

В.О. Кошевой, К.В. Вишневский, И.А. Пронченков,
Е.А. Чернышева (ФГАОУ ВО РГУ нефти и газа (НИУ) им. И.М. Губкина),
И.И. Салахов, А.В. Зурбашев (АО «ТАНЕКО»)

Сравнение предиктивных методов БИК-спектроскопии для анализа качества нефтепродуктов

Использование спектроскопии ближнего инфракрасного диапазона (БИК) и методов математического моделирования является актуальным способом определения и прогнозирования свойств нефтяных и углеводородных смесей различного состава. Для прогнозирования физико-химических свойств дизельных топлив построены регрессионная модель ПЛС (PLS) и искусственная нейронная сеть ИНС (ANN). Показана возможность использования ИНС для решения практических задач хеометрического анализа с использованием БИК-спектроскопии. Приведено сравнение моделей ПЛС и ИНС по параметрам эффективности предсказания.

Ключевые слова: БИК-спектроскопия, дизельные топлива, хеометрика, регрессионный анализ, метод-ПЛС (PLS), искусственные нейронные сети (ИНС, ANN).

Кошевой Виктор Олегович – старший инженер-технолог АО ИПТ «Оргнефтехимзаводы»,
Вишневский Кирилл Вячеславович – руководитель группы ООО "ОЗОН ТЕХНОЛОГИИ",
Пронченков Иван Александрович – инженер,
Чернышева Елена Александровна – канд. хим. наук, проф., зам. зав. кафедрой ФГАОУ ВО РГУ нефти и газа (НИУ) им. И.М. Губкина,
Салахов Илшат Илгизович – канд. техн. наук, ген. директор,
Зурбашев Алексей Владимирович – зам. ген. директора по технической поддержке и качеству АО "ТАНЕКО".

Список литературы

1. D. Wu, X. Chen, P. Shi, S. Wang, F. Feng, and Y. He. Determination of α -linolenic acid and linoleic acid in edible oils using near-infrared spectroscopy improved by wavelet transform and uninformative variable elimination, *Analytica Chimica Acta*, №2, 2009.
2. D. Wu, Y. He, P. Nie, F. Cao and Y. Bao. Hybrid variable selection invisible and near-infrared spectral analysis for non-invasive quality determination of grape juice, *Analytica Chimica Acta*, 2010, №2.
3. R. Balabin, R. Safieva and E. Lomakina. Gasoline classification using near infrared (NIR) spectroscopy data: Comparison of multivariate techniques, *Analytica Chimica Acta*, 2010, №1.
4. P. Baptist, P. Felizardo, J.C. Menezes, M. J.N. Correia. Multivariate near infrared spectroscopy models for predicting the iodine value, CFPP, kinematic viscosity at 40 °C and density at 15 °C of biodiesel, *Talanta*, 2008.
5. D. Ozdemir. Near Infrared Spectroscopic Determination of Diesel Fuel Parameters Using Genetic Multivariate Calibration", *Petroleum Science and Technology*, 2008, №1.
6. H. Ali Gamal Al-Kaf. Predictive Model and Near Infrared Spectroscopy in Predicting the Diesel Fuel Properties, Master's thesis, Universiti Tun Hussein Onn Malaysia, 2018.
7. Pentland A. and Moghaddam B. and Starner T. Viewbased Modular Eigenspaces for Face Recognition, *Proceedings of the IEEE Conference on Computer Vision and Pattern recognition*, 1994, №1.
8. G. Xavier, A. Bordes, Y. Bengio. Deep sparse rectifier neural networks, *Proceedings of the Fourteenth International Conference on Artificial Intelligence and Statistics* 2011.
9. D.P. Kingma, J. Lei Ba. Adam: A method for stochastic optimization, *International Conference on Learning Representation*, 2014.
10. Библиотека для машинного обучения [Электронный ресурс]. URL: <https://www.tensorflow.org/> (дата обращения 20.11.2019).

Koshevoy V.O., Vishnevsky K.V., Pronchenkov I.A., Chwernyshova E.A., Salakhov I.I., Zurbashev A.V.
Comparison of predictive NIR spectroscopy techniques for oil product quality analysis

Application of NIR spectroscopy coupled with mathematical modeling is relevant for evaluating and predicting the properties of hydrocarbon petroleum compounds with various compositions. A partial least square (PLS) regression and an ANN model were built for predicting physicochemical properties of Diesel fuels. The models are compared with respect to prediction effectiveness and development potential. ANN applicability for NIRS-based chemometric analysis is shown.

Keywords: NIR spectroscopy, Diesel fuels, chemometrics, regression analysis, PLS regression techniques, artificial neuron networks.