

## ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΚΑΙ ΑΡΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ ΤΗΣ ΜΟΝΑΔΑΣ FCC ΧΡΗΣΙΜΟΠΟΙΩΝΤΑΣ ΝΕΥΡΩΝΙΚΑ ΔΙΚΤΥΑ

**Ι. Μιχαλόπουλος, Σ. Παπαδοκωσταντάκης, Γ. Αραμπατζής, Α. Λυγερός**  
*Τμήμα Χημικών Μηχανικών, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, 15780 Ζωγράφου*

### ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Το αντικείμενο της εργασίας που ακολουθεί είναι η μοντελοποίηση της μονάδας καταλυτικής πυρόλυσης αεριολαίου σε ρευστοποιημένη κλίνη (FCC) ενός διυλιστηρίου πετρελαίου με τη χρήση νευρωνικών δικτύων. Στόχος είναι η κατασκευή ενός μοντέλου πρόβλεψης της κατανομής προϊόντων στο οποίο θα εφαρμοστεί ανάλυση ευαισθησίας για τον προσδιορισμό των μεταβλητών εισόδου με τη μεγαλύτερη επίδραση στις μεταβλητές εξόδου του μοντέλου.

### ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Η διεργασία της καταλυτικής πυρόλυσης ρευστοστερεάς κλίνης (FCC) είναι σημαντική για ένα διυλιστήριο πετρελαίου, γιατί παρουσιάζει μεγάλα οικονομικά οφέλη. Το τελευταίο εντοπίζεται στο γεγονός ότι η διεργασία αυτή μετατρέπει τα βαρέα προϊόντα της κλασματικής απόσταξης του αργού πετρελαίου σε ελαφρότερα κλάσματα μεγαλύτερης αξίας [1].

Η διεργασία του FCC ολοκληρώνεται σε δύο φάσεις. Στην πρώτη φάση οι βαριοί υδρογονάνθρακες έρχονται σε επαφή με τον καταλύτη ο οποίος είναι σε μορφή λεπτής σκόνης. Κατά την επαφή ο καταλύτης προσφέρει την απαραίτητη θερμότητα για την εξάτμιση τους ενώ μετά την εξάτμιση (αλλά και κατά την διάρκεια αυτής) πραγματοποιούνται οι αντιδράσεις πυρόλυσης. Οι αντιδράσεις αυτές είναι ενδόθερμες ενώ κατά την διάρκεια τους επικάθεται κωκ στην επιφάνεια του καταλύτη. Στο τέλος της πρώτης φάσης τα προϊόντα, αφού διαχωριστούν από τον καταλύτη, οδηγούνται για περαιτέρω διαχωρισμό, ενώ ο καταλύτης οδηγείται στον αναγεννητή. Στη δεύτερη φάση έχουμε την αναγέννηση του καταλύτη η οποία πραγματοποιείται με καύση του κωκ, που έχει επικαθίσει στην επιφάνεια του καταλύτη, με ταυτόχρονη έκλυση θερμότητας. Η θερμότητα αναγέννησης μεταφέρεται μέσω του καταλύτη στον χώρο της αντίδρασης. Ουσιαστικά η διεργασία αποτελείται από δύο αντιδραστήρες (έναν για τις κυρίως αντιδράσεις και έναν για την αναγέννηση του καταλύτη), οι οποίοι εμφανίζουν μεγάλη αλληλεπίδραση μεταξύ τους [1][2].

Η παρουσία δύο αντιδραστήρων σε συνδυασμό με το μεγάλο πλήθος των αντιδράσεων που πραγματοποιούνται, την αποδραστικοποίηση του καταλύτη κατά την αντίδραση από την επικάθιση του κωκ και την ασάφεια της αναγέννησης του καταλύτη στον αναγεννητή καθιστούν την διεργασία του FCC μία από τις πιο δύσκολα μοντελοποιήσιμες. Δεδομένων λοιπόν των πολλών παραμέτρων που επηρεάζουν την διεργασία του FCC, μία φαινομενολογική προσέγγιση είναι πολύ πολύπλοκη και απαιτούνται πολλές απλοποιητικές

παραδοχές για την επίλυση της. Έτσι, μία προσέγγιση “Black box” είναι πολύ πιθανό να δίνει καλύτερα αποτελέσματα από ό,τι ένα φαινομενολογικό μοντέλο [2].

Μία τεχνική για μοντελοποίηση τύπου “Black box” είναι τα νευρωνικά δίκτυα. Τα νευρωνικά δίκτυα αποτελούνται από πολλές απλές μονάδες επεξεργασίας (νευρώνες) οι οποίες είναι ταξινομημένες σε παράλληλες στοιβάδες ενώ κάθε νευρώνας διακλαδίζεται στις επόμενες στοιβάδες. Λόγω της μορφής τους είναι ικανά να προσομοιώσουν με επιτυχία πολύπλοκες μη γραμμικές διαδικασίες [3].

Ο πιο ευρέως χρησιμοποιούμενος τύπος νευρωνικών δικτύων είναι τα MLP (Multi Layer Perceptron), τα οποία αποτελούνται από τη στοιβάδα εισόδου, μία ή παραπάνω κρυφές στοιβάδες και τη στοιβάδα εξόδου. Σε αυτά κάθε σήμα από τη στοιβάδα εισόδου διακλαδίζεται στους νευρώνες της 1ης κρυφής στοιβάδας. Τα σήματα πριν καταλήξουν σε ένα νευρώνα τροποποιούνται κατάλληλα μέσω των βαρών (weights) των συνδέσεων και συνδυάζονται έτσι ώστε να δημιουργήσουν ένα σήμα εισόδου. Το σήμα αυτό μορφοποιείται στον κάθε νευρώνα και διακλαδίζεται στους νευρώνες της επόμενης κρυφής στοιβάδας (ή αν δεν υπάρχει στη στοιβάδα εξόδου), οι οποίοι το επεξεργάζονται όμοια με την διαδικασία που μόλις περιγράφηκε. Στα MLP συνήθως τα βάρη δρουν πολλαπλασιαστικά στα σήματα, τα σήματα συνδυάζονται προσθετικά πριν τον νευρώνα ενώ η συνάρτηση επεξεργασίας των νευρώνων είναι η υπερβολική εφαπτομένη [3].

Για να μπορέσουν να νευρωνικά δίκτυα να προσομοιώσουν μία διεργασία πρέπει να προηγηθεί μία διαδικασία εκμάθησης στην οποία τα βάρη του δικτύου προσαρμόζονται στην συγκεκριμένη διεργασία.

#### ΑΝΑΠΤΥΞΗ ΤΟΥ ΝΕΥΡΩΝΙΚΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ

Κατά τη δημιουργία του νευρωνικού μοντέλου ακολουθήθηκαν τα εξής στάδια [3]: α) επιλογή μεταβλητών εισόδου και εξόδου του μοντέλου και συλλογή δεδομένων β) προεπεξεργασία των δεδομένων γ) επιλογή του βέλτιστου νευρωνικού δικτύου. Αναλυτικότερα:

α) Η επιλογή των μεταβλητών εξόδου καθορίστηκε από το στόχο του μοντέλου, ο οποίος ήταν η πρόβλεψη της σύστασης των προϊόντων της μονάδας (Sour Gas, Gasoline, LPG, LCCO, Slurry, Coke). Όλες οι μεταβλητές που θεωρήθηκαν ότι πιθανώς να έχουν επίδραση στις παραπάνω μεταβλητές εξόδου συμπεριελήφθησαν ως μεταβλητές εισόδου του μοντέλου. Οι μεταβλητές αυτές αφορούν τα λειτουργικά χαρακτηριστικά της μονάδας καθώς και τις ιδιότητες της τροφοδοσία και του καταλύτη. Τα δεδομένα που χρησιμοποιήθηκαν για την ανάπτυξη του μοντέλου ελήφθησαν από τη βιομηχανική μονάδα FCC των ΕΛ.ΠΕ. Α.Ε. Εγκαταστάσεις Ασπροπύργου. Αφορούν το χρονικό διάστημα Νοέμβριος 1999 – Ιούλιος 2000.

β) Πριν χρησιμοποιηθούν τα δεδομένα στη διαδικασία εκμάθησης του νευρωνικού δικτύου απομακρύνθηκαν με κατάλληλο στατιστικό έλεγχο τα δεδομένα που ήταν προφανώς αποτέλεσμα λανθασμένων μετρήσεων ή δυσλειτουργίας της μονάδας (outliers). Έτσι το τελικό σύνολο δεδομένων περιείχε 225 σειρές μετρήσεων. Στη συνέχεια τα δεδομένα κανονικοποιήθηκαν [4]. Για τα δεδομένα εισόδου κρίθηκε καλύτερο να κανονικοποιηθούν έτσι ώστε να έχουν όλες οι μεταβλητές μέση τιμή 0 και τυπική απόκλιση 1.

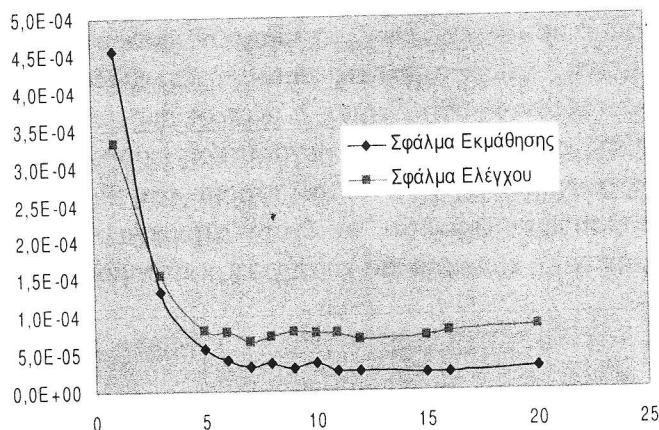
Για τα δεδομένα εξόδου ήταν απαραίτητο να προσαρμοστούν μεταξύ των τιμών -1 και 1, δεδομένου ότι στο νευρωνικό δίκτυο χρησιμοποιήθηκε ως συνάρτηση στη στοιβάδα εξόδου η υπερβολική εφαπτομένη (tanh). Επιπλέον για να μην παρουσιαστούν προβλήματα «κορεσμού των βαρών του δικτύου» με τις ακραίες τιμές 1 και -1 της συνάρτησης εξόδου, η κανονικοποίηση των δεδομένων εξόδου έγινε γραμμικά μεταξύ των τιμών -0.9 και 0.9. Με αυτό τον τρόπο δίνεται και περιθώριο για δυνατότητα λήψης αποτελέσματος από το νευρωνικό δίκτυο μετά την ολοκλήρωση της φάσης ανάπτυξής του, όταν κληθεί να αντιμετωπίσει δεδο-

μένα που βρίσκονται ελαφρώς έξω από την περιοχή των δεδομένων που χρησιμοποιήθηκαν στη φάση ανάπτυξής του.

Μετά την κανονικοποίησή τους τα δεδομένα χωρίστηκαν σε 3 σύνολα: το σύνολο εκμάθησης (150 δεδομένα), το σύνολο ελέγχου (50 δεδομένα) και το σύνολο πιστοποίησης (25 δεδομένα) του μοντέλου.

γ) Η διαδικασία εύρεσης του βέλτιστου νευρωνικού δικτύου περιλαμβάνει τον προσδιορισμό της αρχιτεκτονικής του και την προσαρμογή των βαρών του. Εξετάστηκε η περίπτωση μιας κρυφής στοιβάδας. Οι νευρώνες των στοιβάδων εισόδου και εξόδου είναι 23 και 6 αντίστοιχα και καθορίστηκαν στο στάδιο επιλογής των μεταβλητών εισόδου και εξόδου του μοντέλου. Εξετάζονται δίκτυα με διάφορους αριθμούς νευρώνων στην εσωτερική στοιβάδα (1). Για συγκεκριμένο 1 η διαδικασία εκμάθησης του δικτύου επαναλαμβανόταν

$N_{tr}=10$  φορές με διαφορετικό σύνολο αρχικών βαρών κάθε φορά. Το δίκτυο που παρουσίαζε το ελάχιστο σφάλμα (MSE) στο σύνολο ελέγχου, θεωρούνταν το καλύτερο δίκτυο για το συγκεκριμένο αριθμό νευρώνων στην κρυφή στοιβάδα. Στη συνέχεια δοκιμαζόταν νέα τιμή για το 1 και η παραπάνω διαδικασία επαναλαμβανόταν μέχρι την τιμή  $Lim$ , η οποία γενικά εξαρτάται από το μέγεθος του συνόλου δεδομένων και την πολυπλοκότητα του προβλήματος και στην περίπτωση μας ήταν 20. Ως βέλτιστο θεωρείται νευρωνικό δίκτυο που παρουσιάζει το ελάχιστο σφάλμα  $MSE_{min}$ . Τα αποτελέσματα της παραπάνω διαδικασίας παρουσιάζονται στο Σχήμα 1. Το νευρωνικό δίκτυο με 7 νευρώνες στην κρυφή στοιβάδα παρουσίασε την καλύτερη συμπεριφορά, η οποία παρουσιάζεται στην επόμενη παράγραφο.



Σχήμα 1. MSE στα σύνολα εκμάθησης και ελέγχου για διάφορους αριθμούς νευρώνων της κρυφής στοιβάδας

## ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ – ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

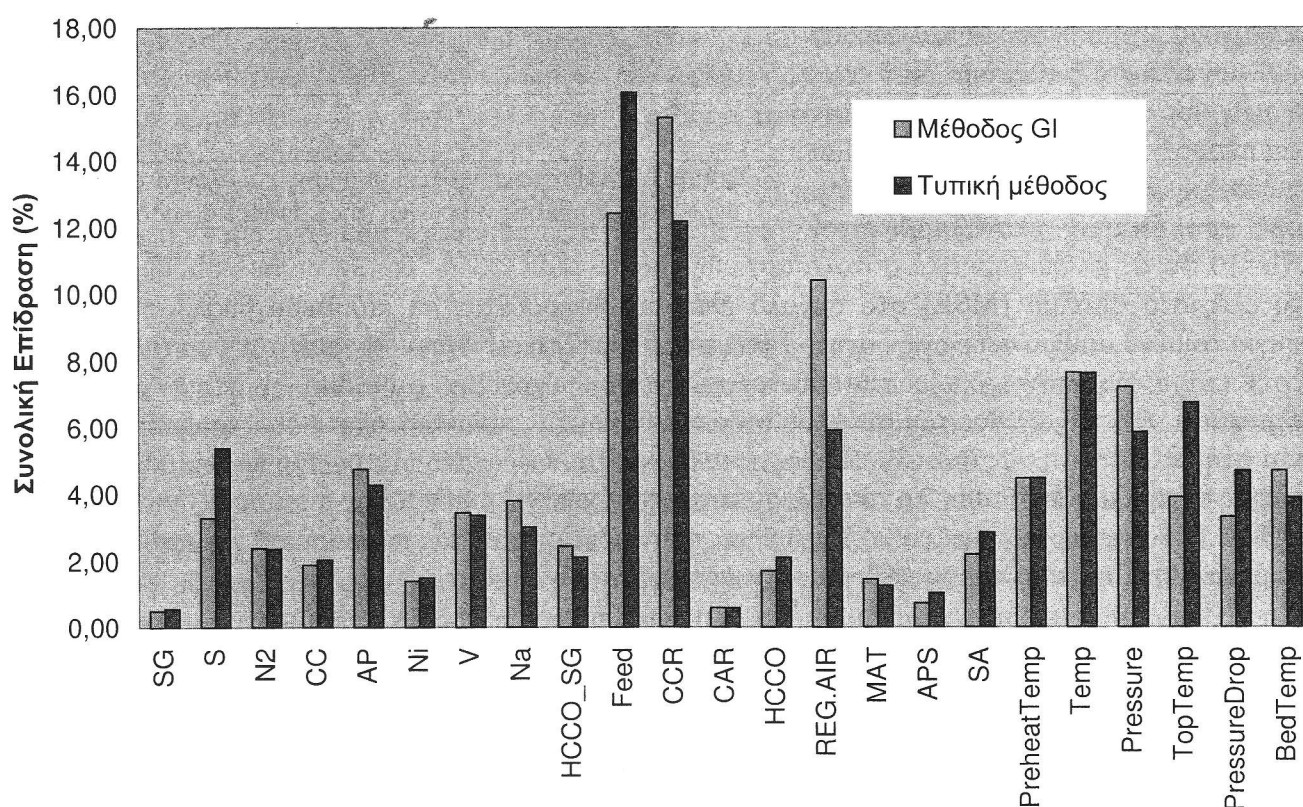
Στον Πίνακα 1 παρουσιάζονται για όλες τις μεταβλητές εξόδου τα μεγέθη MARE (Μέση τιμή της απόλυτης τιμής των σχετικών σφαλμάτων του μοντέλου),  $R^2$  και  $a$ ,  $b$ . Τα τρία τελευταία μεγέθη αναφέρονται στη βέλτιστη ευθεία σε διάγραμμα Αναμενόμενων/Προβλεπόμενων Τιμών. Τα  $a$ ,  $b$  αναφέρονται στην κλίση και στην αποτέμνουσα της ευθείας, που για το «τέλειο» μοντέλο πρέπει να είναι 1 και 0 αντίστοιχα. Όλα τα παραπάνω μεγέθη αναφέρονται στο σύνολο δεδομένων που χρησιμοποιήθηκε για την πιστοποίηση του μοντέλου. Το σύνολο αυτό όπως είναι λογικό παρουσιάζει τις χειρότερες τιμές συγκριτικά με το σύνολο εκμάθησης και ελέγχου του μοντέλου, γεγονός αναμενόμενο, αφού δεν είχε χρησιμοποιηθεί καθόλου στη

Πίνακας 1. Στατιστικά μεγέθη για κάθε μια από τις εξόδους του βέλτιστου μοντέλου

	Sourgas	LPG	Gasoline	LCCO	Slurry	Coke
MARE (%)	2,506	1,289	1,089	2,785	3,537	0,339
$R^2$	0,831	0,798	0,753	0,853	0,907	0,980
$a$	0,801	0,754	0,791	0,763	0,839	1,006
$b$	1,032	3,707	10,269	4,219	1,445	-0,026

διαδικασία εύρεσης του βέλτιστου μοντέλου. Οι τιμές πάντως των στατιστικών μεγεθών για αυτό το σύνολο δείχνουν τις δυνατότητες γενίκευσης του μοντέλου και θεωρούνται ικανοποιητικές.

Επιπλέον έγινε ανάλυση ευαισθησίας των αποτελεσμάτων του δικτύου με 2 μεθόδους. Η μια από αυτές αφορά στο δείκτη γενικής επίδρασης GI [5], ο οποίος προκύπτει αποκλειστικά από τις τιμές των βαρών του δικτύου. Η δεύτερη μέθοδος είναι η κλασσική μέθοδος μεταβολής των μεταβλητών εισόδου στο εύρος τιμών τους και η παρατήρηση της συνολικής επίδρασης στις μεταβλητές εξόδου. Τα αποτελέσματα των δυο μεθόδων αυτά παρουσιάζονται στο Σχήμα 2. Και οι δυο μέθοδοι οδηγούν σε παρόμοια συμπεράσματα ως προς τις μεταβλητές με τη μεγαλύτερη επίδραση. Οι λειτουργικές παράμετροι όπως η παροχή της τροφοδοσίας, η ανακυκλοφορία του καταλύτη και η θερμοκρασία και η πίεση του αντιδραστήρα φαίνεται να έχουν τη μεγαλύτερη επίδραση, γεγονός που συμφωνεί με τη βιομηχανική εμπειρία για τη συγκεκριμένη μονάδα.



Σχήμα 2. Ανάλυση ευαισθησίας στο βέλτιστο μοντέλο με τους δείκτες GI και την τυπική μέθοδο

## ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] Θεολόγος Κ., Προσομοίωση Διεργασιών Καταλυτικής Πυρόλυσης - Διδακτορική Διατριβή, Ε.Μ.Π. (1994)
- [2] Michalopoulos J., Papadokonstadakis S., Arampatzis G. and Lygeros A., Modeling of an Industrial Fluid Catalytic Cracking Unit Using Neural Networks, Chem. Eng. Res. Des. (2001), in print
- [3] Tambe S.S., Kulkarni B.D., Desphande P.B., Elements of Artificial Neural Networks, SAC (1996)
- [4] Swingler K., Applying Neural Networks – A Practical Guide, Academic Press (1996)
- [5] Howes P., Crook N., Neurocomputing 24:191 (1999)