

Многомерный статистический контроль параметров качества продуктов нефтепереработки в режиме реального времени методом ближней инфракрасной спектроскопии

*Л.А. Михалыцын, И.В. Иванова
(ООО «Брукер»)*

Себестоимость выпускаемых бензина и дизеля зависит от эффективности производства, что обуславливает постоянно возрастающую потребность в надежных средствах контроля продукта на всех стадиях нефтепереработки. Оценка качества нефтепродуктов на нефтеперерабатывающих заводах осуществляется стандартными лабораторными методами по показателям физико-химических свойств, нормируемых соответствующими документами (ГОСТ, ТУ и др.). Современный подход к моделированию многомерных процессов, основанный на применении проекционных методов анализа, обеспечивает наблюдение за производственными процессами в режиме реального времени и является более эффективной альтернативой классическому статистическому контролю процессов, позволяя отслеживать не только изменения определенных параметров, но и их взаимосвязь.

Целью работы является создание хемометрических моделей количественного анализа на основе большого массива спектральных и референтных данных для внедрения в систему мониторинга в режиме реального времени на основе спектрального метода в ближней инфракрасной области. Методом БИК-спектроскопии авторами был проведен анализ товарных бензинов и других нефтепродуктов для симулянтного контроля этих параметров в процессах нефтепереработки. Сегодня при разработке калибровочных моделей для определения показателей качества на основании данных БИК-спектроскопии наибольшее распространение получили методы факторного анализа, главные из которых PCR (Principal Component Regression) и PLS (Projection of Latent Structures).

Основной задачей работы является построение калибровочных моделей на основе многомерного хемометрического анализа по семи входящим потокам (12 параметров в каждом потоке – октановое число, фракционный состав, содержание бензола и др.) и трем потокам готовой продукции (10 параметров в каждом потоке) станции смешения бензинов. Проведен подбор условий регистрации спектров. Создан и оптимизирован метод количественного анализа QUANT II. Внесены спектральная информация и референтные значения в QUANT II. Подобраны спектральный диапазон и варианты предварительной обработки. Оптимизированы методы и построены калибровочные модели, проведены внутренняя и внешняя валидация метода количественного анализа, опробована его на независимых образцах. Оценены погрешность и воспроизводимость метода.

При приготовлении качественных бензинов очень важно своевременно располагать точной информацией о показателях качества входных и результирующих потоков, характеризующих эксплуатационные свойства товарных бензинов. Сокращение превышения ОЧ над нормируемым (минимизация продукции quality give away), экономное расходование дорогостоящих присадок (МТБЭ, ТЭС), рациональное использование других компонентов товарных бензинов при их приготовлении, эффективное ведение процесса дают экономии в десятки миллионов долларов в год.

Результаты проведенных измерений и исследований являются основой для практического использования метода на одном из нефтеперерабатывающих заводов «Роснефти».