

ПРОМЫШЛЕННАЯ КОМПЬЮТЕРНАЯ МОДЕЛЬ СНИЖЕНИЯ ПОТЕРЬ ОКТАНОВОГО ЧИСЛА ОЧИЩЕННОГО БЕНЗИНА В ПРОЦЕССЕ S ZORB

© 2023 г. Bo Chen¹, Jie Wang¹, Song Liu², Fusheng Ouyang^{1,*}, Da Xiong¹, Mingyang Zhao²

¹ International Joint Research Center of Green Energy Chemical Engineering, East China University of Science and Technology, Shanghai, 200237, China

² SINOPEC Shanghai Gaoqiao Petrochemical Co., Ltd, Shanghai 200129, China

*E-mail: ouyfs@ecust.edu.cn

Поступила в редакцию 20 марта 2022 г.

После доработки 19 мая 2022 г.

Принята к публикации 2 января 2023 г.

Метод реактивной адсорбционной десульфуризации S Zorb – одна из основных технологий удаления серы из бензина в процессе жидкостного каталитического крекинга (FCC) на установках Китая, сопряженная, однако, с некоторым снижением октанового числа получаемого бензина (ОЧИ, RON). Для оптимизации рабочих переменных и уменьшения потерь прогнозируемого октанового числа бензина (г-RON) были созданы три компьютерно-управляемые модели нейронной сети: с обратной передачей ошибки обучения (BPNN); с радиальной базисной функцией (RBFNN); с обобщенной регрессией (GRNN). Показано, что наилучшим является эффект модели с алгоритмом оптимизации роя частиц PSO-BPNN, обеспечивающей наибольшее снижение потерь г-RON на 48.55%. Методы исследования, использованные для создания компьютерно-управляемой модели снижения потерь г-RON, заслуживают применения на других блоках установки S Zorb.

Ключевые слова: бензин жидкостного каталитического крекинга FCC, потери ОЧИ (RON), компьютерно-управляемая модель, нейронная сеть, алгоритм оптимизации

DOI: 10.31857/S0028242123010069, **EDN:** UHEEPH

В целях защиты окружающей среды мировое сообщество выдвигает строгие требования к выбросам серы. Действующий VI национальный стандарт Китая для автомобильного бензина предусматривает, что содержание серы в нем должно быть менее 10 мкг/г. Также стоит отметить, что в Китае около 70% бензина получают в процессе жидкостного каталитического крекинга (FCC), продукты которого одновременно являются основным источником серы. Технологический процесс S Zorb [1] – запатентованная технология адсорбционной десульфуризации бензина, разработанная компанией ConocoPhillips. Она была выкуплена компанией Sinopec в 2007 г. и впоследствии, усовершенствована инженерной корпорацией Sinopec с целью разработки технологии S Zorb нового поколения. Сегодня она широко используется для глубокой

десульфуризации бензина FCC. Применение этой технологии, однако, приводит к снижению исследовательского октанового числа (RON), наиболее важного показателя при измерении эффективности сгорания автомобильного бензина. Поиск подходящего метода снижения потерь октанового числа очищенного бензина (г-RON) в процессе десульфуризации бензина FCC с помощью технологии S Zorb значительно повысит доходы нефтехимических предприятий.

Благодаря развитию и популяризации технологий сбора и непрерывного накопления данных, различные отрасли химической промышленности широко используют компьютерно-управляемые модели, созданные с помощью методологии интеллектуального анализа данных [2]. Для оптимизации условий прогнозирования распределения

продукта в соответствии с большим количеством промышленных данных из установки FCC с максимально возможным выходом изопарафинов (MIP), Ouyang и др. [3] построили модель нейронной сети с обучением по методу обратного распространения ошибки (BPNN). Выход бензина был значительно улучшен при помощи объединения модели BPNN с генетическим алгоритмом (GA). Sadighi и др. [4] объединили гибридную искусственную нейронную сеть и алгоритм GA для прогнозирования г-RON, что повысило устойчивость и точность модели прогнозирования. Zhu и др. [5] для визуализации процесса связывания нескольких рабочих переменных в распределенной системе управления (DCS) в режиме реального времени предложили параметризованный метод нелинейного снижения размерности и визуализации многомерных переменных (t-SNE). В исследовании Chang и др. [6] для решения проблемы недостаточности работы с негауссовскими характеристиками в процессе очистки сточных вод представлена эффективная глубокая рекуррентная сеть со статистической информацией высокого порядка.

Средняя потеря г-RON на китайской установке S Zorb производительностью 1.20 млн т/год, за последние три года составляет 1.38 ед. Это намного выше, чем лучший показатель (0.6 ед.) аналогичной установки, что серьезно влияет на доходы нефтехимического предприятия. Операторы на установке S Zorb часто эксплуатируют ее в соответствии со своим опытом, поскольку приоритетом для них является обеспечение соответствия содержания серы в очищенном бензине требованиям действующих стандартов, а не снижение потерь г-RON. В настоящем исследовании, основанном на большом количестве данных с установки S Zorb, предложены различные модели нейронных сетей для прогнозирования г-RON и использованы интеллектуальные алгоритмы для оптимизации рабочих переменных установки с целью эффективного снижения потерь г-RON.

МОДЕЛИРОВАНИЕ НА ОСНОВЕ УПРАВЛЕНИЯ ДАННЫМИ И ОПТИМИЗАЦИЯ ДЛЯ СНИЖЕНИЯ ПОТЕРЬ г-RON

Используя технологии интеллектуального анализа, можно получить информацию с неизвестной

актуальностью и потенциальной ценностью из большого количества ошибочных, отсутствующих и нерегулярных данных. Моделирование и анализ полученных эффективных выборок данных с помощью алгоритмов машинного обучения в сочетании с интеллектуальными алгоритмами оптимизации позволяют оптимизировать рабочие переменные для уменьшения потерь г-RON.

Выбор переменных моделирования. Из системы управления лабораторной информацией и DCS установки S Zorb были собраны данные за последние три года, в том числе свойства сырья, адсорбента, очищенного бензина и рабочие переменные. В соответствии с требованиями компьютерно-управляемого моделирования, эти данные были предварительно обработаны на этапах обзора, очистки, преобразования и сокращения объема [7]. Этапы предварительной обработки представлены следующим образом:

1) на основании данных г-RON были отсеяны данные о свойствах сырья и адсорбента в соответствующий момент времени. В связи с наличием определенного времени реакции, в качестве данных для моделирования были взяты средние значения рабочих переменных в пределах 2 ч до и после соответствующего момента времени отбора значения г-RON;

2) во время фактической работы установки S Zorb сравнивали данные с верхним и нижним пределами рабочих условий и удаляли значения, выходящие за эти пределы. Затем было использовано правило 3σ [8] для удаления аномальных значений в наборе данных;

3) для исключения влияния разницы в размерах и стандартизации данных в диапазоне $[0, 1]$ был использован безразмерный метод [9];

4) для оценки степени корреляции между переменными и г-RON использовали закон корреляции Грея [10], при этом отбирали переменные со степенью корреляции более 0.7 [11]. Затем, для определения переменных моделирования, провели двумерный корреляционный анализ между выбранными переменными.

Путем предварительной обработки собранных данных в соответствии с вышеуказанными этапами были выбраны 22 переменные моделирования, включая 21 входную переменную и 1 выходную

Таблица 1. Результаты выбора переменных моделирования

Тип переменной	Количество переменных	Название переменной
Входные переменные:		
Свойства сырья	3	RON сырья, содержание серы в сырье, объемная доля олефинов
Свойства адсорбента	2	Содержание серы в отработанном адсорбенте, содержание серы в регенерированном адсорбенте
Свойство продукта	1	Содержание серы в очищенном бензине
Рабочие переменные	15	Соотношение водорода и нефти, объемная скорость потока, температура в нижней части реактора, температура регенератора, давление в верхней части реактора, перепад давления между верхней и нижней частями реактора, расход псевдооживленного водорода в редукторе, расход регенерационного потока, расход потока азота в регенераторе, расход сухого газа на выходе, расход сырья на входе, расход смешанного водорода, расход очищенного бензина на выходе, расход нефти на входе, расход легких углеводородов на выходе
Выходная переменная:		
Свойство продукта	1	r-RON

(табл. 1). При этом было отобрано 422 образца в соответствии с требованиями моделирования на основе управления данными.

Моделирование искусственных нейронных сетей. Поскольку между различными рабочими переменными существует сложная нелинейная зависимость, ее необходимо учитывать при моделировании. Нейронные сети, такие как BPNN, сеть с радиальной базисной функцией RBFNN и сеть с обобщенной регрессией GRNN [12], могут быть связаны с процессом нелинейной аппроксимации. 422 образца были разделены согласно коэффициенту деления 4:1 на обучающую (337 образцов) и тестовую (85 образцов) последовательности, после чего были созданы модели прогнозирования r-RON на основе BPNN, RBFNN и GRNN.

Модель BPNN состоит из трех слоев: входного, скрытого и выходного. В качестве функции активации скрытого слоя была выбрана сигмоидальная функция [13]:

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}. \quad (1)$$

Количество нейронов в скрытом слое H определяется по уравнению (2):

$$H = \sqrt{m + n} + Z \quad (1 \leq Z \leq 10), \quad (2)$$

где m – количество нейронов во входном слое; n – количество нейронов в выходном слое; Z – регулируемая константа из диапазона [1, 10]. В этой модели $m = 21$, $n = 1$, а $m < H < n$ [5, 14]. Были настроены 10 моделей нейронных сетей с разным количеством нейронов скрытого слоя и сравнен их прогнозирующий эффект по среднеквадратичной ошибке (MSE). Результаты показывают, что когда H равно 11, MSE модели является наименьшей. Таким образом, сетевая структура модели BPNN имеет вид 21-11-1.

Скорость обучения модели BPNN была рассчитана с помощью динамической функции скорости обучения η , предложенной в работе Liu [14]:

$$\eta = Ae^{-\epsilon s}, \quad (3)$$

где A – переменная константа из диапазона [1, 50]; ϵ – переменная константа из диапазона [0.0001, 0.001]; s – количество итераций. Наилучший эффект обучения модели достигается при $A = 10$ и $\epsilon = 0.001$. Этот метод может эффективно сократить периоды и время обучения.

Таблица 2. Результаты оптимизации значения σ

Номер К-перекрестной проверки	Коэффициент сглаживания (σ)	MSE
1	0.1	1.352
2	0.2	0.986
3	0.3	0.547
4	0.4	0.294
5	0.5	0.212
6	0.6	0.198
7	0.7	0.205
8	0.8	0.217
9	0.9	0.231
10	1.0	0.243

Модель RBFNN представляет собой взаимосвязанную иерархическую сетевую структуру с входным, скрытым и выходным слоями. В данном исследовании количество нейронов во входном слое, регулируемом размером входных данных, равно 21. Данные входного слоя отображаются в скрытый слой с помощью радиальной базисной функции, значение функции определяется расстоянием между данными выборки и центральной точкой. Как правило, используется радиальная базисная функция Гаусса [15]:

$$k(\|x_p - c_i\|) = \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}\|x_p - c_i\|^2\right), \quad (4)$$

где $k(\|x_p - c_i\|)$ – евклидово расстояние; x_p – данные выборки; c_i – центральная точка; σ – параметр ширины.

Количество нейронов в скрытом слое зависит от количества центральных точек. Для определения центральных точек выборочных данных использовали алгоритм кластеризации К-средних [16]. В исследовании было установлено, что количество нейронов в скрытом слое равно 30, поэтому модель имела структуру 21-30-1. Данные скрытого слоя были оценены и выведены в выходной слой с помощью линейной функции. С выбором центральной точки RBFNN определяется функция, характеризующая взаимосвязь между входным и скрытым слоями. Соответствующая взаимосвязь между входным и скрытым слоями представляет собой взвешенную линейную зависимость, а вес является

регулируемым параметром, который можно получить путем решения линейных уравнений.

Модель GRNN. Самым большим преимуществом модели GRNN является удобная функция настройки сетевых параметров. Производительность всей сети можно настроить, только установив коэффициент сглаживания в функции ядра GRNN. Коэффициент сглаживания σ в сети GRNN представляет собой параметр ширины в радиальной базисной функции Гаусса из уравнения (4). От его размера зависит реакция сети на данные и эффективность прогнозирования GRNN. σ – единственный параметр в модели GRNN, регулируемый вручную. В этом исследовании для нахождения наиболее подходящего значения σ использовали метод К-перекрестной проверки на достоверность [17]. 422 образца были разделены на 10 групп ($k=10$), проверка каждой из которых повторялась 10 раз. Значение σ увеличили от 0 до 1 с шагом 0.1. В качестве оценочного показателя для оптимизации σ были взяты значения MSE проверочного множества. Чем меньше MSE, тем лучше эффект модели. Результаты оптимизации σ приведены в табл. 2. MSE стремится сохранять стабильность в начале шестой проверки, что указывает на наилучшую способность модели к прогнозированию при $\sigma = 0.6$.

Сравнение трех моделей прогнозирования r-RON. На основе промышленных данных, с использованием нейронных сетей и трех моделей прогнозирования r-RON BPNN, RBFNN и GRNN провели сравнение прогнозируемых и фактических значений r-RON в обучающей и тестовой последовательностях, что приведено на рис. 1 и 2 соответственно. Видно, что значения r-RON, предсказанные моделью BPNN, наиболее близки к фактическим, следовательно, эта модель лучше прогнозирует и аппроксимирует данные, чем модели RBFNN и GRNN.

Кроме того, для этих моделей в табл. 3 приведены такие показатели оценки эффективности, как средняя погрешность (MAE), среднеквадратичная погрешность (MSE) и коэффициент детерминации (R^2). Согласно табл. 3, значения MAE и MSE обучающих и тестовых последовательностей для модели BPNN самые низкие, поэтому эффект прогнозирования модели BPNN является лучшим. Значение R^2 у этой модели также самое высокое из трех, что указывает на наилучшие характеристики аппроксимации.

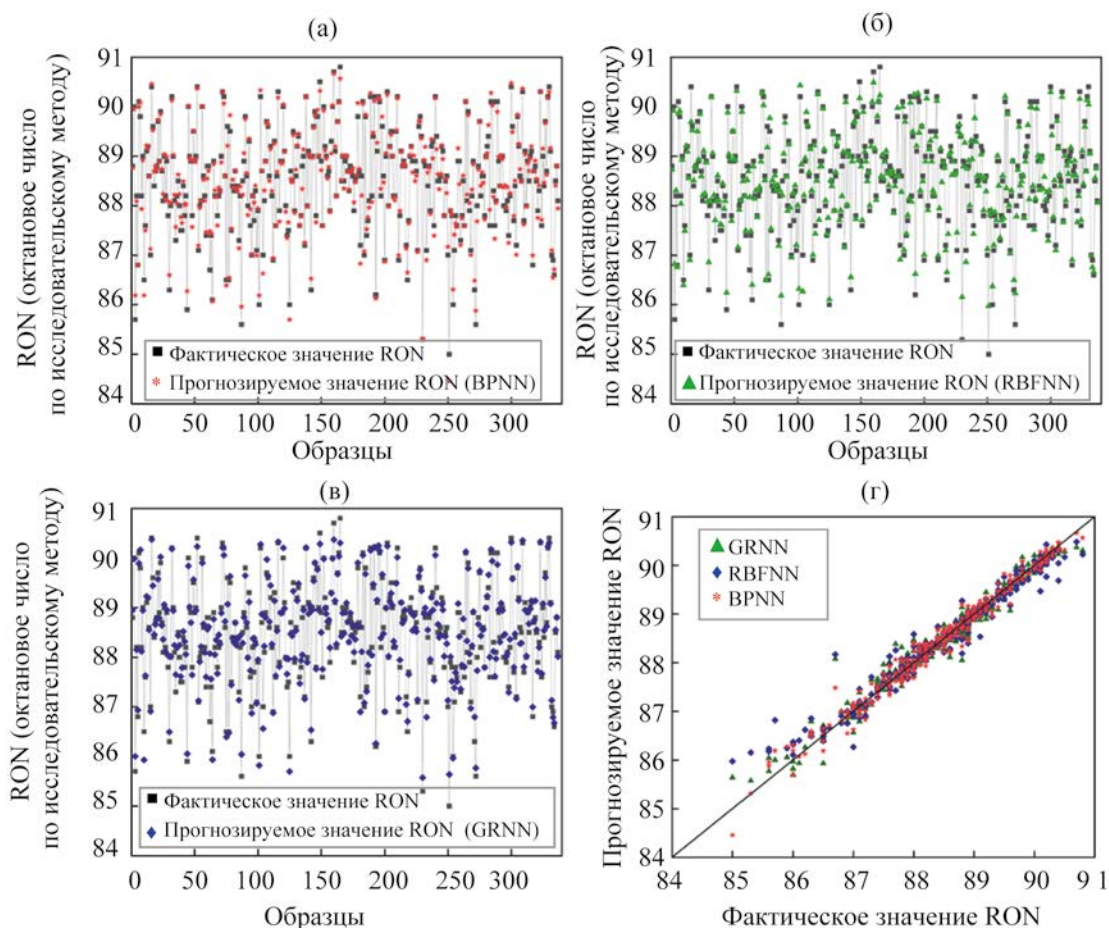


Рис. 1. Сравнение моделей фактических и прогнозируемых значений γ -RON обучающих последовательностей.

В этом исследовании периодичность отбора проб для анализа свойств исходного сырья, абсорбента и бензина в установке S Zorb составляет 2–3 раза в неделю. Предварительно обработанные образцы моделирования являются независимыми и сильно нелинейными. Модель BPNN обладает хорошей способностью аппроксимировать такие

нелинейные зависимости, что делает ее особенно подходящей для решения задач со сложным внутренним механизмом и случайной корреляцией. Хотя алгоритм модели будет ограничивать ее эффективность, правильная настройка параметров может значительно повысить точность модели. Структура сети и схема алгоритма модели RBFNN

Таблица 3. Показатели оценки моделей BPNN, RBFNN и GRNN

Тип образца	MAE			MSE			R^2		
	BPNN	RBFNN	GRNN	BPNN	RBFNN	GRNN	BPNN	RBFNN	GRNN
Обучающая последовательность	0.11	0.14	0.14	0.03	0.05	0.04	0.98	0.97	0.96
Тестовая последовательность	0.16	0.24	0.20	0.04	0.11	0.07	0.96	0.89	0.93

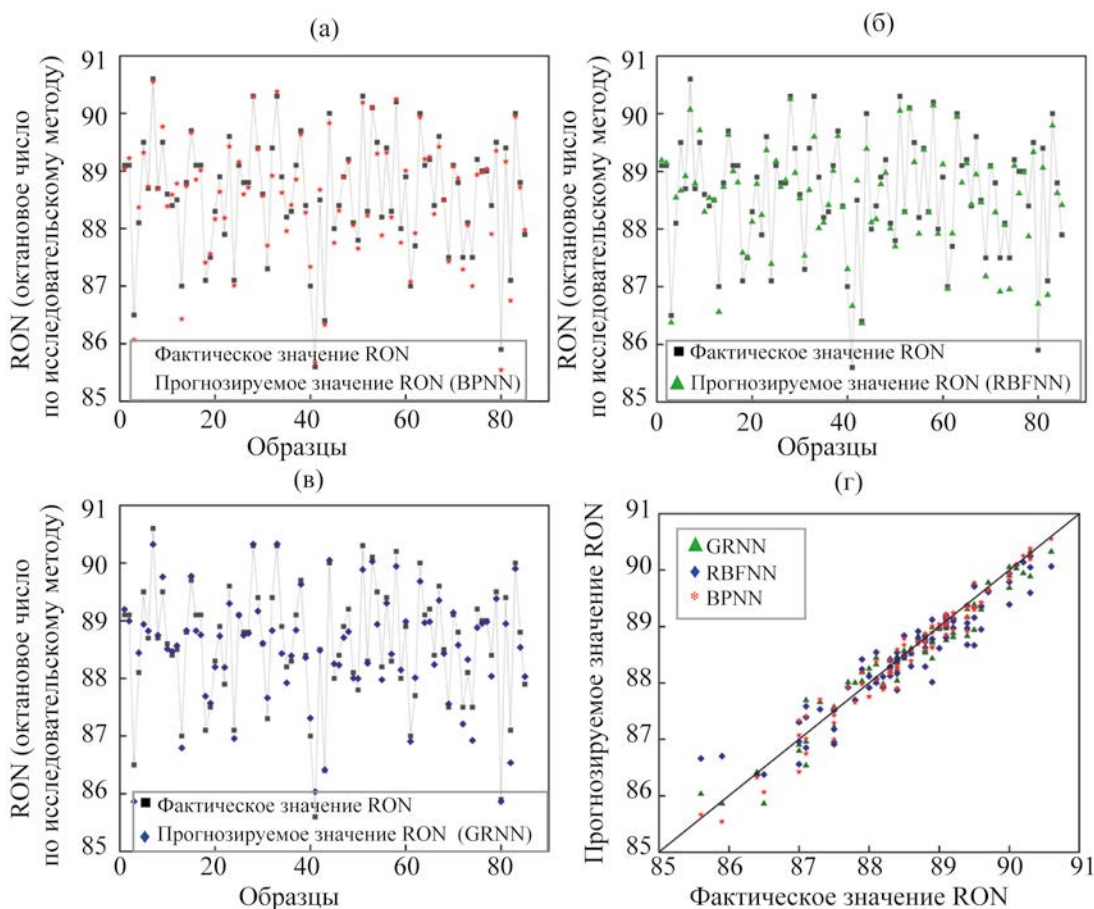


Рис. 2. Сравнение моделей фактических и прогнозируемых значений γ -RON тестовых последовательностей.

такие же, как у модели BPNN, но определение ее центральных точек и нейронов более сложное, что приводит к низкой точности прогноза. Преимущество модели GRNN заключается в том, что она имеет хороший эффект прогнозирования для группы образцов с небольшими по объему и нестабильными данными, но общая точность снижается, поскольку сеть легко сходится к оптимальной регрессии при большом размере выборки. Подводя итоги, можно отметить, что модель BPNN была выбрана в качестве основы для представленных ниже алгоритмов оптимизации γ -RON.

Оптимизация числа γ -RON. В огромном и сложном пространстве поиска многие задачи инженерной оптимизации часто нуждаются в оптимальном решении. Описанная выше модель BPNN эффективно прогнозирует число γ -RON, но не может

управлять реальным промышленным производством без оптимизации рабочих переменных. Для оптимизации 15 переменных и получения самого высокого значения γ -RON, на основе этой модели, с учетом свойств сырья, адсорбента и предпосылок обеспечения эффекта десульфуризации, были использованы три интеллектуальных алгоритма оптимизации: генетический алгоритм (GA), алгоритм оптимизации роя частиц (PSO) и алгоритм моделирования отжига (SA) (см. табл. 1).

Оптимизация методом GA. Ядрами GA [18] являются генетические операторы выбора, скрещивания и мутации, которые определяют порядок отбора алгоритмом GA индивидов с высокой адаптивностью и правила генерации новой популяции. В качестве оператора выбора использовали метод рулетки, включающий следующие шаги:

1) расчет общей приспособленности популяции F :

$$F = \sum_{i=1}^N f_i,$$

где N – численность популяции;

2) вычисление вероятности p_i появления индивида в следующем поколении:

$$p_i = \frac{f_i}{F}$$

3) расчет кумулятивной вероятности q_i отдельных индивидов:

$$q_i = \sum_{j=1}^i p_j$$

4) генерирование случайного числа в диапазоне $[0, 1]$. Если случайное число меньше q_i и больше q_{i-1} , индивид i попадает в следующее поколение;

5) шаг 4 повторяют до тех пор, пока численность популяции следующего поколения не будет соответствовать требованиям.

В данном исследовании используется схема кодирования действительных чисел, поэтому выбран оператор арифметического скрещивания, означающий, что гены потомства генерируются посредством линейной комбинации генов родителя. Гены потомства приведены в уравнении (5):

$$\begin{cases} \hat{x}_1 = \lambda x_1 + (1-\lambda)x_2 \\ \hat{x}_2 = \lambda x_2 + (1-\lambda)x_1 \end{cases}, \quad (5)$$

где $\hat{x}_1$ и $\hat{x}_2$ – дочерние индивиды; x_1 и x_2 – отцовские индивиды; λ – случайная константа из диапазона $[0, 1]$.

Для исследования принят равномерный оператор мутации. Конкретный метод показан в уравнении (6):

$$\begin{cases} X_k = U_{\min}^k, \text{ random}(0,1) = 0 \\ X_k = U_{\max}^k, \text{ random}(0,1) = 1 \end{cases}, \quad (6)$$

где X_k – новое значение гена; $\text{random}(0, 1)$ с равной вероятностью принимает значение 0 или 1; $U_{\min}^k$ и

$U_{\max}^k$ – нижний и верхний пределы значения в точке вариации.

Оптимизация методом PSO. Метод PSO [13] рассматривает индивидуумов в группе как частицы без веса и объема в D -мерном пространстве поиска. Для того чтобы реализовать эволюцию решений, нужно учитывать следующее: каждая частица движется в пространстве с определенной скоростью и собирается как в собственной наилучшей позиции, так и в исторически наилучшей позиции окрестности. Ядром метода является непрерывная регулировка скорости и направления индивида в соответствии с информацией о его местоположении. Общий метод обновления скорости представлен уравнением (7):

$$\begin{aligned} V_{id} = \omega V_{id} + C_1 \text{random}(0,1)(P_{id} - X_{id}) \\ + C_2 \text{random}(0,1)(P_{gd} - X_{id}), \end{aligned} \quad (7)$$

где V_{id} – D -мерная скорость i -й частицы; ω – коэффициент инерции; C_1 и C_2 – константы ускорения в диапазоне $[0, 4]$; $\text{random}(0, 1)$ – случайное число в диапазоне $[0, 1]$; P_{id} – D -размерность индивидуального оптимального решения для i -й частицы; P_{gd} – D -размерность глобального оптимального решения; X_{id} – D -размерность i -й частицы.

При $\omega = 0.7$, $C_1 = C_2 = 1.4$ алгоритм обладает наибольшей оптимизационной способностью. Начальная численность популяции и количество итераций очень важны для оптимизации алгоритма. Наилучший результат оптимизированного r -RON в этом исследовании достигается, когда численность популяции составляет 25, а количество итераций равно 10.

Оптимизация методом SA. Метод SA [19] позволяет преодолеть тот недостаток, что процесс оптимизации традиционных алгоритмов легко попадает в локальный экстремум и зависимость от начальных значений. К основным параметрам алгоритма SA относятся начальная температура, температура охлаждения, длина цепи Маркова (L), вероятность принятия нового решения и выбор функции генерации состояний. Функция падения температуры представлена уравнением

$$T_i = \alpha T_{i-1}, \quad (8)$$

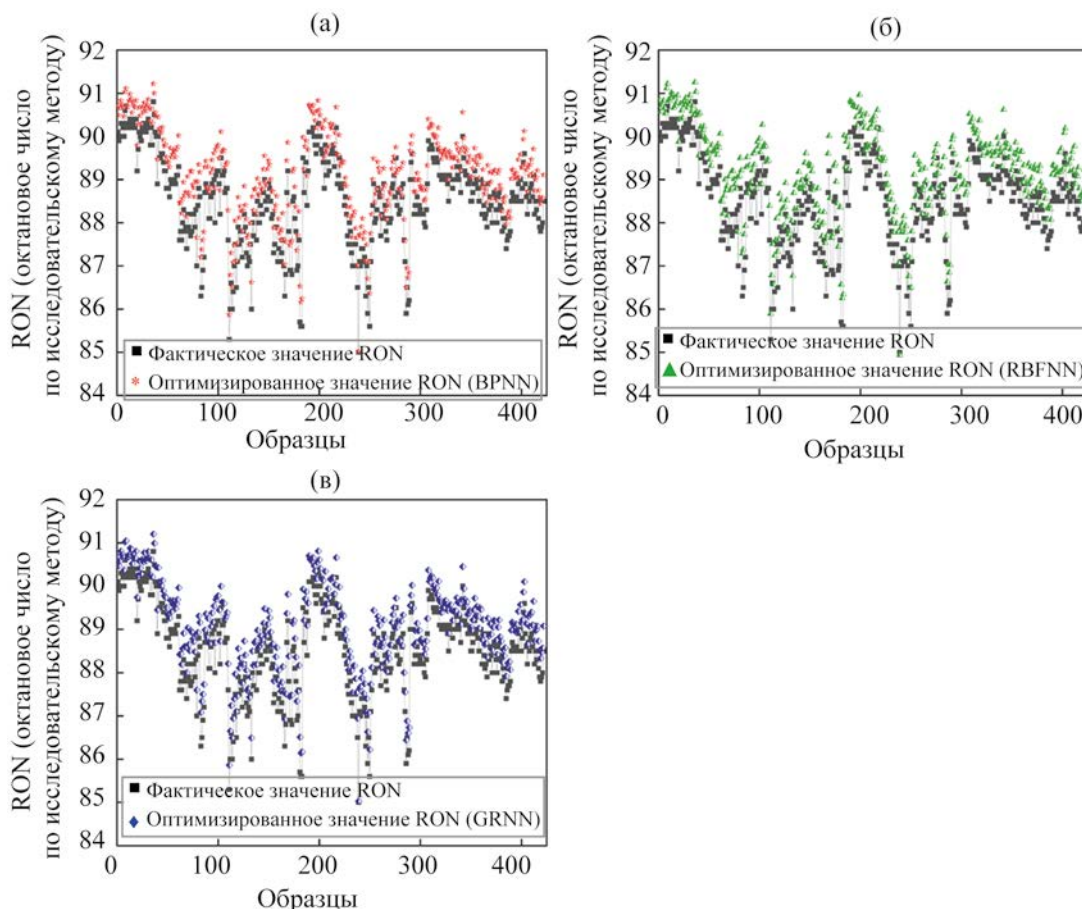


Рис. 3. Сравнение оптимизированных и фактических значений γ -RON.

где T_i – температура; a – скорость падения температуры. В настоящем исследовании начальная температура T_0 равна 100°C , а a равна 0.98.

Принцип выбора значения L зависит от сложности задачи оптимизации. После определения коэффициента охлаждения, значение L должно приблизить спад температуры к равновесному состоянию. В данном исследовании имеется много факторов со сложной взаимосвязью установки S Zorb, поэтому, после сравнения значение L было принято равным 200. Расчет заканчивается по выполнению условия завершения: $T_{\min} = 0.01$ или количество итераций равно 200.

Функция генерации состояния представляет собой алгоритм нового решения. В этом исследовании для получения новых решений между верхним и нижним пределами переменных использовали метод интерполяции:

$$A_i = A_{\min}^i + (A_{\max}^i - A_{\min}^i)\delta, \quad (9)$$

где A_i – значение i -й переменной нового решения; $A_{\min}^i$ и $A_{\max}^i$ – нижний и верхний пределы i -й переменной; δ – случайная константа из диапазона $[0, 1]$.

Для принятия плохого нового состояния с определенной вероятностью введен критерий мегаполиса [20], что позволяет эффективно избежать попадания SA в локальное оптимальное решение. Критерий мегаполиса генерирует вероятность P в соответствии с текущим параметром температуры t и функцией энергии E двух состояний, а затем случайным образом генерирует значение в диапазоне $[0, 1]$. Если случайное значение меньше P , новое состояние будет принято, в противном случае оно будет отклонено. В этом исследовании функция энергии E представляет собой разность между зна-

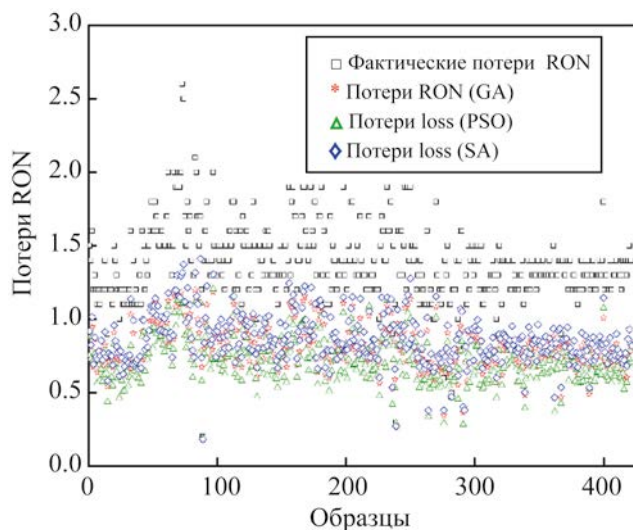


Рис. 4. Сравнение оптимизированных и фактических потерь г-RON.

чениями RON двух решений. Генерирующая функция P показана в уравнении (10):

$$P = \exp\left(-\frac{E}{t}\right). \quad (10)$$

Результаты оптимизации значения г-RON. Согласно сравнительному анализу, приведенному в подразделе «Сравнение трех моделей прогнозирования значения г-RON», характеристики модели BPNN являются лучшими. Основываясь на этой модели, при помощи алгоритмов GA, PSO и SA были определены оптимальные рабочие переменные для минимальных потерь г-RON. Чем выше значение г-RON, тем лучше эффект оптимизации. Результаты сравнения оптимизированного и факти-

ческого г-RON показаны на рис. 3. Видно, что используемые алгоритмы дают хорошие результаты, при этом оптимизированное значение г-RON улучшается в разной степени.

На рис. 4 показано сравнение фактических и оптимизированных значений потерь г-RON по моделям GA-BPNN, PSO-BPNN и SA-BPNN. Эти алгоритмы позволяют уменьшить потери г-RON, а алгоритм PSO является лучшим, поскольку дает наименьшее значение потерь г-RON.

В табл. 4 показаны оптимизированные значения г-RON, полученные для 422 образцов с помощью алгоритмов GA, PSO и SA. Средняя потеря г-RON у 422 образцов составляет 1.38 ед. После оптимизации методами GA, PSO и SA средние значения потерь г-RON снизились до 0.8, 0.71 и 0.86 ед., т. е. на 42.03, 48.55 и 37.68% соответственно.

В целом, для 422 образцов оптимизационные эффекты алгоритмов GA и PSO значительно лучше, чем SA. Среди них лучший эффект оптимизации имеет модель PSO-BPNN.

Результаты оптимизации рабочих переменных. Основываясь на шести свойствах сырья, отработанных и регенерированных абсорбентов и очищенного бензина (табл. 1), соответствующих каждому из 422 образцов, с помощью модели PSO-BPNN для снижения потерь г-RON были оптимизированы 15 рабочих переменных каждого образца. Диапазон оптимизации этих переменных показан в табл. 5.

Учитывая стабильную работу установки S Zorb, были оптимизированы только 10 из 15 рабочих переменных, указанных в табл. 5. Три результата, приведенные в табл. 6, показывают, что с помощью модели PSO-BPNN потери г-RON для каждого образца можно уменьшить путем оптимизации его рабочих переменных.

Таблица 4. Результаты оптимизации для 422 образцов

Параметр	Фактическое значение	Оптимизированное значение		
		GA	PSO	SA
Среднее значение г-RON, ед.	88.53	89.10	89.19	89.05
Средние потери г-RON, ед.	1.38	0.80	0.71	0.86
Падение средних потерь г-RON, %	—	42.03	48.55	37.68

Таблица 5. Диапазон оптимизации рабочих переменных

Рабочая переменная	Нижний предел	Верхний предел
Соотношение водорода и нефти, м ³ /м ³	0.22	0.30
Среднечасовая скорость подачи сырья, ч ⁻¹	3.00	4.50
Температура в нижней части реактора, °C	415	425
Температура регенератора, °C	480	515
Давление в верхней части реактора, МПа	2.40	2.55
Перепад давления между верхней и нижней частями реактора, кПа	90	100
Расход псевдоожигенного водорода в установке для химического восстановления, м ³ /ч	600	1000
Расход регенерационного потока, м ³ /ч	150	550
Расход лифтового азота в регенераторе, м ³ /ч	60	95
Расход смешанного водорода, м ³ /ч	6000	8500
Расход сухого газа на выходе, т/ч	550	1300
Расход сырья на входе, т/ч	125	140
Расход очищенного бензина на выходе, т/ч	110	140
Расход нефти на входе, кг/ч	4000	12000
Расход легких углеводородов, кг/ч	0	2500

Согласно данным, представленным в табл. 6, оптимизированное отношение водорода к нефти распределено вблизи нижнего предела интервала оптимизации, среднечасовая скорость подачи сырья – вблизи ее верхнего предела, расход смешанного водорода – вблизи его нижнего предела, расход регенерационного потока – вблизи его верхнего предела, т. е. соответствующее снижение отношения водорода к нефти и расхода смешанного водорода, увеличение объемно-массовой скорости реактора и расхода регенерационного потока полезно для увеличения значения г-RON в оптимизированном диапазоне. Более высокое отношение водорода к нефти и расход смешанного водорода будут интенсифицировать реакции насыщения водородом олефинов в бензине, что приведет к увеличению потерь г-RON. Расход регенерационного потока влияет на скорость циркуляции адсорбента. Чем быстрее скорость циркуляции, тем меньше время пребывания адсорбента в регенераторе и тем хуже эффект регенерации адсорбента, т. е. активность адсорбента становится ниже, интенсивность протекания реакций насыщения олефинов водородом в бензине также уменьшается. В соответствии с технологическим процессом S Zorb, в реакциях участвует небольшое количество водорода, что приводит к насыщению олефинов в бензине FCC путем гидрирования и снижению значения г-RON.

Чем больше объемно-массовая скорость реактора, тем короче время пребывания, меньше реакция насыщения олефинов водородом и меньше потери г-RON. За исключением вышеупомянутых четырех переменных, очевидного смещения (уменьшения или увеличения) других рабочих переменных после оптимизации не наблюдается, что вызвано взаимосвязью между ними, а также различными свойствами сырья и скоростью десульфуризации.

Кроме того, на десульфуризацию и потери г-RON влияют такие факторы, как температура и давление. Модель PSO-BPNN позволяет эффективно анализировать некоторые внутренние связи различных переменных и разумно комбинировать их значения для выполнения оптимизации (увеличения значения г-RON), что невозможно представить непосредственно в табл. 6.

Промышленная верификация модели. Выполнены два этапа промышленных испытаний модели PSO-BPNN на установке S Zorb. Благодаря сбору и анализу необходимых входных переменных с применением этой модели рабочие переменные оптимизированы и реализованы. Результаты показывают, что среднее снижение потерь г-RON при использовании модели на первом этапе в течение 36 дней составляет 35.21%, а на втором этапе в течение 12 дней – 10.75%, при этом содержание серы

Таблица 6. Оптимизация рабочих переменных для трех образцов (частей)

Рабочая переменная	Образец 1		Образец 2		Образец 3	
	фактическое значение	оптимизированное значение	фактическое значение	оптимизированное значение	фактическое значение	оптимизированное значение
Объемное отношение водорода к нефти	0.27	0.23	0.30	0.23	0.29	0.23
Среднечасовая скорость подачи сырья, ч ⁻¹	3.68	4.42	4.04	4.11	4.63	4.42
Температура в нижней части реактора, °С	419.89	415.03	418.89	415.15	421.87	419.13
Температура регенератора, °С	506.57	506.46	503.84	510.12	510.55	507.21
Давление в верхней части реактора, МПа	2.43	2.54	2.36	2.46	2.39	2.51
Перепад давления между верхней и нижней частями реактора, кПа	98.90	99.38	90.10	98.30	75.55	95.24
Расход псевдоожигенного водорода в установке для химического восстановления, м ³ /ч	649.73	629.52	645.94	648.18	640.44	700.77
Расход регенерационного потока, м ³ /ч	318.95	531.20	239.46	157.69	310.13	166.25
Расход лифтового азота в регенераторе, м ³ /ч	70.04	88.25	70.59	87.73	73.79	93.80
Расход смешанного водорода, м ³ /ч	7689.62	6005.33	8487.64	6056.51	7353.67	6049.79
Расход нефти на входе, кг/ч	4725.71	4306.28	6249.05	4234.79	2653.67	4592.31
Расход сырья на входе, т/ч	135.14	–	134.98	–	129.69	–
Расход сухого газа на выходе, т/ч	1064.68	–	760.93	–	968.26	–
Расход очищенного бензина на выходе, т/ч	124.13	–	123.69	–	119.82	–
Расход легких углеводородов, кг/ч	0.00	–	1536.67	–	0.00	–
г-RON сырья, ед.	88.40	–	87.20	–	87.50	–
г-RON, ед.	87.20	87.81	85.60	86.34	85.60	96.50
Потери г-RON, ед.	1.20	0.59	1.60	0.86	1.90	1.00
Снижение потерь г-RON, %	–	50.83	–	46.25	–	47.37

в очищенном бензине составляет менее 5 мкг/г. За счет непрерывной оптимизации потери г-RON установки S Zorb могут быть уменьшены до значения менее 1 ед., что указывает на надежность и эффективность модели PSO-BPNN.

ВЫВОДЫ

1. На основе промышленных данных, полученных от китайского подразделения S Zorb, в ходе предварительной обработки были отобраны 22 моделируемые переменные и 422 образца.

2. Для прогнозирования значения г-RON были созданы три модели: BPNN, RBFNN и GRNN. Показано, что модель BPNN имеет самую высокую точность прогнозирования значения г-RON и самую высокую способность к обобщению.

3. Модель BPNN объединила алгоритмы PSO, GA и SA для оптимизации рабочих переменных с целью уменьшения потерь г-RON. Установлено, что наилучший эффект оптимизации наблюдается для модели PSO-BPNN, поскольку снижение потерь г-RON на 48.55%, является наибольшим.

4. Достоверность модели PSO-BPNN проверена на установке S Zorb. Методы исследования, использованные для создания компьютерно-управляемой модели снижения потерь г-RON, также заслуживают распространения на другие блоки установки S Zorb.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют об отсутствии каких-либо коммерческих или ассоциативных интересов, ко-

торые представляют собой конфликт интересов в связи с представленной работой.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Bo Chen, ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-3997-1184>

Jie Wang, ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-5150-9961>

Song Liu, ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-5048-2445>

Fusheng Ouyang, ORCID: <http://orcid.org/0000-0001-7523-6673>

Da Xiong, ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-3055-0500>

Mingyang Zhao, ORCID: <http://orcid.org/0000-0003-3952-7160>

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Qiu L.M., Xiang Y.J., Xin M.D., Zou K., Zheng A.G., Xu G.T. Structural verification of nickel sulfide on spent S Zorb adsorbent as studied by HRTEM and XPS // *J. Mol. Struct.* 2020. V. 1202. P. 127215–127215. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2019.127215>
2. Ribeiro E Sousa L.R., Miranda T., e Sousa R.L., Tinoco J. The use of data mining techniques in rockburst risk assessment // *Engineering*. 2017. V. 3. P. 552–558. <https://doi.org/10.1016/J.ENG.2017.04.002>
3. Ouyang F.S., Zhang J.H., Fang W.G. Optimizing product distribution in the heavy oil catalytic cracking (MIP) process // *Petrol. Sci. Technol.* 2017. V. 35. P. 1315–1320. <https://doi.org/10.1080/10916466.2017.1297826>
4. Sadighi S., Mohaddecy R.S., Norouzi A. Optimizing an industrial scale naphtha catalytic reforming plant using a hybrid artificial neural network and genetic algorithm technique // *Bull. Chem. React. Eng. Catal.* 2015. V. 10. P. 210–220. <https://doi.org/10.9767/brec.10.2.7171.210-220>
5. Zhu W.B., Webb Z.T., Mao K., Romagnoli J. A deep learning approach for process data visualization using t-distributed stochastic neighbor embedding // *Ind. Eng. Chem. Res.* 2019. V. 58. P. 9564–9575. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.9b00975>
6. Chang P., Li Z.Y., Wang G.M., Wang P. An effective deep recurrent network with high-order statistic information for fault monitoring in wastewater treatment process // *Expert Syst. Appl.* 2020. V. 167. P. 114141. <https://doi.org/10.1016/j.eswa.2020.114141>
7. Martínez-Martínez J.M., Escandell-Montero P., Soria-Olivas E., Martín-Guerrero J.D., Serrano-López A.J. A new visualization tool for data mining techniques // *Prog. Artif. Intell.* 2016. V. 5. P. 137–154. <https://doi.org/10.1007/s13748-015-0079-4>
8. Chang Z.H., Zhang Y., Chen W.B. Electricity price prediction based on hybrid model of adam optimized LSTM neural network and wavelet transform // *Energy*. 2019. V. 187. P. 115804. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2019.07.134>
9. Luor D.C. A comparative assessment of data standardization on support vector machine for classification problems // *Intell. Data Anal.* 2015. V. 19. P. 529–546. <https://doi.org/10.3233/IDA-150730>
10. Duan H.M., Pang X.Y. A multivariate grey prediction model based on energy logistic equation and its application in energy prediction in China // *Energy*. 2021. V. 229. P. 120716. <https://doi.org/10.1016/J.ENERGY.2021.120716>
11. Fang S.E., Chen S. Model-free damage localization of structures using wavelet based grey relational analysis // *Smart Mater. Struct.* 2020. V. 29. № 8. P. 085046. <https://doi.org/10.1088/1361-665X/ab99da>
12. Cai Y.G., Xi M.C., Xue Q.H. Study on the applications of neural networks for processing deformation monitoring data // *Appl. Mech. Mater.* 2014. V. 501–504. P. 2149–2153. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/AMM.501-504.2149>
13. Zhang E.L., Hou L., Shen C., Shi Y.L., Zhang Y.X. Sound quality prediction of vehicle interior noise and mathematical modeling using a back propagation neural network (BPNN) based on particle swarm optimization (PSO) // *Meas. Sci. Technol.* 2016. V. 27. P. 015801. <https://doi.org/10.1088/0957-0233/27/1/015801>
14. Liu Xm., Liu Jc., Xu Yr. Motion control of underwater vehicle based on least disturbance BP algorithm // *J. Marine. Sci. Appl.* 2002. V. 1. P. 16–20. <https://doi.org/10.1007/BF02921411>
15. Potts M.A.S., Broomhead D.S. Time series prediction with a radial basis function neural network // *Proc. SPIE*. 1991. V. 1565. P. 255–266. <https://doi.org/10.1117/12.49782>
16. Zhao Y.P., Zhou X.L. K-means clustering algorithm and its improvement research // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2021. V. 1873. P. 012074. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1873/1/012074>
17. Yousef W.A. Estimating the standard error of cross-validation-based estimators of classifier performance // *Pattern Recognit. Lett.* 2021. V. 146. P. 115–125. <https://doi.org/10.1016/J.PATREC.2021.02.022>

18. *Liang F., Gao J., Xu L.* Thermal performance investigation of the miniature revolving heat pipes using artificial neural networks and genetic algorithms // *Int. J. Heat Mass Transf.* 2020. V. 151. P. 119394. <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2020.119394>
19. *Ying J.L., Xiao J.C.* Simulated annealing algorithm improved BP learning algorithm // *Appl. Mech. Mater.* 2014. V. 513–517. P. 734–737. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/AMM.513-517.734>
20. *Wang H.L., Hu Z.B., Sun Y.Q., Su Q.H., Xia X.W.* Modified backtracking search optimization algorithm inspired by simulated annealing for constrained engineering optimization problems // *Comput. Intell. Neurosci.* 2018. V. 2018. article ID 9167414. 27 pp. <https://doi.org/10.1155/2018/9167414>