

生物气化制绿色甲醇工艺的 AI 优化功能及其工程应用

杨铭枢 谭森丹 黄雄

茂名市第二职业技术学校

DOI:10.32629/jsse.v4i4.21719

[摘要] 绿色甲醇是航运燃料和化工原料低碳转型的重要选项,生物质气化合成路线因原料来源广、碳减排潜力大而受到持续关注。该工艺链条长、耦合强,原料性质波动频繁,传统依赖人工经验的操作方式难以维持装置在最优区间运行。本文围绕AI优化功能在生物气化制绿色甲醇工艺中的应用展开分析:首先梳理工艺流程及其优化难点,随后给出一个由数据层、模型层和决策控制层构成的AI优化体系架构,并结合公开研究与工程实践,分别讨论原料波动感知与配伍优化、气化操作参数寻优、合成气氢碳比调节、催化剂性能预测、设备故障诊断以及数字孪生协同优化等六类典型功能的实现方式和应用效果。已有研究表明,机器学习模型对合成气组分和甲醇收率的预测精度普遍可达 R^2 不低于0.96,气化温度、水蒸气与生物质配比等关键参数的寻优结果与机理模拟吻合良好。AI优化功能可将装置运行从“事后纠偏”转变为“事前预测、实时寻优”,但目前仍受数据质量、模型外推能力和安全约束验证等因素制约。文章最后对该方向的发展趋势作出展望。

[关键词] 生物质气化; 绿色甲醇; 人工智能; 机器学习; 工艺优化; 数字孪生

中图分类号: TP181 文献标识码: A

AI-Based Optimization Functions for the Biomass Gasification to Green Methanol Process and Their Engineering Applications

Mingshu Yang Miaodan Tan Xiong Huang

Vocational and Technical School

[Abstract] Green methanol is an important option for the low-carbon transition of marine fuels and chemical feedstocks, and the biomass gasification route has drawn sustained attention because of its wide feedstock availability and large carbon reduction potential. This process involves a long and strongly coupled chain, and the frequent fluctuation of feedstock properties makes it difficult for conventional experience-based operation to keep the plant within its optimal region. This paper analyzes the application of AI-based optimization functions in the biomass-gasification-to-green-methanol process. The process flow and its optimization difficulties are reviewed first, and an AI optimization architecture composed of a data layer, a model layer and a decision-and-control layer is then presented. Drawing on published studies and engineering practice, six typical functions are discussed in turn: feedstock fluctuation sensing and blending optimization, optimization of gasifier operating parameters, syngas hydrogen-to-carbon ratio adjustment, catalyst performance prediction, equipment fault diagnosis, and digital-twin-based coordinated optimization. Reported results show that machine learning models generally predict syngas composition and methanol yield with R^2 no lower than 0.96, and the optimized values of key parameters such as gasification temperature and steam-to-biomass ratio agree well with mechanistic simulation. AI-based optimization can shift plant operation from after-the-fact correction to predictive, real-time optimization, although data quality, model extrapolation capability and safety-constraint validation remain limiting factors. Development trends of this field are outlined at the end of the paper.

[Key words] biomass gasification; green methanol; artificial intelligence; machine learning; process optimization; digital twin

1 引言

甲醇是用途最广的基础化工原料之一,也是近年来增长最快的船用替代燃料。全球甲醇年产能已超过1.7亿t,其中约三分之二仍以天然气为原料,其余主要来自煤。化石路线的碳排放强度偏高,煤制甲醇每吨产品的二氧化碳排放可达3t左右,这与化工和航运业的减排目标存在直接冲突。国际可再生能源署(IRENA)在《可再生甲醇创新展望》中将生物质路线和绿氢耦合二氧化碳路线并列为可再生甲醇的两条主要技术路径,其中生物质气化路线可以利用秸秆、林业剩余物等低值资源,全生命周期碳排放远低于化石路线,被普遍认为是近期最具产业化潜力的方向。我国每年可利用的生物质资源量约相当于4.6亿t标准煤,仅秸秆年产量就超过8亿t,原料基础并不薄弱。

问题在于,生物气化制甲醇并不是一条“好走”的工艺路线。从原料预处理、气化、净化、变换补氢到甲醇合成与精馏,整个流程包含十几个相互耦合的单元,任何一个单元的波动都会沿流程向下传递。生物质原料本身又不是标准化商品:不同季节、不同来源的秸秆在含水率、灰分、碱金属含量上差异明显,气化炉的出气组成随之波动,下游净化和合成单元不得不频繁调整。依靠操作人员经验盯住几十个关键参数,很难让装置长时间停留在最优操作区间,多数装置的实际运行点都留有5%以上的优化余量。

人工智能技术的成熟为改变这种状况提供了条件。近五年,机器学习在气化建模、合成气品质预测、催化剂寿命估计等环节的研究明显增多。Fózer等用人工神经网络建模水热气化过程,对燃气产率和组成的预测精度达到 R^2 不低于0.965,并把模型输出接入Aspen Plus流程模拟完成生物甲醇的全流程评估。Salisu等在稻壳与塑料共气化制甲醇研究中对比了响应面法和神经网络-遗传算法组合,后者预测精度的 R^2 超过0.99,给出的最优甲醇收率为0.6 kg/kg原料。这些结果说明,数据驱动模型有能力以较低计算成本逼近复杂的气化-合成行为,具备了走向工程应用的基础。

本文围绕AI优化功能在生物气化制绿色甲醇工艺中的应用进行系统分析。文章先梳理工艺流程与优化难点,再给出AI优化功能的体系架构,随后按应用场景逐一讨论六类典型功能的实现方式与效果,最后归纳当前存在的问题并展望发展方向。需要说明的是,文中涉及的工程数据除注明出处的文献值外,其余来自公开示范装置的统计范围和行业通行经验值,用于说明量级而非指代某一具体项目。

2 工艺流程与优化难点

要讨论优化,先得说清楚这条工艺长什么样、难在哪里。本节先按物料流向梳理主流程,再归纳操作优化层面的实际困难。

2.1 生物气化制绿色甲醇的工艺链条

生物气化制甲醇的主流程可以划分为五个环节。第一是原料预处理,包括破碎、干燥和成型,目标是把含水率降到气化炉允许的范围并稳定供料。第二是气化,生物质在气化炉内与气化剂(空气、富氧或水蒸气)反应生成以 CO 、 H_2 、 CO_2 、 CH_4 为主的

粗合成气,反应温度通常在750~900℃之间,气流床路线则更高。第三是净化,脱除焦油、硫化物、氯化物和粉尘,这一步直接关系到下游合成催化剂的寿命,因为铜基催化剂对硫的耐受极限在 0.1×10^{-6} 量级。第四是气体调节,通过水蒸气变换调整氢碳比,或引入绿电电解水制取的氢气补氢,使合成气模数 $M=(\text{H}_2-\text{CO}_2)/(\text{CO}+\text{CO}_2)$ 接近2.05~2.1的理想值。第五是甲醇合成与精馏,合成气在5~10 MPa、220~280℃条件下经铜基催化剂反应生成粗甲醇,再精馏得到产品。

这条路线与传统煤气化制甲醇的最大区别在于两点。其一,原料性质的离散性大得多。煤可以按牌号采购,品质相对稳定;生物质则随地域、季节、储存条件变化,同一台气化炉面对的可能是含水率从10%到30%不等的进料。其二,气化产气的氢碳比先天偏低。生物质气化合成气的 M 值通常只有1.0~1.5,不补氢就难以达到甲醇合成的化学计量要求,而补氢量和变换深度又直接影响全流程的碳利用率和经济性。有研究基于文献中的气化合成气数据训练机器学习模型后发现,气化剂种类是决定合成气组成的最重要特征,且多数生物质合成气需要补氢把 M 值提高到2.1左右才能获得理想的甲醇产量。

2.2 工艺优化面临的实际困难

从操作优化角度看,这套工艺至少存在四个棘手的特点。

变量多而耦合强。仅气化单元就有气化温度、气化剂配比、当量比、床层高度、进料速率等十余个可调变量,它们之间存在明显的交互作用。例如提高水蒸气配比有利于产氢,却会拉低炉温、增加焦油生成的风险。单变量试错在这种系统里基本失效。

机理模型不够用。气化涉及热解、部分氧化、还原等多个反应区,焦油生成和碱金属迁移的机理至今没有完全厘清,纯机理模型要么做了大量简化、要么计算量大到无法在线使用。Aspen Plus一类的流程模拟工具适合离线分析,却很难直接嵌入实时控制回路。

在线测量有缺口。合成气组分、焦油含量这类关键质量指标很难在线连续测量,色谱分析有几分钟到十几分钟的滞后,操作人员看到的往往是“过去时”的状态,无法据此做前瞻性调整。

原料端不可控。装置不能假设进料性质恒定,配方和掺混比例每天都在变,最优操作点随之漂移,固定参数表的运行方式注定偏离最优。

这四个特点叠加在一起,恰好构成了AI优化功能的用武之地:数据驱动建模可以绕开机理不完备的障碍,软测量技术可以补上在线检测的缺口,而优化算法擅长在多变量耦合空间里寻找可行且较优的操作点。

3 AI优化功能的体系架构

工程上可用的AI优化功能不是单个算法,而是一套分层体系。参考流程工业智能优化系统的通行做法,可以把生物气化制绿色甲醇装置的AI优化体系划分为三层,自下而上分别是数据层、模型层和决策控制层。

数据层负责把“原料-过程-产品”全链条的数据管起来。这一层对接DCS、在线分析仪和实验室信息管理系统,采集温度、压力、流量、组分等过程数据,同时录入原料的工业分析、元素分析和热值数据。生物质装置的数据治理比常规化工装置更麻烦,因为原料数据往往靠人工取样化验,频次低、口径杂,需要专门设计数据对齐和补缺策略,否则后续模型训练会被垃圾数据拖垮。工程实践中一个常见的教训是:模型本身并不差,但训练数据里混入了仪表故障时段的异常值,导致模型学到了错误的映射关系。

模型层是体系的核心,承载三类模型。第一类是数据驱动的预测模型,用神经网络、梯度提升树、支持向量机等算法建立操作变量与合成气品质、甲醇收率之间的映射,作为软测量和优化寻优的代理模型。第二类是机理-数据混合模型,把Aspen Plus流程模拟或动力学模型生成的数据与实测数据融合训练,既保留机理模型的外推能力,又用实测数据校正偏差。Salisu等采用的动力学模型耦合神经网络的方案就属于这一类,其集成模型对实验数据验证的均方根误差为2.31。第三类是状态诊断模型,包括催化剂活性衰减预测、设备健康度评估等,多基于长短期记忆网络或退化特征提取方法。

决策控制层把模型输出转化为可执行的操作指令。这一层包含优化求解(遗传算法、粒子群算法、贝叶斯优化等与代理模型配合寻优)、先进控制接口(与DCS/APC系统通信,下发设定值)以及安全约束校验三个模块。安全约束校验是化工场景特有的要求:任何优化建议在进入控制回路之前,都必须先过一遍约束检查,确认不会触碰温度上限、氧含量红线等安全边界。没有这一层把关,再聪明的优化算法也不能在化工装置上放手使用。

三层之间以数据流闭环衔接:数据层向上供数,模型层输出预测与优化建议,决策控制层下发指令并回收执行结果,执行结果又回流到数据层用于模型迭代。这个闭环能否持续运转,决定了AI优化功能是一次性的演示项目还是长期有效的生产工具。

4 典型AI优化功能与应用

在上述体系架构下,AI优化功能沿工艺链条展开,覆盖从原料进厂到全流程协同的六个环节。以下按功能场景逐一说明其技术实现与应用效果。

4.1 原料波动感知与配伍优化

生物质装置的优化起点在原料端。进厂原料按批次建立数据库后,近红外快速检测可以在几分钟内给出含水率、灰分和热值的估计值,替代滞后数小时的实验室化验。在此基础上,配伍优化模型以气化炉稳定运行和合成气品质为目标,反算不同来源原料的掺混比例,指导料场配料。这一功能的价值在原料杂、来源多的装置上尤为明显:配料方案从凭经验拍脑袋变成有数据支撑的计算结果,气化炉进气性质的波动幅度可以收窄一半左右,下游单元的调节压力随之减轻。

4.2 气化操作参数寻优

气化单元是全流程的“源头”,其操作参数直接决定合成气

组成和冷煤气效率。AI寻优的通行做法是先用Aspen Plus或实验数据训练代理模型,再用优化算法在约束空间内搜索最优参数组合。Dincer等对太阳能塔辅助的生物质气化制甲醇系统采用了径向基神经网络,以水蒸气/生物质比和气化温度为输入预测甲醇、甲烷和氢气产率,甲醇预测的最小均方误差为0.0053,系统能量效率和烟效率分别达到43%和61.3%。Salisu等工作给出了更具体的寻优结论:气化温度850℃、水蒸气/进料比0.96~1.73、合成温度234~255℃、压力11.4~15.0 MPa的组合下,甲醇收率可达0.6 kg/kg原料,且神经网络-遗传算法组合在多数变量上的寻优表现优于响应面法。这类功能落地后,气化炉的操作参数从按固定规程设定转为随原料性质动态寻优,冷煤气效率一般能获得2~4个百分点的提升。

4.3 合成气氢碳比调节与补氢优化

氢碳比偏低是生物质路线的结构性短板,补氢还是加深变换,两者在碳利用率和成本上的取舍并不直观。AI优化功能在此处的作用是把“调多少”变成可计算的问题:以合成气模数M逼近目标值、全流程碳排放和单位甲醇成本为多目标,模型根据实时的气化出气和绿电价格信号,动态给出变换深度与补氢量的组合建议。Fózer等的生命周期评估显示,用波动性可再生电力制氢对水热气化合成气补氢,生物甲醇的温室气体减排量可达到每吨甲醇-725 kg二氧化碳当量,说明补氢策略本身就是影响产品碳属性的关键变量。在绿电价格随时段波动的电力市场环境下,这一功能与电力交易策略联动,还能进一步摊薄补氢成本。

4.4 催化剂性能预测与合成优化

铜基甲醇合成催化剂的活性随运行时间衰减,且对硫、氯中毒高度敏感。催化剂一旦失活,更换一次的直接成本和停车损失都不是小数目,因此“什么时候换、现在该怎么跑”是值得用模型回答的问题。催化剂性能预测模型以运行时长、入口温度、合成气净化后硫含量、床层热点温度历史等为特征,预测剩余活性和失活速率,进而反推当前阶段的最优合成温度和空速,让装置在催化剂寿命周期内始终贴近活性-稳定性的平衡点运行。与按固定周期更换的做法相比,按预测状态管理的策略通常能把催化剂的有效使用寿命延长一到两成,同时避免活性末期的低效运行拖低全厂收率。

4.5 设备故障诊断与预测性维护

气化炉耐火衬里、高温过滤器、合成回路压缩机等关键设备的故障会迫使整条产线停车。基于振动、温度、压力等信号的健康度模型可以识别异常模式并提前预警,把检修从事后抢修转为计划性维护。这一功能在技术上与流程工业其他装置的预测性维护并无本质差别,但在生物质场景下有一个特殊的适配点:原料中的碱金属和氯会加速炉内结渣和高温腐蚀,设备劣化速率与原料品质强相关,因此健康度模型必须把原料数据纳入特征集,否则对结渣风险的预测会系统性乐观。把原料-工艺-设备三条数据链打通之后,结渣倾向、过滤器压差上升速率这类过去靠老师傅经验判断的问题,可以用模型给出量化的预警时间窗。

表 1 对六类功能的实现方式与典型效果作了汇总

功能场景	主要算法 / 技术	优化目标	典型效果(量级)
原料感知与配伍	近红外检测、优化配比模型	稳定进料性质	进料波动幅度收窄约 50%
气化参数寻优	神经网络 + 遗传算法 / 贝叶斯优化	冷煤气效率、合成气品质	效率提升 2~4 个百分点
氢碳比调节	多目标优化、代理模型	碳利用率、补氢成本	减排潜力达 ~725 kg CO ₂ /t (文献值)
催化剂管理	时序预测网络	活性维持、寿命延长	寿命延长 10%~20%
故障诊断	健康度评估模型	非计划停车减少	预警时间窗以天计
数字孪生协同	混合建模、全局优化	全流程能耗	综合能耗降低 3%~6%

4.6 数字孪生与全流程协同优化

前述各功能解决的是单元级问题,而单元之间的相互影响需要一个全局视角来协调。数字孪生为此提供了载体:以流程模拟为骨架、数据驱动模型为补充,构建与物理装置同步运行的虚拟镜像,在其上验证优化方案后再下发执行。Nowak等报道的甲醇合成小型装置与数字孪生联合研究验证了这条路径的可行性,实验结果与孪生模型吻合良好,并直接用生物质气化合成气开展了进料适应性评估。对生物气体制甲醇装置而言,数字孪生的实用价值主要体现在两个方面:一是工况切换(如原料大幅变更、负荷调整)前先在孪生体上预演,把试错成本从物理装置转移到虚拟空间;二是把各单元的局部优化器统一到一个目标函数下协调,避免气化最优但全流程不最优的“局部陷阱”。全流程协同优化投运后,装置综合能耗的改善幅度通常在3%~6%区间,这个数字看起来不大,折算到年产10万t级装置上却是可观的成本和排放差异。

5 存在问题与发展趋势

尽管研究和示范进展可观,AI优化功能在这一领域的规模化应用仍有几道坎要过。

数据基础是第一道坎。生物质原料的数据链条短、频次低,不少装置的历史数据存在缺失、口径不一的问题,而数据驱动模型对训练数据的数量和质量都相当敏感。模型在训练分布内表现良好,一旦原料品种超出训练范围,外推误差就会迅速放大。机理-数据混合建模是目前公认缓解这一问题的方向,但混合模型的构建成本不低,需要在机理可信度和数据需求之间反复权衡。

安全验证是第二道坎。化工装置对操作变动天然谨慎,AI给出的优化建议如何证明安全、出了问题责任如何划分,目前缺

乏行业层面的标准做法。多数装置因此把AI系统定位为“建议级”而非“闭环级”,优化建议由操作人员确认后执行,这在一定程度上限制了优化功能的发挥空间,却是现阶段的现实选择。

经济性边界也需要冷静看待。AI系统的建设投入与装置规模相关,对小型生物质甲醇装置而言,3%~6%的能耗改善未必覆盖智能化改造的投入,这也是当前AI优化功能更多出现在10万t级以上项目中的原因。

往后看,三个趋势值得关注。其一,混合建模与数字孪生会继续融合,孪生体的精度和实时性提升后,闭环优化的安全论证将变得更容易。其二,绿氢耦合会重塑优化目标的结构,补氢策略与电力市场、碳市场的联动会让AI优化的目标函数从“单装置最优”扩展到“电-氢-醇系统最优”。其三,行业数据共享机制一旦建立,跨装置的原料-工艺知识可以迁移复用,新建装置的模型冷启动问题有望缓解。

6 结论

本文梳理了生物气体制绿色甲醇工艺的流程特点与优化难点,给出了数据层、模型层、决策控制层三层结构的AI优化功能体系,并逐一分析了原料配伍、气化寻优、氢碳比调节、催化剂管理、故障诊断和数字孪生协同六类应用场景。已有研究证据表明,机器学习模型能够以 R^2 不低于0.96的精度预测合成气组成和甲醇收率,寻优结果与机理模拟一致性良好;工程应用则在冷煤气效率、催化剂寿命和综合能耗等指标上带来2%~6%量级的改善。AI优化功能的价值不在于替代工艺知识,而在于把工艺知识从个人经验固化为可计算、可迭代的模型资产,让装置在原料持续波动的现实条件下始终保持接近最优的运行状态。数据质量治理、安全约束验证和中小装置的经济性,是下一阶段需要重点解决的问题。

[参考文献]

[1] International Renewable Energy Agency, Methanol Institute. Innovation outlook: renewable methanol[R]. Abu Dhabi: IRENA, 2021.

[2] Fózer D, Tóth A J, Varbanov P S, et al. Sustainability assessment of biomethanol production via hydrothermal gasification supported by artificial neural network[J]. Journal of Cleaner Production, 2021, 318: 128606.

[3] Salisu J, Gao N, Quan C, et al. Modeling of sustainable methanol production via integrated co-gasification of rice husk and plastic coupled with its prediction and optimization using machine learning and statistical-based models[J]. Journal of the Energy Institute, 2025, 120: 102029.

[4] Dincer M M, Kuran B, Öztürk Kırkar M. Exergy analysis and optimization of a solar and biomass-assisted methanol synthesis system using artificial neural networks[J]. Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization and Environmental Effects, 2026, 48(1).

[5] Nowak T A, Drochner A, et al. Development and validation of a laboratory-scale methanol synthesis mini-plant and digital twin simulation[J]. Chemie Ingenieur Technik, 2025.

[6] 王丁冉, 李博, 鲁仰辉, 等. 生物质绿色甲醇制备技术和产业化进展[J]. 洁净煤技术, 2025, 31(9): 33–49.

[7] 葛亚东, 袁壮, 张睿, 等. 生物质厌氧发酵-气化耦合处置过程模拟与碳效益评估[J]. 洁净煤技术, 2025, 31(9): 122–130.

[8] 杨世关, 赵佳乐, 张传昊, 等. 基于不同气化剂的生物质气化制氢工艺模拟[J]. 洁净煤技术, 2025, 31(9): 50–60.

[9] Basu P. Biomass Gasification, Pyrolysis and Torrefaction: Practical Design and Theory[M]. 2nd ed. Burlington: Academic Press, 2013.

[10] Bridgwater A V. Review of fast pyrolysis of biomass and product upgrading[J]. Biomass and Bioenergy, 2012, 38: 68–94.

[11] Li X, Zhong K, Feng L. Machine learning-based meta heuristic optimization of an integrated biomass gasification cycle for fuel and cooling production[J]. Fuel, 2023, 332: 125969.

[12] Ayodele B V, Mustapa S I, Kanthasamy R, et al. Modeling the prediction of hydrogen production by co-gasification of plastic and rubber wastes using machine learning algorithms[J]. International Journal of Energy Research, 2021, 45(6): 9580–9594.

[13] 国家发展改革委. 绿色低碳转型产业指导目录(2024年版)[Z]. 2024.

[14] Puig-Arnavat M, Bruno J C, Coronas A. Review and analysis of biomass gasification models[J]. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2010, 14(9): 2841–2851.

[15] Sansaniwal S K, Pal K, Rosen M A, et al. Recent advances in the development of biomass gasification technology: a comprehensive review[J]. Renewable and Sustainable Energy Reviews, 2017, 72: 363–384.

作者简介:

杨铭枢(1987–), 男, 汉族, 广东茂名人, 大学本科, 化学工艺讲师, 研究方向: 化学工程与工艺。