

应用 BP 神经网络的二次反应清洁汽油辛烷值预测

周小伟¹, 袁俊², 杨伯伦¹

(1. 西安交通大学能源与动力工程学院, 710049, 西安; 2. 西安近代化学研究所, 710065, 西安)

摘要: 借鉴复杂反应动力学研究中的集总方法, 将汽油辛烷值看成汽油链烷烃集总、环烷烃集总、芳烃集总、烯烃集总的函数。采用多元线性回归和 BP 神经网络算法, 分别建立了二次反应清洁汽油的研究法辛烷值预测模型, 并进行了实例计算验证和对比分析。结果表明, BP 神经网络模型的整体性能优于多元线性回归模型, 其强大的非线性映射能力能够更好地反映汽油研究法辛烷值与各集总组分之间的复杂关系, 且具有更好的预测性能, 模型预测值与实验测得的汽油辛烷值的平均相对误差为 0.39%, 与文献报道的汽油辛烷值的平均相对误差为 0.92%。

关键词: 清洁汽油; 辛烷值; 集总; 多元线性回归; BP 神经网络

中图分类号: TQ622; TP301.6 **文献标志码:** A **文章编号:** 0253-987X(2010)12-0082-05

Prediction of Octane Number for Clean Gasoline Obtained from Secondary Reactions Based on Back-Propagation Neural Network

ZHOU Xiaowei¹, YUAN Jun², YANG Bolun¹

(1. School of Energy and Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China;

2. Xi'an Modern Chemistry Research Institute, Xi'an 710065, China)

Abstract: The octane number of gasoline was considered as a function of paraffin lump, naphthalene lump, aromatics lump and olefins lump based on lumping concept for complex reaction kinetics. Back-propagation (BP) neural network and multiple linear regression were adopted to establish prediction models for the research octane number (RON) of clean gasoline obtained from secondary reactions, respectively. The two models were compared and verified via several cases. The results show that BP neural network model exhibits better performance than multiple linear regression model for the higher prediction accuracy due to strong nonlinear mapping ability to reflex the complex relationship between RON and lump components. The mean absolute relative error between predicted gasoline RON and experimental data gets 0.39%, and 0.92% for the reported results.

Keywords: clean gasoline; octane number; lump; multiple linear regression; BP neural network

受全球变暖和节能减排的影响, 世界各国环保法规日趋严格, 对汽油、柴油的质量要求越来越高。发达国家实施了严格的清洁车用汽油标准, 2009 年欧盟开始实施欧 V 标准, 要求烯烃体积分数不大于 18%, $w(S) \leq 10 \times 10^{-6}$ 。2008 年, 我国全范围执行机动车国 III 标准(相当于欧 III), 要求汽油烯烃体

积分数不大于 35%, $w(S) \leq 150 \times 10^{-6}$ ^[1]。但是, 我国常规(流化催化裂化)工艺生产的汽油中烯烃体积分数高达 45%~60%, 而且我国车用汽油中的流化催化裂化(FCC)汽油占 78%以上, 有些炼油厂几乎占 100%。因此, 降低 FCC 汽油的烯烃含量已成为生产清洁汽油的关键。汽油二次反应^[2-3]是能同时降

低汽油烯烃和硫含量的新工艺,同其他油品一样,经过改质后得到的二次反应清洁汽油需要表征其质量参数. 辛烷值代表汽油的抗爆性,是车用汽油重要的指标之一,它是一个国家炼油工业水平和车辆设计水平的综合体现.

传统的汽油辛烷值测定方法是采用 ASTM-CFR 标准方法对汽油进行分析. 该方法费时且机器结构庞大,操作和维护运行费用高,因此测定成本高. 实际中,常采用间接测定方法,典型的思路是利用汽油的相关易测性质的信息,建立相应易测性质与辛烷值的关联模型,并利用模型的泛化能力,根据样品的易测性质来预测其辛烷值. 许多研究者采用红外光谱^[4]或近红外光谱作为易测性质^[5]. 该方法具有测定速度快、可用于在线分析、操作及维护简便、检测成本低等优点,但是光谱吸收带严重重叠,难以分辨,并且存在基线漂移等问题. 也有研究者采用喇曼光谱的方法预测汽油辛烷值,但由于喇曼光谱有较强的荧光背景的噪声干扰,涉及到复杂的光谱预处理技术,同样存在基线漂移的问题^[6]. 近来有报道采用气相色谱的方法预测汽油辛烷值,但该方法要求测定汽油主要组分,标样需要量大,且沸点相近的组分不易分开进行测定^[7].

以上研究的油样都是普通汽油、重整汽油或改进的费-托法合成汽油,二次反应后获得的清洁汽油的辛烷值预测却鲜见报道. 鉴于此,作者在文献^[8]中提出了采用莱文伯格马夸特算法和支持向量机有机结合的方法对汽油研究法辛烷值进行预测.

本文基于集总的思想,将汽油辛烷值视为其集总组成的函数,从而构建基于集总策略的二次反应清洁汽油辛烷值的形式化模型,然后采用多元线性回归和 BP 神经网络的方法建立汽油研究法辛烷值的预测模型,并通过实例计算进行了模型验证、性能比较和分析.

1 研究法辛烷值预测模型

集总思想是把复杂反应体系中的所有化合物根据某种原则(例如沸点、烃族、碳原子数等)划分为若干虚拟组分,以这些集总组分替代实际组分^[9]. 本文从集总的思想出发,根据汽油的烃族划分原则,将二次反应所得清洁汽油看成由汽油链烷烃集总(P)、环烷烃集总(N)、芳烃集总(A)、烯烃集总(O) 4 个虚拟分子组成的体系,并将汽油研究法辛烷值(R_{RON})视为其集总组成的函数,从而构建如下形式化模型

$$R_{RON} = f(w(P), w(N), w(A), w(O)) \quad (1)$$

神经网络^[10-12]是智能控制技术的主要分支之一,是由大量简单的处理单元广泛地相互连接而成的复杂网络系统,具有高度的并行处理、联想记忆、良好的自适应和自组织能力. 它无需人们预先确定系统的模型,而是以实验或实测数据为基础,经过有限次的迭代计算,根据系统输入和输出找到它们之间的非线性关系,从而获得一个反映实验或实测数据内在规律的数学模型.

BP 神经网络结构简单,使用方便,采用的非循环多级网络训练算法使其具有广泛的实用性,而且能够以任意精度逼近任何连续函数,实现从输入到输出的非线性映射. BP 神经网络是单向传播的多层前向神经网络,结构如图 1 所示.

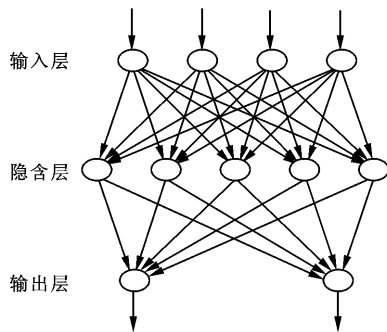


图 1 BP 神经网络结构示意图

第一层是输入节点,最后一层是输出节点,其间有一层或多层隐含层节点,各层内的节点间无连接,信息仅单方向流动. BP 神经网络的训练方法是通过反向误差传播原理不断调整网络权值,从而使得实际输出与期望输出之间的误差平方和达到最小或小于某个阈值. 其训练或学习过程由正向传播和反向传播两部分构成. 当正向传播时,信息从输入层经隐含处理后传入输出层,每一层神经元状态只影响下一层的神经元的状态. 如果在输出层得不到希望的输出,则转入反向传播,将误差信号沿原来的神经元连接通路返回. 在返回过程中,逐一修改各神经元连接的权值,经过不断的迭代,最后使信号误差达到允许范围之内. 算法的步骤如下.

(1)将输入层、隐含层和输出层神经元之间的连接权重 w_{ij} 、 v_{jl} 以及神经元阈值 b_j 、 b_l 赋予 $(-1, 1)$ 间的随机值,并指定学习系数以及神经元的激励函数.

(2)随机选取数据组 $X^k = (x_1^k, x_2^k, \dots, x_m^k)$, $Y^k = (y_1^k, y_2^k, \dots, y_q^k)$ 提交给网络,用网络的设置计算隐含层各神经元的输出

$$Z_j = \sum_{i=1}^m w_{ij} x_i - b_j \tag{2}$$

(3)利用网络的设置,计算输出层神经元的响应为

$$R_l = \sum_{j=1}^p v_{jl} Z_j - b_l \tag{3}$$

(4)利用给定的输出数据,计算输出层神经元的一般化误差 d_l^k 和隐含层各神经元的一般化误差 e_j^k

$$d_l^k = (Y_l^k - R_l^k) f'(R_l) \tag{4}$$

$$e_j^k = \left[\sum_{l=1}^q v_{jl} d_l^k \right] f'(Z_j^k) \tag{5}$$

(5)利用 d_l^k 和隐含层各神经元输出 Z_j 修正隐含层与输出层的连接权重 v_{jl} 和神经元阈值 b_l ,且利用 e_j^k 和各神经元输入 X^k 修正 w_{ij} 和神经元阈值 b_j

$$\left. \begin{aligned} \Delta v_{jl} &= \alpha d_l^k Z_j^k, \\ \Delta b_l &= -\alpha d_l^k, \end{aligned} \right\} \quad 0 < \alpha < 1 \tag{6}$$

$$\left. \begin{aligned} \Delta w_{ij} &= \beta e_j^k x_i^k, \\ \Delta b_j &= -\beta e_j^k, \end{aligned} \right\} \quad 0 < \beta < 1 \tag{7}$$

(6)随机选取另一个数据组,返回到步骤 2,重复利用全部数据组进行学习.

这是网络利用样本集完成的一次学习过程,然后重复下一次学习过程,直至网络的性能符合要求,或学习次数达到设定次数为止.

步骤 2 和步骤 3 是正向传播过程,步骤 4 和步骤 5 是误差逆向传播过程.通过反复的训练和修正,神经网络最后收敛到能正确反映客观过程的权重因子数值.

2 结果与讨论

2.1 实验数据

二次反应清洁汽油的典型实验数据见表 1,其中 P、N、A、O 集总组成的测定方法为荧光法,汽油辛烷值的测定方法为研究法,在 GB17930 规定的条件下,使用美国试验与材料协会(ASTM)辛烷值试验机测得.将表 1 的 12 组数据作为训练集,用于模型学习以获得学习机器.将表 2 的 12 组数据(前 4 组为实验值,后 8 组来自于文献[13])作为预测集,用于评价模型的预测和外推性能.

2.2 多元线性回归模型结果

采用多元线性回归方法,以汽油链烷烃集总、环烷烃集总、芳烃集总、烯烃集总为自变量,以汽油研究法辛烷值为因变量,建立多元线性回归模型,来考

察汽油研究法辛烷值与集总组分之间的关系.构建模型如下

表 1 训练集数据

组	w(P)	w(N)	w(A)	w(O)	R _{RON}
1	0.372	0.096	0.343	0.189	93.5
2	0.361	0.137	0.150	0.352	90.5
3	0.307	0.094	0.181	0.418	91.3
4	0.282	0.093	0.193	0.432	92.2
5	0.283	0.087	0.122	0.508	92.4
6	0.323	0.107	0.346	0.224	92.7
7	0.300	0.098	0.415	0.187	94.1
8	0.334	0.107	0.384	0.175	92.7
9	0.297	0.098	0.470	0.135	93.8
10	0.382	0.108	0.324	0.186	93.6
11	0.346	0.112	0.378	0.164	94.5
12	0.378	0.094	0.367	0.161	94.2

表 2 预测集数据

组	w(P)	w(N)	w(A)	w(O)	R _{RON}
1	0.337 8	0.084 5	0.205 4	0.372 3	90.6
2	0.337 3	0.087 8	0.215 8	0.356 4	91.2
3	0.336 1	0.088 5	0.207 6	0.367 8	90.8
4	0.358 5	0.092 8	0.224 5	0.324 2	91.5
5	0.302 6	0.053 3	0.181 8	0.462 3	90.7
6	0.316 6	0.060 0	0.208 7	0.414 7	92.0
7	0.331 7	0.057 5	0.211 3	0.399 5	91.8
8	0.330 9	0.060 8	0.214 1	0.394 2	91.7
9	0.325	0.059	0.200	0.416	92.0
10	0.331	0.056	0.206	0.407	91.8
11	0.327	0.064	0.218	0.391	92.3
12	0.319	0.070	0.210	0.401	92.1

$$R_{RON} = b_0 + b_1 w(P) + b_2 w(N) + b_3 w(A) + b_4 w(O) \tag{8}$$

采用训练集进行训练,得到多元线性回归模型为

$$R_{RON} = 99.991\ 9\ w(P) + 53.209\ 3\ w(N) + 99.597\ 3\ w(A) + 91.890\ 9\ w(O) \tag{9}$$

2.3 神经网络模型结果

对于神经网络,采用 $4\times 9\times 1$ 的单隐层网络,以汽油链烷烃集总、环烷烃集总、芳烃集总、烯烃集总

为输入,汽油研究法辛烷值为输出,构建 BP 神经网络模型,使用训练集进行训练,得到模型权值和阈值列于表 3.

表 3 BP 神经网络连接权值和阈值

隐含单元	w_{1j}	w_{2j}	w_{3j}	w_{4j}	v_{j1}	b_j
1	1.296 4	−4.35 4	−0.589 9	−0.258 7	−1.337 5	−4.447 9
2	−2.923 7	−2.038 3	3.069 8	−4.817 0	3.553 8	7.338 7
3	−14.161 4	−1.099 5	17.551 1	−1.121 5	0.493 1	7.819 1
4	1.675 4	3.225 4	−1.676 5	4.032 1	−2.535 1	−6.644 3
5	−5.147 4	−3.487 3	−5.315 9	0.993 2	0.635 0	−4.205 3
6	−22.779 3	−8.863 7	4.233 2	27.146 1	−19.313 6	2.639 2
7	16.894 1	4.153 8	−20.144 1	8.899 1	−13.903 3	−2.786 3
8	10.138 5	−1.752 8	−3.264 5	−11.045 3	−31.526 7	0.426 4
9	−9.471 4	−6.281 0	6.240 3	3.609 4	6.713 7	−4.194 3

2.4 模型验证与比较分析

采用所得的多元线性回归模型和 BP 神经网络模型对预测集进行预测,结果见表 4.

表 4 多元线性回归模型和 BP 神经网络模型的预测性能对比

组	R_{RON} 实验值	多元线性回归模型		BP 神经网络模型	
		R_{RON} 计算值	相对误差/%	R_{RON} 计算值	相对误差/%
1	90.6	92.941 7	2.58	90.716 2	0.13
2	91.2	92.642 1	1.58	90.978 5	−0.24
3	90.8	92.790 2	2.19	90.705 9	−0.11
4	91.5	92.935 5	1.57	90.500 3	−1.09
5	90.7	93.681 6	3.29	91.784 2	1.20
6	92.0	93.743 1	1.89	91.603 2	−0.43
7	91.8	93.982 2	2.38	90.943 0	−0.93
8	91.7	93.869 6	2.37	90.915 0	−0.86
9	92.0	93.782 8	1.94	91.175 0	−0.90
10	91.8	93.993 7	2.39	90.998 1	−0.87
11	92.3	93.744 3	1.56	91.068 5	−1.33
12	92.1	93.385 8	1.40	91.294 1	−0.87

如表 4 所示,采用 BP 神经网络模型的研究法辛烷值的整体平均相对误差为 0.75%,其中预测前

4 组实验值的平均相对误差为 0.39%,低于多元线性回归模型的 1.98%以及采用 LM/SVM 方法的 0.71%^[8],预测后 8 组文献报道数据的平均相对误差为 0.92%,而对应的多元线性回归模型的平均相对误差为 2.15%,且相对误差都大于 1%. 可见,BP 神经网络模型不仅能根据二次反应汽油的集总组成很好地预测其实验范围的汽油辛烷值,而且对文献报道的在不同工况下得到的清洁汽油的辛烷值也有很好的预测能力,且预测性能优于多元线性回归模型. 原因在于,在 BP 神经网络模型的学习训练阶段使用的是最速下降法,通过反向传播来不断调整网络的权值和阈值,网络会自动根据各因子对汽油辛烷值所起作用的大小调节其权重. 因此,在没有精确掌握汽油集总组分对其辛烷值影响机理的情况下,采用 BP 神经网络预测模型可以避免回归分析在指标选取上的不足. 另外,BP 神经网络模型强大的非线性映射能力,可以反映更多的影响因素及相互间关系,对预测不同条件下汽油的辛烷值比基于线性假设的多元线性回归模型有更好的适用性,而同样是非线性方法的支持向量机采用的是数学方法和优化技术,通过核函数来逼近非线性映射关系,适宜的非线性核函数的选取是支持向量机模型拟合效果和预测性能的关键.

3 结 论

(1)根据集总的思想,利用二次反应清洁汽油的

集总组成预测汽油辛烷值是可行的,并且预测结果与实测数据吻合较好。

(2)采用多元线性回归和BP神经网络算法分别建立二次反应清洁汽油辛烷值预测模型,并进行实例计算验证。结果表明,BP神经网络模型的预测误差更小,其整体性能优于多元线性回归模型。比较分析发现,BP神经网络的非线性映射能力能够更好地反映汽油的研究法辛烷值中多个自变量和因变量之间的复杂关系,具有较高的模拟精度和较好的可行性,且应用简便。

参考文献:

- [1] 钱伯章,朱建芳.我国清洁汽油发展趋势及生产技术进步[J].天然气与石油,2008,26(6):35-42.
QIAN Bozhang, ZHU Jianfang. Gasoline development trend and production technique progress in China[J]. Natural Gas and Oil, 2008, 26(6): 35-42.
- [2] YANG Bolun, ZHOU Xiaowei, CHEN Chun, et al. Molecule simulation for the secondary reactions of fluid catalytic cracking gasoline by the method of structure oriented lumping combined with Monte Carlo[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2008, 47(14): 4648-4657.
- [3] YANG Bolun, ZHOU Xiaowei, YANG Xiaohui, et al. Multi-scale study on the secondary reactions of fluid catalytic cracking gasoline [J]. AIChE Journal, 2009, 55(8): 2138-2149.
- [4] 李为民,徐春明,许志伟.基于红外光谱-神经网络预测汽油辛烷值[J].炼油技术与工程,2005,35(12): 45-47.
LI Weimin, XU Chunming, XU Zhiwei. Predicting gasoline octane number with infrared spectrum-artificial neural network[J]. Petroleum Refinery Engineering, 2005, 35(12): 45-47.
- [5] Kelly J J, Barlow C H, Jinguji T M, et al. Prediction of gasoline octane numbers from near-infrared spectral features in the range 660~1215 nm[J]. Analytical Chemistry, 1989, 61(4): 313-320.
- [6] 覃旭松,戴连奎.小波变换在Raman汽油辛烷值测定仪中的应用 [J].化工自动化及仪表,2004,31(5): 65-68.
QIN Xusong, DAI Liankui. Application of wavelet

transform in gasoline octane number analyzer using Raman spectroscopy [J]. Control and Instruments in Chemical Industry, 2004, 31(5): 65-68.

- [7] 李长秀,杨海鹰,王征.一种新的汽油辛烷值的气相色谱测定方法[J].色谱,2003,21(1): 81-84.
LI Changxiu, YANG Haiying, WANG Zheng. A new method for determination of octane number of gasoline by chromatography[J]. Chinese Journal of Chromatography, 2003, 21(1): 81-84.
- [8] 袁俊,周小伟,杨伯伦.基于LM/SVM方法的二次反应清洁汽油辛烷值预测[J].高校化学工程学报,2010,24(2): 258-262.
YUAN Jun, ZHOU Xiaowei, YANG Bolun. Prediction of octane number for clean gasoline obtained from secondary reaction based on LM/SVM approach[J]. Journal of Chemical Engineering of Chinese Universities, 2010, 24(2): 258-262.
- [9] WEEKMAN V W, NACE D M. Kinetic of catalytic cracking selectivity in fixed, moving and fluid bed reactors[J]. AIChE Journal, 1970, 16(3): 397-401.
- [10] 朱晓明,程建,刘治国,等.基于反向传播算法神经网络的信用评分系统预测力研究[J].西安交通大学学报,2006,40(12): 1405-1409.
ZHU Xiaoming, CHENG Jian, LIU Zhiguo, et al. Study on prediction ability of credit scoring system based on neural network using back propagating algorithm[J]. Journal of Xi'an Jiaotong University, 2006, 40(12): 1405-1409.
- [11] 蒋宗礼.人工神经网络导论[M].北京:高等教育出版社,2003.
- [12] ABILOV A, ZEYBEK Z. Use of neural network for modeling of non-linear process integration technology in chemical engineering[J]. Chemical Engineering and Processing, 2000, 39(5): 449-458.
- [13] 高金森,徐春明,白跃华.催化裂化汽油催化改质降烯烃反应规律的试验研究[J].炼油技术与工程,2004,34(5): 11-15.
GAO Jinsen, XU Chunming, BAI Yuehua. Test and study on the reaction rule of FCC naphtha olefin decrement upgrading[J]. Petroleum Refinery Engineering, 2004, 34(5): 11-15.

(编辑 杜秀杰)