DOI:10.3969/j. issn. 1000-1298. 2010. 03. 023

稻秆气化焦油催化裂解脱除过程模型改进与优化

李大中 王 卉

(华北电力大学自动化系, 保定 071003)

【摘要】 对所建立的稻秆气化焦油催化裂解脱除过程 LS - SVM 模型进行了改进,将原模型的核函数由高斯径向基 RBF 核函数改为线性 lin 核函数,并对改进以后的模型进行了验证,在此基础上对稻秆气化焦油催化裂解过程作了优化。结果表明,改进以后的模型具有更好的模拟效果和泛化能力,且当催化裂解温度为 949. 135 6℃,气相停留时间为0. 981 9 s时,焦油催化裂解率达到最大值98. 687 7%。

关键词:稻秆 气化 焦油催化裂解 模型改进 优化

中图分类号: TK6 文献标识码: A 文章编号: 1000-1298(2010)03-0109-04

Improving and Optimizing the LS – SVM Model of the Rice Straw Gasification Tar Removal Process by Catalytic Cracking

Li Dazhong Wang Hui

(Department of Automation, North China Electric Power University, Baoding 071003, China)

Abstract

The LS-SVM model of the rice straw gasification tar removal process by the catalytic cracking was improved. Linear kernel function was chosen as the kernel function of the model. Moreover, the validation of the improved model was conducted. On this basis, an optimized calculation of the rice straw gasification tar removal process by the catalytic cracking was done. The results indicated that the improved model had better simulation effects and generalization ability, and when the catalytic cracking temperature reached 949.135 6 $^{\circ}$ C, the gas residence time was 0.981 9 s, the maximum of the tar catalytic cracking rate can be 98.687 7 $^{\circ}$ C.

Key words Rice straw, Gasification, Tar catalytic cracking, Model improving, Optimization

引言

生物质气化过程中产生的有机物包括小分子碳氢化合物和大分子多核芳香族碳氢化合物。大分子多核芳香族碳氢化合物。大分子多核芳香族碳氢化合物即为焦油^[1]。焦油的存在不仅导致产气率降低,还会堵塞和腐蚀设备,严重时无法正常生产。因此,在生物质气化过程中,必须采用一定的方法把气化气中焦油的含量降到最低,使焦油裂解率达到最高。在生物质的气化过程中,影响焦油含量因素很多,诸如气化剂的种类、催化剂的添加量、物料粒度、气相停留时间、催化裂解温度和当量比等。本文首先基于最小二乘支持向量机建立稻

秆热解气化焦油催化裂解脱除过程模型,在此基础上,对所建立的模型采用粒子群算法进行优化计算。

1 气化过程焦油脱除模型的建立

1.1 最小二乘支持向量机模型的建立

本文采用文献[2]中提出的最小二乘支持向量机模型建立简化的生物质气化过程中焦油脱除的LS-SVM模型。

最小二乘支持向量机(least squares support vector machine,简称 LS - SVM)^[3]是标准支持向量机的一种扩展,优化指标采用平方项,并用等式约束代替标准支持向量机的不等式约束,即将二次规划

问题转化为线性方程组求解,降低了计算的复杂性,提高了求解速度^[4]。

最小二乘支持向量机算法^[5]:设训练样本集 $D = \{(x_i, y_i) \mid i = 1, 2, \cdots, l\}, x_i \in \mathbf{R}$ 是输入数据, $y_i \in \mathbf{R}$ 是输出数据。在权 $\boldsymbol{\omega}$ 空间(原始空间)中的优化问题可以描述为

$$\min J(\boldsymbol{\omega}, \boldsymbol{\varepsilon}_i) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\omega}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{\omega} + \frac{1}{2} C \sum_{i=1}^{l} \boldsymbol{\varepsilon}_i^2$$

约束条件

s. t.
$$y_i = \boldsymbol{\omega}^{\mathsf{T}} \varphi(x_i) + b + \varepsilon_i \quad (i = 1, 2, \dots, l)$$
相应的拉格朗日函数为

$$L = J - \sum_{i=1}^{l} a_i \{ \boldsymbol{\omega}^{\mathsf{T}} \boldsymbol{\varphi}(x_i) + b + \varepsilon_i - y_i \}$$

$$(i = 1, 2, \dots, l)$$

求解的优化问题转换为求解线性方程

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & K(x_1, x_1) + 1/C & \cdots & K(x_1, x_i) + 1/C \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & K(x_i, x_1) + 1/C & \cdots & K(x_i, x_i) + 1/C \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b \\ a_1 \\ \vdots \\ a_t \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} 0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_s \end{bmatrix} \tag{1}$$

式(1)中, $K(x_i,x_j) = \mathbf{x}_i^{\mathsf{T}} \mathbf{x}_j, i, j = 1, 2, \cdots, l$,为核函数。 LS-SVM的函数估计^[6]为

$$y(x) = \sum_{i=1}^{l} a_i K(x, x_i) + b$$
 (2)

式中 1---训练次数

 a_i , b 由式(1)求解出。

核函数有不同的形式,文献[7]依据最小二乘支持向量机建立模型时采用的是高斯径向基核函数(RBF核函数),为了建立更加适合于稻秆气化焦油催化裂解脱除过程的模型,并能更加有效地模拟焦油催化裂解过程特性,本文对文献[7]中模型的核函数做了调整,即将原RBF核函数选为线性 lin 核函数。验证结果表明,基于 lin 核函数建立的模型平均相对误差小于RBF核函数模型的平均相对误差。

为了便于建模和验证,同时保证模型的通用性和正确性,仍以文献[7]中的实验数据为例,以催化裂解温度(T)和气相停留时间(t)作为模型输入,以焦油催化裂解率(y_{η})作为模型输出,建立一种简化生物质气化焦油脱除过程的 LS – SVM 模型,如图 1 所示。

1.2 模型验证

以稻秆作为分析对象,采用石灰石作为催化剂



图 1 生物质气化过程中焦油脱除支持向量机模型 Fig. 1 Tar removal model in the biomass gasification process based on SVM

对稻秆热解气化焦油进行催化裂解。

(1)训练样本数据的选取

选取 16 组数据作为模型的训练数据,即催化裂解温度 T 分别为 600、690、790、880 $^{\circ}$ 、气相停留时间 t 分别为 0.5、0.6、0.71 和 0.81 s。

(2)模型训练

函数估计的 LS – SVM 模型包含未知参数 C,通过对参数的选择可以使模型达到最佳。将遗传算法嵌入到 LS – SVM 模型中进行参数寻优,以达到最佳精度。选择初始种群规模为 100,遗传代数为 100,参数寻优范围为 $C \in [1,1000]^{[8]}$,得到模型参数寻优结果为 C = 1.0504。根据得到的最优化参数 C 对 LS – SVM 模型进行训练,从而确定基于稻秆热解气化焦油催化裂解脱除的最优 LS – SVM 模型为

 $y_{\eta} = \sum_{i=1}^{16} a_i K(x, x_i) + b$

其中

 $a = \begin{bmatrix} 0.1657, 0.0028, 0.0818, 0.0092, \\ -0.4479, -0.4754, -0.3965, -0.086, \\ 0.3029, 0.2866, 0.2416, 0.214, 0.1064, \\ -0.0001, -0.1691, 0.164 \end{bmatrix}^{T}$ $b = -8.587739980083207 \times 10^{-16}$

(3)测试样本数据的选取

为了验证模型的准确性,以气相停留时间为 t = 0.95 s,催化裂解温度分别为 T = 600、690、790、880℃的4组数据作为测试样本数据。

(4)模型验证及结果分析

在模型训练的基础上,最后把测试样本输入训练好的模型进行泛化能力的检验。结果为,焦油催化裂解率平均相对误差为1.6552%,可以认为模型具有较好的泛化能力和拟合效果,在实际过程中可以采用该方法对生物质气化过程中焦油的催化裂解脱除进行模拟预测。焦油催化裂解率的模型输出值与实验值的比较如表1所示。

文献[7]建立的最小二乘支持向量机模型,核函数选取的是 RBF 核函数,最后对模型进行验证得到焦油催化裂解率的平均相对误差为 2.117 2%。而本文采用 lin 核函数,所得到焦油催化裂解率的的平均相对误差为 1.655 2%,由此可见,采用 lin 核函数建立的模型具有更好的拟合效果和泛化能力。

表 1 焦油催化裂解率的模型输出值与实验值的比较 Tab. 1 Comparison between model value and experimental value of tar catalytic cracking rate

催化裂解 温度 T/℃	气相停留 时间 t/s	实验 值/%	模型输出值/%	相对误 差/%
600	0.95	69.3	70.4814	1.7048
690	0.95	76.0	77.635 5	2.1388
790	0.95	88.0	85.5635	2.7688
880	0.95	92.7	92.7076	0.0082

2 焦油催化裂解脱除过程优化

基于上述模型,对稻秆气化焦油催化裂解脱除过程进行优化,即找出气化过程中焦油催化裂解率达到最高时的最优输入参量:催化裂解温度 T 和气相停留时间 t。

2.1 优化目标函数模型的建立

(1)选取优化目标函数模型为

$$y_{\eta} = \sum_{i=1}^{16} a_i K(x, x_i) + b$$

其中

a = [0.1657, 0.0028, 0.0818, 0.0092, -0.4479,

$$-0.4754, -0.3965, -0.086, 0.3029,$$

0. 286 66, 0. 241 6, 0. 214, 0. 106 4, -0. 000 1,

$$-0.1691, 0.164$$
^T

 $b = -8.587739980083207 \times 10^{-16}$

(2)约束条件的确立

依据文献[7],选取催化裂解温度 T 的范围为: 500~950℃;选取气相停留时间 t 范围为:0.5~1 s。

2.2 遗传算法优化

基于上述优化目标函数模型,采用遗传算法进行优化,得到优化结果为:当催化裂解温度为947.2515℃、气相停留时间为0.9846s时,焦油催化裂解率达到最大值98.5803%。与文献[7]同样采用遗传算法的优化计算结果:催化裂解温度为937.0101℃、气相停留时间为0.9041s时,焦油催化裂解率最大值95.4418%相比,新建模型的优化结果更好。

2.3 粒子群算法优化

基于上述建立的优化目标函数模型,采用粒子群算法进行优化。粒子群优化的参数设定:种群数 N=30,最大迭代次数 $l_p=100$,为了进一步提高算法的性能,惯性系数 w 采用 Shi Yuhui 1999 年提出的 w 随着迭代次数线性递减的策略 [9],即

$$w = w_{\text{max}} - \frac{w_{\text{max}} - w_{\text{min}}}{l_{n}} k$$

 w_{max} 和 w_{min} 是 w 的最大值和最小值,取 w_{max} = 0.9, w_{min} = 0.4, c_1 = c_2 = 2。用粒子群算法优化参数,粒子的位置为二维实数,分别对应待优化的变量,即催化裂解温度 T 和气相停留时间 t,粒子位置的范围根据给定约束条件确定。粒子群算法优化控制参数流程如图 2 所示。

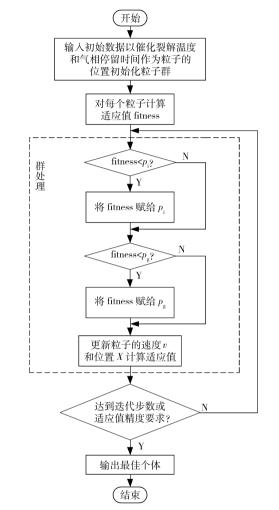


图 2 粒子群算法优化流程

Fig. 2 Optimizing flowchart by particle swarm algorithms

采用上述方法进行迭代计算,经过100步迭代, 得到最佳样本为

Best
$$S = [949. 135 6, 0. 981 9]$$

即当催化裂解温度为 949. 135 6℃, 气相停留时间为 0. 981 9 s 时, 焦油催化裂解率达到 98. 687 7%。

2.4 结果分析

通过以上优化计算结果可以看出,粒子群算法 的优化效果比遗传算法的效果更好。这也正符合粒 子群算法实现容易、精度高、收敛速度快的特点。

3 结束语

(1)以线性 lin 核函数取代了文献[7]模型中高斯径向基 RBF 核函数,改进了稻秆热解气化焦油催

化裂解脱除过程 LS - SVM 模型。与文献[7]模型相比,本文模型的平均相对误差为 1.655 2%,小于文献[7]模型的平均相对误差 2.117 2%,验证了本文模型具有更好的拟合效果和精度。

(2)基于改进模型,对稻秆热解气化焦油催化 裂解脱除过程进行了优化,得到了当催化裂解温度 为949.1356℃,气相停留时间为0.9819s时,焦油 催化裂解率最大值为98.6877%。

参考文献

- 1 孙云娟,蒋剑春.生物质气化过程中焦油的去除方法综述[J].生物质化学工程,2006,40(2):31~35. Sun Yunjuan, Jiang Jianchun. A review of measures for tar elimination in biomass gasification processes [J]. Biomass Chemical Engineering, 2006, 40(2):31~35. (in Chinese)
- 2 李大中,王臻.基于最小二乘支持向量机的生物质气化过程模型建立[J].系统仿真学报,2009,21(3):629~633. Li Dazhong, Wang Zhen. The establishment of the model in the biomass gasification process based on least squares support vector machine[J]. Journal of System Simulation, 2009,21(3):629~633. (in Chinese)
- 3 Suykens J A K, Vandewale J. Least squares vector machine classifiers [J]. Neural Processing Letters, 1999, 9 (3): 293 ~ 300.
- 4 杨延西,刘丁. 基于小波变换和最小二乘支持向量的短期电力负荷预测[J]. 电网技术, 2005, 29 (13):60~64. Yang Yanxi, Liu Ding. Short-term load forecasting based on wavelet transform and least squares support vector machines[J]. Power System Technology, 2005, 29(13):60~64. (in Chinese)
- 5 阎威武,朱宏栋,邵惠鹤. 基于最小二乘支持向量机的软测量建模[J]. 系统仿真学报,2003,15(10):1494~1496.
 Yan Weiwu, Zhu Hongdong, Shao Huihe. Soft sensor modeling based on least squares support vector machine[J]. Journal of System Simulation, 2003,15(10):1494~1496. (in Chinese)
- 6 韩璞,李大中,王臻. 生物质气化过程最小二乘支持向量机建模探讨[J]. 节能技术,2008(1):3~7. Han Pu, Li Dazhong, Wang Zhen. A study on the biomass gasification process model based on least squares SVM[J]. Energy Conservation Technology, 2008 (1):3~7. (in Chinese)
- 7 李大中,王卉,韩璞. 生物质气化焦油催化裂解脱除过程建模与优化[J]. 热力发电,2009,38(7):102~105. Li Dazhong, Wang Hui, Han Pu. Model-building and optimization for extrication process of tar produced in gasification by using catalytic cracking[J]. Thermal Power Generation, 2009,38 (7):102~105. (in Chinese)
- 8 方瑞明. 支持向量机理论及其应用分析[M]. 北京:中国电力出版社,2007.
- 9 金欣磊. 基于 PSO 的多目标优化算法研究及应用[D]. 杭州:浙江大学,2006.
- 10 骆仲泱,张晓东,周劲松,等. 生物质热解焦油的热裂解与催化裂解[J]. 高校化学工程,2004,18(2):162~167. Luo Zhongyang, Zhang Xiaodong, Zhou Jinsong, et al. Experimental study on catalytic and thermal cracking of tar from biomass pyrolysis[J]. Journal of Chemical Engineering of Chinese Universities, 2004, 18 (2):162~167. (in Chinese)
- 11 张晓东,周劲松,骆仲泱,等. 生物质热解煤气中焦油含量的影响因素[J]. 燃料科学与技术, 2003, 9 (4):329~334. Zhang Xiaodong, Zhou Jinsong, Luo Zhongyang, et al. Influence of pyrolysis parameters on tar content in the gas[J]. Journal of Combustion Science and Technology, 2003, 9(4):329~334. (in Chinese)
- 12 王磊,吴创之,赵增立. 热解焦对生物质焦油催化裂解的影响[J]. 太阳能学报, 2006, 27(5):514~518.
- 13 周劲松,王铁柱,骆仲泱,等.生物质焦油的催化裂解研究[J].燃料化学学报,2003,31(2):144~148.
- 14 荣海娜,张葛祥,金伟东. 系统辨识中支持向量机核函数及其参数的研究[J]. 系统仿真学报,2006,18 (11):3 204~3 208.
- 15 李大中,韩璞,王臻.基于支持向量机和粒子群算法的生物质气化过程建模与优化[J].华北电力大学学报,2009,36(2):74~79.
 - Li Dazhong, Han Pu, Wang Zhen. The biomass gasification process modeling and optimization based on SVM and PSO[J]. Journal of North China Electric Power University, 2009,36 (2):74 ~ 79. (in Chinese)