6月

2012 年

文章编号:0253-9993(2012)S1-0161-06

# 基于 BP 神经网络的生物质固定床热解气化过程模拟

闵凡飞,张明旭

(安徽理工大学材料科学与工程学院,安徽淮南 232001)

摘 要:为研究生物质的热解气化规律,基于 BP 人工神经网络原理,利用 Matlab 神经网络工具箱, 以试验得到的两种生物质 54 组试验数据作为样本,建立了以停留时间、水分、温度、催化剂种类和 催化剂用量为输入变量,气、液、固产物产率和不同种类气体组成为输出变量的生物质固定床热解 气化过程模型。模型输出的 7 个变量的预测结果与试验数据吻合较好,证明该模型对生物质热解 气化过程模拟的可行性和有效性。

关键词:BP 神经网络;生物质;固定床;热解气化;过程模拟

中图分类号:TQ351.29 文献标志码:A

# BP neural network simulation of biomass pyrolysis gasification in a fixed-bed reactor

MIN Fan-fei, ZHANG Ming-xu

(School of Materials Science and Engineering, Anhui University of Science and Technology, Huainan 232001, China)

Abstract: A BP neural network was built to simulate the pyrolysis gasification process of biomass in a fixed-bed reactor by using Matlab neural network toolbox. Five input variables, i. e. residence time, initial moisture of biomass, pyrolysis gasification temperature, the kinds of catalyst and the catalyst weight/biomass weight ratios, and seven output variables, i. e. gas yield, liquid yield, solid yield and four kinds of gas component were selected. 54 groups experimental data were taken as training and checking samples. The results show that model-predicted results of seven output variables are in sound agreement with the experimental data. Thereby the neural network model is considered to properly reflect the real pyrolysis gasification process of a biomass. The feasibility and effectiveness of the BP based model are also presented.

Key words: BP neural network; biomass; fixed-bed; pyrolysis gasification; process simulation

生物质是一种环境友好的绿色能源,占世界能源 消费的14%~15%。在CO<sub>2</sub>总量上可实现零增长, 消除了产生"温室效应"的根源,生物质能源的开发 利用越来越受到重视<sup>[1-4]</sup>。

热解气化等热化学方法是将生物质转化为液体 (生物油)、气体(燃料气)和固体(炭)产物最合适的 方法,而且是最有可能商业化的生物质能源转化方 法<sup>[5]</sup>。生物质的热解气化过程是生物质能源利用的 一个非常关键的环节,由于大型化和工业控制的要 求,需要对这一过程进行模拟,然而建立生物质气化 过程的精确机理模型却相当困难,因为生物质在热解 气化过程中受气固两相流动、传热传质、气固异相反 应、气体同相反应、生物质种类、反应温度、停留时间 等复杂因素的影响,这些参数与生物质热解气化产物 之间的关系不是简单的线性关系,这使得对生物质热 解气化过程的模拟变得比较复杂<sup>[6]</sup>。人工神经网络 模型完全不用考虑热解气化机理、反应器结构与流体 力学特性,利用人工神经网络对给定的输入直接给出 预测输出,只要有足够多的生物质热解气化数据,建 立一个用于预测生物质热解气化的模型是完全可行

**收稿日期:2011-08-05 责任编辑:**张晓宁

基金项目:国家自然科学基金资助项目(51046003);教育部留学回国人员科研启动基金资助项目

作者简介:闵凡飞(1969—),男,安徽濉溪人,教授,博士。Tel:0554-6633103,E-mail:ffmin@aust.edu.cn

0%

的,且由于该模型是建立在大量实验数据基础上的, 具有很高的可靠性<sup>[7-8]</sup>。

管霖等<sup>[8]</sup>以生物质热解试验的温度和时间为输入,采用人工神经网络进行了生物质热解失重过程的 准确模拟。唐松涛等<sup>[9]</sup>以实验运行参数、生物质料 的工业分析数据以及化学成分分析数据作为输入,利 用人工神经网络模型给出了流化床热解产率和热解 气体成分数据,预测结果和试验结果吻合较好。马隆 龙等<sup>[7]</sup>利用 Matlab 神经网络工具箱,以内循环流化 床气化试验数据为样本,以加料量和送风量为输入数 据,以燃气热值和产气率等为输出,预测结果和试验 结果吻合良好。Maria 等<sup>[10]</sup>利用人工神经网络进行 了生物质气化模拟预测,取得了较好的效果。

已有神经网络模拟在生物质热解气化方面的应用

主要集中在生物质的流化床气化和热解失重过程的模 拟,而且输入参数少,而对生物质的固定床热解气化过 程的模拟应用较少,为此,在试验的基础上,以取得的 试验数据为训练样本,基于 Matlab 神经网络工具箱,建 立了固定床生物质热解气化人工神经网络模型,并将 模型预测值与实测试验数据进行了对比。

#### 1 试验部分

#### 1.1 生物质样品

生物质样品来自安徽淮南地区的绿化草-高羊 毛(Grass,GR)和小麦秸秆(Wheat Straw,WS)。将生 物质切碎至<1 mm 并过筛,塑料袋密封后在6℃冰 箱中保存备用。生物质的工业分析和元素分析结果 见表1。

	衣 I	生物顶原科工业分析及兀紊分析结果
bla 1	Provimate	and ultimate analysis of fresh grass and wheat st

		Tuble I I	i omnute un	u unimate u	au y 515 01 11 0	Sin Si ass and	Wheat Strutt		70
样品			元素分析		工业分析				
	C <sub>ad</sub>	${\rm H}_{\rm ad}$	$\mathbf{N}_{\mathrm{ad}}$	$O_{ad}$	$S_{t,ad}$	$M_{ m ad}$	$V_{\mathrm{ad}}$	$\mathrm{FC}_{\mathrm{ad}}$	$A_{\rm ad}$
GR	40.46	6. 19	1.94	51.33	0.08	8.63	68.74	13.09	9.54
WS	39.90	6.02	0.21	53.77	0.10	9.18	67.14	13.39	10. 29

#### 1.2 试验系统

生物质固定床热解气化试验系统(图1)由供气 系统、热解反应系统、热解液相产物冷凝收集系统、热 解气体产物收集系统以及气相产物分析系统 组成。



#### 图1 生物质固定床热解气化试验系统

Fig. 1 Fixed-bed experimental system for biomass pyrolysis gasification

#### 1.3 试验方法

称取样品1g(干燥基)左右放入瓷舟内,排出系统中残留的空气,并送入已加热至设定温度的管式电炉中,用集气袋收集生物质热解气体。预先试验表明:15 min 后热解气化基本结束,此时关闭集气袋。从集气袋中取样1 mL,通过气相色谱分析其组成;称量收集到的固体和液体产品,并采用差减法计算出新

鲜生物质热解气化气体产物的质量,并换算为每千克 干燥基生物质不同产物的量。

## 2 Matlab 中生物质固定床热解气化过程神 经网络模拟的实现

#### 2.1 神经网络模型的选择与建立

为了研究生物质的热解气化过程,需要建立一个 人工神经网络模型来模拟生物质的固定床热解气化 过程。神经网络模型的建立包括:①神经网络的建 立;②采用一部分试验数据训练已建立的神经网络 模型;③用其它的试验数据对训练好的神经网络进 行校验。BP神经网络(Back Propagation Neural Net) 是一种单向传播的多层前馈神经网络,结构比较简单 且,具有很强的自学习能力、高度非线性的映射能力 和通过非线性函数(Sigmoid 型)的多次复合可以任 意精度 逼近连续函数的信息处理和模式识别能 力<sup>[11]</sup>。本文选择 BP 神经网络作为模型原型。

#### 2.1.1 输入输出变量的选取及处理

影响生物质热解气化特性的因素很多,本文网络的输入是新鲜生物质固定床热解气化试验时所考察的因素,包括停留时间、生物质水分、热解温度、催化剂种类和催化剂用量,在这5个输入参数中,数据的差别较大,为此对数据进行了调整:温度除以10,停

留时间乘以 10, 催化剂种类分别用 10, 20, 30 表示<sup>[12]</sup>。网络的输出为液体产率、气体产率、残炭产

率、 $H_2$  产率、CO 产率、 $CO_2$  产率和  $CH_4$  产率。试验条 件见表 2。

试验号	停留时间/s	GR 水分/%	WS 水分/%	温度/℃	催化剂种类	催化剂用量/%
1	10.5	61.53	12. 18	600	K <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>	5
2	10.5	61.53	12.18	700	$Na_2CO_3$	10
3	10.5	61.53	12.18	800	${\rm ZnCl}_2$	15
4	10.5	30.01	30.01	600	$Na_2CO_3$	10
5	10.5	30.01	30.01	700	$ZnCl_2$	15
6	10.5	30.01	30.01	800	$K_2 CO_3$	5
7	10.5	15.15	50.28	600	$ZnCl_2$	15
8	10.5	15.15	50.28	700	$K_2 CO_3$	5
9	10.5	15.15	50.28	800	$Na_2CO_3$	10
10	7.9	61.53	12.18	600	$Na_2CO_3$	15
11	7.9	61.53	12.18	700	$ZnCl_2$	5
12	7.9	61.53	12.18	800	$K_2 CO_3$	10
13	7.9	30.01	30.01	600	$ZnCl_2$	5
14	7.9	30.01	30.01	700	$K_2 CO_3$	10
15	7.9	30. 01	30.01	800	$Na_2CO_3$	15
16	7.9	15.15	50.28	600	$K_2 CO_3$	10
17	7.9	15.15	50.28	700	$Na_2CO_3$	15
18	7.9	15.15	50.28	800	$ZnCl_2$	5
19	6.3	61. 53	12.18	600	$ZnCl_2$	10
20	6.3	61. 53	12.18	700	$K_2 CO_3$	15
21	6.3	61. 53	12.18	800	$Na_2CO_3$	5
22	6.3	30.01	30.01	600	$K_2 CO_3$	15
23	6.3	30.01	30.01	700	$Na_2CO_3$	5
24	6.3	30.01	30.01	800	$ZnCl_2$	10
25	6.3	15.15	50.28	600	$Na_2CO_3$	5
26	6.3	15.15	50.28	700	$ZnCl_2$	10
27	6.3	15.15	50. 28	800	K <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>	15

表 2 生物质热解气化试验条件

#### Table 2 Experimental conditions for biomass pyrolysis gasification

#### 2.1.2 网络结构的确定

对于大多数实际问题,一般采用3层网络就已足够,隐含层增多不仅使训练的时间急剧增加,而且增加了网络在训练中陷入局部最小点的概率,从而网络的权重难以调整到全局最小误差处,因此本网络采用3层 BP 网络。

人工神经网络隐含层神经元个数的选取通常采 用试凑法。将取得的试验数据分成两部分:一部分作 为学习样本用于网络的训练;另一部分用作测试样本 检验网络的预报误差。从较少神经元个数开始,训练 并检验网络训练误差和预测误差,不断调整隐含层神 经元个数,重复训练和检验,直到训练和预测误差都 小于预定值。两个隐含层的神经元个数是通过已有 试验数据作为训练样本并以误差平方和以及收敛速 度为考察对象,采用不同隐含层的神经元个数是反复 进行测试后确定的。神经元分布为:第1隐含层和第 2隐含层的神经元个数均为12,输出层的神经元个数 均为7。

2.1.3 神经网络模型在 Matlab 中的实现

Matlab 中设计 BP 网络可供选择的函数有 newcf,newelm,newff和 newfftd 等,他们能够得到不同 调整算法和结构的 BP 网络。经比较发现,当选用 newcf 函数时,网络的收敛速度较快,有很好的学习效 果,因此用它来设计 BP 网络,调用语法为

net = newcf(PR,  $[S1 \ S2 \ \cdots \ SN1]$ ,

 $\{TF1 TF2 \cdots TFN1\}, BTF, BLF, PF\}$ 

其中,PR 表示 R×2 矩阵,由训练样本 R 个输入的最 大最小值构成;Si 表示具有 N1 层神经网络的第 i 层 的神经元数;TFi 表示网络第 i 层的变换函数;BTF 表 示网络训练函数,缺省为 trainlm;BLF 表示网络学习 函数,缺省为 learngdm; PF 表示训练误差函数,缺省 为 mse(平均误差平方和)。

第1隐含层和第2隐含层的传递函数分别用 tansig(正切S型传递函数)和 logsig 函数(对数S型 传递函数),输出层传递函数用线性函数 purelin。学 习函数、训练函数和训练误差函数均用缺省函数分别 为 learngdm, trainlm, mse。

#### 2.2 网络的训练

网络建立后,需要用学习样本集对网络进行训练,使之具有自学习和联想功能,能够对学习样本集 之外的样本进行预测。Matlab 中网络训练的过程步 骤可参考文献[13]及相关文献。

对样本的学习采用 train 函数,其调用语法为

$$net = train(net, P, T)$$

其中,P表示*R×Q*矩阵,Q表示样本总量;T表示*V×Q*矩阵,V表示网络输出。

学习样本用生物质固定床热解气化试验中前21 个试验数据作为训练样本,其余6个试验数据作为预 测用数据。样品 GR 和 WS 的网络训练循环次数分 别为578和391,控制误差为0.01,学习速率为0.01, 两种样品 GR 和 WS 的网络训练最终误差分别达到 0.009 668 81 和 0.009 177 72。

#### 2.3 网络预测

对训练好的网络,输入学习样本集之外的6个样本对生物质 GR 和 WS 固定床热解气化的液体产率、 气体产率、残炭产率、H<sub>2</sub> 产率、CO 产率、CH<sub>4</sub> 产率和 CO, 产率进行预测,用到函数 sim,调用语法为

#### $T_{ANN} = sim(net, TRY)$

其中,TRY 是3种生物质样品的6个固定热解气化试验的试验条件构成的矩阵,结果返回不同产物产率矩阵 T<sub>ANN</sub>。预测结果与试验结果的比较见表3和表4。

表 3 样品 GR 网络预测值与试验结果的比较

Table 3	Comparison	of sample	GR	simulation	results	and	experimental	results
---------	------------	-----------	----	------------	---------	-----	--------------	---------

试验号	项目	气体产率	液体产率	焦炭产率	H <sub>2</sub> 产率/%	CO 产率/%	CH4 产率/%	CO2 产率/%
1	试验值	0.711	0.440	0. 278	29.061	22. 148	6.608	42. 183
	预测值	0.730	0.434	0.306	29.123	22. 223	6.574	42.269
	差值	-0.019	0.006	-0.028	-0.061	-0.075	0.034	-0.086
	试验值	0. 565	0. 527	0.337	27.398	35. 157	5.375	32.071
2	预测值	0.670	0.469	0. 323	27.547	35.265	5.505	32.279
	差值	-0.105	0.058	0.014	-0.149	-0.108	-0.130	-0.208
	试验值	0. 746	0. 433	0.250	30.942	30. 158	11. 791	27.109
3	预测值	0. 649	0. 483	0.336	30.667	30.060	11.618	26.879
	差值	0.098	-0.050	-0.086	0.275	0.098	0. 173	0. 230
4	试验值	0. 532	0.306	0.338	29.057	30. 175	6.916	33. 852
	预测值	0.430	0.414	0.437	28.936	30. 203	6.827	33.894
	差值	0. 102	-0.108	-0.099	0. 121	-0.028	0.089	-0.042
	试验值	0. 481	0.372	0.324	44. 476	28.030	3. 548	23.945
5	预测值	0. 540	0.349	0. 257	44. 593	27.985	3.724	23.870
	差值	-0.059	0.024	0.067	-0.117	0.045	-0.176	0.075
6	试验值	0. 530	0. 393	0.254	39.415	30.771	4.764	25.050
	预测值	0. 567	0.341	0. 228	39. 377	30.720	4.840	24. 965
	差值	-0.037	0.052	0.027	0.038	0.052	-0.076	0.085

从表3 和表4 可以看出,用 Matlab 神经网络工具 箱中的 BP 网络对新鲜生物质固定床热解气化产物 的预测能达到较高的精度,各项的绝对误差基本上小 于 0.1,因此人工神经网络为研究生物质的热解气化 提供了一种有力的工具,具有很好的实际意义。然 而,预测值与试验结果之间存在一定程度的误差,而 且个别误差较大,这主要是由于:① 用于网络训练和 预测的样本值都是由试验得到的,因此难免存在测量 误差;② 样本容量相对较小,这对于提高网络的训练 精度和稳定性都会产生影响;③ 网络本身带来的误 差,毕竟神经网络只是用来研究生物质热解过程的工 具,它不可能完全反映生物质复杂的热解气化过程, 所以要减小预测误差需要减小试验误差并合理增大 样本容量<sup>[14-15]</sup>。

165

Comparison of sample WS simulation results and experimental results Table 4 气体产率 焦炭产率 H<sub>2</sub>产率/% CO 产率/% CH4 产率/% CO2 产率/% 试验号 项目 液体产率 试验值 0.815 0.326 0.289 29.928 27.971 6.947 35.154 预测值 1 0.815 0.326 0.289 29.930 27.962 6.935 35.174 0.012 -0.020差值 0 0 0 -0.0020.009 试验值 0.706 0.425 0.299 24.985 28.517 8.527 37.970 2 预测值 0.705 0.437 0.307 24.796 28.609 8.481 38.112 差值 -0.012 -0.092 0.046 -0.142 0.001 -0.008 0.189 试验值 0.906 0.327 0.197 32.284 16.863 13.470 37.383 3 预测值 0.971 0.263 0.187 32.293 16.800 13.557 37.356 差值 -0.065 0.064 0.010 -0.009 0.063 -0.087 0.027 试验值 1.093 0.625 0.282 20.874 7.854 11.827 59.445 4 预测值 0 995 0.703 0.310 20.619 8.135 11.666 59.563 差值 0.098 -0.078 -0.028 0.255 -0.281 0.161 -0.118 试验值 1.117 0.622 0.261 35.361 19.897 7.276 37.466 5 预测值 1.115 0.627 0.253 35.478 19.842 7.225 37.449 差值 0.002 -0.0050.009 -0.117 0.055 0.051 0.017 试验值 34.705 1.123 0.646 0.231 34.826 20.920 9.550 预测值 6 1.130 0.642 0 227 34 872 20.873 9.596 34.668 差值 -0.0070.004 0.004 -0.0460.047 -0.0460.037

# 表 4 样品 WS 网络预测值与试验结果的比较

## 3 结 论

(1)应用 Matlab 神经网络工具箱,建立了以停留 时间、生物质水分、热解温度、催化剂种类和催化剂用 量为输入参数,液体产率、气体产率、残炭产率以及气 体组成为输出的生物质固定床热解气化模型。

(2)以21组生物质固定床热解气化试验数据为 样本进行了模型训练,利用训练好的神经网络对生物 质固定床热解气化产物产率的预测结果与试验结果 具有良好的吻合,各项的绝对误差基本上小于0.1, 能达到较高的精度。

(3) Matlab 神经网络工具箱进行神经网络设计 及训练具有快速、方便特点,可以省去繁琐的程序设 计工作,为实现生物质气化过程的优化设计及自动化 操作提供了一条现实可行的技术手段。

### 参考文献:

- [1] Lü Dangzhen, Xu Minghou, Liu Xiaowei, et al. Effect of cellulose, lignin, alkali and alkaline earth metallic species on biomass pyrolysis and gasification [J]. Fuel Processing Technology, 2010, 91:903-909.
- Chihiro Fushimi, Tomoko Wada, Atsushi Tsutsumi. Inhibition of steam gasification of biomass char by hydrogen and tar[J]. Biomass & Bioenergy, 2011, 35:179-185.
- [3] 马爱玲, 谌伦建, 黄光许, 等. 生物质与煤混烧的热重-红外试验 研究[J]. 煤炭学报, 2011, 36(1):124-128.

Ma Ailing, Chen Lunjian, Huang Guangxu, et al. TG-FTIR experimental study on co-firing of biomass and coal[J]. Journal of China Coal Society, 2011, 36(1):124-128.

- [4] 闵凡飞,陈清如,张明旭. 新鲜生物质热解气化半焦特性的 XRD 研究[J]. 中国矿业大学学报,2006,35(3):336-340.
  Min Fanfei, Chen Qingru, Zhang Mingxu. Pyrolysis gasification semicoke characteristics of fresh biomass by XRD[J]. Journal of China University of Mining & Technology,2006,35(3):336-340.
- [5] Min Fanfei, Zhang Mingxu. Influence of initial moisture on pyrolysis of fresh biomass [J]. Int. J. Oil, Gas and Coal Technology, 2010, 3 (3):278-292.
- [6] 郭 兵,唐松涛,吕子安,等. 生物质气化过程的混合神经网络 模拟[J]. 太阳能学报,2001,22(1):77-83.
  Guo Bing, Tang Songtao, Lü Zian, et al. Simulation of biomass gasification with a hybrid neural network model[J]. Acta Energlae Solaris Sinica,2001,22(1):77-83.
- [7] 马隆龙,陈 平,原晓华,等.内循环流化床生物质气化过程的 神经网络模型[J].太阳能学报,2007,28(12):1354-1359.
  Ma Longlong, Chen Ping, Yuan Xiaohua, et al. BP neural network simulation of biomass gasification in an inner circulating fluidized bed[J]. Acta Energlae Solaris Sinica,2007,28(12):1354-1359.
- [8] 管 霖,马晓茜. 基于多层前馈网络的生物质热解失重过程模拟[J].太阳能学报,2003,24(5):693-696.
   Guan Lin, Ma Xiaoxi. Simulation on the biomass pyrolysis process based on the multilayer feed-forward neural networks[J]. Acta Energlae Solaris Sinica,2003,24(5):693-696.
- [9] 唐松涛,李定凯,吕子安,等. 流化床中生物质热解过程的混沌 神经网络模拟[J]. 化工学报,2003,54(6):783-789.
   Tang Songtao,Li Dingkai,Lü Zian, et al. Simulation of biomass py-

报

rolysis with chaotic neural network model [J]. Journal of Chemical Industry and Engineering, 2003, 54(6):783-789.

- [10] Maria Puig-Arnavat, Joan Carles Bruno, Alberto Coronas. Review and analysis of biomass gasification models [J]. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2010, 14:2841-2851.
- [11] Martin T Hagan, Howard B Demuth, Mark H Beale. 神经网络设计
   [M].北京:机械工业出版社, 2004.
- [12] 田志勇,张 耀,谭继文.基于 BP 神经网络的钢丝绳断丝定量 检测[J].煤炭学报,2006,31(2):245-249.

Tian Zhiyong, Zhang Yao, Tan Jiwen. Quanative test of broken wire for steel rope based on the back-propagation artificial neural networks[J]. Journal of China Coal Society, 2006, 31(2):245-249.

- [13] 飞思科技产品研发中心. MATLAB6.5 辅助神经网络分析与设 计[M].北京:电子工业出版社,2004.
- [14] Liu Y P, Wu M G, Qian J X. Predicting coal ash fusion temperature based on its chemical composition using ACO-BP neural network [J]. Thermochimica Acta, 2007, 454:64–68.
- [15] Zhang Yongjian, Wu Guoguang, Xu Hongfeng, et al. Prediction of oxygen concentration and temperature distribution in loose coal based on BP neural network [J]. Mining Science and Technology, 2009,19:216-219.