

Купцов А.И., Гимранов Ф.М.

## ПРИМЕНЕНИЕ ИСКУССТВЕННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ИНТЕНСИВНОСТИ ИСПАРЕНИЯ АВАРИЙНОЙ ЖИДКОСТИ С ПОВЕРХНОСТИ ПРОЛИВА

*Ключевые слова:* испарение с поверхности пролива, нейронные сети, достоверность расчетов.

*С использованием математического аппарата искусственных нейронных сетей вычислены интенсивности испарения этанола, циклогексана и сжиженного бутана. Проведено сравнение результатов расчета интенсивности испарения по вычислениям нейросетевой и численной моделей с экспериментальными данными.*

*Keywords:* pool evaporation, artificial neural network, model validation.

*Using artificial neural networks predicted the intensity of evaporation of ethanol, cyclohexane and liquefied butane. A comparison of the calculation results of intensity of evaporation is projected neural networks and computing numerical simulation with experimental data.*

### Введение

Одним из наиболее распространенных сценариев аварий на химических предприятиях является разгерметизация технологического оборудования с последующим образованием проливов токсичной и/или взрывоопасной жидкости. Для корректной оценки потенциальной опасности подобного сценария немаловажную роль играет определение значений интенсивности испарения аварийной жидкости с поверхности пролива. В частности, данная величина позволяет определить какое количество вещества испарится с поверхности аварийного пролива. В настоящее время с целью ее нахождения применяются как полуэмпирические уравнения, так и модели вычислительной гидродинамики (CFD) [1-13].

Ряд полуэмпирических математических методов по определению интенсивности испарения рассмотрен в работе [1]. Как правило, полуэмпирические модели, основанные на корреляции соответствующих экспериментальных данных, точно предсказывают только те показатели, которые были использованы при верификации проводимых исследований. В качестве ключевого параметра для выбора наиболее приемлемой модели, предлагается использовать значения скорости воздушного потока над аварийным проливом. Так, при отсутствии подвижности воздуха (например, в невентилируемом помещении) рекомендуется пользоваться моделью Maskau и van Wesembeeck [2]; а когда скорость ветра превышает 1 м/с хорошее совпадение обеспечивает модель, описанная Neumes и др. [3]. При этом, следует отметить, что ни одна из указанных полуэмпирических моделей не способна спрогнозировать массовый поток или интенсивность испарения с погрешностью меньше, чем 30%.

Использование моделей вычислительной гидродинамики позволяет преодолеть ограничения существующих полуэмпирических моделей. Данный подход, основанный на решении трехмерных уравнений сохранения массы, импульса и энергии, показывает в большинстве случаев хорошее согласование с экспериментальными данными по испарению веществ [4-13]. Однако, использование

пакетных программ CFD для вычислений требуют доработки, в частности, по определению источников и стоков тепла, поведения жидкости, условий на границе раздела [10]. Кроме того, известно, что подобные программы обладают большой стоимостью, требуют высококвалифицированных специалистов, а время расчета одного варианта может занимать от нескольких часов до нескольких недель, что не всегда приемлемо, особенно в тех случаях, когда требуется оперативная оценка последствий аварии для принятия экстренных мер по их локализации и ликвидации.

Оперативное прогнозирование с учетом влияющих на испарение факторов и повышение точности прогноза может быть достигнуто путем применения нетрадиционных подходов и методов, таких, например, как методы искусственного интеллекта. В настоящее время в практике математического моделирования используются искусственные нейронные сети (ИНС), которые позволяют эффективно решать практические задачи экологии и промышленной безопасности [14-17]. Анализ подобного ряда работ показал, что ИНС позволяют значительно проще получать сопоставимые по точности результаты, чем расчетные и вычислительные методики, а также дают возможность учесть дополнительные факторы.

В данной статье проведено сравнение результатов расчетов по нахождению массового потока и интенсивности испарения с помощью нейросетевой модели с данными экспериментов по испарению этанола [4], циклогексана [18] и сжиженного бутана [19], а также с данными, полученными с помощью модели вычислительной гидродинамики.

### Искусственная нейронная сеть

Применение алгоритмов, имитирующих процессы поведения реальной природной нервной клетки, позволяет проводить «обучение» ИНС. Модель  $i$ -нейрона можно представить в виде схемы (рис. 1).

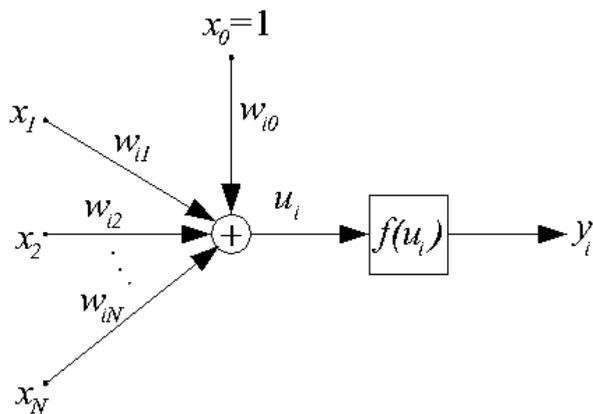


Рис. 1. Обобщенная структурная схема искусственного нейрона

Здесь  $x = [x_1, x_2, \dots, x_N]^T$  - вектор входных сигналов нейрона, а  $x_0 = 1$  - константный "псевдосигнал", сигнал поляризации (поляризатор). В общем случае,  $x_j$  относится к действительным числам, во многих моделях они дискретны и могут принимать значения из множества  $\{0,1\}$  или  $\{-1,1\}$ , однако в некоторых реализациях используются как комплексные числа.

$w_i = [w_{i1}, w_{i2}, \dots, w_{iN}]^T$  - является вектором весов входных сигналов  $i$ -нейрона. Веса входных сигналов применяются для вычисления взвешенной суммы  $u_i$  входных сигналов  $i$ -нейрона по формуле:

$$u_i = \sum_{j=0}^N w_{ij} \cdot x_j;$$

Вес  $w_{ij}$  для размерного входного сигнала  $x_j$  имеет обратную к нему размерность. Например, если  $x_j$  имеет размерность [кг/с], то размерность  $w_{ij}$  - [с/кг].

Взвешенная сумма входных сигналов  $u_i$  служит аргументом функции активации искусственных нейронов  $f(u_i)$ , которая, в свою очередь, определяет значение выходного сигнала  $y_i$ . Если значение функции превышает некоторый заранее определенный порог, то нейрон активирован и передает импульс следующим нейронам в сети. Существует множество различных функций, используемых в качестве активационных. Выбор ее вида является сложной задачей. Как правило, к ним выдвигаются требования иметь область значения  $[0,1]$  или  $[-1,1]$  и быть возрастающими. Примеры таких функций: сигнум, сигмоид. Иногда выдвигают дополнительное требование дифференцируемости.

Объединенные (путем передачи сигналов) между собой нейроны и образуют ИНС.

В простейших однослойных ИНС входные сигналы  $x_j$  нейрона являются входными сигналами сети, а выходные сигналы  $y_i$  нейрона – выходными сигналами сети. В многослойных сетях (рис. 2) роль

входных сигналов  $x_j$  некоторых нейронов играют выходные сигналы  $y_i$  предыдущих слоев ИНС.

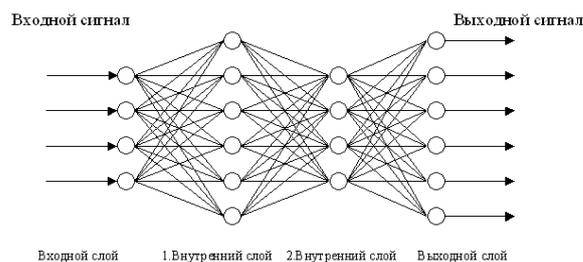


Рис. 2. Пример схемы многослойной ИНС с двумя внутренними слоями

ИНС способна обучаться решению задач, для которых не существует быстрых или работающих с приемлемой точностью теоретических или эмпирических алгоритмов. Наряду с обучающими данными требуется лишь задать некоторый критерий качества решения задачи, который сеть при своём обучении должна будет минимизировать или оптимизировать [20-21].

### Результаты расчетов

Для проверки адекватности нейросетевой модели было проведено сравнение вычисленных результатов с экспериментальными данными [4, 18-19]. Эксперименты по испарению этанола и циклогексана проводились на открытом воздухе при постоянных температурах, как на ровной, так и на сильно шероховатой поверхности. Поддон для пролива имел диаметр 0,74 м и был изолирован от грунта.

При обучении ИНС входными полями совместно служили параметры экспериментов как по испарению этанола, так и циклогексана (температура поверхности, скорость ветра на высоте 2 м, шероховатость, плотность вещества). Выходным полем являлись искомые данные массового потока.

Авторами ИНС реализованы на языке Python при помощи библиотеки PyBrain [22]. Нормализация входных сигналов задавалась как линейная, тогда как у выходного сигнала она оставалась нелинейной. Функцией активации являлся сигмоид с параметром, равный единице. Внутри каждой ИНС использовался один скрытый слой с 10 нейронами. Для обучения сетей использовалось 90% выборки. Во избежание ошибок скорость обучения сети была задана как 0,1. Количество итераций во время обучения не превышало 100 000. Время обучения ИНС составляло в среднем 1 минуту, что, в конечном счете, является весомым преимуществом использования сетей перед моделями CFD при срочной оценке последствий аварии.

Процедура получения результатов (кросс-валидация) заключалась в том, что после каждого обучения ИНС, на вход подавались входные сигналы в виде параметров эксперимента, который

для сети в процессе обучения был неизвестен; после чего сеть выдавала выходной сигнал.

Ниже в таблице приведены экспериментальные данные и расчетные значения по испарению этанола и циклогексана при различных температурах и скоростях ветра. Вычисленные значения с помощью нейросети по сравнению с численной модели CFD [13] точнее и значительно быстрее прогнозируют результаты экспериментальных данных. Значения, полученные ИНС, имеют разницу  $\delta$  к результатам измерений от 0,18 до 24,31% со средним значением 5,94%; тогда как у численной модели разница  $\delta$  от 0,6 до 47,4% со средним значением 12,69%.

Таблица 1 – Экспериментальные данные и вычисленные значения по испарению этанола и циклогексана.

№	T <sub>лиq</sub> , К	U <sup>1</sup> , м/с	Массовый поток J <sub>g,ss</sub> , г/с		
			Эксперимент	CFD [13]	ИНС
<b>Этанол</b>					
Ровная поверхность (шероховатость – 0,0002 м)					
1	310,15	1,4	0,456	0,393	0,461
2	309,65	1,9	0,533	0,523	0,532
3	325,15	1,7	1,02	1,06	1,10
Сильно шероховатая поверхность (0,04 м)					
4	305,65	1,4	0,488	0,536	0,437
5	310,15	1,8	0,679	0,9	0,69
6	324,65	1,8	1,32	1,96	1,641
<b>Циклогексан</b>					
Ровная поверхность (шероховатость – 0,0002 м)					
7	303	2,71	1,08	1,11	1,055
8	310	3,05	1,63	1,66	1,731
9	317	3,49	2,33	2,55	2,121
Сильно шероховатая поверхность (0,04 м)					
10	303	1,71	0,967	1,15	1,009
11	310	1,62	1,35	1,46	1,307
12	317	1,4	1,67	1,68	1,66

Другие эксперименты, например, с жидким бутаном [19], находившимся в теплоизолированном поддоне при температуре ниже температуры кипения, также представляют практический интерес для сравнения численной модели [9] с нейросетевой.

По практическим соображениям в расчетах с жидким бутаном была оставлена та же архитектура ИНС, которая описывалась выше. Входными сигналами послужили температура воздуха, температура жидкости и скорость ветра на высоте 9,15 м. Однако, при вычислениях нескольких экспериментов диапазон нормализации для температур и скорости ветра был увеличен. В противном случае сеть обучалась бы лишь в диапазонах параметров известных экспериментов, и при резко отличающемся входном сигнале выдавала бы статистическую ошибку. Так, например, в ходе подобных расчетов велика вероятность получить интенсивность испарения со знаком минус (сток), что абсолютно противоречит физике процесса.

Результаты расчетов и экспериментальные приведены в табл. 2.

Таблица 2 – Экспериментальные и расчетные значения по интенсивности испарения сжиженного бутана

№	T <sub>воз</sub> , К	T <sub>ж</sub> , К	U <sup>2</sup> , м/с	Интенсивность испарения, кг/(м <sup>2</sup> ·с)		
				Эксперимент	CFD [9]	ИНС
1	283	236,6	3,5	0,0037	0,0032	0,0035
2	282	241	3,0	0,0027	0,0035	0,0035
3	280	244,2	1,5	0,0023	0,002	0,0014
4	291	247,8	3,6	0,0046	0,0027	0,0051
5	289	237,6	5,8	0,0061	0,0045	0,0063
6	275	238,8	5,5	0,0056	0,0064	0,0051
7	287	236	6,9	0,0072	0,0066	0,006
8	282	263	1,0	0,002	0,0037	0,0015

Экспериментальное значение интенсивности испарения в опыте №8 почти в 2 раза меньше (85% отклонения) по сравнению с расчетом по модели CFD. Полученное расхождение авторы работы [9] обуславливают неопределенностью информации о метеорологических условиях (отсутствие детальной информации относительно степени устойчивости атмосферы). Вместе с тем, ИНС прогнозирует этот эксперимент с расхождением в 25%. При нахождении среднего значения разницы  $\delta$  к результатам измерений, эксперимент № 8 не учитывался, так как метеоусловия действительно могут сильно влиять на результаты численной модели [23]. Но несмотря на это, вычисленные значения по CFD модели с разницей  $\delta$  к экспериментальным данным от 13,04 до 41,3% со средним значением 18,29% уступают полученным по ИНС. Значения по ИНС получены с разницей  $\delta$  к результатам измерений от 5,41 до 39,13% со средним значением 14,24%.

## Заключение

ИНС позволяют за кратчайшие сроки спрогнозировать базовые характеристики испарения аварийной жидкости: интенсивность и/или массовый поток, и тем самым произвести корректную оценку потенциальной опасности испарения пролива. Результаты, полученные с помощью нейросетевой модели, хорошо согласуются с экспериментальными данными и превосходят вычисления с помощью численных моделей. При этом расчеты на ИНС можно улучшить, меняя архитектуру сети (добавление нейронов, скрытого слоя, варьирование видом функции активации и т.д.), увеличивая или уменьшая диапазон нормализации, а также используя дополнительные параметры испарения в качестве входных сигналов.

Очевиден и главный недостаток сетей перед численными и полуэмпирическими моделями – они не смогут спрогнозировать интенсивность

<sup>1</sup> U, м/с – скорость ветра на высоте 2 м

<sup>2</sup> U, м/с – скорость ветра на высоте 9,15 м

испарения без «обучающей» выборки. Следовательно, требуется проведение большого количества экспериментов с разными веществами и диаметром пролива. Однако, учитывая дороговизну подобных исследований, их могли бы заменить расчеты по численной модели. Тогда подобный «симбиоз» моделей позволил бы при любых обстоятельствах оперативно решать практические задачи экологии и промышленной безопасности.

### Литература

1. Mazzarotta B., Bubbico R., 2016, Predicting evaporation rates from pools, *Chemical Engineering Transactions*, 48, 49-54
2. Mackay, D., van Wesenbeeck, I., 2014, Correlation of chemical evaporation rate with vapour pressure, *Env. Science & Tech.*, 48, 10259-10263
3. Heymes, F., Aprin, L., Bony, A., Forestier, S., Cirocchi, S., Dusserre, G., 2013, An experimental investigation of evaporation rates for different volatile organic compounds, *Proc. Safety Prog.*, 1-6.
4. Habib, A., Schalaus, B., Acikalin, A., & Steinbach, J. (2009). Transient calculation of the boundary layer flow over spills. *Chem. Eng. Technol.*, 32, 306–311.
5. Rong, L., Nielsen, P.V., & Zhang, G.Q. (2010). Experimental and numerical study on effects of airflow and aqueous ammonium solution temperature on ammonia mass transfer coefficient. *J. Air Waste Manag. Assoc.*, 60, 419–428.
6. Rong, L., Elhadidi, B., Khalifa, H.E., Nielsen, P.V., & Zhang, G.Q. (2011). Validation of CFD simulation for ammonia emissions from an aqueous solution. *Comput. Electron. Agric.*, 75, 261–271.
7. Saha, C. K., Wu, W., Zhang, G., & Bjerg, B. (2011). Assessing effect of wind tunnel sizes on air velocity and concentration boundary layers and on ammonia emission estimation using computational fluid dynamics (CFD). *Comput. Electron. Agric.*, 78, 49–60.
8. Vik, T., & Pettersson Reif, B.A. (2011). Implementation of a new and improved evaporation model in Fluent, FFI-rapport 2011/00116, Norwegian Defence Research Establishment (FFI).
9. Старовойтова Е.В., Галеев А.Д., Поникаров С.И. Моделирование парообразования с поверхности аварийного пролива сжиженного газа // *Вестник Казанского технологического университета*. – 2012. – № 4. – С. 110-112.
10. Галеев А.Д., Дьяконов Г.С., Поникаров С.И., Салин А.А. Испарение аварийно химически опасных веществ из проливов при авариях на ОПО // *Вестник Казанского технологического университета*. – 2014. – № 24. – С. 238-241.
11. Raimundo, A.M., Gaspar, A.R., Oliveira, A.V.M., & Quintela, D.A. (2014). Wind tunnel measurements and numerical simulations of water evaporation in forced convection airflow. *Int. J. Thermal Sciences*, 86, 28–40.
12. Galeev, A.D., Salin, A.A., Poniukarov, S.I. (2015). Numerical simulation of evaporation of volatile liquids, *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 38, 39-49.
13. Старовойтова Е.В., Галеев А.Д., Поникаров С.И. Сравнительный анализ подходов для расчета интенсивности испарения с поверхности аварийного пролива // *Вестник Казанского технологического университета*. – 2016. – № 8. – С. 116-118.
14. Дударов С.П., Папаев П.Л., Кудряшов А.Н., Каримова Ю.А. Ячеечно-нейросетевые модели в задачах экологической безопасности // *Искусственный интеллект и принятие решений*. — 2011. — № 2. — С. 31–39.
15. Новиков В.В., Мартыненко А.А., Солонникова Н.В. Экспресс-оценка риска на предприятиях машиностроения методами нейронных сетей // *Вестник ДГТУ*. – 2013. – № 3-4. – С. 82–90.
16. Потылицына Е.Н., Липинский Л.В., Сугак Е.В. Использование искусственных нейронных сетей для решения прикладных экологических задач // *Современные проблемы науки и образования*. – 2013. – № 4. – С. 1–8.
17. Королев, Д.С. Прогнозирование пожароопасных свойств веществ и материалов с использованием дескрипторов и искусственных нейронных сетей // *Научно-теоретический журнал «Вестник БГТУ им. В.Г. Шухова»*. – 2015. – № 4. – С. 100–103.
18. Khajehnajafi S., Pourdarvish R. (2011). Correlations for mass transfer from a liquid spill: Comparisons and recommendations. *Process Saf. Prog.*, 30, 178–184.
19. Brighton, P.W.M. Further verification of a theory for mass and heat transfer from evaporating pools // *Journal of Hazardous Materials*. — 1990. — No 23. —pp. 215-234.
20. Круг П.Г. Нейронные сети и нейрокомпьютеры: Учебное пособие по курсу «Микропроцессоры». – М.: Издательство МЭИ, 2002. – 176 с.
21. Спицын В.Г., Цой Ю.Р. Применение искусственных нейронных сетей для обработки информации: методические указания к выполнению лабораторных работ. – Томск: Изд-во Томского политехнического университета, 2008. – 31 с.
22. URL: <http://pybrain.org/> (дата обращения: 01.06.2016)
23. Купцов А.И., Акберов Р.Р., Гимранов Ф.М. Влияние метеословий на динамику рассеивания опасного газа, сбрасываемого через технологические свечи // *Проблемы сбора, подготовки и транспорта нефти и нефтепродуктов*. – 2015. – № 4. – С. 171-177.

© А.И. Купцов – аспирант каф. промышленной безопасности КНИТУ, [artpb@yandex.ru](mailto:artpb@yandex.ru); Ф.М. Гимранов - д-р. техн. наук, проф., зав. каф. промышленной безопасности КНИТУ.

© Kuptsov A.I. – postgraduate department of industrial safety KNRTU; [artpb@yandex.ru](mailto:artpb@yandex.ru); Gimranov F.M. - doctor of technical sciences, professor, head of industrial safety chair KNRTU, [expert92@mail.ru](mailto:expert92@mail.ru).