

Семёнов Иван Александрович,

к.т.н., доцент, Ангарский государственный технический университет,

e-mail: semenovia.chem@yandex.ru

Петров Александр Васильевич,

магистрант кафедры ХТТ, Ангарский государственный технический университет,

e-mail: thehereticanthen@mail.ru

**ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ
УГЛЕВОДОРОДНЫХ СМЕСЕЙ С ПОМОЩЬЮ ИСКУССТВЕННЫХ
НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ**

Semenov I.A., Petrov A.V.

**PREDICTION OF THE PHYSICO-CHEMICAL PROPERTIES OF HYDROCARBON
MIXTURES BY NEURAL NETWORKS**

Аннотация. Рассмотрены основные классические подходы к расчету физико-химических свойств отдельных углеводородов и их многокомпонентных смесей, а также рассмотрена возможность их оценки на основе искусственных нейронных сетей. Получена обучающая выборка, позволяющая оценивать температуру кипения, среднюю молекулярную массу и плотность смесей углеводородов на основе ограниченного набора исходных данных: массовых концентраций ее компонентов и их нормальных температур кипения.

Ключевые слова: физико-химические свойства, углеводороды, искусственная нейронная сеть.

Abstract. The main classical approaches to the calculation of the physicochemical properties of individual hydrocarbons and their multicomponent mixtures are considered, as well as the possibility of their evaluation based on artificial neural networks. The obtained training set allows to estimate the boiling point, average molecular weight and density of hydrocarbon mixtures based on a limited set of initial data: mass concentrations of its components and their normal boiling points.

Keywords: physical and chemical properties, hydrocarbons, neural network.

Расчет различных физико-химических свойств нефтяных фракций и отдельных углеводородов, таких как плотность, вязкость, температуры вспышки и воспламенения и т.п., необходимы для моделирования и оптимизации процессов их добычи, хранения, транспортировки и переработки в другие продукты.

На текущий момент времени существует огромное количество эмпирических, полуэмпирических и теоретических подходов к оценке различных физико-химических свойств отдельных углеводородов, их смесей и нефтяных фракций. Эти классические методы расчета свойств нефтяных фракций и индивидуальных углеводородов имеют много достоинств: простота, точность, теоретическая обоснованность и т.п. Однако одним из основных недостатков является необходимость большого количества исходных данных для их расчета. Эти методы обычно требуют информации о структуре молекул индивидуальных веществ и отдельных компонентов смесей, знания важных термодинамических констант для них. В случае расчета смесей требуется также точные знания о составе и концентрации всех входящих в них веществ, а в случае нефтяных фракций требуются данные о фракционном и групповом составе [1].

К сожалению, часто на практике подобная информация не всегда может быть известна или доступна в требуемом объеме. Подобная нехватка исходных данных может привести к значительным ограничениям точности и применимости классических методов, особенно при работе со сложными или плохо охарактеризованными смесями, с которыми разработчики сталкиваются в нефтяной промышленности. В этих случаях результаты классических методов могут быть неточными или ненадежными, и могут потребоваться альтернативные подходы для обеспечения более точных прогнозов.

Использование искусственных нейронных сетей может помочь преодолеть некоторые из этих ограничений, поскольку нейронные сети способны изучать сложные взаимодействия между различными параметрами из ограниченных или неполных данных, а также способны оценить свойства даже при наличии ограниченной информации. Это делает их ценным инструментом для расчета свойств отдельных углеводородов и их смесей.

Одной из основных проблем при создании искусственных нейронных сетей является создание подходящей обучающей выборки. Обучающая выборка – это набор данных, которые нейронная сеть использует для изучения взаимосвязи между входными и выходными параметрами. Объем и качество такой выборки имеет решающее значение для точности прогнозов, сделанных нейронной сетью. Качество и репрезентативность обучающей выборки напрямую влияют на производительность и точность нейронной сети, и формирование подходящей обучающей выборки требует тщательного рассмотрения.

В рамках проведенной работы нами была получена обучающая выборка, представляющая собой набор входных и выходных данных. Входными данными являлись нормальные температуры кипения индивидуальных углеводородов от C_4 до C_{21} , а также их массовые концентрации в составе различных многочисленных модельных смесей. Выходные данные при этом состояли из температур кипения модельных смесей, их средних молекулярных масс, а также данных по их плотностям при различных температурах. Значения выходных параметров при этом изначально были рассчитаны на основе известных классических методов расчета свойств нефтяных фракций и отдельных углеводородов [1].

Обучение искусственной нейронной сети на базе созданной выборки позволит использовать ее в качестве замены классическим методам расчета молекулярной массы, температуры кипения и плотности сложных углеводородных смесей без знания о молекулярной структуре ее отдельных компонентов и других важных термодинамических параметрах.

ЛИТЕРАТУРА

1. Poling, B.E., Prausnitz, J.M., O'Connell J.P. The Properties of Gas and Liquids. 5th ed. – NY: McGraw-Hill, 2003. – 803 p.