

# 多项式回归模型在氢网络中对关键单元设备建模的应用

## 1 问题背景

炼油业是氢气消耗的最大终端市场。炼油厂可以利用深加工技术，消耗氢气将原油转变为更加清洁、更有价值的产品油。炼油厂氢气网络优化这个课题也引起了学术界和工业界的广泛注意。在氢气网络优化的过程中，最重要的就是对其中的关键单元设备，如反应器、闪蒸罐模型的建模。一方面，目前研究采用的是对其进行简化处理，比如固定闪蒸罐的气液平衡常数以及固定反应器氢耗等，但是在实际生产过程中，这些参数是不断变化的，固定这些参数会导致计算最优解于实际最优解存在偏差。另一方面，利用设备模型的第一原理模型对关键单元设备建模，会导致后续的氢气网络优化计算变得高度非线性、难以求解。为了兼顾模型的简单性和准确性，这里可以利用回归分析法建立关键单元设备的模型，后续可以运集成到氢气网络优化计算中。

## 2 问题描述

图 1 是氢气网络中一个加氢精制单元流程示意图，该单元包括两个关键单元设备：反应器和闪蒸罐。本案例分析的主要目的是利用回归模型建立关键单元设备的模型。

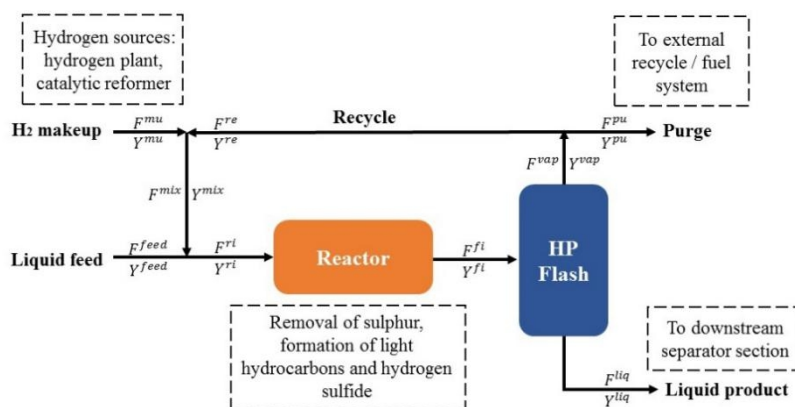


图 1 加氢精制单元流程图

## 3 方法与结果

首先，根据需求选择输入输出变量。对于反应器模型，本案例选取 6 个输入变量：温度 $T^r$ 、进口硫含量 $Y_s^{ri}$ 、进口多环芳烃含量 $Y_{3+R}^{ri}$ 、进口油流量 $F_{oil}^{ri}$ 、氢气分压 $P_{H_2}^{ri}$ 和进口气体流量 $F_{gas}^{ri}$ ；8 个输出变量：出口硫含量 $Y_s^{ro}$ 、出口轻烃流量

$F_{C1}^{r0} \sim F_{C5}^{r0}$ 、出口硫化氢流量 $F_{H_2S}^{r0}$ 和氢气消耗量 $F_{H_2}^{rc}$ ，如下图所示。

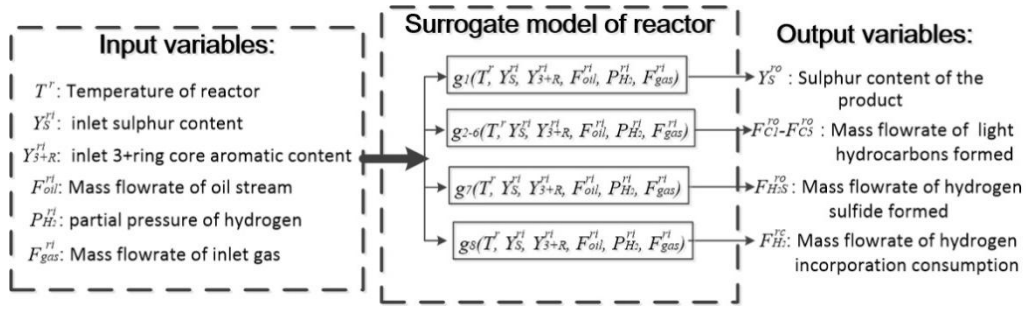


图 2 反应器回归模型的输入输出变量示意图

对于闪蒸罐模型，本案例选取 8 个输入变量：温度 $T^f$ 、压力 $P^f$ 、进口油流量 $F_{oil}^{fi}$ 、进口氢流量 $F_{H_2}^{fi}$ 、进口轻烃流量 $F_{C1}^{fi} \sim F_{C5}^{fi}$ 、进口硫化氢流量 $F_{H_2S}^{fi}$ ；8 个输出变量：出口氢气流量 $F_{H_2}^{fo}$ 、出口轻烃流量 $F_{C1}^{fo} \sim F_{C5}^{fo}$ 、出口硫化氢流量 $F_{H_2S}^{fo}$ 和出口气体流量 $F^{vap}$ ，如图 3 所示。

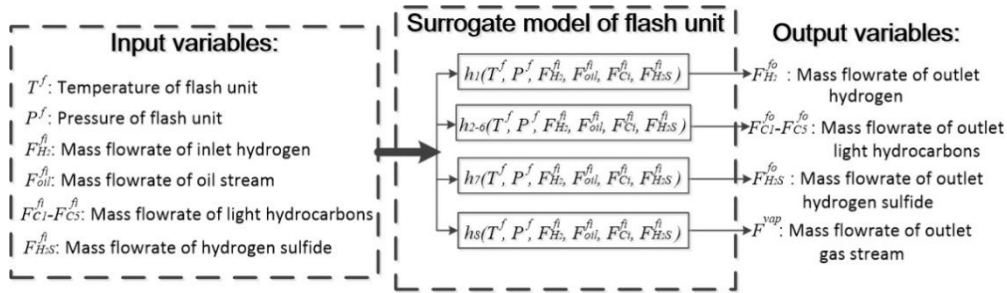


图 3 闪蒸罐回归模型的输入输出变量示意图

其次，准备数据集。选择每个输入变量的变化范围（表 1），并在其中分别均匀地采 500 个样本点，通过 Python 调用反应器和闪蒸罐的机理模型，生成与输入变量对应的输出变量值。

表 1 关键单元设备回归模型的输入变量范围

反应器输入变量	下限	上限	闪蒸罐输入变量	下限	上限
$T^r$ (K)	610	640	$T^f$ (K)	318	328
$Y_s^{ri}$ (wt%)	1.5	2.0	$P^f$ (bar)	15	20
$Y_{3+R}^{ri}$ (wt%)	3.0	3.5	$F_{oil}^{fi}$ (t/h)	5	20
$F_{oil}^{ri}$ (t/h)	300	400	$F_{H_2}^{fi}$ (t/h)	300	400
$P_{H_2}^{ri}$ (bar)	42	52	$F_{C1}^{fi}$ (t/h)	15	25
$F_{gas}^{ri}$ (t/h)	45	55	$F_{C2}^{fi}$ (t/h)	0.01	5
			$F_{C3}^{fi}$ (t/h)	0.08	5
			$F_{C4}^{fi}$ (t/h)	0.06	1
			$F_{C5}^{fi}$ (t/h)	0.02	1
			$F_{H_2S}^{fi}$ (t/h)	30	60

然后，对数据集进行预处理。本案例研究利用了 SPSS 软件中的向后逐步回归法对数据集进行敏感性分析，根据敏感性分析结果，对反应器模块选择了前 5 个输入变量。

最后，对回归模型进行训练和测试。这里选择 400 个数据作为训练数据，100 个数据作为测试数据；对反应器模块选择了二次多项式回归模型（方程 1），对闪蒸罐模型选择了三次多项式回归模型（方程 2）。

$$y = \beta_0 + \sum_{n=1}^N \beta_n x_n + \sum_{n=1}^N \sum_{p=1}^N \beta_{np} x_n x_p \quad (1)$$

$$y = \beta_0 + \sum_{n=1}^N \beta_n x_n + \sum_{n=1}^N \sum_{p=1}^N \beta_{np} x_n x_p + \sum_{n=1}^N \sum_{p=1}^N \sum_{m=1}^N \beta_{npm} x_n x_p x_m \quad (2)$$

其中， $y$ 是输出变量； $x$ 是输入变量； $N$ 是输入变量数； $\beta$ 是模型参数。

为了更好地验证模型的准确度，性能测试指标选择 $R^2$ 、 $RMSE$ （均方根误差）和残差图，如方程(3)–(5)所示。

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{n=1}^N (y^{(n)} - f^{(n)})^2}{\sum_{n=1}^N (y^{(n)} - \bar{y})^2} \quad (3)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{n=1}^N (y^{(n)} - f^{(n)})^2}{N}} \quad (4)$$

$$\varepsilon^{(n)} = y^{(n)} - f^{(n)} \quad (5)$$

其中， $y^{(n)}$ 是 $x_n$ 对应的输出值； $f^{(n)}$ 是 $x_n$ 对应的预测值； $\bar{y}$ 输出值的平均值； $\varepsilon^{(n)}$ 是残差。

得到的验证结果如表 2、图 4–5 所示。对于反应器， $RMSE \leq 8 \times 10^{-5}$ ， $R^2 = 0.9999$ ，从图 4 中可以看出残差分布均匀且随机，说明训练后的多项式模型对反应器的建模是准确的；对于闪蒸罐， $RMSE \leq 0.014$ ， $R^2 = 0.9999$ ，而且从图 5 中可以看出残差分布均匀且随机，说明训练后的多项式模型对闪蒸罐的建模准确度在可接受范围内。

表 2 回归模型的验证结果

反应器输出变量	RMSE	R <sup>2</sup>	闪蒸罐输出变量	RMSE	R <sup>2</sup>
$Y_S^{ro}$	$9.81 \times 10^{-6}$		$F_{H_2}^{fo}$	$9.18 \times 10^{-5}$	
$F_{C1}^{ro}$	$2.04 \times 10^{-6}$		$F_{C1}^{fo}$	$3.78 \times 10^{-3}$	
$F_{C2}^{ro}$	$3.81 \times 10^{-6}$		$F_{C2}^{fo}$	$3.20 \times 10^{-3}$	
$F_{C3}^{ro}$	$1.24 \times 10^{-5}$		$F_{C2}^{fo}$	$5.24 \times 10^{-3}$	
$F_{C4}^{ro}$	$1.36 \times 10^{-5}$	0.9999	$F_{C3}^{fo}$	$1.12 \times 10^{-3}$	0.9999
$F_{C5}^{ro}$	$4.78 \times 10^{-6}$		$F_{C4}^{fo}$	$4.85 \times 10^{-4}$	
$F_{H_2S}^{ro}$	$8.26 \times 10^{-5}$		$F_{C5}^{fo}$	$1.40 \times 10^{-2}$	
$F_{H_2}^{rc}$	$6.82 \times 10^{-5}$		$F_{H_2S}^{fo}$	$1.25 \times 10^{-2}$	
			$F^{vap}$	$9.18 \times 10^{-5}$	

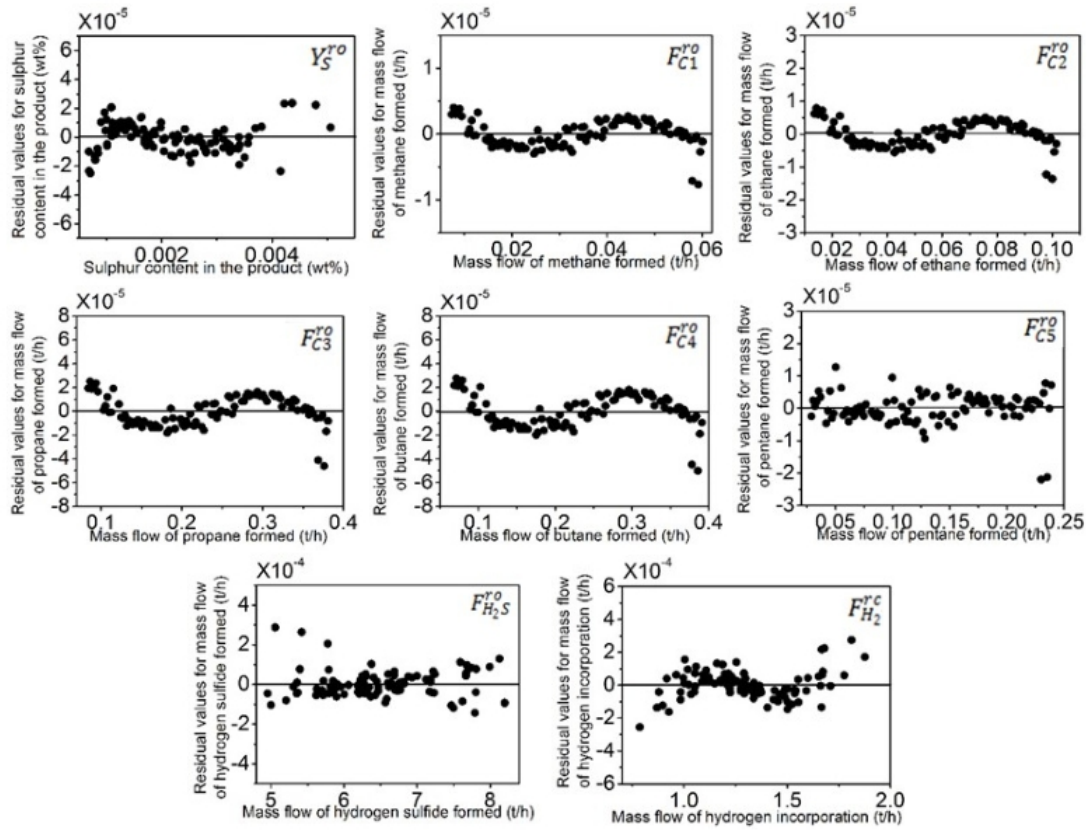


图 4 反应器多项式回归模型残差图

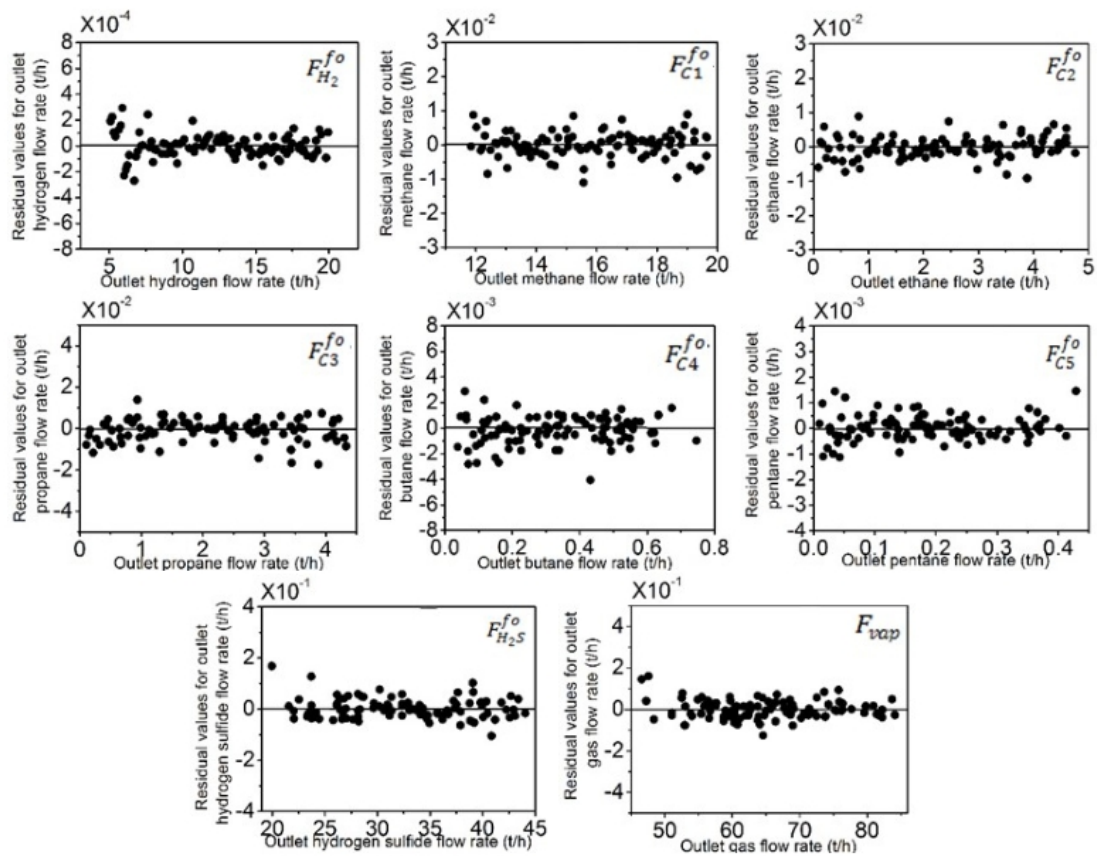


图 5 闪蒸罐多项式回归模型残差图