

МЕТОДИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ПОСТРОЕНИЯ И ПРИМЕНЕНИЯ КАЛИБРОВОЧНЫХ МОДЕЛЕЙ ПОТОЧНОГО АНАЛИЗАТОРА КАЧЕСТВА НА СТАНЦИИ КОМПАУНДИРОВАНИЯ БЕНЗИНОВ

А.Ш. Зиануров, А.Е. Примак, А.Г. Шумихин

Алмаз Шамильевич Зиануров (ORCID 0000-0002-3776-8393) *

ООО "Промышленная кибернетика", ул. Стахановская, 54, лит. П, оф. 328, Пермь, Российская Федерация, 614066

Кафедра Оборудование и автоматизация химических производств, Пермский национальный исследовательский политехнический университет, ул. Профессора Поздеева, 9, корп. Б, Пермь, Российская Федерация, 614013

E-mail:almaz.zianurov@inducyber.com*

Александр Евгеньевич Примак, Александр Георгиевич Шумихин

Кафедра оборудования и автоматизации химических производств, Пермский национальный исследовательский политехнический университет, ул. Профессора Поздеева, 9, корп. Б, Пермь, Российская Федерация, 614013

E-mail: aepriimak@yandex.ru, shumichin@gmail.com

В статье рассмотрены методические основы построения калибровочных моделей связи ИК спектров поточного анализатора и показателей качества бензинов. Для решения задачи разработки моделей был применен хемометрический подход в сочетании с методом главных компонент, а также нейросетевая технология. Приведены результаты анализа разработанных моделей связи показателей качества бензинов марки Премиум-95 и Регуляр-92 по исследовательскому и моторному методам и их компонентов по результатам ИК-спектрофотометрии в сравнении с данными лабораторного анализа. ИК спектры поглощения различных видов автомобильного бензина изменяются в пределах длин волн от 800 до 1700 нм. Предыдущие исследования позволили установить, что диапазон длин волн с наилучшей информативностью для определения значений показателей качества бензинов находится между значениями 1100 и 1650 нм. Обработка данных по методу главных компонент произведена с использованием графиков счетов и влияний. График счетов позволяет оценить группировку образцов по своим свойствам, а график влияния оценивает степень влияния и полноту описания каждого образца полученной моделью. Данные по указанным выше бензинам были включены в одну выборку вследствие близости компонентного состава. Анализ графика влияний показал, что необходимое и достаточное количество главных компонент равно трем для модели по моторному методу и четырем для модели по исследовательскому методу. В статье для демонстрации результатов апробации моделей приводятся данные для бензина марки Премиум-95. Объем обучающей выборки со спектрами варьировался от 153 до 450 спектров. Оценка точности разработанных моделей производилась по таким показателям (метрикам) как средняя ошибка прогноза, максимальная ошибка прогноза, коэффициент корреляции. Результаты разработки и исследования калибровочных моделей для оценки показателей качества бензинов и их компонентов по данным измерений поточного анализатора показали также, что приемлемые по точности прогнозирования модели строятся с не меньшими эффективностью и точностью с применением нейросетевого подхода, в сравнении с моделями на основе применяемого в настоящее время на одном из производств бензинов метода главных компонент. Модели на основе нейронных сетей являются гибкими, позволяют косвенно учесть в моделях влияющие на инфракрасные спектры величины. В частности, по имеющимся экспериментальным данным приемлемые нейросетевые модели были получены для тех показателей качества, для которых метод главных компонент оказался неэффективным.

Ключевые слова: компаундирование бензинов, качество, поточный анализатор, ИК спектр, калибровочная модель анализатора, нейронные сети

METHODOLOGICAL FOUNDATIONS FOR THE CONSTRUCTION AND USE OF CALIBRATION MODELS OF A FLOW QUALITY ANALYZER AT A GASOLINE COMPOUNDING STATION

A.Sh. Zianurov, A.E. Primak, A.G. Shumikhin

Almaz Sh. Zianurov (ORCID 0000-0002-3776-8393) *

«Industrial cybernetics» LLC, Stakhanovskaya st., 54, lit.P, of. 328, Perm, 614066, Russia

Department of Equipment and Automation of Chemical Production, Perm National Research Polytechnic University, Professor Pozdeyev st., 9, bld. B, Perm, 614013, Russia

E-mail:almaz.zianurov@inducyber.com*

Alexander E. Primak, Alexander G. Shumikhin

Department of Equipment and Automation of Chemical Production, Perm National Research Polytechnic University, Professor Pozdeyev st., 9, bld. B, Perm, 614013, Russia

E-mail: aepriimak@yandex.ru, shumichin@gmail.com

This article presents the methodological foundations for constructing calibration models of the connection of the IR spectra of a flow analyzer and gasoline quality indicators. To solve the problem of developing models, a chemometric approach was used in combination with the principal component method, as well as neural network technology. The results of the analysis of the developed models for the relationship between the quality indicators for Premium-95 and Regular-92 gasoline according to the research and motor methods and their components based on the results of IR spectrophotometry are presented in comparison with laboratory analysis data. The IR absorption spectra of various types of automobile gasoline vary within the wavelength range from 800 to 1700 nm. Previous studies have established that the wavelength range with the best information content for determining the values of the quality indicators for gasoline is between 1100 and 1650 nm. Data processing by the principal component method is performed using graphs of accounts and influences. The invoice graph allows you to evaluate the grouping of samples by their properties, and the influence graph evaluates the degree of influence and completeness of the description of each sample by the resulting model. The data on the above-mentioned gasoline were included in one sample due to the proximity of the component composition. The analysis of the influence graph showed that the necessary and enough main components is equal to three for the model according to the motor method and four for the model according to the research method. The article provides data for Premium-95 gasoline to demonstrate the results of model testing. The volume of the training sample with spectra varied from 153 to 450 spectra. The accuracy of the developed models was evaluated using such indicators (metrics) as the average forecast error, the maximum forecast error, and the correlation coefficient. The results of the development and research of calibration models for assessing the quality indicators of gasoline and their components according to the measurements of the flow analyzer also showed that models acceptable in terms of forecasting accuracy are built with no less efficiency and accuracy using a neural network approach, in comparison with models based on the method of main components currently used in one of the gasoline production facilities. Neural network-based models are flexible and allow for indirect consideration of the values affecting the infrared spectra in the models. According to the available experimental data, acceptable neural network models were obtained for those quality indicators for which the principal component method proved ineffective.

Key words: compounding of gasoline, quality, flow analyzer, IR spectrum, calibration model of the flow analyzer, neural networks

Для цитирования:

Зиануров А.Ш., Примак А.Е., Шумихин А.Г. Методические основы построения и применения калибровочных моделей поточного анализатора качества на станции компаундирования бензинов. *Изв. вузов. Химия и хим. технология*. 2024. Т. 67. Вып. 9. С. 118–125. DOI: 10.6060/ivkkt.20246709.6952.

For citation:

Zianurov A.Sh., Primak A.E., Shumikhin A.G. Methodological foundations for the construction and use of calibration models of a flow quality analyzer at a gasoline compounding station. *ChemChemTech [Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.]*. 2024. V. 67. N 9. P. 118–125. DOI: 10.6060/ivkkt.20246709.6952.

ВВЕДЕНИЕ

Значительный вклад в решение важной для нефтеперерабатывающего предприятия проблемы выпуска на станции смешения бензинов товарной продукции со стабильными значениями показателей качества вносит их непрерывный инструментальный контроль. Для этого используются поточные анализаторы, обычно инфракрасные (ИК) спектрометры [1].

На станции смешения бензинов установлен поточный инфракрасный (ИК) спектрофотометр среднего диапазона волн (NIR), обеспечивающий непрерывный контроль показателей качества товарных продуктов и компонентов смешения. Анализатор непрерывно получает спектр поглощения ИК-излучения проходящей через него смеси. Для получения значений показателей качества используются калибровочные (градуировочные) модели, разрабатываемые в лабораторных условиях путем систематической обработки измерительной информации соответствующими программными средствами с последующей инсталляцией моделей в программное обеспечение (ПО) анализатора [2-4].

Вопросы оценки точности калибровочных моделей поточного анализатора и оперативной перенастройки данных моделей являются актуальными. Основным недостатком ИК-спектрометров является то, что они нуждаются в периодической калибровке. Под калибровкой подразумевается обновление калибровочных моделей, т.е. построение математической зависимости между измеряемыми спектрами и характеристиками бензинов. Этот процесс также называют построением хемометрической модели [5-7].

Задача исследований состоит в разработке и внедрении методов построения калибровочных моделей ИК-спектрофотометра связи «данные о спектрах поглощения – значения показателей качества», основанных на современных технологиях моделирования и применении существующих на станции смешения бензинов лабораторных методик и информационно-программных средств. Выполнение разработки направленно на повышение точности непрерывного определения значений по-

казателей качества товарных бензинов и компонентов смешения ИК-спектрофотометром путем улучшения метрологических характеристик (прогнозирующей способности) калибровочных моделей, инсталлируемых в ПО анализатора [8-10].

Обеспечение высокого уровня точности непрерывного измерения показателей качества позволяет разработать эффективную систему управления компаундированием товарных бензинов [11].

В данной работе представлены материалы, посвященные теоретическим основам построения математических моделей анализатора на основе ближней ИК-спектроскопии. Приведена оценка точности разработанных моделей связи показателей качества бензинов и их компонентов по результатам ИК-спектрофотометрии в сравнении с данными лабораторного анализа (ЛА).

При построении моделей показателей качества были использованы метод главных компонент (МГК) и метод, основанный на нейросетевых (НС) моделях (NET).

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Для определения значений показателей качества на станции компаундирования по данным ИК спектра, получаемого поточным NIR анализатором, были применены хемометрический подход, в основе которого лежит метод главных компонент (МГК), а также нейросетевая технология (NET).

Метод главных компонент

МГК позволяет разделить исходный набор данных X на две составляющие, а именно на действительную структуру и шум. Под шумом понимается информация, которая не оказывает влияния на интересующее нас значение показателя качества.

Вид МГК-модели выглядит в общем случае следующим образом:

$$X = TP^T + E \quad (1)$$

где T – матрица счетов; P^T – матрица нагрузок (транспонированная); E – матрица ошибок (шум).

Согласно [12-14] алгоритм МГК включает следующие шаги:

1) центрирование. Сначала исходные данные центрируются относительно средних по столбцам матрицы X ;

2) пошаговое вычисление главных компонент:

$$X = t_1 p_1^T + t_2 p_2^T + \dots + t_i p_i^T + E, i = 1 \dots A, \quad (2)$$

где t_1, t_2, \dots, t_i – вектор счетов для $ГК_1, ГК_2, \dots, ГК_i$ размерности $n \times 1$ (счеты – координаты образцов в пространстве главных компонент); $p_1^T, p_2^T, \dots, p_i^T$ – соответствующий вектор нагрузок (транспонированный) для $ГК_1, ГК_2, \dots, ГК_i$.

Поскольку размерность p_i равна $p \times 1$, то размерность p_i^T будет $1 \times p$. Результатом перемножения t_i и p_i^T будет матрица размерности $n \times p$, как и у матриц X и E ;

3) с использованием матрицы X вычисляются t_1 и p_1 ;

4) из матрицы X вычитается вклад первой компоненты ($ГК_1$):

$$E_1 = X - t_1 p_1^T \quad (3)$$

На этом шаге $X = t_1 p_1^T + E_1$

5) с использованием матрицы E_1 вычисляются t_2 и p_2 ;

6) из матрицы X вычитается вклад, вносимый второй компонентой, т.е. $ГК_2$:

$$E_2 = E_1 - t_2 p_2^T \quad (4)$$

На этом шаге $X = t_1 p_1^T + t_2 p_2^T + E_2$

7) с использованием матрицы E_2 вычисляются t_3 и p_3 ;

8) вычисления продолжают до тех пор, пока не будет определено A главных компонент. Причем должно выполняться условие: $A \ll p$ (A – число главных компонент, p – число входных переменных).

Метод нейросетевой технологии

Для нейросетевых калибровочных моделей поточного анализатора качества бензинов и их компонентов была подобрана многослойная нейронная сеть прямого распространения с одним промежуточным слоем (скрытым), содержащим десять нейронов и одним выходом, соответствующим показателю качества. На входы сети подаются с ИК-спектрофотометра значения данных о спектрах [15-18].

Сеть обучается с учителем – выборкой данных о значениях измерений спектров и соответствующих измерениям значениях показателя качества. Критерием окончания обучения является стабилизация на установившемся значении функции от ошибки обучения [19, 20].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

При выполнении исследований были разработаны калибровочные модели для бензинов Премиум-95 и Регуляр-92, связывающие данные об их

ИК спектрах со следующими показателями качества:

- октановое число по моторному методу;
- октановое число по исследовательскому методу;
- объем выкипания при 70 °С;
- объем выкипания при 100 °С;
- объем выкипания при 150 °С;
- объем выкипания при 180 °С;
- давление насыщенных паров;
- плотность;
- объемная доля бензола;
- объемная доля ароматических углеводородов.

Методы, используемые при разработке калибровочных моделей для перечисленных показателей, идентичны и проиллюстрированы на примере определения показателей качества октанового числа (ОЧ) по моторному (англ. Motor Octane Number - MON) и исследовательскому методам (англ. Research Octane Number - RON).

Формирование обучающей выборки

Для обучения моделей была создана выборка, содержащая спектры бензинов Премиум-95, Регуляр-92. Указанные бензины были включены в одну выборку вследствие близости компонентного состава. Выборке соответствует график, представленный на рис. 1.

Данные, представленные на рис. 1, обработаны методом корректировки графиков относительно диапазона 1100-1650 нм. Для обработки использовалась программа Model Studio.

Из обучающей выборки были удалены все образцы, не являющиеся типичными для данной выборки. Выделение нетипичных образцов производилось путем совместного анализа графика счетов и графика влияний, полученных в результате МГК-декомпозиции, входящих в матрицы данных [21-25].

График счетов позволяет оценить группировку образцов по своим свойствам. Если образец далеко отстоит от ближайшей группы, то следует проверить, не является ли он случайным выбросом.

График влияний позволяет оценить степень влияния и полноту описания каждого образца полученной моделью. Вдоль оси абсцисс откладывается вклад этого образца в общую модель. Вдоль оси ординат откладываются значения остаточной дисперсии и чем больше эти значения, тем хуже данный образец описывается моделью. Таким образом, образцы, расположенные в верхнем правом углу графика влияний, можно сразу исключать из обучающей выборки, поскольку они плохо описываются моделью и оказывают на нее значительное влияние.

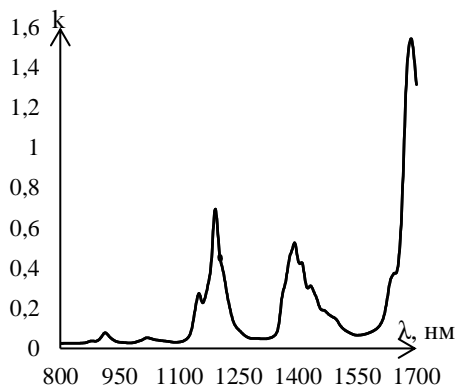


Рис. 1. Спектр поглощения автомобильных бензинов в диапазоне волн 800-1700 нм: λ - длина волны спектра, k - степень поглощения

Fig. 1. Absorption spectra of motor gasolines in the wavelength range of 800-1700 nm: λ - wavelength of the spectrum, k - degree of absorption

Таблица 1

Изменение остаточной дисперсии для модели MON
Table 1. Change in residual variance for the MON model

| № главной компоненты | Значение остаточной дисперсии |
|----------------------|-------------------------------|
| 0 | 0,522 |
| 1 | 0,255 |
| 2 | 0,089 |
| 3 | 0,08 |

Таблица 2

Изменение остаточной дисперсии для модели RON
Table 2. Change in residual variance for the RON model

| № главной компоненты | Значение остаточной дисперсии |
|----------------------|-------------------------------|
| 0 | 2,070 |
| 1 | 0,776 |
| 2 | 0,281 |
| 3 | 0,154 |
| 4 | 0,118 |

Анализ графика влияний показал, что необходимое и достаточное количество главных компонент (ГК) равно трем для модели MON и четырем для модели RON.

Значение остаточной дисперсии для модели MON на 3-й главной компоненте составляет 0,08 (см. табл. 1). Значение остаточной дисперсии для модели RON на 4-й главной компоненте составляет 0,118 (см. табл. 2).

АПРОБАЦИЯ МОДЕЛЕЙ НА ТЕСТОВОЙ ВЫБОРКЕ

Апробация моделей рассматривается на примере бензина марки Премиум-95.

Октановое число по моторному методу (MON)

Результаты обучения модели по МГК для модели MON следующие:

- Объем обучающей выборки: 153;
- Корреляция между предсказанными и измеренными значениями: 0,918;
- Среднеквадратичная ошибка предсказания: 0,28;
- Назначение: бензины марки Премиум 95, Регуляр 92.

На рис. 2 представлены графики, отражающие результаты тестирования модели для бензина Премиум-95 на тестовых выборках с данными, не вошедшими в обучающую выборку.

Результаты тестирования моделей для бензинов Премиум-95 и Регуляр-92 приведены в табл. 3.

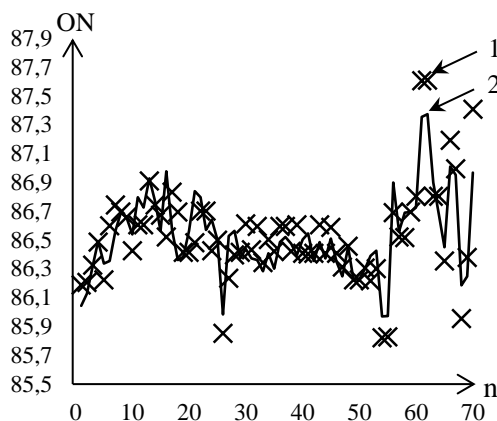


Рис. 2. Графики результатов тестирования модели MON на спектрах бензина марки Премиум-95 по методу МГК: 1 – значения ЛА, 2 – значения по модели, n - номер элемента в выборке, ON - значение показателя качества

Fig. 2. The result of testing the MON model on the spectra of Premium-95 gasoline using the PCA method: 1 – LA values, 2 – values by model, n - the number of the item in the selection, ON - The value of the quality indicator

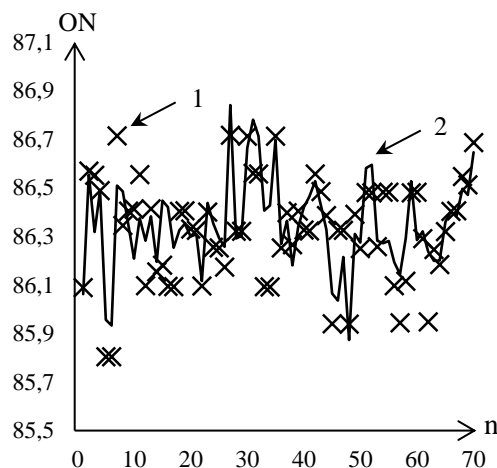


Рис. 3. Графики результатов тестирования модели MON на спектрах бензина марки Премиум-95 по методу NET: 1 – значения ЛА, 2 – значения по модели, n - номер элемента в выборке, ON - значение показателя качества

Fig. 3. The result of testing the MON model on the spectra of Premium-95 gasoline using the NET method: 1 – LA values, 2 – values by model, n - the number of the item in the selection, ON - The value of the quality indicator

Результаты обучения нейросетевой модели (NET) для бензина Премиум-95 следующие:

- Объем обучающей выборки: 450;
- Число входных переменных: 293;
- Число нейронов скрытого слоя: 4.

На рис. 3 представлены графики, отражающие результаты тестирования моделей на тестовых выборках с данными, не вошедшими в обучающую выборку для бензина Премиум-95, полученной NET-моделированием. Результаты тестирования модели представлены в табл. 3.

Результаты тестирования для ОЧ по моторному методу показывают, что для моделей, полученных NET-моделированием, в сравнении с МГК моделями характерно снижение средней ошибки для бензина Регуляр-92 с 0,31 до 0,23, для бензина

Премиум-95 с 0,25 до 0,19; снижение максимальной ошибки для бензина Регуляр-92 с 3,08 до 2,06, для бензина Премиум-95 с 2,32 до 1,00; увеличение коэффициента корреляции для бензина Регуляр-92 с 0,69 до 0,71, для бензина Премиум-95 с 0,66 до 0,73.

Октановое число по исследовательскому методу (RON)

Результаты обучения модели по МГК для модели RON представлены ниже:

- Объем обучающей выборки: 161;
- Корреляция между предсказанными и измеренными значениями: 0,97;
- Среднеквадратичная ошибка предсказания: 0,34;
- Назначение: Премиум 95, Регуляр 92.

Таблица 3

Результаты тестирования моделей по МГК и NET для ОЧ по моторному методу
Table 3. Results of testing of models by PCA and NET for MON

| Метрики | МГК | | NET | |
|------------------------|------------|------------|------------|------------|
| | Регуляр 92 | Премиум-95 | Регуляр-92 | Премиум-95 |
| Ср. ошибка прогноза | 0,31 | 0,25 | 0,23 | 0,19 |
| Макс.ошибка прогноза | 3,08 | 2,32 | 2,06 | 1,00 |
| Коэффициент корреляции | 0,69 | 0,66 | 0,71 | 0,73 |

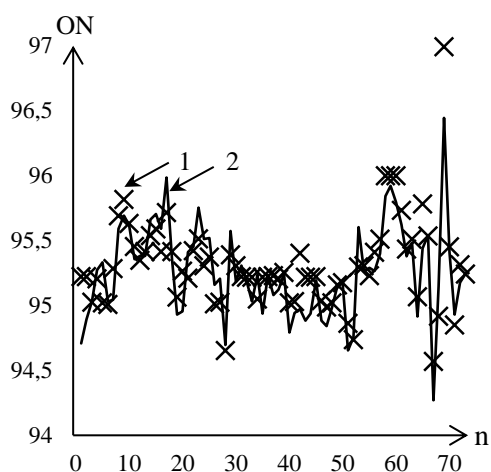


Рис. 4. Графики результатов тестирования модели RON на спектрах бензина марки Премиум-95 по методу МГК: 1 – значения ЛА, 2 – значения по модели, n – номер элемента в выборке, ON – значение показателя качества

Fig. 4. The result of testing the RON model on the spectra of Premium-95 gasoline using the PCA method: 1 – LA values, 2 – values by model, n – the number of the item in the selection, ON – The value of the quality indicator

На рис. 4 представлены графики, отражающие результаты тестирования моделей для бензина Премиум-95, полученных по МГК. Результаты тестирования моделей представлены в табл. 4.

Результаты обучения нейросетевой модели для бензинов Регуляр-92 и Премиум-95 представлены ниже:

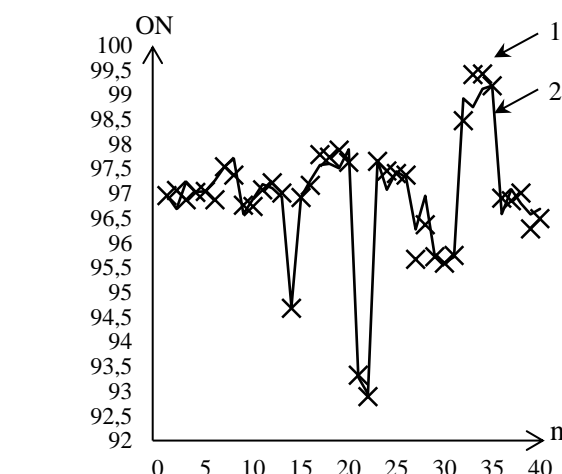


Рис. 5. Результат тестирования модели RON на спектрах бензина марки Премиум-95 по методу NET: 1 – значения ЛА, 2 – значения по модели, n – номер элемента в выборке, ON – значение показателя качества

Fig. 5. The result of testing the RON model on the spectra of Premium-95 gasoline using the NET method: 1 – LA values, 2 – values by model, n – the number of the item in the selection, ON – The value of the quality indicator

- Объем обучающей выборки: 391;
- Средняя ошибка прогноза: 0,24;
- Максимальная ошибка прогноза: 1,8;
- Назначение: Премиум 95, Регуляр 92.

На рис. 5 представлены графики, отражающие результаты тестирования модели для бензина Премиум-95, полученные NET-моделированием.

Результаты тестирования модели представлены в табл. 4.

Результаты тестирования для ОЧ по исследовательскому методу показывают, что для моделей, полученных NET-моделированием, в сравнении с МГК моделями, характерно снижение средней ошибки для бензина Регуляр-92 с 0,33 до 0,30, для бензина Премиум-95 с 0,27 до 0,14; снижение максимальной ошибки для бензина Регуляр-92 с 2,70 до 1,20, для бензина Премиум-95 с 2,50 до 1,80; увеличение коэффициента корреляции для бензина Регуляр-92 с 0,70 до 0,79, для бензина Премиум-95 с 0,72 до 0,82.

ВЫВОДЫ

Результаты, полученные при разработке калибровочных моделей для оценки показателей качества бензинов и их компонентов по данным измерений поточного ИК-спектрометра, позволяют

сделать вывод, что приемлемые по точности прогнозирования модели с применением нейросетевого подхода строятся с не меньшими эффективностью и точностью, чем модели на основе применяемого в настоящее время метода главных компонент, обладают ресурсом повышения точности и эффективности путем оптимизации архитектуры сети и алгоритма обучения. Кроме того, они позволяют учесть в модели влияющие на ИК спектры величины. Повышение точности определения значений показателей качества по калибровочным моделям позволяет снизить риск получения несоответствующей продукции.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов, требующего раскрытия в данной статье.

The authors declare the absence a conflict of interest warranting disclosure in this article.

Таблица 4

Результаты тестирования моделей по МГК и NET по исследовательскому методу
Table 4. Results of testing of models by PCA and NET for RON

| Метрики | МГК | | NET | |
|------------------------|------------|------------|------------|------------|
| | Регуляр-92 | Премиум-95 | Регуляр-92 | Премиум-95 |
| Ср. ошибка прогноза | 0,33 | 0,27 | 0,30 | 0,24 |
| Макс. ошибка прогноза | 2,70 | 2,50 | 1,20 | 1,80 |
| Коэффициент корреляции | 0,70 | 0,72 | 0,79 | 0,82 |

ЛИТЕРАТУРА

1. Беккер Ю. Спектроскопия. М.: Техносфера. 2009. 528 с.
2. Аносов А.А., Ефитов Г.Л., Зусман С.Д. // *Автоматизация в пром-сти*. 2012. № 7. С. 41-47.
3. Kaixun He, Maiying Zhong, Zhi Li, Jingjing Liu. // *Control Eng. Practice*. 2020. V. 101. 104478. DOI: 10.1016/j.conengprac.2020.104478.
4. Fazal Mabooda, Syed Abdullah Gilani, Mohammed Albroumi, Saif Alameri, Mahmood M.O. Al Nabhanian, Farah Jabeen, Javid Hussain, Ahmed Al-Harrasi, Ricard Boque, Saima Farooq, Ahmad M. Hamaed, Zakira Naurreen, Alamgir Khan, Zahid Hussain // *Fuel*. 2017. V. 194. P. 388-396. DOI: 10.1016/j.fuel.2017.02.041.
5. Ge Z. // *Ind. Eng. Chem. Res*. 2018. V. 57 (38). P. 12646-12661. DOI: 10.1021/acs.iecr.8b02913.
6. He K., Zhong M., Fang J., Li Y. // *IEEE Trans. Ind. Informatics*. 2020. V. 16 (4). P. 2799-2808. DOI: 10.1109/TII.2019.2945001.
7. Wang X., Yang K., Kalivas J.H. // *Optik*. 2020. V. 200. 163325. DOI: 10.1016/j.ijleo.2019.163325.
8. Зиануров А.Ш., Шумихин А.Г. // *Инж. Вестн. Дона*. 2021. № 10. С. 22-31.
9. Bachoc F., Gamboa F., Loubes J.-M., Venet N.A. // *IEEE Trans. Inform. Theory*. 2017. V. 64. P. 6620-6637. DOI: 10.1109/TIT.2017.2762322.
10. Chan L.L.T., Qing-Yang W., Junghui C. // *Chemomet. Intell. Lab. Syst*. 2018. V. 175. P. 87-103. DOI: 10.1016/j.chemolab.2018.01.015.

REFERENCES

1. Becker Yu. Spectroscopy. M.: Tekhnosfera. 2009. 528 p. (in Russian).
2. Anosov A.A., Efitov G.L., Zusman S.D. // *Avtomatizatsiya Prom-sti*. 2012. N 7. P. 41-47 (in Russian).
3. Kaixun He, Maiying Zhong, Zhi Li, Jingjing Liu. // *Control Eng. Practice*. 2020. V. 101. 104478. DOI: 10.1016/j.conengprac.2020.104478.
4. Fazal Mabooda, Syed Abdullah Gilani, Mohammed Albroumi, Saif Alameri, Mahmood M.O. Al Nabhanian, Farah Jabeen, Javid Hussain, Ahmed Al-Harrasi, Ricard Boque, Saima Farooq, Ahmad M. Hamaed, Zakira Naurreen, Alamgir Khan, Zahid Hussain // *Fuel*. 2017. V. 194. P. 388-396. DOI: 10.1016/j.fuel.2017.02.041.
5. Ge Z. // *Ind. Eng. Chem. Res*. 2018. V. 57 (38). P. 12646-12661. DOI: 10.1021/acs.iecr.8b02913.
6. He K., Zhong M., Fang J., Li Y. // *IEEE Trans. Ind. Informatics*. 2020. V. 16 (4). P. 2799-2808. DOI: 10.1109/TII.2019.2945001.
7. Wang X., Yang K., Kalivas J.H. // *Optik*. 2020. V. 200. 163325. DOI: 10.1016/j.ijleo.2019.163325.
8. Zianurov A.Sh., Shumikhin A.G. // *Inzh. Vestn. Dona*. 2021. N 10. P. 22-31 (in Russian).
9. Bachoc F., Gamboa F., Loubes J.-M., Venet N.A. // *IEEE Trans. Inform. Theory*. 2017. V. 64. P. 6620-6637. DOI: 10.1109/TIT.2017.2762322.
10. Chan L.L.T., Qing-Yang W., Junghui C. // *Chemomet. Intell. Lab. Syst*. 2018. V. 175. P. 87-103. DOI: 10.1016/j.chemolab.2018.01.015.

11. **Зиануров А.Ш., Шумихин А.Г.** // Междунар. науч.-практ. конф. «Инновационные производственные технологии и ресурсосберегающая энергетика 8, 9 декабря 2021». Омск. 2021. С. 163-168.
12. **Силаев Д.В., Шестопалова Н.Б., Фомина Ю.А., Русанова Т.Ю.** // *Изв. вузов. Химия и хим. технология*. 2022. Т. 65. Вып. 2. С. 50-59. DOI: 10.6060/ivkkt.20226502.6497.
13. **Ахназарова С.Л., Кафаров В.В.** Методы оптимизации эксперимента в химической технологии. М.: Высш. шк. 1985. 327с.
14. **Эсбенсен К.** Анализ многомерных данных. Избранные главы. Черногоровка: Изд-во ИПХФ РАН. 2005. 160 с.
15. Нейронные сети в Matlab. СПб.: Балт. Гос. Техн. Ун-т. 2017. 165 с.
16. **Примак А.Е., Шумихин А.Г., Сташков С.И.** // *Вестн. ПНИПУ. Хим. технология и биотехнология*. 2012. № 14. С. 34-43.
17. **Зиануров А.Ш., Шумихин А.Г.** // Матер. Всеросс. науч.-практ. конф. (с междунар. уч.). 28–29 апреля 2022 г. Пермь. С. 186-190.
18. **Шурыгина Л.И., Суровой Э.П.** Методы оптимизации химического эксперимента. Ч. 2: Регрессионный анализ и статистическое планирование эксперимента. Кемерово: Кемеров. гос. ун-т. 2011. 67 с.
19. **Корячко В.П., Бакулева М.А., Орешков В.И.** Интеллектуальные системы и нечеткая логика. М.: Курс. 2020. 352 с.
20. **Ростовцев В.С.** Искусственные нейронные сети. СПб: Лань. 2021. 216 с.
21. **Казаков А.В., Субботин Е.В.** Математическое моделирование и обработка результатов эксперимента. Пермь: ПНИПУ. 2021. 58 с.
22. **Мойзес Б.Б., Плотникова И.В., Редько Л.А.** Статистические методы контроля качества и обработка экспериментальных данных. М: Юрайт. 2021. 119 с.
23. **Лемешко Б.Ю., Лемешко Б.В., Семенова М.А.** // *Вестн. Томск. гос. ун-та. Управл., вычисл. техника и информ.* 2018. № 44. С. 40–49. DOI: 10.17223/19988605/44/5.
24. **Чистякова Т.Б., Полосин А.Н., Мешалкин В.П., Разыграев А.С.** // *Изв. вузов. Химия и хим. технология*. 2021. Т. 64. Вып. 8. С. 90-98. DOI: 10.6060/ivkkt.20216408.6428.
25. **Сидняев Н.И.** Теория планирования эксперимента и анализ статистических данных. М.: Изд-во Юрайт. 2020. 495 с.
11. **Zianurov A.Sh., Shumikhin A.G.** // *Mezhdunar. nauch.-prakt. konf. «Innovacionnyye proizvodstvennyye tekhnologii i resursosberegayushchaya energetika»* 8, 9 dekabrya 2021. Omsk. 2021. P. 163-168 (in Russian).
12. **Silaev D.V., Shestopalova N.B., Fomina Yu.A., Rusanova T.Yu.** // *ChemChemTech [Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.]*. 2022. V. 65. N 2. P. 50-59 (in Russian). DOI: 10.6060/ivkkt.20226502.6497.
13. **Akhazarova S.L., Kafarov V.V.** Methods of optimization of experiment in chemical technology. M.: Vyssh. shk. 1985. 327 p. (in Russian).
14. **Esbensen K.** Analysis of multidimensional data. Selected chapters. Chernogolovka: Izd-vo IPHF RAN. 2005. 160 p. (in Russian).
15. *Neural networks in Matlab: A practical guide*. SPb.: Balt. Gos. Tekhn. Un-t. 2017. 165 p. (in Russian).
16. **Primak A.E., Shumikhin A.G., Stashkov S.I.** // *Vest. PNRPU. Khim. Tekhnol. Biotekhnol.* 2012. N 14. P. 34-43 (in Russian).
17. **Zianurov A.Sh., Shumikhin A.G.** // *Mater. vseross. nauch.-praktich. Konf. (s mezhdunar. uch.) 28–29 aprelya 2022. Perm'*. P. 186-190 (in Russian).
18. **Shurygina L.I., Surovoy E.P.** Methods of optimization of chemical experiment. Part 2: Regression analysis and statistical planning of the experiment. Kemerovo: Kemerov. Gos. univ. 2011. 67 p. (in Russian).
19. **Koryachko V. P., Bakuleva M. A., Oreshkov V.** Intelligent systems and fuzzy logic. M.: Kurs. 2020. 352 c. (in Russian).
20. **Rostovtsev V.S.** Artificial neural networks. SPb: Lan. 2021. 216 p. (in Russian).
21. **Kazakov A.V., Subbotin E.V.** Mathematical modeling and processing of experimental results. Perm: PNIPIU. 2021. 58 p. (in Russian).
22. **Moises B.B., Plotnikova I.V., Redko L.A.** Statistical methods of quality control and experimental data processing. M.: Yurayt. 2021. 119 p. (in Russian).
23. **Lemeshko B.Yu., Lemeshko B.V., Semenova M.A.** // *Vest. Tomsk Gos. Univ. Upravl. Vychisl. Tekh. Inform.* 2018. N 44. P. 40–49 (in Russian). DOI: 10.17223/19988605/44/5.
24. **Chistyakova T.B., Polosin A.N., Meshalkin V.P., Razygraev A.S.** // *ChemChemTech [Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.]*. 2021. V. 64. N 8. P. 90-98 (in Russian). DOI: 10.6060/ivkkt.20216408.6428.
25. **Sidnyaev N.I.** Theory of experiment planning and analysis of statistical data. M.: Izd-vo Yurayt. 2020. 495 p. (in Russian).

Поступила в редакцию 21.08.2023

Принята к опубликованию 30.10.2023

Received 21.08.2023

Accepted 30.10.2023