

基于概念漂移的电站 SCR 系统催化剂性能的劣化分析

姚学忠¹, 俞勇博¹, 宋贵安^{2,3}, 司风琪^{2,3}

(1. 大唐环境产业集团股份有限公司特许经营分公司, 江苏南京 211100; 2. 东南大学能源热转换及其过程测控教育部重点实验室, 江苏南京 210096; 3. 东南大学能源与环境学院, 江苏南京 210096)

摘要: 建立有效的电站设备性能监测模型, 对指导设备进行预测性维护具有重要意义。以热工过程中的 SCR 脱硝系统为例, 基于海量且连续的运行数据, 从概念漂移的角度对催化剂活性进行了监测以及劣化分析。首先建立了 SCR 系统健康状态的离线模型, 其次将实时运行数据输入模型进行了测试, 并构造了衡量模型性能的统计指标以反映催化剂性能的劣化程度。将模型仿真算例和 SCR 系统实际运行数据进行对比验证, 验证结果表明, 监测指标随时间推移呈指数分布变化关系, 可有效跟踪和监测催化剂活性变化, 为电厂运行人员适时更换催化剂提供科学指导。

关键词: 概念漂移; 性能劣化; 烟气脱硝; 催化剂活性

中图分类号: TM621.1 文献标识码: A DOI: 10.16146/j.cnki.rndlgc.2022.05.014

[引用本文格式] 姚学忠, 俞勇博, 宋贵安, 等. 基于概念漂移的电站 SCR 系统催化剂性能的劣化分析[J]. 热能动力工程, 2022, 37(5): 101-106. YAO Xue-zhong, YUN Yong-bo, SONG Gui-an, et al. Performance degradation analysis of catalyst in the SCR system of power plant based on concept drift[J]. Journal of Engineering for Thermal Energy and Power, 2022, 37(5): 101-106.

Performance Degradation Analysis of Catalyst in the SCR System of Power Plant based on Concept Drift

YAO Xue-zhong¹, YUN Yong-bo¹, SONG Gui-an^{2,3}, SI Feng-qi^{2,3}

(1. Franchised Operation Division, Datang Environmental Industry Group Co. Ltd., Nanjing, China, Post Code: 211100; 2. Key Laboratory of Energy Thermal Conversion and Control of Ministry of Education, Southeast University, Nanjing, China, Post Code: 210096; 3. School of Energy and Environment, Southeast University, Nanjing, China, Post Code: 210096)

Abstract: The establishment of an effective performance monitoring model in the power plant is significant to guide the predictive maintenance for the key equipment. Taking the SCR denitrification system in thermal process as an example, based on the massive and continuous operation data, the activity of the catalyst in the SCR system was monitored, and performance degradation was analyzed from the perspective of concept drift. Firstly, the off-line model of health state of the SCR system was established, and then the input model of real-time operation data was tested. Meanwhile, the statistical indicators measuring the model performance were constructed to reflect the activity of the catalyst and the related deterioration degree. The comparison between the simulation examples of model and the field operation data of SCR system shows that the variation of monitoring indicators with time in exponential distribution, which can effectively track and monitor the activity variation of the catalyst, so as to provide the scientific guidance for the operators in power plant to replace the catalyst at the right time.

Key words: concept drift, performance degradation, flue gas denitrification, catalyst activity

引言

我国燃煤电站锅炉脱硝大多采用选择性催化还原法(Selective Catalytic Reduction, SCR)。SCR是一种高效的烟气脱硝技术,脱硝效率通常高达80%以上^[1],其原理是在催化剂的作用下,采用氨气(NH₃)等还原剂选择性地将在烟气中生成的NO_x转化为无污染的氮气(N₂)和水(H₂O)。催化剂是SCR系统最重要的组成部分之一,其成本较高且直接影响脱硝效果^[2]。目前,商业SCR催化剂的温度窗口一般为300℃~400℃,在该区间范围内,催化剂的活性较高,而高于和低于该温度窗口分别会使催化剂出现烧结和硫中毒的现象^[3],进而对催化剂的活性造成影响。

张战锋等人^[4]对某600 MW机组锅炉烟气脱硝SCR装置的性能和催化剂特性进行了评估,发现灰的硫酸钙及其他物质造成催化剂堵塞,阻碍NO_x和NH₃向活性颗粒的扩散,从而导致催化剂活性以及脱硝效率下降。李乐田等人^[5]利用X射线衍射、可燃物含量测定和浸出溶液离子色谱(IC)分析等方法对SCR系统发黑的催化剂样品进行了检测诊断,发现催化剂颜色发黑为携带黑色飞灰的硫酸氢铵沉积所致,与脱硝系统入口烟气温度低于最低连续喷氨温度(MOT)有关。秦刚华等人^[6]通过调取大量分散控制系统数据,分析了SCR脱硝反应装置中氨氮摩尔比、烟气温度和烟气流速等因素对催化剂活性系数的影响规律,并以此为基础建立了催化剂寿命预警系统,可实时评估催化剂性能并预测催化剂剩余寿命。高常乐等人^[7-8]针对某660 MW机组的SCR脱硝系统,借助长短期记忆神经网络建立了烟囱入口NO_x体积分数的软测量模型,解决了实际过程中烟气出口NO_x体积分数测量误差偏大的问题,并进一步利用最小二乘支持向量机(LSSVM)建立了SCR脱硝催化剂性能劣化监测模型。张爱民等人^[9]基于喷氨调整和性能检测对SCR脱硝催化剂寿命进行了优化管理,通过校正催化剂寿命曲线和制定合理的更新策略有效延长了催化剂寿命。张杨等人^[10]针对当前国内催化剂市场、脱硝装置运维和第三方服务现状,提出了涵盖催化剂全寿命周期的产品供货、质量管控、高效运维、提效优化、寿命管理

以及报废处置的全寿命管理模式。由此可见,SCR脱硝催化剂的性能监测和寿命管理是一个研究热点。

脱硝催化剂的性能劣化是一个连续的过程,因此产生的运行数据流所蕴含的概念和统计特征也是随时间不断变化的,这一现象在机器学习研究领域称为概念漂移(concept drifting)^[11]。本文将从概念漂移角度,利用机器学习方法对脱硝催化剂的性能劣化过程进行研究和分析。首先训练一个离线的脱硝催化剂健康状态模型,对数据流进行快速在线评估,进而通过构造相关指数 R^2 等统计指标来检测系统的概念漂移,从而应用于热工过程SCR系统催化剂活性的监测与评估,最后通过算例分析验证了该方法的可靠性。

1 概念漂移检测流程

概念漂移检测流程可以划分为离线训练和在线测试两个阶段,如图1所示。图中 $\{X_1, X_2, \dots, X_n\}$ 为输入参数测量值, Y 和 Y' 分别为输出参数测量值和估计值。在离线训练阶段,对系统运行数据进行数据预处理之后,取正常状态的运行数据(不含概念漂移)用于训练设备状态特性模型,该模型之后用作系统状态检测器,统称概念漂移检测器。

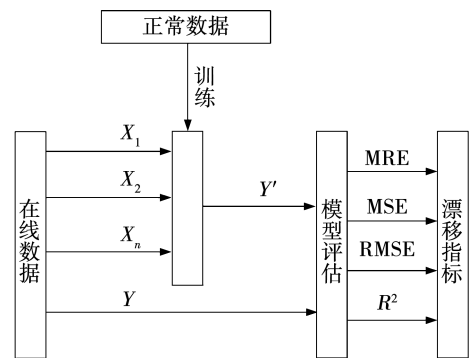


图1 概念漂移检测流程

Fig.1 Detection process of concept drift

研究表明,应用集成学习来组合不同模型能够取得比单一模型更好的效果,在保证准确度的同时也提升了模型泛化能力^[12]。因此,提出一种基于二次学习的混合集成学习方法(Hybrid Ensemble Learning based on Secondary Learning, HEL-SL),利用5种常用的机器学习算法构造不同的个体学习

器,它们分别是:K 邻近算法、支持向量机、多层感知机、决策树及随机森林,并采用基于线性回归的二次学习组合策略对各模型进行集成。

在线测试阶段使用固定大小的滑动窗口来读取实时数据流。为了跟踪系统的概念漂移,持续监控模型预测值与实际传感器值之间的估算误差,通过计算均方根误差(RMSE)、均方误差(MSE)、平均相对误差(MRE)和 R^2 等模型性能指标作为概念漂移监测指标,该触发过程称为状态检测。对于之后每一个输入窗口的数据,都会触发一次状态检测,如果模型估算误差随着时间推移而增加,表现为监测指标偏离正常值,说明模型不再适合当前数据流,系统行为状态发生了变化,即概念漂移。

2 基于合成数据的仿真试验

采用数据合成方法对模型输出结果的漂移进行试验,首先建立数学回归模型,再生成数据,如通过 Box-Jenkins 方法^[13]或通过对现实世界时间序列进行谐波分析并计算傅里叶级数得到预测数据^[14],以产生具有原始数据特征的新合成的时间序列。合成序列通过使用外部输入和内部隐藏状态的固定传递函数来描述系统的特性^[15],系统的状态变化可以通过隐藏状态变量进行控制。

2.1 基于时间序列回归模型的数据合成

在数据合成过程中,首先定义 3 个模型的输入 x_1 、 x_2 、 x_3 ,如式(1)~式(3)所示。

$$x_1 = 1 + \varepsilon + 0.5(\sin(t/5) + \sin(2t/5) + \sin(5t/5)/7) \quad (1)$$

$$x_2 = \varepsilon + 0.4x_1 + \cos(3.5t/5)/3 \quad (2)$$

$$x_3 = \varepsilon + x_2/x_1 \cdot (0.3 - 0.1h_t) + \cos(0.2x_2 + 0.2x_1)/2 \quad (3)$$

式中: t —时间步长,这里取整数计数,从 1 开始; ε —服从高斯分布的模拟信号噪声, $\varepsilon \in N(0, 0.02)$; h_t —系统隐藏状态,在系统状态没有漂移时, h_t 为常数。

定义一个 S 型函数用来模拟设备的性能劣化,表达式如式(4)所示,通过改变参数状态和权重来控制性能劣化的速度。

$$h_t = 1/(1 + e^{-0.05 \cdot (t-250)}) \quad (4)$$

合成模型的输出 y 如式(5)所示。

$$y = \cos(0.6x_1) + 0.1x_2h_t + x_3 \quad (5)$$

2.2 实验结果分析

利用数据合成方法生成 1 000 个时长的无漂移样本,基于训练精度和预测精度均较高且相接近以及测试数据样本充足的原则,以 6:4 的比例划分为训练集和测试集,用来训练和验证概念漂移检测器模型,再通过引入表征劣化的隐状态函数生成 1 000 个劣化样本,用于检测概念漂移。以 HEL-SL 算法训练回归模型,组成 HEL-SL 模型的 5 个成员参数均使用机器学习开源平台 sk-learn 的默认经验值。经数据测试,该回归模型的性能指标如表 1 所示。可以看出,使用集成算法训练的回归模型的拟合精度和预测精度都很高,可以用作概念漂移检测器。

表 1 回归模型性能指标

Tab.1 Regression model performance indicators

模型	训练集	测试集
RMSE	0.018 2	0.023 1
MSE	0.013 6	0.016 8
MRE	0.012 8	0.017 9
R^2	0.992 5	0.988 7

根据图 1 所示的在线检测流程,以 RMSE、MSE、MRE 和 R^2 模型性能指标作为概念漂移检测器模型的性能度量(下文统称监测指标),各监测指标结果如图 2 所示。为了消除短期异常的影响,将监测指标进行滑动平均,滑动窗口值取 100。图 3 给出了滑动平均处理后的各监测指标,图中对标的实际劣化过程(DET)曲线为所添加的 S 型隐状态函数,表示系统实际的劣化过程。

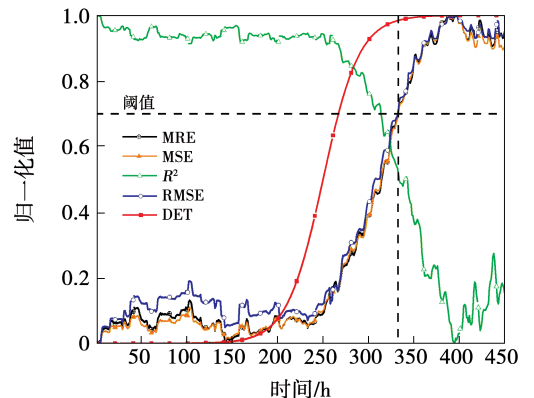


图 2 概念漂移监测指标的时序变化

Fig.2 Time-sequence changes of concept drift monitoring indicators

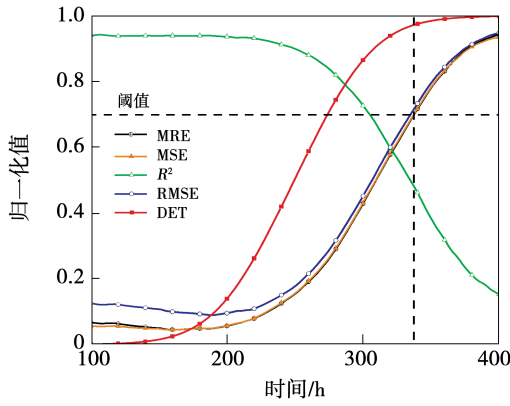


图3 监测指标滑动平均值的时序变化
Fig.3 Time-sequence changes of moving average values of monitoring indicators

从图2和图3可以看出,由概念漂移检测器计算出的监测指标与劣化波形 DET 具有密切的相关性,当劣化值 DET 增大时,模型的误差度量 MSE、RMSE、MRE 相应增大,模型的拟合度量 R^2 相应减小。这些误差度量数值过大则表明该模型无法描述当前的系统行为,即系统状态发生了概念漂移。实际过程中通过采用阈值报警方式对概念漂移进行监测,以 MRE 指标为例,水平虚线为假定的检测阈值 0.7,该阈值一般由运行人员根据实际问题和检测灵敏度设置。从垂直虚线可以看出,在时间点 335 处,监测指标超过设定阈值,此时触发相应的报警,需要对设备采取一定的维护措施。

图4为各监测指标与实际劣化指标 DET 之间的相关系数,相关系数越高表示监测指标与实际劣化曲线的相关性就越大,因此相关系数高的监测指标能更真实地反映系统的劣化过程。由于 R^2 变化趋势与 DET 呈负相关。为了便于比较, R^2 与 DET 的相关系数取绝对值。从图4中可以看出,构建的4个监测指标与 DET 的相关系数都很高,均在 0.85 以上,各项指标的平均值 (AVG) 达到了 0.89 左右,其中相关系数最好的监测指标为 MSE,最差的为 R^2 。

3 热工实例

3.1 SCR 脱硝系统

以某 660 MW 机组 SCR 系统为例,利用概念漂移方法对催化剂活性进行了监测及劣化分析。图5给出了研究对象 SCR 系统的布置流程和相关测点

分布。SCR 反应器位于尾部烟道的省煤器和空气预热器之间,在反应器进口烟道处设有喷氨格栅,被空气稀释后的 NH_3 经由喷氨格栅喷入烟道,与烟气中的 NO_x 混合后进入 SCR 反应器。反应器中布置了多层催化剂,混合气流竖直向下冲刷催化剂层,其中的 NO_x 与吸附在催化剂表面上的 NH_3 发生催化还原反应。

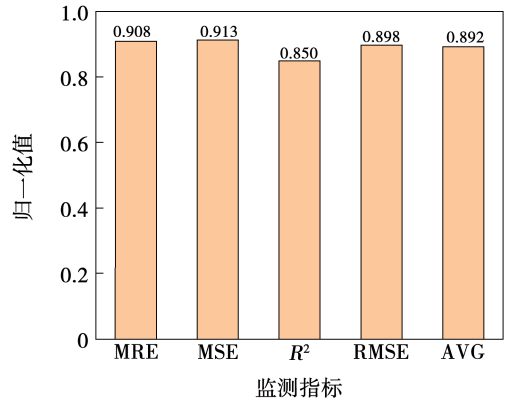


图4 各监测指标与 DET 的相关系数
Fig.4 The correlation between each monitoring indicator and DET

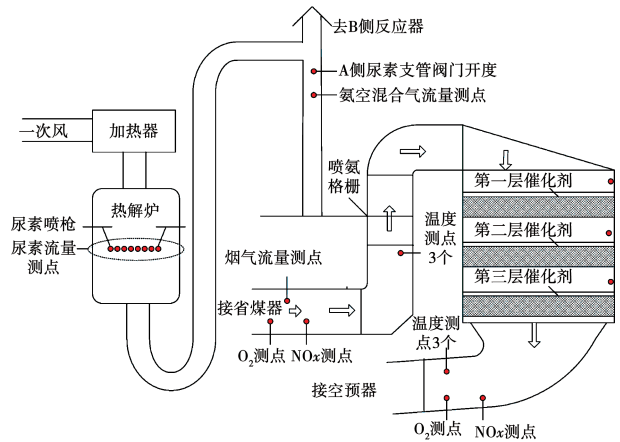


图5 SCR 烟气脱硝工艺流程及相关测点分布
Fig.5 Process flow of SCR flue gas denitrification and relevant measuring points

3.2 基于 PCA 主元空间分布的数据工况判定

概念漂移监测模型对工况极为敏感,为了过滤异常工况,提出基于主元分析 (PCA) 的特征压缩主元的工况判定方法,通过 PCA 算法将原始数据映射到低维空间,确定训练数据的工况范围,若运行数据属于该工况范围内,则利用概念漂移监测模型来进行性能监测。

PCA 是一种常用的数据分析方法,通过对多元统计观测数据的协方差结构进行分析,获得能够简约表达这些数据依赖关系的主分量。主要原理就是用一组正交变换的基向量去乘以原始的数据^[16],设有 m 条 n 维原始数据,其计算过程为:(1) 将原始数据组成 m 行 n 列矩阵 X ; (2) 将数据进行零均值化;(3) 求出协方差矩阵 $C = \frac{1}{m}(XX^T)$; (4) 求出协方差矩阵的特征值和特征向量;(5) 将特征值和特征向量按从大到小顺序排列,取前 r 行组成矩阵 P ; (6) $Y = PX$ 即为降维后的数据。

对于非线性的数据,通过引入核函数,将非线性原始输入空间向量映射到高维特征空间,在该特征空间中计算线性 PCA,从而解决非线性问题。

以 SCR 脱硝系统运行数据为例,以刚换装后稳定运行一段时间的数据作为健康状态数据用以训练状态检测器模型。将机组负荷、入口 NO_x 体积分数、出口 NO_x 体积分数、入口氧量、烟气温度以及喷氨量 7 维数据建立 PCA 模型进行特征压缩,结果保留一位主元,其贡献率为 86.04%,结果如图 6 所示。

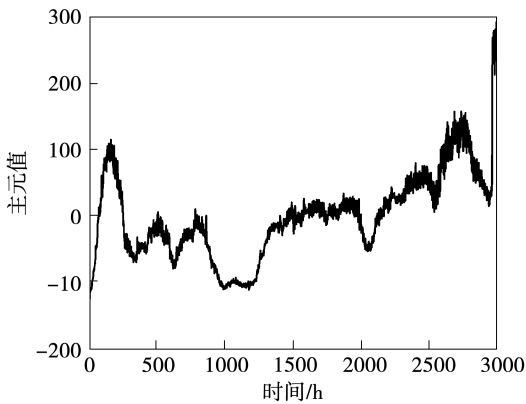


图 6 第一主元序列

Fig. 6 Sequence of the first principal component

将主元取值区间边界所包含的空间作为模型工况空间,随后对运行数据进行测试,计算其经 PCA 压缩后的主元值,若该数值落在模型工况区间范围内,则判定运行数据适用于模型监测,否则弃用该数据。在厂级监控信息系统历史数据库中取 2014 年 8 月至 2015 年 8 月期间的运行数据进行主元分析,

取数据间隔为 60 min,运行数据的工况判定结果如图 7 所示。可以看到,离线训练模型的工况涵盖了绝大多数的实际运行工况。

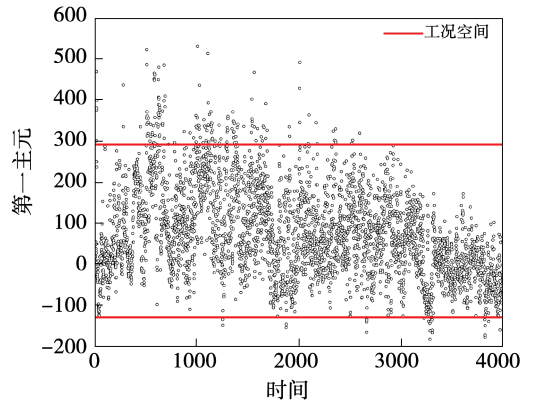


图 7 运行数据工况判定

Fig. 7 Condition judgment through operation data

3.3 基于概念漂移的 SCR 系统催化剂性能劣化监测

以 SCR 脱硝系统刚投入运行时的数据作为系统健康状态数据,SCR 系统的运行目标是以一定的控制方式调节喷氨量保证 SCR 出口 NO_x 体积分数达到环保要求。对于 SCR 系统,入口 NO_x 总量由机组的负荷、锅炉的燃烧品质以及燃煤成分等外在因素决定,出口 NO_x 体积分数是控制对象,无论外在条件如何变化,出口 NO_x 体积分数均保持在机组的环保排放控制水平,SCR 系统的主要调节变量为入口喷氨量。因此,以喷氨量为模型输出,以机组负荷、SCR 入口 NO_x 体积分数、SCR 入口烟气温度、SCR 入口氧量、SCR 出口氧量和 SCR 出口 NO_x 体积份数为模型输入,采用 HEL-SL 方法训练概念漂移检测器模型。选取加装前 12 个月的历史数据进行测试,采样时间间隔为 60 min,滑动窗大小设置为 500。利用状态检测器对运行数据进行测试,以 R^2 、RMSE、MSE 和 MRE 等模型性能指标统计量作为催化剂活性退化的监测指标。为了方便比较,将所有监测指标进行归一化处理,结果如图 8 所示。

由图 8 可知,在 SCR 系统加装新催化剂之前,监测指标 RMSE、MSE 和 MRE 随时间推移持续增大,且增长速度越来越快;而指标 R^2 呈现相反的变化趋势,即催化剂活性随时间推移越来越差,且劣化

速度会越来越快,呈指数分布,这与设备实际劣化过程是相吻合的。加装之后,由于催化剂的整体性能变好,因此随着数据流的滑动输入,性能监测指标 RMSE、MSE 和 MRE 逐渐回落。由于工况判定剔除了部分数据,导致部分时间点运行数据缺失,从而使得指标曲线局部变化较大。因此,对图 8 的计算结果进行了滑动平均,结果如图 9 所示。各监测指标的曲线更加平滑,更加清晰地反映了催化剂性能的长期变化趋势。

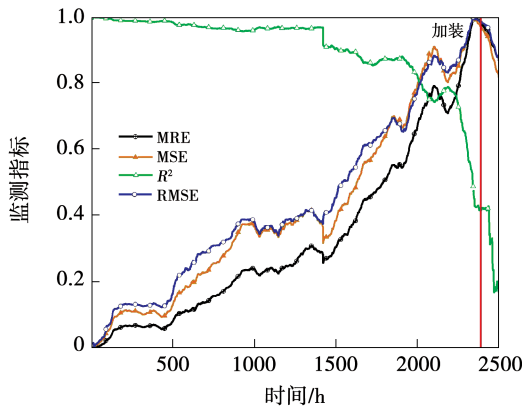


图 8 催化剂活性监测指标的时序变化
Fig. 8 Time-sequence changes of monitoring indicators of catalyst activity

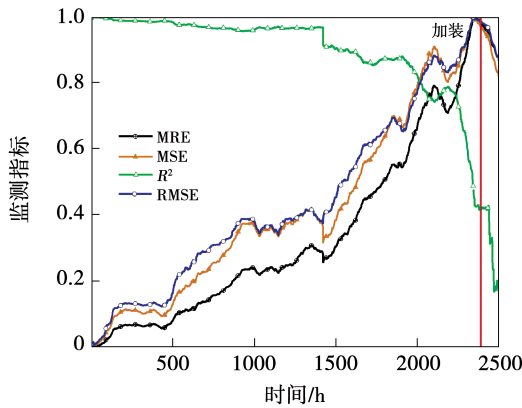


图 9 催化剂活性监测指标滑动平均结果的时序变化
Fig. 9 Time-sequence changes of moving average values of monitoring indicators of catalyst activity

4 结 论

从概念漂移角度对电站设备的性能劣化过程进行了研究和分析。以热工过程的 SCR 脱硝系统为

例,利用 HEL-SL 方法建立了概念漂移检测模型,基于模型统计指标反映 SCR 系统催化剂性能的劣化程度。实例计算表明概念漂移检测模型统计指标随时间推移呈指数分布变化关系,可实现对催化剂活性变化进行有效的跟踪和监测,从而能够为电厂运行人员的维护决策提供科学的指导。

参 考 文 献:

[1] 姚 杰. SCR 燃煤烟气脱硝催化剂制及脱硝系统的数值模拟 [D]. 南京:东南大学,2014.
YAO Jie. Numerical simulation of SCR coal-fired flue gas denitration catalyst preparation and denitration system [D]. Nanjing: Southeast University, 2014.

[2] 杨 航,郑成航,金 侃,等. 燃煤电厂选择性催化还原脱硝系统运行成本 [J]. 浙江大学学报(工学版), 2017, 51(2): 363-369.
YANG Hang, ZHENG Cheng-hang, JIN Kan, et al. Analysis on operation cost of SCR system in coal-fired power plant [J]. Journal of Zhejiang University (Engineering Science Edition), 2017, 51(2): 363-369.

[3] 姜 烨,高 翔,吴卫红,等. 选择性催化还原脱硝催化剂失活研究综述 [J]. 中国电机工程学报, 2013, 33(14): 18-31.
JIANG Ye, GAO Xiang, WU Wei-hong, et al. Review of the deactivation of selective catalytic reduction DeNO_x catalysts [J]. Proceedings of the CSEE, 2013, 33(14): 18-31.

[4] 张战锋,赵俊武. 烟气脱硝 SCR 装置运行性能评估 [J]. 热力发电, 2012, 41(10): 1-4.
ZHANG Zhan-feng, ZHAO Jun-wu. Performance evaluation on selective catalyst reduction equipment [J]. Thermal Power Generation, 2012, 41(10): 1-4.

[5] 李乐田,王乐乐,姚 燕,等. 某燃煤电厂脱硝催化剂运行事故诊断及性能评估 [J]. 热力发电, 2018, 47(9): 138-142.
LI Le-tian, WANG Le-le, YAO Yan, et al. Operational accident diagnosis and performance evaluation for SCR catalyst in a coal-fired power plant [J]. Thermal Power Generation, 2018, 47(9): 138-142.

[6] 秦刚华,陈 彪,冯向东,等. 燃煤机组脱硝催化剂在线性能评估及寿命示警 [J]. 锅炉技术, 2020, 51(5): 16-20.
QIN Gang-hua, CHEN Biao, FENG Xiang-dong, et al. Online performance evaluation and early life warning of denitration catalyst in coal-fired power plant [J]. Boiler Technology, 2020, 51(5): 16-20.