

基于多元混合气的爆炸上限预测

薛霏霏, 李丽娟*, 唐令怡

(南京工业大学电气工程与控制科学学院, 江苏 南京 211800)

摘要:提出了采用人工神经网络方法来重点预测多元混合气体的爆炸上限,并将其与偏最小二乘线性回归、Le Chatelier方法相比较。仿真结果表明, BPNN的预测结果远好于PLSR以及Le Chatelier计算出的结果,由此表明BPNN对混合可燃气体的爆炸上限具有更好的预测和泛化能力。

关键词:安全工程; 爆炸上限; 混合气体; BP神经网络; 偏最小二乘回归

中图分类号: X932

文献标志码: A

文章编号: 0253-4320(2016)02-0159-02

DOI: 10.16606/j.cnki.issn.0253-4320.2016.02.041

Prediction of the upper flammability limits of fuel mixtures

XUE Fei-fei, LI Li-juan*, TANG Ling-yi

(School of Electrical Engineering & Control Science of Nanjing University of Technology, Nanjing 211800, China)

Abstract: A method of back-propagation (BP) artificial neural network for predicting the upper flammability limits of fuel mixtures is proposed. The simulation result shows that the average relative error of BPNN is less than that of Partial Least-Squares Regression Method (PLSR) and the result calculated by Le Chatelier. It suggests that this method has better prediction and generalization ability for the upper flammability limits of the fuel mixtures.

Key words: safety engineering; upper flammability limits; fuel mixtures; back-propagation neural network (BPNN); partial least-squares regression

爆炸极限是使可燃气体在安全范围内得到有效利用的重要参数。但可燃气体的爆炸极限与其组成成分、压力、温度等因素关系复杂,难以得到准确的数据^[1]。不少学者对可燃气体爆炸极限进行了研究,并提出了一些方法,如科瓦德爆炸三角形法、最小助燃氧浓度法、里查特理公式法^[2]。近年来李国梁等提出通过最小二乘法建立绝热火焰温度与混合气爆炸下限间的预测模型^[3];郭艳丽^[4]提出采用Taylor多项式拟合出混合气爆炸极限随组分分配比变化的经验公式。这些方法虽有所改进,但在预测精度以及可燃气体数量上仍有局限。本文中提出了采用具有高度非线性预测能力的BP神经网络方法建立模型对爆炸上限进行预测。

1 实验研究

选用12 L的球形玻璃容器做爆炸实验,实验前容器内温度恒定在35℃,容器内压力为0.1 MPa。实验选用了9种可燃气体配置混合气体,具体组分从表1可知。共采集了86组不同实验的数据。

对实验数据进行了数据分析,其相关系数如表1所示,从表1可以看出,除一氧化碳含量与爆炸上限间存在较高线性关系外,其他组分与爆炸上限间

是一种非线性关系,相关程度较低。

表1 可燃气体体积浓度与爆炸上限间的相关系数

混合气体组分	甲烷	丙烷	乙烯	丙烯	乙醚
相关系数	0.22	0.49	0.16	0.50	0.08
混合气体组分	酯	二氟乙烷	氨气	一氧化碳	
相关系数	0.27	0.29	0.25	0.88	

2 爆炸上限的BP神经网络预测模型

本文中采用的BP神经网络结构:输入层采用9个神经元,分别对应9种可燃气体的体积浓度,爆炸上限作为输出层,隐含层选用具有12个隐层神经元的网络结构^[5]。将实验采集到的86组样本分成2部分,选用前59组样本作为训练数据,后27组样本作为测试数据,用以验证网络的准确性。

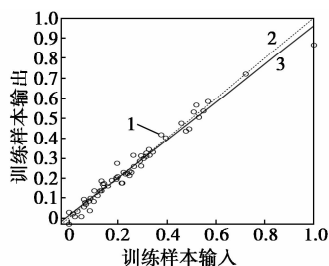
利用Matlab软件建立BP神经网络,并对其权重进行优化^[6]。图1为训练数据所得结果,图2为测试数据所得结果。

从图1中可以看出,这些离散点能够比较好地分布在对角线附近,即训练数据中的预测值与实测值间的吻合度较好,精度较高。图2为测试数据预测值与实测值的对比,可以看出,对新的输入网络预测能力较高,即网络具有较好的泛化能力。

收稿日期:2015-07-20

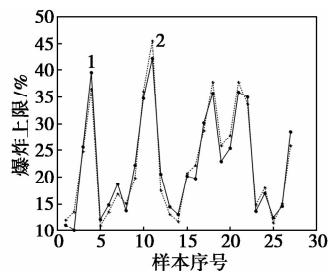
基金项目:国家自然科学基金项目(61203072,61203133);江苏省六大人才高峰项目(DZXX-042)

作者简介:薛霏霏(1990-),男,硕士生;李丽娟(1976-),女,副教授,研究方向为工业过程先进控制,通讯联系人,ljli@njtech.edu.cn。



1—离散点;2—理想吻合线;3—拟吻合合线

图 1 训练数据效果图



1—预测值;2—实际值

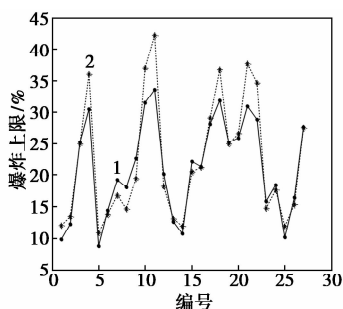
图 2 测试数据爆炸上限对比图

为了体现所建非线性模型的优越性,本文中提出了偏最小二乘法对数据进行线性处理^[7]。所选训练数据以及测试数据与 BP 神经网络方法相同。

爆炸上限的偏最小二乘法回归系数如表 2 所示,图 3 为 PLSR 预测值与实测值的比较图,图 4 为 BPNN 与 PLSR 预测值绝对误差的比较图。从两图中可以明显看出,相对于 BPNN 而言,PLSR 的预测效果较差,而 BPNN 的预测精度良好,准确度明显高于 PLSR。

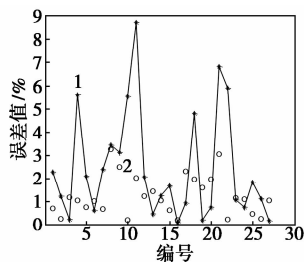
表 2 偏最小二乘回归系数

成分	甲烷	丙烷	乙烯	丙烯	乙醚
系数	-3.80	-13.57	8.69	-9.64	1.89
成分	酯	二氟乙烷	氨气	一氧化碳	常数项
系数	5.41	-2.09	7.99	17.21	18.51



1—预测值;2—测量值

图 3 PLSR 预测值与实测值的比较



1—BPNN 误差值;2—PLSR 误差值

图 4 BPNN 与 PLSR 绝对误差的比较

表 3 给出了 BP 神经网络、偏最小二乘回归、Le chatelier 公式 3 种预测模型结果的汇总。

表 3 BPNN、Le chatelier 公式与 PLSR 模型预测结果汇总

预测模型	训练集			测试集				
	相关系数	最大绝对误差	最小绝对误差	平均绝对误差	相关系数	最大绝对误差	最小绝对误差	平均绝对误差
BPNN	0.99	2.71	0.07	1.02	0.98	3.50	0.10	1.75
PLSR	0.96	7.82	0.08	1.98	0.93	8.70	0.12	2.41
Le chatelier	0.98	8.42	0.15	1.57	0.97	9.69	0.08	2.13

从表 3 看出,Le chatelier 公式法与 PLSR 相比较,虽然平均绝对误差相对小些,但最大绝对误差较大,这恰好验证了它的局限性。BPNN 的最小绝对误差以及最大绝对误差都比另 2 种方法相对应的值要小,BPNN 的相关系数也最高,而且 BPNN 的平均绝对误差比它们小很多,由此说明无论从训练集还是测试集,BPNN 预测出的爆炸上限更为精确,所建非线性模型的泛化能力更好。

3 结论

通过实验以及数据分析为实际工业生产中可燃气体的安全使用提供了参考依据,并得出了以下结论。

(1)多元混合气中可燃气体体积浓度与爆炸上限间存在非线性关系,建立 BPNN 预测模型比 PLSR 模型更为合理。

(2)确立模型后,给定各组分可燃气体体积浓度就可以较为精确地预测出该混合气体的爆炸上限。

(3)BPNN 模型克服了 Le chatelier 等一些算法对非烷烃碳氢化合物不适用的局限性,并且提高了预测精度。

主要原因是返混的影响,预分离塔的非清晰分割大大降低了返混,同时,由于可以适当调节中间组分在塔顶和塔底的分配,使进料组成更为接近某一塔板上的组成。有研究表明,这两大特点使之与传统精馏序列相比节约能耗可达 30%^[3]。

1 原料的预处理

本研究以来自甘油发酵生产 1,3-丙二醇的发酵液为原料,对已加热灭菌的发酵液进行预处理。得到的原料液组成如表 1 所示。

表 1 原料组成

组分名称	分子式	质量分数/%	沸点/°C
乙酸	C ₂ H ₄ O ₂	0.27	117.90
2,3-丁二醇	C ₄ H ₁₀ O ₂	2.27	180.70
1,2-丙二醇	C ₃ H ₈ O ₂	0.17	184.99
丙二醇二乙酸酯	C ₇ H ₁₂ O ₄	0.35	183.04
丙酸	C ₃ H ₆ O ₂	1.36	141.17
1,3-二甲氧基-2-丙醇	C ₅ H ₁₂ O ₃	9.32	169.05
1,3-丙二醇	C ₃ H ₈ O ₂	73.35	214.40
3-甲氧基-1,2-丙二醇	C ₄ H ₁₀ O ₃	0.15	218~220
2,4,4-三甲基己烷	C ₉ H ₂₀	0.01	130.66
丁酸丁酯	C ₈ H ₁₆ O ₂	0.5	165.00
十二酸	C ₁₂ H ₂₄ O ₂	0.01	298.70
辛酸正丁酯	C ₁₂ H ₂₄ O ₂	0.01	239.83
甘油	C ₃ H ₈ O ₃	12.23	287.85

据文献[4]报道,适合热偶精馏的进料组成一般应满足中间组分含量最多,轻组分和重组分含量较少且相当的情况,尤其当中间组分的分离要求较高时热偶精馏的节能优势可以更充分地体现出来。分析该进料组成可知,1,3-丙二醇为中间组分,质量分数为 73.35%,要求其质量分数达到 99.5% 以上,同时轻组分、中间组分、重组分的质量比约为 1:6:1,理论上应比较适合采用热偶精馏进行分离提纯。

2 简捷计算与优化

DWC 与传统精馏序列相比,在节能和减少设备投资方面具有很大的优越性,然而由于主塔和预分离塔互连物流的复杂性,传质和传热更加复杂,增加了其设计与操作难度。采用 Carlberg 等提出的同 Petlyuk 塔等效的三塔模型^[5],结合适当的设计规定,从而减小系统的自由度,其结果可以作为严格计算的初值。

三塔等效模型如图 1 所示,其中塔 1 相当于 DWC 的预分离塔,塔 2 精馏段和塔 3 提馏段相当于 DWC 的塔顶和塔底部分,塔 2 提馏段和塔 3 精馏段相当于 DWC 的间壁部分。塔 2 的塔釜出料和塔 3 的塔顶出料相当于 DWC 的侧线出料,在塔 1 上添加部分冷凝器和再沸器,互连流股对应关系如图 1 所示。

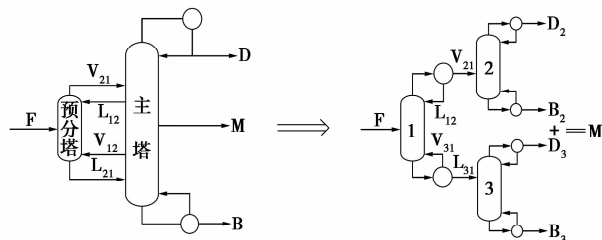


图 1 三塔等效模型示意图

本研究所用进料为低压下极性非电解质物系,故采用 NRTL 物性方法,简捷计算采用 Aspen Plus 中的 DSTWU 模块,使用 Fenske 改善后的 Winn 方程估算最小理论板数;通过 Underwood 方程计算最小回流比,并采用 Gilliland 关联曲线来确定实际回流比与实际所需理论板数的关系^[6]。通过调试使之满足以下约束条件:塔 1 的理论板数等于塔 2 提馏段与塔 3 精馏段的理论板数之和;塔 2 提馏段的气相流率等于塔 3 精馏段的气相流率;B2 出料与 D3 出料中的中间组分 PDO 含量相同;PDO 的回收率满足要求。简捷计算结果如表 2 所示。

(上接第 160 页)

参考文献

[1] 韩德虎,胡耀青,王进尚.煤热解影响因素分析研究[J].煤炭技术,2011,30(7):164-166.
 [2] 田贯三,陈洪涛,王学栋.城市燃气爆炸极限计算与分析[J].山东建筑工程学院学报,2002,17(2):56-60.
 [3] 胡锐,吴小华,胡耀元.(H₂ + CO + CH₄ + Air)多元爆炸性混合气体爆炸形态与波形的区划[J].化学学报,2010,68(7):623-

632.

[4] 郭艳丽.二元混合可燃气体爆炸极限实验研究[J].武警学院学报,2013,29(2):18-19.
 [5] Kondo S, Takizawa K, Takahashi A, et al. A study on flammability limits of fuel mixtures[J]. Journal of Hazardous Materials, 2008, 144:440-448.
 [6] 刘天舒.BP 神经网络的改进研究及应用[D].哈尔滨:东北农业大学,2011:10-50.
 [7] 王惠文.偏最小二乘回归方法及其应用[M].北京:国防工业出版社,1999:178-234. ■