DOI: 10.19666/j.rlfd.202509037

机理与数据融合驱动的碳捕集预处理系统动力学预测研究

陈园园[1,2]，蒋月月[3]，金泉至[3]，张 寅[2]，吴其荣[1,4]
（1. 上海交通大学智慧能源创新学院，上海 200240；2. 上海电力股份有限公司，上海 200126；
3. 上海明华电力科技有限公司，上海 200090；
4. 重庆远达烟气治理特许经营有限公司，重庆 401122）

［摘 要］【目的】碳捕集预处理系统面临高能耗、高运行成本及净化效率不稳定等问题，其中洗涤液 pH 值的波动显著影响 SO_2 吸收效率。以某电厂碳捕集预处理系统为研究对象，提出了一种融合机理模型与数据驱动的混合建模方法。【方法】该方法结合化学反应动力学机理和决策树机器学习算法优势，利用 Python 工具构建模型，对洗涤液 pH 值与出口 SO_2 排放质量浓度等关键参数进行精准预测，并通过实际运行数据验证。【结果】结果表明，该模型对 pH 值和出口 SO_2 排放质量浓度相关系数分别为 0.85 和 0.80，体现出较好的模拟效果，并基于实际运行数据，对入口烟气温度、液气比、碱液添加量等关键操作参数进行了敏感性分析，模型表现出了较好的跟随性。【结论】该模型为后续碳捕集预处理系统的工艺优化、能耗降低及稳定运行提供了理论依据。

［关 键 词］碳捕集；烟气预处理；机理建模；数据驱动；pH 值预测

［引用本文格式］陈园园，蒋月月，金泉至，等. 机理与数据融合驱动的碳捕集预处理系统动力学预测研究[J]. 热力发电，2026，55(6)：115-124. CHEN Yuanyuan, JIANG Yueyue, JIN Quanzhi, et al. Kinetic prediction study of carbon capture pretreatment system driven by mechanism and data fusion[J]. Thermal Power Generation, 2026, 55(6): 115-124.

Kinetic prediction study of carbon capture pretreatment system driven by mechanism and data fusion

CHEN Yuanyuan[1,2], JIANG Yueyue[3], JIN Quanzhi[3], ZHANG Yin[2], WU Qirong[1,4]
(1. College of Smart Energy, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China; 2. Shanghai Electric Power Company Limited, Shanghai 200126, China;
3. Shanghai Minghua Electric Power Science & Technology Co., Ltd., Shanghai 200090, China;
4. Technology Branch of Chongqing Yuanda Flue Gas Control Franchise Co., Ltd., Chongqing 401122, China)

Abstract: [Objective] The carbon capture pretreatment system faces challenges such as high energy consumption, unstable purification efficiency, and significant fluctuations in SO_2 absorption efficiency due to variations in pH value of washing solution. This study proposes a hybrid modeling method combining mechanism models with data-driven by taking the carbon capture pretreatment system in a power plant as the research object. [Methods] By integrating chemical reaction kinetics and decision tree algorithms, the model is implemented in Python to predict key parameters accurately, including the pH value of the washing solution and the SO_2 mass concentration at the system outlet. [Results] The model yields a correlation coefficient of 0.85 and 0.80 for the pH value of the washing solution and the SO_2 mass concentration at the system outlet, respectively. The values fall within an acceptable error band, indicating the proposed model has good simulation performance. Moreover, a sensitivity analysis driven by baseline plant data further reveals that the model faithfully reproduces the system response to perturbations in inlet flue-gas temperature, liquid-to-gas ratio, and alkali feed rate. [Conclusion] These outcomes furnish a quantitative foundation for subsequent optimization of the CO_2-capture pretreatment system, offering clear avenues for energy

收 稿 日 期：2025-09-13 修 回 日 期：2025-10-19 接 受 日 期：2025-11-18
基 金 项 目：国家重点研发计划项目（2024YFB4106404）；上海市科技重大专项（BH0200090）
Supported by: National Key Research and Development Program (2024YFB4106404); Shanghai Major Science and Technology Projects (BH0200090)
第一作者简介：陈园园（1981），女，硕士，高级经济师，主要研究方向为智慧能源及碳捕集，chenyuanyuan@spic.com.cn。
通信作者简介：吴其荣（1984），男，博士，研究员，主要研究方向为碳减排与污染治理，wqr20021@qq.com。

minimization and robust steady-state operation.
Key words: carbon capture; flue gas pretreatment; mechanism modeling; data-driven; pH value prediction

化石燃料发电厂尤其是燃煤电厂是主要的固定 CO_2 集中排放源，对燃煤电厂进行碳捕集改造是实现“双碳”目标的重要途径之一[1]。基于化学吸收法的燃烧后烟气碳捕集技术由于投资成本低、技术成熟等优点，是当前火电厂碳捕集的主流技术路线[2]。烟气预处理系统是化学吸收法碳捕集系统中的关键流程之一，主要作用是冷却、去除烟气中部分水以及含有的少量 SO_2、SO_3 等强酸性物质，减少对后续吸收剂的影响和管道腐蚀[3]。

实际运行中，碳捕集预处理系统常面临能耗高、成本高、净化效率不稳定等问题。这主要是因为洗涤前烟气流量和 SO_2 含量在设计范围内波动大，循环洗涤液流量、含量不能即时相应调整，且运行多依赖手动操作，往往为了保证脱硫效率，将 pH 值控制在较高范围内（pH: 7~9），造成频繁、过量加入碱液，运行能耗和成本也随之增加。系统优化是碳捕集预处理系统高效、稳定运行的迫切需求，通过构建虚拟模型，可以在不影响实际操作的情况下进行模拟和预测，分析关键参数的影响规律，为运行优化提供决策依据。

传统的动力学预测和控制大多采用逻辑算法实现，近年来随着 AI 等智能技术的发展，基于机理和数据融合的方式实现关键动力学参数的预测与控制得到一定发展。机理与数据驱动混合建模已成为过程工业智能化的前沿方向，广泛应用于复杂的反应、传热以及流动系统研究[4-5]。Zhuang 等人[6]基于数据驱动与机理模型相结合的方式，对碳捕集系统的 CO_2 含量波动情况进行了预测，实现平均均方根误差为 0.123。邱韬等[7]针对湿法脱硫 pH 值控制存在大滞后、大惯性问题，采用带扰动抑制的广义预测控制方法，设计了脱硫 pH 值先进控制策略，大幅提升了脱硫系统 pH 值控制的稳定性和快速性。Xu 等人[8]将机器学习模型应用于 pH 值预测和石灰用量控制，以增强中和过程的自动化控制，通过相关分析、交叉验证和网格搜索技术进行了优化，实现了调节阀与 pH 值的联动控制。Wang 等人[9]提出了基于条件驱动的软传感模型，并用于实时的 SO_2 质量浓度预测。相关研究表明利用数字技术开展碳捕集或减排技术优化，有利于提高能源效率，降低能耗[10]。但针对高能耗的碳捕集系统的研究较少，尤其是针对碳捕集预处理系统的有效预测和控制。实际工程中，预处理系统内动力学反应过程复杂，液相体积无法直接测量，传统的控制策略滞后性大，单纯的机理建模和逻辑控制无法精确模拟反应过程，而利用数据驱动模型能有效解决并弥补上述不足[11]。本文以某电厂碳捕集预处理系统为研究对象，通过建立精确的机理与数据驱动的混合动力学模型来模拟预处理系统的关键参数，为后续运行优化提供理论指导。

1 碳捕集预处理系统工艺原理

1.1 工艺流程

某电厂碳捕集预处理系统主要包含洗涤塔、碱液箱、泵及冷却器，其工艺流程如图 1 所示。来自脱硫后的烟气（约 52 ℃，常压），进入洗涤塔与逆流的碳酸钠溶液接触，脱硫降温（40 ℃）后，再经引风机升压后进入吸收、再生系统，洗涤塔产生的烟气冷凝水回流至脱硫系统。实际运行中，通过控制洗涤液的 pH 值在 7~9 内来调整碱液添加量，从而保证洗涤塔出口 SO_2 质量浓度低于 10 mg/m^3，本文气体均在标准状态下测量。

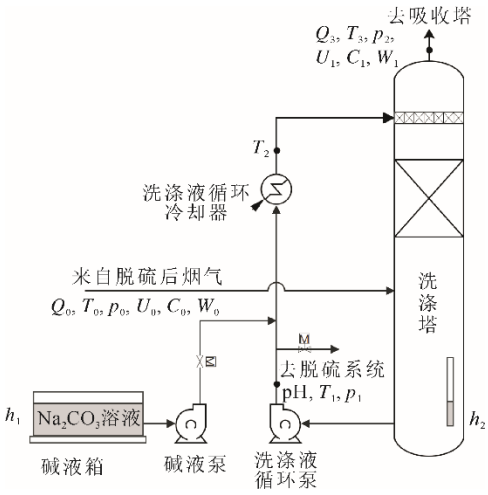


图 1 某电厂碳捕集预处理系统工艺流程
Fig.1 Process flow diagram of the carbon capture pretreatment system in a power plant

图 1 中：Q_0 表示洗涤塔入口烟气流量，m^3/h；T_0 表示入口烟气温度，℃；p_0 表示入口烟气压力，kPa；U_0 表示入口烟气湿度，%；C_0 表示入口烟气中 SO_2 质量浓度，mg/m^3；W_0 表示洗涤塔入口烟气中 O_2 体积分数，%；p_1 表示洗涤塔出口液体压力，kPa；T_1 表示洗涤塔出口液体温度，℃；T_2 表示循环

冷却器出口液体温度，℃；h_1 表示碱液箱液位，m；h_2 表示洗涤塔液位，m；Q_3 表示出口烟气流量，m^3/h；T_3 表示出口烟气温度，℃；p_2 表示出口烟气压力，kPa；U_1 表示出口烟气湿度，%；C_1 表示出口烟气中 SO_2 质量浓度，mg/m^3；W_1 表示出口烟气中 O_2 体积分数，%。

1.2 洗涤塔传质机理

洗涤塔内气液传质过程应用气液双膜理论分析。传质能力由界面浓差推动力、气相传质系数 K_{G,SO_2}、液相传质系数 K_{L,SO_2} 及有效传质比表面积 α 决定[12-14]，计算公式为：

$$N_{SO_2}=\alpha\cdot K([SO_2(aq)]-H\cdot[SO_2(g)]) \tag{1}$$

$$\alpha=1.729\alpha_w\left(\frac{L\rho_L d_p}{S\mu_L}\right)^{0.14}\left(\frac{G\rho_G d_p}{S\mu_G}\right)^{-0.22}\left(\frac{H}{D}\right)^{-0.75} \tag{2}$$

$$\frac{1}{K}=\frac{H}{K_{G,SO_2}}+\frac{1}{K_{L,SO_2}} \tag{3}$$

$$K_{G,SO_2}=5.23\left(\frac{G\rho_G d_p}{S\mu_G}\right)^{0.7}\left(\frac{\mu_G}{\rho_G D_{SO_2,G}}\right)^{1/3}\times(\alpha_w d_p)^{-1.7}\left(\frac{D_{SO_2,G}}{d_p}\right) \tag{4}$$

$$K_{L,SO_2}=0.021\left(\frac{L\rho_L d_p}{S\mu_L}\right)^{0.49}\left(\frac{\mu_L}{\rho_L D_{SO_2,L}}\right)^{-0.5}\times(\alpha_w d_p)^{-0.49}\left(\frac{\mu_L g}{\rho_L}\right)^{1/3} \tag{5}$$

式中：N_{SO_2} 为气液传质通量，$kmol/(m^2/s)$；α 为有效传质比表面积，m^2/m^3；$[SO_2(aq)]$ 为液相 SO_2 浓度，$kmol/m^3$；$[SO_2(g)]$ 为气相 SO_2 浓度，$kmol/m^3$；K 为总传质系数，m/s；K_{G,SO_2} 为气相传质系数，m/s；K_{L,SO_2} 为液相传质系数，m/s；H 为亨利常数；G 为烟气流量，m^3/s；L 为循环液流量，m^3/s；ρ_G 为烟气密度，kg/m^3；ρ_L 为循环液密度，kg/m^3；μ_G 为烟气黏度，Pa·s；μ_L 为循环液黏度，Pa·s；$D_{SO_2,G}$ 为气相 SO_2 扩散系数，m^2/s；$D_{SO_2,L}$ 为液相 SO_2 扩散系数，m^2/s；α_w 为浸润比表面积，m^2/m^3；S 为界面面积，m^2；d_p 为填料直径，m；H 为塔高，m；D 为塔径，m。

1.3 洗涤塔内化学反应机理

洗涤塔是预处理系统的核心设备。在洗涤塔内，烟气中的 SO_2 首先从气相进入液相，与 Na_2CO_3 反应生成亚硫酸盐或硫酸盐，其主要化学反应如下。

Na_2CO_3 水解反应：

$$HCO_3^- + H_2O \rightleftharpoons H_2CO_3 + OH^-$$

$$CO_3^{2-} + H_2O \rightleftharpoons HCO_3^- + OH^-$$

Na_2SO_3 水解反应：

$$SO_3^{2-} + H_2O \rightleftharpoons HSO_3^- + OH^-$$

$$HSO_3^- + H_2O \rightleftharpoons H_2SO_3 + OH^-$$

酸碱中和反应：

当 pH > 9，

$$2CO_3^{2-} + H_2O(L) + SO_2(aq) \rightleftharpoons 2HCO_3^- + SO_3^{2-}$$

当 4 < pH < 7，

$$2HCO_3^- + SO_2(aq) \rightleftharpoons H_2O(L) + SO_3^{2-} + 2CO_2(aq)$$

$$SO_3^{2-} + SO_2(aq) + H_2O(L) \rightleftharpoons 2HSO_3^-$$

副反应：

$$2SO_3^{2-} + O_2(aq) \rightarrow 2SO_4^{2-}$$

在洗涤塔运行过程中，循环洗涤液与烟气中的 SO_2 的反应可以根据碱液泵的启停划分为 2 个部分：1）当碱液泵阀门开启时，Na_2CO_3 溶液自碱液箱流入洗涤塔，此时 pH 值较高，Na_2CO_3 是塔内脱硫反应的主要成分，与 SO_2 可迅速反应生成亚硫酸氢钠（$NaHSO_3$），随着 pH 值的下降，$NaHSO_3$ 生成增多，循环液中以亚硫酸钠（Na_2SO_3）和亚硫酸氢钠（$NaHSO_3$）组成的混合液为主；2）若碱液泵阀门关闭，则 Na_2SO_3 与 $NaHSO_3$ 混合缓冲溶液成为主要反应物。亚硫酸根−亚硫酸氢根（SO_3^{2-}-HSO_3^-）缓冲体系能够一定程度维持洗涤液的 pH 值在合适的范围内，因此，pH 值对洗涤塔内的化学反应平衡过程有着决定性的影响，其变化情况与循环液 SO_3^{2-} 浓度高度关联，是预处理系统控制的核心因素。同时，出口 SO_2 质量浓度是洗涤塔动力学过程的结果体现。因此，本文选择 pH 值和出口 SO_2 质量浓度作为预测的关键参数。

2 机理与数据融合驱动混合建模方法

2.1 建模方法

化学过程模拟大多都是以机理模型为主，机理模型能实现可解释性和高精度，但是稳健性不足。一方面很容易受到异常值或缺失值的干扰，化学过程模拟中依赖的许多参数难以在线测量，并且传感器的误差较大，容易故障，这些都会影响结果的可靠性。更重要的是，仿真需要依靠丰富的经验和对反应全过程的深刻理解，任何理解上的偏差都会严

重干扰仿真结果的准确性。所以对于一些难以估计的过程变量，采用经过约束的机器学习来回归预测，能保证结果的可靠性[15-16]。

为了同时保证模型可解释性和稳健性，本研究采用“机理与数据融合驱动”的混合建模方法，混合模型架构如图 2 所示。混合模型由机理模型和数据驱动模型构成，机理模型主要包括化学反应方程、热力学方程、动力学方程、质量和能量方程等，以有效体现洗涤塔内的整个反应过程为主。而数据驱动模型主要用来描述塔体的相关参数变化影响，如洗涤塔液位变化、pH 值的变化等过程，实际计算过程中，基于初始输入数据，采用机器学习算法进行数据驱动的回归预测。数据驱动输出的预测结果将作为输入值串联耦合到机理模型中参与计算，从而建立“机理与数据融合驱动”的混合模型。

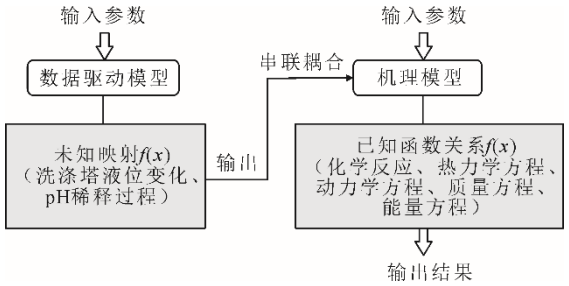


图 2 混合建模方法和架构
Fig.2 Hybrid modeling method and framework

2.2 模型评价指标

pH 值是循环液主要成分的重要量化指标，它既是保证预处理系统中 SO_2 去除效果和决定碱液添加量的关键控制参数，也是过程模拟准确性和可靠性的重要表征。因此，对 pH 值和出口 SO_2 质量浓度的模拟和预测非常重要。

为了定量评价模型的预测性能，采用均方根误差δ_{RMSE}（root mean square error）、平均绝对百分比误差δ_{MAPE}（mean absolute percentage error，MAPE）、相关系数 C_{orr}（correlation coefficient）作为评价指标[17]，评估预测值与实际值的一致性。均方根误差和平均绝对百分比误差的值越小，表明模型预测值越接近实际值，相关系数越接近 1 说明模型越能预测真实趋势。3 种评价指标的计算公式为：

$$\delta_{\mathrm{RMSE}}=\sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\hat{y}_i-y_i)^2} \tag{6}$$

$$\delta_{\mathrm{MAPE}}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left|\frac{\hat{y}_i-y_i}{y_i}\right| \tag{7}$$

$$C_{\mathrm{orr}}=\frac{\sum(y_i-\bar{y}_i)(\hat{y}_i-\bar{\hat{y}})}{\sqrt{\sum(y_i-\bar{y}_i)^2\sum(\hat{y}_i-\bar{\hat{y}})}} \tag{8}$$

式中：n 为样本总数；$\hat{y}_i$ 为预测值；y_i 为实际值；$\bar{y}_i$ 为实际值的平均值；$\bar{\hat{y}}$ 为预测值的平均值。

3 预处理系统混合建模

3.1 数据采集和预处理

某电厂碳捕集预处理系统在线监测数据采集时间间隔为 1 min，为提升实际数据质量，对在线监测数据进行预处理，以去除异常和停机等数据的干扰。对输入数据进行筛选，以线性插值替换异常值（主要由于传感器吹扫导致）和缺失值，优化后的数据进行标记并存档。

3.2 机理模型构建

3.2.1 机理模型模拟过程

机理模型的模拟过程如图 3 所示，输入的当前 t 时刻参数根据控制方程进行衡算，得到的结果再通过热力学-状态方程模型计算系统热力学变量以及各个物质的热力学变量，随后将热力学参数传递给化学动力学模型计算出各个物质的含量，含量计算完成后，意味着 t 时刻的所有参数均已确定。t 时刻状态的结果作为下一轮 t+1 时刻的输入进行下一轮计算，不断迭代直到系统达到稳态或者时间达到设定时间上限。模型随时间迭代计算直至稳态，或预设的时间上限。

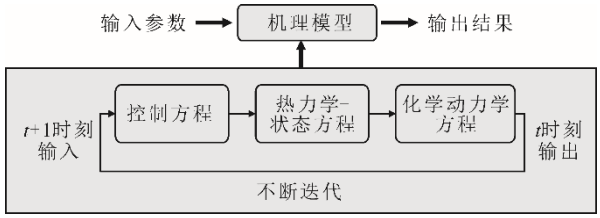


图 3 机理模型模拟过程示意
Fig.3 Schematic diagram of the simulation process of the mechanism model

3.2.2 控制方程

该电厂碳捕集预处理系统选用的是填料塔反应器，由于 SO_2 和 Na_2CO_3 的反应速率很快，为了简化反应，模拟时不考虑流体流动和质量浓度梯度的影响，因此，本次建模的反应器采用 0 维全混合模型，忽略空间变化，主要满足质量守恒、物料守恒和能量守恒方程，分别为：

$$\frac{\mathrm{d}m}{\mathrm{d}t}=\sum\nolimits_{\mathrm{in}}\dot{m}_{\mathrm{in}}-\sum\nolimits_{\mathrm{out}}\dot{m}_{\mathrm{out}} \tag{9}$$

$$\frac{\mathrm{d}(mY_{\mathrm{k}})}{\mathrm{d}t}=\sum\nolimits_{\mathrm{in}}\dot{m}_{\mathrm{in}}Y_{k,\mathrm{in}}-\sum\nolimits_{\mathrm{out}}\dot{m}_{\mathrm{out}}Y_{k,\mathrm{out}}+\dot{m}_{k,\mathrm{gen}} \tag{10}$$

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t}=\dot{Q}+\sum\nolimits_{\mathrm{in}}\dot{m}_{\mathrm{in}}h_{\mathrm{in}}-\sum\nolimits_{\mathrm{out}}\dot{m}_{\mathrm{out}}h_{\mathrm{out}} \tag{11}$$

式中：$\dot{m}_{\mathrm{in}}$ 为入口质量流量，kg/s；$\dot{m}_{\mathrm{out}}$ 为出口质量流量，kg/s；$Y_{k,\mathrm{in}}$ 为入口 k 物质的质量分数；$Y_{k,\mathrm{out}}$ 为出口 k 物质的质量分数；$\dot{m}_{k,\mathrm{gen}}$ 为生成 k 物质的质量流量，kg/s；h_{in} 为入口质量焓，kJ/kg；h_{out} 为出口质量焓，kJ/kg。

3.2.3 热力学−状态方程

热力学−状态方程指联立热力学参数方程与反应物质的状态方程（如理想气体模型、理想液体模型等）。依据热力学关系式，在给定的温度和压强条件下计算系统的热力学参数。通过将系统热力学参数按照各组分的质量分数进行分配，可以得到各组分的热力学参数。在此基础上，利用最小吉布斯自由能法[18-22]，可以计算出各物质的热力学参数以及平衡常数。

热力学参数方程和状态方程的类型繁多，通常是基于温度变化对热力学参数进行拟合而得到的曲线。机理建模中，针对不同的反应物质选择合适的热力学−状态方程，如表 1 所示。洗涤塔中的主要反应均在液相中进行，因此采用恒压和恒容模型。由于反应过程中并未涉及复杂的气相反应，且洗涤过程的温度在 50 ℃左右，压力维持在 1 个标准大气压左右，因此，模拟过程中未使用气体状态方程。

表 1 主要反应物质及其对应的热力学−状态方程

Tab.1 Primary reactive substances and their corresponding thermodynamic state equations

参与反应物质	对应热力学方程	对应状态方程
H_2O	NASA7[19]	IAPWS95[21]
Na^+，OH^-	Shomate[20]	恒容模型
H^+，O_2，SO_4^{2-}，H_2CO_3		
HCO_3^-，HCO_3^{2-}，H_2SO_3	恒压模型	恒容模型
HSO_3^-，SO_3^{2-}，SO_2,SO_2(qs)		

循环液中主要的反应离子为亚硫酸根簇，在模拟过程中，计算出 HSO_3^-和 SO_3^{2-}浓度在 0.001 5 mol/L 左右，结合折算出 Na^+浓度和循环液的浓度，计算出循环液离子强度约 0.006 mol/kg，远小于 0.01 mol/kg，因此循环液属于稀溶液范畴，离子间的影响可以被忽略[22]。

3.2.4 化学动力学方程

确定平衡常数之后，就得到了反应进行的最终程度，再联立所有化学反应速率方程（式(12)）进行动力学求解，化学速率常数根据阿伦尼乌斯方程（式(13)）计算。

$$r_{pj}=k_j\cdot\prod_i c_{r_{ji}} \tag{12}$$

$$k_j=A_j\cdot\mathrm{e}^{-\frac{E_j}{RT}} \tag{13}$$

式中：k_j 为第 j 个反应的反应速率常数；r_{pj} 为第 j 个反应的生成物反应速率，kmol/s；$c_{r_{ji}}$ 为第 j 个反应第 i 种反应物浓度，kmol/m^3；A_j 为第 j 个反应的反应因子；E_j 为第 j 个反应的活化能，J/mol。

3.2.5 机理模型计算

采用美国加州理工学院开发的 Cantera 化学反应计算库[23]，以该电厂碳捕集预处理系统的 DCS 在线数据及阀门启停信号为模型输入，构建机理模型并求解，预测洗涤塔出口循环液 pH 值。为了保证模型一致性，除了模型启动阶段，pH 值在之后的任意时段不会作为模型的输入。机理模型计算如图 4 所示，其中，烟气输入参数有入口烟气湿度 U_0、入口烟气干基流量 Q_0、入口烟气温度 T_0、入口烟气压力 p_0、入口烟气中 SO_2 浓度 C_0、入口烟气中 O_2 浓度 W_0；循环液输入参数有循环冷却器出口溶液温度 T_2、碳酸钠溶液浓度及 H_2SO_3、HSO_3^-、SO_3^{2-}浓度。

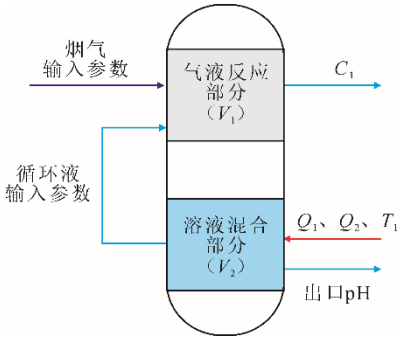


图 4 机理模型计算示意

Fig.4 Schematic illustration of the mechanism model computation

烟气预处理系统的 0 维全混合模型划分为气液反应部分（主要指气液接触区域，体积为 V_1）和溶液混合部分（主要指洗涤塔下方混合区域，体积为 V_2），所以体积作为模型中唯一的尺度变量，并采用浓度作为混合模型的物料输入形式。由于洗涤液循环系统的具体工作流量缺失，为了保证一致性，将烟气输入根据 V_1 换算为反应浓度。经过观察与分析，洗涤塔存在 2 个影响 pH 值的稀释过程，即烟气中水蒸气的冷凝和循环液的阶段性排放。它们直接导致洗涤塔溶液混合部分的体积变化，从而引起循环液中亚硫酸根簇的浓度和 pH 值的变化。因此，

要计算洗涤塔出口 pH 值，必须先确定稀释系数 D，然后再将稀释系数作用到循环液的反应离子中，计算公式为：

$$D=\frac{V_{2(t)}}{V_{2(t+1)}} \tag{14}$$

$$V_{2(t+1)}=V_{2(t)}+(Q_1-Q_2)\times 1 \tag{15}$$

$$c_{t,i}=D\cdot c_{t_0,i} \tag{16}$$

式中：D 为稀释系数；$V_{2(t)}$为 t 时刻对应的溶液混合部分体积，m³；$V_{2(t+1)}$为 t+1 时刻对应的溶液混合部分体积，m³；Q_1 为单位时间内烟气中水蒸气的冷凝量，m³/min；Q_2 为单位时间内循环液的排放量，m³/min；$c_{t_0,i}$ 为未经过稀释修正的混合液 i 反应物浓度，mol/L；$c_{t,i}$ 为经过稀释修正的混合液 i 反应物浓度，mol/L；1 为模型计算的时间间隔 1 min。

然而，冷凝量 Q_1 和循环液排放量 Q_2 无法进行实际测量。尝试通过软测量的方法来实现，但由于 Q_2 需要在 Q_1 的基础上进行计算，无法实现 2 个变量在时间轴上的同步，因此，通过建立数据驱动模型来计算。

3.3 数据驱动模型构建

3.3.1 数据驱动建模方法

本文中冷凝量 Q_1 和循环液排放量 Q_2 的计算所需参数量有限，盲目选择高参数模型容易导致过拟合[24]，因此采用决策树回归算法进行二次开发。决策树回归（decision tree regressor）是一种用于解决连续值预测问题的决策树模型，因其可解释性强和良好的稳健性，在工业界被广泛使用[25-26]。其核心思想是通过递归划分特征空间，使得每个叶节点内的样本目标值尽可能相似（通常用均值作为预测输出），并通过最小化均方根误差δ_{MSE}（mean squared error，MSE）损失函数来选择最优分裂。δ_{MSE} 的计算公式为：

$$\delta_{\mathrm{MSE}}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(\hat{y}_i-y_i)^2 \tag{17}$$

式中：n 为样本总数；$\hat{y}_i$ 为预测值；y_i 为实际值。

3.3.2 数据驱动模型计算

由于洗涤塔截面积不变，洗涤塔液位的变化能直接反映出溶液混合部分的体积 V_2 的变化。通过观察排液泵的启停信号和液位高度的变化关系，发现洗涤塔液位上升过程主要是烟气冷凝的作用，下降过程则是冷凝和排放的共同作用，计算公式为：

$$\Delta H_1=\frac{Q_1\times\Delta t_1}{S} \tag{18}$$

$$\Delta H_2=\frac{(Q_1-Q_2)\times\Delta t_2}{S} \tag{19}$$

式中：ΔH_1 为液位上升过程中液位增加量，m；Δt_1 为液位上升过程对应的时间段，min；S 为洗涤塔截面积，m²；Q_1 为单位时间内烟气中水蒸气的冷凝量，m³/min；ΔH_2 为液位下降过程中液位增加量，m；Q_2 为单位时间内循环液的排放量，m³/min；Δt_2 为液位下降过程对应的时间段，min。

所以将数据集 X 分成液位上升（x_1）和下降两部分（x_2），先通过上升部分训练出冷凝作用的影响，再将冷凝量 Q_1 纳入下降部分的训练，得到循环液排放量 Q_2。

模型 1 用于计算冷凝量 Q_1，标签值为液位上升阶段根据液位差折算的循环液单位时间内体积增加量，则模型 1 可表示为 $Q_1=f(x_1, \Delta H_1, t_1)$。建立模型 2 用于计算循环液排放量 Q_2，标签值为液位下降阶段折算的循环液单位时间内体积增加量，则模型 2 可表示为 $Q_2=f(x_2, Q_1, \Delta H_2, t_2)$。$Q_1$ 和 Q_2 的模型计算如图 5 所示。

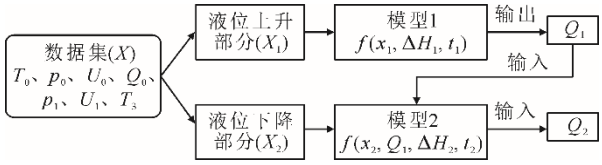


图 5 Q_1 和 Q_2 模型计算示意

Fig.5 Schematic illustration of the model computation process for Q_1 and Q_2

模型 1 和模型 2 均采用回归树模型，具体计算过程如图 6 所示。先是通过 t 时刻前的 5 000 个数据构建训练集，预测 t 时刻后 5 000 个数据，并采用滑动窗口方式连续训练与预测。在训练过程中，对于个别受噪声干扰较大的变量如 Q_0 和 U_0，采用指数滑动平均进行降噪处理。为避免大数值变量掩盖小数值变量的特征，对所有输入参数进行归一化处理。数据集进一步划分为训练集与测试集，通过网格搜索最小化均方根误差以获得最优模型参数组合，并在测试集上进行模型验证。

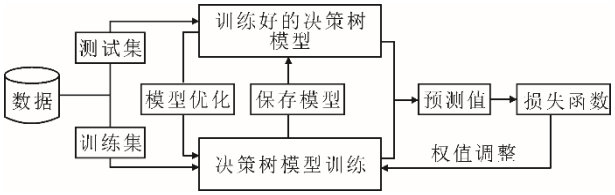


图 6 决策树模型计算过程

Fig.6 Computation process of the regression tree model

滑动过程中，模型 1 测试平均均方根误差为 0.011 3，训练平均均方根误差为 0.010 7；模型 2 的测试平均均方根误差为 0.012 0，训练平均均方根误差为 0.013 5。模型均未发生过拟合现象，且精度均达到要求。

4 混合模型计算和验证

通过数据驱动模型（模型 1 和模型 2）计算得到 Q_1 和 Q_2，从而得到稀释系数 D，再纳入机理模型中进行计算，得到洗涤塔出口循环液 pH 值和 SO_2 质量浓度模拟值。

4.1 pH 值

混合模型模拟 pH 值与实际 pH 值的对比如图 7 所示。由图 7 可见，混合模型模拟的 pH 值能够紧跟实际 pH 值的变化，两者在正常工作范围的趋势吻合，在 pH 值低于 6.0 的异常工作范围依然保持敏感性，这说明模型具备稳健性。在接近 9 000 min 的模拟时间内，从模型的评价指标中得出均方根误差为 0.185，平均绝对百分比误差为 1.6%，C_{orr} 为 0.85，模拟结果与实际结果的趋势吻合度较高，说明模型可靠性较好。

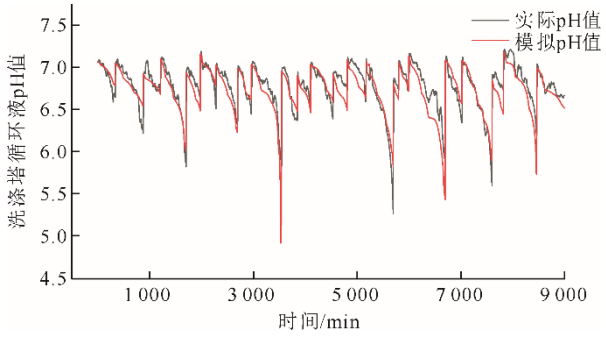


图 7 洗涤液 pH 模拟值与实际值对比

Fig.7 Comparison between the simulated and actual pH values for the washing solution

4.2 SO_2 质量浓度

针对 SO_2 的模拟结果，从混合模型的评价指标中得出均方根误差为 0.197，平均绝对百分比误差为 36.1%，C_{orr} 为 0.80。上述指标整体低于模型对 pH 值预测的效果，主要归因于当前机组已完成超低排放改造，导致 SO_2 实际排放量已普遍低于监测传感器的方法检出限。在此低质量浓度区间内，传感器输出信号受噪声干扰显著，导致噪声幅值高于真实信号，表现为信噪比恶化。具体而言，实测 SO_2 质量浓度的相对标准偏差（RSD）达 2.15（>1），进一步验证了噪声对信号的显著掩盖效应。尽管如此，C_{orr} 仍维持在 0.80 左右，表明模型对 SO_2 出口质量浓度变化趋势的捕捉仍具备一定的可靠性。

混合模型模拟 SO_2 质量浓度与实际 SO_2 质量浓度的对比情况如图 8 所示。由图 8 可见，在该时间段存在一次异常工况，实际 SO_2 质量浓度骤升至 1.5 mg/m³，而模型同步预测的峰值为 4.6 mg/m³，虽绝对幅值存在偏差，但异常点被精准锁定。而对应时段的实际和模拟 pH 值也同步出现显著变化，进一步证实模型对异常扰动的高敏感度。上述结果表明，即便在极端条件下，混合模型仍能有效捕捉洗涤塔动力学的非线性响应，具备可靠的异常工况识别能力。对于正常工况，图 8 显示模拟与实际值在变化趋势上高度一致，验证了模型具备良好的可靠性。

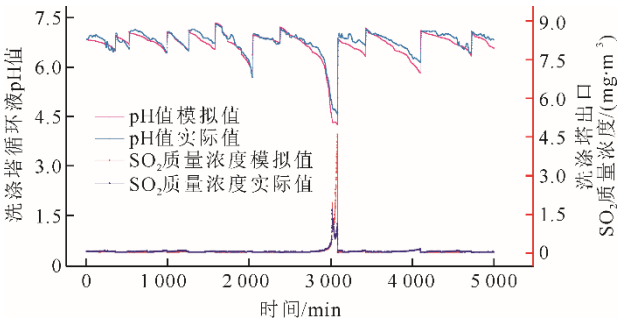


图 8 出口 SO_2 质量浓度和循环液 pH 值模拟值与实际值对比

Fig.8 The simulated and actual outlet SO_2 mass concentrations and pH values of the washing tower

4.3 异常工况模型检验

为验证混合建模策略的有效性，本文选取图 8 所示的极端工况，系统对比了实测数据、混合模型模拟结果，以及仅扣除排液稀释效应、同时扣除排液与冷凝稀释效应 2 种“部分修正”的情景。图 9 与图 10 分别为稀释效应对模拟循环液 pH 值及出口 SO_2 质量浓度的影响。

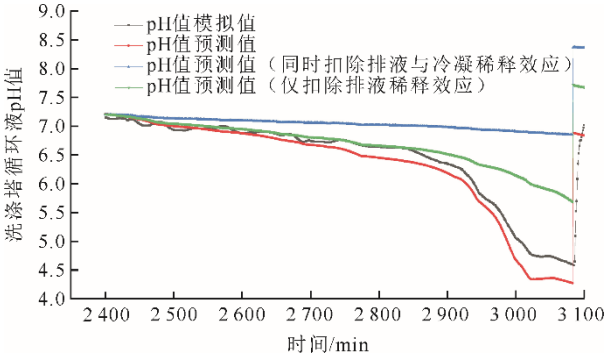


图 9 稀释效应对模拟循环液 pH 值的影响

Fig.9 Influence of dilution effect on simulated pH value of the washing solution

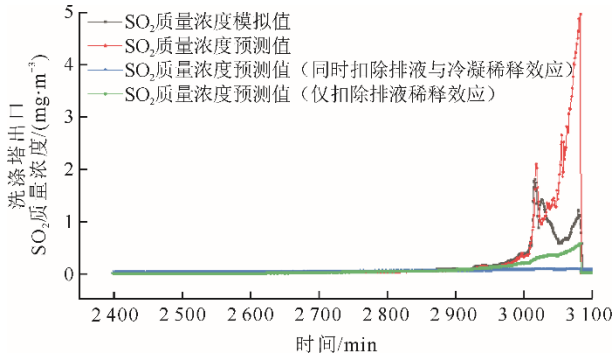


图 10 稀释效应对模拟出口 SO_2 质量浓度的影响

Fig.10 Influence of dilution effect on simulated outlet SO_2 mass concentration

由图 9 与图 10 可见，凡未充分考虑冷凝稀释的模型均无法再现异常工况，且与实测值存在量级性偏差。鉴于该工况时段烟气含湿量在 10%~11%之间，产生的大量冷凝水导致洗涤液碱度被急剧稀释。上述比对不仅确证了混合建模的必要性，也揭示了冷凝水量作为关键隐式变量在洗涤塔稳定运行中的决定性作用。

5 敏感性分析

为确定洗涤塔系统性能的核心影响因素，本研究基于其数学模型开展敏感性分析，重点考察入口烟气温度、液气比与碱液添加量 3 个关键操作变量。对所选参数的原始数据施加特定倍率的扰动，通过模型计算结果来评估各个参数对洗涤塔的影响。

5.1 入口烟气温度

通过调整入口烟气温度为基准温度的±5 ℃和±10 ℃做敏感性分析，结果如图 11 和图 12 所示。由图 11 与图 12 可见，随着入口烟气温度的升高，出口 SO_2 质量浓度显著上升，同时洗涤塔循环液 pH 值有所下降。这一变化趋势与工程实际高度吻合，其主要原因在于碱液吸收 SO_2 是一个放热过程，温度升高促使反应逆向进行，同时降低了 SO_2 在液相中的溶解度[27]。

5.2 液气比

通过调节循环液流量，将液气比控制在 1.0~5.0 L/m³，其对出口 SO_2 质量浓度的影响如图 13 所示。由图 13 可见，随着液气比的提高，出口 SO_2 质量浓度呈指数级下降，并在液气比为 3.0 L/m³ 时趋于饱和。具体而言，当液气比从 1.0 L/m³ 增至 2.0 L/m³ 时，SO_2 质量浓度下降了 63%。在液气比为 2.0 L/m³ 时，吸收过程已达到饱和点；当液气比超过 2.0 L/m³ 后，出口 SO_2 质量浓度变化趋于平缓，如图 13 中曲面平滑部分所示。实际运行中采用的液气比为 2.8 L/m³，可考虑适当降低碱液循环量，将液气比调整至 2.0 L/m³，以优化运行效率。

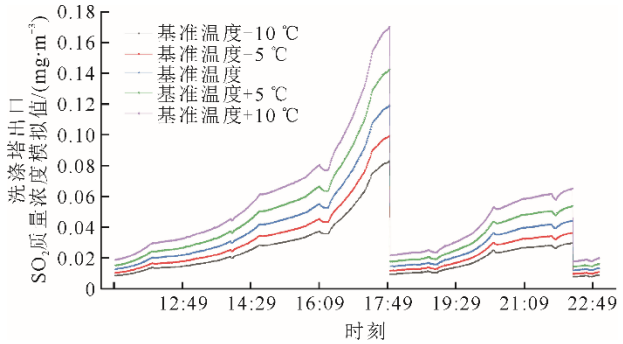


图 11 温度对出口 SO_2 质量浓度的影响

Fig.11 Effect of temperature on the outlet SO_2 mass concentration

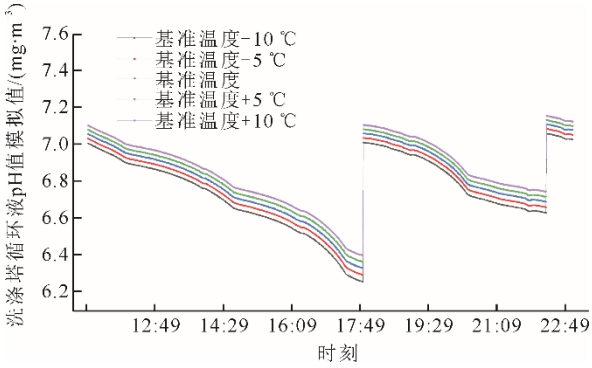


图 12 温度对循环液 pH 值的影响

Fig.12 Effect of temperature on pH value of the circulating liquid

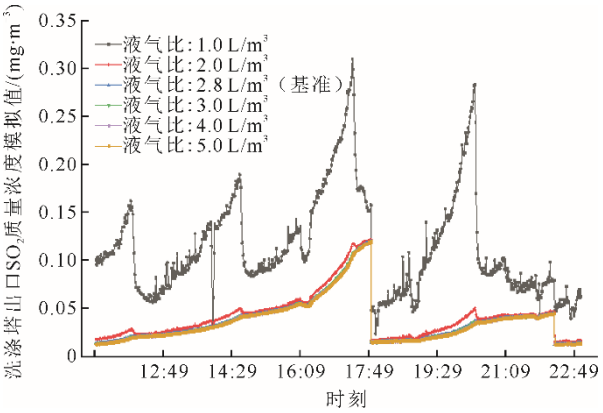


图 13 液气比对出口 SO_2 质量浓度的影响

Fig.13 Effect of liquid-to-gas ratio on the outlet SO_2 mass concentration

5.3 碱液添加量

液气比表征洗涤塔传质能力，而碱液添加量则直接决定 SO_2 化学吸收程度。进行碱液添加量的敏感性分析，图 14 和图 15 分别为碱液添加量对出口 SO_2 质量浓度和循环液 pH 值的影响。由图 14 和

图 15 可见：当碱液添加量减少至原来的 0.9~0.5 倍时，由于碱液吸收能力不足，出口 SO_2 质量浓度显著上升；同时，系统 pH 值呈线性降低趋势，但下降幅度较为平缓。

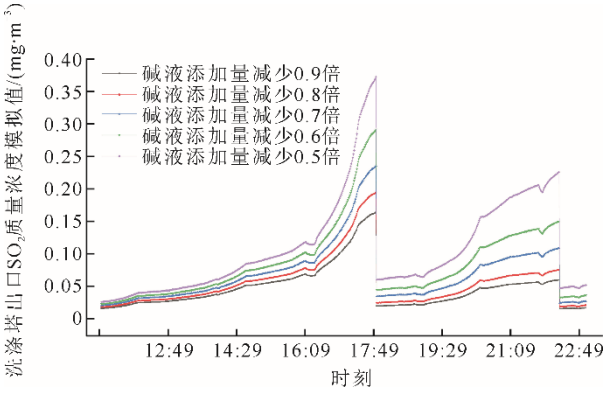


图 14 碱液添加量对出口 SO_2 质量浓度的影响
Fig.14 Effect of alkali feed rate on the outlet SO_2 mass concentration

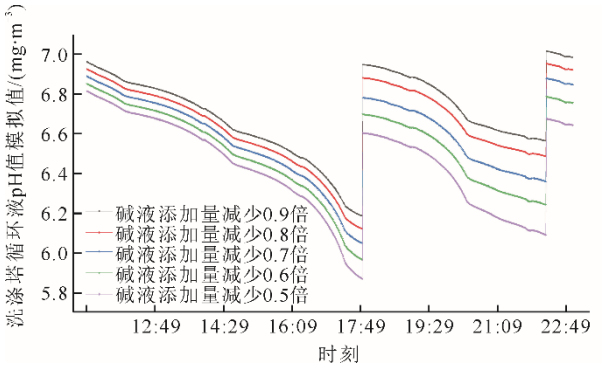


图 15 碱液添加量对循环液 pH 值的影响
Fig.15 Effect of alkali feed rate on pH value of the circulating liquid

6 结　论

本文提出了一种机理与数据融合驱动的混合建模方法，用于提升碳捕集预处理系统关键动力学参数的预测精度。结果表明，该模型对核心变量 pH 值的预测与实际值的拟合度较高，均方根误差为 0.185，平均绝对百分比误差值为 1.6%，C_{orr} 为 0.85。对 SO_2 质量浓度预测结果显示其对极端状况下的极值有较好体现，均方根误差和平均绝对百分比误差分别为 0.197 和 36.1%，C_{orr} 值为 0.80。

出口 SO_2 质量浓度随入口烟气温度升高显著增加，系统 pH 值相应降低，该现象与工程实践一致，主要源于 SO_2 碱液吸收为放热反应及其溶解度随温度上升而下降。提高液气比可显著降低出口 SO_2 质量浓度，液气比在 1.0~2.0 L/m³ 的范围内效果最为明显；超过 2.0 L/m³ 后效率提升趋于平缓。建议将液气比从 2.8 L/m³ 适度调整至 2.0 L/m³，可在维持脱硫效果的同时降低运行能耗。碱液添加量减少将导致出口 SO_2 质量浓度显著上升及 pH 值降低，故需保持适量添加以确保系统吸收能力与稳定运行。

相关模型的建立为碳捕集预处理系统的动力学仿真和模拟优化提供了支撑，为工艺改进与自动控制提供决策支持。为后续的碳捕集全流程动态仿真奠定可扩展基础，可实现跨工艺、跨场景的快速迁移和部署。

［参 考 文 献］

［1］ WANG P T, YANG B, LI J Q, et al. Carbon capture and storage in China's power sector: optimal planning under the 2 ℃ constraint[J]. Applied Energy, 2020, 263: 114694.1-114694.11.

［2］ 吴其荣, 陶建国, 范宝成, 等. 燃煤电厂开展大规模碳捕集的技术路线选择及经济敏感性分析[J]. 热力发电, 2022, 51(10): 28-34.
WU Qirong, TAO Jianguo, FAN Baocheng, et al. Technical route selection and economic sensitivity analysis of large-scale carbon capture in coal-fired power plant[J]. Thermal Power Generation, 2022, 51(10): 28-34.

［3］ 方梦祥, 王涛, 张翼, 等. 烟气二氧化碳化学吸收技术[M]. 北京: 化学工业出版社, 2023: 200.
FANG Mengxiang, WANG Tao, ZHANG Yi, et al. Chemical absorption technology of flue gas carbon dioxide[M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2023: 200.

［4］ 李卓. 混合建模方法研究及其在化学化工过程中的应用[D]. 杭州: 浙江工业大学, 2019: 1.
LI Zhuo. Research on hybrid modeling methods and their applications in chemical and chemical engineering processes[D]. Hangzhou: Zhejiang University of Technology, 2019: 1.

［5］ 李晓光. 混合建模方法研究及其在化工过程中的应用[D]. 北京: 北京化工大学, 2008: 1.
LI Xiaoguang. Research on hybrid modeling methods and their applications in chemical processes[D]. Beijing: Beijing University of Chemical Technology, 2008: 1.

［6］ ZHUANG Y L, LIU Y X, AHMED A, et al. A hybrid data-driven and mechanistic model soft sensor for estimating CO_2 concentrations for a carbon capture pilot plant[J]. Computers in Industry, 2022, 143(1): 103747.

［7］ 邱韬, 刘祎, 徐胜朝, 等. 基于预测控制的脱硫系统 pH 值控制方法研究[J]. 工业控制计算机, 2021, 34(10): 35-37.
QIU Tao, LIU Yi, XU Shengzhao, et al. Research on pH control method of desulfurization system based on predictive control[J]. Industrial Control Computer, 2021, 34(10): 35-37.

［8］ XU Y, ZENG X, BERNARD S, et al. Data-driven prediction of neutralizer pH and valve position towards precise control of chemical dosage in a wastewater treatment plant[J]. Journal of Cleaner Production, 2022, 348: 131360.

［9］ WANG Y, CHEN X, ZHAO C. A data-driven soft sensor model for coal-fired boiler SO_2 concentration prediction with non-stationary characteristic[J]. Energy, 2024, 300:

131522.
[10] LIU Y, ZHANG X, SHEN Y. Technology-driven carbon reduction: analyzing the impact of digital technology on china's carbon emission and its mechanism[J]. Technological Forecasting and Social Change, 2024, 200: 123124.
[11] 张梦轩, 刘洪辰, 王敏, 等. 化工过程的智能混合建模方法及应用[J]. 化工进展, 2021, 40(4): 1765-1776.
ZHANG Mengxuan, LIU Hongchen, WANG Min, et al. Intelligent hybrid modeling methods and applications for chemical processes[J]. Chemical Industry and Engineering Progress, 2021, 40(4): 1765-1776.
[12] ONDA K, TAKEUCHI H, MAEDA Y. The absorption of oxygen into sodium sulphite solutions in a packed column[J]. Chemical Engineering Science, 1972, 27(2): 449-451.
[13] ZHU J, ZHAO P, YANG S, et al. Continuous SO_2 absorption and desorption in regenerable flue gas desulfurization with ethylenediamine-phosphoric acid solution: a rate-based dynamic modeling[J]. Fuel, 2021, 92(2): 120263.
[14] EBRAHIMI S, PICIOREANU C, KLEEREBEZEM R, et al. Rate-based modelling of SO_2 absorption into aqueous $NaHCO_3/Na_2CO_3$ solutions accompanied by the desorption of CO_2[J]. Chemical Engineering Science, 2003, 58(16): 3589-3600.
[15] BISHNU S K, ALNOURI S Y, AL-MOHANNADI D M. Computational applications using data driven modeling in process systems: a review[J]. Digital Chemical Engineering, 2023, 8: 100111.
[16] WU X, WANG M, LIAO P, et al. Solvent-based post-combustion CO_2 capture for power plants: a critical review and perspective on dynamic modelling, system identification, process control and flexible operation[J]. Applied Energy, 2020, 257: 113941.
[17] 李瑞连, 曾德良, 张光明, 等. 基于机理和数据混合模型的 SD-WFGD 系统 SO_2 浓度动态预测[J]. 动力工程学报, 2024, 44(7): 1118-1128.
LI Ruilian, ZENG Deliang, ZHANG Guangming, et al. Dynamic prediction of SO_2 concentration in SD-WFGD system based on hybrid mechanistic and data-driven model[J]. Journal of Chinese Society of Power Engineering, 2024, 44(7): 1118-1128.
[18] WHITE W B, JOHNSON S M, DANTZIG G B. Chemical equilibrium in complex mixtures[J]. Journal of Chemical Physics, 1958, 28(5): 751-755.
[19] MCBRIDE B J, ZEHE M J, GORDON S. NASA glenn coefficients for calculating thermodynamic properties of individual species: technical report NASA/TP-2002-211556[R]. National Aeronautics and Space Administration, 2002: 1.
[20] National Institute of Standards and Technology. NIST chemistry WebBook[EB/OL]. (2024-01-22) [2025-04-19]. https://webbook.nist.gov/chemistry/.
[21] WAGNER W, PRUß A. The IAPWS formulation 1995 for the thermodynamic properties of ordinary water substance for general and scientific use[J]. Journal of Physical and Chemical Reference Data, 2002, 31(2): 387-535.
[22] SKOOG D A, WEST D M, HOLLER F J, et al. Fundamentals of analytical chemistry[J]. 9th ed., international ed. Analytical and Bioanalytical Chemistry, 2013, 405(25): 7903-7904.
[23] GOODWIN D G, MOFFAT H K, SPETH R L. Cantera: an object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes[J]. Zenodo, 2018.
[24] NEYSHABUR B, LI Z, BHOJANAPALLI S, et al. Towards understanding the role of over-parametrization in generalization of neural networks[J]. Statistics， arXiv preprint arXiv: 2018, 1805: 12076.
[25] KOTSIANTIS S B. Decision trees: a recent overview[J]. Artificial Intelligence Review, 2013, 39(4): 261-283.
[26] RAHUL S, GUPTA K N, DUTTA N N. Performance assessment of ensemble decision trees-based fault detection system in a chemical process[J]. International Journal of Applied Engineering Research, 2018, 13(9): 7190-7196.
[27] 苏翔鹏, 刁永发, 杨青杰. 基于 RBF 神经网络的双碱法脱硫塔 SO_2 排放量预测方法[J]. 热力发电, 2017, 46(10): 58-63.
SU Xiangpeng, DIAO Yongfa, YANG Qingjie. Prediction of SO_2 emission from dual alkali desulfurization tower based on RBF neural network[J]. Thermal Power Generation, 2017, 46(10): 58-63.

（责任编辑　杜亚勤）