèle 4) pour 12 paramètres d'entrée. Ces courbes représentent la perte d'entraînement et de validation (perte MSE) sur l'axe des y en fonction du nombre d'itérations globales sur l'axe des x. La courbe bleue représente la "perte d'entraînement" pour le modèle 16-8-sigmoïde. La courbe orange représente la "perte de validation" pour le même modèle. Le nombre d'itérations globales varie de 0 à 50000, tandis que les valeurs de perte varient de 0,000 à 0,200.

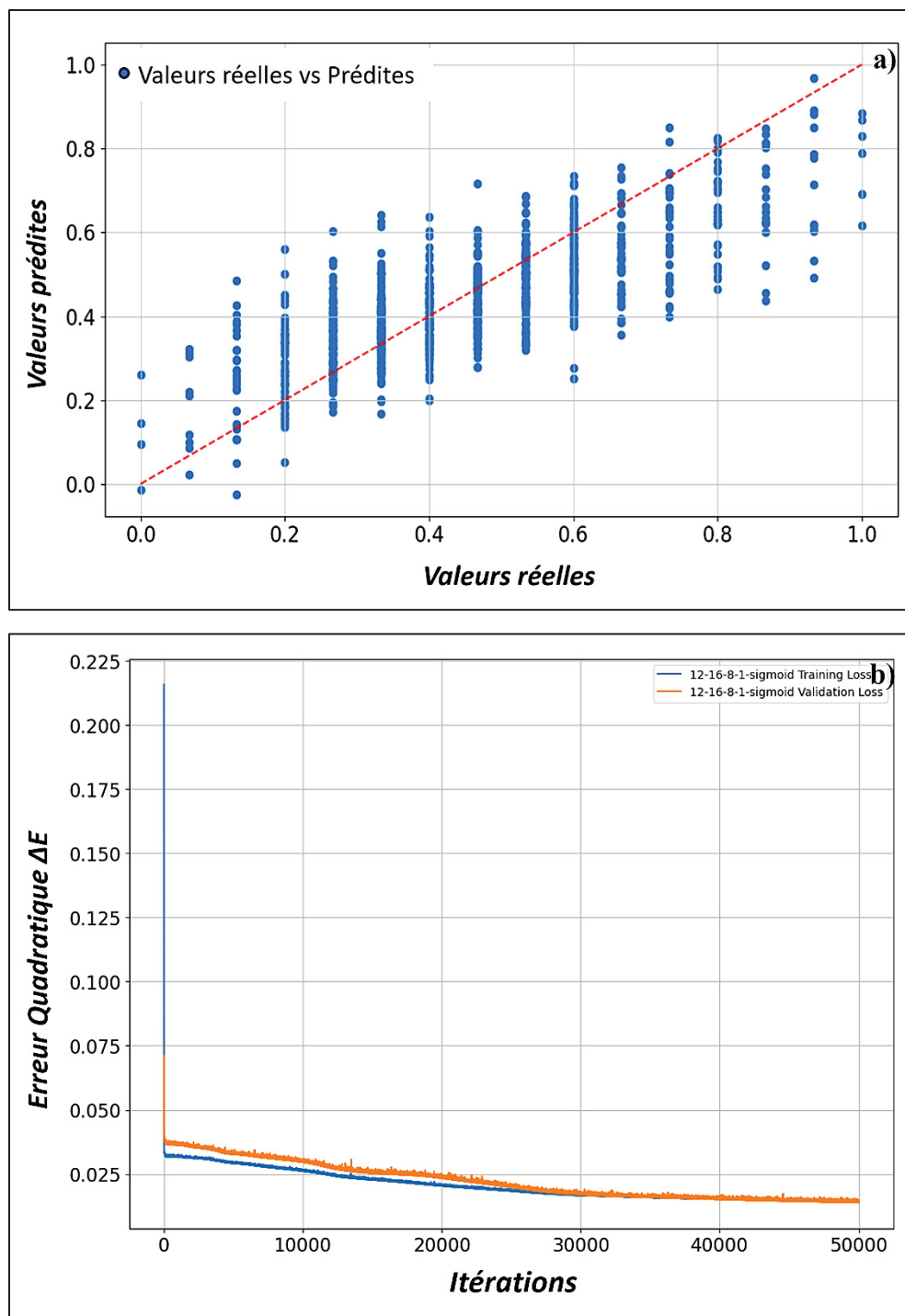


Figure 3-5 (a) Nuage de points pour la teneur finale en phosphore de l'acier, prédite par le modèle ANN\_16-8-sigmoïde (modèle 4) et mesurée, et (b) courbes d'apprentissage pendant l'entraînement et la validation du modèle

Les courbes d'apprentissage fournissent des informations sur la performance du modèle lors de l'entraînement. Comme illustré dans la figure 3-5(b), les deux courbes présentent une tendance similaire de diminution progressive, indiquant une réduction de la perte au fil du temps. Il est important de noter que ces courbes jouent un rôle crucial dans l'évaluation de l'efficacité d'un modèle d'apprentissage automatique. Une diminution des pertes d'entraînement et de validation indique un apprentissage efficace et une généralisation robuste aux données non vues.

Le tableau 3-4 présente la valeur de la fonction de perte et les métriques d'évaluation du modèle ANN\_16-8-sigmoid pour 12 paramètres. Il comprend 2 couches cachées et 24 neurones. Le MSE a été calculé à 0,0144. Le RMSE, R et  $R^2$  ont été calculés à 0,122, 77,8% et 61%, respectivement.

Tableau 3-4 Récapitulatif du modèle ANN\_16-8-sigmoid (Modèle 4) pour 12 paramètres

Architecture	16-8-sigmoid
MSE	0,0144
RMSE	0,122
R	77,8%
$R^2$ (test)	61%

De plus, le nombre de paramètres d'entrée a été réduit de 12 à 10. Les paramètres T\_Sou et CaO ont été exclus car T\_Sou présentait très peu de variation avec la teneur en phosphore final de l'acier (Figure 3-2), et CaO ne présentait que deux valeurs distinctes (Figure 3-1). La raison derrière cette décision était d'éviter que ces paramètres n'introduisent du bruit dans le modèle et réduisent potentiellement sa capacité prédictive. Cet ajustement permet de comprendre comment la simplification du modèle impacte sa précision et sa généralisation à partir des données d'entrée. La figure 3-6 (a) illustre le nuage de points pour la teneur en phosphore final de l'acier, prédite à partir du modèle ANN\_16-8-sigmoid (Modèle 4) pour 10 paramètres, ainsi que ses valeurs mesurées, et ses courbes d'apprentissage.

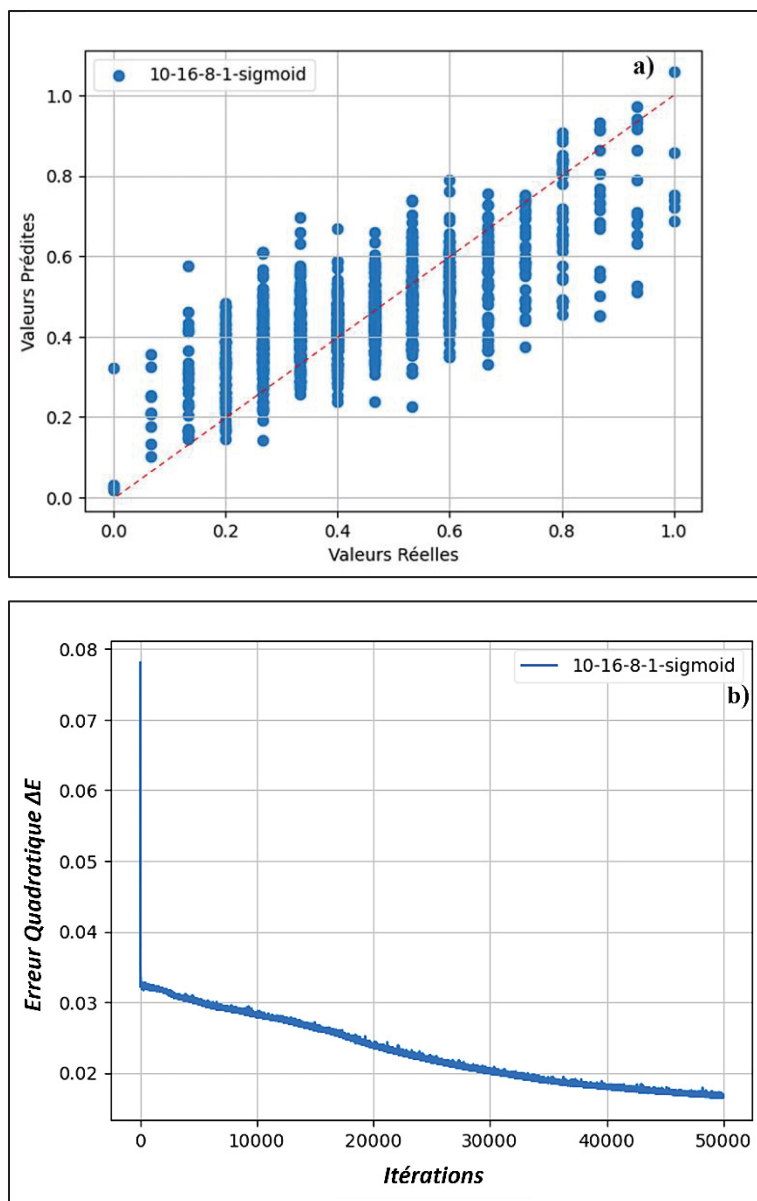


Figure 3-6 (a) Nuage de points pour la teneur finale en phosphore de l'acier, prédite par le modèle ANN\_16-8-sigmoïde (modèle 4) pour 10 paramètres, comparée aux valeurs mesurées, et (b) courbes d'apprentissage pendant l'entraînement du modèle

Le tableau 3-5 présente la valeur de MSE et les métriques d'évaluation du modèle ANN\_16-8-sigmoid (Modèle 4) pour 10 paramètres. Le passage de 12 à 10 paramètres d'entrée a entraîné une augmentation des valeurs de MSE de 0,0144 à 0,0167, respectivement. Il semble que bien que les deux paramètres T\_Sou et CaO montrent des corrélations très faibles avec la teneur finale en P de l'acier, la présence de ces paramètres dans le modèle ANN ne crée aucun bruit.

Il est important de noter que la perte (MSE) mesure l'erreur entre les valeurs prédites et réelles. Une perte plus faible indique une meilleure performance du modèle. Bien que ces valeurs soient encourageantes, elles ne sont pas encore optimales. En général, réduire la perte MSE en dessous de 1 % est souhaitable pour garantir une meilleure précision du modèle.

Tableau 3-5 Récapitulatif du modèle ANN\_16-8 (modèle 4) avec 10 paramètres d'entrée

Architecture	16-8-sigmoid
<b>MSE</b>	0,016
<b>RMSE</b>	0,126
<b>R</b>	73,94%
<b>R<sup>2</sup></b>	54,68%

### 3.7 Étapes d'optimisation de modèle ANN

Dans les premières étapes, les hyperparamètres ont été ajustés. Deux nouvelles architectures, 144-256-64-sigmoid (Modèle 5) et 128-128-128-64-sigmoid (Modèle 6), ont été évaluées pour 12 paramètres. Après avoir identifié les hyperparamètres optimaux, l'ensemble de données d'entraînement a été fusionné avec l'ensemble de données de validation. Le modèle a été retravaillé en utilisant 80% de l'ensemble de données total, tandis que les 20% restants ont été réservés aux tests. Ces étapes d'optimisation seront détaillées ci-dessous.

#### 3.7.1 Évolution des hyperparamètres -Étape 1 (Modèle 5)

La figure 3-7 montre le nuage de points pour la teneur finale en phosphore de l'acier, prédite par le modèle ANN\_144-256-64-sigmoid (Modèle 5) par rapport aux données mesurées (les données ont été dénormalisées) et ses courbes d'apprentissage. Comme le montre la figure 3-7(a), la tendance générale montre que le modèle prédit raisonnablement bien les valeurs mesurées de phosphore, avec une certaine variance qui pourrait être explorée pour améliorer le modèle. Le coefficient de corrélation calculé est de 86,6%.

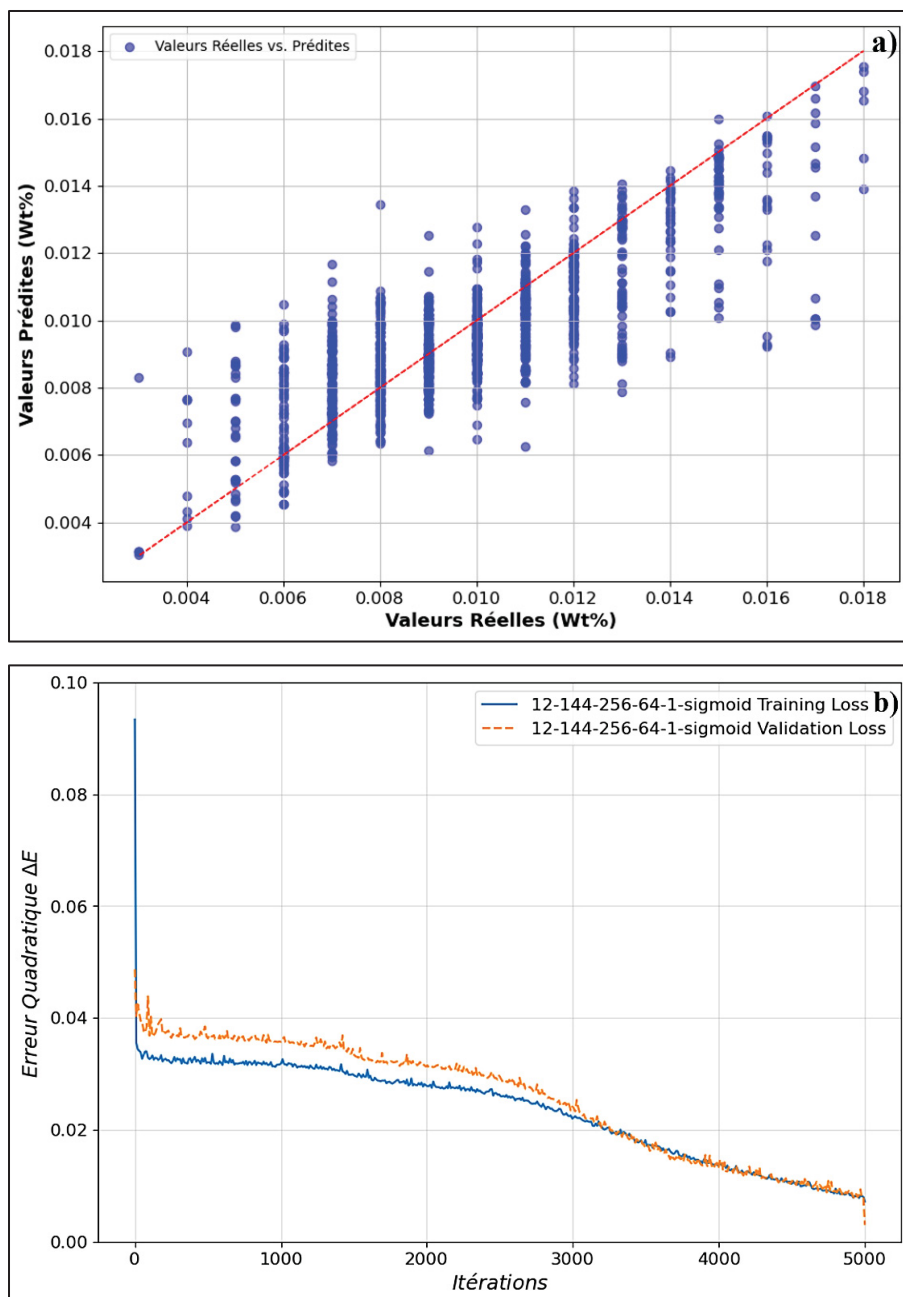


Figure 3-7 (a) Nuage de points représentant la teneur finale en phosphore de l'acier, prédite par le modèle ANN\_144-256-64-sigmoïde (modèle 5) et les valeurs mesurées, et (b) courbes d'apprentissage pendant l'entraînement et la validation du modèle

La figure 3-7(b) illustre les courbes d'apprentissage pour les ensembles d'entraînement et de validation du Modèle 5 (ANN\_144-256-64-sigmoid). La perte d'entraînement (la ligne bleue) commence à un niveau d'erreur plus élevé et diminue progressivement, ce qui indique que le

modèle s'améliore et apprend de l'ensemble d'entraînement au fil des itérations. La perte de validation (la ligne orange) suit une tendance similaire à celle de la perte d'entraînement, commençant à un niveau d'erreur légèrement supérieur et diminuant également avec le temps.

La figure 3-7(b) suggère que le modèle généralise bien sur des données non vues pendant l'entraînement. La convergence des deux lignes indique que le modèle ne souffre pas de surapprentissage significatif, car la perte de validation suit de près la perte d'entraînement. La diminution continue de l'erreur de validation suggère que le modèle devient de plus en plus précis dans ses prédictions sur les données de validation. Le Modèle 5 semble bien converger vers une solution optimale, indiquant une bonne capacité du modèle à apprendre davantage (par exemple, via une augmentation du nombre d'époques) et à généraliser à partir des données fournies.

Le tableau 3-6 présente la valeur de la fonction de perte (MSE) et les métriques d'évaluation du Modèle 5. Il comprend 3 couches cachées et 464 neurones. Le MSE a été calculé à 0,0097. Le RMSE, R et  $R^2$  ont été calculés à 0,0985, 86,6 et 75%, respectivement.

Tableau 3-6 Récapitulatif du modèle ANN\_144-256-64-sigmoid (Modèle 5) pour 12 paramètres

Architecture	144-256-64-sigmoid
MSE	0,0097
RMSE	0,0985
R	86,6%
$R^2$	75%

### 3.7.2 Évolution des hyperparamètres - Étape 2 (Modèle 6)

La figure 3-8 montre le nuage de points pour la teneur finale en phosphore de l'acier, prédite par le modèle ANN\_128-128-128-64-sigmoid (Modèle 6) comparée aux données mesurées, ainsi que ses courbes d'apprentissage (les données ont été dénormalisées). La ligne de régression, comme illustré dans la figure 3-8(a), montre une forte relation linéaire entre les



valeurs mesurées et prédites, indiquée par un coefficient de corrélation très élevé de 99,96%. Cela peut être interprété comme une indication que le Modèle 6, avec l'architecture spécifiée 128-128-128-64-sigmoid, prédit très précisément les valeurs réelles. De plus, la relation linéaire directe entre les valeurs prédites et réelles montre que le modèle capture efficacement la tendance des données sans sous-estimation ou surestimation significative.

Comme on le voit dans la figure 3-8(b), la courbe d'entraînement (ligne bleue) et la courbe de validation (ligne orange) du Modèle 6 (ANN\_128-128-128-64-sigmoid) montrent une chute rapide de la perte au début des itérations, ce qui est typique dans les premières étapes de l'entraînement. Au fil des itérations, le modèle apprend rapidement les caractéristiques générales des données. Le fait que les courbes de perte d'entraînement et de validation convergent vers des valeurs similaires indique que le Modèle 6 ne souffre pas d'un surapprentissage significatif et possède une bonne capacité de généralisation.

La valeur de la fonction de perte (MSE) et les mesures d'évaluation pour le modèle 6 sont présentées dans le tableau 3-7. Ce modèle comprend 4 couches cachées et 448 neurones. Le MSE a été calculé à  $3,027177E-05$ . Le RMSE, le coefficient de corrélation  $R$ , et le coefficient de détermination  $R^2$  ont été évalués à 0,0055, 99,96 % et 99,93 %, respectivement.

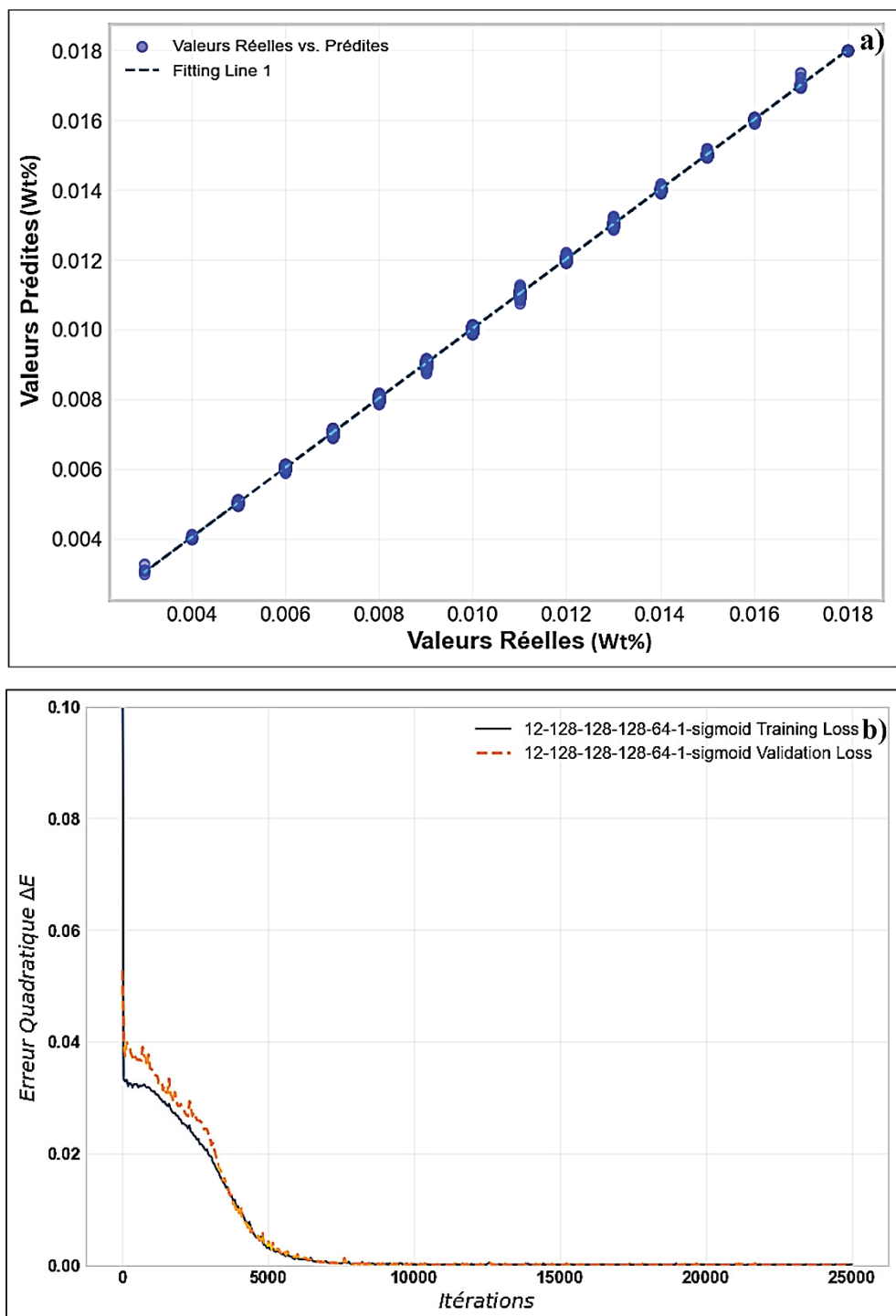


Figure 3-8 (a) Nuage de points montrant la teneur finale en phosphore de l'acier, prédite par le modèle ANN\_128-128-128-64-sigmoïde (Modèle 6) et les valeurs mesurées, et (b) courbes d'apprentissage pendant l'entraînement et la validation du modèle

Tableau 3-7. Récapitulatif du modèle ANN\_128-128-128-64-sigmoid (Modèle 6) pour 12 paramètres

Architecture	128-128-128-64-sigmoid
<b>MSE</b>	3,027177E-05
<b>RMSE</b>	0,0055
<b>R<sup>2</sup></b>	99,93%
<b>R</b>	99,96%

### 3.7.3 Modification de l'ensemble des données d'entraînement

Comme dernière étape de l'optimisation du modèle ANN, le Modèle 6 avec la même architecture que ANN\_128-128-128-64-sigmoid a été adopté, suivi de la fusion de l'ensemble de validation avec l'ensemble d'entraînement et de la reformation du modèle avec un ensemble de données plus important. À l'origine, l'ensemble de données total avait été divisé en trois ensembles : 60 % pour l'entraînement, 20 % pour la validation et 20 % pour les tests. Pour la dernière étape d'optimisation, l'ensemble de données total a été divisé en deux ensembles : un ensemble d'entraînement (80 %) et un ensemble de test (20 %). Cette approche garantit que le modèle généralise bien au-delà des données d'entraînement. Enfin, le modèle a été testé avec l'ensemble de test pour évaluer ses performances. Les résultats sont discutés ci-dessous.

La Figure 3-9 illustre le nuage de points entre la teneur finale en phosphore mesurée de l'acier et les valeurs prédites par le modèle ANN\_128-128-128-64-sigmoid (Modèle 6) avec 12 paramètres d'entrée, ainsi que ses courbes d'apprentissage. Le bon alignement des valeurs réelles et prédites avec la ligne de régression (Figure 3-9(a)) suggère que le modèle fonctionne bien. De plus, les courbes d'entraînement et de validation convergent bien au fil de quelques itérations (Figure 3-9(b)), ce qui indique qu'il n'y a pas de surapprentissage des données. Globalement, le graphique indique que le modèle a appris efficacement et peut généraliser à des données non vues.

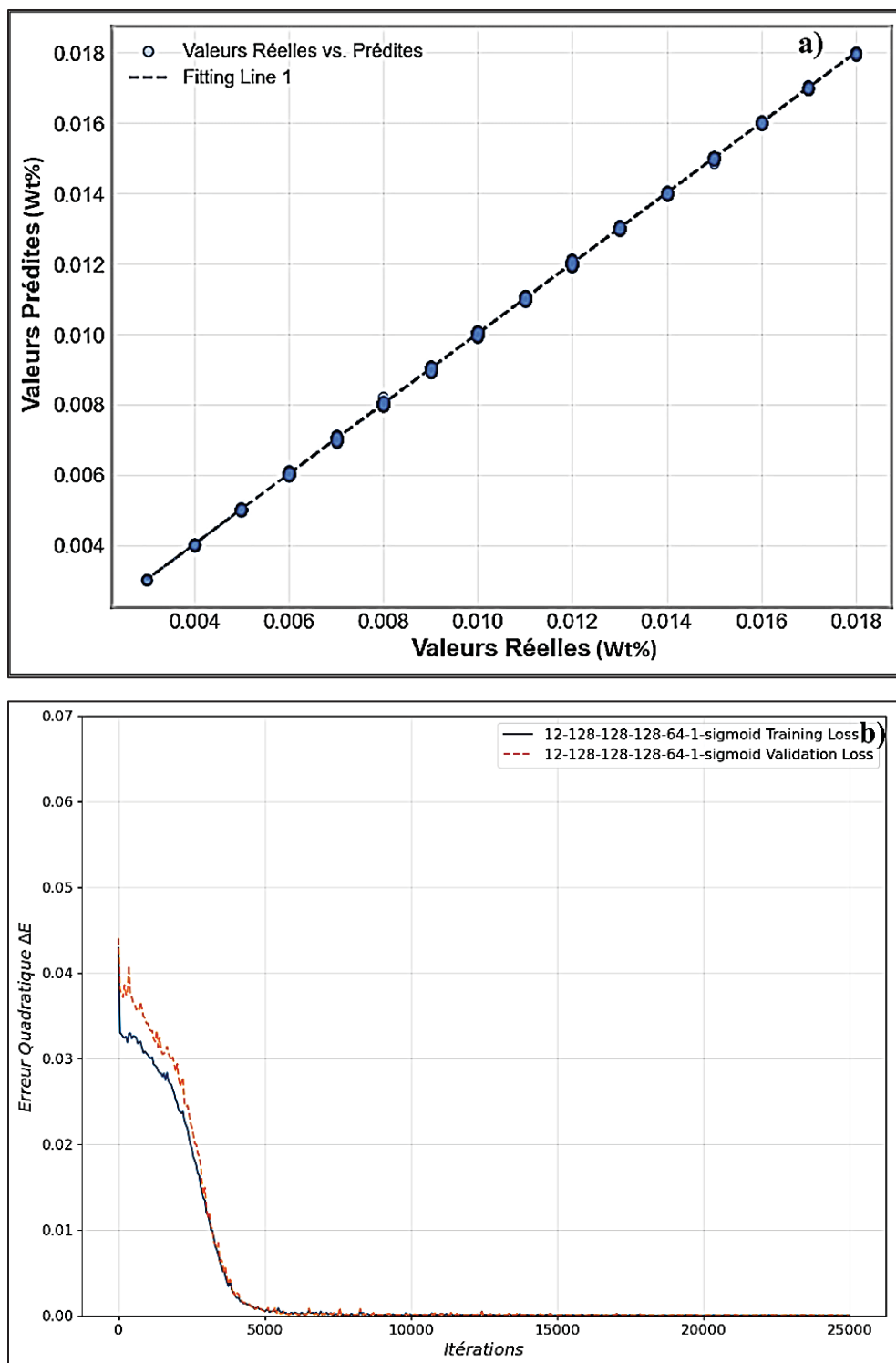


Figure 3-9 (a) un nuage de points illustrant la teneur finale en phosphore de l'acier, prédite par le modèle ANN\_128-128-128-64-sigmoïde (Modèle 6) par rapport aux valeurs mesurées, et (b) les courbes d'apprentissage durant l'entraînement et la validation du modèle, avec une division des données de 80 % pour l'entraînement et 20 % pour le test

La valeur de la fonction de perte (MSE) et les métriques d'évaluation du Modèle 6 optimisé (avec la même architecture que le Modèle 6 : 128-128-128-64-sigmoïde) après avoir divisé les données totales en 80 % pour l'entraînement et 20 % pour les tests se sont améliorées par rapport au Modèle 6 entraîné avec seulement 60 % des données totales. Le MSE du Modèle 6 optimisé a été calculé à  $1,635824E-05$ . Le RMSE, le coefficient de corrélation R et le coefficient de détermination  $R^2$  du modèle ont été évalués à 0,004, 99,98 % et 99,96 %, respectivement. Le tableau 3-8 résume les paramètres d'évaluation des modèles ANN développés dans ce travail.

Tableau 3-7 Récapitulatif des métriques des modèles de réseaux de neurones

Métriques	Modèle 4	Modèle 5	Modèle 6	Modèle 6 Optimisé
MSE	0,0148	0,0097	0,00003	0,000016
RMSE	0,1216	0,0985	0,0055	0,0049998
R	77,8%	86,6%	99,96%	99,98%
$R^2$	61%	75%	99,93%	99,96%

### 3.8 Comparaison du modèle ANN actuel (modèle 6 optimisé) avec les modèles développés antérieurement

Dans cette étude, plusieurs modèles d'apprentissage automatique ont été développés pour prédire la teneur en phosphore de l'acier à la fin d'un four à arc électrique à base de ferraille. Au cours des dernières années, plusieurs recherches ont été publiées sur l'application d'outils d'apprentissage automatique pour prédire la teneur en phosphore de l'acier produit par différentes méthodes. Le tableau 3-8 compare ces modèles développés pour prédire la teneur finale en P de l'acier.

Tableau 3-8 Récapitulation comparative des modèles antérieurs et du modèle proposé

Références	Procédé	Modèle(s) utilisé(s)	Paramètres d'entrée	Nombre de données	Métriques d'évaluation
<b>Ce travail (modèle 6 optimisé)</b>	EAF à base de ferraille	ANN	12	1763 (1005)	$R^2$ : 99,96%
<b>Zhang et al. (2023)</b>	Convertisseur à Oxygène	GBR, RF	16	13000	R : 59,9% 60,8%
<b>Zou et al. (2022)</b>	EAF	BPNN	10	1250 (580)	Taux de réussite : 87,78% (for $\pm 0,004$ ) 75,56% ( $\pm 0,003$ )
<b>He and Zhang (2018)</b>	Convertisseur à Oxygène	PCA and BPNN	18 (7 avec PCA)	1978	R : 79%
<b>Laha et al. (2015)</b>	Four à Réverbère	RF, ANN, DENFIS, SVR	10	54	$R^2$ : 82% pour (SVR)

Dans ce travail, plusieurs modèles d'apprentissage automatique ont été proposés, incluant des modèles d'apprentissage automatique classique (RF et SVM) et d'apprentissage profond (ANN). Les résultats obtenus concernant la précision de la prédiction de la teneur en phosphore à la fin du procédé varient considérablement. Ces variations dépendent du type de modèle, de son architecture et des hyperparamètres utilisés. Le modèle final (référé au modèle 6 optimisé) a été optimisé après plusieurs essais, notamment en modifiant l'architecture, la taille du lot et le nombre d'époques, afin d'obtenir une meilleure précision prédictive. Ce modèle a atteint un coefficient de corrélation  $R$  de 99,98 % et un coefficient de détermination  $R^2$  de 99,96 %.

Une étude similaire a été réalisée sur la prédiction de la teneur en phosphore au point final dans le procédé d'élaboration de l'acier BOF, sur la base de l'ACP et du BPNN. Le résultat indique que le modèle présente un coefficient de corrélation  $R$  de 79 % (He & Zhang, 2018). Zou et al. ont proposé un modèle de réseau de neurones à rétropropagation (BPNN) avec une optimisation périodique des données pour prédire la teneur en phosphore à la fin du procédé de fabrication de l'acier au four à arc électrique (EAF). Le four fonctionne avec du métal chaud et de la ferraille. En comparaison avec les données de production pratiques, les résultats montrent que le taux de réussite du modèle optimisé est de 87,78 % lorsque l'erreur de prédiction est de  $\pm 0,004$  et de 75,56 % lorsque l'erreur est de  $\pm 0,003$  de la teneur en phosphore (Zou et al., 2022).

Dans le but d'améliorer l'efficacité de la déphosphoration dans le procédé sidérurgique BOF, cinq modèles étaient employés pour prédire la teneur en phosphore au point final. Parmi les modèles qui présentent la meilleure précision prédictive, on trouve la régression par amplification de gradient GBR et RF, avec un coefficient de corrélation de 59,9 % et 60,8 % respectivement (Zhang et al., 2023). Lors d'une autre étude, les modèles RF, ANN, DENFIS et SVR ont été utilisés pour évaluer la performance de l'acier dans le procédé de fabrication de l'acier à cœur ouvert (Laha et al., 2015). Une expérience comparative a été menée sur la base de données réelles. Les résultats ont montré que le SVR était le plus performant des quatre algorithmes d'apprentissage, avec un  $R^2$  de 82 %.

Comme documenté dans le Tableau 3-8, cette étude représente la première tentative de concevoir un modèle d'intelligence artificielle pour prédire la teneur finale en phosphore (P) de l'acier dérivé d'un four à arc électrique (EAF) à base de ferraille. Notamment, il s'agit du seul modèle de réseau de neurones artificiels (ANN) spécialement conçu pour prédire la teneur finale en P dans l'acier issu de la voie de fabrication d'acier par EAF. Démontrant la plus haute précision et capacité de prédiction, le ANN développé atteint une valeur de  $R^2$  exceptionnelle de 99,98%, comme expliqué dans la section 3.6.3.



## CHAPITRE 4

### LA DÉPHOSPHORATION DE L'ACIER À L'AIDE DES CALCULS THERMOCHIMIQUES

Le modèle de réseau de neurones artificiels (ANN) développé dans ce travail et présenté au chapitre 3 a bien prédit la teneur finale en phosphore de l'acier issu d'un four à arc électrique (EAF) à l'échelle industrielle, sur la base d'un ensemble de paramètres opérationnels en entrée. Cependant, ce modèle, comme les modèles ANN en général, est souvent considéré comme un modèle "boîte noire" car il fournit des prédictions sans révéler explicitement les relations sous-jacentes entre les variables d'entrée et les sorties. Ce manque d'interprétabilité rend difficile la compréhension des mécanismes physico-chimiques spécifiques qui conduisent à la déphosphoration de l'acier. Comprendre les mécanismes causaux sous-jacents au procédé complexe de déphosphoration est crucial pour une intervention précise et efficace ainsi que pour l'optimisation du procédé. Plus précisément, la composition du laitier, un sous-produit de la fabrication de l'acier, est importante pour l'élimination du phosphore de l'acier. Le modèle ANN considère comment les différents matériaux ajoutés au EAF affectent la composition du laitier et, par conséquent, l'élimination du phosphore. Cependant, il ne montre pas directement comment la composition du laitier influence l'élimination du phosphore, rendant difficile la suggestion de modifications au procédé de fabrication de l'acier. De plus, la composition chimique du laitier n'est généralement pas mesurée directement, et ces données ne sont pas toujours disponibles dans l'industrie. En général, seules les données historiques sur la composition de l'acier sont accessibles. Par conséquent, il est nécessaire d'utiliser un autre outil capable d'expliquer comment les additifs affectent la composition du laitier et, par la suite, l'élimination du phosphore. Dans cette étude, nous avons utilisé les calculs thermochimiques, pour mieux comprendre comment les paramètres d'entrée sont liés à l'élimination du phosphore. Ce chapitre aborde ces résultats de manière approfondie.

## **4.1 Teneur finale en phosphore de l'acier en fonction de variables opérationnelles**

### **4.1.1 Relation entre la teneur finale en P de l'acier et les paramètres d'entrée du procédé**

Dans cette section, les données d'entrée provenant de différentes coulées (c'est-à-dire, l'ensemble de données collecté pour l'entraînement du modèle ANN à l'exception des paramètres de temps, de consommation d'énergie et de température après l'élimination du laitier) ont été utilisées pour calculer la teneur en P de l'acier à l'aide du logiciel thermochimique FactSage. La composition du laitier a également été déterminée en fonction des additifs utilisés dans le four électrique à arc (EAF), démontrant l'impact de la chimie du laitier sur la teneur finale en P de l'acier. La figure 4-1 présente un graphique à barres illustrant la corrélation Pearson entre diverses entrées opérationnelles et les niveaux de phosphore (P) tels que calculés. Les valeurs de corrélation vont de -0,6 et 0,4. Comme discuté au chapitre 3, ce coefficient mesure la force et la direction de la corrélation linéaire entre les paramètres opérationnels et la teneur en P. Une corrélation positive indique qu'à mesure qu'un paramètre d'entrée augmente, la teneur en P de l'acier augmente également, tandis qu'une corrélation négative suggère qu'à mesure qu'un paramètre d'entrée augmente, la teneur en P de l'acier diminue.

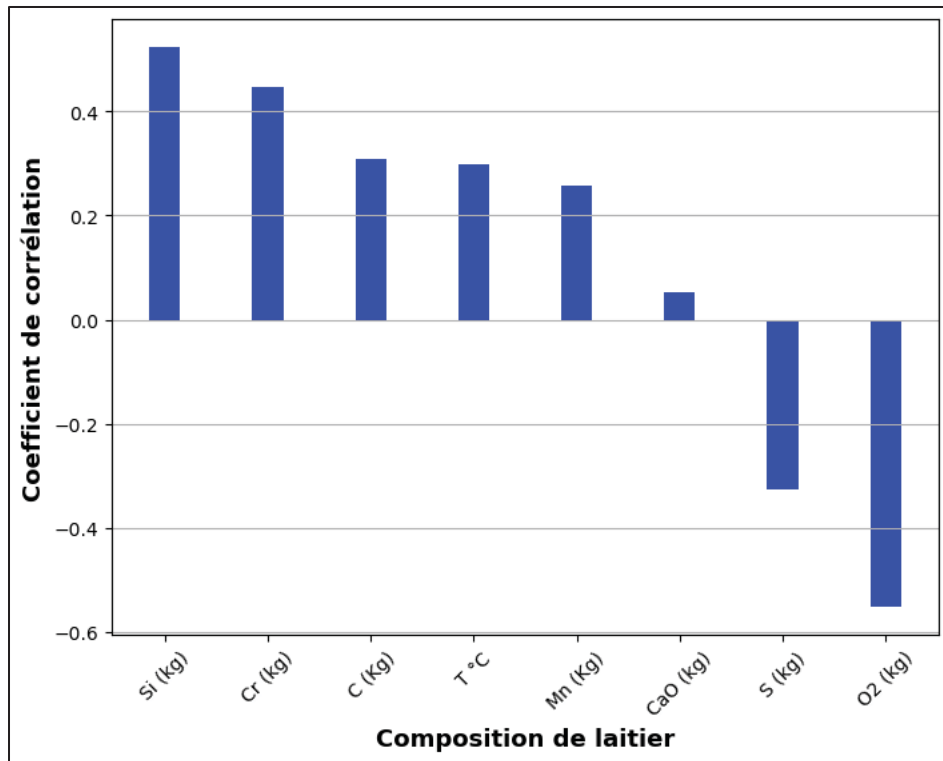


Figure 4-1 Corrélations entre le paramètre cible (la teneur finale en P de l'acier) et les paramètres d'entrée du procédé, calculées à partir des données d'entrée du procédé

On observe des corrélations négatives significatives entre l'O<sub>2</sub> injecté (kg) et le S (kg) de la ferraille, suggérant qu'une augmentation de ces paramètres pourrait entraîner une diminution de la teneur finale en P de l'acier. Le Si (kg) et le Cr (kg) de la ferraille présentent une forte corrélation positive avec la teneur en P, ce qui suggère qu'une augmentation de ces paramètres pourrait entraîner une augmentation de la teneur finale en P de l'acier. Il existe également une corrélation positive entre T (°C), et C (kg) et Mn (kg) de la ferraille, mais avec des valeurs légèrement inférieures à celles de Si (kg) et de Cr (kg). De plus, la CaO ajoutée montre également une légère corrélation positive avec la teneur finale en P de l'acier. La figure 4-2(a et b) montre la variation de la teneur en phosphore final de l'acier pour deux variables d'entrée : la quantité de l'O<sub>2</sub> injectée et la teneur en S de la ferraille (en kg). Comme le montre la figure On observe des corrélations négatives significatives entre l'O<sub>2</sub> injecté (kg) et le S (kg) de la ferraille, suggérant qu'une augmentation de ces paramètres pourrait entraîner une diminution de la teneur finale en P de l'acier. Le Si (kg) et le Cr (kg) de la ferraille présentent une forte

corrélation positive avec la teneur en P, ce qui suggère qu'une augmentation de ces paramètres pourrait entraîner une augmentation de la teneur finale en P de l'acier. Il existe également une corrélation positive entre T (°C), et C (kg) et Mn (kg) de la ferraille, mais avec des valeurs légèrement inférieures à celles de Si (kg) et de Cr (kg). De plus, la CaO ajoutée montre également une légère corrélation positive avec la teneur finale en P de l'acier. La figure 4-2(a et b) montre la variation de la teneur en phosphore final de l'acier pour deux variables d'entrée : la quantité de l'O<sub>2</sub> injectée et la teneur en S de la ferraille (en kg).

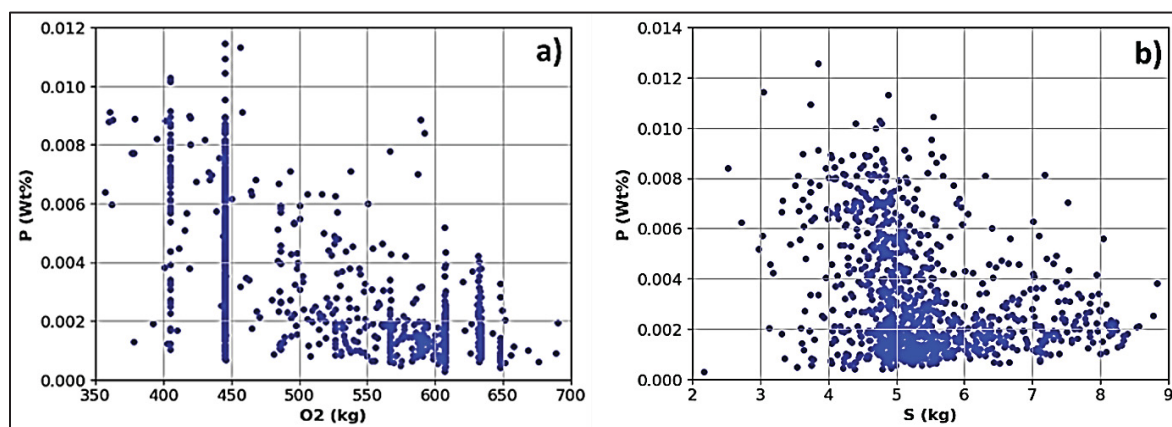


Figure 4-2 Variation de la teneur finale en P de l'acier en fonction de la masse d'O<sub>2</sub> injectée et de la teneur en S de la ferraille, calculée à partir des données d'entrée du procédé

La figure 4-3(a et b) présente la variation de la teneur en phosphore final de l'acier pour deux variables d'entrée : la masse de Si et de Cr dans la ferraille (en kg). Comme on peut le voir sur la figure 4-3(a), la masse de Si varie de 70 à 140 kg tandis que la teneur en P de l'acier (en % en poids) varie de 0,001 % à 0.010 % en poids. Les points de données sont dispersés, avec une concentration plus dense entre 90 et 120 kg de Si. La teneur en P semble augmenter légèrement avec l'augmentation de la teneur en Si de la ferraille, mais la relation n'est pas fortement linéaire et présente une variabilité considérable. La figure 4-3(b) montre que la teneur en phosphore semble augmenter légèrement avec l'augmentation de la teneur en Cr de la ferraille, mais la relation n'est pas fortement linéaire et présente une variabilité considérable. L'absence de tendance claire et forte entre la teneur en P finale de l'acier et la teneur en Si et en Cr de la ferraille indique que la relation entre la masse de ces éléments et la concentration

en P peut ne pas être linéaire ou peut être influencée par d'autres variables non représentées dans ces graphiques.

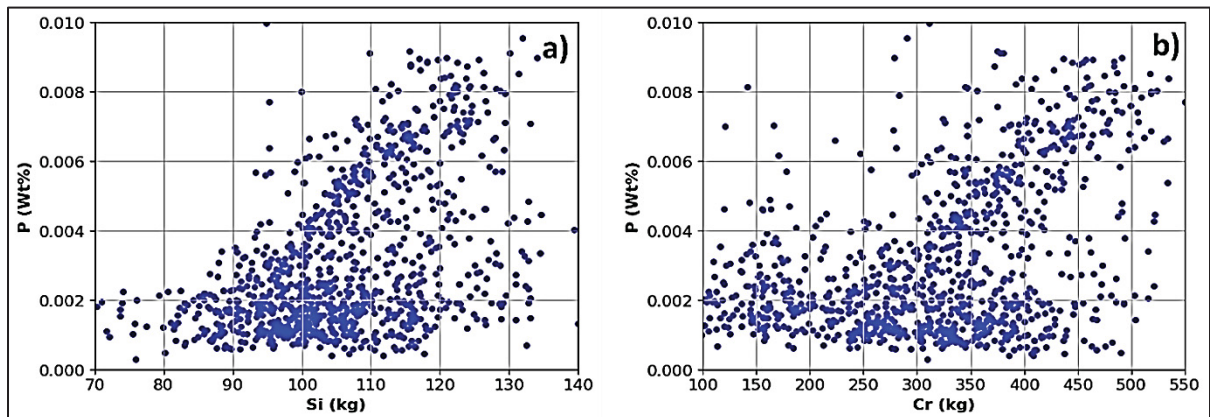


Figure 4-3 Variation de la teneur finale en P de l'acier en fonction de la teneur en Si et de la teneur en S de la ferraille, calculée par FactSage à partir des données d'entrée du procédé

#### 4.1.2 Relation entre la teneur finale en P de l'acier et la composition chimique du laitier

La figure 4-4 représente les coefficients de corrélation de Pearson entre la teneur finale en P de l'acier et la composition du laitier, calculés à partir des données d'entrée du procédé. Les coefficients de corrélation entre les composants du laitier et la teneur finale en P de l'acier sont résumés ci-dessous :

- **Wt% SiO<sub>2</sub>** : Corrélation positive forte, environ 0,66.
- **Wt% CaO** : Corrélation positive moyenne, environ 0,54.
- **Wt% FeO** : Corrélation négative modéré, environ -0,53.
- **Wt% Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>** : Corrélation positive faible, autour de 0,17.
- **Wt% MnO** : Corrélation négative modéré, environ -0,42

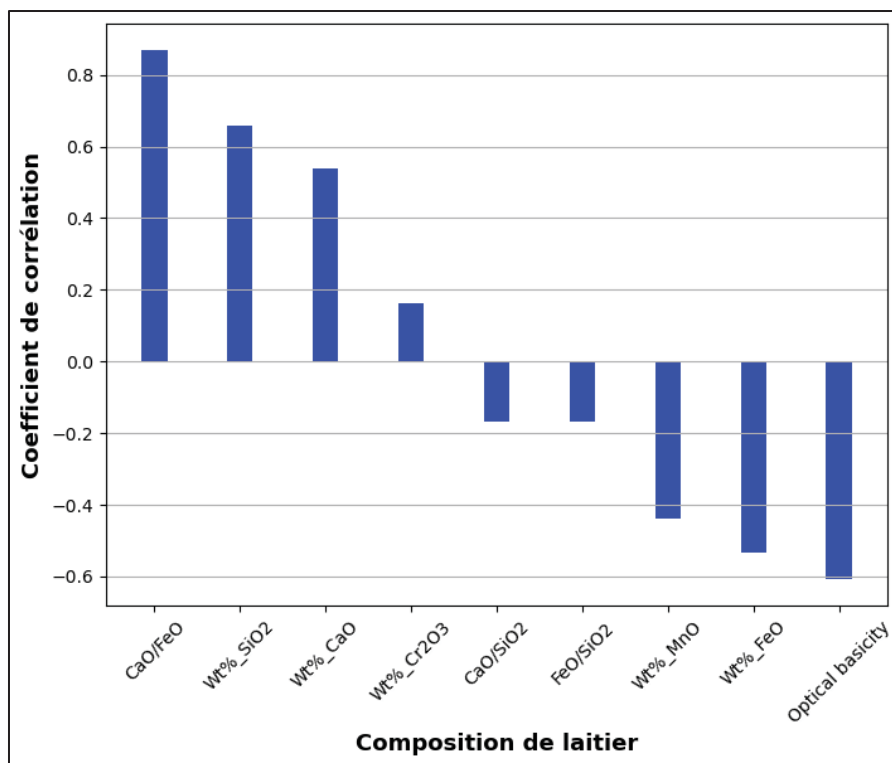


Figure 4-4 Corrélations entre le paramètre cible (la teneur finale en P de l'acier) et la composition chimique du laitier, calculées à partir des données d'entrée du procédé

En outre, certains rapports de composition dans le laitier ont également été calculés et présentés ci-dessous :

- **CaO/FeO** : Corrélation positive forte, environ 0,87.
- **Basicité optique** : Corrélation négative forte, environ -0,61.
- **FeO/SiO<sub>2</sub>** : Corrélation négative faible, environ -0,17.
- **CaO/SiO<sub>2</sub>** : Corrélation négative faible, environ -0,17.

La basicité optique ( $\Lambda$ ) d'un laitier, qui inclut divers composants d'oxyde, peut être définie à l'aide de l'équation (4-1) :

$$\Lambda = \sum \frac{m_i x_i}{\sum m_i x_i} \Lambda_i \quad (4-1)$$

Dans laquelle  $m_i$  représente la quantité d'atomes d'oxygène dans l'oxyde  $i$ , et  $A_i$  désigne la basicité optique théorique de l'oxyde respectif, comme détaillé dans le tableau 4-1.

Tableau 4-1 La basicité optique des oxydes purs Tiré de BERGMAN (1988)

Oxyde	CaO	MgO	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	MnO	FeO	SiO <sub>2</sub>	P <sub>2</sub> O <sub>5</sub>
<b>Basicité optique</b>	1	0,78	0,605	0,59	0,51	0,48	0,4

Les figures 4-5 et 4-6 (a-e) présentent des diagrammes de dispersion qui illustrent les relations entre diverses compositions chimiques du laitier et la teneur en phosphore (P) dans l'acier produit. Ces diagrammes permettent d'observer la distribution des données et d'identifier les tendances ou corrélations potentielles entre les variables étudiées.

Figure 4-5(a) montre la relation entre le pourcentage en poids de CaO (Wt%\_CaO) et la teneur en P en % en poids. Les données indiquent une concentration plus élevée de points dans la partie inférieure de l'axe des y, ce qui suggère que la teneur en P est généralement faible pour la plupart des échantillons. Jusqu'à une valeur de 50% de CaO en poids dans le laitier, la teneur en phosphore varie de 0,0005 à environ 0,004 wt%, indiquant ainsi la limite de saturation en CaO du laitier.

Figure 4-5(b) diagramme illustre la relation entre le pourcentage en poids de SiO<sub>2</sub> (Wt%\_SiO<sub>2</sub>) et la teneur en P en % en poids. Une augmentation de la teneur en SiO<sub>2</sub> du laitier est associée à une augmentation sensible de la concentration de P dans l'acier. Les points de données sont relativement dispersés pour des valeurs faibles de SiO<sub>2</sub> (de 0 à environ 7,5 wt%), ce qui indique une variation de la concentration en P. Cependant, au-delà de 7,5 wt% de SiO<sub>2</sub>, une tendance claire se dessine : la concentration en P augmente avec l'augmentation de la teneur en SiO<sub>2</sub>, atteignant environ 0,011 Wt%.

Figure 4-5(c) montre la relation entre le pourcentage en poids de FeO (wt%\_FeO) dans le laitier d'un four à arc électrique et la distribution du P en % en poids dans l'acier. Le graphique révèle une concentration élevée de points lorsque la masse de FeO est inférieure à 6 wt%,

suggérant que des niveaux bas de FeO sont associés à une rétention accrue ou à une moindre élimination du P. À mesure que le wt% de FeO augmente, la distribution des valeurs de P semble se stabiliser à des niveaux plus bas, indiquant que des niveaux élevés de FeO favorisent la déphosphoration de l'acier. La gestion optimale de la teneur en FeO est donc cruciale pour le contrôle des niveaux de P dans l'acier.

Figure 4-6(d) montre la relation entre le pourcentage en poids de MnO (Wt% MnO) dans le laitier et la concentration de P en % en poids dans l'acier. Les points de données sont principalement dispersés entre 8 et 18 wt% de MnO, avec des concentrations de P variant principalement entre 0,001 et 0,012 wt%. On observe une tendance à des valeurs de P plus faibles aux concentrations extrêmes de MnO. Une concentration modérée de MnO semble être associée à une meilleure déphosphoration, bien que la large dispersion des points indique que d'autres facteurs, tels que la température du four ou la durée du procédé, pourraient également influencer la concentration de P.

Figure 4-6(e) illustre la relation entre la concentration de  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  (Wt%  $\text{Cr}_2\text{O}_3$ ) et la teneur en P dans l'acier. La majorité des données se situe entre 1 et 23 wt% de  $\text{Cr}_2\text{O}_3$ , avec des concentrations de P généralement inférieures à 0,005 wt%. Les points de données montrent une grande variation, avec des niveaux de phosphore atteignant jusqu'à 0,009 wt%. Ainsi, bien que la concentration en  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  semble influencer la déphosphoration, l'effet n'est pas fortement marqué.

Ces analyses montrent que la composition chimique du laitier, en particulier les concentrations en CaO,  $\text{SiO}_2$ , FeO et MnO, joue un rôle significatif dans la déphosphoration de l'acier. Une gestion optimale de ces composants est donc essentielle pour contrôler les niveaux de phosphore dans l'acier produit.



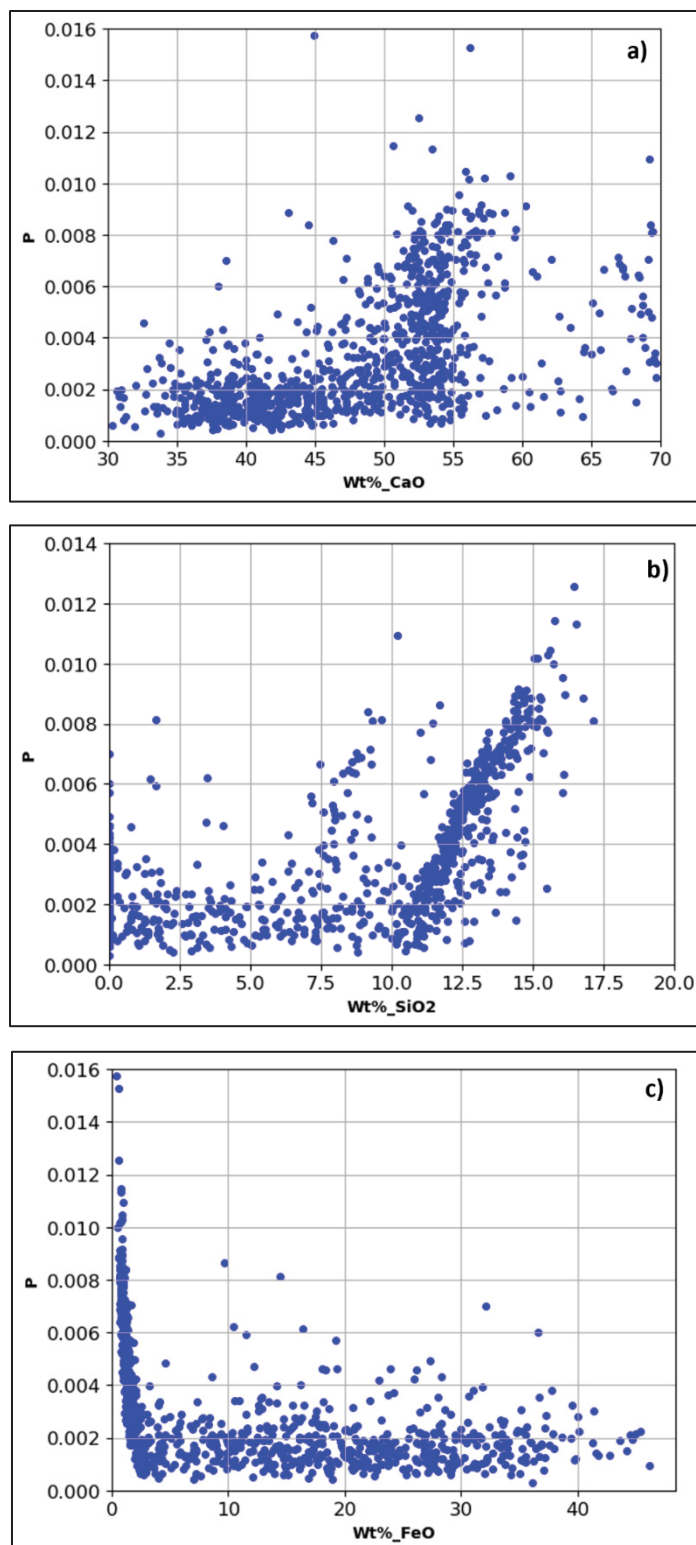


Figure 4-5 Teneur finale en P de l'acier en fonction des composants du laitier, calculées à partir des données d'entrée du procédé

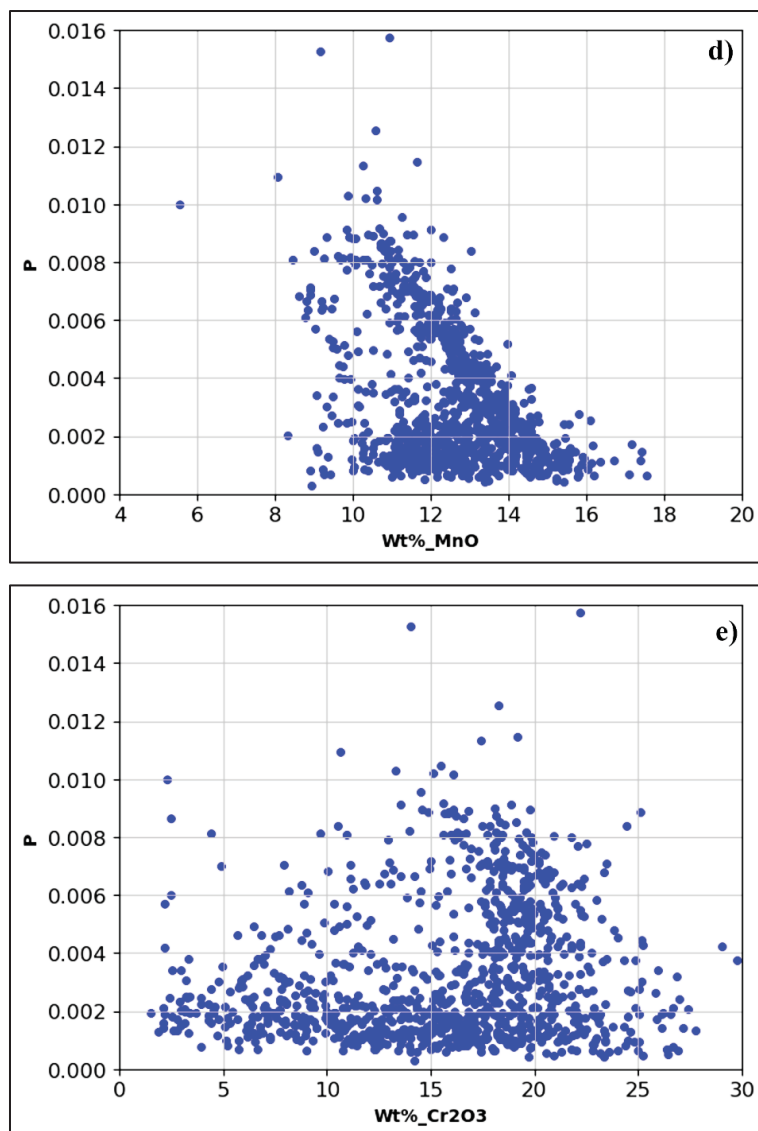


Figure 4-6 Teneur finale en P de l'acier en fonction des composants du laitier, calculées à partir des données d'entrée du procédé (la suite)

Les figures 4-7 et 4-8 (a-d) illustrent la variation de la teneur finale en P de l'acier par rapport à différents ratios compositionnels (en masse) du laitier. Dans la figure 4-7(a), on observe que la teneur en P diminue initialement avec l'augmentation du rapport CaO/FeO jusqu'à atteindre une valeur minimale entre 10 et 20, après quoi le P dans l'acier augmente. En tendance générale, la teneur finale en P de l'acier augmente avec l'augmentation du rapport CaO/FeO, ce qui indique une valeur optimale pour le ratio CaO/FeO pour la meilleure pratique de retrait du P.

La figure 4-7(b) montre la variation du P avec la basicité optique, qui varie entre 0,83 et 1,0, avec la majorité des points de données concentrés entre 0,83 et 0,88, avec une dispersion notable à mesure que le ratio augmente. En outre, la figure 4-8(c) illustre une tendance similaire mais moins forte entre la teneur finale en P de l'acier et le ratio  $\text{CaO/SiO}_2$  (basicité). La basicité du laitier varie largement entre 3 et 14, avec la majorité des points de données concentrés entre 3 et 5. En général, on peut dire que la teneur finale en P de l'acier diminue avec l'augmentation de la basicité du laitier, mais il n'y a pas de tendance claire comme dans la figure 4-7(a). Cela suggère que la basicité a un impact moins direct ou moins prévisible sur la teneur en P de l'acier par rapport à la basicité optique et au ratio  $\text{CaO/FeO}$ .

La distribution du P dans l'acier en fonction du rapport  $\text{FeO/SiO}_2$  dans le laitier de four à arc électrique est illustrée dans la figure 4-8(d). Une tendance notable est que les valeurs élevées de P sont principalement concentrées dans les rapports  $\text{FeO/SiO}_2$  les plus faibles (0-1). À mesure que le rapport  $\text{FeO/SiO}_2$  augmente, la concentration de P dans l'acier tend à diminuer fortement et devient stable pour une large gamme de  $\text{FeO/SiO}_2$  entre 1 et 7. Bien que le coefficient de corrélation entre la teneur en P de l'acier et le rapport  $\text{FeO/SiO}_2$  soit faible (-0,17) l'optimisation de ce rapport pourrait être importante pour améliorer l'élimination du P.

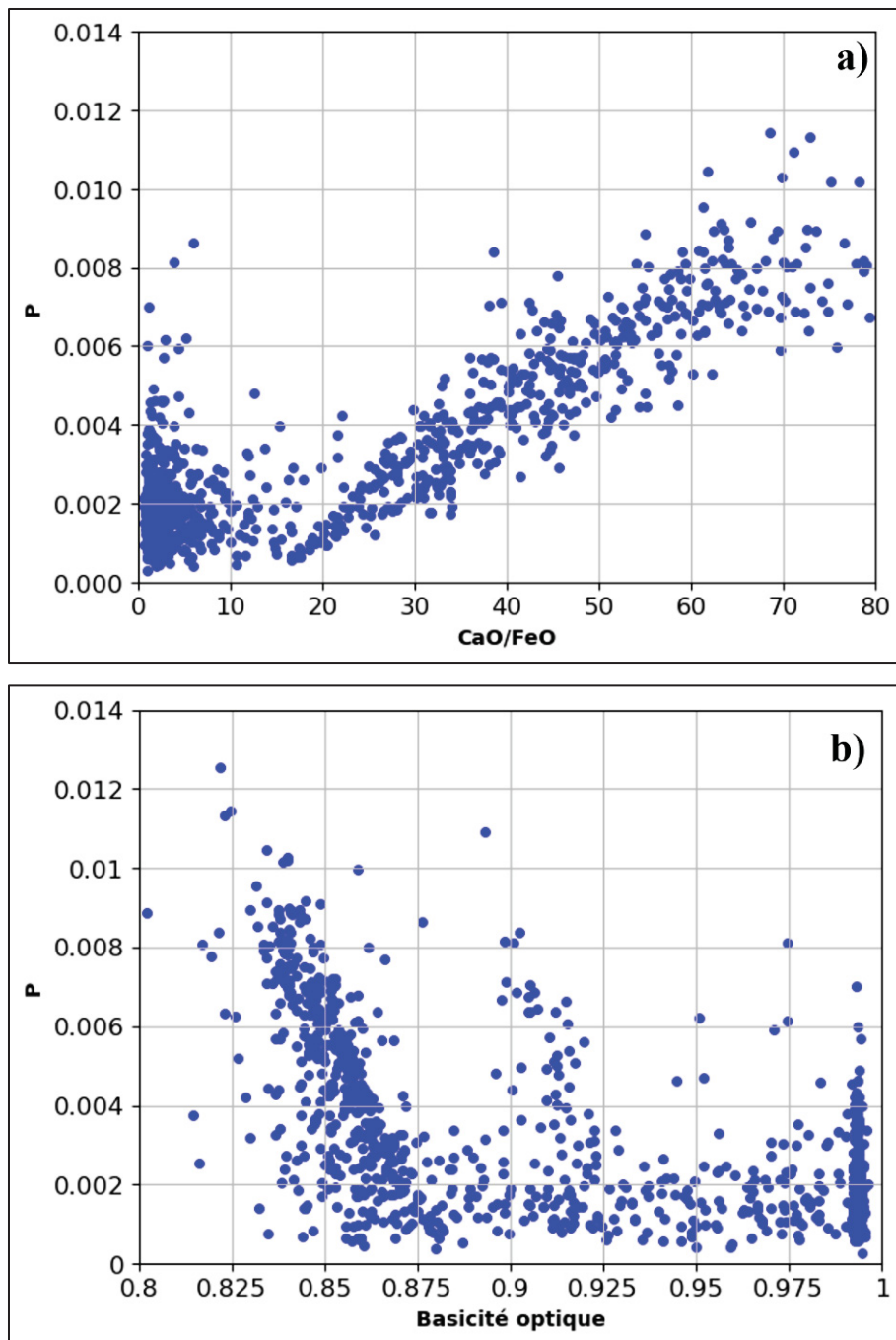


Figure 4-7 Variation de la teneur finale en P de l'acier en fonction (a) du rapport  $\text{CaO/FeO}$ , (b) de la basicité optique, calculées à partir des données d'entrée du procédé

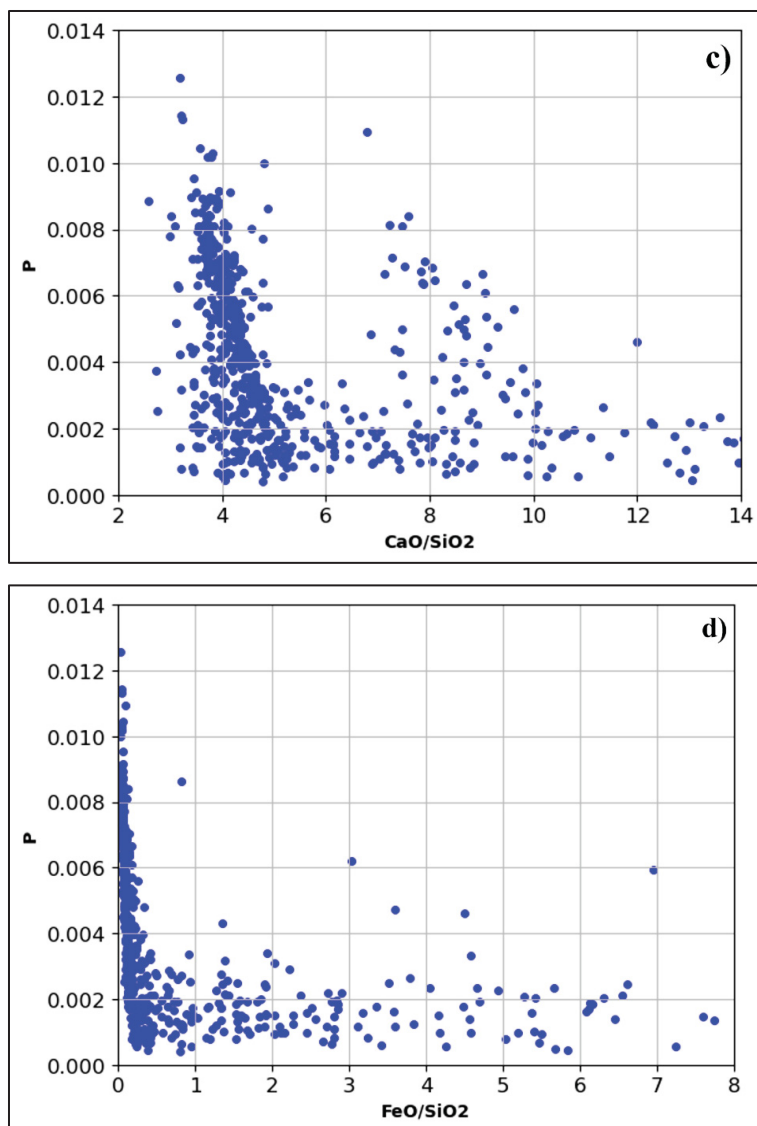


Figure 4-8 Variation de la teneur finale en P de l'acier en fonction (c) du rapport CaO/SiO<sub>2</sub>, et (d) du rapport FeO/SiO<sub>2</sub>, calculées à partir des données d'entrée du procédé

#### 4.2 Coefficient de distribution P ( $L_p$ ) en fonction de variables opérationnelles

Le rapport de distribution du phosphore ( $L_p$ ) entre le laitier et le métal à l'équilibre est un indicateur fiable pour évaluer l'efficacité de la déphosphoration. Ce rapport peut être directement obtenu à partir des analyses chimiques du laitier et du métal selon l'équation suivante (4-2) (C. Nassaralla & R. J. Fruehan, MTB1992) :

$$L_p = \frac{(\%P)_{\text{laitier}}}{[\%P]_{\text{acier}}} \quad (4-2)$$

Des valeurs plus élevées de  $L_p$  favorisent le processus de déphosphoration, entraînant ainsi des teneurs en phosphore plus faibles dans l'acier. Dans cette section, nous examinerons la relation entre le rapport de distribution du P et divers paramètres d'entrée, ainsi que la composition chimique du laitier.

#### 4.2.1 Relation entre $L_p$ et les données d'entrée du procédé

La figure 4-9 illustre un diagramme à barres représentant la corrélation de Perason entre le rapport  $L_p$  et certains paramètres d'entrée. Une corrélation négative est observée entre la plupart des paramètres et  $L_p$ , à l'exception du S et de l'O<sub>2</sub>, qui présentent une corrélation positive modérée.

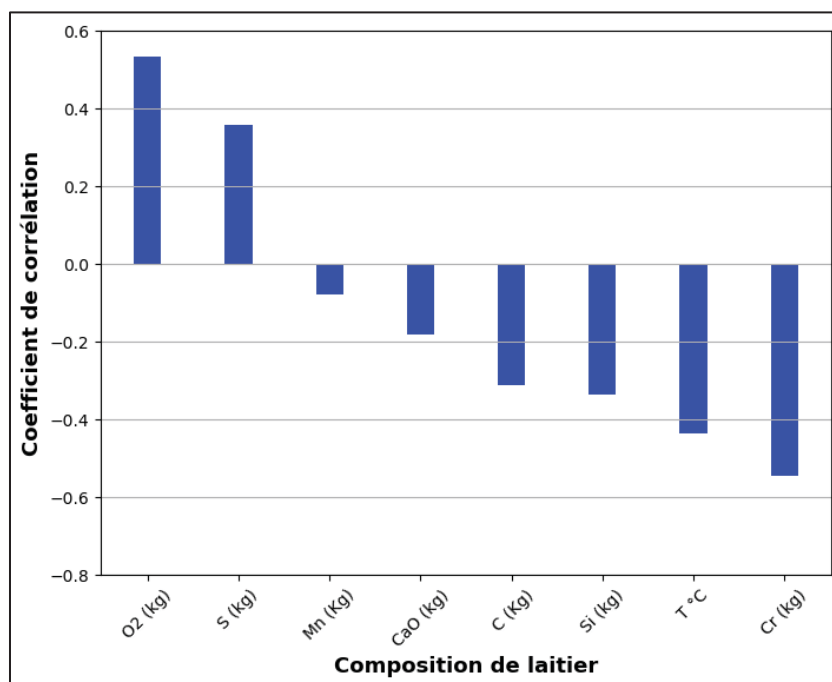


Figure 4-9 Corrélation entre le rapport  $L_p$  et les paramètres d'entrée du procédé, calculées par FactSage à partir des données d'entrée du procédé

Comme le montre la figure 4-9, une augmentation à la fois de la teneur en chrome de la ferraille et de la température du processus entraîne une diminution des valeurs de  $L_p$ . De manière similaire, une augmentation des teneurs en silicium et en carbone de la ferraille est associée à une diminution des valeurs de  $L_p$ . De plus, une légère corrélation négative est observée entre  $L_p$  et l'ajout de CaO, ainsi que la teneur en Mn de la ferraille.

#### 4.2.2 Relation entre $L_p$ et la composition du laitier

La figure 4-10 montre un diagramme à barres illustrant le coefficient de corrélation de Pearson entre le rapport  $L_p$  et la composition chimique du laitier, allant de -0,85 à 0,6. Les coefficients de corrélation entre les composants du laitier et la teneur finale en P de l'acier sont résumés ci-dessous :

- Wt% SiO<sub>2</sub> : Corrélation négative modéré, environ -0,59.
- Wt% CaO : Corrélation négative moyenne, environ -0,58.
- Wt% FeO : Corrélation positive modéré, environ 0,54.
- Wt% Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> : Corrélation négative faible, environ -0,25
- Wt% MnO : Corrélation positive moyenne, environ 0,55

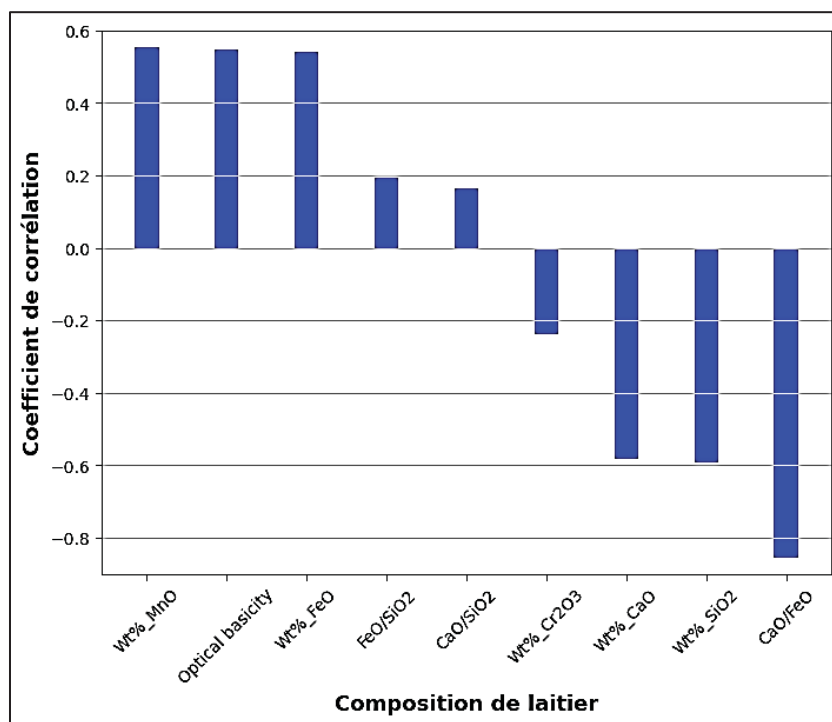


Figure 4-10 Corrélation entre le rapport  $L_p$  et la composition chimique du laitier, calculées à partir des données d'entrée du procédé

En outre, certains rapports de composition dans le laitier ont également été calculés et présentés ci-dessous :

- CaO/FeO : Corrélation négative forte, environ -0,86.
- Basicité optique : Corrélation positive modéré, environ 0,5.
- FeO/SiO<sub>2</sub> : Corrélation positive faible, environ 0,19.
- CaO/SiO<sub>2</sub> : Corrélation positive faible, environ 0,16.

Le wt% CaO, le wt% de SiO<sub>2</sub> et le rapport CaO/FeO présentent des corrélations négatives plus fortes (de l'ordre de -0,6 à -0,85), ce qui suggère une association plus importante entre l'augmentation de ces rapports et la diminution du rapport  $L_p$ . D'autre part, le pourcentage en poids de FeO et la basicité optique présentent une corrélation positive modérée (environ 0,55) avec le  $L_p$ , ce qui suggère que les augmentations de ces composants sont moyennement associées à une augmentation du rapport  $L_p$ . Cette analyse suggère que certains composants



chimiques du laitier, tels que le FeO, et la basicité optique, peuvent favoriser le procédé de déphosphoration.

Les figures 4-11 et 4-12 (a-e) présentent une analyse détaillée des variations du  $L_p$  en fonction de différentes compositions chimiques du laitier, fournissant des informations essentielles sur le procédé de déphosphoration dans la production d'acier. La figure 4-11(a) illustre les variations du coefficient de  $L_p$  en fonction de la teneur en oxyde de fer (Wt% FeO) dans le laitier. Il est observé que, lorsque la teneur en FeO est inférieure à 10%, le coefficient  $L_p$  fluctue considérablement, varie principalement entre 4 et 8. Cependant, à mesure que la teneur en FeO augmente, les valeurs de  $L_p$  tendent à se stabiliser autour de 6 à 8, avec une réduction notable des variations extrêmes. Cela indique qu'une teneur plus élevée en FeO dans le laitier favorise une stabilisation du coefficient  $L_p$ , ce qui pourrait être avantageux pour le contrôle du procédé de déphosphoration dans la production d'acier. Les résultats rapportés sur la figure 4-11(b) montre qu'il n'existe pas de tendance claire entre  $L_p$  et la teneur en CaO dans le laitier. Toutefois, une légère concentration de valeurs  $L_p$  plus élevées est observable autour de 45 à 55 % en poids de CaO. Cela suggère la possibilité d'une concentration optimale de CaO dans le laitier pour une déphosphoration plus efficace.

La figure 4-12(c) présente la relation entre le coefficient  $L_p$  et le pourcentage en poids de SiO<sub>2</sub> (Wt% SiO<sub>2</sub>) dans le laitier. Les valeurs de  $L_p$  sont comprises entre 6 et 8 lorsque le SiO<sub>2</sub> est inférieur à 7,5 %. De manière générale,  $L_p$  diminue avec l'augmentation du pourcentage de SiO<sub>2</sub> dans le laitier. En effet, une teneur plus élevée en SiO<sub>2</sub> semble être associée à une diminution de l'efficacité de la déphosphoration, ce qui se traduit par des valeurs  $L_p$  plus faibles. La figure 4-12(d) illustre la relation entre  $L_p$  et la teneur en MnO. On observe que  $L_p$  augmente avec l'augmentation de la teneur en MnO dans le laitier. Enfin, la figure 4-12(e) montre la relation entre le  $L_p$  et la concentration de Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> dans le laitier. Les données sont uniformément dispersées sur l'ensemble de la plage de concentration de Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Il est notable que  $L_p$  varie globalement de 6 à 8 lorsque la teneur en Cr<sub>2</sub>O<sub>3</sub> est inférieure à 15 %. Au-delà de cette concentration, certaines valeurs de  $L_p$  sont plus basses, autour de 4.

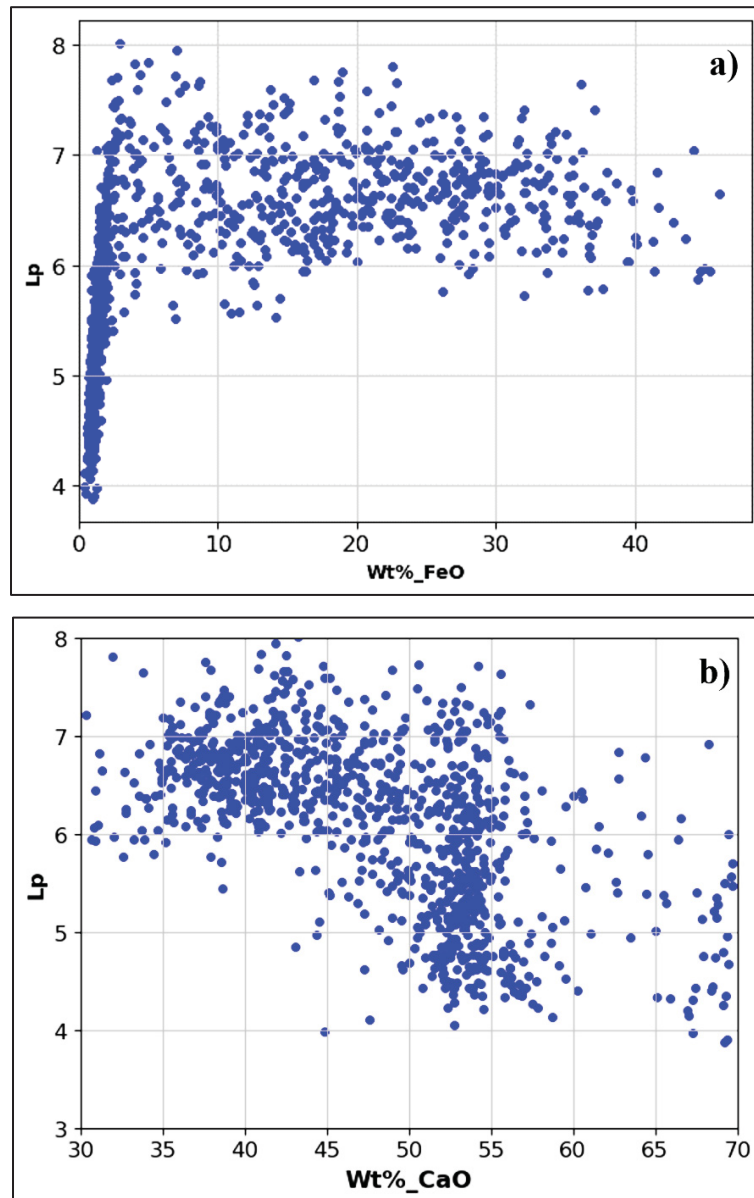


Figure 4-11 Variations de  $L_p$  en fonction de la composition du laitier, (a) Wt% FeO, (b) Wt% CaO

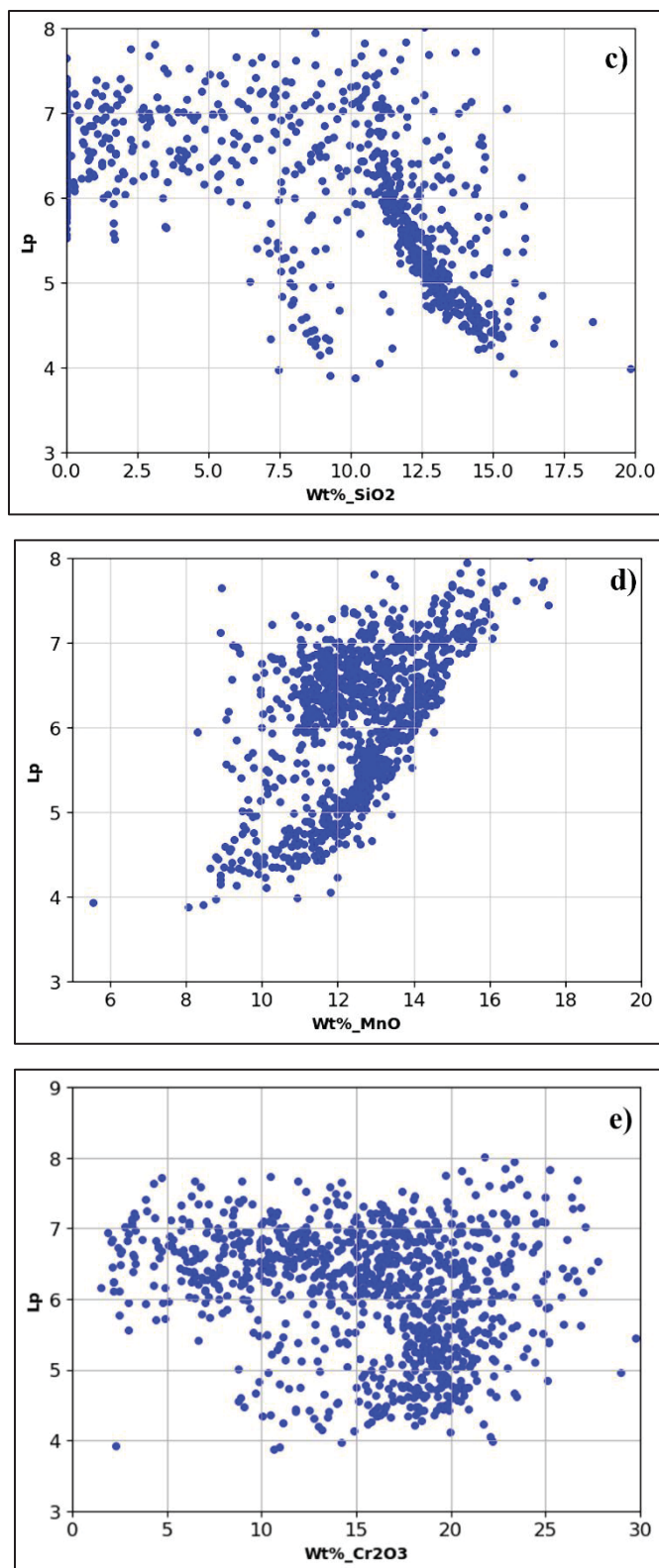


Figure 4-12 Variations de  $L_p$  en fonction de la composition du laitier, (c)  $Wt\%_{SiO_2}$ , (d)  $Wt\%_{MnO}$  et (e)  $Cr_2O_3$ , calculées sur la base des données d'entrée du procédé

Les figures 4-13 et 4-14 (a-c) montrent les variations des valeurs  $L_p$  en fonction de trois rapports de composition différents dans le laitier. La figure 4-13(a) montre qu'il y a une tendance à la baisse de  $L_p$  avec l'augmentation du rapport CaO/FeO. En général, les valeurs de  $L_p$  diminuent à mesure que le rapport CaO/FeO augmente. Cependant, il existe une gamme de rapports CaO/FeO avec des valeurs maximales de  $L_p$  entre 10 et 15. La figure 4-14(b) montre qu'avec l'augmentation de la basicité du laitier, la valeur de  $L_p$  augmente. Le même effet peut également être observé entre la valeur de  $L_p$  et la basicité optique, comme le montre la figure 4-14(c). Cela indique que le laitier avec une basicité plus élevée favorise le procédé de déphosphoration.

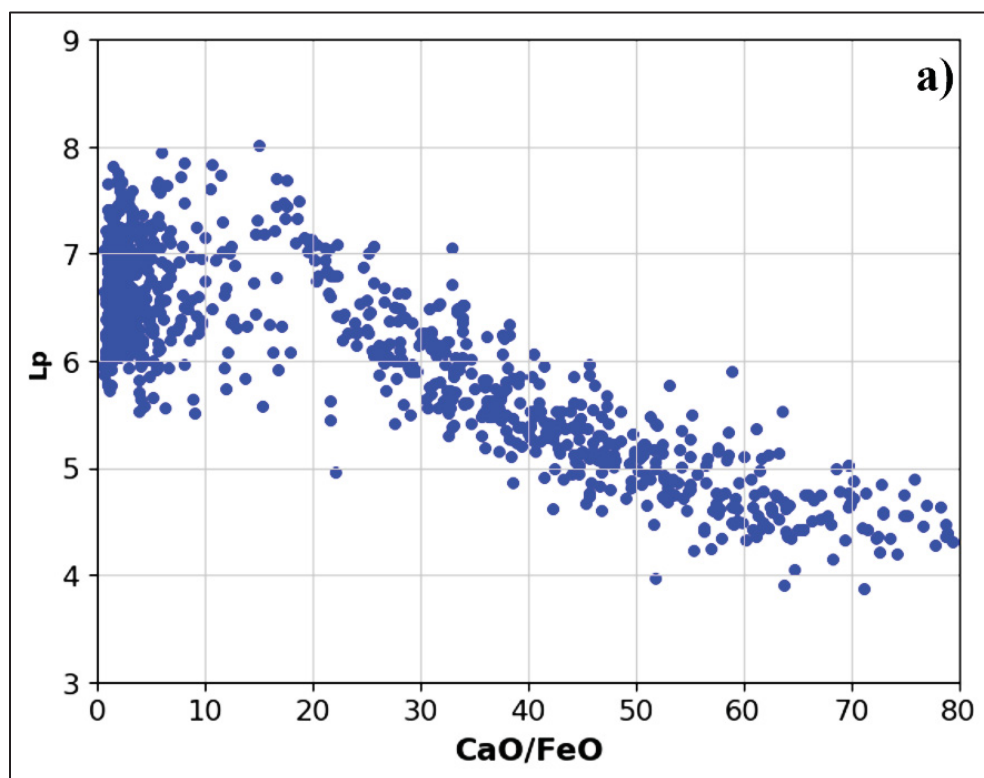


Figure 4-13 Variations de  $L_p$  en fonction de rapport (a) CaO/FeO

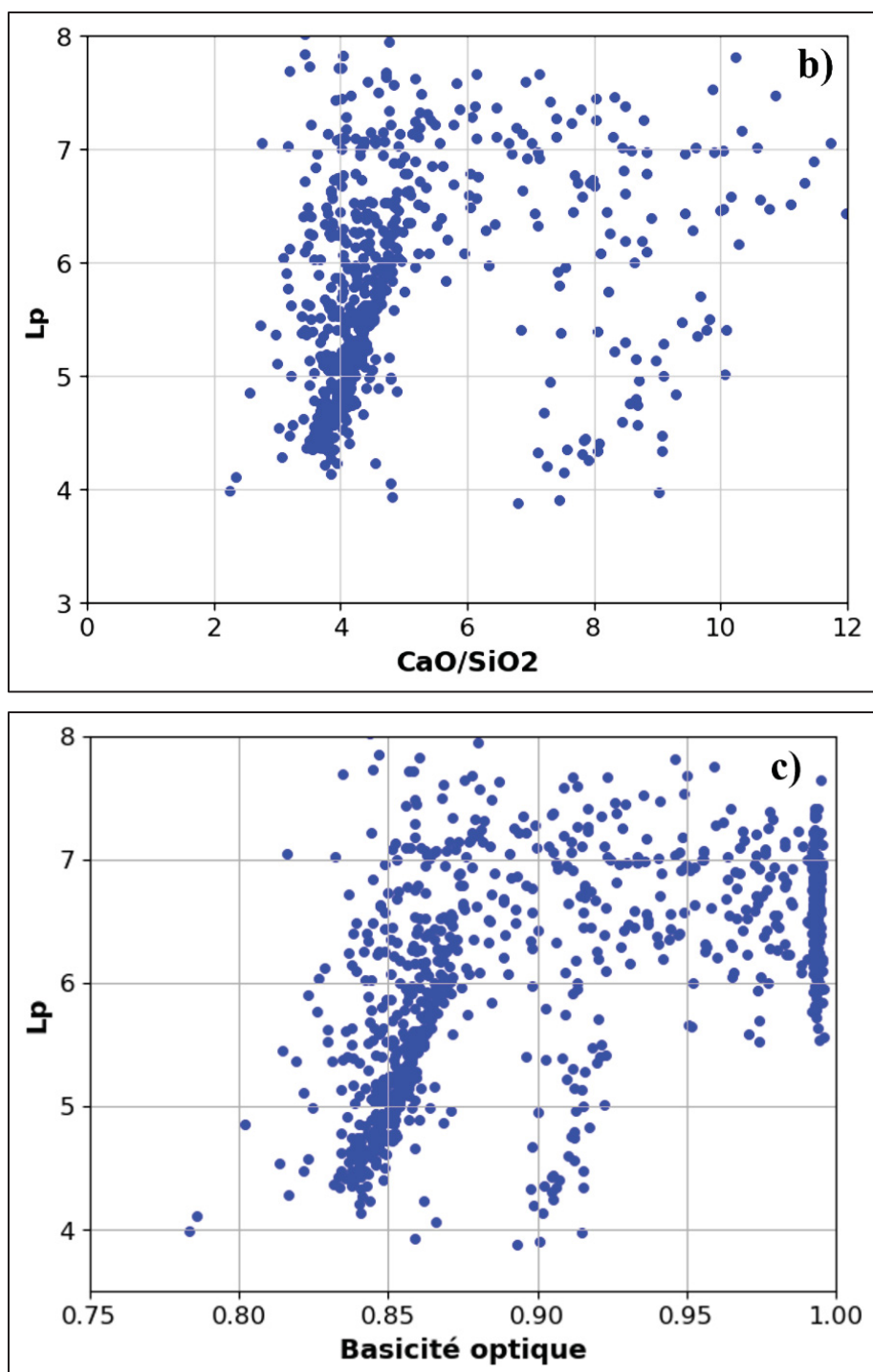


Figure 4-14 Variations de  $L_p$  en fonction des rapports, (b)  $\text{CaO/SiO}_2$  et (c) de la basicité optique, calculées sur la base des données d'entrée du procédé



## CHAPITRE 5

### DISCUSSION

Dans les chapitres 3 et 4, les résultats du modèle ANN et de la modélisation thermochimique à l'équilibre sur la déphosphoration de l'acier ont été présentés séparément. Dans ce chapitre, les différences de corrélations entre la teneur en phosphore de l'acier obtenue par les deux approches de modélisation sont discutées pour aider à mieux comprendre le procédé de déphosphoration dans un four à arc électrique industriel. En outre, l'effet de la composition du laitier sur la déphosphoration est développé. Cela peut servir de base à l'amélioration du procédé de déphosphoration.

#### 5.1 Effet des paramètres d'entrée du procédé sur la teneur finale en P de l'acier

Le tableau 5-1 présente les corrélations du coefficient de Pearson entre la teneur finale en P de l'acier, mesurée à l'usine et calculée par FactSage 8.3, en fonction des données d'entrée du procédé et de la composition du laitier. La teneur finale en P de l'acier montre la corrélation la plus élevée ( $r = 0,255$ ) avec le paramètre "Durée du procédé". Cette relation positive indique qu'avec une augmentation de "Durée du procédé", la teneur en phosphore de l'acier augmente. Cette augmentation est attribuée au phénomène de réversion du P capturé par le laitier vers l'acier. En effet, lorsque le laitier est retiré, une fine couche de laitier subsiste sur l'acier. Par la suite, l'acier est chauffé à une température de  $1650^{\circ}\text{C}$ , une opération qui dure environ 10 minutes, bien que ce délai puisse parfois être prolongé. L'acier est ensuite transféré dans le four à poche. Ces conditions, marquées par une température élevée et une faible pression partielle d'oxygène, ne sont pas propices à une déphosphoration efficace. Il convient de noter que les calculs de FactSage ne tiennent pas compte des effets du temps, car il suppose un état d'équilibre qui persiste indéfiniment.

L'oxygène,  $\text{O}_2(\text{kg})$ , présente la deuxième corrélation négative la plus forte ( $r = -0,18$ ) avec la teneur finale en P de l'acier mesuré. La corrélation entre  $\text{O}_2$  et P calculée par FactSage, bien que plus forte, est également négative ( $r = -0,55$ ). En fait, il existe une corrélation directe entre

l'O<sub>2</sub> injecté et la teneur en FeO du laitier. Comme discuté dans la Section 1.2, la présence de FeO et de CaO améliore le procédé d'élimination du P (Heo & Park, 2021), (Yang et al., 2016). Cependant, il existe une corrélation relativement faible entre le CaO ajouté et la teneur finale en P de l'acier selon les données de l'usine ( $r = -0,06$ ). Cela pourrait être dû au fait que la quantité ajoutée de CaO dans l'EAF est plutôt constante pour la majorité des coulées, avec seulement deux valeurs, 1950 kg et 975 kg, comme l'illustre la figure 4-1, de sorte que la corrélation entre la chaux et la teneur en P de l'acier ne peut pas être bien capturée.

Tableau 5-1 Corrélations du coefficient de Pearson ( $r$ ) entre la teneur finale en P de l'acier en fonction des données d'entrée du procédé et de la composition du laitier

Paramètres d'entrée	Données mesurées [P-wt%]	Valeur-p	Calculé par FactSage 8.3 [P-wt%]	Valeur-p
Température de décrassage	-0,05	$9,35 \times 10^{-2}$	0,3	$3,12 \times 10^{-22}$
Température de soutirage	0,005	$9,38 \times 10^{-1}$	-	-
Durée du procédé	0,255	$2,53 \times 10^{-16}$	-	-
Poids de ferraille	0,07	$2,44 \times 10^{-2}$		
Consommation d'énergie	-0,05	$9,23 \times 10^{-2}$	-	-
C(kg)	-0,03	$3,49 \times 10^{-1}$	0,31	$1,35 \times 10^{-23}$
Mn(kg)	-0,07	$2,22 \times 10^{-2}$	0,26	$1,03 \times 10^{-16}$
S(kg)	-0,11	$5 \times 10^{-4}$	-0,33	$3,24 \times 10^{-26}$
Si(kg)	-0,03	$3,56 \times 10^{-1}$	0,52	$1,74 \times 10^{-71}$
Cr(kg)	0,17	$1,39 \times 10^{-7}$	0,45	$1,33 \times 10^{-50}$
CaO(kg)	-0,06	$4,73 \times 10^{-2}$	0,053	$9,4 \times 10^{-2}$
O <sub>2</sub> (kg)	-0,18	$3 \times 10^{-9}$	-0,55	$2,71 \times 10^{-81}$
FeO (Wt%)	-	-	-0,53	$6,05 \times 10^{-75}$



Paramètres d'entrée	Données mesurées [P-wt%]	Valeur-p	Calculé par FactSage 8.3 [P-wt%]	Valeur-p
<b>CaO (wt%)</b>	-	-	0,54	$1 \times 10^{-76}$
<b>MnO (wt%)</b>	-	-	0,42	$2,6 \times 10^{-48}$
<b>SiO<sub>2</sub> (wt%)</b>	-	-	0,66	$1,62 \times 10^{-125}$
<b>CaO/FeO</b>	-	-	0,87	$2,23 \times 10^{-309}$
<b>CaO/SiO<sub>2</sub></b>	-	-	-0,17	-
<b>FeO/SiO<sub>2</sub></b>	-	-	-0,17	-
<b>Basicité optique</b>	-	-	-0,61	$3,43 \times 10^{-102}$

De plus, la corrélation calculée entre la teneur en P de l'acier et CaO est légèrement positive, contrairement à ce qui est observé dans les données de l'usine. Cela suggère que lorsque la quantité de CaO ajoutée augmente, la quantité de P dans l'acier augmente également. Ce phénomène pourrait être attribué à une augmentation de la fraction solide du laitier lorsque la teneur en chaux augmente (Suito et al., 1981), (Heo & Park, 2018), ou à la dilution du laitier dans le FeO, réduisant ainsi la capacité de déphosphoration du laitier. D'après les calculs ( $r = 0,87$ ) et comme le montre la figure 4-6(a), il existe une forte corrélation linéaire entre le rapport CaO/FeO dans le laitier et la capacité de déphosphoration, avec un rapport CaO/FeO optimal (environ 10-20) pour les meilleurs résultats de déphosphoration. Globalement, les deux valeurs de corrélation, basées sur des mesures et des calculs, sont très faibles, ce qui indique qu'il n'y a pas de relation linéaire entre la teneur finale en P de l'acier et le CaO ajouté. Il existe une corrélation positive faible entre la masse de la ferraille et la teneur finale en P de l'acier ( $r = 0,07$ ). Cela indique qu'avec une augmentation du poids de la ferraille ("Po-Fr"), la teneur en P de l'acier augmente car la ferraille est la source de P dans le procédé. La masse de ferraille pour les calculs a été fixée à une moyenne de 41213 tonnes, et par conséquent, cette corrélation n'a pas été calculée.

La consommation d'énergie présente une faible corrélation négative avec la teneur finale en P de l'acier ( $r = -0,05$ ). Cela indique que la teneur en P de l'acier diminue avec l'augmentation de la consommation d'énergie, ce qui peut être associé à une agitation plus forte du bain d'acier, améliorant le transport de masse du P de l'acier vers le laitier et accélérant le procédé d'élimination du P. Cette corrélation n'a pas pu être calculée.

Les corrélations entre deux températures,  $T_{\text{Dé}}$  (mesurée avant l'enlèvement du laitier) et  $T_{\text{Sou}}$  (après l'enlèvement du laitier), et la teneur finale en P de l'acier sont rapportées. Il convient de noter que  $T_{\text{Cou}}$  est plus élevée que  $T_{\text{Dé}}$  parce que la température de l'acier après l'élimination du laitier est souvent augmentée avant le traitement au four à poche. Il existe une faible corrélation négative entre  $T_{\text{Dé}}$  et la teneur finale en P de l'acier mesurée ( $r = -0,05$ ), ce qui indique qu'avec une augmentation de  $T_{\text{Dé}}$ , la teneur finale en P de l'acier diminue. Comme indiqué dans la section 1.3.3, la température a une double influence sur la performance de la réaction de déphosphoration (Drain et al., 2018). D'un point de vue thermodynamique et tel que calculé ( $r = 0,3$ ), les températures élevées peuvent entraver le procédé de déphosphoration car il s'agit d'une réaction exothermique. Cependant, d'un point de vue cinétique qui n'a pas pu être calculée, les températures élevées favorisent le transfert de masse du P vers la phase de laitier (Zhang et al., 2021). Il semble que l'effet net de la température sur le procédé de déphosphoration soit positif comme indiqué dans le tableau 5-1. Au contraire,  $T_{\text{Sou}}$  montre une très faible corrélation positive avec la teneur finale en P de l'acier ( $r = 0,005$ ). En d'autres termes, la teneur en P de l'acier augmente avec l'augmentation de  $T_{\text{Sou}}$ . Cela pourrait être lié à la réversion du P au stade final du EAF lorsque la température après le décrassage est augmentée.

Parmi les différents éléments présents dans la ferraille, Si, C, Mn et S présentent une corrélation négative avec la teneur finale en P de l'acier ( $r = -0,03$ ,  $-0,03$ ,  $-0,07$  et  $-0,11$ , respectivement), S présentant la corrélation la plus forte après Cr ( $r = 0,17$ ). Seul le Cr présente une corrélation positive avec la teneur finale en P de l'acier. D'un point de vue thermodynamique, tel que calculé et répertorié dans le Tableau 5-1, l'augmentation de Si ( $r = 0,52$ ), Cr ( $r = 0,45$ ), C ( $r = 0,31$ ) et Mn ( $r = 0,26$ ) ne favorise pas le processus de déphosphoration en raison de l'oxydation

sélective de Mn, Si, Cr et C. Autrement dit, ces éléments réagissent d'abord avec l' $O_2(g)$  injecté et s'oxydent avant le P, comme le montre le diagramme d'Ellingham dans la Figure 5-1. Cependant, la tendance observée dans les données de l'usine et rapportée dans le tableau est différente pour Mn, C et Si. Il est possible que l'oxydation de Si conduise à la formation de  $SiO_2$ , et qu'une teneur plus élevée en  $SiO_2$  dans le laitier le rende plus fluide en abaissant la température de liquidus, ce qui favorise la cinétique de déphosphoration (Zhang et al., 2024), (Xi et al., 2019). De même, l'oxydation du Mn conduit à une teneur élevée en MnO dans le laitier, qui est un oxyde plutôt basique (comme indiqué dans le tableau 1-3), et l'augmentation de la basicité peut stabiliser le  $P_2O_5$  dans le laitier (Zhang et al., 2021), comme le montre la figure 5-2. L'augmentation du Cr et son oxydation sous forme de  $Cr_2O_3$  dans le laitier peuvent déstabiliser le  $P_2O_5$  car le  $Cr_2O_3$  est un composant plutôt acide, ce qui diminue la basicité du laitier (Karbowniczek et al., 2012), comme le montre également la figure 5-3. En outre,  $Cr_2O_3$  augmente la viscosité du laitier en raison de sa nature plutôt acide (Xu et al., 2017) et peut donc ralentir la cinétique d'élimination du P.

Les deux corrélations, observées dans les données de l'usine ( $r = -0,11$ ) et calculées ( $r = -0,33$ ), entre la teneur en S de la ferraille et la teneur finale en P de l'acier, étaient négatives, la corrélation calculée étant plus forte. Cela indique qu'avec une augmentation de la teneur en S de la ferraille, la teneur en P de l'acier diminue. Gu et al. (2017) ont rapporté que la réversion de P pour les gouttelettes d'acier à faible teneur en S était très rapide par rapport à celle des gouttelettes à forte teneur en S.

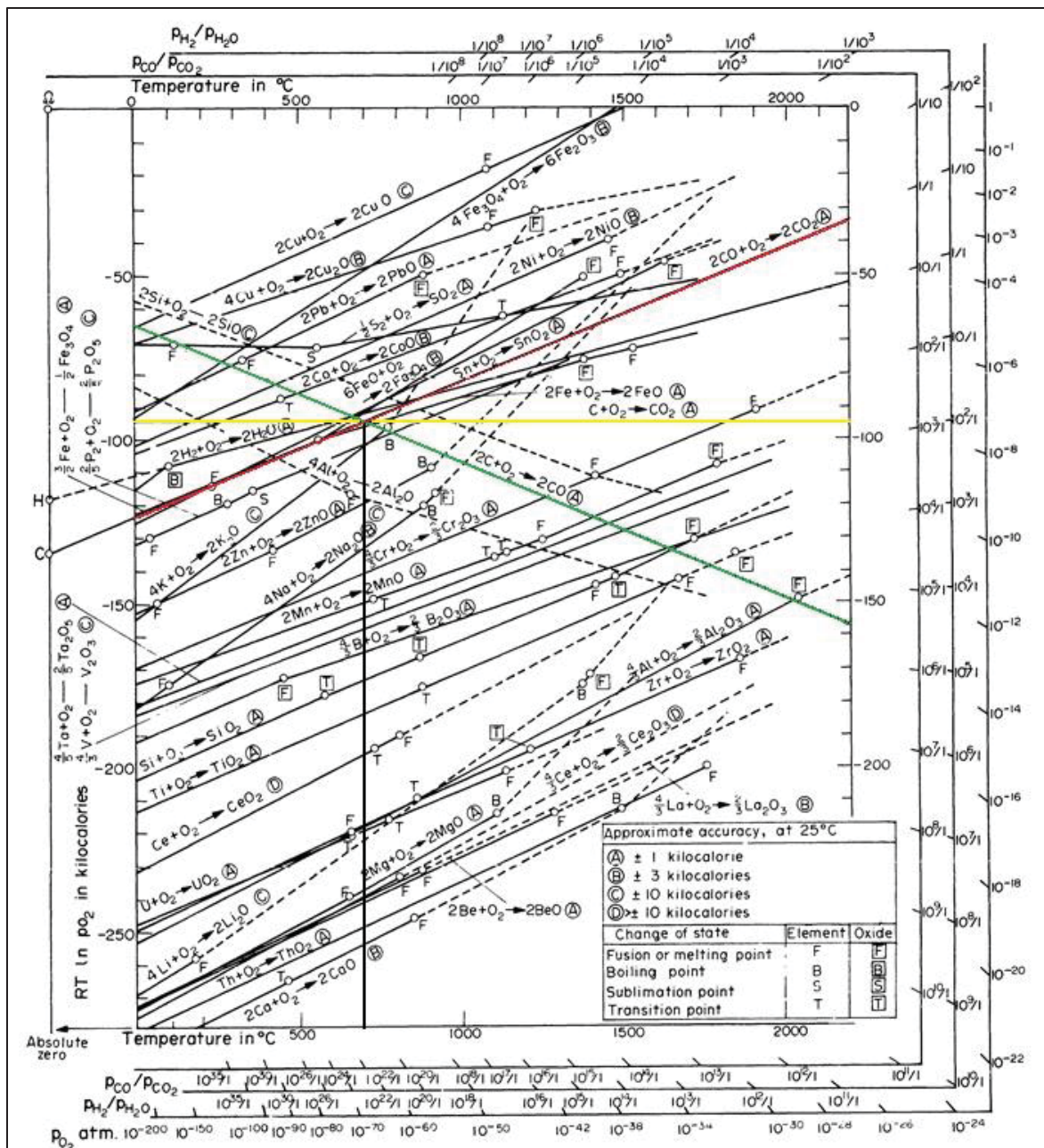


Figure 5-1 Diagramme d'Ellingham montrant l'oxydation sélective du Cr, du Mn, du Si et du C par rapport au P  
Tirée de Royes (2015)

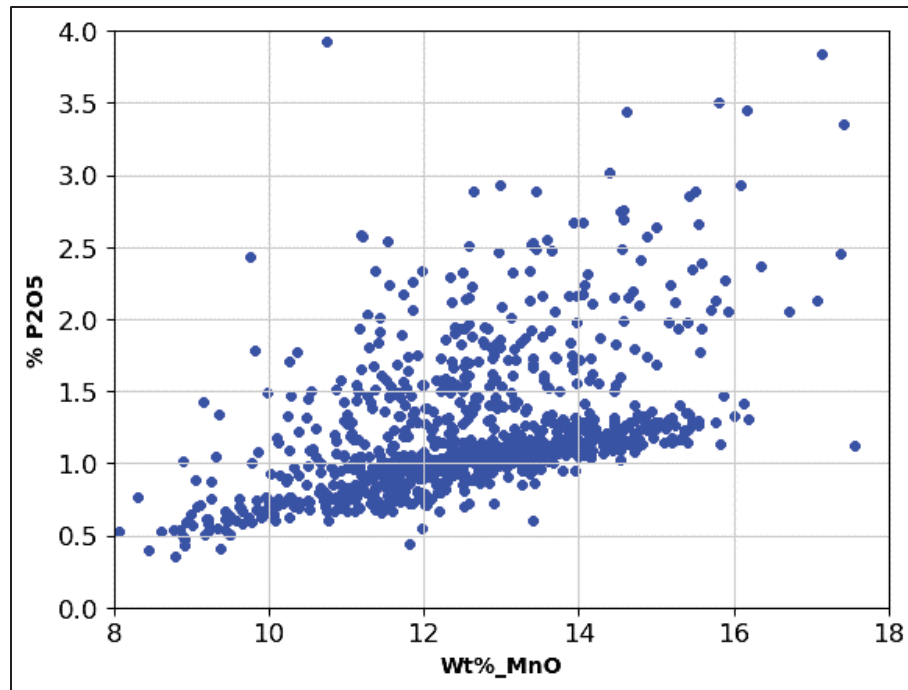


Figure 5-2 Variations de la teneur en  $P_2O_5$  du laitier en fonction de sa teneur en MnO, calculées sur la base des données d'entrée du procédé

## 5.2 Effet de la composition du laitier sur la teneur finale en P de l'acier

Comme indiqué dans le tableau 5-1, une forte corrélation linéaire et positive a été calculée entre le rapport  $CaO/FeO$  du laitier et la teneur finale en P de l'acier ( $r = 0,87$ ). C'est-à-dire qu'une quantité excessive de  $CaO$  par rapport au  $FeO$  entraîne une concentration plus élevée de P dans l'acier. En outre, une relation linéaire croissante globale a été calculée entre la teneur en P de l'acier et les rapports  $CaO/SiO_2$  et  $FeO/SiO_2$  du laitier. En d'autres termes, une augmentation des rapports  $CaO/SiO_2$  et  $FeO/SiO_2$  dans le laitier favorise le procédé de déphosphoration de l'acier, comme l'indiquent les valeurs  $r$  égales à  $-0,17$  et  $-0,17$ , respectivement. Par conséquent, le contrôle de la composition du laitier est essentiel pour obtenir l'élimination souhaitée du P.

La composition du laitier influence l'activité du  $CaO$  ( $a_{CaO}$ ), et la teneur en  $FeO$  du laitier détermine la pression partielle d'oxygène ( $P_{O_2}$ ) à l'interface laitier-acier. Comme indiqué dans la section 1.2, il a été rapporté qu'un  $a_{CaO}$  et une  $P_{O_2}$  élevés (correspondant à certaines teneurs

en FeO dans le laitier) sont des facteurs cruciaux pour obtenir une déphosphoration plus importante de l'acier (Heo & Park, 2021). L'effet de la composition du laitier sur le procédé de déphosphoration et la teneur finale en P de l'acier peut être déterminé en analysant les lignes d'iso-activité du CaO et du  $O_2$  en fonction de la composition du laitier.

La figure 5-3 illustre le diagramme de phase  $SiO_2$ -CaO-FeO-12,5 MnO-15,5  $Cr_2O_3$  (en % en poids), calculé à l'aide de FactSage 8.3 à 1600°C. Les lignes d'iso-activité du CaO (Figure 5-3a) et de l' $O_2$  (Figure 5-3b) sont également présentées sur le diagramme de phase.

De même, comme le montre la figure 5-3(a), l'augmentation du rapport de masse CaO/ $SiO_2$  entraîne une augmentation continue de l' $a_{CaO}$ . Cependant, le  $P_{O_2}$  présente un comportement plus complexe en fonction de la composition du laitier. Le  $P_{O_2}$  à l'interface laitier-acier diminue d'abord avec une augmentation du rapport CaO/ $SiO_2$ , puis augmente, et diminue à nouveau pour les teneurs en FeO calculées du laitier EAF, c'est-à-dire < 40 wt%. Cette complexité explique les données dispersées observées dans le tracé de la teneur finale en P de l'acier en fonction du rapport CaO/ $SiO_2$  (comme le montre la figure 4-8(c)), et bien que la valeur  $r$  soit indiquée comme une valeur négative (-0,17), elle représente une faible corrélation, et il n'y a pas de relation linéaire entre CaO/ $SiO_2$  et la teneur en P de l'acier.

De même, avec une augmentation du rapport massique FeO/ $SiO_2$ ,  $a_{CaO}$  augmente, mais  $P_{O_2}$  présente un comportement assez complexe en fonction de la teneur en CaO du laitier, allant de 35 à 55 wt% pour le procédé étudié. Bien que la valeur  $r$  rapportée entre le rapport FeO/ $SiO_2$  et la teneur en P de l'acier soit négative (-0,17), elle représente une faible corrélation, et il n'y a pas de relation linéaire entre FeO/ $SiO_2$  et la teneur en P de l'acier.



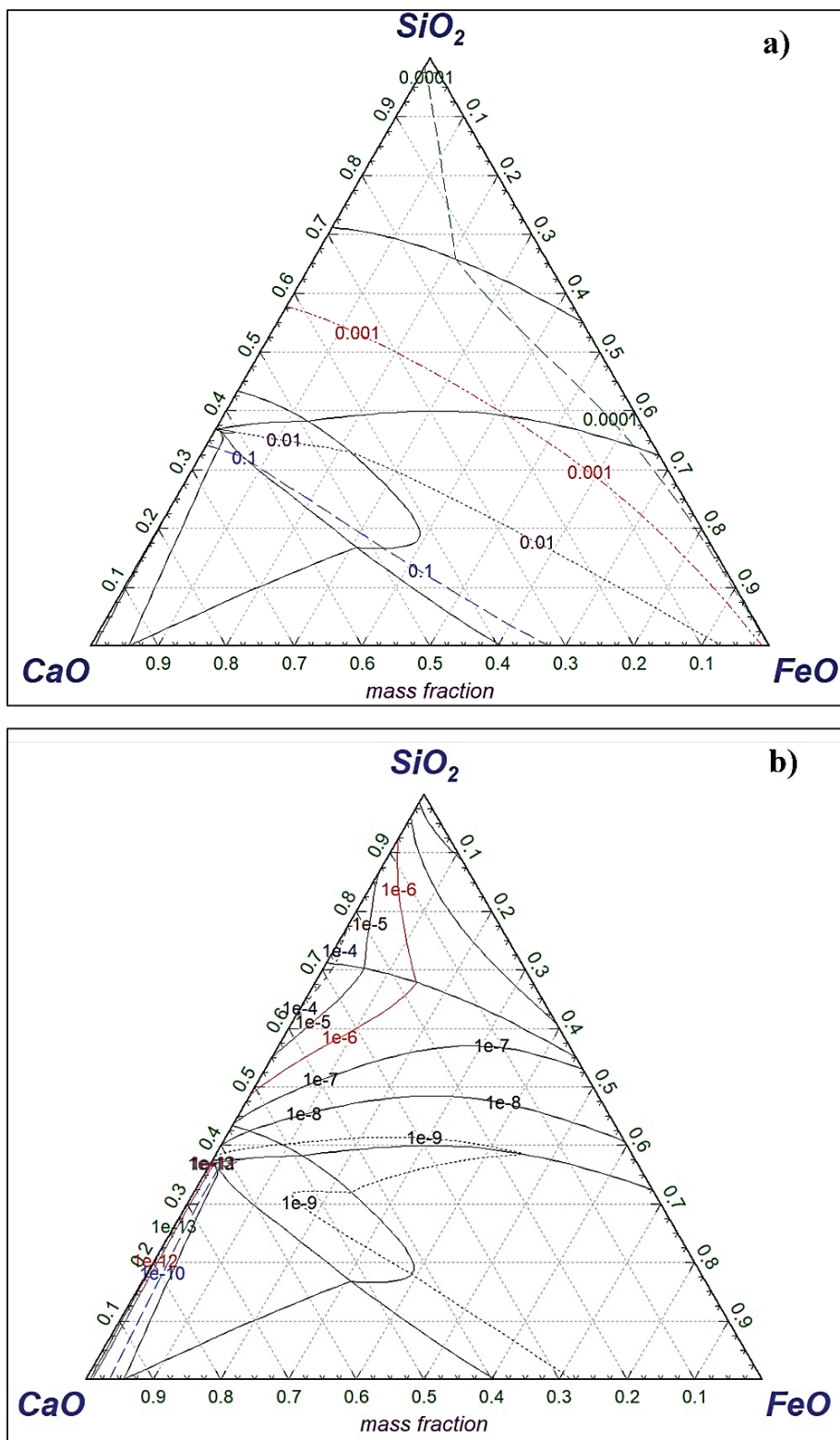


Figure 5-3 Diagramme de phase  $\text{SiO}_2$ - $\text{CaO}$ - $\text{FeO}$ -12,5  $\text{MnO}$ -15,5  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  (en % en poids), calculé à 1600°C, les lignes (a) d'iso-activité du  $\text{CaO}$  et (b) de l'oxygène

### 5.3 Comparaison entre la teneur en P de l'acier, mesurée et calculée

La figure 5-4 illustre la comparaison entre la teneur finale en P de l'acier, telle que calculée par FactSage (axe des y), et les mesures obtenues à l'usine (axe des x). Idéalement, si les points de données étaient parfaitement alignés le long d'une ligne rouge diagonale, cela indiquerait une relation parfaite entre les valeurs prédites et mesurées. Cependant, dans ce cas, la plupart des points de données se situent en dessous de la ligne diagonale, ce qui suggère que les calculs ont tendance à sous-estimer la teneur finale en P de l'acier.

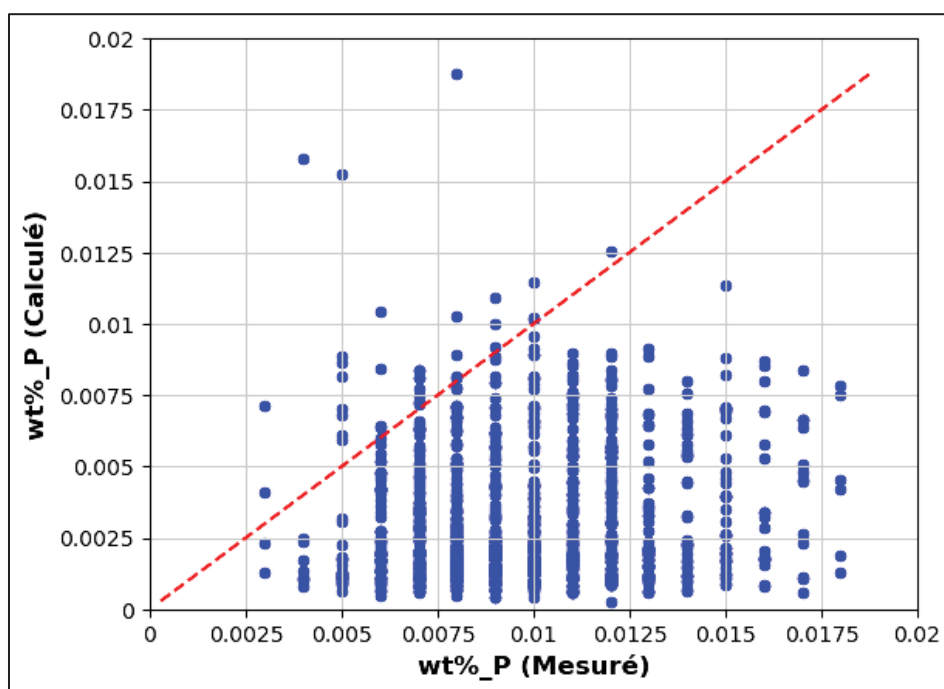


Figure 5-4 Teneur finale en P de l'acier, prédite par FactSage par rapport aux données mesurées à l'usine

Cet écart entre les données calculées et mesurées peut être attribué au fait que les calculs de FactSage sont effectués dans des conditions d'équilibre, négligeant l'influence de la cinétique sur le procédé de déphosphoration. En réalité, le procédé de déphosphoration dans le four à arc électrique est loin d'être équilibré, et la cinétique affecte de manière significative l'élimination du P de l'acier.



En revanche, le modèle de ANN développé dans cette étude intègre à la fois des considérations thermodynamiques et cinétiques, ce qui lui permet de prédire avec précision la teneur finale en P de l'acier, comme le montre la figure 3- 9(a). Cependant, chaque modèle - qu'il soit basé sur un ANN ou sur une base physique, comme celui calculé par FactSage - a ses propres avantages et inconvénients. Par exemple, les modèles ANN sont fortement non linéaires, ce qui implique que la relation entre les variables d'entrée et la teneur finale en P de l'acier n'est pas directe. En outre, le modèle ANN ne permet pas de savoir quelles sont les caractéristiques les plus significatives pour prédire les teneurs en P. Inversement, comme mentionné, les modèles FactSage ne tiennent pas compte de l'effet de la cinétique sur l'élimination du P, qui pourrait être déterminant dans le procédé. Alors que le modèle ANN peut servir d'outil robuste pour prédire la teneur en P de l'acier, les calculs FactSage peuvent être prometteurs en suggérant des directions pour optimiser les variables opérationnelles (par exemple, l' $O_2(g)$  injecté, la quantité de chaux ajoutée, la température et les flux comme le  $SiO_2$ ) afin d'améliorer le procédé de déphosphoration. Par conséquent, le développement d'un modèle de réseau neuronal hybride qui combine les avantages des deux approches pourrait servir d'outil puissant pour améliorer à la fois la prédiction et l'optimisation du procédé de déphosphoration.



## CONCLUSIONS ET RECOMMANDATIONS

Cette étude a exploré l'utilisation de divers modèles d'intelligence artificielle pour prédire la teneur en phosphore à la fin du procédé du four à arc électrique. Les modèles testés incluent une machine à vecteurs de support (Support Vector Machine, SVM) avec un noyau RBF, une forêt d'arbres décisionnels aléatoires (Random Forest, RF), les réseaux de neurones profonds (Deep Neural Network, DNN) et les réseaux de neurones artificiels (Artificial Neural Network, ANN). La teneur finale en P de l'acier a également été prédite en fonction des paramètres d'entrée de l'usine en utilisant des calculs thermochimiques d'équilibre avec la version 8.3 de FactSage et ses bases de données optimisées pour mieux comprendre les mécanismes physiques et chimiques sous-jacents à la déphosphoration de l'acier dans le four à arc électrique (EAF). Les principales conclusions de ce travail de recherche sont résumées ci-dessous.

Les modèles d'apprentissage automatique, SVM-RBF et RF, n'ont pas donné de résultats satisfaisants en termes de précision de prédiction de phosphore. Le modèle DNN s'est avéré inadapté à la taille limitée de l'ensemble de données (environ 1005 coulées) dans le cadre de cette recherche.

Plusieurs modèles d'ANN avec différentes architectures ont été testés, et le modèle le plus performant consistait en 4 couches cachées et 448 neurones. Ce modèle a été entraîné sur 500 époques avec des lots de 50 échantillons, implémenté en utilisant la bibliothèque TensorFlow. Les hyperparamètres ont été soigneusement ajustés pour maximiser les performances du modèle ANN. Le modèle optimisé a atteint des performances remarquables par rapport à des modèles similaires rapportés dans la littérature, avec une erreur quadratique moyenne (MSE) de 0,000016, un coefficient de corrélation (R) de 99,98 % et un coefficient de détermination ( $R^2$ ) de 99,96 %. Ces résultats confirment que, même avec une quantité limitée de données, une architecture ANN bien conçue peut fournir des prédictions précises et fiables pour la teneur en phosphore de l'acier dans le procédé de four à arc électrique.

Les paramètres les plus influents ont été identifiés comme étant la durée du procédé, la quantité d'O<sub>2</sub> injectée et la teneur en Cr de l'acier selon les mesures. Les calculs thermodynamiques indiquent que les trois paramètres les plus importants sont la quantité d'O<sub>2</sub> injectée, et les teneurs en Si et en Cr de l'acier. L'effet du temps n'a pas pu être pris en compte dans les calculs thermodynamiques. Prolonger la durée de procédé, selon les mesures, défavorise la déphosphoration en raison de la réversion du P vers l'acier après le décrassage, qui a une influence relativement forte par rapport aux autres paramètres.

Les deux approches, les calculs thermodynamiques et les mesures, ont convenu que l'augmentation de la teneur en S de l'acier et de l'O<sub>2</sub> injecté favorise le procédé de déphosphoration, tandis que le Cr a un impact négatif sur celui-ci. Cependant, les valeurs de corrélation ( $r$ ) obtenues à partir des mesures de l'usine et des calculs thermodynamiques d'équilibre ne sont pas entièrement concordantes.

Les calculs thermodynamiques ont prédit une corrélation positive entre la température de décrassage, les teneurs en C, Mn et Si de l'acier, et le CaO ajouté. Cependant, selon les mesures, ces valeurs sont négatives, indiquant qu'en pratique, l'augmentation de la température de décrassage, des teneurs en C, Mn et Si de l'acier, et du CaO ajouté pourrait diminuer la teneur en P de l'acier.

Cette divergence montre que la cinétique exerce une influence majeure sur le procédé de déphosphoration de l'acier dans le four à arc électrique (EAF). De plus, les valeurs de corrélation entre la teneur finale en P de l'acier et les paramètres d'entrée sont souvent faiblement liées, indiquant qu'il n'y a pas de relation linéaire entre la déphosphoration et les paramètres opérationnels d'entrée. Il s'agit d'un procédé multivariable sensible à plusieurs paramètres qui doivent être évalués simultanément.

Les modèles d'ANN sont souvent considérés comme des "boîtes noires" avec des structures internes complexes qui rendent difficile l'interprétation de la manière dont les prédictions sont faites. En revanche, les calculs thermodynamiques fournissent des résultats clairs et

interprétables qui peuvent être directement liés aux phénomènes physiques et chimiques, facilitant ainsi la compréhension. Cependant, la cinétique de la déphosphoration, non prise en compte dans les calculs thermodynamiques, s'est avérée jouer un rôle majeur dans la déphosphoration. Par conséquent, il est proposé de développer un modèle hybride pour tirer parti des deux approches. Les résultats du modèle thermodynamique peuvent être entrés comme paramètres d'entrée dans le modèle ANN, qui capturera également la cinétique de la déphosphoration.



## LISTE DE RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- Anderson, C. (2016). Pyrometallurgy.
- Basu, S., Lahiri, A. K., & Seetharaman, S. (2007). Phosphorus partition between liquid steel and CaO-SiO<sub>2</sub>-FeO x-P<sub>2</sub>O<sub>5</sub>-MgO slag containing 15 to 25 pct FeO. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 38, 623-630.
- BERGMAN, Å. (1988). Representation of phosphorus and vanadium equilibria between liquid iron and complex steelmaking type slags. *Transactions of the Iron and Steel Institute of Japan*, 28(11), 945-951.
- Biau, G. (2012). Analysis of a random forests model. *The Journal of Machine Learning Research*, 13(1), 1063-1095.
- Bilel, H., & Taoufik, A. (2022). Radiation pattern synthesis of the coupled almost periodic antenna arrays using an artificial neural network model. *Electronics*, 11(5), 703.
- Breiman, L. (2017). *Classification and regression trees*. Routledge.
- Busa, N. (2023). *Optimization of Steelmaking Processes in an Electric ARC Furnace* [Purdue University].
- Calix, R. A., Ugarte, O., Okosun, T., & Wang, H. (2023). Machine Learning-Based Regression Models for Ironmaking Blast Furnace Automation. *Dynamics*, 3(4), 636-655.
- Chakrabarti, A. (2006). *Steel making*. PHI Learning Pvt. Ltd.
- Chicco, D., Warrens, M. J., & Jurman, G. (2021). The coefficient of determination R-squared is more informative than SMAPE, MAE, MAPE, MSE and RMSE in regression analysis evaluation. *Peerj computer science*, 7, e623.
- Ciampiconi, L., Elwood, A., Leonardi, M., Mohamed, A., & Rozza, A. (2023). A survey and taxonomy of loss functions in machine learning. *arXiv preprint arXiv:2301.05579*.
- Dar, S. U. H., Ayx, I., Kapusta, M., Papavassiliu, T., Schoenberg, S. O., & Engelhardt, S. (2024). Effect of Training Epoch Number on Patient Data Memorization in Unconditional Latent Diffusion Models. BVM Workshop,
- Dong, Q., Ying-ying, F., Nan, Z., & Chen-xu, Z. (2013). Research on relationship model of dephosphorization efficiency and slag basicity based on support vector machine. 2013 International Conference on Mechanical and Automation Engineering,
- Dovoedo, Y., & Chakraborti, S. (2015). Boxplot-based outlier detection for the location-scale family. *Communications in statistics-simulation and computation*, 44(6), 1492-1513.

- Drain, P. B., Monaghan, B. J., Longbottom, R. J., Chapman, M. W., Zhang, G., & Chew, S. J. (2018). Phosphorus partition and phosphate capacity of basic oxygen steelmaking slags. *ISIJ International*, 58(11), 1965-1971.
- Ek, M., Shu, Q., van Boggelen, J., & Sichen, D. (2012). New approach towards dynamic modelling of dephosphorisation in converter process. *Ironmaking & steelmaking*, 39(2), 77-84.
- El Bilali, A., Lamane, H., Taleb, A., & Nafii, A. (2022). A framework based on multivariate distribution-based virtual sample generation and DNN for predicting water quality with small data. *Journal of Cleaner Production*, 368, 133227.
- Elkoumy, M. M., Fathy, A. M., Megahed, G. M., El-Mahallawi, I., Ahmed, H., & El-Anwar, M. (2019). Empirical Model for Predicting Process Parameters during Electric Arc Furnace Refining Stage Based on Real Measurements. *steel research international*, 90(11), 1900208.
- Freedman, D. A. (2009). *Statistical models: theory and practice*. cambridge university press.
- Fruehan, R. J. (1998). *The making, shaping and treating of steel.[2]. Steelmaking and refining volume*. AISE Steel Foundation.
- Galarnyk, M. (2019). *Understanding Boxplots*. Retrieved 17-11-2023 from <https://www.kdnuggets.com/2019/11/understanding-boxplots.html>
- Gibson, A., & Patterson, J. (2018). *Deep Learning en action*. Editions First.
- Guezennec, A.-G. (2004). *La formation des poussières de Four Électrique d'Aciérie: De la Genèse des particules à leur évolution morphologique* Institut National Polytechnique de Lorraine-INPL].
- Hamano, T., & Tsukihashi, F. (2005). The Effect of B<sub>2</sub>O<sub>3</sub> on Dephosphorization of Molten Steel by FeOx-CaO-MgO-satd.-SiO<sub>2</sub> Slags at 1873K. *ISIJ International*, 45(2), 159-165.
- Hamdi, B., Limam, S., & Aguil, T. (2016). Uniform and concentric circular antenna arrays synthesis for smart antenna systems using artificial neural network algorithm. *Progress In Electromagnetics Research B*, 67, 91-105.
- Hay, T., Visuri, V.-V., Aula, M., & Echterhof, T. (2021). A review of mathematical process models for the electric arc furnace process. *steel research international*, 92(3), 2000395.
- He, F., & Zhang, L. (2018). Prediction model of end-point phosphorus content in BOF steelmaking process based on PCA and BP neural network. *Journal of Process Control*, 66, 51-58.



- Heo, J. H., & Park, J. H. (2018). Effect of direct reduced iron (DRI) on dephosphorization of molten steel by electric arc furnace slag. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 49(6), 3381-3389.
- Heo, J. H., & Park, J. H. (2021). Effect of Slag Composition on Dephosphorization and Foamability in the Electric Arc Furnace Steelmaking Process: Improvement of Plant Operation. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 52, 3613-3623.
- Hinz, T., Navarro-Guerrero, N., Magg, S., & Wermter, S. (2018). Speeding up the hyperparameter optimization of deep convolutional neural networks. *International Journal of Computational Intelligence and Applications*, 17(02), 1850008.
- Iiduka, H. (2021). Appropriate learning rates of adaptive learning rate optimization algorithms for training deep neural networks. *IEEE Transactions on Cybernetics*, 52(12), 13250-13261.
- Jain, S., Naicker, D., Raj, R., Patel, V., Hu, Y.-C., Srinivasan, K., & Jen, C.-P. (2023). Computational intelligence in cancer diagnostics: a contemporary review of smart phone apps, current problems, and future research potentials. *Diagnostics*, 13(9), 1563.
- Kadhim, Z. S., Abdullah, H. S., & Ghathwan, K. I. (2022). Artificial Neural Network Hyperparameters Optimization: A Survey. *International Journal of Online & Biomedical Engineering*, 18(15).
- Kadkhodabeigi, M. (2011). Modeling of tapping processes in submerged arc furnaces.
- Kadkhodabeigi, M., TVEIT, H., & JOHANSEN, S. T. (2009). Modeling the tapping of silicon melt from the submerged arc furnaces. 7th International Conference on CFD in the Minerals and Process Industries,
- Kadkhodabeigi, M., Tveit, H., & Johansen, S. T. (2011). Modelling the tapping process in submerged arc furnaces used in high silicon alloys production. *ISIJ International*, 51(2), 193-202.
- Karbowniczek, M., Kawecka-Cebula, E., & Reichel, J. (2012). Investigations of the dephosphorization of liquid iron solution containing chromium and nickel. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 43, 554-561.
- Klimas, M., & Grabowski, D. (2022). Application of Shallow Neural Networks in Electric Arc Furnace Modeling. *IEEE Transactions on Industry Applications*, 58, 6814-6823.
- Koehrsen, W. (2017). Understanding the Random Forest with an intuitive example. *Medium*. <https://williamkoehrsen.medium.com/random-forest-simple-explanation-377895a60d2d>
- Laha, D., Ren, Y., & Suganthan, P. N. (2015). Modeling of steelmaking process with effective machine learning techniques. *Expert systems with applications*, 42(10), 4687-4696.

- Lee, C., & Fruehan, R. (2005). Phosphorus equilibrium between hot metal and slag. *Ironmaking & steelmaking*, 32(6), 503-508.
- Li, F., Li, X., Zhang, Y., & Gao, M. (2019). Phosphate Capacities of CaO–FeO–SiO<sub>2</sub>–Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Na<sub>2</sub>O/TiO<sub>2</sub> Slags. *High Temperature Materials and Processes*, 38(2019), 50-59.
- Li, G., Hamano, T., & Tsukihashi, F. (2005). The effect of Na<sub>2</sub>O and Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> on dephosphorization of molten steel by high basicity MgO saturated CaO-FeOx-SiO<sub>2</sub> slag. *ISIJ International*, 45(1), 12-18.
- Liang, P., & Bose, N. (1996). Neural network fundamentals with graphs, algorithms, and applications. *Mac Graw-Hill*.
- Lin, R. (2022). Analysis on the selection of the appropriate batch size in CNN neural network. 2022 International Conference on Machine Learning and Knowledge Engineering (MLKE),
- Liu, Z., Cheng, S. S., & Wang, L. (2021). Factors Influencing Dephosphorization of Low Carbon Steel in Converter. *Materials Science Forum*,
- Maia, T. A., & Onofri, V. C. (2022). Survey on the electric arc furnace and ladle furnace electric system. *Ironmaking & steelmaking*, 49(10), 976-994.
- Marcu, D. C., & Grava, C. (2021). The impact of activation functions on training and performance of a deep neural network. 2021 16th International Conference on Engineering of Modern Electric Systems (EMES),
- mathworks. (2024). *What Is a Machine Learning Model?* Retrieved 02-02-2024 from (<https://www.mathworks.com/discovery/machine-learning-models.html>)
- Mohanty, I., Bhattacharjee, D., & Datta, S. (2011). Designing cold rolled IF steel sheets with optimized tensile properties using ANN and GA. *Computational materials science*, 50(8), 2331-2337.
- Montgomery, D. C., Peck, E. A., & Vining, G. G. (2021). *Introduction to linear regression analysis*. John Wiley & Sons.
- Nassaralla, C., & Fruehan, R. (1992). Phosphate capacity of CaO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> slags containing CaF<sub>2</sub>, BaO, Li<sub>2</sub>O, or Na<sub>2</sub>O. *Metallurgical Transactions B*, 23, 117-123.
- Nenchev, B., Panwisawas, C., Yang, X., Fu, J., Dong, Z., Tao, Q., Gebelin, J.-C., Dunsmore, A. B., Dong, H. X., Li, M., Tao, B., Li, F. B., Ru, J., & Wang, F. (2022). Metallurgical Data Science for Steel Industry: A Case Study on Basic Oxygen Furnace. *steel research international*, 93.

- Oh, M. K., & Park, J. H. (2021). Effect of Industrial Waste fluxes (red mud and white mud) on dephosphorization and refractory corrosion: applications to electric arc furnace process using direct reduced iron. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 52, 3583-3595.
- Pandey, R., Dhoundiyal, M., & Kumar, A. (2015). Correlation analysis of big data to support machine learning. 2015 Fifth International Conference on Communication Systems and Network Technologies,
- Raj, J. S., & Ananthi, J. V. (2019). Recurrent neural networks and nonlinear prediction in support vector machines. *Journal of Soft Computing Paradigm (JSCP)*, 1(01), 33-40.
- Rathaba, L. P. (2004). *Model fitting for electric arc furnace refining*. University of Pretoria (South Africa).
- Ray, H., & Pal, S. (2004). Simple method for theoretical estimation of viscosity of oxide melts using optical basicity. *Ironmaking & steelmaking*, 31(2), 125-130.
- Reyad, M., Sarhan, A. M., & Arafa, M. (2023). A modified Adam algorithm for deep neural network optimization. *Neural Computing and Applications*, 35(23), 17095-17112.
- Rostamzadeh-Renani, M., Baghoolizadeh, M., Rostamzadeh-Renani, R., Toghraie, D., & Ahmadi, B. (2022). The effect of canard's optimum geometric design on wake control behind the car using Artificial Neural Network and Genetic Algorithm. *ISA transactions*, 131, 427-443.
- Rostamzadeh-Renani, R., Baghoolizadeh, M., Sajadi, S. M., Pirmoradian, M., Rostamzadeh-Renani, M., Baghaei, S., & Salahshour, S. (2023). Prediction of the thermal behavior of multi-walled carbon nanotubes-CuO-CeO<sub>2</sub> (20-40-40)/water hybrid nanofluid using different types of regressors and evolutionary algorithms for designing the best artificial neural network modeling. *Alexandria Engineering Journal*, 84, 184-203.
- Royes, P. T. e. L. (2015). *Composites aluminium-nanotubes de carbone pour application électrique: élaboration par métallurgie liquide, mise en forme et caractérisation* Ecole centrale de Lille].
- Ruiz, E., Ferreño, D., Cuartas, M., Lloret, L., Ruiz del Árbol, P. M., López, A., Esteve, F., & Gutiérrez-Solana, F. (2021). Machine learning methods for the prediction of the inclusion content of clean steel fabricated by electric arc furnace and rolling. *Metals*, 11(6), 914.
- Saxen, H., Gao, C., & Gao, Z. (2012). Data-driven time discrete models for dynamic prediction of the hot metal silicon content in the blast furnace—A review. *IEEE Transactions on Industrial Informatics*, 9(4), 2213-2225.

- Sharifzadeh, M., Sikinioti-Lock, A., & Shah, N. (2019). Machine-learning methods for integrated renewable power generation: A comparative study of artificial neural networks, support vector regression, and Gaussian Process Regression. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 108, 513-538.
- Sidharth. (2022). The RBF kernel in SVM: A Complete Guide. *PyCodeMates*. [https://www.pycodemates.com/2022/10/the-rbf-kernel-in-svm-complete-guide.html?m=1#google\\_vignette](https://www.pycodemates.com/2022/10/the-rbf-kernel-in-svm-complete-guide.html?m=1#google_vignette)
- Singh, R. (2020). *Applied welding engineering: processes, codes, and standards*. Butterworth-Heinemann.
- Son, K., Lee, J., Hwang, H., Jeon, W., Yang, H., Sohn, I., Kim, Y., & Um, H. (2021). Slag foaming estimation in the electric arc furnace using machine learning based long short-term memory networks. *Journal of Materials Research and Technology*, 12, 555-568.
- Suito, H., Inoue, R., & Takada, M. (1981). Phosphorus distribution between liquid iron and MgO saturated slags of the system CaO-MgO-FeOx-SiO<sub>2</sub>. *Tetsu-to-Hagané*, 67(16), 2645-2654.
- Thurnhofer-Hemsi, K., López-Rubio, E., Molina-Cabello, M. A., & Najarian, K. (2020). Radial basis function kernel optimization for support vector machine classifiers. *arXiv preprint arXiv:2007.08233*.
- Tomažič, S., Andonovski, G., Škrjanc, I., & Logar, V. (2022). Data-Driven Modelling and Optimization of Energy Consumption in EAF. *Metals*.
- Vieira, D., Almeida, R. A. M. d., Bielefeldt, W. V., & Vilela, A. C. F. (2016). Slag evaluation to reduce energy consumption and EAF electrical instability. *Materials Research*, 19, 1127-1131.
- Wang, J., Chen, Q., & Chen, Y. (2004). RBF kernel based support vector machine with universal approximation and its application. International symposium on neural networks,
- Wang, R., Mohanty, I., Srivastava, A., Roy, T. K., Gupta, P., & Chattopadhyay, K. (2022). Hybrid method for endpoint prediction in a basic oxygen furnace. *Metals*, 12(5), 801.
- Wang, Z.-L., Song, T.-L., Zhao, L.-H., & Bao, Y.-P. (2023). Study on Efficient Dephosphorization in Converter Based on Thermodynamic Calculation. *Crystals*, 13(7), 1132.
- Xi, X., Yang, S., Lai, C., Li, J., & Wang, F. (2019). Thermal physical properties and dephosphorisation kinetics of rare earth oxides containing slags. *Ironmaking & steelmaking*, 46(10), 968-973.

- Xu, R. Z., Zhang, J. L., Wang, Z. Y., & Jiao, K. X. (2017). Influence of  $\text{Cr}_2\text{O}_3$  and  $\text{B}_2\text{O}_3$  on viscosity and structure of high alumina slag. *steel research international*, 88(4), 1600241.
- Yang, X.-M., Li, J.-Y., Chai, G.-M., Duan, D.-P., & Zhang, J. (2016). Critical evaluation of prediction models for phosphorus partition between CaO-based slags and iron-based melts during dephosphorization processes. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 47, 2302-2329.
- Zhai, X., & Chen, M. (2023). Comparison of data-driven prediction methods for comprehensive coke ratio of blast furnace. *High Temperature Materials and Processes*, 42(1), 20220261.
- Zhang, R.-h., Yang, J., Yang, W.-k., & Sun, H. (2021). Kinetic model of dephosphorization in the new double slag converter steelmaking process. *Ironmaking & steelmaking*, 48(10), 1277-1290.
- Zhang, R., Yang, J., Wu, S., Sun, H., & Yang, W. (2023). Comparison of the Prediction of BOF End-Point Phosphorus Content Among Machine Learning Models and Metallurgical Mechanism Model. *steel research international*, 94(5), 2200682.
- Zhang, R., Yang, J., Xu, L., Wang, L., Sun, H., Yang, W., & Gao, J. (2024). Dephosphorization Kinetics of Hot Metal at Low Slag Basicity and Low Temperature under the Different  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  Addition Amounts. *steel research international*, 2300661.
- Zou, Y., Yang, L., Li, B., Yan, Z., Li, Z., Wang, S., & Guo, Y. (2022). Prediction Model of End-Point Phosphorus Content in EAF Steelmaking Based on BP Neural Network with Periodical Data Optimization. *Metals*, 12(9), 1519.