

2-19-2020

## Modelling and Simulation for NO<sub>x</sub> Emission Concentration of SCR Denitrification System

Dong Ze

*Hebei Technology Innovation Center of Simulation & Optimized Control for Power Generation, North China Electric Power University, Baoding 071003, China;*

Laiqing Yan

*Hebei Technology Innovation Center of Simulation & Optimized Control for Power Generation, North China Electric Power University, Baoding 071003, China;*

Follow this and additional works at: <https://dc-china-simulation.researchcommons.org/journal>



Part of the Artificial Intelligence and Robotics Commons, Computer Engineering Commons, Numerical Analysis and Scientific Computing Commons, Operations Research, Systems Engineering and Industrial Engineering Commons, and the Systems Science Commons

---

This Paper is brought to you for free and open access by Journal of System Simulation. It has been accepted for inclusion in Journal of System Simulation by an authorized editor of Journal of System Simulation.

---

# Modelling and Simulation for NO<sub>x</sub> Emission Concentration of SCR Denitrification System

## Abstract

**Abstract:** The selective catalytic reduction (SCR) denitrification system has the features of non-linearity, large lag and strong disturbance, when the operating condition changes. *Based on mutual information (MI) and Kernel-based Orthogonal Projections to Latent Structures (KOPLS), the model for NO<sub>x</sub> emission concentration is proposed. The time-delay of each input variable is estimated by mutual information, and phase space construction is performed, KOPLS is utilized to modelling.* KOPLS shows the merits of strong generalization, nonlinear fitting and anti-noise in the simulation of benchmark datasets. According to field data analysis, RMSE of MI-KOPLS in training and test are reduced by 17% and 22% respectively. Compared with KOPLS, MI-KOPLS predicts more accurately. Compared with other algorithms, RMSE and MAPE of MI-KOPLS reach minimum values 3.1886 mg/m<sup>3</sup> and 13.5917% in test respectively, what indicates that the predicted value is the closest to real value, and the effectiveness of MI-KOPLS is verified.

## Keywords

SCR, NO<sub>x</sub> emission concentration, mutual information, KOPLS, modelling

## Recommended Citation

Dong Ze, Yan Laiqing. Modelling and Simulation for NO<sub>x</sub> Emission Concentration of SCR Denitrification System[J]. Journal of System Simulation, 2020, 32(2): 172-181.

SCR 脱硝系统 NO<sub>x</sub> 排放浓度建模与仿真

董泽, 闫来清\*

(华北电力大学河北省发电过程仿真与优化控制技术创新中心, 河北 保定 071003)

**摘要:** 由于选择性催化还原(Selective catalytic reduction, SCR)脱硝系统在工况变化时具有非线性、大滞后和强干扰性的特点, 提出基于互信息(Mutual information, MI)和核隐变量正交投影(Kernel-based Orthogonal Projections to Latent Structures, KOPLS)对 NO<sub>x</sub> 排放浓度建立模型。利用互信息估计输入变量时延, 并实现样本相空间重构; 利用 KOPLS 建模。对标准数据集仿真, KOPLS 具有较强的泛化、非线性逼近和抗噪能力。现场数据分析, MI-KOPLS 与 KOPLS 相比, 在训练和测试时 RMSE 减小 17%和 22%, 使预测更精确; MI-KOPLS 与其它算法相比, 测试时 RMSE 和 MAPE 达到最小值 3.1886mg/m<sup>3</sup> 和 13.5917%, 说明预测值最接近真实值, 验证了其有效性。

**关键词:** 选择性催化还原; NO<sub>x</sub> 排放浓度; 互信息; 核隐变量正交投影; 建模

中图分类号: TP391.9

文献标识码: A

文章编号: 1004-731X (2020) 02-0172-10

DOI: 10.16182/j.issn1004731x.joss.18-0047

Modelling and Simulation for NO<sub>x</sub> Emission Concentration of SCR Denitrification System

Dong Ze, Yan Laiqing\*

(Hebei Technology Innovation Center of Simulation &amp; Optimized Control for Power Generation, North China Electric Power University, Baoding 071003, China)

**Abstract:** The selective catalytic reduction (SCR) denitrification system has the features of non-linearity, large lag and strong disturbance, when the operating condition changes. Based on mutual information (MI) and Kernel-based Orthogonal Projections to Latent Structures (KOPLS), the model for NO<sub>x</sub> emission concentration is proposed. The time-delay of each input variable is estimated by mutual information, and phase space construction is performed, KOPLS is utilized to modelling. KOPLS shows the merits of strong generalization, nonlinear fitting and anti-noise in the simulation of benchmark datasets. According to field data analysis, RMSE of MI-KOPLS in training and test are reduced by 17% and 22% respectively. Compared with KOPLS, MI-KOPLS predicts more accurately. Compared with other algorithms, RMSE and MAPE of MI-KOPLS reach minimum values 3.1886 mg/m<sup>3</sup> and 13.5917% in test respectively, what indicates that the predicted value is the closest to real value, and the effectiveness of MI-KOPLS is verified.

**Keywords:** SCR; NO<sub>x</sub> emission concentration; mutual information; KOPLS; modelling

## 引言

随着大气污染问题的日益凸出, 我国火电机



收稿日期: 2018-01-24 修回日期: 2018-05-16;  
基金项目: 河北省自然科学基金(E2018502111), 中央高校基本科研基金(2018QN097);  
作者简介: 董泽(1970-), 男, 河北保定, 博士, 教授, 研究方向为脱硝系统建模; 闫来清(通讯作者 1983-), 男, 山西太原, 博士生, 研究方向为脱硝系统建模。

组的大气污染物排放已纳入严格监管。传统的低 NO<sub>x</sub> 燃烧控制很难满足排放标准, 需配合尾部烟气脱硝装置, 国内外已广泛采用选择性催化还原(selective catalytic reduction, SCR)<sup>[1]</sup>烟气脱硝技术, 其中最为重要的是对氨喷射系统控制<sup>[2]</sup>。在工况稳定时, 喷氨控制通常能取得较好的效果; 但在机组运行条件变化时, 如煤种更换、机组 AGC 负荷指

令频繁波动、燃烧条件(如配风方式、过量空气系数等)的变化,都会使烟气 NO<sub>x</sub> 出现较大扰动,喷氨量很难保证最佳 NH<sub>3</sub>/NO<sub>x</sub> 比。当喷氨过少时,容易导致 NO<sub>x</sub> 排放增加甚至超标;而喷氨过量时,不仅影响脱硝效率,还致使过量氨气与烟气中 SO<sub>3</sub> 反应生成硫酸氢氨和硫酸氨降低催化剂活性,造成空预器积灰堵塞和腐蚀,影响锅炉安全运行,同时氨逃逸量增加也造成运行成本浪费和二次环境污染。由于 SCR 系统反应过程复杂,尤其在工况变化时具有非线性、大滞后性和强扰动的特点,难以建立准确的数学模型,使得 SCR 系统建模与优化成为当前研究的重点。

随着数据驱动建模技术的发展,核偏最小二乘法(Kernel Partial Least Squares, KPLS)、神经网络(Neural Network, NN)以及支持向量回归(Support Vector Regression, SVR)等方法在工业中广泛应用,可以通过利用工业现场的历史数据建立系统模型。廖永进等<sup>[2]</sup>利用径向基神经网络(Radial Basis Function-Neural Network, RBF-NN)建立 SCR 脱硝效率和脱硝出口 NO<sub>x</sub> 浓度的预测模型。Peng 等<sup>[3]</sup>建立 SCR 系统多个稳态工况的径向基-自回归(Radial Basis Function-Auto Regressive exogenous, RBF-ARX)预测模型,但该模型仍与实际系统存在一定的误差,且随着时间的累积,误差会逐渐增大。刘吉臻等<sup>[4-5]</sup>利用机组和 SCR 系统的运行数据,分别采用偏最小二乘法(Partial Least Squares, PLS)和 KPLS,对再热期望焓升和 SCR 系统进行建模。Si 等<sup>[6]</sup>通过改进在线 SVR 建立锅炉燃烧和 SCR 模型,并采用遗传算法优化参数。Wu 等<sup>[7]</sup>实现对 SCR 系统预测控制,其参考模型为喷氨量对出口 NO<sub>x</sub> 浓度影响的模型,无法反应影响 NO<sub>x</sub> 生成的其他因素对系统的影响。

由于 NO<sub>x</sub> 信号测量和脱硝反应具有较长的时间滞后性,同时脱硝反应影响因素众多使 SCR 系统在变工况时表现出大时延、强非线性和强干扰性的特点,很少有文献分析 SCR 系统时延对数据驱动模型精度的影响。从提高模型的预测能力为出发

点,首先利用计算互信息估计各输入变量的时延,对模型样本进行相空间重构;然后在其基础上利用核隐变量正交投影(Kernel-based Orthogonal Projections to Latent Structures, KOPLS)方法对 SCR 系统建立相关因素与出口 NO<sub>x</sub> 浓度的预测模型。通过标准数据集仿真,从泛化能力、非线性逼近能力和抗噪能力 3 个方面对 KOPLS 与其他算法进行对比;并以某电厂 SCR 系统为研究对象,利用现场数据分别验证时延对模型逼近和泛化能力的影响以及对比不同算法的预测效果。

## 1 基于互信息的时延估计

互信息<sup>[8-9]</sup>来源于信息论中熵的概念,作为一种信息度量,可以反映两个变量间的线性和非线性关系。针对大迟延的工业过程,本文利用互信息表示变量间的非线性相关性,估计各输入变量时延。

基于直方图法和核方法的互信息估计方法以概率密度估计为基础,存在算法复杂、高维互信息计算量大、精度低的缺点,不适合应用于高维互信息计算问题。*k*-近邻互信息法<sup>[9]</sup>避免了直接进行概率密度估计的缺点,比较容易进行高维互信息的计算,具有算法简单、计算量小的特点。

*k*-近邻互信息法<sup>[8]</sup>描述如下:

设空间  $Z=(X,Y)$ ,  $X$  和  $Y$  均为 1 列  $n$  个样本。

则  $X$  和  $Y$  的互信息:

$$MI(X,Y) = \psi(k) - \langle \psi(n_x + 1) + \psi(n_y + 1) \rangle + \psi(n) \quad (1)$$

式中:  $n_x(i)$  为与样本  $x_i$  严格小于  $\varepsilon_i/2$  的样本数;  $\varepsilon_i/2$  为样本  $x_i$  至其第  $k$ -近邻的距离,  $i$  为 1 至  $n$ 。同理可得  $n_y(i)$ 。另外,  $\psi(x) = \Gamma(x)^{-1} d\Gamma(x) / dx$ , 满足迭代关系  $\psi(x+1) = \psi(x) + 1/x$  且  $\psi(1) \approx -0.5772156$ 。

$$\langle \psi(n_x + 1) + \psi(n_y + 1) \rangle =$$

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n E \{ \psi [n_x(i) + 1] + \psi [n_y(i) + 1] \} \quad (2)$$

如果  $X$  和  $Y$  相关性越小,则互信息  $MI(X,Y)$  越小;反之,互信息  $MI(X,Y)$  越大,则  $X$  和  $Y$  相关性越大。

由于每个输入变量  $x_j(t)$  与输出变量  $Y(t)$  之间的时延都是不同的, 所以对每个变量  $x_j(t)$  进行相空间重构, 嵌入不同时间延迟  $\tau_j \in [\tau_{\min}, \tau_{\max}]$  ( $\tau_{\min}$  和  $\tau_{\max}$  值由现场经验确定),  $j = 1, \dots, m$ , 得到嵌入不同时间延迟的输入矩阵:

$$\mathbf{X} = [x_1(t - \tau_1), x_2(t - \tau_2), \dots, x_m(t - \tau_m)] \quad (3)$$

根据公式(1)分别计算在输入样本嵌入不同时间延的互信息值, 当互信息值最大时, 对应的  $\tau$  值即为该输入变量的时延。

## 2 核隐变量正交投影方法

Rosipal 等<sup>[5]</sup>在 PLS 的基础上, 引入非线性核函数, 提出 KPLS 方法, 解决变量众多且存在严重非线性相关的工业过程建模。由于包含更多的主成分, 模型性能得到改善。但从模型的解释和鲁棒性考虑, 过多的主成分是不可取的。Rantalainen 等<sup>[10]</sup>在隐变量正交投影基础上引入非线性核函数, 提出 KOPLS 建模方法, 通过有效剔除输入变量中与输出变量无关的结构化信息, 提高模型的预测精度, 同时减少主成分个数, 使模型更加简洁, 增强了模型的解释性。

KOPLS 算法针对训练集具体描述如下:

1) 对  $\mathbf{Y}^T \mathbf{K}_{tr,tr}^{1,1} \mathbf{Y}_{tr}$  进行特征值分解得到训练集  $\mathbf{Y}_{tr}$  预测负荷矩阵  $\mathbf{C}_p$  和特征值矩阵  $\mathbf{\Sigma}_p$ ,  $\mathbf{K}_{tr,tr}^{1,1}$  为训练集原始核矩阵,  $L$  为主成分个数。

$$(\mathbf{C}_p, \mathbf{\Sigma}_p) \leftarrow EVD(\mathbf{Y}^T \mathbf{K}_{tr,tr}^{1,1} \mathbf{Y}_{tr}, L) \quad (4)$$

2) 将  $\mathbf{Y}_{tr}$  投影到  $\mathbf{C}_p$  得到预测得分矩阵  $\mathbf{U}_p$ 。

$$\mathbf{U}_p \leftarrow \mathbf{Y}_{tr} \mathbf{C}_p \quad (5)$$

3) 对每个  $\mathbf{Y}_{tr}$  正交成分执行以下循环,  $i$  从 1 到  $OC$ ,  $OC$  为  $\mathbf{Y}_{tr}$  正交成分数。

a. 计算  $\mathbf{X}_{tr}$  的预测得分矩阵  $\mathbf{T}_{Ptr}^i$

$$\mathbf{T}_{Ptr}^i \leftarrow (\mathbf{K}_{tr,tr}^{1,i})^T \mathbf{U}_p \mathbf{\Sigma}_p^{-1/2} \quad (6)$$

b. 计算第  $i$  个正交成分的负荷矩阵  $\mathbf{c}_O^i$  和特征值  $\sigma_O^i$ 。

$$(\mathbf{c}_O^i, \sigma_O^i) \leftarrow EVD\left(\left(\mathbf{T}_{Ptr}^i\right)^T \left[\mathbf{K}_{tr,tr}^{i,i} - \mathbf{T}_{Ptr}^i \left(\mathbf{T}_{Ptr}^i\right)^T\right] \mathbf{T}_{Ptr}^i, 1\right) \quad (7)$$

c. 计算第  $i$  个正交成分的得分向量  $\mathbf{t}_{Otr}^i$ 。

$$\mathbf{t}_{Otr}^i \leftarrow \left[\mathbf{K}_{tr,tr}^{i,i} - \mathbf{T}_{Ptr}^i \left(\mathbf{T}_{Ptr}^i\right)^T\right] \left(\mathbf{T}_{Ptr}^i\right)^T \mathbf{c}_O^i \sigma_O^{i-1/2} \quad (8)$$

d. 训练集得分向量  $\mathbf{t}_{Otr}^i$  归一化。

$$\|\mathbf{t}_{Otr}^i\| \leftarrow \sqrt{\left(\mathbf{t}_{Otr}^i\right)^T \mathbf{t}_{Otr}^i}$$

$$\mathbf{t}_{Otr}^i \leftarrow \mathbf{t}_{Otr}^i / \|\mathbf{t}_{Otr}^i\| \quad (9)$$

e. 从训练集核矩阵中剔除  $Y$  正交成分,  $\mathbf{I}_{tr}$  为单元矩阵。

$$\mathbf{K}_{tr,tr}^{1,i+1} \leftarrow \mathbf{K}_{tr,tr}^{1,i} \left[\mathbf{I}_{tr} - \mathbf{t}_{Otr}^i \left(\mathbf{t}_{Otr}^i\right)^T\right] \quad (10)$$

f. 计算新的训练集核矩阵  $\mathbf{K}_{tr,tr}^{i+1,i+1}$ , 开始进行下一步循环, 其中  $\mathbf{K}_{tr,tr}^{i,i}$  为原始核矩阵经过  $i$  次缩减后的矩阵。

$$\mathbf{K}_{tr,tr}^{i+1,i+1} \leftarrow \left[\mathbf{I}_{tr} - \mathbf{t}_{Otr}^i \left(\mathbf{t}_{Otr}^i\right)^T\right] \mathbf{K}_{tr,tr}^{i,i} \left[\mathbf{I}_{tr} - \mathbf{t}_{Otr}^i \left(\mathbf{t}_{Otr}^i\right)^T\right] \quad (11)$$

4) 计算第  $OC+1$  个正交成分的训练集预测得分矩阵  $\mathbf{T}_{Ptr}^{OC+1}$ 。

$$\mathbf{T}_{Ptr}^{OC+1} \leftarrow \mathbf{K}_{tr,tr}^{1,OC+1} \mathbf{U}_p \mathbf{\Sigma}_p^{-1/2} \quad (12)$$

5) 计算回归系数  $\mathbf{B}_t$ 。

$$\mathbf{B}_t \leftarrow \left[\left(\mathbf{T}_{Ptr}^{OC+1}\right)^T \mathbf{T}_{Ptr}^{OC+1}\right] \left(\mathbf{T}_{Ptr}^{OC+1}\right)^T \mathbf{U}_p \quad (13)$$

对于测试集, 测试集核矩阵为  $\mathbf{K}_{te,tr}^{1,1}$ , 计算步骤与以上 1)~4) 相同, 得到测试集  $\mathbf{Y}_{te}$  负荷矩阵  $\mathbf{C}_p$  和得分矩阵  $\mathbf{T}_{Pte}^{OC+1}$ , 并根据公式(13)得到的  $\mathbf{B}_t$ , 计算测试集  $\mathbf{Y}_{te}$  的估计值。

$$\hat{\mathbf{Y}}_{te} \leftarrow \mathbf{T}_{Pte}^{OC+1} \mathbf{B}_t (\mathbf{C}_p)^T \quad (14)$$

## 3 预测模型的建立

本文利用互信息法估计各输入变量对输出变量的时延, 对样本进行相空间重构; 然后在重构后的样本上利用 KOPLS 建立预测模型(简称 MI-KOPLS), 提高模型的预测能力, 实现估计出口 NO<sub>x</sub> 浓度。

MI-KOPLS 的建模过程如下:

1) 采用互信息法估计各输入变量  $x_i$  对输出变量  $y$  的纯延迟时间  $\tau = [\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_m]$ , 对输入变量  $x_i$  进行相空间重构, 重构后样本的  $\mathbf{X}$  和  $\mathbf{Y}$  为:

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_{.1}(t - \tau_1 - n) & \cdots & x_{.m}(t - \tau_m - n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{.1}(t - \tau_1 - 1) & \cdots & x_{.m}(t - \tau_m - 1) \\ x_{.1}(t - \tau_1) & \cdots & x_{.m}(t - \tau_m) \end{bmatrix} \quad (15)$$

$$\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} y(t - n) \\ \vdots \\ y(t - 1) \\ y(t) \end{bmatrix} \quad (16)$$

式中:  $x_{.1}, \dots, x_{.m}$  为  $m$  个输入变量;  $y$  为输出变量;  $\tau_1, \dots, \tau_m$  为  $k$ -近邻互信息法估计时延结果。

2) 对训练集  $\mathbf{X}_{tr}^0$  和  $\mathbf{Y}_{tr}^0$  进行 z-score 标准化处理, 得到  $\mathbf{X}_{tr}^1$  和  $\mathbf{Y}_{tr}^1$ , 如式(17)所示:

$$\begin{aligned} \mathbf{X}_{tr}^1 &= (\mathbf{X}_{tr}^0 - \boldsymbol{\mu}_X) / \boldsymbol{\sigma}_X \\ \mathbf{Y}_{tr}^1 &= (\mathbf{Y}_{tr}^0 - \boldsymbol{\mu}_Y) / \boldsymbol{\sigma}_Y \end{aligned} \quad (17)$$

式中:  $\boldsymbol{\mu}_X$  和  $\boldsymbol{\mu}_Y$  分别为  $\mathbf{X}_{tr}^0$  和  $\mathbf{Y}_{tr}^0$  的均值;  $\boldsymbol{\sigma}_X$  和  $\boldsymbol{\sigma}_Y$  分别为  $\mathbf{X}_{tr}^0$  和  $\mathbf{Y}_{tr}^0$  的标准差。

3) 计算训练集核矩阵  $\mathbf{K}_{tr,tr}^0$ , 并按公式(18)进行中心化。

$$\mathbf{K}_{tr,tr}^{1,1} = \left( \mathbf{I}_{tr} - \frac{1}{N_{tr}} \mathbf{I}_{tr} \mathbf{I}_{tr}^T \right) \mathbf{K}_{tr,tr}^0 \left( \mathbf{I}_{tr} - \frac{1}{N_{tr}} \mathbf{I}_{tr} \mathbf{I}_{tr}^T \right) \quad (18)$$

式中:  $N_{tr}$  为训练集样本个数;  $\mathbf{I}$  为元素 1 的列向量;  $\mathbf{I}$  为单位矩阵。

4) 模型参数寻优, KOPLS 训练。为了防止模型过度训练, 采用交叉验证法对 KOPLS 训练模型参数寻优。其中, 主成分  $L$  与输出变量个数有关, 设置径向基核宽度  $\delta \in [\delta_{\min}, \delta_{\max}]$ , 建立 KOPLS 模型, 采用 10 折交叉验证方法, 通过优化算法寻优  $\delta$ , 计算训练集的均方根误差 (root mean square error, RMSE) 和预测值  $\hat{Y}$  的解释方差  $R^2(\hat{Y})$ , 如公式(19)和(20)所示。当  $R^2(\hat{Y})$  增加不超过 1% 时, 得到最佳  $OC$  个数; 当 RMSE 均值最小时, 得到最优径向基核宽度  $\delta$ 。

$$RMSE = \sqrt{\sum_{i=1}^{N_{tr}} (Y_i - \hat{Y}_i)^2 / N_{tr}} \quad (19)$$

$$R^2(\hat{Y}) = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{N_{tr}} (Y_i - \hat{Y}_i)^2}{\sum_{i=1}^{N_{tr}} (\bar{Y} - Y_i)^2} \quad (20)$$

式中:  $Y_i$  为实际值;  $\hat{Y}_i$  为预测值;  $\bar{Y}$  为实际值的均值,  $i = 1, 2, \dots, N_{tr}$ 。

5) 对测试集样本进行 z-score 标准化, 公式与式(17)相同; 计算核矩阵  $\mathbf{K}_{te,tr}^0$ , 并按式(21)中心化。

$$\mathbf{K}_{te,tr}^{1,1} = \left( \mathbf{K}_{te,tr}^0 - \frac{1}{N_{tr}} \mathbf{I}_{te} \mathbf{I}_{tr}^T \mathbf{K}_{tr,tr}^0 \right) \left( \mathbf{I}_{tr} - \frac{1}{N_{tr}} \mathbf{I}_{tr} \mathbf{I}_{tr}^T \right) \quad (21)$$

6) KOPLS 预测。根据最优径向基核宽度  $\delta$  建立的训练模型, 对测试样本  $\mathbf{Y}_{te}^1$  进行预测。

## 4 标准数据集仿真

为测试 KOPLS 的泛化能力, 选取 UCI 机器学习数据库中的 2 个标准数据集 slump<sup>[11]</sup>、polymer<sup>[12]</sup> 验证算法的通用性; 为了测试 KOPLS 的非线性逼近能力和抗噪能力, 选择非线性 sinc 函数见式(22):

$$f(x) = \sin(|x|) / |x| \quad (22)$$

式中:  $x \in [-10, 10]$ , 定义训练集  $x$  递增 0.5, 测试集  $x$  递增 1。  $f(x)$  无噪声的数据集, 记为 sinc;  $f(x)$  加入随机噪声为  $N(0, 0.1)$  的数据集, 记为 sinc\*。所有数据集的参数如表 1 所示。

表 1 数据集参数

Tab. 1 Parameters of datasets /个

数据集	总样本	输入变量	输出变量	训练集	测试集
slump	103	7	1	78	25
polymer	61	13	1	41	20
sinc	62	1	1	42	20
sinc*	62	1	1	42	20

数据集仿真分别选择基于粒子群 (particle swarm optimization, PSO) 优化 BP-NN (简称 PSO-BP)<sup>[2]</sup>、基于交叉验证优化的支持向量回归 (简称 CV-SVR)<sup>[6]</sup>、KPLS<sup>[5]</sup> 与本文的 KOPLS 进行对比, 其中参数寻优除 PSO-BP 外, 其他均采用 10 折交叉验证方法, 网络搜索确定相关参数; KPLS 中主成分  $L$  采用留一法交叉验证有效性确定。

在同等参数寻优条件下, 采用均方根误差 (RMSE) 和平均绝对百分比误差 (mean absolute percentage error, MAPE) 作为模型精度评定指标进行仿真对比, 结果如表 2 所示, 相应算法的参数寻优结果如表 3 所示, 其中:  $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$  为高斯核宽度;  $OC$  为  $Y$  正交成分;  $b$  为隐层节点数;  $c$  为惩罚参数。

表 2 数据集仿真结果对比  
Tab. 2 Comparison of datasets simulation results

数据集	算法	主成分	训练集		测试集	
			RMSE/(mg/m <sup>3</sup> )	MAPE/%	RMSE/(mg/m <sup>3</sup> )	MAPE/%
slump	PSO-BP	-	3.552 9	7.250 3	5.599 2	10.973
	CV-SVR	-	0.138 9	0.301 2	5.485 1	10.338
	KPLS	4	1.402 0	3.138 8	4.586 7	10.085
	KOPLS	1	2.052 0	3.845 4	4.389 5	9.082 5
polymer	PSO-BP	-	0.292 0	14.514	0.224 8	71.872
	CV-SVR	-	0.005 5	1.778 6	0.067 9	23.617
	KPLS	4	0.053 0	22.628	0.085 2	42.317
	KOPLS	1	0.008 2	2.845 0	0.011 7	3.795 5
sinc	PSO-BP	-	0.002 6	2.123 6	0.003 6	1.513 8
	CV-SVR	-	0.002 8	4.134 5	0.026 6	33.447
	KPLS	4	0.015 4	27.590	0.031 7	35.668
	KOPLS	1	0.000 4	0.628 8	0.000 4	0.281 2
sinc*	PSO-BP	-	0.006 1	9.193 6	0.006 2	6.732 8
	CV-SVR	-	0.006 0	5.515 6	0.063	33.210
	KPLS	5	0.016 6	28.211	0.032 7	36.387
	KOPLS	1	0.006 3	5.718 7	0.006 7	6.238 9

表 3 算法参数  
Tab. 3 Parameters of algorithm

算法	寻优范围	数据集			
		slump	polymer	sinc	sinc*
PSO-BP	$b \in [15,20]$	19	19	19	19
CV-SVR	$c \in [-10,10]$	5	9	3	4
	$\sigma_1 \in [-10,10]$	-5	-10	1	1
KPLS	$\sigma_3 \in [1,200]$	3	2	1	1
KOPLS	$OC \in [1,10]$	4	8	4	4
	$\Sigma_4 \in [1,200]$	173	4	4	2

由表 2 可知:

1) 对于数据集 slump 和 polymer, 在泛化能力方面, KOPLS 的测试集 RMSE 和 MAPE 最小, 预测精度最高, 而且  $L=1$ , 较 KPLS 明显减少, 提高模型的鲁棒性; CV-SVR 的训练集 RMSE 和 MAPE 最小, 训练精度最高, 但预测精度不高, 说明 CV-SVR 将不必要的信息引入训练模型, 使预测精度降低; PSO-BP 由于参数寻优存在随机性, 在 polymer 数据集中出现过拟合现象。

2) 对于数据集 sinc 和 sinc\*, 在非线性函数逼近方面, KOPLS 最具优势, PSO-BP 与 KOPLS 相接近, KPLS 和 CV-SVR 测试集的逼近能力差。在

抗噪能力方面, KOPLS 与 PSO-BP 效果接近, CV-SVR 抗噪最差, 说明 CV-SVR 对噪声敏感。

总之, 在同等参数寻优条件下, KOPLS 的泛化能力最强, 非线性函数逼近能力和抗噪能力强, 算法具有通用性。

## 5 SCR 脱硝系统 NO<sub>x</sub> 排放浓度模型建立与仿真

### 5.1 模型样本选择和预处理

根据机组和 SCR 的运行状况, 选择机组 200 MW 附近负荷波动的工况, SCR 脱硝系统的历史运行数据进行实验, 采样周期 60 s, 样本 246 组。为了建立稳定的模型结构, 增强模型的抗干扰能力, 对所有采样数据进行预处理, 包括数据滤波和粗大值剔除。其中, SCR 反应器出口 NO<sub>x</sub> 浓度现场数据如图 1 所示。

### 5.2 模型输入变量选择

输入变量的选择一般通过对工业过程机理分析, 找出与模型输出贡献大的因素作为输入变量。

由于 SCR 脱硝效率与喷氨量、稀释空气量、反应温度、催化剂活性等因素有关<sup>[13]</sup>, 本文通过分析 SCR 反应机理以及与脱硝效率相关因素, 选择与 NO<sub>x</sub> 排放浓度贡献大的因素作为模型输入变量。

SCR 反应机理: 在一定温度和催化剂作用下, 还原剂 NH<sub>3</sub> 选择性地与烟气中 NO<sub>x</sub> 反应生成 N<sub>2</sub> 和 H<sub>2</sub>O。由于 SCR 反应需要 NO<sub>x</sub>, NH<sub>3</sub> 和 O<sub>2</sub> 参与, 且入口 NO<sub>x</sub> 浓度和喷氨流量直接反应 NH<sub>3</sub>/NO<sub>x</sub> 摩尔比大小, 影响脱硝效率和氨逃逸率; 所以喷氨量、入口 NO<sub>x</sub> 浓度和入口 O<sub>2</sub> 含量大小直接影响 NO<sub>x</sub> 排放浓度和脱硝效率。

另外, 负荷、煤质和燃烧条件的变化, 都会使入口 NO<sub>x</sub> 浓度出现较大波动; 而且负荷波动使烟气流量发生变化, 导致锅炉换热表面与烟气热交换, 引起烟气温度变化, 直接影响 SCR 反应速度以及催化剂活性; 喷氨流量主要通过控制喷氨阀开度适应不同负荷, 但现场通常测量不准确。

综合考虑烟气产生和 SCR 脱硝过程, 选择 NO<sub>x</sub> 排放浓度(出口 NO<sub>x</sub> 浓度)  $C_{NO_x}^*$  的历史时刻值为输出变量  $Y$ ; 选择负荷  $N_e$ 、总燃料量  $E$ 、入口 NO<sub>x</sub> 浓度  $C_{NO_x}$ 、喷氨开度  $M$ 、入口 O<sub>2</sub> 含量  $C_{O_2}$ 、入口烟气温度  $T$  和入口烟气流量  $F$  共 7 个参数的历史时刻值为输入变量  $X$ , 其中负荷  $N_e$  从第 112~139 个样本点、第 191~218 个样本点均出现较大波动, 相应的喷氨开度  $M$  在第 201~213 个样本点出现较大波动,  $N_e$  和  $M$  的数据分布如图 2 所示。

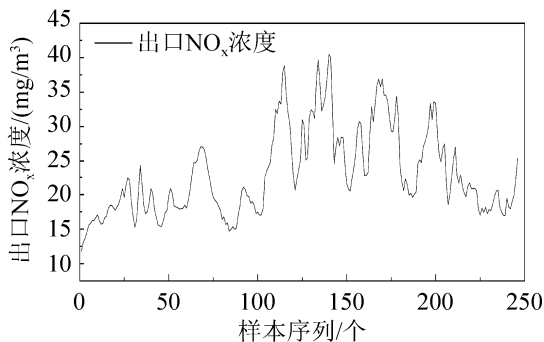


图 1 SCR 反应器出口 NO<sub>x</sub> 浓度  
Fig. 1 NO<sub>x</sub> concentration of SCR reactor outlet

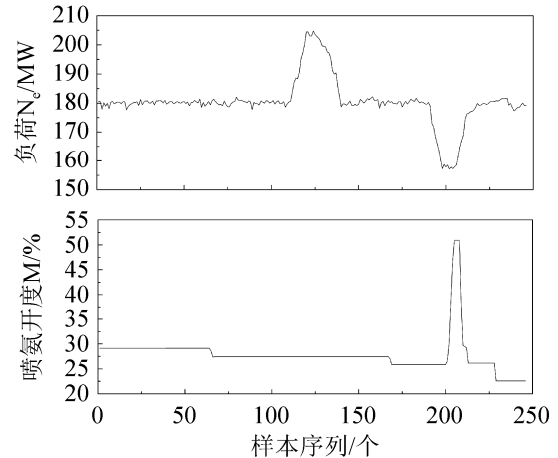


图 2 负荷  $N_e$  和喷氨开度  $M$  的数据分布图  
Fig. 2 Data distribution of  $N_e$  and  $M$

### 5.3 模型分析与仿真对比

本文选择  $X$  中  $N_e$  和  $M$  存在波动的样本区间 [12, 246] 进行实验, 其中:  $N_{tr}=190$ ,  $N_{te}=45$ 。

#### 5.3.1 系统相关性分析

为了分析  $X$  与  $Y$  是否存在非线性、以及  $X$  内部之间是否存在多重相关性, 对标准化后的数据进行相关程度分析, 部分变量间相关性结构如图 3 所示。

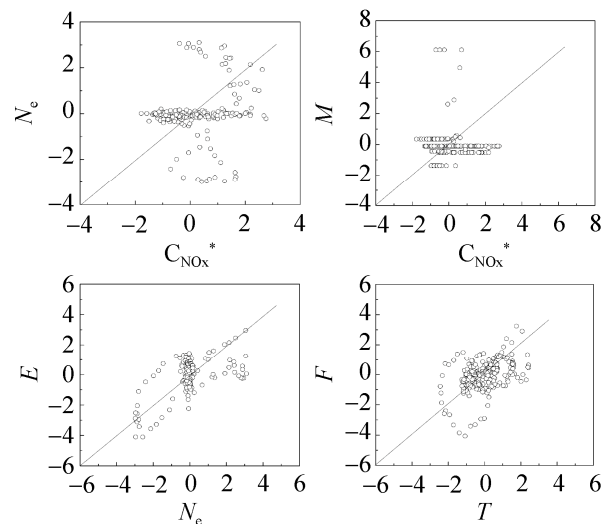


图 3 部分变量间的相关性结构  
Fig. 3 Correlation structures between some variables

由图 3 可以看出, 由于负荷波动的影响, 输入变量中  $N_e$ ,  $M$  与输出变量  $C_{NO_x}^*$  之间存在较强的非



线性和部分线性相关性,而输入变量中 $E$ 与 $N_e$ 、 $F$ 与 $T$ 之间存在相对较强的线性相关性。因此,对于解决变量众多且存在严重相关的非线性工业过程,适于KOPLS建模,通过剔除 $X$ 中与 $Y$ 无关的结构化信息,可以提高模型的预测精度。

### 5.3.2 输入变量的纯延迟时间估计

根据文献[14],在k-近邻互信息法中,选择 $k=6$ 可以达到权衡估计量的方差和偏差。根据现场调研,SCR脱硝反应的 $\tau_{\max}$ 通常为2~5min,分别计算输入变量在嵌入不同时延时的互信息,当互信息值达到最大时,对应的 $\tau$ 值即为该输入变量的时延,如表4所示。

表4 输入变量时延估计结果  
Tab. 4 Estimated delay-time of input variables

输入变量	参数	最大互信息值	时延寻优范围/s	时延/s
$x_1$	负荷	$MI(x_1, x_3)=1.4818$	[10,600]	180+480
$x_2$	总燃料量	$MI(x_2, x_3)=1.3162$	[10,600]	180+420
$x_3$	入口NO <sub>x</sub> 浓度	$MI(x_3, Y)=0.4637$	[10,300]	180
$x_4$	喷氨开度	$MI(x_4, Y)=1.0329$	[10,300]	180
$x_5$	入口O <sub>2</sub> 含量	$MI(x_5, Y)=0.8050$	[10,300]	120
$x_6$	入口烟气温度	$MI(x_6, Y)=0.2376$	[10,300]	120
$x_7$	入口烟气流量	$MI(x_7, Y)=0.6294$	[10,300]	60

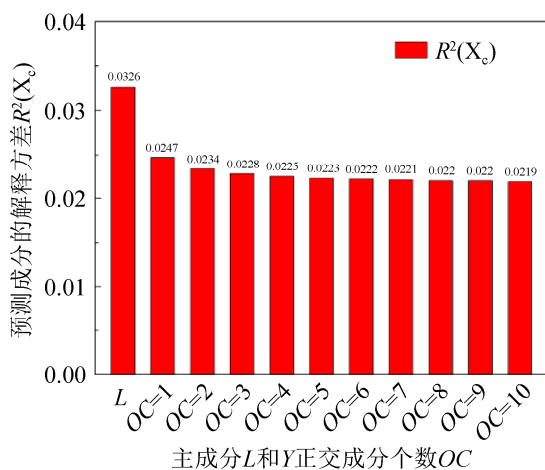


图4 增加Y正交成分OC后预测成分的解释方差  
Fig. 4 Explained variation of predictive components after addition of Y-orthogonal components

### 5.3.3 模型参数选择以及对模型解释的影响

KOPLS算法参数寻优采用10折交叉验证,其中: $L=1$ ,  $OC \in [1,10]$ ,  $\sigma \in [1,50]$ 。针对样本区间[12,246],计算增加Y正交成分OC后预测成分的解释方差 $R^2(X_c)$ 与预测值 $\hat{Y}$ 的累计解释方差 $R^2(\hat{Y})$ ,如图4和图5所示。

通常过多的Y正交成分OC个数不利于模型的解释,由图4和图5可以看出,随着OC个数增加, $R^2(X_c)$ 逐渐减小, $R^2(\hat{Y})$ 先增加,后趋于近似不变。在 $OC>4$ 后,增加不超过1%,得到最佳 $OC=4$ 。根据10折交叉验证和粒子群优化算法,取RMSE均值最小值,得到最优径向基核宽度 $\sigma=8$ ,如图6所示。

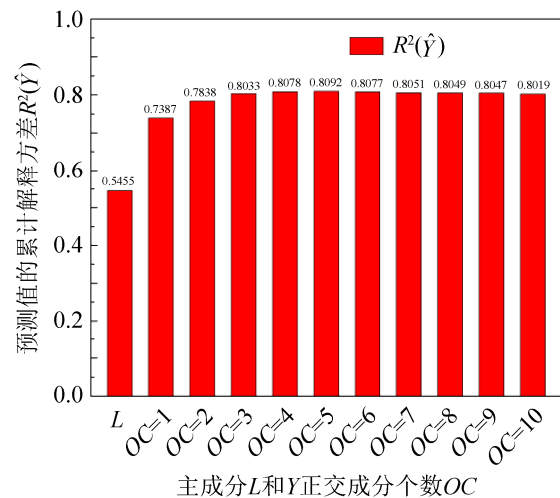
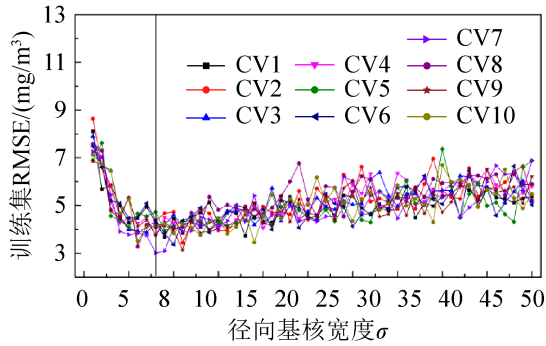


图5  $\hat{Y}$ 的累计解释方差  
Fig. 5 Cumulative explained variation of  $\hat{Y}$

图 6 10 折交叉验证优化  $\sigma$  结果Fig. 6 Optimization results of  $\sigma$  for 10-folds cross-validation

### 5.3.4 系统时延对模型精度的影响

为了分析系统时延对模型精度的影响, 对比 MI-KOPLS 与 KOPLS 的模型精度如表 5 所示, 训练和测试效果如图 7~8 所示。

由表 5 可以看出, 在相同参数寻优条件下对  $Y$  进行预测, MI-KOPLS 训练集的 RMSE 和 MAPE

值比 KOPLS 分别减小 17% 和 14%, 同时测试集的 RMSE 和 MAPE 值分别减小 22% 和 15%, 提高了模型的训练与预测精度。

由图 7~8 可以看出, MI-KOPLS 在训练和测试时, 相应的 RMSE 和 MAPE 最大值均明显小于 KOPLS, 而且预测值总体上相对 KOPLS 更接近于实际值, 提高了预测能力。总之, 系统时延对模型精度有重要影响, 通过对样本进行相空间重构, 提高了模型的逼近能力和泛化能力, 验证了本文估计时延方法的有效性。

### 5.3.5 不同建模算法对比

为了对比不同建模算法的预测效果, 将本文提出的互信息法与其他 4 种不同建模方法结合, 在同等条件下对比样本区间 [12, 246] 的预测效果, 结果如表 6 所示。

表 5 KOPLS 与 MI-KOPLS 的模型精度对比

Tab. 5 Comparison of modeling accuracy between KOPLS and MI-KOPLS

算法	考虑时延	参数		训练集		测试集	
		OC	$\sigma$	RMSE/(mg/m <sup>3</sup> )	MAPE/%	RMSE/(mg/m <sup>3</sup> )	MAPE/%
KOPLS	否	4	8	4.0923	13.703 0	4.104 0	15.911 3
MI-KOPLS	是	6	21	3.4157	11.716 8	3.188 6	13.591 7

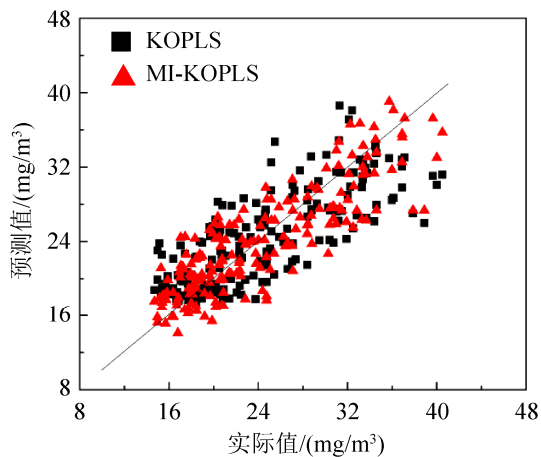


图 7 KOPLS 与 MI-KOPLS 的训练效果对比

Fig. 7 Comparison of training effect between KOPLS and MI-KOPLS

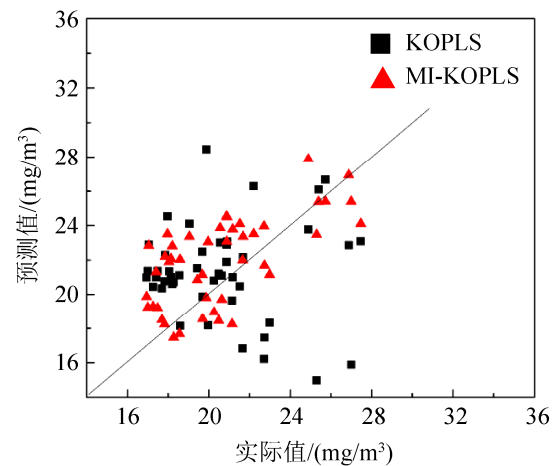


图 8 KOPLS 与 MI-KOPLS 的测试效果对比

Fig. 8 Comparison of test effect between KOPLS and MI-KOPLS

表 6 不同建模算法对比  
Tab. 6 Comparison of different modeling algorithm

算法	主成分	寻优范围	参数	训练集		测试集		运行时间/s
				RMSE/(mg/m <sup>3</sup> )	MAPE/%	RMSE/(mg/m <sup>3</sup> )	MAPE/%	
MI-PLS	2	-	-	4.996 1	17.406 5	6.644 1	28.585 0	0.690
MI-KPLS	6	$\sigma \in [1,100]$	$\sigma=2$	3.141 3	10.531 3	5.104 6	22.103 1	8.022
MI-PSO-BP	-	$b \in [15,25]$	$b=20$	2.853 9	8.639 0	6.942 7	22.813 0	58.580
MI-CV-SVR	-	$\sigma, c \in [-10,10]$	$\sigma=0, c=2$	0.862 8	1.776 3	5.773 3	25.921 2	88.544
MI-KOPLS	1	$OC \in [1,10]$ $\sigma \in [1,50]$	$OC=6, \sigma=21$	3.415 7	11.716 8	3.188 6	13.591 7	30.873

由表 6 可知, MI-KOPLS 的训练集 RMSE 和 MAPE 均不是最小, 但测试集 RMSE 和 MAPE 均达到最小, 说明其对 NO<sub>x</sub> 排放浓度预测效果最优, 更接近现场真实值; 且主成分  $L=1$ , 较 PLS 和 KPLS 的模型更为简洁。由于机组负荷波动, SCR 脱硝系统呈现较强的非线性, MI-PLS 对 NO<sub>x</sub> 排放浓度预测效果最差, 与现场真实值偏差最大; MI-KPLS 对 NO<sub>x</sub> 排放浓度预测效果较 MI-PLS 有所提高; MI-PSO-BP 对 NO<sub>x</sub> 排放浓度预测效果与 MI-KPLS 接近, 但不是最优; MI-CV-SVR 的训练效果最好, 但 NO<sub>x</sub> 排放浓度预测效果差, 由于工业现场数据通常包含噪声, 说明其对噪声敏感。

对于采用工业现场数据建模, 造成模型预测结果与电厂实际数据偏差的原因如下: 一方面, 由于不同建模方法区别或参数寻优影响; 另一方面, 由于现场数据干扰因素多, 不可避免会有一定的影响。

总之, 对于输入变量与 NO<sub>x</sub> 排放浓度之间存在非线性, 且输入变量集中不同变量间存在线性相关的情况, 通过 KOPLS 剔除  $X$  中的不相关成分, 可以提高预测效果, 具有优越性。

在算法运行时间方面, 由于 MI-KOPLS 较 MI-KPLS 增加了一个参数, 其采用交叉检验方法进行参数寻优增加了计算量, 建模耗时 30.632 s, 但由于采样周期 60 s, 仍能满足实时建模的要求。

## 6 结论

针对 SCR 脱硝系统在工况变化时呈现强非线性

性、大迟延和强干扰性的特点, 通过估计各输入变量时延, 对样本进行相空间重构, 提出 MI-KOPLS 建立预测模型。采用标准数据集仿真, KOPLS 与其它算法相比具有较强的泛化、非线性逼近和抗噪能力, 提高了模型的鲁棒性和解释性。通过 SCR 系统现场数据分析, MI-KOPLS 与 KOPLS 相比, 提高了模型训练和预测精度; MI-KOPLS 与 MI-PLS、MI-KPLS、MI-PSO-BP、MI-CV-SVR 和 MI-LS-SVM 相比, NO<sub>x</sub> 排放浓度预测效果最好, 最接近现场真实值。

由于考虑系统时延, 预测模型的输入变量为当前时刻之前的历史值, 采用本文的方法可以实现提前对 SCR 脱硝系统出口 NO<sub>x</sub> 浓度进行预测, 如果与环保要求的标准相差较大, 可以及时进行喷氨调整, 对于燃煤机组降低污染物排放和降低成本具有重要意义。

## 参考文献:

- [1] 孙虹, 华伟, 黄治军, 等. 基于 CFD 建模的 1000MW 电站锅炉 SCR 脱硝系统喷氨策略优化[J]. 动力工程学报, 2016, 36(10): 810-815.  
Sun Hong, Hua Wei, Huang Zhijun, et al. CFD-based Numerical Simulations on Optimization of the Ammonia Spraying Strategy in a 1000 MW SCR Denitrification System[J]. Journal of Chinese Society of Power Engineering, 2016, 36(10): 810-815.
- [2] 廖永进, 范军辉, 杨维结, 等. 基于 RBF 神经网络的 SCR 脱硝系统喷氨优化[J]. 动力工程学报, 2017, 37(11): 931-937.  
Liao Yongjin, Fan Junhui, Yang Weijie, et al. Ammonia Spraying Optimization of an SCR Denitrification

- System Based on RBF Neural Network[J]. Journal of Chinese Society of Power Engineering, 2017, 37(11): 931-937.
- [3] Peng H, Gui W, Shioya H, et al. A predictive control strategy for nonlinear NO<sub>x</sub> decomposition process in thermal power plants[J]. IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics-Part A: Systems and Humans (S2168-2216), 2006, 36(5): 904-921.
- [4] 刘吉臻, 曲亚鑫, 田亮, 等. 基于偏最小二乘回归的锅炉再热汽温建模[J]. 中国电机工程学报, 2011, 31(11): 99-105.  
Liu Jizhen, Qu Yaxin, Tian Liang, et al. Modelling of Utility Boiler Reheat Steam Temperature Based on Partial Least Squares Regression[J]. Proceedings of the Chinese Society for Electrical Engineering, 2011, 31(11): 99-105.
- [5] 刘吉臻, 秦天牧, 杨婷婷, 等. 基于自适应多尺度核偏最小二乘的 SCR 烟气脱硝系统建模[J]. 中国电机工程学报, 2015, 35(23): 6083-6088.  
Liu Jizhen, Qin Tianmu, Yang Tingting, et al. SCR denitrification system modeling based on self-adaptive multi-scale kernel partial least squares[J]. Proceedings of the Chinese Society for Electrical Engineering, 2015, 35(23): 6083-6088.
- [6] Si F, Romero C E, Yao Z, et al. Optimization of coal-fired boiler SCRs based on modified support vector machine models and genetic algorithms[J]. Fuel (S0016-2361), 2009, 88(5): 806-816.
- [7] Wu X, Shen J, Sun S Z, et al. Data-driven disturbance rejection predictive control for SCR denitrification system[J]. Industrial and Engineering Chemistry Research (S0888-5885), 2016, 55(60): 5923-5930.
- [8] Kraskov A, Stögbauer H, Grassberger P. Estimating mutual information[J]. Physical Review E (S2470-0045), 2004, 69(6): 66-138.
- [9] Doquire G, Verleysen M. A Performance Evaluation of Mutual Information Estimators for Multivariate Feature Selection[M]. Berlin: Springer-Verlag, 2013: 51-63.
- [10] Rantalainen M, Bylesjö M, Cloarec O, et al. Kernel-based orthogonal projections to latent structures (K-OPLS)[J]. Journal of Chemometrics (S0886-9383), 2007, 21(7-9): 376-385.
- [11] Yeh I C. Modeling slump flow of concrete using second-order regressions and artificial neural networks[J]. Cement & Concrete Composites (S0958-9465), 2007, 29(6): 474-480.
- [12] Veaux R D D, Psychogios D C, Ungar L H. A comparison of two nonparametric estimation schemes: MARS and neural networks[J]. Computers & Chemical Engineering (S0098-1354), 1993, 17(8): 819-837.
- [13] Nazari S, Shahhoseini O, Sohrabi-Kashani A, et al. Experimental determination and analysis of CO<sub>2</sub>, SO<sub>2</sub>, and NO<sub>x</sub> emission factors in Iran's thermal power plants[J]. Energy (S0360-5442), 2010, 35(7): 2992-2998.
- [14] Loveday T, Wiggins M, Festa M, et al. Pattern Recognition-Applications and Methods[M]. Berlin: Springer Berlin Heidelberg, 2013: 51-63.