



Применение мультимодального трансформера для прогнозирования выходных параметров насыщенных углеводородных соединений из состава тяжелой нефти в присутствии катализаторов

¹П.А. Пылов, ORCID: 0000-0003-3214-6592 <pylovpa@kuzstu.ru>

¹Р.В. Майтак, ORCID: 0009-0009-4353-6925 <maytak.roman@mail.ru>

²Е.Г. Зайцева, ORCID: 0000-0003-1269-329X <zaitsevaeg@mail.ru>

¹ Кузбасский государственный технический университет имени Т.Ф. Горбачева, 650000, Россия, г. Кемерово, ул. Весенняя, д. 28.

² Казанский национальный исследовательский технологический университет, 420015, Россия, г. Казань, ул. Карла Маркса, д. 68.

Аннотация. Предложена интеллектуальная модель на базе мультимодального трансформера для решения задачи прогнозирования времени и площади выхода различных углеводородных компонентов из состава тяжелой нефти при использовании катализаторов на основе шести металлов: никеля, меди, марганца, свинца, цинка и натрия. В качестве входных данных интеллектуальная модель принимает две модальности: хроматограмму образца чистой сырой нефти, представленную в виде графической информации и сопровождающие её табличные данные. На выходе мультимодальный трансформер позволяет получить прогнозные табличные данные, которые формализуют перераспределенный групповой состав нефти и описывают как наименования полученных углеводородов, так и две их качественные характеристики: время выхода спектров компонентов и их относительную площадь. Моделирование прогноза превращений высокомолекулярных соединений в низкомолекулярные на основе разработанной модели позволяет существенно сократить временные, аппаратные и человеческие ресурсы, необходимые для выбора нужного типа катализатора в нефтехимических лабораториях. В процессе исследования было обнаружено, что обучение интеллектуальной модели на данных одного месторождения позволяет в дальнейшем выполнять аналогичный прогноз с приемлемой точностью для данных другого месторождения тяжелой нефти. Величина ошибки прогноза интеллектуальной модели удовлетворяет требованиям, предъявляемым нефтехимической лабораторией для практического применения мультимодального трансформера.

Ключевые слова: тяжелая нефть; интеллектуальный анализ данных; интеллектуальная обработка хроматограмм тяжелой нефти; мультимодальный трансформер; компьютерное зрение.

Для цитирования: Пылов П.А., Майтак Р.В., Зайцева Е.Г. Применение мультимодального трансформера для прогнозирования выходных параметров насыщенных углеводородных соединений из состава тяжелой нефти в присутствии катализаторов. Труды ИСП РАН, том 35, вып. 5, 2023 г., стр. 229–244. DOI: 10.15514/ISPRAS-2023-35(5)-15.

Application of a Multimodal Transformer to the Prediction of the Yield of Saturated Hydrocarbon Compounds from Heavy Crude Oil in the Presence Of Catalysts

¹ P.A. Pylov ORCID: 0000-0003-3214-6592 <pylovpa@kuzstu.ru>

¹ R.V. Maitak ORCID: 0009-0009-4353-6925 <maytak.roman@mail.ru>

² E.G. Zaitseva ORCID: 0000-0003-1269-329X <zaitsevaeg@mail.ru>

¹ T.F. Gorbachev Kuzbass State Technical University,
28, Vesennya st., Kemerovo, 650000, Russia.

² Kazan National Research Technological University,
68, Karl Marx st., Kazan, 420015, Russia.

Abstract. Heavy oil fields are a promising energy source in the future due to the depletion of natural sources of light oil. However, extraction, transportation and refining of heavy oil is significantly more complicated than light oil - difficulties arise at almost all technological stages. One of such stages is laboratory analytics of heavy oil and selection of the most optimal catalyst for extraction of required fractions from crude oil sample. Different catalysts are actively used in petrochemical laboratories, but special attention is paid to those of them, the basis of which is metal. In this study, catalysts based on six different metals namely zinc, nickel, copper, manganese, lead and sodium were analyzed. In order to analyze the yield ratios of the required components from the crude heavy oil composition, it is necessary to test different types of catalysts sequentially on a base sample. The yield of different hydrocarbons on a small volume of oil can be reliably estimated by chromatographic study, which takes about 68 minutes for both the base oil sample and the different catalysts. Since testing 6 different catalysts would require almost 7 hours of chromatographic analysis, a rational solution would be to apply data mining techniques to this task. A multimodal transformer model was proposed to solve this problem. It takes as input two modalities: a chromatogram of a sample of pure crude oil presented as graphical data and accompanying tabular data, which are also generated by the chromatograph and consist of text and numbers. At the output, the model produces predictive tabular data that formalize the redistributed group composition of the oil and describe both the names of the newly produced hydrocarbons and their two qualitative characteristics: time and yield area. Obtaining the prediction makes it possible to significantly reduce the time, hardware and human resources required to select the right type of catalyst in petrochemical laboratories. In the process of the study, it was found that training of the intellectual model on the data of one field allows to perform further similar forecast with acceptable accuracy for the data of another heavy oil field. The magnitude of the prediction error of the intelligent model satisfies the requirements set by the petrochemical laboratory for practical application of the multimodal transformer.

Keywords: heavy oil; intellectual analysis of data; intelligent processing of heavy oil chromatograms; multimodal transformer; computer vision.

For citation: Pylov P.A., Maitak R.V., Zaitseva E.G. Application of a multimodal transformer to the prediction of the yield of saturated hydrocarbon compounds from heavy crude oil in the presence of catalysts. *Trudy ISP RAN/Proc. ISP RAS*, vol. 35, issue 5, 2023. pp. 229-244 (in Russian). DOI: 10.15514/ISPRAS-2023-35(5)-15.

1. Введение

Нефть является одним из наиболее популярных и востребованных ресурсов в мировой топливно-энергетической сфере [1]. Как правило, природная смесь сложных углеводородов не используется промышленностью в своём первозданном виде, так как для получения технически ценного материала – например, моторного топлива, необходима её переработка. Стоит заметить, что процесс переработки различается для легких, средних и тяжелых нефтей – такая классификация принята на основании различающейся плотности нефти, добываемой из разных месторождений. Поскольку в легкой нефти содержание бензиновых и масляных фракций преобладает над нефтью других типов, она считается наиболее ценной для топливной промышленности. Однако, статистика по добычи нефти показывает, что

фокусирование большей части мировой нефтедобычи (70%) на легкой нефти значительно истощает её запасы в фонде природных ресурсов [2], что заставляет нефтяные компании переходить к разработкам более сложных пластов тяжелой высоковязкой нефти, требующих иного технологического подхода к процессу нефтедобычи. Кроме усложнения процесса добычи нефти, усложняется и этап её переработки, поскольку теперь для извлечения легких нефтяных фракций необходимо применять методы каталитического облагораживания и акватермолиза.

Принимая во внимание планомерное истощение разведанных месторождений легкой нефти, а также факт сосредоточения основных мировых запасов углеводородов в составе тяжелой нефти [3], следует отметить, что Российская Федерация занимает третье место в мире по запасам этого труднодобываемого сырья [4]. Совокупность перечисленных факторов подчеркивает актуальность технологической оптимизации процесса переработки тяжелой нефти. Выполнить оптимизацию переработки можно разными способами, например:

1. Совершенствованием оборудования;
2. Видоизменением химической технологии;
3. Автоматизацией одного из этапов трудоемкого процесса переработки тяжелой нефти.

Третий способ включает в себя различные методы химического анализа, в том числе групповой анализ на основе хроматографии. Она позволяет разделить тяжелую нефть на группы химически однородных соединений, поэтому является основным методом для исследования компонентного состава фракций насыщенных и ароматических углеводородов, входящих в состав тяжелой нефти. Несмотря на то, что хроматография выполняется с помощью специальных регистрирующих приборов – хроматографов, которые позволяют получить хроматограммы (здесь и далее в контексте статьи под семантикой термина «хроматограмма» понимается графическое представление непрерывных изменений уровня сигнала хроматографа, зависящих от времени выхода различных компонентов тяжелой нефти) и таблицы селективно определенных органических компонентов, анализ введенного образца тяжелой нефти на этом этапе не заканчивается, а, наоборот, только начинается – хроматограф выступает в роли инструмента, позволяя определить состав вязкой сложной смеси углеводородов, а процесс непосредственной интерпретации результатов остается за исследователем.

Прогнозирование результатов хроматографии тяжелой нефти является творческой задачей, так как она не может быть решена с помощью прямых инструкций методами классического программирования. Наиболее распространенным инструментом для автоматизации подобных задач выступает интеллектуальный анализ данных, на котором основаны алгоритмы машинного обучения. Имплементирование методов прикладного искусственного интеллекта в предметную область переработки тяжелой нефти позволит решить следующие подзадачи:

- Получить на выходе интеллектуальной модели предсказанные табличные данные, на основе которых экспертами формируется прогнозная хроматограмма нефти после катализа;
- Выявить закономерности и особенности в изменениях хроматограмм образца сырой тяжелой нефти при введении в неё катализаторов различного типа и химической природы.

Поскольку автоматизация задачи прогнозирования результатов хроматограмм тяжелой нефти подразумевает генерацию новых табличных данных на основе как графической, так и табличной информации, требуется разработать такую архитектуру интеллектуальной модели, которая будет объединять методы компьютерного зрения и обработки символьных данных (числовых и текстовых) в рамках одной общей структуры.

2. Обзор существующих интеллектуальных методов автоматизации процессов в нефтегазовой области

Выполнение обзора по уже разработанным интеллектуальным моделям, автоматизирующим какой-либо технологический процесс в нефтегазовой области, позволило сделать следующие выводы:

1. В научной среде активно исследуется интеграция методов искусственного интеллекта в задачу оптимизации добычи нефти и газа:
 - В работе [5] оценивается эффективность достоверного прогнозирования критически важных параметров пластовых флюидов (в том числе давление насыщения нефти газом, плотность нефти и газа в общей смеси) на основе искусственных нейронных сетей. В рамках работы авторы сообщают, что практическое применение интеллектуального решения позволяет оптимизировать процесс планирования, разведки и разработки нефтяных месторождений;
 - Научная статья [6] подчеркивает необходимость использования моделей глубокого обучения для сокращения длительности технологических стадий разработки новых месторождений нефти и газа. Относительно классической технологии, автором публикации доказывается не только факт существенного сокращения общих временных затрат, требуемых на разработку месторождения, но и сопутствующий эффект снижения проектных инвестиционных рисков за счет устранения субъективной компоненты, носящей природу человеческого фактора;
 - Автоматизация процесса разведки нефтяных месторождений на основе программной реализации модели случайного леса подробно рассмотрена в работе [7], авторы которой решают проблему ускоренной обработки данных геологоразведки, позволяя тем самым снизить финансовые затраты на исследование новых источников нефти более чем на 10%.
2. Многие исследователи данных смещают фокус своего внимания на экономическую составляющую нефтяной промышленности, используя в качестве инструментария алгоритмы прикладного машинного обучения:
 - В работе [8] был проведен анализ большой выборки финансовых показателей крупной российской нефтегазовой компании на основе модели персептрона. Основной целью исследования авторы обозначили формирование прогноза прибыли компании от продажи нефти на следующий календарный год. На основе разработанной гипотезы авторы получили прогнозное значение чистой прибыли компании, однако, в рамках исследования [8] не производили сравнения предсказанного результата с фактическим значением.
3. Наблюдается низкая активность применения интеллектуальных методов в задаче анализа нефти как таковой. Например, в работе [9] исследователи анализировали процесс сбора проб нефти автоматическими пробоотборниками из трубопроводов. Авторы сообщают, что автоматический сбор является непредставительным, поэтому имплементация технологий искусственного интеллекта может существенно снизить величину ошибки анализа проб.

Другие немногочисленные (чаще всего единичные) публикации посвящены решению конкретных узкоспециализированных задач в рамках объемного (с точки зрения составных этапов) процесса анализа нефти и нефтепродуктов, который до сих пор большей своей частью остаётся неавтоматизированным.

4. Вероятнее всего, широкое применение методов искусственного интеллекта для автоматизации задач разведки и разработки нефтяных месторождений, а также активная программная реализация интеллектуальных прогностических моделей для

предсказания экономической эффективности добычи жидкого углеводородного сырья напрямую связано с повышением общей коммерциализации нефтедобывающего комплекса.

Из обзора следует, что в нефтегазовой отрасли большая часть наукоемких исследований, связанных с применением интеллектуальных методов, сосредоточена в области добычи полезных ископаемых, а не их непосредственной аналитики. Однако, цифровая трансформация предметной области нефтепереработки возможна только при условии автоматизации каждого составного процесса, в том числе и процессов, направленных на исследование нефти: ярким примером является задача прогнозирования табличных данных хроматограмм образцов тяжелого высоковязкого углеводородного сырья при введении в него катализаторов.

В статье приводятся результаты решения данной задачи на основе интеллектуальной модели, позволяющей прогнозировать перераспределения разных компонентов нефти при вводе в базовый образец того или иного катализатора. В качестве основы обучающей выборки выступают хроматограммы сырой тяжелой нефти и соответствующие им табличные данные хроматографа.

3. Постановка задачи предметной области

Подготовка выборок (обучающей и тестовой) для разработки интеллектуальной модели велась на основе данных научно-исследовательской лаборатории «Внутрипластовое горение» Казанского (Приволжского) федерального университета. Поставщиком образцов является эксплуатируемое Ашальчинское месторождение тяжелой высоковязкой нефти, территориально находящееся в Альметьевском районе Республики Татарстан.

Пригодные для анализа моделью данные были получены на основе проведения хроматографического исследования «чистых» образцов сырой тяжелой нефти, а также путем выполнения хроматографии тех же самых образцов после их первоначального взаимодействия с различными металлическими катализаторами в автоклаве. В качестве основы для создания разных катализаторов участвовали шесть металлов: цинк, никель, медь, свинец, марганец и натрий. Таким образом, по отличающимся образцам сырой тяжелой нефти было суммарно получено семь хроматограмм (включая исследование базового образца). Время, требуемое для получения одной хроматограммы, не зависело от типа применяемого катализатора, поэтому было одинаковым для всех исследований и составляло 68 минут.

Отметим, что одно хроматографическое исследование тяжелой нефти позволяет получить сразу два типа информации: графическую, представленную в виде хроматограммы (рис. 1) и символьную, формализованную в виде табличных данных (рис. 2).

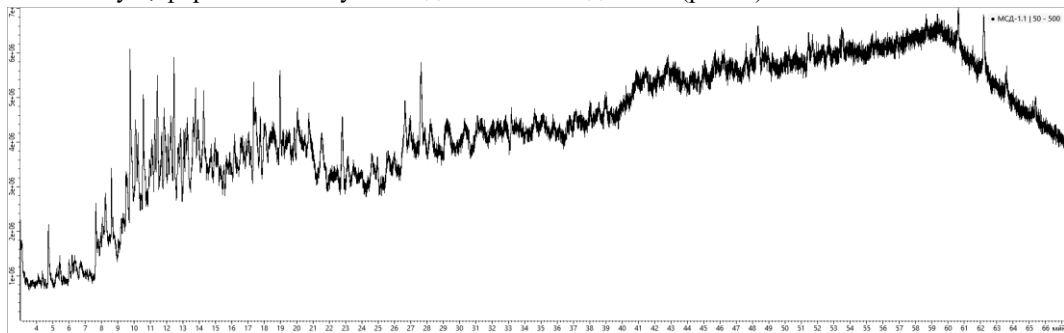


Рис. 1. Хроматограмма образца сырой тяжелой нефти.
Fig. 1. Chromatogram of crude heavy oil sample.

TIC, Ашальчинское CO2 при 200 оС			
Компонент	Время (мин)	Площадь (мВ*с)	Площадь (%)
бензотиофен	9,758	17267704,48	5,018665
4,9-Dimethylnaphtho[2,3-b]thiophe	21,546	16368772,31	4,757401
триметилдибензотиофен	25,602	13334638,39	3,875563
тетраметилдибензотиофен	29,238	12154576,01	3,532592
Benzene, 1,1'-ethylidenebis[4-ethyl-	27,622	11906630,7	3,460529
алкилбензол C16H26	12,448	11783965,5	3,424878
4-метилдибензотиофен	17,472	11682157,2	3,395288
триметилдибензотиофен	26,648	11368077,66	3,304005
алкилбензол C20H34	22,793	11198608,26	3,25475
бензотиофен	9,507	10308088,48	2,995931
бензотиофен	11,854	9803665,463	2,849326
2-и 3-метилдибензотиофен	17,988	8735080,607	2,538753
бензотиофен	11,434	8706273,44	2,530381
алкилбензол C15H24	10,564	8660651,325	2,517121
алкилбензол C19H32	18,97	8436103,279	2,451859
тетраметилнафталин	12,875	8209904,899	2,386117
1-метилдибензотиофен	18,522	7597563,33	2,208147
триметилфенантрен	28,196	7095569,118	2,062248
бензотиофен	12,739	7000756,881	2,034692
алкилбензол C18H30	17,346	6881246,649	1,999957
триметилдибензотиофен	24,609	6343488,301	1,843664
диметилфенантрен	23,147	5965456,548	1,733793
бензотиофен	10,094	5839176,837	1,697091
бензотиофен	11,28	5280047,245	1,534587
алкилбензол	8,246	5168975,952	1,502305
Phenanthrene, 9,10-dihydro-1-meth	16,655	5087925,716	1,478749
алкил-дигидроантрацен	26,97	5013743,813	1,457189
1,1'-Biphenyl, 3,4-diethyl-	17,758	4899112,432	1,423872
Алкилбензол C10	4,734	4842567,827	1,407438
триметилнафталин	11,101	4813859,904	1,399095
4,9-Dimethylnaphtho[2,3-b]thiophe	20,005	4740126,948	1,377665
триметилнафталин	10,245	4587091,694	1,333187
бензотиофен	13,283	4491292,826	1,305344
алкилбензол C13H20	7,662	4431553,469	1,287981
4,9-Dimethylnaphtho[2,3-b]thiophe	20,732	4428490,33	1,287091
бензотиофен	13,072	4368290,006	1,269595
алкилбензол C14H22	8,607	4219503,238	1,226351

Рис. 2. Выдержка из табличных данных органических соединений в составе образца, отсортированных по убыванию площади на хроматограмме.

Fig. 2. Excerpt from tabulated data of organic compounds in the sample, sorted by decreasing area on the chromatogram.

На основе полученной информации (рис. 1, 2), исследователь нефтехимической лаборатории получает первичный анализ компонентов, входящих в состав тяжелой нефти. В зависимости от поставленной технологической задачи, ключевую роль играют отдельные компоненты в составе сложной смеси углеводородов. Для того, чтобы повысить процент выхода приоритетного компонента из образца тяжелой нефти, используются катализаторы на основе металлов.

Однако, не существует достоверной эвристики, по которой применение конкретных катализаторов позволит заранее предопределить получение процентных соотношений требуемой фракции, поэтому специалист нефтехимической лаборатории должен самостоятельно анализировать перераспределение разных компонентов при вводе того или иного катализатора в автоклав. Получить достоверные результаты при малых объемах нефтяного сырья представляется возможным только при использовании

хроматографического исследования, поэтому лаборатории вынуждены проводить данную процедуру анализа нефти многократно (по числу катализаторов).

Таким образом, основной задачей исследования является оценка эффективности применения инструментов интеллектуального анализа данных для решения задачи прогнозирования выходных параметров (времени и площади выхода) углеводородных компонентов из состава тяжелой нефти при введении в неё катализаторов на основе шести металлов: меди, никеля, цинка, свинца, марганца и натрия.

4. Описание метода решения задачи

Стоит заметить, что эффективность интеллектуальной модели существенно зависит от того, каким образом будут организованы обучающие данные. Несмотря на то, что хроматограмма (рис. 1) и её табличное сопровождение (рис. 2) отражают результаты одного хроматографического анализа, они не могут полностью заменить друг друга по двум основным причинам:

1. Хроматограмма непрерывно регистрирует изменение величины аналитического сигнала в течении всего временного интервала исследования. В табличных данных регистрируются лишь пики, которые характеризуют детектирование уникальных углеводородных компонентов в составе тяжелой нефти хроматографом, а задать сколь угодно малый интервал регистраций для табличных данных не представляется возможным.
2. Следствие из первого пункта: в табличных данных фиксируется лишь площадь и время выхода компонента. Однако, без сопровождающей хроматограммы, представить фиксированную площадь на ограниченном временном интервале на плоскости можно неединичным способом, при этом разные вариации представления кривой, имеющей одну и ту же площадь, будут представлять разные образцы тяжелой нефти. Таким образом, восстановить исходную хроматограмму по табличным данным невозможно.

В силу отсутствия возможности установления малого интервала времени для регистрации табличных данных (ограничение большинства хроматографов), возникает проблема точного аналитического задания временного ряда. Решение этой проблемы может быть найдено через аппроксимацию данных с хроматограммы (выполняемой вручную) или через применение интеллектуальных моделей, функционирующих на основе алгоритмов компьютерного зрения. Авторами данной статьи был избран второй вариант, так как он предполагает наиболее полную автоматизацию поставленной задачи предметной области.

В рамках исследования анализировались хроматограммы, получаемые с хроматографа и имеющие разрешение 600 dpi. Для анализа устойчивости интеллектуальной модели разрешение входных тестовых хроматограмм (которые ранее не передавались для исследования моделью) было предварительно занижено до 300 dpi в программном продукте Adobe Photoshop 2022 (версии 23.2.1), что не повлияло на результирующую точность прогноза – загрузка изображений оригинального качества позволило получить аналогичные результаты точности. Использование более низкого разрешения хроматограммы не исследовалось в рамках работы.

В качестве архитектуры интеллектуальной модели была избрана модель мультимодального трансформера, которая позволяет совместно анализировать как графическую (рис. 1), так и символьную информацию, представленную в рассматриваемой задаче в виде таблиц (рис. 2). Подобные архитектуры хорошо зарекомендовали себя в практическом применении при анализе разнородных данных [10]. В рамках автоматизируемой задачи для каждой модальности использовался свой собственный энкодер, который позволял проходить данным через последовательность слоёв самовнимания и определять закономерности для

графических и символьных данных: за аналитику графических данных отвечал трансформер компьютерного зрения (Vision Transformer, ViT) [11], обобщение закономерностей символьных табличных данных выполняла облегченная архитектура трансформера, организованная по примеру TabNet [12]. В обоих составных частях использовалась функция активация ReLU.

Метрикой для оценки точности разработанного решения была определена величина среднеквадратической ошибки между прогнозными значениями площади и времени выхода компонентов на хроматограмме с использованием катализаторов и их фактическими значениями.

Согласно постановке задачи, используется несколько «копий» базового образца сырой нефти, с целью дальнейшего введения в каждую «копию» различающегося катализатора. Для того, чтобы обучить модель машинного обучения, необходимо предоставлять ей связанные пары «хроматограмма – табличные данные», полученные как для базового образца, так и для катализатора. Поскольку в загружаемых на один и тот же вход парах «базовый образец – образец после применения катализатора» хроматограммы сырой нефти будут всегда повторяться, то возникнет процедура ввода избыточной информации («базовый образец» будет повторяться ровно шесть раз – по числу катализаторов) в процесс обучения интеллектуальной модели. Для нивелирования этого негативного эффекта было принято решение создать шесть отдельных ветвей в интеллектуальной модели, каждая из которых сформирует обобщающую способность для конкретного («своего») катализатора. Под термином «ветвь» имеется в виду независимая модель трансформера, гиперпараметры которого в процессе обучения оптимальным образом настраиваются под свой катализатор (рис. 3).

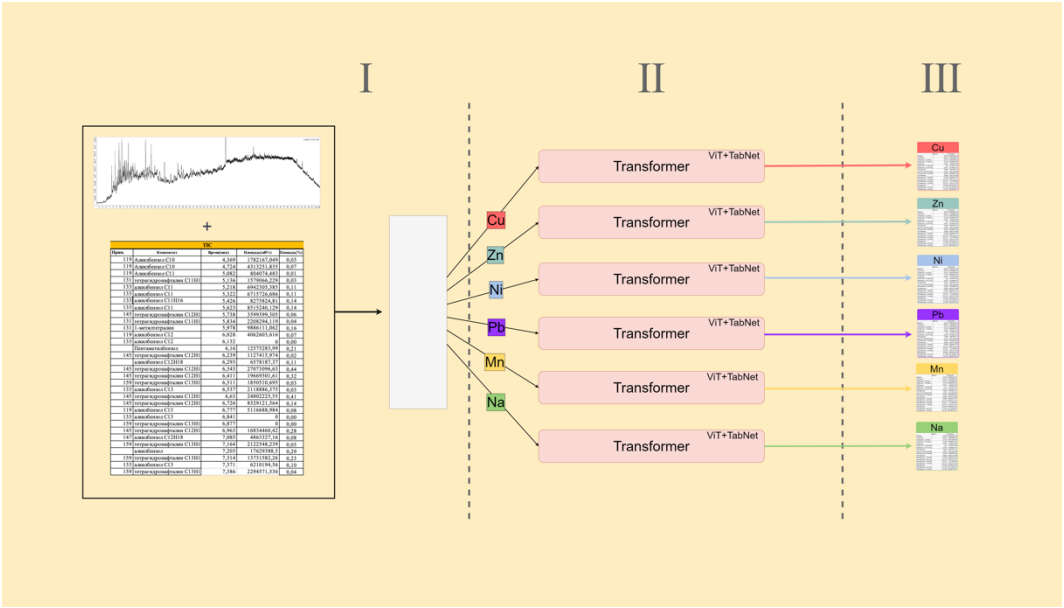


Рис. 3. Общая структура разработанной интеллектуальной модели.
Fig. 3. General structure of the intellectual model developed.

Подробнее рассмотрим итоговую архитектуру разработанного программного решения (рис. 3):

- В I блоке в модель мультимодального трансформера поступает набор данных образца сырой тяжелой нефти (хроматограмма и соответствующие ей табличные

данные). Эти данные передаются без изменений на каждую «ветвь», представляющую собой отдельный трансформер.

- Во II блоке каждая «ветвь» позволяет решать задачу прогнозирования выхода отдельных компонентов из состава базового образца тяжелой нефти при введении в неё катализаторов разного типа.
- В III блоке выходным прогнозным данным присваивается метка соответствующего катализатора. Этот пункт необходим для того, чтобы однозначно идентифицировать прогнозные данные для эксперта предметной области по каждому типу катализатора.

5. Практические результаты применения модели мультимодального трансформера

Практическое применение реализованной модели мультимодального трансформера позволило получить прогнозные значения для состава углеводородов образцов тяжелой нефти при вводе в неё различных катализаторов. В качестве источников данных выступали образцы тяжелой нефти, полученные не только с Ашальчинского, но и с Мордово-Кармальского месторождения. Важной особенностью формирования выборок являлся факт включения образцов нефти Мордово-Кармальского месторождения исключительно в состав тестовых экземпляров, что позволило оценить уровень обобщающей способности разработанной интеллектуальной модели не только на новых данных «известного» месторождения, но и на экспериментально полученных данных другого источника нефти, которые не участвовали в процессе обучения и не могли оказывать влияние на формирование обобщающей способности модели. Такой подход позволяет оценить уровень универсальности разработанного автоматизирующего решения для дальнейшего его переноса на другие месторождения тяжелой нефти.

Для обучения модели были собраны и проанализированы 2100 различных образцов тяжелой нефти. Данные обучающей и тестовой выборки были репрезентативно разделены в соотношении 80:20, после чего было произведено обучение интеллектуальной модели. Результаты экспериментов показали, что в модели трансформера компьютерного зрения оптимальное количество слоев должно составлять 12 (число одинаково для каждой из шести «ветвей»). При установлении этого значения, результаты точности интеллектуальной модели достигают своих наибольших значений. Поскольку каждая «ветвь» мультимодального трансформера (рис. 3) отвечала за свой тип катализатора, то для достижения наиболее точных прогнозных значений, в модели внимания необходимо было настроить оптимальное число «голов» (от английского «number of heads») [11], которое позволяет варьировать число преобразований, через которые проходят входные матрицы данных. Результаты настройки позволили определить оптимальное число «голов» для каждого трансформера (единственный варьируемый разработчиком гиперпараметр):

- 8 для трансформеров, прогнозирующих ввод катализатора на основе меди, никеля и марганца;
- 10 для трансформера, прогнозирующем данные по катализатору на основе цинка;
- 6 для трансформера, прогнозирующем данные по катализатору на основе свинца;
- 12 для модели трансформера, прогнозирующем данные по катализатору на основе натрия.

Инкрементирование числа «голов» сверх выверенных оптимальных значений (в любом из трансформеров) вызывало увеличение времени, требуемого для прогнозирования, которое при этом не сопровождалось увеличением точности. Обоснование такого эффекта авторы находят в повышении вычислительной сложности модели. Декрементирование оптимального числа «голов» позволяло сократить отрезок времени, требуемый для получения прогноза (с 8,2 минут до 5,7 минут), однако, это существенно увеличивало

величину максимальной ошибки – вплоть до 9,12%, что не удовлетворяло требованиям к интеллектуальному решению, предъявляемым предметной областью нефтехимического анализа.

Использование приема параллельной работы трансформеров (рис. 3), каждый из которых отвечает за свой собственный катализатор, позволило получить прогнозные результаты по всем катализаторам за 8,2 минуты (более, чем в 8 раз быстрее, чем при выполнении классического неавтоматизированного анализа).

Время, требуемое для обучения модели мультимодального трансформера (рис. 3), заняло в среднем 205 минут для каждой ветви. В качестве устройства, на котором производилось обучение, использовался ноутбук Apple MacBook Pro 2021 года с процессором Apple M1 Max, оперативной памятью объемом 32 Гб, видеокарты Apple graphics 24-core, твердотельным накопителем объемом 2 Тб и версией macOS Sonoma 14.1.1.

Сразу отметим, что критерий площади выхода прогнозировался интеллектуальной моделью только в рамках относительной площади. Можно заметить, что на рис. 2 представлена как абсолютная величина площади, так и относительная, однако, для получения прогноза в нефтехимическом исследовании достаточно только параметра относительной площади.

В таблице 1 представлены результаты прогнозных значений площади и времени выхода различных углеводородов при вводе в базовый образец тяжелой нефти катализатора из никеля. Наряду с прогнозными значениями, в соответствующих столбцах также зафиксированы фактически полученные величины выхода различных углеводородных фракций на основе тестовых табличных данных соответствующих хроматограмм.

На основании данных таблицы 1 можно рассчитать значения среднеквадратической ошибки для времени и площади выхода компонентов: они составили 0,059 и 0,055 соответственно. При этом величина ошибки при прогнозировании времени выхода элемента в процентном отношении не отклонялась более, чем на 1,704% для любого из углеводородов тяжелой нефти. Ошибка прогноза по параметру относительной площади выхода не превысила 3,007%.

В таблице 2 представлены усредненные результаты времени и площади выхода углеводородов на основании метрики среднеквадратической ошибки и максимального процентного отклонения прогнозных значений от фактических для всех оставшихся катализаторов (медь, цинк, марганец, натрий и свинец).

Результаты расчета среднеквадратической ошибки свидетельствуют о формировании высокой обобщающей способности интеллектуальной модели. Максимальное отклонение прогнозного значения от фактического при определении времени выхода в процентном выражении составило 3,007% на катализаторе из никеля; при определении относительной площади выхода наибольший процент отклонения (2,704%) был зафиксирован на одном из компонентов нефти при использовании катализатора из марганца. Несмотря на то, что некоторые образцы тяжелой нефти были получены из другого месторождения, разработанная модель позволила решить задачу прогнозирования с высокой точностью.

Однако, для понимания полноты решения задачи на данных Мордово-Кармальского месторождения было проведено дополнительное исследование, в рамках которого рассчитывалась среднеквадратическая ошибка и процент отклонения для площади и времени выхода углеводородов исключительно на данных этого месторождения (табл. 3). Ожидалось некоторое снижение точности в силу особенностей природного сырья на месторождении, отличном от того, на котором производилось обучение интеллектуальной модели.

Из таблицы 3 следует, что среднеквадратическая ошибка прогноза модели на данных нового месторождения увеличилась незначительно – менее, чем на 0,002. Модель мультимодального трансформера, реализованная и обученная на данных Ашальчинского месторождения, при тестировании на образцах данных тяжелой нефти Мордово-Кармальского месторождения, позволяет получить практически ту же самую точность.

Табл. 1. Результаты прогнозных и фактических значений времени и площади выхода для компонентов тяжелой нефти (тестовая выборка), получаемых после применения катализатора на основе никеля
Table 1. Results of predicted and actual values of time and yield area for heavy oil components (test sample) obtained after application of nickel-based catalyst

Компонент	Прогнозное время выхода	Фактическое время выхода	Модуль разницы между прогн. и факт. значением	Прогнозная площадь выхода	Фактическая площадь выхода	Модуль разницы между прогн. и факт. значением
Hexadecane, 2,6,10,14-tetramethyl-	16,210	16,178	0,032	17,010	16,801	0,209
Pentadecane, 2,6,10-trimethyl-	12,194	12,176	0,018	10,900	11,046	0,146
Pentadecane, 2,6,10,14-tetramethyl-	13,498	13,545	0,047	9,670	9,830	0,160
Eicosane, 3-methyl-	25,194	25,218	0,024	3,320	3,249	0,071
Octadecane, 3-methyl-	18,404	18,393	0,011	3,070	3,099	0,029
Hexadecane, 2,6,11,15-tetramethyl-	14,420	14,67	0,250	2,980	3,024	0,044
2,6,10-Trimethyltridecane	8,527	8,518	0,009	3,010	2,959	0,051
Tetradecane, 2,6,10-trimethyl-	10,418	10,406	0,012	2,590	2,657	0,067
Tetradecane, 3-methyl-	8,852	8,844	0,008	2,370	2,423	0,053
Hexacosane	42,101	42,069	0,032	2,400	2,337	0,063
Heptacosane	44,323	44,319	0,004	1,945	1,956	0,011
Docosane	30,284	30,281	0,003	1,952	1,930	0,022
Tetracosane	36,815	36,763	0,052	1,927	1,932	0,005
Triacotane	50,749	50,701	0,048	1,828	1,826	0,002
Octacosane	46,598	46,501	0,097	1,820	1,798	0,022
Heneicosane, 3-methyl-	27,574	27,558	0,016	1,770	1,746	0,024
Tricosane	33,685	33,671	0,014	1,724	1,737	0,013
Octadecane	15,998	15,967	0,031	1,723	1,715	0,008
Heptadecane	13,449	13,427	0,022	1,707	1,694	0,013
Nonacosane	48,725	48,626	0,099	1,725	1,679	0,046
Heneicosane	26,523	26,415	0,108	1,648	1,659	0,011
Eicosane	21,970	21,915	0,055	1,635	1,635	0,000
Tetradecane	7,598	7,619	0,021	1,540	1,583	0,043
Hexadecane, 7,9-dimethyl-	11,025	10,922	0,103	1,584	1,580	0,004
Pentacosane	39,714	39,615	0,099	1,537	1,530	0,007
Dodecane, 2,6,10-trimethyl-	7,252	7,246	0,006	1,530	1,517	0,013
Heptadecane, 2,6,10,14-tetramethyl-	18,714	18,672	0,042	1,498	1,491	0,007
Hexadecane, 7-methyl-	10,184	10,173	0,011	1,435	1,438	0,003
Hentriacontane	52,705	52,696	0,009	1,421	1,407	0,014
Hexadecane	11,162	11,151	0,011	1,323	1,354	0,031
Octadecane, 2-methyl-	16,842	16,834	0,008	1,210	1,193	0,017
Nonadecane	18,981	18,97	0,011	1,167	1,173	0,006
Dotriacontane	54,683	54,635	0,048	1,143	1,156	0,013
Nonadecane, 2-methyl-	21,059	21,044	0,015	1,054	1,063	0,009
Pentadecane	9,201	9,195	0,006	1,035	1,011	0,024
Nonadecane, 3-methyl-	21,552	21,549	0,003	1,025	1,004	0,021
Trtriacontane	56,552	56,544	0,008	0,910	0,886	0,024
Tetratriacontane	58,394	58,386	0,008	0,642	0,652	0,010
Pentadecane, 3-methyl-	10,538	10,535	0,003	0,571	0,578	0,007
Dodecane, 2,5-dimethyl-	6,520	6,49	0,030	0,499	0,504	0,005
Tridecane, 7-methyl-	5,893	5,963	0,070	0,152	0,148	0,004

Табл. 2. Данные о величине среднеквадратической ошибки и максимального отклонения (в процентах) прогноза времени и площади выхода углеводородов на тестовой выборке при использовании различных катализаторов
Table 2. Data on the value of the RMS error and the maximum deviation (in per cent) of the prediction of the time and area of hydrocarbon yield on a test sample using different catalysts

Катализатор	Величина ошибки	Площадь выхода	Время выхода
Медь	Максимальный процент отклонения	1,812	1,585
	Среднеквадратическая ошибка	0,042	0,053
Цинк	Максимальный процент отклонения	1,783	1,890
	Среднеквадратическая ошибка	0,039	0,048
Марганец	Максимальный процент отклонения	2,704	2,237
	Среднеквадратическая ошибка	0,057	0,073
Свинец	Максимальный процент отклонения	1,916	2,315
	Среднеквадратическая ошибка	0,061	0,087
Натрий	Максимальный процент отклонения	2,147	2,454
	Среднеквадратическая ошибка	0,054	0,094

Табл. 3. Данные о величине среднеквадратической ошибки и максимального отклонения (в процентах) прогноза времени и площади выхода углеводородов на выборке, образцы которой получены с Мордово-Кармальского месторождения
Table 3. Data on the value of the mean square error and the maximum deviation (in per cent) of the prediction of the time and area of hydrocarbon yield on the sample obtained from the Mordovo-Karmalskoye field

Катализатор	Величина ошибки	Площадь выхода	Время выхода
Медь	Максимальный процент отклонения	1,840	1,625
	Среднеквадратическая ошибка	0,043	0,055
Никель	Максимальный процент отклонения	3,112	1,758
	Среднеквадратическая ошибка	0,057	0,061
Цинк	Максимальный процент отклонения	1,831	1,852
	Среднеквадратическая ошибка	0,040	0,047
Марганец	Максимальный процент отклонения	2,783	2,287
	Среднеквадратическая ошибка	0,059	0,075
Свинец	Максимальный процент отклонения	1,974	2,359
	Среднеквадратическая ошибка	0,063	0,089
Натрий	Максимальный процент отклонения	2,224	2,504
	Среднеквадратическая ошибка	0,056	0,096

При этом разброс результатов точности (по катализаторам всех типов) при множественном запуске разработанной интеллектуальной модели на 275 тестовых данных Мордово-Кармальского (нового) месторождения в среднем составил 1,825% отклонения прогнозных значений от фактических для площади выхода и 1,734% для величины времени выхода.

На основании этого факта можно сделать предположение о том, что извлекаемые мультимодальным трансформером признаки, которыми обладают образцы тяжелой сырой нефти Ашальчинского месторождения, в большей степени являются универсальными, чем индивидуальными. Открытие такой характеристики разработанной интеллектуальной модели позволяет использовать мультимодальный трансформер для автоматизированного анализа тяжелой нефти на других месторождениях без дополнительного обучения новыми данными. Важно отметить, что по мнению сотрудников нефтехимической лаборатории, точность прогноза модели мультимодального трансформера полностью удовлетворяет прогнозным требованиям предметной области нефтепереработки – в подобных исследованиях величина ошибки не должна превышать 5%.

6. Заключение

Исследовано применение модели мультимодального трансформера для решения задачи прогнозирования перераспределений углеводородных фракций в составе тяжелой нефти при введении в неё катализаторов на основе шести металлов: цинка, меди, никеля, натрия, марганца и свинца.

Результаты практических испытаний показали, что автоматизация поставленной задачи была выполнена интеллектуальной моделью с величиной ошибки, не превышающей 3,007% на объединенных тестовых данных Ашальчинского и Мордово-Кармальского месторождения тяжелой нефти, при этом данные второго месторождения не были включены в состав обучающей выборки. Оценка точности интеллектуальной модели исключительно на данных Мордово-Кармальского месторождения продемонстрировала незначительное снижение точности, вызванное повышением максимальной ошибки на отдельном катализаторе до 3,112%. При этом время, требуемое для получения прогноза по всем типам катализаторов (вне зависимости от типа месторождения) составило в среднем 8,2 минуты.

Приведенные результаты позволяют считать, что точность прогноза времени и площади выхода различных компонентов из состава тяжелой нефти при вводе в неё отдельных катализаторов, является достаточной для применения разработанной модели мультимодального трансформера при решении задачи предварительной оценки выхода отдельных углеводородов и выбора необходимого типа катализатора.

Список литературы / References

- [1]. Шадрина А. В., Крец В. Г. Основы нефтегазового дела. М., Нац. Открытый Ун-т «ИНТУИТ», 2016. 214 с. / Shadrina, A.V., Krets, V.G. Fundamentals of Oil and Gas Engineering. Moscow, National Open University of INTUIT, 2016, 214 p. (in Russian).
- [2]. Басарыгин Ю. М., Будников В. Ф., Булатов А. И. Исследование факторов и реализация мер долговременной эксплуатации нефтяных и газовых скважин. М., Просвещение-Юг, 2004, 242 с. ISBN 5-93491-054-X. / Basarygin Y. M., Budnikov V. F., Bulatov A. I. Research of factors and implementation of measures for long-term operation of oil and gas wells. Moscow, Prosveshchenie-Yug, 2004, 242 p. (in Russian). ISBN 5-93491-054-X.
- [3]. Шевченко Д. В., Васильева Л. Х. Математическое моделирование вытеснения тяжелых нефтей горячей водой в тонком пласте. Казань, Издательство "Познание", 2013, 60 с. / Shevchenko D. V., Vasilieva L. H. Mathematical modelling of displacement of heavy oils by hot water in a thin reservoir. Kazan, Poznanie Publishing House, 2013, 60 p. (in Russian).
- [4]. Хуснутдинов И. Ш., Копылов А. Ю., Гончарова И. Н. Разработка и совершенствование сольвентных технологий переработки тяжелого органического сырья. Казань, КГТУ, 2009, 265 с. ISBN 978-5-7882-0745-2 / Khusnutdinov I. Sh., Kopylov A. Yu., Goncharova I. N. Development and

- improvement of solvent technologies for processing of heavy organic raw materials. Kazan, KSTU, 2009, 265 p. (in Russian). ISBN 978-5-7882-0745-2.
- [5]. Хадавимоггаддам Ф., Мищенко И. Т., Мостаджеран М. Применение методов искусственного интеллекта в прогнозировании основных свойств нефти. Газовая промышленность, вып. 12(794), 2019, стр. 28-32. / Hadavimoghaddam F., Mishchenko I. T., Mostajeran M. Application of artificial intelligence methods in predicting basic oil properties. Gas Industry, vol. 12(794), 2019, pp. 28-32 (in Russian).
- [6]. Азиева Р. Х. Искусственный интеллект в добыче нефти и газа: возможности и сценарный прогноз. Проблемы экономики и управления нефтегазовым комплексом, вып. 3(207), 2022, стр. 38-46. DOI: 10.33285/1999-6942-2022-3(207)-38-46. / Azieva R. H. Artificial intelligence in oil and gas production: opportunities and scenario forecast. Problems of economics and management of oil and gas complex, vol. 3(207), 2022, pp. 38-46 (in Russian). DOI: 10.33285/1999-6942-2022-3(207)-38-46.
- [7]. Байбаров Д. А. Оценка продуктивности и экономической эффективности технологий искусственного интеллекта для автоматизации процессов разведки и добычи нефти и газа. XXI век: итоги прошлого и проблемы настоящего плюс, том 10, вып. 3, 2021, стр. 100-105. DOI: 10.46548/21vek-2021-1055-0019 / Baybarov D. A. Assessment of productivity and economic efficiency of artificial intelligence technologies for automation of oil and gas exploration and production processes. XXI century: Resumes of the Past and Challenges of the Present plus, vol. 10, issue 3, 2021, pp. 100-105 (in Russian). DOI: 10.46548/21vek-2021-1055-0019
- [8]. Ломакин Н. И., Дженифер О. Ч., Голодова О. А., Сычева А. В., Кабина В. В. AI-система "Персептрон" для прогноза финансового результата деятельности предприятия нефтяной отрасли РФ. Фундаментальные исследования, вып. 12-1, 2019, стр. 98-103. DOI: 10.17513/fr.42629 / Lomakin N. I., Jennifer O. C., Golodova O. A., Sycheva A. V., Kabina V. V. AI-system "Perseptron" for forecasting the financial result of the enterprise of the oil industry of the Russian Federation. Fundamental Research, vol. 12-1, 2019, pp. 98-103 (in Russian). DOI: 10.17513/fr.42629
- [9]. Овсенко Г. А., Козелков О. В., Кашаев Р. С. Использование нейронных сетей в мехатронном устройстве представительного отбора и анализа проб. Приборостроение и автоматизированный электропривод в топливно-энергетическом комплексе и жилищно-коммунальном хозяйстве. Материалы VII Национальной научно-практической конференции, 2022, стр. 92-96. / Ovseenko G. A., Kozelkov O. V., Kashaev R. S. Use of neural networks in mechatronic device of representative sampling and analysis. Instrumentation and automated electric drive in fuel and energy complex and housing and communal services. Proceedings of VII National Scientific and Practical Conference, 2022, pp. 92-96 (in Russian).
- [10]. Vaswani A., Shazeer N. et al. Attention is all you need. In Proc. of the 31st Conference on Neural Information Processing Systems (NIPS), 2017, 11 p.
- [11]. Dosovitskiy A., Beyer L. et al. An Image is Worth 16x16 Words: Transformers for Image Recognition at Scale. In Proc. of the International Conference on Learning Representations (ICLR), 2021, 21 p. DOI: 10.48550/arXiv.2010.11929
- [12]. Arik S. Ö., Pfister T. TabNet: Attentive Interpretable Tabular Learning. Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence, 35(8), 2020, pp. 6679-6687. DOI: 10.1609/aaai.v35i8.16826

Информация об авторах / Information about authors

Петр Андреевич ПЫЛОВ – аспирант Кузбасского государственного технического университета имени Т.Ф. Горбачева. Совмещает учебу с работой старшим разработчиком высоконагруженных интеллектуальных систем на позиции Senior Computer Vision Engineer. Научные интересы: компьютерное зрение, обработка естественного языка, глубокое обучение, разработка интеллектуальных систем для автоматизации различных прикладных задач.

Petr Andreevich PYLOV – post-grad. student at the T.F. Gorbachev Kuzbass State Technical University. He combines his studies with his work as a Senior Computer Vision Engineer. Research interests: computer vision, natural language processing, deep learning, development of intelligent systems for automation of various applied tasks.

Роман Вячеславович МАЙТАК – магистрант Кузбасского государственного технического университета имени Т.Ф. Горбачева. Учебу совмещает с работой на позиции Middle+ NLP Data Scientist. Научные интересы: обработка естественного языка, глубокое обучение, обработка текстовых и числовых данных моделями машинного обучения, автоматизация технологических задач.

Roman Viacheslavovich MAITAK – Master student at the T.F. Gorbachev Kuzbass State Technical University. He combines his studies with her work as a data scientist at Middle+ NLP. Research interests: natural language processing, deep learning, processing of textual and numerical data by machine learning models, automation of technological tasks.

Елизавета Георгиевна ЗАЙЦЕВА – аспирант кафедры Химической технологии нефти и газа Казанского национального исследовательского университета. Область научной деятельности связана с разработкой каталитических систем для процессов превращения тяжелого нефтяного сырья. Научные интересы: нефтехимия, каталитическое облагораживание тяжелой нефти, аква термолиз.

Elizaveta Georgievna ZAITSEVA – post-grad. student at the Department of Chemical Technology of Oil and Gas, Kazan National Research University. The field of scientific activity is related to the development of catalytic systems for the conversion of heavy oil feedstock. Research interests: oil chemistry, catalytic refining of heavy oil, aquathermolysis.

