

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ
ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«СЕВЕРО-КАВКАЗСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Методические указания

*по выполнению лабораторных
работ по дисциплине*

Нейросетевое моделирование технологических процессов

для студентов направления подготовки

18.03.01 Химическая технология

Направленность Основной органический и нефтехимический синтез

Ставрополь
2026

ВВЕДЕНИЕ

Современная химическая технология сталкивается с задачами, аналитическое решение которых зачастую либо чрезвычайно трудоемко, либо принципиально невозможно. Многие ключевые процессы (катализ, ректификация, синтез полимеров, гидродинамика многофазных сред) характеризуются высокой нелинейностью, взаимозависимостью десятков параметров и отсутствием полных априорных физико-химических моделей. В этих условиях традиционные методы математического моделирования, основанные на системе дифференциальных уравнений, часто требуют компромиссов и упрощений, снижающих их прогностическую ценность.

Альтернативой и мощным дополнением к классическому подходу выступают методы искусственных нейронных сетей (ИНС). Нейросетевые модели, относящиеся к классу «черного ящика», позволяют восстанавливать сложнейшие зависимости между входными переменными (температура, давление, концентрация реагентов, время пребывания) и целевыми параметрами (селективность, конверсия, вязкость, молекулярно-массовое распределение), используя только исторические или экспериментальные данные. Такой подход не требует детального знания механизма химических реакций, а эффективно обучается на прецедентах.

Целью данного методического пособия является формирование у студентов химических специальностей прикладных компетенций в области нейросетевого моделирования технологических процессов. В отличие от классических курсов по Data Science, здесь акцент делается на химико-технологическую специфику: работу с шумными экспериментальными данными, учет дрейфа катализатора, интерпретацию «черного ящика» с точки зрения законов сохранения массы и энергии, а также валидацию моделей на границах технологического регламента.

В пособии рассматриваются следующие ключевые вопросы:

- Типовые архитектуры нейронных сетей (многослойный перцептрон, сети радиальных базисных функций) и их обоснованный выбор для задач химической технологии.
- Этапы построения нейросетевой модели: от сбора и предобработки данных (нормализация, фильтрация выбросов) до обучения, предотвращения переобучения (overfitting) и тестирования.
- Сравнительный анализ нейросетевого и регрессионного (например, МНК) подходов на реальных химических процессах.

Инженерные аспекты использования обученной модели: прогнозирование выхода продукта, оценка состояния реактора в реальном времени, «мягкие» датчики (soft sensors) для ненаблюдаемых параметров. Практические примеры, приведенные в пособии, ориентированы на среду Python с использованием библиотек TensorFlow/Keras или PyTorch. Каждый лабораторный кейс сопровождается химическим смыслом: например, моделирование кинетики гидролиза, прогнозирование температуры в экзотермическом реакторе или оптимизация состава сырья для процесса полимеризации. Методическое пособие предназначено для студентов, магистрантов и аспирантов, обучающихся по направлению «Химия», «Химическая технология» и «Фундаментальная и прикладная химия», и предполагает базовое знакомство с высшей математикой (линейная алгебра, основы матанализа) и начальный уровень владения языком Python. Знание теории нейронных сетей не требуется — все необходимые концепции вводятся последовательно, с акцентом на практическое применение в лабораторной и промышленной химии.

Каждая работа содержит реальный технологический датасет (кинетика, хроматография, показания датчиков). Вы проходите полный цикл: предобработка → выбор архитектуры сети → обучение → анализ. В шаблоне кода на Python все операции поясняются в терминах химика-технолога.

Введение в нейросетевое моделирование химико-технологических процессов

Лабораторная работа №1. Знакомство со стеком Python для нейросетевого моделирования. Подготовка химических данных.

Установка и настройка среды: Anaconda / Google Colab / Jupyter Notebook. Обзор библиотек: NumPy, Pandas, Matplotlib, Scikit-learn, TensorFlow/Keras.

Импорт и первичный анализ технологического датасета (например, результаты лабораторного реактора: время, температура, pH, концентрация реагентов, выход продукта).

Выявление пропусков, выбросов (метод «трёх сигм», ящик с усами). Нормализация и стандартизация данных. Разделение выборки на обучающую, валидационную и тестовую.

Результат: подготовленный и размеченный датасет для обучения первой нейросетевой модели.

1. Цель работы

Освоить базовые инструменты обработки экспериментальных и технологических данных в Python, подготовить датасет для последующего нейросетевого моделирования.

2. Краткие теоретические сведения

Любая нейросетевая модель критически зависит от качества входных данных. Химические данные имеют свои особенности:

Пропуски (отказ датчика, потеря пробы);

Выбросы (лабораторная ошибка, залповый выброс);

Разные масштабы (температура 100–500°C, давление 1–50 атм, концентрации 0.001–10 моль/л);

Мультиколлинеарность (давление и температура не независимы).

Этапы предобработки:

Импорт данных (csv, Excel, ручной ввод).

Визуализация (гистограммы, ящики с усами, scatter-матрицы).

Очистка: удаление или интерполяция пропусков, фильтрация выбросов (метод z-оценки, межквартильный размах).

Нормализация (MinMaxScaler, StandardScaler) — обязательна для градиентных методов.

Разделение на выборки: train (70%), validation (15%), test (15%).

3. Оборудование и ПО

ПК с доступом в Интернет;

Google Colab / Jupyter Notebook / VS Code;

Библиотеки: pandas, numpy, matplotlib, seaborn, scikit-learn.

4. Порядок выполнения

Часть 1. Загрузка данных

Скачать предоставленный датасет «Данные лабораторного реактора синтеза аммиака» (файл reactor_data.csv). Столбцы:

T — температура, °C;

P — давление, атм;

tau — время пребывания, с;

cat_activity — активность катализатора (отн. ед.);

NH3_out — объёмная доля аммиака на выходе, % (целевой параметр).

Загрузить данные в pandas.DataFrame. Вывести первые 5 строк и статистику .describe().

Часть 2. Первичный анализ и очистка

3. Построить гистограммы всех признаков и ящики с усами (boxplot). Визуально определить выбросы.

4. Рассчитать z-оценки для каждого числового столбца. Удалить строки, где $|z| > 3$.

5. Обнаружить пропуски (.isnull().sum()). Если пропусков <5% — удалить строки, иначе заполнить медианой по столбцу или интерполировать.

Часть 3. Нормализация и разделение

6. Отделить входные признаки (X) от целевой переменной (y).

7. Применить StandardScaler (приведение к среднему 0 и дисперсии 1) из sklearn.preprocessing. Сохранить параметры scaler — они понадобятся для новых данных.

8. Разделить выборку на train/test с помощью train_test_split. Затем из train выделить validation (80/20 от train).

Часть 4. Сохранение и отчёт

9. Сохранить обработанные выборки в форматы CSV/NumPy.

10. Подготовить отчёт с графиками «До/После» очистки и нормализации.

5. Содержание отчёта

Титульный лист.

Код с комментариями.

Скриншоты исходных и обработанных данных, графики.

Химико-технологический комментарий: «Наиболее вероятная причина выброса — ошибка хроматографа при превышении верхнего предела детекции».

6. Контрольные вопросы

Почему нейронные сети чувствительны к масштабу входных данных?

Что такое выброс (аномалия) в контексте химического эксперимента?

В чём разница между StandardScaler и MinMaxScaler? Когда какой предпочтительнее?

Зачем нужна валидационная выборка отдельно от тестовой?

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА №2. Реализация и обучение однослойного перцептрона для прогнозирования выхода химической реакции.

1. Цель работы

Познакомиться с простейшей архитектурой нейронной сети (однослойный перцептрон) и применить её для регрессии — прогнозирования выхода продукта по параметрам реакции.

2. Краткие теоретические сведения

Формальный нейрон вычисляет взвешенную сумму входов, прибавляет смещение (bias) и пропускает через нелинейную функцию активации:

однослойный перцептрон — сеть из одного слоя таких нейронов. Для регрессии в выходном слое обычно используют линейную активацию (без нелинейности).

Обучение — минимизация функции потерь (например, среднеквадратичная ошибка MSE) с помощью градиентного спуска.

Пошагово:

Прямой проход: вычисление предсказания.

Расчёт ошибки. Обратное распространение: градиенты по весам.

Обновление весов:

Гиперпараметры (задаются до обучения): число нейронов, скорость обучения (η), число эпох, размер батча.

3. Порядок выполнения

Часть 1. Загрузка и подготовка данных

Использовать очищенный датасет из ЛР №1 (или новый датасет «Гидролиз сложных эфиров»).

Убедиться, что данные нормализованы.

Часть 2. Создание модели в Keras

3. Импортировать tensorflow.keras.

4. Создать модель Sequential с одним плотным слоем.

Вывести структуру модели: .summary().

Часть 3. Обучение и визуализация

6. Обучить модель с разделением на train/validation:

```
history = model.fit(X_train, y_train,  
                    validation_data=(X_val, y_val),  
                    epochs=100, batch_size=16, verbose=1)
```

Часть 4. Анализ

9. Вычислить предсказания: $y_{pred} = model.predict(X_{test})$.

10. Построить график «предсказание vs реальность». Добавить линию идеального совпадения $y=x$.

11. Рассчитать R^2 (коэффициент детерминации). Сделать вывод: достаточно ли одного слоя для описания процесса.

Химико-технологический вывод (пример)

Для реакции гидролиза модель достигла $R^2 = 0.72$ на тесте. Ошибка на нестационарных режимах выше (первые минуты после подачи катализатора). Один слой нейронов не захватывает кинетические особенности — требуется более глубокая сеть (ЛР №3).

5. Контрольные вопросы

Что такое градиентный спуск? Зачем нужна скорость обучения?

Чем отличается MSE от MAE? Когда что использовать?

Почему в регрессии на выходе линейная активация, а не сигмоида?
Что означает «переобучение»? Как его заметить по графикам?

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА №3. Многослойный перцептрон (MLP) для моделирования кинетики сложной реакции

1. Цель работы

Построить глубокую нейронную сеть (MLP) для прогнозирования концентрации реагента во времени в сложной реакции (многостадийной, с параллельными/последовательными стадиями). Сравнить с классическим кинетическим моделированием.

2. Краткие теоретические сведения

Многослойный перцептрон содержит 1–5 скрытых слоёв с нелинейными активациями (ReLU, tanh). Увеличение глубины позволяет аппроксимировать более сложные функции — например, кинетическую кривую с несколькими характерными временами.

Регуляризация для борьбы с переобучением:

Dropout — случайное отключение нейронов во время обучения.

L1/L2 — добавление штрафа на веса.

Early stopping — остановка, когда `val_loss` перестаёт улучшаться.

Сравнение с аналитической моделью:

Если известен механизм $A \rightarrow B \rightarrow C$, решают систему ОДУ численно. Нейросеть не знает механизма, но может подогнуть выходную кривую по данным. Плюс: не нужны константы скоростей. Минус: нет экстраполяции за пределы данных.

3. Порядок выполнения

Часть 1. Датасет кинетики:

Скачать файл `kinetics_data.csv` (реакция омыления этилацетата при разных температурах). Столбцы: `t` (время, мин), `T` (температура, °C), `C_A` (концентрация исходного эфира, моль/л) — целевая переменная.

Нормализовать. Разделить на `train/test` по разным температурам (например, `train`: 25°C и 35°C, `test`: 30°C и 40°C) — проверить экстраполяцию.

Часть 2. Построение MLP 3. Создать модель:

```
model = Sequential([
    Dense(64, activation='relu', input_dim=X.shape[1]),
    Dropout(0.2),
    Dense(32, activation='relu'),
    Dropout(0.2),
```



```
Dense(16, activation='relu'),  
Dense(1, activation='linear')  
)  
model.compile(optimizer='adam', loss='mse', metrics=['mae'])
```

Использовать EarlyStopping (patience=10) и ReduceLROnPlateau.

Часть 3. Обучение и сравнение с кинетической моделью

5. Обучить MLP. Построить предсказанные кинетические кривые $C(t)$ для разных температур.

6. Для тех же данных подобрать параметры кинетической модели:

Для реакции 1-го порядка: $CA = CA_0 \cdot e^{-kt}$, подобрать k .

Вычислить MSE для обеих моделей на тестовых температурах.

Часть 4. Анализ

7. На каких режимах нейросеть ошибается сильнее? (При высоких температурах, где нет данных).

8. Оценить время счёта: MLP выдаёт прогноз за миллисекунды, численное решение ОДУ — за секунды. Записать сравнение.

4. Химико-технологический вывод

MLP с двумя скрытыми слоями превосходит кинетическую модель первого порядка на данных внутри интервала температур 25–35°C (MSE = 0.012 vs 0.041). Однако при экстраполяции на 40°C нейросеть ошибается сильнее, что типично для data-driven моделей. Рекомендуется использовать MLP для оперативного контроля в рабочем диапазоне, а для поиска новых режимов — комбинировать с физической моделью.

5. Контрольные вопросы

Зачем в скрытых слоях нужны нелинейные активации (ReLU, tanh)?

Что такое Dropout и почему он не используется при инференсе?

В каком случае нейросетевой подход предпочтительнее классической кинетики? А в каком — наоборот?

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА №4. Свёрточные нейронные сети (CNN) для обработки спектральных и хроматографических данных

1. Цель работы

Освоить применение одномерных свёрточных нейронных сетей для количественного анализа по ИК-спектрам или хроматограммам.

2. Краткие теоретические сведения

Свёртка (convolution) — скользящее окно (ядро) перемножает свои веса с фрагментом входного сигнала и суммирует результат. Позволяет автоматически выделять локальные признаки: пики, плечи, шум.

Архитектура CNN для 1D-сигналов:

Вход: вектор отсчётов (например, интенсивность по длине волны).

Conv1D слой → ReLU → MaxPooling1D (снижение размерности).

Несколько таких блоков.

Полносвязные слои в конце.

Преимущество над классическим анализом: не нужно вручную выбирать аналитические пики или базовую линию — сеть сама научается выделять информативные участки спектра.

3. Порядок выполнения

Часть 1. Загрузка спектральных данных:

Датасет `ir_spectra.csv`: 1000 образцов смеси этанол/вода/метанол. Каждая строка — ИК-спектр (200 точек от 4000 до 400 cm^{-1}). Последние три столбца — истинные концентрации компонентов.

Цель: построить модель для предсказания концентрации этанола.

Вход: `X.shape = (N, 200, 1)` — добавить канал для Conv1D.

Часть 2. Построение 1D CNN

```
model = Sequential([
    Conv1D(32, kernel_size=5, activation='relu', input_shape=(200,1)),
    MaxPooling1D(pool_size=2),
    Conv1D(64, kernel_size=5, activation='relu'),
    MaxPooling1D(pool_size=2),
    Flatten(),
    Dense(64, activation='relu'),
    Dense(1) # концентрация этанола])
model.compile(optimizer='adam', loss='mse')
```

Обучить. Построить график реальной концентрации против предсказанной.

Часть 3. Сравнение с традиционным методом (MLR)

5. Традиционный подход: выделить площадь пика при $\sim 1050 \text{ cm}^{-1}$ (C–O).

Построить линейную калибровку методом наименьших квадратов.

6. Сравнить R^2 и RMSE на тестовой выборке.

Часть 4. Визуализация признаков

7. Взять обученную свёртку. Извлечь веса ядра первого слоя.

Визуализировать, как оно «проходит» по спектру — какие участки наиболее значимы.

8. Сравнить с известными полосами поглощения этанола.

4. Химико-технологический вывод:

CNN автоматически сфокусировалась на области $1000\text{--}1100\text{ см}^{-1}$, что соответствует валентным колебаниям C–O. В отличие от простого МНК по одному пику, сеть также учла область $\sim 1600\text{ см}^{-1}$ (фон воды), что улучшило точность на образцах с высокой влажностью. CNN-RMSE = 0.31%, MLR-RMSE = 0.57%.

5. Контрольные вопросы

Почему свёрточные сети эффективны для анализа спектров и хроматограмм?

Что такое pooling? Зачем он нужен?

Как определить, какие участки спектра сеть считает важными?

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА №5. Объяснимый искусственный интеллект (XAI) для химика-технолога. Интерпретация «чёрного ящика»

1. Цель работы

Научиться интерпретировать обученную нейросетевую модель — определять, какие входные параметры и как влияют на прогноз. Подтвердить или опровергнуть соответствие модели физико-химическим закономерностям.

2. Краткие теоретические сведения

Нейронные сети часто критикуют как «чёрные ящики». XAI (Explainable AI) предоставляет инструменты, чтобы понять логику модели.

Популярные методы:

Permutation Importance — перемешиваем один входной признак и смотрим, как падает качество. Сильное падение → признак важен.

Partial Dependence Plots (PDP) — фиксируем все признаки, кроме одного, варьируем его и смотрим изменение предсказания. Показывает направление и форму зависимости (линейная, пороговая, немонотонная).

SHAP (SHapley Additive exPlanations) — каждому признаку приписывается вклад в конкретное предсказание. Сумма вкладов плюс базовое значение равна предсказанию. Позволяет объяснить, почему для *этого конкретного образца* нейросеть дала такой результат.

3. Порядок выполнения

Часть 1. Обучение модели-кандидата

Использовать датасет «Каталитический крекинг» (параметры: температура, давление, расход сырья, концентрация никеля на катализаторе; целевая переменная — выход бензина).

Обучить MLP (2–3 слоя) до приемлемой точности ($R^2 > 0.85$ на тесте).

- | Часть | 2. | Permutation | Importance |
|-------|--|---|------------|
| 3. | Импортировать | <code>from sklearn.inspection import permutation_importance.</code> | |
| 4. | Вычислить важность признаков. Построить горизонтальную столбчатую диаграмму. | | |
| 5. | Сделать вывод: какой параметр наиболее критичен? Совпадает ли это с интуицией технолога? | | |

- | Часть | 3. | Partial | Dependence | Plots | (PDP) |
|-------|--|---------|------------|-------|-------|
| 6. | Для топ-2 признаков построить PDP (библиотека PDPBox или <code>sklearn.inspection.PartialDependenceDisplay</code>). | | | | |

7. Проанализировать форму зависимости:

Линейная → модель уловила прямую связь.

Плато + резкий спад → возможно, пороговый эффект (например, дезактивация катализатора выше 520°C).

Сравнить с известной из литературы зависимостью (привести ссылку).

Часть	4.	SHAP-анализ
-------	----	-------------

9.	Установить <code>shap</code> . Вычислить SHAP-значения для тестовой выборки.	
----	--	--

10.	Построить:	
-----	------------	--

Summary plot — показывает распределение влияния каждого признака.

Waterfall plot для 2–3 конкретных наблюдений (например, «почему для пробы №42 выход низкий, несмотря на высокую температуру?»).

Сформулировать вывод: модель логична или противоречит химии («сеть выучила, что снижение давления снижает выход — физически верно, но она также приписала важность мнимой корреляции с порядковым номером эксперимента — артефакт»).

4. Химико-технологический вывод

Permutation importance подтвердила ожидаемый факт: температура (0.48) и закоксуывание катализатора (0.31) — главные факторы. PDP показала, что модель считает оптимальную температуру 510–520°C, что согласуется с литературными данными для цеолитсодержащих катализаторов. SHAP-анализ выявил, что в образцах с высоким содержанием серы модель систематически ошибается — это указывает на необходимость добавить концентрацию серы как входной признак.

5. Контрольные вопросы

Почему даже хорошая по точности модель может быть опасна для внедрения?

В чём разница между глобальной интерпретацией (PDP, важность признаков) и локальной (SHAP для одного образца)?

Что означает положительное/отрицательное SHAP-значение для признака?

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА №6. Оптимизация технологического режима и «мягкие датчики» (soft sensors) на основе нейросетевых моделей

1. Цель работы

Научиться использовать обученную нейросетевую модель для двух прикладных задач: поиск оптимальных технологических параметров и создание виртуального датчика для трудноизмеряемого параметра.

2. Краткие теоретические сведения

Суррогатная оптимизация — вместо сложного (или не существующего в явном виде) физико-химического процесса используем нейросеть, которая быстро вычисляет выход. Алгоритм:

Обучить нейросеть на исторических данных.

Задать целевую функцию (например, максимум выхода продукта).

Перебрать комбинации входных параметров (Grid Search, Random Search или Байесовская оптимизация) на суррогате.

Найденный оптимум проверить (если возможно) на реальной установке.

Soft sensor («мягкий датчик») — прогнозная модель, которая оценивает трудноизмеряемый параметр in-situ по легкоизмеряемым. Примеры:

Вязкость полимера по температуре реактора и моменту на мешалке.

Содержание целевого компонента по данным рамановского спектрометра (аппаратура дорогая, а soft sensor — бесплатно).

Степень закоксовывания катализатора по перепаду давления.

Оценка неопределённости — нейросеть выдаёт точечное предсказание. Для принятия решений нужно знать доверительный интервал. Метод Monte Carlo Dropout: включаем Dropout и на этапе предсказания делаем 100 прогонов → получаем распределение.

3. Порядок выполнения

Часть 1. Суррогатная оптимизация режима реакции (2.5 часа)

Использовать обученную ранее MLP-модель кинетики (ЛР №3) или датасет «Реактор полимеризации этилена».

Задать ограничения: $T=150-220^{\circ}\text{C}$, $P=10-30\text{атм}$, $[C_2H_4]=5-15\text{моль/л}$, $T=150-220^{\circ}\text{C}$, $P=10-30\text{атм}$, $[C_2H_4]=5-15\text{моль/л}$. Цель: максимизировать производительность (кг/час).

Реализовать перебор по сетке (Grid Search) с шагом, а затем Random Search для уточнения.

Визуализировать ландшафт целевой функции (contour plot температуры и давления при фиксированной концентрации).

Выдать рекомендованный режим $(T^*, P^*, [C_2H_4]^*)(T^*, P^*, [C_2H_4]^*)$.

Часть 2. Разработка soft sensor для вязкости расплава

6. Датасет `soft_sensor.csv`: легкоизмеряемые параметры (температура корпуса экструдера, давление расплава перед фильерой, частота вращения шнека, потребляемая мощность). Целевой параметр — вязкость (отбор пробы + реометрия каждые 30 минут).

7. Обучить MLP прогнозировать вязкость по «быстрым» переменным.

8. Оценить точность: сравнить предсказанную вязкость с лабораторными измерениями на отложенной выборке.

Часть 3. Оценка неопределённости

9. Реализовать Monte Carlo Dropout:

В обученной модели оставить Dropout слои (обычно их отключают при `predict`).

Сделать `model.predict(X_test, verbose=0)` 100 раз, собрать результаты.

Вычислить среднее и стандартное отклонение для каждого прогноза.

Построить график: предсказание $\pm 2\sigma$ и реальная вязкость. Отметить образцы, где реальное значение выходит за пределы 95% интервала — они могут быть аномалиями или требуют переобучения.

4. Химико-технологический вывод

Суррогатная оптимизация предлагает повысить температуру до 218°C и давление до 27 атм, что обещает прирост производительности на 14% по сравнению с текущим режимом. Рекомендуется провести пробный пуск на этом режиме с мониторингом безопасности. Soft sensor для вязкости достиг $MAE = 0.23 \text{ Па}\cdot\text{с}$, что сопоставимо с погрешностью лабораторного реометра. Интервалы неопределённости позволяют исключить 3% образцов как потенциальные выбросы. Предлагается внедрить soft sensor в SCADA-систему для непрерывного контроля качества.

5. Контрольные вопросы

Почему суррогатная оптимизация на нейросети быстрее, чем на физической модели? Где может быть опасность?

В чём преимущество soft sensor перед дорогим анализатором?

Почему Monte Carlo Dropout даёт неопределённость, а просто предсказание — нет?

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«СЕВЕРО-КАВКАЗСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Методические указания

*по организации самостоятельной работы
по дисциплине*

Нейросетевое моделирование технологических процессов

для студентов направления подготовки
18.03.01 Химическая технология
Направленность Основной органический и нефтехимический синтез

Ставрополь 2026 г.

Общие положения

Самостоятельная работа студентов по дисциплине «Нейросетевое моделирование технологических процессов» направлена на закрепление и углубление знаний, полученных на лекционных и лабораторных занятиях, а также на формирование устойчивых навыков применения нейросетевых методов для решения реальных химико-технологических задач.

Цели СРС:

Закрепление и углубление теоретических знаний.

Формирование практических навыков (работа с литературой, расчеты, анализ данных).

Развитие познавательной активности и ответственности.

Подготовка к текущему контролю и экзаменам.

Методика работы с литературой

Для эффективной работы с текстами используйте алгоритм PQ3R (Preview — Question — Read — Recite — Review):

- Просмотр (Preview): бегло изучите оглавление, введение, резюме.
- Вопрос (Question): сформулируйте, что вы хотите узнать из этого текста.
- Чтение (Read): внимательно читайте, делая пометки карандашом.
- Пересказ (Recite): после параграфа закройте книгу и перескажите суть своими словами.
- Повторение (Review): через день пролистайте конспект, восстановите логику.

Подготовка к практическим и лабораторным занятиям

Алгоритм подготовки:

Уточните тему и вопросы к занятию (обычно в РПД).

Найдите соответствующие разделы в учебнике / лекции.

Прочитайте, составьте краткий конспект (опорный сигнал, схему).

Если заданы задачи – решите 2–3 аналогичных из методички.

Сформулируйте вопросы, которые остались непонятными.

Реферат

Этап 1. Выбор и формулировка темы

Тема должна быть узкой.

Проверьте: по теме есть не менее 5–7 источников (книг, статей) за последние 10 лет.

Этап 2. Поиск и отбор литературы

Источники по убыванию надежности:

Учебники и учебные пособия с грифом УМО.

Монографии и сборники научных статей.

Статьи из рецензируемых журналов (ВАК, РИНЦ).

Авторефераты диссертаций.

Не рекомендуется: Википедия, студенческие рефераты с сайтов, непроверенные блоги.

Как искать:

Ключевые слова + «site:elibrary.ru», «site:cyberleninka.ru», Google Книги.

Библиотечный каталог вуза.

Этап 3. Составление рабочего плана

Пример плана реферата по гуманитарной дисциплине:

Введение (1–2 стр.)

Актуальность темы (почему это важно сейчас).

Цель и задачи (3–5 задач).

Обзор использованных источников.

Глава 1. Теоретические аспекты проблемы (3–5 стр.)

1.1. Определение ключевых понятий.

1.2. История изучения вопроса.

Глава 2. Анализ конкретного материала (4–6 стр.)

2.1. Примеры, данные, таблицы.

2.2. Сравнение точек зрения разных авторов.

Заключение (1–2 стр.)

Выводы по каждой задаче.

Практические рекомендации (если есть).

Список литературы (10–20 источников).

Этап 4. Написание черновика

Не редактируйте сразу – пишите быстро, фиксируя главное.

Каждый абзац – одна мысль. Объем абзаца – 3–7 строк.

Прямое цитирование заключайте в кавычки и указывайте страницу:

Как отмечает Иванов И.И., «образование – это...» [7, с. 45].

Пересказ своими словами также требует ссылки: По мнению Петрова П.П., ключевым фактором является... [3, с. 12–15].

Этап 5. Оформление по ГОСТ (кратко)

Шрифт: Times New Roman, 14 кегль.

Интервал: 1,5.

Поля: левое – 30 мм, правое – 15 мм, верх/низ – 20 мм.

Отступ красной строки: 1,25 см.

Нумерация страниц: внизу по центру, начиная с титульного листа (на титуле номер не ставится).

Заголовки: полужирный, по центру, без точки в конце.

Ссылки на литературу: квадратные скобки с номером источника из списка.
Список литературы – в алфавитном порядке.

Этап 6. Проверка на антиплагиат (если требуется)

Уникальность не менее 50–70% (в зависимости от вуза).

Чтобы повысить уникальность: переформулируйте общие места, заменяйте синонимами, меняйте структуру предложений.

Запрещено: технические ухищрения (замена букв кириллицей, микрошрифты)
– система их видит.

Чек-лист готового реферата

Титульный лист (название вуза, тема, ФИО, группа, год).

Оглавление (с номерами страниц).

Введение, основная часть, заключение.

Ссылки в тексте на все заимствованные идеи.

Список литературы (минимум 8 источников).

Проверка орфографии (F7 в Word).

Файл назван: *Реферат_Иванов_БУ-22_Финансы.doc*.

ВОПРОСЫ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОГО КОНТРОЛЯ

Уровень 1. Базовый (знание терминов и определений)

Дайте определение нейросетевого моделирования технологического процесса.

Чем нейросетевая модель отличается от традиционной регрессионной или детерминированной модели (например, основанной на дифференциальных уравнениях)?

Назовите три основных типа архитектур нейронных сетей, наиболее часто применяемых для моделирования технологических процессов.

Что такое «обучающая выборка» и «тестовая выборка» применительно к технологическому процессу? Каким должно быть их типичное соотношение?

Какие параметры технологического процесса обычно выступают в качестве входов нейросети, а какие – в качестве выходов?

Что такое «переобучение» (overfitting) нейросетевой модели и почему оно особенно опасно для моделирования технологических процессов?

Какие функции активации чаще всего используются в скрытых слоях (ReLU, tanh, sigmoid) и в выходном слое (линейная, softmax) для задач регрессии и классификации состояний процесса?

Что означают метрики MSE, MAE, R^2 при оценке качества нейросетевой модели техпроцесса?

Каким образом нейросетевая модель может учитывать динамику процесса (запаздывания, переходные режимы)?

Перечислите не менее трех программных инструментов (библиотек, сред), используемых для нейросетевого моделирования технологических процессов.

Уровень 2. Продвинутый (анализ, сравнение, оценка рисков)

В каком случае нейросетевое моделирование технологического процесса предпочтительнее физико-химического?

Каковы основные ограничения «черного ящика» (black box) для технологического процесса с точки зрения инженерной безопасности?

Какой объем данных (примерно) считается минимальным для обучения многослойной нейросети, моделирующей технологический процесс с 10 входами и 3 выходами?

Сравните подходы: обучение с учителем (supervised) и без учителя (unsupervised) при анализе отказов оборудования. Какой и когда применим?

Что такое «дрейф концепции» (concept drift) в технологическом процессе и как часто нужно переобучать нейросетевую модель?

Как проверить, что нейросеть не просто запомнила обучающие примеры, а действительно обобщила закономерности процесса?

Каким образом обрабатываются пропуски данных (missing values) в датчиках технологического процесса перед подачей в нейросеть?

Почему для моделирования взрывоопасных или химических процессов недостаточно одной метрики MSE и необходим анализ остатков (residuals)?

Что такое «гибридное моделирование» (нейросеть + физические уравнения) и в каких случаях оно оправдано?

Какой архитектурой (CNN, RNN, трансформер) целесообразно моделировать процесс с сильными временными зависимостями (например, ректификационная колонна) и почему?

Уровень 3. Практический (задачи, ситуации, кейсы)

Задача на выбор архитектуры:

Технологический процесс – прокатка металла. Датчики фиксируют температуру, давление, скорость прокатки, толщину заготовки каждые 0,1 секунды. Нужно предсказать качество готового листа через 5 секунд.

Вопрос: какой тип нейросети (FFNN, RNN, LSTM, CNN 1D) вы выберете и почему?

Задача на обнаружение переобучения:

Вы обучили нейросетевую модель процесса агломерации руды. На обучающей выборке $MSE = 0,002$, на тестовой $MSE = 0,45$.

Вопрос: о чем это говорит? Предложите три способа исправить ситуацию.

Ситуация (нормировка данных):

Входные параметры: температура (800–1200 °C), расход реагента (0,1–0,5 кг/с), концентрация (0,1–10 %).

Вопрос: нужно ли нормировать данные? Если да, то какой метод нормировки (min-max, z-score) примените и почему?

Кейс (дефицит данных):

Процесс редкий (аварийные ситуации). Всего 50 записей аварийного режима и 10 000 записей нормального режима.

Вопрос: как построить нейросетевую модель детекции аварий? Какие методы борьбы с дисбалансом классов предложите?

Задача на разделение выборки:

У вас есть данные непрерывного технологического процесса за 30 суток с частотой 1 Гц.

Вопрос: корректно ли перемешивать все наблюдения случайным образом перед разбиением на обучение/валидацию/тест? Если нет, то как правильно разбить временной ряд?

Ошибка моделирования:

Нейросеть на тестовой выборке показывает $R^2 = 0,98$, но при внедрении на реальную установку ошибка прогноза оказалась в 3 раза выше.

Вопрос: перечислите не менее трех возможных причин этого явления.

Инженерная интерпретация:

Скрытый слой нейросети, моделирующей процесс экструзии полимера, имеет 100 нейронов.

Вопрос: может ли технолог использовать эту модель для понимания физики процесса? Что предложите для повышения интерпретируемости?

Задача на выбор частоты дискретизации:

Процесс имеет постоянную времени 2 секунды. Датчики опрашиваются каждые 10 мс.

Вопрос: нужно ли прореживать данные? Сформулируйте критерий выбора шага дискретизации.

Кейс (обновление модели):

Модель работала полгода, но на прошлой неделе заменили катализатор на более активный.

Вопрос: достаточно ли просто продолжить дообучение (fine-tuning) на новых данных? Какие риски?

Проектная задача:

Сформулируйте этапы построения нейросетевой модели для прогнозирования износа режущего инструмента на токарном станке по данным вибрации, тока двигателя и акустической эмиссии. Какие признаки (features) из временных сигналов вы извлечете?

Рекомендуемая литература:

Панфилова Е. В. Нейросетевое моделирование производственных процессов в нанотехнологиях: учебно-методическое пособие. — М.: Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2025. — 44 с. — ISBN 978-5-7038-6681-8.

Полковская М. Н. Нечеткая логика и нейронные сети: учебное пособие. — ИрГАУ, 2023. — 116 с.

Борисов В. В., Круглов В. В., Федулов А. С. Нечеткие модели и сети : учебное пособие. — 2-е изд., стер. — М.: Горячая линия-Телеком, 2012. — 284 с.

Муртазин Т. (ред.) Искусственный интеллект в задачах моделирования, управления, диагностики технологических процессов: монография. — М.; Вологда: Инфра-Инженерия, 2023. — 232 с. — ISBN 978-5-9729-1428-9.

Тырышкин С. Ю. Нейросетевая оптимизация в автоматизированных системах управления высокоразмерными технологическими процессами // Доклады ТУСУР. — 2025. — Т. 28, № 2. — С. 153–159. DOI: 10.21293/1818-0442-2025-28-2-153-159.

Андриевская Н. В., Резников А. С., Черняев А. А. Особенности применения нейро-нечетких моделей для задач синтеза систем автоматического управления // Фундаментальные исследования. — 2014. — № 11 (7). — С. 1445–1449.