

Рязанцев О.І., Кардашук В.С., Бортник К.Я., Жушма Є.В.

ДОСЛІДЖЕННЯ НЕЙРОННИХ МЕРЕЖ ДЛЯ ПРОГНОЗУВАННЯ МАТЕРІАЛЬНИХ БАЛАНСІВ У НАФТОПЕРЕРОБНІЙ ПРОМИСЛОВОСТІ

У статті досліджено можливості використання нейронних мереж для прогнозування та зведення матеріальних балансів у нафтопереробній промисловості та принципи їх побудови. Зазначено, що прогнозування та зведення матеріальних балансів в даний час є однією з основних областей дослідження у нафтопереробній промисловості, як такі, що відіграють вирішальну роль при ціноутворенні на продукцію в умовах реформування ринку. Точність прогнозу суттєво впливає на економічність завантаження генеруючого обладнання та вартість електроенергії. Недооцінка навантаження може призвести до зниження резервів, а завищення – до необґрунтованого збільшення оборотного резерву та ціни на електроенергію. Розглянуті переваги використання нейронних мереж для прогнозування матеріальних балансів в нафтопереробній промисловості. Запропонована архітектура нейронної мережі. Розглянуті можливі варіанти активаційних функцій нейронів та обрана активаційна функція гіперболічного тангенса, яка найкраще підходить для використання в нейронній мережі для прогнозування матеріальних балансів у нафтопереробній промисловості. Розглянуто метод градієнтного спуску для використання в нейронних мережах для прогнозування матеріальних балансів, як найбільш поширений метод оптимізації першого порядку. Зазначені основні аспекти для оцінки ефективності моделі нейронної мережі в процесі її валідації. Зроблено висновок щодо ефективності прогнозування матеріальних балансів в нафтопереробній промисловості, однак їхня ефективність залежить від кількості даних та обчислювальних ресурсів. Використання нейронних мереж, інспірованих біологічною структурою мозку людини, дозволяє ефективно аналізувати складні системи та адаптуватися до змін у вхідних даних.

Ключові слова: нейронні мережі, прогнозування, матеріальні баланси, гіперболічний тангенс, сигмоїдна функція, архітектура нейронної мережі, градієнтний спуск, зворотне поширення похибки, хрест-валідація, тестування моделі, нелінійні залежності.

Актуальність дослідження. Прогнозування матеріальних балансів у нафтопереробній промисловості є надзвичайно важливими завданнями, що потребують високої точності та ефективності. Виробничі процеси у цій галузі характеризуються складними взаємозв'язками між численними параметрами, такими як витратами сировини, технічними характеристиками обладнання, обсягами виробництва різних продуктів тощо (рис. 1).

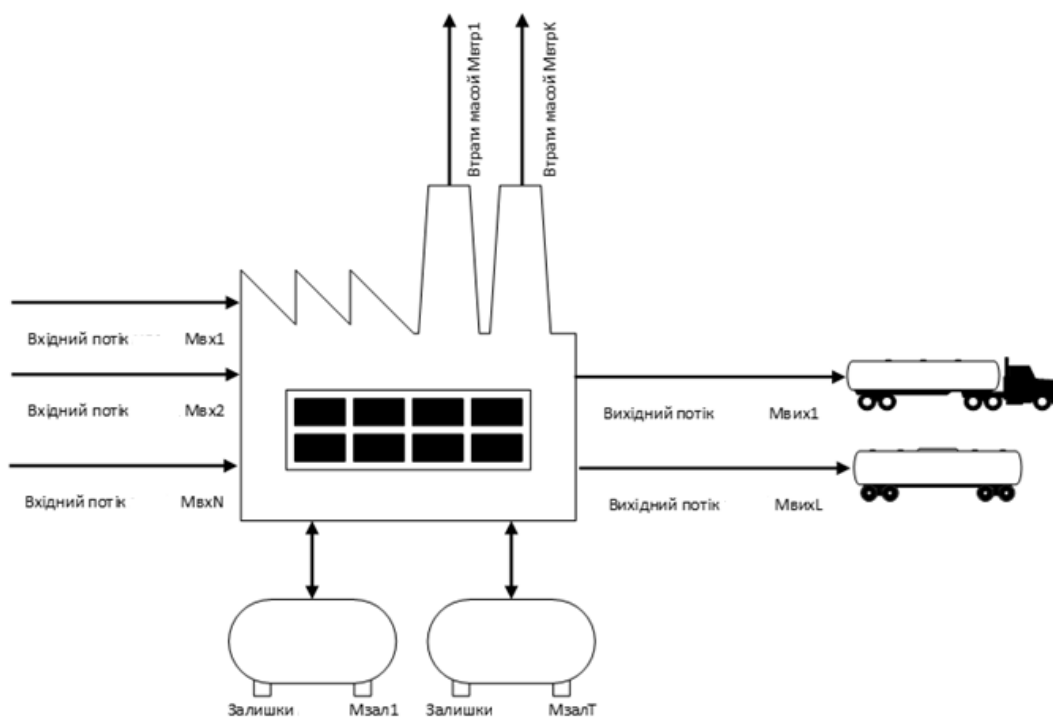


Рисунок 1 – Структурна схема матеріальних балансів у нафтопереробній промисловості

Основна ідея матеріального балансу полягає в тому, що в замкнутій системі загальна кількість матеріалів залишається сталою відповідно до закону збереження маси. Це означає, що вхідна маса матеріалів у систему повинна дорівнювати сумі маси, яка виходить із системи, і маси, що знаходиться в межах цієї системи і також сумі втрат в процесі виробництва.

Формулу матеріального балансу можна представити у наступному вигляді:

$$\sum_{N=1}^i M_{vxi} = \sum_{L=1}^j M_{vixj} + \sum_{T=1}^r M_{залr} + \sum_{K=1}^d M_{втрd} \quad (1)$$

Постановка проблеми. Традиційні методи прогнозування часто не здатні врахувати всі фактори, що впливають на матеріальні потоки. У зв'язку з цим використання нейронних мереж, здатних аналізувати великі обсяги даних і враховувати нелінійні взаємозв'язки, є перспективним підходом до вирішення цих завдань. Нейронні мережі, які наслідують біологічну структуру мозку, здатні навчатися на основі наявних даних, адаптуватися до змін і автоматично генерувати точні прогнози, що робить їх ефективним інструментом для аналізу складних систем.

Метою статті є дослідження можливостей використання нейронних мереж для прогнозування та зведення матеріальних балансів у нафтопереробній промисловості. У роботі розглянуто принципи побудови та проектування нейронних мереж, визначено їхні основні переваги та недоліки, а також запропоновано архітектуру нейронної мережі, яка найкраще підходить для вирішення задач прогнозування у нафтопереробній галузі. Особлива увага приділяється вибору активаційної функції нейронів, яка впливає на ефективність роботи моделі, а також алгоритмам навчання, таким як метод градієнтного спуску та зворотного поширення похибки [1]. Дослідження спрямоване на оцінку ефективності запропонованої моделі та визначення її потенціалу для застосування у реальних умовах нафтопереробної промисловості.

Аналіз останніх досліджень і публікацій. Нейронні мережі в аналізі матеріальних балансів – це комп'ютерні моделі, які навчаються виконувати завдання, використовуючи велику кількість даних. Вони інспіровані біологічною структурою мозку людини, де нейрони з'єднані між собою великою кількістю взаємозв'язків. Нейронні мережі складаються зі шарів нейронів, які обробляють вхідні дані та генерують вихідні прогнози. Вони можуть бути особливо корисними для аналізу складних систем, таких як виробничі процеси в нафтопереробній промисловості, де велика кількість факторів може впливати на матеріальні потоки.

Переваги використання нейронних мереж.

1. Нейронні мережі можуть адаптуватися до змін у вхідних даних та отримувати нові знання, що робить їх ефективними для прогнозування в умовах змінного середовища.
2. Нейронні мережі можуть ефективно обробляти великі обсяги даних, включаючи історичні дані про виробництво та споживання у нафтопереробній промисловості.
3. Нейронні мережі можуть навчатися без нагляду людини, що дозволяє автоматизувати процес аналізу та прогнозування.

Недоліки та обмеження використання нейронних мереж: потребують великих обсягів даних, потребують час на навчання, нейронні мережі не завжди надають прозорі інтерпретації результатів, існує проблема перенавчання.

Вирішення проблеми. Проектування нейронної мережі для прогнозування і зведення матеріальних балансів в нафтопереробній промисловості включає кілька кроків, таких як збір та підготовка даних, визначення вхідних параметрів, розробка архітектури мережі, налаштування та оцінка моделі.

Архітектура нейронної мережі.

Вхідний шар: Кількість нейронів у вхідному шарі визначається кількістю вхідних параметрів або характеристик, що використовуються для прогнозування матеріального балансу. Наприклад, це можуть бути такі параметри, як обсяги виробництва різних продуктів, витрати ресурсів (нафти, газу, хімікатів тощо), технічні характеристики устаткування, часові ряди тощо. Кожен нейрон у вхідному шарі представляє один вхідний параметр і приймає його значення.

Приховані шари: Кількість та розмір прихованих шарів може бути визначена емпірично або за допомогою технік, таких як хрест-валідація (Cross-validation).

Емпіричний підхід означає, що кількість та розмір прихованих шарів можуть бути визначені на основі досвіду та експертної думки. Наприклад, здійснення декількох спроб із різними конфігураціями прихованих шарів, а потім вибір найкращої моделі на основі ефективності.

Хрест-валідація це статистичний метод описаний в джерелі [2], який використовується для оцінки ефективності моделі та визначення оптимальних її параметрів. Зазвичай при використанні хрест-валідації дані розділяються на кілька наборів (зазвичай 5 або 10) частин, навчають модель на одній частині і перевіряють на інших. Потім результати усіх експериментів усереднюють, що дозволяє отримати більш об'єктивну оцінку ефективності моделі. За допомогою хрест-валідації можна експериментально визначити оптимальну кількість та розмір прихованих шарів.

Кожен нейрон у прихованому шарі використовує активаційну функцію, яка обчислює вагову суму вхідних сигналів та передає її наступному шару. У джерелі [3] описані наступні активаційні функції:

Сигмоїдна функція (рис. 2):

$$f(x) = \frac{1}{1+e^{-cx}}, \quad (2)$$

де c – коефіцієнт, який впливає на крутизну (розтягнення) функції.

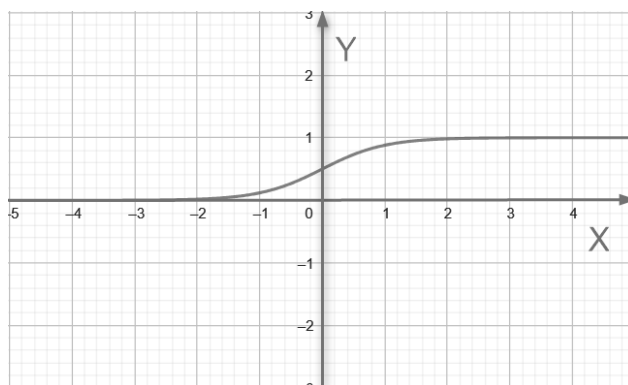


Рисунок 2 – Графік сигмоїдної функції при $c=2$

Чим більше значення параметра c , тим крутіше буде графік сигмоїдної функції. Таким чином, параметр c визначає швидкість зміни значень вихідного сигналу (від 0 до 1) від вхідного значення x . Він регулює, наскільки швидко або повільно сигмоїдна функція наближається до максимального значення 1 при збільшенні вхідного значення x . Зазвичай параметр c вибирається експериментально або шляхом налаштування під час навчання нейронної мережі залежно від характеристик задачі та властивостей даних.

Сигмоїдна функція підходить для прогнозування матеріальних балансів у нафтопереробній промисловості, оскільки вона ефективно моделює нелінійні залежності між вхідними та вихідними параметрами, плавно перетворюючи значення вхідних даних у діапазоні від 0 до 1.

Це дозволяє уникнути великих коливань прогнозів та стабілізує вихідні значення моделі, що є важливим для точного прогнозування матеріальних потоків та зменшення похибок у розрахунках. Сигмоїдна функція добре підходить для обробки даних, коли потрібно обмежити прогнозовані значення в межах фізично можливих значень.

Функція гіперболічного тангенса (рис. 3):

$$f(x) = \tanh(x) = \frac{1-e^{-2x}}{1+e^{-2x}} \quad (3)$$

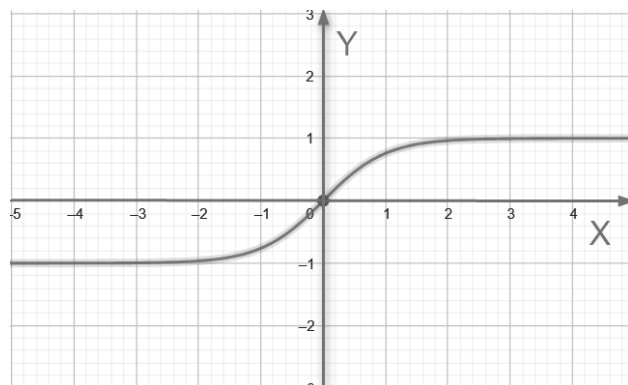


Рисунок 3 – Графік функції гіперболічного тангенса.

Функція гіперболічного тангенса найкраще підходить для прогнозування матеріальних балансів в нафтопереробній промисловості, тому що вона здатна ефективно моделювати складні взаємозв'язки між вхідними та вихідними потоками сировини та продуктів, а також нелінійні залежності.

Функція гіперболічного тангенса корисна у випадках, коли потоки можуть бути від'ємними (наприклад, втрати або негативні відхилення в балансі), також вона добре підходить завдяки симетричній природі функції.

Функція гіперболічного тангенса є гладкою і безперервною функцією, що дозволяє ефективно моделювати нелінійні процеси. У контексті нафтопереробки це важливо для врахування складних взаємозв'язків між змінними, наприклад, зміни обсягів продуктів, залежних від кількох технологічних параметрів. Для дуже великих або дуже малих значень вхідного сигналу X , функція гіперболічного тангенса поступово наближається до своїх асимптот (тобто до значень +1 або -1). Це корисно, коли важливо обмежити вихідні значення моделі в межах фізично можливих значень.

Гаусівська функція (рис. 4):

$$f(x) = e^{-\frac{(x-c)^2}{2\sigma^2}}, \quad (4)$$

Параметр σ є стандартним відхиленням (standard deviation), яке визначає ширину та розкид значень функції, параметр c є центром (або середнім значенням) функції. Він визначає точку, де функція досягає свого максимального значення.

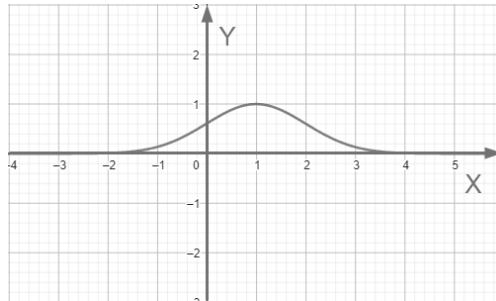


Рисунок 4 – Графік гаусівської функції при $c=1, \sigma=1$

Інверсна мультикватрична функція (рис. 5):

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{(x-c)^2+d^2}}, \quad (5)$$

де c – місцезнаходження центру піку функції;
 d – відповідає за ширину та плавність піку.

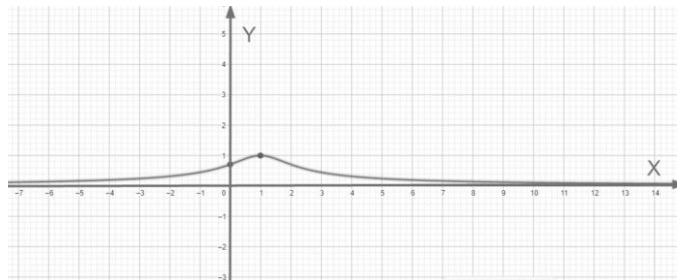


Рисунок 5 – Інверсна мультикватрична функція при $c=1, d=1$

Трикутна функція (для нейро-фаззі-систем) (рис. 6):

$$f(x) = \begin{cases} c_1(x - x_0) & \text{для } x \in (x_0, 0) \\ -c_2(x - x_2) & \text{для } x \in (0, x_2) \\ 0 & \text{в інших випадках} \end{cases} \quad (6)$$

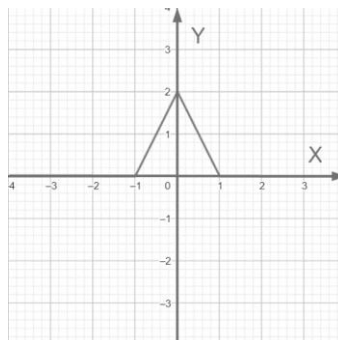


Рисунок 6 - Трикутна функція при $x_0 = -1, c_1 = 2, x_2 = 1, c_2 = 2$

Трапецієподібна функція (для нейро-фазі-систем) (рис. 7):

$$f(x) = \begin{cases} c_1(x - x_0) & \text{для } x \in (x_0, x_1) \\ 1 & \text{для } x \in (x_1, x_2) \\ 1 - c_2(x - x_2) & \text{для } x \in (x_2, x_3) \\ 0 & \text{в інших випадках} \end{cases} \quad (7)$$

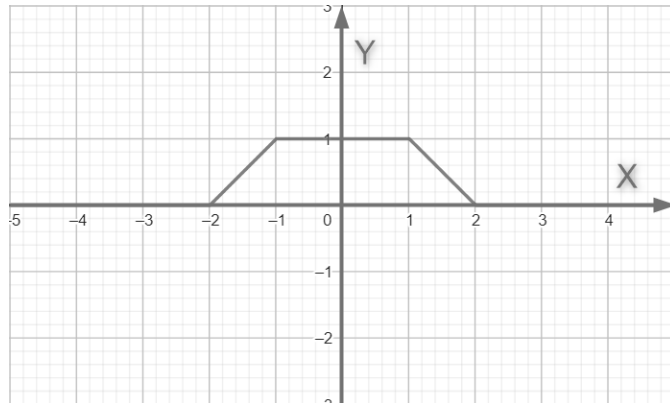


Рисунок 7 - Трапецієподібна функція при $x_0 = -2, x_1 = -1, c_1 = 1, x_2 = 1, x_3 = 2, c_2 = 1$

Вихідний шар: Вихідний шар містить нейрони, які генерують прогнози або оцінки для матеріальних балансів. Кількість нейронів у вихідному шарі відповідає кількості прогнозованих показників.

Навчання та оптимізація. Нейронні мережі навчаються на прикладах даних. Для навчання нейронної мережі доцільно використовувати методу градієнтного спуску або методу зворотного поширення похибки (Backpropagation Algorithm) описаний в [4]. Під час навчання мережі коригуються її параметри, такі як ваги зв'язків між нейронами, для мінімізації похибки прогнозування.

Процеси в нафтопереробці часто є нелінійними і включають багато змінних. Backpropagation алгоритм може ефективно моделювати ці складності, забезпечуючи роботу з великими наборами даних і точність прогнозування. У зв'язку з необхідністю безперервного розвитку, процес нафтопереробки постійно підлягає змінам, пов'язаним із змінами ринкових умов, технологічними інноваціями та впровадженням нових стандартів якості на нафтопродукти. Backpropagation алгоритм дозволяє швидко налаштовувати моделі під нові дані, що є критично важливим для прогнозування матеріальних балансів в нафтопереробній промисловості.

Також важливо провести тестування мережі на реальних даних які не використовувались ні на етапі навчання, ні на етапі валідації, для перевірки її працездатності та точності прогнозів.

Після успішного проходження всіх попередніх етапів нейронна мережа може бути використана для прогнозування майбутніх значень матеріального балансу на основі нових вхідних даних. Вихідні значення, згенеровані вихідним шаром, можуть бути інтерпретовані як прогнозовані показники матеріального балансу.

Результати досліджень. Валідація та тестування. Після навчання мережі важливо провести валідацію на окремому наборі даних, який не використовувався під час навчання, для оцінки її загальної ефективності. Процес валідації моделі нейронної мережі описаний в джерелі [3] і складається з перевірки наступних аспектів:

Виходів моделі (model outputs). Допомогає переконатися, що модель передбачає результати з достатньою точністю. На етапі валідації виявляються випадки, коли модель генерує аномальні чи неправильні результати. Це допомагає скоригувати модель перед розгортанням.

Припущення моделі (assumptions). Моделі ґрунтуються на певних припущеннях (наприклад, лінійності, нормальності розподілів помилок тощо). Якщо ці припущення не виконуються для реальних даних, модель може давати невірні результати навіть якщо на навчальних даних вона працює добре. Перевірка припущень допомагає переконатися, що модель працюватиме не тільки на навчальній вибірці, а й на нових даних, що робить її більш узагальнюючим та надійним у реальних умовах.

Вхідів моделі (model inputs). Якщо дані на вході містять помилки або нерелевантну інформацію, це негативно позначиться на роботі моделі. Валідація вхідів дозволяє переконатися, що дані коректні, повноцінно представляють процес, який модель намагається описати. Моделі можуть бути чутливими до масштабу вхідних даних, тому важливо переконатися, що вони знаходяться у правильних діапазонах (наприклад, під час роботи з градієнтними методами).

Висновки. Нейронні мережі є перспективним інструментом для прогнозування матеріальних балансів у нафтопереробній промисловості, завдяки здатності моделювати складні нелінійні взаємозв'язки між різними факторами виробничих процесів. Вони забезпечують високу точність та ефективність у прогнозуванні, адаптуючись до змін у середовищі та великих обсягів даних.

Процес побудови та навчання нейронної мережі включає кілька етапів, таких як збір та підготовка даних, розробка архітектури мережі, вибір оптимальних параметрів та оцінка моделі за допомогою методів хрест-

валідації та тестування. Важливою частиною проектування нейронної мережі є вибір активаційної функції нейрона, яка визначає, як обробляються сигнали між шарами мережі. Для задач прогнозування матеріальних балансів у нафтопереробній промисловості найбільш підходящими виявилися функція гіперболічного тангенсу та сигмоїдна функція, оскільки вони здатні моделювати складні нелінійні залежності та ефективно працюють з від'ємними і позитивними значеннями вхідних параметрів.

Використання алгоритмів градієнтного спуску та зворотного поширення похибки дозволяє ефективно навчати модель на прикладах даних, що особливо важливо в умовах швидких змін у нафтопереробній галузі.

Важливими аспектами є валідація та тестування моделі для перевірки її точності та узагальненості на нових даних. Це допомагає виявити можливі помилки та забезпечити надійність моделі в реальних умовах.

Таким чином, нейронні мережі мають значний потенціал для підвищення ефективності прогнозування матеріальних балансів, проте їх успішне використання залежить від наявності якісних даних, правильної архітектури моделі та вибору відповідних активаційних функцій, які найбільш ефективно враховують особливості конкретної задачі.

Література

1. Л.С. Ямпольський, О.І. Лісовиченко, В.В. Олійник. «Нейротехнології та нейрокомп'ютерні системи». Київ Дорадо-Друк, 2016 р. – 576 с.
2. Ian Goodfellow, Yoshua Bengio, Aaron Courville. Deep Learning. MIT Press, 2016. – 721 p.
3. Л.С. Ямпольський, Б.П. Ткач, О.І. Лісовиченко. «Системи штучного інтелекту в плануванні, моделюванні та управлінні». МАУП, Київ ДП «Видавничий дім «Персонал», 2011 р. – 543 с.
4. Ashok Kumar Verma, Process Modelling and Simulation in Chemical. Biochemical and Environmental Engineering. CRC Press Taylor & Francis Group, 2015. – 388 p.

References

1. L.S. Yampolskyi, O.I. Lisovychenko, V.V. Oliynyk. Neurotechnologies and neurocomputer systems. Kyiv Dorado-Druk, 2016. – 576 p.
2. Ian Goodfellow, Yoshua Bengio, Aaron Courville. Deep Learning. MIT Press, 2016. – 721 p.
3. L.S. Yampolskyi, B.P. Tkach, O.I. Lisovychenko. Artificial intelligence systems in planning, modeling and management. MAUP Kyiv SE "Personal Publishing House", 2011. – 543 p.
4. Ashok Kumar Verma, Process Modelling and Simulation in Chemical, Biochemical and Environmental Engineering. CRC Press Taylor & Francis Group, 2015. – 388 p.

The article explores the possibilities of using neural networks for forecasting and compiling material balances in the oil refining industry and the principles of their construction. It is noted that forecasting and summarization of material balances are currently one of the main areas of research in the oil refining industry, as they play a decisive role in pricing products in the conditions of market reform. The accuracy of the forecast significantly affects the cost-effectiveness of loading the generating equipment and the cost of electricity. Underestimation of the load can lead to a decrease in reserves, and overestimation - to an unjustified increase in the rotating reserve and the price of electricity. The advantages of using neural networks for forecasting material balances in the oil refining industry are considered. The proposed neural network architecture. The possible variants of the activation functions of the neurons are considered and the hyperbolic tangent activation function is selected, which is best suited for use in a neural network for forecasting material balances in the oil refining industry. The gradient descent method is considered for use in neural networks for forecasting material balances, as the most common first-order optimization method. The main aspects for evaluating the effectiveness of the neural network model in the process of its validation are specified. A conclusion is made regarding the effectiveness of forecasting material balances in the oil refining industry, however, their effectiveness depends on the amount of data and computing resources. The use of neural networks, inspired by the biological structure of the human brain, allows you to effectively analyze complex systems and adapt to changes in input data.

Keywords: neural networks, forecasting, material balances, hyperbolic tangent, sigmoid function, neural network architecture, gradient descent, error backpropagation, cross-validation, model testing, nonlinear dependencies.

Рязанцев О.І. – професор, завідувач кафедри комп'ютерних наук та інженерії Східноукраїнського національного університету ім. В. Даля, ryazancev@snu.edu.ua

Кардашук В.С. – доцент кафедри комп'ютерних наук та інженерії Східноукраїнського національного університету ім. В. Даля, kardashuk@snu.edu.ua, kardashuk1@gmail.com

Бортник К.Я. – доцент кафедри комп'ютерних наук та інженерії Луцького національного технічного університету, katerina.bortnyk@gmail.com

Жушма Є.В. – аспірант кафедри комп'ютерних наук та інженерії Східноукраїнського національного університету ім. В. Даля, asp-122-22-434@snu.edu.ua