

文章编号: 1003-9015(2018)06-1395-08

S-Zorb 反应器的机理建模与基于改进鲸群算法的参数估计

贾华宇, 杜文莉, 范琛, 杨明磊

(华东理工大学 化工过程先进控制和优化技术教育部重点实验室, 上海 200237)

摘 要: 汽油吸附脱硫(S-Zorb)装置是我国催化裂化汽油的主要脱硫装置之一。针对 S-Zorb 工业模型缺乏, 实验室模型无法预测产品油辛烷值等问题, 作者提出了一种基于过程机理的反应器建模方法。该方法将催化裂化汽油划分为 5 个集总, 在集总基础上构建了反应动力学模型、辛烷值关联模型等。另外, 针对传统群优化算法参数估计耗时长的缺点, 提出了一种改进的鲸群算法, 并成功应用于 S-Zorb 模型。通过与工业数据对比验证结果表明, 所提模型能够有效地预测脱硫率、辛烷值等关键指标, 从而为后续的优化生产提供基础。

关键词: S-Zorb; 脱硫率; 辛烷值; 参数估计; 鲸群算法

中图分类号: TE 624.4

文献标识码: A

DOI: 10.3969/j.issn.1003-9015.2018.06.021

Mechanism Modeling of S-Zorb Reactors and Parameter Estimation with Improved Whale Algorithm

JIA Hua-yu, DU Wen-li, FAN Chen, YANG Ming-lei

(Key Laboratory of Advanced Control and Optimization for Chemical Process, Ministry of Education,
East China University of Science and Technology, Shanghai 200237, China)

Abstract: Gasoline adsorption desulfurization units (S-Zorb) are one of the main devices for FCC (fluid catalytic cracking) gasoline desulfurization in China. However, S-Zorb lacks industrial prediction models and laboratory models cannot predict product octane number. A reactor model based on process and mechanism was developed by dividing the catalytic cracking gasoline into five lumps. The reaction kinetics model and octane correlation model were constructed based on these lumps. In addition, an improved whale algorithm was proposed to overcome the disadvantages of traditional group optimization algorithm, and was successfully applied for the S-Zorb model. The proposed model was compared with industrial data and the results show that it can effectively predict key indexes such as desulfurization rate and octane number. Therefore, the model provides a new method for the optimization of S-Zorb production.

Key words: S-Zorb; desulfurization rate; octane number; parameter estimation; whale optimization algorithm

1 前 言

汽油吸附脱硫(S-Zorb)装置凭借脱硫率高、辛烷值损失小、氢耗低、能耗低的优点, 已成为中国石化汽油质量升级的主要技术手段, 并在国内汽油脱硫生产中得到迅速推广^[1]。该技术采用特殊的吸附剂, 在混氢条件下与汽油硫化物发生化学吸附反应, 将硫原子从汽油转移到吸附剂上^[2]。由于 S-Zorb 出现较晚, 相关的机理和动力学还有待研究, 近年来, 越来越多的学者参与到相关的研究工作中。Bezverkhyy

收稿日期: 2017-08-14; 修订日期: 2017-11-11。

基金项目: 国家自然科学基金重大项目(61590923); 国家自然科学基金(61422303, 61590922); 中央高校基本科研业务费专项基金(222201717006)。

作者简介: 贾华宇(1993-), 男, 安徽阜阳人, 华东理工大学硕士生。通讯联系人: 杜文莉, E-mail: wldu@ecust.edu.cn

等^[3]利用热重分析方法,在实验室条件下探讨了噻吩在吸附剂上的反应动力学,将噻吩在 Ni/ZnO 上的反应分为三个不同阶段:快速吸附阶段、表面反应控制阶段以及固相扩散阶段。相关的实验分析表明^[4],噻吩的吸附反应动力学符合准一级反应特点。丁建军等^[5]对烯烃在镍基催化剂上的加氢反应进行了宏观动力学研究,实验结果显示:加氢反应对轻馏分烯烃的反应级数均为 1。

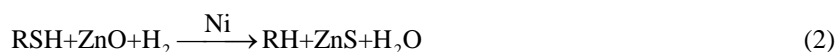
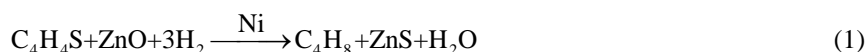
然而,相关的实验室模型,在指导工业生产过程中,出现了数据过于保守、与工业数据不吻合等不足^[6]。更重要的是,在装置运行中,存在烯烃饱和导致辛烷值损失的现象,但是相关的辛烷值预测模型迟迟未能建立。

本研究在前人的基础上,首先,根据 S-Zorb 装置的特点,提出了催化裂化汽油的五集总表征方法;然后,在集总表征的基础上,建立反应器的机理模型;另外,为了有效地预测辛烷值,采用 PSO-SVM^[7] (particle swarm optimization-support vector machine)建立集总含量与辛烷值的关联模型。考虑到传统群优化算法在动力学参数估计问题上耗时较长,提出一种改进的鲸群优化算法,通过在标准测试函数及 S-Zorb 模型参数估计上的实验表明,新算法具有收敛快、精度高的优点。最后,结合实际工厂数据,验证了所建模型的可行性,从而为后续的工业生产优化和研究提供基础。

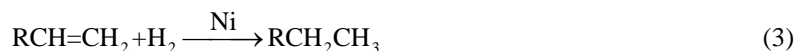
2 汽油吸附脱硫过程简介

催化裂化汽油的硫含量较高,必须经过深度脱硫才能满足现今的汽油质量标准^[8]。S-Zorb 装置作为催化裂化汽油深度脱硫的主要装置,其吸附脱硫的流程如图 1 所示。

高硫汽油和氢气混合后,自下而上通过反应器。在反应器中,硫化物与吸附剂发生化学反应,所含硫原子被“吸附”在吸附剂上。为了维持吸附剂的活性,待生吸附剂经闭锁料斗依次进入再生器、还原器,发生再生还原反应,得到再生吸附剂后再次进入反应器中参与反应。典型的脱硫反应过程^[9]如式(1)和(2)所示:



催化裂化汽油烯烃含量高,烯烃饱和反应是脱硫反应器内发生的主要副反应,也是造成汽油辛烷值损失的主要原因。典型的烯烃加氢反应如式(3)所示:



3 S-Zorb 的建模过程

3.1 S-Zorb 模型的预测指标

综合考虑 S-Zorb 装置的运行特点和国 V 车用汽油质量标准规范,模型主要围绕以下指标建立:装置脱硫率、产品油烯烃含量、产品油研究法辛烷值。

由于 S-Zorb 装置的主要目的是实现汽油的深度脱硫,因此预测产品汽油的硫含量是建模的主要目的之一^[10]。由于产品汽油硫含量受到原料油硫含量的影响,波动较大^[11]。因此使用装置脱硫率代替产品汽油硫含量。脱硫率的数学公式如式(4)所示:

$$R_s = \frac{S_{\text{in}} - S_{\text{out}}}{S_{\text{in}}} \times 100\% \quad (4)$$

式中, S_{in} 为原料硫含量, S_{out} 为出料硫含量, R_s 为脱硫率。

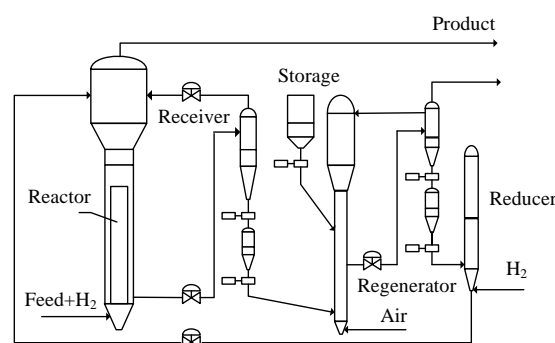


图 1 S-Zorb 装置的工艺流程图

Fig.1 Flow chart of the S-Zorb process

辛烷值是衡量汽油抗爆性能的重要指标^[12]; 车用汽油的国 V 质量标准^[13]要求烯烃含量不高于 25%。汽油经过吸附脱硫后, 烯烃含量会降低, 辛烷值会减少。

3.2 催化裂化汽油的五集总划分

建立模型的首要前提是依据相关数据和反应体系合理地表征油品。馏分表征法以整体性质进行表征, 无法提供馏分的组成信息^[14], 并不适用于吸附脱硫过程。催化裂化汽油的组成复杂, 也不适宜使用具体的分子来表征。因此, 本文采用集总的方式划分催化裂化汽油组分, 把各集总假定为虚拟的单一组分, 在集总体系上建立动力学模型。

综合考虑催化裂化汽油的特点以及 S-Zorb 装置的反应机理, 将汽油组分划分为饱和烃(P)、烯烃(O)、芳香烃(A)、噻吩类硫(S_1)以及硫醇硫醚类硫(S_2), 共五个集总。因为噻吩类硫和硫醇硫醚类硫的化学性质差异较大, 硫醇硫醚几乎可以完全脱除, 噻吩类硫的脱除率受到操作条件的影响较大^[15], 所以将硫划分为两类。

3.3 反应动力学模型描述

集总之间的化学反应如式(1)、(2)、(3)所示, 噻吩类硫、硫醇硫醚类硫分别与吸附剂的活性组分 ZnO 发生反应(1)和(2), 增加微量的烃组分; 烯烃与氢气发生反应(3)生成饱和烃。各反应的反应速率用 r_i ($i=1,2,3$) 表示, 计算公式如下式所示:

$$r_1 = k_{0,1} \exp(-E_1 / RT) p_{S_1}^{a_1} p_H^{c_1} \quad (5)$$

$$r_2 = k_{0,2} p_{S_2}^{a_2} \quad (6)$$

$$r_3 = k_{0,3} \exp(-E_3 / RT) p_O^{b_3} p_H^{c_3} \quad (7)$$

式中, $k_{0,i}$ 为反应 i 的频率因子; E_i 为反应活化能, $\text{kJ}\cdot\text{kmol}^{-1}$; R 为气体常数, $8.314 \text{ kJ}\cdot(\text{kmol}\cdot\text{K})^{-1}$; T 为反应温度, K ; p_{S_1} 、 p_{S_2} 、 p_H 、 p_O 分别为噻吩类硫、硫醇硫醚类硫、氢气及烯烃的分压, MPa ; a_i 、 b_i 、 c_i 为反应级数。

3.4 反应器模型描述

由于吸附脱硫反应器的直径较短, 具有一定的长度, 因此可假定为理想平推流反应器^[16], 其数学公式如下:

$$\frac{dF_i}{dz} = \sum \rho_p \times r_i \times S \quad (8)$$

$$\frac{dT}{dz} = \frac{-S \times \rho_p \times \sum (\Delta H_i \times r_i)}{\sum (F_i \times C_{p,i})} \quad (9)$$

式中, d 为取微元符号, F_i 为集总组分 i 的摩尔流速, $\text{kmol}\cdot\text{h}^{-1}$; T 为反应温度, K ; z 为反应器长度, m ; ρ_p 为吸附剂床层堆积密度, $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$; r_i 为反应速率, $\text{kmol}\cdot(\text{kg}\cdot\text{h})^{-1}$; S 为反应器截面积, m^2 ; ΔH_i 为反应 i 的焓变, $\text{kJ}\cdot\text{kmol}^{-1}$; $C_{p,i}$ 为气相热容, $\text{kJ}\cdot(\text{kmol}\cdot\text{K})^{-1}$ 。

3.5 辛烷值关联模型描述

辛烷值可以看成是汽油饱和烃含量、烯烃含量及芳烃含量的非线性函数^[17], 如下式所示:

$$\text{RON} = f(v_P, v_O, v_A) \quad (10)$$

式中, RON (research octane number) 为研究法辛烷值, v_P 、 v_O 、 v_A 分别为汽油所含饱和烃、烯烃及芳烃的体积含量。

由于 f 为非线性函数, 不适合使用传统的多元线性回归。由于 SVM 在处理小样本回归问题上具有的独特优越性, 且工厂辛烷值测量样本较少的特点, 因此选用 PSO-SVM 预测研究法辛烷值, 其基本流程如下所示:

Step 1 设置 PSO 的参数值及 SVM 的参数范围。

Step 2 输入训练样本, 迭代 PSO 算法, 不断寻找 SVM 的最优参数, 直到满足结束条件。

Step 3 将最优参数代入 SVM, 对样本进行有效预测。

3.6 模型预测指标与动力学参数的关系

模型的动力学参数有 $k_{0,1}$ 、 E_1 、 a_1 、 c_1 、 $k_{0,2}$ 、 a_2 、 $k_{0,3}$ 、 E_3 、 b_3 、 c_3 ，共 10 个；产品汽油各集总的模型预测含量有饱和烃含量 $v_{P,mod}$ 、烯烃含量 $v_{O,mod}$ 、芳香烃含量 $v_{A,mod}$ 、噻吩类硫含量 $S_{1,mod}$ 、硫醇硫醚类硫含量 $S_{2,mod}$ ，共 5 个；模型需要预测的指标分别有脱硫率 $R_{s,mod}$ 、产品油烯烃含量 $v_{O,mod}$ 、产品油研究法辛烷值 RON_{mod} ，共 3 个。假设：模型的动力学参数向量为 $\theta = (k_{0,1}, E_1, \dots, c_3)^T$ ；模型预测的产品汽油集总含量向量为 $Y = (v_{P,mod}, v_{O,mod}, \dots, S_{2,mod})^T$ ；模型预测的指标向量为 $Z = (R_{s,mod}, v_{O,mod}, \dots, RON_{mod})^T$ 。

联立式(5)~(8)可得出产品油集总含量预测值与动力学参数的非线性函数 $Y = F(\theta)$ 。然后根据产品汽油的硫含量预测值，利用式(4)可得出脱硫率预测值 $R_{s,mod}$ ；根据产品汽油的烃类含量预测值，利用训练好的 PSO-SVM 可得出 RON 预测值 RON_{mod} 。因此，可得出预测指标与动力学参数的非线性函数 $Z = G_F(\theta) = G(F(\theta))$ 。

4 基于生物地理学迁移策略的混沌鲸群算法

动力学参数的估计实际上是非线性函数的优化问题^[18]。传统的优化算法在求解参数估计问题时，如果初值设置不当，很难得到全局最优解^[19~21]。群智能优化算法全局寻优能力强，对初始值的依赖较小，近年来在参数估计的问题上得到广泛引用。然而，多数的群优化算法迭代次数多，收敛慢，对模型的参数估计需要耗费大量的时间。

基于此，本文提出了一种基于生物地理学迁移策略的混沌鲸群算法(BLCWOA (biogeography-based learning chaotic whale optimization algorithm))，在保持原有鲸群算法(WOA (whale optimization algorithm))快速收敛的前提下，有效地提高了原算法的全局寻优能力，并成功应用于 S-Zorb 建模的参数估计问题。

4.1 鲸群算法

在鲸群算法中，共有包围猎物、捕食猎物和搜寻猎物三种算子。

(1) 包围算子

$$D = |CX^*(t) - X_i(t)| \quad (11)$$

$$X_i(t+1) = X^*(t) - AD \quad (12)$$

(2) 捕食算子

$$D' = |X^*(t) - X_i(t)| \quad (13)$$

$$X_i(t+1) = X^*(t) + D'e^{bl} \cos(2\pi l) \quad (14)$$

(3) 搜寻算子

$$D'' = |CX_r(t) - X_i(t)| \quad (15)$$

$$X_i(t+1) = X_r(t) - AD'' \quad (16)$$

各式中， t 为当前迭代次数， $X^*(t)$ 为当前群体的最优解向量， $X_i(t)$ 为第 i 个座头鲸的位置向量， $X_r(t)$ 为一个随机的座头鲸位置向量， $| \cdot |$ 代表取绝对值； A 、 C 均为自适应系数，其中， $A = 2a\gamma_1 - a$ ， $C = 2\gamma_2$ ， a 值随迭代次数从 2 到 0 线性下降， γ_1 、 γ_2 为(0,1)中的随机数； b 是定义螺旋形状的常数， l 为(-1,1)中的随机数。

在每次迭代中，算法利用 A 和(0,1)随机数 p 来控制个体采用何种算子进行位置更新。对于每个个体，算法首先判断 p 值，若 $p \geq 0.5$ ，采用捕食算子进行位置更新；若 $p < 0.5$ ，算法判断 A 值，若 $|A| < 1$ ，采用包围算子进行位置更新，若 $|A| \geq 1$ ，采用搜寻算子进行位置更新。

4.2 基于生物地理学迁移策略的混沌鲸群算法

在原始的鲸群算法中，座头鲸的位置变化主要受历史最优点 $X^*(t)$ 的影响，如果 $X^*(t)$ 是局部最优点，原算法将很快陷入局部最优；另外，算法的包围、搜寻算子在猎物的邻域内随机搜索，这导致大约 50% 的解远离最优解，降低了算法的收敛能力。

为克服这些问题,同时保持 WOA 快速收敛的能力,本文提出了一种改进的鲸群算法(BLCWOA)。新算法对原算法进行了以下改进:对于不同个体,引入生物地理学的迁移策略生成不同的猎物代理,提高种群的多样性;改进包围算子和搜寻算子,提高种群的收敛能力和局部搜索能力。

4.2.1 改进的猎物代理

BLCWOA 利用每个个体本身的历史最优解 $X_i^*(t)$, 生成猎物代理 $X_i^f(t)$ 。其详细流程如下:首先,所有个体根据自身的历史最优值进行排列,不失一般性,假设 $fit(X_1^*(t)) \leq \dots \leq fit(X_n^*(t))$; 然后,计算个体 i 的 HSI 等级 $k_i = n - i$, 进而得出个体 i 的迁入率 $\lambda_i = (1 - k_i/n)^2$ 和迁出率 $\mu_i = (k_i/n)^2$; 最后,对于个体 i , 按照图 2 中的策略生成相应的猎物代理 $X_i^f(t)$ 。其中, D 为个体向量的维度。

以捕食算子为例,改进后,座头鲸的位置更新公式如下式所示:

$$D' = |X_i^f(t) - X_i(t)| \quad (17)$$

$$X_i(t+1) = X_i^f(t) + D'e^{bl} \cos(2\pi l) \quad (18)$$

可以看出:在改进算法中,一方面,每个个体对于猎物位置的确定,受到种群中其它个体的影响,且优良个体影响程度更大,有利于优良信息在种群中的传播;另一方面,不同个体的猎物代理不一,有效提高了算法的探索能力。

4.2.2 包围算子和搜寻算子的改进

在自然环境中,生物具有“趋利避害”的本能。根据这种特性,将搜寻算子改进如下式所示:

$$D'' = \begin{cases} X_r(t) - X_i(t), & f(X_r(t)) \leq f(X_i(t)) \\ X(t) - X_r(t), & f(X_r(t)) > f(X_i(t)) \end{cases} \quad (19)$$

$$X_i(t+1) = X_i(t) + |A|D'' \quad (20)$$

可以看出:改进后,鲸鱼游动具有靠近优解、远离差解的趋势,有利于提高算法的收敛能力。同理,对包围算子的改进如下式所示:

$$D = CX_i^f(t) - X_i(t) \quad (21)$$

$$X_i(t+1) = X_i^f(t) + |A|D \quad (22)$$

另外,为了提高种群的局部搜索能力,采用下式的混沌序列生成 C 。式中, $a = 0.7$, $x_0 = 0.95$ 。

$$x_{i+1} = \sin\left(\frac{a\pi}{x_i}\right) \quad (23)$$

$$C = 2x_{i+1} \quad (24)$$

4.3 BLCWOA 在标准测试函数上的性能测试

BLCWOA 可以认为是 WOA 与 BBO (biogeography-based optimization) 的混合算法,为了直观比较 BLCWOA 的性能,本文选取鲸群算法^[22](WOA)、改进的鲸群算法^[23](EWOA)、生物地理学算法^[24](BBO)、改进的生物地理学算法^[25](DEBBO (differential evolution BBO))在常用的 8 个标准测试函数上进行对比试验。其中,前四个为单峰函数,后四个为多峰函数。所有算法的迭代次数和种群规模均相同,迭代次数为 1000,种群规模为 40。对于维度为 10、30 的每个函数,分别独立测试 30 次。不同算法的测试结果如表 1 所示。

从表 1 中可以看出,无论是单峰函数还是多峰函数,改进的 WOA 算法较于其它算法均取得较好的结果。另外,值得注意的是 Schwefel's 1.2 函数,该函数的最优值为 0,最优状态为原点。函数在原点之外的值较大,且随着维度的提高,变化的幅度愈加明显,适宜于比较各优化算法在单峰问题上的收敛精度。BLCWOA 在改进了包围算子、搜寻算子后,有效地提高了算法的局部搜索能力,在此函数的收敛精

```

for d = 1 to D
  if rand(0,1) < λi
    according to μ value use roulette pricipie
    to select individual j
    Xi,df(t) = Xj,d*(t)
  else
    Xi,df(t) = Xi,d*(t)
  end if
end for

```

图 2 基于生物地理学迁移策略的猎物代理

Fig.2 Prey agents based on biogeography migration

度明显优于其它算法。从表中结果可以说明：改进算法在处理单峰问题时具有很高的收敛精度，在处理多峰问题时具有良好的全局寻优能力。

表 1 不同算法的测试结果

Table 1 Test results of different algorithms

Name	Dim	WOA		EWOA		BBO		DE/BBO		BLCWOA	
		Mean	Std	Mean	Std	Mean	Std	Mean	Std	Mean	Std
Sphere	10	6.83×10^{-169}	0	1.83×10^{-40}	5.46×10^{-40}	1.98×10^{-1}	2.09×10^{-1}	5.53×10^{-56}	1.26×10^{-55}	1.39×10^{-194}	0
	30	2.96×10^{-163}	0	2.86×10^{-33}	9.87×10^{-33}	5.19×10^1	1.80×10^1	1.38×10^{-19}	1.71×10^{-19}	2.24×10^{-169}	0
Schwefel's	10	2.47	5.18	3.10×10^1	5.66×10^1	1.37×10^2	1.01×10^2	5.92×10^{-5}	1.79×10^{-4}	1.55×10^{-154}	7.05×10^{-154}
1.2	30	1.68×10^4	8.63×10^3	2.39×10^4	6.76×10^3	6.23×10^3	2.00×10^3	1.96×10^4	3.49×10^3	1.01×10^{-118}	5.47×10^{-118}
Schwefel's	10	1.03×10^{-1}	5.34×10^{-1}	7.76×10^{-1}	1.33	1.03	3.45×10^{-1}	4.04×10^{-5}	2.21×10^{-4}	3.58×10^{-89}	9.98×10^{-89}
2.21	30	3.10×10^1	3.13×10^1	3.04×10^1	1.12×10^1	1.37×10^1	1.86	3.46	5.96	3.85×10^{-76}	1.15×10^{-75}
Rosenbrock	10	5.96	5.55×10^{-1}	7.80	1.92×10^1	5.69×10^1	3.76×10^1	8.80	1.95×10^1	5.08	1.27×10^{-1}
	30	2.68×10^1	3.63×10^{-1}	2.48×10^1	2.00×10^{-1}	2.78×10^3	1.36×10^3	5.88×10^1	3.00×10^1	2.55×10^1	1.09×10^{-1}
Schwefel's	10	-3.59×10^3	5.70×10^2	-4.07×10^3	1.12×10^2	-4.19×10^3	2.87×10^{-1}	-4.18×10^3	3.61×10^1	-4.19×10^3	1.21×10^{-3}
2.26	30	-1.15×10^4	1.64×10^3	-1.06×10^4	6.89×10^2	-1.25×10^4	2.15×10^1	-1.25×10^4	1.16×10^2	-1.26×10^4	1.68×10^1
Rastrigin	10	0	0	3.32×10^{-2}	1.82×10^{-1}	8.94×10^{-2}	5.63×10^{-2}	0	0	0	0
	30	0	0	9.91	7.41	6.37	1.68	1.55×10^1	3.28	0	0
Ackley	10	3.73×10^{-15}	2.17×10^{-15}	1.08×10^{-14}	4.70×10^{-15}	2.43×10^{-1}	9.65×10^{-2}	4.44×10^{-15}	0	8.88×10^{-16}	0
	30	3.73×10^{-15}	2.17×10^{-15}	6.64×10^{-1}	3.64	3.04	2.87×10^{-1}	4.54×10^{-1}	2.49	8.88×10^{-16}	0
Griewank	10	1.56×10^{-2}	5.52×10^{-2}	4.13×10^{-2}	4.73×10^{-2}	2.91×10^{-1}	1.12×10^{-1}	5.92×10^{-7}	3.24×10^{-6}	0	0
	30	4.33×10^{-3}	1.74×10^{-2}	5.31×10^{-3}	1.70×10^{-2}	1.43	1.44×10^{-1}	4.93×10^{-4}	1.88×10^{-3}	0	0

5 仿真验证

5.1 辛烷值关联模型的性能测试

为了测试辛烷值关联模型的准确性，此次试验选取了 102 个样本训练 PSO-SVM；然后另外选取测试样本 30 个，比较 RON 关联值与 RON 测量值之间的差异，比较结果如图 3 所示。

经计算，在测试集上 RON 的拟合标准差 RMSE (root mean square error) 为 0.23，平均绝对误差 MAE (mean absolute error) 为 0.19；从图 3 中也可以看出，汽油 RON 的关联值与测量值偏差很小，趋势相同。因此，采用 PSO-SVM 关联集总含量与辛烷值，可以满足后续建模的精度要求。

5.2 BLCWOA 估计模型参数的性能测试

为了测试 BLCWOA 在 S-Zorb 模型参数估计上的性能，分别采用 BBO、PSO、WOA 与 BLCWOA 优化动力学参数。考虑到所建模型的主要目的是为实际生产提供指导，此次试验采集了某厂 S-Zorb 装置连续 6 个月的工业生产数据。一方面，由于工业数据存在测量误差，小范围的操作条件变化对结果的影响易被噪声淹没，另一方面，工业数据长时间在一组工况下小范围波动。因此此次试验选取操作条件差异较大且长时间使用的工况数据，按照操作条件将数据分为三组，在剔除异常值后取平均作为参数优化的样本。

设定算法优化的目标函数如下式所示：

$$\min(\Psi(\theta)) = \min\left(\sum_{i=1}^m \left(\left(\frac{R_{s,\text{mod}} - R_{s,\text{act}}}{R_{s,\text{act}}} \right)^2 + \left(\frac{v_{O,\text{mod}} - v_{O,\text{act}}}{v_{O,\text{act}}} \right)^2 + \left(\frac{\text{RON}_{\text{mod}} - \text{RON}_{\text{act}}}{\text{RON}_{\text{act}}} \right)^2 \right) \right) \quad (25)$$

式中， $\theta = (\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_{10})^T$ 为需要估计的动力学参数向量， m 为工况数， $R_{s,\text{act}}$ 、 $v_{O,\text{act}}$ 、 RON_{act} 分别为实际的装置脱硫率、产品油烯烃含量、产品油研究法辛烷值，可由工厂测量数据得出； $R_{s,\text{mod}}$ 、 $v_{O,\text{mod}}$ 、 RON_{mod} 分别为模型预测的脱硫率、产品油烯烃含量、产品油研究法辛烷值，可由参数向量 θ 计算得出。

为便于比较，所有优化算法的公共参数设置均相同，种群数设定为 20，迭代次数设定为 100。各算法分别独立运行三次，选取最优的测试结果进行对比。算法最优值随迭代次数的收敛曲线如图 4 所示。

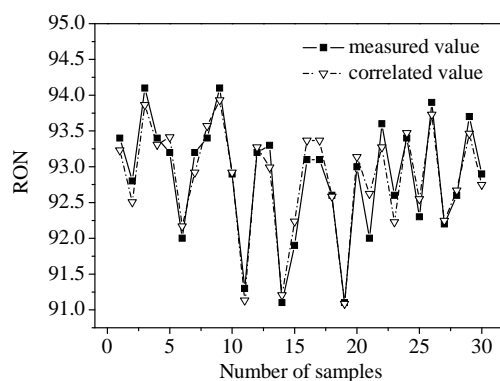


图 3 RON 的 PSO-SVM 关联值与实际测量值比较
Fig. 3 Comparison of PSO-SVM correlated values with experimental measured values

从图 4 中可以看出, BLCWOA 优化后的误差最小, WOA、PSO 次之, BBO 最差; WOA 虽然在开始时快速收敛,但是很快掉入局部最优值。BLCWOA 基本保持了 WOA 的收敛速度,同时由于迁移策略的作用,具有跳出局部最优解的能力,有更高的收敛精度。实验表明: BLCWOA 在 S-Zorb 模型的参数估计上具有一定的优越性。

5.3 模型验证

为了验证 S-Zorb 模型的可行性,将 BLCWOA 优化后的动力学参数代入模型后,选取 5 组不同的工业操作数据输入到模型中,包括反应器入口温度、反应器压力、原料油流量、氢气流量等,然后对比模型预测值与实际工业值的差异。对比结果如表 2

所示。表中, Actual 为实际测量值, Model 为模型预测值, Error 为绝对误差。

从表 2 中可以看出,装置脱硫率的预测值与实

际值的绝对误差不超过 ±0.69%; 产品油烯烃含量的预测值与实际值的绝对误差不超过 ±0.49%; 产品油辛烷值的预测值与实际值的绝对误差不超过 ±0.17。由此说明了 S-Zorb 模型的准确性和稳定性。

6 结 论

本文从工艺流程和反应机理出发,首先将催化裂化汽油划分为五个集总,在此基础上采用 PSO-SVM 关联集总含量与辛烷值,进而提出了一种基于过程机理的 S-Zorb 反应器模型。另外,针对模型的参数估计问题,提出了一种具有快速收敛能力和全局寻优能力的改进鲸群算法,并成功应用于 S-Zorb 的建模过程。通过与实际数据对比结果验证表明,所建模型可以有效地预测装置脱硫率、产品油烯烃含量、产品油辛烷值等重要指标,从而为后续的生产优化提供基础。

参考文献:

[1] Brunet S, Mey D, Pérot G, *et al.* On the hydrodesulfurization of FCC gasoline: a review [J]. **Applied Catalysis A: General**, 2005, 278(2): 143-172.

[2] LI Peng (李鹏), TIAN Jian-hui (田健辉). Gasoline adsorptive desulfurization of S-Zorb technology overview (汽油吸附脱硫 S Zorb 技术进展综述) [J]. **Petroleum Refinery Engineering** (炼油技术与工程), 2014, 44(1): 1-6.

[3] Bezverkhy I, Ryzhikov A, Gadacz G, *et al.* Kinetics of thiophene reactive adsorption on Ni/SiO₂ and Ni/ZnO [J]. **Catalysis Today**, 2008, 130(1): 199-205.

[4] Hou X M, Shen B X, Zhao J G, *et al.* Kinetics of reactive adsorption desulfurization of thiophene in *n*-hexane over oxides adsorbent of NiO/ZnO-Al₂O₃-SiO₂ [J]. **Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization, and Environmental Effects**, 2014, 36(15): 1626-1633.

[5] DING Jian-jun (丁建军), HUANG Xing-liang (黄星亮). Hydrogenation macrokinetics of olefin in catalytic cracking light gasoline (催化裂化轻汽油中烯烃加氢反应宏观动力学) [J]. **Chemical Engineering** (化学工程), 2011, 39(9): 62-65.

[6] ZHU Yun-xia (朱云霞), XU Hui (徐惠). Improvement and development of S-Zorb process (S-Zorb 技术的完善及发展) [J]. **Petroleum Refinery Engineering** (炼油技术与工程), 2009, 39(8): 7-12.

[7] Lin S W, Ying K C, Chen S C, *et al.* Particle swarm optimization for parameter determination and feature selection of support vector machines [J]. **Expert systems with applications**, 2008, 35(4): 1817-1824.

[8] SUN Qi-ming (孙启明), ZHANG Yao (张遥), ZHAO Ming-yang (赵明洋). Application of domestic S-Zorb adsorbent in commercial FCC gasoline desulfurization unit (S-Zorb 国产吸附剂在高桥催化裂化汽油脱硫装置上的应用) [J]. **Petroleum Refinery Engineering** (炼油技术与工程), 2013, 43(1): 15-18.

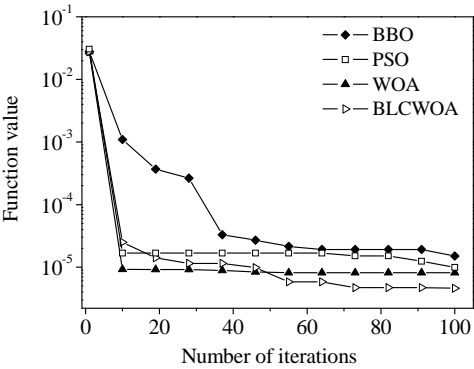


图 4 各算法在参数估计上的收敛曲线
Fig.4 Convergence curves of different algorithms for parameter optimization

表 2 S-Zorb 的实际值与模型预测值对比

Situation	Desulfurization rate (R_2) / %			Olefin content (v_O) / %			Octane number (RON)		
	Actual	Model	Error	Actual	Model	Error	Actual	Model	Error
1	97.73	97.63	-0.10	27.60	28.03	0.43	92.60	92.67	0.07
2	96.99	97.68	0.69	28.30	27.81	-0.49	92.60	92.58	-0.02
3	97.85	97.44	-0.41	24.70	25.01	0.31	92.60	92.47	-0.13
4	97.32	97.56	0.24	25.30	25.72	0.42	92.30	92.34	0.04
5	98.29	97.77	-0.52	27.60	27.86	0.26	92.50	92.67	0.17

- [9] LIN Wei (林伟), LONG Jun (龙军). From the mechanism of reaction chemistry to commercial application II. The design and performance of S-Zorb catalyst (从反应化学原理到工业应用 II. S-Zorb 催化剂设计开发及性能) [J]. *Acta Petrolei Sinica* (石油学报), 2015, 31(2): 453-459.
- [10] ZHANG Tong-wang (张同旺), WU Xue-feng (武雪峰), LIU Ling-tao (刘凌涛). Effect of S-Zorb absorbent active site distribution on desulfurization (S-Zorb 吸附剂颗粒活性位分布对汽油脱硫率的影响) [J]. *Acta Petrolei Sinica* (石油学报), 2017, 33(2): 198-203.
- [11] Srivastava V C. An evaluation of desulfurization technologies for sulfur removal from liquid fuels [J]. *RSC Advances*, 2012, 2(3): 759-783.
- [12] Pasadakis N, Gaganis V, Foteinopoulos C. Octane number prediction for gasoline blends [J]. *Fuel Processing Technology*, 2006, 87(6): 505-509.
- [13] ZHENG Ning-lai (郑宁来). China will supply the country with standard gasoline and diesel in 2017 (2017 年我国将全面供应国 V 标准汽柴油) [J]. *Petroleum Refinery Engineering* (炼油技术与工程), 2016, 46(4): 21-21.
- [14] Zhang N. Optimisation is key to high-performing refineries [J]. *Business Briefing: Oil & Gas Processing Review*, 2006, 1983(7): 33-35.
- [15] CHEN Jun-wu (陈俊武), CAO Han-cang (曹汉昌). *Catalytic cracking process and engineering* (催化裂化工艺与工程) [M]. Beijing (北京): The China University of Petroleum press (中国石油大学出版社), 2005.
- [16] Szukiewicz M, Kaczmarski K, Petrus R. Modelling of fixed-bed reactor: two models of industrial reactor for selective hydrogenation of acetylene [J]. *Chemical Engineering Science*, 1998, 53(1): 149-155.
- [17] YUAN Jun (袁俊), ZHOU Xiao-wei (周小伟), YANG Bo-lun (杨伯伦). Prediction of octane number for clean gasoline obtained from secondary reaction based on LM/SVM approach (基于 LM/SVM 方法的二次反应清洁汽油辛烷值预测) [J]. *Journal of Chemical Engineering of Chinese Universities* (高校化学工程学报), 2010, 24(2): 258-262.
- [18] LI Wei (栗伟), SU Hong-ye (苏宏业), LIU Rui-lan (刘瑞兰). Parameter estimation of catalytic cracking model using PSO algorithm (粒子群优化算法在催化裂化模型参数估计中的应用) [J]. *CIESC Journal* (化工学报), 2010, 61(8): 1928-1932.
- [19] DONG Yue-hua (董跃华), SANG Zhi-xiang (桑志祥), LI Shao-jun (李绍军). Improved AEA and its simulation on parameter estimation of heavy oil thermal cracking three lumps model (改进的 AEA 算法及其在重油热解模型参数估计中的仿真研究) [J]. *Journal of Chemical Engineering of Chinese Universities* (高校化学工程学报), 2012, 26(2): 332-337.
- [20] HE Peng-fei (何鹏飞), LI Shao-jun (李绍军). AEA combined with copula EDA and its application on parameter estimation (融合 copula EDA 的 AEA 算法及其在参数估计中的应用) [J]. *Journal of Chemical Engineering of Chinese Universities* (高校化学工程学报), 2015, 29(1): 177-184.
- [21] YU Huan-jun (俞欢军), ZHANG Li-ping (张丽平), CHEN De-zhao (陈德钊). Estimation of model parameters using composite particle swarm optimization (复合粒子群优化算法在模型参数估计中的应用) [J]. *Journal of Chemical Engineering of Chinese Universities* (高校化学工程学报), 2005, 19(5): 675-680.
- [22] Mirjalili S, Lewis A. The whale optimization algorithm [J]. *Advances in Engineering Software*, 2016, 95(6): 51-67.
- [23] Kaveh A, Ghazaan M I. Enhanced whale optimization algorithm for sizing optimization of skeletal structures [J]. *Mechanics Based Design of Structures and Machines*, 2016, 45(3): 1-18.
- [24] Simon D. Biogeography-based optimization [J]. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 2008, 12(6): 702-713.
- [25] Gong W, Cai Z, Ling C X. DE/BBO: a hybrid differential evolution with biogeography-based optimization for global numerical optimization [J]. *Soft Computing*, 2010, 15(4): 645-665.