

**Семёнов Иван Александрович,**

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

e-mail: semenovia.chem@yandex.ru

**Петров Александр Васильевич,**

магистрант каф. ХТТ, Ангарский государственный технический университет,

e-mail: thehereticanthe@mail.ru

## **РАСЧЕТ СВОЙСТВ СМЕСЕЙ УГЛЕВОДОРОДОВ С ПОМОЩЬЮ ИСКУССТВЕННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ**

**Semenov I.A., Petrov A.V.**

## **CALCULATION OF THE PROPERTIES OF HYDROCARBON MIXTURES USING ARTIFICIAL NEURAL NETWORKS**

**Аннотация.** В данной статье рассматривается вопрос замены классических подходов расчета физико-химических свойств углеводородов и их смесей искусственной нейронной сетью. В рамках работы была создан набор данных, представляющая собой более 18000 вариантов модельных смесей. Для каждой смеси рассчитывались температуры кипения, молекулярные массы и плотности. На базе полученной обучающей выборки была создана нейронная сеть, позволяющая рассчитывать приведенные свойства 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.** This article discusses replacing the classical approaches to calculating the properties of hydrocarbons and their mixtures with an artificial neural network. In the work, a data sample was created, representing more than 18,000 variants of model mixtures. Boiling points, molecular weights, and densities were calculated for each mixture. On the basis of the received training sample, a neural network was created, which allows calculating the properties 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.

В нефтегазовой промышленности точное определение физических и химических свойств имеет важное значение для обеспечения эффективных и рентабельных производственных процессов. Эти свойства включают плотность, вязкость, фракционный состав, температуры вспышки и воспламенения и множество других ключевых показателей. Точное прогнозирование этих свойств необходимо для характеристики качества перерабатываемого сырья, его состава, и качества получаемых при переработке продуктов. Они необходимы для проектирования и оптимизации производственных процессов. Поэтому неточности в оценках физико-химических свойств может привести к некорректности проведенных на их основе технологических расчетов [1].

Классические методы определения физико-химических свойств нефтяных фракций и индивидуальных углеводородов широко используются в промышленности на протяжении десятилетий. Эти методы основаны на эмпирических, полуэмпирических и теоретических подходах, которые можно использовать для прогнозирования широкого спектра свойств, включая молекулярную

массу, температуру кипения, вязкость, плотность и т.п. Хотя классические методы обычно считаются точными, они имеют определенные ограничения, в том числе необходимость иметь большой набор исходных данных для расчета.

Искусственные нейронные сети становятся перспективной альтернативой классическим методам прогнозирования физико-химических свойств нефтяных фракций и отдельных углеводородов. Нейронные сети – это вычислительные модели, которые могут изучать сложные взаимосвязи между входными и выходными параметрами с помощью алгоритмов, которые позволяют им делать прогнозы даже с неполными или ограниченными данными. Это делает нейронные сети привлекательным инструментом для нефтегазовой отрасли, поскольку они могут помочь преодолеть ограничения классических методов расчета.

Одним из ключевых преимуществ искусственных нейронных сетей является их способность учиться на предоставленных им данных. В случае прогнозирования свойств смесей углеводородов нейронные сети могут обучаться на наборе данных, включающем информацию о составе смеси, ее фракционном и групповом составе и других соответствующих параметрах. Анализируя эти данные, нейронная сеть может выявить сложные взаимосвязи между различными параметрами, которые затем можно использовать для прогнозирования свойств других смесей с похожими составами.

Структурной единицей нейронной сети является искусственный нейрон. Каждый нейрон при этом представляет собой расчетную схему, представленную на рисунке 1.

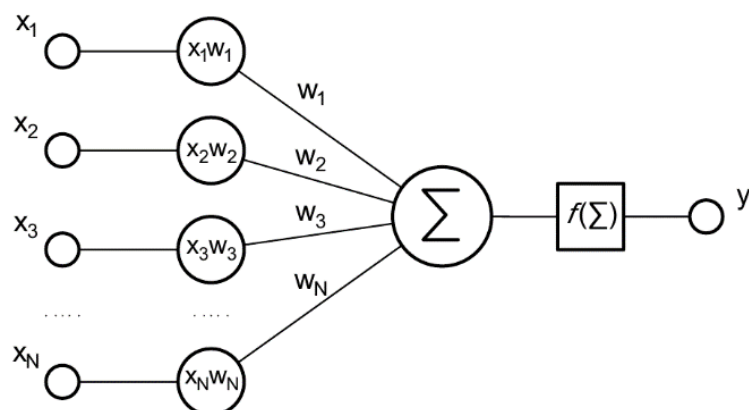


Рисунок 1 – Расчетная схема одиночного нейрона.

Процесс вычисления единичного искусственного нейрона выглядит следующим образом: все входные значения  $x$  умножаются каждый на свой соответствующий весовой коэффициент  $w$  и суммируются друг с другом. Полученная сумма используется в качестве аргумента функции активации  $f(\Sigma)$ , по которой в конечном итоге вычисляется выходное значение нейрона  $y$ . Обучение нейронов заключается в определении таких значений весовых коэффициентов  $w$ , при которых выходные значения нейронов будут соответствовать целевым значениям обучающей выборки с определенной степенью точности.

Создавать, обучать и использовать нейронные сети можно на базе многих языков программирования. Python в настоящий момент времени широко используется для многих проектов машинного обучения и искусственного интеллекта. Основным преимуществом использования Python для создания и использования нейронных сетей является простота использования и наличие мощных библиотек и фреймворков для машинного обучения. Эти библиотеки и фреймворки могут помочь упростить процесс обучения и использования нейронных сетей, а также могут предоставить дополнительные функции, такие как предварительная обработка данных и их оптимизация.

В рамках проведенной работы мы сформировали обучающую выборку для искусственной нейронной сети, которая включала в себя два набора данных: входные и выходные. Входные данные состояли из нормальных температур кипения ( $T_K$ ) индивидуальных углеводородов в диапазоне от  $C_4$  до  $C_{21}$ , а также их массовых концентраций ( $x$ ) в различных модельных смесях. Количество компонентов в каждой такой смеси не превышало 6-ти углеводородов. Выходные данные включали температуры кипения модельных смесей ( $T_{\text{кип}}$ ), их средние молекулярные массы ( $M$ ) и плотности при различных температурах ( $d$ ). Выходные параметры при этом были рассчитаны с использованием классических методов определения свойств индивидуальных углеводородов. Размер полученной обучающей выборки составил более 18 000 вариантов смесей.

Для создания нейронной сети нами был использован фреймворк Keras. Данный фреймворк представляет собой высокоуровневую библиотеку глубокого обучения, построенную на основе библиотеки TensorFlow.

На этапе подготовки исходных данных вся обучающая выборка преобразовывалась в массив формата математической библиотеки NumPy. Далее полученный массив данных нормализовался. Нормализация подразумевала приведение всех числовых данных массива к диапазону значений от -1 до 1 путем их масштабирования. Такая предварительная обработка данных позволяла избегать «насыщения» функции активации в процессе обучения нейронной сети. Некоторые функции активации могут «насыщаться», когда входные значения имеют слишком большие абсолютные значения. Это может привести к медленной сходимости и снижению производительности. Кроме того, приведение всех входных параметров к единому масштабу чисел позволяет выровнять значимость всех факторов для процесса обучения.

Формирование структуры нейронной сети подразумевало определение количества слоев нейронов, количества нейронов в каждом слое и их функций активации. На рисунке 2 представлена схема конечного варианта нейронной сети для расчета свойств смеси углеводородов. Данная структура была подобрана путем перебора различных вариантов нейронных сетей и выборе из них одного, который описывал математическую связь между входными и выходными данными обучающей выборки наилучшим образом.

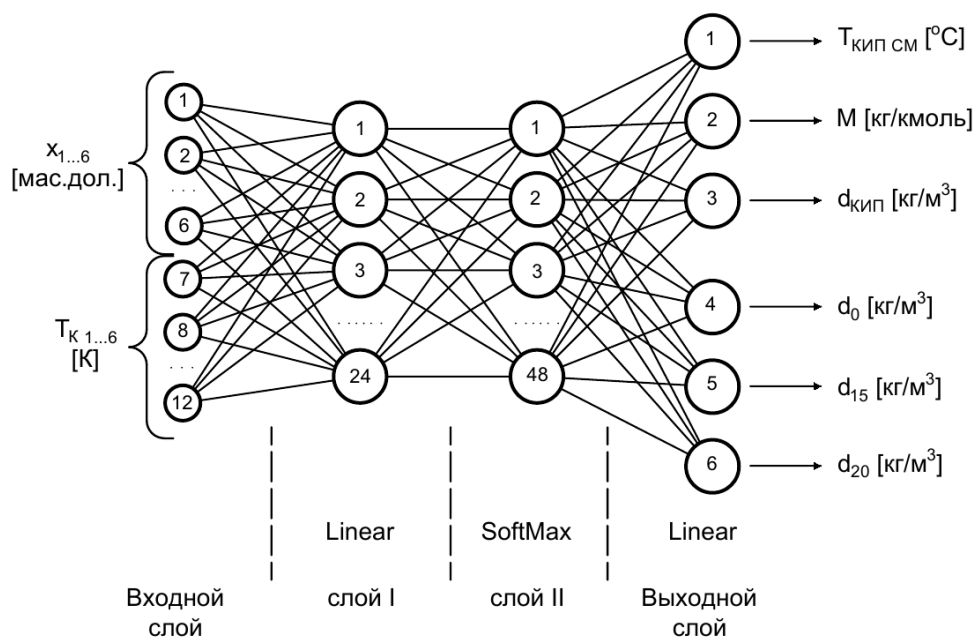


Рисунок 2 – Структура нейронной сети

В качестве функции активации для нейронов скрытого слоя I и выходного слоя использовалась простейшая функция Linear вида:

$$f(x) = x$$

Нейроны скрытого слоя II рассчитывались по логистической функции активации SoftMax вида:

$$f(x_i) = \frac{\exp(x_i)}{\sum_j \exp(x_j)}$$

В качестве критерия оптимальности в процессе обучения была использована функция среднеквадратичной ошибки (*MSE*), которая рассчитывалась для *N*-точек выходных данных обучающей выборки  $y_i$  и расчетных выходных значений нейронной сети  $\hat{y}_i$ .

$$MSE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2$$

Полученная после обучения нейронная сеть позволяет 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 параметров.

## ЛИТЕРАТУРА

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