

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ УПРАВЛЕНИЯ

им. В.А. ТРАПЕЗНИКОВА

РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК



На правах рукописи

**Брокарев Иван Андреевич**

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ И ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ИНФОРМАЦИОННОЙ  
СИСТЕМЫ ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОГО АНАЛИЗА КАЧЕСТВА ГАЗА**

Специальность 2.3.8. — «Информатика и информационные процессы»

Диссертация на соискание ученой степени  
кандидата технических наук

Научный руководитель:

доктор технических наук, с.н.с. №17 ИПУ РАН Фархадов М.П.

**Москва – 2024**

## Оглавление

Введение .....	6
Глава 1. Анализ методов и автоматизированных информационных систем анализа показателей качества газа .....	14
1.1 Классификация методов анализа показателей качества газа .....	14
1.2 Физико-химические методы определения энергетических характеристик газа .....	15
1.3 Аналитические методы определения энергетических характеристик газа .....	23
1.4 Системы и приборы контроля качества в газовой промышленности.....	28
1.5 Надёжность систем и приборы контроля качества в газовой промышленности .....	31
1.6 Исследуемые статистические модели.....	32
1.6.1 Многопараметрическая линейная регрессия .....	32
1.6.2 Гребневая регрессия .....	33
1.6.3 Регрессия на основе гауссовских процессов .....	34
1.6.4 Модель на основе метода опорных векторов .....	35
1.6.5 Нейросетевая модель (многослойный перцептрон) .....	35
1.6.6 Рекуррентная нейронная сеть.....	36
1.6.7 Рекуррентная нейронная сеть с долгой краткосрочной памятью .....	37
1.6.8 Рекуррентная нейронная сеть с управляемым рекуррентным блоком .....	40
Выводы по первой главе: .....	43
Глава 2. Метод обработки информации для анализа энергетических параметров природного газа .....	45

2.1 Выбор объекта, к которому будет применяться исследуемая система .....	53
2.2 Выбор измеряемых (входных) физических параметров и выходных параметров.....	57
2.2.1 Алгоритм многокритериальной оценки входных параметров.....	61
2.2.2 Подтверждение результатов многокритериальной оценки путем нейросетевого анализа..	69
2.3 Применение алгоритма перехода от рассматриваемой газовой смеси к модели эквивалентной псевдогазовой смеси .....	72
2.3.1 Описание алгоритма перехода к информационным параметрам модели эквивалентного псевдогаза .....	74
2.3.2 Подтверждение алгоритма на расчётных данных .....	76
2.3.3 Подтверждение алгоритма на результатах экспериментов.....	78
2.3.4 Алгоритм проведения эксперимента .....	80
2.3.5 Анализ результатов эксперимента .....	81
2.4 Разработка статистической модели для определения компонентного состава псевдогаза по измеряемым физическим параметрам .....	82
2.4.1 Выбор статистической модели.....	82
2.4.1.1 Выбор параметров для оценки выбранных моделей .....	84
2.4.1.2 Проведение сравнительного анализа выбранных статистических моделей.....	84
2.4.2 Обучение модели .....	85
2.4.3 Тестирование разработанной модели .....	91
2.5 Апробация аналитического метода анализа качества газа на результатах имитационного моделирования и экспериментальных данных.....	92
2.5.1 Сравнение предлагаемого метода с аналитическим методом определения только энергетической характеристики .....	92

2.5.2 Тестирование разработанной модели расчета компонентного состава псевдогаза на данных имитационного моделирования и определение характеристик газовых смесей .....	99
2.5.3 Расчет методической погрешности метода анализа качества природного газа .....	100
2.5.4 Результат апробации метода определения энергетических характеристик природного газа .....	102
Выводы по второй главе: .....	104
Глава 3. Методика и математические модели оценки эффективности обработки информации при использовании разработанного метода .....	105
3.1 Построение системы сбора данных на основе исследуемого метода обработки информации для анализа качества газа .....	105
3.2 Исследование надёжности информационно-вычислительной системы на основе аналитического метода анализа газа.....	107
3.2.1 Исследование модели надёжности измерительных приборов .....	114
3.2.2 Модель надёжности подсистемы для измерения одного параметра газовой смеси .....	116
3.2.3 Предварительные исследования. Надёжность подсистемы измерительных приборов для случая, когда $N = 1$ .....	118
3.2.4 Надёжность подсистемы измерительных приборов.....	121
Выводы по третьей главе: .....	127
Глава 4. Архитектура автоматизированной информационной системы интеллектуального анализа качества газа.....	128
4.1 Архитектура автоматизированной системы анализа качества газа.....	128
4.2 Подсистема измерительной информации .....	129
4.3 Подсистема алгоритмов и программное обеспечение .....	133
4.4 Подсистема проведения анализа.....	137

4.5 Преимущества автоматизированной информационной системы для определения значений энергетических характеристик природного газа.....	145
Выводы по четвертой главе: .....	146
Заключение .....	147
Основные научные результаты .....	148
Список сокращений и условных обозначений .....	149
Список литературы.....	151
Приложение 1. Акты о внедрении результатов диссертационной работы .....	163
Приложение 2. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ .....	165
Приложение 3. Примеры кода программы алгоритмов метода обработки информации для анализа качества газа.....	166
3.1 Код программы алгоритмов формирования расчетных данных.....	166
3.2 Код программы алгоритмов нейросетевого анализа.....	173
3.3 Код программы алгоритмов визуализации данных.....	175
Приложение 4. Часть журнала экспериментов для получения экспериментальных данных.....	177

## Введение

В промышленности важную роль имеют стоимостные показатели и эксплуатационные характеристики природного газа. Их качество также определяет правильную и эффективную эксплуатацию, учет и безопасную транспортировку. Поэтому задача определения показателей качества является крайне актуальной и одной из важнейших в промышленности. Для решения проблемы анализа качества природного газа в настоящее время в промышленности используются различные автоматизированные информационные системы на основе физико-химических методов анализа. При этом, обеспечивается очень высокая точность за счёт применения прямых методов измерения. Но отсюда же следуют и недостатки: низкая скорость проведения анализа, высокие затраты на проведение анализа, трудоёмкость разработки, очень дорогое обслуживание. Поэтому актуальной является разработка нового подхода, который будет обладать высокой скоростью проведения анализа, будет дешевле в реализации, в том числе будет иметь низкую трудоёмкость при разработке, а также будет иметь низкие эксплуатационные затраты и простоту обслуживания и ремонта. Эффективной, с этой точки зрения, является разработка новых методов обработки информации и их реализация.

Ряд эксплуатационных и качественных свойств природного газа (например, низшая теплотворная способность, число Воббе, относительная плотность для природного газа) регламентируются и являются обязательными к определению согласно действующим нормативным документам. Определение этих свойств может производиться как прямыми методами (например, калориметрия и измерение плотности), так и расчетными на основе определенных физико-химических свойств. В промышленности наиболее распространённым методом определения свойств природного газа является расчетный метод на основе анализа компонентного состава.

В отличие от методов прямого определения компонентного состава, аналитические методы (в том числе методы, основанные на измерении физических параметров) обычно позволяют определять только некоторые свойства, такие как: теплотворная способность, число Воббе, плотность и коэффициент сжимаемости при нормальных или стандартных условиях. Подобные методы основаны на определении искомым свойств с помощью разработанной модели по измерениям набора физических параметров. Данные параметры часто выбираются из следующего ряда: поглощение излучения в инфракрасной области спектра на определенных длинах волн, скорость звука, диэлектрическая проницаемость, вязкость и теплопроводность в газе. С эксплуатационной точки зрения такие методы значительно проще в реализации, чем методы прямого измерения компонентного состава. При этом точность работы аналитических методов при определении некоторых свойств часто сопоставима с результатами, получаемыми

при расчете методами по измерениям компонентного состава промышленными газовыми хроматографами. Основными преимуществами аналитических методов является небольшие временные затраты на проведение анализа и низкая стоимость оборудования.

Среди различных видов аппроксимационных моделей отдельное место занимают модели на основе нейросетевых технологий. Они обладают целым рядом уникальных возможностей, которые делают целесообразным их применение при решении задач аппроксимации. Среди них стоит отметить способность нейронных сетей к генерализации и адаптации к данным, эффективность при аппроксимации различного рода зависимостей. В отличие от других классических аппроксиматоров, нейронные сети менее подвержены влиянию размерности, что делает возможным решение задач с большим числом определяемых параметров. В настоящее время нейронные сети используются в большом числе задач нефтегазовой отрасли в связи с её модернизацией и интеллектуализацией, а также со сложностью решения промышленных задач существующими традиционными методами и алгоритмами. Использование искусственных нейронных сетей в газовой промышленности не ограничивается задачами прогнозирования и имитационного моделирования и используется, в том числе в задачах в большом числе практических задач, включая обучение моделей на экспериментальных данных для определения требуемых эксплуатационных и стоимостных показателей. Одной из важнейших задач газовой промышленности, в которой применение нейросетевых технологий видится крайне актуальным, является задача анализа качества природного газа.

В диссертации предлагается метод обработки информации и архитектура автоматизированной информационной системы (АИС) для определения показателей качества природного газа по измерениям их физических параметров с применением нейросетевых технологий. Предлагаемая архитектура АИС основана на методе обработки информации. Данный метод основан на корреляционном и нейросетевом анализе и измерении физических параметров, которые относительно просто измерить с помощью доступных на рынке измерительных приборов. Метод предполагает определение компонентного состава модели эквивалентного псевдогаза, который может быть напрямую использован для расчета показателей качества природного газа, в частности его теплотворной способности, с использованием специализированного программного обеспечения.

**Объектом исследования** являются информационные процессы в автоматизированных информационных системах, применяемых для анализа качества природного газа.

**Предметом исследования** являются метод, модели, алгоритмические и программные средства обработки информации для интеллектуального анализа качества природного газа.

**Целью диссертационной работы** является разработка метода обработки информации с применением нейросетевых технологий, а также архитектуры АИС для повышения эффективности анализа качества природного газа путем снижения временных и стоимостных затрат.

В диссертационной работе решены следующие **задачи**:

1. Проведен анализ существующих моделей, алгоритмов и информационных систем, используемых для анализа качества природного газа.
2. Разработан метод обработки информации с использованием нейросетевых технологий для определения качества природного газа на основе массива данных о входных физических параметрах.
3. Разработан алгоритм перехода от исходного природного газа к модели эквивалентного псевдогаза.
4. Разработана методика и математические модели для оценки точности интеллектуального анализа качества газа.
5. Разработана архитектура АИС определения характеристик природного газа, реализующая предлагаемый метод обработки информации.
6. Проведена оценка эффективности применения разработанного математического и программного обеспечения.

**Научная новизна работы:**

1. Разработан метод обработки информации об измеряемых физико-химических параметрах газа, отличающийся применением нейросетевых технологий и регрессионных моделей и позволяющий проводить интеллектуальный анализ качества газа с меньшими временными и стоимостными затратами.
2. Разработан модифицированный алгоритм описания, оценки информационных параметров реального газа и перехода к модели эквивалентного псевдогаза, отличающийся возможностью обработки информации о широком классе объектов и выбора числа компонент и моделей псевдогаза на основе возможностей используемого программно-аппаратного обеспечения.
3. Разработана методика и математические модели, позволяющие проводить многоэтапную оценку показателей точности информационных параметров АИС и повышающие эффективность ее функционирования, обеспечивающие применение информационных технологий в принятии решения о качестве газа на оперативном уровне управления.
4. Разработана архитектура АИС для интеллектуального анализа качества природного газа, отличающаяся отсутствием сложных информационных процессов,



необходимых для получения результатов прямых физико-химических методов измерения, реализующая алгоритм перехода от реального газа к псевдогазу и нейросетевой анализ информации, что позволяет уменьшить число необходимых входных информационных параметров, повысить скорость обработки информации и уменьшить стоимость проведения анализа.

**Область исследования.** Диссертационная работа соответствует содержанию специальности 2.3.8. «Информатика и информационные процессы», а именно следующим пунктам:

1. Разработка методов обработки, группировки и аннотирования информации, в том числе, извлеченной из сети интернет, для систем поддержки принятия решений, интеллектуального поиска, анализа.

2. Разработка компьютерных методов и моделей описания, оценки и оптимизации информационных процессов и ресурсов, а также средств анализа и выявления закономерностей на основе обмена информацией пользователями и возможностей используемого программно-аппаратного обеспечения.

3. Автоматизированные информационные системы, ресурсы и технологии по областям применения (научные, технические, экономические, образовательные, гуманитарные сферы деятельности), форматам обрабатываемой, хранимой информации. Системы принятия групповых решений, системы проектирования объектов и процессов, экспертные системы и др.

4. Обеспечение информационных систем и процессов, применения информационных технологий и систем в принятии решений на различных уровнях управления. Общие принципы и основы организации информационных служб и электронных библиотек.

**Методы исследования.** В диссертационной работе применяются методы машинного обучения, компьютерное имитационное моделирование, используются регрессионный и корреляционный анализ, методы многокритериальной оценки формирования нейросетей. При реализации разработанных метода и средств обработки информации используются среда Matlab и специализированное программное обеспечение NIST REFPROP.

**Степень обоснованности и достоверности полученных результатов.**

Достоверность выводов диссертационной работы подтверждается результатами экспериментальных исследований. Выполнена проверка результатов диссертационной работы путем исследования точности анализа. Разработанные алгоритм и метод обработки информации прошли апробацию на многочисленных международных конференциях и при публикации в высокорейтинговых международных изданиях.

**Апробация результатов.**

Основные результаты диссертационной работы докладывались на: семинарах ИПУ РАН и 12 всероссийских и международных конференциях:

1. XII Всероссийская научно-техническая конференция «Актуальные проблемы развития нефтегазового комплекса России», Москва, 12.02.18 - 14.02.18.
2. 73-я Международная молодежная научная конференция «Нефть и газ – 2019», Москва, 22.04.19 - 25.04.19.
3. 18-я Международная научно-практическая конференция им. А. Ф. Терпугова «Информационные технологии и математическое моделирование», Саратов, 26.06.19 – 30.06.19.
4. XXII международная конференция “Распределенные компьютерные и телекоммуникационные сети: управление, вычисление, связь” (DCCN 2019), Москва, 23.09.19 – 27.09.19.
5. 13-я Всероссийская конференция молодых ученых, специалистов и студентов “Новые технологии в газовой промышленности (газ, нефть, энергетика)”, Москва, 22.10.19 – 25.10.19.
6. The 2nd International Workshop on Stochastic Modeling and Applied Research of Technology (SMARTY 2020), 16.08.2020 – 20.08.2020.
7. XXIII международная конференция “Распределенные компьютерные и телекоммуникационные сети: управление, вычисление, связь” (DCCN 2020), Москва, 14.09.20 – 18.09.20.
8. The 5th international conference on stochastic methods (ICSM-5), Москва, 23.11.20 – 27.11.20.
9. 19-я Международная научно-практическая конференция им. А. Ф. Терпугова «Информационные технологии и математическое моделирование», Томск, 02.12.20 – 05.12.20.
10. The 6th International Reliability and Safety Engineering Conference (IRSEC2020), Шираз, Иран, 17.02.2021 – 18.02.2021.
11. The 15th IEEE International Conference on Application of Information and Communication Technologies, ADA University, Baku, Azerbaijan, 13.10.21 – 15.10.21.
12. 6th International Scientific Conference on Information, Control, and Communication Technologies (ICCT 2022), Astrakhan State Technical University, Astrakhan, 03.10.22 – 07.10.22.
13. 5th International Conference on Problems of Cybernetics and Informatics (PCI 2023), Institute of Control Systems of the Ministry of Science and Education, Baku, Azerbaijan, 28.08.23 – 30.08.23.

**Личный вклад.**

Основные результаты диссертационной работы получены автором самостоятельно. В работах [79, 82, 98, 99, 127, 128] автор выполнил разработку и тестирование системы анализа качества природного газа, а также проведение нейросетевого анализа данных. Результаты работы [81] построены на многокритериальной оценке входных параметров методами анализа иерархий с применением корреляционного анализа, проведенного автором. В работах [75, 84, 126] автор осуществлял написание первоначального проекта статей, визуализацию результатов, исследование и подготовку данных для анализа. Работа [76] выполнена без соавторов.

**Публикации.** Основные результаты диссертационной работы опубликованы в 24 научных трудах, в том числе: в 8 статьях в журналах, индексируемых Scopus, в 7 статьях в рецензируемых научных журналах, рекомендуемых ВАК при Минобрнауки России, из них 4 входят в список RSCI; в 9 тезисах и материалах международных и всероссийских конференций. Зарегистрирована 1 программа для ЭВМ.

**Структура и объем работы.** Диссертация состоит из введения, четырёх глав, заключения, списка литературы из 134 наименований, 4 приложений. Полный объём диссертации составляет 181 страница, включая 54 рисунка и 35 таблиц.

## Содержание работы

**Во введении** обосновывается актуальность избранной диссертантом темы исследования, определяются цели и задачи диссертации, рассмотрена научная новизна диссертации, представлены положения, выносимые на защиту, приведена информация об апробации результатов исследования, структуре работы и публикациях.

**В первой главе** проведен обзор наиболее известных методов и информационных автоматизированных систем, использующихся для анализа компонентного состава и энергетических свойств природного газа. Методы анализа показателей качества подразделяются на две группы: непосредственное измерение энергетических характеристик; определение компонентного состава с последующим расчётом показателей качества. Каждая из этих групп делится на две подгруппы: физико-химические и аналитические методы.

**Во второй главе** приведена и исследована концепция, а также структура разработанного метода обработки информации для решения задачи анализа качества природного газа. Основное положение анализа состоит в определении компонентного состава эквивалентного псевдогаза по измерениям физических параметров газа разработанной нейросетевой моделью. Метод основан на статистических и корреляционных зависимостях между физическими параметрами, которые возможно измерить коммерчески доступными и относительно недорогими измерительными приборами, и концентрациями компонентов, входящих в рассматриваемую газовую смесь.

**В третьей главе** предложены методика и математические модели для проведения многоэтапной оценки надежности обработки информации для повышения достоверности результатов интеллектуального анализа качества природного газа. Для разработанной структурной схемы архитектуры АИС были получены оценки показателей качества системы, основанные на разности показаний измерительных приборов основного и резервного измерительного канала.

**В четвертой главе** приведена архитектура информационной автоматизированной системы и апробация разработанного метода на реальных данных, полученных в ходе экспериментальных измерений. Экспериментальные исследования заключались в подготовке реальных газовых смесей с помощью газосмесительной станции и измерении физических параметров смесей. Из полученных измерительных данных формировалась выборка, на которой симулировалась разработанная нейросетевая модель.

**В заключении** приведены основные научно-технические результаты, полученные в ходе диссертационной работы.

**В приложениях** приведены иллюстративные примеры программного кода для реализации основных функций исследуемой системы, вычислительные процедуры для определения требуемых показателей качества природного газа, часть журнала проведённых экспериментальных исследований.

**Основные положения, выносимые на защиту:**

1. Метод обработки информации об измеряемых физико-химических параметрах газа, позволяющий проводить анализ качества газа в  $10^3$  раз быстрее и в 10 раз дешевле по сравнению с существующими методами анализа при удовлетворении требованиям по его точности.

2. Модифицированный алгоритм описания, оценки информационных параметров реального газа и перехода к модели эквивалентного псевдогаза.

3. Методика и математические модели, позволяющие проводить многоэтапную оценку показателей точности информационных параметров разработанной АИС и повышающие эффективность ее функционирования.

4. Архитектура АИС определения показателей качества природного газа с обеспечением требуемых временных и стоимостных затрат.

## **Глава 1. Анализ методов и автоматизированных информационных систем анализа показателей качества газа**

В настоящее время в газовой промышленности наблюдаются существенные изменения в вопросах производства и использования природного газа для коммунально-бытовых нужд и промышленных процессов. Во многих странах-экспортерах газа из-за ряда экономических и политических изменений возникла тенденция к снижению использования природного газа, добываемого на месторождениях, и переход к другим источникам газа, в частности к биогазу и сжиженному природному газу, которые имеют непостоянный компонентный состав по сравнению с так называемым традиционным природным газом. Но, следует отметить, что даже для традиционного природного газа компонентный состав в значительной степени может отличаться в зависимости от месторождения, на котором его добывают. Компонентный состав природного газа является обязательным для определения физико-химическим параметром согласно нормативному документу [1]. Один из основных энергетических параметров газа - теплотворная способность напрямую зависит от компонентного состава газа и является основной характеристикой при определении стоимости природного газа. Исходя из этого факта можно сделать вывод, что от точности определения компонентного состава природного газа зависит экономическая эффективность его использования.

Существует большое количество способов анализа показателей качества природного газа [2, 128], некоторые из них регламентированы в [3]. В международном нормативном документе [4] основным методом определения компонентного состава природного газа признана хроматография, а в национальном стандарте [5] калориметрия рекомендована для измерения наиболее важной энергетической характеристики – теплотворной способности газа.

Данная глава посвящена исследованию методов анализа компонентного состава и энергетических параметров газа – как физико-химических методов, используемых в настоящее время в газовой промышленности, так и альтернативных аналитических методов анализа.

### **1.1 Классификация методов анализа показателей качества газа**

Методы анализа показателей качества природного газа подразделяются на две группы (Рисунок 1.1.1):

– физико-химические методы определения энергетических характеристик;

– аналитические методы определения компонентного состава и энергетических параметров газа.

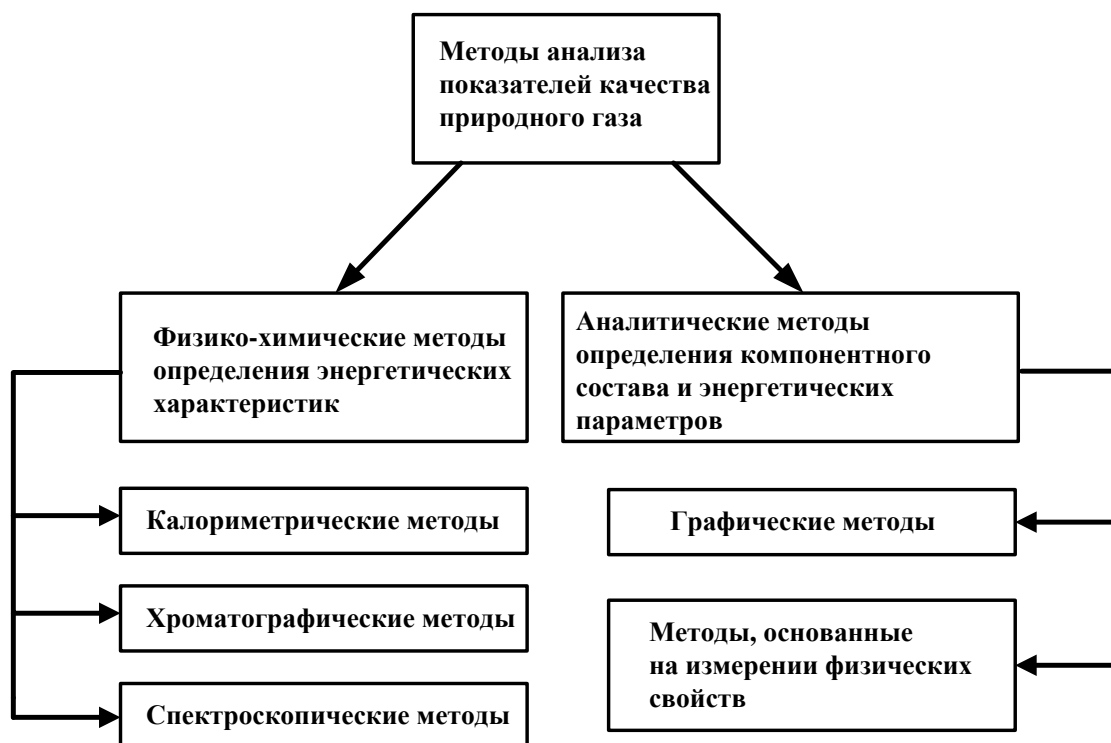


Рисунок 1.1.1 — Методы анализа показателей качества природного газа

## 1.2 Физико-химические методы определения энергетических характеристик газа

В настоящее время для прямого определения энергетических характеристик газа чаще всего используют калориметрические методы, в частности различные варианты газовой калориметрии:

- сжигание газа в калориметрической бомбе;
- сжигание газа открытым способом;
- каталитическое сжигание газа.

В первом случае исследуемый образец сгорает в избытке кислорода в герметичной металлической емкости (калориметрическая бомба), которую помещают в заполненный водой калориметрический сосуд. По разнице температуры воды в начале и конце эксперимента устанавливают количество выделившейся теплоты.

Фронт пламени распространяется от места поджигания к стенкам калориметрической бомбы и смесь вблизи стенок нагревается, что может привести к неполному окислению. В этой связи необходимо корректировать полученные результаты с учётом данных о качественном и

количественном составе продуктов горения. Этот метод применяют для анализа природного газа лишь в отдельных случаях с возможностью проведения исследования продуктов горения [6].

При сжигании газа открытым способом (при постоянном давлении) выделившаяся энергия через теплообменник передается «абсорбирующему веществу», в качестве которого обычно используют воду или воздух. По изменению их температуры рассчитывают теплотворную способность исследуемого газа. Данный метод позволяет проводить измерения в непрерывном режиме. При этом важно поддерживать постоянными расход исследуемого газа и «абсорбирующего вещества» [7], что усложняет его реализацию.

В третьем методе исследуемый газ пропускают через плотный слой катализатора. По изменению температуры катализатора рассчитывают энергию сгорания газа. Два следующих фактора ограничивают применимость данного метода:

- для полного протекания реакции необходимо поддерживать температуру каталитического слоя в определенном диапазоне [8];
- в результате загрязнения катализатора в процессе анализа снижается точность измерений.

Рассмотрев методы калориметрии, перейдем к рассмотрению более применяемых в настоящее время хроматографических методов.

Хроматография – это метод разделения, анализа и изучения свойств газовых смесей, основанный на распределении компонентов смеси между подвижной и неподвижной фазами [9]. В случае газовой хроматографии подвижной фазой является газ, который называется газ-носитель. Хроматографический метод осуществляется путём разделения анализируемой газовой смеси, подаваемой в поток газа-носителя, на составляющие компоненты за счет их сорбции и десорбции на неподвижной фазе.

Хроматография базируется на многократном повторении актов сорбции и десорбции вещества при перемещении её в потоке подвижной фазы вдоль неподвижной фазы. Сорбция – это процесс поглощения твердым веществом или жидкостью газообразного или растворенного вещества, обратный процесс называется десорбцией. Зависимость количества поглощённого вещества от концентрации раствора или давления газа при постоянной температуре называется изотермой адсорбции. Математически эта зависимость может быть выражена уравнением Ленгмюра [10]:

$$n = n_{\max} \frac{kc}{1 + kc}, \quad (1.2.1)$$



Где  $n$  – количество адсорбированного вещества при равновесии,  $n_{\max}$  – максимальное количество вещества, которое может быть адсорбировано на данном сорбенте,  $k$  – постоянный коэффициент,  $c$  – концентрация.

Регистрирующий прибор строит график зависимости сигнала детектора от времени – хроматограмму, по которой ведется количественный расчет показателей, проводится расчет градуировочных коэффициентов для каждого компонента, которые используются в дальнейших расчетах по определению долей всех компонентов.

Метод теоретических тарелок [11], лежащий в основе теории хроматографического процесса заключается в том, что хроматографическая колонка делится условно на ряд элементарных участков (тарелок). Распределение вещества вдоль слоя сорбента происходит согласно уравнению:

$$C = C_{\max} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2lH}}, \quad (1.2.2)$$

Где  $C_{\max}$  – величина концентрации вещества в точке максимума пика,  $x$  – расстояние от начала колонки до точки, в которой концентрация равна  $C$ ,  $x_0$  – координата центра полосы,  $H$  – высота, эквивалентная теоретической тарелке (ВЭТТ),  $l$  – длина слоя сорбента, на которой проводится поглощение и размещается  $m$  теоретических тарелок (длина хроматографической колонки).

Кинетическая теория хроматографии главное внимание предоставляет кинетике процесса, связывая высоту ВЭТТ с процессами диффузии, медленным установлением равновесия и неравномерностью процесса. Высота ВЭТТ связана со скоростью потока уравнением Ван-Деемтера [12].

Полнота разделения двух компонентов количественно может быть выражена критерием разделения  $R_s$ :

$$R_s = \frac{\Delta l}{p(1) + p(2)}, \quad (1.2.3)$$

Где  $\Delta l$  – расстояние между максимумами пиков разделяемых компонентов,  $p(1)$  и  $p(2)$  – ширина хроматографического пика 1 и 2 компонентов на половине высоты.

При  $R_s = 1$  разделение будет достаточно полным.

Основными достоинствами метода газовой хроматографии являются возможность определения с высокой точностью малых концентраций углеводородных газов, широкий выбор сорбентов и неподвижных фаз, высокая вариативность выбора условий разделения, возможность осуществления химических реакций в хроматографической колонке или детекторе, повышение эффективности при сочетании с различными инструментальными методами, например, масс-спектрометрией и инфракрасной спектроскопией.

Недостатками данного метода являются требование наличия калибровочных газов для проведения анализа, дороговизна оборудования, удаленность места отбора проб от места проведения анализа (в случае лабораторных исследований), что делает метод излишне затратным по времени и стоимости.

В настоящее время существует большое количество разработок и нововведений в области газовой хроматографии [13], часть из которых относятся к всесторонней двумерной газовой хроматографии. При данном виде хроматографии используются две различные колонки с разными неподвижными фазами. Подвижная фаза из первой колонки затем поступает во вторую через модулятор. Данная технология используется для смесей с большим количества разного рода углеводородов и их изомеров.

Кроме описанных выше основными достоинствами газовой хроматографии являются высокая чувствительность в отношении низших углеводородов и возможность повысить информативность метода путем дополнения хроматографа масс-спектрометрической или ИК-спектроскопической приставкой. Среди недостатков следует отметить высокие временные затраты на проведение анализа (даже для поточных хроматографов время анализа превышает десятки минут).

Рассмотрев методы газовой хроматографии, рассмотрим спектроскопические методы, являющиеся еще одним примером физико-химических методов анализа качества газа.

Инфракрасную спектроскопию также используют для определения компонентного состава газа. Метод основан на различиях зависимости интенсивности поглощения инфракрасного излучения от длины волны для разных веществ.

В данном методе не требуется разделять исследуемую смесь на компоненты. В этом методе определение состава газовой смеси по поглощению инфракрасного излучения основано на том факте, что для каждого газа зависимость интенсивности поглощения инфракрасного излучения от длины волны уникальна. При пропускании инфракрасного излучения через газовую смесь происходит ослабление его интенсивности, связанное с колебательным движением молекул. По длинам волн, при которых наблюдается максимальное поглощение инфракрасного излучения, можно сделать вывод о наличии в смеси определенных компонентов, так как поглощение излучения происходит только при длинах волн, энергия которых равна энергии возбуждения колебаний в молекулах определенного компонента.

Инфракрасное излучение представляет собой электромагнитную волну и характеризуется длиной волны  $\lambda$ , частотой  $\nu$  и волновым числом. При поглощении фотона происходит возбуждение - увеличение энергии молекулы: она переходит из основного колебательного состояния  $E_1$  в некоторое возбуждённое колебательное состояние  $E_2$ .

Энергия поглощённого инфракрасного излучения расходуется на возбуждение колебательных переходов для веществ в конденсированном состоянии. Для газов поглощение кванта ИК-излучения приводит к колебательным и вращательным переходам.

Одним из методов получения спектра инфракрасного излучения является Фурье-спектроскопия – совокупность методов, в которых для восстановления спектра применяется обратное преобразование Фурье [14].

Интенсивность света на детекторе в спектрографе определяется по формуле:

$$I(x) = A(\omega) \cos(\omega x), \quad (1.2.4)$$

Где  $x$  - разность хода в интерферометре,  $A(\omega)$  – интенсивность монохроматической спектральной линии с частотой  $\omega$ .

Данные, полученные в виде интерферограммы  $I(x)$ , должны быть преобразованы в спектр  $S(\nu)$  с использованием преобразования Фурье.

Если коэффициенты Фурье известны и имеется дискретный спектр, то вид интерферограммы может быть восстановлен обратным дискретным преобразованием Фурье:

$$I(n\Delta x) = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} S(k\Delta \nu) e^{\frac{-2i\pi nk}{N}}, \quad (1.2.5)$$

Известен ряд методов, в которых инфракрасная спектроскопия на основе преобразования Фурье используется для решения задач на предприятиях нефтегазовой промышленности [15 - 17]. В частности, для детектирования выбросов газов (обнаружения метана, этана, пропана, бутана и других компонентов) был разработан измерительный прибор, построенный на основе инфракрасного спектрометра [18]. Также существуют модификации метода инфракрасного спектроскопии для упрощения конструкции аппаратуры и снижения расходов на проведение анализа, например, статический инфракрасный спектрометр на основе преобразования Фурье [19]. В описанных методах в качестве эталонного анализатора использовался газовый хроматограф, но существует ряд методов, которых используется комбинация методов газовой хроматографии и инфракрасной спектроскопии [20].

Основное преимущество Фурье-спектроскопии – возможность регистрации одновременно всего спектра. Фурье-спектрометры, по сравнению с другими спектрометрами, выигрывают в светосиле, что позволяет сократить продолжительность эксперимента, увеличить соотношение сигнал – шум, уменьшить габариты прибора. Кроме того, в них более точно отсчитывается длины волны: в дифрактометрах длину волны можно оценить только косвенно, в Фурье-спектрометрах она определяется непосредственно.

Однако при исследовании многокомпонентных систем с помощью Фурье-спектроскопии можно расшифровать состав, как правило, только двух- или трёхкомпонентных смесей. В остальных случаях требуется предварительно разделять или концентрировать смесь. К

существенным недостаткам также относится невозможность исследовать компоненты, не имеющие специфического спектра поглощения в ИК-области, большую продолжительность эксперимента и высокую стоимость оборудования.

Преимуществами данного метода является его молекулярно-специфичность, что позволяет получать информацию о функциональных группах в молекуле. Также метод является методом количественного неdestructивного анализа, даже по отношению к неустойчивым соединениям и позволяет определять содержание от 0.1% до 100%. Спектры поглощения и отражения вещества в ИК области характеризуются большей индивидуальностью, что определяет ценность метода при изучении структурно-группового состава веществ и материалов. Если рассматривать Фурье-спектрометрию как частный случай спектрометрического метода, то основным ее преимуществом является возможность регистрации одновременно всего спектра. Фурье-спектрометры по сравнению с другими спектрометрами имеют выигрыш в светосиле, что позволяет уменьшить время регистрации спектров, уменьшить отношение сигнал – шум, уменьшить габариты прибора. Фурье-спектрометры выигрывают также в точности отсчета длины волны. В дифракционных приборах длину волны можно определить только косвенно, а в Фурье-спектрометрах она определяется непосредственно.

Недостатком метода является сложность в исследовании углеводородных компонентов, не имеющих специфического поглощения в инфракрасной области. При исследовании многокомпонентных систем, как правило, определяется состав двух- или трёхкомпонентных смесей при содержании одного компонента не менее 5-10%; в остальных случаях требуется дополнительное разделение компонентов или их концентрирование. Важными недостатками также являются невозможность регистрации слабых сигналов, сравнительно невысокая разрешающая способность (до  $0,1 \text{ см}^{-1}$ ), длительная регистрация спектров и высокая стоимость оборудования.

Рассмотрим еще один метод анализа – Рамановская спектроскопия (метод комбинационного рассеяния). В методах анализа компонентного состава природного газа, основанных на определении концентраций в газовых средах методами комбинационного рассеяния, излучение лазера направляется в измерительную камеру, содержащую природный газ, и возбуждает спектры комбинационного рассеяния входящих в него компонентов. Путем регистрации интенсивности сигналов комбинационного рассеяния на соответствующих частотах, делается вывод о концентрации компонента в анализируемой пробе. При рассмотрении комбинационного (рамановского) рассеяния можно воспользоваться волновой теорией света и квантовой теорией. Происхождение рамановского эффекта можно

интерпретировать [21] с помощью классической теории при рассмотрении двухатомной молекулы. Молекулы веществ рассеивают монохроматический свет (лазерное излучение), в результате чего регистрируются спектры комбинационного рассеяния (КР) смеси. По интенсивности КР-сигналов на соответствующей частоте можно судить о концентрации компонента в анализируемой пробе [22]. Мощность рассеянного света пропорциональна энергии падающих фотонов (значение параметра, который называют «сечение рамановского рассеяния»).

Молекулы вибрируют по косинусоидальной кривой с частотой, пропорциональной силе сцепления и обратно пропорциональной массе. Каждая молекула выдает свой собственный сигнал вибраций, который зависит не только от атомов молекулы, но также и от индивидуальных связей. С помощью рамановского эффекта эти частоты вибрации можно измерить с учетом поляризации молекулы  $\alpha$ , которая представляет собой функцию смещения  $q$ . Когда падающий свет взаимодействует с молекулой, он индуцирует дипольный момент  $P$ . Это можно выразить следующим образом:

$$P = \alpha E_0 \cos(2\pi\nu_0 t), \quad (1.2.6)$$

Где  $E_0$  представляет собой интенсивность,  $\nu_0$  – частота электрического поля.

С помощью аппроксимации амплитуды поляризуемость можно описать как линейную функцию смещения, которая в сочетании с равенствами приводит к уравнению, в котором фигурируют два результирующих эффекта, которые проистекают из взаимодействия молекулы и света. Первый компонент – распределение Рэлея, он доминирует и не меняет частоту света. Второй компонент – рамановское рассеяние: для изменения частоты света увеличивается или уменьшается частота молекулярной вибрации. Измеряя изменение частоты падающего света, можно получить значение частоты вибрации молекулярной связи.

Дальнейшее исследование рамановского эффекта приводит к тому, что мощность распределенного света  $P_s$ , равна интенсивности падающих фотонов,  $I_0$ , или значению параметра, которое называют сечением рамановского рассеяния  $\sigma_R$ .

$$P_s = \frac{I_0}{\lambda^4}, \quad (1.2.7)$$

Из уравнения (1.2.7) видно, что существует линейная зависимость между мощностью рассеяния и интенсивностью падающего света, а также между мощностью рассеяния света и обратной величиной длины волны в четвертой степени. Поэтому желательно использовать коротковолновое возбуждение и источник возбуждения высокой мощности.

Метод рамановской спектроскопии имеет следующие достоинства: не требует подготовки пробы; обеспечивает достаточно быстрый анализ; дает возможность удаленного

бесконтактного анализа; применяются недорогие кварцевые или стеклянные кюветы; возможность комбинирования с другими методами, в частности с ИК-Фурье.

Среди недостатков рамановской спектроскопии, ограничивающих ее применение, можно выделить следующие: интенсивность линий рамановского спектра много меньше интенсивности источника, поэтому необходим мощный источник излучения; применение лазера в качестве источника возбуждающего излучения может привести к нагреву исследуемой среды; определённые трудности возникают при попытке определить вращательные и вращательно-колебательные спектры в высоком разрешении. Основным недостатком метода состоит в том, что интенсивности регистрируемых сигналов комбинационного рассеяния малы. Для измерения содержания малых примесей в пробе природного газа необходимо использовать мощные лазеры, которые являются дорогостоящими и конструктивно сложными устройствами. К настоящему времени проведены измерения лишь для незначительного количества компонентов природного газа: метан и этан.

Методом анализа качества газа является также рефрактометрический метод, основанный на зависимости показателя преломления (коэффициента рефракции) анализируемой газовой смеси от концентрации определяемого. Этот метод применяется для идентификации химических соединений, количественного и структурного анализа, определения физико-химических параметров веществ. Показатель преломления – это отношение скоростей света в граничащих средах.

Измеряя диэлектрическую проницаемость  $\varepsilon$ , характеризующую вещество в целом, можно определить по теории поляризации диэлектриков электрооптические параметры его молекул, связанные с  $\varepsilon$  формулой Клаузиуса-Моссотти [23]:

$$\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2} \frac{M}{\rho} = \frac{4}{3} \pi N_A \rho = P_M, \quad (1.2.8)$$

Где  $N_A$  – число Авогадро,  $M$  – молекулярная масса вещества,  $\rho$  – плотность вещества,  $P_M$  – молярная поляризация – величина, характеризующая меру индуцированного момента в объёме, который занимает 1 моль вещества.

Для длин волн, значительно удалённых от области их поглощения молекулами вещества, справедливо равенство диэлектрической проницаемости квадрату показателя преломления света для определённых длин волн  $n_\infty$ .

С учётом этого уравнение Клаузиуса-Моссотти принимает следующий вид:

$$R_M = \frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} \frac{M}{\rho} = \frac{4}{3} \pi N_A \alpha_{эл} = P, \quad (1.2.9)$$

Из полученного выражения видно, что показатель  $R_M$ , называемый молярной рефракцией, имеет размерность объёма молекул, содержащихся в 1 моль вещества. На практике

часто пользуются показателем удельной рефракции  $r$ , то есть рефракцией одного грамма вещества [24]. Удельная и молярная рефракции связаны соотношением:  $R_M = rM$ , где  $M$  - молярная масса. Учитывая это, уравнение (1.2.9) можно представить в следующем виде:

$$r = \frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} \frac{1}{\rho}, \quad (1.2.10)$$

Достоинствами метода являются относительная простота аппаратуры и техники выполнения, высокая точность измерений ( $10^{-4}$  до  $10^{-2}$  %), экспрессность (анализ занимает несколько минут).

Недостатком метода является трудность вычисления, т.к. показатели преломления газов очень малы по абсолютной величине. На настоящий момент удалось найти коэффициенты преломления для метана, азота, этана, поэтому полный анализ по этому методу пока провести не удалось. Но существенное относительное различие показателей преломления говорит о больших возможностях данного метода.

### 1.3 Аналитические методы определения энергетических характеристик газа

Более перспективными по сравнению с физико-химическими можно считать аналитические методы анализа, в которых энергетические характеристики (теплотворная способность, число Воббе) вычисляют с использованием данных о других физических свойствах (скорость звука в газе, диэлектрическая проницаемость, динамическая вязкость, теплопроводность). Эти свойства выбирают, учитывая ряд факторов, в частности: наличие корреляции с искомым параметром, возможность измерения известными методиками, доступность измерительных приборов.

Метод определения теплотворной способности природного газа путем обработки данных от трех стандартных измерительных приборов – теплопроводности и двух инфракрасных (ИК), предназначенных для измерения содержания  $\text{CO}_2$  и степени поглощения ИК-излучения углеводородами [25], реализован в соответствующем измерительном приборе, обладающем высокой точностью и малым временем отклика инфракрасных измерительных приборов (менее 15 с). Поскольку прибор непрерывно осуществляет измерения, его можно использовать вместо калориметров сгорания на газосмесительных станциях.

Измерительный прибор используют для определения числа Воббе по данным о скорости звука в газе и его теплопроводности при разной температуре [26]. Относительная погрешность определения числа Воббе составляет 0,5 %. Прибор используют для контроля полноты

процессов горения, а в сочетании с ультразвуковым счетчиком – для контроля качества газа коммунально-бытового назначения.

Метод определения величины низшей теплотворной способности газа, основанный на ее нелинейной аппроксимации функцией от скорости звука и концентрации диоксида углерода, с использованием искусственных нейронных сетей предложен в работе [27]. В данной работе экспериментально показано, что максимальное отклонение рассчитанной величины составляет 166 кДж/м<sup>3</sup>. Результаты можно использовать совместно с экспериментальными данными промышленного объемного газового расходомера для определения энергетических характеристик газа.

Метод определения компонентного состава реализуется по измерениям двух известных физических величин с использованием тернарных диаграмм [28]. В данном методе каждый компонент представляется в виде функции от двух физических параметров. Эти параметры изображаются в виде тернарной диаграммы как показано на рисунке 1.2.1. Значение концентраций компонентов газа определяются по координатам точки пересечения линий двух параметров по уравнениям.

На рисунке 1.3.1 изображена тернарная диаграмма для следующих компонентов:  $X_1$  – метан,  $X_2$  – этан,  $X_3$  – пропан.

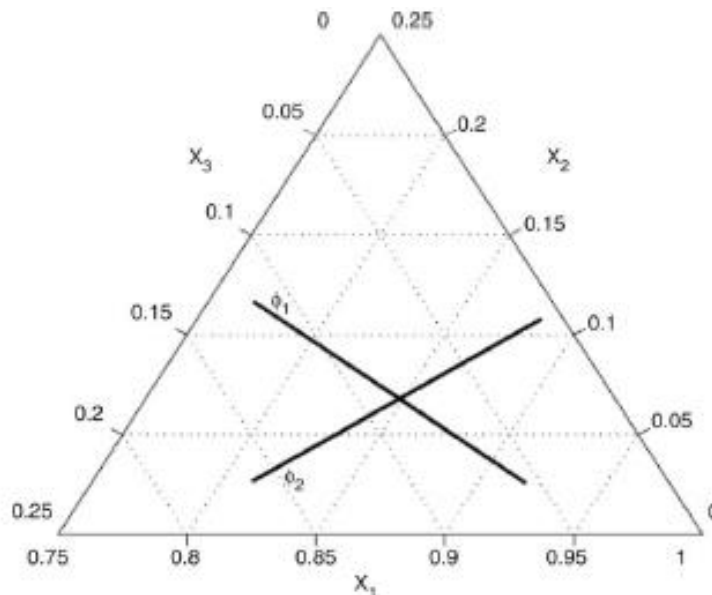


Рисунок 1.3.1 — Пример тернарной диаграммы [28]

По тернарной диаграмме с использованием уравнений рассчитываются концентрации искомых компонентов.



$$\begin{cases} X_1 = X_{10} + (1 - \frac{a_1(\phi_1)}{\sqrt{3}}) * (\frac{b_1(\phi_1) - b_2(\phi_2)}{a_2(\phi_2) - a_1(\phi_1)}) - \frac{b_1(\phi_1)}{\sqrt{3}} \\ X_2 = X_{20} + \frac{2 * a_1(\phi_1)}{\sqrt{3}} * (\frac{b_1(\phi_1) - b_2(\phi_2)}{a_2(\phi_2) - a_1(\phi_1)}) + \frac{2 * b_1(\phi_1)}{\sqrt{3}}, (1.3.1) \\ X_3 = 1 - X_1 - X_2 \end{cases}$$

Где  $X_1, X_2, X_3$  – концентрации искоемых компонентов;

$a_1(\phi_1), a_2(\phi_2), b_1(\phi_1), b_2(\phi_2)$  – коэффициенты, зависящие от физических величин  $\phi_1$  и  $\phi_2$ .

Для рассмотренных в приведенной работе газовых смесей относительная погрешность определения искоемых параметров не превышает 1%.

Преимуществами метода являются возможность определения компонентного состава, возможность определения компонентного состава, используя измерения только двух физических параметров, использование в качестве измеряемых параметров как различных физических параметров, так и одного параметра при разных значениях температуры, использование относительно недорогих и доступных на рынке измерительных приборов.

Недостатками метода являются его применимость только для определения компонентного состава тернарных смесей, хотя реальный природный газ включает как минимум пять компонентов, различный вид модели для различных тернарных смесей, применимость метода только для некоторых компонентов газа (метан, этан, пропан, бутан, диоксид углерода и азот).

Методика оценки состава четырехкомпонентной смеси газов предложена в работе [29]. Исследуемый образец рассматривают как псевдогаз, состоящий из метана, пропана, азота и диоксида углерода. Для определения концентраций эффективных компонентов используют значения измеренных физических параметров. Коэффициенты уравнения корреляции, связывающего входные и выходные параметры при фиксированных значениях температуры и давления, получают путем регрессионного анализа массива данных.

Метод пригоден для анализа газовых смесей, содержащих углеводороды до гексана. В качестве входных данных в нем можно использовать различные физические параметры газа, измеряемые доступными приборами. Его недостатки – необходимость расчета компонентного состава эквивалентного псевдогаза (что вносит погрешность в результаты анализа), таблиц значений коэффициентов для различных температур и давлений и отсутствие методики перехода от эквивалентного псевдогаза к реальному природному газу.

В [30] предложен метод, основанный на применении в качестве измерительных приборов емкостных встречно-штыревых электродов для измерения концентрации компонентов газа с последующим расчётом энергетических характеристик. Характеристики каждого емкостного прибора настраивают для определения концентрации определенного

компонента (метан, этан, пропан, бутан, азот, диоксид углерода) с относительной погрешностью менее 1 %. Далее вычисляют теплотворную способность и число Воббе с относительной погрешностью до 0,4 %. Результаты определения компонентного состава реальных газовых смесей подтверждаются с экспериментальными данными хроматографии.

Преимущества данного метода – возможность проводить анализ многокомпонентной газовой смеси с использованием большего количества измерительных приборов. Однако, поскольку принцип измерения для всех компонентов одинаков, может происходить взаимное влияние на результаты.

Комбинированная измерительная система для определения компонентного состава природного газа методом [31] содержит недиспергирующие ИК-приборы, детектор теплопроводности и микроэлектромеханические измерительные приборы для измерения фотоакустических параметров газа. К её преимуществам следует отнести использование измерительных приборов с различным принципом действия, предназначенных для измерения различных параметров газа, что увеличивает селективность результатов, а также возможность пересчитать измеренные величины на давление и температуру в измерительной системе.

Разработан многопараметрический метод компонентного анализа [32], реализованный в системе измерения расхода, состоящей из расходомера Кориолиса, термического измерителя расхода, измерителя плотности и измерителя давления. С её помощью экспериментально определяют массовый расход, плотность, вязкость и теплоемкость газа. С использованием полученных данных и аналитической модели рассчитывают концентрации составляющих его веществ.

У данного метода есть ограничения по числу определяемых компонентов, верификация системы возможна только на бинарных и тернарных смесях. Кроме того, точность определения концентраций (до 1 % для бинарных смесей и до 5 % для тернарных) невелика.

В [33] предложен метод, который используется для определения состава четырехкомпонентного псевдогаза, эквивалентного реальным смесям на основе природного газа, по измерению его физических параметров. Исследуемая смесь рассматривается как псевдогаз, состоящий из эффективного метана, эффективного пропана, эффективного азота и эффективного диоксида углерода. Затем используются значения трех измеренных физических параметров для определения значений концентраций эффективных компонентов по формулам.

$$\begin{cases} X = K_1 C_{CH_4} + K_2 C_{C_3H_8} + K_3 C_{CO_2} + K_4 C_{N_2} \\ Y = K_5 C_{CH_4} + K_6 C_{C_3H_8} + K_7 C_{CO_2} + K_8 C_{N_2} \\ Z = K_9 C_{CH_4} + K_{10} C_{C_3H_8} + K_{11} C_{CO_2} + K_{12} C_{N_2} \\ C_{CH_4} + C_{C_3H_8} + C_{CO_2} + C_{N_2} = 100 \end{cases}, (1.3.2)$$

Где  $X$ ,  $Y$ ,  $Z$  – физические измеряемые параметры,  $K_1 \dots K_{12}$  – коэффициенты модели,  $C_i$  – концентрация  $i$ -того компонента.

Для определения коэффициентов  $K_1 \dots K_{12}$  при фиксированных температуре и давлении используются диапазоны измеряемых величин для известных значений компонентного состава. Затем путем регрессионного анализа определяются сначала коэффициенты  $K_1 \dots K_4$ , где компонентный состав является входом для параметра  $X$ , а параметр  $X$  является входом для параметра  $Y$ . После этого аналогичным образом этот процесс повторяется для получения остальных коэффициентов.

Преимуществами метода являются возможность проведения анализа для газовых смесей, содержащих тяжелые углеводороды до гексана, использование в качестве входных измеряемых параметров различных величин, которые возможно измерять доступными на рынке измерительными приборами.

Недостатками метода являются необходимость расчета компонентного состава модели эквивалентного псевдогаза, что вносит погрешность в результаты анализа, необходимость расчёта таблицы значений коэффициентов для различных температур и давлений, отсутствие методики перехода от эквивалентного псевдогаза обратно к реальному природному газу.

В случае, когда в качестве модели, ставящей в соответствие измеряемым физическим параметрам газа неизвестные концентрации компонентов газа, используется статистическая модель необходимо: выбрать входные измеряемые параметры и выбрать вид и архитектуру используемой модели. Далее приведен ряд аналитических методов, использующих описанную методику.

Основанный на измерении скорости распространения ультразвука в природном газе на двух уровнях давления (5 и 40 бар) метод описан в [26]. Также в методе проводится измерение концентрации диоксида углерода. Согласно результатам полевых испытаний, неопределенность в определении теплотворной способности природного газа составляет 0.3% в зависимости от типа газа. Метод, реализуемый в измерительном приборе [34], основан на использовании трёх стандартных измерительных приборов – измерителя теплопроводности и двух инфракрасных приборов, необходимых для получения молярной доли диоксида углерода и степени поглощения инфракрасного излучения углеводородами. Ощутимыми преимуществами метода являются высокая точность (неопределенность показаний – 0.4%) и малое времени отклика измерительных приборов (меньше 15 секунд).

Преимуществами данных методов являются низкие временные затраты на проведение анализа, использование статистических моделей (в частности нейросетей), которые можно предварительно обучить на расчётных данных для получения высокой точности анализа,

большое количество архитектур моделей и входных измеряемых параметров, которые можно выбрать в зависимости от сложности и целей анализа.

Недостатками данного класса методов является ошибки на неизвестных модели данных, необходимость измерения большого количества параметров для многокомпонентных смесей.

#### **1.4 Системы и приборы контроля качества в газовой промышленности**

Природный газ относится к классу взрывоопасных и легковоспламеняемых веществ, учитывая этот факт на предприятиях газовой промышленности используются газоаналитические приборы для обеспечения безопасности персонала и промышленных объектов [35-42]. С целью обеспечения безопасности объекты газовой промышленности оснащаются системами непрерывного контроля и переносными приборами предельно допустимых концентраций токсичных газов. Основными мировыми лидерами по производству газоаналитической техники являются следующие компании: BW Technologies, Drager, MSA Auer, Testo. Из отечественных производителей лидером рынка является компания «Аналитприбор». Большинство продукции данных компаний предназначено для задач контроля безопасности технологического объекта и не предусматривает определение полного компонентного состава исследуемой газовой смеси, а лишь некоторых токсичных компонентов или групп компонентов. В силу этого данные приборы и системы не могут решать поставленную задачу, следовательно, в работе не рассматриваются.

Централизованная система контроля и анализа газа АСМ 150 FT-IR применяется для детектирования токсичных компонентов в ходе производственного процесса. В данной системе используется описанный выше метод инфракрасной Фурье-спектроскопии. Преимуществами данной системы являются большое количество точек контроля (до 40 измерительных точек могут быть централизованно расположены на одном устройстве), двойное инфракрасное сканирование, уменьшающее количество ложных срабатываний, наличие самодиагностики, которая исключают необходимость калибровки на месте, удобный сенсорный интерфейс. Недостатками данной системы являются описанные выше недостатки метода инфракрасной Фурье-спектроскопии, следовательно, невозможность ее применения для решения поставленной задачи.

Газоанализатор Midas применяется для детектирования различных легковоспламеняющихся и токсичных компонентов газовых смесей для технологических процессов промышленного производства. Преимуществами данной системы являются простота установки, большое

количество обнаруживаемых газовых компонентов (более 35), наличие технологии компенсации температуры, обеспечение мгновенного оповещения о показаниях системы и уровнях тревоги. Недостатками данной системы являются невозможность одновременного определения нескольких компонентов, определение большинства компонентов в миллионных долях, определение для ряда требуемых в рассматриваемой задаче компонентов, например, для метана, нижнего концентрационного предела распространения пламени, ограниченный диапазон для ряда требуемых компонентов, например, 0-2 % для диоксида углерода.

Система газовой сигнализации Dräger X-zone 5500 в сочетании с газоанализаторами Dräger X-am 5000, 5100 или 5600 используется для сигнализации наличия газовых компонентов (максимум шести). Преимуществами данной системы являются отсутствие ежедневной проверки работоспособности и калибровки, возможность организации контроля больших областей путем объединения устройств (до 25 устройств) в единую сеть, поступление газа к газоанализатору со всех сторон, возможность обеспечения непрерывной работы системы до 120 часов. Недостатками данной системы являются ограниченный перечень определяемых компонентов, определение концентрации компонентов в миллионных долях и нижнего концентрационного предела распространения пламени для ряда компонентов.

Многоканальный анализатор Dräger X-am 7000 применяется для одновременного и непрерывного обнаружения до пяти газов. Преимуществами данного прибора являются широкий диапазон датчиков (в детекторе газа можно установить три электрохимических и два инфракрасных, термокаталитических и/или фотоионизационных сенсора в любой комбинации), длительное время работы (до 20 часов полноценной работы), особо прочная конструкция анализатора. Недостатками данного прибора являются ограниченный перечень определяемых компонентов, определение концентрации компонентов в миллионных долях и нижнего концентрационного предела распространения пламени для ряда компонентов.

Многоканальный газоанализатор MSA ALTAIR 5X способен одновременно измерять концентрацию до шести различных газов. Преимуществами данного газоанализатора являются простота использования, долгий срок службы, наличие встроенного фотоионизационного датчика для обнаружения летучих органических веществ. Недостатками данного газоанализатора являются описанные выше ограниченность определяемых компонентов и определение концентрации компонентов в миллионных долях и нижнего концентрационного предела распространения пламени для ряда компонентов.

Анализатор газов для промышленности Testo 350 применяется для промышленного анализа выбросов газа. Преимуществами данного прибора являются простота в управлении, прочная конструкция, возможность управления блоком анализатора и передачи данных измерений в

управляющий модуль. Недостатками данного газоанализатора являются описанные выше ограниченность определяемых компонентов и определение концентрации компонентов в миллионных долях и нижнего концентрационного предела распространения пламени для ряда компонентов.

Переносной многокомпонентный газоанализатор АНКАТ-7664Микро применяется для одновременного контроля дозврывоопасных концентраций горючих газов, предельно допустимых концентраций токсичных газов и необходимого содержания кислорода в воздухе рабочей зоны. Преимуществами данного прибора являются – наличие внутренней вибрирующей сигнализации для рабочих зон с высоким уровнем шума, широкий температурный диапазон, наличие энергонезависимой памяти. Недостатками данного газоанализатора являются описанные выше ограниченность определяемых компонентов и определение концентрации компонентов в  $\text{мг/м}^3$  и нижнего концентрационного предела распространения пламени для ряда компонентов.

Микропроцессорная газоаналитическая система СТМ-30М предназначена для непрерывного автоматического контроля дозврывоопасных концентраций горючих газов и их смесей в рабочей зоне и выдачи сигнализации о превышении установленных пороговых значений. Данная система имеет термохимический принцип действия. Преимуществами данной системы являются широкий температурный диапазон, большое количество контролируемых веществ (более 140), возможность реализации многоканальных систем. Недостатками данной системы описанные выше ограниченность определяемых компонентов и определение нижнего концентрационного предела распространения пламени для ряда компонентов.

На основании вышеизложенного можно сделать вывод о том, что основные методы определения компонентного состава и энергетических параметров природного газа – физико-химические, в частности, газовая хроматография. Их достоинства – высокая точность измерений и большое разнообразие имеющихся на рынке приборов. Однако есть и недостатки, главные из которых – высокие временные затраты на проведение анализа и дороговизна проведения анализа.

Аналитические методы определения компонентного состава и энергетических параметров природного газа лишены этих недостатков.

Необходима разработка системы определения показателей качества природного газа на основе аналитического метода обработки информации для определения характеристик природного газа по измерениям его физических параметров. Предлагается определять компонентный состав модели эквивалентного псевдогаза с использованием корреляционного

анализа и нейросетевых моделей. Измерение физических параметров газа целесообразно осуществлять коммерчески доступными и относительно недорогими приборами. Высокая точность анализа (до третьего класса согласно [106]) может быть достигнута с помощью статистических моделей (нейросетей), что позволит создавать измерительные комплексы с меньшими габаритами, чем хроматографическое оборудование.

### **1.5 Надёжность систем и приборы контроля качества в газовой промышленности**

При проектировании систем газоанализа необходимо учитывать большой срок эксплуатации данного класса целевых систем (в среднем на общепромышленное исполнение изделий средний срок службы не менее 5 лет). Поэтому необходимо учитывать фактор оценки надёжности таких сложных и дорогостоящих систем. Из-за сложности целевых систем, их распределенной структуры и специфики построения необходимы математические, в частности, вероятностные методы оценки таких классов устройств, которые могли бы позволить производить оценку надёжности систем определения компонентного состава и энергетических параметров природного газа на различных этапах проектирования и давать рекомендации при техническом обслуживании и эксплуатации. Надёжность системы определяется расчётом показателей надёжности по картам уровня. Если вероятность безотказной работы системы не соответствует требуемому – изделие пополняется комплектом запасных частей, инструментов и принадлежностей (ЗИП).

Согласно нормативному документу [43] основными параметрами, обеспечивающими надёжность систем газоанализа являются:

- вероятность безотказной работы системы за определённый промежуток времени;
- наработка до отказа;
- продолжительность ремонта (среднее время восстановления работоспособного состояния);
- срок эксплуатации;
- закон распределения вероятности безотказной работы (как правило, у приборов закон экспоненциальный).

Исходя из анализа нормативного документа [43] можно сделать вывод о высоких требованиях к надёжности данного класса целевых систем.

## 1.6 Исследуемые статистические модели

Важным этапом работы метода обработки информации является разработка статистической модели. Исходя из проведенного обзора источников был сделан вывод об исследовании следующих статистических моделей.

### 1.6.1 Многопараметрическая линейная регрессия

Многопараметрическая линейная регрессия может рассматриваться в исследуемой задаче в качестве модели для сравнения. Она может использоваться для получения результата, который будет взят для сравнения точности других моделей с регрессионной.

В случае многопараметрической линейной регрессии величина  $Y$  зависит от нескольких независимых величин  $X_i$  ( $i=1\dots m$ ). Исходные точки находятся в  $m+1$ -мерном пространстве и аппроксимируются  $m$ -мерной гиперплоскостью. Система уравнений для многопараметрической линейной регрессии записывается в виде:

$$\begin{cases} Y_1 = X_{11}\beta_1 + \dots + X_{1m}\beta_m \\ Y_2 = X_{21}\beta_1 + \dots + X_{2m}\beta_m \\ \dots \\ Y_n = X_{n1}\beta_1 + \dots + X_{nm}\beta_m \end{cases}, (1.6.1.1)$$

Данная система уравнений может быть записана в матричной форме с учетом вектора ошибок  $e$ :

$$Y = X\beta + e, (1.6.1.2)$$

Для того чтобы найти оценку параметров линейной регрессии необходимо найти минимум суммы квадратов ошибок, которая в матричной форме записывается следующим образом:

$$\sum_i e_i^2 = e^T e = (Y - X\beta)^T (Y - X\beta), (1.6.1.3)$$

Для нахождения оценки параметров необходимо использовать условие равенства нулю частной производной в точке минимума. Продифференцировав выражение для суммы квадратов ошибок по переменной  $\beta$  и приравняв полученную частную производную к нулю можно получить систему нормальных уравнений для многопараметрической линейной регрессии в матричной форме:

$$(X^T X)\beta = X^T Y, (1.6.1.4)$$

Решением данной системы будет являться оценка параметров многопараметрической регрессии методом наименьших квадратов (МНК), которая выглядит следующим образом:



$$\hat{\beta} = (X^T X)^{-1} X^T Y, \quad (1.6.1.5)$$

Многопараметрическая линейная регрессия тренируется на исходных данных, с расчётом оценок параметров для каждого компонента исследуемой газовой смеси. Затем модель тестируется на данных, не участвовавших в тренировке. Исходя из результатов тестирования рассчитываются точность для модели.

### 1.6.2 Гребневая регрессия

Гребневую регрессию как один из методов понижения размерности применяют в задачах с переизбыточностью данных. В исследуемой задаче это возможно в случае, когда входные параметры коррелируют друг с другом, то есть мультиколлинеарность полностью не устранена проведением корреляционного анализа. Мультиколлинеарность может приводить к неустойчивости оценок коэффициентов регрессии и плохой обусловленности матрицы  $X^T X$ , которая ведет к неустойчивости решения нормального уравнения линейной регрессии. Метод гребневой регрессии заключается во введении дополнительного регуляризующего параметра  $\tau$  в минимизируемый функционал. Применяемая регуляризация позволяет уменьшить число обусловленности матрицы  $X^T X$  и получить более устойчивое решение. При регуляризации параметры регрессионной модели находятся из минимизации функционала  $\beta^*$ :

$$\beta^* = \arg \min(\|Y - X \beta\|^2 + \tau \|\beta\|^2), \quad (1.6.2.1)$$

Решение задачи минимизации находится таким же способом, как и для линейной регрессии и выглядит следующим образом:

$$\beta^* = (X^T X + \tau E)^{-1} X^T Y, \quad (1.6.2.2)$$

Где  $E$  – единичная матрица.

Рассмотрим число обусловленности матрицы  $X^T X + \tau E$ . Числом обусловленности матрицы  $\mu$  называется отношение ее максимального сингулярного числа к минимальному. Для рассматриваемой регуляризованной матрицы оно равно:

$$\mu(X^T X + \tau E) = \frac{\lambda_1 + \tau}{\lambda_n + \tau}, \quad (1.6.2.3)$$

Где  $\lambda_i$  – собственные числа матрицы  $X^T X$ .

Из приведенной выше формулы видно, что увеличение регуляризационного параметра приводит к уменьшению числа обусловленности регуляризационной матрицы. Чем меньше данный параметр, тем меньше будет погрешность решения относительно погрешностей во входных данных. Также увеличение регуляризационного параметра приводит к уменьшению

нормы вектора параметров. Стоит отметить, что метод гребневой регрессии улучшает устойчивость параметров регрессионной модели, но не обращает в ноль ни один из них.

Гребневая регрессия тренируется и тестируется для той же схемы разделения данных, что и многопараметрическая линейная регрессия. Исходя из сущности метода гребневой регрессии можно предположить более высокую точность оценки для данной модели.

### 1.6.3 Регрессия на основе гауссовских процессов

Регрессия на основе гауссовских процессов является непараметрической вероятностной моделью на основе гауссовских процессов. Гауссовский процесс - это случайный процесс, все конечномерные распределения которого являются нормальными. Гауссовский процесс определяется функцией математического ожидания  $m$  и ковариационной функцией  $K$ . Обозначение гауссовского процесса выглядит следующим образом:

$$f \sim GP(m(x), K(x, x')), \quad (1.6.3.1)$$

В модели регрессии на основе гауссовских процессов используются скрытые переменные гауссовского процесса и базисные функции  $H$ , которые преобразуют исходный вектор параметров  $x$  в новый вектор параметров  $H(x)$ . Учитывая, что шумовая составляющая модели представляет собой гауссовский процесс с нулевым математическим ожиданием и ковариационной функцией  $K(x, x')$ , модель регрессии на основе гауссовских процессов может быть представлена следующим образом:

$$Y = H(x)^T \beta + f(x), \quad (1.6.3.2)$$

Затем необходимо получить искомое распределение выходного вектора  $Y$ . Исходя из сущности регрессии на основе гауссовских процессов данное распределение в векторной форме выглядит следующим образом:

$$P(Y | f, X) \sim N(Y | H\beta + f, \sigma^2 E), \quad (1.6.3.3)$$

Где  $E$  – единичная матрица,  $\sigma^2$  - дисперсия ошибки.

Следовательно, для получения прогноза исследуемой моделью необходимо: знать коэффициенты вектора  $\beta$ ; знать дисперсию ошибки  $\sigma^2$ ; иметь возможность оценить ковариационную функцию (зачастую это является сложной задачей из-за наличия так называемых гиперпараметров  $\theta$  – неизвестных параметров, которые могут варьироваться).

Одним из методов оценки необходимых параметров  $\beta$ ,  $\sigma^2$  и  $\theta$  является нахождение максимума следующего функционала:

$$\hat{\beta}, \hat{\sigma}^2, \hat{\theta} = \arg \max \log P(Y | X, \beta, \sigma^2, \theta), \quad (1.6.3.4)$$

Сначала получают оценку параметров коэффициентов  $\beta$  для заданных значений  $\sigma^2$  и  $\theta$  по формуле:

$$\hat{\beta}(\sigma^2, \theta) = [H^T [K(X, X | \theta) + \sigma^2 E]^{-1} H]^{-1} H^T [K(X, X | \theta) + \sigma^2 E]^{-1} Y, \quad (1.6.3.5)$$

Затем представленный выше функционал максимизируется по  $\sigma^2$  и  $\theta$  для получения их оценок.

Регрессия на основе гауссовских процессов тренируется и тестируется для той же схемы разделения данных, что и две предыдущие рассматриваемые модели. Исходя из сущности метода регрессии на основе гауссовских процессов можно предположить более высокие временные затраты для данной модели.

#### 1.6.4 Модель на основе метода опорных векторов

Модель на основе метода опорных векторов (support vector machine – SVM). Это набор схожих алгоритмов обучения с учителем, использующихся для задач классификации и регрессионного анализа. Основная идея метода – перевод исходных векторов в пространство более высокой размерности и поиск разделяющей гиперплоскости с максимальным зазором в этом пространстве. Данная модель не была выбрана для анализа по причине наличия существенных недостатков, в частности сложной интерпретации параметров модели и применения в основном для решения задач классификации с двумя классами.

#### 1.6.5 Нейросетевая модель (многослойный перцептрон)

В качестве примера нейросетевой модели для проведения сравнительного анализа рассматривалась трехслойная сеть (многослойный перцептрон), включающая в себя три нейрона во входном слое – по числу компонент входного вектора, одиннадцать нейронов во втором слое и четыре нейрона в выходном слое – по числу компонент выходного вектора. Входной слой представляет собой вектор  $X = \{x_0 \ x_1 \ x_2 \ x_3\}$ . Нейроны каждого следующего слоя связаны с нейронами предыдущего слоя, причем каждый входной сигнал имеет определенный вес, который в данном случае одинаков для всех входных нейронов в силу равной важности всех входных величин. У каждого нейрона есть функция активации, аргументом которой является входной сигнал нейрона. У нейронов скрытого слоя функция активации сигмоидальная в виде гиперболического тангенса, у нейронов выходного слоя – линейная.

Архитектура используемой нейросетевой модели показана на рисунке 1.5.1. Количество нейронов во входном слое  $n = 3$  для случая, когда в векторе входных параметров присутствуют концентрация диоксида углерода, скорость звука и теплопроводность. Количество нейронов в скрытом слое  $k = 11$  для данной модели и выбрано в соответствии с анализом различных моделей. Количество нейронов в выходном слое  $m = 4$  для случая пятикомпонентной газовой смеси.  $W_i$  и  $b_i$  – весовые коэффициенты и коэффициенты смещения для скрытого слоя,  $W_j$  и  $b_j$  – для выходного слоя.

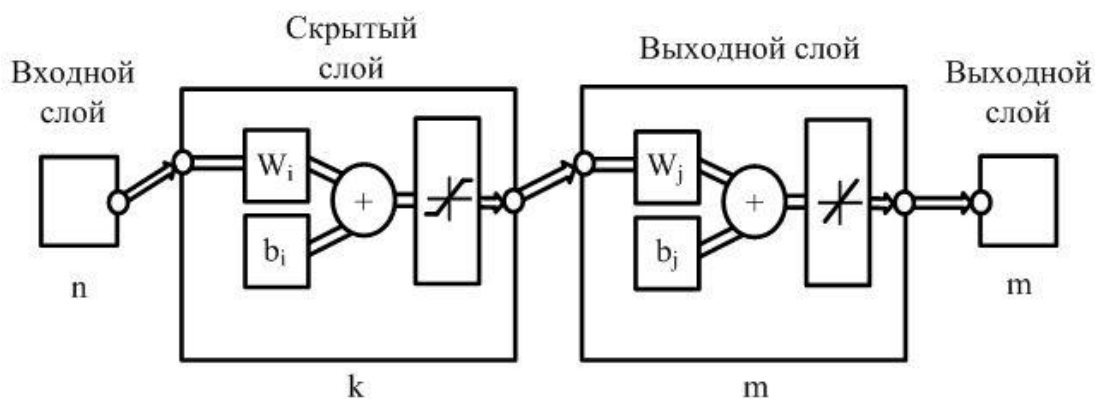


Рисунок. 1.5.1 — Архитектура рассматриваемой нейросетевой модели (многослойный перцептрон)

Исходя из анализа архитектуры нейронной сети можно сделать вывод о возможном существенном повышении точности работы модели.

### 1.6.6 Рекуррентная нейронная сеть

Рекуррентные нейронные сети (РНС) - класс нейронных сетей, которые могут использовать свою внутреннюю память при обработке входных данных. Функционирование данного класса нейросетей основано на использовании предыдущих состояний сети для вычисления текущего. Рекуррентную сеть можно рассматривать, как несколько копий одной и той же сети, каждая из которых передает информацию последующей копии. В данный момент существует большое количество архитектур рекуррентных нейронных сетей. Учитывая вычислительные сложности, возникающие при разработке данного класса нейронных сетей, в начале предложено рассмотреть простую модель рекуррентной нейронной сети. В такой сети скрытые элементы имеют связи, направленные обратно во входной слой. Это позволяет учитывать предыдущее состояние сети при обучении. Математически процесс сохранения

информации о предыдущем шаге обучения выглядит следующим образом: на каждом  $i$ -том шаге обучения выходное значение скрытого слоя РНС  $h_i$  вычисляется с учетом выходного значения скрытого слоя на предыдущем шаге  $h_{i-1}$ :

$$h_i = f(W_h X_i + U_h h_{i-1} + b_{h0}), \quad (1.6.6.1)$$

Где  $W_h$ ,  $U_h$ ,  $b_{h0}$  – параметры скрытого слоя РНС.

Выходное значение на  $i$ -том шаге обучения вычисляется следующим образом:

$$y_i = W_{out} h_i + b_{out0}, \quad (1.6.6.2)$$

Где  $W_{out}$ ,  $b_{out0}$  – параметры выходного слоя РНС.

Архитектура рассматриваемой РНС показана на рисунке 1.6.1. Количество нейронов во входном ( $n$ ), скрытом ( $k$ ) и выходном ( $m$ ) слоях, функции активации для слоев (для скрытого слоя - сигмоидальная в виде гиперболического тангенса, для выходного слоя – линейная), алгоритм обучения (Левенберга-Марквардта) были выбраны такими же, как и для нейросетевой модели в виде многослойного перцептрона.

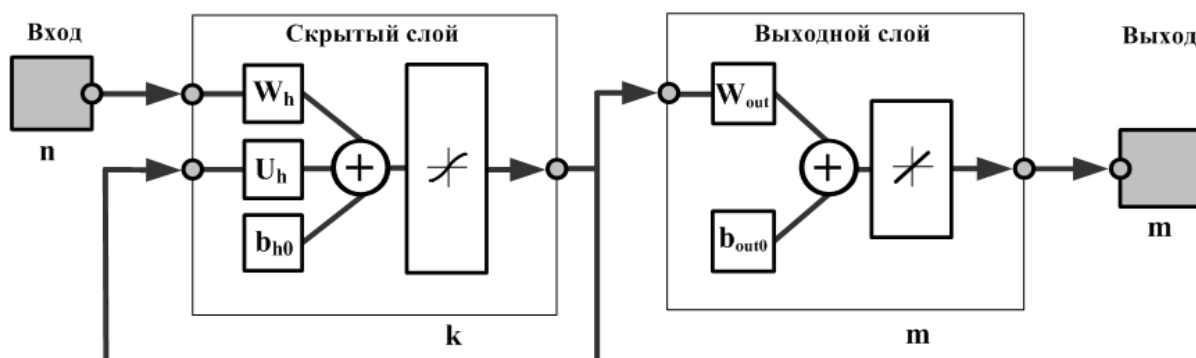


Рисунок 1.6.1 — Архитектура рекуррентной нейросетевой модели

Учитывая более сложную архитектуру РНС по сравнению с другими моделями, предполагается увеличение точности определения компонентного состава эквивалентного псевдогаза.

### 1.6.7 Рекуррентная нейронная сеть с долгой краткосрочной памятью

Для проверки идеи о том, что усложнение архитектуры нейронной сети в рамках одного вида сетей (например, РНС) не приводит к значительному улучшению характеристик определения компонентного состава природного газа, предложено подвергнуть сравнительному анализу рекуррентную нейронную сеть с долгой краткосрочной памятью. Долгая краткосрочная

память (Long short-term memory; LSTM) – особая разновидность архитектуры рекуррентных нейронных сетей, способная к обучению долговременным зависимостям. В нейросетях, имеющих подобную архитектуру, применяется более сложный метод вычисления как выходного значения скрытого слоя, так и выходного значения сети в целом. Этот метод заключается в использовании так называемых вентилях. Под вентиляем понимается специальный блок в LSTM архитектуре, реализованный в виде логистической функции и операции поэлементного умножения (произведения Адамара). Слой логистической функции показывает какую долю информации, поступающей от определенного блока, следует пропустить дальше по сети. Данный слой возвращает числа в диапазоне от нуля (информация полностью не проходит дальше по структуре сети) до единицы (информация полностью проходит дальше по структуре сети). В традиционной архитектуре LSTM предусмотрено три подобных блока: вентиль забывания (или вентиль остаточной памяти), входной вентиль (или вентиль добавления) и выходной вентиль (или вентиль фокусировки). В качестве логистической функции для вентилях зачастую используется сигмоидальная функция.

Более подробно рассмотрим функционирование LSTM блока. На  $i$ -том шаге обучения модели в LSTM блок поступают вектор входных данных  $X_i$ , вектор долговременной памяти  $LTM_{i-1}$  (вектор состояния блока на  $(i-1)$ -ом шаге) и вектор рабочей памяти  $WM_{i-1}$  (выходной вектор блока на  $(i-1)$ -ом шаге). При расчете вектора долговременной памяти используются вентиль забывания и входной вентиль. Сначала используется вентиль забывания для определения доли долговременной памяти с предыдущего шага, которую следует продолжать использовать на текущем шаге. Вентиль забывания рассчитывается по формуле:

$$forget_i = \sigma(W_f X_i + U_f WM_{i-1} + b_{f0}), \quad (1. 6.7.1)$$

Где  $\sigma$  - сигмоидальная функция вентиля забывания,  $W_f$ ,  $U_f$ ,  $b_{f0}$  - параметры вентиля забывания LSTM блока.

Далее определяется доля информации из вектора входных данных, которая может быть добавлена в долговременную память:

$$LTM'_i = th(W' X_i + U' WM_{i-1} + b'_{0}), \quad (1. 6.7.2)$$

Где  $th()$  – функция активации в виде гиперболического тангенса,  $W'$ ,  $U'$ ,  $b'_{0}$  - параметры LSTM блока.

Для того чтобы рассчитать какая доля из предыдущего шага является действительно полезной и будет добавлена в долговременную память рассчитывается входной вентиль:

$$input_i = \sigma(W_{input} X_i + U_{input} WM_{i-1} + b_{input0}), \quad (1. 6.7.3)$$

Где  $\sigma$  - сигмоидальная функция входного вентиля,  $W_{input}$ ,  $U_{input}$ ,  $b_{input0}$  - параметры входного вентиля LSTM блока.

Учитывая проделанные операции, т.е. исключив ненужную информацию с предыдущего шага и добавив полезную информацию с текущего шага, рассчитываем вектор обновленной долговременной памяти:

$$LTM_i = forget_i \circ LTM_{i-1} + input_i \circ LTM'_i, \quad (1.6.7.4)$$

Где  $\circ$  - операция поэлементного умножения.

Далее необходимо рассчитать вектор рабочей памяти. При расчете вектора рабочей памяти используется выходной вентиль. Чтобы рассчитать вектор рабочей памяти необходимо вычислить какую долю информации из долговременной памяти нужно использовать на текущем шаге обучения. Выходной вентиль рассчитывается следующим образом:

$$output_i = \sigma(W_{output} X_i + U_{output} WM_{i-1} + b_{output0}), \quad (1.6.7.5)$$

Где  $\sigma$  - сигмоидальная функция выходного вентиля,  $W_{output}$ ,  $U_{output}$ ,  $b_{output0}$  - параметры выходного вентиля LSTM блока.

Затем вычисляется вектор рабочей памяти на текущем шаге:

$$WM_i = output_i \circ th(LTM_i), \quad (1.6.7.6)$$

Где  $th()$  - функция активации в виде гиперболического тангенса,  $\circ$  - операция поэлементного умножения.

Рассчитанные векторы долговременной памяти  $LTM_i$  и рабочей памяти  $WM_i$  поступят на LSTM блок на следующем шаге обучения. Архитектура LSTM блока показана на рис. 1.7.1. Общая архитектура РНС с долгой краткосрочной памятью выглядит так же, как и для простой РНС с учетом LSTM блока в скрытом слое.

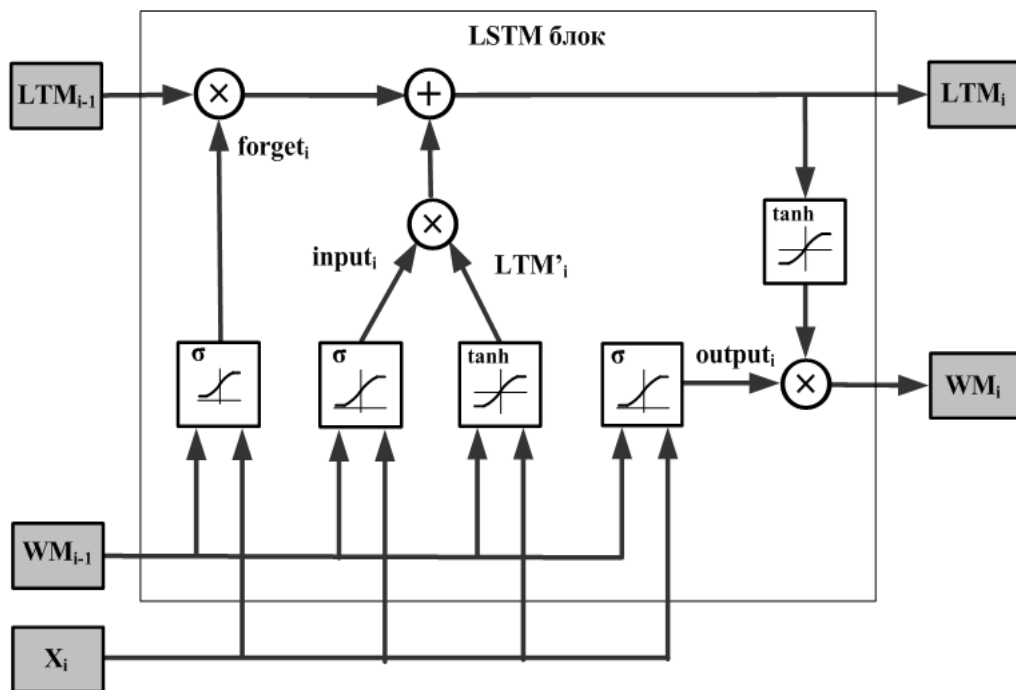


Рисунок 1.7.1 — Архитектура блока долгой краткосрочной памяти (LSTM)

Выходное значение на  $i$ -том шаге обучения для РНС с LSTM блоком вычисляется по тому же принципу, что и для простой РНС:

$$y_i = W_{out} W M_i + b_{out0}, \quad (1.6.7.7)$$

Где  $W_{out}$ ,  $b_{out0}$  – параметры выходного слоя РНС с LSTM блоком.

Учитывая более сложную архитектуру РНС с LSTM блоком по сравнению с простой РНС, но при этом схожий принцип функционирования нейросетевой модели, предполагается увеличение временных затрат на обучение модели и сохранение точности определения компонентного состава природного газа.

### 1.6.8 Рекуррентная нейронная сеть с управляемым рекуррентным блоком

Управляемые рекуррентные блоки (GRU) – это специализированный вентиляльный механизм для рекуррентных нейронных сетей. Структура управляемого рекуррентного блока показана на рисунке 1.8.1. Структура нейронной сети с этим блоком аналогична ранее представленной простой рекуррентной сети.

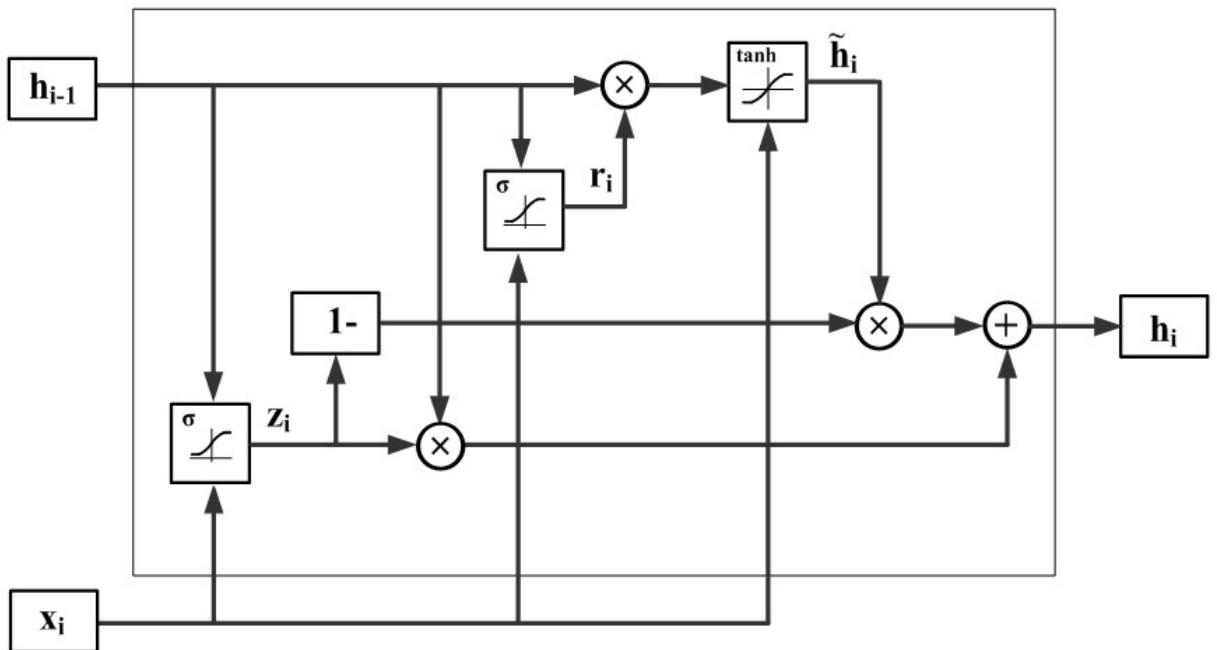


Рисунок 1.8.1 — Архитектура управляемого рекуррентного блока

Основные различия между нейронными сетями с управляемым рекуррентным блоком и нейронными сетями с LSTM заключаются в количестве вентилялей и принципам их функционирования. В отличие от нейронных сетей с GRU, нейронные сети с LSTM имеют три



вентиля (входной, забывания, выходной) и поддерживают состояние ячейки внутренней памяти, что делает их более гибкими, но менее эффективными с точки зрения памяти и времени. Однако, поскольку оба этих типов сетей отлично справляются с проблемой исчезающего градиента, необходимой для эффективного отслеживания долгосрочных зависимостей. При выборе между этими двумя вариантами рекомендуется сначала использовать нейронные сети с LSTM, а затем использовать нейронные сети с GRU. Если нет значительных различий между производительностью этих двух типов RNN, то используются более простые и эффективные нейронные сети с GRU.

Принцип работы управляемого рекуррентного блока заключается в следующем. Когда вектор  $x_i$  подается в блок, этот вектор умножается на вектор весов  $W_z$  входного вентиля. Вектор предыдущего состояния скрытого слоя  $h_{i-1}$ , в котором хранится информация о предыдущих шагах  $i-1$ , умножается на вектор весов  $U_z$  входного вентиля. Затем два произведения складываются и направляются в сигмоидальную функцию активации  $\sigma$ . В результате выходное значение входного вентиля  $z_i$  вычисляется как:

$$z_i = \sigma(W_z x_i + U_z h_{i-1}), \quad (1.6.8.1)$$

Формула для вычисления выходного значения вентиля забывания  $r_i$  схожа с формулой для входного вентиля за исключением векторов весов  $W_r$  и  $U_r$ .

$$r_i = \sigma(W_r x_i + U_r h_{i-1}), \quad (1.6.8.2)$$

Значение вентиля забывания используется, чтобы вычислить текущее значение контейнера памяти. Сначала соответствующие векторы весов  $W$  и  $U$  умножают на входной вектор и предыдущий вектор состояния скрытого слоя соответственно. Затем вычисляется произведение Адамара значения фильтра забывания и значения  $U h_{i-1}$ . Это необходимо для определения объема информации из предыдущих шагов, который мы не рассматриваем. Затем два ранее полученных значения суммируются и отправляются на функцию активации нелинейного гиперболического тангенса ( $\tanh$ ), чтобы получить значение текущего значения контейнера памяти  $H_i$ :

$$H_i = \tanh(W x_i + r_i U_r h_{i-1}), \quad (1.6.8.3)$$

Если значение вентиля забывания близко к единице, то контейнер памяти полностью сохраняет информацию из предыдущего скрытого состояния. Если значение вентиля сброса близко к нулю, то контейнер памяти не принимает во внимание предыдущее скрытое состояние.

На завершающем этапе работы блока вычисляется вектор  $h_i$ ; вектор содержит информацию о текущем состоянии скрытого слоя и передается на следующий уровень нейронной сети. Для этой процедуры используется входной вентиль; фильтр определяет,

сколько информации взять из текущего контейнера памяти и из предыдущего состояния скрытого слоя. Для этого вычисляются произведение Адамара значения входного вентиля и вектора предыдущего состояния скрытого слоя, а также произведение Адамара значения текущего контейнера памяти и значения  $(1 - z_i)$ . Наконец, результаты двух произведений суммируются, чтобы получить выходное значение блока:

$$h_i = z_i h_{i-1} + (1 - z_i) H_i, \quad (1.6.8.4)$$

Если значение выходного вентиля близко к единице, то текущий контейнер памяти не учитывается, и выход блока равен предыдущему значению скрытого слоя. Если значение выходного вентиля близко к нулю, то предыдущее состояние скрытого слоя не учитывается, и вывод блока зависит только от текущего контейнера памяти. Основным преимуществом управляемого рекуррентного блока является возможность хранить и фильтровать информацию с помощью вентилях. Такая система не имеет исчезающих градиентов, поскольку модель хранит соответствующую информацию и передает ее следующим временным шагам сети.

Использование данной модели возможно приведет к увеличению временных затрат на проведение анализа.

### Выводы по первой главе:

В результате проведённого исследования достоинств и недостатков существующих методов и автоматизированных информационных систем определения показателей качества газа можно сделать следующие выводы:

1. В настоящее время в промышленности преобладают физико-химические методы анализа качества газа и системы на их основе. Основными методами являются методы газовой хроматографии и калориметрии для задач определения энергетических характеристик природного газа.

2. Физико-химические методы анализа компонентного состава и энергетических параметров газа обладают рядом существенных недостатков, в частности дороговизна и крупные габариты используемого оборудования, большие временные затраты на проведение единичного анализа.

3. В настоящее время разрабатываются альтернативные аналитические методы анализа качества газа и системы на их основе, но широкого распространения они пока не получили.

4. Характерными особенностями систем на основе аналитических методов, определяющими актуальность их разработки, являются низкие временные затраты на проведение анализа, использование моделей, в частности статистических, для получения необходимых концентраций компонентов, использование относительно недорогих и доступных на рынке измерительных приборов.

Разработанная архитектура АИС анализа качества газа обладает следующими свойствами:

1. Определение компонентного состава модели эквивалентного псевдогаза и энергетических параметров природного газа с низкими временными затратами.

2. Использование статистических моделей, в частности нейросетей, для нахождения неизвестных концентраций компонентов модели эквивалентного псевдогаза, зная измеренные свойства газа.

3. Измерение физических параметров газа коммерчески доступными и относительно недорогими измерительными приборами.

Основными преимуществами АИС является:

1. Проведение анализа с низкими временными затратами – до нескольких секунд (для портативных газовых хроматографов анализ занимает десятки минут).

2. Высокая точность проведения анализа за счет применения статистических моделей (в частности, нейросетей) – до третьего класса ( $\pm 0.5$  МДж/м<sup>3</sup>) определения энергетических параметров газа согласно рассматриваемому нормативному документу.

3. Снижение стоимости измерительного комплекса за счет использования доступных на рынке измерительных приборов до сотен тысяч рублей (стоимость высокоточного промышленного хроматографа составляет десятки миллионов рублей).

4. Меньшие габариты измерительного комплекса по сравнению с традиционным хроматографом до 15 x 10 x 10 см и 3 кг (для хроматографа Varian CP4900 - размеры базового блока - 28 x 15 x 30 см, минимальный вес - 5.2 кг, для транспортного блока – 16 кг).

## Глава 2. Метод обработки информации для анализа энергетических параметров природного газа

В связи с модернизацией нефтегазовой промышленности, а также со сложностью решения производственных задач традиционными методами в данной отрасли существует большое число примеров применения нейросетей, в частности, для прогнозирования работы скважин [44, 45], при обработке экспериментальных данных процесса коксования [46], прогнозирования эффективности технологических процессов [47 - 49], оптимизации процесса добычи нефти [50], прогнозирования вязкости природного газа [51], контроля давления в газораспределительной сети [52], прогнозирования содержания углерода в органических сланцах с помощью каротажных диаграмм [53], оценки растворимости кислых газов [54], определения реологических свойств бурового раствора [55], прогнозирования вязкости добываемой нефти [56], а также в большом количестве других направлений [57, 58]. Стоит отметить, что использование ИНС в газовой промышленности не ограничивается задачами прогнозирования и используется, в том числе в задачах имитационного моделирования, в частности для моделирования механической скорости бурения морских газовых месторождений [59], оценки коэффициентов сжимаемости природного газа [60], оценки чистоты триэтиленгликоля в установках осушки природного газа [61].

Рассмотрим методы, которые можно использовать для класса целевых систем определения компонентного состава газа. Аналитический метод анализа состоит в определении компонентного состава модели эквивалентного псевдогаза по измерениям физических параметров газа разработанной нейросетевой моделью. Метод основан на статистических и корреляционных зависимостях между физическими параметрами газа, которые возможно измерить коммерчески доступными и относительно недорогими измерительными приборами, и концентрациями компонентов, входящих в рассматриваемую газовую смесь. В реализации метода отсутствуют химические процессы, которые присущи методам на основе физико-химических методов анализа и лимитируют их применение. С применением данного метода возможно определение концентрации многокомпонентных смесей, что отличает его от используемых в задачах контроля безопасности технологических процессов. По определяемому компонентному составу псевдогаза возможно в дальнейшем рассчитать требуемые энергетические параметры газа, что можно считать преимуществом по сравнению с аналитическими методами непосредственного определения энергетической характеристики

газа. Пример формул для нахождения показателей качества природного газа на основе измерения физических свойств приведен на рис.2.1 [28].

$$\begin{cases} A_1(\lambda_{293}) = \alpha_1 \lambda_{293} + \beta_1, \\ B_1(\lambda_{293}) = \alpha'_1 \lambda_{293} + \beta'_1, \\ A_2(\lambda_{343}) = \alpha'_2 \lambda_{343}^2 + \beta_2 \lambda_{343} + \gamma_2, \\ B_2(\lambda_{343}) = \alpha'_2 \lambda_{343}^2 + \beta'_2 \lambda_{343} + \gamma'_2, \end{cases} \quad (1)$$

Рисунок 2.1 — Пример формул для нахождения показателей качества природного газа на основе измерения физических свойств

Общая схема разработанного метода приведена на рисунке 2.2. Под NR на рисунке понимается специализированной программное обеспечение NIST REFPROP.

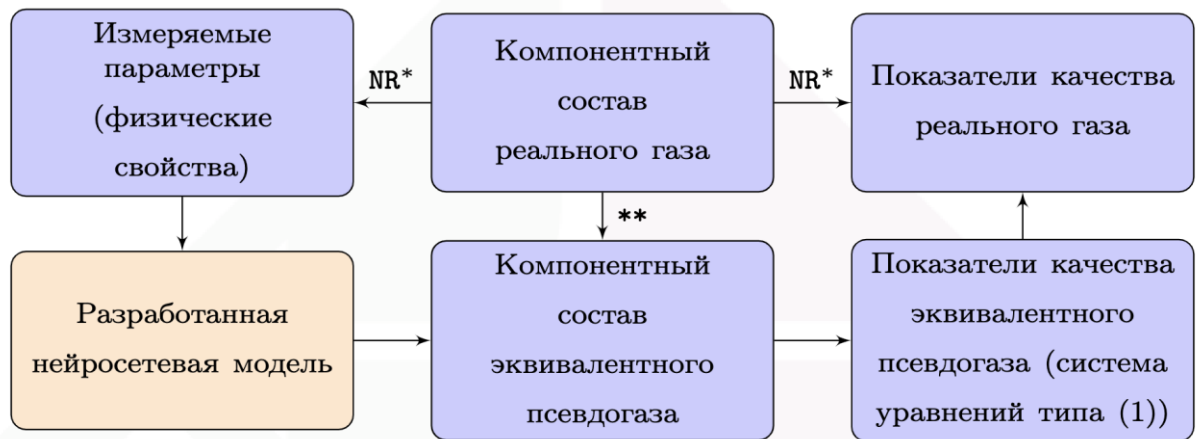


Рисунок 2.2 — Схема разработанного метода обработки информации для анализа показателей качества газа

Разработанный метод состоит из двух основных этапов. В первом этапе, изображенном на рисунке 2.3, разработанная нейросетевая модель определяет компонентный состав эквивалентного псевдогаза. Во втором этапе, изображенном на рисунке 2.4, по определенному в предыдущем этапе компонентному составу псевдогаза рассчитываются требуемые энергетические параметры газа. На рисунке  $E_1$ ,  $E_2$  – погрешности модели,  $E_{1\max}$ ,  $E_{2\max}$  – максимальные допустимые погрешности модели.

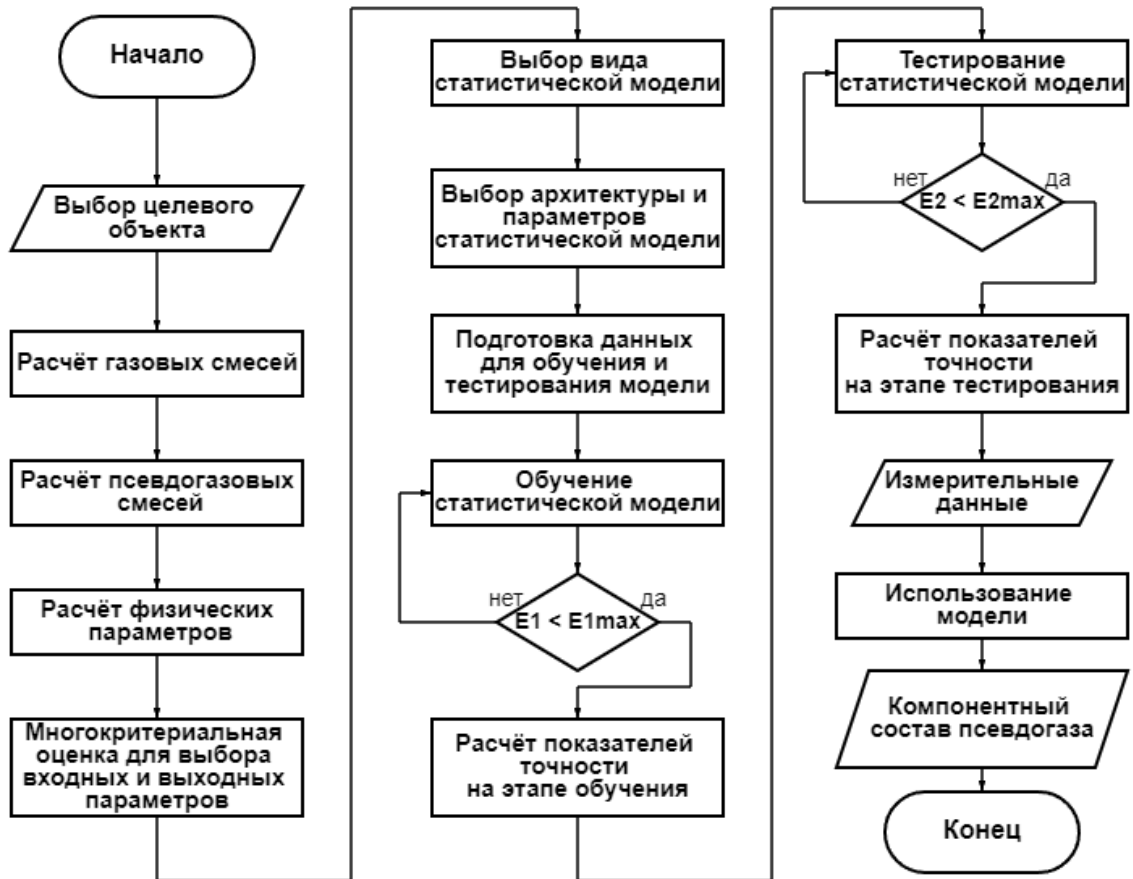


Рисунок 2.3 — Структура этапа определения компонентного состава эквивалентного псевдогаза

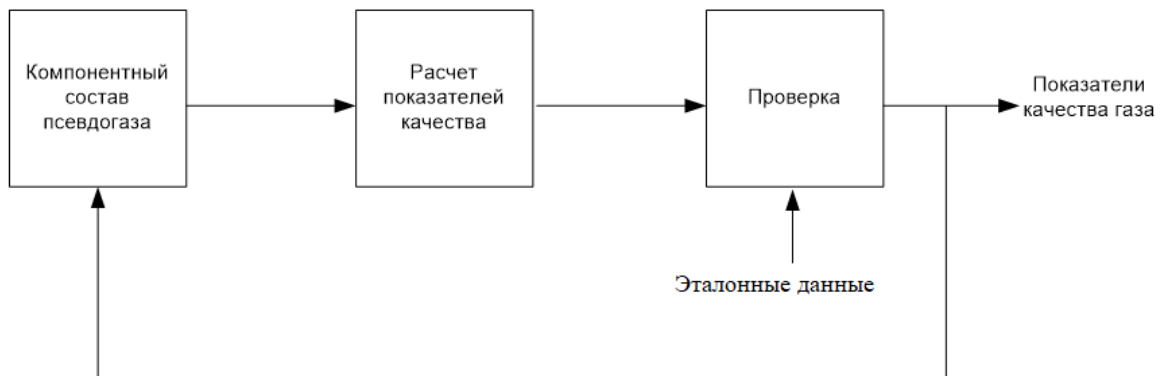


Рисунок 2.4 — Структура этапа определения энергетических параметров газа

Первый этап исследуемого метода состоит из подсистем (блоков), выполняющих следующие функции:

1. Моделирование исходных газовых смесей (Блок “Расчёт газовых смесей”). Обоснование выбора объекта, к которому будет применяться исследуемый метод. Согласно

действующим российским и международным стандартам моделируются газовые смеси, путём расчёта их компонентного состава.

2. *Применение алгоритма перехода от рассматриваемой газовой смеси к эквивалентной псевдогазовой смеси (Блок “Расчёт псевдогазовых смесей”).* Определение компонентного состава природного газа (который является многокомпонентной смесью) по измеряемым физическим параметрам является задачей многопараметрической аппроксимации. В ходе предварительного исследования не удалось найти удовлетворяющее решение задачи аппроксимации полного компонентного состава природного газа по выбранным параметрам. Одним из способов упрощения поиска решения такой задачи является уменьшение размерности выходных параметров функции аппроксимации. Существуют алгоритмы перехода от природного газа к эквивалентному псевдогазу с меньшим количеством компонентов, но со свойствами, которые соответствуют свойствам изначального природного газа (в частности, такими свойствами являются скорость звука, теплопроводность, относительная плотность, число Воббе, теплотворная способность и др.). Согласно алгоритмам, предложенным в работах Р. Р. Тёрстона, К. Лубара, К. Рахмуни, О. Ле Корре, М. Тазероута [28, 29, 125], природный газ может быть описан эквивалентным пятикомпонентным псевдогазом, состоящим из углеводородов (эффективных метана, этана и пропана), эффективных азота и диоксида углерода. Содержание углеводородов в таком газе не соответствует содержанию в изначальном природном газе, а содержание азота и диоксида углерода - такое же. Предварительные расчёты показали, что уменьшение количества целевых параметров до пяти не позволит достичь желаемой точности аппроксимации по выбранным входным параметрам. Поэтому был использован переход от природного газа к четырёхкомпонентному псевдогазу. Алгоритм перехода к эквивалентному псевдогазу был подтвержден как на результатах имитационного моделирования, которые заключались в расчете требуемых физических параметров для исходных и псевдогазовых смесей с последующим сравнением данных параметров, так и на результатах проведенных экспериментов [84]. В ходе экспериментов с помощью газосмесительной станции готовились определенные газовые смеси и соответствующие им псевдогазовые смеси, затем измерялись физические параметры смесей [84]. При обработке результатов эксперимента для всех исследованных смесей максимальное относительное отклонение составило не больше 0.24% по скорости звука и 1.51% по теплопроводности для четырёхкомпонентного псевдогаза и 0.21% по скорости звука и 1.05% по теплопроводности для пятикомпонентного псевдогаза. Результаты проведенных исследований позволяют сделать вывод об адекватности алгоритма в целом и корректности применения данного алгоритма в разработанном методе для упрощения рассматриваемого объекта исследования.



3. *Моделирование параметров для исходных газовых смесей и эквивалентных им псевдогазовых смесей (Блок “Расчёт физических параметров”)*. В программном комплексе NIST REFPROP рассчитываются требуемые физические параметры и энергетические характеристики как для исходных газовых, так и для эквивалентных им псевдогазовых смесей.

4. *Обоснование выбора измеряемых (входных) физических параметров и выходных параметров для метода (Блок “Корреляционный анализ входных и выходных параметров”)*.

Для определения взаимосвязи параметров и компонентного состава природного газа проводился корреляционный анализ физических параметров и компонентного состава смоделированной выборки природного газа различного компонентного состава. По рассчитанным коэффициентам корреляции Пирсона для смоделированной выборки делался вывод о целесообразности выбора входного параметра. В случае, если параметр имел высокую корреляцию (значение коэффициента корреляции в диапазоне 0,7 – 1 по модулю) с определёнными компонентами газа и при этом слабую корреляцию (0 – 0,3 по модулю) с другими входными параметрами, то данный параметр добавлялся в набор входных параметров модели. Описанный подход предлагается модифицировать с применением методов многокритериальной оценки. Первым шагом предлагаемого алгоритма является выбор критериев, по которым будет осуществляться оценка входных параметров для модели. Выбранные критерии делятся на три группы, первая из которых – наличие доступной технологии для измерения параметра (0 в случае отсутствия, 1 в случае наличия), высокая корреляция с выходными параметрами модели (компонентным составом) и низкая корреляция с другими входными физическим параметрами газа. Вторая группа включает в себя три критерия: корреляции с основными компонентами эквивалентного псевдогаза – метаном, пропаном и азотом. Приведённые критерии являются неравнозначными. Наиболее важен критерий наличия доступной технологии для измерения параметра. Вторым является критерий по высокой корреляции с выходными параметрами модели. Критерии по корреляции выражаются в виде коэффициентов корреляции Пирсона. Наименее важным можно считать критерий слабой корреляции между входными параметрами, который необходим в основном для устранения возможной мультиколлинеарности входных параметров. Для формирования оптимального набора входных физических параметров природного газа предлагается использовать метод анализа иерархий. В результате проведённой многокритериальной оценки с применением метода анализа иерархий и компромиссного программирования в качестве входных величин для нейросетевой модели были выбраны скорость звука, теплопроводность, концентрация диоксида углерода. Результаты проведённой многокритериальной оценки

входных параметров подтверждаются результатами нейросетевого анализа, проведённого на различных наборах входных параметров.

5. *Разработка статистической модели для определения компонентного состава по измеряемым физическим параметрам.* Данный этап включает в себя ряд последовательных задач, которые необходимо решить для разработки необходимой модели.

5.1. Выбор статистической модели (Блок “Выбор вида статистической модели”). На этом этапе производился сравнительный анализ различных статистических моделей (многопараметрическая линейная регрессия, гребневая регрессия, модель регрессии на основе гауссовских процессов, нейросетевая модель (многослойный перцептрон)). В результате сравнительного анализа в качестве основной статистической модели для решения поставленной задачи была выбрана нейросетевая модель.

5.2. Выбор архитектуры модели (Блок “Выбор архитектуры и параметров статистической модели”). На данном этапе рассматривались различные архитектуры нейросетевых моделей (нейросетевая модель (многослойный перцептрон), простая рекуррентная нейросетевая модель, рекуррентная нейронная сеть с долгой краткосрочной памятью, рекуррентная нейронная сеть с управляемым рекуррентным блоком). В результате анализа в качестве архитектуры нейросетевой модели для решения поставленной задачи была выбрана простая рекуррентная нейронная сеть с одним скрытым слоем.

5.3. Выбор параметров модели (Блок “Выбор архитектуры и параметров статистической модели”). На данном этапе рассматривались нейросетевые модели с различным значением внутренних параметров, таких как количество скрытых слоев, вид функции активации скрытых и выходного слоя, количество нейронов в скрытых слоях. В результате анализа была выбрана модель со следующими параметрами: 1 скрытый слой, 3 нейрона во входном слое, 11 нейронов в скрытом слое, 3 нейрона в выходном слое, сигмоидальная функция активации в виде гиперболического тангенса в скрытом слое, линейная функция активации в выходном слое.

5.4. Обучение модели (Блок “Обучение статистической модели”). Данный этап заключается в обучении разработанной нейросетевой модели на подготовленной тренировочной выборке данных.

5.4.1. Формирование тренировочной выборки газовых смесей для нейросетевой модели (Блок “Подготовка данных для обучения и тестирования модели”). Разработанная нейросетевая модель тренируется на расчётных данных. Это сделано с целью исключения погрешностей, возникающих при обучении модели на экспериментальных данных. Согласно существующим нормативным документам в газовой промышленности формируются диапазоны по каждому компоненту. Моделирование производилось с учётом определённых допустимых диапазонов

молярных долей компонентов путем перебора всех возможных комбинаций компонентов. Молярная доля метана рассчитывалась как балансная доля путём вычитания из 100% суммы молярных долей остальных компонентов природного газа. Расчёт физико-химических параметров для смоделированных смесей производился с помощью прикладной программы NIST REFPROP по действующим международным промышленным стандартам для стандартных условий по температуре и давлению. Расчётные физические параметры, которые являются входными для модели, были округлены до определенных значащих цифр для имитации ограничения проведения измерения реальными измерительными приборами. Также данные подвергались ряду операций для улучшения качества обучения модели, в частности кросс-валидации и нормализации.

5.4.2. Выбор алгоритма обучения (Блок “Подготовка данных для обучения и тестирования модели”). В качестве обучающего алгоритма выбран алгоритм Левенберга – Марквардта. Данный алгоритм используется для оптимизации параметров нелинейных регрессионных моделей. Отметим, что в описываемом алгоритме критерием оптимизации является среднеквадратичная ошибка модели на обучающей выборке. Основная идея алгоритма состоит в том, чтобы достичь искомого локального оптимума путем приближения к нему заданных начальных значений параметров. Алгоритм применялся на большой выборке газовых смесей для обеспечения высоких показателей обучения. Результирующая выборка составила около 1.5 миллиона возможных смесей природного газа.

5.4.3. Выбор критериев окончания обучения (Блок “Подготовка данных для обучения и тестирования модели”). Критериями для окончания обучения являлись минимальное значение отклонения, то есть минимальная сумма квадратичных отклонений выходов сети от истинных значений, при которой обучение будет считаться законченным. Также при обучении модели одним из критериев окончания обучения могло быть выбрано максимальное количество циклов обучения, но выбор такого критерия приводит к неэффективному увеличению времени обучения. Стоит отметить, что модель необходимо переобучать только в случае наличия ошибок в работе с реальными данными, в других случаях модель проходит обучение на расчётных и экспериментальных данных один раз. Время обучения для рассматриваемых моделей составляет около двух часов.

5.5. Оценка точности работы разработанной нейросетевой модели (Блок “Проверка точности”). Для оценки точности работы нейросетевой модели рассчитывались следующие критерии точности: максимальное абсолютное отклонение (МАО), среднее абсолютное отклонение (САО), максимальное относительное отклонение (МОО), среднее относительное отклонение (СОО), среднеквадратическое отклонение (СКО), коэффициент детерминации (КД).

По этим характеристикам определения концентрации каждого компонента псевдогазовой смеси делался вывод об применимости разработанной модели или необходимости переобучения модели.

5.6. Тестирование разработанной нейросетевой модели (Блок “Тестирование статистической модели”). Данный этап заключался в тестировании разработанной нейросетевой модели на подготовленной тестовой выборке данных.

6.6.1. Формирование тестовой выборки газовых смесей для нейросетевой модели (Блок “Подготовка данных для обучения и тестирования модели”). Тестовая выборка формировалась по тем же принципам, что и тренировочная выборка, но включала данные, которые не участвовали в этапе обучения нейросетевой модели.

6.6.2. Оценка точности работы модели на тестовой выборке (Блок “Проверка точности”). Оценка точности проводилась тем же способом, что и на этапе обучения модели.

7. *Использование модели на реальных измерительных данных* (Блок “Использование модели”).

Второй этап предлагаемого метода состоит из следующих блоков:

1. *Блок определения компонентного состава псевдогаза, описанный выше.*
2. *Блок расчета требуемых энергетических параметров газа по компонентному составу, определенному в предыдущем этапе.*
3. *Блок проверки соответствия рассчитанных энергетических параметров эталонным данным.* В качестве таких данных выступают данные полученные от результатов хроматографического анализа.

Более подробно рассмотрим каждый этап работы аналитического метода.

## 2.1 Выбор объекта, к которому будет применяться исследуемая система

Компонентный состав газа зависит от региона добычи, а также от источников добычи (например, сжиженный природный газ (СПГ), сжиженный нефтяной газ (СНГ) и биогаз). Учитывая этот факт, необходимо установить к какому объекту будет применяться разработанная система анализа. В таблице 2.1.1 показаны компонентный состав и основные энергетические характеристики природного газа из различных регионов и источников. В таблице под знаком (-) подразумевается несущественное содержание компонента.

Таблица 2.1.1 — Компонентный состав и основные энергетические характеристики природного газа из различных регионов и источников [62]

Компонент / параметр газа	Россия, группа Н	Северное море, группа Н	Дания, группа Н	Ливия, СПГ	Нигерия, СПГ	Египет, СПГ	Биометан	Биометан + СНГ
Метан, %	96,96	88,71	90,07	81,57	91,28	97,70	96,15	90,94
Азот, %	0,86	0,82	0,28	0,69	0,08	0,08	0,75	0,69
Диоксид углерода, %	0,18	1,94	0,60	-	-	-	2,90	2,68
Этан, %	1,37	6,93	5,68	13,38	4,62	1,80	-	-
Пропан, %	0,45	1,25	2,19	3,67	2,62	0,22	-	5,00
Бутан, %	0,15	0,28	0,90	0,69	1,40	0,20	-	0,50
Пентан, %	0,02	0,05	0,22	-	-	-	-	-
Гексан, %	0,01	0,02	0,06	-	-	-	-	-
Водород, %	-	-	-	-	-	-	-	-
Кислород, %	-	-	-	-	-	-	0,2	0,19
Высшая теплотворная способность, МДж/м <sup>3</sup>	40,3	41,9	43,7	46,4	44,0	40,7	38,3	41,9
Относительная плотность, -	0,574	0,629	0,630	0,669	0,624	0,569	0,587	0,641
Число Воббе, МДж/м <sup>3</sup>	53,1	52,9	55,0	56,7	55,7	53,9	50,0	52,3

Исходя из того, что результаты диссертационной работы планируется использовать для реализации разработанного метода и системы на его основе на территории России, основным объектом, к которому предлагается применять разработанный метод, является российский природный газ. Однако, учитывая близость стандартов, регламентирующих диапазоны входящих в природный газ компонентов, разработанный аналитический методы возможно применять к газу из любого источника и региона. Для этого необходимо скорректировать диапазоны компонентов газа в обучающей и тренировочной выборке на этапе разработки статистической модели.

Компонентный состав исходных газовых смесей моделируется следующим образом. Согласно стандарту (ГОСТ Р 57413 – 2017) выбираются компоненты газа, необходимые для определения  $x_1, x_2, \dots, x_{21}$  и значения минимального и максимального содержания по каждому компоненту  $x_{1max}, x_{1min}, x_{2max}, x_{2min}, \dots, x_{21max}, x_{21min}$ . Затем выбирается количество точек по каждому компоненту  $N_{x1} \dots N_{x21}$  и рассчитываются шаги по каждому компоненту по формуле:

$$\Delta x_i = \frac{x_{imax} - x_{imin}}{N_{xi}} \quad (2.1.1)$$

Формирование матрицы исходных газовых смесей приведено в таблице 2.1.2. Сначала все компоненты, кроме балансного газа ( $x_1$  – метан), который рассчитывается путем вычитания из 100 суммы концентраций всех остальных компонентов, равны  $x_{min}$  (строка №1).

Затем концентрация компонентов поочередно увеличивается на  $\Delta x_i$  для каждого рассматриваемого компонента, например, для  $x_4$  (строки 2-3) и  $x_3$  (строки 5-6). Это происходит до достижения компонентами  $x_{max}$  (строка 4 для  $x_4$  и строка 7 для  $x_3$ ). Таким образом в матрицу включаются бинарные смеси. Затем в матрицу по такой же логике включаются тернарные смеси (строки 8,9,10) и так далее до достижения минимального значения по балансному газу (метану) (строка 12). Стоит отметить, что в матрице исходных газовых смесей включены смеси  $x_{i \text{ target}}$ , близкие по компонентному составу российскому природному газу из таблицы 1 (строка 11).

Таблица 2.1.2 — Формирование матрицы исходных газовых смесей

№	X <sub>1</sub>	X <sub>2</sub>	X <sub>3</sub>	X <sub>4</sub>	...	X <sub>21</sub>
1	X <sub>1max</sub>	X <sub>2min</sub>	X <sub>3min</sub>	X <sub>4min</sub>	...	X <sub>21min</sub>
2	X <sub>1max</sub> - ΔX <sub>4</sub>	X <sub>2min</sub>	X <sub>3min</sub>	X <sub>4min</sub> + ΔX <sub>4</sub>	...	X <sub>21min</sub>
3	X <sub>1max</sub> - 2*ΔX <sub>4</sub>	X <sub>2min</sub>	X <sub>3min</sub>	X <sub>4min</sub> + 2*ΔX <sub>4</sub>	...	X <sub>21min</sub>
...	...	...	...	...	...	...
4	X <sub>1max</sub> - X <sub>4max</sub>	X <sub>2min</sub>	X <sub>3min</sub>	X <sub>4max</sub>	...	X <sub>21min</sub>
...	...	...	...	...	...	...
5	X <sub>1max</sub> - ΔX <sub>3</sub>	X <sub>2min</sub>	X <sub>3min</sub> + ΔX <sub>3</sub>	X <sub>4min</sub>	...	X <sub>21min</sub>
6	X <sub>1max</sub> - 2*ΔX <sub>3</sub>	X <sub>2min</sub>	X <sub>3min</sub> + 2*ΔX <sub>3</sub>	X <sub>4min</sub>	...	X <sub>21min</sub>
...	...	...	...	...	...	...
7	X <sub>1max</sub> - X <sub>3max</sub>	X <sub>2min</sub>	X <sub>3max</sub>	X <sub>4min</sub>	...	X <sub>21min</sub>
...	...	...	...	...	...	...
8	X <sub>1max</sub> - ΔX <sub>3</sub> - ΔX <sub>4</sub>	X <sub>2min</sub>	X <sub>3min</sub> + ΔX <sub>3</sub>	X <sub>4min</sub> + ΔX <sub>4</sub>	...	X <sub>21min</sub>
9	X <sub>1max</sub> - 2*ΔX <sub>3</sub> - ΔX <sub>4</sub>	X <sub>2min</sub>	X <sub>3min</sub> + 2*ΔX <sub>3</sub>	X <sub>4min</sub> + ΔX <sub>4</sub>	...	X <sub>21min</sub>
...	...	...	...	...	...	...
10	X <sub>1max</sub> - X <sub>3max</sub> - X <sub>4max</sub>	X <sub>2min</sub>	X <sub>3max</sub>	X <sub>4max</sub>	...	X <sub>21min</sub>
...	...	...	...	...	...	...
11	X <sub>1 target</sub>	X <sub>2 target</sub>	X <sub>3 target</sub>	X <sub>4 target</sub>	...	...
...	...	...	...	...	...	...
12	X <sub>1min</sub>	...	...	...	...	...

Затем, по матрице исходных газовых смесей X рассчитывается матрица эквивалентных псевдогазовых смесей Y. Далее к двум матрицам добавляются значения по температуре и давлению t, p. Потом рассчитываются физические и энергетические параметры для двух типов матриц. Согласно концепции предлагаемого метода, входными параметрами для модели являются физические параметры исходных газовых смесей, выходными – концентрации компонентов эквивалентного псевдогаза. Виды матриц, используемых в работе, приведены на рисунке 2.2.1.

			X_parameters			X_energy			Комментарий
X	t	p	Скорость звука, $c_x$	Теплопроводность, $\lambda_x$	...	Теплотворная способность, $CV_x$	Число Воббе, $WI_x$	...	Матрица для входных параметров

			Y_parameters			Y_energy			Комментарий
Y	t	p	Скорость звука, $c_y$	Теплопроводность, $\lambda_y$	...	Теплотворная способность, $CV_y$	Число Воббе, $WI_y$	...	Матрица для выходных параметров

			X_parameters			X_energy			Комментарий
Y	t	p	Скорость звука, $c_x$	Теплопроводность, $\lambda_x$	...	Теплотворная способность, $CV_x$	Число Воббе, $WI_x$	...	Финальная матрица для модели

Рисунок 2.2.1 — Виды используемых в работе матриц

В полученной матрице выделяются важные участки (см. Рисунок 2.2.1) – это смеси:

1. близкие к чистому метану, необходимые для проведения экспериментов,
2. многокомпонентные смеси, содержащие максимальное число компонентов, наиболее сложные для модели,
3. смеси, близкие по составу к российскому природному газу.

Эти смеси добавляются в две матрицы – матрицу целевых смесей (Target data), которая в любом случае будет добавляться в тренировочную выборку при кросс-валидации и матрицу, на которой будет проводиться тестирование модели после этапа обучения (Final test). Стоит отметить, что окончательный вариант матрицы для модели из таблицы 3 подвергается кросс-валидации по K-fold (на рисунке 2.2.1 для простоты  $k=5$ , в работе  $k=11$ ). Кросс-валидация или скользящий контроль — процедура эмпирического оценивания обобщающей способности алгоритмов. Обучающая выборка разбивается на  $k$  непересекающихся одинаковых по объему частей; Производится  $k$  итераций. На каждой итерации происходит следующее: модель обучается на  $k-1$  части обучающей выборки; модель тестируется на части обучающей выборки, которая не участвовала в обучении. Каждая из  $k$  частей единожды используется для тестирования.

Перед обучением данные подвергаются нормализации. Нормализация — это преобразование данных к неким безразмерным единицам. В нашем случае к заданному диапазону  $[0...1]$ . Основная цель нормализации — приведение данных в разных единицах



измерения и диапазонах значений к единому виду. В работе использовалась максимум-минимум нормализация по формуле:  $X_n = \frac{X - X_{min}}{X_{max} - X_{min}}$ .

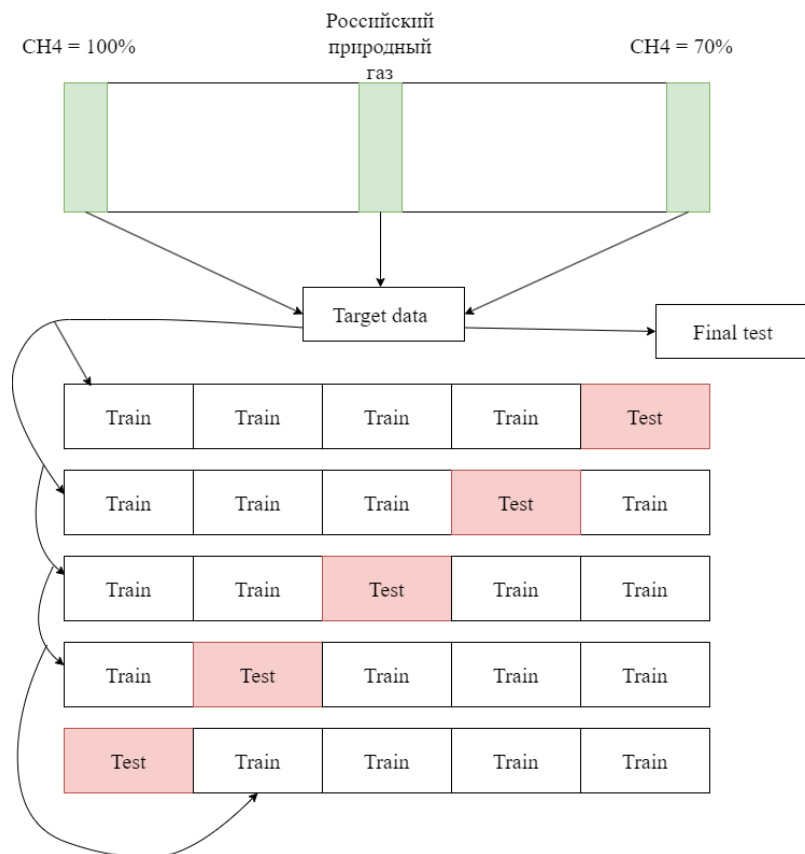


Рисунок 2.2.1 — Кросс-валидация данных и разбиение на матрицы

## 2.2 Выбор измеряемых (входных) физических параметров и выходных параметров

Критериями для выбора измеряемых физических параметров являлись наличие взаимосвязи между параметром газа и компонентным составом, а также возможность измерения данного параметра коммерчески доступными и относительно недорогими измерительными приборами.

В рамках проведенного исследования были проанализированы скорость звука, теплопроводность, вязкость, диэлектрическая проницаемость и изобарическая теплоёмкость и другие параметры природного газа, а также приборы и системы для их измерения [26, 63-72].

Для определения взаимосвязи параметров и компонентного состава природного газа был проведен корреляционный анализ для проверки взаимозависимостей внутри множеств входных

и выходных параметров и связи их между собой с целью устранения возможной мультиколлинеарности параметров – линейной взаимосвязи двух или нескольких переменных. Мультиколлинеарность может привести к нежелательным последствиям, так как при этом оценки параметров становятся ненадёжными, т.е. возрастает стандартная ошибка, и становится невозможным определить изолированное влияние факторов на результирующий показатель. В качестве входных параметров необходимо использовать те показатели, которые имеют высокую корреляцию с выходными параметрами и низкую корреляцию между собой. Для проведения корреляционного анализа для каждой пары исследуемых параметров рассчитываются коэффициенты корреляции, по которым можно определить наличие линейной зависимости между двумя параметрами. В общем случае для выборок параметров  $X$  и  $Y$  коэффициент корреляции  $r$  рассчитывается по формуле:

$$r = \frac{\sum_{i=1}^N (X_i - \bar{X})(Y_i - \bar{Y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^N (X_i - \bar{X})^2 \sum_{i=1}^N (Y_i - \bar{Y})^2}}, \quad (2.2.1)$$

Для проведения корреляционного анализа была смоделирована выборка природного газа с различным компонентным составом. Моделирование производилось с учётом допустимых диапазонов молярных долей компонентов согласно действующему нормативному стандарту [73], регламентирующему методы расчёта физических свойств природного газа, путем перебора всех возможных комбинаций компонентов. В таблице 2.2.1 приведены данные диапазоны для каждого компонента.

Таблица 2.2.1 — Диапазоны газовых смесей для корреляционного анализа

Компонент	Молярная доля, %
Метан	80 – 100
Пропан	0 – 5
Диоксид углерода	0 – 5
Азот	0 – 5

Шаг перебора по содержанию диоксида углерода и азота был равен 1%, пропана - 0,5%. Молярная доля метана рассчитывалась как балансная доля путем вычитания из 100% суммы молярных долей остальных компонентов природного газа. Результирующая выборка составила около 150 тысяч элементов. Дальнейшее увеличение выборки путем уменьшения шага по содержанию компонентов не привело к заметному изменению результатов корреляционного анализа. Расчет физико-химических параметров для смоделированных смесей производился с помощью пакета NIST REFPROP по действующим международным промышленным стандартам для стандартных условий по температуре и давлению [74]. По результатам

корреляционного анализа, которые показаны в таблице 2.2.2, и с учётом дальнейшей возможности практической верификации предлагаемой системы, в качестве входных параметров были выбраны концентрация диоксида углерода, скорость звука и коэффициент теплопроводности. В качестве выходных параметров использовались подлежащие определению концентрации компонентов газовой смеси.

Таблица 2.2.2 — Коэффициенты корреляции входных параметров газа по отношению к концентрациям компонентов газа

	Скорость звука, с, м/с	Коэффициент теплопроводности, $\chi$ , мВт/(м·К)	Динамическая вязкость, $\eta$ , Па·с	Содержание метана, %	Содержание азота, %	Содержание диоксида углерода, %	Содержание пропана, %
Скорость звука, с, м/с	1	0,99	-0,49	0,93	-0,24	-0,61	-0,67
Коэффициент теплопроводности, $\chi$ , мВт/(м·К)	0,99	1	-0,41	0,91	-0,15	-0,53	-0,71
Динамическая вязкость, $\eta$ , Па·с	-0,49	-0,41	1	-0,68	0,59	0,47	-0,23
Содержание метана, %	0,93	0,91	-0,68	1	-0,52	-0,52	-0,49
Содержание азота, %	-0,24	-0,15	0,59	-0,52	1	0	0
Содержание диоксида углерода, %	-0,61	-0,53	0,47	-0,52	0	1	0
Содержание пропана, %	-0,68	-0,71	0,23	-0,49	0	0	1

Некоторые измеряемые параметры показывают высокую корреляцию (значение коэффициента корреляции в диапазоне 0,7 – 1 по модулю) с определенными компонентами и при этом низкую (0 – 0,3 по модулю) с другими, что говорит о некоторой степени селективности данного измеряемого параметра и может быть использовано в дальнейшем. На рисунке 2.2.1 показаны результаты корреляционного анализа для параметров, которые не были выбраны в качестве входных по причине низкой корреляции (скорость звука на данном графике показана в качестве параметра для сравнения). На рисунке 2.2.2 показаны результаты корреляционного анализа для параметров, которые были выбраны в качестве входных по причине высокой корреляции. Исходя из результатов корреляционного анализа можно сделать ряд выводов: например, о наличии высокой корреляции между физическими параметрами

(скорость звука, теплопроводность) и содержанием метана и пропана, об отсутствии корреляции между содержаниями азота, диоксида углерода и пропана.

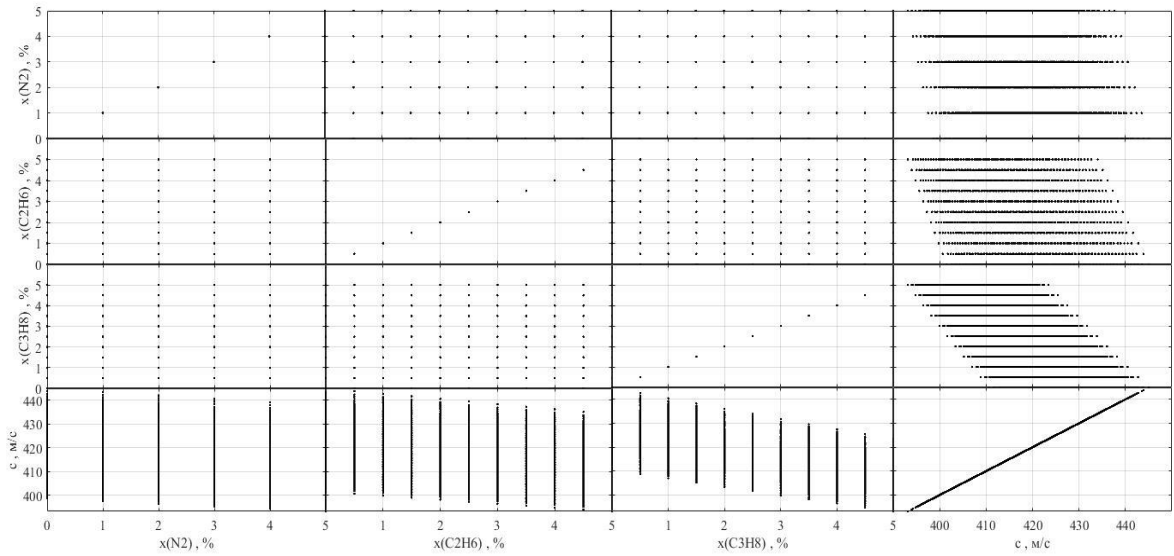


Рисунок 2.2.1 — Результаты корреляционного анализа для невыбранных параметров

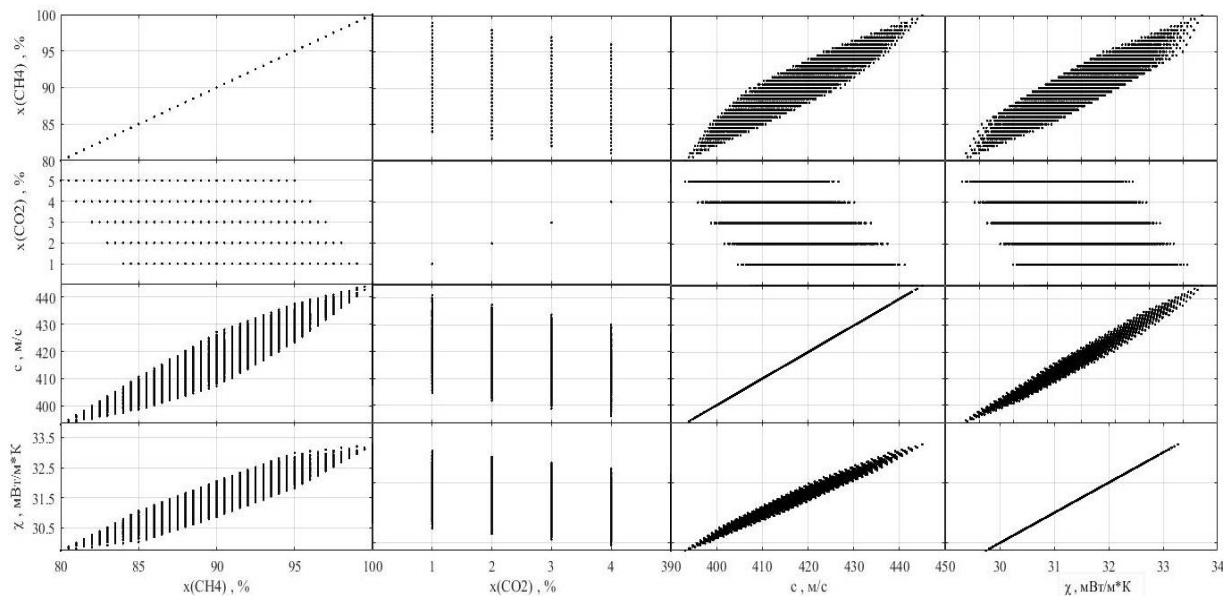


Рисунок 2.2.2 — Результаты корреляционного анализа для выбранных параметров

Однако, проведение выбора входных параметров для модели только на основе корреляционного анализа является недостаточно математически обоснованным. Поэтому для выбора входных параметров был разработан алгоритм выбора входных параметров, основанный на комбинации корреляционного анализа и многокритериальной оценки.

### 2.2.1 Алгоритм многокритериальной оценки входных параметров

В работах [75, 76] выбор измеряемых физических параметров предлагалось осуществлять, исходя из наличия взаимосвязи между рассматриваемым параметром и компонентным составом газа, а также из возможности измерения данного параметра коммерчески доступными и относительно недорогими измерительными приборами. Описанный подход предлагается модифицировать с применением методов многокритериальной оценки. Первым шагом предлагаемого алгоритма является выбор критериев, по которым будет осуществляться оценка входных параметров для модели. Выбранные критерии делятся на три группы: наличие доступной технологии для измерения параметра (0 в случае отсутствия, 1 в случае наличия), высокая корреляция с выходными параметрами модели (компонентным составом) и низкая корреляция с другими входными физическим параметрами газа. Вторая группа включает в себя три критерия: корреляции с основными компонентами эквивалентного псевдогаза – метаном ( $\text{CH}_4$ ), пропаном ( $\text{C}_3\text{H}_8$ ) и азотом ( $\text{N}_2$ ). Приведенные критерии являются неравнозначными. Наиболее важен критерий наличия доступной технологии для измерения параметра. Вторым является критерий по высокой корреляции с выходными параметрами модели. Наименее важным можно считать критерий низкой корреляции между входными параметрами, который необходим в основном для устранения возможной мультиколлинеарности входных параметров. Критерии по корреляции выражаются в виде коэффициентов корреляции Пирсона  $r$ .

В качестве входных анализируемых параметров, исходя из результатов предыдущих исследований и анализа [64 - 70], были выбраны следующие физические параметры природного газа: скорость звука ( $c$ ), теплопроводность ( $\chi$ ), концентрация диоксида углерода ( $\text{CO}_2$ ), динамическая вязкость ( $\eta$ ) и диэлектрическая проницаемость ( $\epsilon$ ).

Для формирования оптимального набора входных физических параметров природного газа предлагается использовать метод анализа иерархий (МАИ) [77]. Данный метод позволяет найти такой вариант (альтернативу), который наилучшим образом согласуется с пониманием сути проблемы и требованиями к её решению. Основным достоинством метода анализа иерархий является высокая универсальность – метод может применяться для решения самых разнообразных задач вне зависимости от области применения. Недостатком метода анализа иерархий является необходимость получения большого объема информации от экспертов. Однако, данный недостаток компенсируется расчетом коэффициентов корреляции и необходимостью экспертной оценки только критерия наличия технологии измерения исследуемого параметра.

Первым этапом МАИ является построение иерархической структуры, включающей цель, критерии, альтернативы и другие влияющие на выбор факторы. Структура выбора оптимального набора приведена на рисунке 2.2.1.1.

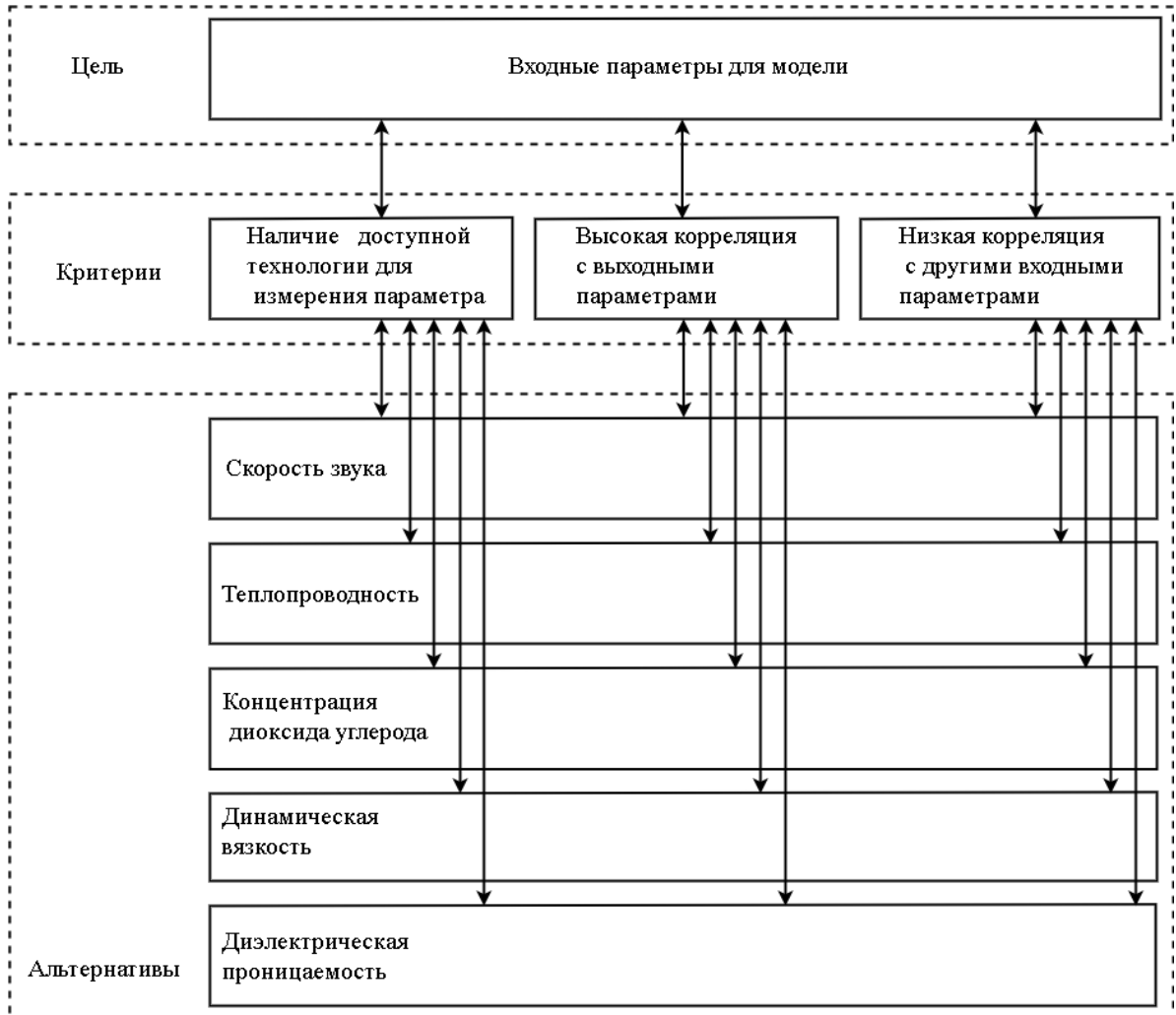


Рисунок 2.2.1.1 — Структура формирования оптимального набора входных параметров модели по методу анализа иерархий

Следующим этапом является построение матрицы попарных сравнений критериев. Сравнение выполняется таким образом, что каждый критерий оценивается относительно всех остальных. Для проведения парных сравнений Т. Саати [77] была разработана шкала относительной важности, представленная в таблице 2.2.1.1.

Таблица 2.2.1.1 — Шкала относительной важности

Количественное значение уровня важности	Уровень важности	Сущность уровня важности
0	Несравнимы	Сложность в сравнении критериев
1	Равная важность	Равный вклад двух критериев в цель
3	Умеренное превосходство	Наличие легкого превосходство одного критерия над другим
5	Существенное или сильное превосходство	Наличие сильного превосходства одного критерия над другим
7	Значительное превосходство	Один из критериев имеет настолько сильное превосходство, что оно становится практически значительным
9	Очень сильное превосходство	Очевидность превосходства одного критерия над другим
2,4,6,8	Промежуточные решения между двумя соседними уровнями важности	Применяются в пограничном случае, когда сложно однозначно отнести критерий к какому-либо уровню важности

Согласно приведенному перечню критериев осуществлено попарное сравнение критериев по качественной шкале с последующим преобразованием в баллы. Матрица попарных сравнений составляется путем расчёта коэффициентов  $a_{ij}$  – отношения веса критерия  $i$  к критерию  $j$ . Матрица попарных сравнений критериев показана в таблице 2.2.1.2.

Таблица 2.2.1.2 — Матрица попарных сравнений критериев

$a_{ij}$	Техн.	$r(\text{CH}_4)$	$r(\text{C}_3\text{H}_8)$	$r(\text{N}_2)$	$r(\text{c})$	$r(\chi)$	$r(\text{CO}_2)$	$r(\eta)$	$r(\varepsilon)$
Техн.	1	2	2	2	3	3	3	3	3
$r(\text{CH}_4)$	1/2	1	1	1	2	2	2	2	2
$r(\text{C}_3\text{H}_8)$	1/2	1	1	1	2	2	2	2	2
$r(\text{N}_2)$	1/2	1	1	1	2	2	2	2	2
$r(\text{c})$	1/3	1/2	1/2	1/2	1	1	1	1	1
$r(\chi)$	1/3	1/2	1/2	1/2	1	1	1	1	1
$r(\text{CO}_2)$	1/3	1/2	1/2	1/2	1	1	1	1	1
$r(\eta)$	1/3	1/2	1/2	1/2	1	1	1	1	1
$r(\varepsilon)$	1/3	1/2	1/2	1/2	1	1	1	1	1

Затем производится нормировка матрицы попарных сравнений критериев. Для этого новый элемент матрицы  $A_{ij}$  рассчитывается как отношение исходного элемента  $a_{ij}$  к сумме элементов соответствующего столбца. Также находятся средние значения для каждой строки ( $\text{Avg}_i$ ), что называется весовым столбцом критериев по цели. Нормированная матрица попарных сравнений критериев приведена в таблице 2.2.1.3.

Таблица 2.2.1.3 — Нормированная матрица попарных сравнений критериев

$A_{ij}$	Техн.	$r(\text{CH}_4)$	$r(\text{C}_3\text{H}_8)$	$r(\text{N}_2)$	$r(\text{c})$	$r(\chi)$	$r(\text{CO}_2)$	$r(\eta)$	$r(\varepsilon)$	$\text{Avg}_i$
Техн.	0,240	0,267	0,267	0,267	0,214	0,214	0,214	0,214	0,214	0,235
$r(\text{CH}_4)$	0,120	0,133	0,133	0,133	0,143	0,143	0,143	0,143	0,143	0,136
$r(\text{C}_3\text{H}_8)$	0,120	0,133	0,133	0,133	0,143	0,143	0,143	0,143	0,143	0,136
$r(\text{N}_2)$	0,120	0,133	0,133	0,133	0,143	0,143	0,143	0,143	0,143	0,136
$r(\text{c})$	0,080	0,067	0,067	0,067	0,071	0,071	0,071	0,071	0,071	0,070
$r(\chi)$	0,080	0,067	0,067	0,067	0,071	0,071	0,071	0,071	0,071	0,070
$r(\text{CO}_2)$	0,080	0,067	0,067	0,067	0,071	0,071	0,071	0,071	0,071	0,070
$r(\eta)$	0,080	0,067	0,067	0,067	0,071	0,071	0,071	0,071	0,071	0,070
$r(\varepsilon)$	0,080	0,067	0,067	0,067	0,071	0,071	0,071	0,071	0,071	0,070

Определив веса критериев, можно перейти к следующему шагу – определению весов альтернатив. Для этого предлагается использовать метод компромиссного программирования [78] - метод многокритериальной оптимизации, при котором определяется решение,



минимизирующее расстояние от целевой точки до множества эффективных решений. Первым шагом данного метода является расчет значения критериев для каждой альтернативы. Значение критерия по наличию технологии измерения параметра равно нулю при отсутствии доступной технологии и единице при ее наличии. Остальные значения критериев рассчитывались как коэффициенты корреляции Пирсона по модулю для выборки природного газа со следующими диапазонами концентрации по каждому компоненту: 85 - 100 % для метана, 0 - 5 % для азота, диоксида углерода и пропана. В таблице 2.2.1.4 приведены значения критериев для каждой альтернативы.

Таблица 2.2.1.4 — Значения критериев для каждой альтернативы

Альтернативы \ Критерии	c	$\chi$	CO <sub>2</sub>	$\eta$	$\varepsilon$
Техн.	1	1	1	0	0
r(CH <sub>4</sub> )	0,899	0,848	0,628	0,785	0,117
r(C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> )	0,477	0,557	0,053	0,339	0,906
r(N <sub>2</sub> )	0,787	0,764	0,083	0,750	0,129
r(c)	1	0,992	0,233	0,629	0,451
r( $\chi$ )	0,992	1	0,141	0,535	0,554
r(CO <sub>2</sub> )	0,233	0,141	1	0,541	0,445
r( $\eta$ )	0,629	0,535	0,541	1	0,403
r( $\varepsilon$ )	0,451	0,554	0,445	0,403	1

На следующем шаге вычисляются значения степеней близости критериев. Для этого критерии делятся на две категории: критерии на минимум и максимум. В рассматриваемой задаче необходимо как максимизировать наличие технологии для измерения и корреляцию с выходными параметрами, так и минимизировать корреляцию между входными параметрами. Для критериев на минимум степень близости *i*-ой альтернативы по *k*-ому критерию  $O_{ki}$  рассчитаем по формуле:

$$O_{ki} = \frac{\max(O_{ki}) - O_{ki}}{\max(O_{ki}) - \min(O_{ki})}, \quad i = 1..n \quad (2.2.1.1)$$

где  $O_{ki}$  – значение оценки для *i*-ой альтернативы по *k*-ому критерию, min и max – операции по нахождению минимального и максимального значения, *n* – число альтернатив.

Для критериев на максимум степень близости альтернатив рассчитывается по схожей формуле:

$$o_{ki} = \frac{O_{ki} - \min(O_{ki})}{\max(O_{ki}) - \min(O_{ki})}, \quad i = 1..n \quad (2.2.1.2)$$

Результаты расчёта степеней близости альтернатив по критериям представлены в таблице 2.2.1.5.

Таблица 2.2.1.5 — Степени близости альтернатив по критериям

Критерии \ $O_{ki}$	c	$\chi$	CO <sub>2</sub>	$\eta$	$\varepsilon$
Техн.	1	1	1	0	0
r(CH <sub>4</sub> )	1	0,935	0,653	0,854	0
r(C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> )	0,497	0,591	0	0,335	1
r(N <sub>2</sub> )	1	0,967	0	0,947	0,065
r(c)	0	0,010	1	0,484	0,716
r( $\chi$ )	0,009	0	1	0,541	0,519
r(CO <sub>2</sub> )	0,893	1	0	0,534	0,646
r( $\eta$ )	0,621	0,779	0,769	0	1
r( $\varepsilon$ )	0,920	0,747	0,930	1	0

После определения степени близости альтернатив необходимо определить оценки каждой альтернативы по критериям с учетом их значимости, рассчитанной выше. Для этого множество критериев G для каждой пары альтернатив делится на два подмножества: G<sub>1</sub> – подмножество критериев, по которым рассматриваемая i-тая альтернатива превосходит j-ую; G<sub>2</sub> – подмножество критериев, по которым рассматриваемая i-тая альтернатива уступает j-ой. Например, первая альтернатива (скорость звука c) превосходит пятую (диэлектрическая проницаемость  $\varepsilon$ ) по первому, второму, четвертому, пятому, шестому и восьмому критерию, но уступает по всем остальным. Общая формула для расчета оценок  $\beta_{ij}$  выглядит следующим образом:

$$\beta_{ij} = \frac{\sum_{k \in G_1} Avg_k * (o_{ki} - o_{kj})}{\sum_{k \in G_2} Avg_k * (o_{kj} - o_{ki})}, \quad (2.2.1.3)$$

Где  $Avg_k$  – значения весов критериев из таблицы 2.2.2.3;  $o_{ki}$  и  $o_{kj}$  – степени близости  $i$ -ой и  $j$ -ой альтернатив по  $k$ -ому критерию из таблицы 2.2.1.5.

С учетом того что  $\beta_{ii} = 1$  матрица оценки альтернатив представлена в таблице 2.2.1.6.

Таблица 2.2.1.6 — Матрица оценки альтернатив

$\beta_{ij}$	с	$\chi$	CO <sub>2</sub>	$\eta$	$\varepsilon$
с	1	1,277	6,391	5,207	4,046
$\chi$	0,783	1	5,667	4,230	4,391
CO <sub>2</sub>	0,156	0,176	1	0,850	1,452
$\eta$	0,192	0,236	1,177	1	2,036
$\varepsilon$	0,247	0,228	0,688	0,491	1

Завершающим шагом алгоритма является вычисление собственного вектора матрицы оценки альтернатив с последующим нормированием для определения требуемого вектора весов альтернатив. Полученный вектор выглядит следующим образом: [0,412; 0,351; 0,074; 0,095; 0,068]. Исходя из полученного вектора можно сделать вывод о превосходстве первой (скорость звука) и второй (теплопроводность) альтернатив.

Далее необходимо оценить полученные данные с точки зрения согласованности матрицы оценки альтернатив и необходимости пересмотра оценок альтернатив. Для этого были рассчитаны следующие параметры: максимальное (главное) собственное значение  $\lambda_{\max}$ , индекс согласованности (CI) и отношение согласованности (CR).

Расчёт максимального собственного значения осуществляется по матрице оценки альтернатив следующим образом: сумма каждого столбца матрицы умножается на соответствующий элемент вектора весов альтернатив, затем полученные числа суммируются. Чем ближе максимальное собственное значение к числу альтернатив (размерности матрицы оценки альтернатив)  $n$ , тем более согласован результат. Для полученных матрицы оценки альтернатив и вектора весов альтернатив  $\lambda_{\max}$  равно 5,106 при пяти альтернативах.

После этого результаты сравниваются с полученными в результате случайных оценок данными для матрицы оценок той же размерности. Для этого рассчитывается индекс согласованности по формуле:

$$CI = \frac{\lambda_{\max} - n}{n - 1} \quad (2.2.1.4)$$

Индекс согласованности для полученных данных равен 0.026.

Индекс согласованности сгенерированной случайным образом обратно-симметричной матрицы с соответствующими обратными величинами элементов, называется случайным индексом (RI), причем значение случайного индекса увеличивается с увеличением порядка матрицы. В таблице 2.2.1.7 представлены порядок матрицы и средние значения случайного индекса, определенные для случайных выборок [77]:

Таблица 2.2.1.7 — Зависимость случайного индекса от порядка матрицы

Порядок матрицы	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Средний RI	0,00	0,00	0,58	0,90	1,12	1,24	1,32	1,41	1,45	1,49

Для исследуемой размерности матрицы согласно таблице 2.2.1.7 случайный индекс равен 1,12. Отношение индекса согласованности к среднему случайному индексу для матрицы того же порядка называется отношением согласованности.

$$CR = \frac{CI}{RI} \quad (2.2.1.5)$$

Значение данного параметра, которое меньше или равно 0,1, считается приемлемым. Если отношение согласованности равно 0, это означает, что данные полностью согласованны. Если отношение согласованности превышает 0,1, то необходим пересмотр оценок и повторный расчёт параметров согласованности. В исследуемом случае этого не требуется, так как отношение согласованности равно 0.024. Исходя из рассчитанных характеристик, можно сделать вывод о согласованности выбранных оценок альтернатив.

## 2.2.2 Подтверждение результатов многокритериальной оценки путем нейросетевого анализа

Для подтверждения результатов проведенной многокритериальной оценки входных параметров для нейросетевой модели был произведен нейросетевой анализ. Эксперимент заключался в симуляции нейросетевой модели на расчётных данных, полученных в результате имитационного моделирования. Разработанная простая рекуррентная нейронная сеть [79] обучалась, тестировалась и симулировалась с различными вариантами набора входных параметров для определения требуемого компонентного состава газовых смесей. Для пяти вариантов входных параметров возможно десять вариантов набора параметров по три в каждом. Все возможные наборы входных параметров для рассматриваемого случая показаны в таблице 2.2.2.1.

Таблица 2.2.2.1 — Возможные наборы входных параметров для рассматриваемого случая

Номер набора	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Входные параметры	с, χ, CO <sub>2</sub>	с, χ, η	с, χ, ε	с, CO <sub>2</sub> , η	с, CO <sub>2</sub> , ε	с, η, ε	χ, CO <sub>2</sub> , η	χ, CO <sub>2</sub> , ε	χ, η, ε	CO <sub>2</sub> , η, ε

Для каждого варианта из набора для таблицы 2.2.2.1 рассчитывалась точность определения требуемых параметров: максимальное абсолютное отклонение (maximum absolute error, MaxAE), среднее абсолютное отклонение (mean absolute error, MAE), максимальное относительное отклонение (maximum absolute percentage error, MaxAPE), среднее относительное отклонение (mean absolute percentage error, MAPE) по формулам, представленным ниже.

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (Y_{output} - Y_{target}) \quad (2.2.2.1)$$

$$MAPE = \frac{100\%}{n} \sum_{i=1}^n \left( \frac{Y_{output} - Y_{target}}{Y_{target}} \right) \quad (2.2.2.2)$$

$$MaxAE = \max(Y_{output} - Y_{target}) \quad (2.2.2.3)$$

$$MaxAPE = 100\% \max\left(\frac{Y_{output} - Y_{target}}{Y_{target}}\right) \quad (2.2.2.4)$$

Где  $Y_{output}$  – значения, полученные от статистической модели,  $Y_{target}$  – исходные значения целевых параметров,  $n$  – объем выборки,  $\max$  – операция вычисления максимального значения.

Предлагаемый расчет производился в Matlab 2019b с использованием специализированного программного обеспечения NIST REFPROP. Данные включали 150000 газовых смесей с диапазонами, описанными выше, и рассчитанными исследуемыми входными физическими параметрами. Результаты симуляции разработанной нейросетевой модели показаны в таблице 2.2.2.2. Характеристики по диоксиду углерода не приведены, так как концентрация данного компонента является входным параметром и считается известной.

Таблица 2.2.2.2 — Результаты симуляции разработанной нейросетевой модели для различных наборов входных параметров

Компонент	Характеристика	Номер набора									
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Метан	МахАЕ, молярная доля, %	0,425	0,696	0,751	0,516	0,567	0,832	0,524	0,535	0,556	0,987
	МАЕ, молярная доля, %	0,008	0,011	0,012	0,009	0,010	0,015	0,009	0,009	0,010	0,018
	МахАРЕ, %	0,451	0,714	0,789	0,562	0,579	0,875	0,542	0,551	0,561	0,991
	МАРЕ, %	0,009	0,011	0,012	0,010	0,011	0,016	0,010	0,011	0,010	0,018
Азот	МахАЕ, молярная доля, %	0,285	0,482	0,621	0,378	0,415	0,781	0,394	0,419	0,402	0,871
	МАЕ, молярная доля, %	0,011	0,013	0,016	0,012	0,013	0,018	0,013	0,014	0,013	0,018
	МахАРЕ, %	0,308	0,482	0,568	0,376	0,421	0,790	0,382	0,407	0,399	0,862
	МАРЕ, %	0,012	0,017	0,018	0,012	0,013	0,017	0,012	0,012	0,012	0,018
Пропан	МахАЕ, молярная доля, %	0,256	0,521	0,535	0,279	0,293	0,541	0,311	0,321	0,361	0,671
	МАЕ, молярная доля, %	0,007	0,012	0,012	0,007	0,007	0,012	0,008	0,008	0,009	0,014
	МахАРЕ, %	0,235	0,539	0,546	0,291	0,318	0,567	0,309	0,311	0,354	0,649
	МАРЕ, %	0,006	0,011	0,011	0,007	0,007	0,012	0,007	0,007	0,008	0,013

По результатам проведённого нейросетевого анализа можно сделать вывод о наилучшей точности в первом наборе, который содержит превалирующие с точки зрения многокритериальной оценки альтернативы. В то же время худшая точность в десятом наборе с наименее весомыми альтернативами. Полное ранжирование всех наборов входных параметров

приведено в таблице 2.2.2.3. Данная процедура проводилась при помощи экспертной оценки ввиду наглядности рассчитанной точности. Исходя из полученных результатов, можно сделать вывод об совпадении результатов многокритериальной оценки альтернатив и нейросетевого анализа.

Таблица 2.2.2.3 — Ранжированные по точности наборы входных параметров

Номер набора	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Ранг набора	I	VII	VIII	II	V	IX	III	IV	VI	X

Необходимо отметить, что результаты применения алгоритма показали существенное преобладание значимости скорости звука и теплопроводности по сравнению с остальными входными параметрами. Данные результаты частично совпадают с проведенными ранее исследованиями, основанными на применении только корреляционного анализа входных параметров. Установлено также, что концентрация диоксида углерода, уступающая большинству рассмотренных альтернатив, в дальнейших исследованиях может не использоваться в качестве входного параметра статистической модели, хотя и необходима для измерения с целью снижения количества неизвестных концентраций компонентов определяемого газа. Результаты проведенной многокритериальной оценки [81] входных параметров подтверждаются результатами нейросетевого анализа, проведенного на различных наборах входных параметров.

### **2.3 Применение алгоритма перехода от рассматриваемой газовой смеси к модели эквивалентной псевдогазовой смеси**

В настоящее время существуют и разрабатываются аналитические методы анализа природного газа, которые не требуют измерения полного компонентного состава, в частности, метод определения свойств и состава природного газа по измерениям его физических параметров [82]. При разработке таких методов приходится учитывать, что промышленный природный газ содержит большое количество компонентов. Например, для российского природного газа существует восемь значимых компонентов, необходимых к определению при анализе компонентного состава [83]. Определение компонентного состава природного газа (который является многокомпонентной смесью) по измеряемым физическим параметрам является задачей многопараметрической аппроксимации. Выходными параметрами для такой аппроксимирующей функции является искомый компонентный состав природного газа. В ходе предварительного исследования не удалось найти удовлетворяющее решение задачи аппроксимации полного компонентного состава природного газа по выбранным параметрам. Одним из способов упрощения поиска решения такой задачи является уменьшение размерности выходных параметров функции аппроксимации.

Для упрощения задачи анализа компонентного состава природного газа существует алгоритм перехода к эквивалентному псевдогазу, снижающая количество определяемых компонентов [28, 29, 125]. Данный алгоритм заключается в переходе от природного газа к модели эквивалентного псевдогаза с меньшим количеством компонентов, но со свойствами, которые соответствуют свойствам изначального природного газа. Содержание компонентов псевдогаза возможно получить либо, решая задачу, обратную задаче определения свойств газа по компонентному составу, либо методом, имея измерения физических параметров. Таким образом, природный газ может быть описан эквивалентным пятикомпонентным псевдогазом, состоящим из углеводородов (эффективных метана, этана и пропана), эффективных азота и диоксида углерода. Содержание углеводородов в таком газе не соответствует содержанию в изначальном природном газе, а содержание азота и диоксида углерода - такое же.

Блок-схема алгоритма перехода к эквивалентному псевдогазу представлена на рисунке 2.3.1 Входной информацией для алгоритма является количество доступных технических средств информационной системы и сведения о рассматриваемом объекте исследования. В зависимости от соотношения количества доступных технических средств ( $N_s$ ) и числа компонентов в объекте ( $N$ ) расчёт возможен по моделям четырёх- и пятикомпонентного



псевдогаза. Выходной информацией в алгоритме является компонентный состав выбранной модели псевдогаза.

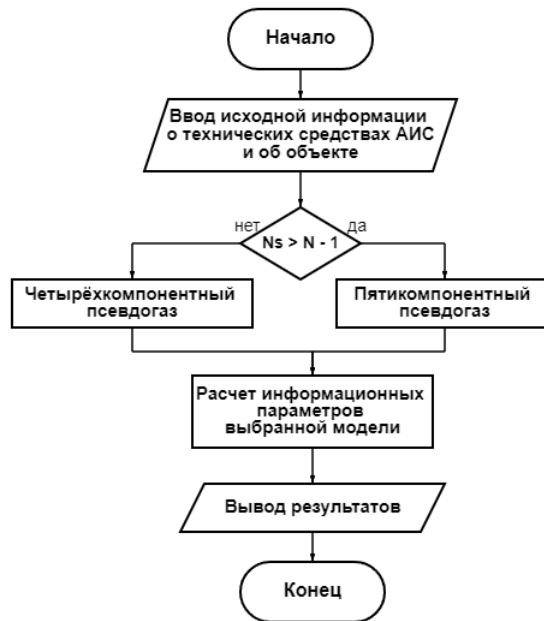


Рисунок 2.3.1 — Блок-схема алгоритма перехода к информационным параметрам модели эквивалентного псевдогаза

Предварительные расчеты показали, что уменьшение количества целевых параметров до пяти не позволит достичь желаемой точности аппроксимации по выбранным входным параметрам. Поэтому был использован способ перехода от природного газа к четырёхкомпонентному псевдогазу. Ниже приведены системы уравнений, позволяющие преобразовать природный газ в модели четырёх- и пятикомпонентного псевдогаза, состоящий из эффективных метана, пропана, азота, диоксида углерода, а также этана в случае пятикомпонентного псевдогаза.

$$\begin{cases} x'_1 = C_{11}(P, T) * x_1 + C_{12}(P, T) * x_2 - C_{13}(P, T) * x_4 - C_{14}(P, T) * x_5 - C_{15}(P, T) * x_6 \\ x'_2 = C_{21}(P, T) * x_2 + C_{22}(P, T) * x_3 + C_{23}(P, T) * x_4 + C_{24}(P, T) * x_5 + C_{25}(P, T) * x_6 \\ x'_3 = x_7 \\ x'_4 = x_8 \end{cases} \quad (2.3.1)$$

$$\begin{cases} x'_1 = C_{11}(P, T) * x_1 - C_{12}(P, T) * x_4 - C_{13}(P, T) * x_5 - C_{14}(P, T) * x_6 \\ x'_2 = C_{21}(P, T) * x_2 + C_{22}(P, T) * x_4 + C_{23}(P, T) * x_5 - C_{24}(P, T) * x_6 \\ x'_3 = C_{31}(P, T) * x_3 + C_{32}(P, T) * x_4 + C_{33}(P, T) * x_5 + C_{34}(P, T) * x_6 \\ x'_4 = x_7 \\ x'_5 = x_8 \end{cases} \quad (2.3.2)$$

где  $x_i$  и  $x'_i$  – молярные доли  $i$ -тых компонентов природного газа и псевдогаза,  $C_{ij}(P, T)$  – коэффициенты перехода к модели псевдогаза, зависящие от температуры и давления.

### 2.3.1 Описание алгоритма перехода к информационным параметрам модели эквивалентного псевдогаза

Основной целью перехода к псевдогазу является упрощение рассматриваемой модели природного газа для решения задачи анализа качества газа. Переход к псевдогазу заключается в снижении числа углеводородных компонентов в рассматриваемом газе и последующем определении процентного содержания всех составляющих псевдогазовой смеси для определения необходимых качественных и эксплуатационных характеристик газа. В рассматриваемых алгоритмах [28, 29, 125] производится переход либо к четырёхкомпонентному псевдогазу (эффективные метан, пропан, азот и диоксид углерода), либо к пятикомпонентному псевдогазу (эффективные метан, этан, пропан, азот и диоксид углерода). Соотношение компонентов псевдогаза выбирается таким образом, чтобы получившийся газ обладал теми же основными физическими свойствами, что и исходный природный газ. В качестве примера можно показать, как будет представлен в молярных долях бутан для учета его отсутствия в итоговой пятикомпонентной псевдогазовой смеси (1 моль бутана = 1 моль этана + 1 моль пропана – 1 моль метана). То есть, отсутствие бутана будет учтено путем пересчёта содержания эффективных углеводородных компонентов добавлением (в случае этана и пропана) или вычитанием (в случае метана) из исходного содержания данных компонентов содержания неопределяемого компонента с соответствующим коэффициентом. Для приведенного примера коэффициенты будут равны -1,1,1 для метана, этана и пропана соответственно. Природный газ также может содержать инертные газы, основными из которых являются азот и диоксид углерода. Их содержание в псевдогазе не меняется при переходе и соответствует содержанию в исходном природном газе. Стоит отметить, что рассматриваемые псевдогазовые смеси не соответствуют реальному природному газу, а являются упрощенной моделью газа определенного компонентного состава.

Коэффициенты пересчета для перехода к пяти- и четырехкомпонентному псевдогазу представлены в таблице 2.3.1.1. Под символом (-) в таблице понимается отсутствие компонента в рассматриваемой смеси.

Таблица 2.3.1.1 — Коэффициенты пересчета для перехода к пяти- и четырёхкомпонентному псевдогазу

Компоненты природного газа	Четырёхкомпонентный псевдогаз		Пятикомпонентный псевдогаз		
	Эфф. метан	Эфф. пропан	Эфф. метан	Эфф. этан	Эфф. пропан
Метан	1.0	-	1.0	-	-
Этан	0.5	0.5	-	1.0	-
Пропан	-	1.0	-	-	1.0
Бутан	-0.5	1.5	-1.0	1.0	1.0
Пентан	-1.0	2.0	-1.5	1.0	1.5
Гексан	-1.5	2.5	-1.0	-1.0	3.0

Пример перехода от реального природного газа к эквивалентным четырёх- и пятикомпонентному псевдогазу приведен в таблице 2.3.1.2. Компонентный состав исходного природного газа соответствуют содержанию типичного российского природного газа [83].

Таблица 2.3.1.2 — Пример перехода от реального природного газа к эквивалентным псевдогазам

Природный газ		Четырёхкомпонентный псевдогаз		Пятикомпонентный псевдогаз	
Компонент	Молярная доля, %	Компонент	Молярная доля, %	Компонент	Молярная доля, %
Метан	96.96	Эфф. метан	97.535	Эфф. метан	96.77
Этан	1.37	-	-	Эфф. этан	1.53
Пропан	0.45	Эфф. пропан	1.425	Эфф. пропан	0.66
Н-бутан	0.15	-	-	-	-
Н-пентан	0.02	-	-	-	-
Н-гексан	0.01	-	-	-	-
Азот	0.86	Эфф. азот	0.86	Эфф. азот	0.86
Диоксид углерода	0.18	Эфф. диоксид углерода	0.18	Эфф. диоксид углерода	0.18

Перейдем к рассмотрению вопросов следующего этапа – подтверждения алгоритма перехода к эквивалентному псевдогазу на расчётных данных.

### 2.3.2 Подтверждение алгоритма на расчётных данных

К физическим параметрами газовой смеси, определяемым по её компонентному составу, относятся коэффициент теплопроводности, скорость звука, плотность при нормальных условиях, низшая и высшая теплота сгорания и число Воббе. Эти параметры рассчитываются аналитически, используя значения молярных долей компонентов газовых смесей и значения этих параметров в чистых газах. Соответственно, при переходе к псевдогазу вклад в рассчитываемый параметр неопределяемых компонентов будет учтён за счёт изменения вклада эффективных компонентов.

Для подтверждения адекватности алгоритма был произведён расчёт и сравнение физических параметров и некоторых показателей качества для природного газа и эквивалентных четырёх- и пятикомпонентных псевдогазовых смесей. Сначала была смоделирована выборка природного газа с учетом допустимых диапазонов молярных долей компонентов путем перебора всех возможных комбинаций компонентов. Диапазоны по компонентам были выбраны исходя из стандарта, регламентирующего расчёт рассматриваемых физических параметров [83]. Шаг перебора по содержанию диоксида углерода и азота был равен 2%, этана - 1%, пропана - 0,5%, бутана и пентана - 0.25%, гексана - 0.1%. Молярная доля метана рассчитывалась как балансная для смеси. Результирующая выборка составила около 220 тысяч различных компонентных составов природного газа. По описанному выше алгоритму перехода к псевдогазовым смесям, для каждой газовой смеси были рассчитаны соответствующие ей четырёх- и пятикомпонентные псевдогазовые смеси. В таблице 2.3.2.1 показаны диапазоны изменения содержания компонентов рассматриваемой выборки природного газа и полученных эквивалентных псевдогазов. Затем были рассчитаны некоторые свойства как для природного газа, так и для псевдогаза. Расчет производился с помощью программного комплекса REFPROP [74], разработанного национальным институтом стандартов и технологий США (NIST). При расчете использовалось уравнение состояния газа AGA 8. На рисунке 2.3.2.1 показаны физические параметры природного газа и соответствующих ему четырёх- и пятикомпонентного псевдогазов.

Таблица 2.3.2.1 — Диапазоны изменения молярной доли компонентов природного газа и эквивалентного псевдогаза

Исходный природный газ		Четырехкомпонентный псевдогаз		Пятикомпонентный псевдогаз	
Компонент	Молярная доля, %	Компонент	Молярная доля, %	Компонент	Молярная доля, %
Метан	70 – 100	Эфф. метан	68.75 – 100	Эфф. метан	67.75 – 100
Азот	0 – 20	Эфф. азот	0 – 20	Эфф. азот	0 – 20
Диоксид углерода	0 – 20	Эфф. диоксид углерода	0 – 20	Эфф. диоксид углерода	0 – 20
Этан	0 – 10	-	-	Эфф. этан	0 – 12
Пропан	0 – 3.5	Эфф. пропан	0 – 12	Эфф. пропан	0 – 6.05
Бутан	0 – 1.5	-	-	-	-
Пентан	0 – 0.5	-	-	-	-
Гексан	0 – 0.1	-	-	-	-

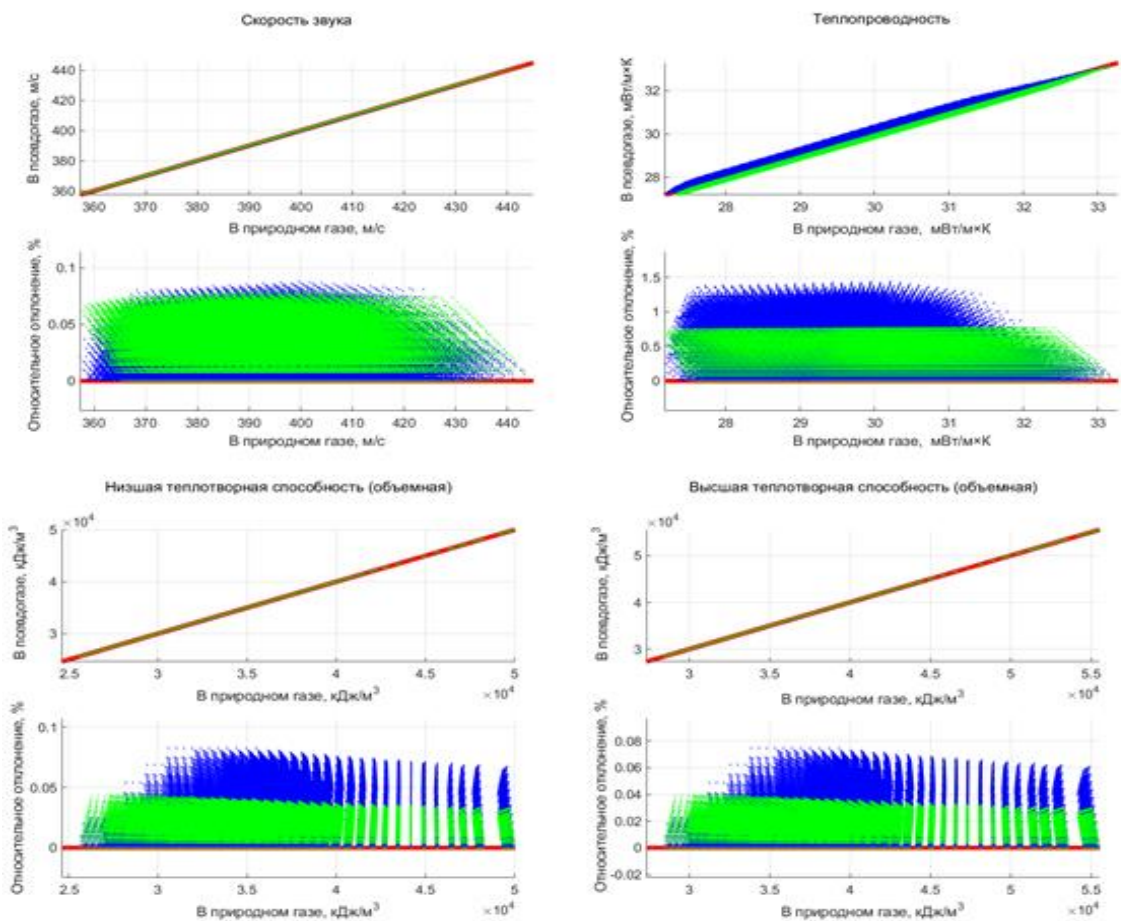


Рисунок 2.3.2.1 — Сравнение расчётных свойств природного газа и эквивалентных ему четырех- и пятикомпонентных псевдогазов

В таблице 2.3.2.2 представлены результаты расчётного моделирования, показывающие, что рассматриваемые физические и качественные свойства эквивалентных псевдогазов с небольшим отклонением соответствуют свойствам исходного природного газа. Таким образом, можно сделать вывод, что при переходе к эквивалентному псевдогазу сохраняется информация об исходном природном газе, и свойства псевдогазов могут быть использованы для того чтобы характеризовать исходные газовые смеси.

Таблица 2.3.2.2 — Результаты имитационного моделирования для сравнения расчётных свойств природного газа и эквивалентных псевдогазов

Псевдогаз	Четырёхкомпонентный		Пятикомпонентный	
	Абсолютное отклонение			
	Среднее	Максимальное	Среднее	Максимальное
Физический параметр				
Скорость звука, м/с	0.09 (0.02%)	0.35 (0.08%)	0.14 (0.03%)	0.32 (0.07%)
Теплопроводность, мВт/м*К	0.12 (0.36%)	0.25 (0.75%)	0.13 (0.39%)	0.44 (1.32%)
Высшая теплотворная способность, кДж/м <sup>3</sup>	7.08 (0.02%)	16.4 (0.04%)	9.51 (0.03%)	33.4 (0.09%)
Низшая теплотворная способность, кДж/м <sup>3</sup>	7.11 (0.02%)	16.4 (0.05%)	9.55 (0.03%)	33.3 (0.10%)

Рассмотрим следующий этап метода – подтверждение алгоритма перехода к эквивалентному псевдогазу на экспериментальных данных.

### 2.3.3 Подтверждение алгоритма на результатах экспериментов

С целью подтверждения возможности перехода от природного газа к эквивалентным псевдогазам было произведено экспериментальное исследование [84]. Эксперимент заключался в создании газовых смесей, которые соответствуют исходному природному газу и эквивалентных четырёх- и пятикомпонентных газовых смесей. Потом производилось измерение ряда физических свойств полученных газовых смесей и их сравнение. В ходе эксперимента измерялись следующие физические свойства газовых смесей: скорость звука и коэффициент

теплопроводности. В таблице 2.3.3.1 приведены диапазоны компонентов газовых смесей, для которых проводились экспериментальные измерения.

Таблица 2.3.3.1 — Диапазоны для газовых смесей, для которых проводились экспериментальные измерения

Компонент	Молярная доля, %
Метан	80.05 – 100
Этан	0 – 10.165
Пропан	0 – 5
Н-бутан	0 – 2.65
Изобутан	0 – 0.5
Диоксид углерода	0 – 4.97
Азот	0 – 4.98

В таблицах 2.3.3.2 и 2.3.3.3 приведены некоторые исследуемые газовые смеси и эквивалентные им четырёх- и пятикомпонентные псевдогазовые смеси из исследованных ста газовых смесей.

Таблица 2.3.3.2 — Матрица исследуемых газовых смесей

№ смеси	Метан, %	Этан, %	Пропан, %	Бутан, %	Диоксид углерода, %	Азот, %
1	95	1	1	1	1	1
2	80	5	5	-	5	5
3	95	2.5	0.5	-	1	1
4	99.76	-	-	0.24	-	-
5	99.23	-	-	0.77	-	-
6	98.43	-	-	1.57	-	-
7	99.49	0.51	-	-	-	-
8	98.48	1.52	-	-	-	-
9	96.45	3.55	-	-	-	-
10	89.84	10.16	-	-	-	-

Таблица 2.3.3.3 — Эквивалентные четырёх- и пятикомпонентные псевдогазовые смеси

№ смеси	Четырёхкомпонентный псевдогаз				Пятикомпонентный псевдогаз				
	Эфф. CH <sub>4</sub> , %	Эфф. C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> , %	Эфф. CO <sub>2</sub> , %	Эфф. N <sub>2</sub> , %	Эфф. CH <sub>4</sub> , %	Эфф. C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> , %	Эфф. C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> , %	Эфф. CO <sub>2</sub> , %	Эфф. N <sub>2</sub> , %
1	95	3	1	1	94	2	2	1	1
2	82.5	7.5	5	5	-	-	-	-	-
3	96.25	1.75	1	1	-	-	-	-	-
4	99.63	0.37	-	-	99.51	0.25	0.24	-	-
5	98.84	1.16	-	-	98.44	0.78	0.78	-	-
6	97.64	2.36	-	-	96.85	1.57	1.58	-	-
7	99.74	0.26	-	-	-	-	-	-	-
8	99.23	0.77	-	-	-	-	-	-	-
9	98.23	1.77	-	-	-	-	-	-	-
10	94.92	5.08	-	-	-	-	-	-	-

Перейдем к рассмотрению алгоритма проведения экспериментальных исследований.

### 2.3.4 Алгоритм проведения эксперимента

Для создания газовых смесей использовалась газосмесительная станция, подробное описание которой приведено в четвёртой главе. Станция состоит из шести каналов для подачи определённого компонента природного газа: метана, этана, пропана, бутана, азота и диоксида углерода. Для задания каждого компонента в результирующей смеси используются регуляторы массового расхода компании Bronkhorst [85] - устройства для измерения и поддержания заданных параметров по расходу газа. Смешение компонентов заданного содержания происходит в технологической камере, и полученная смесь поступает на блок измерительных приборов. Для измерения и проверки содержания компонентов получаемой газовой смеси использовался эталонный анализатор - газовый хроматограф VARIAN CP4900 [86].

В процессе подготовки каждой газовой смеси проводилось пятикратное измерение компонентного состава с помощью хроматографа до достижения повторяемых результатов с отклонением не более 0,01% объемной доли содержания компонента в смеси. Компонентный



состав каждой смеси подстраивался с помощью регуляторов массового расхода до достижения необходимого содержания компонентов смеси с отклонением не более 0,01% объёмной доли каждого компонента.

В качестве измеряемых физических параметров газа были выбраны те, которые могут быть измерены доступными на рынке приборами и технологиями: скорость звука и коэффициент теплопроводности газовой смеси. Данные параметры при выбранных термодинамических стандартных условиях измерялись двумя однотипными измерительными приборами для верификации получаемых измерительных данных. В процессе проведения эксперимента производился контроль температуры, давления и относительной влажности газовой смеси. Данные параметры в течение всего эксперимента оставались постоянными.

Перейдем к анализу результатов экспериментальных исследований.

### **2.3.5 Анализ результатов эксперимента**

Для анализа результатов эксперимента был произведен сравнительный анализ измеренных свойств всех исследованных смесей и соответствующих им псевдогазов. Более подробно данный анализ описан в четвёртой главе.

В ходе обработки результатов эксперимента для всех исследованных смесей максимальное относительное отклонение составило 0.24% по скорости звука и 1.51% по теплопроводности для пятикомпонентного псевдогаза, и 0.21% по скорости звука и 1.05% по теплопроводности для четырёхкомпонентного псевдогаза.

Рассматриваемый алгоритм перехода от природного газа к эквивалентному четырёх- и пятикомпонентному псевдогазу был проиллюстрирован на результатах имитационного моделирования и подтвержден с помощью эксперимента, проводимого на реальных газовых смесях. Исходя из результатов проведённого эксперимента можно сделать вывод об адекватности применения алгоритма перехода к псевдогазу для рассматриваемых диапазонов компонентов газа и исследуемых физических параметров газа. Физические и качественные свойства четырёх- и пятикомпонентного псевдогазов с незначительными отклонениями соответствуют свойствам природного газа. Таким образом, псевдогаз с небольшим количеством компонентов может быть использован для моделирования многокомпонентного природного газа при создании, разработке и тестировании методов анализа природного газа.

## **2.4 Разработка статистической модели для определения компонентного состава псевдогаза по измеряемым физическим параметрам**

Этап разработки статистической модели включает в себя ряд последовательных задач, которые необходимо решить для разработки необходимой модели, а именно, выбор статистической модели, выбор архитектуры модели, выбор параметров модели, обучение модели, оценка точности работы разработанной модели, тестирование разработанной модели. Каждый из данных этапов является многоступенчатой задачей, состоящей из нескольких подзадач, которые необходимо решить для успешной разработки необходимой модели.

### **2.4.1 Выбор статистической модели**

В описанных аналитических методах из-за невозможности или высокой сложности решения поставленных задач традиционными методами, зачастую используются различные статистические модели. Данные модели, обладая рядом преимуществ перед традиционными алгоритмами [87], ставят в соответствие известным входным величинам неизвестные выходные, используя существующие между ними зависимости.

В связи с отсутствием общего алгоритма выбора модели для задачи анализа качества природного газа, а также разнообразием как статистических моделей, так и архитектур отдельных моделей, выбор модели для исследуемой задачи в большинстве случаев производится эвристическими методами. Соответственно, необходимо провести сравнительный анализ статистических моделей, которые возможно использовать в рассматриваемой задаче для выбора модели, которую наиболее целесообразно применять для имеющихся данных.

Перед проведением сравнительного анализа статистических моделей для задачи определения качества газа, необходимо осуществить ряд предварительных процедур: выбор исходных данных и обеспечение единообразия условий для обучения моделей, а также выбор необходимых данных для тестирования моделей; выбор перечня статистических моделей для сравнения; выбор критериев и характеристик, по которым будут сравниваться принятые к анализу модели.

Первый этап заключается в выборе данных для обучения и тестирования модели. Данные должны соответствовать требованиям, предъявляемым к природному газу, но не должны создавать неразрешимых проблем в процессе анализа моделей с применением этих данных. Для подбора исходных данных была смоделирована выборка газовых смесей на основе российского природного газа с учетом допустимых диапазонов молярных долей компонентов путем перебора всех возможных комбинаций компонентов. Затем смоделированные газовые

смеси приводятся к эквивалентным четырёхкомпонентным псевдогазовым смесям для упрощения проведения анализа рассматриваемых статистических моделей. Исходя из полученной модели природного газа, выходными параметрами для модели выбираются подлежащие определению концентрации эффективных компонентов псевдогазовой смеси, а именно, метана, пропана и азота. Входными параметрами для модели должны являться физические параметры природного газа.

Необходимо отметить, что перед обучением модели исходные данные подвергаются кросс-валидации и нормализации для равномерного использования данных и улучшения результатов прогноза исследуемыми моделями. Для данной задачи использовалась выборка размером 550734 элементов. Диапазоны концентраций, входящих в обучающую выборку компонентов и их параметров, использовавшихся в качестве входных параметров показаны в таблице 2.4.1.1.

Таблица 2.4.1.1 — Диапазоны концентраций газовых смесей и их параметров для обучающей выборки этапа выбора статистической модели

Параметр	Диапазон
Концентрация метана, %	80 – 100
Концентрация азота, %	0 – 5
Концентрация пропана, %	0 – 5
Концентрация диоксида углерода, %	0 – 5
Скорость звука, м/с	401.49 – 445.02
Коэффициент теплопроводности, мВт/(м·К)	30.59 – 33.27

Следующим этапом является выбор перечня статистических моделей, которые можно использовать для решения задачи анализа компонентного состава природного газа. Данный выбор производится исходя из исследования источников, в которых рассматриваются проблемы, возникающие при подборе статистических моделей для определённых задач нефтегазовой промышленности [88 - 90], а также практической возможности реализовать выбранные статистические модели [91 – 95] и эффективности выбранных моделей для решения поставленной задачи.

По итогам исследования для сравнительного анализа выбраны следующие модели: многопараметрическая линейная регрессия (LINREG) [92], гребневая регрессия (RIDGE) [93], модель регрессии на основе гауссовских процессов (GPR) [94], нейросетевая модель (многослойный перцептрон) (ANN) [95].

### **2.4.1.1 Выбор параметров для оценки выбранных моделей**

В качестве основных параметров, по которым делается вывод о возможности применения статистической модели, зачастую используется точность работы модели [96]. В проводимом сравнительном анализе рассчитываются различные параметры как для тренировочной, так и для тестовой выборки. Учитывается тот факт, что статистическая модель может показать хорошие результаты на этапе тренировки, но высокую погрешность на этапе тестирования. Также важным параметром при оценке работы статистической модели является время, затраченное моделью на обучение. На больших выборках время обучения моделей со сложной архитектурой может быть велико и не соответствовать требуемым характеристикам.

Для оценки точности работы модели, как и на предыдущих шагах, рассчитываются следующие параметры: средняя абсолютная погрешность и средняя относительная погрешность. Учитывая тот факт, что модель может иметь удовлетворительную среднюю погрешность, но при этом иметь выбросы в отдельных точках, необходимо также рассчитать максимальную абсолютную погрешность и максимальную относительную погрешность.

### **2.4.1.2 Проведение сравнительного анализа выбранных статистических моделей**

Все рассматриваемые статистические модели обучались на одних и тех же данных, сформированных согласно описанным ранее требованиям. Расчет входных параметров для моделей был произведен с помощью программного комплекса NIST REFPROP. Само же обучение статистических моделей проводилось в пакете Matlab 2019b с использованием функционала Deep Learning Toolbox. Более подробное описание проведенного сравнительного анализа приведено в приложении.

Рассматриваемые статистические модели (многопараметрическая линейная регрессия, гребневая регрессия, регрессия на основе гауссовских процессов, нейросетевая модель в виде многослойного перцептрона) были подвергнуты сравнительному анализу для выбора наиболее подходящей модели для решения задачи анализа компонентного состава природного газа. Исходя из результатов сравнительного анализа был сделан вывод об использовании нейросетевой модели в качестве основной статистической модели для решения поставленной задачи.

Учитывая большое разнообразие видов архитектур нейронных сетей, были проанализированы различные применения нейронных сетей для задач определения каких-либо параметров. Например, из рассмотрения были исключены сверточные нейронные сети [97] по

причине применения данного типа нейронных сетей в основном для задач по распознаванию и классификации.

Кроме приведенной выше архитектуре нейронной сети в виде многослойного перцептрона (ANN) [98, 99] для анализа были выбраны простая рекуррентная нейронная сеть (RNN) [100], рекуррентная нейронная сеть с долгой краткосрочной памятью (LSTM) [101], рекуррентная нейронная сеть с управляемым рекуррентным блоком (GRU) [102]. Подробное описание исследуемых моделей приведено в приложении.

Рассматриваемые статистические модели (нейросетевая модель в виде многослойного перцептрона, рекуррентная нейронная сеть, рекуррентная нейронная сеть с долгой краткосрочной памятью, рекуррентная нейронная сеть с управляемым рекуррентным блоком) были подвергнуты сравнительному анализу для выбора наиболее подходящей модели для решения задачи анализа компонентного состава природного газа. Исходя из сравнения времени, необходимого для обучения исследуемых моделей, был сделан вывод об увеличении времени обучения модели при усложнении ее архитектуры. Учитывая тот факт, что в предлагаемом методе анализа компонентного состава газа модели тренируются на расчётных данных до этапа применения модели к реальным данным, увеличение времени обучения в рамках нескольких часов не ухудшает применимость метода. Исходя из сравнения точности работы моделей как на этапе обучения, так и на этапе тестирования был сделан вывод о снижении погрешности модели с ростом сложности ее архитектуры. Обобщая результаты проведённого сравнительного анализа статистических моделей предлагается использовать нейросетевую модель с более сложной архитектурой в работе с реальными данными. В схожих с рассмотренной задачах анализа компонентного состава природного газа, а также в других задачах определения энергетических характеристик газа рекомендуется использовать нейросетевые модели с близкой к рассмотренным архитектурой.

#### **2.4.2 Обучение модели**

Необходимо отметить, что перед обучением модели данные подвергаются кросс-валидации, т.е. перекрестной проверке – методу оценки аналитической модели и её поведения на независимых данных. Данная процедура заключается в следующем: имеющиеся в наличии данные разбиваются на  $k$  частей, затем на  $k - 1$  частях данных производится обучение модели, а оставшаяся часть данных используется для тестирования модели. Процедура повторяется  $k$  раз; в итоге каждая из  $k$  частей данных используется для тестирования. В результате получается оценка эффективности выбранной модели с наиболее равномерным использованием имеющихся данных. Для данной задачи выборка размером  $N = 511476$  элементов разбивалась

на  $k = 10$  частей. Также обучающая выборка перед тренировкой подвергалась процедуре нормализации с целью улучшения результатов прогноза исследуемой нейросетевой моделью. При расчете скорости звука использовалось уравнение состояния газа GERG-2008 для стандартных условий по температуре и давлению. Теплопроводность газовой смеси рассчитывалась на основе моделей для индивидуальных компонентов и расширенной модели соответствующих состояний, реализованных в NIST REFPROP.

В качестве обучающего алгоритма выбран алгоритм Левенберга–Марквардта [103, 104].

Для более адекватного проведения анализа выбранные модели обучались на одном и тех же данных несколько раз, и затем бралось среднее время обучения модели и средняя точность модели за несколько циклов обучения. Исходя из анализа времени, затраченного на обучение, можно сделать вывод об приемлемости времени обучения для всех исследуемых моделей в рамках рассматриваемой задачи. Сравнительный анализ точности на этапе обучения для исследуемых моделей показан в таблице 2.4.2.1. Абсолютные погрешности (MAE и MaxAE) приводятся в единицах определяемых концентраций (молярная доля, в %), относительные погрешности (MAPE и MaxAPE) приводятся в %.

Таблица 2.4.2.1 — Сравнение точности на этапе обучения для исследуемых моделей

Компонент	Характеристика	Модель			
		LINREG	RIDGE	GPR	ANN
Метан	MaxAE, молярная доля, %	5,383	5,373	0,581	0,491
	MAE, молярная доля, %	0,382	0,382	0,007	0,007
	MaxAPE, %	5,396	5,386	0,611	0,491
	MAPE, %	0,441	0,442	0,008	0,008
Азот	MaxAE, молярная доля, %	6,464	6,450	0,362	0,247
	MAE, молярная доля, %	0,479	0,480	0,025	0,010
	MaxAPE, %	6,481	6,472	0,383	0,249
	MAPE, %	0,514	0,501	0,027	0,011
Пропан	MaxAE, молярная доля, %	1,081	1,077	0,589	0,426
	MAE, молярная доля, %	0,107	0,107	0,011	0,007
	MaxAPE, %	1,095	1,087	0,589	0,446
	MAPE, %	0,109	0,109	0,011	0,009

Сравнительный анализ точности на этапе тестирования для исследуемых моделей показан в таблице 2.4.2.2.

Таблица 2.4.2.2 — Сравнение точности на этапе тестирования для исследуемых моделей

Компонент	Характеристика	Модель			
		LINREG	RIDGE	GPR	ANN
Метан	МахАЕ, молярная доля, %	5,531	5,399	0,592	0,511
	МАЕ, молярная доля, %	0,416	0,399	0,009	0,008
	МахАРЕ, %	5,578	5,423	0,712	0,529
	МАРЕ, %	0,567	0,487	0,012	0,010
Азот	МахАЕ, молярная доля, %	6,691	6,689	0,353	0,236
	МАЕ, молярная доля, %	0,523	0,501	0,024	0,009
	МахАРЕ, %	6,526	6,516	0,394	0,253
	МАРЕ, %	0,578	0,561	0,028	0,011
Пропан	МахАЕ, молярная доля, %	1,125	1,099	0,592	0,432
	МАЕ, молярная доля, %	0,109	0,109	0,012	0,007
	МахАРЕ, %	1,239	1,102	0,596	0,448
	МАРЕ, %	0,131	0,115	0,011	0,009

Все рассматриваемые статистические модели обучались на одних и тех же данных, сформированных согласно описанным ранее требованиям. Расчет входных параметров для моделей был произведен с помощью программного комплекса NIST REFPROP. Само же обучение статистических моделей проводилось в пакете Matlab 2019b с использованием функционала Deep Learning Toolbox.

Сравнительный анализ нейросетевых моделей проводился аналогично сравнительному анализу для выбора статистической модели. Сравнительный анализ точности на этапе обучения для исследуемых моделей показан в таблице 2.4.2.3. Сравнительный анализ точности на этапе тестирования для исследуемых моделей показан в таблице 2.4.2.4.

Таблица 2.4.2.3 — Сравнение точности на этапе обучения для исследуемых моделей

Компонент	Характеристика	Модель			
		ANN	RNN	LSTM	GRU
Метан	MaxAD, %	0.611	0.476	0.412	0.408
	MAD, %	0.329	0.210	0.243	0.219
	MSE	0.581	0.491	0.451	0.401
	R <sup>2</sup>	0.998	0.9998	0.9998	0.9999
Азот	MaxAD, %	0.312	0.271	0.281	0.256
	MAD, %	0.161	0.183	0.171	0.128
	MSE	0.341	0.291	0.289	0.195
	R <sup>2</sup>	0.998	0.9999	0.9999	0.9999
Пропан	MaxAD, %	0.512	0.331	0.305	0.245
	MAD, %	0.267	0.181	0.179	0.115
	MSE	0.356	0.201	0.197	0.191
	R <sup>2</sup>	0.998	0.9998	0.9998	0.9999

Таблица 2.4.2.4 — Сравнение точности на этапе тестирования для исследуемых моделей

Компонент	Характеристика	Модель			
		ANN	RNN	LSTM	GRU
Метан	MaxAD, %	0.823	0.767	0.783	0.781
	MAD, %	0.456	0.381	0.356	0.343
	MSE	0.581	0.491	0.451	0.401
	R <sup>2</sup>	0.998	0.9998	0.9998	0.9999
Азот	MaxAD, %	0.312	0.271	0.281	0.256
	MAD, %	0.161	0.183	0.171	0.128
	MSE	0.341	0.291	0.289	0.195
	R <sup>2</sup>	0.998	0.9999	0.9999	0.9999
Пропан	MaxAD, %	0.512	0.331	0.305	0.245
	MAD, %	0.267	0.181	0.179	0.115
	MSE	0.356	0.201	0.197	0.191
	R <sup>2</sup>	0.998	0.9998	0.9998	0.9999



В данной работе рассматривались модели, архитектура которых имеет один скрытый слой. Размерность входного слоя определена количеством входных физических параметров газа. Размерность выходного слоя определена количеством определяемых концентраций компонентов газа. Учитывая данные факты, в качестве основного настраиваемого параметра для модели использовалось число нейронов в скрытом слое сети. Результаты проведенного исследования по выбору числа нейронов в скрытом слое показаны в таблице 2.4.2.5.

Таблица 2.4.2.5 — Сравнение точности для исследуемых моделей с различным количеством нейронов в скрытом слое

Компонент	Характеристика	Количество нейронов в скрытом слое		
		5	11	25
Метан	МахАЕ, молярная доля, %	0,511	0,467	0,499
	МАЕ, молярная доля, %	0,008	0,006	0,008
	МахАРЕ, %	0,529	0,481	0,511
	МАРЕ, %	0,010	0,009	0,010
Азот	МахАЕ, молярная доля, %	0,236	0,179	0,223
	МАЕ, молярная доля, %	0,009	0,008	0,009
	МахАРЕ, %	0,253	0,193	0,238
	МАРЕ, %	0,011	0,010	0,011
Пропан	МахАЕ, молярная доля, %	0,432	0,318	0,421
	МАЕ, молярная доля, %	0,007	0,006	0,007
	МахАРЕ, %	0,448	0,371	0,439
	МАРЕ, %	0,009	0,008	0,009

Исходя из результатов проведенного исследования было определено, что наибольшей точностью обладает модель с одиннадцатью нейронами в скрытом слое.

С использованием алгоритма Левенберга–Марквардта происходит обучение разработанной нейронной сети на сформированных заранее расчетных данных. Перед этим необходимо задать критерий окончания обучения, например, максимальное значение отклонения, при котором обучение будет считаться законченным. В нашем случае для получения оценки вычисляется сумма квадратичных отклонений выходов сети от истинных значений. Также при обучении модели одним из критериев окончания обучения может выбираться максимальное количество циклов обучения, но, как видно из рисунка 2.4.2.1, выбор такого критерия приводит к неэффективному увеличению времени обучения.

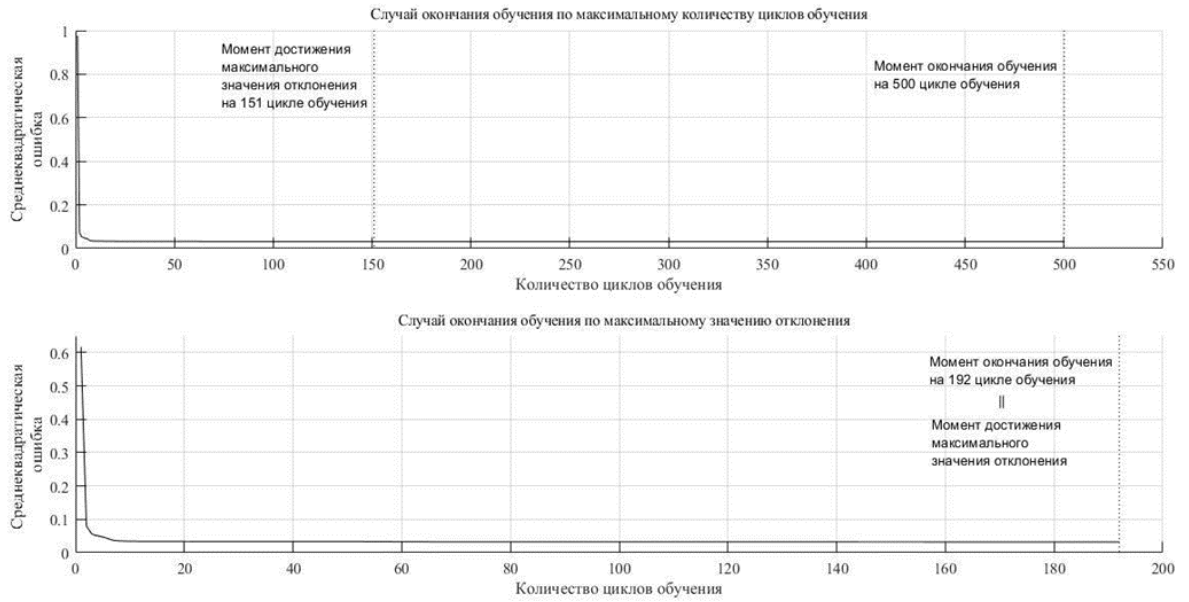


Рисунок 2.4.2.1 — Случаи окончания обучения для разрабатываемой нейросетевой модели

После успешного окончания обучения полученная нейросетевая модель тестируется на данных, которые не участвовали в тренировке модели. Затем для оценки точности работы модели рассчитываются следующие параметры:

- Максимальная абсолютная погрешность ( $\Delta Y_{\max}$ , молярная доля, в %):

$$\Delta Y_{\max} = \max(Y_{out} - Y_{target}), \quad (2.4.2.1)$$

где  $Y_{out}$  – значения требуемых параметров на выходе нейросети,  $Y_{target}$  – расчётные значения параметра.

- Средняя абсолютная погрешность ( $\Delta Y_{avg}$ , молярная доля, в %):

$$\Delta Y_{avg} = \frac{\sum_{i=1}^n (Y_{out} - Y_{target})}{n}, \quad (2.4.2.2)$$

Где  $n$  – объём выборки.

- Максимальная относительная погрешность ( $\delta_{\max}$ , в %):

$$\delta_{\max} = \max\left(\frac{Y_{out} - Y_{target}}{Y_{target}}\right) 100\%, \quad (2.4.2.3)$$

- Средняя относительная погрешность ( $\delta_{avg}$ , в %):

$$\delta_{avg} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\frac{Y_{out} - Y_{target}}{Y_{target}}\right) 100\%, \quad (2.4.2.4)$$

- Среднеквадратическое отклонение (MSE, в %<sup>2</sup>):

$$MSE = \frac{\sum_{i=1}^n (Y_{out} - Y_{target})^2}{n}, \quad (2.4.2.5)$$

- Коэффициент детерминации – параметр, показывающий насколько исследуемая модель соответствует данным ( $R^2$ , безразмерный). Равенство коэффициента детерминации единице означает, что данные в точности описываются рассматриваемой моделью:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (Y_{out} - Y_{target})^2}{\left( \sum_{i=1}^n \left( Y_{out} - \frac{\sum_{i=1}^n Y_{out}}{n} \right)^2 \right)}, \quad (2.4.2.6)$$

По перечисленным параметрам делается вывод о возможности использования модели для решения исследуемой задачи. В случае если модель обладает низкой точностью, повторяется этап обучения модели.

### 2.4.3 Тестирование разработанной модели

Для проверки эффективности работы разработанной модели проводится исследование на тестовой выборке данных. Данная выборка включала данные, которые не участвовали в обучении нейросетевой модели. Предварительная тестовая выборка включала 4358 газовых смесей, сформированные аналогично тренировочной выборке. Отклонение для диоксида углерода для модели принималась равным нулю, так как содержание в газе данного компонента в рассматриваемой задаче считается известным из-за наличия доступной технологии для его измерения, а именно технологии недисперсионного поглощения инфракрасного излучения (NDIR) [105]. Тестирование нейросетевой модели также проводилось в пакете Matlab 2019b с использованием функционала Deep Learning Toolbox. На рисунке 2.4.3.1 показаны результаты тестирования для нейросетевой модели в виде многослойного перцептрона в виде абсолютного отклонения результата определения моделью компонентного состава газа. Стоит отметить, что тестирование нейросетевой модели на данных экспериментов будет проведено в главе 4.

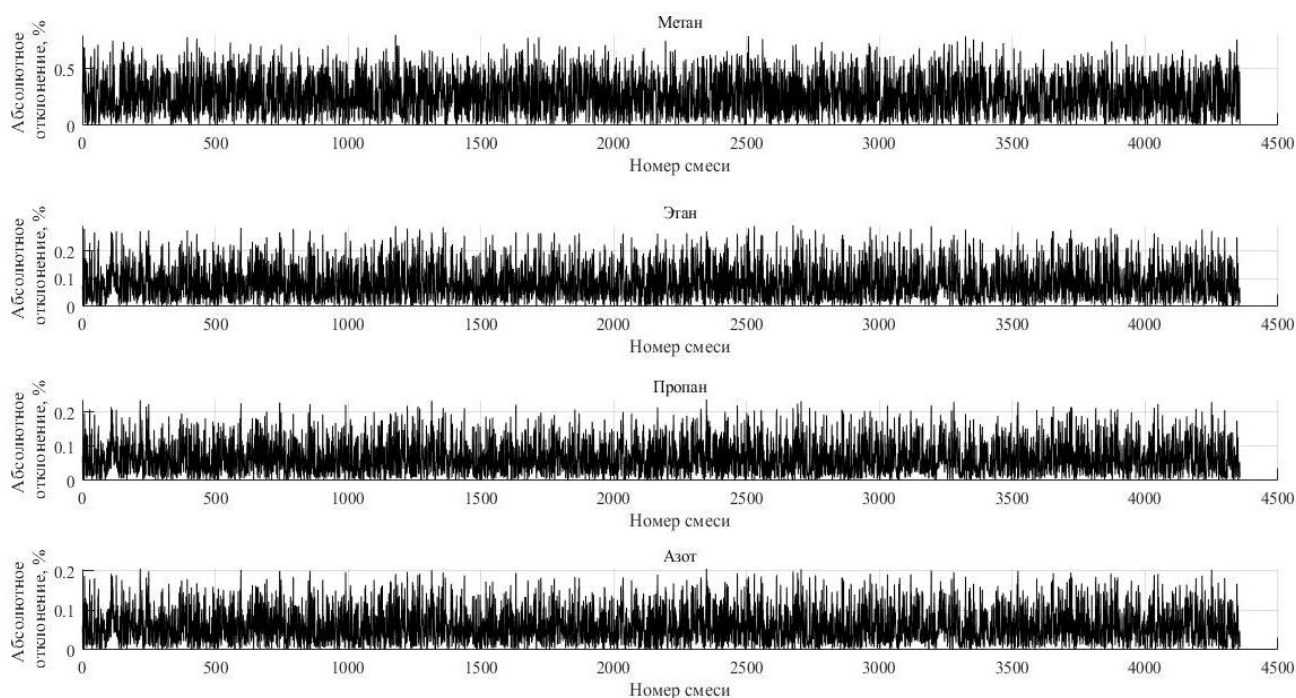


Рисунок 2.4.3.1 — Абсолютное отклонение результата определения моделью компонентного состава газа на тестовой выборке

Перейдем к апробации аналитического метода анализа качества газа на результатах имитационного моделирования и экспериментальных данных.

## 2.5 Апробация аналитического метода анализа качества газа на результатах имитационного моделирования и экспериментальных данных

Апробация предлагаемого метода анализа качества газа на результатах имитационного моделирования включала в себя сравнение с методом определения только энергетической характеристики и тестирование разработанной нейросетевой модели на расчётных данных, полученных в результате имитационного моделирования с последующим определением характеристик газовых смесей. Также апробация предлагаемого метода анализа качества газа включала тестирование нейросетевой модели на результатах проведенных экспериментов.

### 2.5.1 Сравнение предлагаемого метода с аналитическим методом определения только энергетической характеристики

Аналитические методы основаны на измерении входных физических параметров газовых смесей, по этим параметрам разработанная статистическая модель делает вывод о выходных параметрах газовой смеси. Данные методы должны удовлетворять требованиям существующих нормативных документов по определению энергетических характеристик природного газа по его компонентному составу [106]. В настоящее время разработано большое количество различных методов как практических, так и теоретических, которые по измерениям

определенных физико-химических параметров природного газа определяют требуемые энергетические характеристики газа. На рисунке 2.5.1.1 показана схема аналитического метода определения только энергетической характеристики природного газа.

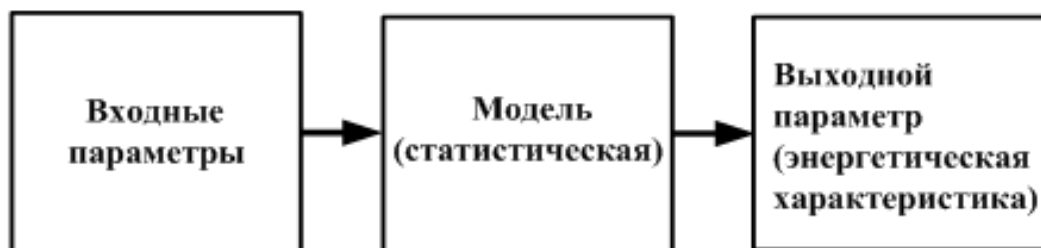


Рисунок 2.5.1.1 — Схема аналитического метода определения только энергетической характеристики природного газа

Анализ показал, что в ситуации, когда выходные параметры (энергетические характеристики) для различных газовых смесей будут близкими по значению, результат работы будет содержать ошибку. При применении метода в случае исследования большого количества разнообразных газовых смесей могут возникнуть неразрешимые проблемы. Такую ситуацию иллюстрирует таблица 2.5.1.1, где показана газовая смесь с известным компонентным составом и эквивалентные ей четырёх-и пятикомпонентные псевдогазовые смеси. Приведенные в таблице энергетические характеристики газовых смесей (относительная плотность, низшая теплотворная способность, высшая теплотворная способность, число Воббе) незначительно отличаются для приведенных газовых смесей.

Таблица 2.5.1.1 — Энергетические характеристики газовых смесей с различным компонентным составом

Характеристики газовой смеси	Исходная газовая смесь	Четырехкомпонентный псевдогаз	Пятикомпонентный псевдогаз
Относительная плотность, -	0,737	0,737	0,738
Низшая теплотворная способность, МДж/м <sup>3</sup>	38,781	38,787	38,795
Высшая теплотворная способность, МДж/м <sup>3</sup>	35,012	35,019	35,026
Число Воббе, МДж/м <sup>3</sup>	49,604	49,613	49,622
Компонентный состав, %	Метан – 94 Азот – 1 Диоксид углерода – 1 Этан – 1 Пропан – 1 Бутан – 1 Изобутан – 1	Метан – 93,5 Азот – 1 Диоксид углерода – 1 Пропан – 4,5	Метан – 92 Азот – 1 Диоксид углерода – 1 Этан – 3 Пропан – 3

Тем не менее, аналитический метод определения только энергетической характеристики природного газа применим в некоторых задачах контроля качества природного газа. В итоге, данный вид аналитических методов ограничен по диапазону решаемых задач и не использует весь потенциал доступных входных данных.

В предлагаемом варианте метода определения энергетической характеристики природного газа по компонентному составу указанные недостатки метода определения только энергетической характеристики природного газа отсутствуют. В предлагаемом методе определяется компонентный состав модели эквивалентного псевдогаза, по которому рассчитываются требуемые энергетические характеристики исследуемого газа. На рисунке

2.5.1.2 показана схема аналитического метода определения энергетических характеристик по компонентному составу.



Рисунок 2.5.1.2 — Схема аналитического метода определения энергетических характеристик по компонентному составу

В предлагаемом методе увеличивается число этапов вычисления, но время на получение окончательных результатов для двух рассматриваемых методов соизмеримо. В дальнейшем будет показано, что снижение точности из-за увеличения количества этапов вычисления не является критичным для решения поставленных задач контроля качества природного газа.

Для сравнения метода определения только энергетической характеристики природного газа и метода определения энергетических характеристик по компонентному составу эквивалентного псевдогаза исследуется работа двух нейросетевых моделей, в реализации которых заложен основной принцип функционирования рассматриваемых методов. Многие этапы, а именно этапы выбора данных для обучения и тестирования модели, выбор способа обучения модели и оценка точности работы статистической модели были одинаковыми для обоих сравниваемых методов для обеспечения единообразия работы разработанных моделей. Входными параметрами для статистических моделей, используемых в методах, являются выбранные физические параметры природного газа: скорость звука, теплопроводность и концентрация диоксида углерода. Определяемыми параметрами для обоих методов были выбраны низшая теплотворная способность, высшая теплотворная способность и число Воббе в силу того, что данные параметры являются выходными во многих разрабатываемых методах, а также используются при расчёте стоимостных характеристик товарного природного газа. Стоит отметить, что для метода определения только энергетической характеристики газа необходимо разработать по одной модели для определения каждого требуемого энергетического параметра, что также является особенностью рассматриваемого метода. Выходными параметрами для статистических моделей являются непосредственно требуемая энергетическая характеристика

для метода определения только энергетической характеристики и концентрации компонентов четырёхкомпонентного псевдогаза для метода определения энергетических характеристик по компонентному составу. Стоит отметить, что для предлагаемого метода концентрация диоксида углерода является входным и выходным параметром статистической модели одновременно. В качестве архитектуры используемой статистической модели была принята простая рекуррентная нейронная сеть (РНС) с одним скрытым слоем. Количество нейронов во входном слое равно трем по количеству входных физических параметров. Количество нейронов в выходном слое равно одному для метода прямого определения требуемого параметра и трем для предлагаемого метода по количеству выходных концентраций компонентов псевдогаза за исключением концентрации диоксида углерода. Количество нейронов в скрытом слое равно одиннадцати, функциями активации нейронов были выбраны сигмоидальная функция в виде гиперболического тангенса для скрытого слоя и линейная функция активации для выходного слоя. Структуры разработанных РНС для каждого из методов показаны на рисунке 2.5.1.3 и рисунке 2.5.1.4 ( $n$ ,  $k$ ,  $m$  – количество нейронов во входном, скрытом и выходном слоях). Для метода определения только энергетической характеристики на рисунке 2.5.1.3 показан случай для низшей теплотворной способности. Для высшей теплотворной способности и числа Воббе архитектуры РНС будут аналогичны.

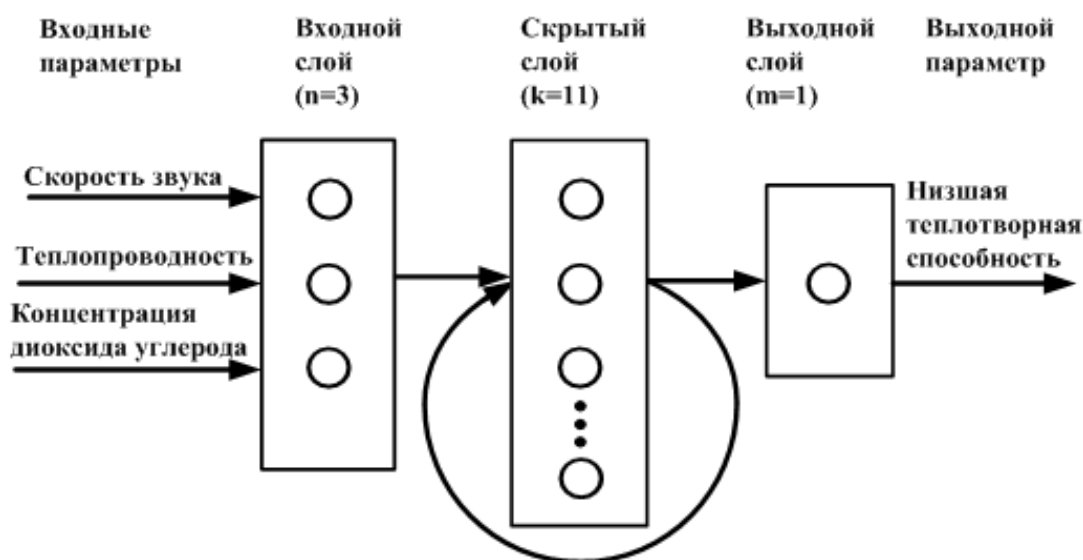


Рисунок 2.5.1.3 — Статистическая модель определения низшей теплотворной способности газа



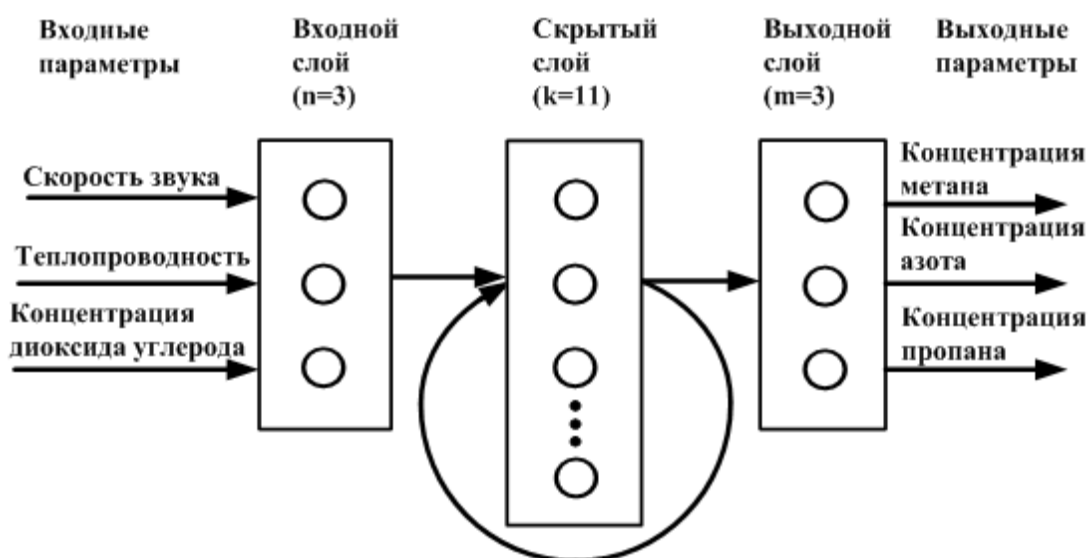


Рисунок 2.5.1.4 — Статистическая модель определения компонентного состава эквивалентного псевдогаза

Исследуемые статистические модели были разработаны, а также обучались и тестировались в Matlab 2019b. Входные параметры для моделей рассчитывались в программном комплексе NIST REFPROP. Также в данном комплексе производился расчёт теплотворной способности по определённому статистической моделью компонентному составу для предлагаемого аналитического метода. Программный код выполнения данных функций приведен в приложении.

После проведения обучения и тестирования статистических моделей проводился сравнительный анализ точности работы исследуемых методов. Для метода определения только энергетической характеристики природного газа точность рассчитывалась с использованием непосредственно требуемых энергетических параметров газа, полученных от статистической модели и исходных значений данных параметров. Для предлагаемого метода точность рассчитывалась с использованием рассчитанных по полученному от статистической модели компонентному составу энергетических параметров газа и исходных значений данных параметров. Для данного расчета использовалась выборка газовых смесей с следующими диапазонами по каждому компоненту: 80 - 100% для метана, 0 - 5% для азота, диоксида углерода и пропана. По результатам расчёта, показанным в таблице 2.5.1.2, были рассчитаны максимальное абсолютное отклонение (MAO), среднее абсолютное отклонение (CAO), максимальное относительное отклонение (MOO), среднее относительное отклонение (COO).

Таблица 2.5.1.2 — Сравнение точности определения энергетических параметров газовых смесей для двух рассматриваемых методов

Характеристика метода	$\Delta Y_{\max}$ , МДж/м <sup>3</sup>	$\Delta Y_{\text{avg}}$ , МДж/м <sup>3</sup>	$\delta_{\max}$ , %	$\delta_{\text{avg}}$ , %
Энергетическая характеристика	Низшая теплотворная способность			
Метод определения только характеристики	0,0533	0,0134	0,1404	0,0359
Метод определения характеристик по компонентному составу	0,0588	0,0154	0,1504	0,0413
Энергетическая характеристика	Высшая теплотворная способность			
Метод определения только характеристики	0,0432	0,0105	0,1244	0,0334
Метод определения характеристик по компонентному составу	0,0548	0,0144	0,1561	0,0427
Энергетическая характеристика	Число Воббе			
Метод определения только характеристики	0,0631	0,0157	0,1227	0,0346
Метод определения характеристик по компонентному составу	0,0721	0,0188	0,1411	0,0411

Приведённые результаты расчетов указывают на то, что точность определения параметров двух рассматриваемых методов весьма близка. Наибольшая разница для всех рассмотренных параметров по максимальному абсолютному отклонению 0,01165 МДж/м<sup>3</sup> (для высшей теплотворной способности) на порядок меньше допустимой погрешности по определению данных параметров, равной 0,5 МДж/м<sup>3</sup> для третьего класса измерительных приборов согласно нормативному документу по определению энергетических параметров природного газа [106].

Исходя из результатов исследования можно сделать вывод, что некоторое ухудшение точности в предлагаемом методе, связанное с увеличением количества этапов расчета, не выходит за пределы допустимой погрешности определения энергетических характеристик газа.

Перейдем к тестированию разработанной модели расчета компонентного состава псевдогаза на данных имитационного моделирования и определение характеристик газовых смесей.

## 2.5.2 Тестирование разработанной модели расчета компонентного состава псевдогаза на данных имитационного моделирования и определение характеристик газовых смесей

Исследование модели расчёта компонентного состава псевдогаза по измеренным физическим параметрам природного газа показало, что полученный в результате определения разработанной моделью псевдогаз можно использовать для определения свойств природного газа. Для проверки было проведено математическое моделирование на новой выборке данных, полученной путем перебора всех возможных вариантов компонентного состава, но с меньшим шагом изменения по отдельным компонентам по сравнению с этапом обучения модели. Шаг перебора по концентрации для этана, пропана, диоксида углерода и азота был равен 0.5%, для бутана и пентана - 0.25%, для гексана - 0.1%. Молярная доля метана рассчитывалась как балансная доля. Результирующая выборка составила около 1.5 миллиона возможных смесей природного газа. Расчетные физические параметры, которые являются входными для модели, были округлены до определенных значащих цифр для имитации ограничения проведения измерения реальными измерительными приборами. Учитывая технические характеристики коммерческих образцов измерительных приборов, параметры были округлены следующим образом: скорость звука до  $10^{-1}$  м/с, коэффициент теплопроводности до  $10^{-5}$  Вт/(м\*К). Точность результата определения компонентного состава псевдогаза разработанной моделью на сформированной выборке показана в таблице 2.5.2.1. Результат, определенный моделью, корректировался путем нормирования полученного компонентного состава.

Таблица 2.5.2.1 — Точность определения компонентного состава псевдогаза моделью

Компонент	$\Delta Y_{\max}$ , молярная доля, %	$\Delta Y_{\text{avg}}$ , молярная доля, %	MSE, % <sup>2</sup>	R <sup>2</sup> , -
Эффективный метан	0,124	0,027	0,033	0,9999
Эффективный пропан	0,046	0,012	0,014	0,9999
Эффективный азот	0,125	0,032	0,039	0,9999

На рисунке 2.5.2.1 приведено сравнение некоторых параметров, характеризующих качество природного газа: теплотворная способность, число Воббе, относительная плотность и коэффициент сжимаемости.

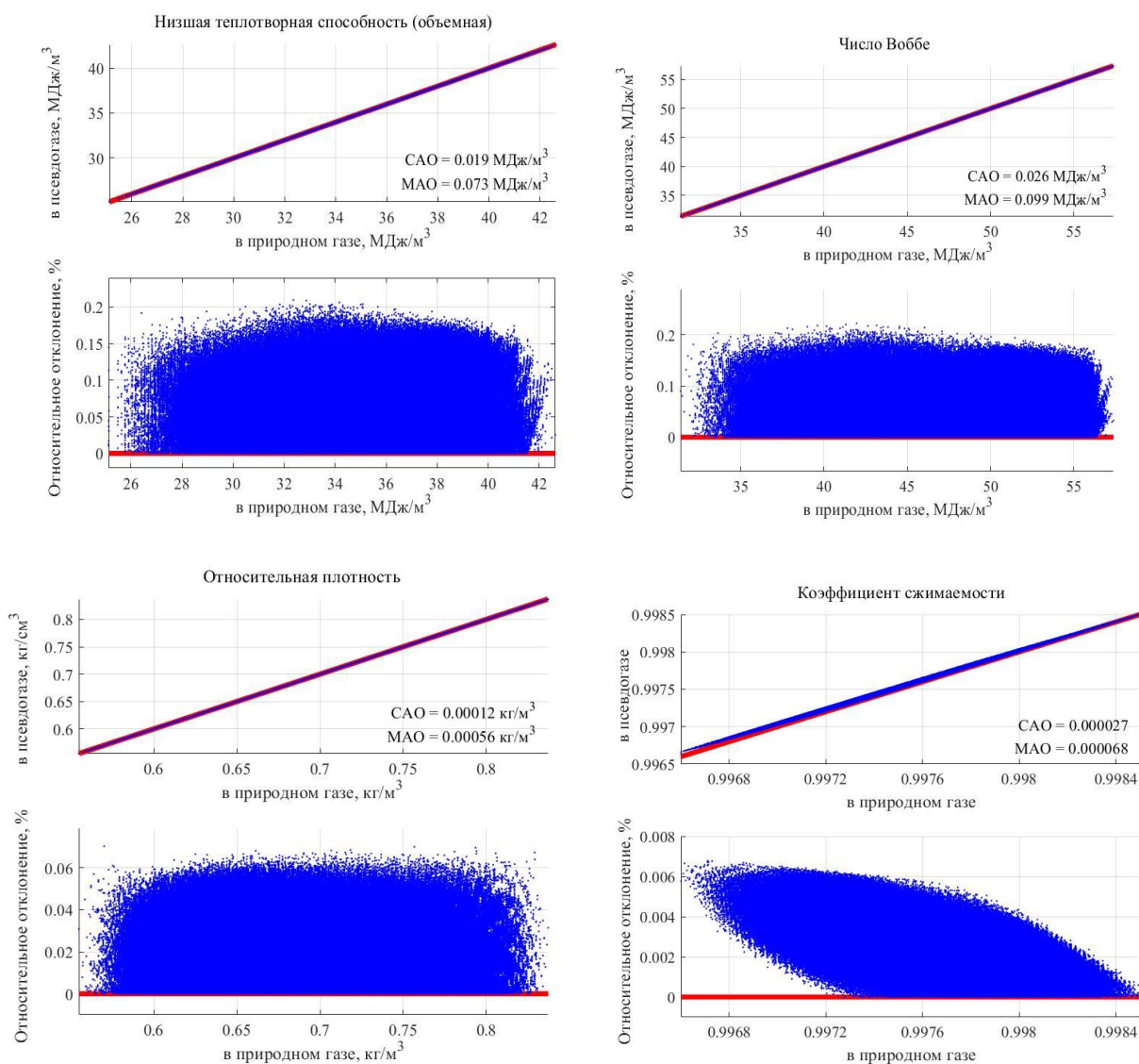


Рисунок 2.5.2.1 — Сравнение расчетных свойств (при стандартных условиях) для природного газа и определенного моделью псевдогаза

Результаты сравнения говорят о высокой сходимости свойств изначального природного газа и эквивалентного псевдогаза, определенного разработанной моделью.

### 2.5.3 Расчет методической погрешности метода анализа качества природного газа

Разрабатываемый метод анализа качества природного газа должен осуществлять определение требуемых энергетических характеристик природного газа с определённой точностью ( $\pm 0.5$  МДж/м<sup>3</sup>). Класс методов, к которому принадлежит разрабатываемый метод, как правило, относят к третьему классу [106].

Согласно данному нормативному документу методы и системы третьего класса должны определять требуемую величину с точностью не более  $\pm 0.5$  МДж/м<sup>3</sup>, что соответствует

относительной погрешности приблизительно в 1% от измеряемой величины. Для исследования методической погрешности и оценки ее составляющих предлагается рассмотреть следующую концепцию.

Методическая погрешность исследуемого метода  $\gamma_{sum}$  состоит из трех составляющих: погрешность, вносимая на этапе перехода к модели эквивалентного псевдогаза  $\gamma_{pseudo}$ , погрешность, вносимая на этапе определения компонентного состава нейросетевой моделью  $\gamma_{ANN}$ , инструментальная погрешность, вносимая на этапе измерения физических параметров газа  $\gamma_{meas}$ .

Остальными составляющими погрешности предлагается пренебречь. С учетом случайного характера всех составляющих суммарную погрешность можно рассчитать по формуле:

$$\gamma_{sum} = \sqrt{\gamma_{pseudo}^2 + \gamma_{ANN}^2 + \gamma_{meas}^2} \quad (2.5.3.1)$$

По расчётным величинам погрешность перехода от рассматриваемой смеси к эквивалентной псевдогазовой смеси составляет (взято максимальное абсолютное отклонение): 0.35 м/с для скорости звука (VOS), 0.44 мВт/м\*К для теплопроводности (TCD), 0% для концентрации диоксида углерода CO<sub>2</sub> (т.к. содержание данного компонента в газе и эквивалентном псевдогазе совпадают), 33.4 кДж/м<sup>3</sup> для теплотворной способности. Затем для каждого параметра рассчитывается приведенная погрешность – отношение абсолютной погрешности к нормирующему значению (в качестве нормирующих значений были выбраны параметры чистого метана при стандартных условиях VOS<sub>CH<sub>4</sub></sub> = 445.01 м/с, TCD<sub>CH<sub>4</sub></sub> = 33.27 мВт/м\*К, CV<sub>CH<sub>4</sub></sub> = 37.04 МДж/м<sup>3</sup>). Рассчитав приведенную погрешность для каждого физического параметра была рассчитана общая приведенная погрешность перехода к эквивалентному псевдогазу ( $\gamma_{CO_2} = 0$ ).

$$\gamma_{pseudo} = \sqrt{\gamma_{VOS}^2 + \gamma_{TCD}^2 + \gamma_{CO_2}^2 + \gamma_{CV}^2} \quad (2.5.3.2)$$

По расчётным данным погрешность перехода к эквивалентному псевдогазу составила 0.0133%.

$$\gamma_{ANN} = \sqrt{\gamma_{CH_4}^2 + \gamma_{C_3H_8}^2 + \gamma_{N_2}^2} \quad (2.5.3.3)$$

Погрешности нейросетевой модели по компонентам рассчитываются как отношение абсолютной погрешности к соответствующим нормирующим значениям (X<sub>CH<sub>4</sub></sub> = 100%, X<sub>C<sub>3</sub>H<sub>8</sub></sub> = 7.5%, X<sub>N<sub>2</sub></sub> = 5%). По расчётным данным погрешность нейросетевой модели составила 0.0696%.

Погрешность измерения физических параметров складывается из погрешности измерительных приборов для измеряемых параметров газа (для предлагаемой конфигурации для верификации метода – это скорость звука, теплопроводность и концентрация диоксида углерода).

$$\gamma_{meas} = \sqrt{\gamma_{measVOS}^2 + \gamma_{measTCD}^2 + \gamma_{measCO_2}^2} \quad (2.5.3.4)$$

Для нормирующего теплотворной способности значения 40 МДж/м<sup>3</sup> требуемая суммарная погрешность  $\gamma_{sum}$  составляет 0.105%.

Можно рассчитать требуемую инструментальную погрешность измерительных приборов по формуле:

$$\gamma_{meas} = \sqrt{\gamma_{sum}^2 - \gamma_{pseudo}^2 - \gamma_{ANN}^2} \quad (2.5.3.5)$$

Для приведенных погрешностей измерения физических параметров газа в 0.1% для каждого параметра с теми же нормирующими значениями для чистого метана суммарная приведенная погрешность измерения составляет 0.02%. Достижение точности измерения, достаточной для решения задачи анализа качества предлагаемым методом, как было показано в разделе о тестировании метода обеспечивает применение в качестве первичных преобразователей серийно-выпускаемых или специализированных измерительных приборов с установленными метрологическими характеристиками.

#### **2.5.4 Результат апробации метода определения энергетических характеристик природного газа**

Разработан и исследован аналитический метод определения энергетических характеристик природного газа. Метод заключается в последовательности аналитических операций над исходными данными, полученными от первичных преобразователей (в случае работы с экспериментальными данными) или расчётными данными в подсистеме подготовки исходных данных. Расчётные данные включают в себя компонентный состав исходного газа, компонентный состава эквивалентной ему модели псевдогаза, физические и энергетические параметры исходных и псевдогазовых смесей. В случае работы с расчётными данными, они подвергаются многокритериальной оценке с применением корреляционного анализа с целью определения наиболее подходящего набора входных физических параметров. Затем данные направляются для сравнительного анализа статистических моделей и, в исследуемом случае, нейросетевых моделей. Целью введения нейросетевых моделей в цепочку обработки данных являлось повышение точности определения компонентного состава модели псевдогаза,

подтверждённое в результате анализа. Наиболее подходящая статистическая модель отбирается для последующего определения требуемых параметров. После этого разработанная статистическая модель обучается и тестируется на расчетных данных. Стоит отметить, что для исследуемого метода не рекомендуется обучать и тестировать модель на экспериментальных данных для исключения из результатов обучения и тестирования погрешности, вносимой измерительными приборами. Затем разработанная статистическая модель применяется к измерительным данным для компонентного состава псевдогаза, по которому с помощью программного пакета (в его качестве может выступать коммерчески доступное программное обеспечение для расчёта параметров газа) определяются значения отдельных искомых показателей качества газа с последующим сравнением с эталонными данными для определения точности метода.

**Выводы по второй главе:**

В результате проведённого исследования была разработана структура предлагаемого метода обработки информации для анализа энергетических параметров природного газа. Основными преимуществами приведённой структуры являются:

1. Использование чётких критериев для определения входных и выходных информационных параметров, а именно, наличие известной и доступной на рынке технологии для измерения входных параметров и наличие высокой корреляции между входными и выходными параметрами и низкой корреляции между входными информационными параметрами (что подтверждается результатами корреляционного анализа и многокритериальной оценки).

2. Применение алгоритма перехода от информационных параметров исходной газовой смеси к информационным параметрам модели эквивалентной псевдогазовой смеси. Данный алгоритм был подтвержден на расчётных данных, полученных в результате имитационного моделирования, и экспериментальных данных.

3. Разработка и исследование нейросетевой модели в качестве статистической модели для определения необходимых выходных параметров.

4. Проведение сравнительного анализа на большом числе этапов разработки статистической модели, а именно на этапах выбора модели, выбора её архитектуры и параметров.

5. Независимый расчет точности на этапах обучения и тестирования статистической модели.

Моделирование показало, что погрешность определения энергетических характеристик природного газа удовлетворяет поставленным в диссертации требованиям. Например, максимальное абсолютное отклонение по расчётным данным составляет  $0.073 \text{ МДж/м}^3$  для низшей теплотворной способности и  $0.099 \text{ МДж/м}^3$  для числа Воббе при требуемой погрешности  $\pm 0.5 \text{ МДж/м}^3$  для третьего класса методов. Для метода определения только энергетической характеристики необходимо разрабатывать статистические модели отдельно для каждого требуемого параметра, поэтому невозможно определить больше одного параметра в одной задаче метода. В методе определения энергетических характеристик по компонентному составу эквивалентного псевдогаза отсутствуют данный недостаток, при этом сложность разработки и объем ресурсов, использованных в процессе разработки подобного метода, соизмеримы с методами, используемыми в газовой промышленности.



### **Глава 3. Методика и математические модели оценки эффективности обработки информации при использовании разработанного метода**

Каждый из рассмотренных в диссертации методов обработки информации для анализа качества газа может быть использован при проектировании АИС. Таким образом выбирая наиболее эффективный метод построения такой системы, используя его теоретические аспекты, сокращается время и стоимость проектирования АИС. Для проведения надежной обработки информации необходимо обеспечить надёжную структуру исследуемой системы. Для этого необходимо провести исследование надежности программно-технических средств с учетом требований, предъявляемых к данному классу целевых систем. Для разработки требований необходимо исследовать структуру системы, в том числе входящие в её состав программно-технические средства. Перейдем к реализации такой модели автоматизированной информационно-вычислительной системы.

#### **3.1 Построение системы сбора данных на основе исследуемого метода обработки информации для анализа качества газа**

Рассмотрим построение системы сбора данных (ССД) для исследуемой задачи анализа качества природного газа. На основе предлагаемой ССД планируется реализовать автоматизированную систему, являющуюся как информационным комплексом для мониторинга технологического процесса транспорта газа, так и информационно-вычислительным комплексом для расчёта ряда качественных показателей природного газа (например, его теплотворной способности). Исходя из различных принципов построения ССД в исследуемой задаче предлагается использовать мультиплексную ССД. Именно мультиплексные системы, обладающие индивидуальными средствами обработки сигнала в каждом измерительном канале, имеют наибольшее распространение в настоящее время среди различных систем сбора данных [130]. Одним из наиболее важных свойств является свойство распределённости. Следует особенно подчеркнуть существенную роль отношения местоположений элементов системы, как с точки зрения функционирования системы, так и с точки зрения анализа и синтеза системы.

Стоит отметить, что свойство распределённости присуще большинству систем, применяемых для газоанализа, которые в данном случае являются целевыми системами. Основными отличиями предлагаемой системы от существующих является использование в

качестве аппаратной части коммерчески доступных и относительно недорогих измерительных приборов, возможность расчёта ряда энергетических характеристик природного газа, в частности его теплотворной способности. Другим важным свойством рассматриваемой системы является ее принадлежность к классу систем реального времени. Стоит отметить, что свойство реального времени не является целью разработки, а определяется тем, что от первичных преобразователей данные поступают и обрабатываются непрерывно. При проектировании системы сбора данных предполагается, что проектирование с учётом реального времени производится в несколько этапов. Основной этап заключается в независимой разработке и отладке взаимосвязанных компонентов прикладного программного обеспечения и аппаратной части.

Программное обеспечение разрабатываемой системы сбора данных состоит из следующих основных компонентов: нижний уровень сбора данных (уровень измерительных приборов); блок взаимодействия нижнего и верхнего уровней (уровня измерительных приборов и уровня анализа и оценки информации); блок анализа данных после процесса мониторинга, их документирование и архивирование.

Структуру проектируемой информационной системы с алгоритмической точки зрения можно рассматривать как распределенную. На первом уровне данной системы расположены две измерительные камеры (это необходимо для верификации получаемых измерительных данных) с подсоединенными к ним первичными преобразователями. В качестве важного узла системы сбора данных предлагается использование приборов для измерения предусмотренных разработанным методом физических параметров анализируемой газовой смеси – скорости звука, теплопроводности и концентрации диоксида углерода [66 - 71]. На втором уровне системы находятся подсистемы сбора информации, функции которых заключается в опросе измерительных приборов и передачи информации на верхний уровень. На третьем уровне происходит процесс обработки поступающей информации, которая заключается в усреднении полученных измерительных данных, расчёта значений вспомогательных параметров, необходимых для последующего анализа, и визуализации полученных данных. На четвёртом уровне реализованы алгоритмы для анализа и оценки полученной измерительной информации, которые будут описаны позже. Данные алгоритмы предназначены для расчёта искомых энергетических характеристик исследуемой газовой смеси по результатам измерений её входных физических параметров. Также на данном уровне рассчитываются точность функционирования разработанной нейросетевой модели, подтверждающие адекватность применения предлагаемой модели.

### **3.2 Исследование надёжности информационно-вычислительной системы на основе аналитического метода анализа газа**

Для исследуемой модели информационно-вычислительной системы на основе аналитического метода анализа газа предлагается рассмотреть требования по надёжности функционирования системы. Независимо от выполняемых системой задач, ее структура должна обладать высоким уровнем надёжности.

Определение и оценка надёжности традиционных систем газоанализа при определении компонентного состава и энергетических характеристик газа является крайне сложной задачей. Одной из проблем при натуральных и полунатурных испытаниях, а также при эксплуатации данного класса целевых систем является обеспечение надёжности. Кроме того, срок эксплуатации таких систем составляет около десяти лет при достаточно высокой стоимости оборудования. При проведении полунатурных испытаний в специальных термокамерах при высокой температуре и влажности, а также при эксплуатации систем газоанализа трудно получить объективную картину характеристик надёжности. Кроме того, следует отметить высокие затраты на испытания и их длительность [107].

Тем не менее, оценивать надёжность для исследуемого класса систем крайне необходимо. Поэтому такие оценки существуют и применяются. Однако, для систем, к которым относится исследуемая в данной работе целевая система анализа энергетических характеристик газа, отличающихся по своей структуре и являющихся информационно-вычислительными, существующие методы в рассматриваемой задаче в общем случае не подходят. Ввиду этого, в данной работе разрабатывается адекватная модель надёжности системы и исследуются показатели надёжности, например, времени безотказной работы, средней наработки до отказа и т. д. Для этой цели и модифицируется вероятностный метод оценки надёжности автоматизированной информационной системы газоанализа.

Таким образом, разработанный метод позволяет проектировать специализированные структурные схемы систем газоанализа. Исследование таких структурных схем позволит оценить вероятностными методами характеристики надёжности целевых систем, а также обнаружить проблемные места систем газоанализа с точки зрения характеристик надёжности и технического обслуживания, а также оценить её с точки зрения надёжности.

Для оценки надёжности разработанной информационно-вычислительной системы анализа качества природного газа необходимо определить основные термины и показатели

надёжности, необходимые для определения уровня надёжности данного класса целевых систем. Согласно нормативному документу [108] под надёжностью будем понимать свойство объекта сохранять во времени в установленных пределах значения всех параметров, характеризующих способность выполнять требуемые функции в заданных режимах и условиях применения, технического обслуживания, хранения и транспортирования. Основные термины и показатели надёжности такой системы связаны с оценкой ее работоспособности. Для оценки работоспособности необходимо определиться с видом возникающих в ней отказов. В общем случае отказом будем считать событие, заключающееся в нарушении работоспособности системы. В исследуемой задаче отказы в системе являются параметрическими (приводящие к выходу параметров за допустимые пределы).

Основными показателями надёжности разрабатываемой системы являются:

- вероятность отказа системы (вероятность возникновения отказа в течение интервала времени работы);
- среднее время безотказной работы системы;
- интенсивность отказов;
- плотность распределения времени до отказа.

Методы оценки надёжности систем позволяют прогнозировать качество их функционирования с учетом возникающих ошибок, количества и интенсивности отказов, а также исправлять обнаруженные ошибки в процессе разработки и эксплуатации [109]. Многие методы оценки надёжности технических объектов основываются на вероятностных методах, в том числе Марковских схемах. Эти методы позволяют оценить надёжность функционирования техники, приборов и устройств в различных областях.

Для расчёта показателей надёжности технических систем применяются аналитические и имитационные методы [110]. К ним относятся методы теории случайных процессов, теории экспертных оценок (эвристического прогнозирования), декомпозиции (эквивалентирования), логико-вероятностные, асимптотические, аналитико-статистические методы. Методы теории случайных процессов применяются для оценки надёжности различных комплексов с непрерывными технологическими процессами, для исследования надёжности объектов промышленных предприятий, в том числе газовых комплексов.

Обычно на этапе проектирования распределенных систем расчеты надёжности основываются на данных об интенсивностях отказов входящих в них элементов, определяемых по результатам экспериментальных исследований. Но чтобы сделать вывод о надёжности системы в целом, необходимо производить расчёт, учитывая структуру

рассматриваемой системы и возможности по ее усовершенствованию. Методы расчёта структурной надёжности, основанные на данных об интенсивностях отказов, широко известны [129]. Примеры построения и оптимизации подобных моделей для распределённых информационно-вычислительных систем и систем управления сетями рассматриваются в работах [111 - 113]. Однако, применительно к задаче газоанализа у этого подхода есть недостатки. Понятие структурной надёжности как "способности системы выполнять заданные функции в течение заданного интервала времени" является слишком общим в задаче газоанализа, требует уточнения того, какие именно функции важны в этом случае. Первоочередной является задача анализа качества природного газа, при этом данная функция характеризуется через дискретное конечное пространство состояния системы (например, "работает"/"не работает") и не позволяет построить модель, применимую для практического использования, поскольку понятие точности измерения является характеристикой, изменяющейся непрерывно, и может варьироваться в зависимости от задачи. Поэтому в данной главе будет предложен новый подход и построена модель, основанная на анализе точности определения параметров газа.

Для расчёта структурной надёжности целевая распределенная система разделяется на элементы. Для расчёта показателей надёжности используются структурно - логические схемы надёжности, с помощью которых возможно графически отобразить взаимосвязь входящих в систему элементов и их влияние на работоспособность системы в целом. В данном случае структурно - логическая схема представляет собой совокупность соединенных друг с другом последовательно и/или параллельно элементов. Пример структурно-логической схемы расчета надёжности показан на рисунке 3.2.1 [129].

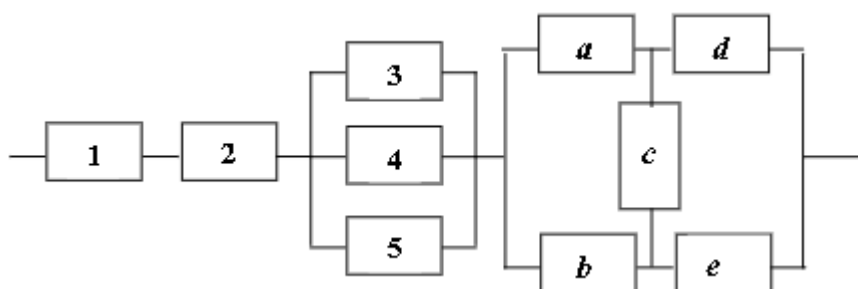


Рисунок 3.2.1 — Пример структурно-логической схемы расчета надёжности

Методы расчёта структурной надёжности хорошо известны и данный подход хорошо работает при стандартных случаях, например, об экспоненциальном распределении наработки на отказ (постоянных интенсивностях), независимости элементов [114, 115]. Структурная схема

распределённой системы сбора данных показана на рис. 3.2.2. В этом варианте схемы информация поступает в систему анализа информации по двум независимым измерительным каналам. Использование двух независимых измерительных каналов предполагается для верификации получаемой измерительной информации. Возможно укрупнение схемы путем добавления дополнительных измерительных каналов для увеличения как характеристик надёжности, так и точности распределённой системы, но в диссертации рассматривается система с двумя измерительными каналами. В данном варианте схемы измерительные приборы (ИП) соединены параллельно, так как предполагается, что отказ измерительного прибора не приводит к отказу системы, а снижает её точность. Для расчёта структурной надёжности по структурной схеме строится граф состояний. Пример графа состояний показан на рисунке 3.2.3 для состояний, показанных в таблице 3.2.1. При построении графа учитывается, что все элементы имеют различные показатели надёжности. Определяется характер потока отказов и интенсивность отказов и интенсивность восстановления для каждого элемента системы. По этим данным определяется вероятность нахождения каждого элемента в работоспособном или неработоспособном состоянии в определенный момент времени  $t$ . Затем составляется система дифференциальных уравнений, связывающая вероятности нахождения всех элементов в работоспособном или неработоспособном состоянии. Решая данную систему уравнений, можно получить требуемые показатели надёжности, например, стационарный коэффициент готовности системы.

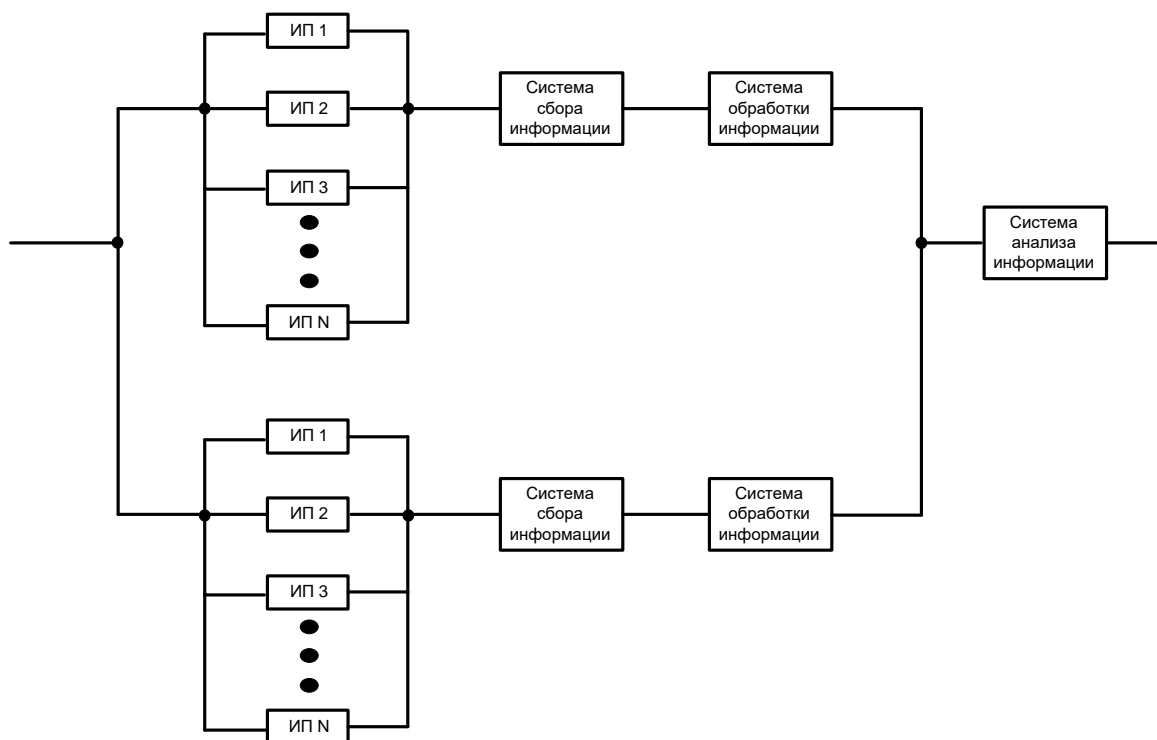


Рисунок 3.2.2 — Структурная схема информационной системы газоанализа

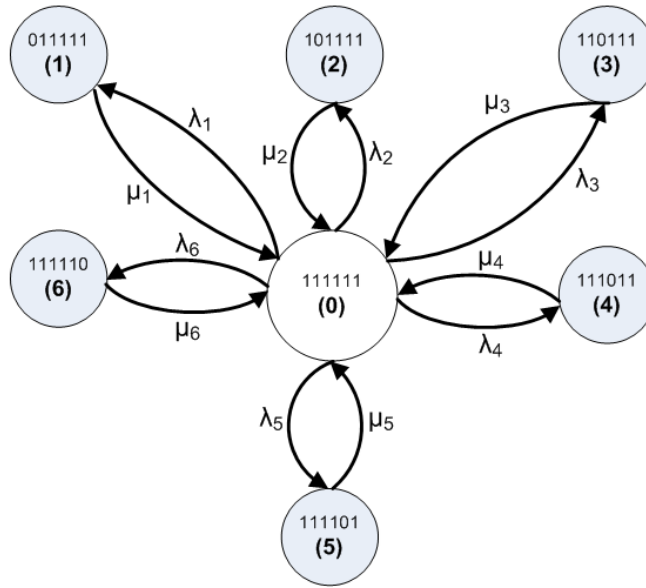


Рисунок 3.2.3 — Пример графа состояний исследуемой системы

Таблица 3.2.1 — Таблица состояний для рассматриваемого примера графа состояний

Состояние \ Номер ИП	(0)	(1)	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)
1	1	0	1	1	1	1	1
2	1	1	0	1	1	1	1
3	1	1	1	0	1	1	1
4	1	1	1	1	0	1	1
5	1	1	1	1	1	0	1
6	1	1	1	1	1	1	0

Надёжность резервированной системы (вероятность безотказной работы в течение времени  $t$ )  $p_r(t)$ , состоящей из элементов, работающих независимо в нагруженном режиме, в общем случае находится по следующей формуле:

$$p_r(t) = 1 - \prod_{k=1}^n \left( \frac{\lambda_k}{\lambda_k + \mu_k} - \frac{\lambda_k}{\lambda_k + \mu_k} e^{-(\lambda_k + \mu_k)t} \right), \quad (3.2.1)$$

Где  $\lambda_k$  и  $\mu_k$  - интенсивности отказов и восстановлений  $k$ -го элемента.

Соответственно, надёжность (вероятность безотказной работы)  $p_{rm}(t)$  системы из  $m$  последовательных блоков с  $(n-1)$ -кратным резервированием в общем случае может быть вычислена по формуле [116]:

$$p_{rm}(t) = \prod_{i=1}^m \left( 1 - \prod_{j=1}^n \left( \frac{\lambda_{ij}}{\lambda_{ij} + \mu_{ij}} - \frac{\lambda_{ij}}{\lambda_{ij} + \mu_{ij}} e^{-(\lambda_{ij} + \mu_{ij})t} \right) \right), \quad (3.2.2)$$

Для структурной схемы системы газоанализа, показанной на рисунке, произведён расчёт показателя надёжности - стационарного коэффициента готовности. В силу длительного срока эксплуатации систем газоанализа ( $t$  более 5 лет) предлагается пренебречь вторым слагаемым в формулах 3.2.1-3.2.2 и провести расчёт по упрощённым формулам. Расчёт проводился для следующих значений параметров: интенсивность отказов датчика температуры –  $\lambda_T = 1/20000 = 5 \cdot 10^{-5}$  1/ч; интенсивность отказов датчика давления:  $\lambda_P = 1/20000 = 5 \cdot 10^{-5}$  1/ч; интенсивность отказов датчиков скорости звука, теплопроводности, концентрации диоксида углерода:  $\lambda_{VOS} = \lambda_{TCD} = \lambda_{CO_2} = 1/15000 = 6.7 \cdot 10^{-5}$  1/ч; интенсивность восстановления для датчиков  $\mu_{sensor} = 0.1$  1/ч; интенсивность восстановления для систем сбора, обработки и анализа информации  $\mu_{comp} = 0.05$  1/ч; интенсивность отказов компьютера:  $\lambda_{comp} = 1/25920 = 3.9 \cdot 10^{-5}$  1/ч.

Для расчёта надёжности схема на рисунке 3.2.2 разбивается на несколько более простых схем, как показано на рисунке 3.2.4.

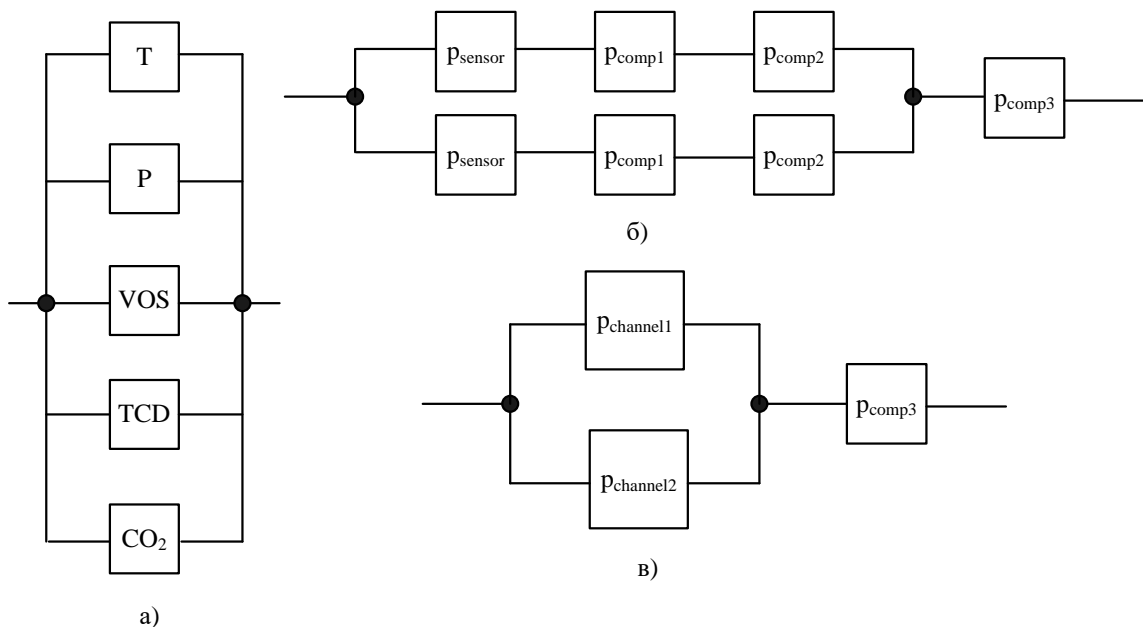


Рисунок 3.2.4 — Дополнительные схемы для расчёта надёжности

Вероятность безотказной работы параллельно соединённых датчиков  $p_{sensor}$  (Рисунок 3.2.4 (а)) находится по формуле:



$$P_{sensor} = 1 - \left( \frac{\lambda_T}{\lambda_T + \mu_T} * \frac{\lambda_P}{\lambda_P + \mu_P} * \frac{\lambda_{VOS}}{\lambda_{VOS} + \mu_{VOS}} * \frac{\lambda_{TCD}}{\lambda_{TCD} + \mu_{TCD}} * \frac{\lambda_{CO_2}}{\lambda_{CO_2} + \mu_{CO_2}} \right), \quad (3.2.3)$$

Вероятность безотказной работы для систем сбора, обработки и анализа информации  $p_{comp}$  (Рисунок 3.2.4 (б)) находится по формуле:

$$P_{comp} = 1 - \frac{\lambda_{comp}}{\lambda_{comp} + \mu_{comp}}, \quad (3.2.4)$$

Стоит отметить, что для систем сбора, обработки и анализа информации вероятности безотказной работы равны  $p_{comp1} = p_{comp2} = p_{comp3}$ . После проведенного расчёта схема упрощается до схемы на рисунке 3.2.4 (б). Вероятность безотказной работы  $p_{channel1}$  для одного измерительного канала находится по формуле:

$$P_{channel1} = P_{sensor} * P_{comp1} * P_{comp2}, \quad (3.2.5)$$

После проведенного расчёта схема упрощается до схемы на рисунке 3.2.4 (в). С учётом равенства вероятности безотказной работы измерительных каналов  $p_{channel1} = p_{channel2}$  вероятность безотказной работы для двух измерительных каналов  $p_{channel}$  рассчитывается по формуле:

$$P_{channel} = 1 - (1 - P_{channel1})^2, \quad (3.2.6)$$

Итоговая вероятность безотказной работы системы  $p_{final}$  рассчитывается по формуле:

$$P_{final} = P_{channel} * P_{comp3}, \quad (3.2.7)$$

Для численных значений интенсивностей отказов и восстановлений величина вероятности безотказной работы, которая численно равна стационарному коэффициенту готовности, составила 0.9992. Исходя из рассчитанного значения коэффициента можно сделать вывод о высокой надёжности представленной модели системы газоанализа.

Данная схема применима при стандартных подходах, но не позволяет ответить на вопрос будет ли при этом выполнена основная задача - обеспечение точности измерения. Ключевую роль здесь играет подсистема измерительных приборов. Именно с этой позиции и надо подходить к расчёту надёжности. Это требует введения новых определений и построения новой модели и другого подхода к надёжности для системы измерительных приборов. Т.е. стандартная схема расчёта надёжности содержит недостатки и для нашей задачи не подходит ввиду отсутствия новизны.

Основной недостаток стандартного подхода и применения формул (3.2.1 - 3.2.2) - это невозможность явно идентифицировать отказ некоторых элементов: необеспечение заданной

точности измерения по сути является скрытым отказом, внешне работающий измерительный прибор может при этом может передавать некорректные данные, при этом с точки зрения функционирования нашей системы — это отказ, последствия которого весьма критичны, потому что не выполняется основная функция системы - определение энергетических характеристик газа.

Если выход из строя системы сбора, обработки и анализа информации можно обнаружить явно (выход из строя компьютера), то с измерительными приборами это можно обнаружить не сразу. Если происходит отказ измерительных приборов, то явных внешних признаков у этого явления может и не быть. Т.е. это явление не наблюдаемое, и судить о нём мы можем только по выходным данным: для этого все измерительные приборы дублируются (см. рис. 3.1.1). Будем полагать, что отказ имел место, если данные, передаваемые с измерительных приборов, не верны, а это, в свою очередь будет идентифицироваться по разности между показаниями основного и резервного измерительных приборов: если показания сильно разнятся между первым и вторым измерительным прибором и превосходят некоторый порог. Это требует разработки нового подхода к оценке надёжности подсистемы измерительных приборов. Рассмотрим модель надёжности измерительных приборов более подробно. Стоит отметить, что для системы в целом надёжность рассчитывается по статистическим формулам, а для измерительных приборов по модели, которая будет описана в дальнейшем.

### 3.2.1 Исследование модели надёжности измерительных приборов

Для рассматриваемого случая будем считать, что для анализа каждого физического параметра газовой смеси необходимо два измерительных прибора - основной и резервный, которые функционируют независимо друг от друга. Измерительные приборы независимо передают сведения по двум различным каналам (основному и резервному) в систему сбора информации и далее в систему обработки информации - эти компоненты все вместе образуют измерительный канал (ИК). Основные ИП передают информацию в основной ИК. Резервные ИП передают сведения в резервный ИК, работающий в горячем режиме. Таким образом, распределённая система собирает информацию от  $2N$  измерительных приборов ( $N$  основных и  $N$  резервных). Поскольку главной задачей системы является определение энергетических характеристик, то систему будем считать надёжной, если она обеспечивает заданный уровень точности определения требуемых характеристик газа. Надёжность подсистемы "измерительный

канал – вычислительная система" определяется по стандартной схеме, описанной, например, в [111, 115]. И, поскольку все подсистемы функционируют независимо, то оценивать надёжность каждой из них можно независимо.

Рассмотрим модель надёжности подсистемы измерительных приборов. Будем считать, что подсистема измерения одного параметра газовой смеси находится в рабочем состоянии, если оба измерительных прибора (основной и резервный) дают для одного и того же момента времени одной и той же точки измерений одинаковые показания с учётом выбранного порога измерений. Если показания с двух приборов отличаются несущественно, то в этом случае считаем, что измерение можно считать достоверным, и система находится в работоспособном состоянии. В остальных случаях будем считать, что произошёл отказ. При этом можно считать, что измерительный прибор, предназначенный для определения соответствующего параметра газа, вышел из строя, если на выходе мы получаем существенную разницу в показаниях – до 10% (между основным и резервным). В этой ситуации фиксируется отказ подсистемы измерительных приборов для соответствующего параметра газа.

Теперь перейдём к более строгому описанию модели. Для этого введём следующие определения. Под надёжностью измерительной системы будем понимать её способность выполнять заданные функции в течение заданного интервала времени. При этом под "заданной функцией системы" понимается её способность осуществлять измерения параметров газа с заданной точностью.

**Определение 3.2.1.1.** Измерение для  $i$ -ого параметра газа будем считать точным, если разница между значениями, полученными с основного и резервного измерительного прибора, лежит в некотором, заранее выбранном диапазоне  $(-\varepsilon_i, \varepsilon_i)$ ,  $\varepsilon_i > 0$  – граница диапазона для  $i$ -ого параметра.

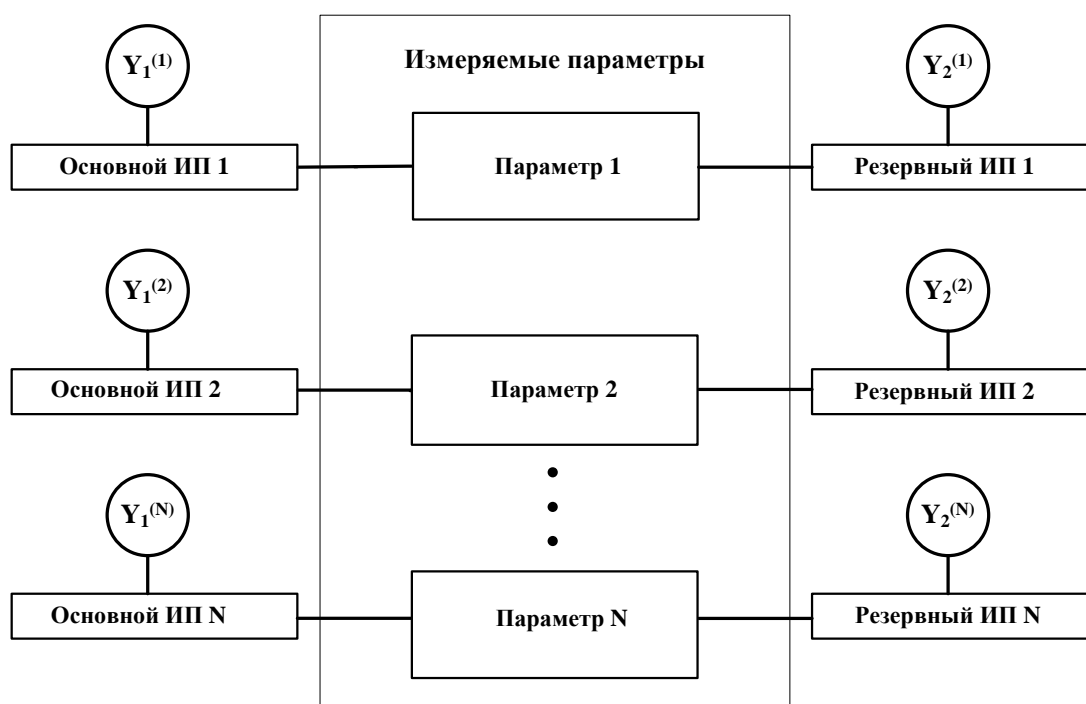
В случае, когда определять необходимо  $N$  параметров, то мы будем иметь дело уже с вектором положительных значений:  $\varepsilon = (\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_N)$ ,  $\varepsilon_i > 0 \forall i = 1, \dots, N$ , т.е. для каждого измерительного прибора задаётся некоторый диапазон допустимых значений  $(-\varepsilon_i, \varepsilon_i)$ .

**Определение 3.2.1.2.** Под отказом системы мы будем понимать выход показателя точности за допустимые границы. При этом, на практике понятие отказа необходимо уточнять каждый раз при решении определённой задачи: так, в случае  $N$ -компонентной смеси, под отказом будет пониматься выход за границы заданной точности измерений для подсистем  $k$  измерительных приборов из  $N$ , где  $k$  может принимать значения от 1 до  $N$  (в зависимости от условий эксплуатации и других, например, экономических факторов, условий эксплуатации системы, требования заказчика). В случае  $k = 1$  к подсистеме измерительных приборов

предъявляются самые жёсткие требования, т.е. невозможность измерить точно хотя бы один параметр газа уже считается отказом, в случае  $k = N$  для работоспособности подсистемы измерительных приборов достаточно иметь возможность измерить хотя бы один параметр газа. Сущность метода оценки надёжности по отклонению показаний основного и резервного измерительных приборов проиллюстрирована на рисунке 3.2.1.1 и в формуле 3.2.1.1.

$$\begin{aligned} |Y_1^{(1)} - Y_2^{(2)}| &= \xi_1 \\ \bullet \bullet \bullet & \\ |Y_1^{(N)} - Y_2^{(N)}| &= \xi_N \end{aligned} \quad , (3.2.1.1)$$

Где  $Y_1^i$  –  $i$ -ое измерение основного ИП,  $Y_2^i$  –  $i$ -ое измерение резервного ИП,  $\xi_i$  – значение отклонения для  $i$ -го измерения.



Рисунок

3.2.1.1 — Структура метода оценки надёжности по отклонению показаний основного и резервного измерительных приборов (ИП)

### 3.2.2 Модель надёжности подсистемы для измерения одного параметра газовой смеси

Допустим, что в системе измеряется только один параметр газовой смеси. Показания поступают в дискретные моменты времени с двух измерительных приборов (основного и резервного). Будем предполагать, что если измерительные приборы функционируют в штатном

режиме, то их показания лежат в заранее выбранном диапазоне. Мы будем наблюдать дискретную последовательность некоторых случайных величин:  $\{\xi_i\}$ ,  $i = 0, 1, 2, \dots$ , которые мы будем трактовать как разность между показаниями измерительных приборов. Естественно предположить, что если показания измерительных приборов отличаются несущественно, то значения этой последовательности будут колебаться около нуля. При этом, если бы мы рассматривали абсолютные замеры, то наблюдения были бы зависимыми. Но, поскольку мы наблюдаем модуль разности, то, вне зависимости от колебаний реального состава газа, это даёт нам основание полагать, что  $\{\xi_i\}$ ,  $i = 0, 1, 2, \dots$  независимые и одинаково распределённые случайные величины. Также, мы можем трактовать  $\xi_i$  как некоторую ошибку измерения. Поэтому будем считать, что элементы последовательности - нормальные случайные величины:  $\xi_i \sim N(0, \sigma^2)$ ,  $i = 0, 1, 2, \dots$ . Без потери общности можно считать, что дисперсия случайной величины  $\sigma^2 = 1$ , т.е. элементы последовательности - стандартные нормальные случайные величины. Сделаем следующие предположения относительно измерительных приборов: с ростом числа измерений (увеличением времени работы) повышается износ измерительных приборов, соответственно, растёт ошибка (разность между показаниями ИП). Скорость роста можно считать непостоянной в общем случае, зависящей от времени и от состояния системы  $m(i, X_i)$ . Поэтому, в качестве модели работы системы можно рассматривать случайный процесс в дискретном времени, характеризующий сумму накопленных ошибок:

$$X_i = m(i, X_i) * i + \sum_{k=0}^i \xi_k, \quad (3.2.2.1)$$

где  $i = 0, 1, 2, \dots$ ,  $m(i, X_i)$  можно трактовать как скорость нарастания ошибки, связанной с износом измерительного прибора (накоплением ошибки), обусловленным дополнительными факторами, и  $\xi_i \sim N(0, 1)$ .

Без потери общности можно предположить, что измерения производятся непрерывно, поэтому перейдём от (3.2.2.1) к непрерывной модели. В этом случае возникает естественная модель на базе броуновского движения [117]. И исследовать такую модель можно с помощью хорошо известных результатов из теории случайных процессов [118].

Недостаточная надёжность функционирования АИС приводит к наличию неточностей в оценке основных параметров исследуемого объекта информационной системы и, следовательно, к существенным стоимостным затратам. Для рассматриваемой архитектуры АИС была разработана методика (рисунок 3.2.2.1), основанная на оценке показателей точности информации в ходе ее обработки на нескольких этапах, в частности на этапах перехода к

информационным параметрам модели эквивалентного псевдогаза, этапе разработки статистической модели, а также при оценке входных информационных параметров за счет разности показаний измерительных приборов основного и резервного измерительного канала. Заключительным действием предлагаемой методики является результирующая оценка АИС по критериям отказа системы.

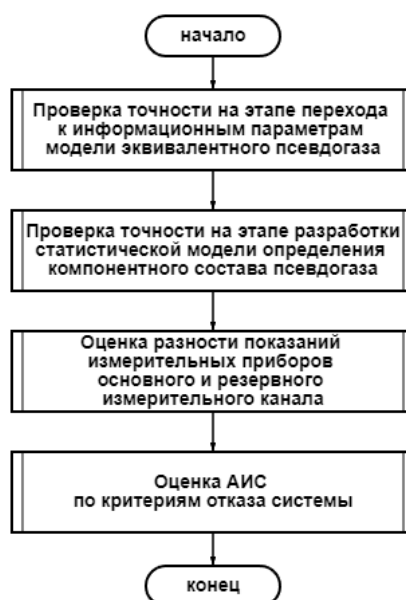


Рисунок 3.2.2.1 – Методика многоэтапной оценки точности информационных параметров АИС.

### 3.2.3 Предварительные исследования. Надёжность подсистемы измерительных приборов для случая, когда $N = 1$

Мы будем наблюдать случайный процесс в непрерывном времени  $X(t)$ , который можно описать простым дифференциальным уравнением [118]:

$$dX(t) = \mu(t, X(t))dt + \sigma(t, X(t))dW(t), \quad (3.2.3.1)$$

Данный подход можно также интерпретировать следующим образом: ошибку (разность) можно моделировать одномерным броуновским движением  $X(t) = W(t)$ , или, формально,  $dX(t) = dW(t)$ . Обобщая,  $dX(t) = \sigma(t, X(t))dW(t)$ , где коэффициент  $\sigma$  может в общем случае и не быть константой, а зависеть от состояния системы.

Т.е. мы предполагаем, что имеет место некоторая случайность в наших измерениях: то показание основного измерительного прибора больше резервного, то показание резервного больше основного, поэтому ошибка то увеличивается, то уменьшается. Также мы предполагаем, что метрологические характеристики и параметры надёжности измерительного прибора со временем снижаются, поэтому ошибка растёт в среднем с некоторой скоростью  $\mu$ .

Т.е. на интуитивном уровне модель изменения ошибки  $X$  описывается случайным блужданием, которое при устремлении к нулю шага времени будет стремиться к процессу, определяемому уравнением (3.2.3.1). Однако, далее мы предполагаем, что  $\sigma > 0$  и  $\mu \geq 0$  - константы:

$$dX(t) = \mu dt + \sigma dW(t), \quad (3.2.3.2)$$

Теперь предположим, что для измерительного прибора задан некоторый допустимый интервал значений его показаний  $(-A, A)$ ,  $A > 0$ , рамками работы которого определяется штатное функционирование системы [114]. В случае выхода за указанные границы фиксируется состояние отказа (рисунок 3.2.3.1).



Рисунок 3.2.3.1 — Фиксирование состояния отказа системы при достижении определенного уровня

**Определение 3.2.3.1.** Система находится в работоспособном состоянии, если  $X(t) \in (-A, A)$ .

**Определение 3.2.3.2.** Под отказом системы понимается событие - выход процесса на границу множеств  $X(t) \notin (-A, A)$ :  $X(t) \leq -A$  или  $X(t) \geq A$ .

**Определение 3.2.3.3.** Нарботка на отказ - это первый момент достижения  $A$ :

$$\tau_A = \inf \{t \geq 0: |X(t)| = A\},$$

(при строго положительном  $\mu$  вероятность  $P\{X(t)=A\} \rightarrow 0$ )

**Определение 3.2.3.4.** Функция надёжности системы (в общем случае) определяется как

$$R(t) = P(\tau > t),$$

**Определение 3.2.3.5.** Функция распределения времени работы системы (в общем случае):

$$F(t) = 1 - R(t) = P(\tau \leq t),$$

**Задача 3.2.3.1.** Для системы, описываемой в общем случае уравнением (3.2.3.2), оценить среднюю наработку на отказ  $MTTF = E_\tau$  (в простейшем случае найти явно аналитически).

Для выбора значений порога  $A_i$  для каждого из измеряемых параметров необходимо задаться точностью определения физических параметров газа. В большинстве стандартов [119] регламентируется приведенная погрешность определения требуемых параметров. С учётом того, что в качестве значений порогов необходимо привести значения максимальной абсолютной погрешности ИП, при которой значение разницы показаний измерительных приборов не выйдет за допустимые значения. В качестве таких значений предлагается использовать значение повторяемости измерений измерительных приборов, которые использовались для проведения экспериментальных измерений. Пороговые значения для всех входных и выходных параметров приведены в таблице 3.2.3.1.

Таблица 3.2.3.1 — Значения порогов для параметров газа

Физический параметр газа	Единицы измерения	Значение порога $A_i$
Концентрация метана, $X_{CH_4}$	Молярная доля, %	0.1
Концентрация пропана, $X_{C_3H_8}$	Молярная доля, %	0.1
Концентрация азота, $X_{N_2}$	Молярная доля, %	0.1
Концентрация диоксида углерода, $X_{CO_2}$	Молярная доля, %	0.1
Скорость звука, $c$	м/с	0.2
Теплопроводность, $\chi$	Вт/м*К	0.009



### 3.2.4 Надёжность подсистемы измерительных приборов

Особенностью рассматриваемой модели является то, что отказ измерительного прибора не приводит к отказу системы, а снижает её точность. На нашей схеме измерительные приборы соединены параллельно, однако расчёт надёжности как структурной надёжности параллельной подсистемы не является корректным, т.к. отказ  $N-1$  подсистемы в этом случае не приводит к фактическому отказу системы, а обеспечивает возможность определения лишь одного параметра газа. Поэтому для учёта влияния отказов отдельных измерительных приборов на точность расчётов корректной является модель надёжности “k out of N” ( $k \leq N$ ), далее везде будем полагать  $N = 5$ .

Рассмотрим несколько критериев работы системы:

**Критерий 1:** снижение показателей точности до заданного порога для всех параметров будем считать отказом системы (Рисунок 3.2.4.1).

**Критерий 2:** снижение показателей точности хотя бы для одного параметра будем считать отказом системы (Рисунок 3.2.4.2).

**Критерий 3:** снижение показателей точности для  $k$  ( $k < 5$ ) параметров будем считать отказом системы.

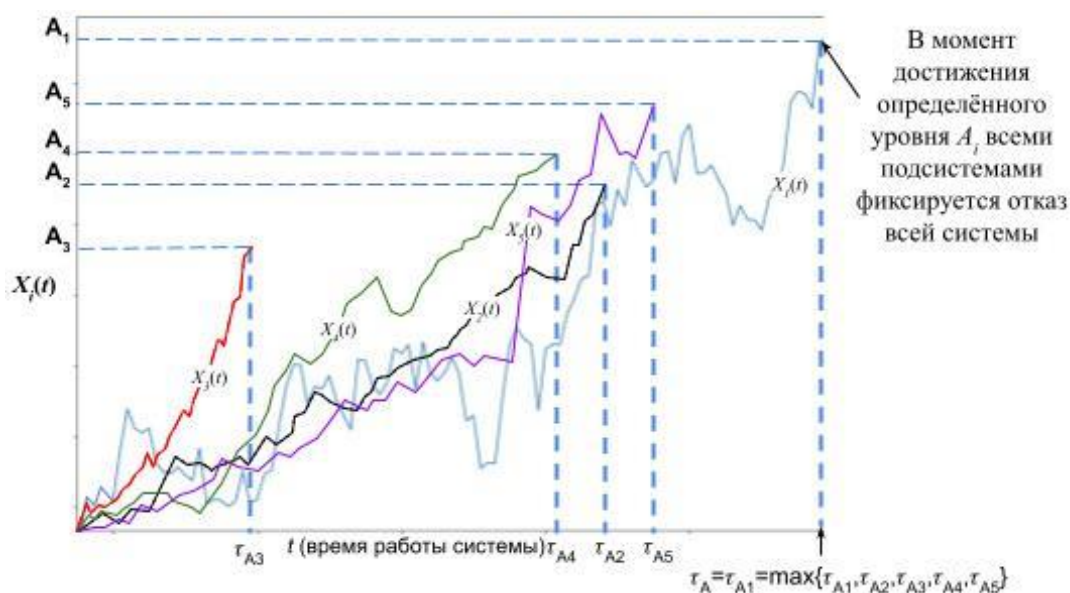


Рисунок 3.2.4.1 — Критерий 1: снижение показателей точности до заданного порога для всех параметров является отказом системы

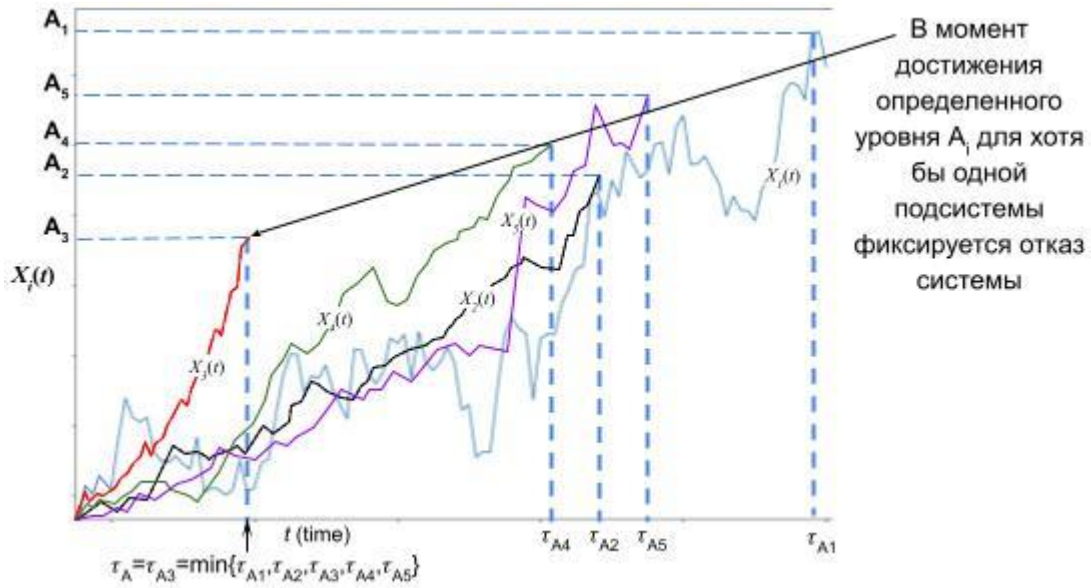


Рисунок 3.2.4.2 — Критерий 2: снижение показателей точности хотя бы для одного параметра является отказом системы

Рассмотрим первый критерий работы системы. Обозначим через  $F_1(t)$  функцию распределения времени работы системы для первого критерия.

**Теорема 3.2.4.1.** Функция распределения времени работы подсистемы  $F_1(t)$  для Критерия 1 находится по следующей формуле:

$$F_1(t) = \prod_{i=1}^5 (1 - \Phi(\frac{A_i - \mu_i t}{\sigma \sqrt{t}}) + e^{\frac{-2\mu_i A_i}{\sigma^2}} \Phi(\frac{-A_i - \mu_i t}{\sigma \sqrt{t}})), \quad (3.2.4.1)$$

**Доказательство.** Полагаем, что для каждого параметра ( $i = 1, 2, 3, 4, 5$ ) в газовой смеси имеет место модель изменения ошибки и заданы параметры  $A_i, \mu_i, \sigma$ .

Тогда функция распределения времени работы системы может быть определена как:

$$F_1(t) = P\{\tau_1 \leq t, \dots, \tau_5 \leq t\} = P\{\sup_{0 \leq s \leq t} X_1(s) \geq A_1, \dots, \sup_{0 \leq s \leq t} X_5(s) \geq A_5\} = \quad (3.2.4.2)$$

$$P\{\sup_{0 \leq s \leq t} (\mu_1 t + \int_0^t \sigma dW_1(t)) \geq A_1, \dots, \sup_{0 \leq s \leq t} (\mu_5 t + \int_0^t \sigma dW_5(t)) \geq A_5\} = \quad (3.2.4.3)$$

$$P\{\sup_{0 \leq s \leq t} W_1(t) \geq \frac{A_1}{\sigma} - \frac{\mu_1 t}{\sigma}, \dots, \sup_{0 \leq s \leq t} W_5(t) \geq \frac{A_5}{\sigma} - \frac{\mu_5 t}{\sigma}\}. \quad (3.2.4.4)$$

Воспользуемся следующим хорошо известным результатом для вероятности пересечения – винеровским процессом  $W(t)$  линейной границы а при заданных  $\mu$  и  $\sigma$  [120, 121].

$$P\left\{\sup_{0 \leq s \leq t} W(t) \geq A\right\} \approx 1 - \Phi\left(\frac{a - \mu t}{\sigma \sqrt{t}}\right) + e^{\frac{-2\mu a}{\sigma^2}} \Phi\left(\frac{-a - \mu t}{\sigma \sqrt{t}}\right), \quad (3.2.4.5)$$

Где  $\Phi$  – функция распределения для стандартного нормального закона.

Из (3.2.4.5) легко показать, что:

$$F_1(t) = \prod_{i=1}^5 \left(1 - \Phi\left(\frac{A_i - \mu_i t}{\sigma \sqrt{t}}\right) + e^{\frac{-2\mu_i A_i}{\sigma^2}} \Phi\left(\frac{-A_i - \mu_i t}{\sigma \sqrt{t}}\right)\right), \quad (3.2.4.6)$$

**Следствие 3.2.4.1.** Как следствие из теоремы 3.2.2.1 может быть найдена функция надёжности и средняя наработка до отказа для Критерия 1:

$$R_1(t) = 1 - F_1(t), \quad (3.2.4.7)$$

$$MTTF_1 = \int_0^{\infty} R_1(t) dt, \quad (3.2.4.8)$$

**Следствие 3.2.4.2.** Функция распределения времени работы подсистемы  $F_2(t)$ , функция надёжности и средняя наработка до отказа для Критерия 2 находятся по следующим формулам:

$$F_2(t) = \prod_{i=1}^n \left(1 - \Phi\left(\frac{A_i - \mu_i t}{\sigma \sqrt{t}}\right) + e^{\frac{-2\mu_i A_i}{\sigma^2}} \Phi\left(\frac{-A_i - \mu_i t}{\sigma \sqrt{t}}\right)\right), \quad (3.2.4.9)$$

$$R_2(t) = 1 - F_2(t), \quad (3.2.4.10)$$

$$MTTF_2 = \int_0^{\infty} R_2(t) dt, \quad (3.2.4.11)$$

**Теорема 3.2.2.2.** Функция распределения времени работы подсистемы  $F_3(t)$  для Критерия 3 находится по следующей формуле:

$$F_3(t) = \prod_{i=1}^5 \left(1 - \Phi\left(\frac{A_i - \mu_i t}{\sigma \sqrt{t}}\right) + e^{\frac{-2\mu_i A_i}{\sigma^2}} \Phi\left(\frac{-A_i - \mu_i t}{\sigma \sqrt{t}}\right)\right), \quad (3.2.4.12)$$

Как видно из приведённых выше формул, ключевым моментом в обеспечении высокой надёжности является повышение времени безотказной работы подсистемы измерительных приборов, поэтому считается целесообразным использование первичных преобразователей с высокими показателями надёжности, которые способны предоставлять требуемую измерительную информацию, что будет показано в дальнейшем с последующей оценкой точности определения требуемых параметров. В случае необеспечения требуемых показателей надёжности и точности предлагается использование более дорогостоящих преобразователей с более высокими показателями надёжности и точности.

На рисунке 3.2.4.3 показано сравнение результатов измерений основного и резервного измерительных приборов на примере измерительного прибора скорости звука. Исходя из проведенного исследования можно сделать вывод о достоверности измерительных данных, которые будут использовать в дальнейшем для экспериментальной апробации автоматизированной системы.

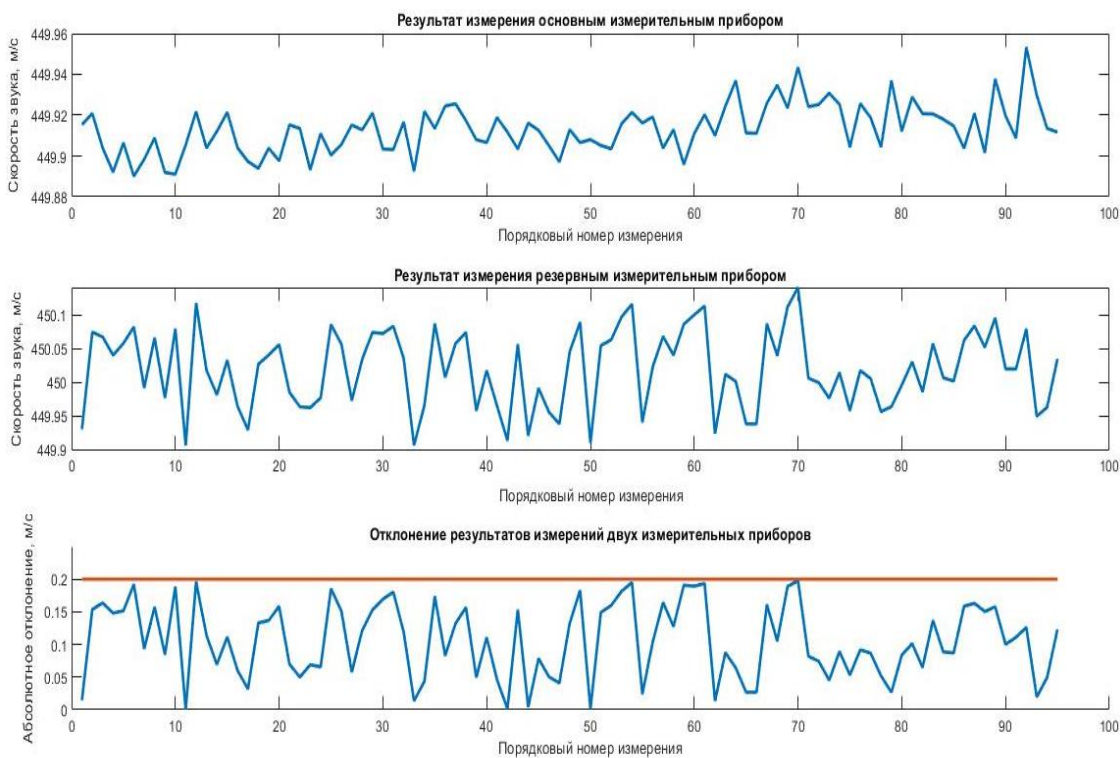


Рисунок 3.2.4.3 — Сравнение результатов основного и резервного измерительных приборов

Для расчёта численных значений показателей и построения графиков функций надёжности использовались показания измерительных приборов, полученные в результате экспериментальных исследований на реальных газовых смесях. Функция распределения времени работы подсистемы измерительных приборов рассчитывалась по формуле 3.2.4.6. Значения порогов для измерительных приборов были взяты из таблицы 3.2.3.1. Параметры  $\mu$  и  $\sigma$  из формулы 3.2.4.6 определялись по превышению порога разницей показаний измерительных приборов из графиков отклонения показаний основного и резервного измерительных приборов по формулам:

$$\mu = \frac{\sum_{i=1}^n \mu_i}{n}, \quad (3.2.4.13)$$

$$\sigma^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (\mu_i - \mu)^2}{n}, \quad (3.2.4.14)$$

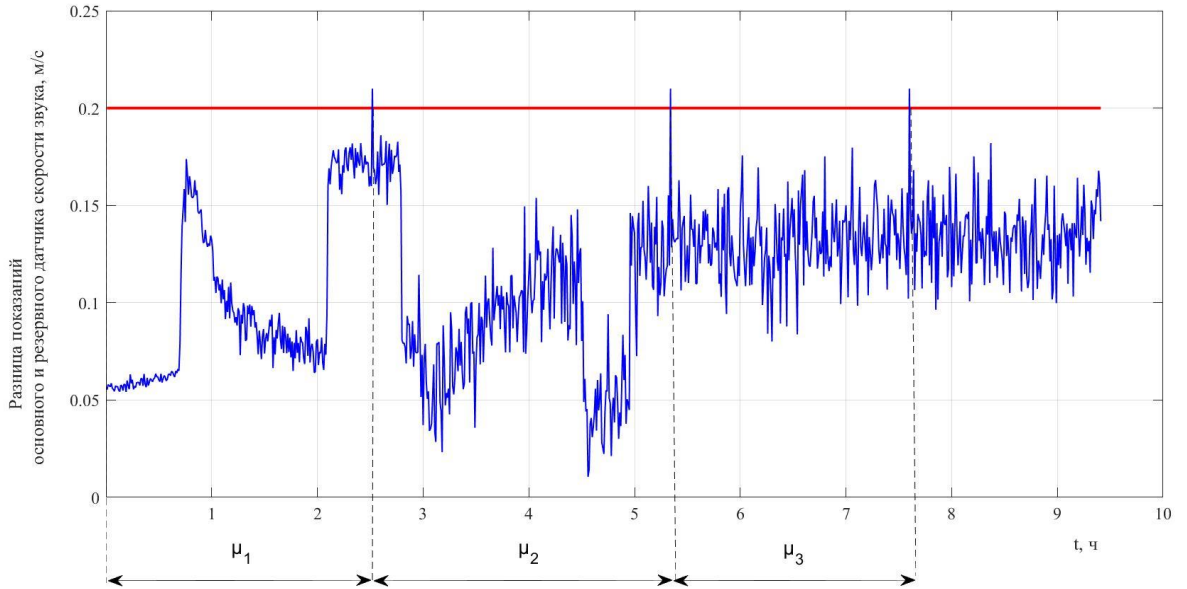


Рисунок 3.2.4.4 — Разница показаний основного и резервного измерительного прибора для скорости звука

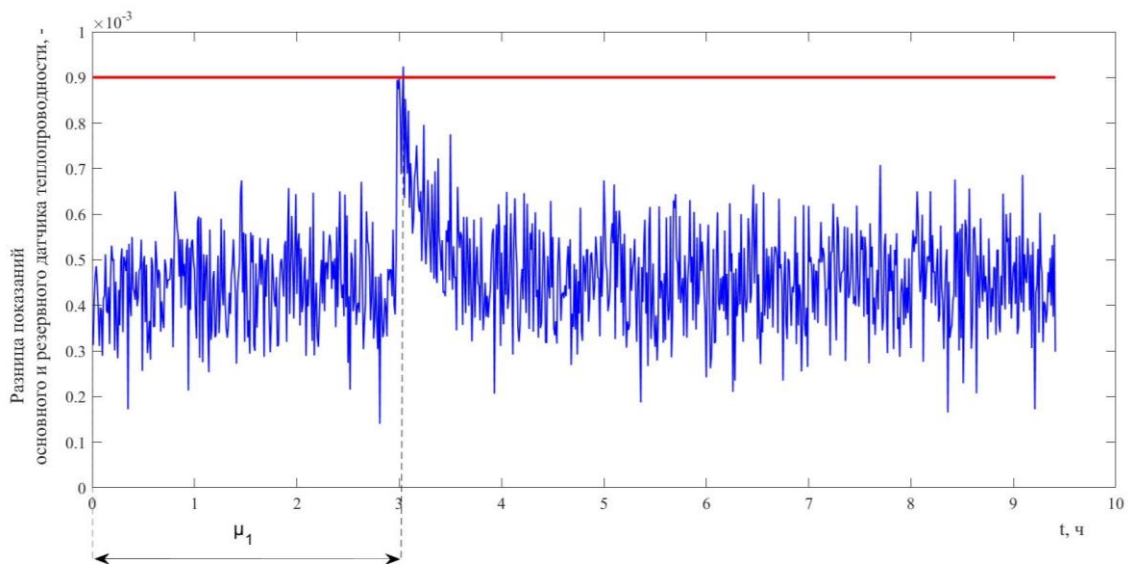


Рисунок 3.2.4.5 — Разница показаний основного и резервного измерительного прибора для теплопроводности

Результаты измерений приведены для одного дня экспериментов. Для всего набора экспериментальных данных значения параметров  $\mu$  и  $\sigma$  будут определяться таким же образом. Затем по формулам 3.2.4.9-3.2.4.11 определяются функция распределения времени работы

подсистемы измерительных приборов  $F(t)$  (Рисунок 3.2.4.6), функция надёжности  $R(t)$  (Рисунок 3.2.4.7) и средняя наработка до отказа. Средняя наработка до отказа, рассчитанная с применением метода трапеций, равна 0.9617.

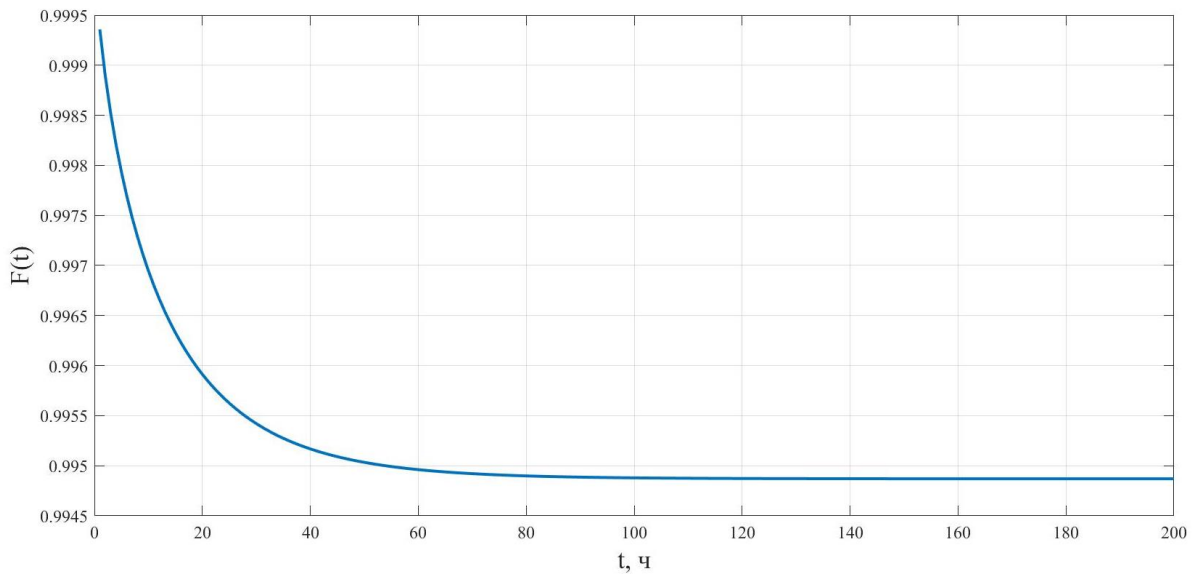


Рисунок 3.2.4.6 — Функция распределения времени работы подсистемы измерительных приборов

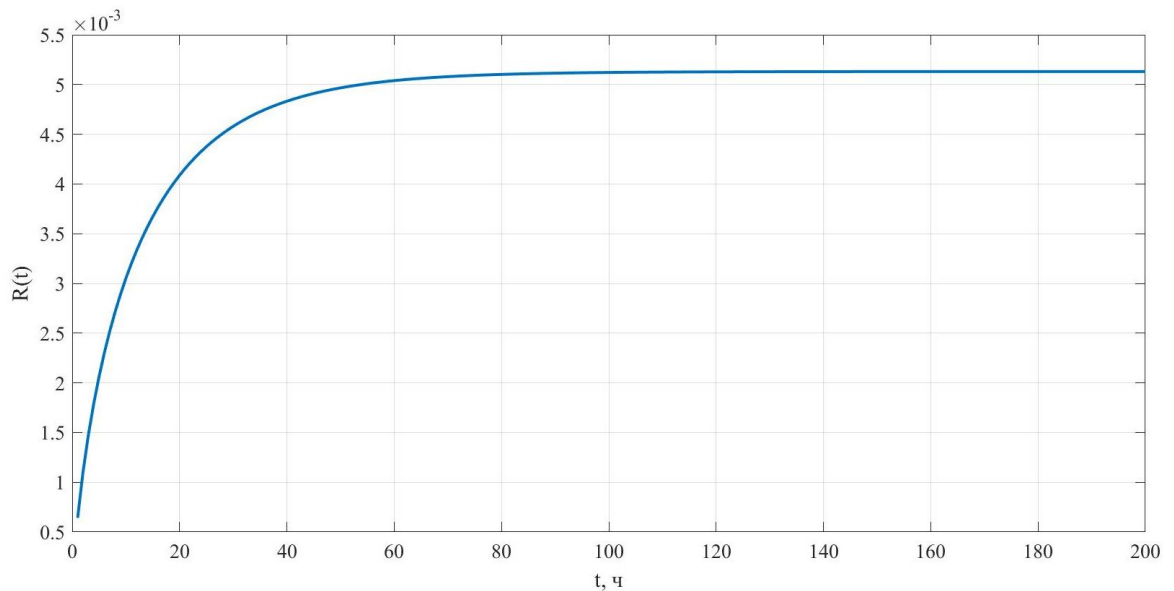


Рисунок 3.2.4.7 — Функция надёжности подсистемы измерительных приборов

Рассмотренный критерий отказа автоматизированной информационной системы является наиболее характерным из рассмотренных. Данный критерий описывает функционирование системы в случае снижения показателей точности хотя бы для одного информационного параметра.

**Выводы по третьей главе:**

Исследование критериев отказа системы показало снижение точности оценок в зависимости от количества параметров, входящих в модель. Разработанные методика и математические модели для оценки надежности метода обработки информации позволяет проводить интеллектуальный анализ качества газа с более высокой достоверностью. Для построенной структурной схемы целевой системы были получены основные формулы для определения требуемых функций и показателей надёжности, в частности функции распределения времени работы, функции надёжности и средней наработки до отказа. Исследованы критерии отказа для проектирования различных комплексов, в том числе и класса информационно-вычислительных систем определения показателей качества природного газа в зависимости от количества параметров, для которых наблюдается снижение показателей точности. Для каждого из критериев получены формулы для требуемых функций надёжности. Разработанный метод отличается от существующих как наличием нескольких независимых измерительных каналов, так и применением независимо работающих измерительных приборов (основного и резервного). Это повышает достоверность получаемых измерительных данных путём сравнения результатов измерений основного и резервного измерительных приборов для данного класса целевых систем.

## Глава 4. Архитектура автоматизированной информационной системы интеллектуального анализа качества газа

### 4.1 Архитектура автоматизированной системы анализа качества газа

В качестве практической реализации в данной главе рассмотрено экспериментальное подтверждение предложенного метода обработки информации, в частности реализация архитектуры АИС анализа качества газа, а также экспериментальный комплекс для подготовки экспериментальных данных и алгоритмическую часть, включающую описание алгоритмов работы основных узлов системы. При исследовании данной системы использовались ранее полученные в работах [79, 81, 82, 98, 99, 127] и предыдущих главах результаты, в частности: использование разработанной нейросетевой модели, применение многокритериальной оценки для выбора входных информационных параметров, использование алгоритма перехода к информационным параметрам модели эквивалентного псевдогаза, оценка надёжности с применением вероятностного метода.

Структурная схема архитектуры АИС показана на рисунке 4.1.1. Система функционирует следующим образом. На технологическом объекте, к которому планируется применить разработанную АИС, в байпасе (обводном трубопроводе технологической установки, применяющемся для транспортировки газа параллельно запорной и регулирующей арматуре) от основной технологической трубы располагаются две измерительные камеры (основная и резервная). В каждой измерительной камере установлены следующие измерительные приборы (которые подробнее описаны ниже): прибор TCG3880 от компании Xensor Integration для измерения коэффициента теплопроводности, прибор TDS0119 от компании Dynament Infrared Gas Sensors для измерения концентрации диоксида углерода, прибор Optim от компании Optel для измерения скорости звука. Также на объекте необходим эталонный анализатор (в рассматриваемом случае это газовый хроматограф VARIAN CP4900) для получения эталонных данных для анализа. Данные измерений через концентратор поступают на персональный компьютер. Измерительные приборы и эталонный анализатор входят в блок входных данных, который в диссертации подробно не исследовался. В качестве блока входных данных для формирования экспериментальных данных использовался макет газосмесительной станции.

Поступившие от блока входных данных измерения поступают на подсистему алгоритмов, реализованную на ПК в Matlab и Refprop.



Модель АИС состоит из трёх основных узлов: подсистема алгоритмов, включающая подготовку расчётных данных, выбор входных параметров для статистической модели, выбор вида и архитектуры модели; подсистему получения измерительной информации, включая измерение физических параметров газа и получение информации от эталонного анализатора; подсистему проведения расчёта требуемых параметров, включая обработку измерительной информации и расчёт энергетических параметров с последующим сравнением с эталонными данными.

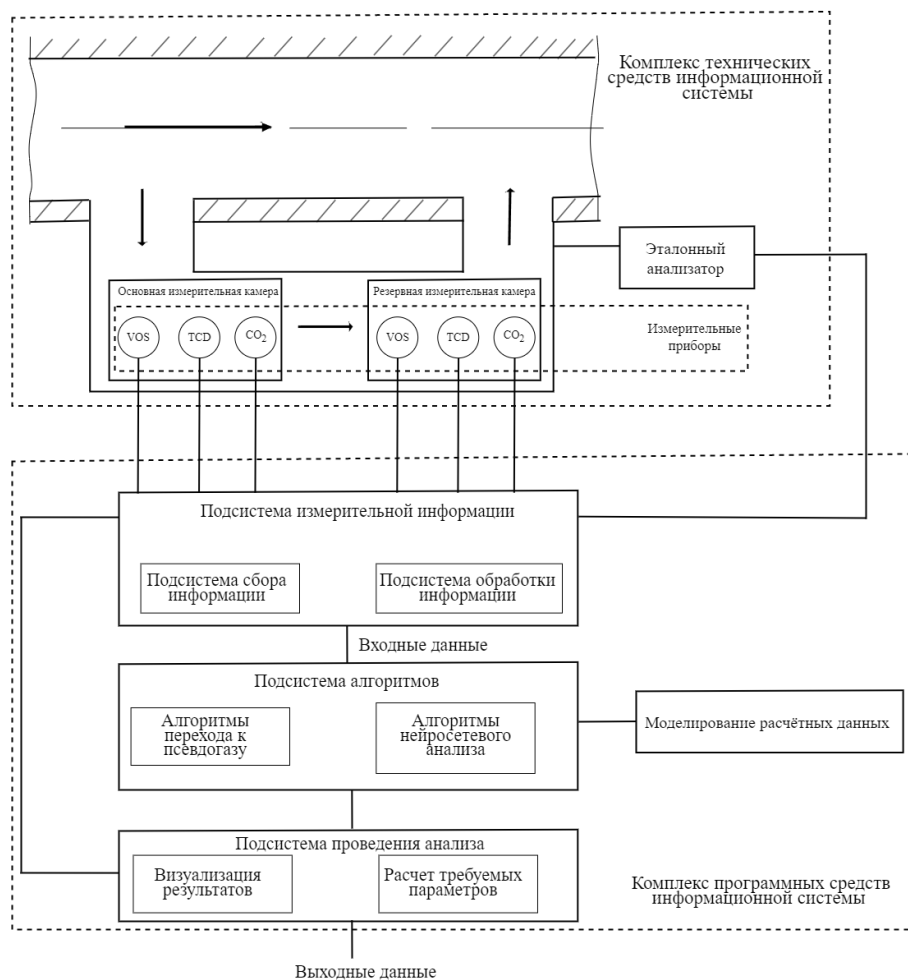


Рисунок 4.1.1 — Архитектура АИС

## 4.2 Подсистема измерительной информации

Подсистема измерительной информации состоит из измерительных приборов и аппаратуры, которую возможно использовать в исследуемой задаче для получения значений требуемых физических параметров и эталонных данных для оценки работы системы в целом. Стоит отметить, что данная подсистема апробировалась на имитационном макете, обладающем

всеми свойствами предлагаемой АИС, в частности возможность достижения высокой точности анализа за счёт подготовки смесей с использованием регуляторов массового расхода, проведение измерений коммерчески доступными и относительно недорогими измерительными приборами. В данной работе, для апробации системы использовалась газосмесительная станция с измерительным оборудованием. Благодаря данному комплексу возможно производить анализ качества газовых смесей в лабораторных условиях. Данный комплекс был разработан в Королевском технологическом институте (Стокгольм, Швеция) [122]. Принцип работы комплекса заключается в следующем: происходит приготовление газовой смеси путем смешения компонентов с задаваемой концентрацией, затем полученная смесь поступает в измерительную камеру с установленным в ней блоком измерительных приборов, затем происходит анализ смеси с использованием газового хроматографа, полученные измерительные данные поступают на персональный компьютер (ПК), газовая смесь идет на сброс. Структура измерительного комплекса представлена на рисунке 4.2.1. На схеме MFC – регулятор массового расхода, VOS - измеритель скорости звука в газе, TCD – измеритель коэффициента теплопроводности в газе, CO<sub>2</sub> – измеритель концентрации диоксида углерода, GC – газовый хроматограф.

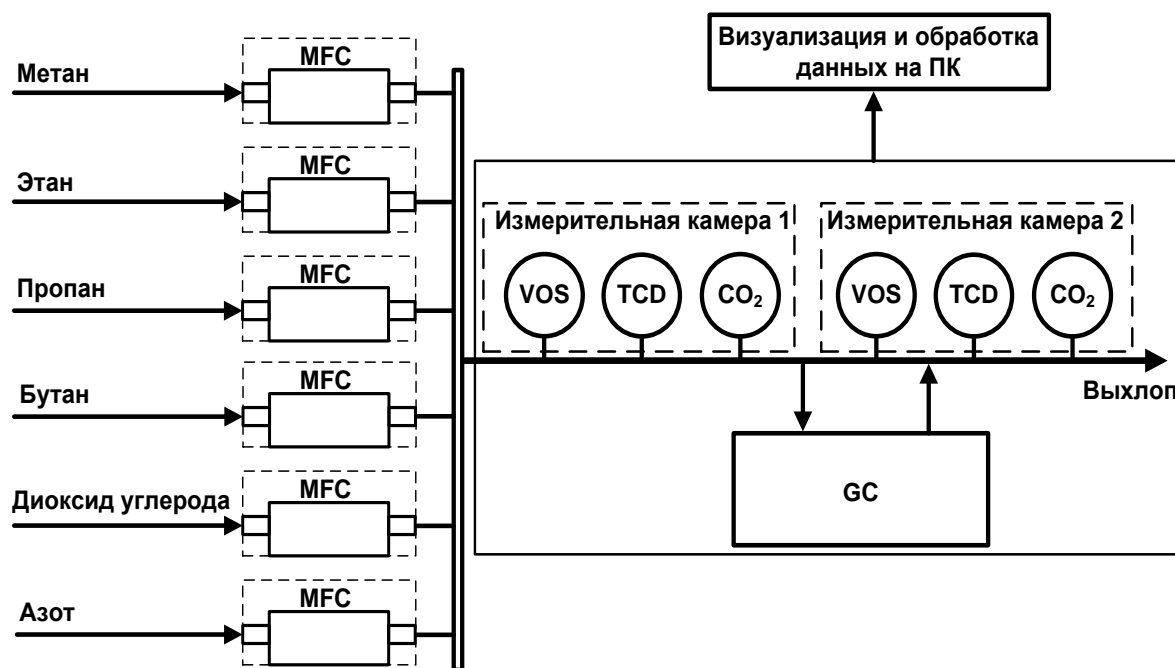


Рисунок 4.2.1 — Структура измерительного комплекса

Станция состоит из шести каналов, каждый из которых откалиброван под определённый компонент природного газа: метан, этан, пропан, бутан, азот, диоксид углерода. Для задания концентрации каждого компонента используются регуляторы массового расхода компании Bronkhorst [85] - устройства для измерения и поддержания заданных параметров по расходу

газа в технологическую камеру. Уставка по расходу вводится при помощи разработанного программного обеспечения. Регистрируемое измерителем фактическое значение расхода в регуляторе сравнивается с уставкой, и затем формируется управляющий сигнал для исполнительного механизма. Затем происходит смешение компонентов заданного содержания, и полученная смесь поступает в измерительные камеры на блок измерительных приборов. Для проверки соответствия содержания концентраций компонентов получаемой газовой смеси заданным значениям в качестве эталонного анализатора использовался хроматограф VARIAN CP4900 [86].

В качестве доступного российского аналога можно привести хроматограф газовый промышленный ХРОМАТ-900-7 [123], предназначенный для непрерывного автоматического измерения молярной доли азота, кислорода, диоксида углерода, высших углеводов, содержащихся в газе горючем природном в соответствии с ГОСТ 31371.7-2008 «Газ природный. Определение состава методом газовой хроматографии с оценкой неопределенности методики выполнения измерения молярной доли компонента».

Также были применены измерительные приборы для получения значений необходимых параметров газа. В качестве измеряемых параметров газа были выбраны скорость звука, коэффициент теплопроводности, концентрация диоксида углерода.

В данной работе скорость звука измеряется специализированным измерительным прибором, разработанным компанией Optel [124]. Используемый измерительный прибор [64] состоит из измерительного блока, в котором реализован ультразвуковой метод измерения уровня, и блока управления, соединенного с модулем визуализации ультразвукового сигнала. Принцип действия прибора основан на измерении времени прохождения звукового импульса через исследуемую газовую смесь. Время прохождения импульса через газ определяется как разница во времени между моментами послышки и приёма электрического импульса преобразователем измерительного прибора. Скорость звука определяется отношением расстояния между передатчиком и приёмником к времени распространения импульса. Особенностью прибора является измерение по первому отраженному сигналу, что исключает из результата измерения ошибку измерения, связанную с временем задержки в электронных компонентах. Данный измерительный прибор может использоваться для определения энергетических характеристик для газовых смесей в ряде задач [122, 126]. В качестве альтернативы можно использовать ультразвуковой расходомер газа, в котором скорость звука является одним из измеряемых параметров.

Теплопроводность, которая в газовых смесях может быть характеризована коэффициентом теплопроводности, измеряется прибором TCG3880 от компании Xensor

Integration [67]. В данном приборе реализован принцип, при котором изменение какой-либо характеристики измеряемой среды приводит к изменению характеристики полупроводникового материала. Работа измерительного прибора основана на измерении коэффициента теплопроводности между мембраной и окружающей газовой средой. Данный измеритель теплопроводности производит измерение термического сопротивления между горячим спаем термопары в центре мембраны и холодным спаем на поверхности микросхемы.

В качестве альтернативы можно использовать недорогой измерительный прибор термокондуктометрический ДАМ ИБЯЛ.407111.002 ТУ [123]. Принцип действия этого прибора основан на измерении разности температур между электрически нагреваемым резистивным элементом, помещённым в контролируемую среду, и таким же элементом, помещённым в камеру с газом сравнения, вызванной различием теплопроводностей анализируемой среды и газа сравнения. Прибор не изменяет химического состава пробы, для работы ему не требуется кислород. (ФГУП “Смоленское производственное объединение “Аналитприбор” Каталог продукции 2021 г., лист 14). Прибор ДАМ имеет степень пылевлагозащиты IP54, а также имеет взрывозащищенное исполнение.

В газоанализаторах часто применяется недиспергирующий инфракрасный анализатор (NDIR), который является упрощенной реализацией инфракрасного спектрометра и позволяет измерять поглощение инфракрасного излучения на определенных длинах волн в соответствии с законом Бугера-Ламберта-Бера. Измерение содержания диоксида углерода может проводиться с высокой точностью с помощью компактных и коммерчески доступных измерительных приборов. В данной работе использовался прибор TDS0119 от компании Dynament Infrared Gas Sensors [70]. Данный инфракрасный прибор работает по принципу NDIR для определения концентрации целевого газа, в нашем случае диоксида углерода. Измерительный прибор состоит из источника инфракрасного излучения длительного срока службы с вольфрамовой нитью, оптической полости, пироэлектрического инфракрасного детектора с двойной температурной компенсацией, встроенного полупроводникового температурного прибора и электроники для обработки сигналов от пироэлектрического детектора. В качестве альтернативы для измерения диоксида углерода из недорогих измерительных приборов можно рекомендовать газоанализатор ДАК-СО-126, (0 - 20) %, ИБЯЛ.418414.071 ТУ2 [123]. В основу принципа действия ДАК-СО-126 положен оптико-абсорбционный метод, основанный на измерении поглощения инфракрасной энергии анализируемым компонентом ( $\text{CO}_2$ ). Степень поглощения ИК-энергии излучения зависит от концентрации компонента  $\text{CO}_2$  в газовой смеси. Каждому газу присуща своя область длин волн поглощения, это обуславливает возможность

проведения избирательного анализа CO<sub>2</sub> в среде природного газа. (ФГУП “Смоленское производственное объединение “Аналитприбор” Каталог продукции 2021 г., лист 16).

Также исследуемая подсистема измерительной информации включает в себя визуализацию основных измеряемых параметров, в частности скорости звука, теплопроводности и концентрации диоксида углерода для наглядного представления процесса измерения. Визуализация реализуется при помощи алгоритмов из соответствующей подсистемы, в частности алгоритма для визуализации различия параметров исходных смесей и модели псевдогазовых смесей, приведённого в приложении.

Предлагаемая подсистема получения измерительной информации апробировалась на доступном измерительном оборудовании, её основная функция – предоставление измерительной информации для последующей обработки в следующей подсистеме. Преимуществами данной подсистемы являются возможность использования измерительного оборудования для апробации подсистемы и использование известных измерительных методов для измерения параметров газа.

#### **4.3 Подсистема алгоритмов и программное обеспечение**

Данная подсистема включает программное обеспечение с реализованными алгоритмами основных функций подсистемы. В предлагаемой реализации имитационной модели системы в качестве программного обеспечения используется пакет прикладных программ для решения задач технических вычислений Matlab 2019b [80] с плагином NIST REFPROP [74], программы производящей расчёт различных свойств газовых смесей, как физических параметров, являющихся измеряемыми в исследуемой задаче, так и энергетических параметров, являющихся выходными целевыми параметрами в исследуемой задаче. В качестве пакета прикладных программ для реализации алгоритмов и расчёта параметров газа в исследуемой задаче возможно использовать программное обеспечение, функционирующее на современных операционных системах, включая Linux, macOS и Windows, в котором возможно реализовать приведенные алгоритмы, что является преимуществом предлагаемой системы - свойством многофункциональности системы. Примеры алгоритмов рассмотрены в приложении.

Подсистема алгоритмов включает в себя следующие алгоритмы: алгоритмы формирования расчётных данных, алгоритмы проведения нейросетевого анализа, алгоритмы первичной визуализации данных.

Алгоритм формирования компонентного состава газа заключается в задании минимального и максимального (согласно стандартам) значения концентрации каждого компонента с последующим перебором всех возможных вариантов компонентного состава с заданием шага по каждому компоненту. Алгоритм расчёта компонентного состава модели эквивалентного псевдогаза заключается в использовании описанных выше методик [28, 29, 125] для расчёта по компонентному составу исходного газа компонентного состава модели четырёх-, пятикомпонентного псевдогаза или двух видов псевдогаза одновременно, что можно задать в данном алгоритме. Алгоритм задания температуры и давления позволяет добавлять к компонентному составу значения давления и температуры в задаваемом диапазоне для формирования расчётных данных. Алгоритм расчёта физических параметров и энергетических характеристик для исходного газа и модели эквивалентного псевдогаза заключается в выборе стандарта, по которому будет производиться расчет, выбора параметров, которые будут рассчитаны, единиц измерения, формирования отчёта о возможных ошибках расчёта и формировании массива расчётных данных. Схема алгоритма расчета физических параметров и показателей качества в NIST REFPROP показана на рисунке 4.3.1.

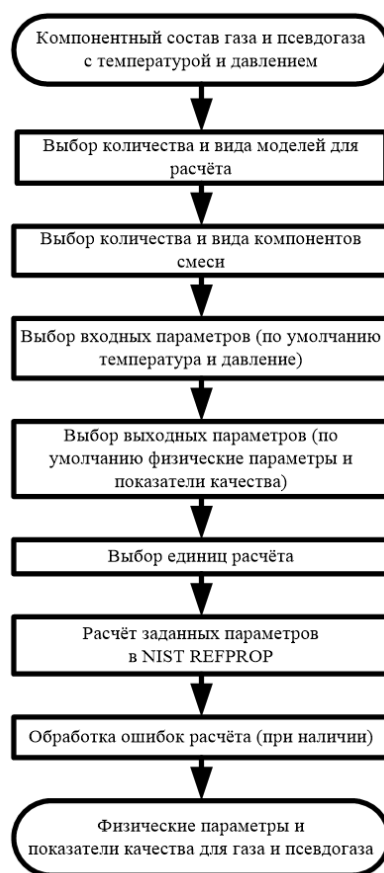


Рисунок 4.3.1 — Схема алгоритма расчёта физических параметров и показателей качества в NIST REFPROP

Алгоритмы, реализующие нейросетевой анализ, заключается в формировании данных для модели, разработке самой модели, её обучении и тестировании на расчётных данных. Алгоритм импорта данных предназначен для формирования удобного для представления вида расчётных данных в зависимости от платформы, из которого осуществляется импорт. Основной алгоритм нейросетевого анализа включает в себя ряд алгоритмов, реализующих следующие функции: возможность пропуска ряда моделей в случае отсутствия необходимости их рассмотрения; многокритериальная оценка входных параметров с последующим выбором наиболее подходящего набора входных данных; разделение данных на тренировочную, валидационную, тестовую выборки с выбором объема выборки, количества разбиений, процентом данных, идущих на каждую из выборок; выбор набора входных и выходных данных, их округление до значений, которые возможно получить посредством измерений приборами; вычисление матрицы коэффициентов корреляции, нормализация и кросс-валидация данных; реализация статистических моделей, описанных выше (как регрессионных, так и нейросетевых), для нейросетевых моделей настройка требуемых параметров, в том числе архитектуры модели, алгоритма обучения, критерия окончания обучения, количества циклов обучения, расчёта ошибок при обучении для всех моделей, обратной денормализации данных, расчёта показателей точности при обучении и тестировании статистических моделей и выбор модели для последующего тестирования. Алгоритмы симуляции статистической модели заключаются в тестировании выбранной на предыдущем шаге модели и расчёте показателей точности на этапе тестирования модели. Схема общего алгоритма нейросетевого анализа рисунке 4.3.2.

Алгоритмы визуализации расчётных данных заключаются в построении графиков по различиям в параметрах исходных газовых смесей и модели эквивалентных псевдогазовых смесей для расчёта отклонения и его вклада в погрешность метода, а также графиков по процессу обучения и тестирования моделей для поиска возможных ошибок при протекании данных процессов и их устранении из реализации алгоритмов.

На рисунке 4.3.3 показан пример пользовательского интерфейса подсистемы алгоритмов для определения теплотворной способности. Для данного примера в подсистеме необходимо иметь значения физических параметров газа (в рассматриваемом случае скорость звука, теплопроводность, концентрация диоксида углерода), обученную и оттестированную статистическую модель, расчётное значение требуемого параметра (в рассматриваемом случае теплотворной способности).



Рисунок 4.3.2 — Схема общего алгоритма нейросетевого анализа

CV\_Calc

Скорость звука, м/с 435.86	Концентрация эффективного метана, % 97.285	Значение теплотворной способности, МДж/м <sup>3</sup> 37.425
Теплопроводность, Вт/(м·К) 32.662	Концентрация эффективного пропана, % 1.505	Абсолютное отклонение, МДж/м <sup>3</sup> 0.153
Концентрация CO <sub>2</sub> , % 0.27	Концентрация эффективного азота, % 0.94	Максимальное относительное отклонение, % 0.409
Рассчитать компонентный состав псевдогаза	Рассчитать теплотворную способность	Рассчитать погрешность

Рисунок 4.3.3 — Схема пользовательского интерфейса подсистемы алгоритмов



Подсистема приведённых алгоритмов является важным преимуществом предлагаемой модели системы анализа качества газа, реализующая алгоритмы предварительной подготовки расчётных данных и разработки нейросетевой модели. На этом этапе в силу многофункциональности подсистемы возможно пропустить или модифицировать некоторые этапы, подстроив подсистему под определённую задачу. Также в данной подсистеме возможно реализовать предварительное обучение и тестирование модели, многокритериальную оценку входных параметров, переход к модели эквивалентного псевдогаза и другие алгоритмы, позволяющие упростить дальнейшую разработку системы и дающие возможность оттестировать некоторые этапы функционирования системы.

#### 4.4 Подсистема проведения анализа

Данная подсистема была реализована с использованием того же программного обеспечения, что и подсистема алгоритмов. В данной подсистеме разработанная в подсистеме алгоритмов нейросетевая модель симулировалась на измерительных данных, полученных в соответствующей подсистеме, с последующим сравнением с эталонными данными.

Для апробации предлагаемой подсистемы был произведён измерительный эксперимент, который заключался в измерении физических параметров газа, в частности, скорости звука, коэффициента теплопроводности и концентрации диоксида углерода для исходных газовых смесей и для соответствующих им четырёх- и пятикомпонентных псевдогазовых смесей. Данные параметры при выбранных термодинамических стандартных условиях измерялись двумя однотипными измерительными приборами для оценки надёжности, как было показано в главе 3, получаемых измерительных данных. В таблице 4.4.1 приведены диапазоны компонентов газовых смесей и соответствующих им псевдогазов, для которых проводились экспериментальные измерения. Скорость звука, теплопроводность измерялись для матрицы газовых смесей. Данная матрица строилась путём постепенного увеличения содержания компонентов для покрытия выбранного объекта, а именно российского природного газа. Исследуемая матрица газовых смесей соответствует диапазонам по компонентам российского природного газа, что означает, что в проведенном эксперименте был покрыт весь исследуемый природный газ, что может считаться преимуществом системы по её качеству апробации.

Таблица 4.4.1 — Диапазоны для газовых смесей и соответствующих им псевдогазов, для которых проводились экспериментальные измерения

Исходная газовая смесь		4-х компонентный псевдогаз		5-и компонентный псевдогаз	
Компонент	Молярная доля, %	Компонент	Молярная доля, %	Компонент	Молярная доля, %
Метан	80.05 - 100	Эффективный метан	82.57 - 100	Эффективный метан	94.7 - 100
Этан	0 - 10.165	Эффективный этан	-	Эффективный этан	0 - 2.65
Пропан	0 - 5	Эффективный пропан	0 - 7.48	Эффективный пропан	0 - 2.65
Бутан	0 - 2.65	Эффективный бутан	-	Эффективный бутан	-
Диоксид углерода	0 - 4.97	Эффективный диоксид углерода	0 - 4.97	Эффективный диоксид углерода	0 - 1.02
Азот	0 - 4.98	Эффективный азот	0 - 4.98	Эффективный азот	0 - 1.01

Для показанных в таблице 4.4.1 газовых смесей было произведено сравнение измеренных физических параметров исходного газа и соответствующих ему псевдогазовых смесей. На рисунке 4.4.1 показаны графики для показания измерительных приборов скорости звука и теплопроводности для исходной газовой смеси (метан 94.97%, этан 1%, пропан 1%, бутан 1%, диоксид углерода 1.02%, азот 1.01%) и для эквивалентных ей четырёхкомпонентной псевдогазовой смеси (метан 94.97%, пропан 3%, диоксид углерода 1.02%, азот 1.01%) и пятикомпонентной псевдогазовой смеси (метан 93.98%, этан 2%, пропан 1.99%, диоксид углерода 1.02%, азот 1.01%).

Для данной смеси максимальное относительное отклонение параметра псевдогаза от параметра газовой смеси составило 0.02% по скорости звука и 0.04% по теплопроводности для четырёхкомпонентного псевдогаза и 0.07% по скорости звука и 0.19% по теплопроводности для пятикомпонентного псевдогаза.

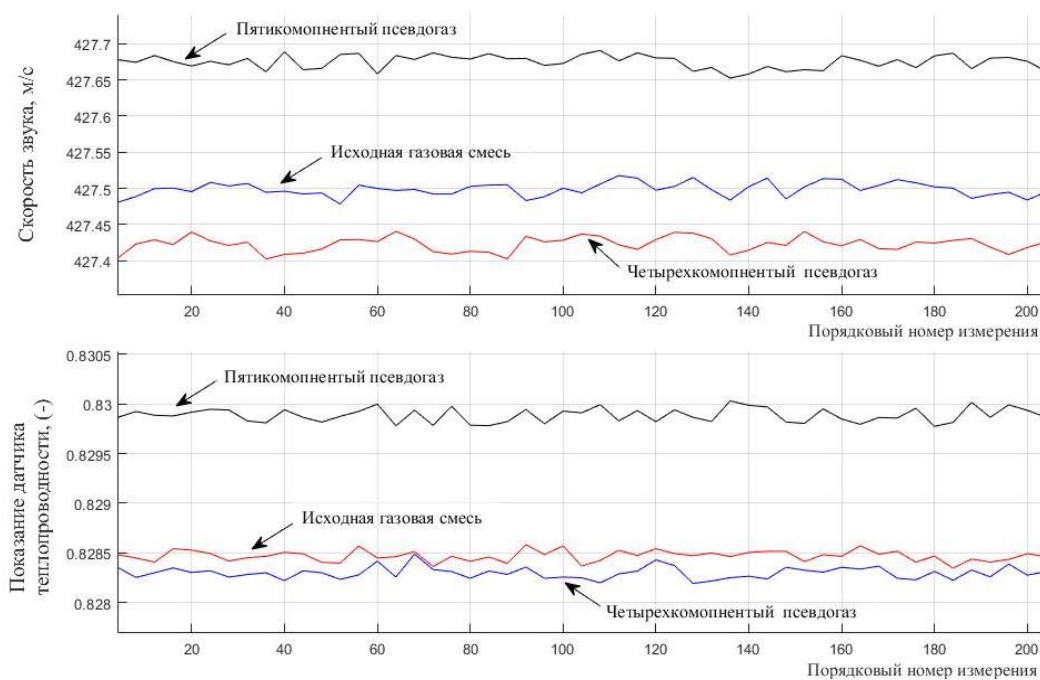


Рисунок 4.4.1 — Сравнение экспериментальных свойств для природного газа и эквивалентных псевдогазовых смесей

На рисунке 4.4.2 показаны графики для показания измерительных приборов скорости звука и теплопроводности для исходной газовой смеси (метан 80.05%, этан 5%, пропан 5%, диоксид углерода 4.97%, азот 4.98%) и эквивалентной ей четырехкомпонентной псевдогазовой смеси (метан 82.57%, пропан 7.48%, диоксид углерода 4.97%, азот 4.98%).

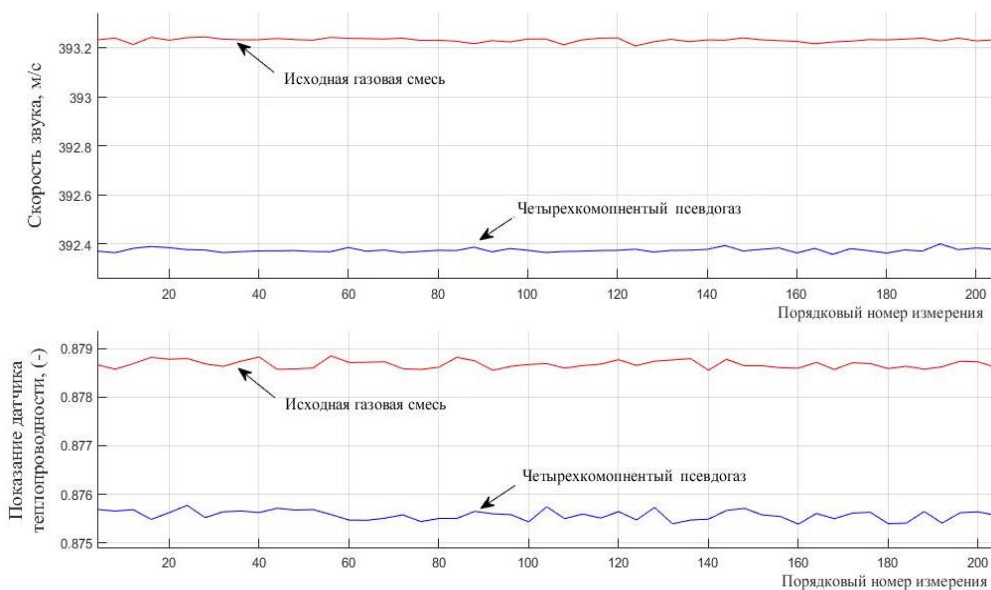


Рисунок 4.4.2 — Сравнение экспериментальных свойств для природного газа и эквивалентного псевдогаза

Для данной смеси максимальное относительное отклонение параметра четырехкомпонентного псевдогаза от параметра газовой смеси составило 0.22% по скорости звука и 0.38% по теплопроводности. На рисунках 4.4.3 показаны данные об измерении скорости звука для газовой смеси метан-пропан-азот-диоксид углерода. На рисунке 4.4.4 показаны результаты измерения для смеси метан 94%, пропан 1%, диоксид углерода 1%, азот 4%. Из рисунка видно, что в связи с высокой повторяемостью измерений в рамках одного компонентного состава смеси скорость звука не выходит за пределы 5 см/с. Стоит отметить, скачки на графиках 4.4.3 и 4.4.5 объясняются тем, что в начале и конце измерений происходит проверка на чистом метане для контроля достоверности измерений и дальнейшей коррекции данных по температуре и давлению.

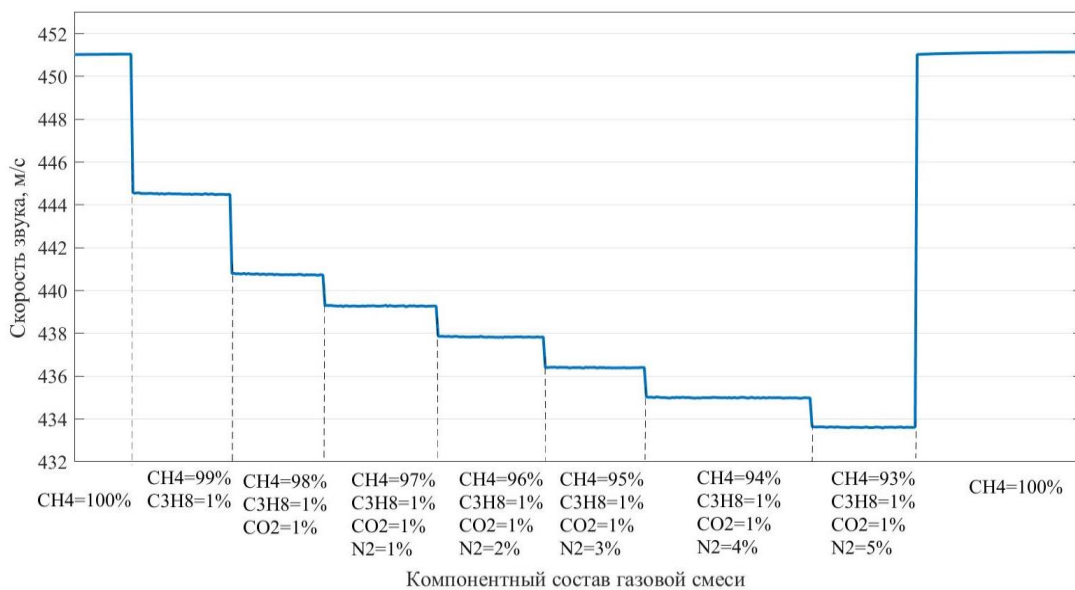


Рисунок 4.4.3 — Результаты измерения скорости звука газовой смеси метан-пропан-азот-диоксид углерода

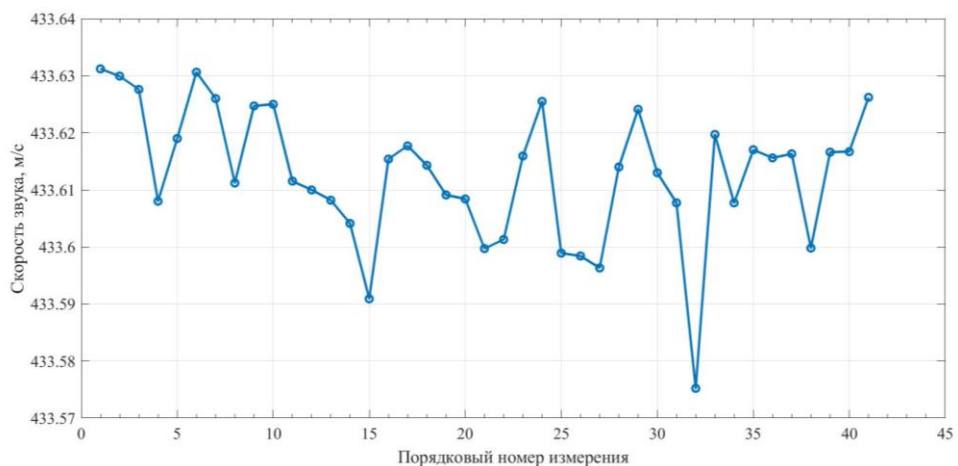


Рисунок 4.4.4 — Результаты измерения скорости звука для газовой смеси метан 94%, пропан 1%, диоксид углерода 1%, азот 4%

На рисунке 4.4.5 показаны данные об измерении теплопроводности для газовой смеси метан-пропан-азот-диоксид углерода. На рисунке 4.4.6 показаны результаты измерения для смеси метан 94%, пропан 1%, диоксид углерода 1%, азот 4%. Из рисунка видно, что в связи с высокой повторяемостью измерений в рамках одного компонентного состава смеси теплопроводность не выходит за пределы 0.0005.

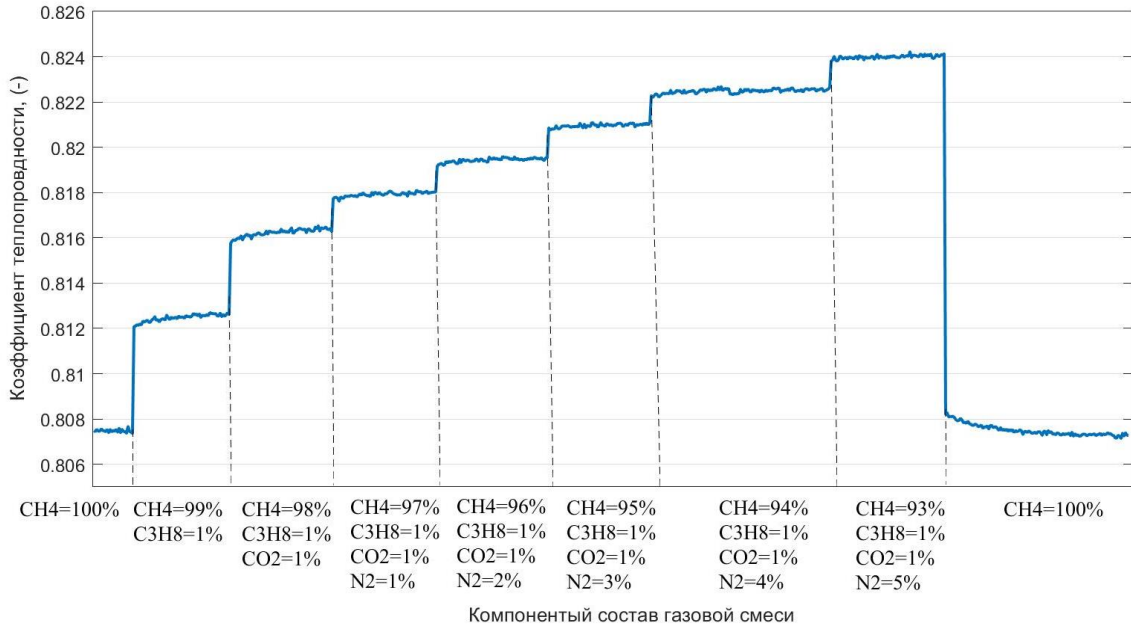


Рисунок 4.4.5 — Результаты измерения теплопроводности для газовой смеси метан-пропан-азот-диоксид углерода

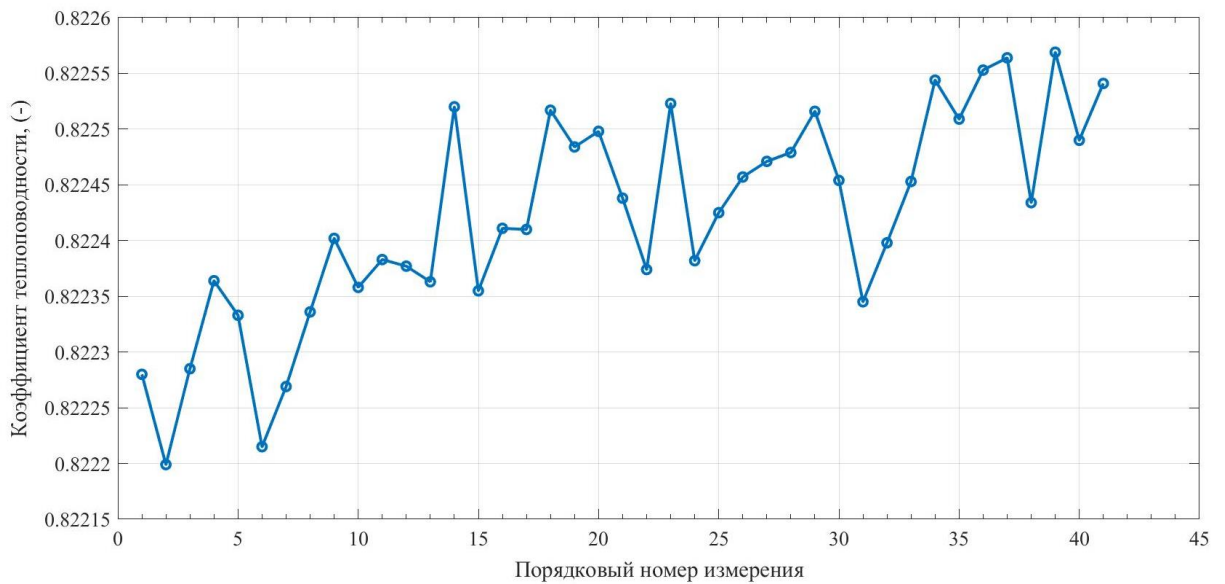


Рисунок 4.4.6 — Результаты измерения теплопроводности для газовой смеси метан 94%, пропан 1%, диоксид углерода 1%, азот 4%

На рисунке 4.4.7 показаны данные об измерении температуры и давления для показанных выше параметров.

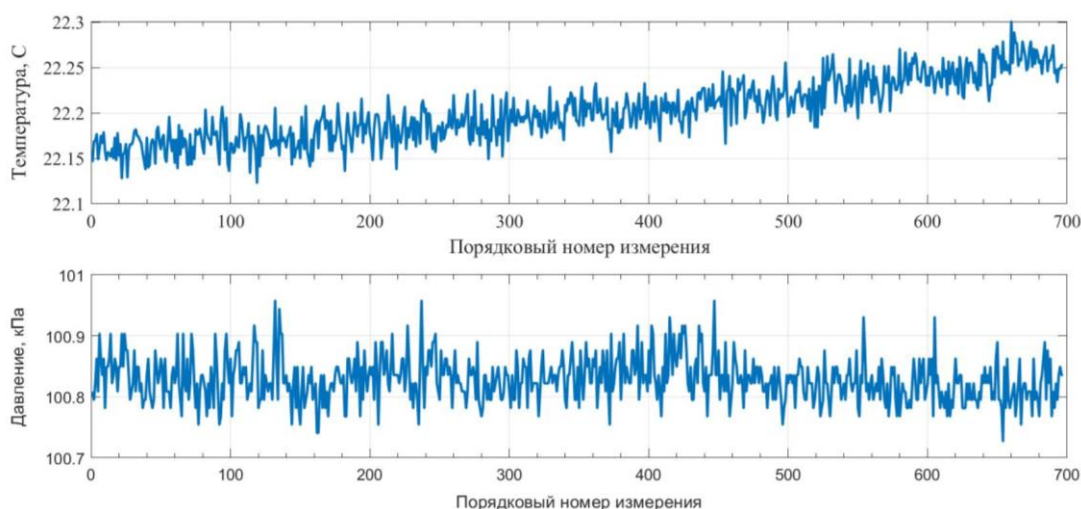


Рисунок 4.4.7 — Результаты измерения температуры и давления для газовой смеси метан-пропан-азот-диоксид углерода

Эксперименты проводились в следующих диапазонах:  $102 \pm 0.5$  кПа по давлению и  $22.8 \pm 0.75$  °С по температуре. В связи с тем, что изменение термобарических условий в течение проведения эксперимента может внести погрешность в результаты измерений, для всех данных была проведена коррекция по температуре и давлению. Стоит отметить, что измерительные данные по давлению и температуре были получены со встроенных в основные приборы измерителей давления и температуры. На рисунке 4.4.8 показан пример приведения скорости звука для двух экспериментов с разными термобарическими условиями (до сотого измерения температура 22.8°С, после 23.4°С) к одной температуре и давлению (к температуре 22.8°С и давлению 101.325 кПа).

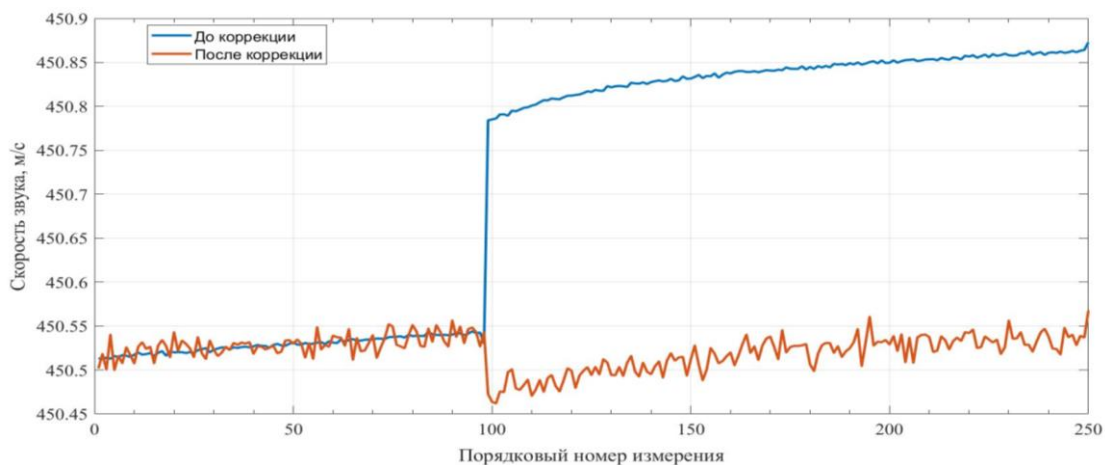


Рисунок 4.4.8 — Приведение скорости звука для разных экспериментов к одной температуре

На рисунке 4.4.9 показаны экспериментальные измерения скорости звука для смеси метан-пропан-бутан. Скорость звука показана в зависимости от содержания бутана для различного содержания пропана. Сплошной линией показаны экспериментальные измерения, пунктирной теоретические значения, рассчитанные с использованием NIST REFPROP.

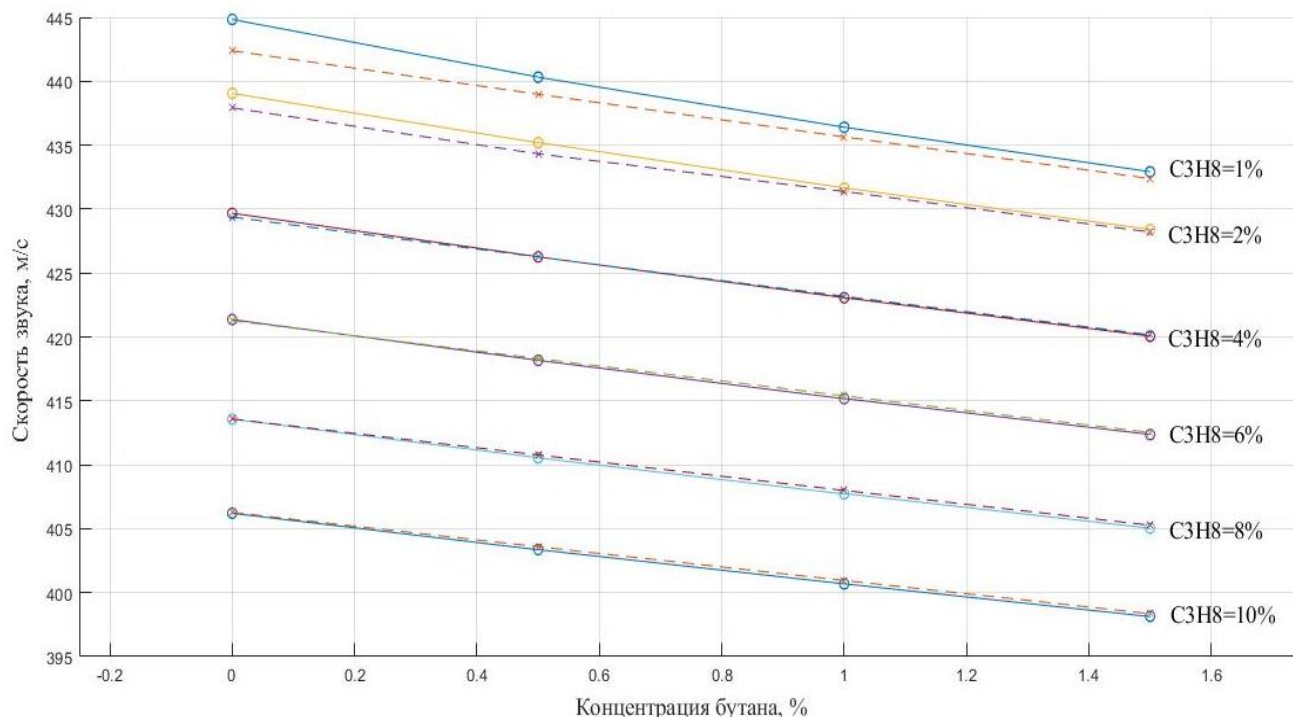


Рисунок 4.4.9 — Результаты измерения скорости звука в сравнении с теоретическим значением

На следующем шаге в данной подсистеме разработанная в подсистеме алгоритмов нейросетевая модель симулировалась на измерительных данных, полученных в соответствующей подсистеме. Рассчитывались показатели точности определения как компонентного состава модели эквивалентного псевдогаза, так и точность определения требуемых энергетических параметров газа. Работа данной подсистемы заключается в тестировании разработанной нейросетевой модели на полученных экспериментальных данных после их коррекции и предварительной обработки [127]. Результаты тестирования показаны в таблице 4.4.2.

Таблица 4.4.2 — Точность определения компонентного состава псевдогаза разработанной нейросетевой моделью на экспериментальных данных

Компонент	МАО, молярная доля, %	САО, молярная доля, %	СКО
Метан	0,94	0,56	0,64
Пропан	0,53	0,36	0,32
Азот	0,44	0,25	0,23

В таблице 4.4.3 и на рисунках 4.4.10 и 4.4.11 показана точность определения энергетических характеристик газа (низшая объемная теплотворная способность и число Воббе), полученных путем расчета по полученному компонентному составу модели эквивалентного псевдогаза в сравнении с эталонными данными. В качестве эталонных данных использовались данные хроматографического анализа. Часть журнала экспериментов приведена в приложении 3.

Таблица 4.3.3 — Точность определения энергетических параметров газа по разработанной нейросетевой модели на этапе тестирования

Параметр точности, МДж/м <sup>3</sup>	Теплотворная способность	Число Воббе
МАО	0.351	0.478
САО	0.112	0.235

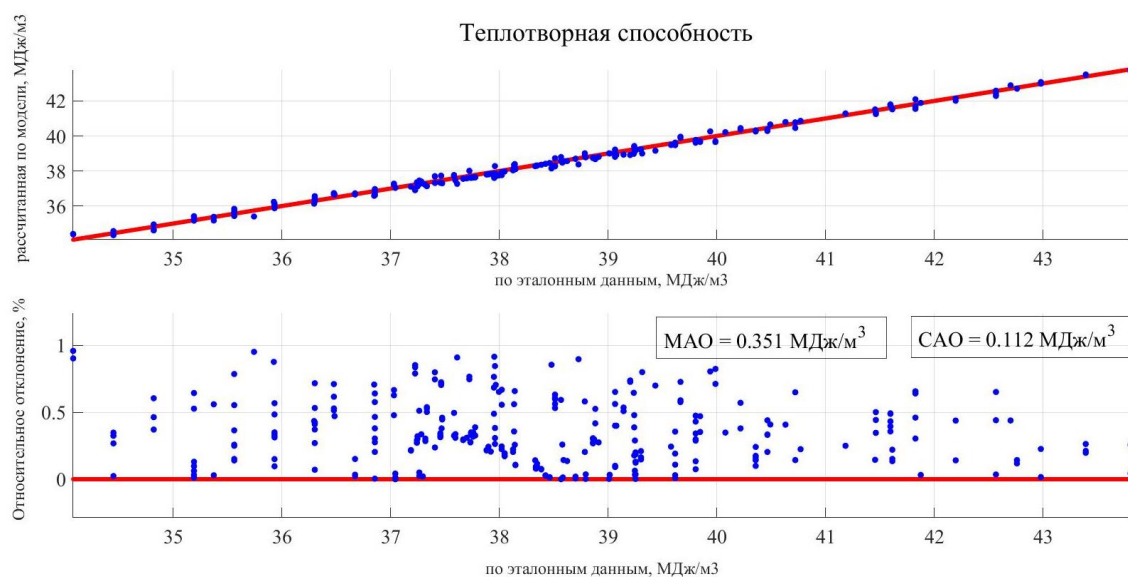


Рисунок 4.4.10 — Точность определения теплотворной способности по разработанной нейросетевой модели на этапе тестирования



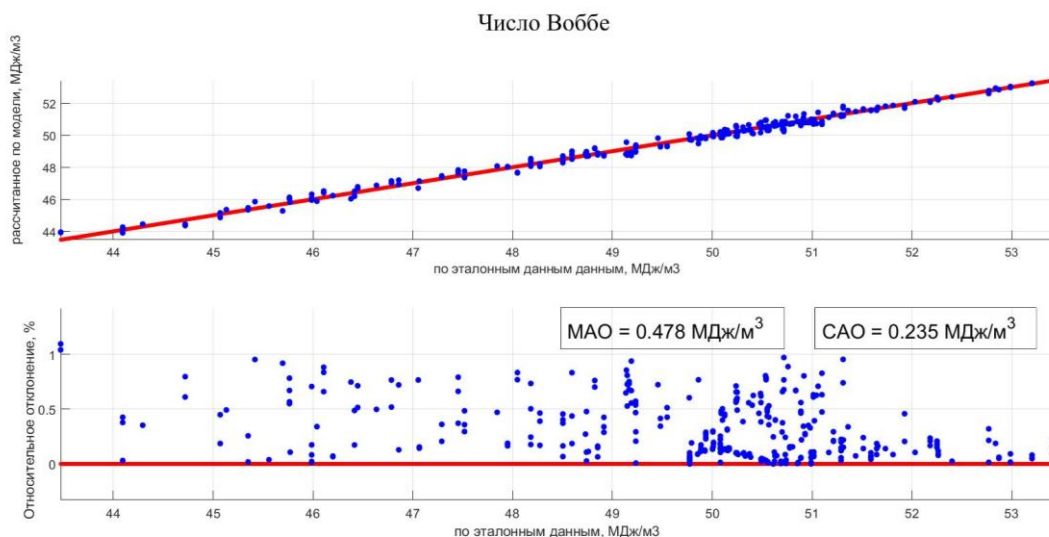


Рисунок 4.4.11 — Точность определения числа Воббе по разработанной нейросетевой модели на этапе тестирования

#### 4.5 Преимущества автоматизированной информационной системы для определения значений энергетических характеристик природного газа

Разработана архитектура АИС для определения значений энергетических характеристик природного газа по результатам измерения заданного набора его физических параметров. Данная модель системы состоит из подсистемы алгоритмов, подсистемы измерительной информации и подсистемы проведения анализа. Преимуществом системы является её распределённая структура, заключающаяся в том, что выход из строя одного из узлов не приводит к полной остановке всей системы. Возможность функционирования системы обосновывается использованием программного обеспечения, выполняющего расчёты, и измерительных приборов, предоставляющих измерительную информацию. Оба описанных преимущества были приведены в главе 3. Стоит отметить, что высокое быстродействие системы крайне важно для тех случаев, когда свойства газа могут изменяться быстро и требуют постоянного мониторинга, что делает разработку исследуемой системы крайне актуальной, например, это переработка попутного газа нефтяных месторождений, который раньше шел в факелы, газ, получаемый гидроразрывом пласта и биогаз из различных источников [131 - 134]. Реализация в системе ряда алгоритмов, методов и технологий, описанных в главах 2 и 3, в том числе использование нейросетевых технологий, многокритериальной оценки входных параметров, алгоритма перехода к модели эквивалентного псевдогаза, оценка надёжности с применением вероятностного метода также являются преимуществами системы.

**Выводы по четвертой главе:**

В результате проведенного исследования была предложена архитектура автоматизированной информационной системы определения энергетических параметров природного газа, приведены её основные узлы, показан вариант работы системы на экспериментальных данных. Предложенная архитектура АИС на основе метода обработки информации состоит из следующих подсистем – подсистема алгоритмов, подсистема измерительной информации, подсистема проведения анализа. Основные преимущества метода и системы на его основе заключаются в следующем:

1. Преимуществом каждой из подсистем является их многофункциональность, позволяющая модифицировать систему на каждом этапе под определенную задачу и осуществлять получение необходимой измерительной информации коммерчески доступным и относительно недорогим измерительным оборудованием.

2. Система апробирована на результатах экспериментов, проведенных в лабораторных условиях на данных реальных газовых смесей. Рассчитаны показатели точности определения энергетических параметров (максимальное абсолютное отклонение 0.351 МДж/м<sup>3</sup> по теплотворной способности и 0.478 МДж/м<sup>3</sup> по числу Воббе), по которым можно сделать вывод об возможности применения исследуемого метода и системы на его основе для анализа качества реальных газовых смесей.

## Заключение

Настоящее исследование посвящено разработке нового подхода к анализу показателей качества газа с использованием современных информационных технологий, программных средств и информационных моделей. Исследованы основные составляющие современных автоматизированных информационных систем и методов анализа компонентного состава и энергетических характеристик природного газа, выявлены их основные преимущества и недостатки. На базе проведенного теоретического исследования предложен метод обработки информации, в котором реализованы основные преимущества и устранены основные недостатки существующих методов. На базе разработанного метода предложена архитектура системы анализа качества газа, учитывающая современные тенденции по проведению газоанализа.

Реализованная архитектура АИС на основе метода обработки информации обеспечивает анализ качества газа с низкими временными затратами. Быстродействие системы выражается в определении требуемых показателей качества с использованием данных, полученных с измерительных приборов, и программного обеспечения для расчёта параметров. Таким образом, результат диссертации актуален как с точки зрения теоретической базы методов анализа качества газа, так и с практической точки зрения применения современных технологий в нефтегазовой отрасли.

При разработке структуры метода были применены ряд методик, в частности нейросетевой анализ, корреляционный анализ, методика перехода к информационным параметрам модели эквивалентного псевдогаза, сравнительный анализ вида и архитектуры статистических моделей, которые возможно применять в других методах и задачах газовой промышленности.

Кроме того, разработаны статистические модели, (в частности, нейросетевые) которые возможно использовать в решении различных прикладных задач газовой промышленности. Произведено тестирование разработанного метода на расчетных данных, полученных в результате имитационного моделирования и данных, полученных в результате проведения экспериментальных измерений свойств реальных газовых смесей. В том числе получены показатели точности и исследована надёжность работы метода, подтверждающие адекватность его применения для решения поставленной задачи.

В будущем планируется расширять сферы применения разработанного метода, в частности интегрировать его в существующие системы анализа качества газа, применяющиеся в настоящее время в промышленности, в том числе в хроматографические системы. С точки

зрения методов и алгоритмов анализа данных планируется исследовать и в случае подтверждения целесообразности внедрить в метод большее число архитектур нейросетевых моделей, в том числе моделей с более сложной архитектурой, ряд методов многокритериальной оценки и оценки надежности, для расширения вычислительных возможностей и аналитической силы разрабатываемого метода.

### **Основные научные результаты**

В диссертационной работе была решена актуальная научно-техническая задача по разработке моделей, методов и программных средств обработки информации для повышения эффективности анализа качества газа и получены следующие научные результаты:

1. Проведен анализ существующих моделей, алгоритмов и методов, используемых для анализа качества природного газа, показавший наличие существенных недостатков в существующих методах и информационных системах, применяемых в данной области, что обусловило необходимость разработки нового метода обработки информации и АИС, архитектура которой основана на предлагаемых алгоритмах и моделях.

2. Разработан и исследован метод обработки информации автоматизации интеллектуального анализа показателей качества газа, применение которого позволит повысить скорость анализа в  $10^3$  раз и уменьшить стоимостные затраты в 10 раз.

3. Разработан и исследован алгоритм перехода от информационных параметров исходного природного газа к информационным параметрам модели эквивалентного псевдогаза, позволяющий проводить анализ для широкого класса целевых объектов, в том числе газообразных веществ и псевдогазовых смесей.

4. Разработаны методика и математические модели, позволяющие обеспечить точность обработки информации и повысить эффективность проведения анализа качества газа.

5. Разработана архитектура АИС интеллектуального анализа качества газа для определения параметров природного газа с использованием нейросетевых технологий, отличающаяся от существующих применением разработанного метода обработки информации.

6. Проведена оценка эффективности применения предлагаемого математического и программного обеспечения информационной системы интеллектуального анализа качества газа на основе экспериментальных и расчетных данных, доказывающая повышение скорости анализа в  $10^3$  раз, снижение затрат на анализ в 10 раз и удовлетворяющая требованиям к точности проведения анализа.

## Список сокращений и условных обозначений

**ANN** artificial neural network, искусственная нейронная сеть

**C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>** этан

**C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>** пропан

**C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>** бутан

**C<sub>5</sub>H<sub>12</sub>** пентан

**C<sub>6</sub>H<sub>14</sub>** гексан

**CH<sub>4</sub>** метан

**CI** consistency index, индекс согласованности

**CO<sub>2</sub>** диоксид углерода

**CR** consistency ratio, отношение согласованности

**GC** gas chromatograph, газовый хроматограф

**GPR** Gaussian process regression, модель регрессии на основе гауссовских процессов

**GRU** gated recurrent unit, рекуррентная нейронная сеть с управляемым рекуррентным блоком

**LINREG** linear regression, линейная регрессия

**LSTM** long short-term memory, рекуррентная нейронная сеть с долгой краткосрочной памятью

**MAE** mean absolute error, среднее абсолютное отклонение

**MAPE** mean absolute percentage error, среднее относительное отклонение

**MaxAE** maximum absolute error, максимальное абсолютное отклонение

**MaxAPE** maximum absolute percentage error, максимальное относительное отклонение

**MFC** mass flow controller, регулятор массового расхода

**MSE** mean squared error, среднеквадратическое отклонение

**N<sub>2</sub>** азот

**NDIR** nondispersive infrared, технология недисперсионного поглощения инфракрасного излучения

**NIST** National Institute of Standards and Technology, Национальный институт стандартов и технологий

**RI** random index, случайный индекс

**RIDGE** ridge regression, гребневая регрессия

**SVM** support vector machine, метод опорных векторов

**TCD** thermal conductivity, теплопроводность

**VOS** velocity of sound, скорость звука

**АИС** автоматизированная информационная система

**ВЭТТ** высота, эквивалентная теоретической тарелке  
**ЗИП** запасные части, инструменты и принадлежности  
**ИК** измерительный канал  
**ИК** инфракрасный  
**ИНС** искусственные нейронные сети  
**ИП** измерительный прибор  
**КД** коэффициент детерминации  
**КР** комбинационное рассеяние  
**МАИ** метод анализа иерархий  
**МАО** максимальное абсолютное отклонение  
**МОО** максимальное относительное отклонение  
**ПК** персональный компьютер  
**РНС** рекуррентная нейронная сеть  
**САО** среднее абсолютное отклонение  
**СКО** среднеквадратическое отклонение  
**СНГ** сжиженный нефтяной газ  
**СОО** среднее относительное отклонение  
**СПГ** сжиженный природный газ  
**ССД** система сбора данных

## Список литературы

1. ГОСТ 5542-2014 Газ горючий природный промышленного и коммунально-бытового назначения. — М.: Стандартинформ, 2019. — 11 с.
2. Dörr H., Koturbash T., Kutcherov V. Review of impacts of gas qualities with regard to quality determination and energy metering of natural gas // Meas. Sci. Technol. — 2019. — Vol. 30. No. 2. — Pp. 1–20.
3. ГОСТ Р 57614-2017 Газ горючий природный. Определение энергии. — М.: Стандартинформ, 2017. — 58 с.
4. ГОСТ 31371.1-2008 Газ природный. Определение состава методом газовой хроматографии с оценкой неопределенности. Часть 1. Руководство по проведению анализа. — М.: Стандартинформ, 2010. — 19 с.
5. ГОСТ Р 8.816-2013 Государственная система обеспечения единства измерений. Газ природный. Объемная теплота сгорания. Методика измерений с применением калориметра сжигания с бомбой. — М.: Стандартинформ, 2014. — 24 с.
6. Kolesov V.P. Bomb combustion of gaseous compounds in oxygen // Experimental Chemical Thermodynamics. Combustion Calorimetry. — Oxford, United Kingdom: Pergamon Press, 1979. — Pp. 291–306.
7. Hyde C.G., Jones M.W. Gas calorimetry. — London: Ernest Benn, 1960. — Pp. 83–102.
8. Lewis E.A., Hart R.M., Greenfield H. Design and testing of a new isothermal flow gas calorimeter: The hart field-deployable natural gas energy meter // Thermochim. Acta. — 1989. — Vol. 154. No. 1. — Pp. 167–185.
9. Айвазов Б. В. Введение в хроматографию. — М.: Высшая школа, 1983. — С.63-79.
10. Петров В.Н. Определение компонентного состава природных газов. — М.: ООП МИНГ им. И.М. Губкина, 1988. — С. 1-24.
11. McNair H.; Miller J. M. Basic Gas Chromatography. — John Wiley & Sons: Hoboken, NJ, 2009. — Pp. 93–126.

12. Dorman F. L., Whiting J. J., Cochran J. W., Gardea-Torresdey J. Gas chromatography. — *Anal. Chem.* 2010. — Pp. 4775–4785.
13. Ramos L. *Comprehensive Two Dimensional Gas Chromatography*, 1st Edition. — Elsevier Science, 2009. — Pp. 47-64.
14. Smith B.C. *Fundamentals of Fourier Transform Infrared Spectroscopy* 2nd Edition. — CRC Press, 2011. — Pp. 55-62.
15. Griffiths P.R., De Haseth J.A. *Fourier Transform Infrared Spectrometry*, 2<sup>nd</sup> ed. — Wiley: Hoboken, NJ, USA, 2007. — Pp. 237-241.
16. Buric M.P., Chen K.P., Falk J., Woodruff S.D. Enhanced spontaneous Raman scattering and gas composition analysis using a photonic crystal fiber // *Applied Optics*. — 2008. — Vol. 47. — Pp. 4255-4261.
17. Makhoukhi N., Pere E., Creff R., Pouchan C. Determination of the composition of a mixture of gases by infrared analysis and chemometric methods // *Journal of Molecular Structure*. — 2005. — V. 744. — Pp. 855-859.
18. Yuntao Liang, Xiaojun Tang, Xuliang Zhang, Fuchao Tian, Yong Sun, Haozhe Dong Portable Gas Analyzer Based on Fourier Transform Infrared Spectrometer for Patrolling and Examining Gas Exhaust // *Journal of Spectroscopy*. — 2015. — Volume 136516. — Pp. 1-7.
19. Köhler M.H., Schardt M., Rauscher M.S., Koch A.W. Gas Measurement Using Static Fourier Transform Infrared Spectrometers // *Sensors (Basel)*. — 2017. — 17(11). — Pp. 1-11.
20. Tania A. Sasaki, Charles L. Wilkins Gas chromatography with Fourier transform infrared and mass spectral detection // *Journal of Chromatography*. — 1999. — V. 842. — Pp. 341–349.
21. Пентин Ю.А., Вилков Л.В. *Физические методы исследования в химии*. — М: Мир, 2003. — С. 131-140.
22. Баженов Ю.В., Власов В.И. Анализ газовых сред методом спектроскопии комбинационного рассеяния // *Аналитика и контроль*. — 2008. — №3. — С. 65-74.
23. Барановский В.Ф., Горелкин С.М., Городенцева В.А. *Физико–химические методы анализа*. — М.: Высшая школа, 1972. — С. 78-85.



24. Иоффе Б.В. Рефрактометрические методы анализа в химии. — Л.: Гос. Научно-техническое изд. Химической литературы, 1960. — С. 267-276.
25. Schley P., Kastner J., Wiegleb G. Novel optical techniques for process analysis of natural gas quality // Proc. 3rd Conference on Optical Analysis Technology. — Dusseldorf, Germany, 2002. — Pp. 105-110.
26. Schley P., Jaeschke M., Altfeld K. New technologies for gas quality determination // FLOMEKO. — Germany, 2003. — Pp. 1-12.
27. Koturbash T., Karpash M., Darvai I., Rybitskyi I., Kutcherov V. Development of New Instant Technology of Natural Gas Quality Determination // Proceedings of the ASME 2013 Power Conference. — 2013. — Volume 1: Fuels and Combustion, Material Handling, Emissions; Steam Generators; Heat Exchangers and Cooling Systems; Turbines, Generators and Auxiliaries; Plant Operations and Maintenance. — Pp. 1-6.
28. Rahmouni C., Tazerout M., Le Corre O. Determination of the combustion properties of natural gases by pseudo-constituents // Fuel. — 2003. — Vol. 82. No. 11. — Pp. 1399–1409.
29. Thurston R.R. Determination of effective composition of a mixture of hydrocarbon gases. PCT Patent WO 02/40992A1. — 2002.
30. Boersma A., Sweelssen J., Blokland H. Multiparameter sensor array for gas composition monitoring // Proc. Eurosensors. — 2018. — Vol. 2 (13). — P. 867.
31. De Graaf G., Bakker F., Wolffenbuttel R.F. Sensor platform for gas composition measurement // Procedia Eng. — 2011. — Vol. 25. — Pp. 1157–1160.
32. Lötters J.C., van der Wouden E.J., Groenesteijn J., et al. Real-time composition determination of gas mixtures // Proc. SENSORS. — 2014. — Valencia, Spain. — Pp. 1640–1643.
33. Pannemann H. J, Koreman C. W., Kroon A., Horstink H., Jaeschke M., Schouten J. A., Michels J. P. A Fast Energy Measurement System Suitable for Process Control and Off-Shore Metering Application // Proceedings of 2001 International Gas Research Conference. — 2001. — Amsterdam, The Netherlands.
34. Дарвай И.Я., Карпаш М.О., Рыбицкий И.В. Контроль качества природного газа – новое решение // Литье и Металлургия. — 2012. — №3(67). — С. 328-333.

35. ACM 150 FT-IR Centralized Gas Monitoring System. URL: <https://www.honeywellanalytics.com/en/products/ACM-150> (дата обращения: 17.04.2022).
36. Midas Gas Detector. URL: <https://www.honeywellanalytics.com/en-sg/products/Midas> (дата обращения: 17.04.2022).
37. Система газовой сигнализации Dräger X-zone 5500. URL: [https://www.draeger.com/ru\\_ru/Applications/Products/Portable-Gas-Detection/Multi-Gas-Detectors/X-zone-5500](https://www.draeger.com/ru_ru/Applications/Products/Portable-Gas-Detection/Multi-Gas-Detectors/X-zone-5500) (дата обращения: 17.04.2022).
38. Многоканальный анализатор Dräger X-am 7000. URL: [https://www.draeger.com/ru\\_ru/Applications/Products/Portable-Gas-Detection/Multi-Gas-Detectors/X-am-7000](https://www.draeger.com/ru_ru/Applications/Products/Portable-Gas-Detection/Multi-Gas-Detectors/X-am-7000) (дата обращения: 17.04.2022).
39. ALTAIR 5X Multigas Detector. URL: <https://de.msasafety.com/Portable-Gas-Detection/Multi-Gas/ALTAIR®-5X-Multigas-Detector/p/000080001600001023> (дата обращения: 17.04.2022).
40. Portable emission analyzer Testo 350. URL: <https://www.testo.com/en-US/testo-350/p/0632-3510> (дата обращения: 17.04.2022).
41. Переносной многокомпонентный газоанализатор АНКАТ-7664Микро. URL: [http://www.analitpribor-smolensk.ru/products/bezopasnost\\_gazoanalizatory/perenosnye\\_gazoanalizatory/ankat\\_micro\\_pid](http://www.analitpribor-smolensk.ru/products/bezopasnost_gazoanalizatory/perenosnye_gazoanalizatory/ankat_micro_pid) (дата обращения: 17.04.2022).
42. Микропроцессорная газоаналитическая система СТМ-30М. URL: [http://www.analitpribor-smolensk.ru/products/bezopasnost\\_gazoanalizatory/stacionarnye\\_gazoanalizatory/stm30m\\_signalizator/](http://www.analitpribor-smolensk.ru/products/bezopasnost_gazoanalizatory/stacionarnye_gazoanalizatory/stm30m_signalizator/) (дата обращения: 17.04.2022).
43. ГОСТ Р ИСО 20815-2013 Нефтяная, нефтехимическая и газовая промышленность. Управление обеспечением эффективности производства и надежностью. — М.: Стандартинформ, 2015. — 74с.
44. Mirzaei-Paiaman A., Salavati S. The application of artificial neural networks for the prediction of oil production flow rate // Energy Sources, Part A: Recovery, Utilization, and Environmental Effects. — 2012. — No. 34:19. — Pp. 1834-1843.

45. Соломатин Г.И., Захарян А.З., Ашкарин Н.И. Прогнозирование работы скважин с помощью искусственных нейронных сетей // Нефтяное хозяйство. — 2002. — №10. — С. 92–96.
46. Леонов М.Г., Жирнов Б.С. Обработка экспериментальных данных процесса коксования с помощью нейронных сетей // Нефтегазовое дело. — 2014. — №2. — С. 151–165.
47. Келлер Ю.А. Разработка искусственных нейронных сетей для предсказания технологической эффективности от выравнивания профиля приемистости // Известия Томского политехнического университета. Информационные технологии. — 2014. — №5. — С. 60–65.
48. Мандрик И.Э., Шахвердиев А.Х., Сулейманов И.В. Оценка и прогноз нефтеотдачи на основе моделирования нейронными сетями // Нефтяное хозяйство. — 2005. — №10. — С. 31–34.
49. Пчельников И.В., Борхович С.Ю., Натаров А.Л. Перспективы прогнозирования эффективности ГТМ на основе нейросетевого моделирования // Нефть. Газ. Новации. — 2016. — №4. — С. 37–40.
50. Jimenez De La Cruz G., Ruz-Hernandez J., Shelomov E., Salazar-Mendoza R. Optimization of an Oil Production System using Neural Networks and Genetic Algorithms // Proc. of the Joint 2009 Int. Fuzzy Systems Association World Congress and 2009 European Society of Fuzzy Logic and Technology Conference. — 2009. — Pp. 1815–1820.
51. Yousefi S. H., Azamifard A., Hosseini S., Shamsoddini M., Alizadeh N. Toward a predictive model for predicting viscosity of natural and hydrocarbon gases // Journal of Natural Gas Science and Engineering. — 2014. — Volume 20. — Pp. 147-154.
52. Hadian M., Akbari N., Karami M. Using artificial neural network predictive controller optimized with Cuckoo Algorithm for pressure tracking in gas distribution network // Journal of Natural Gas Science and Engineering. — 2015. — Volume 27, Part 3. — Pp. 1446-1454.
53. Shi X., Wang J., Liu G., Yang L., Ge X., Jiang S. Application of extreme learning machine and neural networks in total organic carbon content prediction in organic shale with wire line logs // Journal of Natural Gas Science and Engineering. — 2016. — Volume 33. — Pp. 687-702.
54. Hamzehie M. E., Fattahi M., Najibi H., Van der Bruggen B., Mazinani S. Application of artificial neural networks for estimation of solubility of acid gases (H<sub>2</sub>S and CO<sub>2</sub>) in 32 commonly ionic liquid

and amine solutions // *Journal of Natural Gas Science and Engineering*. — 2015. — Volume 24. — Pp. 106-114.

55. Gomaa I., Elkatatny S., Abdulraheem A. Real-time determination of rheological properties of high over-balanced drilling fluid used for drilling ultra-deep gas wells using artificial neural network // *Journal of Natural Gas Science and Engineering*. — 2020. — Volume 77. — P. 103.

56. Ghorbani B., Ziabasharhagh M., Amidpour M. A hybrid artificial neural network and genetic algorithm for predicting viscosity of Iranian crude oils // *Journal of Natural Gas Science and Engineering*. — 2014. — Volume 18. — Pp. 312-323.

57. Ashena R., Thonhauser G. Application of Artificial Neural Networks in Geoscience and Petroleum Industry // *Artificial Intelligent Approaches in Petroleum Geosciences*. — 2015. — Pp. 127–166.

58. Alkinani Husam, Al-Hameedi Abo Taleb, Dunn-Norman Shari, Flori Ralph, Alsaba Mortadha, Amer Ahmed. (2019). Applications of Artificial Neural Networks in the Petroleum Industry: A Review // *SPE Middle East Oil and Gas Show and Conference*. — 2019. — Manama, Bahrain.

59. Etesami D., Zhang W.J., Hadian M. A formation-based approach for modeling of rate of penetration for an offshore gas field using artificial neural networks // *Journal of Natural Gas Science and Engineering*. — 2021. — P. 104.

60. Sanjari E., Lay E. N. Estimation of natural gas compressibility factors using artificial neural network approach // *Journal of Natural Gas Science and Engineering*. — 2012. — Volume 9. — Pp. 220-226.

61. Ghiasi M. M., Bahadori A., Zendehboudi S. Estimation of triethylene glycol (TEG) purity in natural gas dehydration units using fuzzy neural network // *Journal of Natural Gas Science and Engineering*. — 2014. — Volume 17. — Pp. 26-32.

62. Altfeld K., Schley P. Development of natural gas qualities in Europe // *Heat processing*. — 2012. — Pp. 77-83.

63. Vermeulen M., Drenthen J., Hollander H. Understanding diagnostic and expert systems in ultrasonic flow meters // *KROHNE Oil & Gas, CT Products*. — 2012.

64. Koturbash T., Bicz A., Bicz W. New instrument for measuring velocity of sound and quantitative characterization of binary gas mixtures composition // Measurement Automation Monitoring. — 2016. — Pp. 254-258.
65. Löfqvist T., Delsing J., Sokas K. Speed of sound measurements in gas-mixtures at varying composition using an ultrasonic gas flow meter with silicon based transducers // International Conference on Flow Measurement . — 2003. — Groningen, Netherlands.
66. Advanced Gasmittler (AGM22). URL: <http://www.sensors-inc.com> (дата обращения: 17.04.2022).
67. Thermal Conductivity Gauge. URL: <http://www.xensor.nl> (дата обращения: 17.04.2022).
68. Wild K. R., Ehrich D. L. Energy Metering Technologies // Proceedings of 2001 International Gas Research Conference. — 2001. — Amsterdam, the Netherlands.
69. Dräger Infrared Sensors. URL: <https://www.draeger.com> (дата обращения: 17.04.2022).
70. Dynament Infrared Gas Sensors. URL: <https://www.dynament.com> (дата обращения: 17.04.2022).
71. Bright Sensors BlueEye. URL: <https://www.bright-sensors.com> (дата обращения: 17.04.2022).
72. Potocnik P. Natural Gas // Sciyo. — 2010. — 616р.
73. ГОСТ 30319.1-2015. Газ природный. Методы расчета физических свойств. Общие положения. — М.: Стандартинформ, 2015. — 12с.
74. REFPROP Software. URL: <https://www.nist.gov/srd/refprop> (дата обращения: 17.04.2022).
75. Котурбаш Т.Т., Брокеров И.А. Метод определения свойств и состава природного газа по измерениям его физических параметров // Датчики и системы. — 2018. — №6. — С. 43-50.
76. Брокеров И.А. Искусственные нейронные сети для решения задачи анализа компонентного состава газовых смесей // Управление большими системами. — 2019. — Выпуск 80. М.: ИПУ РАН. — С.98-115.
77. Саати Т. Л. Принятие решений. Метод анализа иерархий. — М.: Радио и связь, 1989. — 316 с.

78. Ringuest J.L. Compromise Programming. In: Multiobjective Optimization: Behavioral and Computational Considerations. — Springer, Boston, MA, 1992. — Pp. 51-59.
79. Brokarev I.A., Vaskovskii S.V. Gas Quality Determination Using Neural Network Model-based System // Proceedings of the 2nd International Workshop on Stochastic Modeling and Applied Research of Technology (SMARTY 2020). — Petrozavodsk: Institute of Applied Mathematical Research, Karelia Research Centre of the Russian Academy of Sciences, 2020. — Vol-2792. — Pp. 113-128.
80. Matlab 2019b Software. URL: <https://www.mathworks.com> (дата обращения: 17.04.2022).
81. Brokarev I.A., Vaskovskii S.V. Multi-criteria estimation of input parameters in natural gas quality analysis // Advances in Systems Science and Applications. — 2020. — Vol. 20, No. 4. — Pp. 60-69.
82. Васьковский С.В., Брокарев И.А. Анализ компонентного состава природного газа с применением искусственных нейронных сетей // Материалы 18-й Международной научно-практической конференции им. А.Ф. Терпугова «Информационные технологии и математическое моделирование» (ИТММ–2019, Томск). — Томск: Издательство НТЛ, 2019. — Ч. 1. — С. 21-26.
83. ГОСТ Р 8.662-2009 Газ природный. Термодинамические свойства газовой фазы. Методы расчетного определения для целей транспортирования и распределения газа на основе фундаментального уравнения состояния AGA8 — М.: Стандартинформ, 2010. — 43 с.
84. Котурбаш Т.Т., Брокарев И.А. Сравнительный анализ физических свойств природного газа и эквивалентных ему псевдогазовых смесей // Датчики и системы. — 2019. — №3. — С. 7-13.
85. Сайт компании Bronkhorst. URL: <https://www.bronkhorst.com/products/gas-flow> (дата обращения: 17.04.2022).
86. Сайт компании Varian, Inc. URL: <http://www.varianinc.ru> (дата обращения: 17.04.2022).
87. Костин В.Н., Тишина Н.А. Статистические методы и модели: Учебное пособие. — Оренбург: ГОУ ОГУ, 2004. — 138 с.
88. Hribar R., Potočnik P., Šilc J., Papa G. A comparison of models for forecasting the residential natural gas demand of an urban area // Energy. — 2018. — Vol. 167. — Pp. 511-522.

89. Vondráček J., Pelikán E., Konár O., Čermáková J., Eben, K., Malý, M., Brabec, M. A statistical model for the estimation of natural gas consumption // *Applied Energy*. — 2008. — No. 85(5). — Pp. 362-370.
90. Aleardi M. Analysis of different statistical models in probabilistic joint estimation of porosity and litho-fluid facies from acoustic impedance values // *Geosciences*. — 2018. — No. 8(11). — Pp. 386-388.
91. Graybill F.A., Iyer H.K. *Regression analysis — Concepts and applications*, Duxbury Pr., 1994. — Pp. 99-132.
92. Стрижов В.В., Крымова Е.А. *Методы выбора регрессионных моделей*. — М.: ВЦ РАН, 2010. — 60 с.
93. Rasmussen C. E., Williams C. K., *Gaussian Processes for Machine Learning* — The MIT Press, 2006. — 266 p.
94. Cristianini N., Shawe-Taylor J. *An Introduction to Support Vector Machines and Other Kernel-based Learning Methods*. — Cambridge University Press, 2000. — Pp. 9-25.
95. Брюхомицкий Ю. А. *Нейросетевые модели для систем информационной безопасности: Учебное пособие*. — Таганрог: Изд-во ТРТУ, 2005. — 160 с.
96. Mitchell T. M. *Machine Learning* — McGraw-Hill Science/Engineering/Math, 1997. — Pp. 81-126.
97. LeCun Y., Boser B., Denker J. S., Henderson D., Howard R. E., Hubbard W. and Jackel L. D. Backpropagation Applied to Handwritten Zip Code Recognition // *Neural Computation* — 1989. — No1(4). — Pp. 541-551.
98. Васьковский С.В., Брокарев И.А. Распределенная система сбора данных для задачи анализа компонентного состава природного газа // *Материалы 22-й Международной научной конференции "Распределенные компьютерные и телекоммуникационные сети: управление, вычисление, связь" (DCCN-2019, Москва)*. — М.: РУДН, 2019. — Т. 1. — С. 381-388.
99. Брокарев И.А., Васьковский С.В. Natural gas quality determination system based on artificial neural networks // *Proceedings of the 5th International Conference on Stochastic Methods (ICSM-5, 2020)*. — М.: РУДН, 2020. — С. 265-268.

100. Callan R. The essence of neural networks (The essence of computing series) — Prentice Hall, 1999. — 248 p.
101. Hochreiter S., Schmidhuber J. Long short-term memory // Neural computation. — 1997. — Vol. 9(8). — P. 1735-1780.
102. Chung J., Gulcehre C., Cho K., Bengio Y. Empirical Evaluation of Gated Recurrent Neural Networks on Sequence Modeling, arXiv:1412.3555. — 2014. — P. 1-9.
103. Демиденко Е.З. Оптимизация и регрессия. — М.: Наука, 1989. — С. 223–228.
104. Marquardt D.W. An algorithm for least squares estimation of non-linear parameters // J. Soc. of Appl. Math. — 1963. — V.2. — P. 431–441.
105. Kaur J., Adamchuk V., Whalen J., Ismail A. Development of an NDIR CO<sub>2</sub> Sensor-Based System for Assessing Soil Toxicity Using Substrate-Induced Respiration // Sensors. — 2015. — №15. — P. 4734–4748.
106. ISO 15971:2008. Natural Gas - Measurement of Properties - Calorific Value and Wobbe Index. — International Organization for Standardization, 2008. — 50p.
107. ГОСТ Р 52350.29.1-2010 Взрывоопасные среды Часть 29-1 Газоанализаторы. Общие технические требования и методы испытаний газоанализаторов горючих газов. — М.: Стандартинформ, 2011. — 40 с.
108. ГОСТ 27.002–89. Надежность в технике. Основные понятия. Термины и определения. — М.: Издательство стандартов, 1990. — 40 с.
109. Лаврищева Е.М., Пакулин Н.В., Рыжов А.Г., Зеленов С.В. Анализ методов оценки надежности оборудования и систем. Практика применения методов // Труды ИСП РАН. — 2018. — Том 30, Вып. 3. — С. 99-120.
110. Конесев С.Г., Хазиева Р.Т. Методы оценки показателей надежности сложных компонентов и систем // Современные проблемы науки и образования. — 2015. — № 1-1. — С. 2-3.
111. Kalimulina E.Y. Math Modeling of the Reliability Control and Monitoring System of Complex Network Platforms International // Conference on Intelligent Systems Design and Applications. — 2018. — Vol. 941. — Pp. 230-237.



112. Kalimulina E.Y. Analysis of system reliability with control, dependent failures, and arbitrary repair times // International Journal of System Assurance Engineering. — 2017. — V.8. — Pp.1-9.
113. Kalimulina E.Y. A new approach for dependability planning of network systems // International Journal of System Assurance Engineering. — 2013. — V.4:3. — Pp. 215-222.
114. Granig W., Faller L.-M., Zangl H. Sensor system optimization to meet reliability targets // Microelectronics Reliability. —2018. — V. 87. — 37 p.
115. Kalimulina E.Y. Analysis of Unreliable Open Queueing Network with Dynamic Routing // International Conference on Distributed Computer and Communication Networks. — 2017. — Vol. 700. — Pp. 355-367.
116. Андреев А.В., Яковлев В.В., Короткая Т.Ю. Теоретические основы надежности технических систем. — СПб.: Издательство Политехнического университета, 2018. — 164 с.
117. Oksendal B. Stochastic Differential Equations. An Introduction with Applications. — Springer-Verlag, 2003. — 352p.
118. Koralov L., Sinai Y. G. Theory of Probability and Random Processes. — Springer Science & Business Media, Mathematics, 2007. — 358 p.
119. ISO 6976: 1995 International Standard. Natural gas - Calculation of calorific value, density and relative density. — International Organization for Standardization, 1995. — 46 p.
120. Осипов Л. В., Петров В. В. Об оценке остаточного члена в центральной предельной теореме // Теория вероятностей и ее применения. — 1967. — №12:2. — С. 322–329.
121. Ibragimov I.A., Hasminsky R.Z. Statistical Estimation. Asymptotic Theory, Applications of Mathematics. — Springer Verlag, 1981. — 403 p.
122. Koturbash T. Determining the quality of natural gas and biomethane Development of a correlative method and instrument prototype for measuring gas quality: Doctoral Thesis in Energy Technology. — KTH Royal Institute of Technology, Stockholm, Sweden 2021. — 96 p.
123. ФГУП СПО Аналитприбор. URL: <https://www.analitpribor-smolensk.ru/> (дата обращения: 17.04.2022).

124. Optel Ultrasonic Technology. URL: [www.optel.eu](http://www.optel.eu) (дата обращения: 17.04.2022).
125. Loubar K., Rahmouni C., Le Corre O., Tazerout M. A combustionless determination method for combustion properties of natural gases // *Fuel*. — 2007. — P. 2535-2544.
126. Koturbash, T., Brokarev, I. Estimation of the energy content of propanated biomethane using ultrasonic measurements // *Journal of Natural Gas Science and Engineering*. — 2021. — V.86. — 9 p.
127. Brokarev I.A., Farkhadov M.P., Vaskovskii S.V. Recurrent neural networks to analyze the quality of natural gas // *Vestnik Tomskogo Gosudarstvennogo Universiteta - Upravlenie, Vychislitel'naya Tekhnika i Informatika*. — 2021. — №55. — Pp. 11–17.
128. Брокарев И.А., Васьковский С.В., Фархадов М.П. Современные методы и средства анализа показателей качества природного газа // *Газовая промышленность*. — 2020. — № 9. — С. 38-43.
129. Половко А. М., Гуров С. В. Основы теории надёжности. — СПб.:БХВ-Петербург, 2006. — 702с.
130. Крюков В. В. Системы сбора данных // *Информационно-измерительные системы*. — Владивосток: ВГУЭС, 2000. — 93 с.
131. Yi P., Lizhi X., Yuanzhong Z. Remote real-time monitoring system for oil and gas well based on wireless sensor networks // *International Conference on Mechanic Automation and Control Engineering*. — 2010. — Pp. 2427-2429.
132. Wu F., Yan Y., Yin C. Real-time microseismic monitoring technology for hydraulic fracturing in shale gas reservoirs: A case study from the Southern Sichuan Basin // *Natural Gas Industry*. — 2017. — Volume 4, Issue 1. — Pp. 68-71.
133. Petculescu A. An acoustic approach to assess natural gas quality in real time // *The Journal of the Acoustical Society of America*. — 2017. — №142. P. 2547.
134. Koturbash T., Bicz A., Kutcherov V. G. Real-time quality metering of propanated biomethane // *International Journal of Oil, Gas and Coal Technology*. — 2021. — Vol. 27, No. 1. — P. 8.

## Приложение 1. Акты о внедрении результатов диссертационной работы



Общество с ограниченной ответственностью «Газпром добыча Ямбург»  
(ООО «Газпром добыча Ямбург»)

**Управление автоматизации и метрологического обеспечения**  
(УАиМО)

«25» января 2024 г.

№ 60/12

### АКТ

о внедрении результатов диссертационного исследования Ивана Андреевича Брокарева «Математическое и программное обеспечение информационной системы интеллектуального анализа качества газа», представленной на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 2.3.8 «Информатика и информационные процессы»

Настоящим актом удостоверяется, что результаты диссертационной работы И.А. Брокарева «Математическое и программное обеспечение информационной системы интеллектуального анализа качества газа», а именно алгоритмы функционирования информационной системы, метод обработки информации на основе применения искусственных нейронных сетей, численные результаты экспериментальных исследований по анализу качества газа были использованы в рамках следующих работ, проводимых ООО «Газпром добыча Ямбург»:

- исследование и анализ различных современных подходов для определения качества природного газа;
- верификация качества функционирования оборудования и моделирование оценки качества природного газа в программных комплексах;
- экспериментальные исследования для оценки точности измерений качества природного газа.

По результатам исследований Брокарева И.А. было предложено алгоритмическое решение, на основе которого разработано программное обеспечение, функционирующее в рамках существующей автоматизированной информационной системы, которое позволяет проводить анализ качества природного газа с меньшими временными и стоимостными затратами.

Начальник управления



С.И. Гункин

УТВЕРЖАЮ

Ректор  
РГУ нефти и газа (НИУ)  
имени И.М. Губкина  
академик РАН, д.т.н., профессор

В.Г. Мартынов

« 31 » января 2024 г.

**АКТ**

о внедрении результатов диссертационной работы  
Брокарева Ивана Андреевича  
**«МАТЕМАТИЧЕСКОЕ И ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ  
ИНФОРМАЦИОННОЙ СИСТЕМЫ  
ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОГО АНАЛИЗА КАЧЕСТВА ГАЗА»**  
в учебный процесс РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина

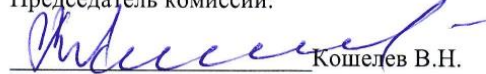
Комиссия в составе:

Председатель: проректор по учебной работе Кошелев В.Н., профессор, д.х.н.  
Члены комиссии: начальник учебно-методического управления Душин А.В., доцент,  
к.филос.н.  
заведующий кафедрой автоматизации технологических процессов,  
Самарин И.В., доцент, д.т.н.

Составили настоящий акт о том, что результаты диссертационной работы на соискание учёной степени кандидата технических наук по специальности 2.3.8 - Информатика и информационные процессы, внедрены в рабочие программы дисциплин «Основы автоматизации технологических процессов нефтегазового производства», «Технические средства автоматизации и управления», «Автоматизация управления нефтегазовыми технологическими процессами и производствами» по направлению подготовки 27.03.04 «Управление в технических системах» в виде описания возможного использования метода обработки информации для анализа качества природного газа на основе искусственных нейронных сетей, модифицированного алгоритма перехода от информационных параметров исходного рассматриваемого объекта к информационным параметрам его упрощенной модели, архитектуры автоматизированной информационной системы для определения показателей качества природного газа, а также в виде методических указаний к нескольким лабораторно-практическим работам.

Использование результатов диссертационного исследования позволяет изучить в рамках учебного процесса современные подходы обеспечения анализа качества газа.

Председатель комиссии:

  
Кошелев В.Н.

Члены комиссии:

  
Душин А.В.

  
Самарин И.В.

## Приложение 2. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ

3318

РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



## СВИДЕТЕЛЬСТВО

о государственной регистрации программы для ЭВМ

№ 2023661379

**«Модель автоматизированной информационной системы с применением метода обработки информации, основанного на нейросетевых технологиях»**

Правообладатель: *Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем управления им. В.А. Трапезникова Российской академии наук (RU)*

Авторы: *Васьковский Сергей Владимирович (RU), Брокарев Иван Андреевич (RU)*

Заявка № 2023660150

Дата поступления 19 мая 2023 г.

Дата государственной регистрации

в Реестре программ для ЭВМ 30 мая 2023 г.



Руководитель Федеральной службы  
по интеллектуальной собственности

Ю.С. Зубов

### Приложение 3. Примеры кода программы алгоритмов метода обработки информации для анализа качества газа

#### 3.1 Код программы алгоритмов формирования расчетных данных

```

%% Код программы алгоритма формирования компонентного состава

% Задание максимальных значений по каждому компоненту
comp_number = 0;
data_RAW = [];
limit_max_CH4 = 100;
limit_max_N2 = 5;
limit_max_CO2 = 5;
limit_max_C2H6 = 0;
limit_max_C3H8 = 5;
limit_max_n_C4H10 = 0;
limit_max_n_C5H12 = 0;
limit_max_n_C6H14 = 0;

% циклы по каждому компоненту от минимального значения до максимального с заданием шага
initial_conc_1 = 70; points_conc_1 = 1; step_conc_1 = 0; % CH4 Methane
initial_conc_2 = 0; points_conc_2 = 21; step_conc_2 = 0.25; % N2 Nitrogen
initial_conc_3 = 0; points_conc_3 = 21; step_conc_3 = 0.25; % CO2 Carbon Dioxide
...
initial_conc_21 = 0; points_conc_21 = 1; step_conc_21 = 0; % H2S Hydrogen Sulfide
for i2 = 1:points_conc_2
...
for i21 = 1:points_conc_21

% вычисление текущего значения концентрации
active02_N2 = initial_conc_2 + (i2-1) * step_conc_2;
active03_CO2 = initial_conc_3 + (i3 - 1) * step_conc_3;
...
active21_H2S = initial_conc_21 + (i21 - 1) * step_conc_21;

% вычисление концентрации метана как балансной концентрации
conc_rest = (active02_N2 + active03_CO2 + active04_C2H6 + active05_C3H8 + active06_n_C4H10
+ active07_i_C4H10 + active08_n_C5H12 ...
+ active09_i_C5H12 + active10_n_C6H14 + active11_n_C7H16 + active12_n_C8H18 +
active13_n_C9H20 + active14_n_C10H22...
+ active15_He + active16_Ar + active17_H2 + active18_O2 + active19_CO + active20_H2O +
active21_H2S);
conc_CH4=100- round(conc_rest,3);
active01_CH4=conc_CH4;

```

```

% проверка превышения значения концентраций компонентов максимальным значениям
if (conc_CH4>=initial_conc_1) && (conc_CH4<=limit_max_CH4) &&
(active02_N2<=limit_max_N2)&&(active03_CO2<=limit_max_CO2)&&(active04_C2H6<=limit_ma
x_C2H6)&&(active05_C3H8<=limit_max_C3H8)&&(active06_n_C4H10<=limit_max_n_C4H10)&
&(active08_n_C5H12<=limit_max_n_C5H12) && (active10_n_C6H14<=limit_max_n_C6H14)

```

```

% заполнение массива данными концентраций компонентов
comp_number = comp_number + 1 ;
data_RAW(comp_number, 1) = comp_number;
data_RAW(comp_number, 4) = active01_CH4;
data_RAW(comp_number, 5) = active02_N2;
data_RAW(comp_number, 6) = active03_CO2;
...
data_RAW(comp_number, 24) = active21_H2S;
data_RAW(comp_number, 25) = sum(data_RAW(comp_number, 4:24));

end
...
End

```

```

% формирование диапазонов концентраций определением максимального и минимального
значения по каждому компоненту

```

```

CH4_min = min(data_RAW(:,4));
CH4_max = max(data_RAW(:,4));
N2_min = min(data_RAW(:,5));
N2_max = max(data_RAW(:,5));
CO2_min = min(data_RAW(:,6));
CO2_max = max(data_RAW(:,6));
...
H2S_min = min(data_RAW(:,24));
H2S_max = max(data_RAW(:,24));

```

```

%% Код программы алгоритма формирования компонентного состава модели псевдогаза

```

```

% возможность выбора модели расчёта

calc_for_5comp = 1;
calc_for_4comp = 1;

% коэффициенты для пятикомпонентного псевдогаза
coeffs_for_effective_methane_5comp = [1 0 0 0 0 -1 -1 -1.5 -1.5 -1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0];
coeffs_for_effective_ethane_5comp = [0 0 0 1 0 1 1 1 1 -1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0];
coeffs_for_effective_propane_5comp = [0 0 0 0 1 1 1 1.5 1.5 3 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0];

% коэффициенты для четырёхкомпонентного псевдогаза
coeffs_for_effective_methane_4comp = [1 0 0 0.5 0 -0.5 -0.5 -1 -1 -1.5 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0];
coeffs_for_effective_propane_4comp = [0 0 0 0.5 1 1.5 1.5 2 2 2.5 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0];

% Настройки, связанные с форматом входных данных
range_for_conc = 4:24;

```

```

methane_column = 4;
ethane_column = 7;
propane_column = 8;
...
zeroing_range_for_4comp = [7 9:13];

                                % сохранение переменной для природного газа
real_comp = conc_data_filtered;
str = [var_name '_0real', '=real_comp;'];
eval(str);
all_comp = conc_data_filtered(:,range_for_conc);

                                % расчёт для пятикомпонентного псевдогаза
if calc_for_5comp==1
for i=1:length(conc_data_filtered(:,1))
effective_methane_5comp(i) = sum(all_comp(i,:).*coeffs_for_effective_methane_5comp);
effective_ethane_5comp(i) = sum(all_comp(i,:).*coeffs_for_effective_ethane_5comp);
effective_propane_5comp(i) = sum(all_comp(i,:).*coeffs_for_effective_propane_5comp);
end
pseudo_5_comp = conc_data_filtered;
pseudo_5_comp(:,methane_column) = effective_methane_5comp;
pseudo_5_comp(:,ethane_column) = effective_ethane_5comp;
pseudo_5_comp(:,propane_column) = effective_propane_5comp;
pseudo_5_comp(:,zeroing_range_for_5comp) = 0;

                                % сохранение переменной для пятикомпонентного псевдогаза
str = [var_name '_5pseudo', '=pseudo_5_comp;'];
eval(str);
end

                                % расчёт для четырёхкомпонентного псевдогаза
if calc_for_4comp==1
for i=1:length(conc_data_filtered(:,1))
effective_methane_4comp(i) = sum(all_comp(i,:).*coeffs_for_effective_methane_4comp);
effective_propane_4comp(i) = sum(all_comp(i,:).*coeffs_for_effective_propane_4comp);
end
pseudo_4_comp = conc_data_filtered;
pseudo_4_comp(:,methane_column) = effective_methane_4comp;
pseudo_4_comp(:,8) = effective_propane_4comp;
pseudo_4_comp(:,zeroing_range_for_4comp) = 0;

                                % сохранение переменной для четырёхкомпонентного псевдогаза
str = [var_name '_4pseudo', '=pseudo_4_comp;'];
eval(str);
end

%% Код программы алгоритма добавления значений давления и температуры

                                % Выбор переменной (природный газ или псевдогаз)
var_name = ['data2D_diap_01_0real']; % variable to process

```



```
conc_data = evalin('base',var_name);
```

```
    % Задание начальных значений по температуре и давлению
```

```
initial_pressure = 0.101325; point_pressure = 1; step_pressure = 0;
initial_pressure = 0.101325; point_pressure = 1; step_pressure = 0;
initial_temperature_C = 20; point_temperature = 1; step_temperature = 0;
```

```
initial_temperature = initial_temperature_C + 273.15;
counter1 = 1;
comp_number = length(conc_data(:,1));
data_final_withPT = [];
```

```
    % Добавление к исходному массиву данных по температуре и давлению
```

```
for i_pres = 1:point_pressure
for i_temp = 1:point_temperature
counter1 = 1+(i_temp-1)*comp_number+(i_pres-1)*point_temperature*comp_number;
data_final_withPT(counter1:counter1+comp_number-1, 1) = conc_data(:, 1)+counter1-1;
data_final_withPT(counter1:counter1+comp_number-1, 2) = initial_pressure + (i_pres - 1) *
step_pressure;
data_final_withPT(counter1:counter1+comp_number-1, 3) = initial_temperature + (i_temp - 1) *
step_temperature;
data_final_withPT(counter1:counter1+comp_number-1, 4:25) = conc_data(:, 4:25);
end
end
```

```
    % Сохранение переменной для массива данных с температурой и давлением
```

```
str = [var_name '_withPT','=data_final_withPT;']; % name for output 2D matrix
eval(str);
service=[length(data_final_withPT(:,1)) comp_number point_temperature point_pressure];
str = [var_name '_withPT_service','=service;']; % service variable for output 2D matrix
eval(str);
```

```
%% Код программы алгоритма расчета физических параметров и энергетических
характеристик
```

```
    % Выбор переменной с массивом данных
```

```
var_name = 'data2D_diap_01_0real_withPT';
calc_data = evalin('base',var_name);
```

```
    % Выбор стандартов для расчёта
```

```
AGA_calc = 0;
GERG_calc = 1;
PR_calc = 0;
default_calc = 0;
```

```
    % импорт библиотеки REFPROP
```

```
import py.ctREFPROP.ctREFPROP.REFPROPFunctionLibrary
```

```
    % инициализация REFPROP
```

```
RP = REFPROPFunctionLibrary('C:\Program Files (x86)\REFPROP');
```

## % Выбор состава газовой смеси

```
hFld = 'Methane;Nitrogen;Carbon
dioxide;Ethane;Propane;Butane;Isobutane;Pentane;Isopentane;Hexane;Isobutane;Pentane';
```

## % Выбор входных переменных для расчёта

```
hIn = 'PT';
```

## % Выбор выходных переменных для расчёта (список с единицами измерения)

```
% Regular properties
% T Temperature Molar [K] Mass [K]
% P Pressure Molar [kPa] Mass [kPa]
% D Density Molar [mol/dm^3] Mass [kg/m^3]
% V Volume Molar [dm^3/mol] Mass [m^3/kg]
...
% Transport, etc.
% VIS Viscosity Molar [uPa*s] Mass [uPa*s]
% TCX Thermal conductivity Molar [W/(m*K)] Mass [W/(m*K)]
...

% hOut =
'T;P;D;V;E;H;S;CV;CP;CP/CV;W;Z;JT;A;G;R;M;VIS;TCX;KV;DE;HG;HN;HGVOL;HNVOL';
```

## % Выбор единиц измерения и условий расчета

```
% 1 - for mole SI, 2 - for mass SI; 3 - for SI with Centigrade
iUnits = 2;
% iMass - select mass or mole concentrations; 0 - for mole, 1 - for mass
iMass = 0;
% iFlag - select calc type; 0 - for default
iFlag = 0;
```

## % Выбор модели для расчёта

```
% FLAGSdll(hFlag,jFlag) - library syntax
% hFlag - AGA8, GERG, PR for model. There are other options for hFlag such as Gas Constant or
Carorie
% jFlag - 0 for turning off, 1 for turning on (AGA and GERG), 2 - for turning on PR, 3 for turning on
advanced PR
% before turning on the model you should turn off the previous model
RP.FLAGSdll('AGA8',int8(0));
RP.FLAGSdll('GERG',int8(0));
RP.FLAGSdll('PR',int8(0));
```

## % Начальные значения переменных

```
data_GERG = [];
data_AGA = [];
data_PR = [];
data_default = [];
error_comp_GERG = [];
error_code_GERG = [];
error_disc_GERG = "";
error_comp_code_GERG = [];
```

```

error_comp_AGA = [];
error_code_AGA = [];
error_disc_AGA = "";
error_comp_code_AGA = [];
error_comp_PR = [];
error_code_PR = [];
error_disc_PR = "";
error_comp_code_PR = [];
error_comp_default = [];
error_code_default = [];
error_disc_default = "";
error_comp_code_default = [];
j_default = 1;
j_GERG = 1;
j_AGA = 1;
j_PR = 1;

```

% Выбор количества выходных переменных

```
amount_of_out_var = length(find(hOut == ';')) + 1;
```

% Выбор количества входных переменных

```
amount_of_in_var = length(find(hFld == ';')) + 1;
```

% Проведение расчёта с заданием компонентного состава, температуры и давления и  
применением выбранных настроек

```

start_col = 4; % start conc column (methane)
fin_col = amount_of_in_var+3; % final conc column
for i=1:length(calc_data(:,1))
% a - first input property (Pressure)
a = calc_data(i,2);
% b - second input property (Temperature)
b = calc_data(i,3);
% z - concentrations
z = calc_data(i,start_col:fin_col);

```

% Расчёт по стандартной модели

```

if default_calc == 1
r = RP.REFPROPdll(hFld,hIn,hOut,int8(iUnits),int8(iMass),int8(iFlag),a,b,z);
properties_default = cellfun(@double,cell(r.Output)); % convert python list to double
properties_default = properties_default(1:amount_of_out_var); %removing all unused cells
data_default = [data_default; calc_data(i,:) properties_default];

```

%Создание массива ошибок расчёта

```

if r.ierr ~= 0
%error_comp_default = [error_comp_default; calc_data(i,1)];
%error_code_default = [error_code_default; int64(r.ierr)];
error_comp_code_default = [error_comp_code_default; calc_data(i,1) int64(r.ierr)];
error_disc_default(j_default,1:strlength(char(r.herr))) = char(r.herr);
j_default = j_default + 1;
end
end

```

## % Расчёт по модели Пенга-Робинсона

```

if PR_calc == 1
RP.FLAGSdll('PR',int8(2));
r = RP.REFPROPdll(hFld,hIn,hOut,int8(iUnits),int8(iMass),int8(iFlag),a,b,z);
properties_PR = cellfun(@double,cell(r.Output)); % convert python list to double
properties_PR = properties_PR(1:amount_of_out_var);
data_PR = [data_PR; calc_data(i,:) properties_PR];

```

## %Создание массива ошибок расчёта

```

if r.ierr ~= 0
error_comp_code_PR = [error_comp_code_PR; calc_data(i,1) int64(r.ierr)];
error_disc_PR(j_PR,1:strlength(char(r.herr))) = char(r.herr);
j_PR = j_PR + 1;
end
end

```

## % Расчёт по модели AGA 8

```

if AGA_calc == 1
RP.FLAGSdll('PR',int8(0));
RP.FLAGSdll('AGA8',int8(1));
r = RP.REFPROPdll(hFld,hIn,hOut,int8(iUnits),int8(iMass),int8(iFlag),a,b,z);
properties_AGA = cellfun(@double,cell(r.Output)); % convert python list to double
properties_AGA = properties_AGA(1:amount_of_out_var);
data_AGA = [data_AGA; calc_data(i,:) properties_AGA];

```

## %Создание массива ошибок расчёта

```

if r.ierr ~= 0
%error_comp_AGA = [error_comp_AGA; calc_data(i,1)];
%error_code_AGA = [error_code_AGA; int64(r.ierr)];
error_comp_code_AGA = [error_comp_code_AGA; calc_data(i,1) int64(r.ierr)];
error_disc_AGA(j_AGA,1:strlength(char(r.herr))) = char(r.herr);
j_AGA = j_AGA + 1;
end
end

```

## % Расчёт по модели GERG-2008

```

if GERG_calc == 1
RP.FLAGSdll('AGA8',int8(0));
RP.FLAGSdll('GERG',int8(1));
r = RP.REFPROPdll(hFld,hIn,hOut,int8(iUnits),int8(iMass),int8(iFlag),a,b,z);
properties_GERG = double(py.array.array('d',r.Output));
properties_GERG = properties_GERG(1:amount_of_out_var);
data_GERG = [data_GERG; calc_data(i,:) properties_GERG];

```

## %Создание массива ошибок расчёта

```

if r.ierr ~= 0
error_comp_code_GERG = [error_comp_code_GERG; calc_data(i,1) int64(r.ierr)];
error_disc_GERG(j_GERG,1:strlength(char(r.herr))) = char(r.herr);
j_GERG = j_GERG + 1;
end

```

```
end
```

```
RP.FLAGSdll('AGA8',int8(0));
RP.FLAGSdll('GERG',int8(0));
RP.FLAGSdll('PR',int8(0));
```

```
end
```

```
    % Сохранение переменных для всех расчётов
```

```
if default_calc == 1
error_check_default =
struct('error_comp_code',error_comp_code_default,'error_disc',error_disc_default,'data_default',data_d
efault);
str = [var_name '_default','=data_default;'];
eval(str);
end
```

```
if PR_calc == 1
error_check_PR =
struct('error_comp_code',error_comp_code_PR,'error_disc',error_disc_PR,'data_PR',data_PR);
str = [var_name '_PR','=data_PR;'];
eval(str);
end
```

```
if AGA_calc == 1
error_check_AGA =
struct('error_comp_code',error_comp_code_AGA,'error_disc',error_disc_AGA,'data_AGA',data_AGA
);
str = [var_name '_AGA','=data_AGA;'];
eval(str);
end
```

```
if GERG_calc == 1
error_check_GERG =
struct('error_comp_code',error_comp_code_GERG,'error_disc',error_disc_GERG,'data_GERG',data_G
ERG);
str = [var_name '_GERG','=data_GERG;'];
eval(str);
end
```

### 3.2 Код программы алгоритмов нейросетевого анализа

```
%% Код программы алгоритма создания нейросетевой модели
```

```
    % Функция вызова нейронной сети
```

```
function [net,net_information] = PD_03_neural_network(number_of_neurons,method_of_training,
input_variable_train,output_variable_train,input_variable_test,output_variable_test,input_variable_vali
d,output_variable_valid)
```

```

% Комбинация входных и выходных переменных в одну переменную
input_variables = [input_variable_train; input_variable_valid; input_variable_test];
output_variables = [output_variable_train; output_variable_valid; output_variable_test];

```

```

% Расчёт размера тестовой, тренировочной и валидационной выборок
len_test = length(input_variable_test);
len_train = length(input_variable_train);
len_valid = length(input_variable_valid);
len_all = length(input_variables);

```

```

% Транспонирование входной и выходной переменной для корректной работы сети
inputs = input_variables';
targets = output_variables';

```

```

% Создание нейронной сети с заданным числом нейронов
net = feedforwardnet(number_of_neurons);

```

```

% Выбор параметра окончания обучения
net.performFcn = 'mse';

```

```

% Выбор метода разделения на тренировочную, валидационную и тестовую выборки
(используется разделение по индексам)
net.divideFcn = 'divideind';
net.divideParam.trainInd = 1:len_train;
net.divideParam.valInd = len_train+1:len_train+len_valid;
net.divideParam.testInd = len_train+len_valid+1:len_all;

```

```

% Выбор алгоритма обучения
switch method_of_training
case 1
net.trainFcn = 'trainlm';
case 2
net.trainFcn = 'trainbr';
case 3
net.trainFcn = 'trainscg';
case 4
net.trainFcn = 'trainbfg';
case 5
net.trainFcn = 'trainrp';
case 6
net.trainFcn = 'traincgb';
case 7
net.trainFcn = 'traincgf';
case 8
net.trainFcn = 'traincgp';
case 9
net.trainFcn = 'trainoss';
case 10
net.trainFcn = 'traingdx';
case 11

```

```

net.trainFcn = 'traingdm';
case 12
net.trainFcn = 'traingd';
end

                                % Определение условий для окончания обучения
net.trainParam.max_fail = 25;
net.trainParam.min_grad=1e-5;
net.trainParam.mu=0.001;
net.trainParam.time=Inf;
net.trainParam.epochs=1000;
net.trainParam.goal=0;

                                % Обучение сети
[net,net_information] = train(net,inputs,targets);

end

```

### 3.3 Код программы алгоритмов визуализации данных

```

%% Код программы алгоритма для визуализации различия параметров исходных смесей и
%% модели псевдогазовых смесей

                                % Задание переменных для визуализации
data_4pseudo = data2D_diap_01_4pseudo_withPT_GERG;
data_5pseudo = data2D_diap_01_5pseudo_withPT_GERG;
data_real = data2D_diap_01_0real_withPT_GERG;
param_col = [36 44 47 48];

                                % Задание названий переменных и единиц измерения
titles = char('VOS', 'TCD', 'Gross CV','Net CV');
units_of_measurement = char('m/s', 'W/(m*K)', 'kg/m3', 'MJ/m3', 'MJ/m3');

                                % Построение графиков
for i=1:length(param_col)
figure;
subplot(3,1,1);
suptitle(titles(i,:))
x = data_real(:,param_col(i));
y = data_4pseudo(:,param_col(i));
z = data_5pseudo(:,param_col(i));
hold on;
plot(x,'r.','LineWidth',5)
plot(y,'b.','MarkerSize',5)
plot(z,'g.','MarkerSize',5)
xlabel('Comp number','FontSize', 15);
ylabel('Parameter','FontSize', 13);
axis([1 length(x) min([x;y;z]) max([x;y;z])])

```

```

grid on;
hold off;
subplot(3,1,2);
suptitle(titles(i,:))
x = data_real(:,param_col(i));
y = data_4pseudo(:,param_col(i));
z = data_5pseudo(:,param_col(i));
hold on;

```

% Построение параметров в природном газе и псевдогазе

```

plot(x,x,'r','LineWidth',5)
plot(x,y,'b','MarkerSize',5)
plot(x,z,'g','MarkerSize',5)
xlabel('--- in real gas, ---','FontSize', 15);
ylabel('--- in pseudo gas, ---','FontSize', 13);
axis([min(x) max(x) min([y;z]) max([y;z])])
grid on;
hold off;
subplot(3,1,3);
suptitle(titles(i,:))
delta_real = abs(data_real(:,param_col(i)) - data_real(:,param_col(i)))/data_real(:,param_col(i))*100;
delta_4pseudo = abs(data_real(:,param_col(i)) -
data_4pseudo(:,param_col(i)))/data_real(:,param_col(i))*100;
delta_5pseudo = abs(data_real(:,param_col(i)) -
data_5pseudo(:,param_col(i)))/data_real(:,param_col(i))*100;

```

% Добавление на графики значений отклонений

```

MAD = mean(abs(data_real(:,param_col(i)) - data_4pseudo(:,param_col(i))));
MAD4 = mean(abs(data_real(:,param_col(i)) - data_4pseudo(:,param_col(i))));
MAD5 = mean(abs(data_real(:,param_col(i)) - data_5pseudo(:,param_col(i))));
txt1 = ['MAD = ' num2str(MAD) ' ---'];
dim1 = [0.8 0.15 0.3 0.3];
MaxAD = max(abs(data_real(:,param_col(i)) - data_4pseudo(:,param_col(i))));
MaxAD4 = max(abs(data_real(:,param_col(i)) - data_4pseudo(:,param_col(i))));
MaxAD5 = max(abs(data_real(:,param_col(i)) - data_5pseudo(:,param_col(i))));
txt2 = ['MaxAD = ' num2str(MaxAD) ' ---'];
dim2 = [0.6 0.15 0.3 0.3];
hold on;

```

% Построение отклонения природного газа от псевдогаза

```

plot(x,delta_real,'r','LineWidth',5)
plot(x,delta_4pseudo,'b','MarkerSize',5)
plot(x,delta_5pseudo,'g','MarkerSize',5)
xlabel('--- in real gas, ---','FontSize', 15);
ylabel('Relative error, %','FontSize', 15);
axis([min(x) max(x) -0.3*max([delta_4pseudo;delta_5pseudo])
1.3*max([delta_4pseudo;delta_5pseudo])])
grid on;
annotation('textbox',dim1,'String',txt1,'FitBoxToText','on','FontSize', 15);
annotation('textbox',dim2,'String',txt2,'FitBoxToText','on','FontSize', 15);
hold off;
end

```



## Приложение 4. Часть журнала экспериментов для получения экспериментальных данных

12/8	Quaternary C <sub>1</sub> -C <sub>4</sub> (with GC) (K63 + C <sub>1</sub> -C <sub>2</sub> from 13)
12/7	GasMixer COM 18
7:36	START LOG
	#1 CH <sub>4</sub> 100% GC 1
7:46	#80 C <sub>2</sub> 3.5% C <sub>3</sub> 2% GC 1 C <sub>2</sub> 3.54%; C <sub>3</sub> 2.04%
	#81 C <sub>2</sub> 3.5% C <sub>3</sub> 2% C <sub>4</sub> 0.5% GC 1 C <sub>2</sub> 3.56%; C <sub>3</sub> 2.05%; C <sub>4</sub> 0.48%
	#82 C <sub>2</sub> 3.5% C <sub>3</sub> 2% C <sub>4</sub> 1.5% GC 1 C <sub>2</sub> 3.57%; C <sub>3</sub> 2.06%; C <sub>4</sub> 1.54%
8:01	#83 C <sub>2</sub> 3.5% C <sub>3</sub> 3% GC 1 C <sub>2</sub> 3.56%; C <sub>3</sub> 3.05%
	#84 C <sub>2</sub> 3.5% C <sub>3</sub> 3% C <sub>4</sub> 0.5% GC 1 C <sub>2</sub> 3.56%; C <sub>3</sub> 3.07%; C <sub>4</sub> 0.53%
	50

2018 12/7	Quaternary C <sub>1</sub> -C <sub>4</sub> with G.C (K63 + C <sub>4</sub> - C <sub>2</sub> from 1.5)
8:11	#85 C <sub>2</sub> 3.5% C <sub>3</sub> 3% C <sub>4</sub> 1.5% GCI C <sub>2</sub> 3.56%; C <sub>3</sub> 3.07%; C <sub>4</sub> 1.56%
	#86 C <sub>2</sub> 3.5% C <sub>3</sub> 5% GCI C <sub>2</sub> 3.57%; C <sub>3</sub> 5.05%
8:21	#87 C <sub>2</sub> 3.5% C <sub>3</sub> 5% C <sub>4</sub> 0.5% GCI C <sub>2</sub> 3.57%; C <sub>3</sub> 5.1%; C <sub>4</sub> 0.53%
	#88 C <sub>2</sub> 3.5% C <sub>3</sub> 5% C <sub>4</sub> 1.5% GCI C <sub>2</sub> 3.57%; C <sub>3</sub> 5.11%; C <sub>4</sub> 1.57%
8:31	#89 C <sub>2</sub> 3.5% C <sub>3</sub> 10% GCI C <sub>2</sub> 3.59%; C <sub>3</sub> 10.12%
	#90 C <sub>2</sub> 3.5% C <sub>3</sub> 10% C <sub>4</sub> 0.5% GCI C <sub>2</sub> 3.58%; C <sub>3</sub> 10.16%; C <sub>4</sub> 0.53%
	#91 C <sub>2</sub> 3.5% C <sub>3</sub> 10% C <sub>4</sub> 1.5% GCI C <sub>2</sub> 3.59%; C <sub>3</sub> 10.18%; C <sub>4</sub> 1.58%
8:46	#92 C <sub>2</sub> 4% C <sub>3</sub> 0.5% GCI C <sub>2</sub> 4.05%; C <sub>3</sub> 0.56%
	#93 C <sub>2</sub> 4% C <sub>3</sub> 0.5% C <sub>4</sub> 0.5% GCI C <sub>2</sub> 4.05%; C <sub>3</sub> 0.52%; C <sub>4</sub> 0.52%

2018  
12/7 Quaternary C<sub>1</sub>-C<sub>4</sub> with NBC  
(M63 + C<sub>4</sub> - C<sub>2</sub> from 1.5).

8:56 #94 C<sub>2</sub> 4% C<sub>3</sub> 0.5% C<sub>4</sub> 1.5%  
GC1 C<sub>2</sub> 4.05%; C<sub>3</sub> 0.51%; C<sub>4</sub> 1.56%

#95 C<sub>2</sub> 4% C<sub>3</sub> 1%  
GC1 C<sub>2</sub> 4.05%; C<sub>3</sub> 1.02%

9:07 #96 C<sub>2</sub> 4% C<sub>3</sub> 1% C<sub>4</sub> 0.5%  
GC1 C<sub>2</sub> 4.05%; C<sub>3</sub> 1.02%; C<sub>4</sub> 0.53%

9:11 #97 C<sub>2</sub> 4% C<sub>3</sub> 1% C<sub>4</sub> 0.5%  
GC1 C<sub>2</sub> 4.06%; C<sub>3</sub> 1.02%; C<sub>4</sub> 1.56%

#98 C<sub>2</sub> 4% C<sub>3</sub> 2%  
GC1 C<sub>2</sub> 4.05%; C<sub>3</sub> 2.03%

#99 C<sub>2</sub> 4% C<sub>3</sub> 2% C<sub>4</sub> 0.5%  
GC1 C<sub>2</sub> 4.06%; C<sub>3</sub> 2.05%; C<sub>4</sub> 0.53%

9:26 #100 C<sub>2</sub> 4% C<sub>3</sub> 2% C<sub>4</sub> 1.5%  
GC1 C<sub>2</sub> 4.06%; C<sub>3</sub> 2.05%; C<sub>4</sub> 1.57%

#101 C<sub>2</sub> 4% C<sub>3</sub> 3%  
GC1 C<sub>2</sub> 4.06%; C<sub>3</sub> 3.04% 52

#102 C<sub>2</sub> 4% C<sub>3</sub> 3% C<sub>4</sub> 0.5%  
GC1 C<sub>2</sub> 4.06%; C<sub>3</sub> 3.05%; C<sub>4</sub> 0.53%

2018  
12/7 Quaternary C1-L4 with GC  
(W63 + L4 - C2 from 1.5).

9:41 #103 C<sub>2</sub> 4% ; C<sub>3</sub> 3% C<sub>4</sub> 1.5%  
GC1 C<sub>2</sub> 4.06% ; C<sub>3</sub> 3.06% ; C<sub>4</sub> 1.57%.

#104 C<sub>2</sub> 4% C<sub>3</sub> 5%  
GC1 C<sub>2</sub> 4.06% ; C<sub>3</sub> 5.06%

9:52 #105 C<sub>2</sub> 4% C<sub>3</sub> 5% C<sub>4</sub> 0.5%  
GC1 C<sub>2</sub> 4.06% ; C<sub>3</sub> 5.09% ; C<sub>4</sub> 0.53%

#106 C<sub>2</sub> 4% C<sub>3</sub> 5% C<sub>4</sub> 1.5%  
GC1 C<sub>2</sub> 4.07% ; C<sub>3</sub> 5.1% ; C<sub>4</sub> 1.57%.

10:02 #107 C<sub>2</sub> 4% C<sub>3</sub> 10%  
GC1 C<sub>2</sub> 4.07% ; C<sub>3</sub> 10.1%.

#108 C<sub>2</sub> 4% C<sub>3</sub> 10% C<sub>4</sub> 0.5%  
GC1 C<sub>2</sub> 4.08% ; C<sub>3</sub> 10.14% ; C<sub>4</sub> 0.53%.

#109 C<sub>2</sub> 4% C<sub>3</sub> 10% C<sub>4</sub> 1.5%  
GC1 C<sub>2</sub> 4.08% ; C<sub>3</sub> 10.16% ; C<sub>4</sub> 1.58%.

10:17 #110 C<sub>2</sub> 5% C<sub>3</sub> 0.5%  
GC1 C<sub>2</sub> 5.06% ; C<sub>3</sub> 0.56%

#111 C<sub>2</sub> 5% C<sub>3</sub> 0.5% C<sub>4</sub> 0.5%  
GC1 C<sub>2</sub> 5.06% ; C<sub>3</sub> 0.52% ; C<sub>4</sub> 0.53%.

53

20 <sup>18</sup> 12/7	Quaternary C <sub>1</sub> -C <sub>4</sub> with GC (N63 + C <sub>4</sub> -C <sub>2</sub> from 15)
10:27	#112 C <sub>2</sub> 5% C <sub>3</sub> 0.5% C <sub>4</sub> 1.5% GC1 C <sub>2</sub> 5.07%; C <sub>3</sub> 0.51%; C <sub>4</sub> 1.57%
	#113 C <sub>2</sub> 5% C <sub>3</sub> 1% GC1 C <sub>2</sub> 5.06%; C <sub>3</sub> 1.02%
	#114 C <sub>2</sub> 5% C <sub>3</sub> 1% C <sub>4</sub> 0.5% GC1 C <sub>2</sub> 5.07%; C <sub>3</sub> 1.02%; C <sub>4</sub> 0.53%
	#115 C <sub>2</sub> 5% C <sub>3</sub> 1% C <sub>4</sub> 1.5% GC1 C <sub>2</sub> 5.08%; C <sub>3</sub> 1.02%; C <sub>4</sub> 1.57%
10:47	#116 C <sub>2</sub> 5% C <sub>3</sub> 2% GC1 C <sub>2</sub> 5.08%; C <sub>3</sub> 2.03%
	#117 C <sub>2</sub> 5% C <sub>3</sub> 2% C <sub>4</sub> 0.5% GC1 C <sub>2</sub> 5.08%; C <sub>3</sub> 2.04%; C <sub>4</sub> 0.53%
	#118 C <sub>2</sub> 5% C <sub>3</sub> 2% C <sub>4</sub> 1.5% GC1 C <sub>2</sub> 5.08%; C <sub>3</sub> 2.05%; C <sub>4</sub> 1.57%
11:02	#119 C <sub>2</sub> 5% C <sub>3</sub> 3% GC1 C <sub>2</sub> 5.08%; C <sub>3</sub> 3.04%
	#120 C <sub>2</sub> 5% C <sub>3</sub> 3% C <sub>4</sub> 0.5% GC1 C <sub>2</sub> 5.08%; C <sub>3</sub> 3.06%; C <sub>4</sub> 0.53%
	#121 C <sub>2</sub> 5% C <sub>3</sub> 3% C <sub>4</sub> 1.5% GC1 C <sub>2</sub> 5.08%; C <sub>3</sub> 3.06%; C <sub>4</sub> 1.57%