

Параметрическая идентификация моделей смешения качественных показателей нефтепродуктов

А.А. Бурда¹, Р.А. Шайдуллин^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет)

²ЗАО «Хоневелл»

Одной из центральных проблем моделирования смешения товарных нефтепродуктов является нелинейное смешение ряда их качественных показателей. Вследствие нелинейного характера физико-химических закономерностей и наличия погрешности измерения свойств, построить идеально точную математическую модель принципиально невозможно. Поэтому для прогнозирования свойств нефтепродуктов используются эмпирические подходы. Нелинейные модели смешения свойств нефтепродуктов, которые могут быть найдены в научной и технической литературе, представляют собой зависимости свойств смеси от свойств ее компонентов. При построении таких моделей их параметры подбираются на основе имеющегося набора данных, что приводит к изменению точности метода при изменении набора данных.

В работе рассматриваются различные модели смешения качественных показателей товарных бензинов, сравнивается их точность на наборе актуальных данных российского нефтеперерабатывающего завода (НПЗ), а также ставится задача параметрической идентификации параметров этих моделей для повышения их точности. Линейные свойства бензинов смешиваются следующим образом:

1. Линейный закон смешения:

$$P_B = \sum_{i=1}^n X_i P_i, \quad (1)$$

где P_B - значение свойства смеси, P_i - значение свойства i -го компонента в смеси, а X_i - доля i -го компонента в смеси, причем $\sum_{i=1}^n X_i = 1$. Такие показатели качества бензинов, как плотность, содержание серы и бензола - смешиваются линейно и для них может применяться закон (1).

К основным нелинейным показателям качества товарных бензинов можно отнести исследовательское октановое число (ИОЧ), моторное октановое число (МОЧ) и давление насыщенных паров (ДНП). При моделировании данных показателей качества товарных бензинов используются следующие модели смешения [1]:

2. Индекс смешения:

$$BI_{P_i} = f(P_i), \quad (2)$$

$$BI_{P,B} = \sum_{i=1}^n BI_{P_i} X_i, \quad (3)$$

здесь BI_{P_i} - индекс свойства P_i для i -го компонента, а $BI_{P,B}$ - индекс смешения продукта. Тогда искомое свойство смеси можно получить, сделав следующее обратное преобразование:

$$P_{Blend} = f^{-1}(\sum_{i=1}^n f(P_i) X_i) \quad (4)$$

где f^{-1} - обратная функция преобразования, а P_{Blend} - значение свойства продукта.

В работе [2] приводится следующий индекс смешения для октановых чисел:

$$BI_{P_i} = a(J) + \sum_{j=1}^J b(J)_j (P_i)^j, \quad (5)$$

где коэффициенты $a(J)$, $b(J)_j$ и J - зависят от диапазона, к которому принадлежит октановое число P_i . Обратный индекс в данном методе рассчитывается из зависимости (5) путем решения уравнения третьей степени относительно P_i .

Для ДНП индекс смешения имеет более простой вид:

$$BI_{P_i} = P_i^a, P_{Blend} = (\sum_{i=1}^n P_i^a)^{1/a}, \quad (6)$$

где коэффициент a равен 1,25.

3. Метод Ethyl:

Метод был предложен в отчетах RT-205 и RT-70 корпорации Ethyl и предполагает, что октановые числа смеси зависят не только от октановых чисел компонентов, но и от содержания в них ароматики и олефинов.

$$R = \bar{r} + a_1(\bar{r}_j - \bar{r}\bar{j}) + a_2(\bar{O}^2 - \bar{O}^2) + a_3(\bar{A}^2 - \bar{A}^2) \quad (7)$$

$$M = \bar{m} + b_1(\bar{m}_j - \bar{m}\bar{j}) + b_2(\bar{O}^2 - \bar{O}^2) + b_3\left[\frac{(\bar{A}^2 - \bar{A}^2)}{100}\right]^2 \quad (8)$$

где: R – ИОЧ смеси, M – МОЧ смеси, \bar{r} – объемное среднее ИОЧ смеси, \bar{m} – объемное среднее МОЧ смеси, \bar{j} – объемная средняя чувствительность (ИОЧ - МОЧ), \bar{r}_j – объемное среднее произведение ИОЧ на чувствительность для всех компонентов, \bar{m}_j – объемное среднее произведение МОЧ на чувствительность для всех компонентов, \bar{O}^2 и \bar{A}^2 – объемные средние квадраты концентраций олефинов и ароматических углеводородов в компонентах, выраженные в объемных процентах, \bar{O}^2 и \bar{A}^2 – квадраты объемных средних концентраций олефинов и ароматических углеводородов в компонентах, выраженные в объемных процентах, a_1, a_2, a_3, b_1, b_2 и b_3 – коэффициенты.

На основе обработанных данных мировых НПЗ были получены коэффициенты нелинейных законов смешения (5) - (8). Однако для конкретного НПЗ можно повысить точность прогнозирования приведенных выше методов путем корректировки данных коэффициентов с помощью параметрической идентификации [3]. Для этого необходимо собрать набор фактических данных об операциях смешения на НПЗ, который включает рецептуру смешения, качество остатка продукта в резервуаре перед смешением, качество компонентов смешения, а также качество получившейся смеси. Для вычисления коэффициентов на основе этих данных решается задача минимизации невязки между рассчитанными по модели и измеренными свойствами смеси:

$$\sum_k (R_k - \hat{R}_k)^2 \rightarrow \min \quad (9)$$

$$R_k = f(a, P_{ik}), k = 1 \dots K, \quad (10)$$

здесь k – номер операции смешения, K – общее число операций смешения, \hat{R}_k – свойство смеси в операции смешения k, полученное в результате лабораторного анализа, R_k – прогнозное свойство смеси в операции смешения k, P_{ik} – значение свойства i-го компонента в смеси в операции смешения k, f – модель смешения, a – искомые переменные модели – коэффициенты метода. Задача (9) - (10) при K = 230 операций смешения имеет 230 уравнений и для метода Ethyl является задачей квадратичной минимизации и имеет 3 переменные (a_1, a_2, a_3 или b_1, b_2, b_3), а для индекса ДНП является задачей нелинейной минимизации и имеет 1 переменную (a).

Приведенная в работе корректировка коэффициентов метода Ethyl на актуальных данных о 230 операциях смешениях приводит уменьшению среднеквадратичного отклонения ошибки прогноза в 2 раза по сравнению со стандартными коэффициентами метода, и приближает ошибку метода к точности измерения свойств в лаборатории. Прогноз ДНП с помощью индекса с скорректированным коэффициентом имеет среднюю ошибку на 3 кПа меньше, чем индекс с стандартным коэффициентом.

Литература

1. Ефитов Г.Л., Журавлева Т.Ю. Математическое моделирование операций смешения. Математические методы в химии и в химической технологии. Сборник, 1995, с.110.
2. Fahim M.A., Al-Sahhaf T.A., Elkilani A.S. Fundamentals of Petroleum Refining, 2010 Elsevier, ISBN: 978-0-444-52785-1.
3. Дилигенская А.Н. Идентификация объектов управления. – Самара: Самарский государственный технический университет, 2009. – 136 с.