

Современные математические методы анализа спектральных данных для определения свойств и показателей качества продуктов нефтепереработки и нефтехимии

Балабин Роман Михайлович

магистрант

Российский государственный университет нефти и газа им. И.М. Губкина, Москва, Россия

E-mail: balabin.r@gubkin.ru

Современная тенденция к автоматизации технологических процессов в нефтепереработке и нефтехимии вызывает необходимость создания соответствующих методов получения информации о составе и свойствах потоков, поступающих на установку и покидающих её. Экспресс-методы становятся неотъемлемой частью нефтеперерабатывающих и нефтехимических производств.

Полная автоматизация процесса анализа может быть достигнута при внедрении методов непрерывного (on-line) контроля качества поступающего сырья и производимой продукции.

Главное требование к методике экспресс-определения показателей качества можно кратко сформулировать как многократное сокращение времени измерения при точности, сопоставимой с лабораторным (гостированным) методом. Выполнение этого условия позволяет надеяться на внедрение данной технологии в производственный процесс.

В настоящее время авторами проводятся исследования направленные на создание экспресс-методов анализа сырья и продуктов для процессов нефтепереработки и нефтехимии. В основу метода положены ключевые положения молекулярной спектроскопии (в ближней инфракрасной области) и многомерного анализа данных (хеометрики).

Спектральный анализ в ближнем инфракрасном (БИК) диапазоне отвечает основным требованиям, предъявляемым к экспресс-методу: время одного измерения не превышает нескольких минут, а информативность получаемых данных достаточно высока.

Анализ многомерных данных, поставляемых БИК-спектроскопией, осуществляется серией хеометрических алгоритмов. Этими алгоритмами являются: метод регрессии на главные компоненты (PCR), метод проекций на латентные структуры (PLS), нейронные сети (ANN) и др.

Данная работа посвящена сравнению эффективности различных методов многомерного анализа с целью выявления наиболее работоспособного для исследуемых систем: бензиновых и дизельных фракций газоконденсатного происхождения.

В работе проведено сравнение основных методов многомерного анализа, как то: множественная линейная регрессия (MLR); регрессия на главные компоненты (PCR); метод проекций на латентные структуры (PLS); нелинейные PLS методы – poly-PLS и spline-PLS; нейронные сети (ANN) и др.

Показаны преимущества и недостатки указанных методов для анализа спектральных данных в ближнем инфракрасном диапазоне (8000-14000 см⁻¹). Проведено сравнение сложности основных алгоритмов и вычислительной трудоемкости.

Показано превосходство нейросетевого подхода над остальными методами анализа.