

УДК 004.032.26
DOI 10.17513/snt.40437

РАЗРАБОТКА КОМПЛЕКСА НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ДЛЯ РАСЧЕТА ВЯЗКОСТИ ХИМИЧЕСКОЙ СМЕСИ НА ОСНОВЕ ДЕКОМПОЗИЦИИ ЗАДАЧИ

¹Лаптева Т.В., ¹Лаптев С.А., ²Бронская В.В.

¹ФБГОУ ВО «Казанский государственный энергетический университет», Казань;

²ФБГОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет»,
Казань, e-mail: dweronika@mail.ru

Представленная разработка способствует внедрению цифровых технологий в описание процессов нефтехимических предприятий, отвечает потребностям промышленности в быстрых и точных расчетах, сокращает зависимость от дорогостоящих экспериментов и зарубежного программного обеспечения, что делает его актуальным как для науки, так и для реального сектора экономики. Целью исследования является способ расчета вязкости широкой фракции углеводородов с использованием нейронных сетей для повышения точности и эффективности прогнозирования по сравнению с традиционными методами и реализация в виде специализированного программного комплекса. Для оптимизации процесса обучения и ускорения вычислений исходная задача была разделена на несколько более простых подзадач с уменьшенной размерностью параметров, предложенная декомпозиция значительно сократила объем вычислений, что способствует снижению параметричности построенного многослойного полносвязного персептрона и понижению проблематичности процедуры обучения моделей. Для автоматизации сбора информации для обучения многослойного полносвязного персептрона был разработан вспомогательный программный комплекс, формирующий требуемые наборы данных в Unisim. Все построенные нейронные сети обучались на выборках, которые разбивались на обучающее, валидационное и тестовое подмножества по 70, 15 и 15 % от исходного набора соответственно. Потери при обучении не превысили 10^{-6} при отсутствии переобучения. Работоспособность полученного многослойного полносвязного персептрона дополнительно проверили на производственных данных, не использовавшихся при обучении. Реализация метода осуществлена в виде оригинального специализированного программного комплекса, в котором используется согласованная работа нескольких обученных нейронных сетей для точного расчета вязкости углеводородных смесей. Разработанный программный комплекс доказал свою эффективность и надежность, представляя собой мощный инструмент для расчета вязкости широкой фракции углеводородов при моделировании процессов нефтехимии.

Ключевые слова: математическое моделирование, машинное обучение, нефтехимия, нейронные сети

DEVELOPMENT OF A SET OF NEURAL NETWORKS FOR CALCULATION OF CHEMICAL MIXTURE VISCOSITY ON THE BASIS OF PROBLEM DECOMPOSITION

¹Lapteva T.V., ¹Laptev S.A., ²Bronskaya V.V.

¹Kazan State Power Engineering University, Kazan;

²Kazan National Research Technological University, Kazan,
e-mail: dweronika@mail.ru

The presented development promotes the introduction of digital technologies in the description of processes of petrochemical enterprises, meets the needs of industry for fast and accurate calculations, reduces dependence on expensive experiments and foreign software, which makes it relevant for both science and the real sector of the economy. The aim of the study is a method for calculating the viscosity of a wide fraction of hydrocarbons using neural networks to improve the accuracy and efficiency of forecasting compared to traditional methods and implementation in the form of a specialized software package. To optimize the learning process and speed up calculations, the original problem was divided into several simpler subtasks with reduced parameter dimensionality, the proposed decomposition significantly reduced the amount of calculations, which helps to reduce the parametricity of the constructed multilayer fully connected perceptron and reduce the problematic nature of the model training procedure. To automate the collection of information for training samples, an auxiliary software package was developed that generates the required data sets in Unisim. All constructed neural networks were trained on samples that were divided into training, validation and test subsets of 70%, 15% and 15% of the original set, respectively. Losses during training did not exceed 10^{-6} in the absence of overtraining. The performance of the resulting multilayer fully connected perceptron was additionally tested on production data that were not used in training. The method was implemented in the form of an original specialized software package that uses the coordinated operation of several trained neural networks to accurately calculate the viscosity of hydrocarbon mixtures. The developed software package has proven its efficiency and reliability, representing a powerful tool for calculating the viscosity of a wide fraction of hydrocarbons in the modeling of petrochemical processes.

Keywords: mathematical modeling, machine learning, petrochemicals, neural networks

Введение

Химико-технологические процессы представляют собой сложные иерархические системы, где каждый уровень требует описания через набор нелинейных уравнений разной степени сложности. В результате их объединения формируется общая система, включающая трансцендентные зависимости и алгебраические уравнения. Даже с использованием современных вычислительных методов решение таких систем остается крайне затратным по времени и вычислительным ресурсам. Это существенно ограничивает их применение в системах автоматизированного управления технологическими процессами (АСУ ТП), где ключевым требованием является высокая скорость обработки данных. Значительный вклад во время получения решения вносят вычисления характеристик смесей – доли газовой фазы, вязкости, рассчитываемых на нижних уровнях.

Моделирование химико-технологических систем и процессов (ХПС) математическими методами составляет методологическую основу для технологических расчетов при проектировании, диагностике рабочих параметров эксплуатируемых химических производств и оптимизации их управленческих алгоритмов [1, с. 1–17]. Современные математические модели аппаратов ХПС представляют собой систему нелинейных уравнений, включающую блоки описания материального баланса, массообмена, теплового баланса и парогазодинамического равновесия [2].

Уравнения взаимосвязаны между собой параметрами, характеризующими в том числе транспортные свойства химической смеси внутри аппарата. К их числу относятся доля газовой фазы химической смеси, вязкость, плотность и др., для расчета которых также используются нелинейные зависимости [1, с. 35–44]. Время получения решения при сохранении его точности становится определяющим при решении множества задач моделирования ХПС. Расчет транспортных свойств химических смесей, в том числе вязкости, находясь на нижнем уровне модели ХПС, определяет качество и скорость получения общего результата.

Машинное обучение сегодня предлагает эффективные инструменты для быстрого прогнозирования. Многообразие алгоритмов позволяет обрабатывать сложные данные любой структуры, не требуя при этом точного математического описания лежащих в основе процессов, в отличие от классических методов моделирования.

Проведенный обзор научной литературы по машинному обучению позволил систематизировать основные подходы к обучению моделей [3]: обучение без учителя (unsupervised learning) [4], обучение с учителем (supervised learning) [5], обучение с подкреплением, ансамблевые методы, полуконтролируемое обучение [6], многозадачное обучение [7], гибридные подходы [8]. Неконтролируемое обучение (unsupervised learning) [4] характеризуется отсутствием предварительных сведений о категориальной принадлежности объектов в обучающей выборке. В данном подходе алгоритмы автоматически выделяют кластеры объектов, основываясь на метриках сходства, которые определяются через расстояние между векторами признаков в многомерном пространстве. Особый интерес представляют модели, способные выявлять дополнительные свойства кластеров, такие как алгоритм DBSCAN [3]. Этот метод кластеризации по плотности группирует близко расположенные точки данных (имеющие множество соседей в заданном радиусе), одновременно идентифицируя аномалии в разреженных областях признакового пространства. В отличие от предыдущего подхода, контролируемое обучение (supervised learning) требует наличия размеченного датасета, где каждый экземпляр снабжен соответствующей классовой меткой. Данная парадигма особенно востребована при обучении искусственных нейронных сетей, хотя следует отметить, что нейросетевые архитектуры могут обучаться и по другим схемам [5].

Выделяются два подхода к построению и обучению ММО – это гибридное обучение и ансамблевое обучение [8]. Современные исследования подтверждают, что оба подхода к обучению основаны на комбинации различных модельных архитектур. В случае ансамблевых методов возможно использование однотипных алгоритмов, что наглядно демонстрирует алгоритм «случайный лес» [9]. Однако данное условие не является строго обязательным. В отличие от этого, гибридные подходы принципиально требуют сочетания разнородных моделей, включая в некоторых случаях интеграцию алгоритмов машинного обучения с физически обоснованными моделями [8].

Современный инструментарий машинного обучения включает множество разнородных подходов, основанных на различных принципах обучения. Тем не менее применительно к прогнозированию транспортных характеристик полидисперсных углеводородных систем эффективность большинства методов машинного обучения оказывается ограниченной как по числу

учитываемых веществ, так и с учетом только одной фазы, например [10].

В современных программных средствах компьютерного моделирования ХПС часто используются интеллектуальные средства. Авторы обзоров [11, 12] показали, что количество исследований в области химии, использующих средства ИИ, увеличилось с нескольких тысяч в 2010 г. до более 60000 в 2021 г. Согласно исследованию J.B. Zachary [13], наибольший интерес в публикациях, посвященных применению искусственного интеллекта в химии, вызывают нейронные сети, теория функционала плотности и метод «случайного леса».

В современных программах моделирования ХПС для расчета вязкости используются различные модели, выбор которых зависит от состава смеси, состояния смеси. Для расчета вязкости можно использовать одну из моделей:

$$\mu = \frac{(\mu\xi)^0 + \varpi_m (\mu\xi)^1}{\xi}, \quad (1)$$

$$\xi = \frac{T_{cm}^{1/6}}{m_w^{0.5} P_{cm}^{2/3}}, \quad (2)$$

$$(\mu\xi)^0 = 0.015174 - 0.02135T_{cm} + 0.0075T_{cm}^2,$$

$$(\mu\xi)^1 = 0.042552 - 0.07674T_{cm} + 0.0340T_{cm}^2,$$

где T_{cm}, P_{cm} – критические температура и давление, m_w – молекулярный вес, ϖ_m – фактор ацентричности, $\omega_m = \sum_j y_j \omega_j$, y_j – мольная

доля вещества в смеси.

Значения критических температуры и давления смеси рассчитываются по степенным зависимостям с дробным показателем степени, например, для модели Соаве – Редлиха – Квонга

$$T_{cm} = \left\{ \frac{\sum_j y_j (T_{cj}^{5/2} / P_{cj})^{0.5}}{\sum_j y_j (T_{cj} / P_{cj})} \right\}^{2/3},$$

$$P_{cm} = \frac{T_{cm}}{\sum_j y_j (T_{cj} / P_{cj})}. \quad (3)$$

Расчет сложных аппаратов в ХПС проводится итерационно, и на каждой итерации рассчитываются значения транспортных свойств, в том числе и вязкости. Заметим, что модели расчета вязкости смеси рассчитывались на основе мольной доли вещества в смеси, также расчет проводился для обеих фаз смеси. Для получения информации

о долях чистых веществ в жидкой и газовой фазах необходимо рассчитывать долю паровой фазы на основе модели расчета парожидкостного равновесия. Здесь различные математические модели – модели Соаве – Редлиха – Квонга, Пенга – Робинсона, модель неслучайных двух жидкостей (NRTL), универсальная квазихимическая модель (UNIQUAC) [1]. Модели расчета значения доли газовой фазы представляют собой совокупность нелинейных уравнений. В итоге для расчета значения вязкости необходимо решить систему нелинейных уравнений, включающих степенные зависимости с дробными показателями степеней и логарифмы [1]. Полученная задача является весьма затратной вычислительно. Очевидно, использование средств быстрого и достаточно точного расчета значения вязкости снизит временные затраты на расчет всего ХПС.

Проведенный анализ научных работ выявил эффективность применения многослойных полносвязных персептронов (МПП) для прогнозирования вязкости и фракционного состава. Следует отметить, что при определенных термобарических условиях и составе смеси может наблюдаться полная гомогенизация системы в газообразном или жидком состоянии, что делает излишним расчет реологических параметров для отсутствующей фазы.

Разработка и внедрение высокоточного метода расчета вязкости широких фракций углеводородов, основанного на применении искусственных нейронных сетей. Данный метод призван преодолеть ограничения существующих эмпирических корреляций и групповых методов расчета, обеспечивая существенное повышение точности прогнозирования и эффективности процесса за счет автоматизированной обработки данных. Конечным результатом работы станет реализация метода в виде специализированного, удобного и надежного программного комплекса, предназначенного для использования в научно-исследовательской и инженерной практике нефтегазовой и нефтехимической отраслей.

Целью исследования является способ расчета вязкости широкой фракции углеводородов с использованием нейронных сетей для повышения точности и эффективности прогнозирования по сравнению с традиционными методами и реализация в виде специализированного программного комплекса.

Материалы и методы исследования

Расчеты и анализ данных проводились с использованием специализированного про-

граммного обеспечения. Для разработки алгоритмов и визуализации данных применялся пакет MATLAB. Инженерное проектирование, симуляция технологических процессов выполнялись в среде UNISIM.

В ходе исследования была осуществлена декомпозиция исходной задачи на две последовательные стадии. Первоначально разработан классификационный алгоритм для определения фазового состояния системы, где каждому образцу присваивался один из трех возможных классов: 1 – газовая фаза, 2 – жидкая фаза, 3 – смешанная фаза.

Второй этап – определение вязкостных свойств смеси, где методика расчета дифференцировалась в зависимости от установленного класса фазового состояния системы. Таким образом была построена МПП для реализации первой стадии, MLF_S1, которая будет определять класс принадлежности примера.

Для реализации второй стадии этапа построены три МПП расчета вязкости смеси из каждого класса, MLF_V для первого класса, MLF_L для второго и MLF_M для третьего класса. Предложенная декомпозиция значительно сократила объем вычислений, что способствует снижению параметричности МПП и понижению проблематичности процедуры обучения моделей.

Для обучения МПП выбраны признаки, необходимые для обеспечения полноты представления объектов, а затем построен обучающий набор данных. Реологические характеристики газовых систем демонстрируют выраженную зависимость от давления, тогда как вязкость жидкой фазы пре-

имущественно определяется температурными параметрами.

Таким образом, корректное моделирование реологического поведения требует учета ключевых термодинамических переменных: давления как доминантного фактора для газовой фазы и температуры как основного параметра для жидкой фазы. Объектом исследования служит десятикомпонентная система, включающая следующие соединения: азот, диоксид углерода, сероводород, метан, этан, пропан, изобутан, н-бутан, изопентан и н-пентан. В сочетании с термодинамическими параметрами (давление и температура) это формирует 12-мерное пространство признаков.

Процесс обучения требует формирования четырех независимых обучающих выборок: первая предназначена для тренировки классификатора фазовых состояний, тогда как три остальных используются для построения специализированных регрессионных моделей прогнозирования вязкости, соответствующих каждому из возможных фазовых состояний системы.

Доступные экспериментальные данные о многокомпонентных смесях характеризуются ограниченным объемом выборки и неоднородностью признакового пространства. В связи с этим для генерации данных была использована среда Unisim, где реализована компьютерная модель вспомогательного химико-технологического процесса, позволяющая рассчитывать фазовый состав (долю паровой фазы) и реологические характеристики (вязкость) системы при вариации параметров состава, давления и температуры (рис. 1).

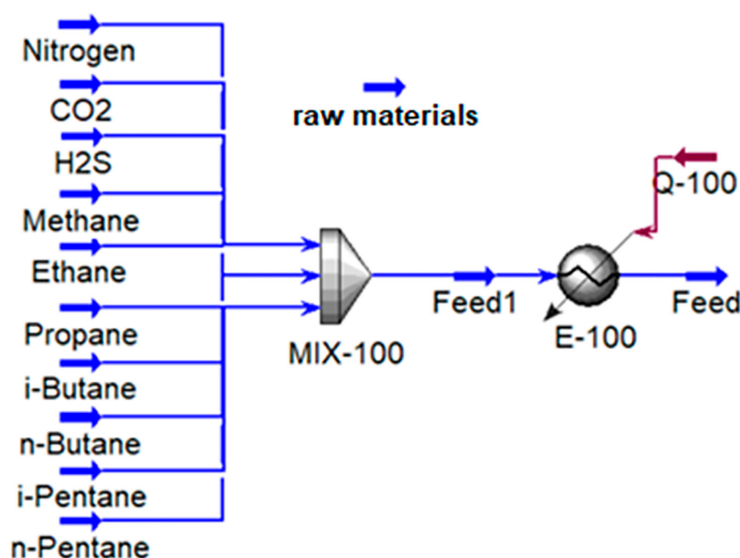


Рис. 1. Вспомогательный вычислительный блок Unisim
Источник: составлено авторами

Результаты исследования и их обсуждение

С целью автоматизации процесса формирования данных был создан специализированный программный комплекс DATABANK (рис. 2), генерирующий четыре необходимых набора данных. Архитектура системы включает модуль PLANT, выполняющий следующие функции: передачу состава смеси в поток raw materials, передачу термодинамических параметров (Т, Р) в теплообменник E-100, получение расчетных значений от Unisim: доля газовой фазы, вязкость смеси.

Интеграция модуля PLANT с Unisim осуществляется посредством технологии Component Object Model (COM) [14, 15]. Модуль DATA выполняет итеративную генерацию параметров (Т, Р, состав), передает их в PLANT, получает результаты моделирования и формирует соответствующие наборы данных. Все компоненты системы разработаны на языке MatLab с использованием встроенной поддержки COM-технологии для обмена данными.

Для задачи первой стадии построена МПП классификации MLF_S1, в качестве функции потерь выбрана кроссэнтропия, минимизация осуществлялась методом Левенберга – Марквардта. МПП MLF_S1 имеет один скрытый слой, выходной слой содержит 3 нейрона по числу классов, входной слой – 12 нейронов по числу признаков. Оптимизация гиперпараметров (числа нейронов в скрытом слое, выбор функции активации) проводилась по сетке. После тщательного тестирования различных архитектур наилучшие результаты показала нейросетевая модель со следующими параметрами: скрытый слой из 25 нейронов с функцией активации tanh; продолжитель-

ность обучения составила 110 эпох (обусловлено масштабом обучающей выборки, превышающей 800 тыс. образцов).

Анализ графических данных (рис. 3), в том числе матрицы классификации и распределения ошибок, позволяет сделать следующие выводы: количество ошибочных прогнозов крайне незначительно; алгоритм демонстрирует устойчивую сходимость в процессе обучения; модель обладает выраженной способностью к различению классов.

Ключевые преимущества выбранной конфигурации:

1. Оптимальное соотношение сложности модели и вычислительных затрат.

2. Устойчивость к переобучению благодаря регуляризирующему эффекту «tanh-активаций».

3. Репрезентативность оценки качества на крупном датасете.

Для задач аналогичной размерности рекомендуется рассматривать данную архитектуру в качестве основного решения.

На втором этапе для решения поставленных задач разработали три МПП. В частности, для класса 1 построили модель MLF_V с одним скрытым слоем (53 нейрона), дополненную каскадом, подающим входные сигналы не только на скрытый, но и на выходной слой (рис. 4).

Для смеси в жидком состоянии лучшее качество аппроксимации с $R = 0,977$ показала МПП MLF_L со скрытым слоем из 53 нейронов. Сеть удалось обучить после нормализации входных данных. Для класса смешанной фазы необходимо предсказывать два параметра – вязкость в газовой и в жидкой фазах. Здесь лучшие результаты с $R = 0,985$ показала МПП MLF_M с каскадом, с 40 нейронами в скрытом слое при нормализации входных данных.

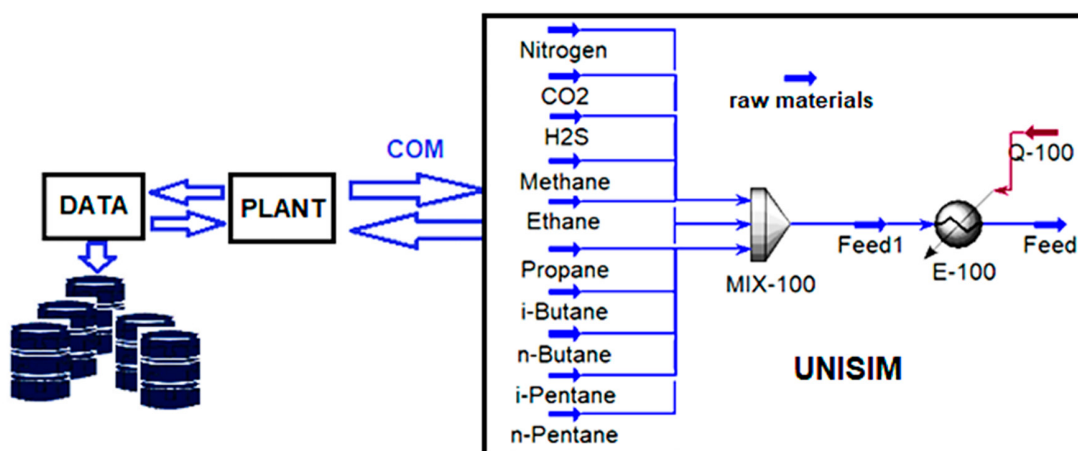
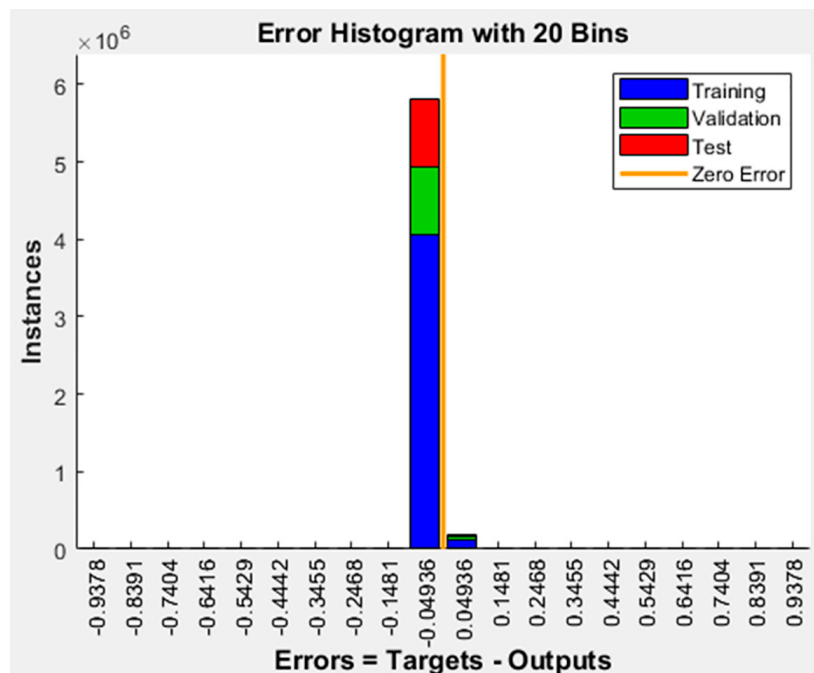


Рис. 2. Структура программного комплекса DATABANK
Источник: составлено авторами



All Confusion Matrix

	1	2	3	
1	342501 17.1%	0 0.0%	1 0.0%	100.0% 0.0%
2	0 0.0%	1331031 66.6%	84 0.0%	100.0% 0.0%
3	0 0.0%	109 0.0%	325890 16.3%	100.0% 0.0%
	100.0% 0.0%	100.0% 0.0%	100.0% 0.0%	100.0% 0.0%
	1	2	3	
	1	2	3	

Output Class

Target Class

Рис. 3. Матрица ошибок и распределение ошибок классификатора
Источник: составлено авторами

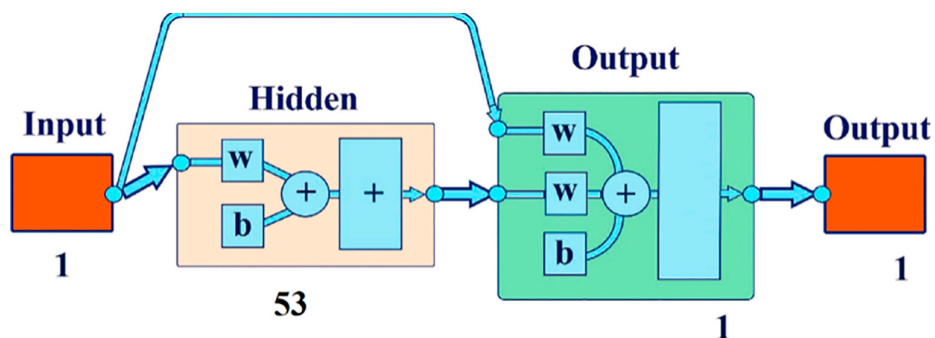


Рис. 4. Структура МПП MLF_V
Источник: составлено авторами

Все построенные нейронные сети обучались на датасетах, которые разбивались на обучающее, валидационное и тестовое подмножества по 70, 15 и 15 % от исходного набора соответственно. Потери при обучении не превысили 10^{-6} при отсутствии переобучения. Для уточнения качества работы построенных МПП были проанализированы результаты работы на промышленном примере, не попавшем ни в один датасет. Отклонения составили не более 0,01 %, что объясняется подготовкой датасетов, обеспечивших репрезентативность данных.

Заключение

Для прогнозирования вязкостных характеристик полидисперсных углеводородных систем был создан специализированный программный комплекс ВЯЗКОСТЬ, разработанный в среде MatLab. Система обеспечивает: интерактивный ввод параметров исследуемой смеси, расчет и вывод значений вязкости, интеграцию обученных нейросетевых моделей.

Предложенная декомпозиция задачи расчета вязкости многокомпонентной смеси позволила использовать несколько небольших нейронных сетей разной архитектуры вместо одной нейросети большой параметричности. Разработанный программный комплекс доказал свою эффективность и надежность, представляя собой мощный инструмент для расчета вязкости широкой фракции углеводородов при моделировании процессов нефтехимии.

Список литературы

1. Boyadjiev Ch. Modeling and simulation in chemical engineering. Project Reports on Process Simulation, Springer Cham. 2022. 199 p. [Электронный ресурс]. URL: <https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-030-87660-9> (дата обращения: 22.04.2025). ISBN: 978-3-030-87660-9.
2. Мануйко Г.В., Аминова Г.А., Дьяконов Г.С., Ахметов И.Г., Бронская В.В. Кинетическая неоднородность неодимовой каталитической системы, модифицированной метилалюмоксаном // Теоретические основы химической технологии. 2015. Т. 49. № 3. С. 261–266. DOI: 10.7868/S0040357115030082.
3. Jafar Alzubi, Anand Nayyar, Akshi Kumar. Machine Learning from Theory to Algorithms: An Overview // J. Physics: Conference Series. 2018. Vol. 1142. P. 012012. DOI: 10.1088/1742-6596/1142/1/012012.
4. Samreen N., Aqib A., Sania A., Muhammad M.A., An unsupervised machine learning algorithms: Comprehensive Review // International Journal of Computing and Digital System. 2023. Vol. 13, Is. 1. P. 911–921. DOI: 10.12785/ijcds/130172.
5. A. Tiwari Chapter 2 – Supervised learning: From theory to applications // Editor(s): Rajiv Pandey, Sunil Kumar Khatri, Neeraj Kumar Singh, Parul Verma // Artificial Intelligence and Machine Learning for EDGE Computing, Academic Press. 2022. P. 23–32. DOI: 10.1016/B978-0-12-824054-0.00026-5.
6. Van Engelen J.E., Hoos H.H. A survey on semi-supervised learning // Mach Learn. 2020. Vol. 109. P. 373–440. DOI: 10.1007/s10994-019-05855-6 (дата обращения: 22.04.2025).
7. Yu Zhang, Qiang Yang, An overview of multi-task learning // National Science Review. 2018. Vol. 5. P. 30–43. DOI: 10.1093/nsr/nwx105 (дата обращения: 22.04.2025).
8. Mohammed A., Kora R. A comprehensive review on ensemble deep learning: Opportunities and challenges // J. King Saud University – Computer and Information Sciences. 2023. Vol. 35, Is. 2. P. 757–774. DOI: 10.1016/j.jksuci.2023.01.014.
9. Vergni L., Todisco F. A random forest machine learning approach for the identification and quantification of erosive events // Water. 2023. Vol. 15, Is. 12. P. 2225. DOI: 10.3390/w15122225.
10. Chaparro G., Müller E.A. Simulation and data-driven Modeling of the transport properties of the mic fluid // J. Phys. Chem. B. 2024. Vol. 128, Is. 2. P. 551–566. DOI: 10.1021/acs.jpcc.3c06813.
11. Artrith N., Butler K.T., Coudert F.X. et al. Best practices in machine learning for chemistry // Nature Chemistry. 2021. Vol. 13. P. 505–508. DOI: 10.1038/s41557-021-00716-z.
12. Mafat I.H., Surya D.V., Sharma S.K., Rao C.S. Exploring machine learning applications in chemical production through valorization of biomass, plastics, and petroleum resources: A comprehensive review // Journal analytical and applied pyrolysis. 2024. Vol. 180. P. 106512. DOI: 10.1016/j.jaap.2024.106512.
13. Zachary J.B., Xiang Y., Philippe Y.A., Yanan Z., Steven P.W., Zhou Q. Artificial Intelligence in Chemistry: Current Trends and Future Directions // Journal Chemical Information and Modeling. 2021. Vol. 61, Is. 7. P. 3197–3212. URL: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jcim.1c00619> (дата обращения: 22.04.2025).
14. Nanvakenari S., Ghasemi M., Movagharnjad K. Viscosity prediction of hydrocarbon binary mixture using an artificial neural network-group contribution method // Journal Chemical Product and Process Modeling. 2022. Vol. 17, Is. 3. P. 199–211. DOI: 10.1515/cppm-2020-0084.
15. Ssebadduka R., Le N.N.H., Nguele R., Alade O., Sugai Y. Artificial neural network model prediction of bitumen/light oil mixture viscosity under reservoir temperature and pressure conditions as a superior alternative to empirical models // Energies. 2021 Vol. 14, Is. 24 P. 8520. URL: <https://www.mdpi.com/1996-1073/14/24/8520> (дата обращения: 22.04.2025).