

УДК 519.7

*Демидченко Егор Александрович,**аспирант кафедры «Вычислительные машины и комплексы»,  
ФГБОУ ВО «Ангарский государственный технический университет»,  
e-mail: demidchen-ko.ea@yandex.ru**Истомин Андрей Леонидович,**д.т.н., профессор, декан факультета управления и бизнеса  
ФГБОУ ВО «Ангарский государственный технический университет»,  
e-mail: a.l.istomin@mail.ru***ВИРТУАЛЬНЫЙ АНАЛИЗАТОР ОКТАНОВОГО ЧИСЛА ТЯЖЁЛОГО РИФОРМАТА***Demidchenko E.A., Istomin A.L.***VIRTUAL OCTANE ANALYZER OF HEAVY REFORMAT**

**Аннотация.** Методами многомерного статистического анализа проведена математическая обработка технологических данных для задачи создания виртуального анализатора качества октанового числа тяжёлого риформата. В качестве метода исследования был выбран метод множественной линейной регрессии.

**Ключевые слова:** множественная линейная регрессия, метод наименьших квадратов, виртуальный анализатор, метод Фишера.

**Abstract.** Mathematical processing of technological data has been carried out using methods of multidimensional statistical analysis for the task of creating a virtual octane quality analyzer for heavy reformat. The method of multiple linear regression was chosen as the research method.

**Keywords:** multiple linear regression, least squares method, virtual analyzer, Fisher's method.

Основной целью исследования является создание виртуального анализатора октанового числа тяжёлого риформата на основе легко измеряемых параметров, таких как температура и плотность. Виртуальный анализатор необходим для мониторинга качества продукта и оптимизации технологического процесса на предприятии.

Перед началом работы был сформирован большой исторический блок данных, содержащий в себе данные измерений фактической температуры тяжёлого риформата, его плотности и данных лабораторных анализов, включающих в себя анализы октанового числа по моторному и исследовательскому методам.

Для того, чтобы начать работу над математической моделью виртуального анализатора, необходимо вначале привести плотность тяжёлого риформата к температуре 20°C. Эта плотность будет использоваться в дальнейших вычислениях. Для этого использовалась специальная программа пересчёта плотности нефти и нефтепродуктов, разработанная для этой задачи. Её работа основывается на использовании поправочного температурного коэффициента (КТП) в формуле пересчёта плотности:

$$\rho_{20} = \rho_{\text{факт}} + \text{КТП} \cdot (t_{\text{факт}} - 20),$$

где  $\rho_{\text{факт}}$  – фактическая плотность тяжёлого риформата при фактической температуре;  $t_{\text{факт}}$  – фактическая температура.

КТП зависит от диапазона плотности конкретного нефтепродукта и приводится в ГОСТ 3900-2022, ГОСТ Р 57037-2016 и межгосударственном стандарте ГОСТ 8.602-2010. Если  $t_{\text{факт}} > 20^\circ\text{C}$ , то плотность при 20°C будет выше, а поправка положительной. Если  $t_{\text{факт}} < 20^\circ\text{C}$ , то плотность при 20°C будет ниже, а поправка отрицательной.

Все данные имеют единицы измерения приведённые к системе СИ, поэтому нормирование показателей не производилось.

Для дальнейшего анализа использовались такое программное обеспечение, как MathCad и MS Excel с пакетом математического анализа.

Работа математической модели виртуального анализатора основывается на уравнении множественной линейной регрессии (МЛР), которая имеет вид:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \dots + \beta_n X_n + \varepsilon,$$

где  $Y$  – зависимая переменная,  $\beta_0$  – свободный член (константа),  $\beta_1 - \beta_n$  – весовые коэффициенты регрессии, показывающие как изменится  $Y$  при изменении соответствующей

$X$  на единицу;  $X_1-X_m$  – независимые переменные, которые влияют на  $Y$ ;  $\varepsilon$  – ошибка модели, случайные вариации или нелинейные эффекты, которые не объясняются независимыми переменными.

Уравнение МЛР является наилучшим выбором для разработки математической модели виртуального анализатора качества октанового числа тяжёлого риформата. Оно позволяет легко интерпретировать влияние технологических параметров на конечный результат, обеспечивая достаточную точность при наличии линейных или квазилинейных зависимостей в производственных процессах. При этом расходуется минимальное количество вычислительных ресурсов, что критически важно для интеграции в систему технологического мониторинга предприятия, работающую в реальном времени.

Имея ряд экспериментальных данных, составим из них матрицы вида:

$$X = \begin{pmatrix} \beta_0 & X_{1,1} & X_{2,1} & \dots & X_{m,1} \\ \beta_0 & X_{1,2} & X_{2,2} & \dots & X_{m,2} \\ \beta_0 & X_{1,3} & X_{2,3} & \dots & X_{m,3} \\ \beta_0 & X_{1,4} & X_{2,4} & \dots & X_{m,4} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \beta_0 & X_{1,n} & X_{2,n} & \dots & X_{m,n} \end{pmatrix}, Y = \begin{pmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ Y_3 \\ Y_4 \\ \dots \\ Y_n \end{pmatrix},$$

где матрица  $X$  содержит в себе перечисление величин технологических параметров и свободных членов, а  $Y$  – результаты лабораторных исследований по одному из методов (моторному или исследовательскому).

Затем найдём вектор оценок искомых коэффициентов регрессии -  $\hat{\beta}$  в уравнении МЛР методом наименьших квадратов:

$$\min_{\beta} \sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2 = \min_{\beta} \sum_{i=1}^n (Y_i - (\beta_0 + \beta_1 X_{i1} + \beta_2 X_{i2} + \dots + \beta_k X_{ik}))^2.$$

Этот метод основан на минимизации суммы квадратов отклонений между наблюдаемыми данными и значениями, предсказанными моделью, что позволяет найти наилучшие аппроксимации для набора экспериментальных данных. Решение этой задачи минимизации приводит к матричной формуле нахождения вектора коэффициентов регрессии:

$$\beta = (X^T X)^{-1} X^T Y.$$

где  $T$  - знак транспонирования.

Найденный вектор оценок искомых коэффициентов регрессии имеет вид:

$$\beta = \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \\ \dots \\ \beta_n \end{pmatrix},$$

где  $\beta_0-\beta_n$  – количество переменных, включая свободный член.

Вычислив весовые коэффициенты регрессии, мы можем использовать их в формулах уравнений МЛР для прогнозирования октанового числа тяжёлого риформата как по исследовательскому (ИМ), так и по моторному (ММ) методам. В результате будут найдены искомые прогнозируемые значения октанового числа для одной и той же фракции – тяжёлого риформата. На рисунках 1 и 2 показаны графики сравнения фактических лабораторных значений октанового числа (соответственно для моторного и исследовательского методов) с результатами, рассчитанными виртуальным анализатором на основе описанной выше математической модели.

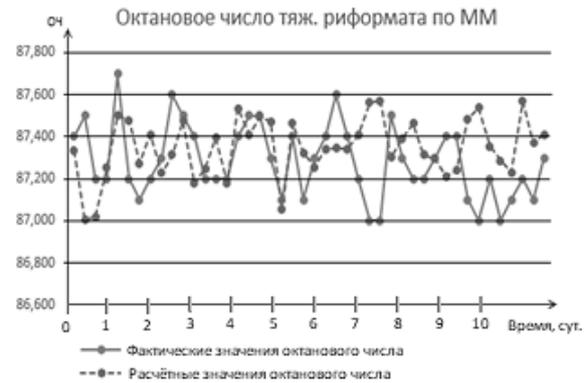


Рисунок 1 – График сравнения фактических значений из лаборатории по моторному методу с рассчитанными виртуальным анализатором.



Рисунок 2 – График сравнения фактических значений из лаборатории по исследовательскому методу с рассчитанными виртуальным анализатором.

Адекватность построенной математической модели проверялась по критерию Фишера (или F-тест). Ключевая идея состоит в сравнении - насколько хорошо модель описывает данные, с естественной, случайной изменчивостью самих экспериментальных данных. Формула расчёта критерия Фишера представлена в ниже:

$$F = \frac{S_{\text{ост}}^2}{S_{\text{воспр}}^2},$$

где  $S_{\text{ост}}^2$  - остаточная дисперсия,  $S_{\text{воспр}}^2$  - дисперсия воспроизводимости.

Дисперсия воспроизводимости отражает случайную ошибку эксперимента, то есть разброс опытных данных, полученных в одинаковых условиях (повторные измерения). Остаточная дисперсия же характеризует разницу между значениями, предсказанными моделью, и средними значениями экспериментальных данных. Она показывает, насколько систематически модель отклоняется от наблюдаемых результатов. Остаточная дисперсия вычисляется по формуле:

$$S_{\text{ост}}^2 = m \sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - \bar{y}_i)^2.$$

Если отношение  $S_{\text{ост}}^2$  меньше табличного  $F_p(f_1, f_2)$ , то уравнение адекватно. При

отсутствии параллельных опытов и дисперсии воспроизводимости можно оценить качество аппроксимации принятым уравнением, сравнив  $S_{\text{ост}}^2$  и дисперсию относительно среднего -  $S_y^2$ :

$$S_y^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2}{N - l}.$$

По критерию Фишера:

$$F = \frac{S_y^2}{S_{\text{воспр}}^2}.$$

В этом случае критерий Фишера показывает, во сколько раз уменьшается рассеяние относительно полученного уравнения регрессии по сравнению с рассеянием относительно среднего. Чем больше значение  $F$  превышает табличное  $F_p(f_1, f_2)$  для выбранного уровня значимости при числе степеней свободы  $f_1=N-l$  и  $f_2=N-l$ , тем эффективнее уравнение регрессии.

Таким образом, появилась возможность осуществить контроль качества октанового числа тяжелого риформата сразу в системе технологического мониторинга, не прибегая к лабораторным анализам, что имеет определённый технологический и экономический эффекты.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Ахметов С.А.** Технология глубокой переработки нефти и газа: учебное пособие для вузов. Уфа: Гилем, 2002. – 672 с.
2. **Кафаров В.В.** Методы кибернетики в химии и химической технологии. – Издательство «Химия», М., 1971. – 496 с.

3. **Кулаичев А.П.** Методы и средства комплексного анализа данных. - М.: ФОРУМ: ИНФРА-М, 2006. – 512 с.
4. **Табак Д., Куо Б.** Оптимальное управление и математическое программирование. Издательство «Наука», М., 1975. – 280 с.