

АДАПТАЦИЯ НЕЛИНЕЙНЫХ ЗАКОНОВ СМЕШЕНИЯ НЕФТЯНЫХ ТОПЛИВ — ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ПРИБЫЛЬ НПЗ

А.А. Аносов, Г.Л. Ефитов, Р.А. Шайдуллин (АО «Хоневелл»)

Рассматриваются наиболее применяемые на практике нелинейные модели смешения свойств нефтяных топлив, опыт их использования и адаптации к конкретным НПЗ. Приводятся результаты нелинейного смешения октановых чисел и примеры использования нелинейных законов смешения в системах off- и on-line оптимизации компаундирования. Приводится общая формула вычисления погрешности моделирования и оценивается экономический эффект от снижения погрешности нелинейного моделирования октановых чисел.

Ключевые слова: нелинейное смешение, погрешность, адаптация, off- и on-line оптимизация.

Товарные бензины, дизтоплива, мазуты производятся компаундированием (смешением) из нескольких компонентов, при этом для управления процессом необходимо прогнозировать свойства смеси по свойствам компонентов. Большинство свойств, определяющих потребительскую стоимость топлива, смешиваются нелинейно (неаддитивно), а физико-химический механизм смешения, например, таких важнейших параметров товарного бензина, как октановые числа, неизвестен [2].

Рассмотрим вопросы нелинейности смешения свойств на примере бензинов, хотя все приведенные результаты и описываемые подходы применимы и для других нефтепродуктов, получаемых смешением.

На рис. 1 иллюстрируется нелинейный характер смешения свойства двух компонентов: по горизонтальной оси — концентрация компонента в смеси, по вертикальным осям — значения смешиваемого свойства для одного и другого компонента. Прямая 1 соответствует линейному смешению, кривая 2 — нелинейному (реальному) смешению. Δ_1 , Δ_2 — так называемые линейные бонусы смешения каждого компонента, добавление которых к значению свойств этих компонентов позволяет линеаризовать закон смешения в точке x_0 .

Для оценки влияния нелинейности на точность расчета октановых чисел бензинов рассмотрим табл. 1, где приводятся фактические данные одного из НПЗ по трем маркам бензина, результаты линейного расчета, а также разница между значением свойства, рассчитанного линейно, и фактом.

Как видно из табл. 1, нелинейный характер смешения увеличивает исследовательское октановое число и уменьшает моторное октановое число. Опыт авторов по российским НПЗ показывает, что учет нелинейности позволяет уточнить прогноз смешения октановых чисел на 0,2-1 пункта (для смесей, содержащих изопентан или высокоароматические и высокоолефиновые соединения, эффект от нелинейного смешения может достигать для исследовательского октана 2,6 [1]). Ниже будет показано, что такая ошибка про-

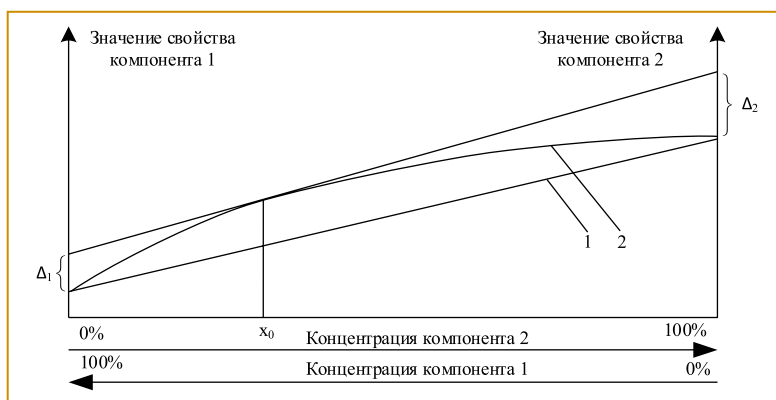


Рис. 1. Нелинейное смешение и бонусы

Таблица 1. Влияние нелинейности при расчете свойств

Показатель качества	Факт	Линейный расчет	Различие	Расчет BLEND
АИ-92				
Исследов. октановое число	92,0	92,0	0,0	92,2
Моторное Октановое число	83,4	83,9	0,5	83,5
АИ-95				
Исследов. октановое число	95,1	94,8	-0,3	95,0
Моторное октановое число	85,1	86,2	1,1	85,8
АИ-98				
Исследов. октановое число	98,4	98,0	-0,4	98,3
Моторное октановое число	88,5	89,6	0,4	89,2

гнозирования приводит к многомиллионным потерям даже для небольших НПЗ. С ростом объема производства эти потери пропорционально увеличиваются, поэтому учет нелинейностей является крайне актуальной задачей для экономики нефтепереработки.

На производстве нелинейность часто пытаются компенсировать путем прибавления к рассчитанному линейно свойству товарного бензина некоторого значения (так называемого бонуса продукта), определяемого из опыта и практики смешения. Это, конечно, дает весьма приблизительный результат, к тому же зависящий от рецептуры смешения.

Накопленный практический опыт и многолетние усилия исследователей за последние полвека позволили создать набор различных подходов к моделированию нелинейного смешения свойств. Имеется обширная литература по различным методам нели-

нейного смешения (например, [2–4]), но широкое практическое применение нашли лишь несколько методов, рассматриваемых ниже: индексы смешения, бонусы компонентов, специальные методы. Однако такие достаточно общие модели требуют параметрической идентификации для каждого конкретного НПЗ, так как описанные в литературе параметры, используемые в этих моделях, получены усреднением по сотням заводов. В то же время каждый завод отличается свойствами используемой нефти и особенностями технологии, что влияет на точность моделей смешения, использующих стандартные коэффициенты. Для иллюстрации в табл. 1 приведены результаты нелинейного расчета октановых чисел в системе оптимизации рецептур BLEND компании Honeywell. В качестве модели смешения использовался метод Ethyl (будет описан ниже) со стандартными коэффициентами. Полученные результаты показывают, что, хотя такой учет нелинейностей существенно приближает расчет к факту, все же остается существенная ошибка прогнозирования, минимизировать которую можно путем подбора наиболее подходящей методики расчета и подстройки ее коэффициентов по данным НПЗ.

Рассмотрим кратко основные модели (законы) нелинейного смешения и начнем с уточнения определений.

При линейном законе смешения свойство смешанного продукта может быть определено следующим правилом:

$$P_{Blend} = \sum_{i=1}^n X_i P_i,$$

где P_{Blend} — значение свойства смеси; P_i — значение свойства i -го компонента в смеси; X_i — доля i -го компонента в смеси, причем $\sum_{i=1}^n X_i = 1$.

В качестве X_i можно использовать объемные доли компонентов, тогда формула будет описывать закон смешения — линейный по объему, или массовые доли, тогда — линейный по массе.

Отметим, что линейный закон смешения определяется вышеприведенной формулой, в то время как нелинейность смешения означает, что эта формула не выполняется, то есть конструктивное определение нелинейности отсутствует.

Модели нелинейного смешения

Индексы смешения. Одним из способов математического моделирования нелинейного смешения является использование так называемых индексов смешения. Индексом называется такая функция свойства $f(P_i)$, что «преобразованное» с помощью этой функции свойство смешивается линейно, то есть

$$BI_{P_i} = f(P_i),$$

$$BI_{P,Blend} = \sum_{i=1}^n BI_{P_i} X_i.$$

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

$$P_{Blend} = f^{-1}(BI_{P,Blend}) = f^{-1}\left(\sum_{i=1}^n f(P_i) X_i\right),$$

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

Для многих свойств, таких как вязкость, температура вспышки, температура фильтрации, помутнения для дизельных топлив, а также ДНП (давление насыщенных паров) для бензинов данные функции получены. В этом случае говорят, что эти свойства смешиваются по индексу.

Например, для ДНП формула индекса смешения имеет степенной вид:

$$PI = P^a,$$

$$P = PI^{1/a},$$

где PI — индекс смешения ДНП; a — коэффициент индекса смешения, в стандартной формуле равный 1,25; P — значение ДНП, кПа.

Линейные бонусы. Линейными бонусами компонентов (далее бонусы) называются такие числа, добавив которые к начальным значениям свойств компонентов смешения, значение свойства смеси можно рассчитать по линейному закону следующим образом (иллюстрация приведена на рис. 1):

$$P_{Blend} = \sum_{i=1}^n X_i (P_i + \Delta_i),$$

где P_{Blend} — значение свойства смеси; P_i — значение свойства i -го компонента смеси; Δ_i — значение бонуса свойства i -го компонента смеси; X_i — доля i -го компонента в смеси, причем $\sum_{i=1}^n X_i = 1$.

Линейные бонусы являются наиболее универсальным аппаратом для моделирования нелинейного смешения, могут применяться к любым свойствам, но для их определения нужны специальные исследования. И значения бонусов сильно зависят от рецептуры смешения, то есть если на НПЗ смешиваются, например, четыре марки бензина, то нужны не менее четырех таблиц бонусов.

Смешение октановых чисел. Октановое число — показатель, характеризующий детонационную стойкость топлива для двигателей внутреннего сгорания — способность топлива противостоять самовоспламенению при сжатии. Число равно содержанию (в процентах по объему) изооктана (2, 2, 4-триметилпентана) в его смеси с n -гептаном, при котором эта смесь эквивалентна по детонационной стойкости исследуемому топливу в стандартных условиях испытаний. В зависимости от метода определения различают исследовательское октановое число (ИОЧ) и моторное октановое число (МОЧ), разница между ИОЧ и МОЧ называется чувствительностью топлива.

Октановые числа являются самыми важными свойствами, определяющими качество товарного бензина — маркировка бензина производится по исследовательскому октановому числу. Экономика производства во многом определяется стоимостью одной октано-тонны бензина. Эффективность системы управления и оптимизации смешением товарных бензинов в большой степени зависит от точности прогнозирования, то есть моделирования именно октановых чисел товарных бензинов.

Коллоидно-химический механизм образования ассоциатов и различного рода надмолекулярных структур, являющийся причиной нелинейного смешения октановых чисел, в настоящее время недостаточно изучен, и единственной возможностью моделирования является эмпирический подход.

Наиболее используемыми в мировой практике моделями нелинейного смешения октановых чисел являются специальные методы, разработанные корпорациями Ethyl и Dupont [2, 5].

Метод Ethyl. Метод был предложен в отчетах RT-205 и RT-70 корпорации Ethyl [5] и предполагает, что октановые числа смеси зависят не только от октановых чисел компонентов, но и от содержания в них ароматики и олефинов:

$$R = \bar{r} + a_1(\overline{rj} - \bar{r}\bar{j}) + a_2(\overline{O^2} - \bar{O}^2) + a_3(\overline{A^2} - \bar{A}^2),$$

$$M = \bar{m} + b_1(\overline{mj} - \bar{m}\bar{j}) + b_2(\overline{O^2} - \bar{O}^2) + b_3\left[\left(\overline{A^2} - \bar{A}^2\right)/100\right]^2.$$

Здесь: R — исследовательское октановое число смеси; M — моторное октановое число смеси; \bar{r} — объемное среднее исследовательское октановое число; \bar{m} — объемное среднее моторное октановое число; \bar{j} — объемная средняя чувствительность (исследовательское минус моторное); \overline{rj} — объемное среднее произведение исследовательского октанового числа на чувствительность для всех компонентов; \overline{mj} — объемное среднее произведение моторного октанового числа на чувствительность для всех компонентов; $\overline{O^2}$ и $\overline{A^2}$ — 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; $a_1, a_2, a_3, b_1, b_2, b_3$ — коэффициенты метода.

В отчете RT-205 приведены значения коэффициентов, полученные усреднением данных для НПЗ США и Канады. Как показывает опыт, эти усредненные значения достаточно адекватны при моделировании, и в подавляющем числе случаев дают погрешность, не превышающую воспроизводимость метода измерения октановых чисел в лаборатории. Однако повышение точности моделирования требует подстройки коэффициентов a, b к специфике (технологии, качеству нефти и т. п.) конкретного НПЗ.

Метод Dupont. Интерактивный метод корпорации Dupont [6] выражается следующей формулой:

$$o_{см} = o_1x_1 + o_2x_2 + \dots + o_nx_n + a_{12}x_1x_2 + a_{13}x_1x_3 + \dots + a_{n-1,n}x_{n-1}x_n,$$

где: o_i — октановое число i -го компонента; $o_{см}$ — октановое число смеси; x_i — концентрация i -го компонента в смеси ($\sum_{i=1}^n x_i = 1$); n — число компонентов; a_{ij} — ин-

терактивный коэффициент.

Эта формула кроме линейного смешения учитывает также попарное взаимодействие всех компонентов. Интерактивные коэффициенты описывают влияние каждой пары компонентов на изменение октанового числа смеси.

Отметим, что формула Dupont имеет самую простую из всех возможных структур для моделирования нелинейностей. Ее коэффициенты имеют ясный физический смысл. Так, например, a_{12} отражает влияние нелинейного эффекта взаимодействия первого и второго компонента. Однако интерактивные коэффициенты заранее неизвестны и должны определяться для каждого НПЗ.

Для использования этой формулы в заводской практике необходимы доступные инженерные методы нахождения интерактивных коэффициентов. Учитывая высокую стоимость каждого лабораторного эксперимента по определению октанового числа, единственным целесообразным подходом может быть планирование эксперимента. Для исследования коэффициентов метода Dupont предлагается использование симплекс-решетчатых ортогональных планов Шеффе и планов Мак Лина и Андерсона [9].

Авторами предложена практическая методика применения симплекс-решетчатых ортогональных планов Шеффе для определения интерактивных коэффициентов, состоящая из следующих шагов.

1. По числу компонентов смеси N рассчитывается число коэффициентов полинома:

$$k = \frac{N(N+1)}{2}.$$

2. Выбирается уровень значимости p . Это один из важных показателей достоверности расчетных значений. По определению он равен вероятности того, что отклонение расчетного значения \hat{y} от истинного $o_{см}^{ист}$ превышает некоторую величину, которая называется доверительным интервалом:

$$p \{|\hat{y} - o_{см}^{ист}| > \Delta\} = p.$$

3. Оценка дисперсии опытных данных (дисперсия воспроизводимости). Для этого возьмем L образцов одной и той же смеси и измерим для них октановое число x_i ($i=1, 2, \dots, L$). Тогда математическое ожидание равно:

$$\bar{X} = \frac{\sum_{i=1}^L x_i}{L},$$

а дисперсия рассчитывается по формуле:

$$S_y^2 = \frac{\sum_{i=1}^L (x_i - \bar{x})^2}{f},$$

где $f = L - 1$.

4. Зная величины k, p, f , по таблице определяется значение критерия Стьюдента $t_{p/k, f}$.

5. Оценивается число параллельных опытов:

$$n \geq \frac{1}{\Delta} (t_{p/k, f} \times S_y)^2.$$

6. Строится план Шеффе, в каждой точке проводится n измерений октанового числа смеси, и вычисляются средние \bar{y}_i и \bar{y}_{ij} .

7. Рассчитываются коэффициенты полинома:

$$a_i = \bar{y}_i, a_{ij} = 4\bar{y}_{ij} - 2\bar{y}_i - 2\bar{y}_j.$$

8. С учетом целевой рецептуры выбираются контрольные точки, и в них измеряются значения октановых чисел $y^{экс}$.

9. В контрольных точках вычисляются расчетные значения октановых чисел \hat{y} , разности $\Delta y = y^{экс} - \hat{y}$ и значения параметра

$$\xi = \left(\sum_{i=1}^N b_i^2 + \sum_{i,j=1}^N b_{i,j}^2 \right),$$

где $b_i = x_i(2x_i - 1)$, $b_{ij} = 4x_i x_j$, x_i, x_j — концентрации компонентов в контрольных точках.

10. В контрольных точках вычисляется значение критерия Стьюдента:

$$t = \frac{\Delta y \sqrt{n}}{S_y \sqrt{1 + \xi}}$$

и путем сравнения с табличными значениями производится оценка адекватности.

Смешение точек фракционного состава. Нефтепродукты — это смесь углеводородов, имеющих различные точки кипения. Кривая разгонки нефтепродукта показывает зависимость объема испарившейся его части (в процентах от первоначального объема)

от температуры. Точное измерение этой кривой, позволяющей определить реальное содержание легких и тяжелых углеводородов, называют истинной температурой кипения (ИТК), но ее определение занимает >20 ч. На практике для измерения параметров испаряемости бензина, как правило, используется другой метод — ASTM D86 (или его аналоги), который позволяет получать результаты гораздо быстрее, но в ущерб точности измерения. Обычно на заводах получают кривую D86 путем набора точек температуры, на которых испаряются определенные объемы исследуемого образца, например: 10%, 30%, 50%, 70%, 90%, 95%.

Таким образом, если кривая D86 содержит точку (10%, 60°C), то это означает, что 10% образца испарилось при температуре ниже 60°C. Однако это не означает, что образец содержит 10% углеводородов, имеющих значения температуры кипения ниже 60°C, поскольку метод D86 имеет некоторые неточности, так как легкие компоненты испаряются, вытягивая за собой более тяжелые. В результате перегонки кривая D86 смещается от ИТК (рис. 2).

Очевидно, что содержание легких углеводородов (как и тяжелых) в конечной смеси будет пропорционально содержанию легких углеводородов в компонентах. Следовательно, при помощи линейных уравнений можно вычислять по ИТК точки испарения нефтепродукта через точки испарения его компонентов при тех же температурах (например, 100°C), в то время как значения температуры фиксированных точек испарения (например, 10%) смешиваются очень нелинейно.

Существуют приближенные методы пересчета ИТК по кривой D86 и обратно, позволяющие путем дополнительных математических преобразований вычислять параметры испаряемости продукта на основании соответствующих свойств компонентов, однако применение этих методов требует проведения исследовательских работ в лаборатории для подстройки коэффициентов преобразования. Тем не менее, применение описанного ниже метода расчета точек фракционного состава без перехода от D86 к ИТК также способно обеспечить существенное повышение точности относительно линейных вычислений.

Кроме бонусов смешения и метода интерактивных коэффициентов для фракционного состава применяется специальный метод, описанный далее [7, 8].

Пусть имеются следующие данные о фракционном составе каждого компонента:

- набор точек температуры, на которых испаряются определенные объемы компонента, например, 10%, 50%, 90%. Обозначим эти точки T_V , где V — процент объема компонента (T_{10}, T_{50}, T_{90});
- температура начала и окончания кипения.

Для расчета за температуру начала кипения $T_{нк}$

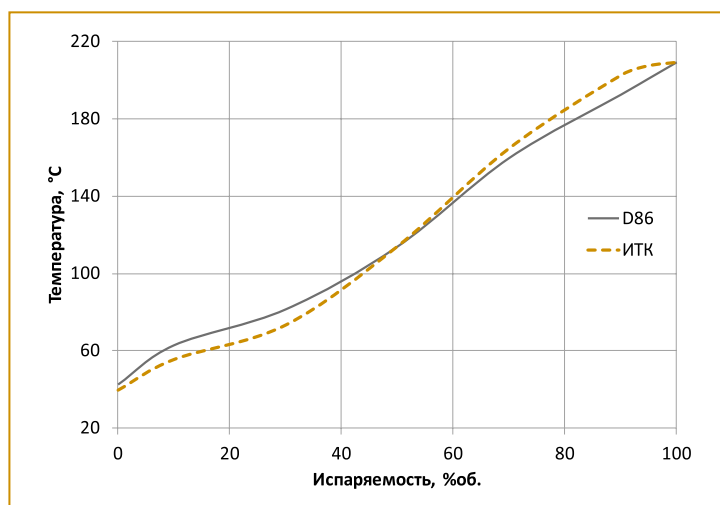


Рис. 2. Испаряемость по ИТК и D86

можно принять температуру, при которой испаряется 1% объема компонента, а за температуру конца кипения $T_{кк}$ — температуру, при которой испаряется 98% объема компонента;

- набор точек объема (в процентах от исходного количества), который испаряется до определенной температуры, например, до 70°C, до 100°C, до 150°C. Обозначим эти точки T_V , где T — температура в градусах Цельсия (V_{70} , V_{100} , V_{150}).

Алгоритм для расчета фракционного состава смеси

Шаг 1. Преобразование исходных данных по фракционному составу каждого компонента.

Осуществляется переобозначение температуры начала и конца кипения в точки T_V : $T_{нк}$ в T_1 , а $T_{кк}$ в T_{98} . Затем производится переобозначение точек температуры выкипания в точки объема испарения до определенной температуры компонента: T_V преобразуется в V_T . Например, $T_{10} = 65^\circ\text{C}$ преобразуется в $V_{65} = 10\%$.

Шаг 2. Кусочно-линейная интерполяция точек выкипания компонента. Для каждого компонента определяются значения n точек \tilde{V}_T кусочно-линейной кривой выкипания. Точки расположены через равные промежутки температур между минимальной точкой начала кипения T_1^{min} и максимальной точкой окончания кипения T_{98}^{max} всех компонентов, шаг D определяется следующей формулой:

$$D = (T_{98}^{max} - T_1^{min}) / (n - 1).$$

Температуры кипения, для которых определяются значения n точек интерполяции кривой выкипания, вычисляются по формуле:

$$T = T_1 + n * D, n = 0..15,$$

Для этого на каждом участке кусочно-линейной кривой выкипания находятся коэффициенты уравнения прямой линии k и b :

$$k = \frac{(V_1 - V_2)}{T_1 - T_2}, b = V_1 - T_1 k,$$

где V_1 — объем выкипания в левой точке участка кривой, V_2 — объем выкипания в правой точке участка кривой, T_1 — температура выкипания в левой точке участка кривой, T_2 — температура выкипания в правой точке участка кривой, k и b — коэффициенты уравнения прямой линии на участке кривой.

Для определения интерполированных значений точек выкипания \tilde{V}_T необходимо определить участок, к которому принадлежит температура, и вычислить значения по формуле:

$$\tilde{V}_T = kT + b.$$

Для других компонентов, если температуры кипения ниже точки начала кипения, то принимается равным 0%, если больше температуры конца кипения — 100%.

Шаг 3. Определение точек выкипания смеси. Точки определяются по линейному закону смешения точек выкипания всех компонентов:

$$\tilde{V}_T^{blend} = \sum_{i=1}^n X_i \tilde{V}_T^i,$$

где \tilde{V}_T^{blend} — объем выкипания смеси при температуре T ; \tilde{V}_T^i — объем выкипания i -го компонента смеси при температуре T ; X_i — объемная доля i -го компонента в смеси.

Шаг 4. Определение фракционного состава смеси. На основе \tilde{V}_T^{blend} осуществляется построение кусочно-линейной кривой выкипания смеси, и с использованием вышеприведенных уравнений прогнозируются значения необходимых температур выкипания смеси, например: 10%, 30%, 50%, 70%, 90%, 95%, 100% объема.

Если для компонентов имеется ограниченный набор данных по фракционному составу, описанный метод также можно применить, но в этом случае для повышения точности можно использовать полиномиальную или степенную функцию для аппроксимации точек кривых выкипания компонентов и смеси.

Задача адаптации нелинейных законов смешения

Повышение точности расчета рецепта как на уровне off-line, так и на уровне on-line оптимизации [10] невозможно без корректного прогнозирования качественных показателей смеси, имеющих нелинейные законы смешения. Учет нелинейностей возможен с применением различных подходов, каждый из которых имеет свои достоинства и недостатки, обладает меньшей или большей универсальностью применения и требует различных затрат по подстройке коэффициентов.

Для бензинов к основным нелинейным показателям качества относятся ИОЧ, МОЧ, ДНП и фракционный состав. Для дизельных топлив почти все основные свойства смешиваются нелинейно, причем подход с индексами дает наиболее приемлемый результат. В формулы индекса смешения входят параметры, которые определены или из общих физических соображений, или эмпирически (и тогда зависят от исходной нефти и установок конкретного НПЗ). Структура формулы индекса задается из физических или формальных соображений, а параметры должны находиться экспериментально для каждого НПЗ, а если можно выделить различные используемые нефти, то для каждой нефти.

Анализ данных российских НПЗ показывает, что из всех качественных показателей бензинов, смешиваемых нелинейно, точки фракционного состава, как правило, не являются критичными и не влияют на экономику смешения. В то же время значения октановых чисел бензина по моторному и исследовательскому методам непосредственно определяют его себестоимость. Даже десятые доли значений запаса качества по октановым числам имеют очень высокое влияние на экономические потери НПЗ, поэтому необходимо стремиться к достижению максимальной точности расчетов этих показателей.

По мировому опыту компании Honeywell, применение метода Ethyl для расчета октановых чисел со стандартными коэффициентами способно повы-

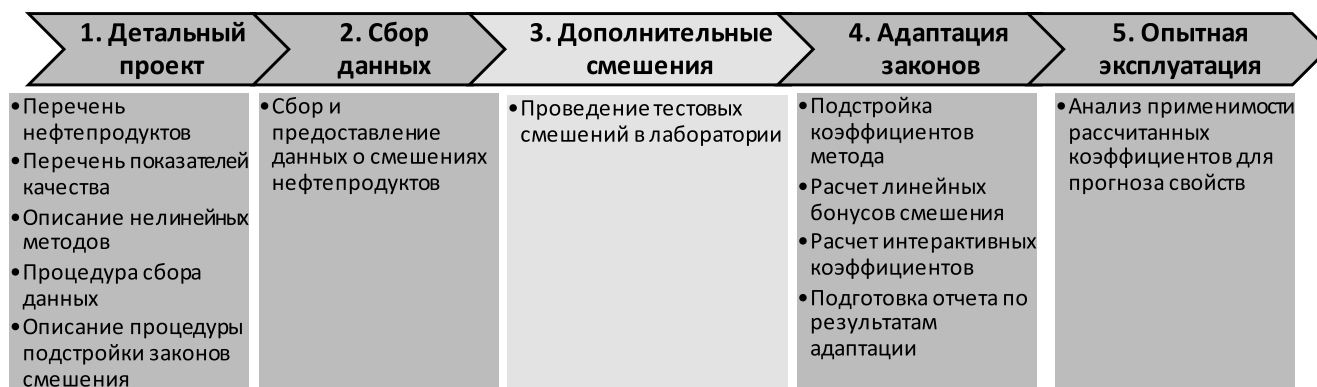


Рис. 3. Последовательность работ по адаптации нелинейных законов смешения

сить точность прогнозирования в среднем на полпункта. Результаты нелинейного моделирования смешения октановых чисел методом Ethyl в системе BLEND, например показывают, что нелинейный эффект увеличивает значение октанового числа по исследовательскому методу и уменьшает октановое число по моторному методу, что приближает рассчитываемое значение октановых чисел к фактическому [10].

Необходимо отметить, однако, что в мировой практике для расчета октановых чисел наравне с методом Ethyl также применяют альтернативный способ — интерактивный метод Dupont, описанный выше. Этот метод всегда требует проведения специальных экспериментов (по измерению октановых чисел смесей) для определения коэффициентов взаимодействия между всеми парами компонентов смешения. Вследствие использования относительно большого числа коэффициентов, которые находятся для каждого НПЗ индивидуально, этот метод при тщательно проведенных экспериментах может быть точнее, чем метод Ethyl.

Немаловажное значение при выборе подходов расчета свойств имеют и возможности систем оптимизации рецептур уровней off- и on-line по поддержке этого подхода. Оптимизация смешения даже с линейными свойствами сама по себе, как правило, является довольно сложной постановкой задачи математического программирования, а использование смешения по массе, не говоря уже о более сложных подходах, таких как метод Ethyl или Dupont, требует дополнительных усложненных алгоритмов оптимизации.

Таким образом, если предприятие стремится к повышению точности моделирования нелинейных свойств, необходимо выбрать наиболее подходящий метод из множества альтернативных подходов и выполнить подстройку коэффициентов для него.

Далее приводятся краткое описание и результаты такой работы по адаптации нелинейных законов смешения на примере одного из НПЗ.

Порядок и объем выполненных работ

Для решения задачи адаптации нелинейных законов смешения была выполнена последовательность шагов, представленная на рис. 3.

Детальный проект включал перечень нефтепродуктов и качественных показателей, участвующих в адаптации; обзор по литературным источникам, в которых описаны нелинейные методы для каждого показателя; описание процедур сбора и подготовки данных, а также процедур подстройки законов смешения.

Далее осуществлялся сбор данных в формате, описанном в детальном проекте. В объем данных входили: фактические рецептуры смешения партии, качество компонентов, фактическое качество нефтепродукта. Затем проводилась серия тестовых смешений в лаборатории по типовым рецептурам приготовления товарных нефтепродуктов для определения значений интерактивных коэффициентов метода Dupont.

На четвертом основном этапе для каждого качественного показателя и каждого нелинейного метода, который может использоваться для этого показателя, была проведена подстройка коэффициентов этого метода. Следует иметь в виду, что найденные значения линейных бонусов будут верны только в окрестности определенной рецептуры. На пятом этапе осуществлялась опытная эксплуатация полученных законов смешения (сбор и анализ данных, применение адаптированных законов смешения, сравнение результатов моделирования с фактическими данными).

Адаптация выполнялась для следующих показателей качества.

Бензины:

- ИОЧ (октановое число по исследовательскому методу) — Ethyl, Dupont, линейные бонусы;
- МОЧ (октановое число по моторному методу) — Ethyl, Dupont, линейные бонусы;
- ДНП (давление насыщенных паров) — индекс, Dupont, линейные бонусы;
- точки фракционного состава (ТКК — точка конца кипения; И70, И100, И150 — испаряемость до 70°C, до 100°C, до 150°C) — специальный метод, Dupont, линейные бонусы.

Дизтоплива и мазуты (индекс смешения и линейные бонусы): вязкость; температура вспышки; температура помутнения; температура фильтруемости.

Приведем результаты сравнения полученных адаптированных нелинейных законов смешения для бензинов.

Таблица 2. Средняя ошибка и разброс для всех продуктов суммарно

Свойство	Лин. расчет		Стандартный спец. метод		Адаптированный спец. метод		Бонусы смещения		Dupont	
	Ср. ош.	Разброс	Ср. ош.	Разброс	Ср. ош.	Разброс	Ср. ош.	Разброс	Ср. ош.	Разброс
ИОЧ	-0,3	0,7	-0,6	0,8	0,0	0,6	0,0	0,5	0,0	0,5
МОЧ	-0,9	0,9	-0,8	0,8	0,0	0,6	0,0	0,4	0,0	0,5
ДНП	-1,3	5,6	-2,2	5,8	-0,1	5,6	-0,1	5,0	-0,2	6,7
ТКК	17,2	13,8			1,0	5,4	0,1	5,4	1,4	9,6
И70	1,2	5,0			1,7	4,9	0,0	4,6	-0,4	5,3
И100	1,7	4,0			1,8	3,8	0,0	3,2	0,0	3,5
И150	-0,3	2,5			-0,5	2,4	0,0	2,4	-0,2	3,5

Таблица 3. Средняя ошибка и разброс для АИ-80

Свойство	Лин. расчет		Стандартный спец. метод		Адаптированный спец. метод		Бонусы смещения		Dupont	
	Ср. ош.	Разброс	Ср. ош.	Разброс	Ср. ош.	Разброс	Ср. ош.	Разброс	Ср. ош.	Разброс
ИОЧ	-1,4	2,3	-2,4	2,2	0,0	2,3	0,0	1,4	-0,2	1,0
МОЧ	-0,4	1,8	-1,2	1,6	0,0	1,5	0,0	0,4	0,0	0,5
ДНП	-5,4	11,9	-7,0	12,9	0,1	10,0	0,0	6,0	-2,8	12,1
ТКК	29,9	20,2			1,3	7,8	-0,1	5,6	14,8	20,4
И70	-1,4	8,4			-1,6	8,2	0,1	4,9	-4,9	7,6
И100	-3,8	10,3			-3,7	10,3	0,0	5,6	-2,0	5,5
И150	-1,2	5,4			-1,2	5,4	0,1	4,1	-3,5	9,3

Таблица 4. Средняя ошибка и разброс для АИ-92

Свойство	Лин. расчет		Стандартный спец. метод		Адаптированный спец. метод		Бонусы смещения		Dupont	
	Ср. ош.	Разброс	Ср. ош.	Разброс	Ср. ош.	Разброс	Ср. ош.	Разброс	Ср. ош.	Разброс
ИОЧ	-0,4	0,8	-0,7	0,8	0,0	0,4	0,0	0,4	0,0	0,4
МОЧ	-0,8	0,9	-0,8	0,9	0,0	0,5	0,0	0,4	0,0	0,4
ДНП	-1,1	6,7	-2,1	6,9	-0,1	6,7	0,0	6,2	-0,2	6,1
ТКК	16,4	14,3			1,0	5,7	0,0	5,4	0,1	5,0
И70	1,7	5,8			1,8	5,8	0,1	5,5	-0,1	5,1
И100	1,4	4,1			1,5	3,9	0,0	3,4	0,0	3,0
И150	-0,4	3,7			-0,5	3,8	0,0	3,5	-0,1	2,8

Таблица 5. Средняя ошибка и разброс для АИ-95

Св-во	Лин. расчет		Стандартный спец. метод		Адаптированный спец. метод		Бонусы смещения		Dupont	
	Ср. ош.	Разброс	Ср. ош.	Разброс	Ср. ош.	Разброс	Ср. ош.	Разброс	Ср. ош.	Разброс
ИОЧ	-0,2	0,5	-0,4	0,6	0,0	0,4	0,0	0,3	0,0	0,4
МОЧ	-1,1	0,9	-1,0	0,9	0,0	0,3	0,0	0,3	0,0	0,4
ДНП	-1,5	7,7	-2,2	7,7	-0,2	7,7	-0,3	6,7	-0,5	6,5
ТКК	16,3	13,3			0,7	5,7	0,0	4,8	0,7	6,2
И70	1,1	5,3			2,1	5,2	0,0	4,9	-0,3	4,7
И100	2,2	4,0			2,4	3,9	0,0	3,5	0,0	3,4
И150	-0,1	2,9			-0,3	2,9	0,0	2,7	-0,1	2,8

Таблица 6. Средняя ошибка и разброс для АИ-98

Свойство	Лин. расчет		Стандартный спец. метод		Адаптированный спец. метод		Бонусы смещения		Dupont	
	Ср. ош.	Разброс	Ср. ош.	Разброс	Ср. ош.	Разброс	Ср. ош.	Разброс	Ср. ош.	Разброс
ИОЧ	0,0	0,5	-0,9	0,6	0,0	0,5	0,0	0,2	0,1	0,8
МОЧ	-0,9	0,6	-0,8	0,6	0,0	0,4	0,0	0,1	0,8	0,6
ДНП	-1,1	6,7	-1,9	6,6	-0,3	6,9	0,0	2,3	3,1	5,9
ТКК	33,2	11,9			1,3	7,4	0,0	5,1	12,3	12,1
И70	-1,6	5,2			-0,6	5,3	0,0	3,3	-3,2	4,6
И100	4,4	4,7			4,8	4,7	0,0	3,4	2,5	4,1
И150	-0,1	4,8			-0,2	4,7	0,0	3,6	-2,4	4,9

Сравнение различных законов смешения для бензинов

Для сравнения использовались два показателя.

Средняя ошибка. Среднее значение отклонения R_j свойства смеси L_j , вычисленного с использованием закона смешения, от фактического значения свойства смеси E_j , полученного в результате лабораторных анализов:

$$\bar{R} = \frac{\sum_j (L_j - E_j)}{J}$$

где J — число операций смешения.

Разброс. Стандартное отклонение σ , умноженное на 1,96, где:

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{J-1} \sum (R_j - \bar{R})^2}$$

Величина $1,96 \cdot \sigma$ характеризует 95% данных, то есть 95% прогнозных значений, полученных с помощью рассматриваемого закона смешения, будут находиться в следующем диапазоне:

$$[\bar{R}_j - 1,96 \cdot \sigma_j; \bar{R}_j + 1,96 \cdot \sigma_j]$$

В табл. 2–6 приведены значения средних ошибок и разбросов, рассматриваемых в адаптации законов смешения для одного из НПЗ. Сравнение осуществляется с результатами смешения по линейному закону. Под специальным методом для ИОЧ и МОЧ подразумевается метод Ethyl, для ДНП — индекс смешения, для фракционного состава — ТКК, И70, И100 и И150 — специальный метод фракционного состава. Также в таблицах приводятся характеристики прогноза с использованием бонусов смешения и метода Dupont. Стандартный специальный метод — закон с коэффициентами, взятыми из литературных источников (Ethyl) или из модели месячного планирования НПЗ (индекс ДНП).

Как следует из приведенных таблиц, адаптированный специальный метод (метод Ethyl) для октановых чисел и метод бонусов позволяют свести среднюю ошибку моделирования наиболее значимых показателей (ИОЧ и МОЧ) к нулю.

Использование в системах управления

Адаптировать нелинейные законы смешения к данным конкретного НПЗ актуально для систем всех уровней от месячного планирования (PIMS, RPMS) и до систем on-line управления (OpenBPC/PBO). Причем для off-line систем планирования и оптимизации это более важно, так как

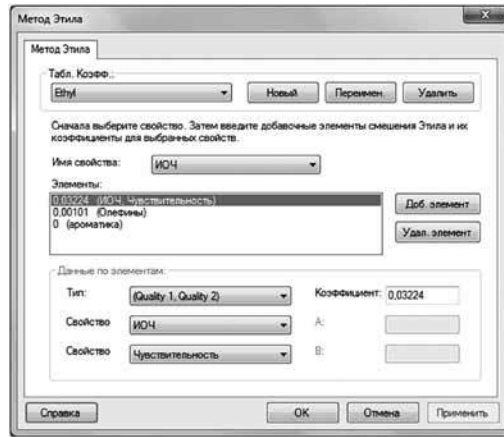


Рис. 4. Задание коэффициентов метода Ethyl

ввиду отсутствия обратной связи в реальном времени такие системы не могут сами корректировать параметры моделей смешения по фактическим данным в темпе с процессом. А неточные законы смешения увеличивают погрешность общей модели, что снижает эффективность всей системы управления.

Коммерческие программные продукты, предназначенные для оптимизации смешения, имеют встроенные средства нелинейного модели-

рования, позволяющие выбрать метод расчета и указать коэффициенты. В качестве примера рассмотрим окно для ввода параметров метода Ethyl системы оперативного планирования и оптимизации рецептур смешения BLEND (рис. 4). Это окно позволяет задавать коэффициенты a_1, a_2, a_3 для исследовательского октанового числа и коэффициенты b_1, b_2, b_3 для моторного октанового числа. В системе имеются усредненные значения указанных коэффициентов, но система BLEND позволяет легко изменять их на другие, адаптированные к конкретному НПЗ.

Системы on-line управления и оптимизации смешения, например, Honeywell Profit Blend Optimizer (PBO), напротив, благодаря обратной связи от поточного анализатора, который измеряет в реальном времени свойства смеси компонентов, имеют возможность осуществлять коррекцию модели смешения с периодом поточного измерения свойств смеси. Однако такая коррекция, часто называемая компенсацией модели, реализуется, как правило, изменением значения свободного члена в уравнении закона смешения (рис. 5).

Измеренное значение свойства смеси A , сравнивается с вычисленным по модели Y , разница фильтруется и в виде свободного члена прибавляется к вычисленному значению.

Но и в этом случае важно использовать в качестве моделей смешения адаптированные нелинейные законы смешения, так как простейшей линейной компенсации недостаточно для повышения эффективности управления смешением.

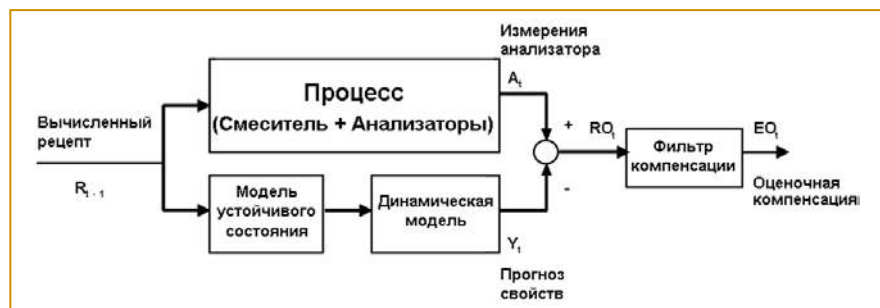


Рис. 5. Схема компенсации модели смешения

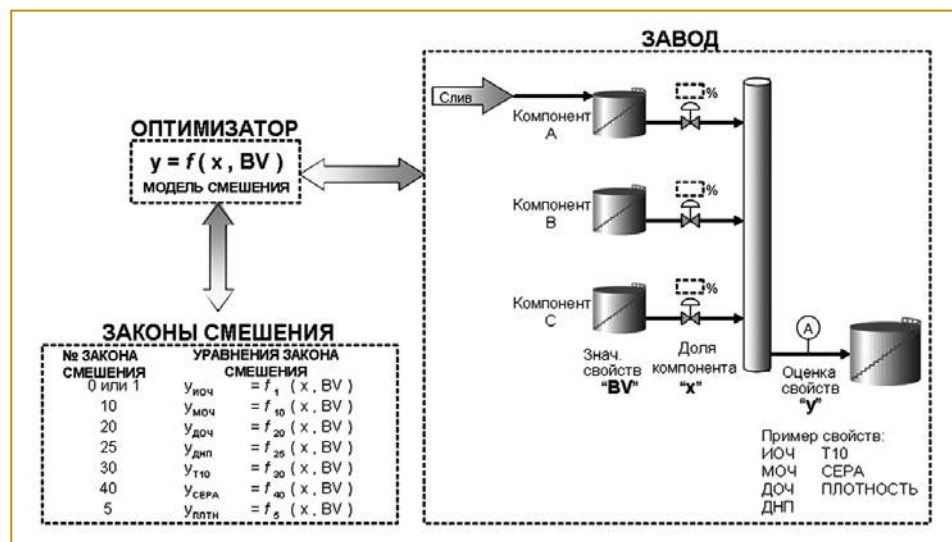


Рис. 6. Пример использования законов смешения в системе РВО

Рассмотрим пример использования законов смешения в системе on-line оптимизации РВО, представленный на рис. 6.

Здесь закон смешения имеет вид:

$$y_p = f(x_i, BV_{pi}),$$

где: p — моделируемое свойство; y_p — необработанное (до компенсации) значение для свойства p в смеси по оценке модели; x_i — объемная доля компонента i в смеси; BV_{pi} — значения свойства p для компонента i .

Система РВО позволяет ввести любой закон смешения, который затем используется оптимизатором при расчете оптимальной рецептуры.

Таким образом, полученные адаптированные законы смешения могут использоваться в off- и on-line системах управления. Причем адаптация более важна в off-line системах, так как они не связаны с реальным временем и сами не могут корректировать заданные модели смешения. Но и в on-line системах, несмотря на возможности компенсации модели с использованием обратной связи от поточного анализатора, адаптация нелинейных законов смешения повышает эффективность оптимизации.

Экономический эффект

Повышение точности моделирования нелинейного смешения уменьшает общую погрешность off- и on-line оптимизации, что приводит к получению дополнительной прибыли. Для бензинов это, как правило, означает уменьшение отдачи качества по октановым числам при смешении товарного продукта. При смешении мазутов из компонентов, сильно различающихся по кинематической вязкости (например, дизельные топлива и гудроны), актуальной является возможность адекватно рассчитать вязкость смеси, чтобы ликвидировать повторные смешения и при этом минимизировать вовлечение более ценных компонентов (дизельное топливо, вакуумный газойль и т. д.).

На НПЗ, не использующих программные системы оптимизации, специалисты по смешению в некоторых случаях опытным путем «нащупывают» значение поправки к линейному расчету, для корректировки расчетного значения октановых чисел и других свойств топлив. При этом невозможно отразить зависимость вносимой поправки от рецептуры смешения, углеводородного состава компонентов и др. Очевидно, что более корректный учет нелинейностей позволяет достичь существенно более высокой точности прогнозирования свойств смеси.

Поэтому многие крупнейшие мировые корпорации (ExxonMobil, Ethyl, DuPont, Shell и др.) финансируют исследовательские работы по моделированию смешения октановых чисел, ДНП, вязкости и других основных свойств нефтяных топлив [2–8]. Широкое использование цифровых технологий в системах управления различного уровня только усиливает интерес к математическому моделированию процессов компаундирования. Список публикаций с эмпирическими законами нелинейного смешения за последние 10-летия достигает многих десятков. Все это говорит о большом экономическом потенциале и актуальности задачи адекватного моделирования нелинейного смешения.

Оценим экономический аспект адекватного моделирования нелинейного смешения.

В работе [10] приведена формула для оценки причин погрешности расчетного качества смеси от фактического:

$$\Delta_{\text{офф}} = E_N + \sqrt{E_L^2 + E_Q^2 + E_C^2}.$$

Здесь E_N — погрешность от неточного моделирования нелинейного смешения; E_L — погрешность измерения свойства смеси в лаборатории; E_Q — погрешность свойств компонентов смешения; E_C — погрешность от неточной реализации рецептуры.

Три вида погрешностей E_L , E_Q , E_C имеют случайный характер, так как связаны с измерениями (в лаборатории или КИП на производстве), а E_N определяется детерминированной математической моделью смешения, и поэтому эта погрешность неслучайна и входит в формулу как слагаемое. Численная оценка указанных погрешностей весьма затруднительна, так как их сложно выделить из общей погрешности off-line оптимизации и представить в виде физических единиц измерения. Легче всего поддается оценке погрешность лаборатории, так как для каждого метода измерения существует соответствующий ГОСТ,

и в ГОСТ приводятся требования к точности — воспроизводимость и сходимость метода измерения. Согласно общему для всех лабораторных методов измерения ГОСТ Р 8.580-2001 «Определение и применение показателей прецизионности методов испытаний нефтепродуктов», с 95% вероятностью значение E_L не превышает $0,59R$, где R — погрешность воспроизводимости. Погрешности E_Q , E_C при реализации on-line управления по порядку величины, как правило, существенно ниже E_L .

Эффект нелинейности (E_N) для октановых чисел, как указывалось выше, составляет 0,2-1 пункт. Простые корректировки расчетов (на фиксированное значение) по опыту предыдущих смещений позволяют снизить эту погрешность, но лишь до некоторой степени (0,2-0,5). На практике статистический анализ нелинейностей и адаптация законов смещения, по опыту компании Honeywell, позволяет снизить E_N до 0,1-0,3.

При средней цене октано-тонны 600 руб./т и средней производительности НПЗ по бензинам 2 млн. т/г, получим годовой эффект от снижения отдачи качества по октановым числам за счет адекватного учета нелинейности их смещения на 0,1:

$$0,1 \cdot 600 \cdot 2 \text{ млн.} \approx 120 \text{ млн. руб.}$$

Конечно, эта оценка носит несколько условный характер, хотя бы потому, что выделить точно из всей погрешности расчета относительно фактических результатов погрешность нелинейного смещения, строго говоря, невозможно. «Истинное» фактическое значение моделируемого свойства всегда известно, как уже отмечалось, с некоторой погрешностью, определяемой лабораторным методом измерения, и адекватность нелинейной модели лучше описывать в статистических терминах. Тем не менее, даже такая приблизительная и грубая оценка свидетельствует о большом экономическом потенциале точного моделирования нелинейного смещения октановых чисел.

Изменить качество текущего дня - вот высшее искусство.

Генри Дэвид Торо

Вышеприведенная оценка экономического эффекта относится только к улучшению управления процессом компаундирования. Но полученные нелинейные законы смещения свойств нефтяных топлив могут применяться на всех уровнях планирования (месячное, календарное, оперативное), что в каждом случае применения повышает точность моделирования и дает согласованный результат в различных системах. В конечном счете, это повышает общую прибыль НПЗ при минимальных затратах на адаптацию моделей смещения.

Список литературы

1. Справочник химика 21 века (<http://chem21.info/tabs/98989/>).
2. *Cud Thomas Baird*. Petroleum Product Blending. First edition. Winchester, Virginia 22604.
3. *Dornheim F.R., Borgenson B.T.* Optimum Nonlinear Gasoline Blending // Oil Gas Journal. Vol. 56, No 21 (May 1988). pp. 91-97.
4. *Mohamed Fahim, Taher Al-Sahhaf, Amal Elkilani*. Fundamentals of Petroleum Refining. Elsevier. 2010. ISBN: 9780444527851.
5. *Healy W.C., Maassen C.W. and Peterson R.T.* (1959). Predicting Octane Numbers of Multi-Component Blends. Report Number RT-70. Ethyl Corporation, Detroit.
6. *Morris, William E.* The Interaction Approach to Gasoline Blending. NPRA Paper AM-7530. National Petroleum Refiners Association annual meeting. March. 1975.
7. *Riazi M.R. and Daubert T.E.* Analytical correlations interconvert distillation curve types // Oil & Gas Journal. Aug. 25, 1986.
8. *Riazi M.R.* Characterization and Properties of Petroleum Fractions. ASTM stock number: MNL50, ISBN 0-8031-3361-8, 2005.
9. *Ефитов Г.Л., Журавлева Т.Ю.* Математическое моделирование операций смещения // Математические методы в химии и в химической технологии. Сборник. 1995. с.110.
10. *Аносов А.А., Ефитов Г.Л., Шайдуллин Р.А., Голованов Ю.В., Королев А.В.* Влияние погрешности лаборатории на эффективность системы управления компаундированием топлив на НПЗ//Автоматизация в промышленности. 2017. № 3.

Аносов Андрей Александрович — канд. техн. наук, нач. отдела,

Ефитов Григорий Леонидович — канд. техн. наук, ст. консультант,

Шайдуллин Ренат Анварович — консультант АО «Хоневелл».

Контактные телефоны: 7(495)797-99-44, 796-98-00.

E-mail: grigory.efitov@honeywell.com

Симулятор на основе дополненной/виртуальной реальности для обучения производственного персонала и устранения недостатков профессиональной подготовки

Корпорация Honeywell представила новый симулятор на основе сочетания дополненной реальности (AR) и виртуальной реальности (VR) для обучения производственного персонала важнейшим действиям на производстве. Учитывая тенденцию старения кадров и необходимость качественной передачи знаний молодым специалистам, Honeywell разработала систему профессионального обучения Connected Plant Skills Insight Immersive Competency. Она предназначена для ускоренного и более эффективного обучения нового производственного персонала за счет перевода процесса обучения на современные технологии.

Благодаря удачному сочетанию смешанной реальности, современных методов информационного анализа и более чем 25-летнего опыта Honeywell в области профессионального обучения персонала удалось создать уникальную интерактивную среду обучения без отрыва от производства. В данном решении применяется первый и пока единственный в мире голографический компьютер HoloLens от Microsoft и гарнитуры смешанной реальности Windows Mixed Reality, позволяющие симулировать различные сценарии работы контроллера Honeywell C300, такие как отказ основного контроллера и переключение при отказе, неисправность кабеля, отказ источника питания. Симуляция этих сценариев позволяет обучать персонал и проверять приобретенные навыки.

Решение корпорации Honeywell, симулирующее конкретные действия работника в виртуальных средах, доступ к которым осуществляется через облако, обеспечивает для обучаемого близкое к естественному взаимодействие и обмен информацией как с коллегами, так и с инструктором. При этом обучаемые, так же как и при работе на авиатренажере, могут в безопасной обстановке изучать последствия принимаемых ими решений. Такой подход позволяет на 100% повысить эффективность поддержания навыков по сравнению с традиционными методами обучения и сокращает продолжительность технического обучения на 66%. Дополнительно за процессом обучения сотрудников можно наблюдать в рамках официальной системы управления профессиональной подготовкой.

[Http://www.honeywellprocess.com](http://www.honeywellprocess.com)