Васильев А.Н., Тархов Д.А., Шемякина Т.А. Нейросетевая модель решения задачи о катализаторе. Гибридный метод. // Проблемы информатики в образовании, управлении, экономике и технике: Сб. статей XIV Междунар. научно-техн. конф. – Пенза: ПДЗ, 2014. – С. 58-62.

УДК 004.032.26+519.63:517.951

НЕЙРОСЕТЕВАЯ МОДЕЛЬ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ О КАТАЛИЗАТОРЕ. ГИБРИДНЫЙ МЕТОД

А.Н. Васильев, Д.А. Тархов, Т.А. Шемякина

NEURAL NETWORK MODEL FOR THE SOLUTION OF THE CATALYST PROBLEM. HYBRID METHOD

A.N. Vasilyev, D. A. Tarkhov, T.A. Shemyakina

Аннотация. Обсуждаются методы построения нейросетевой модели процессов тепломассообмена в грануле пористого катализатора. Приближённое решение задачи ищется в виде выхода искусственной нейронной сети (ИНС), параметры которой настраиваются на основе глобальной оптимизации. Рассматриваются гибридные методы, основанные на применении в процессе обучения нейронной сети результатов численных расчётов.

Ключевые слова: тепломассообмен, гранула катализатора, искусственная нейронная сеть (ИНС), система дифференциальных уравнений, настройка ИНС, глобальная оптимизация, гибридный метод.

Abstract. Some methods of neural network model constructing for heat-mass exchange in a porous catalyst grain are discussed. An approximate solution of the problem is found in the form of an artificial neural network (ANN) output. ANN-parameters are adjusted on the basis of global optimization. Hybrid methods based on the use of numerical computation results in ANN-training are considered.

Keywords: heat-mass exchange, catalyst grain, artificial neural network (ANN), system of differential equations, ANN-training, global optimization, hybrid method.

Моделирование различных химических реакций, физических процессов и т.д. приводит к решению граничных задач для нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений или для нелинейных дифференциальных уравнений с частными производными. На практике коэффициенты и параметры, входящие в уравнения или в дополнительные условия (граничные или начальные), задаются неточно: изменяются на некотором интервале.

В работе [1] рассматривалась задача анализа баланса тепла и массы в плоской грануле пористого катализатора при каталитической реакции в следующем виде: в безразмерных переменных ищется решение краевой задачи

$$\frac{d^2y}{dx^2} = \alpha(1+y)\exp\left[-\frac{\gamma\beta y}{1-\beta y}\right]; \quad \frac{dy}{dx}(0)=0; \quad y(1)=0.$$

Авторы применяли свой нейросетевой подход [2, 3] к построению устойчивых параметрических решений данной задачи в случае, когда один параметр (или все три) задан интервально: $\alpha \in (\alpha^-;\alpha^+)$. Приближённое решение строится в виде выхода искусственной нейронной сети $y(x,\alpha)=\sum_{i=1}^{n} c_i v_i(x,\alpha,\mathbf{a}_i)$, при этом α является входом сети. В качестве базисных нейроэлементов используются функции вида:

$$v(x,\alpha,\mathbf{a}_i)=\exp[-a_{1i}(x-a_{2i})^2]th[-a_{3i}(\alpha-a_{4i})^2],$$
$$\mathbf{a}_i=(a_{1i},a_{2i},a_{3i},a_{4i}),\ \ i=1,..,n.$$

Веса нейронной сети определяются в процессе обучения сети на основе процесса глобальной минимизации функционала ошибки, включающего в себя ошибки в удовлетворении уравнения и граничных условий.

Было проведено три серии вычислительных экспериментов. В первой серии применялся вышеприведённый подход без изменений. Недостатками такого подхода являются большая ресурсоёмкость процесса обучения нейронной сети и существенное возрастание ошибок при расширении интервала изменения параметра.

Во второй и третьей серии применялся гибридный метод, при котором использовались численные поточечные решения задачи при граничных значениях параметра α. Для этого в функционал ошибки добавляется невязка численного решения и выхода нейронной сети:

$$J(y)=\sum_{j=1}^{M}\left\{\left|\frac{d^2y}{dx^2}-\alpha_j(1+y)\exp[-\frac{\gamma\beta y}{1-\beta y}]\right|(x_j,\alpha_j)\right\}^2+$$
$$+\delta\sum_{j=1}^{M}[y'(0,\alpha_j)^2+y(1,\alpha_j)^2]+\delta'\sum_{k=1}^{m}\left[y(x_k')-y_k\right]^2.$$

Функционал вычисляется в наборах пробных точек (x_j,α_j), $(0,\alpha_j)$, $(1,\alpha_j)$, $j=1,...,M$, таким образом, рассматривается минимизация набора функционалов.

Процесс перегенерации семейств пробных точек после определённого числа шагов процесса минимизации позволяет избежать «зависания» в точках локальных экстремумов, способствует устойчивости вычислительного процесса.

Во второй серии численных экспериментов весовой множитель δ' при слагаемом, соответствующем разности между выходом сети и упомянутым выше поточечным решением не менялся в процессе обучения. Использование приближённого решения позволило гораздо лучше обучить нейронную сеть при малых значениях параметра. Особо следует отметить, что при $\alpha=0.01$ ошибка, которую даёт нейронная сеть, меньше ошибки используемых дополнительных данных.

В третьей серии экспериментов уменьшался вес δ' (умножался на 0,95 при каждой перегенерации пробных точек). Результат получился заметно лучше, чем при предыдущем подходе (при постоянном весовом множителе). Данное обстоятельство объясняется тем фактом, что на начальном этапе обучения нейронной сети её ошибка существенно выше, чем у используемого поточечного приближения, и оно позволяет ускорить обучение нейронной сети. На этапе, когда нейронная сеть даёт ошибку, сравнимую с ошибкой поточечного приближения, использование последнего становится нецелесообразными и его влияние на процесс обучения уменьшается указанной выше регулировкой веса при соответствующем слагаемом в функционале ошибки.

Заметим, что обученную таким образом нейронную сеть можно использовать для определения параметров по данным измерений, проводя минимизацию по этим параметрам невязки между данными измерений и выходом нейронной сети.

Полученные результаты позволяют высказать предположение, что такого рода гибридные алгоритмы могут оказаться эффективными для достаточно представительного класса задач построения приближённых решений обыкновенных дифференциальных уравнений и уравнений в частных производных.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант №14-01-00660).

Библиографический список

1. Kubicek M, Hlavacek V. Solution of nonlinear boundary value problems -VIII. evaluation of branching points based on shooting method and GMP technique// Chem. Eng. Sci. – 1974. – V. 29. – P. 1695–1699.

2. Васильев А.Н., Тархов Д.А. Нейросетевое решение задачи о пористом катализаторе // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. – 2008. – №6 (67). – С. 110–113.

3. Тархов Д.А. Нейросетевые модели и алгоритмы. – М.: Радиотехника, 2014. – 348 с.

Васильев Александр Николаевич
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет,
г. Санкт-Петербург, Россия
E-mail: a.n.vasilyev@gmail.com

Vasilyev Alexander Nikolayevich
Federal State Autonomous educational institution of higher education «St. Petersburg State Polytechnical University»,
Saint Petersburg, Russia

Тархов Дмитрий Альбертович
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет»,
г. Санкт-Петербург, Россия
E-mail: dtarkhov@gmail.com

Tarkhov Dmitry Albertovich
Federal State Autonomous educational institution of higher education «St. Petersburg State Polytechnical University»,
Saint Petersburg, Russia

Шемякина Татьяна Алексеевна
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный политехнический университет»,
г. Санкт-Петербург, Россия
E-mail: sh_tat@mail.ru

Shemyakina Tatiana Alekseevna
Federal State Autonomous educational institution of higher education «St. Petersburg State Polytechnical University»,
Saint Petersburg, Russia