

## شبیه‌سازی و بهینه‌سازی واحد تصفیه و شستشوی نفت سفید با نرم‌افزار Petro-Sim

محمد برزگر قهفرخی\*<sup>1</sup>، کبری پور عبدالله قهفرخی<sup>2</sup>، مسعود نعمت الهی<sup>3</sup>

<sup>1</sup> کارشناس ارشد مهندسی شیمی، دانشگاه آزاد اسلامی، واحد شهرضا، شهرضا، ایران

<sup>2</sup> دانشیار، پژوهشکده مهندسی شیمی و نفت، پژوهشگاه شیمی و مهندسی شیمی ایران، تهران، ایران

<sup>3</sup> کارشناس پژوهش، شرکت پالایش نفت آبادان، آبادان، ایران

نوع مقاله: ترویجی

دریافت: 1399/01/27 پذیرش: 1399/07/23

### چکیده

حذف مرکپتان از برش‌های نفتی جهت ارتقای کیفیت آن‌ها دارای اهمیت فراوان است. در این مقاله به شبیه‌سازی واحد تصفیه نفت سفید پالایشگاه آبادان بر اساس روش مراکس با نرم‌افزار Petro-SIM پرداخته شده است. برای مقایسه بهینه‌سازی با نرم‌افزار مذکور، اطلاعات شبیه‌سازی واحد برای پارامترهای تأثیرگذار، در ابتدا یک مدل با استفاده از تحلیل شبکه عصبی به‌دست آمده و مدل اخیر توسط الگوریتم ژنتیک بهینه شد. مقایسه نتایج بهینه‌سازی با نرم‌افزار Petro-SIM و الگوریتم ژنتیک نشان داد که دما در هر دو تکنیک یکسان بوده و برابر  $125^{\circ}\text{F}$  است که همان دمای عملیاتی است. همچنین فشار به‌دست آمده از الگوریتم ژنتیک و نرم‌افزار Petro-SIM به ترتیب 75/6 و 79/5 psig بوده که نسبت به مقدار عملیاتی اندکی کم‌تر شده است و در مقابل شدت جریان هوای بهینه به کمک الگوریتم ژنتیک  $181 \text{ kg/hr}$  از مقدار بهینه به‌دست آمده از نرم‌افزار  $(169/8 \text{ kg/hr})$  بیشتر شده است. علاوه بر این، کسر وزنی بهینه سود در دو هر تکنیک تقریباً برابر 0/28 است و تفاوتی با مقادیر موجود در واحد ندارد. با استفاده از نتایج به‌دست آمده از الگوریتم ژنتیک و وارد کردن این شرایط به نرم‌افزار Petro-SIM و شبیه‌سازی آن مشخص شد که با بهینه‌سازی شرایط، مقدار غلظت جرمی مرکپتان در محصول خروجی به کم‌تر از 1 ppm خواهد رسید که شرایط مطلوبی را ایجاد خواهد کرد.

**کلمات کلیدی:** نفت سفید، فرآیند مراکس، نرم‌افزار پتروسیم، شبکه عصبی، الگوریتم ژنتیک

\* mohammad\_barzegar\_gh@yahoo.com

## مقدمه

واحد تصفیه نفت سفید در پالایشگاه آبادان به‌عنوان یکی از مهم‌ترین واحدهای این پالایشگاه است که نقش تعیین کننده‌ای در تأمین نفت سفید مورد نیاز کشور ایفا می‌کند. در این پژوهش فرآیند تصفیه با مراکز برای کاهش محتوای مرکاپتان از نفت سفید پالایشگاه آبادان مورد بررسی قرار می‌گیرد. فرآیند موجود در پالایشگاه آبادان با استفاده از نرم‌افزار Petro-SIM شبیه‌سازی و سپس چهار پارامتر مهم مؤثر دما، فشار، شدت جریان هوای ورودی و غلظت محلول سود برگشتی که بیش از سایر پارامترها بر کیفیت محصول نهایی مؤثر بودند شناسایی شدند. برای مقایسه بهینه‌سازی با نرم‌افزار مذکور، اطلاعات شبیه‌سازی واحد برای پارامترهای تأثیرگذار، در ابتدا یک مدل با استفاده از تحلیل شبکه عصبی به دست آمد و مدل اخیر توسط الگوریتم ژنتیک بهینه شد. سپس نتایج بهینه‌سازی با استفاده از الگوریتم ژنتیک با نتایج حاصل از ابزار بهینه‌سازی نرم‌افزار مقایسه گردید.

## شبیه‌سازی فرآیند

برای شبیه‌سازی فرآیند مراکز با نرم‌افزار Petro-SIM ابتدا یک شناسنامه نفتی به نام Kerosene-2 Migrated با استفاده از اطلاعات نفت‌های منطقه‌ی خلیج فارس که در جدول 1 ارائه شده است، ایجاد شد. همچنین شرایط عملیاتی هر جریان نظیر دما، فشار و دبی جرمی که در شبیه‌سازی مورد استفاده قرار گرفت در جدول 2 ارائه شده است.

جدول 1- خواص شناسنامه نفتی سنتز شده [1 و 17]

برش خصوصیت	Cut-1	Cut-2	Cut-3	Cut-4	Cut-5
Percent Volume yield (Vol%)	2/27	8/11	13/20	12/93	12/24
Final cut point (F)	320/0	338/0	356/0	374/0	392/0
Initial cut point (F)	302/0	320/0	338/0	356/0	374/0
Molecular weight	131/0	137/0	143/18	149/55	156/10
True vapor pressure (psig)	-14/54	-14/59	-14/63	-14/66	-14/67
C to H ratio (wt%)	5/92	5/96	5/99	6/03	6/07
Density 60 F (kg/m <sup>3</sup> )	767/8	773/75	779/59	785/34	791/02

جدول 2- خواص جریان‌های مهم در نمودار فرآیند

خصوصیت	Feed stream	Keros feed-3	Mixed feed-2	Air stream	Final Product
Temperature (F)	104	125	125	125	123/4
Pressure (psig)	35	70	90	60	60
Mass Flow (kg/hr)	21140	21140	21170	100	21350

پس از وارد کردن مواد ورودی به واحد شستشوی نفت سفید پالایشگاه آبادان باید معادله حالت مناسب را برای آن تعیین نمود که با توجه به ترکیبات هیدروکربنی موجود در خوراک و شرایط موجود، معادله ترمودینامیکی Peng Robinson از قسمت Fluid package به‌عنوان معادله ترمودینامیکی مناسب برای تعریف خواص PVT ترکیبات هیدروکربنی انتخاب شد.

تعریف واکنش مراکس در سربرگ Reactions انجام شده و ثابت سرعت واکنش بر اساس نتایج ارائه شده در مرجع [2] وارد شده است. پس از شبیه‌سازی تک‌تک تجهیزات فرآیند مراکس مطابق نمودار جریان ارائه شده از طرف پالایشگاه آبادان در صفحه PFD شبیه‌سازی گردید. شرایط عملیاتی برای جریان‌های اصلی در بخش نهایی فرآیند مراکس که واکنش تبدیل مرکاپتان‌ها به دی‌سولفیدها در آن اتفاق می‌افتد در شکل 1 نشان داده شده است.

Name	Mixed feed-2	Prod-4	Prod-3	Drain-2
Vapour	0.0031	0.0000	1.0000	0.0000
Temperature [F]	123.8	123.9	123.9	123.9
Pressure [psig]	12.14	7.786	7.786	7.786
Molar Flow [kgmole/h]	1899	139.8	6.214	1753
Mass Flow [kg/h]	5.617e+004	2.119e+004	176.7	3.480e+004
Std Ideal Liq Vol Flow [barrel/day]	8911	4005	30.74	4875
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-2.751e+005	-3.231e+005	-1.962e+004	-2.722e+005
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	26.32	289.0	157.1	4.935
Heat Flow [kJ/h]	-5.224e+008	-4.516e+007	-1.219e+005	-4.771e+008

شکل 1- نتیجه حاصل از شبیه‌سازی مرحله نهایی فرآیند مراکس در نرم‌افزار Petro-SIM

### مدل‌سازی با شبکه عصبی

جهت مدل‌سازی با شبکه عصبی لازم است پارامترهای ورودی به شبکه که شامل متغیرهای مستقل و وابسته هستند وارد گردند. همچنین هدف از مدل‌سازی نیز باید مشخص شود، لذا در ابتدا لازم است کلیه قيود و محدودیت‌های واحد شناسایی شده و در مدل‌سازی در نظر گرفته شوند که عبارت‌اند از:

اثر مقدار و غلظت محلول سود در استخراج مرکاپتان: با تغییر غلظت سود از صفر تا 2/75 مول بر لیتر، افزایش درصد تبدیل مرکاپتان‌ها به مرکاپتایدهای سدیم چشم‌گیر بوده، اما پس از آن با افزایش غلظت سود، درصد تبدیل واکنش تغییر چندانی نمی‌کند [18].

غلظت تیوسولفات: در کاستیک احیاشده عملاً نباید ترکیب تیوسولفات موجود باشد. غلظت بیش از 1 ppm این ماده نشان‌دهنده‌ی حضور  $H_2S$  در واحد است که در این حالت، رنگ کاستیک نیز رو به سیاهی می‌رود [3].

غلظت سولفید: غلظت بیش از 1 ppm از سولفید به معنی اکسید شدن بیش از اندازه کاستیک است که احتمال تولید پلی سولفید و گرفتگی مسیرها را افزایش می‌دهد. یکی از دلایل افزایش غلظت این ماده بالا بودن دمای برج احیا است [4].

غلظت مرکاپتایدها: مرکاپتایدها محصول واکنش کاستیک با مرکاپتان بوده و غلظت این مواد در کاستیک احیاشده نباید کم‌تر از 30 ppm باشد [18 و 3 و 4].

غلظت DSO: بالا رفتن غلظت DSO تا بیش از 200 ppm در کاستیک احیاشده سبب می‌شود که در برج جذب، DSO وارد فاز هیدروکربنی شده و میزان غلظت کل ترکیبات گوگردی افزایش یابد [3].

میزان اکسیژن در Off-Gas: بهتر است میزان اکسیژن بین 9 تا 16٪ تغییر کند. اگر میزان اکسیژن کم‌تر از این مقدار باشد به این معنی است که نشان‌دهنده کمبود هوا بوده که دلیل اصلی بر وجود  $H_2S$  در خوراک و ترکیبات سولفاته در کاستیک و اگر بیش از این مقدار باشد نیز، به معنی بالا بودن هوا یا بالا بودن دمای احیاست [5-6].

دمای برج جذب: یکی از پارامترهای مهم در برج جذب، بسته به نوع واکنش، دمای پایین آن است؛ اما کاهش بیش‌ازاندازه‌ی دما در برج نیز، باعث همراه برده شدن کاستیک توسط فاز هیدروکربنی می‌شود.

مقدار در گردش کاستیک: عموماً میزان جریان در گردش کاستیک نسبتی از مقدار هیدروکربن است. دور شدن از مقدار محاسبه شده باعث افزایش غلظت کل ترکیبات گوگردی در محصول می‌شود [7].

میزان هوا: بهتر است دست کم 150٪ هوای استوکیومتری به سیستم تزریق شود [3 و 4 و 18].

تمامی این محدودیت‌ها باید در زمان بهینه‌سازی مدنظر قرار گیرند. بر اساس بررسی‌های انجام شده در این پژوهش پارامترهایی نظیر دمای فرآیند (برحسب فارنهایت)، فشار عملیاتی (برحسب psig)، دبی هوا (برحسب kg/hr) و کسر جرمی سود به‌عنوان متغیر مستقل باید وارد شوند. کاهش مرکاپتان در محصول نهایی هدف اصلی کار است اما این کاهش مرکاپتان ممکن است در طول فرآیند به‌صورت انحلال غیر واکنشی در فاز آبی یا تبدیل به محصولات ناخواسته مانند سولفید هیدروژن شود. به همین دلیل میزان DMDS تولیدی در محصول نهایی به‌عنوان پارامتر خروجی از مدل و متغیر وابسته در نظر گرفته می‌شود.

همچنین علاوه بر انتخاب پارامتر مستقل و وابسته، باید دامنه تغییرات آن‌ها نیز مشخص گردد، دامنه پارامترهای به‌کار گرفته شده در این مدل نیز در جدول 3 نشان داده شده است. پارامترهای ورودی، به لایه ورودی شبکه وارد می‌شوند. تعداد نرون‌های لایه ورودی برابر با تعداد پارامترهای ورودی و تعداد نرون‌های لایه خروجی برابر با تعداد پارامترهای خروجی هستند.

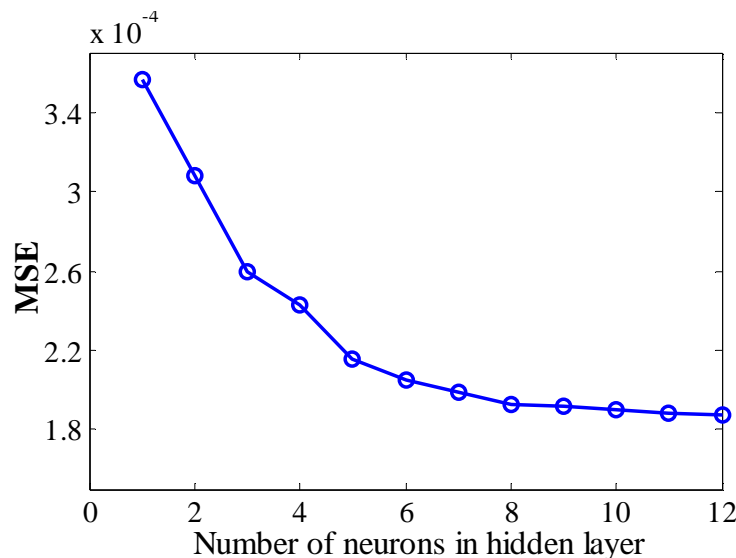
جدول 3- پارامترهای مدل و دامنه آن‌ها

متغیر	دامنه متغیر
لایه ورودی	
دمای فرآیند (F)	75-180
فشار عملیاتی (psig)	75-180
دبی هوا (kg/hr)	10-3000
کسر جرمی سود برگشتی	0/0 – 0/7
لایه خروجی	
محصول DS (kg/hr)	0/1 – 0/48

در این شبکه از یک لایه مخفی استفاده شده و تعداد نرون‌های مخفی، با کمینه کردن خطای مربع متوسط (MSE) بین داده‌های ورودی و خروجی شبکه، با استفاده از شبکه‌های مختلف با نرون‌های مخفی متفاوت مشخص می‌شود.

به همین منظور با تغییر متغیرهای عملیاتی دما، فشار، ترکیب درصد سود و شدت جریان هوا در محدوده مجاز عملیاتی، 460 داده از نرم‌افزار Petro-SIM گرفته شده و شبکه عصبی با یک لایه مخفی و تعداد نرون‌های مختلف آموزش، آزمون و ارزیابی شد و شبکه‌ای با MSE کم‌تر انتخاب شد.

در شکل 2 میزان MSE برحسب تعداد نرون‌های مخفی نشان داده شده است. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، با افزایش تعداد نرون‌های لایه مخفی، مقدار MSE کاهش می‌یابد. البته شیب کاهش MSE با افزایش تعداد نرون‌های لایه مخفی کم می‌شود به طوری که با افزایش نرون‌ها به بیش از 8 نرون در لایه مخفی میزان MSE کاهش ناچیزی پیدا می‌کند؛ بنابراین لایه مخفی با 8 نرون برای شبکه عصبی در نظر گرفته شد زیرا با افزایش تعداد نرون، هرچند میزان MSE مقدار اندکی کاهش می‌یابد اما ساختار شبکه پیچیده‌تر و زمان آموزش شبکه نیز افزایش خواهد یافت.



شکل 2- رابطه بین تعداد نرون‌های لایه مخفی و MSE

معمولاً در کارهای انجام شده از توابع انتقال لگاریتمی و تانژانتی بیشتر برای لایه مخفی استفاده می‌شود و توابع خطی مثل *poslin*, *satlin*, *hardlims* و *purelin* برای لایه خروجی انتخاب می‌شوند. در این تحقیق توابع فوق بر این اساس و به صورت ترکیبی در چند مرحله آزموده شده‌اند. همچنین برای تعیین توابع انتقال شبکه، شبکه با توابع مختلف (*hardlims*, *tansig*, *logsig*, *poslin*, *satlin*, *purelin*) به صورت حدس و خطا آزموده شده و توابعی با آموزش بهتر شبکه و خطای کم‌تر انتخاب شده است که در نهایت تابع انتقال سیگموئیدی تانژانتی<sup>1</sup> برای لایه مخفی و تابع انتقال خطی<sup>2</sup> برای لایه خروجی انتخاب شدند.

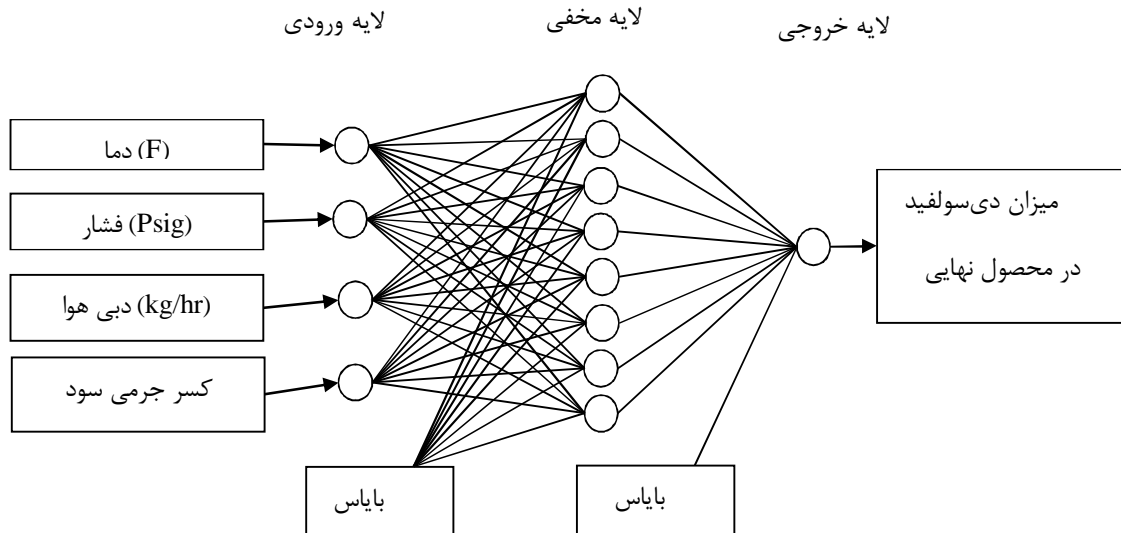
ساختار مناسب انتخاب شده برای شبکه عصبی مصنوعی که یک شبکه با یک لایه ورودی با 4 نرون، یک لایه مخفی با 8 نرون و یک لایه خروجی است در شکل 3 نشان داده شده است.

بر اساس روش به کاررفته توسط مراجع [8 و 9]، ساختار شبکه ایجاد شده با 70 درصد از 460 داده (322 داده) به دست آمده توسط نرم‌افزار Petro-SIM آموزش داده شد و با 15 درصد از داده‌ها (69 داده) آزمون و با 15 درصد از داده‌ها (69 داده) ارزیابی گردید. درصد‌های فوق بر اساس پیشنهاد‌های مراجع [8 و 9] انتخاب شده است. مطابق این

<sup>1</sup> Tansig

<sup>2</sup> Purelin

مراجع برای آموزش از 60 تا 80 درصد داده‌ها، برای آزمون و ارزیابی نیز 10 تا 20 درصد برای هرکدام توصیه شده است. مقادیر انتخاب شده فوق بر اساس میانگین بازه‌های فوق انتخاب شده است.



شکل 3- ساختار مناسب شبکه عصبی مصنوعی

### بهینه‌سازی با الگوریتم ژنتیک

به‌طور کلی الگوریتم‌های بهینه‌سازی، روش‌هایی محاسباتی هستند که برای رسیدن به یک کیفیت مشخص، فرایند را با تکرار زیاد انجام می‌دهند. پارامترهای الگوریتم ژنتیک برای بهینه‌سازی این فرآیند عبارت‌اند از: میزان دی‌سولفید (DS) تولیدی در محصول نهایی به‌عنوان تابع هدف<sup>3</sup> جهت بهینه‌سازی در نظر گرفته شد که مقدار آن توسط مدل شبکه عصبی با توجه به پارامترهای ورودی محاسبه می‌شود. تعداد اعضای جمعیت اولیه<sup>4</sup> 500 کروموزوم یا داده هستند که در نسل اول به‌صورت تصادفی تولید شده‌اند و تعداد کل نسل‌ها<sup>5</sup> برای رسیدن به مقدار بهینه 60 نسل است.

### نتایج و بحث

#### نتایج شبیه‌سازی اولیه

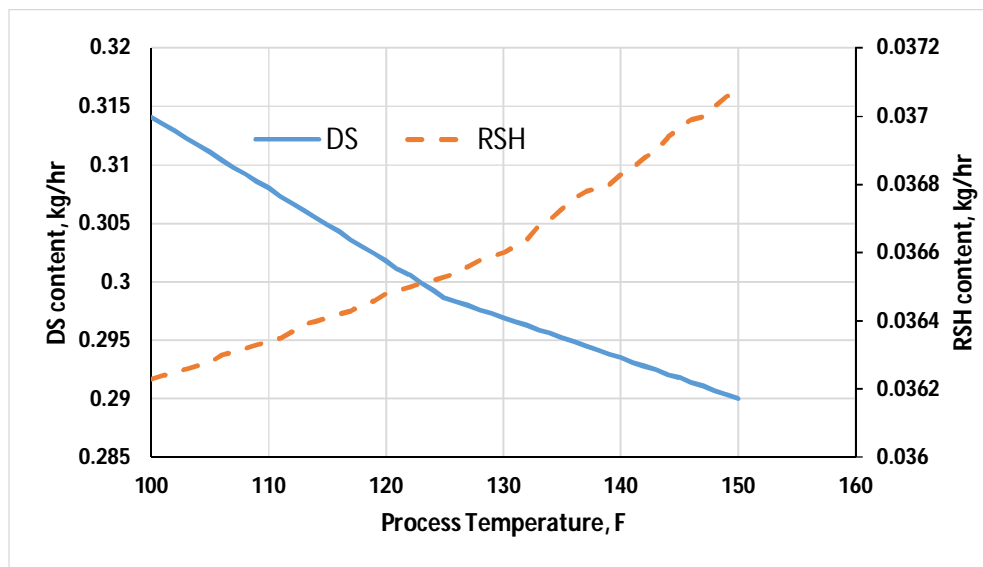
فرآیند مراکس با استفاده از نرم‌افزار Petro-SIM شبیه‌سازی شد. برای بررسی هر یک از متغیرهای دما و فشار جریان ورودی، شدت جریان هوای تزریق شده و کسر جرمی محلول سود به‌صورت مجزا، هر پارامتر در محدوده مجاز آن تغییر داده شده و سپس بر اساس مقدار متغیرها مقدار مرکاپتان موجود و دی‌سولفید تولیدی در جریان محصول نهایی به دست خواهد آمد که در ادامه تأثیر هر یک از پارامترها بررسی خواهد شد.

<sup>3</sup> Fitness value

<sup>4</sup> Initial Population

<sup>5</sup> Generation

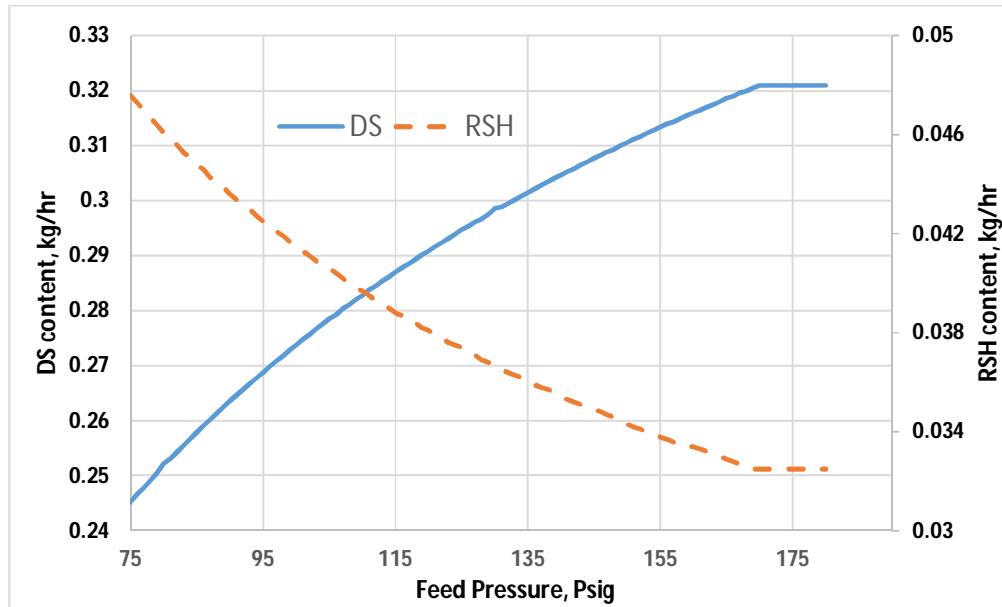
با توجه به داده‌های جمع‌آوری شده از فرآیند مراکس در پالایشگاه آبادان مشخص شد که در حال حاضر دمای فرآیند بر روی 125 درجه فارنهایت تنظیم شده است [10]. اثر تغییر دما در محدوده 100 تا 150 درجه فارنهایت بر روی میزان تولید دی‌سولفید و نیز مقدار باقی‌مانده مرکاپتان بررسی شده و در شکل 4 نشان داده شده است.



شکل 4- اثر تغییر دما بر فرآیند گوگردزایی مراکس از نفت سفید

مطابق شکل، کاهش دما منجر به کاهش محتوای مرکاپتان و افزایش تبدیل آن به دی‌سولفید می‌شود اما از طرف دیگر با توجه به محدودیت‌های ذکر شده در فصل دوم، کاهش دما باعث می‌شود بخشی از محلول کاستیک همراه فاز هیدروکربنی برده شده و این امر باعث افزایش خوردگی و افت کیفیت محصول می‌گردد [10 و 13]؛ بنابراین بایستی دمای بهینه انتخاب شده تا در آن مقدار مرکاپتان موجود و دی‌سولفید تولیدی در جریان محصول نهایی در مقدار بهینه قرار گیرد.

فشار نیز یکی از پارامترهای مؤثر بر این فرآیند است که در شکل 5 تغییرات فشار خوراک ورودی بر عملکرد فرآیند مورد ارزیابی قرار گرفته است.

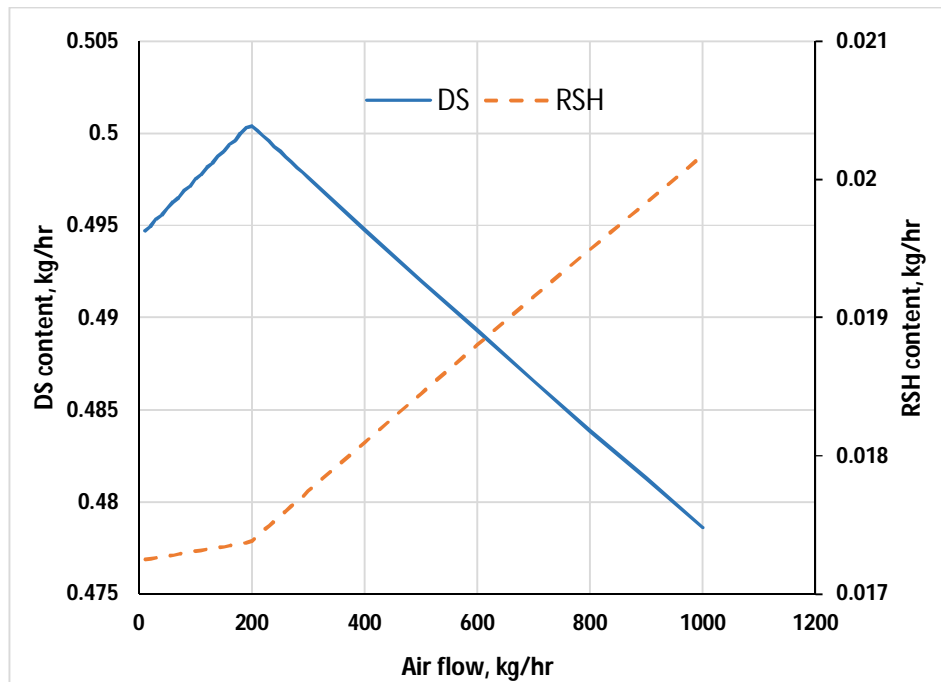


شکل 5- اثر تغییر فشار جریان ورودی بر فرآیند گوگردزدایی مراکس از نفت سفید

مطابق نمودار، جریان فشار فرآیند توسط پمپ P-1 کنترل شده که بر اساس شکل 5، تغییر فشار اثر معکوسی بر فرآیند حذف مرکپتان از جریان نفت سفید دارد. به این ترتیب که با افزایش فشار، میزان مرکپتان در جریان محصول کم شده و در مقابل، میزان دی سولفید افزایش می یابد که هر دو این موارد مطلوب خواهند بود. با افزایش فشار به حدود 170 psig، مقادیر دی سولفید و مرکپتان تغییر نکرده و مستقل از فشار خواهد شد زیرا در این فشار تمام ترکیبات در فاز مایع بوده و افزایش فشار تأثیری بر فرآیند نخواهد داشت [14]. لذا افزایش فشار تا حد بخصوصی منجر به بهبود فرآیند شده و پس از آن مقدار مشخص (در اینجا 170 psig) تأثیری بر فرآیند ندارد. لازم به ذکر است که فشار بالا تا جایی که توسط تجهیزات قابل تحمل باشد مطلوب خواهد بود [15]؛ بنابراین مقدار بهینه فشار نیز بایستی با الگوریتم های بهینه سازی تعیین گردد.

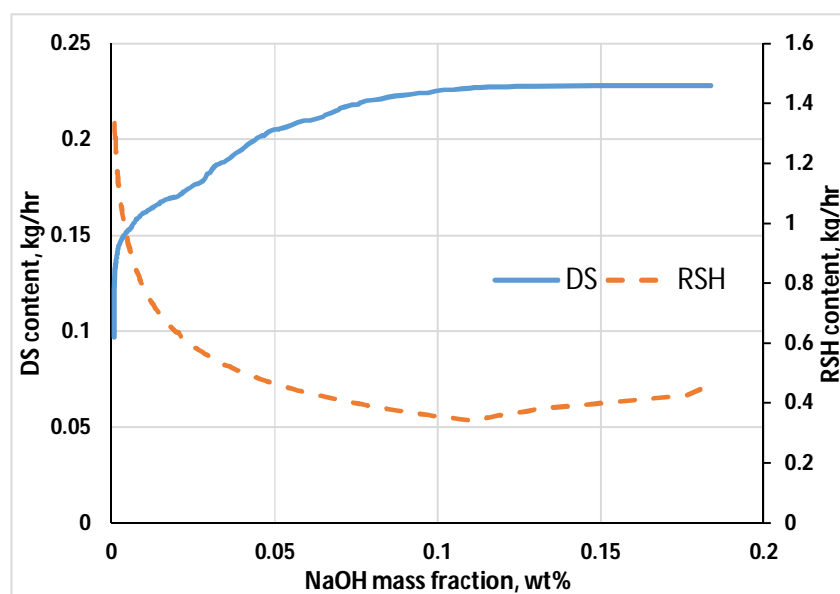
بر اساس معادله استوکیومتری و میزان مرکپتان موجود در جریان خوراک، مقدار هوای استوکیومتری لازم برای تبدیل مرکپتان به دی سولفید حدود 20 کیلوگرم بر ساعت است [5]. با توجه به محدودیت تعریف شده برای شدت جریان هوا، مقدار آن بایستی بین 150 تا 500 درصد مقدار استوکیومتری یعنی حدود 30 تا 100 کیلوگرم بر ساعت تغییر کند؛ اما آنچه از بررسی تغییرات غلظت دی سولفید در مقابل تغییرات شدت جریان هوای ورودی در شکل 6 برمی آید حاکی از این است که در شدت جریان 200 کیلوگرم بر ساعت (هوا) میزان تولید دی سولفید بیشینه مقدار را داشته و مقدار مرکپتان در محصول نیز کم خواهد شد؛ اما با افزایش شدت جریان هوا از مقدار بیشینه، غلظت مرکپتان در محصول افزایش یافته و میزان دی سولفید تولیدی نیز کاهش خواهد یافت. این پدیده نشان می دهد که بایستی شدت جریان هوا کم تر از مقدار بیشینه یعنی 200 کیلوگرم بر ساعت انتخاب گردد.





شکل 6- اثر تغییر شدت جریان هوای ورودی بر فرآیند گوگردزایی مراکس از نفت سفید

اثر غلظت محلول سود بر فرآیند مراکس در شکل 7 نشان داده شده است. بر اساس این شکل با افزایش غلظت سود میزان تولید دی سولفید افزایش یافته به نحوی که در ابتدا تولید دی سولفید با سرعت بالاتری افزایش می یابد اما هر چه غلظت سود افزایش یابد، اثر چشم گیری در تولید دی سولفید دیده نمی شود. از طرف دیگر با افزایش غلظت سود، ابتدا میزان مرکاپتان در محصول کاهش یافته اما با افزایش درصد سود به بیش از 11 درصد وزنی، میزان مرکاپتان در محصول افزایش خواهد یافت [18]؛ بنابراین می توان نتیجه گرفت که به مقدار بهینه غلظت محلول سود می تواند به عنوان یک پارامتر تعیین کننده دیگر در نظر گرفته شود.



شکل 7- اثر تغییر غلظت سود ورودی بر فرآیند گوگردزایی مراکس از نفت سفید

## بهینه‌سازی با نرم‌افزار Petro-SIM

برای بهینه‌سازی پارامترهای فوق‌الذکر با استفاده از نرم‌افزار Petro-SIM از ابزار Optimizer استفاده شد. با توجه به دلایل ذکر شده در قسمت قبل، چهار متغیر دما، فشار، شدت جریان هوا و غلظت سود برگشتی با شرایط جدول 4 به‌عنوان متغیرهای مستقل در نظر گرفته شدند. شدت جریان جرمی دی‌سولفید به‌عنوان متغیر وابسته (پارامتر هدف) انتخاب شد که بایستی بیشینه شود. لازم به ذکر است که برای بهینه‌سازی باید دو محدودیت زیر در نظر گرفته شود:

1. شدت جریان مرکاپتان در محصول نهایی به کم‌تر از 0/03 کیلوگرم بر ساعت برسد
2. غلظت محلول سود موجود در واکنش مراکس مطابق نتایج به‌دست آمده (شکل 7) کم‌تر از 20 درصد جرمی باشد.

نتایج این بهینه‌سازی با در نظر گرفتن این قیود و پارامترهای مستقل بهینه‌سازی با استفاده از نرم‌افزار انجام شد که نتایج آن در جدول 4 ارائه شده است.

جدول 4- نتایج حاصل از بهینه‌سازی با نرم‌افزار Petro-SIM

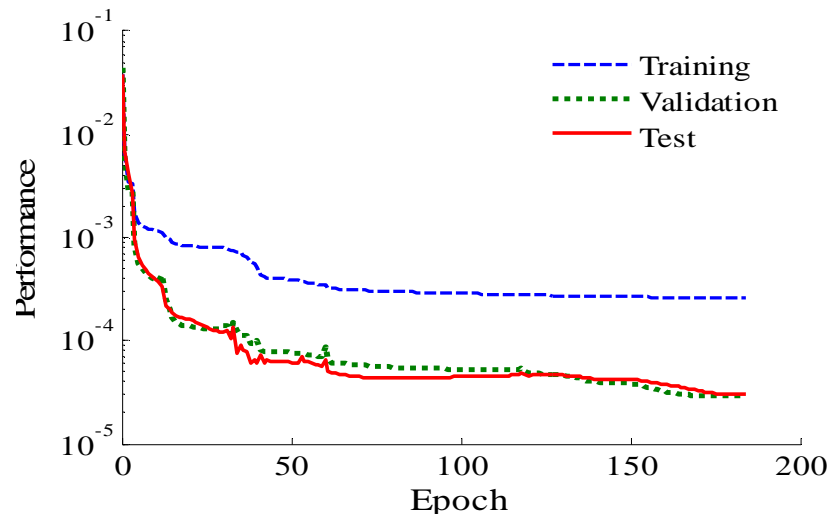
پارامترها	مقدار پایینی	مقدار موجود اولیه	مقدار بالایی	مقدار نهایی
پارامترهای مستقل				
دمای فرآیند (F)	100/0	125	150/0	124/99
فشار خوراک ورودی (Psig)	75/0	80	100/0	79/5
شدت جریان هوای ورودی (kg/hr)	10/0	100	500/0	169/8
کسر وزنی سود جریان برگشتی	0/0	0/280	0/40	0/2801
محدودیت‌ها				
شدت جریان مرکاپتان در محصول (kg/hr)	0/02	0/0167	0/03	0/01657
غلظت سود در مخلوط واکنش (kg/hr)	0/00	0/185	0/200	0/185
پارامتر وابسته				
شدت جریان جرمی دی‌سولفید (kg/hr)		0/4584		0/4533

با توجه به نتایج بهینه‌سازی اولیه ملاحظه شد که شرایط موجود برای پارامترهای فوق اختلاف چندانی با شرایط بهینه عملیاتی ندارند به‌جز شدت جریان هوای ورودی که در حال حاضر از مقدار بهینه حدود 70 درصد کم‌تر است. با رسیدن به شرایط بهینه شدت جریان جرمی دی‌سولفید در محصول نهایی حدود 0/4533 کیلوگرم بر ساعت خواهد شد که در این شرایط، شدت جریان جرمی مرکاپتان در محصول 0/01657 کیلوگرم بر ساعت خواهد بود. برای بررسی دقیق‌تر این پارامترها ابتدا با استفاده از نتایج متعدد به‌دست آمده از نرم‌افزار Petro-SIM داده‌های لازم برای مدل‌سازی فرآیند با استفاده از شبکه عصبی فراهم شده و پس از به‌دست آمدن مدل، با استفاده از الگوریتم ژنتیک مقادیر بهینه پارامترها تعیین خواهد شد.

## نتایج مدل‌سازی با شبکه عصبی

با توجه به اینکه نتایج حاصل از نرم‌افزار توسط داده‌های تجربی ارزیابی و صحت آن بررسی شده بنابراین داده‌های استفاده شده برای آموزش شبکه عصبی نیز معتبر بوده است؛ بنابراین در ارزیابی مدل شبکه عصبی، معیار ارزیابی،

نتایج حاصل از نرم‌افزار بوده و برای ارزیابی باید نتایج شبکه عصبی با نتایج نرم‌افزار مقایسه شوند. شکل 8 روند انجام آموزش، آزمون و ارزیابی شبکه و رسیدن به خطای کمینه را نشان می‌دهد.

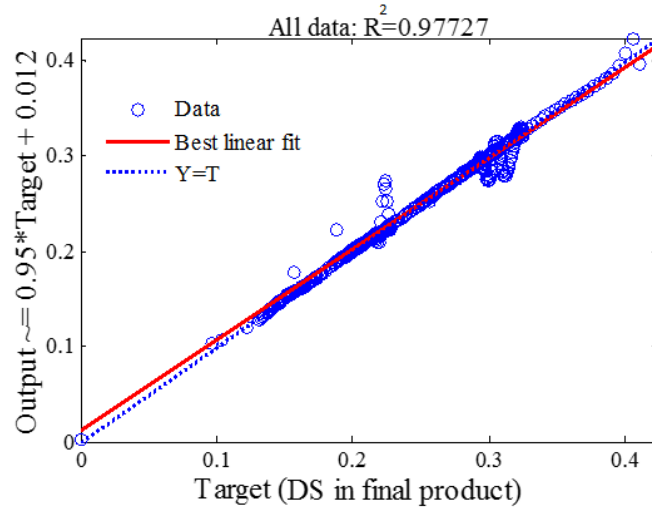


شکل 8- روند انجام آموزش، آزمون و ارزیابی شبکه

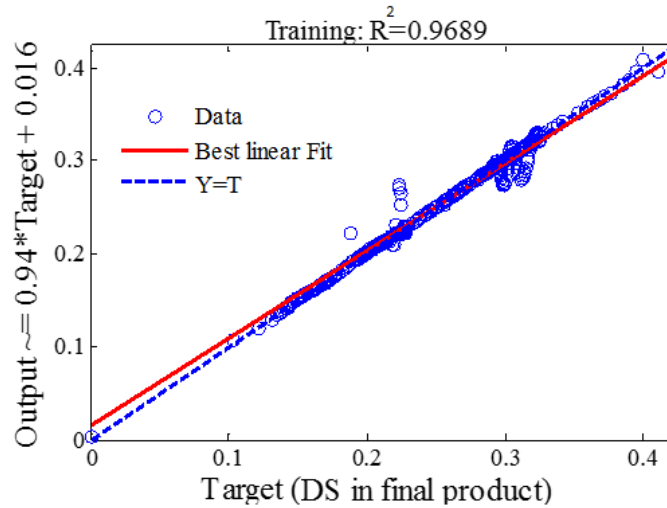
مقادیر ضریب همبستگی، MSE و MRE برای آموزش، آزمون، ارزیابی شبکه عصبی و پیش‌بینی توسط شبکه عصبی در جدول 5 نشان داده شده است. همچنین نمودار پراکندگی از مقایسه بین داده‌های ورودی به شبکه و داده‌های پیش‌بینی شده توسط شبکه برای کل داده‌ها، داده‌های آموزشی، داده‌های آزمون و داده‌های ارزیابی به دست آمده که به ترتیب در شکل‌های 9 تا 12 نشان داده شده است. همان‌طور که در شکل نشان داده شده بیش‌تر نقاط روی خط مناسب قرار گرفته‌اند و ضریب همبستگی بین داده‌های ورودی و خروجی شبکه برای کل داده‌ها، داده‌های آموزشی، داده‌های آزمون و داده‌های ارزیابی به ترتیب برابر با 0,97727، 0,9689، 0,99665 و 0,99632 بوده که این نتایج نشان می‌دهند که شبکه‌های عصبی مصنوعی می‌توانند پیش‌بینی بسیار خوبی برای این فرآیند داشته باشند.

جدول 5- مقادیر ضریب همبستگی، MSE و MRE برای شبکه عصبی

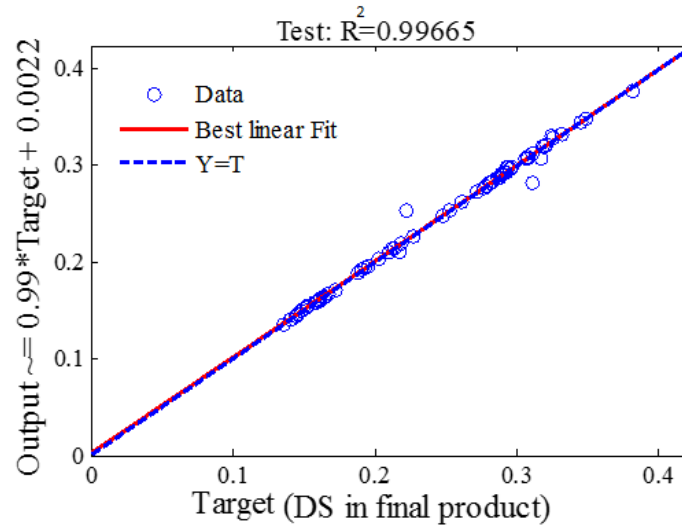
Data set	Number of data	R	MSE $\times 10^4$	MRE (%)
Train	322	0,9689	2/568	9/460
Test	69	0,99665	0/3057	0/7886
Validation	69	0,99632	0/2899	1/0386
All data	460	0,97727	1/8889	1/1207



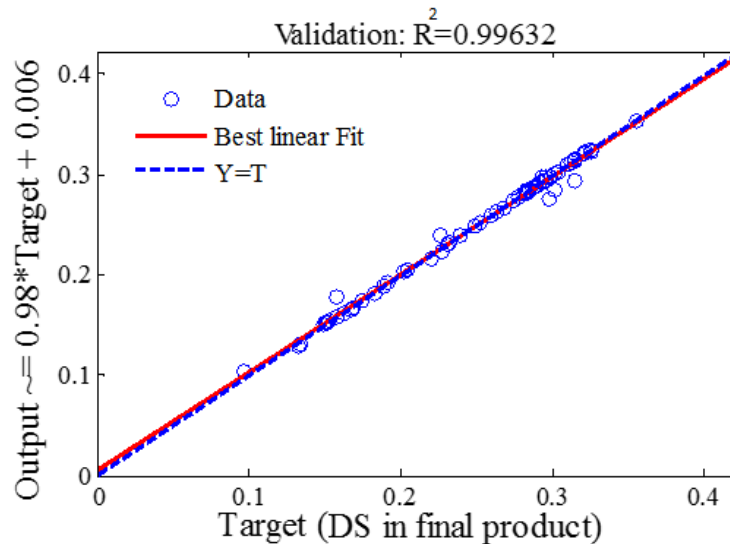
شکل 9- نمودار پراکندگی از مقایسه بین کل داده‌های ورودی و خروجی شبکه عصبی



شکل 10- نمودار پراکندگی از مقایسه بین داده‌های ورودی و خروجی در آموزش شبکه عصبی



شکل 11- نمودار پراکندگی از مقایسه بین داده‌های ورودی و خروجی در آزمون شبکه عصبی



شکل 12- نمودار پراکندگی از مقایسه بین داده‌های ورودی و خروجی در ارزیابی شبکه عصبی

### نتایج حاصل از بهینه‌سازی با الگوریتم ژنتیک

اثر پارامترهای مؤثر بر فرایند توسط نرم‌افزار Petro-SIM بررسی و تا حدودی دامنه پارامترهای بهینه برای فرآیند مشخص شد. در بررسی اثر هر پارامتر سایر پارامترها ثابت نگه داشته شده و با توجه به اینکه مقدار بهینه پارامترها به یکدیگر بستگی دارد، امکان یافتن پارامترهای بهینه با این شرایط امکان‌پذیر نبوده است؛ بنابراین برای اینکه اثر همه پارامترها هم‌زمان بررسی شود از الگوریتم بهینه‌سازی ژنتیک کمک گرفته شد تا شرایط بهینه فرآیند مشخص شود.

پارامترهای الگوریتم ژنتیک برای بهینه‌سازی این فرآیند به این صورت تعریف شد: میزان دی‌سولفید تولید شده (DS) در محصول نهایی به‌عنوان تابع هدف<sup>6</sup> جهت بهینه شدن در نظر گرفته شد که مقدار آن توسط مدل شبکه عصبی با توجه به پارامترهای ورودی محاسبه گردید. تعداد اعضای جمعیت اولیه<sup>7</sup> 500 کروموزوم یا داده بوده که در نسل اول به‌صورت تصادفی تولید شده‌اند و تعداد کل نسل‌ها<sup>8</sup> برای رسیدن به مقدار بهینه برابر 60 نسل است.

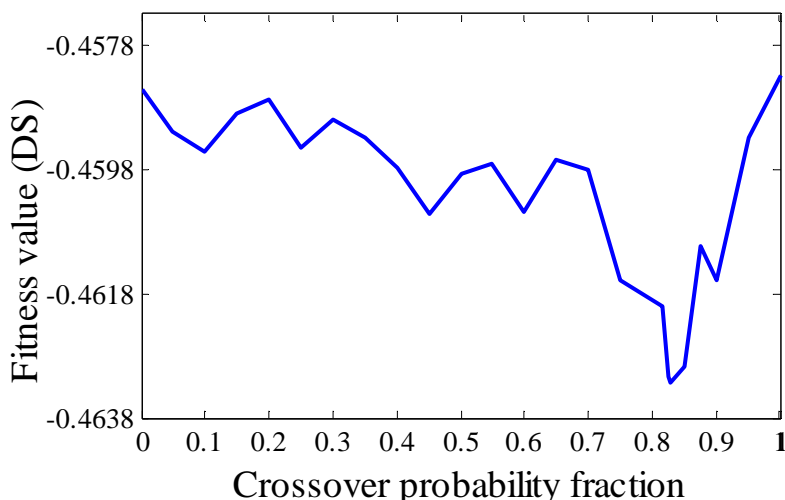
تغییرات مقدار تابع هدف نسبت به کسرهای مختلف احتمال ترکیب ترسیم شد (شکل 13) و مشخص شد که عملگر ترکیب<sup>9</sup> با کسر احتمال 0/83 و به‌صورت تک نقطه‌ای بهترین پاسخ را می‌دهد. به این صورت که با احتمال کم‌تر از 0/83 کروموزوم انتخاب و یک نقطه تصادفی با توزیع یکنواخت در طول رشته یا کروموزوم برگزیده شده و رشته‌های اولیه در این نقطه به دو بخش تقسیم می‌شوند. هر رشته جدید با انتخاب تکه اول از یکی از رشته‌های اولیه و تکه دوم از رشته دیگر به‌وجود می‌آید [16].

<sup>6</sup> Fitness value

<sup>7</sup> Initial Population

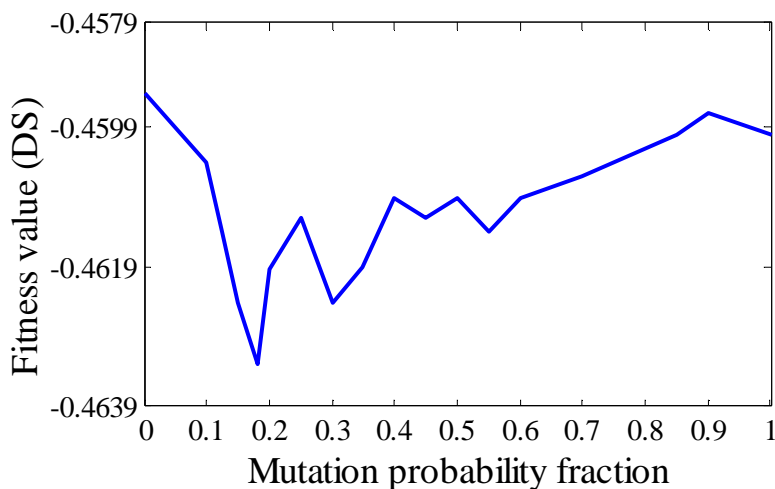
<sup>8</sup> Generation

<sup>9</sup> Crossover



شکل 13- نتایج حاصل از آنالیز حساسیت کسر احتمال ترکیب

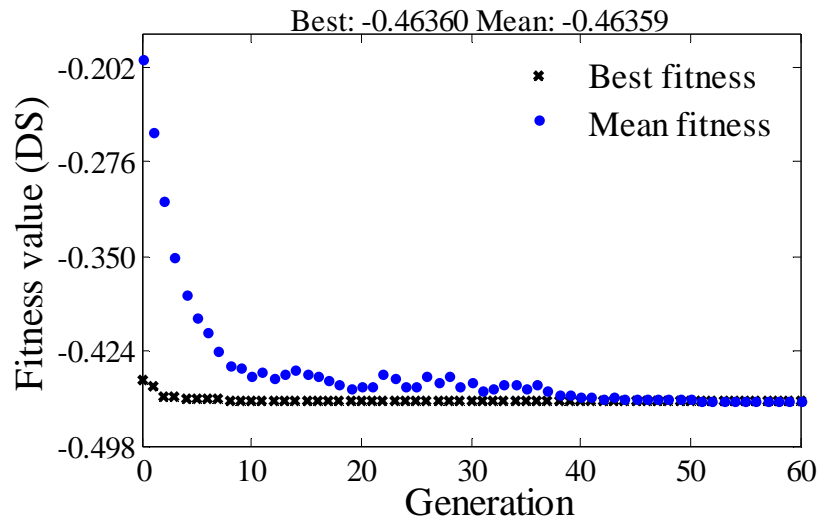
با توجه به شکل 14 که تغییرات مقدار تابع هدف را نسبت به کسرهای مختلف احتمال جهش نشان می‌دهد، عملگر جهش<sup>10</sup> با کسر احتمال 0/18 به‌عنوان بهترین پاسخ انتخاب شده و به‌صورت یکنواخت انجام می‌گیرد به‌طوری که با احتمال کم‌تر از 0/18، کروموزوم انتخاب و با استفاده از یک توزیع یکنواخت، یک بیت از یک رشته به‌صورت تصادفی برگزیده شده و مقدار آن تغییر می‌کند.



شکل 14- نتایج حاصل از آنالیز حساسیت کسر احتمال جهش

شرط توقف الگوریتم، مربوط به تعداد نسل‌هایی است که در آن تابع هدف به مقداری ثابت رسیده است و آن را به‌عنوان بهترین پاسخ، در نظر می‌گیرد [16] لذا با توجه به شکل 15 که روند رسیدن به مقدار بهینه تابع هدف (میزان DS در محصول نهایی) را توسط الگوریتم ژنتیک نشان می‌دهد، 50 نسل به‌عنوان بهترین پاسخ انتخاب شد.

<sup>10</sup> mutation



شکل 15- روند رسیدن به مقدار بهینه تابع هدف توسط الگوریتم ژنتیک

همچنین در شکل بهترین پاسخ در هر نسل در مقایسه با مقدار میانگین نشان داده شده است. با توجه به اینکه اساس کار الگوریتم ژنتیک کمینه‌سازی است و در این مطالعه هدف، رسیدن به مقدار حداکثری DS در محصول بوده است لذا علامت منفی در تابع هدف، این مشکل را مرتفع می‌سازد.

با توجه به موارد ذکر شده شرایط بهینه توسط الگوریتم ژنتیک برای پارامترهای موردنظر شامل دما، فشار عملیاتی، شدت جریان جرمی هوا و کسر جرمی سود در جریان برگشتی تعیین شده و در جدول 6 گزارش شده است. در این شرایط، مقدار بهینه بیشینه DS در محصول نهایی برابر مقدار 0/4636 کیلوگرم بر ساعت محاسبه شده است.

جدول 6- شرایط بهینه به دست آمده توسط الگوریتم ژنتیک برای فرآیند مراکز

پارامترها	مقدار پایینی	مقدار موجود اولیه	مقدار بالایی	مقدار نهایی
پارامترهای وابسته				
دمای فرآیند (F)	100/0	125	150/0	125
فشار خوراک ورودی (Psig)	75/0	80	100/0	75/6
شدت جریان هوای ورودی (kg/hr)	10/0	100	500/0	181
کسر وزنی سود جریان برگشتی	0/0	0/280	0/40	0/2800
پارامتر هدف				
شدت جریان جرمی دی‌سولفید (kg/hr)		0/4584		0/4636

### مقایسه نتایج حاصل از بهینه‌سازی در دو روش

در جدول 7 مقادیر بهینه به دست آمده برای دو روش فوق‌الذکر ارائه شده است. مطابق نتایج به دست آمده پارامتر هدف بر اساس الگوریتم ژنتیک مقدار بالاتری را به دست خواهد آورد که مطلوب‌تر است؛ اما می‌توان گفت که در بین پارامترهای وابسته فقط برای فشار و شدت جریان هوای ورودی تا حدودی اختلاف بین دو روش بهینه‌سازی وجود دارد.

### جدول 7- مقایسه نتایج بهینه‌سازی توسط الگوریتم ژنتیک و ابزار بهینه‌ساز نرم‌افزار Petro-SIM

پارامترها	مقادیر نهایی بر اساس ابزار بهینه‌ساز نرم‌افزار	مقادیر نهایی بر اساس الگوریتم ژنتیک
پارامترهای وابسته		
دمای فرآیند (F)	124/99	125
فشار خوراک ورودی (Psig)	79/5	75/6
شدت جریان هوای ورودی (kg/hr)	169/8	181
کسر وزنی سود جریان برگشتی	0/2801	0/2800
پارامتر هدف		
شدت جریان جرمی دی سولفید (kg/hr)	0/4533	0/4636

به این ترتیب با استفاده از نرم‌افزار کاربردی Petro-SIM و استفاده از الگوریتم ژنتیک و تحلیل شبکه عصبی شرایط بهینه عملیاتی برای واحد تصفیه با مراکز پالایشگاه نفت آبادان به دست آمد.

#### نتیجه‌گیری

در این پژوهش فرآیند تصفیه با مراکز برای کاهش محتوای مرکاپتان از نفت سفید پالایشگاه آبادان مورد بررسی قرار گرفت که نتایج آن به طور خلاصه آورده شده است:

1. بهینه‌سازی فرآیند برای چهار پارامتر مهم دما، فشار، شدت جریان هوای ورودی و غلظت محلول سود برگشتی با استفاده از بهینه‌ساز نرم‌افزار انجام شد. در این مرحله دما، فشار، شدت جریان هوا و کسر وزنی سود به ترتیب F 124/99، 79/5 Psig، 169/8 kg/hr و 0/2801 به دست آمد که غیر از شدت جریان هوای ورودی سایر پارامترها تفاوت چندانی با مقادیر عملیاتی موجود ندارند.

2. برای اطمینان از پارامترهای بهینه به دست آمده توسط بهینه‌ساز نرم‌افزار، به مدل‌سازی فرآیند با استفاده از شبکه عصبی پرداخته شد و سپس پارامترهای مهم توسط الگوریتم ژنتیک بهینه شدند. نتایج بهینه‌سازی با استفاده از الگوریتم ژنتیک به صورت F 125، 75/6 Psig، 181 kg/hr و 0/28 به ترتیب برای دما، فشار، شدت جریان هوا و کسر وزنی سود به دست آمد. متناظر با این نتایج و بر اساس مدل به دست آمده از شبکه عصبی، مقدار شدت جریان جرمی دی سولفید برابر 0/4636 kg/hr به دست آمد.

3. مقایسه نتایج بهینه‌سازی با نرم‌افزار Petro-SIM و الگوریتم ژنتیک نشان داد که دما در هر دو روش یکسان بوده که همان دمای عملیاتی است. فشار به دست آمده از الگوریتم ژنتیک و نرم‌افزار Petro-SIM نسبت به مقدار عملیاتی اندکی کم‌تر شده است. در مقابل شدت جریان هوای بهینه در حالت الگوریتم ژنتیک کمی بیش‌تر از مقدار بهینه به دست آمده از نرم‌افزار (169/8 kg/hr) بوده که نسبت به شرایط فرآیندی واحد (100 kg/hr) بیشتر شده است. همچنین کسر وزنی بهینه سود در هر دو روش تقریباً برابر 0/28 است و تفاوتی با مقادیر موجود در واحد ندارد.

4. با استفاده از نتایج به دست آمده از الگوریتم ژنتیک و وارد کردن این شرایط به نرم‌افزار و شبیه‌سازی آن مشخص شد که با بهینه‌سازی شرایط، مقدار غلظت جرمی مرکاپتان در محصول خروجی به کم‌تر از 1 ppm و درصد حذف مرکاپتان به 98/76٪ خواهد رسید که شرایط مطلوبی را ایجاد خواهد کرد.



## منابع

- [1] Fahim, M.A., Al-Sahhaf, T.A., Elkilani, A.S., *Fundamental of Petroleum refining*, Elsevier, Netherland, pp. 8-15 (2010).
- [2] Ganguly S. K., Das G., Kumar S., Sain B., Garg M. O Catalytic Oxidation of Mercaptans in Light Oil Sweetening: Kinetics and Reactor Design, *Chem. Eng. Transac.* 32, pp. 661-666 (2013).
- [3] Leung P.S.K., Betttrton E.A., Hoffman M.R., Kinetics and Mechanism of the Reduction of Cobalt (II) 4, 4', 4'', 4'''- etrasulfophthalocyanine by 2-Mercaptoethanol under Anoxic Conditions, *Journal of Physical Chemistry*, 93(1), pp. 430-451 (1989).
- [4] Sain B., Puri S.N., Das G., Balodi B.P., Kumar S., Kumar A., Kapoor V. K., Bhatia V. K., Rao T.S.R.P., Rai G.P., Process for the preparation of a novel catalyst useful for sweetening Of LPG and light petroleum distillates. US 6 pp. 619-740 (2004).
- [5] Lavric E. D., Cerato-Noyerie C., Mass transfer in gas-liquid flow in Corning® Advanced-Flow™ reactors, *Chemical Engineering Transactions*, 29, pp. 979-984 (2012).
- [6] Mazgarov, A.M., Vildanov, A.F., Sciamanna, S.F., Jossens, L.W., A Selective Treatment of Various Oils and Gas Condensates to Remove Light Mercaptans and Hydrogen Sulfide, the 15th World Petroleum Congress, Published by John Wiley & Sons, pp.59-62 (1998).
- [7] Van de Vusse J. G., Engineering aspects of oxidation of mercaptans in caustic solutions: Reaction kinetics and design of reactor, *Chem. Eng. Sci.* 8, pp. 72-80 (1958).
- [8] Bulsari, A.B., *Neural networks for chemical engineers*, Elsevier Science, finaland, pp.18-23 (1995).
- [9] Demuth, H., Beale, M., *Neural Network Toolbox User' s Guide*, the Math Works, Inc, pp.24-29 (2002).
- [10] <http://abadan-ref.ir/>
- [11] Basu B., Satapathy S., Bhatnagar A. K., Merox and related metal phthalocyanine catalyzed Oxidation processes, *Catal. Rev.-Sci. Eng.* 35, pp. 571-609 (1993).
- [12] Bungartz, H.J., Zimmer, S., Buchholz, M., Pfluger, D., *Modeling and Simulation, An Application-Oriented Introduction*, Springer, Germany, pp.264 - 278 (2014).
- [13] Sparks A.K., Oxidation of Mercaptans, *USP* 3, pp. 352- 777, (1967).
- [14] Shirai H., Tsuiki H., Masuda E., Koyama T., Hanabusa K., Kobayashi N., Functional Metallomacrocycles and Their Ppolymers. 25. Kinetics and Mechanism of the Biomimetic Oxidation of Thiol by Oxygen Catalyzed by Homogeneous Polycarboxy Phthalocyaninato Metals, *Journal of Physical Chemistry*, 95(1), pp. 417-419 (1991).
- [15] Leitao, A., Costa, C., Rodrigues, A., Studies on the impregnation step of the Merox process, *Chemical Engineering Science*, 42 (10), pp. 2291-2299, (1987).
- [16] Bryant, K., *Genetic Algorithm and the Traveling Salesman Problem*, Hervey Mudd colledge, pp. 13-16 (2000).
- [17] روئیائی، س. ج.، شفقت، الف، سلطانعلی، س.، طراحی و شبیه‌سازی فرآیندهای پالایشگاهی با Petro-SIM انتشارات کتاب پدیده، 1391.
- [18] قربانی، ی.، بررسی روش‌های حذف ترکیبات گوگرددار از نفت خام، فصلنامه تخصصی، علمی-ترویجی فرآیند نو، شماره 43، صفحات 19-39، 1392.