煤粉富氧燃烧着火温度预测的优化随机 森林(GA-RF)模型

彭 潮1,兰彦冰1,邹 春1,蔡 磊2

(1. 华中科技大学 煤燃烧国家重点实验室,湖北 武汉 430074;2. 华中科技大学 环境科学与工程学院,湖北 武汉 430074)

摘 要:二氧化碳排放是造成温室效应的主要原因之一,富氧燃烧作为一种有效的碳减排与封存技术 具有广泛的研究前景。在燃煤电厂中煤粉富氧燃烧的着火温度是燃烧器设计和运行安全的重要指 标,并且与煤粉组成成分、煤粉粒径以及燃烧氛围都有复杂的相关性。因此,对煤粉富氧燃烧着火温 度的预测模型研究意义重大。采用滴管炉分别测量了5种煤粉在 O₂体积分数为 30%、35%、40%、 50%、60%、70%、80%、90%、100%富氧条件下的着火温度,分析了氧气体积分数和煤粉的组成成分与 着火温度之间的关系。研究发现,随着氧气体积分数分数的增加,5种煤样的着火温度均显著下降, 且挥发分越高的煤,下降幅度越大。将 45 组试验着火温度数据与其他研究者采用同样方法测得的 69 组着火温度数据组成机器学习样品库,以煤粉的元素分析、工业分析、煤粉粒径及氧气体积分数为 输入条件,以着火温度 T 为目标输出,构建了遗传算法优化的随机森林模型(GA-RF 模型),准确预 报了煤粉富氧燃烧的着火温度,其预报精度为: R²>0.99, RMSE<16, MAE<8。通过模型参数重要性分 析发现,氢组分超过 5%后,着火温度出现阶跃式上升,现有煤粉着火数据也证实了该现象。 关键词:煤粉;富氧燃烧;着火温度;随机森林;遗传算法

中图分类号:X701 文献标志码:A 文章编号:1006-6772(2020)01-0071-06 Prediction of ignition temperature of pulverized coal under oxy-fuel combustion condition based on optimized random forest(GA-RF) model

PENG Chao¹, LAN Yanbing¹, ZOU Chun¹, CAI Lei²

(1. State Key Laboratory of Coal Combustion, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, China;

2. School of Environmental Science and Engineering, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, China)

Abstract: Carbon dioxide emission is one of the main reasons for the greenhouse effect. Oxy-fuel combustion has an extensive research prospect as an effective carbon emission reduction and storage technology. The ignition temperature of pulverized coal in oxy-fuel combustion in coal-fired power plants is an important indicator of burner design and operational safety, which has complex correlations with the composition of coal, coal particle size, and the atmosphere of combustion. Therefore, the research of the ignition temperature prediction model of pulverized coal oxy - fuel combustion is very meaningful. In this study, the ignition temperatures of five coal samples were measured in dropper furnace under 30%, 35%, 40%, 50%, 60%, 70%, 80%, 90% and 100% volume fraction of O_2 in CO_2 atmosphere. The relationship between coal ignition temperature and the oxygen concentration and the composition of pulverized coal was analyzed. The research finds that the coal ignition temperature decreases significantly with the increase of oxygen concentration, and the degree of decrease is higher when the coal sample contains more volatile. A machine learning sample base with 45 sets of coal ignition temperature in the experiment and 69 sets of ignition temperature collected from recent year's research with the same measurement was established. The

引用格式:彭潮,兰彦冰,邹春,等.煤粉富氧燃烧着火温度预测的优化随机森林(GA-RF)模型[J].洁净煤技术,2020,26(1): 71-76.

PENG Chao, LAN Yanbing ,ZOU Chun, et al. Prediction of ignition temperature of pulverized coal under oxy-fuel combustion condition based on optimized random forest(GA-RF) model[J].Clean Coal Technology,2020,26(1):71-76.



收稿日期:2019-08-05;责任编辑:张晓宁 DOI:10.13226/j.issn.1006-6772.19080501

基金项目:国家自然科学基金面上资助项目(51776081)

作者简介:彭 湖(1993—),男,湖北天门人,博士研究生,研究方向为机器学习在燃烧领域的应用。E-mail:2739438948@qq.com。 通讯作者:邹春(1970—),男,教授,博士生导师,研究方向为富氧燃烧、燃烧过程数值模拟与燃烧反应动力学。Email:zouchun@hust.edu.cn

洁净煤技术

ultimate analysis and proximate analysis of the pulverized coal, the coal particle size and the oxygen volume fraction were selected as the input features, and the ignition temperature was the target output, a random forest model optimized by genetic algorithm (GA-RF model) was constructed and the ignition temperature of pulverized coal in oxy-fuel combustion was accurately predicted, with the accuracy of $R^2 > 0.99$, RMSE<16, MAE<8. The feature importance of ignition temperature shows that the ignition temperature increases immediately when the H content is over 5%, which is proved by the existing ignition data of pulverized coal.

Key words:pulverized coal; oxy-fuel combustion; ignition temperature; random forest; genetic algorithm

0 引 言

化石燃料燃烧产生的二氧化碳是导致全球气候 变暖的主要原因之一。对于中国、印度等发展中国 家,燃煤发电依然是电力的主要来源。富氧燃烧被 认为是应对全球气候变化挑战的有前途的碳减排与 封存技术之一^[1-5]。富氧燃烧是采用纯氧代替空气 与燃料燃烧,并利用循环烟气来降低燃烧产生的高 温,其燃烧烟气中的二氧化碳浓度非常高,方便隔离 封存。与常规燃烧不同,富氧燃烧的气氛是 O₂/ CO₂,由于 CO₂的物理和化学性质与 N₂有较大差异, 导致煤粉在富氧气氛下的燃烧特性不同于常规 燃烧^[6-9]。

富氧气氛下煤的着火温度是采用富氧燃烧方式 的燃煤电厂中燃烧器和锅炉设计的重要指标。同 时,在富氧燃烧过程中,由于输送煤粉的一次风是由 纯 O₂和循环烟气混合而成,该混合过程的局部存在 高 O₂浓度,会导致一次风管内的煤粉着火风险^[10]。 因此富氧燃烧煤粉的着火温度也是运行和安全的重 要指标。

许多研究人员在滴管炉(DTF)和携带流反应器 (EFR)中测量了煤粉在不同 0,/CO,气氛下的着火 温度,以期找到煤粉属性、气氛与煤粉着火温度之间 的关系^[1-4],研究表明,着火温度随 O₂体积分数的增 加而降低,且与煤阶有密切关系。煤阶代表了煤化 作用中可达到的成熟度级别,不同煤阶,其挥发分、 固定碳以及氢含量等均存在显著差异。Zhou 等^[1] 在 DTF 中测量了富氧气氛下 5 种煤的着火温度,发 现富氧气氛下的煤粉着火温度高于氮气气氛,且随 着氧气分压的增加,着火温度下降。Arias 等^[2]在 EFR 中测量了 O₂/CO₂气氛下,氧气体积分数为 21%、30%、35%时不同煤阶煤粉的着火温度,发现 在氧气体积分数高于 30%时,其着火温度低于相同 条件下空气气氛的着火温度。Riaza 等^[3-4]在 EFR 中测量了 0,/CO,气氛下不同煤的着火温度,认为煤 阶与着火温度显著相关,但关系极其复杂。Khatami 等[11-13]研究了煤级对燃煤的影响,认为,在其他条 件相似的情况下,着火温度随煤级单调变化,同时着 火温度受反应气氛的影响,无烟煤和半无烟煤通常 是非均相着火,而烟煤为均相着火。

前人研究存在诸多局限:① 氧气体积分数的变 化在 21%~50%,由于降低烟气循环率是提高富氧 燃烧效率的主要途径,且在分级加压富氧方式中,大 幅度降低了烟气再循环,因此,煤粉在高氧气浓度下 的着火温度需加以研究。② 目前尚没有可较好预 报煤粉在不同氧气浓度下着火温度的模型。③ 对 煤阶和着火温度的分析不够深入。本文针对存在的 问题,进行更高氧气浓度的煤粉富氧燃烧试验,并结 合机器学习模型对煤的组分和煤阶与着火温度的关 系进行深入分析。

本文测量了 5 种不同煤阶的煤粉,在 O₂体积分数分别为 30%、35%、40%、50%、60%、70%、80%、 90%和 100%的 O₂/CO₂气氛下的着火温度。由于煤 粉组成、粒径和气氛对煤粉着火温度的影响复杂,因 而采用高精度和鲁棒性强的随机森林模型方法,结 合已有文献的着火温度数据^[1-4,11-17],建立了煤粉富 氧燃烧着火温度模型,定量分析煤粉组成对着火温 度的影响。

1 试 验

1.1 试验煤样与装置

本文选取 5 种不同煤阶的煤样,其工业分析和 元素分析见表 1。煤样被研磨筛分至 78~105 μm。

表1 5种煤样工业分析与元素分析

|--|

煤样	工业分析/%				元素分析/%			
	$M_{\rm ad}$	$V_{\rm ad}$	$A_{\rm ad}$	$FC_{\rm ad}$	$\mathrm{C}_{\mathrm{daf}}$	$\mathbf{H}_{\mathrm{adf}}$	N_d	(0+S) _{daf}
SF	6.40	36.95	2.90	53.75	72.82	4.88	0.93	21.37
DT	2.62	25.48	35.21	36.69	46.62	3.29	0.82	49.27
Sample 1	2.19	13.96	59.7	21.25	28.43	1.65	0.62	69.30
Sample 2	11.39	33.56	15.97	39.08	53.83	3.80	0.67	41.70
Sample 3	2.27	31.44	20.25	46.04	66.36	4.50	1.23	27.91

滴管炉试验装置示意如图 1 所示,装置的主体 为双层石英管,其内径为 50 mm 和 80 mm。煤颗粒 通过流量为 1.0 L/min(STP)的一次气体带入中心 炉管,从底部供应流量为 9.0 L/min(STP)的二次气 体,经过中心炉管与保温层之间的夹层管道流到炉 子顶部,在此过程中被加热到一定温度形成二次风, 然后与一次气体和煤颗粒混合燃烧。O₂和 CO₂流速 由质量流量控制器精确控制。在试验中设置 9 种不 同工况,O₂体积分数分别为 30%、35%、40%、50%、 60%、70%、80%、90%和 100%,采用高速摄像机观察 煤的点火现象。



Fig.1 Schematic of thedropper furnace equipment

1.2 试验方法

本文采用文献[18-19]中方法测量煤粉的着火 温度,该方法是普遍采用的煤粉着火测量方法。将 在设定的 O₂/CO₂气氛下,将滴管炉加热到给定温度 *T_g*,保持恒温 20 min,炉膛内温度稳定后,将煤注入 炉膛中。高速摄像机用于判断点火的发生,若观察 到发光颗粒,可判断煤被点燃。然后,降低炉温至比 *T_g*低 2 K,待稳定后重复试验,观察炉中的煤颗粒, 若发现煤粉着火,则继续下降 2 K 直至无着火现象 发生,此时温度标记为 *T_i*₋₁。之后,炉温升高到 *T_i* (比 *T_i*₋₁高 1 K),若煤被点燃,则称 *T_i*为点火温度。 对于每种设定气氛,试验至少重复 5 次,且定义平均 点火温度为煤粉的点火温度。

1.3 随机森林及超参数优化

随机森林(RF)是由决策树组成的集成学习模型。RF使用 bootstrap 方法生成训练集,并对每个训练集构建决策树。在生成训练集的过程中,未取到的数据称为袋外数据(oob),可作为测试集验证模型精度,通过分类回归树算法(CART)来确定要分割的最佳特征。RF模型中需要调整的超参数如下:森林中树木的数量(n_estimators)、每次分割时随机选择的特征数量(max_features)、进行分枝所需的最小样本数量(min_sample_split)、树的最大深度(max_depth)、用于测试集的数据比例(test_size),以及 2

个随机种子数来控制随机数发生器(random_state)。 本工作中采用遗传算法(GA)对随机森林模型的超 参数进行优化。

本文 RF 模型的精度用 3 个指标进行评估:决定系数(*R*²)、均方根误差(RMSE)和平均绝对误差(MAE),其计算公式如下:

$$R^{2} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{N} (T_{pre}^{i} - T_{act}^{i})^{2}}{\sum_{i=1}^{N} (T_{pre}^{i} - \bar{T}_{act}^{i})^{2}}$$
(1)

RMSE =
$$\sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (T_{\text{pre}}^{i} - T_{\text{act}}^{i})^{2}}$$
 (2)

MAE =
$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} |T_{\text{pre}}^{i} - T_{\text{act}}^{i}| \times 100\%$$
 (3)

式中,N为样本数; T_{pre}^{i} 为预测温度; T_{act}^{i} 为试验温度; \overline{T}_{act}^{i} 为平均试验温度。

2 试验结果与分析

2.1 煤粉组成对富氧气氛着火温度的影响

本文试验研究了5种煤样在9种不同氧气体积 分数下的着火温度,结果如图2所示。可以看到,随 氧气体积分数的增加,5种煤样的着火温度均显著 下降。5种煤样的着火温度从低到高依次为 SF<Sample 2<Sample 3<DT<Sample 1,该次序与其挥 发分值的次序相同;且煤的挥发分越高,随氧气体积 分数的增加,其着火温度下降幅度越大。因此, 100%氧气体积分数条件下,5种煤样着火温度之间 的差值大于在 30%条件下着火温度的差值。







文献[1、17]采用相同的试验方法分别测量了4 种煤样和5种煤样的着火温度,且这2篇文献所用 煤样的颗粒粒径与本文相近。图3为30%氧气体积 分数下,文献和本文试验的共14种煤样(下同)的 着火温度。可以看出,14种煤样的着火温度并未表 现出随着挥发分增加而降低的规律,其中共4种煤 样含 33%左右的挥发分,但其着火温度相差较大。 文献[17]中5种煤样的挥发分对着火温度的影响 并不显著,表明挥发分对煤颗粒着火的影响非常复 杂。煤粉的着火温度与着火机理密切相关,当煤粉 是均相着火时,挥发分的影响非常显著;而煤粉为非 均相着火时,挥发分不是主要影响因素。



Fig.3 Relationship between coal ignition temperature and volatile

图 4 为 14 种煤样中含水量与着火温度的关 系。通过本文试验值和文献[1]的数据可以看出, 当含水量超过 3%时,含水量对着火温度的影响较 微弱;含水量小于 3%时,水分对煤粉的着火温度影 响比较明显。煤粉中的水分会对煤粉的着火温度影 响比较明显。煤粉中的水分会对煤粉的着火温度 分子为三原子分子,由于其辐射性强,同时也会增加 辐射散失的热量,使煤粉着火温度升高;另外,水蒸 气在一些化学反应中(如 H₂O+CO ==CO₂+H₂)也会 释放大量的热,使煤粉着火温度降低。当煤粉中的 含水量较高时,由于水的潜热和散热损失较大,从而 阻碍着火;当煤粉的含水量较低时,水分子参与的反 应放热量占主导,从而会促进着火。综上,水分对着 火温度的影响非常复杂,水分对煤粉着火温度具有 促进或是阻碍作用,与煤粉的含水量关系密切。





Fig.4 Relationship between coal ignition temperature and moisture

图 5 为 14 种煤样中碳含量与着火温度的关系。从图 5 可以看到,文献[1]的测量结果表明,高含碳煤样的着火温度明显低于低含碳量的煤样,但本文和文献[17]的测量结果并没有这种趋势,碳含

量为55%左右的煤样有3种,其着火温度差异非常大。因此,煤中碳含量对着火温度的影响也是复杂的。



Fig.5 Relationship between coal ignition temperature and carbon content

2.2 煤粉富氧气氛着火温度随机森林模型

通过试验得到 45 组煤粉的着火温度数据,同时 收集了 69 组近年来文献中煤粉富氧燃烧的着火温 度试验数据,将煤粉的的元素分析和工业分析、煤颗 粒大小、氧气体积分数作为输入特征,以着火温度 *T* 作为目标输出,构建了随机森林模型。根据 sckit learn 机器学习网站^[20]设定了 RF 模型的默认超参 数,并由 GA 计算出 RF 模型的最优参数。RF 模型 和 GA-RF 模型的参数设定见表 2,2 种模型的预测 结果见表 3。

表 2 RF 模型和 GA-RF 模型的参数设定

Table 2 Parameters of RF model and GA-RF model

参数	RF 模型	GA-RF 模型
test_size	0.25	0.10
random_state1	0	20
n_estimators	100	33
max_features	3	9
random_state2	0	797
min_samples_split	2	2
max_depth	10	10

表 3 RF 模型和 GA-RF 模型的精度

Table 3 Accu	uracy of RH	' model and	GA-RF	model
--------------	-------------	-------------	-------	-------

模型	R^2	RMSE	MAE/K
RF-test	0.889	68.278	43.203
RF-train	0.979	25.741	14.453
RF-total	0.951	40.988	21.766
RF-oob	0.837		
GA-RF-test	0.978	12.492	8.186
GA-RF-train	0.992	17.311	8.918
GA-RF-total	0.992	16.869	8.841
GA-RF-oob	0.929		

由表 3 可知, RF 模型在训练集上有很高的精度, R² = 0.979, 但在测试集和袋外数据上表现一般,

 R^{2} 值分别为 0.889 和 0.837。经过 GA 优化后,模型 精度在训练集和测试集上均得到提高,尤其是测试 集和袋外数据的精度提升较大, R^{2} 值分别提升至 0.978和 0.929。同时, GA 优化算法使 RF 模型的 RMSE 和 MAE 值降低。优化后的模型总精度值为: $R^{2} = 0.992$, RMSE = 16.869, MAE = 8.841, 表明该模型 可达到非常好的预测着火温度效果。

2种模型的预测温度与实际温度对比如图 6 所示。可以看到,与 RF 模型精度相比,GA-RF 模型的精度明显更高,预报数据的集中程度也非常高,表明 GA 的优化效果非常显著。测试集着火温度的预测结果均与试验值接近,说明该模型对煤粉着火温度的预测效果很好。



图 6 随机森林模型 RF 与 GA 优化的模型预测结果 Fig.6 Prediction results of random forest model RFand GA-RF

2.3 着火温度影响因素分析

图 7 为由随机森林模型得到的煤组成参数对煤 粉着火温度的重要程度排序,可以看出,氢元素含量 影响最大,达 74.9%;其次为氧气体积分数、颗粒粒 径和挥发分,为此对氢做单变量分析。利用 GA-RF 模型,进行多组氢含量的单变量分析,选取了 7 组数 据,改变氢元素含量,对着火温度进行预测,结果如 图 8 所示。可以看到,在氢含量超过 5%后,着火温 度会出现跃升。114 组数据中着火温度与氢含量的 关系(图 9)显示,这种跃升是存在的,氢含量超过 5%煤的着火温度比氢含量低于 5%的煤要高80 ℃ 以上。

3 结 论

1) 随氧气体积分数的增加,5 种煤样的着火温 度均显著下降,且挥发分越高的煤,下降幅度越大。



图 7 煤组成参数对煤粉着火温度的重要程度

Fig.7 Importance of coal composition parameters to ignition temperature of pulverized coal



图8 氢组分单变量分析

Fig.8 Univariate analysis of hydrogen composition



and hydrogen content

2)遗传算法优化的随机森林模型可准确预测 煤粉富氧燃烧的着火温度,预测结果的决定系数 *R*²>0.99,均方根误差 RMSE < 16,平均绝对误差 MAE < 8。

3)模型参数重要性分析发现,氢在输入参数中 的重要程度最高,氢含量超过5%后,着火温度会出 现阶跃式上升。

参考文献(References):

- [1] ZHOU Y G, JIN X D, CHU W. Quantitative measurement and indication of pulverized coal ignition temperatures in O₂/CO₂ environments[J]. Appl. Therm. Eng., 2017, 112:888–894.
- [2] ARIAS B, PEVIDA C, RUBIERA F, et al. Effect of biomass blending on coal ignition and burnout during oxy-fuel combustion

洁净煤技术

[J].Fuel,2008,87(12):2753-2759.

- [3] RIAZA J, GIL M V, ALVAREZ L, et al. Oxy fuel combustion of coal and biomass blends[J].Energy, 2012, 41(1):429-435.
- [4] RIAZA J, ALVAREZ L, GIL M V, et al. Effect of oxy-fuel combustion with steam addition on coal ignition and burnout in an entrained flow reactor[J]. Energy, 2011, 36(8):5314-5319.
- [5] LEI C K, DENG J, CAO K, et al. A comparison of random forest and support vector machine approaches to predict coal spontaneous combustion in gob[J].Fuel, 2019, 239:297–311.
- [6] MATIN S S, CHELGANI S C. Estimation of coal gross calorific value based on various analyses by random forest method [J]. Fuel, 2016, 177:274-278.
- [7] MATIN S S, HOWER J C, FARAHZADI L, et al. Explaining relationships among various coal analyses with coal grindability index by Random Forest [J]. Int. J. Miner. Process., 2016, 155: 140–146.
- [8] QI M F, LUO H G, WEI P J, et al. Estimation of low calorific value of blended coals based on support vector regression and sensitivity analysis in coal-fired power plants [J]. Fuel, 2019, 236: 1400– 1407.
- [9] ZHANG W B, CHENG X F, HU Y H, et al. Online prediction of biomass moisture content in a fluidized bed dryer using electrostatic sensor arrays and the Random Forest method [J]. Fuel, 2019, 239: 437-445.
- [10] IBRAHIM IA, KHATIB T.A novel hybrid model for hourly global solar radiation prediction using random forests technique and firefly algorithm [J]. Energ. Convers. Manage., 2017, 138: 413– 425.
- [11] KHATAMI R, STIVERS C, JOSHI K, et al. Combustion behavior of single particles from three different coal ranks and from sugar cane bagasse in O_2/N_2 and O_2/CO_2 atmospheres [J]. Combust. Flame, 2012, 159(3):1253-1271.

- [12] RIAZA J, KHATAMI R, LEVENDIS Y A, et al.Single particle ignition and combustion of anthracite, semi-anthracite and bituminous coals in air and simulated oxy-fuel conditions[J].Combust. Flame, 2014, 161(4):1096-1098.
- [13] RIAZA J, ALVAREZ L, GIL M V, et al Effect of oxy-fuel combustion with steam addition on coal ignition and burnout in an entrained flow reactor[J].Energy, 2011, 36(8):5314-5319.
- [14] FAN Y S, ZHOU Z, CAO Z D, et al The influence of high oxygen concentration on ignition characteristics of pulverized bituminous coal[J].Challenges of Power Engineering and Environment, 2007, 1/2:174-180.
- [15] KIM J K, LEE H D, KIM H S, et al. Combustion possibility of low rank Russian peat as a blended fuel of pulverized coal fired power plant[J].J. Ind. Eng. Chem., 2014, 20(4):1752-1760.
- [16] QI H L, SUN R, PENG J B, et al. Experimental study on ignition and combustion characteristics of pyrolyzed char in an O₂ – enriched atmosphere with multiple optical diagnostic techniques [J].Energ. Fuel, 2019, 33(6):5682-5694.
- [17] MOROW, RYBAK W. Ignition behaviour and flame stability of different ranks coals in oxy fuel atmosphere [J]. Fuel, 2015, 161: 174-181.
- [18] FAUNDEZ J, ARIAS B, RUBIERA F, et al. Ignition characteristics of coal blends in an entrained flow furnace [J].Fuel, 2007,86(14):2076-2080.
- [19] JOVANOVIC R, MILEWSKA A, SWIATKOWSKI B, et al. Sensitivity analysis of different devolatilisation models on predicting ignition point position during pulverized coal combustion in O₂/N₂ and O₂/CO₂ atmospheres[J].Fuel,2012,101:23-37.
- [20] ASHISH Swami, RITESH Jain. Scikit-learn: Machine learning in python[J]. Journal of Machine Learning Research, 2011, 12: 2825-2830.