

基于L-M梯度迭代算法的煤质发热量预测模型

黄奎¹, 王充实², 王林立¹, 窦有权¹, 张冬练¹, 曾文慧², 王嘉垠², 曾勇²

1. 国能南京煤炭质量监督检验有限公司, 南京 210031

2. 国能大渡河新能源投资有限公司, 成都 610096

摘要 选取150家火电企业的煤质检测数据, 通过分析泛在煤质化验数据信息, 构建L-M算法下的煤质发热量的预测模型。实验结果表明: (1) 煤质化验数据中仅碳(C_d)、灰分(A_{ad})与发热量($Q_{gr,ad}$)的线性关系较为显著, 相关系数 R^2 为0.8768和0.6880; (2) 主成分分析法挖掘出影响煤质发热量的主成分特征值、特征矩阵及得分, 实现了由六维矩阵降至四维矩阵的降维效果, 增强了神经网络在训练过程中收敛的稳定性; (3) 基于L-M算法下, 改进的BP神经网络预测模型(LMBP)的训练集系数 R_t 、验证集系数 R_v 和测试集系数 R_m 分别为0.9957、0.9942和0.9963, 总体系数为0.9931, 同时通过待测20组数据进一步验证了LMBP预测模型可靠, 预测精度较高, 更符合实际预测需求。

关键词 煤质化验数据; 主成分分析法; L-M算法; 训练集系数

煤的发热量是指煤质中碳元素燃烧所释放出的热量, 是煤炭的固有属性之一, 同时也是市场上进行交易时重要的计价尺码。目前, 煤质发热量主要通过弹筒量热仪测定, 这种方法虽然便捷、精准, 但在实际检测中存在苛刻的环境要求。因此, 为了快速准确获取煤炭的发热量, 许多研究人员通过灰分、挥发分、水分等工业分析指标和碳、氢、氧、硫等元素分析指标进行分析, 寻求发热量与上述分析指标的密切关系^[1-5], 陈文敏等^[6]利用灰分(A_d)、挥发分

(V_{daf})和元素成分对干燥无灰基发热量($Q_{gr,daf}$)及干燥基高位发热量($Q_{gr,d}$)进行回归式预测; Majumder等^[7]分析了发热量与灰分、挥发分、水分等工业分析指标的影响, 预测结果较为理想; Sözer等^[8]基于工业分析和元素分析数据通过多元线性回归方法实现煤质发热量预测; 李祥等^[9]利用主成分-线性回归分析方法预测煤炭的热值, 并提出该方法具有较好的适应性; 周子民等^[10]建立Elman神经网络预测模型, 利用单煤的水分、灰分和挥发分含量直接预

收稿日期: 2022-08-22; 修回日期: 2023-02-15

基金项目: 国家能源投资集团有限责任公司科技项目(GJNY-22-90)

作者简介: 黄奎, 工程师, 研究方向为煤质分析污染物治理, 电子信箱: hk2216@126.com

引用格式: 黄奎, 王充实, 王林立, 等. 基于L-M梯度迭代算法的煤质发热量预测模型[J]. 科技导报, 2023, 41(20): 106-112; doi: 10.3981/j.

issn.1000-7857.2023.20.012

测混煤的发热量。然而,虽然有研究采用神经网络预测模型进行发热量的预测,但未对泛在煤质化验指标进行主成分分析,造成神经网络输入信息量过大,在训练过程中易引起收敛不稳定;有些研究虽对影响煤质发热量的主成分信息进行挖掘,但采用多元线性回归法进行预测,易造成模型的预测精度不高。

基于上述研究现状,选取某集团下属 150 家火电企业的煤质化验数据,通过分析泛在煤质化验数据与发热量的多元线性回归方程,采用主成分分析法(PCA)对泛在数据进行降维,选取贡献率高的主成分代替原始数据,并依此构建一种预测精度高的

预测模型^[11-13]。

1 实验数据及方法

1.1 实验数据

对煤质开展工业分析指标检测,获得空干基水分(M_{ad})、空干基灰分(A_{ad})和空干基挥发分(V_{ad});对煤质开展元素分析指标检测,获得干基碳(C_d)、干基氢(H_d)和干基全硫($S_{t,d}$);对煤质开展发热量检测,获得弹筒发热量后并转化成空干基高位发热量($Q_{gr,ad}$)。表 1 为 150 项煤质化验数据。

表 1 煤质化验数据

煤样	工业分析/%			元素分析/%			发热量/(J·g ⁻¹)
	M_{ad}	A_{ad}	V_{ad}	C_d	H_d	$S_{t,d}$	$Q_{gr,ad}$
1	2.81	33.94	24.93	50.28	3.16	1.05	19382.17
2	1.94	37.10	23.86	48.57	3.18	0.70	18970.11
3	5.98	18.74	27.48	70.36	3.92	0.52	26071.03
4	4.93	33.90	24.40	49.80	3.08	0.94	18519.52
5	5.43	32.92	24.57	61.09	3.99	0.95	18644.58
...
128	12.76	11.54	30.92	66.97	4.26	0.49	23158.86
129	5.72	13.48	29.50	64.34	3.77	0.45	25623.61
130	5.32	13.38	29.23	68.60	3.95	1.90	25788.17
131	6.63	15.02	29.01	62.28	3.70	0.74	24858.34
132	3.84	20.93	24.92	60.06	3.40	1.91	23968.24
133	6.32	12.60	32.65	62.90	3.85	0.51	24961.98
...
148	5.27	11.92	31.14	69.05	4.26	0.50	26255.91
149	5.51	13.04	31.04	56.22	3.24	0.36	21140.10
150	3.96	27.60	25.51	60.89	3.72	0.31	24220.80

1.2 实验方法

1) 主成分分析法。

主成分分析法是一种降维统计分析方法,主要借助矩阵变换原理将初始 N 组特征属性线性组合成 N_1 组 ($N_1 < N$) 互不关联的组合特征指标,通过该 N_1 组特征指标尽可能反馈系统信息,其步骤如下。(1) 假设矩阵 X 用于描述系统信息;(2) 计算协方差矩阵的特征值和特征向量;(3) 对协方差矩阵的特征向量进行单位化处理并计算主成分贡献率和

主成分累计贡献率。

2) 改进 BP 神经网络预测法——LMBP 法。

BP 神经网络是一种机器学习算法,主要用于大数据回归预测,网络结构如图 1 所示。



图 1 BP 神经网络预测模型

BP神经网络通过调整网络输入层(input)、隐含层(hidden layer)和输出层(output layer)3层之间的权值和阈值,经过多次训练后使均方误差沿梯度方向下降至最小,但缺点是在训练过程中易陷入局部极小值和产生收敛速度慢等现象,Gauss-Newton迭代法虽很好地弥补了BP神经网络在训练过程中收敛速度慢的缺点,但Gauss-Newton迭代法在初始值离最优解较远时不易收敛。

针对标准BP神经网络预测法和Gauss-Newton迭代法的不足,本研究在BP神经网络预测法和Gauss-Newton迭代法的基础上耦合一种Leven-

berg-Marquardt(L-M)算法,既能有效保证迭代梯度的下降又能保证训练过程中快速收敛,同时避免过拟合与欠拟合现象,L-M算法理论可参见文献[14-20]。

2 结果与讨论

2.1 单指标线性分析

依据表1分别绘制 M_{ad} 、 A_{ad} 、 V_{ad} 、 C_d 、 H_d 、 $S_{1,d}$ 与 $Q_{gr,ad}$ 散点布置(图2)。

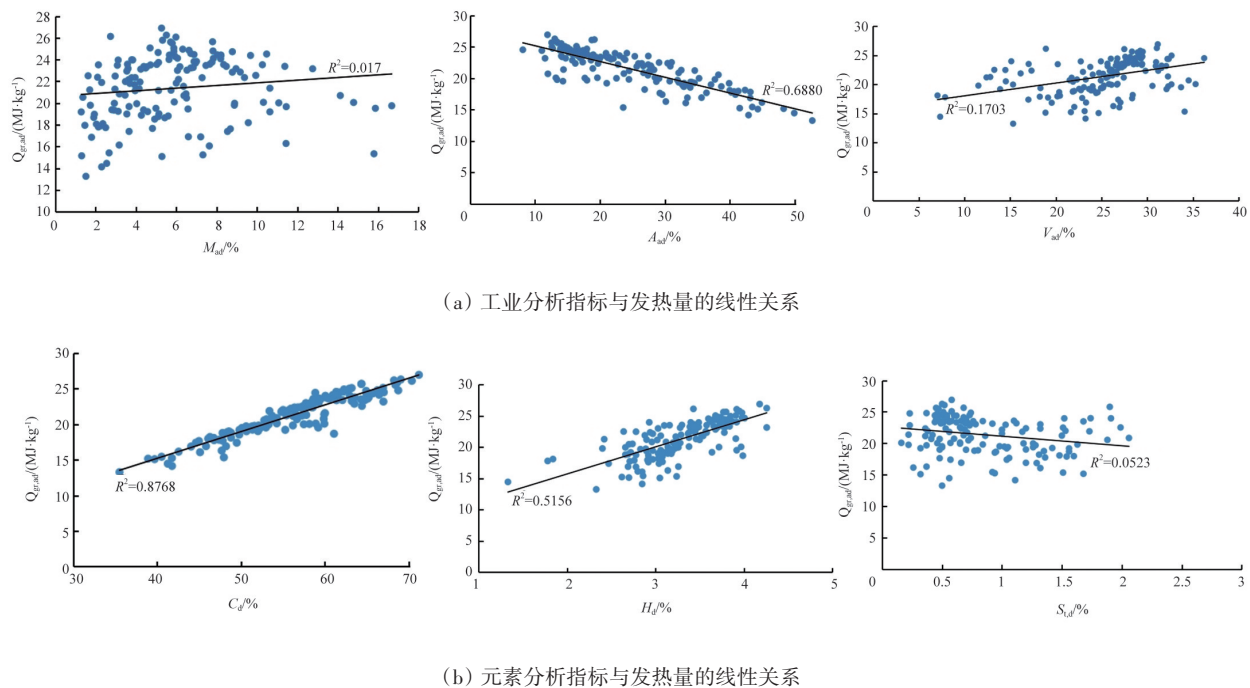


图2 各煤质化验指标与发热量的线性回归图

横坐标为工业分析指标(M_{ad} 、 A_{ad} 、 V_{ad})和元素分析指标(C_d 、 H_d 、 $S_{1,d}$),纵坐标表示对应指标下煤质的发热量($Q_{gr,ad}$),并将坐标系中的坐标点拟合成线性方程。由图2可知,各煤质化验指标中仅 C_d 、 A_{ad} 与 $Q_{gr,ad}$ 的线性关系较显著,相关系数为0.8768和0.6880, M_{ad} 、 V_{ad} 、 H_d 和 $S_{1,d}$ 与 $Q_{gr,ad}$ 线性关系均较弱,相关系数分别为0.0170、0.1703、0.5156和0.0523。分析可知,仅采用多元线性回归法预测煤质发热量的适应性较差。

针对上述煤质化验结果,首先对 M_{ad} 、 A_{ad} 、 V_{ad} 、 C_d 、 H_d 和 $S_{1,d}$ 进行主成分降维,然后采用LMBP神经网络预测法预测发热量,其PCA-LMBP神经网络预测模型如图3所示。

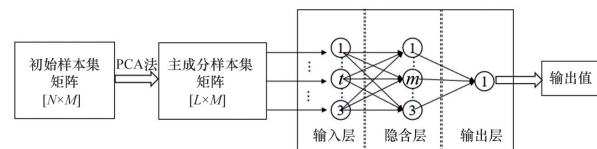


图3 PCA-LMBP神经网络预测模型

2.2 PCA法分析结果

基于主成分分析的原理和步骤,对表1中数据进行主成分分析降维,获得各主成分的贡献率,如图4所示。

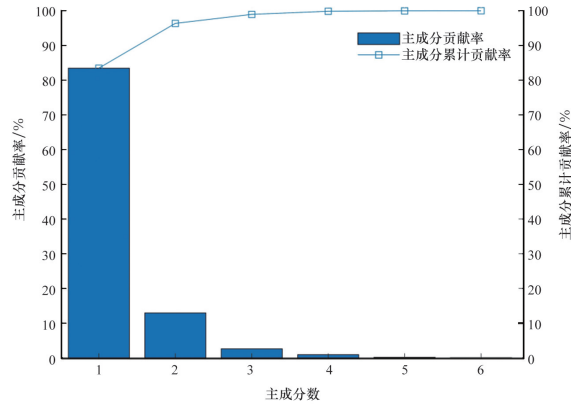


图4 主成分贡献率图

由图4可知,主成分1贡献率为83.34%、主成分2贡献率为12.29%、主成分3贡献率为3.05%、主成分4贡献率为1.20%,累计贡献率为99.88%,几乎覆盖了煤质化验所有信息,因此,前4个主成分组成的四维矩阵有效替代 M_{ad} 、 A_{ad} 、 V_{ad} 、 C_d 、 H_d 和 $S_{t,d}$,这6项煤质化验数据组成的六维矩阵,将前4个主成分编号分别记为 $PC1$ 、 $PC2$ 、 $PC3$ 和 $PC4$,其四维矩阵方程为

$$\begin{bmatrix} PC1 \\ PC2 \\ PC3 \\ PC4 \end{bmatrix} = (M_{ad} A_{ad} V_{ad} C_d H_d S_{t,d}) \times \begin{bmatrix} -0.149 & -0.388 & -0.600 & 0.683 \\ 0.769 & 0.077 & 0.356 & 0.533 \\ -0.338 & -0.648 & 0.659 & 0.133 \\ -0.520 & 0.649 & 0.261 & 0.484 \\ -0.034 & -0.007 & 0.085 & 0.059 \\ 0.022 & 0.046 & 0.059 & -0.064 \end{bmatrix} \quad (1)$$

由式(1)可知,对于不同主成分,原变量的指标载荷不同,表明主成分元素与原变量之间的关联程度亦不同。具体地,对于主成分 $PC1$ 而言,主成分 $PC1$ 与原变量 A_{ad}/C_d 指标载荷为0.769/-0.520,则表示主成分 $PC1$ 与原变量 A_{ad}/C_d 的关联程度较高,主成分 $PC1$ 与原变量 M_{ad} 、 V_{ad} 、 H_d 及 $S_{t,d}$ 的关联程度较低,故可把 $PC1$ 看成原变量 A_{ad} 和 C_d 的综合影响,以

此类推,主成分 $PC2$ 、 $PC3$ 和 $PC4$ 分别与原变量 V_{ad}/C_d 、 V_{ad} 和 M_{ad}/A_{ad} 的关联程度较高,表明 V_{ad}/C_d 、 V_{ad} 和 M_{ad}/A_{ad} 对主成分影响较大,将表1中煤质化验数据代入式(1),即可得到降维后的四维矩阵元素数据(表2)。

表2 四维矩阵元素

序号	PC1	PC2	PC3	PC4
1	10.49	-2.019	3.23	-0.53
2	14.29	-1.86	3.74	-0.42
3	-13.02	6.94	2.93	3.82
4	10.57	-2.81	1.46	0.59
5	3.78	4.13	3.95	5.96
...
128	-18.98	-0.68	-2.29	3.52
129	-14.57	1.41	0.96	-1.76
130	-16.69	4.57	2.03	-0.141
131	-12.28	0.17	0.08	-1.42
132	-4.74	2.98	0.49	-1.94
133	-15.66	-1.86	1.99	-2.09
...
148	-19.84	4.86	3.58	0.67
149	-17.87	3.52	3.22	0.38
150	2.14	0.50	2.26	-0.06

2.3 LMBP预测模型的分析结果

2.3.1 数据处理

基于PCA法将六维矩阵降至四维矩阵(表2),将表1中前130组发热量、表2中前130组 $PC1$ 、 $PC2$ 、 $PC3$ 、 $PC4$ 元素用于训练集、验证集和测试集,采用零-均值规范化后的数据作为BP神经网络预测模型和LMBP预测模型的输入值。

2.3.2 训练过程

在BP和LMBP神经网络预测模型中,设置训练次数为1000次,学习速率为0.01,训练目标最小误差为0.00001,输入层数为4,隐含层数为6,输出层数为1,训练过程如图5、图6、图7所示。

图5、图6为BP和LMBP神经网络预测模型的训练过程图。由图5、图6可知,BP和LMBP预测模型进行 $K(K \leq 1000)$ 轮训练后训练最小误差达到0.00001,此时运行次数分别为21次和11次,最佳性能验证值为0.0012601和0.00097655,拟合效果最佳。

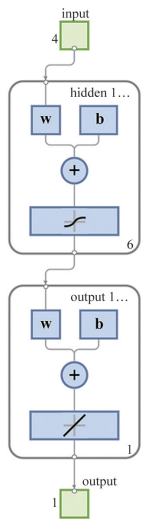
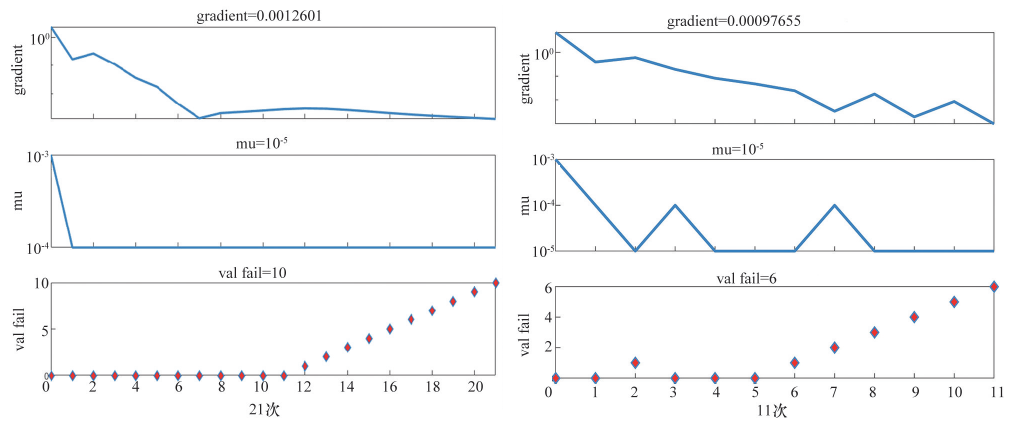


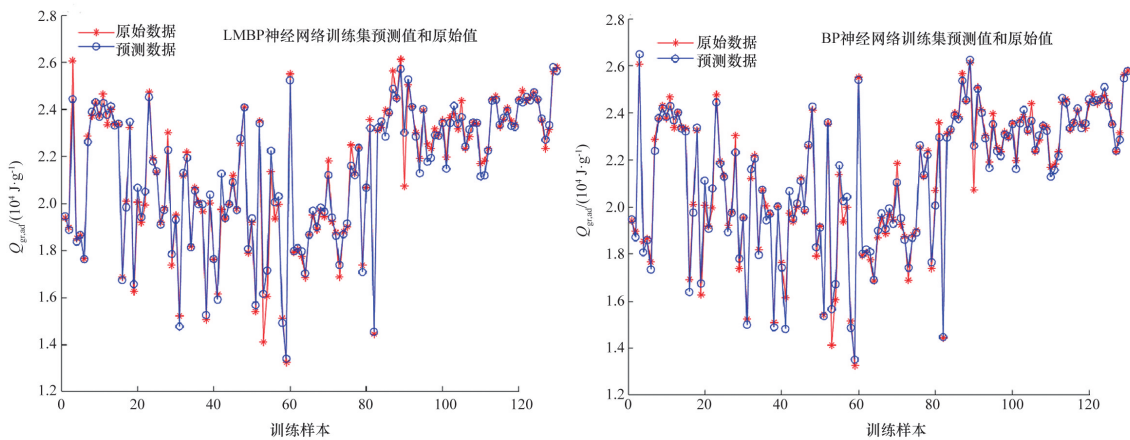
图5 LMBP法网络
训练流程



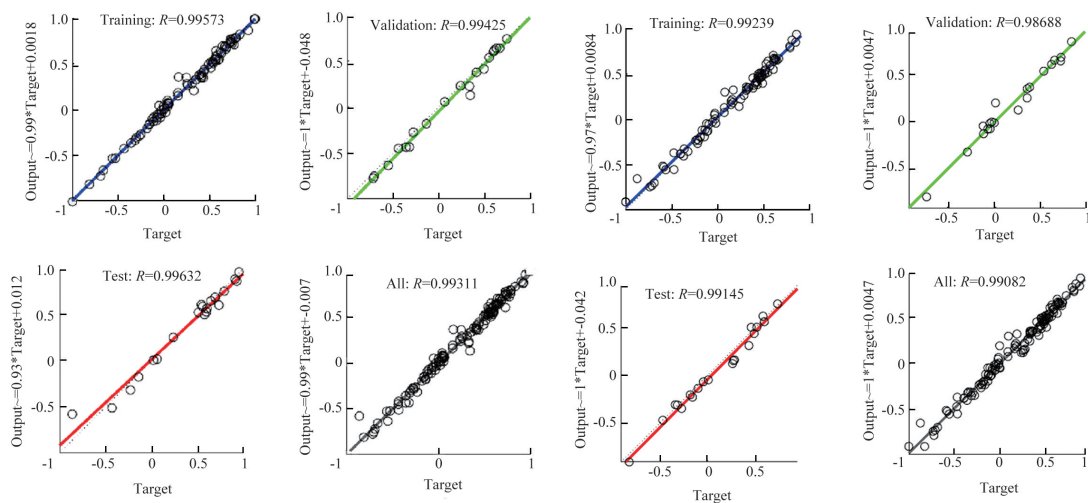
(a) BP预测模型

(b) LMBP预测模型

图6 BP和LMBP预测模型的网络训练状态图



(a) LMBP和BP预测模型的对比



(b) LMBP和BP预测模型的网络训练结果

图7 不同预测模型下预测值与原始值的示意图及拟合直线图

2.3.3 结果分析

图7为不同预测模型下训练集的预测值与原始值的对比示意图和拟合直线图。由图7(a)可知, BP/LMBP神经网络预测模型的预测值与原始值最大与最小差值分别为 $1025/876 \times 10^4$ 和 $268/106 \times 10^4$ J/g, 最大与最小误差率分别为12.35%/9.17%和8.65%/6.53%, 即, BP神经网络的预测模型的误差率区间范围为[8.65%, 12.35%], LMBP神经网络预测模型的误差率区间范围为[6.53%, 9.17%], 表明LMBP预测模型的误差范围较BP神经网络预测模型小, LMBP预测模型的预测精度稍高; 由图7(b)可知, BP/LMBP预测模型的训练集系数 R_t 、验证集系数 R_v 和测试集系数 R_m 分别为0.9923/0.9957、0.9869/0.9942和0.9914/0.9963, 总体系数 R 为0.9908/0.9931, 表明LMBP预测模型的系数均高于BP神经网络预测模型的系数, LMBP预测模型的多元非线性关系稍显著, 拟合性能更理想。

为进一步验证BP和LMBP预测模型的适应性, 将剩余20组数据代入上述模型, 测试误差如图8所示。

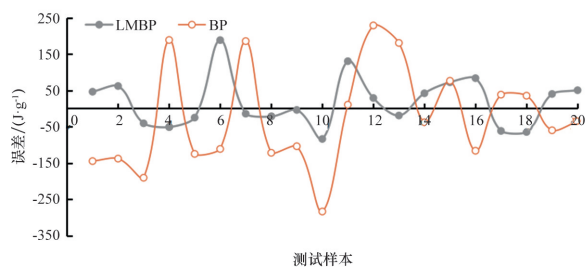


图8 BP和LMBP神经网络预测模型测试误差图

由图8可知, LMBP预测模型的误差波动较BP神经网络预测模型小, LMBP预测模型的期望值与预测值的最大误差为188.4 J/g, 最小误差为-4.1 J/g, 平均绝对百分比误差为2.85%, 相关系数为0.9678; BP预测模型的期望值与预测值的最大误差为-284.7 J/g, 最小误差为10.3 J/g, 平均绝对百分比误差为5.85%, 相关系数为0.9278。通过上述20组数据的测试误差对比可知, LMBP预测模型较BP

神经网络模型预测可靠, 预测精度较高, 更符合实际需求。

3 结论

1) 基于煤质单指标与发热量的线性分析可知, 仅煤质中 C_d 、 A_{ad} 与 $Q_{gr,ad}$ 的线性关系较显著, 相关系数 R_2 为0.8768和0.6880, 其他指标与 $Q_{gr,ad}$ 的线性相关性较弱, 即表明多元线性回归预测模型的预测精度不高。

2) 通过PCA主成分分析可知, PC1、PC2、PC3、PC4前4个主成分累积贡献率达到了99.88%, 几乎覆盖 M_{ad} 、 A_{ad} 、 V_{ad} 、 C_d 、 H_d 和 S_{td} 等6项煤质化验数据信息, 实现了由六维矩阵降至四维矩阵的降维效果, 增强了神经网络在训练过程中收敛的稳定性。

3) 基于L-M算法下, PCA-LMBP预测模型既实现了预测精度高的优点, 又避免了过拟合与欠拟合的缺点。实验结果表明, LMBP预测模型的训练集系数 R_t 、验证集系数 R_v 和测试集系数 R_m 分别为0.9957、0.9942和0.9963, 总体系数为0.9931, LMBP预测模型的多元线性关系显著, 拟合性能理想。

4) 通过待验证20组数据测试误差可知, LMBP预测模型的期望值与预测值的最大误差为188.4 J/g, 最小误差为-4.1 J/g, 平均绝对百分比误差为2.85%, 相关系数为0.9678, 上述结果进一步表明LMBP预测模型较BP神经网络模型预测可靠, 预测精度较高, 更符合实际预测需求。

参考文献 (References)

- [1] 李大虎, 韦鲁滨, 朱学帅. 基于SVR与特征变量选择方法的煤炭发热量预测[J]. 煤炭学报, 2019, 44(Suppl 1): 278-288.
- [2] 宋宜猛. 基于工业分析预测煤质发热量研究[J]. 西安科技大学学报, 2022, 42(1): 71-75.
- [3] 谭鹏, 李鑫, 张小培, 等. 基于工业分析的煤质发热量预测[J]. 煤炭学报, 2015, 40(11): 2642-2645.
- [4] 姜英, 涂华, 陈亚飞, 等. 我国商品褐煤低位发热量回归式的推导[J]. 煤炭学报, 2004, 29(4): 477-480.
- [5] Feng Q, Zhang J, Zhang X, et al. Proximate analysis based pre-diction of gross calorific value of coals: A comparison of support vector machine, altering conditional ex-

- pectation and artificial neural network[J]. Fuel Processing Technology, 2015, 129: 120–129.
- [6] 陈文敏, 姜宁. 利用工业分析、元素分析数据计算我国煤炭热值的新回归式[J]. 煤炭分析及利用, 1993(1): 16–18.
- [7] Majumder A K, Jain R, Banerjee P, et al. Development of a new proximate analysis based correlation to predict calorific value of coal[J]. Fuel, 2008, 87(13/14): 3077–3081.
- [8] Sözer M, Haykiri-acma H, Yaman S. Prediction of calorific value of coal by multilinear regression and analysis of variance[J]. Journal of Energy Resources Technology, 2021, 144: 1–11.
- [9] 李祥, 杜政焯, 刘翠茹, 等. 基于主成分-线性回归分析的煤炭热值预测模型研究[J]. 煤炭工程, 2018, 50(7): 142–146.
- [10] 周子民, 朱再兴, 刘艳军, 等. 基于Elman神经网络的动力配煤发热量及着火温度的预测[J]. 中南大学学报(自然科学版): 2011, 42(12): 3871–3875.
- [11] 郭凯维, 郭传超, 史耀凡, 等. 基于主成分分析的GA-BP神经网络地表下沉系数预测[J]. 北京测绘, 2021, 35(11): 1374–1378.
- [12] 张靖苑. 基于主成分分析和随机配置网络的矿井突水水源判别方法研究[J]. 煤炭工程, 2020, 52(Suppl 1): 101–104.
- [13] 王汉元, 贾宝山, 李守国, 等. 基于PCA的煤炭自然发火预测预报研究[J]. 洁净煤技术, 2015, 21(6): 119–122.
- [14] Livet C, Rouvier T, Sauret C, et al. A penalty method for constrained multibody kinematics optimisation using a Levenberg-Marquardt algorithm[J]. Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering, 2023, 26(7): 864–875.
- [15] 肖舜仁, 胡青春, 李妮妮, 等. 基于Levenberg-Marquardt算法的无人机多传感器校正方法研究[J]. 机床与液压, 2022, 50(10): 13–18.
- [16] 杨承午, 刘志平, 徐永明. L-M算法优化的灰色模型在GPS卫星钟差预报中的应用[J]. 河南理工大学学报(自然科学版), 2020, 39(2): 48–51.
- [17] 黄天炎, 唐莲. L-M优化改进的BP网络模型在水环境承载力评价中的应用研究[J]. 中国农村水利水电, 2019(5): 49–51.
- [18] 王华, 王连华, 葛岭梅. 主成分分析与BP神经网络在煤耗氧速度预测中的应用[J]. 煤炭学报, 2008, 33(8): 921–925.
- [19] 陈家慧. 灰色理论与人工神经网络在电力系统中长期负荷预测中的应用[D]. 苏州: 苏州大学机电工程学院, 2019.
- [20] 骆仲泱, 殷春根, 姚强, 等. 人工神经网络在优化动力配煤中应用的理论研究[J]. 煤炭学报, 1997, 22(4): 337–342.

A prediction model for coal calorific value based on L-M gradient iterative algorithm

HUANG Kui¹, WANG Chongshi², WANG Linli¹, DOU Youquan¹, ZHANG Donglian¹, ZENG Wenhui²,
WANG Jiayin², ZENG Yong²

1. Guoneng Nanjing Coal Quality Supervision and Inspection Corporation Ltd., Nanjing 210031, China

2. Guoneng Daduhe New Energy Investment Co., Ltd., Chengdu 610096, China

Abstract The coal quality test data of about 150 thermal power enterprises are selected, and the coal calorific value prediction model based on L-M algorithm is built by analyzing the ubiquitous coal quality test data information. The experimental results show that: (1) the linear relationships between calorific value and carbon, ash are significant respectively, and the correlation coefficients are 0.8768 and 0.6880; (2) principal component analysis(PCA) method excavates the information of the principal component eigenvalue, characteristic matrix and score, which could realize the dimension reduction effect from six-dimensional matrix to four-dimensional matrix, and enhance the convergence stability of neural network in the training process; (3) based on the L-M algorithm, the training coefficient, verification coefficient and test coefficient of the Levenberg-Marquardt back propagation neural network prediction method(LMBP) model are 0.9957, 0.9942 and 0.9963 respectively, and the overall coefficient is 0.9931. Through the further verification of 20 groups of data to be tested, the LMBP prediction model is more reliable, the prediction accuracy is higher, and better to meet the actual forecast demand.

Keywords coal quality test data; Principal component analysis; L-M algorithm; training set coefficient ●



(责任编辑 傅雪)