

Д. Р. Ахмеров, А. Г. Мухаметзянова

## АНАЛИТИЧЕСКИЙ МЕТОД РАСЧЕТА ОКТАНОВОГО ЧИСЛА УГЛЕВОДОРОДНЫХ СМЕСЕЙ С УЧЕТОМ НЕАДДИТИВНОСТИ СВОЙСТВ КОМПОНЕНТОВ

*Ключевые слова:* октановое число смешения, углеводороды, смесь, аддитивность, межмолекулярное взаимодействие, дипольный момент.

Разработанная математическая модель определения октанового числа товарного изомеризата (продукта установки изомеризации - смеси изомерных углеводородов) в режиме реального времени представляет собой важный шаг в улучшении процессов контроля качества на предприятии АО «ТАНЕКО». В нынешних условиях, когда технологии становятся всё более сложными, а требования к качеству продукции ужесточаются, возникает необходимость в более точных и надёжных методах анализа. На данный момент для мониторинга октанового числа автомобильных бензинов и их компонентов используются виртуальные анализаторы, которые основываются на регрессионных уравнениях. Однако, несмотря на существующие технологии, точность и эффективность таких анализаторов оставляют желать лучшего, что связано с нелинейной зависимостью октанового числа от технологических параметров, а также с неаддитивностью свойств углеводородных смесей. Для решения этих проблем была предложена новая математическая модель. В её основе лежит учёт неаддитивности, связанной с межмолекулярными взаимодействиями молекул, которые можно количественно охарактеризовать с помощью дипольного момента. Такой подход позволяет значительно улучшить точность расчетов октанового числа, так как он учитывает сложные взаимодействия между компонентами, входящими в состав изомеризата. Алгоритм, который был разработан в рамках этой модели, не только позволяет рассчитывать октановое число с высокой точностью, но и может быть легко интегрирован в существующие производственные процессы на АО «ТАНЕКО». Это открывает новые возможности для оперативного мониторинга качества топлива в реальном времени, что, в свою очередь, способствует повышению эффективности производственных процессов и улучшению качества конечного продукта. Внедрение данной модели в практическую деятельность предприятия обещает стать значительным шагом вперед в области контроля качества углеводородного сырья.

D. R. Akhmerov, A. G. Mukhametzyanova

## ANALYTICAL METHOD FOR CALCULATING THE OCTANE NUMBER OF HYDROCARBON MIXTURES TAKING INTO ACCOUNT THE NON-ADDITIONALITY OF COMPONENTS' PROPERTIES

*Keywords:* blending octane number, hydrocarbons, mixture, additivity, intermolecular interaction, dipole moment.

The developed mathematical model for real-time determination of octane number of isomerizate (product of the isomerization unit - a mixture of isomeric hydrocarbons) is an important step in improving quality control processes at TANEKO JSC. In the current conditions, when technologies are becoming more and more complex and product quality requirements are becoming stricter, there is a need for more accurate and reliable methods of analysis. Currently, virtual analyzers based on regression equations are used to monitor the octane number of automotive gasoline and its components. However, despite the existing technologies, the accuracy and efficiency of such analyzers leave much to be desired due to the nonlinear dependence of octane number on technological parameters, as well as the non-additivity of the properties of hydrocarbon mixtures. To solve these problems a new mathematical model was proposed. It is based on the non-additivity associated with intermolecular interactions of molecules, which can be quantitatively characterized by the dipole moment. This approach can significantly improve the accuracy of octane number calculations because it takes into account the complex interactions between the components that make up the isomerizate. The algorithm that has been developed within the framework of this model not only allows calculating octane number with high accuracy, but can be easily integrated into existing production processes at TANEKO JSC. This opens up new opportunities for real-time operational monitoring of fuel quality, which, in turn, contributes to increasing the efficiency of production processes and improving the quality of the final product. Implementation of this model into the practical activity of the enterprise promises to become a significant step forward in the field of hydrocarbon feedstock quality control.

### Введение

На предприятии АО «ТАНЕКО» в 2018 году была введена в действие установка изомеризации легкой нефти. Товарным продуктом установки является изомеризат (смесь изомерных углеводородов, см. таблица 1) с октановым числом по исследовательскому методу 92-93, являющийся компонентом автомобильных бензинов.

Ввиду высокой загрузки заводской лаборатории, анализ качества получаемого изомеризата производится 1 раз в сутки, что негативно сказывается на оперативное управление

технологическим процессом и управление планированием производства.

На действующей установке состав получаемого изомеризата в режиме реального времени измеряется хроматографом YOKOGAWA GC1000 Mark II.

Целью настоящего исследования является:

- разработка методики расчета октанового числа по исследовательскому методу (ИОЧ) товарного изомеризата АО «ТАНЕКО» в режиме реального времени на основе известного компонентного состава, получаемого с поточного анализатора;
- вывод аналитического выражения для

определения зависимости между ИОЧ (согласно ГОСТ 8226) и составом углеводородной смеси;

- реализация найденной зависимости в системах MES и мониторинга результата расчета ИОЧ для оперативного управления качеством изомеризата.

В результате исследования решались следующие задачи:

- определение влияния полярности компонентов углеводородной смеси на октановое число;

- разработка математической модели расчета ИОЧ потока изомеризата с учетом дипольного момента компонентов смеси.

### Описание метода

Установлено, что физико-химические взаимодействия между молекулами углеводородов обусловливают неаддитивность детонационных свойств при смешении потоков. Влияние полярности компонентов смеси на неаддитивность октановых чисел смешения может изменяться в широком

интервале в зависимости от расхода и состава углеводородных потоков [2].

Нами произведено сравнение между собой ИОЧ изомеризата:

1) полученного по данных лабораторного контроля;

2) расчетное значение ИОЧ изомеризата по формуле: сумма произведений объемной доли каждого компонента на его ИОЧ:

$$\text{ИОЧ}_{\text{см}} = \sum_{i=1}^n \text{ИОЧ}_i \times \vartheta_i \quad (1.1)$$

где  $\text{ИОЧ}_{\text{см}}$  – октановое число смешения,  $\vartheta_i$  – концентрация  $i$ -го компонента, об.доли.

Графически сравнение лабораторного и рассчитанного нами ИОЧ показано на рисунке 1. По оси ординат – ИОЧ изомеризата, по оси абсцисс – время. Сравнение показало, что средняя ошибка (RMSE) между данными лабораторного контроля и расчётным ИОЧ составляет 1,41 ед., (рисунок 1).

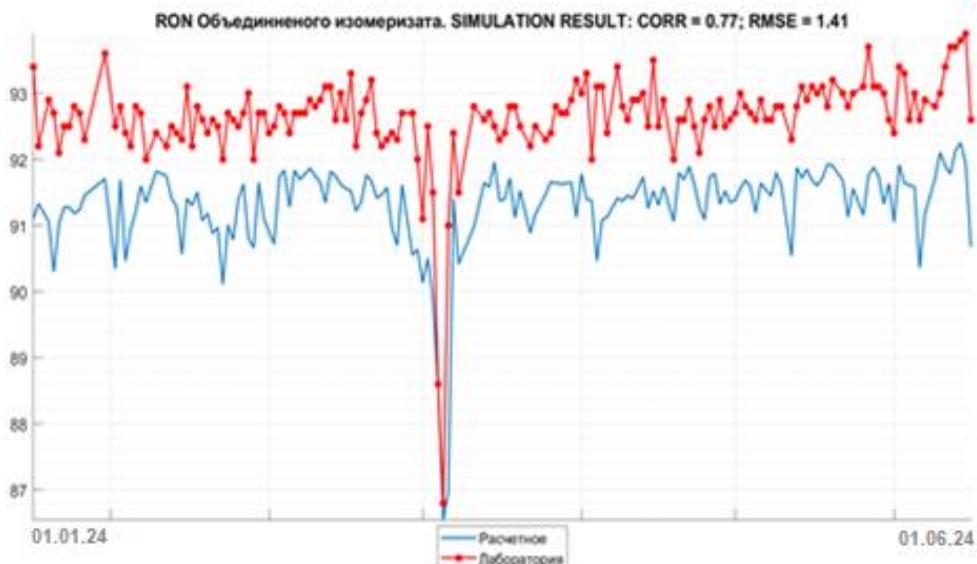


Рис. 1 – ИОЧ изомеризата, полученный лабораторным методом и расчетные аддитивные значения ИОЧ

Fig. 1 – Isomerize octane number according to the research method (RON) obtained by laboratory method and calculated additive RON values

Полученные отклонения лабораторных данных от расчетных можно объяснить тем, что при аналитическом расчете не учитываются неаддитивные свойства компонентов смеси. Также стоит отметить, что в составе изомеризата присутствует большое количество углеводородов разветвленной структуры, обладающих высоким коэффициентом межмолекулярного взаимодействия.

Таким образом причиной отклонений является наличие взаимодействий между молекулами углеводородов, входящих в состав объединенного изомеризата. Установлено, что силы межмолекулярного взаимодействия определяющим образом зависят от полярности молекул компонентов смеси.

Экспериментальные исследования позволили установить количественные зависимости между степенью полярности компонентов смеси,

характеризуемой дипольным моментом, и отклонением октановых чисел смешения от аддитивности. Иными словами, чем выше полярность молекул, тем значительнее проявляется неаддитивность при смешении, что сказывается на итоговом октановом числе.

В качестве первого приближения используется следующий подход расчета ИОЧ: ИОЧ изомеризата представляется как сумма величин, подчиняющихся аддитивности, плюс некоторая поправка, характеризующая суммарное отклонение октанового числа от аддитивности [1].

Аддитивная величина представляется виде суммы произведений объемной доли каждого компонента на его ИОЧ, формула 1.1.

Для описания неаддитивной части октанового числа изомеризата вводится в расчет новый параметр В, который описывает неаддитивность ИОЧ:

$$B = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^n Bi \times Bj \times \vartheta i \times \vartheta j \times \frac{1}{100} \quad (1.2)$$

где  $Bi$ ,  $Bj$  – величины, характеризующие склонность  $i$ -й молекулы к межмолекулярному взаимодействию с  $j$ -й молекулой, которую можно выразить через дипольные моменты молекул:

$$Bi = \alpha \times \left( \frac{Di}{D_{max}} \right) \quad (1.3)$$

где  $\alpha$  – кинетический параметр, определяющий интенсивность межмолекулярных взаимодействий в зависимости от дипольного момента  $Di$ ;

$D_{max}$  – максимальный дипольный момент молекулы углеводорода (ароматические углеводороды С9+).

Представленный метод расчета неаддитивной части ИОЧ (1.2) был получен в ходе работы, описанной в материалах [2]. В ходе работы авторы предположили, и в дальнейшем доказали, что главным образом неаддитивность свойств углеводородных смесей (в нашем случае ИОЧ) можно объяснить возникающим взаимодействием между индивидуальными компонентами смеси, а также аналитически рассчитать используя дипольные моменты (ДМ) этих компонентов. Нулевые ДМ не учитывается в расчете.

Для оценки величины  $Bi$  были проведены расчеты дипольных моментов молекул углеводородов. Расчет был произведен методом Хартри-Фока с использованием пакета квантово-химических программ. Выполненные расчеты показали, что средние значения дипольного момента (по возрастанию) в гомологических группах расположены следующим образом (рисунок 2).

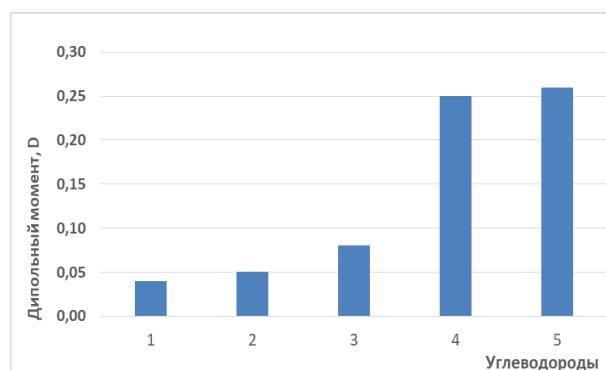


Рис. 2 – средние значения дипольных моментов в гомологических группах: 1 – н-алканы; 2 – циклоалканы; 3 – изоалканы; 4 – алкены; 5 – арены

Fig. 2 – Average dipole moments in homologous groups: 1 – n-alkanes; 2 – cycloalkanes; 3 – isoalkanes; 4 – alkenes; 5 – arenes

Выполненные исследования [2] показали, что наибольшим дипольным моментом обладают непредельные и ароматические углеводороды. Следовательно, именно наличие этих углеводородов в составе бензинов вызывают наибольшие отклонения от аддитивности октановых чисел смешения. Расчет дипольных моментов позволил определить интенсивность межмолекулярных

взаимодействий (ИММВ) углеводородов  $Bi$  [2], входящих в состав высокооктанового бензина. Интенсивность межмолекулярных взаимодействий углеводородов, входящих в состав объединенного изомеризата представлена в таблице 1.

Выражение для определения ИОЧ, учитывающее аддитивную и неаддитивную части примет вид:

$$\text{ИОЧсм} = \sum_i^n \text{ИОЧ}i \times \vartheta i + B \quad (1.4)$$

Таблица 1 – Интенсивность межмолекулярных взаимодействий углеводородов

Table 1 – Intensity of intermolecular interactions between hydrocarbons

№	Наименование компонента	ИММВ, $Bi$	Дипольный момент
1	Изобутан	0,17	0,04
2	Н-бутан	0,19	0,03
3	Изопентан	0,14	0,13
4	Н-пентан	0,16	0,06
5	2,2-диметилбутан	0,16	0,14
6	2,3-диметилбутан	0,16	0,14
7	Циклопентан	0,15	0,04
8	2-метилпентан	0,2	0,07±0,005
9	3-метилпентан	0,2	0,07±0,005
10	н-гексан	0,13	0,08
11	Метилцикlopентан	0,15	0,05
12	Циклогексан	0,22	0,03

### Проведение расчетов

**Шаг 1.** Поскольку результаты лабораторного анализа компонентного состава изомеризата лабораторией выполняются в масс. %, необходимо осуществить перевод массовых % в об. доли.

Перевод осуществляется по выражению:

$$\vartheta i = \frac{Xi \times \rho sm}{\rho i} \quad (1.5)$$

где  $Xi$  – массовые доли  $i$ -го компонента;  $\rho sm$  – плотность смеси,  $\text{кг}/\text{м}^3$ ;  $\rho i$  – плотность  $i$ -го компонента,  $\text{кг}/\text{м}^3$ .

Перевод масс. % в масс. доли осуществляется по формуле:

$$Xi = \frac{x_i}{100} \quad (1.6)$$

где  $x_i$  – концентрация  $i$ -го компонента, масс. %.

Плотность смеси определяется как:

$$\rho sm = \frac{1}{\sum_i^n \frac{Xi}{\rho i}} \quad (1.7)$$

где  $Xi$  – массовые доли  $i$ -го компонента;  $\rho i$  – плотность  $i$ -го компонента,  $\text{кг}/\text{м}^3$ .

Плотности компонентов, входящих в состав изомеризата представлены в таблице 2 [3].

**Шаг 2.** Определение аддитивной составляющей

ИОЧ потока производится по выражению (1.1).

Для определения аддитивной составляющей ИОЧ потока требуется знать ИОЧ каждого компонента, входящего в состав изомеризата. ИОЧ компонентов изомеризата являются справочными, их значения представлены в таблице 3 [2].

Результаты расчетов аддитивной составляющей ИОЧ в зависимости от состава потока представлены на рисунке 1.

**Таблица 2 – Плотности компонентов, входящих в состав объединенного изомеризата**

**Table 2 – Densities of components included in the combined isomerizate**

№	Компоненты изомеризата	Плотность, кг/м <sup>3</sup>
1	Изобутан	564,09
2	Н-бутан	584,23
3	Изопентан	626,13
4	Н-пентан	631,02
5	2,2-диметилбутан	652,26
6	2,3-диметилбутан	664,59
7	Циклопентан	759,89
8	2-метилпентан	656,11
9	3-метилпентан	667,16
10	н-гексан	665,08
11	Метилцикlopентан	753,58
12	Циклогексан	781,88

**Таблица 4 – Матрица коэффициентов взаимодействия углеводородов, входящих в состав изомеризата**

**Table 4 – Matrix of interaction coefficients for hydrocarbons included in the isomerizate**

Bij	nC4	iC5	nC5	22MP	23MP	CycP	2MP	3MP	nC6	MCP	CycH
iC4	0.0323	0.0238	0.0272	0.0272	0.0272	0.025	0.034	0.034	0.0221	0.0255	0.037
nC4	-	0.0266	0.0304	0.0304	0.0304	0.028	0.038	0.038	0.0247	0.0285	0.041
iC5	-	-	0.0224	0.0224	0.0224	0.021	0.028	0.028	0.0182	0.021	0.030
nC5	-	-	-	0.0256	0.0256	0.024	0.032	0.032	0.0208	0.024	0.035
22MP	-	-	-	-	0.0256	0.024	0.032	0.032	0.0208	0.024	0.035
23MP	-	-	-	-	-	0.024	0.032	0.032	0.0208	0.024	0.035
CycP	-	-	-	-	-	-	0.03	0.03	0.0195	0.0225	0.033
2MP	-	-	-	-	-	-	-	0.04	0.026	0.03	0.044
3MP	-	-	-	-	-	-	-	-	0.026	0.03	0.044
nC6	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.0195	0.028
MCP	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.033
CycH	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

### Корректировка метода с учетом специфики смеси

В процессе работы выдвинуто предположение, что данный способ учёта неаддитивной составляющей ИОЧ по выражению (1.2) является не применимой в рамках настоящей работы, так как выражение (1.2) получено для определения неаддитивной составляющей ИОЧ для риформатов, в

**Таблица 3 – ИОЧ компонентов объединенного изомеризата**

**Table 3 – RON of components of combined isomerizate**

№	Компоненты	ИОЧ
1	Изобутан	101,1
2	Н-бутан	93,8
3	Изопентан	92,3
4	Н-пентан	61,7
5	2,2-диметилбутан	91,8
6	2,3-диметилбутан	105,8
7	Циклопентан	100
8	2-метилпентан	73,4
9	3-метилпентан	74,5
10	н-гексан	24,8
11	Метилцикlopентан	91,3
12	Циклогексан	82

**Шаг 3.** Определение неаддитивной составляющей ИОЧ потока производится по выражению (1.2).

Для определения параметра *B* необходимо знать произведение интенсивности межмолекулярных взаимодействий углеводородов *Bi* (таблица 1) между собой. В результате расчётов получена матрица коэффициентов взаимодействия углеводородов, входящих в состав изомеризата, таблица 4.

Расчёты параметра *B* по каждому компонентному составу изомеризата за каждый день, показал, что значение неаддитивной составляющей ИОЧ очень низкое, что не находит своего подтверждения в сравнении данных лабораторного анализа и аддитивной составляющей ИОЧ (рисунок 1).

состав которых входят ароматические углеводороды, обладающие наибольшими дипольными моментами. Например, рассчитанный параметр *Bi* [2] для молекулы бензола равен 1,08, толуола 0,78, о-ксилола -1,06, что значительно превышает параметры *Bi* для компонентов, входящих в состав изомеризата. Тогда можно заключить, что наибольший вклад в неаддитивность октанового числа углеводородных

смесей вносят углеводороды ароматического ряда, получаемые на установках риформинга.

Тогда, для определения неаддитивной составляющей ИОЧ изомеризата выражение (1.2) мы представляем в следующем виде:

$$B = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^n B_{ij} \times \vartheta_i \times \vartheta_j \times (\text{ИОЧ}_i + \text{ИОЧ}_j) \quad (1.8)$$

где  $B_{ij}$  – коэффициенты взаимодействия углеводородов, входящих в состав изомеризата, таблица 4;

ИОЧ<sub>i</sub>, ИОЧ<sub>j</sub> – октановое число i-го и j-го компонента смеси, ед.;

$\vartheta_i$ ,  $\vartheta_j$  – концентрация i-го и j-го компонента смеси, об.доля.

Тогда финальное выражение для расчета ИОЧ выглядит следующим образом: аддитивная величина (результат по формуле 1.1) + неаддитивная величина (результат по формуле 1.8), или

$$\text{ИОЧрасч} = \sum_{i=1}^n \text{ИОЧ}_i \times \vartheta_i + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1}^n B_{ij} \times \vartheta_i \times \vartheta_j \times (\text{ИОЧ}_i + \text{ИОЧ}_j) \quad (1.9)$$

На рисунке 3 представлены ИОЧ:

- полученные заводской лабораторией;
- расчетный ИОЧ (формула 1.9).

Средняя ошибка (RMSE) между данными лабораторного контроля и расчётным ИОЧ составляет 0,46 ед., что ниже ошибки лабораторного метода 1,0 ед. (см. ГОСТ 8226).



Рис. 3 – ИОЧ изомеризата, полученный лабораторным методом и расчётные значения ИОЧ (сумма аддитивной и неаддитивной составляющих)

Fig. 3 – RON of isomerizate obtained by laboratory method and calculated RON values (sum of additive and non-additive components)

### Заключение

Разработанный метод имеет следующие статистические показатели:

- Среднее отклонение от лабораторных данных – 0,46 ед;

- Сравнение средней ошибки между аддитивной моделью (рис.1) и предложенным нами методом (рис.3): 1,41 и 0,46 соответственно. Уменьшение ошибки составило минус 0,95 ед. или минус 67%;

- Повторяемость и воспроизводимость метода согласно ГОСТ 8226 составляет 0,5 и 1,0 ед. соответственно. Полученная ошибка 0,46 ед. находится в допустимом пределе и удовлетворяет производственным требованиям точности расчета ИОЧ;

- Коэффициент корреляции – 0,8.

Таким образом, можно заключить, что представленный метод расчета ИОЧ изомеризата может быть использован в производственной деятельности на АО «ТАНЕКО».

### Литература

1.А.В. Кравцов, Э.Д. Иванчина, Ю.А. Смышляева, Известия Томского политехнического университета, 314, 3, 81-85 (2009).

- Смышляева Ю.А., Иванчина Э.Д., Кравцов А.В., Нефтепереработка и нефтехимия. Научно-технические достижения и передовой опыт, издание №9, 9-14 (2010).
- Рудин М.Г., Сомов В.Е., Фомин А.С. Карманный справочник нефтепереработчика. ЦНИИТЭнефтехим, 2004. 336 с.
- Станкевич М.И., Станкевич И.В., Зефиров Н.С. Успехи химии, 57, 33, 337-366 (1988)
- Смоленский Е.А, Изв. АН. Сер. хим., 9, 1447-1453 (2006).
- Balaban A.T., Kier L.B. and Josh N., Journal of Chemical Information and Computer Sciences, том 32, издание 3, с. 237-244.
- Поздяев В.В., Сомов В.Е., Лисицын Н.В., Кузичкин Н.В. Оптимальное компаундирование бензинов, Нефтепереработка и нефтехимия. – 2002. – № 10. – С. 53–57.
- Гошкин В.П., Поздяев В.В., Дрогоев С.В., Кузичкин Н.В. Моделирование смешения нефтепродуктов, Химическая промышленность. 2001. – № 7. – С. 49–52;
- Левин И.А., Попов А.А., Энглин Б.А. Определение октановых чисел бензинов прямой перегонки по их физико-химическим показателям, Нефтепереработка и нефтехимия. – 1985. – №5. – С. 10–12.
- Смоленский Е.А., Рыжков А.Н., Бавыкин В.М., Чуваева И.В., Лапидус А.Л, Математическое моделирование октановых чисел бензинов, получаемых из природного газа, Газохимия, июль-август 2009, 72-74 с.

11. Гуреев, А.А. Применение автомобильных бензинов. Химия, 1972. 368 с.
12. Кириченко Н.Б. Автомобильные эксплуатационные материалы. Издательский центр "Академия", 2003. 208 с.
13. Школьникова В.М. Топлива, смазочные материалы, технические жидкости. Ассортимент и применение. Технформ, 1999. 596 с.
14. Гуреев А.А., Азев В.С., Автомобильные бензины. Свойства и применение. Учебное пособие для вузов. М.: Нефть и газ, 1996. 444 с.
15. ГОСТ Р 52946-2008 (ЕН ИСО 5163:2005) «Нефтепродукты. Определение детонационных характеристик моторных и авиационных топлив. Моторный метод».
16. ГОСТ 8226-2015 Топливо для двигателей. Исследовательский метод определения октанового числа.
17. Эсбенсен К. Анализ многомерных данных, сокр. пер. с англ. под ред. / К. Эсбенсен, О. Родионовой. И ПХФ РАН., 2005. 113 с.
18. Pomerantsev A. L. Confidence Intervals for Non-linear Regression Extrapolation. Chemom. Intell. Lab. Syst., **49**, 41-42 (2009)
19. O. Ye. Rodionova, K. H. Esbensen, and A.L. Pomerantsev, "Application of SIC (Simple Interval Calculation) for object status classification and outlier detection - comparison with PLS/PCR", J. Chemometrics, **18**, 402-413 ( 2004)
20. Халафян А.А. STATISTICA 6. Статистический анализ данных. 3 - е изд. Учебник. ООО «Бином – Пресс», 2007. 512 с.
- 6.Balaban A.T., Kir L.B., and Josh N., Journal of Chemical Information and Computer Sciences, Volume 32, Issue 3, pp. 237-244.
- 7.Pozdyaev V.V., Somov V.E., Lisitsyn N.V., Kuzichkin N.V. Optimal Compounding of Gasolines, Oil Refining and Petrochemicals. – 2002. – No. 10. – Pp. 53–57.
- 8.Goshkin V.P., Pozdyaev V.V., Drogov S.V., Kuzichkin N.V. Modeling of Mixing of Petroleum Products, Chemical Industry. 2001. – No. 7. – Pp. 49–52;
- 9.Levin I.A., Popov A.A., Englin B.A. Determination of the octane numbers of straight-run gasoline based on their physical and chemical properties, Neftepererabotka i neftekhimiya. – 1985. – No. 5. – Pp. 10–12.
- 10.Smolensky E.A., Ryzhov A.N., Bavykin V.M., Chuvaeva I.V., Lapidus A.L., Mathematical Modeling of Octane Numbers of Gasolines Produced from Natural Gas, Gazokhimiya, July-August 2009, pp. 72-74.
- 11.Gureev, A.A. Application of automobile gasolines. Chemistry, 1972. 368 p.
- 12.Kirichenko N.B. Automobile operational materials. Publishing center "Academy", 2003. 208 p.
- 13.Shkolnikova V.M. Fuels, lubricants, technical liquids. Assortment and application. Techinform, 1999. 596 p.
- 14.Gureev A.A., Azev V.S., Automobile gasolines. Properties and application. Textbook for universities. Moscow: Oil and Gas, 1996. 444 p.
- 15.GOST R 52946-2008 (EN ISO 5163:2005) "Petroleum products. Determination of detonation characteristics of motor and aviation fuels. Motor method".
- 16.GOST 8226-2015 Fuel for engines. Research method for determination of octane number.
- 17.Esbensen K. Multivariate Data Analysis, edited by K. Esbensen, O. Rodionova. AND PKHF RAN. 2005. 113 p.
- 18.Pomerantsev A. L. Confidence Intervals for Non-linear Regression Extrapolation. Chemom. Intell. Lab. Syst., **49**, 41-42 (2009)
19. O. Ye. Rodionova, K. H. Esbensen, and A.L. Pomerantsev, "Application of SIC (Simple Interval Calculation) for object status classification and outlier detection - comparison with PLS/PCR", J. Chemometrics, **18**, 402-413 ( 2004)
20. Khalafyan A.A. STATISTICA 6. Statistical analysis of data. 3rd ed. Textbook. LLC "Binom - Press", 2007. 512 p.

### References

- 1.A.V. Kravtsov, E.D. Ivanchina, Y.A. Smyshlyayeva, Izvestiya Tomskogo Polytechnicheskogo Universitet, **314**, 3, 81-85 (2009).
- 2.Smyshlyayeva Yu.A., Ivanchina E.D., Kravtsov A.V., Oil Refining and Petrochemicals. Scientific and Technical Achievements and Best Practices, Issue 9, 9-14 (2010).
- 3.Rudin M.G., Somov V.E., Fomin A.S. Pocket reference book of oil refiner. TsNIITEneftekhim, 2004. 336 p.
- 4.Stankevich, M.I., Stankevich, I.V., and Zefirov, N.S. Uspekhi chemii, **57**, 33, 337-366 (1988)
- 5.Smolenskiy E.A., Izv. AN. Ser. chem. 9, 1447-1453 (2006).

© Д. Р. Ахмеров – аспирант кафедры Инженерной компьютерной графики и автоматизированного проектирования (ИКГАП), Казанский национальный исследовательский технологический университет (КНИТУ), Казань, Россия, dr.danilsis@yandex.ru; А. Г. Мухаметзянова – докт. тех. наук, доцент, зав. кафедры ИКГАП, КНИТУ, asia@kstu.ru.

© D. R. Akhmerov – PhD-student of the department of Computer Graphics Engineering and Computer Design (CGECD), Kazan National Research Technological University (KNRTU), Kazan, Russia, dr.danilsis@yandex.ru; А. Г. Mukhametzyanova – Doctor of Sciences (Technical Sci.), Associate Professor, Head of the CGECD department, KNRTU, asia@kstu.ru.

Дата поступления рукописи в редакцию – 04.05.25.

Дата принятия рукописи в печать – 18.07.25.