

НЕЙРОСЕТЕВОЕ РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ИДЕНТИФИКАЦИИ НЕФТЕПРОДУКТОВ МЕТОДОМ СПЕКТРОСКОПИИ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ

Е.С. Трачевская;

А.В. Иванов, кандидат технических наук.

Санкт-Петербургский университет ГПС МЧС России

Приведены результаты исследования следов автомобильных бензинов спустя различные промежутки времени после нанесения методами атомно-силовой микроскопии и спектроскопии комбинационного рассеяния. Показана возможность идентификации следов нефтепродуктов с помощью нейронных сетей.

Ключевые слова: бензины, атомно-силовая спектроскопия, спектроскопия комбинационного рассеяния

NEURAL NETWORK FOR SOLVING INVERSE PROBLEMS IDENTIFICATION OF OIL PRODUCTS BY RAMAN SPECTROSCOPY

E.S. Trachevskaya; A.V. Ivanov.

Saint-Peterburg university of State fire servise of EMERCOM of Russia

The results of the study of traces of motor gasoline after different intervals after the application of the methods of atomic force microscopy and Raman spectroscopy. Demonstrated the possibility identifying traces of oil using neural networks.

Keywords: gasoline, atomic force spectroscopy, Raman spectroscopy

Проблема идентификации вида нефтепродуктов при обеспечении промышленной безопасности возникает при мониторинге трубопроводного транспорта нефтепродуктов, обнаружении аварийных разливов, проведении экспертных мероприятий на месте пожара или аварии [1].

Аварии, связанные с розливом нефтепродуктов, происходят достаточно часто, некоторые из них могут приводить к человеческим жертвам и серьезному материальному ущербу. В связи с этим важную роль играет ликвидация данных аварий в оперативном режиме, что осложняется зачастую невозможностью определения источников утечек в кратчайшее время [2].

В данной работе решается проблема идентификации вида нефтепродуктов с помощью нейронных сетей, которые являются одним из мощных средств анализа.

В последние несколько лет наблюдается рост интереса к нейронным сетям, они находят успешное применение в самых различных областях – бизнесе, медицине, геологии, физике. Нейронные сети вошли в практику везде, где нужно решать задачи прогнозирования, классификации и управления. Такие характеристики нейронных методов, как возможность нелинейного моделирования и сравнительная простота реализации, часто делают их незаменимыми при решении сложнейших многомерных задач.

Нейронные сети нелинейны по своей природе и представляют собой исключительно мощный метод моделирования, позволяющий воспроизводить чрезвычайно сложные зависимости. На протяжении многих лет в качестве основного метода в большинстве областей использовалось линейное моделирование, поскольку для него хорошо разработаны процедуры оптимизации. Там, где линейная аппроксимация неудовлетворительна и линейные модели работают плохо, а таких задач достаточно много, основным

инструментом становятся нейронные методы. Кроме того, нейронные сети справляются с «проклятием размерности», которое не позволяет моделировать линейные зависимости в случае большого числа переменных.

Нейронные сети учатся на примерах. Пользователь нейронной сети подбирает репрезентативную выборку, а затем запускает алгоритм обучения, который автоматически воспринимает структуру данных. При этом от пользователя, конечно, требуется какой-то набор эвристических знаний о том, как следует отбирать и подготавливать данные, выбирать нужную архитектуру сети и интерпретировать результаты, однако уровень знаний, необходимый для успешного применения нейронных сетей, гораздо скромнее, чем, например, при использовании традиционных методов статистики [3].

Целью исследования являлось определение возможности идентификации автомобильных бензинов методом спектроскопии комбинационного рассеяния спустя определенные промежутки времени.

При постановке эксперимента в качестве исследуемых объектов использовались автомобильные бензины АИ-92 [4], которые наносились на слюду, стекло и бумагу.

Учитывая возможные проблемы идентификации, при постановке эксперимента применялась КР-спектроскопия в сочетании с атомно-силовой микроскопией (АСМ). При применении методов КР-спектроскопии и АСМ их важным преимуществом, по сравнению с остальными методами идентификации, является практически полное отсутствие процесса пробоподготовки.

В качестве исследуемых объектов использовался автомобильный бензин АИ-92 [5], полученный на автомобильных заправках ООО «ПТК–Сервис». Исследования проводились на установке N-TegraSpectra, при использовании лазера с длиной волны 532 нм [6]. При проведении эксперимента исследуемые образцы выдерживались в течение различного времени (от 0 ч до 21 сут) [7].

На основании полученных данных возможно проведение аналитической оценки КР-спектров, при этом предполагается использование метода нейронных сетей, что позволит с достаточной точностью определять вид нефтепродукта и время, в течение которого он находился в среде.

Рассмотрим данные спектров комбинационного рассеяния бензина АИ-92, а также слюды (рис. 1–10).

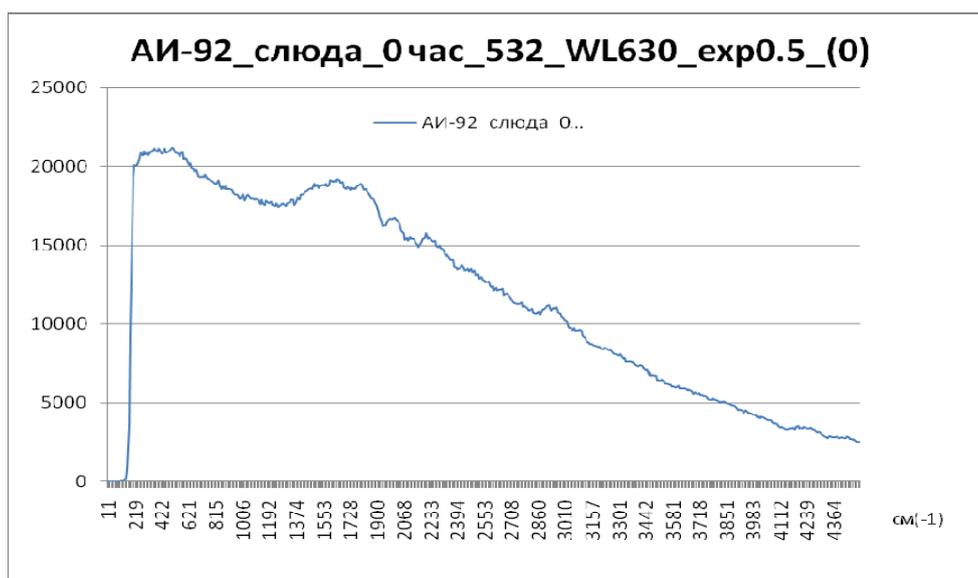


Рис. 1. Бензин АИ-92 спустя 0 ч на слюде

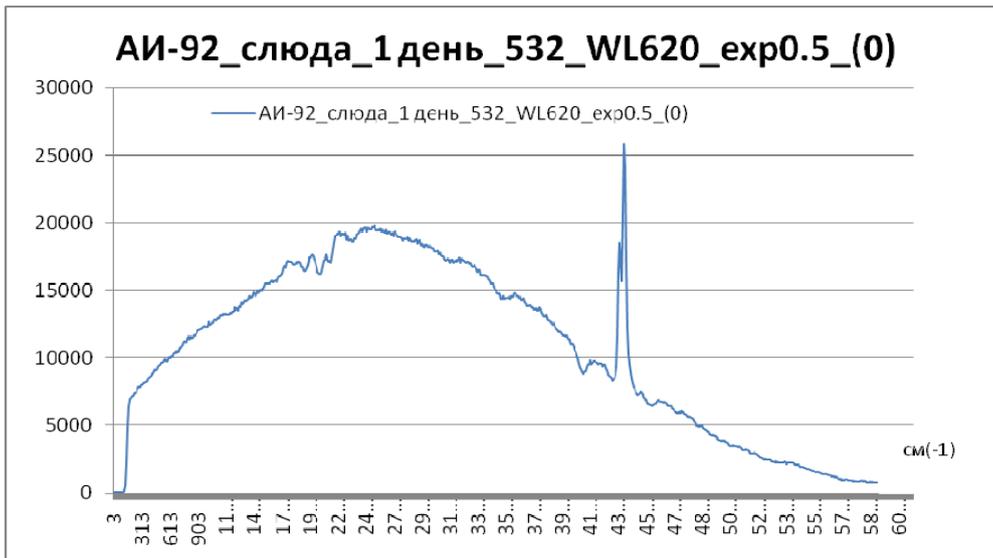


Рис. 2. Бензин АИ-92 спустя 1 сут на слюде

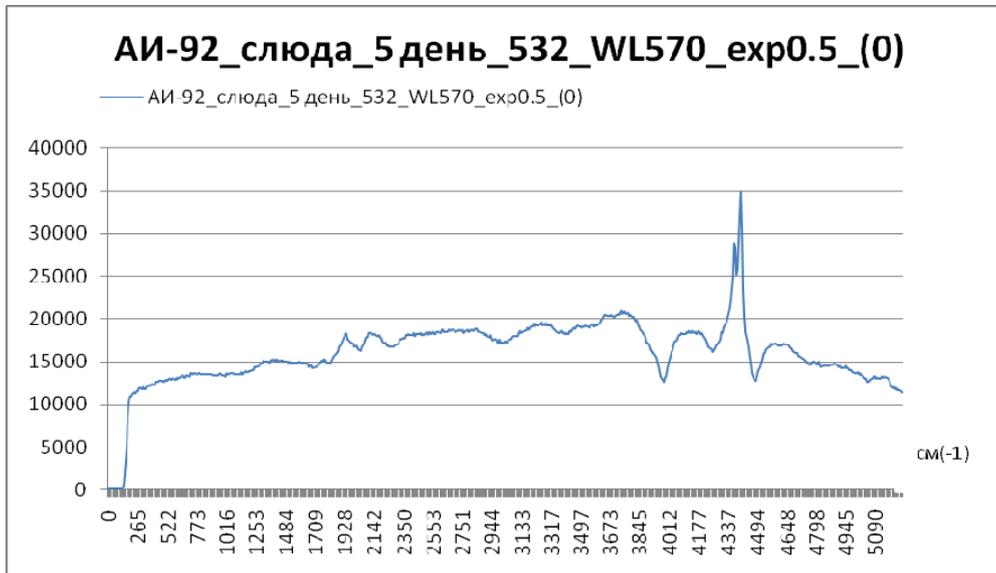


Рис. 3. Бензин АИ-92 спустя 5 сут на слюде

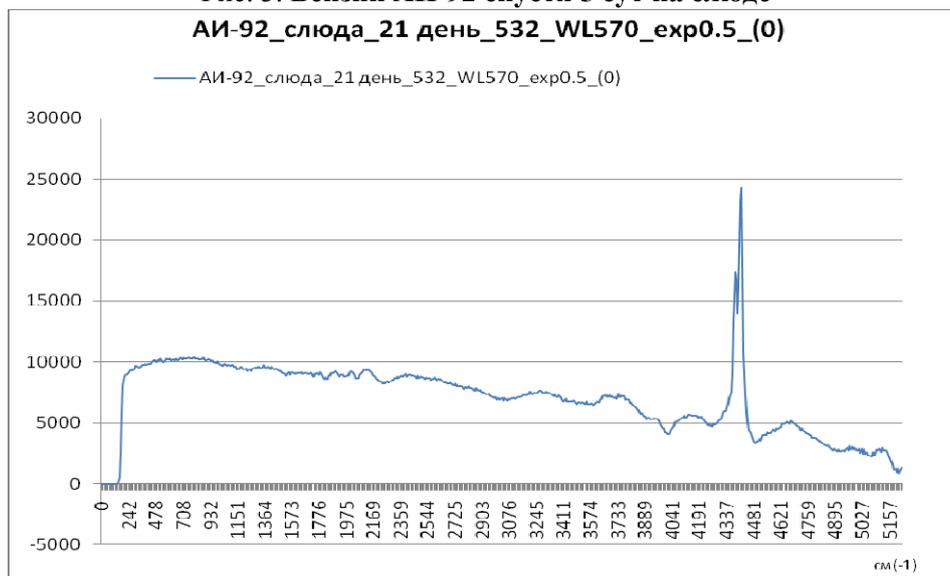


Рис. 4. Бензин АИ-92 спустя 21 сут на слюде

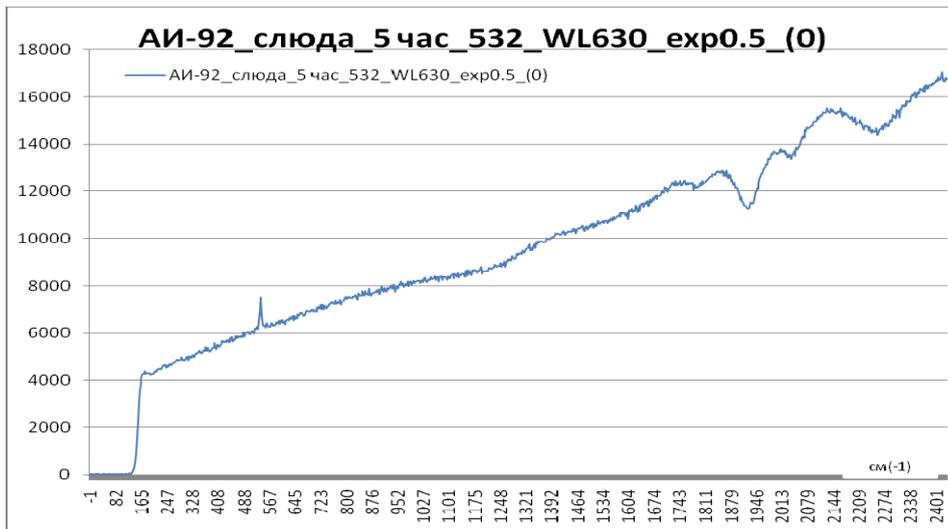


Рис. 5. Бензин АИ-92 спустя 5 ч на слюде

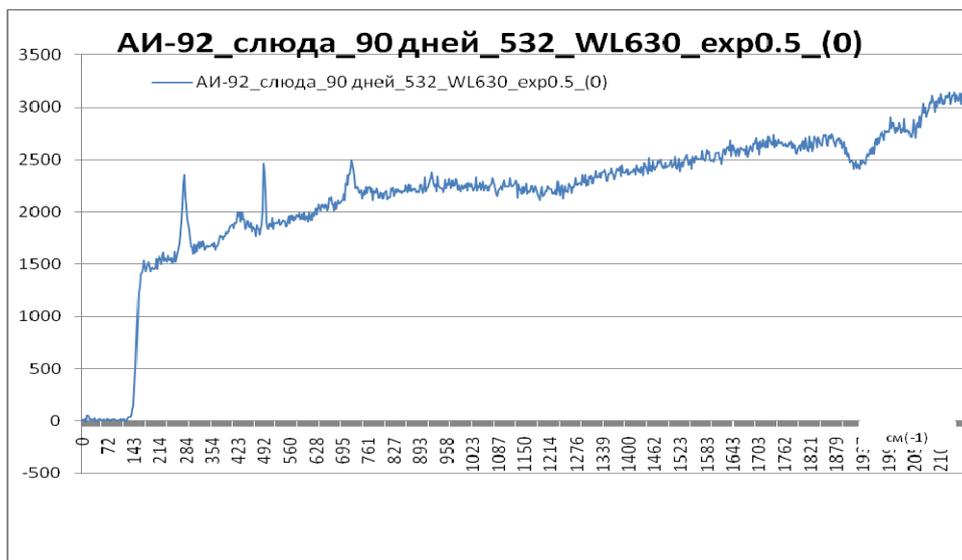


Рис. 6. Бензин АИ-92 спустя 90 сут на слюде

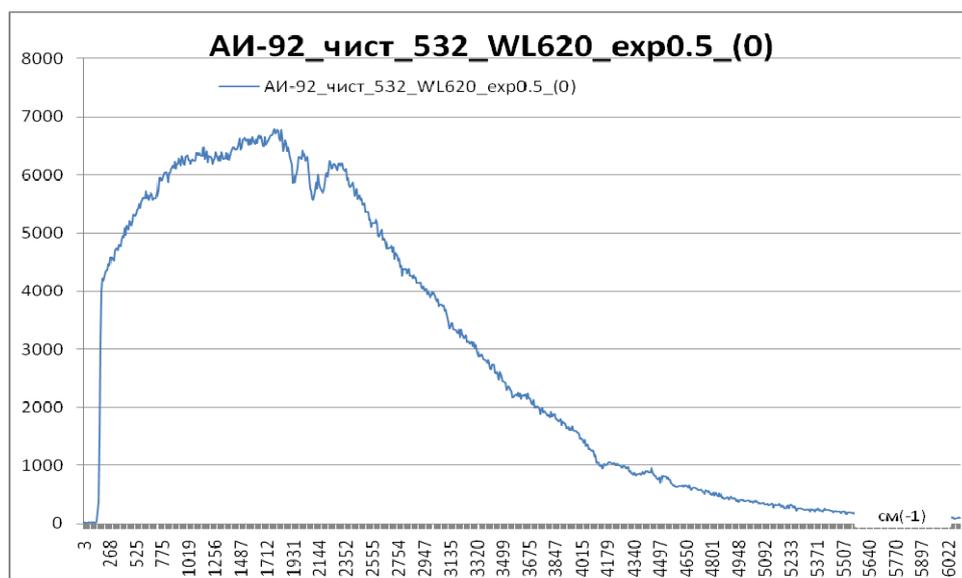


Рис. 7. Бензин АИ-92 чистый

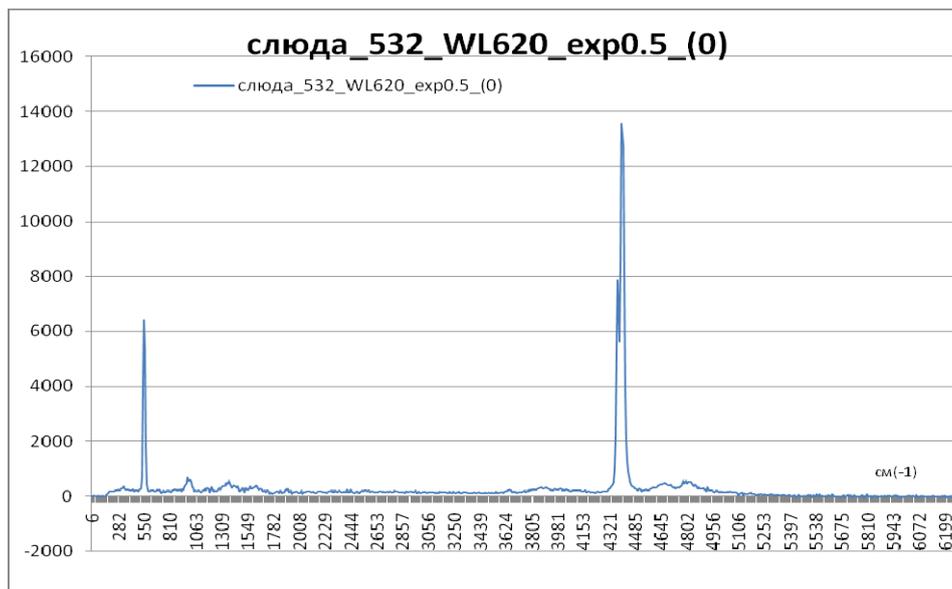


Рис. 8. Сланца



Рис. 9. Бензин АИ-92 спустя 1 день на стекле



Рис. 10. Бензин АИ-92 спустя 1 день на бумаге

Из рис. 1–10 видно, что пики бензина АИ-92 спустя различные промежутки времени абсолютно идентичны, что свидетельствует о возможности идентификации нефтепродуктов методом КР-спектроскопии спустя длительные промежутки времени с момента аварий или утечек.

Далее методом экспертной оценки выбирались пики из всего спектра, которые могли быть значимыми для дальнейшей экспертизы.

Всего было выбрано 10 пиков от 50 до 3500 см^{-1} , которые в дальнейшем будут являться входными параметрами в нейронной сети. Примеры пиков представлены на рис. 11, 12.

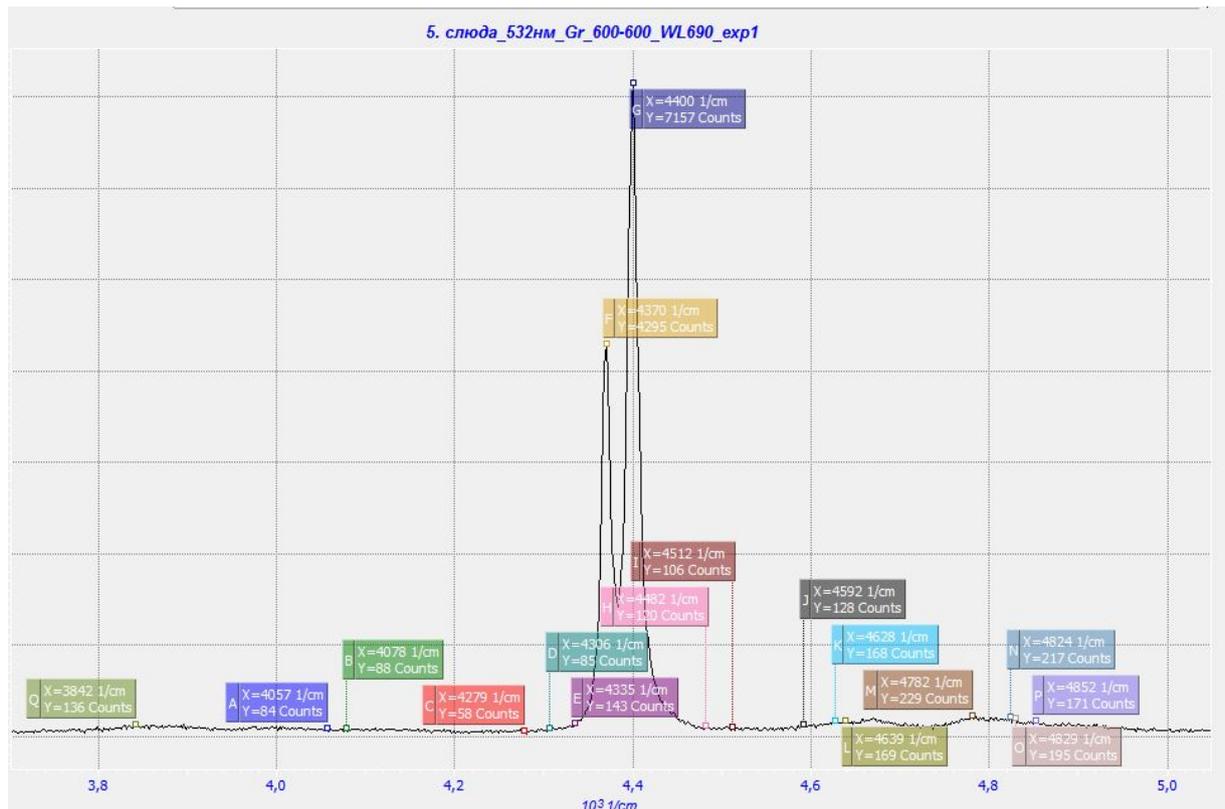


Рис. 11

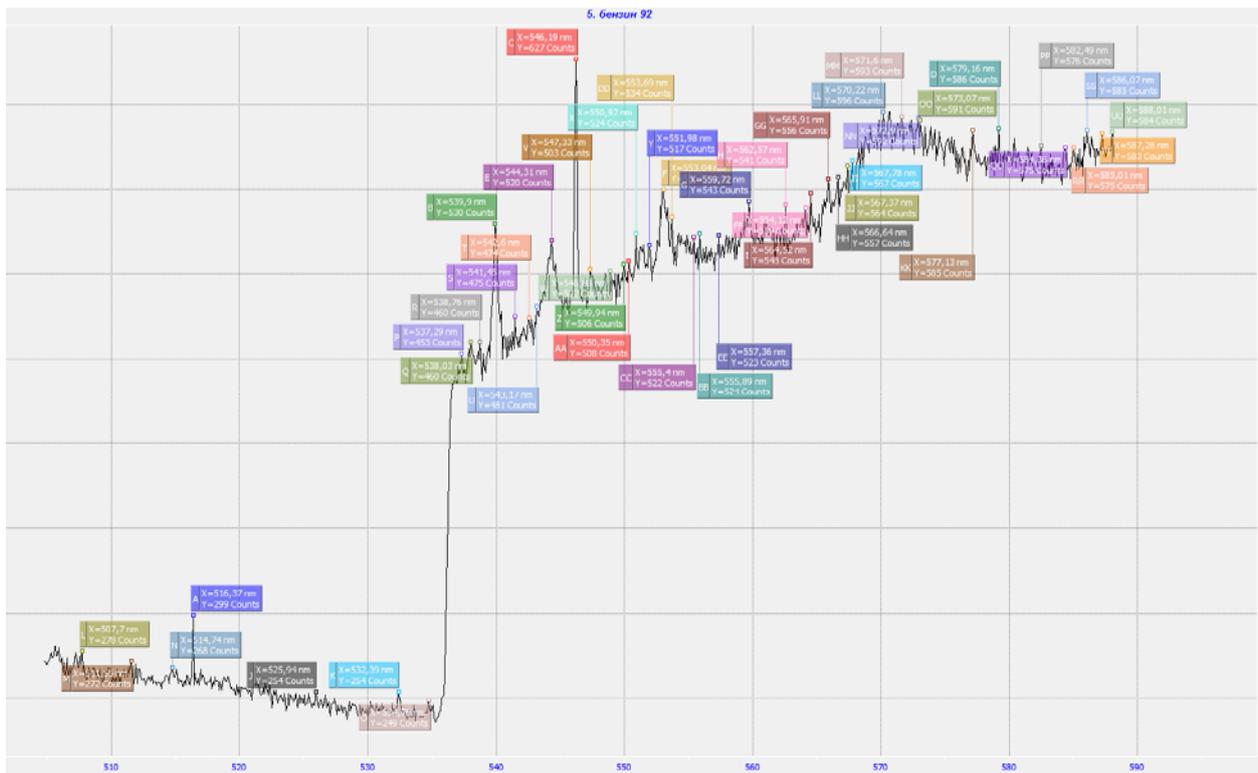


Рис. 12

Для того чтобы нейронная сеть приобрела способность решать конкретную задачу, то есть на каждый входной сигнал выдавать необходимый выходной сигнал, необходимо провести настройку параметров сети. Настройка производится по обучающей выборке, которая состоит из пар (<вход>, <желаемый выход>) – обучающих примеров [8].

Если в необученную нейронную сеть ввести входной сигнал одного из примеров обучающей выборки, то выходной сигнал сети будет существенно отличаться от желаемого выходного сигнала, определенного в обучающей выборке. Функция ошибки численно определяет сходство всех текущих выходных сигналов сети и соответствующих желаемых выходных сигналов обучающей выборки. Наиболее распространенной функцией ошибки является среднеквадратичное отклонение. Однако предложены и другие функции ошибки.

Цель обучения – минимизировать функцию ошибки, то есть найти такие значения параметров сети, при которых текущие выходные сигналы сети минимально отличаются от соответствующих желаемых выходных сигналов, заданных обучающей выборкой.

Для обучения нейронных сетей могут быть использованы различные алгоритмы. Можно выделить две большие группы алгоритмов – градиентные и стохастические. Градиентные алгоритмы обучения сетей основаны на вычислении частных производных функции ошибки по параметрам сети. Среди градиентных различают алгоритмы первого и второго порядков. В стохастических алгоритмах поиск минимума функции ошибки ведется случайным образом.

При обучении сетей, как правило, используется один из двух следующих критериев останова: останов при достижении некоторого малого значения функции ошибки или останов в случае успешного решения всех примеров обучающей выборки.

Перед обучением выполняется инициализация нейронной сети, то есть присваивание параметрам сети некоторых начальных значений. Как правило, эти начальные значения – некоторые малые случайные числа.

Для формирования обучающих выборок, инициализации и обучения в программах моделирования нейронных сетей используются специальные процедуры. Возможность использования многостраничного обучения является очень важной при решении практических задач с помощью нейронных сетей, моделируемых на обычных компьютерах.

Обучение – это итерационная процедура, которая при реализации на обычных компьютерах требует значительного времени.

Исследования сетей проводились в программе Statistica – программный пакет для статистического анализа, разработанный компанией StatSoft, реализующий функции анализа данных, управления данными, добычи данных, визуализации данных с привлечением статистических методов. За ноябрь было оценено около 8 000 сетей, которые тестировались аппаратно, и результаты сверялись с практическими значениями. Входные параметры представлены в табл. 1.

Таблица 1

x1	x2	x3	x4	x5	x6	x7	x8	x9	x10	день	Y
17125	16743	17658	19005	18639	17258	14424	11673	12350	11823	1	слюда 1 день
15044	18151	18038	17679	18415	19161	18431	16917	13178	10158	5	слюда 5 день
18641	16625	15038	13466	10997	14236	13756	12453	11463	10213	0	слюда 0 ч
17890	18332	18154	17126	14834	14912	14422	10616	10922	10140	21	слюда 21 день
17105	16204	15006	13408	10115	11024	12607	11022	10098	10093	5	слюда 5 день
17978	16952	16212	14905	12984	13339	13854	12675	11474	10470	21	слюда 21 день
17531	16569	15595	14139	11516	12154	13215	11829	10770	10277	5	слюда 5 день
17852	16844	16038	14688	12569	13004	13674	12436	11275	10416	0	слюда 0 ч
17222	16304	15168	13609	10500	11335	12774	11243	10283	10144	21	слюда 21 день
17380	16440	15387	13881	11021	11755	13000	11544	10533	10212	5	слюда 5 день
18761	17624	17294	16248	15559	15415	14973	14159	12709	10809	21	слюда 21 день
17222	16305	15169	13609	10501	11335	12774	11244	10283	10144	0	слюда 0 ч
17938	16919	16158	14837	12855	13234	13798	12601	11412	10453	1	слюда 1 день
18732	17599	17253	16197	15462	15337	14931	14103	12662	10796	5	слюда 5 день
17993	16965	16233	14930	13033	13378	13875	12703	11498	10477	0	слюда 0 ч
18465	17370	16885	15741	14586	14631	14550	13598	12242	10681	21	слюда 21 день
17360	16423	15359	13846	10955	11701	12972	11506	10501	10203	0	слюда 0 ч
18565	17456	17023	15912	14914	14895	14693	13787	12400	10724	5	слюда 5 день
19056	17876	17701	16753	16526	16196	15394	14716	13173	10936	21	слюда 21 день
17972	16947	16204	14895	12965	13323	13846	12664	11465	10468	0	слюда 0 ч
17907	16892	16114	14783	12751	13151	13753	12541	11362	10439	5	слюда 5 день
17302	16373	15279	13747	10765	11548	12889	11396	10410	10178	21	слюда 21 день
17827	16824	16005	14647	12490	12940	13639	12390	11237	10405	0	слюда 0 ч
19180	17983	17872	16966	16934	16525	15571	14951	13368	10989	5	слюда 5 день
18084	17043	16358	15086	13332	13619	14005	12875	11641	10516	1	слюда 1 день
17682	16699	15804	14397	12012	12554	13431	12115	11008	10342	5	слюда 5 день
19046	17868	17688	16736	16495	16170	15380	14698	13158	10932	0	слюда 0 ч
17612	16639	15707	14278	11783	12370	13332	11983	10898	10312	21	слюда 21 день
18276	17208	16625	15417	13966	14130	14281	13240	11945	10599	1	слюда 1 день
18733	17600	17255	16199	15465	15340	14933	14105	12664	10796	5	слюда 5 день
18741	17606	17266	16213	15491	15361	14944	14119	12676	10800	0	слюда 0 ч
17892	16879	16094	14759	12704	13112	13732	12513	11340	10433	5	слюда 5 день
18795	17653	17341	16306	15670	15505	15022	14223	12762	10823	21	слюда 21 день
17823	16820	15999	14640	12476	12929	13633	12382	11230	10403	0	слюда 0 ч

В результате получилось несколько сетей, у которых параметр ошибки тестирования был менее 1 %. Структура сети приведена в табл. 2.

Таблица 2

Index	Net. name	Training perf.	Test perf.	Validation perf.	Training error	Test error	Validation error	Training algorithm	Error function	Hidden activation	Output activation
7	MLP 10-8-1	0,849485	0,41982	0,658075	8,59815	21,80152	28,815	BFGS 61	SOS	Tanh	Logistic
20	MLP 10-14-1	0,869424	0,290334	0,642317	7,57828	24,25564	30,377	BFGS 40	SOS	Logistic	Logistic

Результаты

1. Сеть для всех сред

факт. время образца	проверка сети 20.y_(t)	x1	x2	x3	x4	x5	x6	x7	x8	x9	x10
1	3,33709	14667	11670	8935	11874	7976	6901	10352	7164	4724	10108
5	3,33722	10327	14876	16772	16723	8686	7497	7986	6380	8546	6306
21	21	9722	10583	16551	16054	7764	5723	6404	7479	1495	5023
0	0	10255	14380	6835	15874	6623	8209	9010	8732	1918	5981

Вывод: сеть работает хорошо при малом времени нахождения образца на поверхности.

2. Сеть для твердой поверхности

факт. время образца	проверка сети 1.y_(t)	x1	x2	x3	x4	x5	x6	x7	x8	x9	x10
1	21	8945	9166	9077	8563	7417	7456	7211	5308	5461	5070
5	4,99951	10837	6813	17144	11766	9552	6814	13343	9369	5337	10089
21	0	16067	17033	11203	9848	5538	5077	3456	6997	1821	10133
0	4,97936	16747	9753	16764	8233	7621	6305	10567	3672	10772	2477

Вывод: сеть работает хорошо во всех диапазонах, но существуют определенные ограничения по твердой поверхности.

Исходя из полученных результатов, можно сделать вывод, что экспериментально полученная модель решает задачи при экспертной оценке на стадии проведения контрольных мероприятий при мониторинге объектов нефтегазового комплекса, проведения экспертных действий на местах возможных чрезвычайных ситуаций. С помощью этой модели появилась возможность определять время нахождения образца, несмотря на сложность состава, с достаточной точностью. Тип образца можно определить, построив классификационную нейронную сеть по образцам различного типа либо иным более точным способом.

Литература

1. James G. Speight. Handbook of Petroleum Analysis. 2001.
2. База данных экономической статистики о странах мира, рынках и компаниях. URL: <http://www.statinfo.biz/> (дата обращения: 05.04.2015).
3. Головкин В.А. Нейронные сети: обучение, организация и применение. М., 2001. Кн. 4. 256 с.
4. ТУ 38.001165-97. Бензины автомобильные экспортные. URL: <http://www.chemister.ru> (дата обращения: 12.01.2016).
5. ГОСТ 2084-77. Бензины автомобильные. Технические условия.
6. Mark Ahmadjian, Chris W. Brown. Petroleum Identification by Laser Raman Spectroscopy // Analytical Chemistry. 1976. Vol. 48. № 8.
7. Миронов В.Л. Основы сканирующей зондовой микроскопии. Н. Новгород, 2004.
8. Адаптивное построение иерархических нейросетевых классификаторов / С.А. Доленко [и др.] // Нейрокомпьютеры: разработка, применение. 2005. № 1-2. С. 4-1.

