

DOI: 10.7524/j.issn.0254-6108.2014.01.007

基于人工神经网络的燃煤汞排放预测模型*

王凡¹ 刘宇¹ 王相凤¹ 张辰¹ 曹晴¹ 张凡^{1**}
邓双¹ 陈育武² 王立刚²

(1. 中国环境科学研究院, 北京, 100012; 2. 北京科技大学, 北京, 100083)

摘要 利用 GA-BP 的人工神经网络算法建立燃煤汞排放预测模型, 确定煤中汞含量、煤的发热量、煤中硫含量、煤中氯含量、挥发份含量、排烟温度作为输入矢量, 元素态汞、氧化态汞和颗粒态汞 3 个因素作为输出参数, 通过对 20 个燃煤锅炉汞排放形态的测试数据进行模型训练, 结合实际测试数据和预测数据对误差来源进行了分析。通过对 3 个样本进行验证, 分析人工神经网络的实际预测效果。研究结果表明, 训练与预测的精度都是符合汞排放预测实际要求的, 预测精度达 0.895, 分析表明利用人工神经网络建立预测模型可对燃煤汞排放进行预测。

关键词 燃煤烟气, 预测模型, 汞形态。

Study on prediction model for mercury speciation of coal combustion flue gases by using ANN

WANG Fan¹ LIU Yu¹ WANG Xiangfeng¹ ZHANG Chen¹ CAO Qing¹
ZHANG Fan^{1*} DENG Shuang¹ CHEN Yuwu² WANG Ligang²

(1. Chinese Research Academy of Environmental Sciences, Beijing, 100012, China;

2. Beijing University of Science and Technology, Beijing, 100083, China)

Abstract: A mercury emission prediction model of GA-BP was developed and improved based on traditional BP neural networks, in which mercury content of coal, calorific value, sulfur content of coal, chlorine content of coal, volatile content, and flue gas temperature had been evaluated and selected as the input characteristic variants, and 3 mercury speciations including elemental mercury, divalent mercury and particulate mercury were set as outputs. Analysis results of 20 coal-fired boilers had been used as training input samples, and source of training error had been discussed. 3 samples were used for testing the predicting model, and predicting accuracy of the prediction model also evaluated. The results showed that the results of training and predicting were greatly coordinated with the actual measurement results, and the training correlation efficiency was as high as 0.895. It is deduced that the GA-BP is achievable for prediction of mercury speciation.

Keywords: coal fired flue gases, predicting model, mercury speciation.

随着对大气中汞污染问题的日益关注, 燃煤烟气汞的排放规律和控制技术已成为目前大气污染控制的重要研究方向^[1-2]。煤在燃烧过程中, 绝大部分汞进入烟气并排放到大气中, 成为大气中汞的重要来源。烟气中的汞主要有气态汞和颗粒态汞(Hg_p)两种^[3-4], 而气态汞中主要以元素态汞(或零价汞, Hg_g^0)和氧化态汞(或二价汞, Hg_g^{2+})存在, 其中最主要的是 Hg_g^0 。 Hg_g^0 有熔点低、不易溶于水等特点, 在烟气排放过程中很难通过飞灰或炉渣吸附去除^[5]。分析燃煤烟气中汞的形态对汞的控制有重要的指导作

2013年5月3日收稿。

* 国家高技术研究发展计划(863计划)(2012AA06A11303); 环保公益性行业科研专项(200909025, 201009048)资助。

** 通讯联系人, Tel: 010-84915188; E-mail: zhangfan5188@vip.sina.com

用。由于不同煤种、不同规模的锅炉、不同燃烧方式对不同形态的汞排放影响差别较大,目前对燃煤烟气中汞的排放形态分析和燃煤汞排放控制研究得较多,但缺少对燃煤烟气不同形态汞排放的数学量化分析模型^[6],通过建立燃煤汞排放预测模型,可实现对燃煤烟气排放不同形态汞的预测。

影响燃煤不同形态汞排放的因素主要有煤的化学成分、煤的发热量、煤的灰分、锅炉规模、燃烧方式、烟气控制设施等,各种因素对不同形态的汞排放量均不是线性关系,而是多种因素经复杂的相互作用^[7-8],因而通过拟合迭代计算建立的数学模型精确性较差,并不能真实反应燃煤不同形态汞的排放机理。

人工神经网络不同于其他的数学模型,它具有类似人脑思维逻辑原理的学习,适应及“函数逼近”的能力^[9-13],因此对于煤种含汞量、氯含量、硫含量、水分含量等参数的变化趋势与输出参数 3 种不同形态的汞(元素态汞、氧化态汞、颗粒态汞)之间建立关系有重要的优势。而且神经网络算法可以避免其他数学定量分析方法的抗干扰性不强、稳定性差及不容易收敛等问题,适用于燃煤电站锅炉汞排放这种具有多种影响相关因子的系统。Zhao 等人^[14]将 ANN 对锅炉燃烧方式、脱硫脱硝除尘装置、燃煤化学成分和烟气排放温度等参数作为输入向量,将锅炉出口烟气中总汞和零价汞的浓度作为输出神经元,建立有导师学习规则的 B-P 数学模型,通过对 59 个神经元样本的学习,将预测得到的结果与测量结果相比较,研究发现二者符合得很好。Robert 等人^[15]利用 ANN 将燃煤锅炉、燃煤特征、烟气控制系统的技术参数作为输入神经元,将美国 76 个电厂作为学习样本开发了燃煤汞排放数学模型,发现预测结果与测量值的正确率达 0.9750。人工神经网络的 B-P 算法具有复杂的非线性映射能力,能够很好地捕捉各预测要素之间内在的规律性,不需要设计任何数学模型和计算各因子对预测评估模型的影响程度,通过对大量样本数据的竞争学习,完成整个网络的信息处理,从而得到很好的预测结果。Abdel-Aal 等人^[16]利用基于模拟退火的人工神经网络算法,建立基于数据分组处理方法(GMDH)汞形态排放预测模型,对 6 个输入参数进行训练,结果表明训练数据的相关度可达 0.97。

本研究通过分析燃煤排放不同形态的汞相关的因素,选择预测模型的输入参数,对 BP 算法进行改进,并对传统的 BP 人工神经网络算法进行改进,建立一种 GA-BP 网络训练新算法的人工神经网络数学模型,将模拟所得数据与实际实验数据进行了对比分析,并分析误差产生的原因,为完善燃煤汞排放预测模型提供依据。

1 燃煤烟气汞排放预测模型的建立

1.1 神经网络变量的确定

应用人工神经网络进行燃煤锅炉汞排放预测有两种方法^[17]:一种是训练样本全部由过去的汞排放历史数据组成;另一种是训练样本由影响汞排放变化因素的历史记录组成。由于对燃煤锅炉系统的汞排放预测是为了通过对燃煤锅炉现有的分析数据测算其对不同形态汞的排放浓度和排放量,不需通过获得多年详细准确的历史排放数据来预测汞的排放,本研究采用的训练样本是由汞排放的影响因素组成的。

人工神经网络只要有样本就可以通过网络训练得出满足精度要求的输出结果,但如果忽略有重要影响的参数或选择一些无关紧要的影响参数作为网络的输入时,用得出的网络训练结果预测新样本会产生大的误差。研究表明,影响燃煤烟气中汞形态分布的因素主要有:煤种、煤中硫含量、排烟温度、烟气组分、飞灰含量及元素组成,锅炉负荷和脱硫除尘系统的布置等^[18-19]。本文通过大量燃煤烟气汞排放影响因素的相关性研究,选取了 6 个重要影响参数组成输入矢量:煤中汞含量、煤的低位发热量、煤中硫含量、煤中氯含量、挥发份含量、排烟温度。确定预测模型的输出参数分别为:元素态汞、氧化态汞、颗粒汞 3 种汞形态。

1.2 神经网络结构

(1) 网络隐层层数的确定

人工神经网络隐含层数一般通过经验确定,增加隐含层数可提高人工神经网络预测精度,但网络的复杂程度也随之增加,导致训练时间急剧增加,而且局部最小误差也会增加,网络的连接权系数矩阵也因此难以调整到最小误差处。本研究通过多次误差试验测算,确定采用 1 个隐含层,在保证训练精度的条件下,大大缩短训练时间。

(2) 网络隐层节点数的确定

隐含层节点数的选取是决定神经网络训练精度的关键, 隐含层节点数存在一个最佳值的。由于隐含层节点数的计算函数与函数本身的波动特征和精度有关, 到目前为止没有一个较好的解析式来表示^[20]。Kawashima^[21] 提出隐含层神经元节点数通过经验的方法 $2n + 1$ (n 为输入层神经元个数), 但这种方法在每增加一次新的隐单元时, 训练都应重新开始, 而不能采用上一次训练后所得到的连接权系数矩阵, 浪费计算时间。本文通过几种方法的比选, 参考 Kolmogorov 定理, 确定通过以下的经验公式确定隐含层节点数:

$$n_1 = \sqrt{m + n} + a$$

式中, m : 输出神经元数; n : 输入神经元数; a : 1—10 之间的常数

(3) 网络拓扑结构的选择

采用图 1 所示的 3 层网络结构, 根据分析选取 6 个输入层神经元节点, 3 个输出层神经元节点, 隐含层神经元节点选取 11 个。输入层神经元到隐含层神经元激活函数为 tansig 函数, 隐含层神经元到输出层神经元的激活函数采用 Purelin 函数。

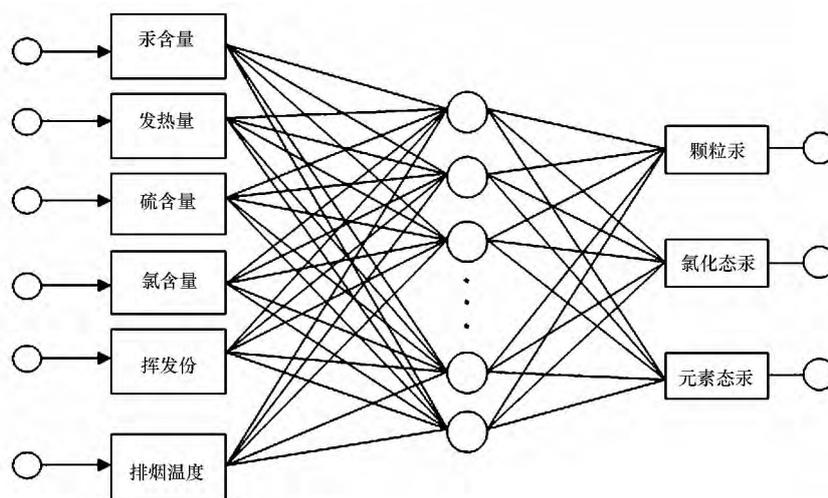


图 1 BP 神经网络结构

Fig. 1 Topology structure of BP network

1.3 人工神经网络的改进

(1) 初始数据的归一化

为提高神经网络学习速度, 需要对输入样本进行归一化^[22]。通过归一化将输入样本的数据经过特定的算法处理限制在一定范围内, 便于后续数据的处理, 加快程序运行时收敛速度。本研究采用的归一化方法如下式所示:

$$X_i = (X_{di} - X_{dmin}) / (X_{dmax} - X_{dmin})$$

式中, X_{di} 为归一化前的输入值; X_{dmin} 为归一化前输入值中的最小值; X_{dmax} 为归一化前输入值中的最大值。

(2) GA 遗传算法

利用基于全局搜索的 GA (Genetic Algorithm) 遗传算法对 BP 算法进行改进, 建立一种 GA-BP 网络训练新算法^[23]。通过采用 GA 遗传算法对初始权值分布进行优化, 在解空间中定位出搜索空间, 利用 BP 算法在该解空间中搜索出最优解^[24]。本文采用 trainbpx 的训练函数, 对网络进行训练。

2 结果与讨论

2.1 网络的训练

通过对采集的 23 个燃煤锅炉数据作为样本, 数据为锅炉出口后烟气处理装置前采样分析得到的结

果. 数据经归一化预处理, 选择 20 个样本数据进行训练, 训练样本数据见表 1. 采用 GA 遗传算法训练人工神经网络的初始权值和阈值时, 初始种群数目 IV 设为 25, 遗传代数设为 200 代, 最大训练步数设为 10000, 训练误差设为 0.01. 训练回归结果如图 2 所示.

表 1 网络部分训练数据
Table 1 Mercury speciation

序号	元素态汞含量/($\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$)		氧化态汞含量/($\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$)		颗粒态汞含量/($\mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$)	
	实测值	训练值	实测值	训练值	实测值	训练值
1	1.13	0.91	7.86	7.23	3.28	3.12
2	1.67	1.66	7.37	7.11	3.95	4.05
3	7.04	7.68	4.54	4.52	0.01	0.10
4	8.20	7.79	3.05	3.56	0.01	0.05
5	9.23	9.10	0.67	0.68	0.01	0.04
6	9.61	9.80	4.17	4.64	0.01	0.07
7	2.24	2.28	6.44	6.82	0.24	0.67
8	2.00	1.47	6.09	5.57	0.13	0.29
9	4.46	4.67	2.74	2.94	0.62	1.68
10	1.01	1.71	6.29	6.05	0.20	0.55
11	5.36	10.66	0.33	0.80	0.10	0.47
12	3.93	4.36	6.36	5.72	0.78	0.68
13	0.01	0.02	0.01	0.20	1.10	1.82
14	0.31	0.51	0.97	0.91	6.65	6.40
15	0.01	0.11	0.01	0.05	0.43	0.21
16	2.58	1.96	2.99	1.92	4.02	4.41
17	6.24	6.31	1.03	1.02	0.02	0.84
18	1.21	0.05	5.95	6.42	0.20	0.47
19	3.37	3.71	2.05	1.96	1.17	1.16
20	0.14	0.77	0.17	0.12	6.42	6.55

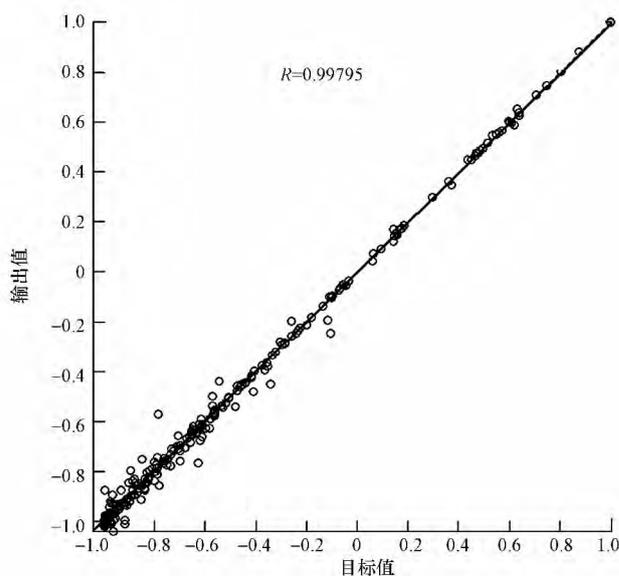


图 2 线性回归结果

$$\text{输出值} = 1 \times \text{目标值} + 0.0024$$

Fig. 2 Results of linear regression

通过对网络进行多次训练结果表明, 利用 GA 遗传算法优化 BP 神经网络结构, GA-BP 算法进行了 9477 次迭代计算后训练误差低于 0.01, 达到了预计精度要求. 对 20 个样本数据进行训练后的元素态、氧化态和颗粒态汞的实测值与训练值的对比如图 3 所示.

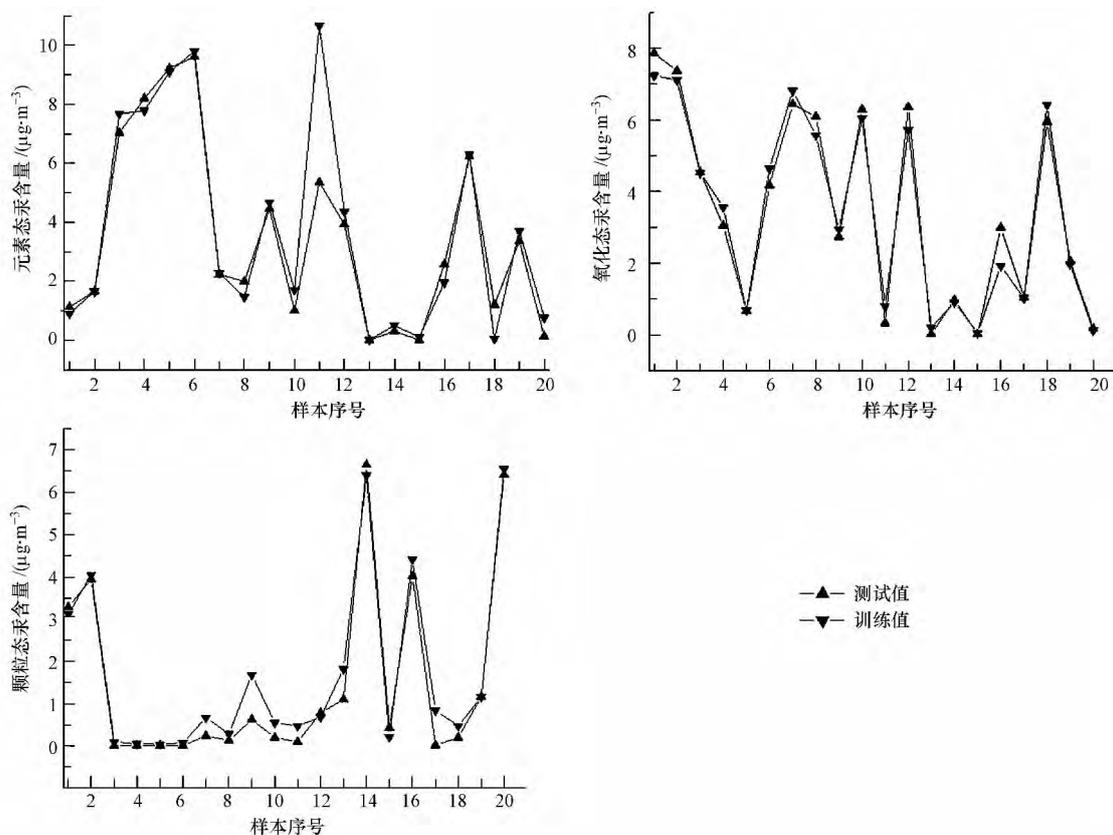


图3 训练样本元素态汞、氧化态汞和颗粒态汞数据训练值与实测值对比

Fig. 3 Comparison between simulated values and measured values of elemental mercury, oxidized mercury and particulate mercury for the training samples

观察图3看出,实际训练得到的网络对于输入参数矩阵的训练验证结果较准确,绝对误差大多都在 $0.01\text{—}1.2\ \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$ 之间。图3所示第11个样本中元素态汞实测值为 $5.36\ \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$,而训练预测值为 $10.66\ \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$,为预测的最大误差,这种显著性的误差可以舍去。综合以上分析说明,该预测模型具有可以实际应用的训练精度。

网络训练的预测结果受样本数量集的影响明显。由于神经网络对样本的训练是一个整体逼近过程,如果训练时使用的样本数据较少,则其预测结果往往会偏离实际结果;选用过多的样本时其预测精度虽可以满足一定的要求,但如果输出主要集中在某一相对较小的范围内就不能明显反映出原始测试数据的变化,最后导致失真^[23]。因此,在神经网络训练时应根据经验和多次试验,选取合理的样本规模对网络进行训练。

2.2 网络的预测

一个GA-BP神经网络模型的性能是否准确反应样本的数据,主要是从该模型的预测精度来看的。利用未经训练的3组样本数据,对建立的人工神经网络预测模型进行验证,得到相应的3组预测数据,分别如图4所示。观察图4可以看出,预测样本的预测数据误差在 $0.01\text{—}1.1$ 之间,预测精度为 0.895 。说明本研究建立的基于遗传算法的BP神经网络模型对预测燃煤烟气中汞形态浓度的分布是可行的,具有较高的预测精度。

2.3 误差来源分析

预测模型的误差主要是因为:

(1) 煤质分析数据的误差主要来自于采样是否有代表性、测量的精确度等,特别是燃煤汞测量误差,对预测模型影响较大。

(2) 烟气汞测量误差,汞形态采样采用的OH法操作比较复杂,由于人员经验问题导致的操作过程中也会产生误差,同时制样和测量过程中的误差也不容忽略。

(3) 预测数学模型的建立、软件程序编写和训练主要取决于预测人员的经验以及判断力,难免会出现误差。

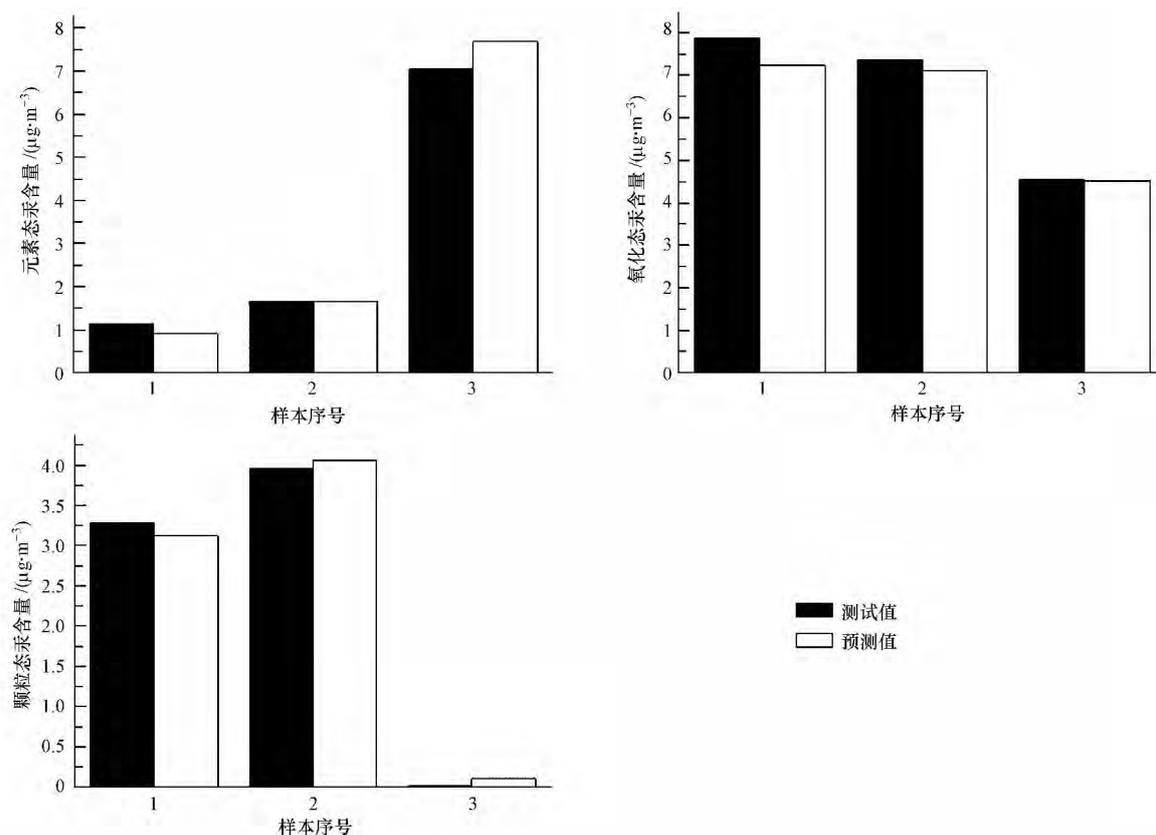


图4 样本元素态汞,氧化态汞和颗粒态汞的预测值与实测值对比

Fig.4 Comparison between predicted values and measured values of elemental mercury, oxidized mercury and particulate mercury

3 结论

(1) 通过调整神经网络的初始参数与训练方法,建立一个燃煤锅炉重金属排放神经网络预测模型,可用于较准确地对燃煤烟气不同形态汞的排放进行预测。

(2) 运用 GA-BP 神经网络进行燃煤汞排放预测有较强的系统稳定性、容错性、抗干扰性等,较好地弥补了传统预测方法的不足,具有一定的优势,预测精度达 0.895,有较好的预测效果。

(3) 在运用神经网络进行预测时,误差的来源主要有实验数据测定的准确性、网络初始权值的赋值、神经网络模型参数的选择、输入输出样本数据选择的准确性和全面性、数据处理的可靠性等。在运用人工神经网络进行预测时,应从这些方面进行重点考虑。

参 考 文 献

- [1] 张军营,任德怡,徐德伟. 煤中汞及其对环境的影响[J]. 环境科学进展,1999,7(3): 100-104
- [2] 廖自基. 环境中微量重金属元素的污染危害与迁移转化[M]. 北京: 科学出版社,1989
- [3] 姚强等. 洁净煤技术[M]. 北京: 化学工业出版社,2005 1: 165-177
- [4] Wang S X, Zhang L, Li G H et al. Mercury emission and speciation of coal-fired power plants in China[J]. Atmospheric Chemistry and Physics, 2010, 10: 1183-1192
- [5] 王立刚,徐雪,王凡,等. 燃煤飞灰粒径分布函数的分形特征及其对吸附性能的影响[J]. 环境化学,2008,27(2): 215-217
- [6] 吴成军,段钰锋. 燃煤烟气中汞形态分布的神经网络预测研究[J]. 电站系统工程,2007,23(6): 15-16
- [7] 朱珍锦,薛来,谈仪. 负荷改变对煤粉锅炉燃烧产物中汞的分布特征影响研究[J]. 中国电机工程学报,2001,21(7): 87-94
- [8] 赵毅,王丽蓉. 火电厂燃煤中汞的迁移转化规律研究[J]. 中国电力,1994,6: 52-54

- [9] Kaan Yetilmezsoy ,Sevgi Demirel. Artificial neural network (ANN) approach for modeling of Pb(II) adsorption from aqueous solution by Antep pistachio (Pistacia Vera L.) shells. *Journal of Hazardous Materials* ,2008 ,153(3) : 1288-1300
- [10] 王琳琳. BP 神经网络用于城市土壤中重金属(Cd、Pb) 形态分析的研究[D]. 长春: 吉林大学, 2009
- [11] 鲁文华. 电站锅炉受热面积灰、结渣在线监测的研究与应用[D]. 北京: 华北电力(北京) 大学, 2002
- [12] 杨甲沛. 基于自适应学习速率的改进型 BP 算法研究[D]. 天津: 天津大学, 2008
- [13] Kashani M N ,Aminian J ,Farrokhi M. Dynamic crude oil fouling prediction in industrial preheaters using optimized ANN based moving window technique[J]. *Chemical Engineering Research & Design* 2012 90(7) : 938-949
- [14] Zhao B T ,Zhang Z ,Jin X J ,et al. Modeling mercury speciation in combustion flue gases using support vector machine: Prediction and evaluation[J]. *Journal of Hazardous Materials* ,2010(174) : 244-250
- [15] Robert R J ,Shankar K ,Hossein S. Artificial neural network-based estimation of mercury speciation in combustion flue gases [J]. *Fuel Processing Technology* ,2004 ,85(6/7) : 451-462
- [16] Abdel-Aal R E. Predictive modeling of mercury speciation in combustion flue gases using GMDH-based abductive networks [J]. *Fuel Processing Technology* ,2007 88(5) : 483-491
- [17] Lee S J ,Seo Y C ,Jongsoo Jurng J S ,et al. Mercury emission from selected stationary combustion sources in Korea [J]. *Science of the Total Environment* ,2004 325: 55-161
- [18] 朱珍锦 薛来 谈仪. 负荷改变对煤粉锅炉燃烧产物中汞的分布特征影响研究[J]. *中国电机工程学报* 2001 21(7) : 87-94
- [19] 赵文秀. 小波网络在空调负荷预测中的应用[D]. 西安: 西安科技大学, 2009: 19-22
- [20] 浦健 程静. 基于 PSO-Elman 神经网络的汽轮机排汽焓在线预测计算[J]. *南京师范大学学报(工程技术版)* ,2009 ,19(2) : 35-39
- [21] Kawashima M. Artificial neural network back propagation model with three-phase annealing developed for the building energy predictor shootout [J]. *ASHRAE Trans* ,1994 ,100(2) : 1096-1103
- [22] Lin J Z ,Luo Z ,Tong L Y. A new multi-objective programming Scheme for topology optimization of compliant mechanisms [J]. *Struct Multidisc Optim* ,2010 ,(40) : 241-255
- [23] Lau G K ,Du H ,Lim M K. Use of functional specifications as objective functions in topological optimization of compliant mechanism [J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* ,2011 ,(190) : 4421-4433
- [24] Villers J. Back-propagation Neural Nets with One and Two Hidden Layers [J]. *IEEE Trans On Neural Networks* ,1992 4(1) : 136-146