

УДК 544.452.1

# ПРИМЕНЕНИЕ ИСКУССТВЕННОЙ НЕЙРОННОЙ СЕТИ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПОЛНОТЫ ВЫГОРАНИЯ МЕХАНОАКТИВИРОВАННОГО УГЛЯ

С. С. Абдуракипов<sup>1,2</sup>, Е. Б. Бутаков<sup>1,2</sup>, А. П. Бурдуков<sup>1</sup>, А. В. Кузнецов<sup>1</sup>,  
Г. В. Чернова<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, 630090 Новосибирск, e\_butakov@mail.ru

<sup>2</sup>Новосибирский государственный университет, 630090 Новосибирск

Проведено экспериментальное исследование влияния измельчения на термическую деструкцию углей. С помощью искусственных нейронных сетей создана модель, позволяющая прогнозировать степень выгорания измельченных углей с высокой точностью (средняя относительная ошибка 3 %, коэффициент детерминации 96 %).

Ключевые слова: уголь, высоконапряженное измельчение, синхронный термический анализатор, факел, машинное обучение, искусственная нейронная сеть.

DOI 10.15372/FGV201906010

## ВВЕДЕНИЕ

Уголь является наиболее распространенным топливом как в мире, так и в России. Однако в топливном балансе России он занимает всего  $\approx 15\%$ , тогда как в Германии —  $40\%$  [1]. Для повышения энергетической безопасности, расширения сферы применения угля и повышения его доли в энергетике России необходимо развивать новые, экономически выгодные и экологически чистые технологии сжигания угля. Ранее было установлено, что при измельчении угольного топлива в высоконапряженных мельницах на вновь образованной поверхности возникают активные центры, способные ускорить протекание физико-химических реакций. Измельчение сопровождается ослаблением молекулярных связей, деструкцией макромолекул с образованием свободных радикалов [2, 3]. Влияние механоактивации на термическое разложение угольного топлива исследовалось в ряде работ. Была установлена зависимость увеличения его реакционной способности в процессах термоокислительной деструкции от интен-

сивности механических воздействий (см., например, [4, 5]), что связано с процессами преобразования относительно высокомолекулярных составляющих органической массы. Несмотря на большое число опубликованных работ, эффект механоактивации все еще изучен не полностью.

Развитие современных алгоритмов анализа данных и машинного обучения обеспечило исследователей новыми эффективными инструментами обработки больших массивов данных и обобщения содержащейся в них информации в виде многофакторных вычислительных моделей объектов и процессов. Например, нейросетевые модели позволяют эффективно решать широкий круг задач нелинейной регрессии и классификации [6]. Модели вида многослойного персептрона с полносвязными слоями нейронов достаточно полно представлены в литературе и хорошо зарекомендовали себя при решении схожих задач [7, 8]. В работе [9] модель нейронной сети была успешно применена для распознавания режимов горения.

Целью настоящей работы являются экспериментальное исследование влияния высоконапряженного измельчения на степень выгорания угольного топлива и анализ применимости математической модели, основанной на искусственной нейронной сети, для прогнозирования степени выгорания угольного топлива, измельченного в высоконапряженных мельницах.

---

Исследование образцов угля методами дериватографии выполнено в рамках государственного задания ИТ СО РАН, исследование с применением искусственной нейронной сети выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и Правительства Новосибирской области в рамках научного проекта № 18-48-543015.

© Абдуракипов С. С., Бутаков Е. Б., Бурдуков А. П.,  
Кузнецов А. В., Чернова Г. В., 2019.

Характеристики углей

Уголь	Влажность, %	Зольность, %	Содержание серы, %	Выход летучих веществ, %
Бурый	26	5.3	0.27	47.0
Антрацит	13.0	12.0	1	3.5
Каменный слабоспекающийся	7.0	13.5	0.3	43.5

### ХАРАКТЕРИСТИКИ ОБРАЗЦОВ

В данной работе использовались угли различной степени метаморфизма, полученные с теплоэлектростанций и месторождений Сибири. Данные по техническим характеристикам приведены в таблице.

Угольное топливо измельчалось в мельничных устройствах трех типов: мельница-дезинтегратор со скоростью вращения ротора 6 тыс. об/мин (патент на изобретение РФ № 2511314), виброцентробежная мельница с частотой вибраций 3 тыс. об/мин (патент на изобретение РФ № 2043156) и молотковая мельница с размером ячейки сита 150 мкм и скоростью вращения ротора 3 тыс. об/мин (Molot 200, завод «ИНФЕЛ»).

Уголь марки антрацит значительно отличается по выходу летучих от исследуемых газовых углей, данный факт влияет на начальную стадию воспламенения. Бурый уголь характеризуется большей влажностью, поэтому требуется больше энергии для его термического разложения, при этом его зольность значительно меньше по сравнению с антрацитом и каменным углем.

### СИНХРОННЫЙ ТЕРМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ

Синхронный термический анализ, который включает в себя одновременное проведение термогравиметрических определений, исследований методом дифференциальной сканирующей калориметрии и масс-спектрометрического анализа выделенного газа (АВГ-МС), проводили на приборе STA 449F1 Jupiter®, совмещенном с квадрупольным масс-спектрометром QMS 403D Aeolos® (NETZSCH, Германия).

Термогравиметрический анализ выполняли в интервале температуры  $30 \div 800$  °С в среде синтетического воздуха (80 % Ar, 20 % O<sub>2</sub> по объему), скорость потока аргона 20 мл/мин, кислорода — 5 мл/мин. Использовали открытые тигли из Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, скорость нагрева

10 К/мин. Исследовали пробы углей различной степени метаморфизма, прошедших обработку в мельнице-дезинтеграторе, массой 50 мг. Предварительно определялся спектр размеров частиц. Отбор угольной пыли проходил в течение 15 мин после измельчения, затем ее загружали в тигель дериватографа и проводили термогравиметрический анализ.

### ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ НЕЙРОННОЙ СЕТИ

Многослойный персептрон содержит множество полносвязных слоев: слой входящих параметров, скрытые слои и выходной слой, формирующий результат регрессии (прогноза вещественной величины). Каждый нейрон скрытого слоя получает на вход все выходы предыдущего слоя, вычисляет их линейную комбинацию с нелинейной функцией активации и передает на вход следующему нейрону. За счет последовательности таких операций в нескольких полносвязных слоях нейронные сети могут приближать нелинейные функции высокой степени сложности. Математически это можно записать в виде

$$a(x) \approx y\{n\{m[g(f(x)W_1 + B_1)W_2 + B_2]W_3 + B_3\}W_4 + B_4\},$$

где  $x_i$  — входной параметр (признак),  $W_i$  — вес слоя нейросети,  $B_i$  — вектор сдвига,  $f$ ,  $g$ ,  $m$ ,  $n$ ,  $y$  — функции активации в каждом слое,  $a(x)$  — модель нейросети, приближенно описывающая целевую переменную.

Данные для обучения состоят из четырех параметров  $x_i$ : температура, скорость нагрева, тип угля и степень измельчения. Последние три имеют категориальный или порядковый тип, поэтому для использования в модели были закодированы с помощью процедуры бинаризации (в виде последовательности нулей и единиц). Таким образом, входной слой нейронной сети включает 17 параметров. Целевым параметром, зависимость которого мы хотим

обучиться моделировать наиболее точно, является коэффициент потери угольной массы  $y \approx a(x)$ . Перед применением в модели признаки масштабировались (отображались на отрезок единичной длины). В качестве функции ошибки модели, которая минимизировалась по ходу обучения нейросети, мы использовали среднюю относительную ошибку (MAPE), в качестве метрики качества — среднюю относительную ошибку

$$\text{MAPE} = \frac{100\%}{N} \sum_{i=1}^N \frac{|y_i - a_i|}{y_i}$$

и коэффициент детерминации

$$R^2 = 100\% \left[ 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - a_i)^2}{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2} \right],$$

где  $a_i$  — прогнозируемое значение,  $y_i$  — реальный результат,  $\bar{y}$  — выборочное среднее,  $N$  — размер выборки.

Средняя относительная ошибка (MAPE) показывает, на сколько процентов в среднем отклоняется прогноз от реальной зависимости. Коэффициент детерминации  $R^2$  имеет смысл доли дисперсии (в процентах), которая описывается моделью, по отношению ко всей дисперсии данных. Эти метрики были выбраны по причине их интерпретируемости. Полная выборка данных эксперимента разбивалась на обучающую и тестовую части в соотношении 80 : 20 %. Для предотвращения переобучения гиперпараметры нейронной сети подбирались на обучающей выборке с помощью процедуры кроссвалидации, а качество модели с оптимальными параметрами оценивалось на тестовой выборке.

Число скрытых слоев, число нейронов в каждом слое, функции активации сети, число эпох обучения, размер подвыборки обучения (батч), параметр регуляризации, способ инициализации начальных весов подбирались с использованием процедуры кроссвалидации. При обучении нейросети на кроссвалидации разбиение данных на 10 частей (фолдов) осуществлялось со стратификацией — выравниванием соотношения количеств данных по типу угля, степени измельчения и интенсивности нагрева в каждом фолде, что значительно снижало дисперсию метрики качества на тестовых фолдах. Алгоритм реализован на языке Python с

использованием фреймворка TensorFlow и частично библиотек NumPy, SciPy, Pandas, Scikit-Learn и Keras. Чтобы осуществлять поиск в пространстве гиперпараметров автоматизированным и более интеллектуальным способом, мы использовали библиотеку Hyperopt с применением деревьев оценивающих алгоритмов Парзена [10].

Оптимальная структура нейронной сети изображена на рис. 1. Она включает в себя входной слой с 17 параметрами, три скрытых полносвязных слоя (64, 32, 8 нейронов), выходной слой с одним нейроном. Для нейронов в скрытых слоях использовалась функция активации ReLU, для выходного слоя — линейная функция активации. Для предотвращения переобучения в скрытых слоях применялась  $L_2$ -регуляризация (штраф за большой квадрат нормы весов нейронов). Коэффициент регуляризации выбран равным  $\lambda = 0.01$ . Начальная равномерная инициализация весов нейронов осуществлялась методом Хе (вариация метода Хавьера). Он наиболее подходит для вычисления функции активации «выпрямитель» ReLU: вычисление становится значительно менее ресурсоемким, чем вычисление сигмоидальной функции или гиперболического тангенса. Правильная инициализация весов обеспечивала лучшую производительность и сходимость модели. Коэффициент регуляризации, начальные значения весов были подобраны с помощью процедуры кроссвалидации. Оптимизация весов нейронной сети осуществлялась алгоритмом адаптивной инерции ADAM, который хорошо справляется с большинством сложных ситуаций и обеспечивает наилучшие

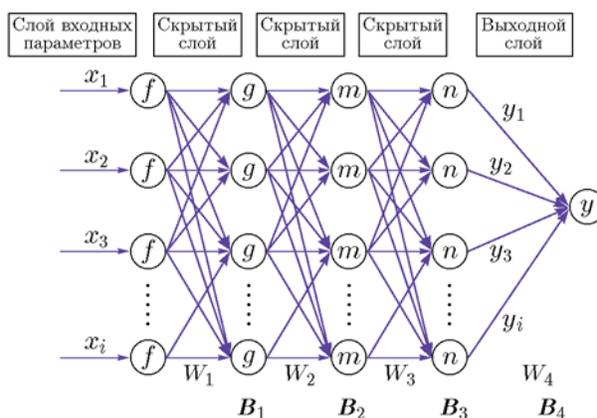


Рис. 1. Схема многослойной нейронной сети

результаты при минимальном подборе параметров оптимизации [11].

## РЕЗУЛЬТАТЫ

Результаты термического анализа приведены на рис. 2. Далее используются следующие обозначения: В — уголь, измельченный в виброцентробежной мельнице, Д — в мельнице-дезинтеграторе, И — исходный образец.

На термогравиметрических кривых для антрацита наблюдалось резкое увеличение потери массы  $M$  в интервале температуры  $550 \div 700$  °С. Для исходного образца антрацита максимум достигался при 770 °С, при диспергировании максимум сдвигался до температуры 706 °С для образца В и до 730 °С для образца Д. Максимальная потеря массы составила: для образца Д — 79 %, В — 76 %, И — 72 %.

Для бурого угля (образец В) наблюдалось резкое изменение потери массы в интервале температуры  $290 \div 470$  °С. Для образца Д менее интенсивное изменение происходило в диапазоне  $250 \div 640$  °С. Максимальная потеря массы составила: для образца Д — 85 %, для В — 78 %.

В случае газового слабоспекающегося угля потеря массы происходила в диапазоне температуры  $325 \div 600$  °С. Максимальное ее значение составило: для образца Д — 82 %, для В — 79 %.

Данные о типе угля, степени измельчения, скорости нагрева и температуре нагрева использовались в модели нейронной сети в качестве значимых параметров, влияющих на тепловое поведение при горении. На основе указанных признаков обучалась модель многослойной искусственной нейронной сети для моделирования кривых термогравиметрического анализа (зависимость коэффициента потери угольной массы). Среди математических моделей нейросетей с разной архитектурой слоев была выбрана модель, имеющая наименьшую среднюю абсолютную ошибку и наивысший коэффициент детерминации с помощью процедуры кроссвалидации. Оценка качества финальной модели проверялась на тестовой выборке. Обучение модели нейронной сети на тренировочной части выборки останавливалось, когда величина функции ошибки начинала сходиться и далее переставала снижаться с ростом числа эпох (ранняя остановка). Ранняя остановка обучения происходила на 19-й эпохе при размере батча 100. На рис. 3 приведены зависи-

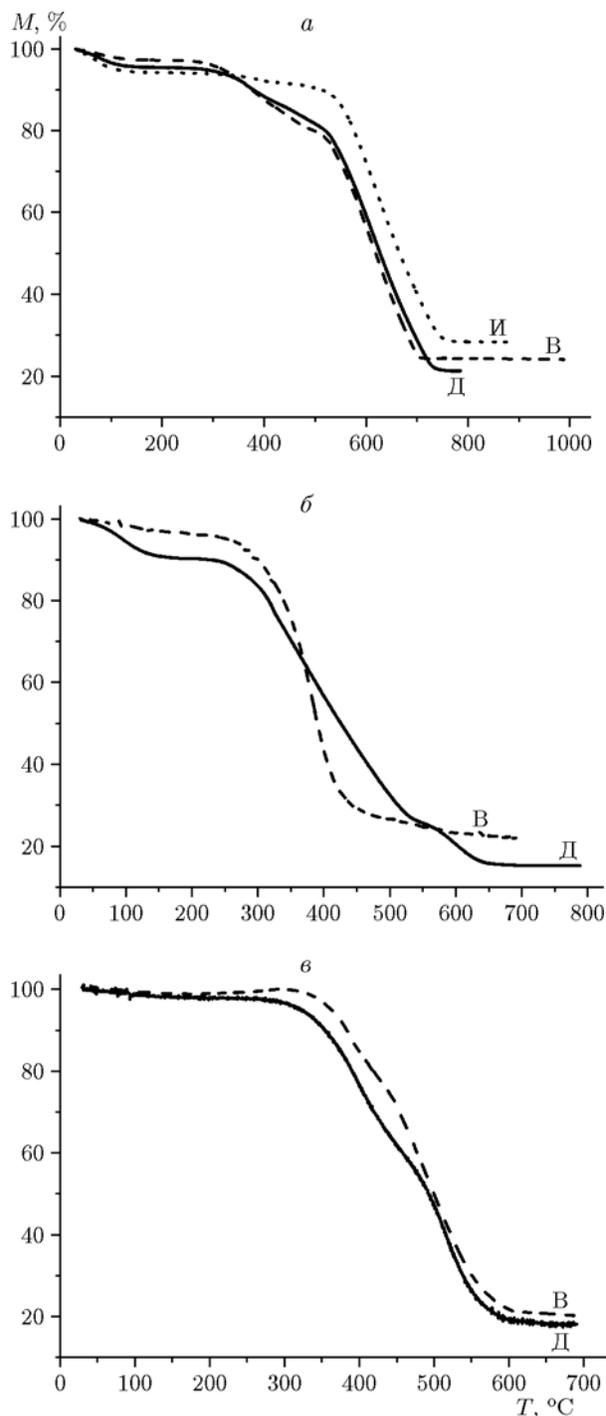


Рис. 2. Кривые термического анализа антрацита (а), бурого угля (б), слабоспекающегося каменного угля (в), полученные в среде синтетического воздуха при скорости нагрева  $10$  °С/мин

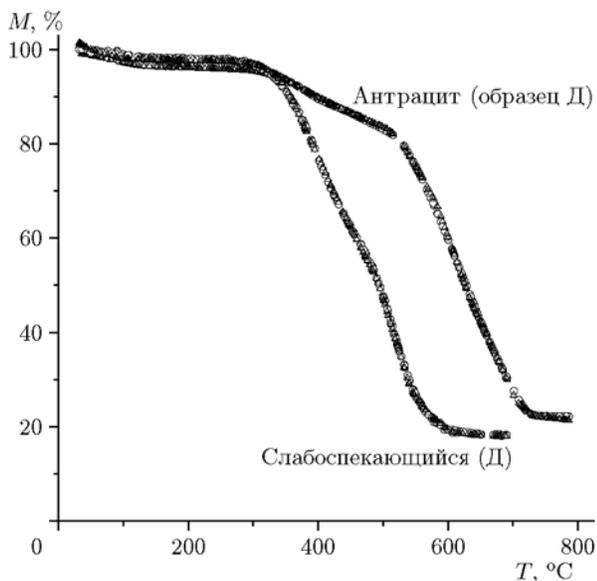


Рис. 3. Результаты моделирования и экспериментальных измерений коэффициента потери угольной массы для антрацита и каменного слабоспекающегося угля (измельчение в дезинтеграторе):

кружки — экспериментальные измерения, треугольники — результаты моделирования

мости коэффициента потери угольной массы от температуры, полученные по данным эксперимента (тестовая выборка) и рассчитанные с помощью модели нейронной сети. Для примера выбраны кривые для двух типов углей: антрацита и каменного слабоспекающегося, измельченных в дезинтеграторе. Видно, что кривые, предсказанные моделью, достаточно точно аппроксимируют реальные зависимости. На рис. 4 измеренные и рассчитанные значения располагаются вдоль одной диагональной линии с незначительным разбросом точек вокруг нее, что свидетельствует о хорошем соответствии моделирования и экспериментальных данных о коэффициенте потери угольной массы.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследование образцов угля методами дериватографии показало, что в результате измельчения углей происходит изменение их химической структуры и полноты выгорания угольного топлива. Применена математическая модель искусственной нейронной сети для моделирования термогравиметрических кривых углей, измельченных в различных мельни-

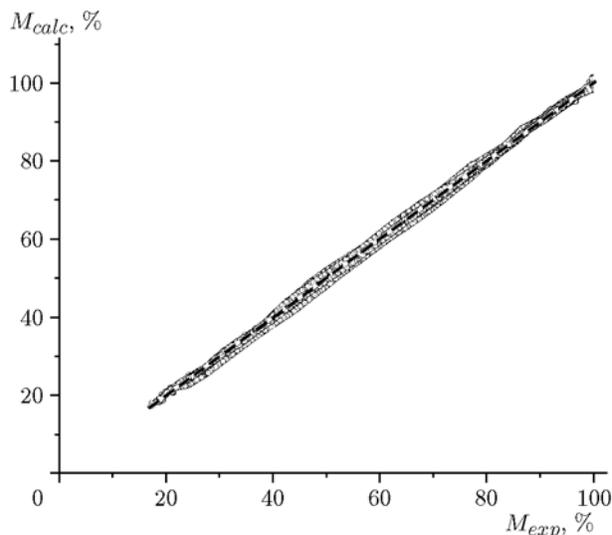


Рис. 4. Значения коэффициента потери массы измельченного угольного топлива, измеренные и рассчитанные с использованием модели искусственной нейронной сети (символы):

штриховая линия соответствует идеальной модели, которая с нулевой ошибкой воспроизводит эксперимент

цах. Полученные результаты показывают, что модель четырехслойной искусственной нейронной сети достаточно точно воспроизводит основные эффекты влияющих параметров и позволяет с высокой точностью определить коэффициент потери угольной массы по задаваемым параметрам: типу угля, способу измельчения, температуре и скорости нагрева. Средняя относительная ошибка результатов моделирования в сопоставлении с тестовыми экспериментальными данными составила 3 %, а коэффициент детерминации — 96 %. Математическая модель, дополненная экспериментальными данными горения, полученными на полномасштабных тепловых стендах, может быть полезна для оптимизации и проектирования промышленных топочных устройств, использующих механоактивированное угольное топливо.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Тугов А. Н., Майданик М. Н. Угольная электрогенерация в России: состояние и перспективы // Перспективы развития новых технологий в энергетике России: материалы междунар. науч.-техн. конф., Москва, 2017. — С. 31–41.
2. Burdukov A. P., Butakov E. B., Popov V. I., Chernetskiy M. Yu., Chernetskaya N. S.

- The use of mechanically activated micronized coal in thermal power engineering // Therm. Sci. — 2016. — V. 20. — P. 23–33.
3. **Burdukov A. P., Popov V. I., Yusupov T. S., Chernetskiy M. Yu., Hanjalić K.** Autothermal combustion of mechanically-activated micronized coal in a 5 MW pilot-scale combustor // Fuel. — 2014. — V. 122. — P. 103–111.
  4. **Burdukov A. P., Popov V. I., Chernetskiy M. Yu., Dekterev A. A., Hanjalić K.** Mechanical activation of micronized coal: prospects for new combustion applications // Appl. Therm. Eng. — 2015. — V. 74. — P. 174–181.
  5. **Burdukov A. P., Chernetskiy M. Yu., Dekterev A. A., Hanjalić K.** Computational modeling of autothermal combustion of mechanically-activated micronized coal // Fuel. — 2014. — V. 135. — P. 443–458.
  6. **Zhou H., Cen K., Mao J.** Combining neural network and genetic algorithms to optimize low NO<sub>x</sub> pulverized coal combustion // Fuel. — 2001. — V. 80, N 15. — P. 2163–2169.
  7. **Yin C., Luo Z., Ni M., Cen K.** Predicting coal ash fusion temperature with a back-propagation neural network model // Fuel. — 1998. — V. 77, N 15. — P. 1777–1782.
  8. **Smrekar J., Assadi M., Fast M., Kuštrin I., De S.** Development of artificial neural network model for a coal-fired boiler using real plant data // Energy. — 2009. — V. 34, N 2. — P. 144–152.
  9. **Абдуракипов С. С., Гобызов О. А., Токарев М. П., Дулин В. М.** Мониторинг режимов горения на основе регистрации изображений пламени и машинного обучения // Автометрия. — 2018. — Т. 54, вып. 5. — С. 108–115.
  10. **Li Peisheng, Xiong Youhui, Yu Dunxi, Sun Xuexin** Prediction of grindability with multivariable regression and neural network in Chinese coal // Fuel. — 2005. — V. 84, N 18. — P. 2384–2388.
  11. **Liu Y. P., Wu M. G., Qian J. X.** Predicting coal ash fusion temperature based on its chemical composition using ACO-BP neural network // Thermochim. Acta. — 2007. — V. 454, N 1. — P. 64–68.

*Поступила в редакцию 19.07.2018.*

*После доработки 22.10.2018.*

*Принята к публикации 28.11.2018.*