

УДК 004.622

Задача кластеризации в моделировании состава смеси каталитического риформинга бензина*

Алексеева В. А.¹, Коледина К. Ф.^{1,2}

Уфимский государственный нефтяной технический университет¹,
Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН²

Одной из актуальных задач моделирования процесса каталитического риформинга бензина является анализ октановых чисел углеводородов методами кластеризации на основе промышленных данных с целью группировки индивидуальных компонент для последующего моделирования и оптимизации процесса. Кластеризация заключается в разбиении заданной выборки на непересекающиеся подмножества (кластеры) по принципу схожести объектов.

Для решения данной задачи использована задача кластеризации двумя алгоритмами машинного обучения – алгоритмом иерархической кластеризации и алгоритмом K-Means.

Первым этапом работы является группирование углеводородов (УВ) по значениям октановых чисел (ОЧ) с последующим анализом полученных групп по классу УВ и числу атомов в структуре молекулы с использованием данных в форме таблицы УВ с характеристиками. Далее было проведено сравнение с принятой группировкой [1]. Данные методы и результаты группировки могут в дальнейшем использоваться при моделировании каталитического риформинга бензина.

Результат кластеризации двумя алгоритмами только для олефинов с числом атомов углерода 7 приведен в таблице 1, для изопарафинов с числом атомов углерода 8 – в таблице 2.

Таблица 1. Результат решения задачи кластеризации олефинов с числом атомов углерода 7.

Наименование УВ	Число атомов углерода	ОЧ	Номер группы по алгоритму иерархической кластеризации	Номер группы по алгоритму K-Means
5-метилгексен-1	7	43,47	2	3
2-метил- <i>t</i> -гексен-3	7	34,38	2	3
2-этил-3-метилбутен-1	7	43,47	2	3
О-с7-9	7	90,36	4	2
О-с7-10	7	90,36	4	2
О-с7-11	7	90,36	4	2
О(di)-с7-4	7	90,36	4	2

*Работа выполнена по теме «Разработка новых теоретических подходов и программного обеспечения для моделирования сложных химических процессов и поиска соединений с заданными физико-химическими свойствами» (Регистрационный номер: АААА-А19-119022290011-6).

Продолжение таблицы 1.

О-с7-14	7	90,36	4	2
с-гептен-3	7	34,38	2	3
2-метил-2-гексен	7	34,38	2	3
3-метил-с-гексен-3	7	34,38	2	3
t-гептен-3	7	34,38	2	3
3-этилпентен-2	7	34,38	2	3
1,5-диметилциклопентен	7	34,38	2	3
O(di)-с7-3	7	90,36	4	2
О-с7-13	7	90,36	4	2

Таблица 2. Результат решения задачи кластеризации изопарафинов с числом атомов углерода 8.

Наименование УВ	Число атомов углерода	ОЧ	Номер группы по алгоритму иерархической кластеризации	Номер группы по алгоритму K-Means
2,2,4-триметилпентан	8	90,36	4	2
2,2-диметилгексан	8	34,38	2	3
2,2,3-триметилпентан	8	34,38	2	3
2,5-диметилгексан	8	34,38	2	3
2,4-диметилгексан	8	34,38	2	3
3,3-диметилгексан	8	34,38	2	3
2,3,4-триметилпентан	8	34,38	2	3
2-метил-3-этилпентан	8	188,36	5	6
I-с8-1	8	188,36	5	6
3,4-диметилгексан	8	16,15	2	3
3-метилгептан	8	16,15	2	3
3-этилгексан	8	25,18	2	3
2-метилгептан	8	16,15	2	3
2,3-диметилгексан	8	188,36	5	6

Согласно результатам, приведенным в таблицах 1 и 2, олефины с числом атомов углерода 7 необходимо рассматривать при моделировании процесса не как одну, а как две группы, так как значения ОЧ сильно отличаются. Изопарафины с числом атомов углерода 8, которые ранее рассматривались как одна группа [1], необходимо декомпозировать на три.

Кроме того, анализ результатов кластеризации показал, что такие группы как олефины, ароматика, изопарафины, нафтены 5-ти членные и 6-ти членные нафтены необходимо делить на 2 или даже 3 класса по октановым числам. Данная группировка углеводородов может применяться при математическом моделировании кинетики процесса каталитического риформинга бензинов, с целью решения задачи оптимизации условий процесса для максимизации ОЧ продукта и минимизации выхода ароматических углеводородов.

Литература

1. Iranshahi D., Amiri H., Karimi M. Modeling and Simulation of a Novel Membrane Reactor in a Continuous Catalytic Regenerative Naphtha Reformer Accompanied with a Detailed Description of Kinetics // Energy Fuels. 2013. No. 27. pp. 4048.
2. Белоусов Р. Л., Дрожжин Н. А., Костенчук М. И. Построение нечетких лингвистических переменных с использованием методов кластерного анализа данных // Журнал Прикладная информатика. 2015. Т. 10. № 1. (55). С. 98-105.

MSC2020 92E99

Clustering problem in modeling the composition of a mixture of catalytic reforming of gasoline

V. A. Alekseeva¹, K. F. Koledina^{1,2}

Ufa State Petroleum Technological University¹,
Institute of Petrochemistry and Catalysis of the Russian Academy of Sciences²