

УДК 665.6+66.092+004.942

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДА ОПОРНЫХ ВЕКТОРОВ ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ВЫХОДА ПРОДУКТОВ ГИДРОКРЕКИНГА

© 2019 г. К. Sharifi^{1, *}, А. Safiri¹, М. Haghghi Asl^{1, 2}, Н. Adib³, В. Nonahal¹

¹*Petroleum Refining Division, Research Institute of Petroleum Industry, Tehran, Iran*

²*Department of Engineering, Senior Process Engineer, South Pars Gas Complex, Assaluyeh, Iran*

³*School of Chemical Engineering, Amirkabir University of Technology (Tehran Polytechnic), Tehran, Iran*

*E-mail: sharifikh@ripi.ir

Поступила в редакцию 05.07.2017 г.

После доработки 15.04.2018 г.

Принята к публикации 15.10.2018 г.

В настоящей работе для прогнозирования выхода продуктов гидрокрекинга применяются метод опорных векторов (МОВ) и групповая кинетическая модель и используются данные, полученные на Тегеранском НПЗ, Иран. Для оценки поведения МОВ использовались некоторые ключевые параметры последнего, включая минимальный рассчитанный квадратичный коэффициент корреляции. Выходные переменные МОВ-модели оптимизировались для продуктов гидрокрекинга. Вычислены кинетические параметры и среднеквадратичные значения ошибок для 4-компонентных кинетических моделей. Средние квадраты ошибок (СКО) обучающей выборки для дизельной фракции, нефти и сжиженного нефтяного газа составили 0.179, 0.166 и 0.174, тестовой выборки – 0.164, 0.148 и 0.132 соответственно. На основе сравнения данных МОВ и ректификационной подсистемы Тегеранского НПЗ заключается, что МОВ можно использовать в качестве надежного и точного оценочного метода. Модели, оцененные таким образом, могут рассматриваться как ценные инструменты для оптимизации процессов, контроля, проектирования, выбора катализатора и лучшего понимания процесса.

Ключевые слова: гидрокрекинг, математическая модель, метод опорных векторов, кинетическое моделирование, облагораживание.

DOI: 10.1134/S002824211902014X

В связи с истощением источников ископаемого топлива и разработкой новых технологий извлечения и переработки тяжелых нефтяных остатков, добыча тяжелой нефти становится все более значимой, и ожидается, что к 2020 г. она достигнет величины 12.3 млн бар/сут. Гидрокрекинг обычно считается одной из наиболее эффективных технологий конверсии тяжелых остатков в более легкие и более ценные продукты, а также одной из наиболее привлекательных альтернатив для производства промежуточных дистиллятов из тяжелой сырой нефти и остатков. Важность этого процесса в последнее время возросла из-за необходимости переработки тяжелых нефтяных фракций [1, 2].

Гидрокрекинг обычно проводится в реакторе с псевдооживленным слоем катализатора под высоким давлением. Типичные реакции при гидрокрекинге: гидрирование ароматических соединений; дегидрирование циклоалканов в циклоалкены на металлических центрах и реакции крекинга; изомеризация на кислотных центрах бифункционального кислотно-металлического катализатора. По

своей природе гидрокрекинг является существенно экзотермическим процессом [3].

Типичное сырье гидрокрекинга – тяжелый атмосферный и вакуумный газойль, а также газойль каталитического или термического крекинга [4]. В процессе гидрокрекинга данные потоки конвертируются в продукты с меньшей молекулярной массой, прежде всего в нефть или более высококипящие дистилляты. В реакторе гидрокрекинга происходит одновременное удаление серы, азота, кислорода и олефинов. Диапазон рабочих условий реактора гидрокрекинга зависит от типа сырья и требуемых спецификаций продуктов и составляет в общем 280–475°C и 35–215 бар для температуры и давления соответственно. Для гидрокрекинга были разработаны различные технологические схемы – одноступенчатые, двухступенчатые и секционные. Различия между этими конфигурациями выражаются в частичной или полной конверсии сырья в более легкие продукты, в типе катализатора и селективности процесса по отношению к спецификациям конечных продуктов. На рис. 1 показана простая технологи-

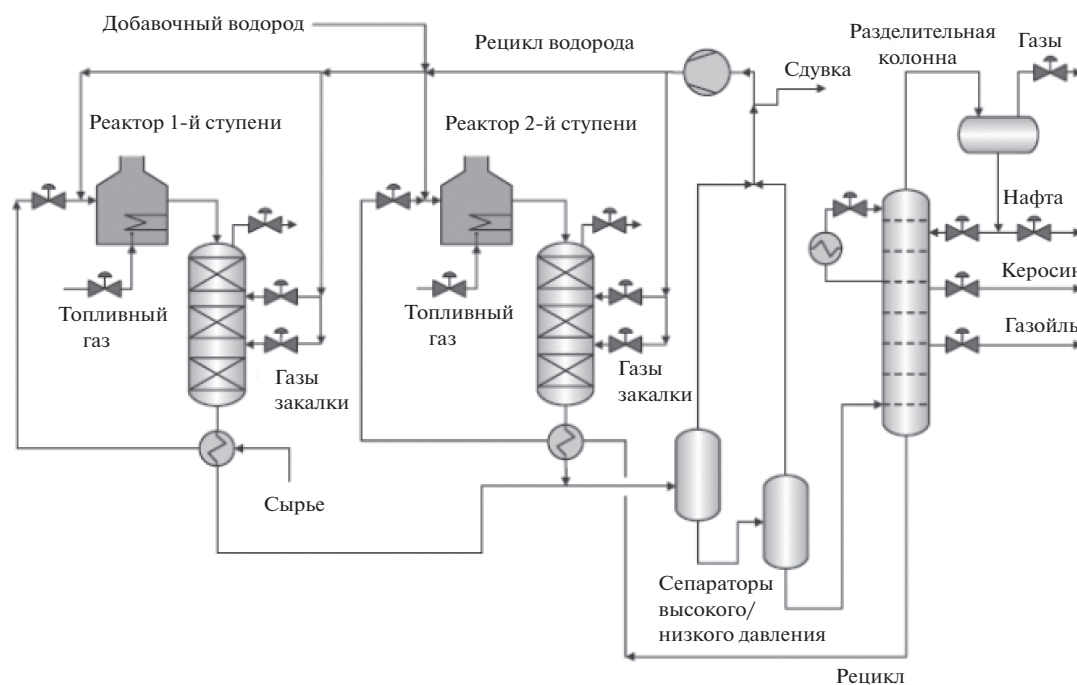


Рис. 1. Упрощенная технологическая схема установки гидрокрекинга.

ческая схема данного процесса. Согласно рис. 1, вначале смесь свежего сырья и рециркулированной непрореагировавшей фракции поступает в реактор в присутствии водорода. Свежий водород должен добавляться к водороду рецикла из-за расходования водорода в ходе гидрокрекинга. Отходящий поток реактора гидрокрекинга пропускается через сепараторы высокого и низкого давления, где водород выделяется и отправляется на рецикл. Далее, жидкие продукты направляются на ректификационные колонны, где конечные продукты и непрореагировавшая фракция разделяются [5].

Для идеального моделирования процесса гидрокрекинга следует учитывать различные реакции и механизмы. Однако практически, очень сложно отслеживать отдельные компоненты в ходе реакций. Полученные результаты не могут непосредственно использоваться инженерами для прогнозирования выхода продукта при различных условиях из-за приблизительной и весьма замысловатой модели. Кроме того, используемые модели обладают рядом обычно неизвестных физических параметров, которые присущи процессу и должны определяться с использованием какой-либо методики их оценки [6, 7].

Предпринимались значительные усилия по разработке моделей, основанных на базовых принципах, а также использующих наборы входных и выходных промышленных данных. Было доказано, что модели, основанные на детальных уравнениях баланса массы и энергии, очень сложны, осо-

бенно когда они связаны со вспомогательными процедурами оптимизации [8].

Разработка математической модели для прогнозирования значений выходных переменных как функции входных, таких, как свойства потока сырья, условия работы реактора и подсистемы ректификации установки гидрокрекинга, может быть очень полезной [9–11]. В качестве нового математического подхода для расчета/прогнозирования выхода продуктов установки гидрокрекинга был применен метод опорных векторов (МОВ).

В настоящей работе этот метод был использован для моделирования установки гидрокрекинга Тегеранского НПЗ. Свойства подачи, рабочие условия секций реактора и дистилляции установки гидрокрекинга были приняты в качестве входных, а выходы продукта — в качестве выходных параметров сети.

МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

МОВ как универсальный классификационный алгоритм на основе сети прямого распространения, основанный на статистической теории обучения и принципе минимизации структурных рисков, был впервые представлен Кортесом [12, 13]. Подход МОВ представляет собой контролируемый метод обучения с соответствующим алгоритмом для анализа данных и распознавания шаблонов данных ввода/вывода. Стратегия такого подхода — отображение входно-

го вектора в пространство признаков с высокой размерностью, которое соответствует ядру. Основные особенности МОВ включают [6]:

- возможность надежного обобщения даже в пространствах высокой размерности при условиях так называемой малой обучающей выборки. Другими словами, степень способности МОВ к обучению может быть независимой от размерности пространства признаков.

- достижение решения с глобальным оптимумом, так как МОВ сформулирован как квадратичная проблема программирования.

- возможность моделирования нелинейных функциональных взаимосвязей, которые трудно моделировать с применением других методов.

Уравнения МОВ получены на основе теории статистического обучения, разработанной Вапником [14]. Если рассмотреть обучающую выборку из N точек $\{x_k, y_k\}$, $k = 1, 2, \dots, N$, с входными данными $x_k \in R^n$ и соответствующими выходными данными $y_k \in R^n$ в пространстве признаков, то модель МОВ принимает следующий вид:

$$y(x) = \sum_{k=1}^N \alpha_k K(x, x_k) + b, \quad (1)$$

где N – количество входных данных с ненулевыми значениями множителей Лагранжа (α_i), b – смещение, y – выходной вектор. Нелинейная функция ядра $K(x, x_k)$ трансформирует входное пространство в более высокую характеристическую размерность, вычисляемую из скалярного произведения двух векторов x и x_k в допустимой области, которая строится скалярным произведением векторов $\Phi(x)$ и $\Phi(x_k)$ следующим образом [7]:

$$K(x, x_k) = \Phi(x)^T \Phi(x_k).$$

Для определения множителей Лагранжа (α_i) [15–17] решена следующая квадратичная задача программирования:

$$\omega(\alpha) = \sum_{i=1}^N \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \alpha_i \alpha_j y_i y_j K(x_i, x_j)$$

и

$$0 \leq \alpha_i \leq \gamma, \quad i = 1, \dots, N,$$

где γ – определяемый пользователем параметр регуляризации (см. ниже), который определяет компромисс между сложностью МОВ и количеством зависимых точек и поэтому обычно называется параметром регуляризации. Формулировка квадратичной оптимизации имеет единственное решение [18]. В целом, для достижения оптимального значения γ анализ МОВ определяется как ограниченная задача оптимизации [14, 16, 19, 20]:

$$\min_{\alpha, \beta, \xi_i, \xi_i^*} \frac{1}{2} \|\omega\|^2 + \gamma \sum_{i=1}^N (\xi_i, \xi_i^*)$$

при условиях $y_i - \omega^T x_i - \beta \leq \varepsilon + \xi_i, \quad \forall i = 1, \dots, N,$

$$\omega^T x_i + \beta - y_i \leq \varepsilon + \xi_i^*, \quad \forall i = 1, \dots, N,$$

$$\xi \geq 0, \quad \forall i = 1, \dots, N,$$

$$\xi_i^* \geq 0, \quad \forall i = 1, \dots, N,$$

где ε – предел точности, γ представляет собой параметр регуляризации, а ξ_i и ξ_i^* представляют собой фиктивные переменные с положительными значениями для обеспечения возможных ограничений. Сложность модели представлена первым членом целевой функции, тогда как второе слагаемое представляет допустимую погрешность или точность модели.

Смещение в уравнении (1) обычно определяется с использованием первичных ограничений:

$$b = -\left(\frac{1}{2}\right) \left[\text{Max}_{(i, y_i = -1)} \left(\sum_{j \in \{SV\}} y_j \alpha_j K(x_i, x_j) \right) \right] + \left[\text{min}_{(i, y_i = -1)} \left(\sum_{j \in \{SV\}} y_j \alpha_j K(x_i, x_j) \right) \right],$$

где m – число опорных векторов.

Кроме того, ядро радиальной базисной функции (РБФ) в данной работе применялось в следующей форме:

$$K(x, x_k) = \exp\left(\frac{-\|x_k - x\|^2}{\sigma^2}\right),$$

где σ – параметр ядра, используемый внешним алгоритмом оптимизации в ходе внутренних вычислений для МОВ.

В таком виде алгоритм МОВ использовали для разработки корректной модели оценки промышленных данных процесса гидрокрекинга. Входной слой соответствует конкретным свойствам входного потока, условиям работы реактора и секции ректификации установки, тогда как выходной слой связывается с выходами продуктов. Поэтому, чтобы предотвратить ошибку округления при расчетах по модели, все входные/выходные переменные процесса гидрокрекинга были нормализованы в диапазоне $[-1, +1]$. Уравнение (2) затем применялось к нормализованной выборке данных:

$$x_n = 2 \frac{x_i - x_{\min}}{x_{\max} - x_{\min}} - 1, \quad (2)$$

где x_n и x_i – масштабированные и фактические значения входных/выходных данных, а x_{\min} и x_{\max} – минимальные и максимальные наблюдае-

Таблица 1. Оптимизированные кинетические параметры и значения среднеквадратичной ошибки для 4-компонентной кинетической модели

Продукт	$K_0, \text{ч}^{-1}$	$E, \text{кДж/моль}$	СКО
Дизельная фракция	1.3618×10^{10}	19664.38	0.0252
Бензиновая фракция	3.068×10^{11}	52822.036	0.0086
Сжиженные газы (СГ)	1.225×10^{11}	20277.88	0.0091

мые значения в выборке, соответственно. Поскольку данные на входе/выходе модели находятся в нормализованном виде, выходные данные модели были пересчитаны к их фактическим значениям x , решая уравнение (2).

КЛАССИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ РЕАКЦИЙ ГИДРОКРЕКИНГА

Для моделирования промышленных данных была использована реакционная сеть с вовлечением четырех групп соединений:

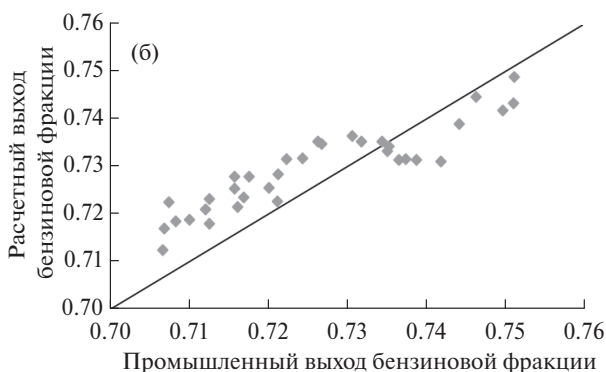
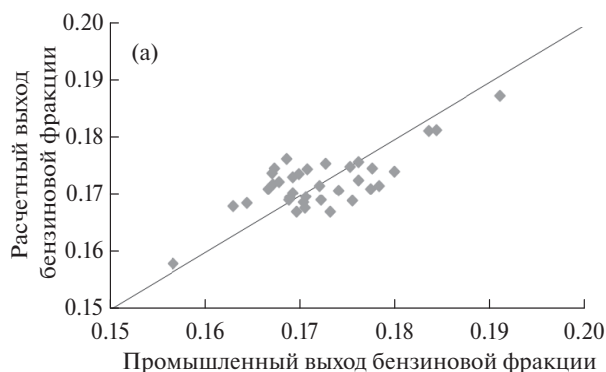
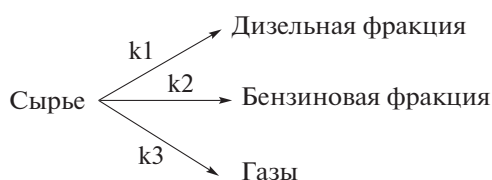


Рис. 2. Корреляционные диаграммы для выходов согласно 4-компонентной кинетической модели: (а) бензин, (б): дизельная фракция.

Для моделирования процесса гидрокрекинга использовалось уравнение материального баланса с учетом кинетики первого порядка:

$$\frac{dy_i}{d\left(\frac{1}{LHSV}\right)} = r_i = K_i y_i,$$

где y_i – массовые доли групп, r_i – скорость реакции для каждой группы, $LHSV$ – объемная скорость жидкости, ч^{-1} . Согласно рекомендации Квадера [21] реакции предполагались имеющими первый порядок; константы считались зависящими от

температуры по Аррениусу, $K_0 \exp\left(\frac{-E}{RT}\right)$, где K_0 – предэкспоненциальный множитель и E – энергия активации. Для определения наилучшего набора кинетических параметров при минимизации целевой функции использовали среднеквадратичную сумму расхождений между промышленными и расчетными составами продуктов. Целевая функция определяется с использованием процедуры нелинейной регрессии по методу наименьших квадратов на основе алгоритма Марквардта, доступного в MATLAB. В табл. 1 для кинетической модели показаны оптимизированные кинетические параметры и значения среднеквадратичной ошибки (СКО).

Корреляционные диаграммы для разработанной кинетической модели показаны на рис. 2. Как можно видеть, модельные и промышленные данные хорошо согласуются между собой.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Развитие МОВ-модели. На установке гидрокрекинга Тегеранского НПЗ был собран большой объем промышленных данных. Данные по промышленным условиям, используемые для развития модели, принадлежат области нормального функционирования процесса. Большое число выборок было проанализировано статистически с целью исключения выпадающих данных (точек с большим разбросом относительно основного массива значений). После удаления выпадающих данных осталось в общей сложности 558 точек. Эффективной процедурой уменьшения размерности входных векторов является анализ основных компонент. При его применении компоненты,

составляющие менее 2% от общего многообразия данных, были отброшены с помощью набора редактирования нейронной сети в MATLAB.

Некоторые разновидности традиционных кинетических моделей для процесса гидрокрекинга в точности построены быть не могут. Модели, основанные на уравнениях баланса энергии и массы, весьма сложны и трудны для решения. Поэтому, в подобных случаях можно использовать имеющееся коммерческое программное обеспечение, реализующее метод опорных векторов, для выполнения точных модельных расчетов, имеющих дело с переменными входа/выхода.

Нормализованная выборка, полученная по уравнению (2), была разбита случайным образом на обучающую, тестовую и оптимизационную под-выборки с целью исчерпывающей оценки общности и надежной работы МОВ-модели. 80% данных обычно использовали для обучения, а остальные 20% разделены на две категории: 10% для оптимизационной и 10% для тестовой выборки [22, 23]. Кроме того, следует отметить, что алгоритм оптимизации был разработан для получения оптимальных значений параметра ядра, такого, как σ_2 , во время внутренних вычислений МОВ. Чтобы получить оптимальные значения, в среде MATLAB была применена оптимизация с использованием генетического алгоритма.

Двумя ключевыми параметрами в моделях МОВ являются параметры регуляризации (γ) и ядра (σ^2). Параметр регуляризации определяет компромисс между минимизацией погрешности согласования и гладкостью оценочной функции, тогда как параметр ядра играет решающую роль в создании хорошей регрессионной модели МОВ, характеризующейся высокой точностью и стабильностью. В настоящем исследовании параметры, связанные с ядром, такие, как γ и σ^2 , подвергались оптимизации. Число заселенности, использовавшееся в данном исследовании для достижения оптимальных значений двух параметров алгоритма МОВ, принято равным 900. Процедуру оптимизации повторяли несколько раз, чтобы гарантировать, что значение конечного решения очень близко к глобальному оптимуму проблемы. В табл. 2 приведены значения оптимальных γ и σ^2 .

На рис. 3 проиллюстрировано сопоставление промышленных значений выхода продуктов гидрокрекинга и результатов, предсказываемых МОВ-моделью. Как можно видеть, результаты МОВ-модели в обучении и тестировании находятся в надлежащем согласовании с промышленными данными, однако некоторые из предсказанных значений демонстрируют заметные расхождения с ними. Это может быть связано с неустраиваемым шумовым компонентом заводских данных, который может быть нивелирован, если обучающий алгоритм оснащен каким-либо подходящим инструментом

Таблица 2. Оптимальные значения параметров модели МОВ для переменных на выходе

Параметры	γ	σ^2
Дизельная фракция, об. %	47 983	1.3847
Фракция нефти, об. %	58 349	1.8238
Сжиженные газы, об. %	22 590	1.3744

фильтрации шума. В данной работе подобная фильтрация не применяется с целью проведения обучения и тестирования как можно ближе к промышленным условиям.

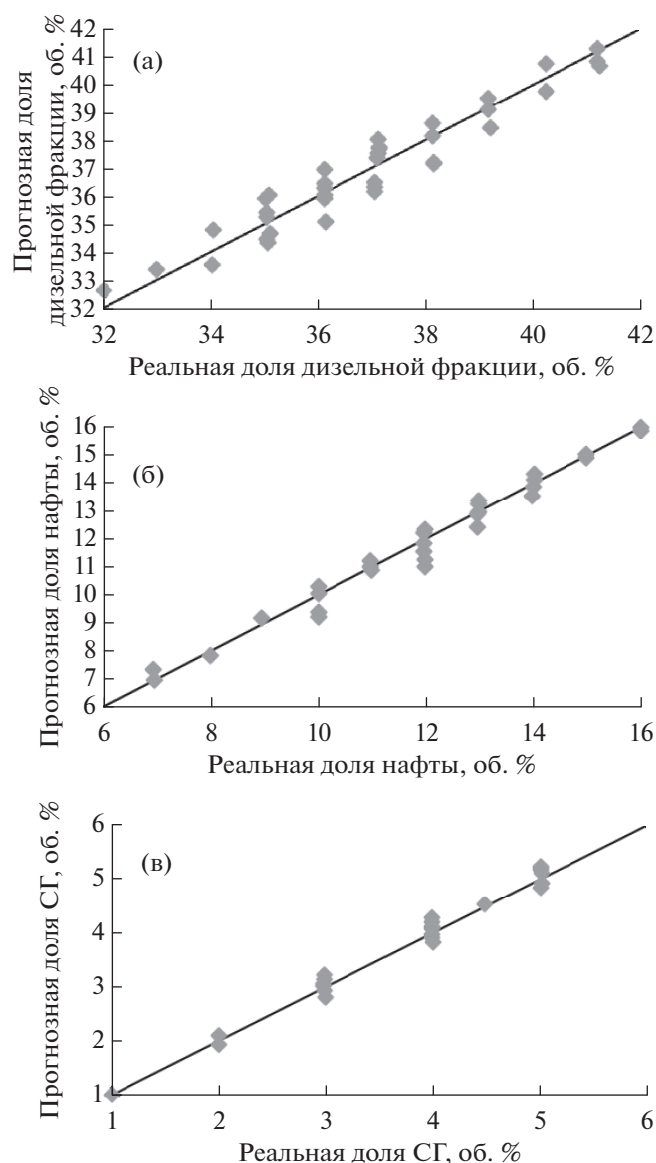


Рис. 3. Сопоставление результатов моделирования по МОВ с заводскими значениями выхода: (а) дизельной фракции, (б) нефти, (в) СГ.

Таблица 3. Наибольшие расхождения между результатами, вычисленными по МОВ, и реальными данными

Параметры на входе		Модель МОВ
Рабочее давление, бар		170
Рабочая температура, °С		421
Расход сырья, барр./сут		15000
Расход H ₂ , млн куб. фут./сут		26694
Выход дизельной фракции, об. %	расчет	36.11
	наблюдение	35.07
Выход бензиновой фракции, об. %	расчет	11.99
	наблюдение	11.03
Выход сжиженных газов, об. %	расчет	3.99
	наблюдение	4.20

Таблица 4. Статистические параметры представленной модели, мол. % по компонентам

Параметр	Дизельная фракция, об. %	Нафта, об. %	СГ, об. %
Обучающая выборка			
СКО	0.179	0.116	0.174
Ср. абс. ошибка, %	0.348	0.311	0.296
R ²	0.97	0.98	0.98
Число точек данных	48	48	48
Тестовая выборка			
СКО	0.164	0.148	0.132
Ср. абс. ошибка, %	0.181	0.152	0.110
R ²	0.98	0.98	0.98
Число точек данных	12	12	12

Согласно рис. 3, между результатами тестового моделирования и данными обучения наблюдавшееся расхождение незначительное. Таким образом, МОВ-модель, основанная на универсальном статистическом оптимизированном алгоритме, обладает исключительно высокой способностью воспроизводить нелинейные явления. Наибольшие расхождения между результатами, вычисленными по МОВ, и реальными данными, показаны в табл. 3.

Для количественной оценки точности разработанных моделей рассчитывалась среднеквадратичная ошибка:

$$\text{СКО} = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - x_i)^2}{n},$$

где y , x и n представляют промышленные данные, результаты моделирования по МОВ и число точек отбора, для которых взяты промышленные данные, соответственно.

Можно ожидать наличие некоторых флуктуаций в промышленных данных из-за присутствующих флуктуаций рабочих давления и температуры, изменений расхода сырья и количеств используемого водорода в данном процессе. В табл. 4 представлены сводные результаты по расчетной СКО для отходящих продуктов процесса гидрокрекинга. Как можно видеть, СКО для обучающей и тестовой выборок имеют согласующиеся значения. Например, СКО для обучающей выборки для дизельной фракции, нефти и СГ составляет соответственно 0.179, 0.166 и 0.174, а СКО для тестовой выборки – соответственно 0.164, 0.148 и 0.132.

Групповая кинетическая модель. Для модели использовались четыре значимых параметра: давление, температура, расход впрыскиваемого водорода и расход подаваемого в реактор сырья. Как давление, так и температура оказывают большое влияние на процесс гидрокрекинга, и увеличение степени крекинга тяжелой нефти обуславливается оптимизацией этих величин. Кроме то-

Таблица 5. Наибольшие расхождения между расчетными и промышленными данными для 4-компонентной кинетической модели

Выходы продуктов		Групповая кинетическая модель
Дизельная фракция	расчет	0.72
	наблюдение	0.71
Бензиновая фракция	расчет	0.168
	наблюдение	0.177

го, производительность процесса повышается и с увеличением расхода впрыскиваемого водорода.

В табл. 5 представлены наибольшие расхождения между расчетными и промышленными данными для групповой кинетической модели. В рамках данной работы допустимо заявить, что результаты моделирования и экспериментальные данные находятся в хорошем согласии между собой. Как уже упоминалось, для оценки энергии активации E и предэкспоненциального множителя K_0 использовались промышленные данные. Большой объем данных (558 точек) был выбран для того, чтобы по возможности исключить влияние на расчеты ошибок масштабирования.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом показано, что полученные результаты МОВ-моделей находились в согласии с промышленными данными. Точность прогноза промышленных данных с использованием обученных моделей с помощью средней квадратичной ошибки (СКО) показала, что при применении МОВ обнаруживаются некоторые расхождения, обусловленные зашумлением промышленных данных, хотя эти ошибки сообщаются. Кроме того, определена СКО для выходов продуктов гидрокрекинга и обнаружено, что СКО обучающих и тестовых выборок имеют согласующиеся значения. Можно заключить, что разработанные МОВ-модели демонстрируют хорошую предсказательную способность по промышленным данным.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Atkins L., Warren M., Barnes C., Favela R., Higgins T.* Hart Energy Consulting Report.. Houston, Texas, USA. 2011.
2. *Puron H., Arcelus-Arrillaga P., Chin K., Pinilla J., Fidalgo B., Millan M.* // *Fuel*. 2014. V. 117. P. 408.
3. *Kumar V., Balasubramanian P.* // *Fuel*. 2009. V. 88. P. 2171.
4. *Pleshakova N., Zanozina I., Shabalina O., Rokhman'ko E., Mishustina T.* // *Pet. Chem.* 2012. V. 52. P. 233.
5. *Sahu R., Song B.J., Im J.S., Jeon Y.-P., Lee C.W.* // *J. Ind. Eng. Chem.* 2015. V. 27. P. 12.
6. *Balasubramanian P., Pushpavanam S.* // *Fuel*. 2008. V. 87. P. 1660.
7. *Chavarría-Hernández J., Ramírez J., Baltanas M.* // *Catal. Today*. 2008. V. 130. P. 455.
8. *Adib H., Sharifi F., Mehranbod N., Kazerooni N.M., Koolivand M.* // *J. Nat. Gas Sci. Eng.* 2013. V. 14. P. 121.
9. *Elkamel A., Al-Ajmi A., Fahim M.* // *Petrol. Sci. Technol.* 1999. V. 17. P. 931.
10. *Bellos G., Kallinikos L., Gounaris C., Papayannakos N.* // *Chem. Eng. Process.* 2005. V. 44. P. 505.
11. *Sedighi M., Keyvanloo K., Towfighi J.* // *Ind. Eng. Chem. Res.* 2011. V. 50. P. 1536.
12. *Kulkarni A., Jayaraman V.K., Kulkarni B.D.* // *Comput. Chem. Eng.* 2004. V. 28. P. 311.
13. *Cortes C., Vapnik V.* // *Machine Learning*. 1995. V. 20. P. 273.
14. *Ancheyta J., Sánchez S., Rodríguez M.A.* // *Catal. Today*. 2005. V. 109. P. 76.
15. *Balabin R.M., Lomakina E.I.* // *Analyst*. 2011. V. 136. P. 1703.
16. *Curilem M., Acuna G., Cubillos F., Vyhmeister E.* // *Chem. Eng. Trans.* 2011. V. 25. P. 761.
17. *Pelckmans K., Suykens J.A., Van Gestel T., De Brabanter J., Lukas L., Hamers B., De Moorand B., Vandewalle J.* // *Tutorial. KULeuven-ESAT. Leuven, Belgium.* 2002. V. 142. P. 1.
18. *Agarwal S., Saradhi V.V., Karnick H.* // *Neurocomputing*. 2008. V. 71. P. 1230.
19. *Strack R., Kecman V., Strack B., Li Q.* // *Neurocomputing*. 2013. V. 101. P. 59.
20. *Li D.-C., Fang Y.-H.* // *Expert Syst. Appl.* 2008. V. 34. P. 2013.
21. *Qader S.A., Hill G.R.* // *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.* 1969. V. 8. P. 98.
22. *Çomak E., Arslan A.* // *Expert Syst. Appl.* 2008. V. 35. P. 564.
23. *Zhao C., Zhang H., Zhang X., Liu M., Hu Z., Fan B.* // *Toxicology*. 2006. V. 217. P. 105.