

# 基于PW图的溢油鉴别分析方法研究\*

刘杨晓月<sup>1</sup>,季 民<sup>1</sup>,马俊瑞<sup>2</sup>

(1. 山东科技大学 测绘科学与工程学院, 山东 青岛 266590;

2. 山东省煤田地质局, 山东 泰安 271021)

**摘 要:** 鉴于油样组分风化百分比图(percentage weathering graph, PW图)人工绘制繁琐的问题, 在开发完成的油指纹综合数据库及油指纹分析鉴别系统的基础上, 运用.NET框架及Dundas Chart组件技术, 设计和开发了油样组分风化PW图绘制模块。该模块重点研究了不同指标分类下的组分存储、归一化计算和图形表达等关键技术, 实现了油样组分综合PW图、正构烷烃PW图的快速绘制与表达, 大大提高了分析人员的工作效率。

**关键词:** 油样组分; PW图; 溢油风化; 溢油鉴别

**中图分类号:** O657

**文献标识码:** A

随着海上石油勘探开发力度的不断加大和海洋运输的愈加繁忙, 海上溢油已经成为海洋环境保护日益瞩目的严峻问题。海上溢油不仅造成海洋环境的严重污染、破坏海洋生态平衡, 还间接危及了陆地生物和人类生命健康安全。石油主要成分为饱和烃和芳香烃, 各种烃类的结构和所占比例因石油产地不同而大相径庭。正是由于组分种类繁多且浓度差异性的存在, 使得不同地质构造条件下形成的油品化学特征明显不同, 导致光谱、色谱图千差万别, 其复杂性、多样性如同人类指纹一样具有唯一性, 因此把油品的光谱、色谱图称为“油指纹”。目前, 主流的油指纹鉴别指标主要包括正构烷烃、姥鲛烷、植烷、环芳烃、生物标志化合物萜烷和甾烷以及不可分离的复杂混合物(UCMs)等<sup>[1]</sup>。

近几年来连续进行了海上溢油油指纹综合数据建设和油指纹快速分析辅助鉴别及油品信息可视化管理系统的开发<sup>[2-3]</sup>, 并进行了一系列油指纹鉴别分析方法的研究, 原油之间、提炼油之间以及原油和提炼油之间各自化学成分的内在不同是化学指纹分析的基础<sup>[4]</sup>。由于溢油的风化程度在油品鉴别过程中起着至关重要的作用, 溢油中不同化合物组分抗风化程度也是不同<sup>[5-6]</sup>, 有些生物标志物如环烷烃的抗风化和抗降解能力强, 因此经常被用于溢油样品的鉴别中。但目前国内外在运用油样组分风化程度进行油品鉴别时, 所运用的油样组分风化百分比图(percentage weathering graph, PW图)均为人工绘制, 不仅耗时耗力, 且在一定程度上阻碍了油品鉴别效率与质量的提高。为此, 在开发完

\* 收稿日期: 2014-10-10

资助项目: 国家海洋局公益行业科研专项——海洋预报综合信息系统(MiFSIS)研究应用(201105017)

作者简介: 刘杨晓月(1992-), 女, 硕士研究生, 主要从事地理信息系统开发与应用方面研究. E-mail: 576167341@qq.com

(王佳实 编辑)

成油指纹快速分析辅助鉴别及油品信息可视化管理系统的基础上,运用 Dundas Chart 组件技术,进行不同鉴别指标条件及归一化鉴别组分标准条件下的 PW 图的可视化表达,为进一步溢油样品的快速鉴别分析提供支持。

## 1 油指纹鉴别系统整体架构及 PW 图鉴别原理

自 2011 年开始,山东科技大学在国家海洋局海洋公益性行业科研专项“海洋预报综合信息系统(MiFSIS)研究应用”子课题“海洋环境信息可视化平台探索性研究”整体开发构架过程中,在国家海洋局北海环境监测中心(简称北海监测中心)的指导下,先后在北海监测中心进行了油指纹综合数据库建设和油指纹快速分析辅助鉴别及油品信息可视化管理系统(简称油指纹鉴别系统)的开发。油指纹鉴别系统的成功开发对我国油指纹鉴别水平的提高和业务化运行起到了巨大的促进作用,该系统主要功能模块包括:油样基本信息入库与管理、油样谱图信息管理与表达、基础地理数据管理与表达、油指纹特征自动提取与积分运算、油品自动检索鉴别、谱图对比与可视化、鉴别报告生成等,具体的系统功能如图 1 所示。

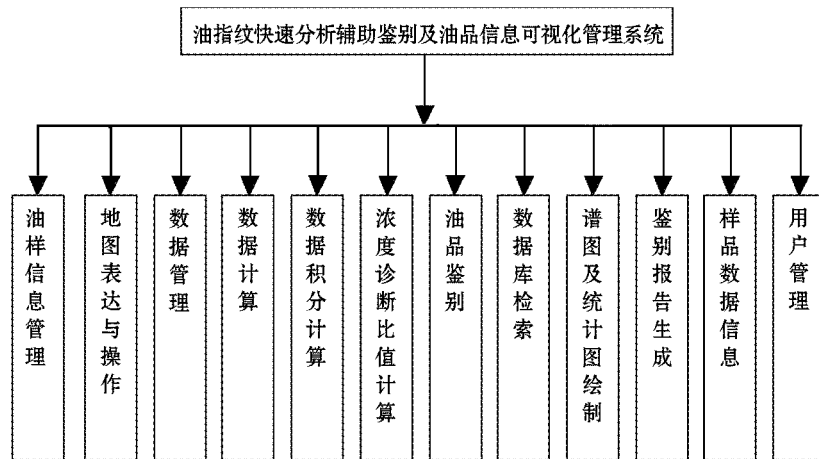


图 1 系统功能框架

Fig. 1 Block diagram of system functions

为进一步加强谱图与统计图绘制部分的功能,增加油样组分风化百分比图(PW 图)的绘制,由油样信息管理和数据库检索模块共同辅助完成 PW 图的绘制工作,油样信息管理模块执行各油样平行样的入库功能,数据库检索模块存储各组分的名称、保留时间、峰面积、数据文件类型等相关信息。

目前,溢油鉴别过程中采用的色谱质谱分析法和诊断比值法采样样本均为受风化程度影响较小的化合物种类,而 PW 图的绘制对溢油鉴别的意义非常重大,它可以使专业人员快速用肉眼分辨出检测油品有没有受到风化的影响或者受风化影响程度的高低。峰高和峰面积是溢油鉴别的重要指标,来自同一溢油样本的同一种峰的油样检测峰高和峰面积相似度较高。依据这一本质规律,在 PW 图的计算中,采用常用油品的峰面积进行归一化比值的计算来判断可疑溢油源和溢油样品是否为同一来源。

PW 图绘制模块包括综合 PW 图和正构烷烃 PW 图的绘制,备选指标分类中为峰面积和峰高两大类,此外还有一个指标选项,即归一化组分。其中该模块具体流程如图 2 所示。

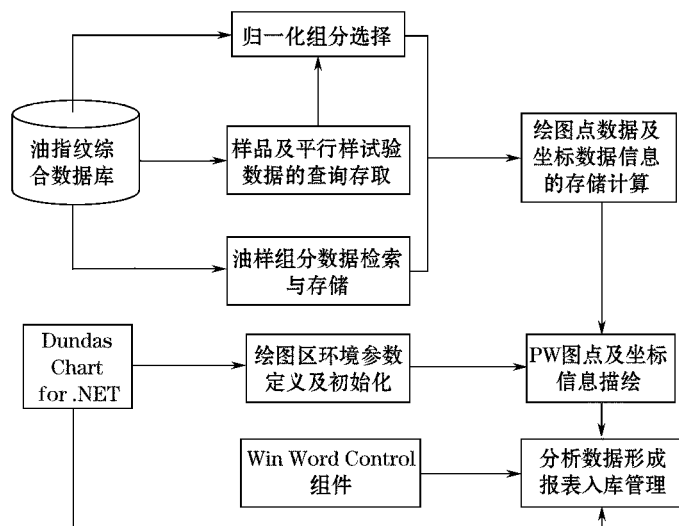


图 2 绘制模块整体流程

Fig. 2 Overall flow chart of the drawing of module

## 2 基于 PW 图的油指纹鉴别流程设计与关键技术研究

系统为基于组件化开发(CBD)的分布式体系结构<sup>[7]</sup>,采用 Oracle 数据库,通过 .NET 查询数据库数据,实现对组分数据的检索、读取、存储和计算等功能,根据 Dundas 绘制显示 PW 图相关信息。用户可将鼠标定位 PW 图点位置查看具体组分,同时可将当前风化图以及数据信息生成报表导出保存。

### 2.1 Dundas Chart

Dundas Chart 控件是控件行业著名的开发商之一——加拿大 Dundas Software 公司的产品<sup>[8]</sup>。Dundas Chart for .NET 提供了全面的图表功能、非常完整的图表架构示例以及高质量的在线技术支持。专为 Windows Forms 和 ASP .NET 开发。开发者能够容易地实现高级的图表。Dundas Chart for .NET 具有以下主要特征:1)Chart and Data Wizard;利用高级的 Chart and Data Wizard,可以便捷地创建用户所需要的图表并绑定用户数据,并且操作简单快速;2)智能图列:智能数据图列允许减少混乱的数据点显示,大量的设置项用以满足用户所需要的外观(需要 ASP .NET 企业版);3)高级的用户界面支持:新的用户界面选项提供许多高级的最终用户自定义设置;4)高级数据分析和处理功能:包括应用内建公式计算用户数据,过滤数据点,处理丢失或空的数据,分组数据点等等;5)True Date Time 支持:用 .NET Date Time 值存储、处理和显示数据和时间。

## 2.2 油样平行样与绘图指标类型确定存储

### 2.2.1 样品存储计算

在可疑溢油源和溢油样品的选择时,采取依据溢油样的溢油时间、溢油发生事件和油样平行样监督分类方式加以选择。利用 SQL 程序语句查询油指纹综合数据库通过树状形式显示加载,在平行样试验数据中平行样的个数自由设定,根据设定的个数,系统检索不同平行样下相对应的数据。

### 2.2.2 PW 图指标分类

模块根据需求将常用的预留指标设为 5 个,此为第一部分;若不满足需求则增加预留指标至 12 个,指标总数则为 17 个,此为第二部分;第三部分是归一化组分指标,通过数据库检索将多环芳烃及其同系物、甾萜类生物标志化合物和正构烷烃等所有组分全部列出,供用户自由选择。确定指标类型为峰值或峰面积之后,根据仪器类型和化合物种类将可疑溢油源和溢油样品的可计算组分全部检索列出。

因正构烷烃 PW 图组分仅与正构烷烃组分有关,特此修改数据库查询语句程序直接检索数据库数据组分中的正构烷烃组分。

### 2.3 油样组分存储及归一化计算

在油品鉴别油样数据积分计算中的特征峰识别采用峰高和峰面积的综合识别法,峰高确定和峰面积计算用到峰的最高点的经验值,即系统计算所需的保留时间。油品组分属性数据中的保留时间愈小,风化量愈大,风化程度就愈加严重。根据这一原理,通过内存表存储参与计算的组分不同属性的数据,运用.NET 和数据库查询检索数据库油指纹数据表将用于绘图计算的组分保留时间坐标数据以及相关的组分属性数据存储到可灵活用于程序运算的内存表中。表结构如表 1 所示。

表 1 组分数据存储结构表

Table 1 Table of data storage structure of the components

组分名称	保留时间	样品 A	样品 B	样品 A	样品 B	E/F/%
	(A 或 B)/s	峰面积/mAu*s	峰面积/mAu*s	归一化	归一化	
C17	23.00	36 000	32 000	3.6	4.0	90
C18	25.00	45 000	40 000	4.5	5.0	90
.....	.....	.....	.....	.....	.....	.....
C30 藿烷	45.00	10 000	8 000	1.0	1.0	100

注:假设 C30 藿烷为归一化组分;“.....”为 C19~C29 组合数据

在油品风化过程中,含碳量较高的样品组分是比较稳定的,受风化影响比较小。据此,确定归一化组分,通过可疑溢油源峰面积归一化结果与溢油样品峰面积归一化结果的比值计算出纵坐标数据。

## 3 溢油鉴别结果表达与报告生成

### 3.1 PW 图绘制显示

首先选取特征物质,得到目标仪器类型、化合物种类,从系统给出的油样共有特征物质中人工预选出用于分析绘图的特征物质,并添加归一化组分,程序设定默认添加一个

组分,用户操作界面如图 3、图 4 所示,籍由此确定参数完成绘制 PW 图的准备工作。参数选择结果呈现在 PW 图绘制界面的第一个标签页中,如图 5 所示。

结合 Dundas Chart 和数据库,基于 Dundas. Charting 中的 Series 类设定绘图点的形状、颜色、大小等属性信息。利用 Dundas. Charting. WinControl 中 DataPoint 类显示该点对应的组分名称。对于综合 PW 图,以可疑溢油源的保留时间作为横坐标,对于正构烷烃 PW 图,以可疑溢油源的组分名称作为横坐标,两者纵坐标均采用可疑溢油源峰面积归一化结果与溢油样品峰面积归一化结果的比值。通过 SetZXTSeries 方法设置坐标参数信息。效果图如图 6、图 7 所示。

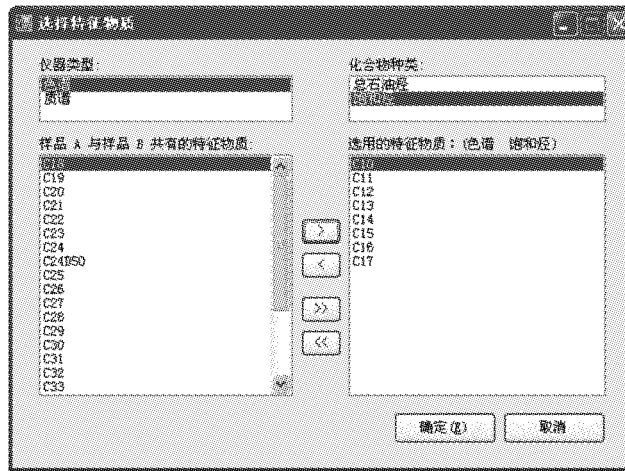


图 3 选取特征物质

Fig. 3 Selection of the character components



图 4 综合 PW 图归一化组分

Fig. 4 The components normalized with the integrated percentage weathering graph

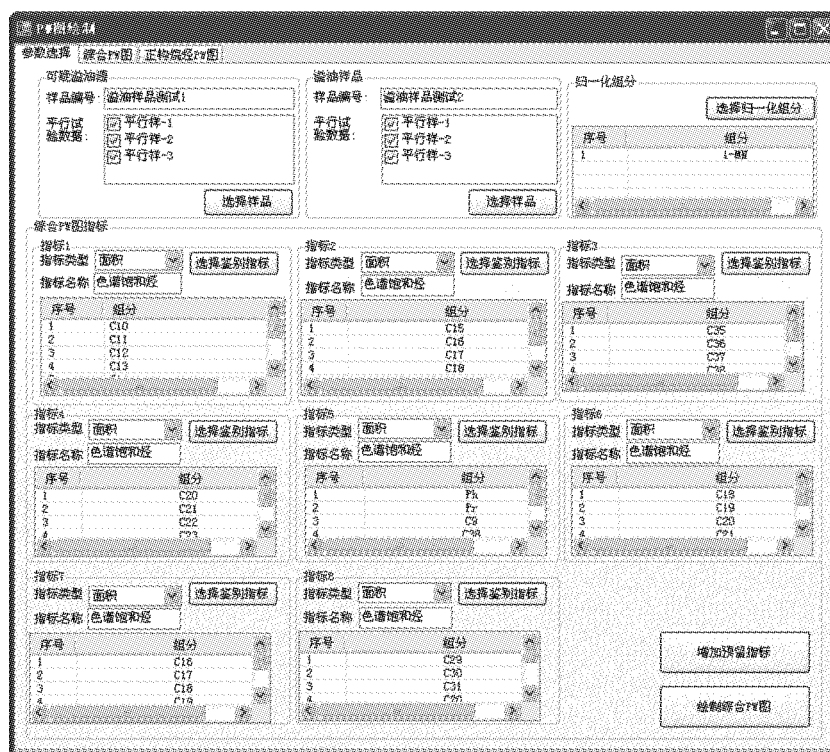


图5 PW图参数选择

Fig. 5 Selection of parameters for the integrated percentage weathering graph

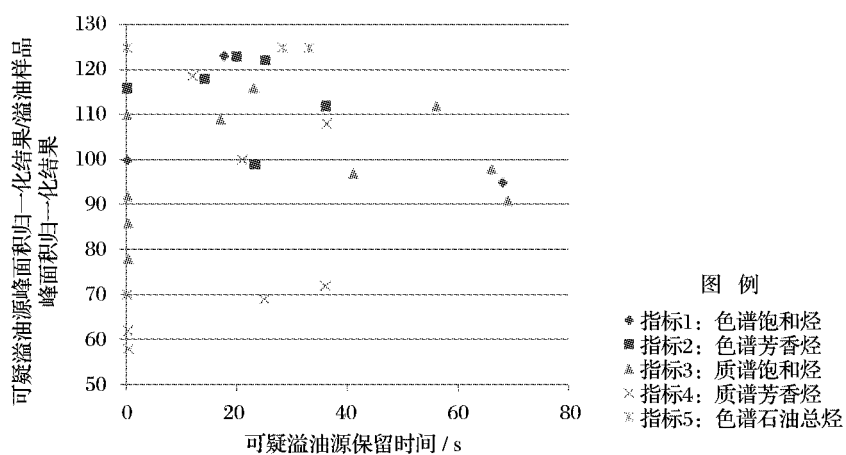


图6 综合PW效果图

Fig. 6 The effect drawing of the integrated percentage weathering graph

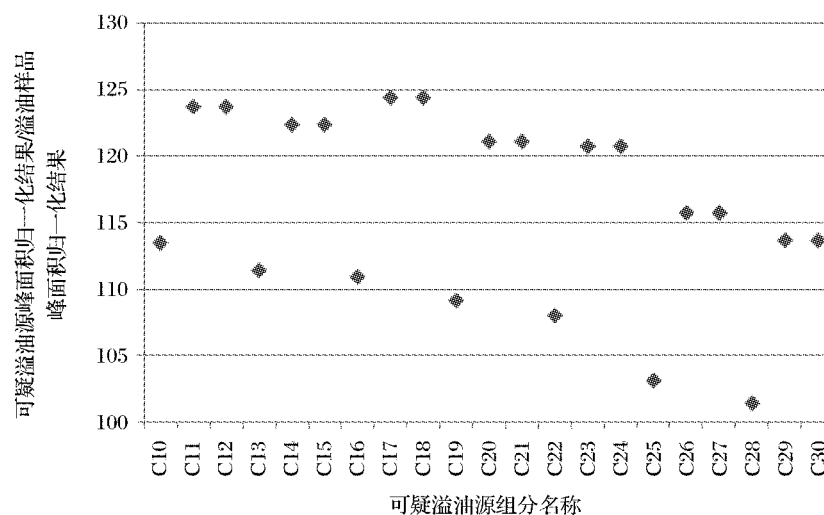


图 7 正构烷烃 PW 效果图

Fig. 7 The effect drawing of the integrated percentage weathering graph of normal paraffinic hydrocarbon

### 3.2 PW 图数据分析报告自动生成与管理技术

鉴于油指纹系统的报表输出功能,建立空表 ConstructDatatable 用来存储 PW 图的表头信息,然后通过转换表 TransformDatatable 将用于计算的 Datatable 中的数据赋值给已建立的 ConstructDatatable 表进行存储。运用 .NET 和 Dundas Charts 的 ChartImageFormat 枚举可以将各种图片格式的 PW 图保存输出,最后通过 WinControl 三方控件将当前 Chart 的画面和涉及计算后的坐标数据信息发到 Word,形成一览表,方便留档查看风化百分比。数据表部分图如表 2 所示。

表 2 正构烷烃 PW 数据表

Table 2 Data of the percentage weathering graph of normal paraffinic hydrocarbons

序号	正构烷烃组分	纵坐标值
1	C10	113.499 4
2	C11	123.725 7
3	C12	123.725 7
4	C13	111.432 5
5	C14	122.379 8
6	C15	122.379 8
7	C16	110.933 8
8	C17	124.410 7
9	C18	124.410 7
10	C19	109.174 1
11	C20	121.116 3
12	C21	121.116 3

## 4 结 论

本文介绍了在.NET 框架环境下,利用数据库与 Dundas Chart 组件技术,在油指纹快速分析辅助鉴别及油品信息可视化管理系统和油指纹综合数据库的基础上研究开发的油样组分风化百分比图绘制模块。这为科研人员和试验分析人员繁重的油品鉴别任务提供了有力的技术支持,在大幅提高任务完成质量的基础上有效缩减了任务完成时间,成功克服了人工绘制繁琐的难题,大大提高了溢油鉴别工作效率。

### 参考文献:

- [1] 程海鸥. 海面溢油风化与鉴定技术研究[D]. 青岛:中国海洋大学,2009.
- [2] 孙培艳,王鑫平,周青,等. 油指纹快速辅助分析及油品可视化管理系统[J]. 海洋环境科学,2011, 31(5):729-732.
- [3] 王春晓. 基于 GIS 的油指纹快速辅助分析与可视化鉴别系统设计[D]. 青岛:山东科技大学,2011.
- [4] 郝友亮. 海洋溢油化学指纹分析鉴定方法研究[D]. 青岛:中国海洋大学,2011.
- [5] 程海鸥,马启敏. 船舶燃料油中主要多环芳烃的短期风化特性[J]. 环境化学,2009,28(5):661-665.
- [6] 褚家成. 海上溢油的风化特性和对污染油种的鉴别[J]. 环境化学,1982,1(4):297-303.
- [7] 王树德,柴寿升,刘修军. 新一代地理信息系统(GIS)发展趋势浅议[J]. 海岸工程,2002,21(2):66-71.
- [8] 朱群志,王渡,任建兴,等. Dundas Chart 控件在电厂管理信息系统中的应用[J]. 上海电力学院通报,2008,24(8):43-46.

## Study on the Analysis Method of Oil Spill Identification by Using Percentage Weathering Graph

LIU Yang-xiaoyue<sup>1</sup>, JI Min<sup>1</sup>, MA Jun-rui<sup>2</sup>

(1. Geomatics College of Shandong University of Science and Technology, Qingdao 266590, China;

2. Shandong Province Bureau of Coal Geology, Taian 271021, China)

**Abstract:** Because it is a fussy work to draw artificially a percentage weathering graph of oil sample components, a new module for drawing automatically the percentage weathering graph is developed based on the oil fingerprint integrated database and the oil fingerprint analysis and identification system, which were developed by us in recent years, and by using .NET framework and Dundas Chart techniques. This module emphasizes the key techniques such as component storage, normalization computation and graphic expressions under the conditions of different index classifications and realizes the fast drawing and expressing of the percentage weathering graphs of the oil components and the normal paraffinic hydrocarbons, hence improving greatly the efficiency of analyzers.

**Key words:** oil component; percentage weathering graph; oil spill weathering; oil spill identification