



УДК 66.011

## ВОПРОСЫ МЕТОДОЛОГИИ ПРИ АВТОМАТИЗАЦИИ ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО РАСЧЕТА РЕАКТОРА КАТАЛИТИЧЕСКОГО РИФОРМИНГА С НЕПОДВИЖНЫМ СЛОЕМ КАТАЛИЗАТОРА

### METHODOLOGICAL QUESTIONS OF ENGINEERING DESIGN AUTOMATION OF FIXED-BED CATALYTIC REFORMING REACTOR

**Давыдов Кирилл Андреевич**

магистрант кафедры нефтехимии  
и химической технологии,  
Уфимский государственный нефтяной  
технический университет  
kirandav2000@mail.ru

**Чуракова Светлана Константиновна**

доктор технических наук, профессор,  
профессор кафедры нефтехимии  
и химической технологии,  
Уфимский государственный нефтяной  
технический университет  
churakovack@rambler.ru

**Аннотация.** Данная статья освещает вопросы методологии технологического расчета реактора каталитического риформинга с неподвижным слоем катализатора, дает основание применению одной из методик расчета и предлагает способ ее автоматизации.

**Ключевые слова:** риформинг, реактор, технологический расчет, автоматизация, программа расчета, регрессионный анализ.

**Davydov Kirill Andreevich**

Master of Department of Petrochemistry  
and Chemical Technology,  
Ufa State Petroleum Technological University  
kirandav2000@mail.ru

**Churakova Svetlana Konstantinovna**

Doctor of Technical Sciences,  
Professor of Department of Petrochemistry  
and Chemical Technology,  
Ufa State Petroleum Technological University  
churakovack@rambler.ru

**Annotation.** This article covers the question of engineering design of fixed-bed catalytic reforming reactor methodology, affords ground for an appliance of one of the design methods and suggests a solution to problem of its automatization.

**Keywords:** reforming, reactor, engineering design, automatization, regression analysis.

**А**втоматизация технологических расчетов направлена на сокращение времени, потребляемого на выполнение элементарных математических операций, лежащих в основе методологии этих расчетов. Обычно такие нетрудоемкие, но многочисленные действия выполняются специалистом-технологом вручную или воссоздаются в готовых программах, ограниченных в полноте и удобстве реализации методики. Подобными аспектами ее могут быть расчеты, основанные на многочисленных итерациях, поиск решений уравнений или экстремумов функций с заданной точностью, определение расчетных величин при помощи графиков и номограмм и т.д. Эти аспекты наряду с более простыми, с точки зрения оптимизации расчета, могут в дальнейшем подлежать алгоритмизации, значительно сокращая количество требуемых от специалиста действий и уменьшая время их выполнения. Таким образом, проблема автоматизации технологических расчетов, выступающая в дальнейшем предметом исследования, имеет прикладную значимость.

Основной замысел проводимого исследования – выявить зависимости, лежащие в основе технологического расчета реактора каталитического риформинга с неподвижным слоем катализатора, составить их математическое описание и показать методологические подходы к разработке реализующей их программы. В качестве основного языка предполагается Python v.3.10. Объектом исследования является методика расчета [1, с. 8], при автоматизации которой были определены следующие основные подходы:

- Возможность сверки проводимых расчетов с известными результатами выполнения расчетов и определений величин.
- Учет специфичности технологических параметров для выбранного сырья и катализатора.
- Итерационный характер определения ключевого конечного параметра теплового расчета – температуры на выходе из реактора.
- Выполнение значительной части расчетов по табличным и графическим данным из актуальных государственных стандартов и экспериментально выявленным закономерностям.

Первый подход позволяет оценить правильность производимых расчетов и определить их абсолютные и относительные погрешности; второй – проводить их для большинства вариантов процесса [2, с. 45], для чего в качестве исходных данных предлагаются характеристики катализатора, выходы продуктов и характеристики риформата. Подходы 3 и 4, до проведения связанного с автоматизацией исследования, подразумевали отклик от специалиста в виде ввода задаваемых вручную величин и связанных с ними параметров. Эти величины, согласно методике, представлялись как результаты анализа табличных данных и



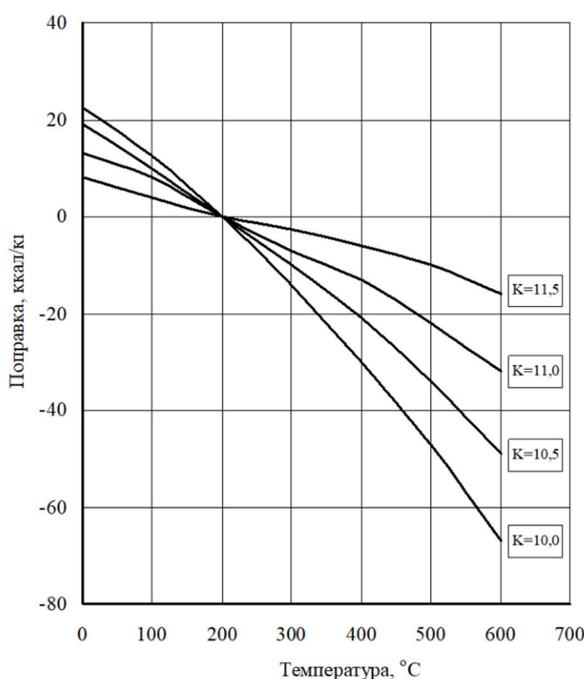
графиков. Нахождение табличных данных предлагается автоматизировать при помощи вычисления по пропорции в заранее сформированных файлах Excel, доступ к которым организуется за счет внедрения в программу библиотеки `orepruhl` [3]. Инструментом же имитации связанной с графиками работы специалиста предлагается представление их в виде функций, полученных при регрессионном анализе [4, с. 44], и расчет их значений при промежуточных параметрах.

Для осуществления регрессионного анализа описываемые графиками зависимости воспринимаются как результаты активного эксперимента и интерпретируются путем измерений вручную на интервалах значений параметров, допустимых для проведения процесса риформинга. По определенным значениям в файле Excel формируется эталонный набор данных, после чего к ним подбираются члены выражения, задающего функцию, и проводится регрессионный анализ [5, с. 4]. Подбор функции осуществляется до достижения абсолютной погрешности по эталонным значениям меньшей, чем погрешность измерения прибора.

Для обоснования формы кривых зависимостей исследуемых графиков требуется использовать объективные методы оценки адекватности [6, с. 102]. В работе применяется сопоставление с табличными значениями критериев Фишера и Стьюдента при достижении значения совокупного коэффициента детерминации  $R^2$  выше 0,9999. Полученные выражения включаются в разрабатываемую программу как функции, возвращающие свое значение при параметрах условий процесса, задаваемых специалистом.

### Применение способа функционального описания

На рисунке 1 показан один из графиков, подверженных регрессионному анализу.



**Рисунок 1** – График поправки к энтальпии паров нефтепродуктов на содержание ароматических углеводородов

В данном случае рассматривается зависимость определяемого параметра, поправки, от двух факторов: температуры и характеризующего фактора К. Принципиальных вариантов описания два:

- по температуре для каждой кривой, в зависимости от К, и с пропорцией для промежуточных значений;
- по температуре и К для всех кривых и промежуточных значений.

Для каждого варианта описания существует единый набор эталонных значений, представленных в таблице 1.

**Таблица 1** – Эталонные значения к графику  $\Delta H = f(t, K)$

t, °C	0	100	200	300	400	500	600
K	ΔH, ккал/кг						
10	22,67	12,67	0,00	-14,00	-30,00	-47,33	-66,67
10,5	19,33	10,67	0,00	-10,00	-20,67	-34,00	-48,67
11	13,33	8,67	0,00	-6,67	-12,67	-22,00	-32,00
11,5	8,00	4,00	0,00	-2,67	-6,00	-10,00	-16,00



На рисунке 2 показана реализация первого варианта при помощи линий тренда, описанных автоматически по методу наименьших квадратов на базе эталонных значений с наибольшим возможным для типовых функций R2.

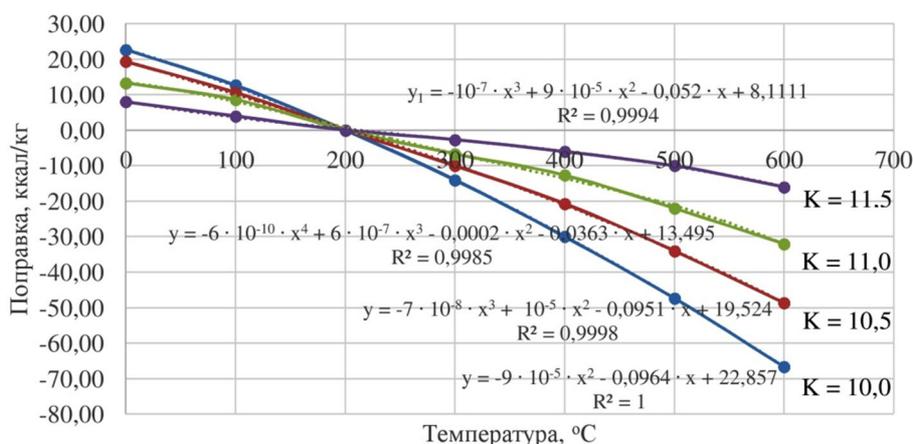


Рисунок 2 – Зависимости по линиям тренда для графика  $\Delta H = f(t, K)$

Все описанные выше зависимости являются значимыми по критерию Фишера, но не все из них предоставляют достаточно точное функциональное описание.

В таблице 2 приведены статистические характеристики уточненных при регрессионном анализе зависимостей. Для установленного в выборке по каждой функции числа степеней свободы, равного 7, критерии Стьюдента для доверительной вероятности 99 и 99,9 должны равняться 3,4995 и 5,4079 соответственно [7]. Согласно обозначенным критериям, в функциях для K = 10,5 и 11 присутствуют статистически незначимые элементы, требующие не только исключения, но и замены.

В таблице 3 показаны полученные абсолютные отклонения, рассчитанные при уточнённых коэффициентах в зависимостях. Значение погрешности определения величин вручную составляет 0,5 ккал/кг, что меньше величины отклонений по названным функциям. Вследствие этого можно констатировать необходимость уточнения вида функций и проведения повторных анализов.

Таблица 2 – Статистические характеристики уточненных зависимостей

Характеристика	10	10,5	11	11,5
R2	0,99997	0,99979	0,99789	0,99964
Значимость F	$9,13 \cdot 10^{-10}$	$5 \cdot 10^{-6}$	$4,21 \cdot 10^{-3}$	$1,14 \cdot 10^{-5}$
Статистика по критерию Стьюдента				
Y-пересечение	120	41,6419	10,8076	38,6932
t	-65	-14,8033	-2,4988	-17,0953
t2	-37	-0,6864	-0,3502	5,5931
t3	-	-2,2978	0,2009	-7,5657
t4	-	-	-0,4103	-

Таблица 3 – Абсолютные отклонения по полученным зависимостям

t	K							
	10		10,5		11		11,5	
	$\Delta H$	$\Delta$						
°C	ккал/кг		ккал/кг		ккал/кг		ккал/кг	
0	22,67	0,19	19,33	0,17	13,33	0,36	8,00	0,07
100	12,67	0,33	10,67	0,53	8,67	1,09	4,00	0,23
200	0,00	0,05	0,00	0,43	0,00	0,86	0,00	0,26
300	-14,00	0,00	-10,00	0,16	-6,67	0,42	-2,67	0,13
400	-30,00	0,19	-20,67	0,41	-12,67	0,94	-6,00	0,04
500	-47,33	0,05	-34,00	0,20	-22,00	0,46	-10,00	0,02
600	-66,67	0,05	-48,67	0,03	-32,00	0,07	-16,00	0,01



Второй вариант подхода к описанию функции подразумевает применение многопараметрической регрессии, результаты которой сравниваются по критериям Стьюдента равным 3,7074 и 5,9588 для числа степеней свободы, равного 6 [7].

В ходе компьютерного эксперимента была подобрана функциональная зависимость в следующем виде:

$$\Delta H = A \cdot K + B \cdot K \cdot t + C \cdot \frac{t^2}{K^2} + D \cdot \frac{t^3}{K^3} + E \cdot \frac{1}{K}, \tag{1}$$

где A, B, C, D, E – коэффициенты, определяемые при регрессионном анализе.

Статистические результаты анализа приведены в таблице 4. В таблице 5 приведены абсолютные отклонения значений полученной многопараметрической функции. Для упрощения уточнения её вида и получения более точных результатов, область исследования была ограничена температурами 400–600 °С.

**Таблица 4** – Статистические характеристики многопараметрической зависимости

R <sup>2</sup>	Значимость F	Статистика по критерию Стьюдента				
		K	K·t	t <sup>2</sup> / K <sup>2</sup>	t <sup>3</sup> / K <sup>3</sup>	1 / K
0,99993	10 <sup>-12</sup>	-12,624	22,873	-18,141	11,925	7,5244

**Таблица 5** – Абсолютные отклонения по многопараметрической зависимости

t	K							
	10		10,5		11		11,5	
	ΔH	Δ	ΔH	Δ	ΔH	Δ	ΔH	Δ
°С	ккал/кг		ккал/кг		ккал/кг		ккал/кг	
400	-30,00	0,40	-20,67	0,26	-12,67	0,39	-6,00	0,11
500	-47,33	0,35	-34,00	0,09	-22,00	0,50	-10,00	0,21
600	-66,67	0,21	-48,67	0,09	-32,00	0,03	-16,00	0,22

**Обсуждение результатов**

По результатам, полученным при описании функции по однопараметрическому варианту, можно заключить, что использование линий тренда для наборов эталонных данных не всегда позволяет осуществлять достаточно точное определение конечного вида выражений функций, члены которых также могут быть объективно незначимы, поэтому необходимо проводить анализ на основе сложных функций, а не типовых.

Сопоставляя рассмотренные варианты описания функций, можно сделать вывод, что, при анализе зависимостей от нескольких переменных, целесообразно использовать множественную регрессию, а не однопараметрическую для каждого рассматриваемого значения второго аргумента. Это связано с меньшим числом операций по подбору значимых членов многопараметрического выражения и большей точностью расчета при варьировании его параметров.

При анализе множественной регрессии замечено, что по задаваемым функциям нецелесообразно проводить исследование на всей области исследуемых параметров. Функции, описывающие отдельные части графика, позволяют получить более точный результат в большинстве случаев, поэтому, зная условия процесса и, как следствие, участки варьирования аргументов для разных групп веществ, при необходимости допустимо описать график несколькими многопараметрическими выражениями.

Таким образом, в ходе компьютерного исследования были достигнуты следующие результаты:

- показаны основные методологические подходы к разработке программы расчёта реактора каталитического риформинга с неподвижным слоем катализатора;
- проведен регрессионный анализ графиков энтальпии паров нефтепродуктов и компонентов водородсодержащего газа и поправок к ней;
- определены области эффективного выполнения расчета по найденным в ходе регрессионного анализа функциям.

**Список литературы:**

1. Прокофьева Т.В., Круглов С.С. (ст.), Круглов С.С. (мл.) Технологический расчет реакторного блока установки каталитического риформинга с платиновым катализатором: учебно-методическое пособие. – М. : Издательский центр РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина, 2019. – 42 с.
2. Владимиров А.И. Установки каталитического риформинга: учебное пособие. – М. : Нефть и газ, 1993. – 60 с.
3. OpenPyXL [Электронный ресурс]: openpyxl – A Python library to read/write Excel 2010 xlsx/xlsm files. – URL : <https://openpyxl.readthedocs.io/en/stable/index.html>
4. Болдырев Д.В. Корреляционный и регрессионный анализ: учебно-методическое пособие. – Невинномысск : Издательство СКФУ, 2016. – 169 с.
5. Кеткина О.С. Возможности MS Excel для регрессионного анализа: электронный текстовый курс. – Екатеринбург : УрФУ, 2020 – 43 с.
6. Самойлов Н.А. Моделирование в химической технологии и расчет реакторов: учебное пособие. – Уфа : Издательство УГНТУ, 2006. – 195 с.
7. Институт биотехнологии, пищевой и химической инженерии АлтГТУ [Электронный ресурс]: Справочная информация. – URL : <https://www.chem-astu.ru/science/reference/index.html>

**List of references:**

1. Prokof'eva T.V., Kruglov S.S. (senior), Kruglov S.S. (junior) Technological calculation of the reactor block of the catalytic reforming unit with a platinum catalyst: tutorial. – М. : Gubkin Russian State University of Oil and Gas (NRU) Publishing Center, 2019. – 42 p.
2. Vladimirov A.I. Catalytic reforming units: textbook. – М. : Oil and Gas, 1993. – 60 p.
3. OpenPyXL [Electronic resource]: openpyxl – A Python library to read/write Excel 2010 xlsx/xlsm files. – URL : <https://openpyxl.readthedocs.io/en/stable/index.html>
4. Boldyrev D.V. Correlation and regression analysis: tutorial. – Nevinnomyssk : SKFU Publishing House, 2016. – 169 p.
5. Ketkina O.S. Possibilities of MS Excel for regression analysis: an electronic text course. – Yekaterinburg : UrFU, 2020 – 43 p.
6. Samoilov N.A. Modeling in Chemical Technology and Calculation of Reactors. – Ufa : Publishing house UGNTU, 2006. – 195 p.
7. Institute of Biotechnology, Food and Chemical Engineering Altai State Technical University [Electronic resource]: Reference information. – URL : <https://www.chem-astu.ru/science/reference/index.html>