

基于物理信息神经网络的 燃煤锅炉 NO_x 排放浓度预测方法

任少君, 朱保宇, 翁琪航, 邓志平, 司凤琪

(能源热转换及其过程测控教育部重点实验室(东南大学), 江苏省南京市 210096)

Forecasting Method for NO_x Emission in Coal Fired Boiler Based on Physics-informed Neural Network

REN Shaojun, ZHU Baoyu, WENG Qihang, DENG Zhiping, SI Fengqi

(Key Laboratory of Energy Thermal Conversion and Control, Ministry of Education (Southeast University),
Nanjing 210096, Jiangsu Province, China)

ABSTRACT: Accurate NO_x emission prediction significantly improves operation safety and reduces pollutant emissions in coal-fired power plants. Machine learning-based NO_x emission prediction models have the advantages of fast computational speed and high fitting accuracy. However, these methods lack interpretability and overly rely on training samples, leading to poor generalization ability under insufficient data scenarios. Therefore, this paper introduces a novel forecasting method for NO_x emission based on a physics-informed neural network (PINN). In PINN, the monotonic relationships between coal feed rates, oxygen levels, openings of separated overfire air (SOFA), and NO_x emission concentration are embedded into the neural network model, prompting the model to obey the mechanisms and effectively inhibiting the overfitting or underfitting issues. This enhancement boosts the model's accuracy under broad boiler operating conditions. Taking a 660 MW utility boiler as the research object, the results indicate that the proposed method significantly outperforms three traditional machine learning methods (random forest, support vector machine, and artificial neural network), reflecting superior prediction performance and generalization capacity. Moreover, this PINN model maintains adherence to the monotonic relationship between parameters even in unknown operating modes.

KEY WORDS: NO_x emission prediction; coal-fired boiler; machine learning; physics-informed neural network; monotonic relationships

摘要: 准确的 NO_x 浓度预测对保障燃煤锅炉安全运行和降

低污染物排放具有重要意义。基于机器学习的 NO_x 排放浓度预测方法计算速度快、拟合精度高,但缺少可解释性,且过度依赖训练样本,在样本不充分的情况下模型泛化能力差。为此,该文提出一种基于物理信息神经网络的燃煤锅炉 NO_x 排放浓度预测方法,将煤量、氧量、分离燃尽风(separated overfire air, SOFA)开度与 NO_x 排放浓度之间的单调关系嵌入到神经网络中,促使模型服从机理约束,避免机器学习过拟合或欠拟合,提升模型在锅炉宽工况条件下的准确性。以某 660 MW 燃煤锅炉为研究对象,算例分析表明,提出的预测方法明显优于随机森林、支持向量机和神经网络等常规机器学习方法,即使在未知工况下也能遵循参数间单调性关系,具有较好的可解释性和泛化能力。

关键词: NO_x 排放预测; 燃煤锅炉; 机器学习; 物理信息神经网络; 单调性

0 引言

燃煤锅炉燃烧过程中产生的氮氧化物(NO_x)是大气污染物的重要来源,对人体健康和生态环境有严重危害^[1]。在“超低排放”背景下,环保部门要求燃煤机组的 NO_x 排放不得超过 50 mg/Nm³, 如何控制 NO_x 排放量成为燃煤电厂面临的重大课题^[2]。目前,主要有两种控制 NO_x 排放的途径,包括通过优化燃烧过程抑制 NO_x 的生成和采用选择性催化还原(selective catalytic reduction, SCR)等烟气脱硝技术来脱除 NO_x^[3-4]。对锅炉出口处的 NO_x 排放浓度进行准确预测可以为锅炉的低氮燃烧和脱硝设备的喷氨控制提供理论指导,对控制燃煤电厂 NO_x 排放具有重要意义。

近年来,研究者们提出多种 NO_x 排放浓度预测

技术,主要可分为机理建模和机器学习两大类。在机理建模方面,Chui等^[5]基于锅炉燃烧过程的计算流体力学(computational fluid dynamics, CFD)模拟对 NO_x 排放量进行了估计。Sun等^[6]通过三维数值模拟研究了二次风和燃尽风对 NO_x 排放的影响。Zhou等^[7]分析了火焰稳定性和抑制 NO_x 生成的机理,并对低 NO_x 燃烧器的 NO_x 排放进行了优化。然而,由于锅炉燃烧过程以及 NO_x 生成机制复杂,在模型构建过程中一般需要进行一系列的假设和简化,造成预测模型与实际锅炉燃烧过程还存在一定偏差^[8]。此外,CFD数值模拟涉及炉内流动、传热及燃烧反应的耦合计算,其模型响应速度不能满足实时预测的要求^[9]。

随着人工智能技术的发展,基于机器学习的 NO_x 排放预测技术也受到广泛关注。这类方法无需深入探究复杂的锅炉燃烧机理,而是从海量运行数据中挖掘出 NO_x 排放浓度及其影响因素之间的函数关系,从而构建能够快速调用的 NO_x 排放浓度预测模型^[10]。Wang等^[11]提出一种基于互信息(mutual information, MI)和反向传播网络(back propagation neural network, BPNN)预测 NO_x 排放的方法。司凤琪等^[12]采用支持向量机(support vector machine, SVM)和遗传算法研究了影响 NO_x 排放的主要因素,提出一种平衡机组热效率、SCR试剂消耗和 NO_x 排放量的综合燃烧优化方法。Zhai等^[13]考虑 NO_x 排放中的系统延迟问题,提出一种结合遗忘因子的在线最小二乘支持向量机。然而,传统的机器学习方法只能捕捉变量之间的相关性,无法理解输入和输出变量之间的因果关系,缺少物理可解释性,特别是在少样本或无样本区域,机器学习模型所体现的参数关联特性与实际机理规律存在较大偏差^[14]。

内嵌物理信息机器学习是一个新兴跨学科研究领域,与常规机器学习相比,该类新方法既可以利用观测数据作为约束,还能够充分利用科学与工程领域已经发现的物理或化学规律,通过软约束、硬约束、算子映射等方式将这些观测数据和先验机理无缝衔接^[15]。王意存等^[16]将燃烧化学微分方程嵌入神经网络模型中,对两个典型湍流燃烧场景进行了分析讨论。Masi等^[17]将基本热力学原理编码到神经网络中,使模型能够产生具有热力学一致性的预测结果。Wang等^[18]在随机森林模型中嵌入了雷诺时均方程,进一步预测了不同流场中的雷诺应力差异。除了定量的物理方程,单调性等定性关系也可

以嵌入到机器学习模型中。Pan等^[19]建立了一个基于因子影响的单调加性支持向量回归混合模型。Zhu等^[20]通过考虑单调性约束提出一个单调分类极限学习机。Xie等^[21]构建了一个由极端事件和单调性关系指导的深度学习模型来模拟降雨-径流过程。上述研究表明,将定量或定性的物理信息约束嵌入机器学习模型可以显著缩小可接受的解空间,使得模型对训练数据的数量和质量的要求大大降低,由此得到的机器学习模型在保证精度的同时还能符合科学规律,具有更高的泛化能力^[22]。

探索实际运行数据与先验机理之间的融合方法对提高模型可解释性和泛化能力具有重要意义,是机器学习领域的一个开拓性的研究方向,但在锅炉 NO_x 排放建模中还缺少相关的工作。为此,本文提出一种基于物理信息神经网络(physics-informed neural network, PINN)的燃煤锅炉 NO_x 排放浓度预测方法,该方法将3种锅炉运行参数(氧量、煤量以及分离燃尽风(separated overfire air, SOFA)开度)与 NO_x 排放浓度之间的单调性嵌入到神经网络模型训练过程中,在目标函数中加入了物理不一致性损失项,采用协方差矩阵自适应进化策略(covariance matrix adaptation evolution strategy, CMA-ES)算法对数据项和物理不一致性损失项进行协同优化。通过某电厂660 MW燃煤锅炉的实际运行数据建立锅炉 NO_x 排放浓度预测模型,并与传统机器学习模型进行比较,结果表明由PINN模型具有较强的泛化能力,而且能够严格服从机理单调性,具有更好的可解释性。

1 内嵌单调性关系的物理信息神经网络

1.1 神经网络基础框架

本文采用结构为 $n-\tilde{N}-1$ 的神经网络作为锅炉 NO_x 排放预测模型的基础框架,其中 n 和 \tilde{N} 分别代表模型输入层和隐藏层的神经元个数。对于 N 个训练样本 $\{(\mathbf{x}^{(i)}, t^{(i)})\}_{i=1}^N, i=1, \dots, N$, $\mathbf{x}^{(i)} \in \mathbb{R}^n$ 为输入向量, $t^{(i)}$ 为输出值,相应的模型预测值可表示为

$$o^{(i)} = f(\mathbf{x}^{(i)}) = \boldsymbol{\beta} \mathbf{g}(\mathbf{w} \mathbf{x}^{(i)} + \mathbf{b}) \quad (1)$$

式中: $o^{(i)}$ 为模型预测值; $f(\cdot)$ 为神经网络模型表征的函数; \mathbf{w} 为连接输入层和隐藏层的权重矩阵; $\boldsymbol{\beta}$ 为连接隐藏层和输出层的权重向量; $\mathbf{g}(\cdot)$ 为sigmoid激活函数; \mathbf{b} 为隐藏层偏置向量。

神经网络训练过程实际是对 \mathbf{w} 、 $\boldsymbol{\beta}$ 及 \mathbf{b} 等模型内部参数的优化过程^[23],其训练目标是实现模型输

出值与期望值之间的误差 E_r 最小，如下所示：

$$E_r = \sum_{i=1}^N (o^{(i)} - t^{(i)})^2 \quad (2)$$

1.2 单调性表述

输出变量 o 对于第 j 维输入变量 x_j 的偏导数可表示为式(3)。如果 o 和 x_j 之间存在单调递增关系，那么 $\partial o / \partial x_j(\mathbf{x}) > 0$ ，否则 $\partial o / \partial x_j(\mathbf{x}) < 0$ 。

$$\begin{aligned} \frac{\partial o}{\partial x_j} &= \frac{\partial [\boldsymbol{\beta} \mathbf{g}(\mathbf{w} \mathbf{x} + \mathbf{b})]}{\partial x_j} = \\ &= \frac{\partial [\boldsymbol{\beta}_1 \mathbf{g}(w_{11}x_1 + \dots + w_{1n}x_n + b_1)] + \dots +}{\partial x_j} + \\ &= \frac{\partial [\boldsymbol{\beta}_{\tilde{N}} \mathbf{g}(w_{\tilde{N}1}x_1 + \dots + w_{\tilde{N}n}x_n + b_{\tilde{N}})]}{\partial x_j} = \\ &= \sum_{k=1}^{\tilde{N}} \beta_k w_{kj} \mathbf{g}'(\mathbf{w}_k \mathbf{x} + b_k) [1 - \mathbf{g}'(\mathbf{w}_k \mathbf{x} + b_k)] \quad (3) \end{aligned}$$

式中 $j=1, 2, \dots, n$ 。

1.3 PINN 模型的损失函数

传统神经网络学习通常将实际观测值与模型预测值的偏差作为模型的损失函数。在模型训练过程中，所有的模型内部参数都朝着损失函数最小化的方向调整。本文在常规神经网络的基础上，充分考虑模型输入与输出参数之间的先验单调性关系，提出一种新的 PINN 建模方法。该方法在模型训练的损失函数中引入了两个附加约束，即结构损失和物理不一致性，如下所示：

$$E_s = \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^{\tilde{N}} (w_{jk})^2 + \sum_{k=1}^{\tilde{N}} (\beta_k)^2 \quad (4)$$

$$E_p = \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^{T_j} \frac{1 - m_j^{(i)} \times \text{sign}[\partial o / \partial x_j(\mathbf{x}_{\text{syn}}^{(i)})]}{2} \quad (5)$$

式中： $\text{sign}(\theta) = \begin{cases} -1, \theta < 0 \\ 1, \theta \geq 0 \end{cases}$ ； $\mathbf{x}_{\text{syn}}^{(i)}$ 为第 i 个合成样本的人工输入部分； $m_j^{(i)}$ 为其单调性因子，如果物理单调性为正，则 $m_j^{(i)} = 1$ ，否则 $m_j^{(i)} = -1$ ； T_j 为第 j 维输入和输出之间单调性的合成样本数量。

上述物理不一致性 E_p 通过构造合成样本向 PINN 模型注入单调性信息。与实际运行数据 (\mathbf{x}, t) 不同，每组合成样本 $(\mathbf{x}_{\text{syn}}, m)$ 包括一个人工输入部分 \mathbf{x}_{syn} 和一个给定的单调性因子 m ，不包含输出标签信息。需要注意的是， E_p 衡量的是 PINN 模型的整体物理不一致性，当 E_p 较大时，说明网络与实际过程的内在机理的严重不符，模型的可解释性较低。例如，给定一个合成样本 $(\mathbf{x}_{\text{syn}}^{(i)}, m_j^{(i)})$ ，其中 $m_j^{(i)} = -1$ ，

表明第 j 维输入和输出之间单调性为负。在 PINN 模型的每一次迭代训练中， o 关于 x_j 的偏导数 $\partial o / \partial x_j(\mathbf{x}_{\text{syn}}^{(i)})$ 都将进行计算和调整。如果 $[\partial o / \partial x_j(\mathbf{x}_{\text{syn}}^{(i)})] > 0$ ，那么 $\text{sign}[\partial o / \partial x_j(\mathbf{x}_{\text{syn}}^{(i)})] = 1$ ，表明 PINN 模型中的第 j 维输入和输出之间单调性为正。这与给定的单调性因子 $m_j^{(i)} = -1$ 不一致。因此，根据式(5)，合成样本 $(\mathbf{x}_{\text{syn}}^{(i)}, m_j^{(i)})$ 对应的 E_p 为损失函数中的一个惩罚项。而如果 $[\partial o / \partial x_j(\mathbf{x}_{\text{syn}}^{(i)})] < 0$ ，那么相应的 E_p 为零，表明 $\partial o / \partial x_j(\mathbf{x}_{\text{syn}}^{(i)})$ 可以匹配给定的单调性因子 $m_j^{(i)}$ ，且在损失函数中没有惩罚项。

综上所述，PINN 的损失函数可以表示为

$$\begin{aligned} E &= E_r + \lambda_s E_s + \lambda_p E_p = \sum_{i=1}^N (o^{(i)} - t^{(i)})^2 + \\ &= \lambda_s \left\{ \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^{\tilde{N}} (w_{jk})^2 + \sum_{k=1}^{\tilde{N}} (\beta_k)^2 \right\} + \lambda_p \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^{T_j} \{1 - m_j^{(i)} \times \\ &= \text{sign}[\frac{\partial o}{\partial x_j}(\mathbf{x}_{\text{syn}}^{(i)})]\} / 2 \quad (6) \end{aligned}$$

式中： λ_s 和 λ_p 分别代表结构损失和物理不一致性的权重系数。回归损失 E_r 表示实测值与预测值之间的距离，结构损失 E_s 为网络权重的 L_2 范数以减少模型的过拟合，物理不一致性 E_p 表示模型与物理单调性的偏离程度。

1.4 PINN 模型训练

神经网络通常采用反向传播方法获得最优的网络参数。然而，BP 算法不适用于 PINN 模型损失函数中的不可微的单调性约束项。因此，本文采用 CMA-ES^[24] 对 PINN 训练过程中的参数进行优化。算法 1 给出了 PINN 的一般训练过程。

算法 1 基于 CMA-ES 的 PINN 训练过程。

步骤 1：为给定的训练数据集设置 PINN 隐藏层的节点数。本文将锅炉 NO_x 排放预测模型的隐藏层节点数设定为 46。

步骤 2：初始化 CMA-ES 的参数。待优化的参数为权重 $\boldsymbol{\beta}$ 、 \mathbf{w} 和偏置 \mathbf{b} 中的所有元素。式(6)中的损失函数为 CMA-ES 的适应度函数。

步骤 3：开始 CMA-ES 的优化过程，迭代终止时的最优方案为 PINN 模型的网络参数。

1.5 模型评价指标

本文采用 RF、SVM、ANN 作为对比模型，使用粒子群优化算法 (particle swarm optimization, PSO) 调节 SVM 的超参数，采用 BP 算法训练 ANN 模型。此外，ANN 以及 PINN 具有相同的网络结构，以便

于比较。通过这些手段确保各个模型达到最佳性能，保证各模型在对比与分析时的公平性。最后，采用以下两个统计指标来评估模型的预测结果。

1) 决定性系数(R^2)，体现了模型对实验数据的适应性。 R^2 的值越接近1，模型对实验数据的拟合度就越高。 R^2 被定义为

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (t^{(i)} - o^{(i)})^2}{\sum_{i=1}^N (t^{(i)} - \bar{t})^2} \quad (7)$$

式中： N 为样本量； \bar{t} 为所有测试样本的实测平均值。

2) 均方根误差(root mean square error, RMSE)表示模型与数据的绝对拟合能力，而 R^2 是对拟合能力的相对测量。RMSE 具有与响应变量的单位相同的优点，其定义如下：

$$R_{MSE} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (t^{(i)} - o^{(i)})^2} \quad (8)$$

2 模型建立

2.1 对象描述

本文研究对象为 660 MW 超临界机组的 II 型燃煤锅炉，其炉膛横截面尺寸为 18.82 m×18.14 m。该锅炉配备了低 NO_x 同心燃烧系统，投入 6 台中速磨煤机和相应的给煤机，为燃烧提供燃料。所有主燃烧器的喷嘴都可以在垂直方向上倾斜。炉膛二次风系统由二次风喷口(AI/AII、BI/BII、CI/CII、DI/DII、EI/EII 和 FI/FII)和辅助二次风喷口(AA、AB、BC、CD、DE 和 EF)组成，并与一次风喷口(A—F)按间隔方式布置。此外，为补充燃烧后期的空气，在主燃烧区之上布置有两层紧凑燃尽风(CCOFA)和 5 层分离燃尽风(SOFA)，炉膛内部结构如图 1 所示。

2.2 变量选取和数据采集

由锅炉燃烧和 NO_x 的生成过程可以看出，煤质是影响 NO_x 生成的重要因素。但是，在正常运行条件下，煤在进入炉内燃烧之前，已经根据所需的要求掺混好，其特性基本保持不变。此外，燃煤电厂没有配备在线煤质分析仪，无法获得燃烧中的煤质实时数据。因此，本文在建立 NO_x 排放预测模型时不考虑煤质的影响，在建模过程中假设煤质参数保持恒定，重点研究运行参数与 NO_x 排放浓度之间的关系。

选择机组负荷、氧量、给煤量、一次风、二次风、燃尽风等 23 个变量作为模型输入，锅炉出口

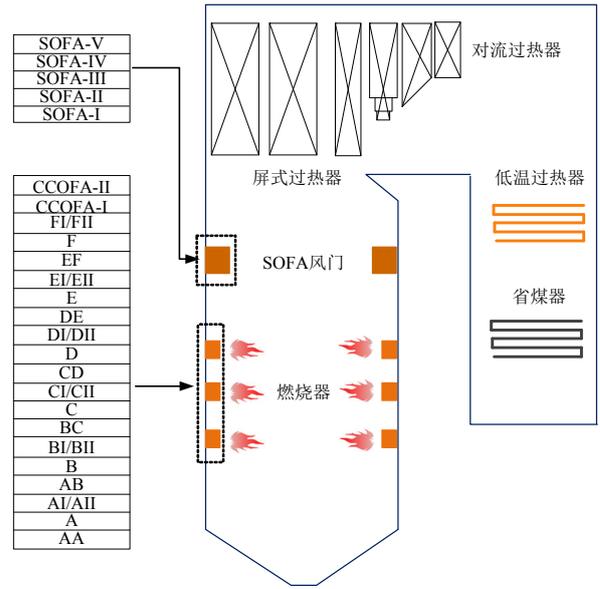


图 1 炉膛结构示意图

Fig. 1 Schematic diagram of the furnace structure

NO_x 排放浓度作为模型输出。相关变量如表 1 所示。为了准确反映火电机组的实际情况，从电站 SIS 系统中收集半个月的运行数据，采样间隔为 30s。通过数据预处理，获得 4738 组样本作为 NO_x 排放预测模型的数据集，其中 2842 组作为训练样本，1896 组作为测试样本。

表 1 锅炉 NO_x 排放预测模型的相关变量
Table 1 Primary variables for establishing NO_x emission prediction model

标签	变量	描述	单位
x_1	N_{unit}	机组负荷	MW
x_2	I_O	氧量	%
x_3-x_8	A_c-F_c	给煤机瞬时煤量	t/h
x_9-x_{14}	A_a-F_a	各燃烧器一次风量	t/h
$x_{15}-x_{20}$	$I_{AA}-I_{EF}$	二次风喷口风门开度	%
x_{21}	I_{sofa}	SOFA 风平均开度	%
x_{22}, x_{23}	I_{cc1}, I_{cc2}	CCOFA 风开度	%
o	I_{NOx}	NO_x 排放浓度	mg/(Nm ³)

2.3 物理单调性关系

燃煤锅炉燃烧产生的 NO_x 主要包括 NO 、 NO_2 和 N_2O ，其生成机理和温度可分为燃料型、热力型和快速型^[3]。炉膛内 NO_x 的生成不仅受煤质、燃烧方式、炉温以及炉内停留时间的影响，还与锅炉燃烧的运行参数有关，如煤量、氧量、机组负荷、SOFA 开度等，这些因素都使 NO_x 浓度预测变得愈加复杂。本文着重分析锅炉运行的 3 个主要参数(氧量、给煤量以及 SOFA 风开度)与 NO_x 排放浓度的物理单调性关系，从而确保所采用的 PINN 模型符合 NO_x 的实际生成机理。

温度是锅炉燃烧过程中影响 NO_x 生成最重要

的因素之一^[25]。随着炉膛火焰温度的上升，燃料中的氮转化为 NO_x 的转化率增加，因此燃料型 NO_x 的生成量也随之增加。同时，热力型 NO_x 的反应速率也会随着温度的上升呈指数级增加，从而产生更多的热力型 NO_x。给煤量的变化直接影响炉膛内的温度。随着给煤量的增加，炉内温度渐渐上升，因此燃料型和温度型 NO_x 的生成量增加，从而 NO_x 排放浓度逐步上升。因此，给煤量与 NO_x 排放浓度之间的关系是单调递增的，即：

$$\partial o / \partial A_c(x) > 0 \quad (9)$$

式中 A_c 为 A 磨给煤机瞬时煤量。

氧浓度对 NO_x 排放也有着重要影响。烟气中的氧量用来衡量燃烧是否充分，与氧浓度密切相关^[5]。随着氧量的增加，炉内燃烧区域的氧浓度上升，燃烧强度加强，炉膛火焰温度升高，导致热力型 NO_x 的生成量增加。此外，燃烧区域的富氧环境为燃料氮的热解产物氧化为 NO_x 提供了条件，进而导致燃料型 NO_x 的生成量也增加，因此总的 NO_x 排放量增加。由此可见，锅炉 NO_x 整体排放水平与氧量之间

呈现正相关的关系，即：

$$\partial o / \partial I_o(x) > 0 \quad (10)$$

式中 I_o 为氧量。

由于煤粉燃烧消耗大量氧气，因此在燃烧后期会形成缺氧环境，这对 NO_x 生成有很大影响^[26]。在锅炉燃烧系统中，位于炉膛顶部的 SOFA 风对燃烧有很强的混合作用，可以提供燃尽阶段所需氧气^[6]。SOFA 风量的增加会导致主燃烧器区域的氧浓度降低，这既能控制燃烧区域的火焰温度，又能抑制燃料氮的热解中间产物与氧发生化学反应，从而减少 NO_x 生成。因此，适当加大 SOFA 风的开度有助于降低 NO_x 排放量，即 SOFA 风开度与 NO_x 排放浓度之间是单调递减的：

$$\partial o / \partial I_{SOFA}(x) < 0 \quad (11)$$

式中 I_{SOFA} 为 SOFA 风平均开度。

综上，本文将氧量、煤量以及 SOFA 风开度与 NO_x 排放浓度的单调性关系作为物理一致性约束嵌入所提的 PINN 模型，对锅炉 NO_x 排放浓度进行预测，所提模型的整体结构如图 2 所示。

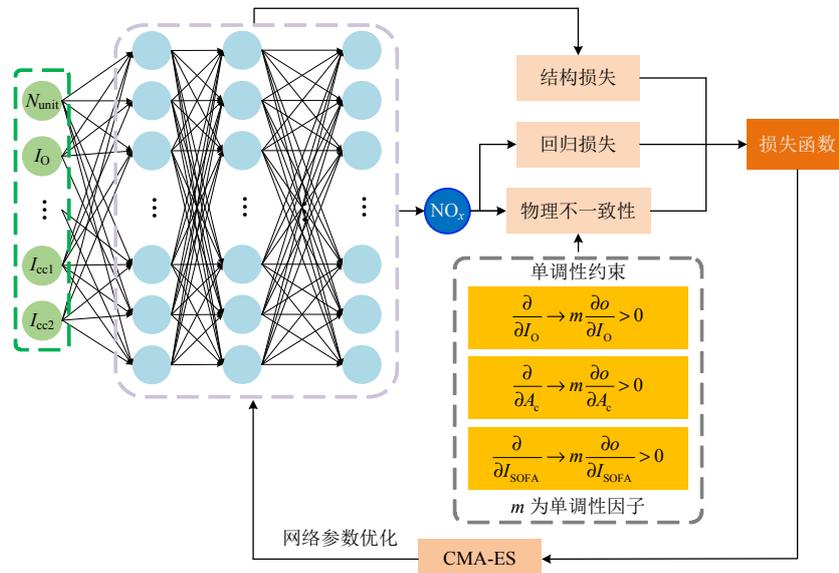


图 2 基于 PINN 的 NO_x 排放预测模型框架

Fig. 2 Model framework for NO_x emission prediction model based on PINN

3 结果与讨论

本文从拟合精度和可解释性两个方面综合评价模型的性能：1) 采用 R^2 和 RMSE 两个指标来分析 PINN 模型对锅炉 NO_x 排放浓度的预测效果，并与其他 3 种预测模型(RF、SVM 和 ANN)进行比较；2) PINN 模型的可解释性和泛化性分析，探究模型输出对输入参数(氧量、A 磨给煤机瞬时煤量以及 SOFA 风平均开度)的物理单调性的适应性。

3.1 模型性能分析与对比

为了评估所提方法的有效性，本文在相同的训练和测试数据集上对比 RF、SVM、ANN 3 种传统机器学习模型和 PINN 模型的预测结果。

图 3 所示为 4 个模型模型的训练和测试结果。由图 3 可知，RF、ANN 与 PINN 模型的训练结果相似，优于 SVM 模型。在测试阶段，PINN 模型的预测精度高于其他方法，预测结果均在 15%偏差线

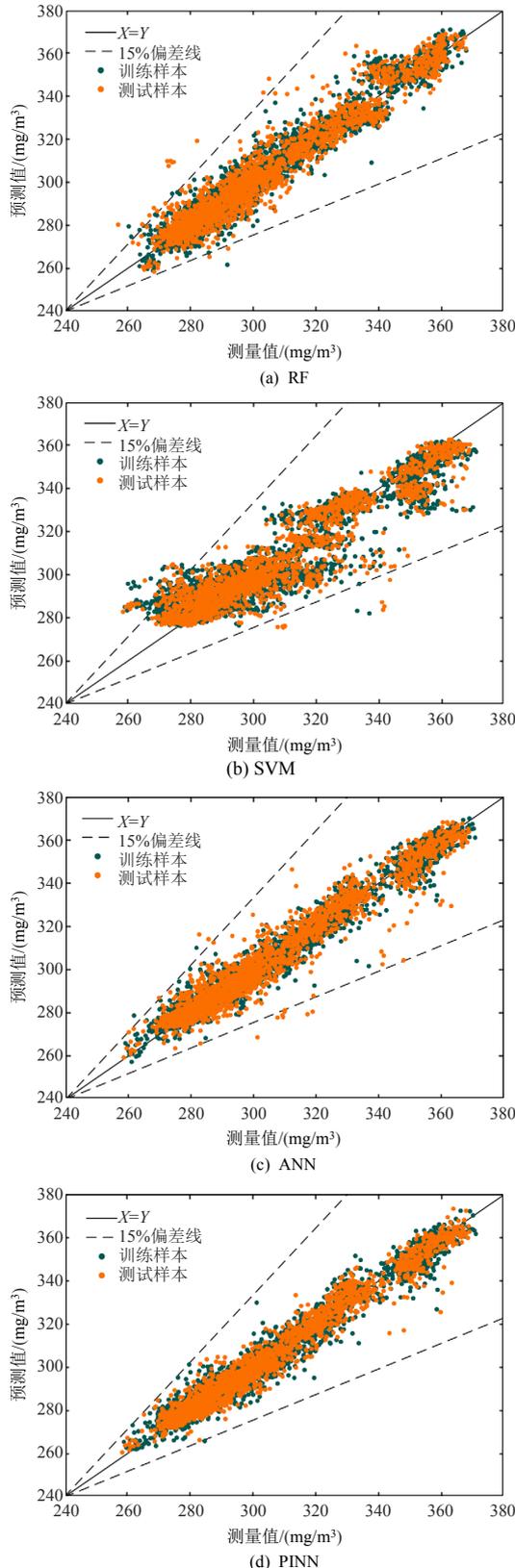


图3 4种模型的预测结果

Fig. 3 Prediction results of four different models

内,而其他3种模型的预测点均存在不同程度的超出偏差线的情况。结果表明,PINN模型的泛化能力优于其他3种纯拟合模型,这是因为在PINN模型的训练中,既考虑了回归误差,也满足参数间的

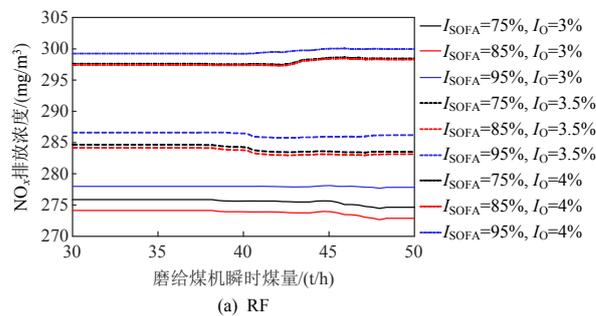
单调性关系,从而提高了模型泛化能力。

3.2 可解释性和物理单调性

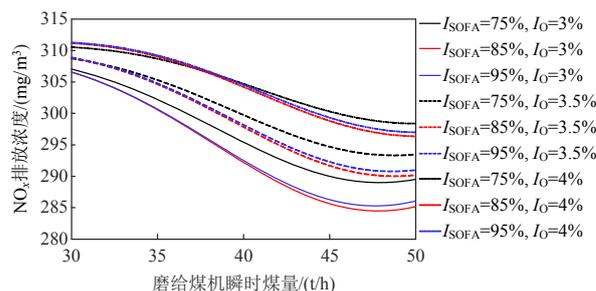
本文采用部分依赖性分析(partial dependence analysis, PDA)^[27]分析机器学习模型的可解释性,比较4种预测模型在输出变量(锅炉NO_x排放浓度)和输入变量(氧量、A磨给煤机瞬时煤量以及SOFA风平均开度)之间的物理单调性,以检验模型与实际过程的匹配程度。

为评估模型预测结果与特定输入变量之间的单调性关系,首先采用一维PDA进行分析。图4所示为4种模型在不同氧气量和SOFA风开度下,随着煤量增加,NO_x排放浓度的变化趋势。RF模型的结果如图4(a)所示,可以看出,煤量的变化对NO_x浓度没有明显的影响,整体趋势比较平稳。这与锅炉NO_x排放过程的单调性关系不符合。相比之下,图4(b)和(c)显示SVM和ANN模型对煤量的变化具有一定响应。在SVM模型中,随着煤量的增加,NO_x浓度持续下降,当煤量接近50t/h时,逐渐平稳并略微回升,整体变化趋势是非单调的。在ANN模型中,NO_x浓度先下降再上升,这也不能正确地匹配单调性。此外,不同氧气量和SOFA风开度组合情况下,其他3种模型NO_x浓度预测曲线交错或重叠,说明模型学习到的关系无法满足真实的NO_x生成机理。

然而,PINN模型的预测结果随着煤量的增加而上升,且在不同的氧量条件和SOFA风开度组合下呈现不同的水平:随着氧量的增加、SOFA风开度的减小,NO_x排放浓度提高,如图4(d)所示,这



(a) RF



(b) SVM

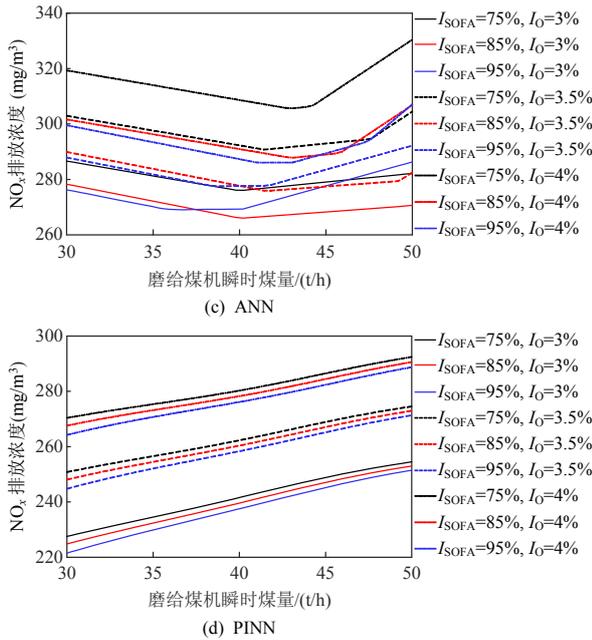
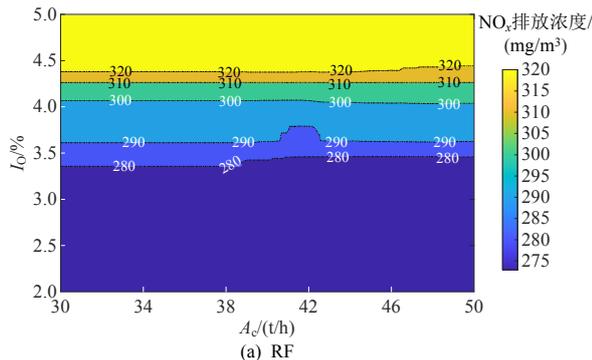


图 4 NO_x 排放一维 PDA 分析图

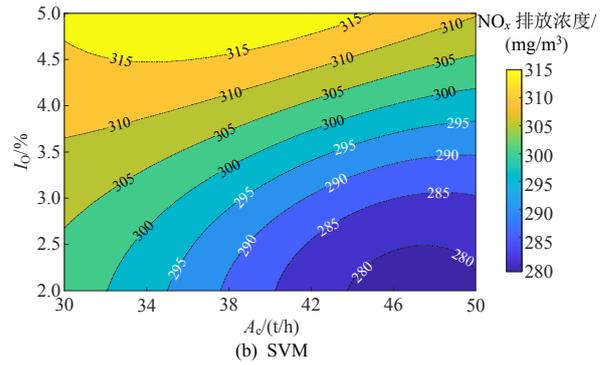
Fig. 4 One-way PDA of the NO_x emissions

更接近于实际的物理过程。在训练样本的覆盖范围内(给煤量在 40~50 t/h 之间), ANN 模型的预测结果存在一定的上升趋势;而在训练样本未覆盖的工况范围,由于没有物理一致性的约束,出现了与实际物理过程相悖的变化趋势。这表明了 PINN 可以扩展模型学习到的单调性关系,提高模型预测的泛化能力。

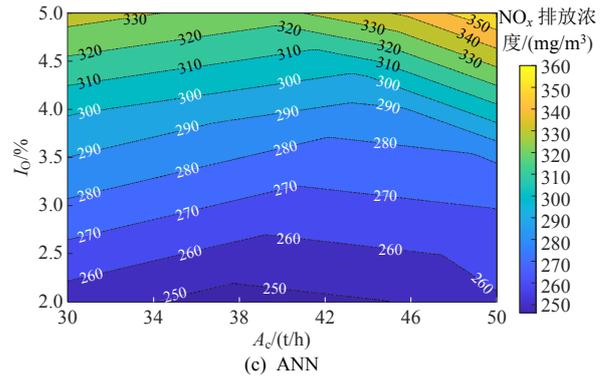
为进一步研究给煤量、氧气量和 SOFA 之间的相互影响,采用二维 PDA 可视化两个输入变量之间的相互作用。图 5 以等高线的形式展示了 NO_x 浓度,横坐标和纵坐标分别表示煤量和氧气量。图 5(a)~(c)所示为 RF、SVM 和 ANN 3 种对比模型的结果。可知,RF 模型的 NO_x 浓度随着氧气量的增加而上升,但煤量的变化对 NO_x 浓度没有明显的影响。在 SVM 模型中,NO_x 浓度随着煤量的增加而下降,呈现负单调性。从等高线走势来看,ANN 模型的 NO_x 浓度变化趋势非单调。因此,其他 3 种对比模型的预测结果不满足锅炉 NO_x 的实际生成



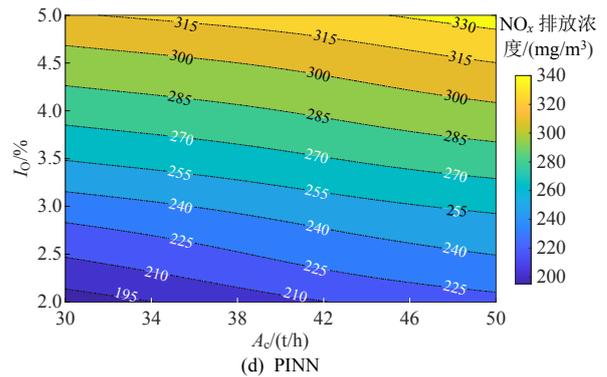
(a) RF



(b) SVM



(c) ANN



(d) PINN

图 5 NO_x 排放二维 PDA 分析图(给煤量与氧量)

Fig. 5 Two-way PDP of the NO_x emissions: coal flow rate and excess O₂

机理。由图 5(d)可知,本文 PINN 模型呈现出严格的参数单调性关系,NO_x 浓度随着煤量和氧气量的增加而上升。

图 6 展示了煤量和 SOFA 风开度之间的相互作用关系。根据 PINN 模型的预测结果分析,随着煤量的增加和 SOFA 风开度的降低,空气分级效果减弱,主燃烧器区域的氧气浓度增加,炉膛火焰温度升高,NO_x 排放量上升,如图 6(d)所示。图 6(a)~(c)还比较了其他 3 种模型的结果。RF 模型的 NO_x 浓度等高线分布无序,变量之间的单调关系并不明显。SVM 和 ANN 模型的等高线图中存在不同位置的低谷,整体呈现出非单调性,这不符合实际反应机理。结果表明,PINN 模型的预测结果可以准确反映出煤量、氧气量和 SOFA 风开度 3 个参数与

NO_x排放浓度之间的单调性关系,体现出较高的可解释性和泛化能力。

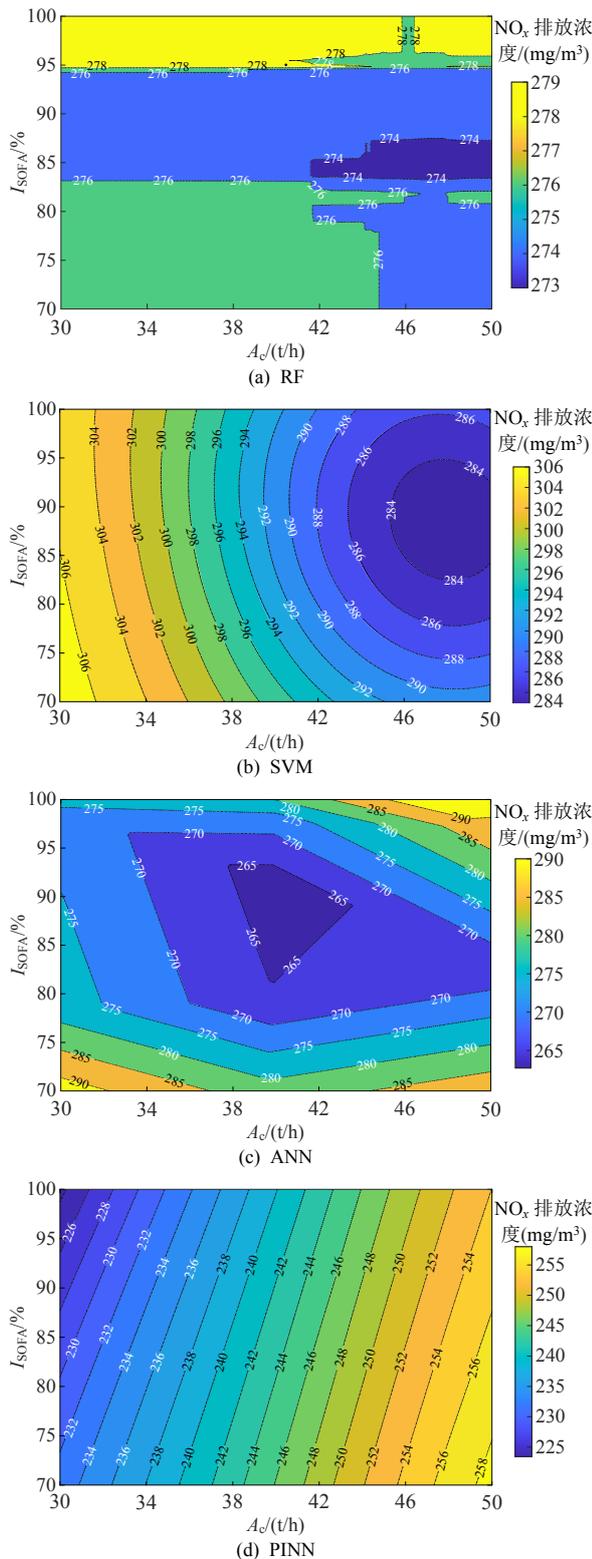


图6 NO_x排放二维PDA分析图(给煤量与SOFA风开度)

Fig. 6 Two-way PDA of the NO_x emissions: coal flow rate and SOFA openings

4 结论

本文针对燃煤锅炉NO_x排放浓度预测问题,以

660 MW 燃煤锅炉为研究对象,提出一种基于物理信息神经网络的预测方法,主要结论如下:

1) 提出的PINN模型将NO_x排放浓度与关键输入参数(煤量、氧量以及SOFA风开度)之间的物理单调性关系嵌入到神经网络结构中,使模型在拟合误差最小化的同时服从先验物理规律,提高了模型的可解释性和泛化能力。

2) 基于锅炉实际运行数据对比分析了多个机器学习模型的预测性能。结果表明,与RF、SVM和ANN相比,PINN模型在预测精度和泛化能力方面均表现出显著优势。特别是在训练样本未覆盖的工况范围内,PINN模型仍能保持良好的预测性能。

3) 采用一维和二维PDA研究不同模型学习到的NO_x排放规律。结果表明,PINN模型能够准确捕捉NO_x排放浓度与运行参数之间的单调性关系,展现出优越的可解释性,为锅炉运行优化和排放控制提供有效的理论指导。

本文为融合物理先验知识与机器学习模型预测燃煤锅炉NO_x排放浓度提供一种新思路。未来可继续探索其他形式的物理约束,如偏微分方程等定量描述,将更多燃烧反应机理知识引入到数据驱动建模过程中,进一步提升NO_x排放预测模型的精度与稳健性。

参考文献

- [1] 薛文博,许艳玲,王金南,等. 全国火电行业大气污染物排放对空气质量的影响[J]. 中国环境科学, 2016, 36(5): 1281-1288.
XUE Wenbo, XU Yanling, WANG Jinnan, et al. Ambient air quality impact of emissions from thermal power industry[J]. China Environmental Science, 2016, 36(5): 1281-1288(in Chinese).
- [2] 张志宇,李新利,杨国田. 基于改进生成对抗网络pix2pix的火电厂NO_x排放预测[J]. 中国电机工程学报, 2023, 43(12): 4678-4687.
ZHANG Zhiyu, LI Xinli, YANG Guotian. NO_x emission prediction of thermal power plant based on improved generative adversarial network pix2pix [J]. Proceedings of the CSEE, 2023, 43(12): 4678-4687(in Chinese).
- [3] SHI Li, FU Zhongguang, DUAN Xuenong, et al. Influence of combustion system retrofit on NO_x formation characteristics in a 300 MW tangentially fired furnace[J]. Applied Thermal Engineering, 2016, 98: 766-777.
- [4] SMREKAR J, POTOČNIK P, SENEGAČNIK A. Multi-step-ahead prediction of NO_x emissions for a coal-based boiler[J]. Applied Energy, 2013, 106: 89-99.
- [5] CHUI E H, GAO Haining. Estimation of NO_x emissions from coal-fired utility boilers[J]. Fuel, 2010, 89(10):

- 2977-2984.
- [6] SUN Wenjing, ZHONG Wenqi, YU Aibing, et al. Numerical investigation on the flow, combustion, and NO_x emission characteristics in a 660 MWe tangential firing ultra-supercritical boiler[J]. *Advances in Mechanical Engineering*, 2016, 8(2): 2289-2296.
- [7] ZHOU Chaoyang, WANG Yongqiang, JIN Qiye, et al. Mechanism analysis on the pulverized coal combustion flame stability and NO_x emission in a swirl burner with deep air staging[J]. *Journal of the Energy Institute*, 2019, 92(2): 298-310.
- [8] VAN DER LANS R P, GLARBORG P, DAM-JOHANSEN K. Influence of process parameters on nitrogen oxide formation in pulverized coal burners[J]. *Progress in Energy and Combustion Science*, 1997, 23(4): 349-377.
- [9] 唐振浩, 朱得宇, 李扬. 基于数据驱动的燃煤锅炉 NO_x 排放浓度动态修正预测模型[J]. *中国电机工程学报*, 2022, 42(14): 5182-5193.
TANG Zhenhao, ZHU Deyu, LI Yang. Data driven based dynamic correction prediction model for NO_x emission of coal fired boiler[J]. *Proceedings of the CSEE*, 2022, 42(14): 5182-5193(in Chinese).
- [10] WU Zheng, ZHANG Yue, DONG Ze. Prediction of NO_x emission concentration from coal-fired power plant based on joint knowledge and data driven[J]. *Energy*, 2023, 271: 127044.
- [11] WANG Fang, MA Suxia, WANG He, et al. Prediction of NO_x emission for coal-fired boilers based on deep belief network[J]. *Control Engineering Practice*, 2018, 80: 26-35.
- [12] SI Fengqi, ROMERO C E, YAO Zheng, et al. Optimization of coal-fired boiler SCRs based on modified support vector machine models and genetic algorithms[J]. *Fuel*, 2009, 88(5): 806-816.
- [13] ZHAI Yongjie, DING Xuda, JIN Xiuzhang, et al. Adaptive LSSVM based iterative prediction method for NO_x concentration prediction in coal-fired power plant considering system delay[J]. *Applied Soft Computing*, 2020, 89: 106070.
- [14] AZODI C B, TANG Jiliang, SHIU S H. Opening the black box: interpretable machine learning for geneticists [J]. *Trends in Genetics*, 2020, 36(6): 442-455.
- [15] KARNIADAKIS G E, KEVREKIDIS I G, LU Lu, et al. Physics-informed machine learning[J]. *Nature Reviews Physics*, 2021, 3(6): 422-440.
- [16] 王意存, 邢江宽, 罗坤, 等. 基于物理信息神经网络的燃烧化学微分方程求解[J]. *浙江大学学报: 工学版*, 2022, 56(10): 2084-2092.
WANG Yicun, XING Jiangkuan, LUO Kun, et al. Solving combustion chemical differential equations via physics-informed neural network[J]. *Journal of Zhejiang University: Engineering Science*, 2022, 56(10): 2084-2092(in Chinese).
- [17] MASI F, STEFANO I, VANNUCCI P, et al. Thermodynamics-based Artificial Neural Networks for constitutive modeling[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2021, 147: 104277.
- [18] WANG Jianxun, WU Jinlong, XIAO Heng. Physics-informed machine learning approach for reconstructing Reynolds stress modeling discrepancies based on DNS data[J]. *Physical Review Fluids*, 2017, 2(3): 034603.
- [19] PAN Chunjian, DONG Yaming, YAN Xuefeng, et al. Hybrid model for main and side reactions of p-xylene oxidation with factor influence based monotone additive SVR[J]. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2014: 136: 36-46.
- [20] ZHU Hong, TSANG E C C, WANG Xizhao, et al. Monotonic classification extreme learning machine [J]. *Neurocomputing*, 2017, 225: 205-213.
- [21] XIE Kang, LIU Pan, ZHANG Jianyun, et al. Physics-guided deep learning for rainfall-runoff modeling by considering extreme events and monotonic relationships[J]. *Journal of Hydrology*, 2021, 603: 127043.
- [22] ALBER M, BUGANZA TEPOLE A, CANNON W R, et al. Integrating machine learning and multiscale modeling—perspectives, challenges, and opportunities in the biological, biomedical, and behavioral sciences [J]. *npj Digital Medicine*, 2019, 2(1): 115.
- [23] GOH A T C. Back-propagation neural networks for modeling complex systems[J]. *Artificial Intelligence in Engineering*, 1995, 9(3): 143-151.
- [24] HANSEN N, MÜLLER S D, KOUMOUTSAKOS P. Reducing the time complexity of the derandomized evolution strategy with covariance matrix adaptation (CMA-ES)[J]. *Evolutionary Computation*, 2003, 11(1): 1-18.
- [25] LE BRIS T, CADAVID F, CAILLAT S, et al. Coal combustion modelling of large power plant, for NO_x abatement[J]. *Fuel*, 2007, 86(14): 2213-2220.
- [26] ZHOU Hao, MO Guiyuan, SI Dongbo, et al. Numerical simulation of the NO_x emissions in a 1000 MW tangentially fired pulverized-coal boiler: influence of the multi-group arrangement of the separated over fire air[J]. *Energy & Fuels*, 2011, 25(5): 2004-2012.
- [27] ZHAO Sheng, LI Jian, CHEN Chao, et al. Interpretable machine learning for predicting and evaluating hydrogen production via supercritical water gasification of biomass[J]. *Journal of Cleaner Production*, 2021, 316: 128244.



任少君

在线出版日期: 2024-02-02.

收稿日期: 2023-08-04.

作者简介:

任少君(1989), 男, 工学博士, 主要从事电力大数据、大型火电机组系统特性建模及故障诊断等方面的研究工作, rsj@seu.edu.cn.

(编辑 胡琳琳)