

УДК 536.22

## Прогнозирование коэффициента теплопроводности сложных углеводородных смесей с помощью искусственных нейронных сетей

Б.А. Григорьев<sup>1</sup>, И.С. Александров<sup>2\*</sup>, А.А. Герасимов<sup>2</sup>

<sup>1</sup> ООО «Газпром ВНИИГАЗ», Российская Федерация, 142717, Московская обл., Ленинский р-н, с.п. Развилковское, пос. Развилка, Проектируемый пр-д № 5537, вл. 15, стр. 1

<sup>2</sup> Калининградский государственный технический университет, Российская Федерация, 236022, г. Калининград, Советский просп., д. 1

\* E-mail: alexandrov\_kgrd@mail.ru

**Ключевые слова:** теплопроводность, плотность, нейронная сеть, нефть, газовый конденсат.

**Тезисы.** На основе надежных экспериментальных данных разработана новая модель на базе искусственных нейронных сетей, применимая для прогнозных расчетов коэффициента теплопроводности сложных углеводородных смесей. Модель описывает избыточную масштабированную теплопроводность и основана на расширенном принципе соответственных состояний. Входными параметрами для нейронной сети являются приведенная температура, приведенная плотность, а также два критерия подобия. Указанные критерии подобия определяются по доступным физико-химическим свойствам – относительной плотности при температуре 20 °С, коэффициенте преломления при той же температуре и молярной массе.

Основу обрабатываемого массива экспериментальных данных составили данные о теплопроводности нефти и газовых конденсатов различных месторождений, их фракций и товарных нефтепродуктов. С использованием указанного массива данных по методу Левенберга – Марквардта произведено обучение двухслойной нейронной сети с обратным распространением ошибки. Для устранения эффекта переобучения сети параллельно проводились процедуры тестирования и проверки (валидации).

В статье сравниваются коэффициенты теплопроводности, рассчитанные обученной нейронной сетью, с имеющимися экспериментальными данными. Результаты сравнения позволяют сделать вывод о хороших экстраполяционных возможностях предлагаемой модели.

Данные о коэффициентах теплопроводности  $\lambda$  сложных углеводородных смесей необходимы при расчете технологических процессов, технологического оборудования, транспортных трубопроводных систем, а также при разработке математических моделей процессов для систем автоматического управления.

Определенная проблематичность экспериментальных исследований теплофизических свойств (ТФС) сложных углеводородных систем, а именно нефтепродуктов и газовых конденсатов, обусловлена их многокомпонентностью (от 20 до 500 индивидуальных веществ), которая осложняет определение точного химического состава таких смесей и, как следствие, разработку надежных методов прогнозного расчета их ТФС на основе информации о свойствах компонентов. Очевидный выход заключается в развитии универсальных прогнозных подходов к созданию методов расчета ТФС нефтепродуктов. Одним из таких подходов можно считать использование искусственных нейронных сетей как универсального алгоритмического аппарата приближения функций многих переменных с помощью линейных операций и суперпозиций функций одной переменной [1]. В настоящее время нейронные сети широко применяются в разных отраслях науки и техники.

Так, нейронная сеть есть специальное формальное устройство, состоящее из искусственных нейронов. Искусственный нейрон (рис. 1) – это преобразовательный элемент, имеющий некоторое количество входов (синапсов), на которые поступают входные сигналы  $x_i$ , и один выход (аксон), с которого снимается выходной сигнал  $y$ . Каждый синапс имеет вес  $w_i$ . Внутри нейрона можно выделить блок суммирования,

определяющий взвешенную сумму всех входных сигналов

$$U = \sum_{i=1}^n w_i x_i, \quad (1)$$

и блок функции активации  $F(U) = y$ . Таким образом, нейрон функционирует за два такта: 1) суммирование входных сигналов; 2) вычисление  $y$  по функции активации.

Функция активации является сигмоидной:

$$F(U) = \frac{1}{1 + e^{-\alpha U}}, \quad (2)$$

где  $\alpha$  – параметр наклона сигмоидной функции.

Нейроны образуют нейронные сети путем соединения синапсов с аксонами. Наиболее распространенными и хорошо изученными считаются многослойные сети, состоящие из входного, скрытого и выходного слоев нейронов (рис. 2). Нейроны входного слоя  $H_{ij}$  имеют только по одному синапсу. Количество нейронов входного слоя соответствует числу входных переменных сети  $x_i$ . Задачей нейронов этого слоя является только распределение входных сигналов по нейронам скрытого слоя, суммирования и вычисления функции активации в них не происходит. Количество нейронов в скрытом слое может быть различным и часто подбирается экспериментально. Входные сигналы последовательно проходят через все нейроны и после преобразований напрямую подаются на выходы. Выходной сигнал  $y_{ij}$  каждого  $j$ -го нейрона в  $i$ -м слое определяется как

$$y_{ii} = F\left(\sum_{k=1}^{n(i-1)} w_{ij}^k y_{i-1,k}\right), \quad (3)$$

где  $n(i)$  – число нейронов в  $i$ -м слое.

Нейронные сети относятся к классу аппроксиматоров и «черных ящиков», аппроксимирующих некоторые функции вида  $y = F(x)$ , где  $x, y$  – векторы входных и выходных переменных соответственно. Процесс аппроксимации заключается в подборе весовых коэффициентов  $w_{ij}$  и называется обучением нейронной сети. Сеть может функционировать в двух режимах:

- 1) эксплуатации, когда на вход подаются сигналы, а на выходе снимаются результаты вычислений;
- 2) обучения, когда происходит корректировка весов таким образом, чтобы выходные сигналы наиболее точно соответствовали

желаемым. От качества обучения зависит точность работы сети в режиме эксплуатации.

Далее в статье показано обучение и моделирование двухслойной нейронной сети с функциями активации сигмоидного типа, предназначенной для прогнозирования коэффициента теплопроводности сложных углеводородных смесей. Обучение осуществлялось по правилу обратного распространения с минимизацией ошибки обучения, которая определяется как

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_{\text{вых}}} (y_i - y_{\text{жел},i})^2, \quad (4)$$

где  $y_{\text{жел},i}$  – желаемые (экспериментальные) значения выходных сигналов;  $N_{\text{вых}}$  – количество выходных сигналов сети.

Для обучения и тестирования нейронной сети были отобраны следующие экспериментальные значения  $\lambda$ :

1) отраслевой теплофизической лаборатории Грозненского нефтяного института (ОТФЛ ГНИ), полученные в разные годы для 80 углеводородных фракций нефтяного и газоконденсатного происхождения (прямогонных и вторичных) в диапазоне температур 243–673 К

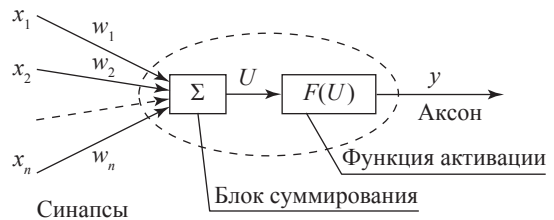


Рис. 1. Структура нейрона

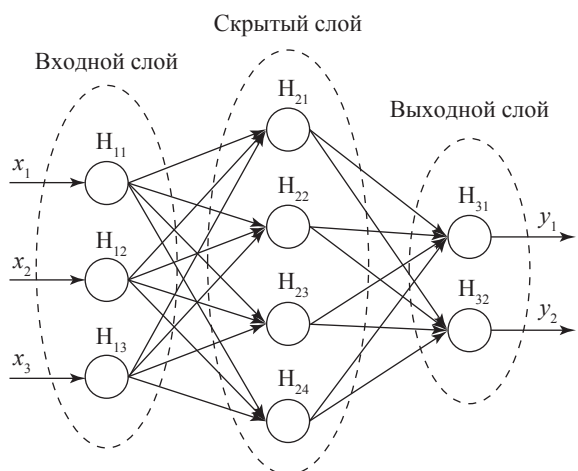


Рис. 2. Слоистая нейронная сеть

при давлениях до 60 МПа [2, 3]. Значения погрешностей для разных экспериментальных установок составляли 1,0–1,3 % при температуре 273 К, 1,8–2,2 % при температуре 523 К и 3,0 % при температуре 673 К;

2) Кубанского государственного технологического университета (КубГТУ), полученные в диапазоне температур 230–470 К при давлениях до 100 МПа [4]. Всего исследованы 13 газовых конденсатов различных месторождений и 23 их прямогонные фракции. Погрешность отдельного измерения  $\lambda$ , по оценке авторов, не превышает  $\pm 1,5$  %;

3) Ташкентского автодорожного института (ныне – Ташкентский институт по проектированию, строительству и эксплуатации автомобильных дорог, ТАДИ), полученные в диапазоне температур 250–530 К при давлениях до 40 МПа [5]. Исследованы 10 газовых конденсатов и 18 их прямогонных фракций. Погрешность отдельного измерения  $\lambda$ , по оценке авторов, не превышает  $\pm 3,1$  %;

4) полученные В.А. Казаряном [6] методом регулярного режима в диапазоне температур 220–470 К при давлениях до 60 МПа. Исследованы четыре газовых конденсата и шесть прямогонных фракций газового конденсата Вуктыльского месторождения. Погрешность данных не сообщается.

### Построение нейронной сети для прогнозирования коэффициента теплопроводности

Обобщенный закон изменения теплопроводности базируется на расширенном принципе соответственных состояний в таких переменных, как приведенная температура и приведенная плотность, и в общем виде представлен следующей зависимостью:

$$\Delta\lambda = f(\tau, \delta, Y, K_w). \quad (5)$$

Здесь приведенная температура  $\tau = T/T_\lambda$  (где  $T$  – абсолютная температура, К;  $T_\lambda$  – параметр приведения для температуры, см. далее формулу (10), К); приведенная плотность  $\delta = \rho/\rho_\lambda$  (где  $\rho$  – абсолютная плотность, кг/м<sup>3</sup>;  $\rho_\lambda$  – параметр

приведения для плотности, кг/м<sup>3</sup>(см. далее));  $Y$  – характеристический комплекс (см. далее);  $K_w$  – фактор Ватсона (см. далее);  $\Delta\lambda$ , левая часть уравнения (5), представляет собой масштабированную избыточную теплопроводность, которая определяется соотношениями

$$\Delta\lambda = [\lambda(\delta, \tau) - \lambda_0] \Lambda_\lambda, \quad (6)$$

$$\Lambda_\lambda = T^{-\left(\frac{1}{2}\right)} M^{-\left(\frac{1}{6}\right)} \rho^{-\left(\frac{2}{3}\right)}, \quad (7)$$

$$\lambda_0 \cdot 10^3 = \frac{\eta_0}{M} (16,75 + 1,15C_v^\infty), \quad (8)$$

$$\eta_0 \xi = 1,564 \tau^{*0,94}, \quad (9)$$

где  $\lambda_0$  – теплопроводность разреженного газа, Вт/(м·К);  $\Lambda_\lambda$  – масштабирующий множитель;  $\eta_0$  – коэффициент вязкости разреженного газа, мкПа·с;  $M$  – средняя молярная масса, кг/кмоль;  $C_v^\infty$  – изохорная теплоемкость в состоянии идеального газа, кДж/(кмоль·К) [7];  $\xi = T_k^{1/6}/M^{1/2}/p_k^{2/3}$  (где  $T_k$ , К, и  $p_k$ , МПа – псевдокритические свойства, а именно температура и давление, смеси);  $\tau^* = T/T_k$ . Для расчета плотности  $\rho$  использовалась авторская методика, базирующаяся на двух обобщенных уравнениях состояния [8].

В качестве точки приведения принята точка на псевдокритической изобаре при фиксированном значении масштабированной теплопроводности  $\Delta\lambda = 0,25$ , которое подбиралось таким образом, чтобы значение температуры  $T_\lambda$  находилось в пределах экспериментально исследованного диапазона. Определенные по экспериментальным данным значения  $T_\lambda$  аппроксимированы уравнением

$$\frac{T_\lambda}{T_k} = C_0 + C_1 Y + C_2 Y^2 + C_3 (K_w - 10) + C_4 (K_w - 10)^2 + C_5 Y (K_w - 10), \quad (10)$$

где численные значения коэффициентов представлены в табл. 1.

Определяющими критериями подобия в зависимости (5) являются:

$$Y = \frac{100[(n_D^{20})^2 - 1](n_D^{20} - \rho_4^{20})}{M \rho_4^{20} (n_D^{20} + 0,4)}; \quad (11)$$

Таблица 1

Значения коэффициентов уравнения (10)

$C_0$	$C_1$	$C_2$	$C_3$	$C_4$	$C_5$
0,180689	1,279527	-0,443805	0,032758	0,020290	-0,180112

$$\text{и } K_w = 1,2251 \frac{T_{\text{кип.об}}^{1/3}}{\rho_{15}^{15}}, \quad (12)$$

где  $n_D^{20}$  – показатель преломления при температуре 20 °С;  $\rho_4^{20}$  – относительная плотность при той же температуре;  $T_{\text{кип.об}}$  – средняя объемная температура кипения,  $\rho_{15}^{15}$  – относительная плотность при температуре 15 °С.

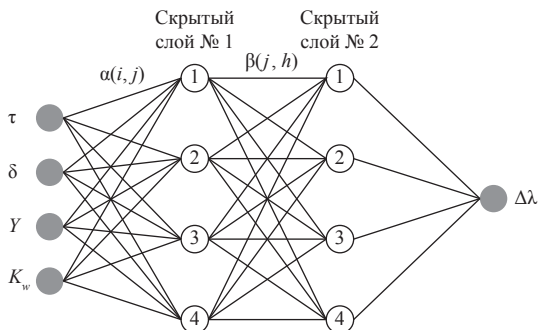
Для прогнозирования коэффициента теплопроводности в среде программирования MATLAB [9] создана двухслойная нейронная сеть с обратным распространением ошибки (англ. back propagation neural network) (рис. 3, табл. 2). Сеть состоит из двух скрытых слоев по четыре нейрона каждый. Входными нейронами для сети служат  $\tau$ ,  $\delta$ ,  $Y$  и  $K_w$ .

В качестве обучающей процедуры применялся пошаговый алгоритм Левенберга – Марквардта [10] (шаги называются эпохами, или циклами). В каждом цикле на вход сети подаются все элементы обучающей последовательности, затем вычисляются выходные значения сети, сравниваются с целе-

выми значениями, и вычисляется функционал ошибки. Значения функционала, а также его градиента используются для корректировки весов (см. табл. 2), после чего все действия повторяются. Процесс обучения прекращается, когда выполнено заданное количество циклов либо когда ошибка достигла некоторого малого значения или перестала уменьшаться.

Обучение сети производилось на массиве экспериментальных значений, состоящем из 4661 точки. Для устранения эффекта переобучения сети параллельно проводились процедуры тестирования и проверки (валидации) на базе не участвовавших в обучении сети массивов, построенных по 430 точкам. Среднеквадратичная погрешность описания используемого массива обученной сетью составляет 2,56 %.

Проверка прогнозных возможностей сети осуществлялась с использованием массива экспериментальных данных (4483 точки) о теплопроводности газовых конденсатов,



**Рис. 3. Архитектура нейронной сети:**  
 $\alpha$  и  $\beta$  – весовые коэффициенты входных нейронов на скрытых слоях № 1 и № 2 соответственно (см. табл. 2)

Таблица 2

**Численные значения весовых коэффициентов в обученной нейронной сети**

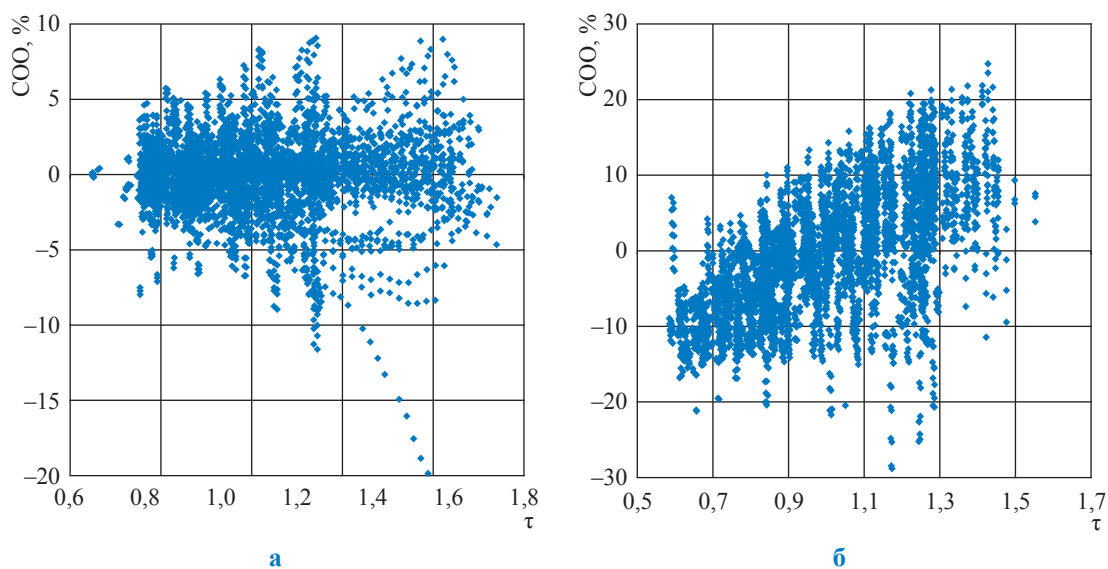
		$\alpha(i, j)$			
$j \setminus i$	$\tau$	$\delta$	$Y$	$K_w$	
1	0,4067	0,0200	-1,4577	1,3704	
2	0,0199	-0,1875	0,1218	0,0193	
3	0,0725	0,0545	-0,4474	0,7166	
4	0,1179	0,4488	-1,4209	-1,6435	
		$\beta(j, h)$			
$h \setminus j$	1	2	3	4	
1	1,5859	-0,4286	1,7722	0,3039	
2	-0,9959	-0,9154	1,9446	0,6248	
3	1,2819	-0,5762	1,4439	-1,9572	
4	0,0222	-2,7683	0,2455	-0,6640	

Таблица 3

**Результаты сравнения экспериментальных значений  $\lambda$  сложных углеводородных смесей с расчетными значениями, полученными с использованием обученной нейронной сети:**

СКО – среднее квадратичное отклонение; СОО – среднее относительное отклонение

Источник данных (вещества)	Массив данных, ед.		Отклонение, %	
	количество веществ	число точек	СКО	СОО
ОТФЛ ГНИ (нефть, нефтяные и газоконденсатные фракции) [2, 3]	80	4661	2,56	1,83
КубГТУ (газовые конденсаты и их фракции) [4]	36	4483	8,31	6,86
ТАДИ (газовые конденсаты и их фракции) [5]	28			
В.А. Казарян (газовые конденсаты и их фракции) [6]	10			



**Рис. 4. Сравнение значений теплопроводности сложных углеводородных смесей с расчетными значениями, полученными с использованием обученной нейронной сети: а – нефть, нефтяные и газоконденсатные фракции [2, 3]; б – газовые конденсаты и их фракции [4–6]**

ранее не задействованного в процедуре обучения. Указанный массив описывается со средней относительной погрешностью 6,86 %. Существенно бо́льшая погрешность описания объясняется прежде всего не ошибками модели, а большей погрешностью экспериментальных данных КубГТУ, ТАДИ и В.А. Казаряна [4–6] по сравнению с данными ОТФЛ ГНИ [2, 3], включая и погрешности определения физико-химических свойств, используемых для идентификации веществ (табл. 3, рис. 4).

\*\*\*

Таким образом, разработана модель на базе искусственных нейронных сетей для прогнозных расчетов коэффициента теплопроводности сложных углеводородных смесей. На основе приведенных в статье сведений можно сделать вывод о том, что предлагаемая модель не только описывает имеющиеся экспериментальные данные с точностью, не уступающей точности современных корреляционных уравнений, но и обладает хорошими прогнозными возможностями.

### Список литературы

1. Kolmogorov A.N. On the representation of continuous functions of several variables as a superposition of continuous functions of one variable // Doklady akademii nauk SSSR. – 1957. – Vol. 114. – № 5. – P. 953–956.
2. Григорьев Б.А. Исследование теплофизических свойств нефтей, нефтепродуктов и углеводородов: дис. ... д-ра тех. наук (05.14.05 – Теоретические основы теплотехники) / Б.А. Григорьев. – Грозный: ГНИ, 1979. – 524 с.
3. Богатов Г.Ф. Теплопроводность индивидуальных углеводородов и нефтепродуктов в жидком состоянии: дис. ... д-ра тех. наук (01.04.14 – Теплофизика и молекулярная физика) / Г.Ф. Богатов. – Грозный: ГНИ, 1992. – 424 с.
4. Экспериментальное исследование теплофизических свойств стабильных газовых конденсатов и их фракций в жидкой фазе: отчет о НИР по теме № 112.04.14 / Кубанский государственный технологический университет; рук. А.С. Магомадов. – Краснодар: КубГТУ, 1994. – 171 с.

5. Муталибов А.А. Теплопроводность газовых конденсатов и их фракций / А.А. Муталибов, В.В. Шубин, Г.Н. Махмудов и др. // ГСССД Р 308-89. Таблицы рекомендуемых справочных данных. – М.: ВНИЦ МВ Госстандарта СССР (деп. в ГСССД), 1989. – 40 с.
6. Казарян В.А. Теплофизические свойства индивидуальных углеводородов и газовых конденсатов / В.А. Казарян. – М.: Техника, 2002. – 448 с.
7. Григорьев Б.А. Теплофизические свойства и фазовые равновесия газовых конденсатов и их фракций / Б.А. Григорьев, А.А. Герасимов, Г.А. Ланчаков. – М.: Издательский дом МЭИ, 2007. – 344 с.
8. Григорьев Б.А. Анализ применения одножидкостной модели для расчета термодинамических свойств многокомпонентных углеводородных смесей на основе фундаментальных уравнений состояния / Б.А. Григорьев, А.А. Герасимов, И.С. Александров // Актуальные вопросы исследований пластовых систем месторождений углеводородов: сб. науч. ст. – М.: Газпром ВНИИГАЗ, 2012. – 412 с.
9. Медведев В.С. Нейронные сети. MATLAB 6 / В.С. Медведев, В.Г. Потемкин; под общ. ред. В.Г. Потемкина. – М.: Диалог МИФИ, 2002. – 496 с.
10. Hagan M.T. Training feed forward networks with the Marquardt algorithm / M.T. Hagan, M. Menhaj // IEEE Transactions on Neural Networks. – 1994. – Vol. 5. – № 6. – P. 989–993.

---

## Predicting thermal conductivity coefficient of complex hydrocarbon mixtures by means of artificial neural networks

B.A. Grigoryev<sup>1</sup>, I.S. Aleksandrov<sup>2\*</sup>, A.A. Gerasimov<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Gazprom VNIIGAZ LLC, Bld. 1, Estate 15, Proyektiruemyy proezd # 5537, Razvilka village, Leninsky District, Moscow Region, 142717, Russian Federation

<sup>2</sup> Kaliningrad State Technical University, Bld. 1, Sovetskiy prospekt, Kaliningrad, 236022, Russian Federation

\* E-mail: alexandrov\_kgrd@mail.ru

**Abstract.** Based on reliable experimental data a new artificial neural network model is developed for predicting thermal conductivity coefficients of complex hydrocarbon mixtures. The proposed model describes the residual scaled thermal conductivity and is based on the extended corresponding states principle. The mentioned neural network takes the reduced temperature and reduced density and two criteria of similarity as input parameters. Criteria of similarity are defined by a set of physical properties – the average molar mass, relative density, refractive index.

Broad experimental array of data on thermal conductivity of petroleum and gas condensates from various fields, their fractions and trade products was applied to a fitting procedure. For Levenberg–Marquardt-method training of a two-layer back-propagation neural network a specified experimental data array was used. To eliminate an effect of network retraining it was tested and validated.

Comparison of experimental data and thermal conductivity coefficient values calculated by means of the trained neural network are presented in the article. Results show good extrapolation opportunities of the proposed model.

**Keywords:** thermal conductivity, density, neural network, oil, gas condensate.

### References

1. KOLMOGOROV, A.N. On the representation of continuous functions of several variables as a superposition of continuous functions of one variable. *Doklady akademii nauk SSSR*. 1957, vol. 114, no. 5, pp. 953–956.
2. GRIGORYEV, B.A. *Study on thermophysical properties of oils, petroleum products and hydrocarbons* [Issledovaniye teplofizicheskikh svoystv neftey, nefteproduktov i uglevodorodov]. Dr. of Sci. (Eng.) thesis. Groznyy Petroleum Institute (USSR), 1979. (Russ.).
3. BOGATOV, G.F. *Thermal conductivity of individual hydrocarbons and liquid-state petroleum products* [Teploprovodnost individualnykh uglevodorodov i nefteproduktov v zhidkom sostoyanii]. Dr. of Sci. (Eng.) thesis. Groznyy Petroleum Institute (USSR), 1992. (Russ.).
4. KUBAN STATE TECHNOLOGICAL UNIVERSITY. *Experimental research of thermophysical properties of stable gas condensates and their fractions in liquid phase* [Eksperimentalnoye issledovaniye teplofizicheskikh svoystv stabilnykh gazovykh kondensatov i ikh fraktsiy v zhidkoy faze]: scientific report, theme no. 112.04.14. Research manager A.S. Magomadov. Krasnodar: KubSTU, 1994. (Russ.).

5. MUTALIBOV, A.A., V.V. SHUBIN, G.N. MAKHMUDOV et al. Thermal conductivity of gas condensates and their fractions [Teploprovodnost gazovykh kondensatov i ikh fraktsiy]. In: *GSSSD R 308-89. Tables of recommended reference data*. Deposited in STATE SERVICE FOR STANDARD REFERENCE DATA. Moscow, 1989. (Russ.).
6. KAZARYAN, V.A. *Thermophysical properties of individual hydrocarbons and gas condensates* [Teplofizicheskiye svoystva individualnykh uglevodorodov i gazovykh kondensatov]. Moscow: Tekhnika, 2002. (Russ.).
7. GRIGORYEV, B.A., A.A. GERASIMOV, G.A. LANCHAKOV. *Thermophysical properties and phase equilibria of gas condensates and their fractions* [Teplofizicheskiye svoystva i fazovyye ravnovesiya gazovykh kondensatov i ikh fraktsiy]. Moscow: MPEI Publishers, 2007. (Russ.).
8. GRIGORYEV, B.A., A.A. GERASIMOV, I.S. ALEKSANDROV. Analysis of single-fluid model application for calculating thermodynamic properties of multicomponent hydrocarbon mixtures on the grounds of fundamental equations of state [Analiz primeneniya odnozhidkostnoy modeli dlya rascheta termodinamicheskikh svoystv mnogokomponentnykh uglevodorodnykh smesey na osnove fundamentalnykh uravneniy sostoyaniya]. In: *Actual issues of studying bedded hydrocarbon systems* [Aktualnyye voprosy issledovaniy plastovykh system mestorozhdeniy uglevodorodov]: collected scientific papers. Moscow: Gazprom VNIIGAZ LLC, 2012. (Russ.).
9. MEDVEDEV, V.S. and V.G. POTEKIN (Ed.). *Neural networks. MATLAB 6* [Neyronnyye seti. MATLAB 6]. Moscow: Dialog MIFI, 2002. (Russ.).
10. HAGAN, M.T. and M. MENHAJ. Training feed forward networks with the Marquardt algorithm. *IEEE Transactions on Neural Networks*. 1994, vol. 5, no. 6, pp. 989–993. ISSN 1045-9227.