

СТАТЬИ

УДК 004.94:66

DOI 10.17513/snt.40204

**ЦИФРОВОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ УСТАНОВКИ
ГАЗОФРАКЦИОНИРОВАНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ
МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ****Бронская В.В., Зиннурова О.В., Фирсин А.А., Шипин А.В.***ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет»,
Казань, e-mail: t.shipin@mail.ru*

Цель исследования – совершенствование процессов переработки углеводородного и химического сырья при изменении параметров технологического режима или компонентного состава сырья. В рамках исследования выполнено моделирование газофракционирующей установки действующего производства с использованием универсальной моделирующей программы Aspen Hysys V12. Для достижения поставленной цели на основе результатов моделирования была разработана модель машинного обучения в облачной среде программирования Google Colaboratory на языке программирования Python с использованием встроенных программных библиотек Pandas и Sklearn для машинного обучения и анализа данных. Модель предсказывает изменение доли выхода целевого продукта в зависимости от изменения рабочих параметров блока абсорбции, а именно расхода абсорбента и компонентного состава сырья. Полученный результат позволяет повысить эффективность процесса абсорбции на газофракционирующих установках. Процесс предсказания модели основан на методе линейной регрессии. Точность прогнозирования модели машинного обучения составила 99,4%. Полученная модель является универсальным инструментом контроля с целью увеличения выхода целевого продукта на газофракционирующих установках, что делает ее полезной как с технической, так и с экономической точек зрения.

Ключевые слова: газофракционирующая установка, технологическое моделирование, модель машинного обучения, абсорбция, цифровой двойник

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания на оказание государственных услуг (выполнение работ) от 29.12.2022 г. № 075-01508-23-00. Тема исследования «Сверхкритические флюидные технологии в переработке полимеров».

**DIGITAL MODELING OF GAS FRACTIONATION
UNIT USING MACHINE LEARNING METHODS****Bronskaya V.V., Zinnurova O.V., Firsin A.A., Shipin A.V.***Kazan National Research Technological University, Kazan, e-mail: t.shipin@mail.ru*

The aim of the work is to improve the processing of hydrocarbon and chemical feedstock when changing the parameters of the technological mode or the component composition of the feedstock. Within the framework of the research the modeling of gas fractionation unit of the operating production was performed using the universal modeling program Aspen Hysys V12. To achieve the set goal, based on the results of modeling, a machine learning model was developed in the cloud programming environment Google Colaboratory in the Python programming language with the use of built-in software libraries Pandas and Sklearn for machine learning and data analysis. The model predicts the change in the yield fraction of the target product depending on changes in the operating parameters of the absorption unit, namely the absorbent flow rate and the component composition of the feedstock. The result obtained allows to increase the efficiency of the absorption process in gas fractionation units. The model prediction process is based on the linear regression method. The prediction accuracy of the machine learning model was 99.4%. The obtained model is a universal control tool to increase the yield of the target product at gas fractionation plants, which makes it useful from both technical and economic points of view.

Keywords: gas fractionation plant, process simulation, machine learning model, absorption, digital twin

The work was carried out with the financial support of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation within the framework of the state assignment for the provision of public services (performance of works) dated 12/29/2022, No. 075-01508-23-00. Research topic "Supercritical fluid technologies in polymer processing".

Введение

В настоящее время развитие нефтехимической отрасли невозможно представить без газофракционирующих установок, которые входят в состав газоперерабатывающих, нефтеперерабатывающих, нефтехимических и химических заводов. Данные установки позволяют разделять сырую

нефть и газ на различные углеводородные фракции, которые в дальнейшем становятся сырьем для производства различных нефтехимических продуктов. Разделение сырья на отдельные фракции позволяет не только эффективно управлять производственными процессами, улучшая качество конечного продукта и снижая затраты на переработку,

но и повышать степень извлечения ценных компонентов из сырья, что способствует увеличению прибыли предприятия.

Для разделения смеси на индивидуальные компоненты, с последующим выделением товарных продуктов, на газофракционирующей установке применяются такие методы, как ректификация, абсорбция, конденсация и адсорбция. Состав газофракционирующей установки обычно включает в себя блок очистки газов, блок ректификации и абсорбции, блок охлаждения и компрессии.

В ходе моделирования технологических процессов установки газофракционирования возможно решение проблем действующих производств, увеличение выхода продуктов и совершенствование технологических процессов установки. Данные результаты достигаются с помощью разработки оптимизационных сценариев, расчетов эффективности оборудования при изменении технологических параметров и компонентного состава сырья [1–3].

В качестве среды для моделирования химико-технологических процессов используются различные симуляторы, которые способны отражать работу реальных установок в виде математического описания протекающих процессов. Самыми популярными моделирующим программными обеспечениями, используемыми в нефте-газохимической отрасли, являются Aspen Hysys, Petro-SIM, GIBBS, «Аэросим» и др. [4–6]. Такой подход обеспечивает возможность изучать моделируемый объект, проводить различные исследования, проведение которых в реальных условиях было бы затруднительно или по ряду причин небезопасно.

Также в качестве инструмента для математического описания химико-технологических процессов используются методы модели машинного обучения [7–9]. Модель машинного обучения – это математический алгоритм или статистическая модель, которая используется для выявления закономерностей и принятия решений в процессе обучения на основе входных данных. Таким образом в результате работы модели машинного обучения возможно получение выходных данных без проведения технологических расчетов, а основываясь только на полученных коэффициентах, вычисленных в ходе обучения модели.

Новым актуальным подходом в моделировании химико-технологических процессов является комплексное использование методов, рассмотренных ранее [10–12]. Первым этапом такого способа является расчет процесса в моделирующей среде, а полученные данные далее используются для разработки модели машинного об-

учения. Такой подход обеспечивает более точный и подробный анализ химико-технологического процесса без значительных временных затрат.

Цель исследования – совершенствование процессов переработки углеводородного и химического сырья при изменении параметров технологического режима или компонентного состава сырья.

Материалы и методы исследования

Для моделирования химико-технологических систем применяется универсальная моделирующая программа Aspen Hysys V12, которая является одним из популярных симуляторов для моделирования процессов благодаря своей высокой точности, обширной базе данных, которая включает в себя основные модули химико-технологических процессов, интеграции с другими продуктами AspenTech и интуитивно понятному интерфейсу. Программа также обладает высокой производительностью и масштабируемостью, что позволяет использовать его как для небольших задач, так и для крупных проектов с высокими требованиями к вычислительным ресурсам.

Процесс расчета можно разделить на несколько этапов:

- 1) анализ исследуемого процесса и последующее его разделение на последовательные подпроцессы, связанные друг с другом материальными и энергетическими потоками;
- 2) установка модулей, описывающих подпроцессы из базы универсальной моделирующей программы, подключение установленных модулей с материальными и энергетическими потоками, определение спецификаций модулей для обеспечения сводимости;
- 3) расчет установки, в ходе которого был получен материальный и тепловой баланс;
- 4) проверка адекватности, в ходе которой сравниваются полученные в ходе расчетов и рабочие результаты установок.

Модель машинного обучения разрабатывалась в облачном сервисе Google Colaboratory (Google Colab) на основе Jupyter Notebook. Этот облачный сервис позволяет работать на языке Python с большими объемами данных (Big Data) без необходимости установки дополнительного программного обеспечения. Благодаря встроенным библиотекам, таким как Sklearn, TensorFlow и PyTorch, Google Colab является удобным и эффективным инструментом для разработки и тестирования моделей машинного обучения. Сервис предоставляет бесплатный доступ к мощным графическим процессорам (GPU) и тензорным процессорам (TPU), что значительно ускоряет процесс обучения сложных моделей.

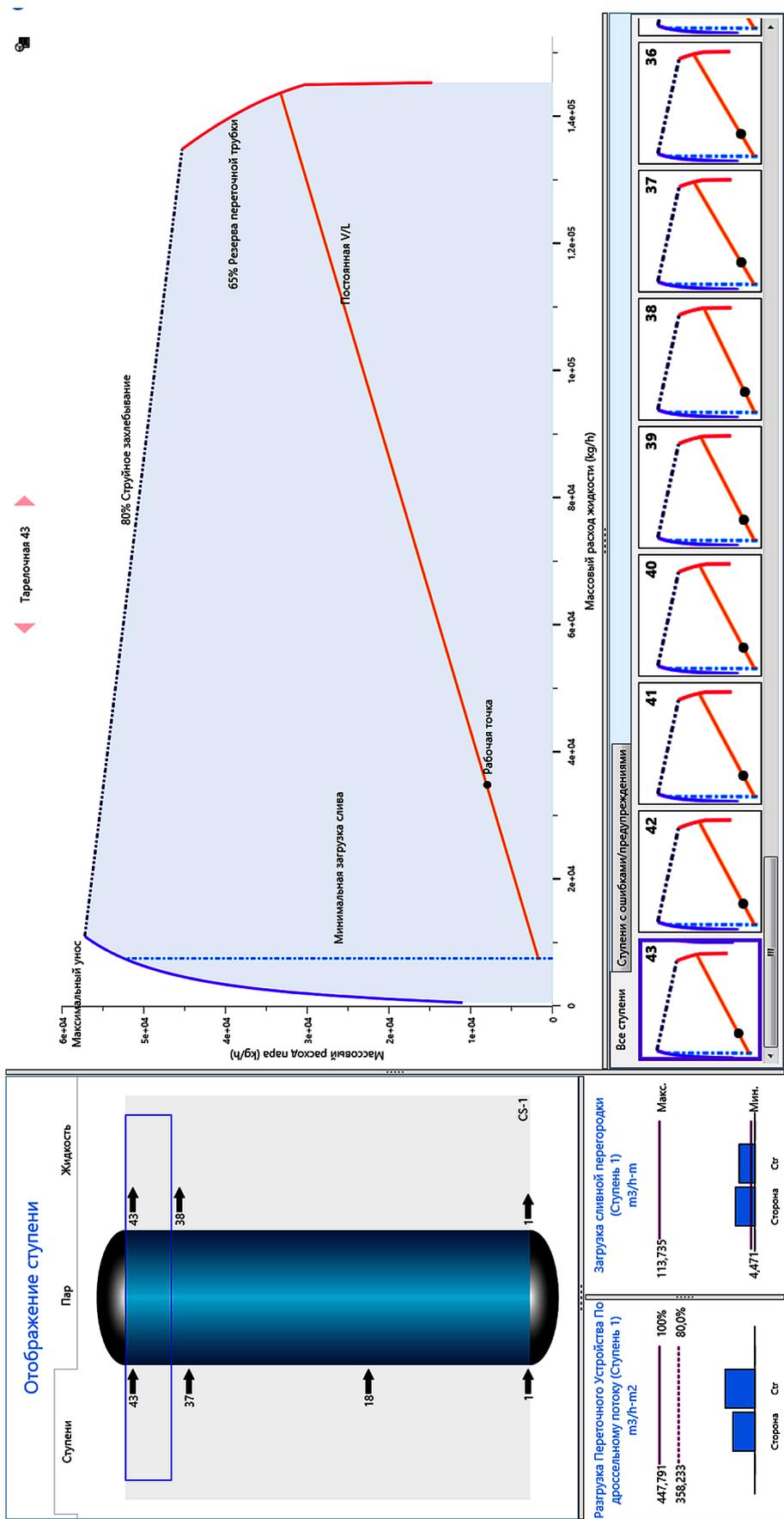


Рис. 1. Гидравлическая диаграмма колонны

Результаты исследования и их обсуждение

Газофракционирующая установка включает в себя 5 блоков, а именно: абсорбции пирогаза, выделения этан-этиленовой фракции, очистки газа, деметанизации этан-этиленовой фракции и выделения этилена.

Для обеспечения сходимости расчетов требуется специфицировать технологические параметры работы оборудования. Для колонного оборудования необходимо задаться температурными профилями колонны, то есть температурой низа и верха колонны или отдельных ее секций, что позволит регулировать переход целевого компонента из одного агрегатного состояния в другое. Согласно уравнению Клапейрона – Клаузиуса при изменении давления системы температура кипения компонента смещается в ту же сторону, следовательно, давление внутри колонного оборудования используется в качестве спецификации в ходе расчетов такими параметрами, как давление верха и низа колонны.

В ходе моделирования колонного оборудования был проведен гидравлический расчет. Для этого были заданы такие геометрические параметры, как диаметр колонного оборудования, тип контактных устройств и расстояние между ними, диаметр колпачков и высота их юбки, количество ходов

по тарелке, количество колпачков на тарелке и толщину тарелки. В качестве проектных параметров задаются такие параметры, как процент затопления тарелки, минимальная площадь сливного устройства к общей площади тарелки, максимальный процент струйного затопления, максимальный процент затопления переливного устройства, коэффициент вспенивания жидкости, коэффициент аэрации, фактор избыточной концентрации. В процессе гидравлического анализа исследуемой абсорбционно-отпарной колонны газофракционирующей установки была выявлена возможность увеличения производительности колонного оборудования на 20% с учетом нормальной работы контактных устройств. Гидравлическая диаграмма исследуемой колонны на рис. 1.

Для расчета реактора гидрирования ацетилена требуется задаться сведениями о стехиометрии, указать компоненты и протекающие в реакторе реакции, перепад давления и геометрические параметры. Расчет реактора приведен на рис. 2.

Расчет теплообменного оборудования сводится к определению параметров температур, давлений и расходов входных и выходных материальных потоков, а также определения геометрии и типа «ТЕМА» оборудования. Расчет теплообменного оборудования в среде Aspen Hysys приведен на рис. 3.

Конверсионный реактор: CRV-100 - Set-1

Проект Реакции Номинал Таблица Динамика

Реакции

Подр. свед. Результаты

Подобные сведения о реакции преобразования

Набор реакций Set-1 Реакция Rxn-1

Стехиометрия Базис Преобраз., %

Сведения о стехиометрии

Компонент	Молярный вес	Стех. коэф.
Hydrogen	2,016	-1,000
Ethylene	28,054	1,000
Acetylene	26,038	-1,000
Доб. комп.		

Ошибка баланса 0,00000

Теп. реак.(25 °C) -1,7e+05 kJ/kgmole

Игнор.

Рис. 2. Расчет реактора гидрирования ацетилена

Имя	Пирогаз	Пирогаз охл.	Пропилен	Пропилен-1
Пар	1,0000	1,0000	0,0000	0,0000
Температура [C]	-10,00	-15,00	-30,00	-24,76
Давление [кПа]	3420	3370	2000	1950
Мольный расход [kgmole/h]	602,9	602,9	285,2	285,2
Масс. расход [kg/h]	1,250e+004	1,250e+004	1,200e+004	1,200e+004
Станд. объем. расх. ид. жидк. [м3/h]	36,61	36,61	23,03	23,03
Молярная энтальпия [kJ/kgmole]	-2,501e+004	-2,523e+004	-758,7	-287,5
Молярная энтропия [kJ/kgmole-C]	143,7	143,0	-2,087	-0,1563
Тепловой поток [kJ/h]	-1,508e+007	-1,521e+007	-2,164e+005	-8,199e+004

Рис. 3. Расчет теплообменного оборудования

Полученная в ходе расчетов схема цифровой модели установки газодифракционного представления представлена на рис. 4 и 5.

Благодаря результатам, полученным в ходе моделирования установки в среде Aspen Hysys, была разработана модель машинного обучения, способная предсказывать массовую долю этилена в составе насыщенного абсорбента при изменении технологических параметров абсорбционно-отпарной колонны и компонентного состава сырья. База данных, используемая для обучения и тестирования модели, была составлена из экспериментальных данных, полученных в ходе расчетов установки в среде Aspen Hysys, а также производственных данных, полученных с действующего предприятия. Таким образом, входными параметрами модели являются массовые расходы сырья и абсорбента, компонентный состав сырья. В качестве выходных параметров представляется массовая доля этилена в составе насыщенного абсорбента, а также его массовый расход.

Работу модели машинного обучения можно разделить на 6 этапов: структуризация входных данных; обучение модели; проведение тестирования; вычисление ошибки; ввод новой обстановки; проведение предсказания для новой обстановки.

Этап структуризации данных включает использование библиотек Pandas и scikitlearn. Библиотека Pandas, предназначенная для обработки и анализа входных данных, преобразует полученные данные из среды Aspen Hysys в структурированный массив данных. Библиотека scikitlearn, содержащая функции и алгоритмы машинного обучения, разбивки данных на группы и прогнозирования, разбивает полученный массив данных с собранными рабочими параметрами абсорбционно-отпарной колонны на входные и выходные данные «X»

и «Y». Вводятся переменные тестирования и тренировки x_{test}, y_{test} и x_{train}, y_{train} , объем которых определяется функцией $train_test_split$, которая разбивает тестовые и тренировочные данные на 20 и 80% соответственно, а также псевдорандомизирует последовательность строк на данное отношение.

Полученные предсказания и процесс обучения модели основываются на использовании метода линейной регрессии, уравнение которой представлено в формуле

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \dots + \beta_n x_n + \varepsilon, \quad (1)$$

где y – зависимая переменная, включающая в себя выходные данные массовой доли этилена в насыщенном абсорбенте и его расход,

β_0 – константа, определяющая смещение линии регрессии вдоль оси y , то есть начальное значение в случае, когда все независимые переменные равны нулю. В данном случае константа равна нулю,

$x_1 \dots x_n$ – независимые переменные, включающие в себя входные данные,

$\beta_1 \dots \beta_n$ – коэффициенты при независимых переменных, определяющиеся по сумме квадратов разности фактических и предсказанных значениях. В начале обучения задаются случайным образом для предсказания и последующего обновления,

ε – ошибка модели, равная разнице между фактическими и предсказанными значениями выходных данных.

Для анализа обученной модели вызывается модуль `scikitlearn.metrics`, включающий в себя метрику оценки производительности. Таким образом, погрешность модели можно вычислить с помощью метода средней абсолютной ошибки. В качестве фактических и предсказанных значений используются параметры расхода насыщенного абсорбента и доли целевого компонента в составе насыщенного абсорбента.

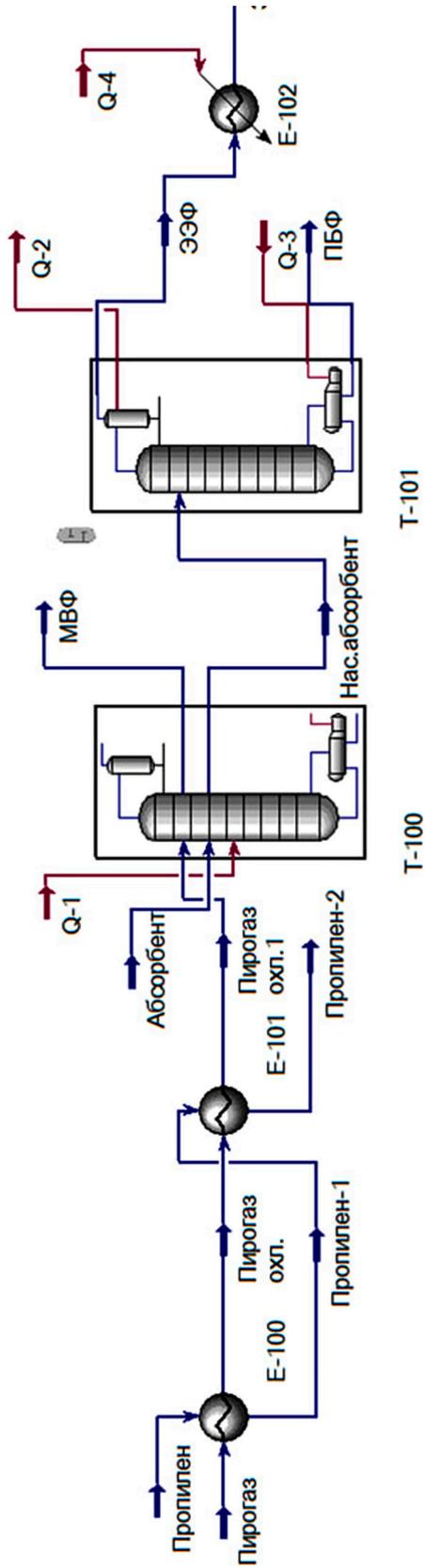


Рис. 4. Расчетная схема процесса в пакете Aspen Hysys, лист 1

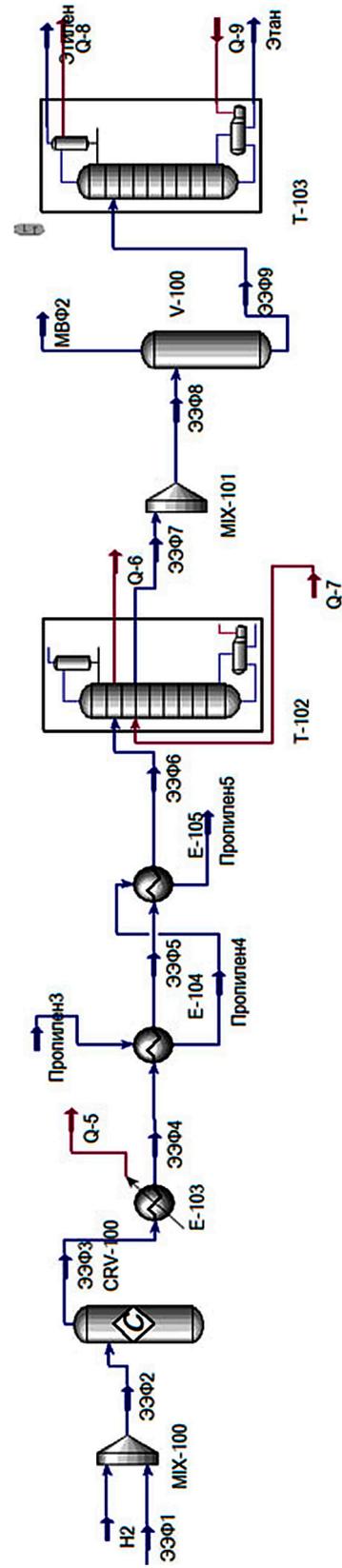


Рис. 5. Расчетная схема процесса в пакете Aspen Hysys, лист 2

Результаты предсказания для новой обстановки

Предсказанные значения		
Доля этилена в насыщенном абсорбенте, % мас.	Расход насыщенного абсорбента, кг/ч	Расход этилена в насыщенном абсорбенте, кг/ч
0,1482	34530	5117
Актуальные значения		
Доля этилена в насыщенном абсорбенте, % мас.	Расход насыщенного абсорбента, кг/ч	Расход этилена в насыщенном абсорбенте, кг/ч
0,1486	34230	5085

Уравнение средней абсолютной ошибки представлено в формуле

$$MAE = \frac{\sum_{i=1}^n |y_{\phi} - y_{\pi}|}{n}, \quad (2)$$

где y_{ϕ} – фактическое значение переменной, y_{π} – предсказанное значение переменной, n – количество переменных.

Для предсказания новых рабочих параметров абсорбционно-отпарной колонны предусматривается создание нового наблюдения. На основе обученной модели производится предсказание выходных данных, которые после выводятся. Для удобства использования модели производится расчет этилена в насыщенном абсорбенте в килограммах в час. Результаты предсказания для новой обстановки представлены в виде таблицы, где предсказанные значения – значения, полученные в ходе работы обученной модели, актуальные значения – экспериментальные значения, полученные в результате моделирования установки в среде Aspen Hysys V12.

Заключение

В результате технологического моделирования построена цифровая модель установки газофракционирования в пакете Aspen Hysys V12. В ходе анализа результатов работы модели проведено исследование, включающее регулирование расхода абсорбента на абсорбционно-отпарную колонну с учетом изменения компонентного состава сырья. Более точное определение уставки расхода абсорбента позволило улавливать целевой компонент смеси в абсорбтиве, а также влиять на температурные профили оборудования.

Результаты цифровой модели установки были использованы для разработки модели машинного обучения блока абсорбции, которая способна предсказывать массовую долю этилена в составе насыщенного абсорбента, а также расход насыщенного абсорбента с точностью 99,4%. Полученные результаты могут быть использованы

для повышения эффективности процесса абсорбции на газофракционирующих установках предприятий.

Список литературы

1. Bakhtadze N.N., Lototsky V.A. Knowledge-based models of nonlinear systems based on inductive learning // Intelligent Systems Reference Library. 2016. Vol. 98. P. 85–104.
2. Tun M.S., Lakshminarayanan S., Emoto G. Data Selection and Regression Method and Its Application to Softsensing Using Multirate Industrial Data // Journal of Chemical Engineering of Japan. 2008. Vol. 41, Is. 5. P. 374–383.
3. Клилин Г.А., Кавалеров Б.В., Бахирев И.В. Получение нелинейной модели ГТУ на основе нейронной сети // Автоматизация в электроэнергетике и электротехнике. 2015. Т. 1. С. 72–77.
4. Веревкин А.П., Слетнев М.С. Усовершенствованное управление (APC) нефтехимическим производством на основе многоуровневой нейросетевой системы поддержки принятия решений // Нефтегазовое дело. 2012. Т. 10, № 2. С. 61–64.
5. Шаймухаметов Д.Р., Мустафина С.А., Шаймухаметова Д.В. Прямое моделирование процесса дегидрирования метилбутенов в изопрен на основе искусственных нейронных сетей // Вестник Технологического университета. 2017. Т. 20, № 24. С. 123–126.
6. Артюшкин И.В., Максимов А.Е. Разработка автоматической системы управления процессом термохимического обезвоживания нефтяных эмульсий на основе искусственной нейронной сети // Вестник Самарского государственного технического университета. Серия: Технические науки. 2017. № 1 (53). С. 7–15.
7. Zahedi G., Lohi A., Karami Z. A Neural Network Approach for Identification and Modeling of Delayed Coking Plant // International Journal of Chemical Reactor Engineering. 2009. Vol. 7, Is. 1. DOI: 10.2202/1542-6580.1832.
8. Chen X., Wang N. Modeling a Delayed Coking Process with GRNN and Double-Chain Based DNA Genetic Algorithm // International Journal of Chemical Reactor Engineering. 2010. Vol. 8, Is. 1. DOI: 10.2202/1542-6580.2192.
9. Деникеева А.У. Моделирование процесса получения газойля при помощи искусственной нейронной сети // Приоритетные научные направления: от теории к практике. 2016. № 26–1. С. 219–223.
10. Мухаметзянова А.Г., Бронская В.В., Харитонов О.С. Нейросетевое моделирование гидродинамики потока в колонных аппаратах с насадочными элементами // Вестник Технологического университета. 2021. Т. 24, № 12. С. 139–141.
11. Frolov I.N., Firsin A.A., Okhotnikova E.S., Yusupova T.N., Ziganshin M.A. The study of bitumen by differential scanning calorimetry: the interpretation of thermal effects // Petroleum Science and Technology. 2019. Т. 37, № 4. P. 417–424.
12. Харитонов О.С., Бронская В.В., Зиннурова О.В., Фирсин А.А. Моделирование установки замедленного коксования в программе MATLAB // Вестник Астраханского государственного технического университета. Серия: Управление, вычислительная техника и информатика. 2024. № 2. С. 29–37.