

ИДЕНТИФИКАЦИЯ ИМИТАЦИОННЫХ МОДЕЛЕЙ РЕКТИФИКАЦИОННЫХ КОЛОНН ПРОЦЕССОВ НЕФТЕПЕРЕРАБОТКИ

Сластенов И.В.

Институт проблем точной механики и управления РАН, Саратов, Россия

igor.slastenov@gmail.com

Кушников В.А.

Саратовский научный центр РАН, Саратов, Россия

kushnikoff@yandex.ru

Богомолов А.С.

Институт проблем точной механики и управления РАН, Саратов, Россия

alexbogomolov@yandex.ru

Резчиков А.Ф.

Институт проблем управления им. В.А. Трапезникова РАН, Москва, Россия

rw4cy@mail.ru

Аннотация. Проверена принципиальная возможность идентификации фундаментальной имитационной модели ректификационной колонны дезанизации типовой газофракционирующей установки нефтеперерабатывающего завода. Проанализированы результаты серии численных экспериментов по идентификации указанной модели с применением расширенного фильтра Калмана.

Ключевые слова: идентификация, расширенный фильтр Калмана, имитационное моделирование, процесс нефтепереработки, фундаментальная модель, ректификационная колонна.

Введение

Последнее десятилетие отмечено заметным развитием инструментов имитационного моделирования технологических процессов (ТП), предназначенных для создания фундаментальных моделей технологических объектов, позволяющих детально воспроизводить структуру и характеристики моделируемых установок с учетом законов сохранения массы и энергии, а также строгих физических зависимостей для процессов термодинамики, теплообмена и гидрогазодинамики [1]. При этом помимо общепризнанных областей применения высокоточных имитационных моделей ТП, таких как проектирование технологических установок, определение номинальных характеристик единиц оборудования, поиск «узких мест», многовариантный причинно-следственный анализ и компьютерный тренинг оперативного персонала [2], наблюдается повышение интереса к использованию этого класса моделей для задач управления ТП [3].

Традиционно в системах управления на основе прогнозирующих моделей (MPC – model predictive control) используются эмпирические модели (ЭМ), которые представляют собой зависимости (часто линейные) выходных сигналов от входных, полученные в процессе наблюдения за объектом моделирования. Преимуществами таких моделей является их простота, высокая скорость расчета и наличие универсальной теоретической базы, которая позволяет применять эти модели к разным типам ТП. Кроме того, в случае линейных моделей гарантирована сходимость численных методов их расчета, что означает высокую надежность, которая является важным критерием функционирования системы управления. Вместе с тем допущения, принятые при создании таких моделей, а также их структурное несоответствие объекту моделирования существенно ограничивают диапазон технологических режимов, в которых ЭМ обеспечивают высокую точность предсказания поведения объекта. В случае изменений условий эксплуатации или технологического режима ЭМ необходимо перенастраивать, для чего на объект подаются тестовые сигналы (возмущения), в процессе чего снижается качество управления ТП.

В отличие от ЭМ фундаментальные имитационные модели (ИМ) ТП строятся на основе знаний о структуре и принципах функционирования объекта, что позволяет им с высокой точностью воспроизводить поведение объекта в широком диапазоне изменения параметров его технологического режима. Тем не менее непосредственное применение фундаментальных ИМ в контуре управления ТП было до последнего времени затруднительно в силу ограничений в скорости расчета таких моделей и отсутствию унифицированных подходов к их идентификации. Однако развитие вычислительной техники, информационных систем и средств имитационного моделирования расширяет область применимости высокоточных ИМ ТП. В данной статье рассмотрены результаты численных

экспериментов по идентификации фундаментальной ИМ на примере строгой модели колонны дезанизации типовой газофракционирующей установки (ГФУ) нефтеперерабатывающего завода.

1. Задача идентификации имитационной модели

Фундаментальные ИМ ТП представляют собой нелинейные модели в пространстве состояний. Пусть $\mathbf{x}_i = (x_i^{(1)} \dots x_i^{(k)})$, $\mathbf{y}_i = (y_i^{(1)} \dots y_i^{(l)})$, $\mathbf{u}_i = (u_i^{(1)} \dots u_i^{(m)})$ – значения вектора состояния модели, вектора выходов, и вектора управления, соответственно, в момент времени t_i из заданной сетки времени $T = \{t_i\}_{i=0}^n$, для которой рассчитываются значения модели; \mathbf{p} – вектор настраиваемых параметров модели. Тогда динамика ИМ в общем виде описывается следующей системой уравнений:

$$\begin{cases} \mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{f}_i(\mathbf{x}_i, \mathbf{u}_i; \mathbf{p}), \\ \mathbf{y}_i = \mathbf{g}_i(\mathbf{x}_i, \mathbf{u}_i). \end{cases} \quad (1)$$

Из системы (1) видно, что качество прогноза при заданном управлении зависит как от близости начального состояния \mathbf{x}_0 модели к состоянию реального технологического объекта в соответствующий момент времени, так и от вектора параметров \mathbf{p} . Поскольку ТП постоянно находится под воздействием огромного количества различного рода возмущений, то его состояние постоянно изменяется. Поэтому необходим инструментарий, позволяющий приводить модель, настроенную на некоторый технологический режим, к текущему состоянию объекта в режиме реального времени. Вектор параметров можно считать константой на небольших промежутках времени (для большинства процессов нефтепереработки предельный интервал составляет порядка месяца), однако в течение цикла функционирования установки (характерный период работы между плановыми ремонтами составляет порядка одного года) эти значения также испытывают медленный дрейф, а значит, нуждаются в периодической корректировке.

Под идентификацией модели будем понимать совместное оценивание текущего состояния и параметров рассматриваемой модели. Для этого удобно ввести расширенный вектор состояния:

$$\xi_i = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_i \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} \quad (2)$$

Тогда систему (1) можно переписать в следующем виде:

$$\begin{cases} \xi_{i+1} = \varphi_i(\xi_i, \mathbf{u}_i), \\ \mathbf{y}_i = \psi_i(\xi_i, \mathbf{u}_i). \end{cases} \quad (3)$$

В таком виде задача идентификации в смысле совместного оценивания состояния и параметров сводится к классической задаче фильтрации, которая может быть решена, например, с помощью расширенного фильтра Калмана.

2. Характеристика объекта моделирования

Основная технологическая линия ГФУ представляет собой цепочку ректификационных колонн (рис. 1), в каждой из которой происходит выделение определенной фракции поступающего на установку сырья [4]. Количество колонн на конкретной установке, как правило, составляет от 3 до 7 в зависимости от перерабатываемого сырья и целевых продуктов. Все колонны имеют схожую конфигурацию и отличаются количеством тарелок, геометрическими размерами и номинальными значениями параметров нормального технологического режима.

На каждой тарелке пар, поступающий с нижней тарелки через отверстия, проходит через слой стекающей через сливной стакан с вышестоящей тарелки жидкости и вступает с ней в контакт (рис. 2). Это приводит к массообмену между паром и жидкостью на тарелке, в результате чего из пара в жидкость переходят наиболее тяжелые компоненты, а из жидкости в пар – наиболее легкие. Таким образом в движущейся по тарелкам сверху вниз жидкости постепенно растет концентрация тяжелых фракций, а в поднимающемся снизу вверх паре увеличивается содержание легких компонентов.

В силу конечности времени пребывания пара и жидкости на тарелке между ними не успевает установиться абсолютное термодинамическое равновесие. Поэтому важной характеристикой функционирования тарелки является ее коэффициент полезного действия (КПД), который представляет собой меру приближенности работы реальной тарелки к теоретической тарелке, то есть гипотетической тарелке, на которой успевает установиться идеальное равновесие между паровой и жидкой фазами. При КПД равном 0% составы поступающих на тарелку пара и жидкости не

изменяются; при значении КПД 100% с тарелки выходят равновесные составы. Формально этот параметр может быть определен разными способами: например, как общий (средний) КПД, как локальный КПД (метод Мерффри); существуют также методы на основе теории массопередачи [5]. Здесь под КПД тарелки будет пониматься доля присутствующего на тарелке вещества, для которой успевает установиться идеальное термодинамическое равновесие. КПД тарелки зависит не только от конструктивных особенностей самой тарелки, но также от текущих параметров технологического режима: компонентных составов, расходов и температур поступающих на тарелку потоков и давления на тарелке. Это означает, что данный параметр в модели колонны необходимо обновлять по мере изменения технологического режима. Также КПД тарелок снижаются в процессе эксплуатации колонны вследствие ее загрязнения. Таким образом, КПД тарелок являются ключевыми параметрами модели колонны, которые должны актуализироваться в рамках процедуры ее идентификации.

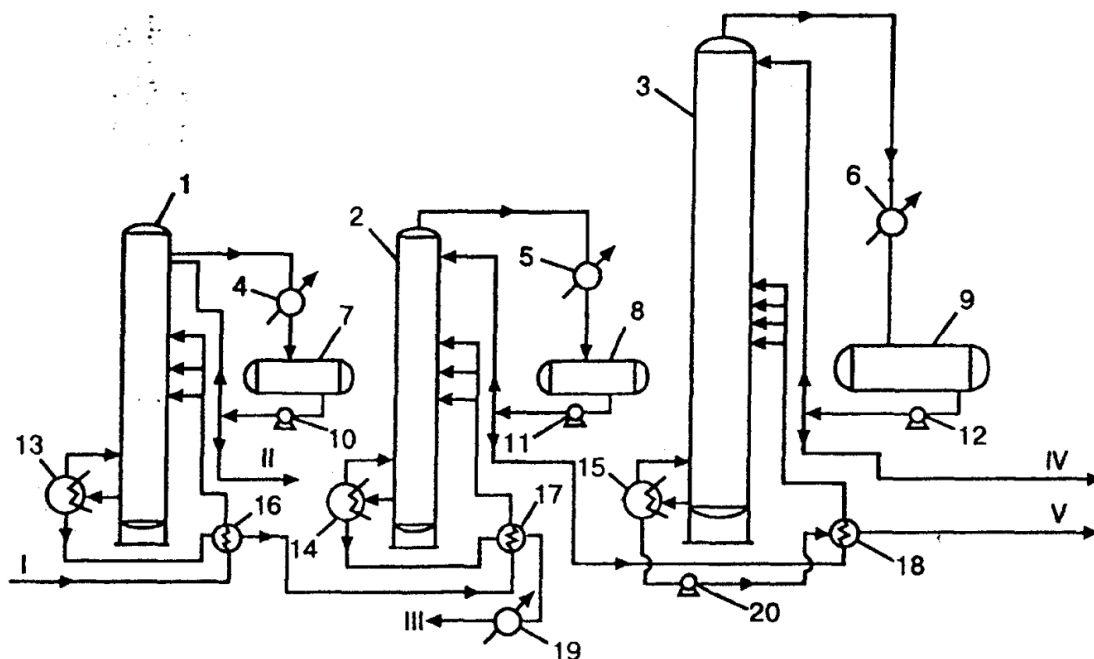


Рис. 1. Принципиальная технологическая схема промышленной ГФУ с тремя колоннами:

1 – пропановая колонна; 2 – бутановая колонна; 3 – изобутановая колонна;

4, 5, 6 – конденсаторы-холодильники; 7, 8, 9 – флегмовые емкости; 10, 11, 12, 20 – насосы;

13, 14, 15 – ребойлеры; 16, 17, 18 – теплообменники; 19 – холодильник бензина.

Потоки: I – нестабильный бензин; II – пропан; III – стабильный бензин; IV – изобутан; V – н-бутан

Для проведения численных экспериментов по идентификации была выбрана колонна дезанизации, поскольку она является первой в технологической цепочке ГФУ, вследствие чего сильно подвержена влиянию изменений характеристик поступающего на установку сырья и обладает наибольшей вариативностью технологического режима. Сырьем колонны является смесь головок стабилизации установок нефтепереработки и сжиженного углеводородного газа. Продуктами колонны являются этан-пропановая смесь, которая направляется в топливную сеть завода, и широкая фракция легких углеводородов (ШФЛУ) с низкой концентрацией этана.

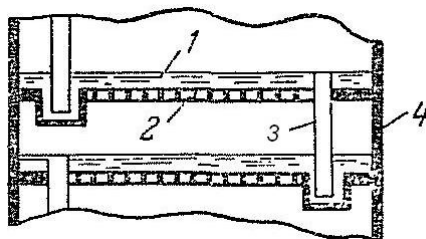


Рис. 2. Принцип работы тарелок ректификационной колонны: 1 – слой жидкости на тарелке;

2 – отверстия тарелки; 3 – сливной стакан; 4 – стенка колонны

3. Организация численных экспериментов

Несмотря на то, что попытки идентификации моделей колонн делались и ранее [6, 7], во всех найденных по этой теме работах были приняты те или иные существенные допущения при построении модели. В данной рассматривается пример идентификации строгой ИМ колонны, в которой в полной мере учитываются материальный и энергетический балансы, геометрия колонны, а также уравнения гидравлики, описывающие перетоки вещества между тарелками.

Для проведения экспериментов построено две модели. Первая модель создана в специализированной среде для моделирования ТП UniSim Design (рис. 3) и использовалась в качестве источника синтетических исходных данных (вместо реальной установки). Далее будем называть эту модель объектом. Вторая модель представляет собой собственную реализацию на языке программирования Python, на ней проводилось исследование алгоритма идентификации на базе расширенного фильтра Калмана.

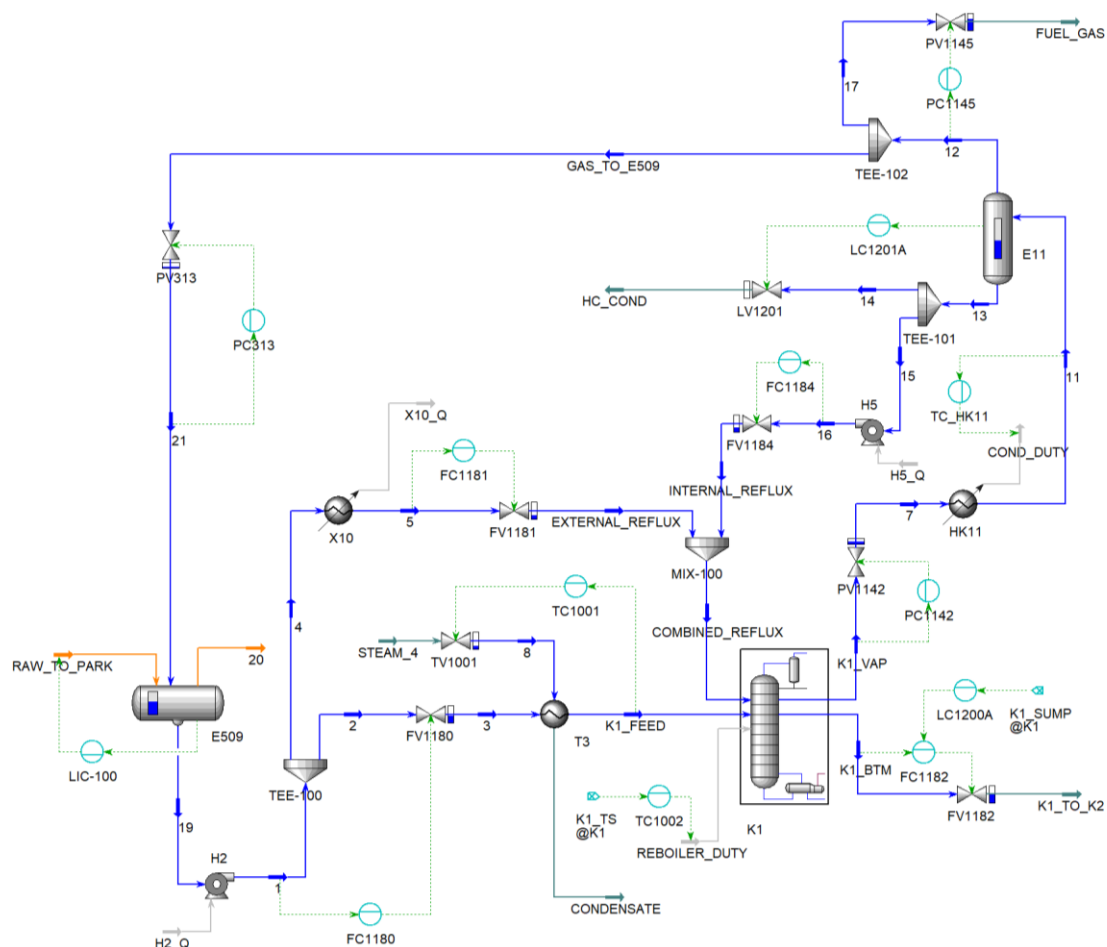


Рис. 3. Структура модели секции деэтанзации ГФУ, построенной в пакете моделирования ТП UniSim Design

Моделируемая колонна деэтанзации состоит из 43-х тарелок. Сырье подается на тарелки с номерами 30 и 35 (нумерация тарелок снизу вверх).

Для описания материальных потоков в модели использованы следующие химические компоненты:

- Азот;
- Водород;
- Метан;
- Этан;
- Этилен;
- Пропан;
- Пропилен;
- Изобутан;
- Нормальный бутан;

- Транс-бутен-2;
- 2,2-диметил-пропан;
- Изопентан;
- Нормальный пентан;
- Транс-пентен-2;
- Гексан;
- Гептан.

Вектор состояния модели \mathbf{x} состоит из $k = 1672$ компонентов, которые включают следующие физико-химические характеристики для каждой тарелки колонны, флегмовой емкости и ребойлера:

- Количество каждого химического компонента в паровой и жидкой фазах;
- Мольные энтальпии пара и жидкости;
- Температуру;
- Коэффициент сжимаемости пара;
- Молярную плотность жидкости.

Помимо этого, в векторе состояний хранятся степени открытия регулирующих клапанов для контуров регулирования давления в колонне, температуры на выходе из конденсатора, давления и уровня жидкости во флегмовой емкости, расхода орошения, температуры на 5-й тарелке, уровня в кубе колонны и расхода деэтанализированной ШФЛУ в следующую колонну ГФУ.

Выходами модели являются:

- $y^{(1)}$ – давление на верхней тарелке колонны;
- $y^{(2)}$ – температура на выходе из конденсатора;
- $y^{(3)}$ – давление во флегмовой емкости;
- $y^{(4)}$ – уровень во флегмовой емкости;
- $y^{(5)}$ – расход орошения;
- $y^{(6)}$ – уровень в кубе колонны;
- $y^{(7)}$ – расход деэтанализированной ШФЛУ из куба колонны;
- $y^{(8)}$ – температура в кубе;
- $y^{(9)}$ – давление в кубе;
- $y^{(10)}, \dots, y^{(15)}$ – температуры на тарелках с номерами 43, 35, 30, 10, 5, 1, соответственно;
- $y^{(16)}, y^{(17)}$ – доли пропана в топливном газе и этана в нижнем продукте, соответственно.

В модели предусмотрены следующие виды возмущений:

- Компонентный состав, расход и температура сырья, подаваемого на тарелки 30 и 35;
- Расход и температура сырья, подаваемого на верхнюю тарелку;
- Расход отбора газа из флегмовой емкости на поддержание давления в сырьевых емкостях;
- Граничные давления продуктовых потоков (FUEL_GAS, HC_COND и K1_TO_K2 на рис. 3).

В качестве настраиваемого в процессе идентификации параметра модели использовался КПД тарелок, причем было принято допущение, что значение КПД одинаково для всех тарелок модели.

4. Результаты

Проведено несколько серий численных экспериментов. В каждой серии объект и настраиваемая модель запускались из некоторых начальных состояния (в общем случае не совпадающих). При этом и на объект, и на модель подавались одинаковые возмущения и управляющие воздействия.

После каждого запуска модели рассчитывалась невязка между моделью и объектом согласно следующему квадратичному критерию:

$$E = \frac{1}{(n+1)l} \sum_{i=0}^n \sum_{j=1}^l \left(\frac{y_i^{(j)} - z_i^{(j)}}{s_j} \right)^2 \quad (4)$$

Здесь $\mathbf{z}_i = (z_i^{(1)} \dots z_i^{(l)})$ – вектор выходов объекта, s_j ($j = 1, \dots, l$) – масштабирующие коэффициенты, которые выбираются исходя из физического смысла и единиц измерения соответствующего выхода:

- Давление – 20 кПа;
- Температура – 0,5 °C;
- Расход – 0,5 м³/ч;

- Уровень – 1,0 %;
- Содержание (мольное) пропана в топливном газе – 0,01;
- Содержание (мольное) этана в ШФЛУ – 0,0002.

Модель запускалась несколько раз (из одного и того же состояния) в разных условиях:

- Без идентификации для определения базовой погрешности, на основании которой определяется качество идентификации;
- Идентификация без зашумления выходов объекта (показывает влияние различий между объектом и моделью в начальном состоянии и значениях настраиваемых параметров);
- Идентификация с зашумленными выходами объекта, чтобы определить зависимость качества идентификации от уровня шумов;
- Идентификация при наличии структурных различий между объектом и настраиваемой моделью (была изменена геометрия колонны в модели).

Для всех запусков, кроме варианта без идентификации, рассчитан коэффициент снижения невязки относительно запуска без идентификации, который определяется как отношение величина невязки при запуске без идентификации E_{NoID} к невязке при запуске с идентификацией E_{ID} :

$$q = \frac{E_{NoID}}{E_{ID}} \quad (5)$$

Приближение значений выходов настраиваемой модели к значениям выходов объекта вследствие применения реализованного алгоритма идентификации на примере содержания этана в ШФЛУ показано на рис. 4, 5 для случаев без зашумления выходов объекта и с зашумлением, соответственно.

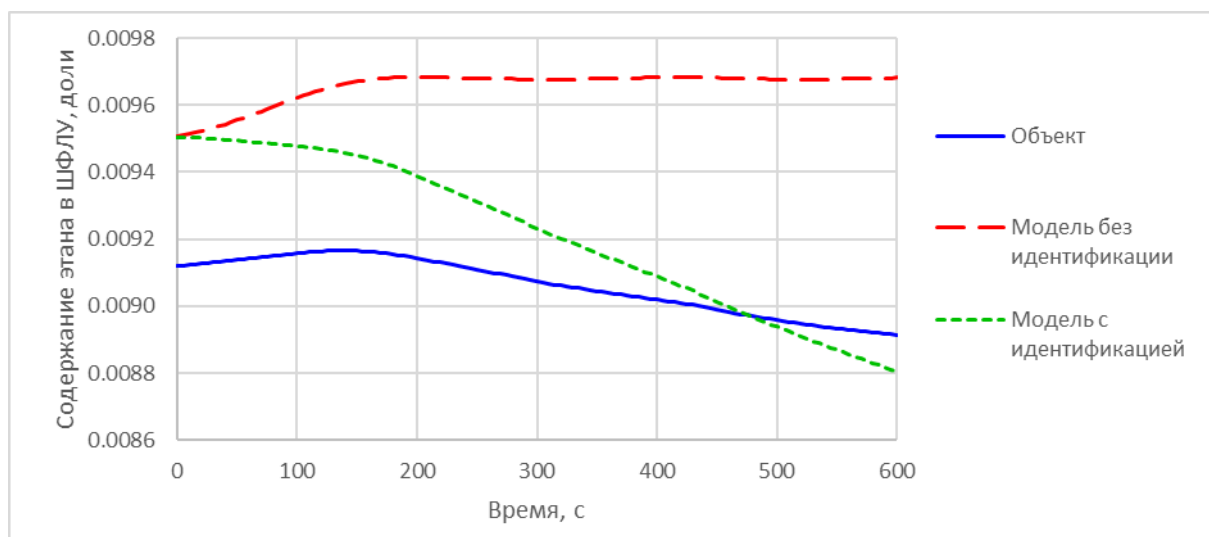


Рис. 4. Изменение содержания этана в ШФЛУ (выходы объекта без шума)

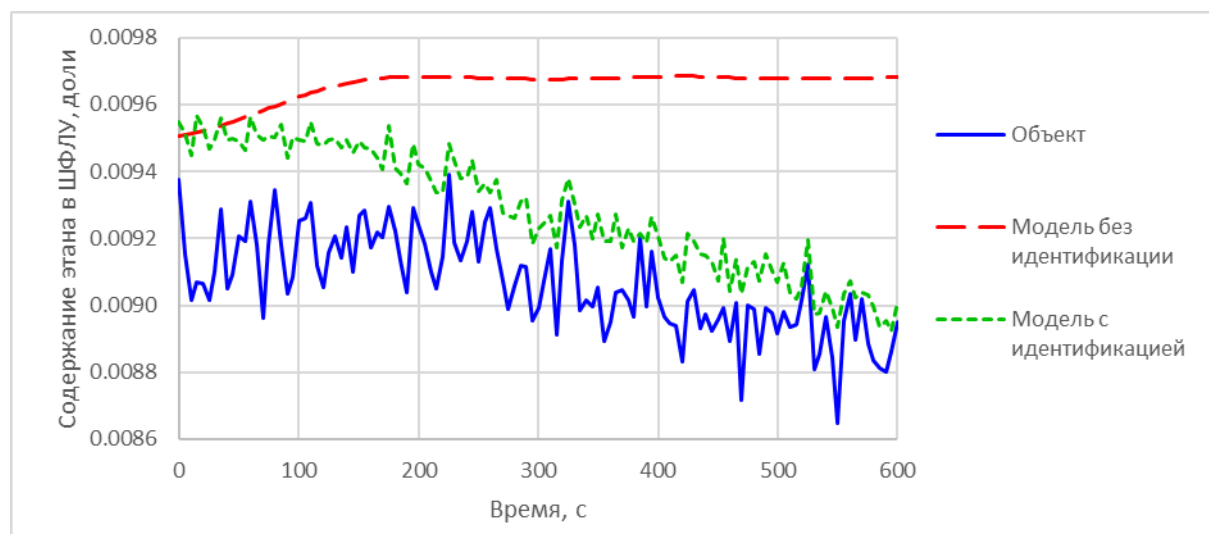


Рис. 5. Изменение содержания этана в ШФЛУ (выходы объекта зашумлены)

Проведенные эксперименты подтверждают принципиальную работоспособность расширенного фильтра Калмана при умеренных отклонения начального состояния настраиваемой модели от состояния объекта и амплитудах шумов порядка выбранных масштабирующих коэффициентов для соответствующих типов величин. Кроме того, идентификация продолжала быть успешной при внесении ошибок (до 10%) в геометрические параметры колонны в настраиваемой модели, хотя это и снижало качество прогноза (табл. 1). Тем не менее, если разница значений переменных состояния или амплитуды шума становятся в несколько раз больше выбранных масштабирующих коэффициентов, модель с расширенным фильтром Калмана становится неустойчивой. Помимо этого, в силу большой размерности модели фильтр Калмана существенно замедляет ее расчет, поскольку требуется оценка частных производных по всем компонентам вектора. Если при запуске без идентификации ускорение модели относительно реального времени составляет в среднем 65-70, то с фильтром Калмана происходит замедление в 6-8 раз (ускорение 0,12–0,15).

Таблица 1. Отклонения прогноза модели от объекта при запуске идентификации в разных условиях

Номер серии	Значения невязки			
	Без идентификации	Идентификация без шума	Идентификация с шумом	Структурные различия
1	4.43	0.547	1.051	0.809
2	3.59	0.490	0.910	0.746
3	4.04	0.527	0.973	0.749
4	4.83	0.611	1.134	0.913
5	4.10	0.548	1.011	0.808

5. Заключение

Выполненные расчеты подтверждают принципиальную возможность идентификации фундаментальной ИМ ректификационной колонны ГФУ. Вместе с тем выявлены ограничения по устойчивости проверенного алгоритма идентификации при существенных различиях в начальных состояниях настраиваемой модели и объекта, а также при сильной зашумленности выходов объекта. Кроме того, в процессе идентификации расчет модели становился медленнее реального времени, что делает невозможным ее применение в задачах управления ТП.

Оба указанных недостатка заметным образом вытекают из высокой размерности модели. В настоящее время ведутся работы по построению гибридных моделей технологических объектов [8, 9], которые были бы близки по точности к фундаментальным моделям, обладая при этом меньшей размерностью и большей скоростью расчета. Именно этот класс моделей представляется перспективным в качестве прогнозирующих моделей для нового поколения MPC.

Литература

1. *Foo D.C.Y.* Chemical engineering process simulation. – 2nd edition. – 2022. – 496 p. – ISBN 978-0-323-90168-0
2. *Дозорцев В.М.* Компьютерные тренажеры для обучения операторов технологических процессов. М.: СИНТЕГ, 2009. – 372 с.
3. *Rhinehart R.* Nonlinear Model-Predictive Control Using First-Principles Models // Smart Sensors Measurement and Instrumentation: Select Proceedings of CISCON 2021. – 2023. – P. 93–114.
4. *Капустин В.М.* Технология переработки нефти. В 2 ч. Часть вторая. Деструктивные процессы / В.М. Капустин, А.А. Гуреев. – М.: КолосС, 2013. – 334 с.
5. *Domingues T.L., Secchi A.R., Mendes T.F.* Overall efficiency evaluation of commercial distillation columns with valve and dualflow trays // AIChE Journal. – 2010. – Vol. 56, N 9. – P. 2323–2330.
6. *Yang D.R., Lee K.S.* Monitoring of a distillation column using modified extended Kalman filter and a reduced order model // Computers chem. Engng. – 1997. – Vol. 21. – P. S565–S570.
7. *Dodds S.* Application of an extended Kalman filter to a binary distillation column model / S. Dodds, G. Adams, W. Health, G. Goodwin // IFAC dynamics and control of process systems. – Jeju Island, Korea, 2001. – P. 421-426.
8. *Bradley W. et al.* Perspectives on the integration between first-principles and data-driven modeling // Computers & Chemical Engineering. – 2022. – Vol. 166. – 107898.
9. *Rajulapati L.* Integration of machine learning and first principles models / L. Rajulapati, C. Sivadurgaprasad, B. Shyamala, R. Rengaswamy // AIChE Journal. – 2022. – Vol. 68, N 6. – e17715.