

基于DTW-CNN-LSTM的SCR出口NO_x浓度预测

杨 鹏, 孙开迪, 李高琛

青岛大学计算机科学技术学院, 山东 青岛

收稿日期: 2024年9月19日; 录用日期: 2024年10月22日; 发布日期: 2024年10月31日

摘 要

为了解决火力发电厂SCR烟气脱硝设备操作人员依赖经验调节喷氨阀门开度, 降低SCR脱硝系统出口烟气中NO_x浓度的问题, 提出了一种SCR出口NO_x浓度预测方法。该方法基于一维卷积神经网络和长短时记忆神经网络, 同时在数据处理过程中加入动态时间规整算法, 利用青岛某热电厂发电机组的SCR脱硝系统运行数据, 搭建SCR脱硝系统出口NO_x浓度预测模型, 通过提取数据在时序上的特征, 可实现预测45分钟内SCR出口NO_x浓度。电厂SCR脱硝设备操作人员可将该模型的预测结果作为调节阀门开度时的重要参考, 将其调整至当前最佳状态。结果表明, DTW-CNN-LSTM模型在SCR出口浓度预测精度优于传统LSTM及CNN-LSTM, 在测试集上 R^2 为79.65%, 得到了期望的结果。

关键词

时间序列, 动态时间规整, 一维卷积神经网络, 长短时记忆神经网络, 氮氧化物浓度

Prediction of NO_x Concentration at SCR Outlet Based on DTW-CNN-LSTM

Peng Yang, Kaidi Sun, Gaochen Li

School of Computer Science and Technology, Qingdao University, Qingdao Shandong

Received: Sep. 19th, 2024; accepted: Oct. 22nd, 2024; published: Oct. 31st, 2024

Abstract

In order to solve the problem of operators of SCR flue gas denitrification equipment in thermal power plants relying on experience to adjust the opening of the ammonia injection valve and reduce the concentration of NO_x in the outlet flue gas of the SCR denitrification system, a method for predicting the NO_x concentration at the SCR outlet is proposed. This method, based on a one-dimensional

convolutional neural network and long short-term memory neural network, incorporates a dynamic time warping algorithm in the data processing process. Using the operating data of the SCR denitrification system of a power plant in Qingdao, a prediction model for the NO_x concentration at the outlet of the SCR denitrification system is built. By extracting the temporal features of the data, the NO_x concentration at the SCR outlet can be predicted within 45 minutes. The operators of SCR denitrification equipment in power plants can use the predicted results of this model as an important reference when adjusting valve opening, and adjust it to the current optimal state. The results showed that the DTW-CNN-LSTM model had better accuracy in predicting SCR outlet concentration than traditional LSTM and CNN-LSTM, with R-Square of 79.65% on the test set, achieving the expected results.

Keywords

Time Series, Dynamic Time Warping, One-Dimensional Convolutional Neural Network, Long Short-Term Memory Neural Network, Nitrogen Oxide Concentration

Copyright © 2024 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

在我国,大气污染物中氮氧化物(Nitrogen oxides, NO_x)占有较大的比例,是酸雨和光化学污染烟雾形成的主要原因,会对人类的健康和环境保护造成很大危害。控制减少 NO_x 的排放对降低大气污染程度具有重要意义。随着国家对环保要求的提高,工厂烟气中氮氧化物的排放要求也越来越严格,对脱硝控制系统的优化是势在必行的[1]。

电力作为一种重要能源,与我们的生活息息相关,随着互联网时代的到来,我们对电力的需求也在不断增长。电厂作为电力供给的重要设施,值得我们重点关注,其中火电厂的占比较大。火电厂通过燃烧煤炭发电,在燃煤过程中会产生大量烟气,其中不可避免地会含有大量 NO_x 等污染物,火电厂大多采用选择性催化还原法(Selective Catalytic Reduction, SCR)对燃煤产生的烟气进行脱硝处理。简单来讲,SCR 工艺是在催化剂作用下,将 NO_x 还原为氮气和水[2],反应机理如下:



其 NO_x 脱除率可达 90% 以上,拥有技术可靠、结构简单、氨气逃逸率小等优点。SCR 设备通过控制喷氨阀门的开关程度来控制喷氨量,喷氨过多容易造成氨气逃逸,导致设备堵塞;而喷氨不足会造成氮氧化物排放量过高,对大气环境造成污染等一系列问题,现已成为燃煤机组的共性问题,由于目前阀门开度是由工人根据监测设备监测到的出口 NO_x 浓度进行调节,SCR 设备作为一个大惯性系统,工人对当前时刻阀门开度的调节,会在几分钟后才能够观测到影响,因此预测当前时刻阀门开度对 SCR 出口 NO_x 浓度的影响,对阀门开度的控制和最终的脱硝效果都至关重要。

针对上述问题,本文提出一种基于 DTW-CNN-LSTM 神经网络的 SCR 出口烟气 NO_x 浓度预测模型。

2. 相关技术

2.1. 长短期记忆神经网络

SCR 设备是长时间不间断系统,当前时刻的出口 NO_x 浓度会在一定程度上受到过往时刻的影响,这

种影响是不可忽略的。而循环神经网络(Recurrent Neural Network, RNN)就是用于处理这类包含顺序关系数据的一类神经网络,如图,其中 x 是输入层特征, h 是隐含层向量, o 为输出特征, U 为输入层到隐含层的权重矩阵, V 为隐含层到输出层的权重矩阵, W 为上一隐含层的权重值,其特殊的循环结构,会将过往时刻的结果带入到当前时刻,其模型结构如图 1 所示,相关计算公式如式(3)、式(4)所示。

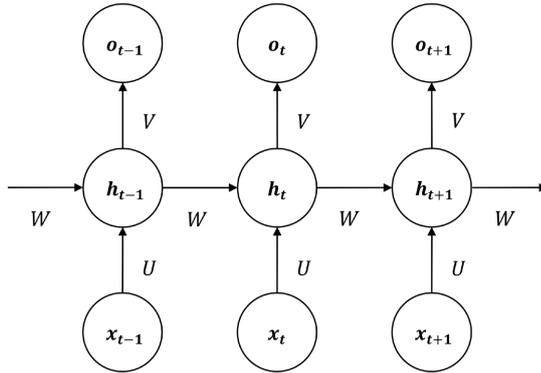


Figure 1. Structure of recurrent neural network model
图 1. 循环神经网络模型结构

$$o_t = (V \times h_t) \tag{3}$$

$$h_t = f(U \times x_t + W \times h_{t-1}) \tag{4}$$

RNN 网络虽然结构简单,但是当时间序列过长的時候,模型容易出现梯度消失等问题,因此其不适用于处理长时间序列。长短期记忆神经网络(Long Short-Term Memory, LSTM)是由 Hochreiter 等在 RNN 结构基础上改进而来,增加了遗忘门、记忆门和输出门结构。LSTM 网络结构中的门结构起到滤波的作用,对过往时刻神经元的状态输出和当前的输入通过激活函数和权重向量选择性保留和舍弃,为神经元提供了更加丰富的数据结构。其网络结构如图 2 所示,相关计算公式如式(5)~(10)所示。

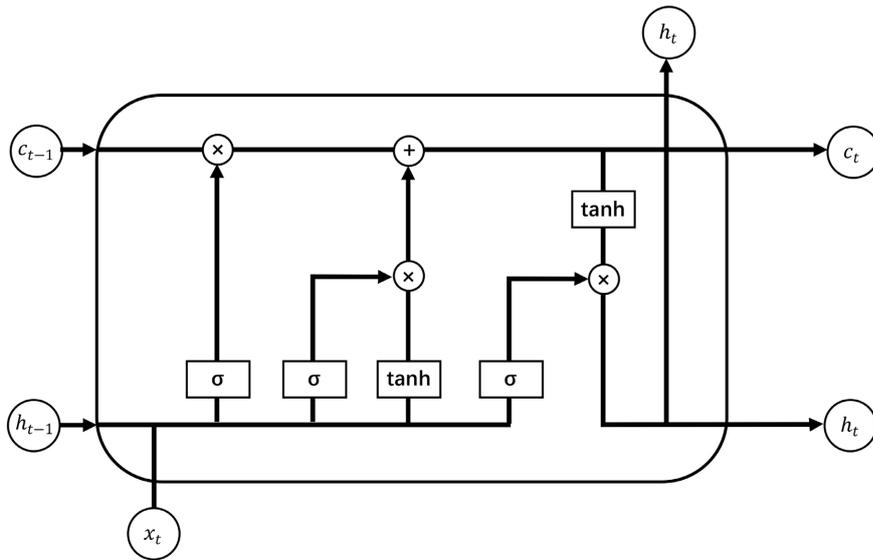


Figure 2. Structure of long short term memory neural network model
图 2. 长短期记忆神经网络模型结构

$$f_t = \sigma[W_f(h_{t-1}, x_t) + b_f] \quad (5)$$

$$i_t = \sigma[W_i(h_{t-1}, x_t) + b_i] \quad (6)$$

$$\tilde{c}_t = \tanh[W_c(h_{t-1}, x_t) + b_c] \quad (7)$$

$$c_t = f_t \odot c_{t-1} + i_t \odot \tilde{c}_t \quad (8)$$

$$o_t = \sigma[W_o(h_{t-1}, x_t) + b_o] \quad (9)$$

$$h_t = o_t \odot \tanh(c_t) \quad (10)$$

其中, f_t 、 i_t 、 o_t 、 c_t 分别为遗忘门, 输入门、输出门、记忆细胞状态; h_t 、 \tilde{c}_t 为隐含层细胞状态及中间变量; W 、 b 分别为权重矩阵及偏置; σ 、 \tanh 分别为 sigmoid 函数及 tanh 函数[3]。LSTM 神经网络虽然在一定程度上解决的 RNN 网络存在的梯度消失的问题, 但是在面对时间更长的序列时, 随着时间的增长, 可能会出现对序列特征难以捕捉提取的情况, CNN 网络在特征提取具有充分的优势, 因此本文使用 CNN 网络对 LSTM 网络进行改进。

2.2. 一维卷积神经网络

卷积神经网络(Convolutional Neural Networks, CNN)作为一种典型的深度学习方法, 被广泛应用于计算机视觉等领域, 其核心是其中的卷积层和池化层。卷积层能够捕获到输入数据中的全局特征, 可以大幅度减少参数并降低过拟合风险。池化层能够对卷积计算出的数据在保留卷积层大部分重要特征的基础上进行降维, 降低网络的复杂度, 减小模型的大小[4] [5]。

一维卷积神经网络(1D Convolutional Neural Network, 1D-CNN)是卷积神经网络的一个变种, 卷积神经网络通常用于对二维图像进行卷积, 而一维卷积神经网络则用于对一维时序数据进行处理, 使用固定大小的卷积核在一维特征上进行卷积操作, 如图 3 所示[6]。

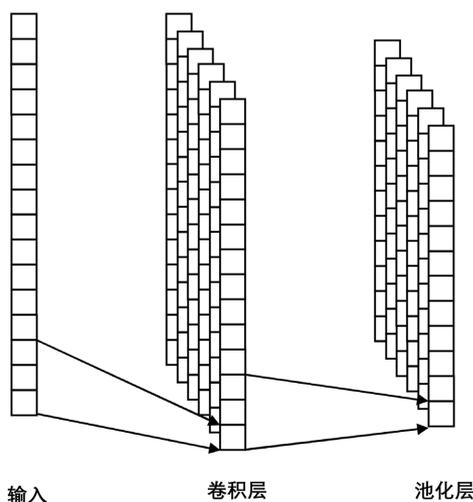


Figure 3. Structure of one-dimensional convolutional neural network model
图 3. 一维卷积神经网络模型结构

SCR 脱硝设备作为一个大惯性系统, 其中不同的参数对出口 NO_x 浓度影响速度上会存在不同程度的延迟, 神经网络模型虽然能够在一定程度上学习到延迟效果, 但是网络对延迟的学习可能会出现偏差, 导致网络的预测结果发生偏移, 因此本文尝试通过 DTW 算法对输入数据进行处理, 来修正网络在学习

过程中对延迟产生的误差。

2.3. 动态时间规整算法

动态时间规整算法(Dynamic Time Warping, DTW)是一种适用于时间序列匹配的算法,最早被应用于孤立词语音识别之中,其主要目的是通过序列间对齐寻找一个最佳对应关系,从而使两个不同长度的序列可以进行比较。算法流程:将两个需要比较的时间序列看作两个数组,建立一个距离矩阵,该矩阵的每个元素存储了序列中对应元素之间的距离,在距离矩阵中找到一条从左上角到右下角的最短路径,该路径为两个序列之间的最佳对齐。DTW 算法利用所有相似点之间距离的和来衡量两个时间序列整体之间的相似性,设 $X = [x_1, x_2, x_3, \dots, x_m]$ 、 $Y = [y_1, y_2, y_3, \dots, y_n]$ 分别为长度为 m 、 n 的时间序列,其 DTW 距离如式(11)、(12)所示:

$$\varphi(m, n) = d(x_i, y_j) + \min \{ \varphi(i-1, j-1), \varphi(i, j-1), \varphi(i-1, j) \} \quad (11)$$

$$DTW(X, Y) = \varphi(m, n) \quad (12)$$

其中, $d(x_i, y_j)$ 为 x_i 和 y_j 之间的距离,通常使用欧式距离进行计算[7]。DTW 虽然计算量大,在处理较长时间序列时速度相对较慢,但是其能够容忍序列之间的时间非等长及偏移,适用于更多场景[8]。

3. SCR 脱硝设备出口浓度预测模型

3.1. 数据预处理

本文处理的数据是来自青岛某火电厂的锅炉燃煤数据,对数据预处理的具体步骤如下:

(1) 数据清理。从火电厂 SCR 设备采集的数据相对规整,但是仍然存在部分数据缺失,部分参数在采集过程中因对 SCR 出口浓度没有影响,在采集时均记录为 0,对模型训练没有价值,将该部分从原始数据集中剔除。

(2) 数据归一化。数据归一化可以降低原始数据中较大范围的数据造成的影响,提高模型训练的速度和预测的精准度[9]。本文采用 min-max 归一化方法使输入数据处于[0, 1]区间,其公式如式(13)所示:

$$x' = \frac{x - \min(x)}{\max(x) - \min(x)} \quad (13)$$

(3) 计算延迟时间。SCR 设备作为一个大惯性系统,在烟气流动的过程中,不同参数对最终 SCR 设备出口氮氧化物浓度的影响效果会存在不同程度的延迟,通过初步计算延迟时间,能够使网络更好地学习到不同输入特征对输出特征的影响,输入特征最优延迟时间结果如表 1 所示。

Table 1. Optimal delay time for input features

表 1. 输入特征最优延迟时间

参数	延迟时间(s)	参数	延迟时间(s)
#4 发电机有功功率	359	4A 氨混合器调节门 SP_NOX	2
4A 反应器入口烟气温度一	138	4A 氨混合器调节门开度指令	65
4A 反应器入口烟气温度二	141	4A 氨混合器调节门开度反馈	66
4A 反应器入口烟气温度三	142	4A 反应器氨气供应流量	167
4A 反应器入口 CEMS 烟气 NOX	4	4A 反应器氨气供应压力	353
4A 反应器入口 CEMS 烟气 NOX (折算)	6	4A 反应器氨气供应温度	0
4A 反应器入口烟气流量	358		

(4) 使用滑动窗口拆分数据。对于时间序列预测, LSTM 神经网络需要从过往时间中获取信息对当前时刻进行预测, 需要对数据集进行划分, 设置时间步长度为 150 秒的滑动窗口, 对数据集进行处理, 得到可供模型使用的数据集。

3.2. 模型搭建

将从火电厂采集到的 SCR 脱硝过程数据作为实验数据, 经过上述预处理后, 得到实验样本, 将其中 89% 作为训练样本, 11% 作为预测样本。

为评估模型预测效果、衡量预测结果相较于真实结果的差异。本文使用平均绝对误差(Mean Absolute Error, MAE)、均方根误差(Root Mean Square Error, RMSE)和决定系数(R-Square, R2)对模型准确性进行评估。其中 MAE 用来反映预测误差的实际情况, 见式(14), RMSE 用来衡量观测值与实际值之间的偏差, 见式(15), R2 用于评估模型的拟合度, 见式(16) [10]。

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i| \quad (14)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (15)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \quad (16)$$

其中, n 为预测样本的数量, \bar{y} 为标签值的期望, y_i 为第 i 个样本的预测值, \hat{y}_i 为第 i 个样本的真实值。

本文搭建的 DTW-CNN(1D)-LSTM 网络包含 1 个输入层, 1 个卷积层, 1 个池化层, 1 个长短时记忆层和 1 个输出层, 具体结构如表 2 所示。

Table 2. Struct of DTW-CNN-LSTM model

表 2. DTW-CNN-LSTM 模型结构

名称结构	参数
Conv1D	卷积核个数: 32, 卷积核宽度: 3
MaxPooling1D	池化层宽度: 3
LSTM	神经元个数: 4
Dense	输出单元数: 1

卷积层通过卷积运算对输入的某个局部进行加权求和, 实现对应输入的局部感知, 进而提取输入数据特征, 使用 ReLU 激活函数对提取到的进行非线性化处理。选取最大池化作为池化层的操作。同时, 不同的卷积核大小与个数以及卷积层层数会产生不同的拟合结果, 本文选择不同大小及数量的卷积核和卷积层层数构造预测模型, 并探究其对预测结果的影响, 以获取卷积核参数和卷积层数的最优组合。将 SCR 出口 NO_x 浓度的预测值与实际值进行对比分析, 以验证模型的有效性。

为防止过拟合, 在网络中加入 L2 正则化。L2 正则化是最常用的一种正则化技术, 又称为权重衰减 (Weight Decay), 其在原损失函数后添加正则化项以防止权重过大, 使模型更平滑 [11]。

3.3. 模型训练与验证

本文搭建的 DTW-CNN-LSTM 网络模型与传统 LSTM 及 CNN-LSTM 对训练样本进行 100 轮拟合,

同时对 SCR 设备出口 45 分钟内氮氧化物浓度进行预测得到的结果如图 4 及表 3 所示，绘图时每间隔 5 秒钟取 1 个样本点。

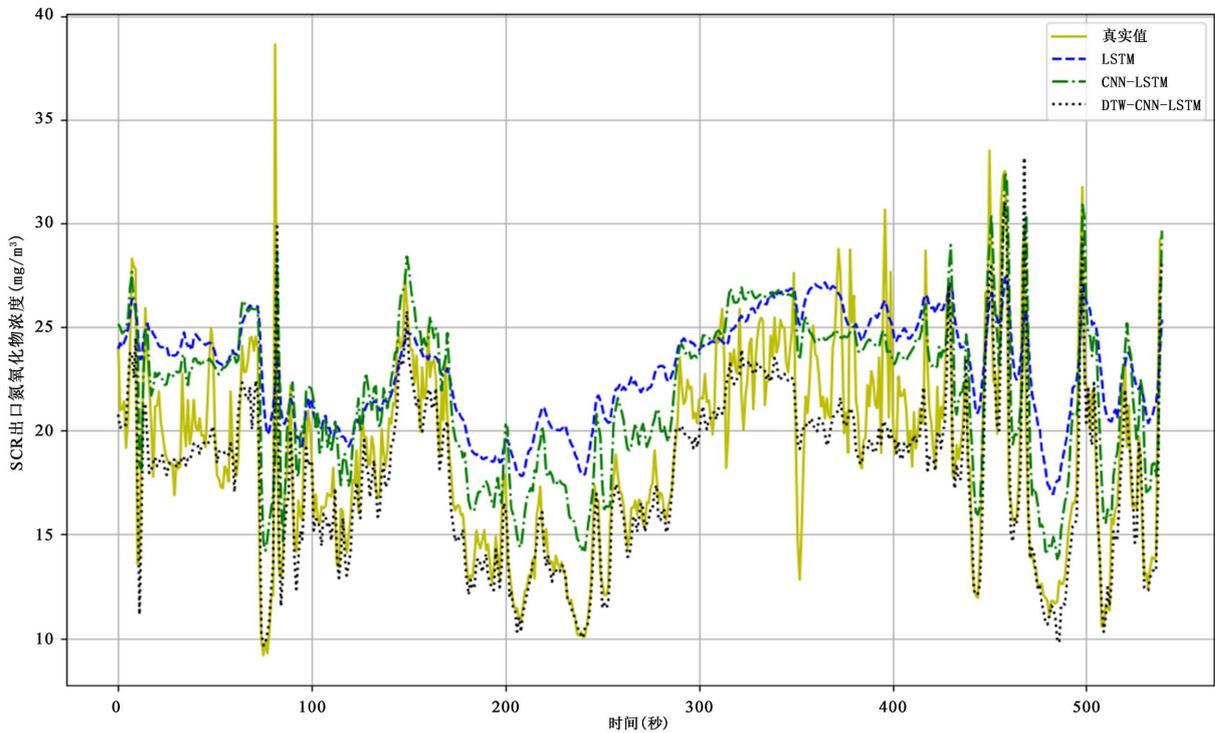


Figure 4. Prediction results of NO_x within 45 minutes (different structure of neural network)

图 4. 45 分钟内 NO_x 浓度预测结果(不同网络结构)

Table 3. Evaluation of model prediction performance (different structure of neural network)

表 3. 模型预测效果评价(不同网络结构)

模型	MAE	RMSE	R2
LSTM	0.0613	0.0701	31.89
CNN-LSTM	0.0452	0.0518	53.10
DTW-CNN-LSTM	0.0214	0.0297	79.65

为了分析卷积层层数对预测结果的影响，以预测结果更好的模型的卷积核参数为基准，构建不同卷积层层数的 CNN-LSTM 网络模型对 SCR 设备出口 45 分钟内的氮氧化物浓度进行预测，结果如图 5 和表 4 所示，绘图时每间隔 5 秒钟取一个样本点。

Table 4. Evaluation of model prediction performance (different layer number of CNN)

表 4. 模型预测效果评价(不同 CNN 层数)

卷积层层数	MAE	RMSE	R2
1 层	0.0214	0.0297	79.65
2 层	0.0224	0.0327	74.06
3 层	0.0459	0.0562	46.54

由表可知，当卷积层数为 1 时，模型预测效果最好，其 R2 最高且 MAE 和 RMSE 最小。增加卷积层

层数可以分层次传递信息, 即将各层需要学习的问题分解, 同时可以引入更多非线性因素, 进而提高模型性能和预测效果。然而随着网络层数的增加, 模型预测性能反而会下降, 这是因为随着卷积层数的增加, 模型会出现性能退化的现象, 即卷积层层数增加至两层时训练集的准确度趋于饱和, 继续增加层数训练集的精度就会下降。

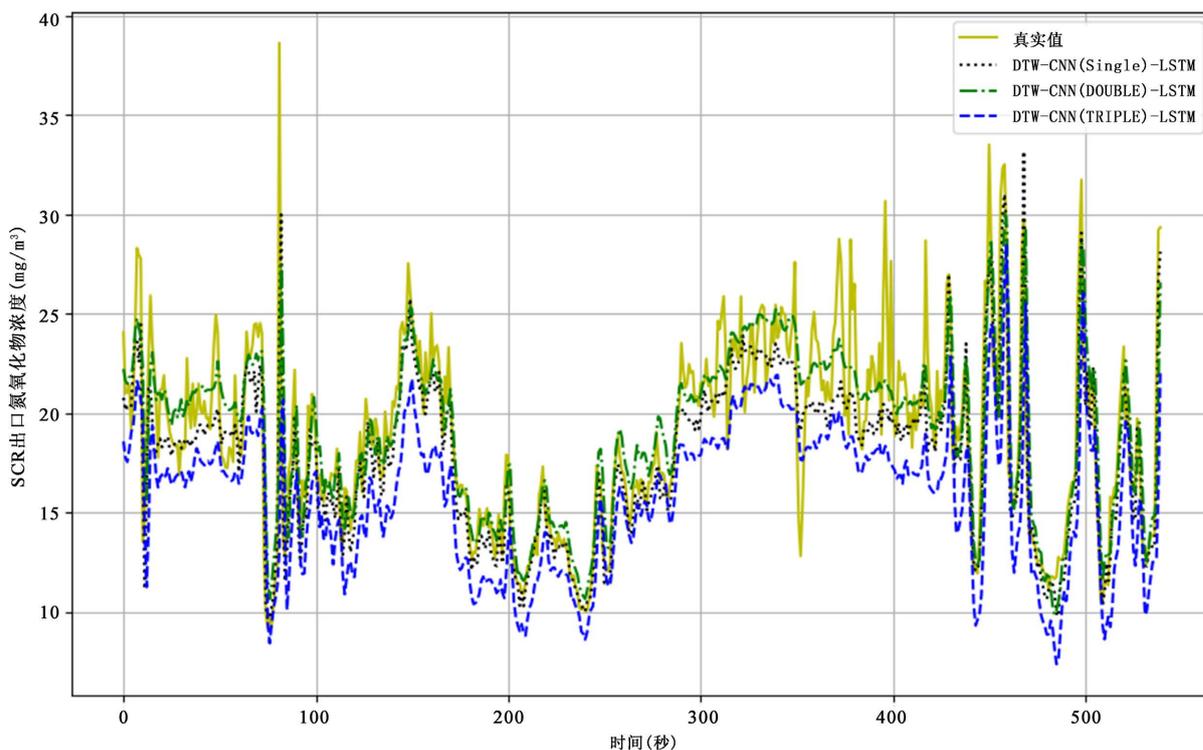


Figure 5. Prediction results of NO_x within 45 minutes (different layer number of CNN)

图 5. 45 分钟内 NO_x 浓度预测结果(不同 CNN 层数)

4. 结论

本文建立了 DTW-CNN-LSTM 神经网络利用燃煤锅炉参数对 SCR 脱硝设备的入口浓度进行预测, 同时考虑不同参数之间对于入口浓度带来的延迟影响。结果表明, 相比于 LSTM 和 CNN-LSTM 网络, DTW-CNN-LSTM 在该数据集上具有更好的预测结果, 同时当 CNN 网络层数为 1 时, 得到的预测结果更好。该网络的预测结果可以在一定程度上为 SCR 脱硝设备的出口浓度预测提供参考。在未来的研究中会考虑更多的影响因素, 以提升模型的预测精度。

参考文献

- [1] 金秀章, 张少康. 基于神经网络在线学习的脱硝系统入口氮氧化物预测[J]. 河北大学学报(自然科学版), 2018, 38(4): 423-431.
- [2] 蒙西, 王岩, 孙子健, 等. 基于注意力模块化神经网络的城市固废焚烧过程氮氧化物排放预测[J]. 化工学报, 2024, 75(2): 593-603.
- [3] 孙亚婷, 杨阳, 罗倩, 等. 基于 LSTM 模型的汉口水文站流量预测研究[J/OL]. 水利水电快报, 2024: 1-7. https://kns.cnki.net/kcms2/article/abstract?v=64ENavj7QCC0A_fN-PIBMreMxS7rLnUGbE5LIh-178wsjLOXS0Qmh3aXKGEgT9vQWXMdIJMpgMf7Ue1K4il_fBm4SMpgbXnMGvgjdksiQGIRA5-ZCdcGO1ie-Ogx56aOgKNBdxfcqM6n1VSfJPpy--SG_tp_45lswZCy13I4iju1KldRfq0XAD41hzw5go&uniplat-form=NZKPT&language=CHS, 2024-07-21.

- [4] 刘建军, 赵旭, 张卫东, 等. 基于 CNN(1D)-LSTM 模型的电站锅炉 SCR 入口 NO_x 浓度预测[J]. 电子测量技术, 2023, 46(13): 59-65.
- [5] 章玉容, 余威龙, 王龙龙, 等. 基于一维卷积神经网络的粉煤灰混凝土氯离子质量分数预测[J]. 浙江工业大学学报, 2024, 52(2): 156-163.
- [6] 高致源, 邢建春, 张学伟, 等. 基于注意力机制的 CNN-LSTM 建筑能耗预测方法研究[J]. 暖通空调, 2024, 54(8): 48-55.
- [7] 刘卓睿, 熊健豪, 曾清霖, 等. 基于 DTW 算法和遗传算法的三相不平衡负荷调整[J]. 江西电力, 2024, 48(1): 32-39.
- [8] 谭鑫龙. 基于 RNN-DTW 的注采井间连通性判断[J]. 石油地质与工程, 2023, 37(5): 76-80.
- [9] 韩利国. 基于 PSO-LSTM 神经网络的沙坪水电站水位预报方法研究[J]. 水利技术监督, 2023(11): 193-197.
- [10] 黄明星, 姚晨. PSO-BP 神经网络模型在股票预测中的应用[J]. 福建电脑, 2023, 39(3): 36-40.
- [11] 张顺, 龚怡宏, 王进军. 深度卷积神经网络的发展及其在计算机视觉领域的应用[J]. 计算机学报, 2019, 42(3): 453-482.