Васильев А.Н., Тархов Д.А., Шемякина Т.А. Модель неизотермического химического реактора на основе параметрических нейронных сетей. // Проблемы информатики в образовании, управлении, экономике и технике: Сб. статей XV Междунар. научно-техн. конф. – Пенза: ПДЗ, 2015. – С. 96-99.

УДК 004.032.26+519.63

МОДЕЛЬ НЕИЗОТЕРМИЧЕСКОГО ХИМИЧЕСКОГО РЕАКТОРА НА ОСНОВЕ ПАРАМЕТРИЧЕСКИХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ *

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

MODEL OF NONISOTHERMAL CHEMICAL REACTOR BASED ON PARAMETRIC NEURAL NETWORKS

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

Аннотация. Статья посвящена построению приближённого параметрического нейросетевого решения дифференциального уравнения, описывающего процессы в неизотермическом химическом реакторе. Изучаются свойства приближённого нейросетевого решения задачи в области изменения параметра. Анализируется влияние дополнительной информации о решении, заданной в виде приближённых данных точечных измерений, на результат обучения нейронной сети.

Ключевые слова: неизотермический химический реактор, начально-краевая задача, уравнение диффузии, нейросетевое моделирование, искусственная нейронная сеть (ИНС), настройка ИНС, глобальная оптимизация, гибридный метод.

Abstract. The article is devoted to constructing an approximate parametric neural network solution of singular differential equation describing the processes in non-isothermal chemical reactor. The properties of approximate neural network solution of the problem are investigated in the range of the parameter. The influence of additional information about the solution, given in the form of approximate data point measurements, on the result of neural network training is analyzed.

Keywords: non-isothermal chemical reactor, initial-boundary value problem, diffusion equation, neural network modeling, artificial neural network (ANN), ANN training, global optimization, hybrid method.

Рассматривается макрокинетическая модель неизотермического химического реактора [1]. Процессы теплового взрыва, самовоспламенения, зажигания, распространения волн горения и т.д., происходящие в реакторе, описываются системой квазилинейных (параболических, эллиптических) уравнений в частных производных или обыкновенных дифференциальных уравнений.

В безразмерных переменных модель химического реактора описывается системой квазилинейных уравнений теплопроводности и диффузии:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial\theta}{\partial t} = \dfrac{1}{\delta}\Delta\theta + \varphi(a)\exp\dfrac{\theta}{1+\beta\theta}, \\ \dfrac{\partial a}{\partial t} = \dfrac{1}{\delta}\Delta y - \gamma\varphi(a)\exp\dfrac{\theta}{1+\beta\theta}, \end{cases} \tag{1}$$

где a – относительная концентрация реагирующей компоненты смеси; θ – изменение относительной температуры (безразмерная температура); x – относительное изменение длины реактора (безразмерная координата); Δ – оператор

*Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (гранты №14-01-00660 и №14-01-00733).

Лапласа в безразмерных координатах; γ – безразмерная энергия активации; β – безразмерный коэффициент теплопередачи; δ – безразмерный параметр, называемый числом Франк-Каменецкого; $\varphi(a)$ – зависимость, характеризующая скорость реакции от концентрации.

В работах [2–4] исследовалась нейросетевая модель катализатора: анализ баланса тепла и массы в плоской грануле пористого катализатора при каталитической реакции приводил к краевой задаче для обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка, которое является частным случаем стационарной системы дифференциальных уравнений (1):

$$\frac{d^2\theta}{dx^2} = \alpha(1+\theta)\exp[-\frac{\gamma\beta\theta}{1-\beta\theta}], \qquad \frac{d\theta}{dx}(0)=0, \quad \theta(1)=0. \tag{2}$$

В данной работе продолжается исследование частных вариантов модели химических реакторов – системы уравнений (1) с помощью нейросетевого моделирования. В предположении, что реакция является одностадийной, необратимой, не сопровождается фазовыми переходами, протекает в неподвижной среде, рассматривается стационарная задача о тепловом взрыве в плоскопараллельном случае [1]. Эта задача интересна тем, что известно точное решение, область существования решения и значения параметра, при которых решение задачи не существует ($\delta > \delta_{кр} \approx 0.878458$), – рассматриваем её в качестве модельной для алгоритмов обучения нейронных сетей.

Ищется приближённое решение краевой задачи:

$$\frac{d^2\theta}{dx^2} + \delta\exp(\theta) = 0, \ \frac{d\theta}{dx}(0)=0, \quad \theta(1)=0, \tag{3}$$

в виде нейросетевого разложения вида

$$\theta(x,\delta) = \sum_{k=1}^{N} c_k exp(-\alpha_k(x-\tilde{x}_k)^2) th\left(\beta_k(\delta-\tilde{\delta}_k)^2\right),$$

параметры которого находятся в процессе поэтапного обучения сети на основе минимизации функционала ошибки $J(\theta) = J_0 + \lambda_1 J_1 + \lambda_2 J_2$, состоящего из невязок в удовлетворении уравнению

$$J_0 = \sum_{j=1}^{M}\left(\frac{d^2\theta}{dx^2} + \delta\exp(\theta)\right)^2 (x_j, \delta_j),$$

краевым условиям

$$J_1 = \sum_{j=1}^{M}\left(\left(\frac{d\theta}{dx}(0,\delta_j)\right)^2 + \left(\theta(1,\delta_j)\right)^2\right)$$

и *дополнительным условиям* в форме $J_2 = \sum_{i=1}^{m}\left(\theta(x_i', \delta') - \theta_i\right)^2$,

где x_j – периодически перегенерируемые тестовые точки из $[0,1]$; δ_j – тестовые точки из $[\delta_{\min}; \delta_{\max}]$; x_i' – фиксированные точки, где известны значения искомой функции $\theta(x_i', \delta') = \theta_i$; λ_1, λ_2 – положительные штрафные параметры. Нейросетевой подход применялся с учётом и без учёта дополнительной информации, полученной на основе измерений или грубого численного решения в фиксированном наборе точек, учитываемой в слагаемом $\lambda_2 J_2$.

Минимизация функционала $J(\theta)$ проводилась методом ***RProp*** с перегенерацией $M=50$ и $M=100$ тестовых точек каждые 5 шагов работы алгоритма, делалось 200 перегенераций.

Для применения гибридного метода строим приближённое поточечное решение при значениях параметра: $\delta' = 0.5,\ \delta' = 0.8,\ \delta' = 0.87$, которые рассматриваем как дополнительные данные для решения задачи.

Мы использовали сети из $N = 30,\ N = 50,\ N = 100$ нейроэлементов и выбирали следующие интервалы изменения параметра $\delta \in [\delta_{\min}, \delta_{\max}]$: $[0.4;1]$ и $[0.85;0.9]$.

Численные эксперименты показали:

1. Методы построения нейросетевых моделей сложных систем существенно улучшают нейросетевое решение, если используется дополнительная информация. Её можно получить, например, с помощью приближений на основе традиционных численных методов (даже не очень точных).

2. Нейронная сеть позволяет построить приближённое решение параметрической задачи. При этом параметр может принимать значения, при которых точного решения задачи не существует. Эффект отсутствия решения проявляется резким ростом ошибки удовлетворения уравнению.

3. В сложных задачах, где неизвестен интервал существования решения, нейронные сети позволяют уточнить приближённое решение. Для этого используются дополнительные данные – измерения или численное решение при одном значении параметра. При этом эффект уточнения теряется при приближении к критическому значению параметра.

Библиографический список

1. Худяев С.И. Пороговые явления в нелинейных уравнениях. – М.: Наука, 2003. – 268 с.

2. 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. науч.-техн. конф. – Пенза: Приволжский Дом знаний, 2014. – С. 58–62.

3. Васильев А.Н., Тархов Д.А., Шемякина Т.А. Гибридный метод построения параметрической нейросетевой модели катализатора // Современные информац. технологии и ИТ-образование. – М.: ИНТУИТ.РУ, 2014. – Т.1. №1(9). – С.476–484.

4. Vasilyev A.N., Tarkhov D.A. Mathematical Models of Complex Systems on the Basis of Artificial Neural Networks // Nonlinear Phenomena in Complex Systems. - vol. 17, no.3. – P. 327–335 (2014).

5. Васильев А.Н., Тархов Д.А. Нейросетевые методы и алгоритмы математического моделирования. – СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2014. – 582 с.

Васильев Александр Николаевич
Санкт-Петербургский государственный политехнический университет Петра Великого,
г. Санкт-Петербург, Россия
E-mail: a.n.vasilyev@gmail.com

Vasilyev A.N.
Peter the Great Saint-Petersburg Politechnical University,
Saint-Petersburg, Russia

Тархов Дмитрий Альбертович
Санкт-Петербургский государственный политехнический университет Петра Великого,
г. Санкт-Петербург, Россия
E-mail: dtarkhov@mail.com

Tarkhov D.A.
Peter the Great Saint-Petersburg Politechnical University,
Saint-Petersburg, Russia

Шемякина Татьяна Алексеевна
Санкт-Петербургский государственный политехнический университет Петра Великого,
г. Санкт-Петербург, Россия
E-mail: sh_tat@mail.ru,

Shemyakina T.A.
Peter the Great Saint-Petersburg Politechnical University,
Saint-Petersburg, Russia