

Семёнов Иван Александрович,

к.т.н., доцент, Ангарский государственный технический университет,

e-mail: semenovia.chem@yandex.ru

Петров Александр Васильевич,

магистрант каф. ХТТ, Ангарский государственный технический университет,

e-mail: thehereticanthen@mail.ru

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ИСКУССТВЕННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ДЛЯ ПОИСКА РЕШЕНИЙ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

Semenov I.A., Petrov A.V.

USING NEURAL NETWORKS TO SEARCH SOLUTIONS TO DIFFERENTIAL EQUATIONS

Аннотация. Рассмотрен подход к моделированию химико-технологических процессов за счет решения дифференциальных уравнений при помощи искусственных нейронных сетей. Описаны возможности модуля Keras языка программирования Python в решении данной проблемы.

Ключевые слова: моделирование, нейронные сети, Keras, Python.

Abstract. An approach to modeling chemical technological processes for calculating solutions of differential methods using artificial neural networks is considered. The capabilities of the Keras module of the Python programming language within these problems are described.

Keywords: simulation, neural networks, Keras, Python.

Математическое моделирование нестационарных и динамических химико-технологических процессов сопряжено с решением дифференциальных уравнений. В частности, они описывают изменение параметров системы с течением времени и в пространстве, что позволяет в целом прогнозировать поведение процессов.

Дифференциальные уравнения широко применяются для расчёта реакционных процессов, гидравлики, а также тепло- и массопереноса. Например, при их помощи удастся описать изменение концентрации реагентов и продуктов по времени, учитывая кинетику реакции и условия в реакторе. Это позволяет инженерам оптимизировать процесс, управляя параметрами реактора для достижения желаемого выхода продукта или эффективности производства.

Уравнения теплопроводности и теплоотдачи позволяют предсказать распределение температуры в реакторе или теплообменнике. Уравнение диффузии дают сведения об изменении концентраций веществ в объеме реакционных аппаратов за счет массопередачи. Всё это важно для контроля процесса и предотвращения неэффективности или аварийных ситуаций.

Из всех возможных методов решения дифференциальных уравнений в области моделирования химико-технологических процессов наиболее распространенными являются два основных подхода:

1. Аналитические методы. Это классический подход, основанный на аналитическом нахождении вида неизвестной зависимости между параметрами

процессов. Однако, в случае сложных дифференциальных уравнений получить решение аналитически может быть невозможным.

2. Численные методы. Эти методы разбивают пространство и время на конечные элементы или ячейки и аппроксимируют дифференциальные уравнения на этих элементах. Численные методы позволяют решать сложные уравнения, но требуют вычислительных ресурсов и могут быть нестабильными при неправильном выборе параметров.

Выбор метода решения дифференциальных уравнений зависит от конкретной задачи моделирования и требуемой точности результатов. Комбинация различных методов часто применяется для достижения наилучших результатов в прогнозировании химико-технологических процессов.

В последние годы для решения дифференциальных уравнений стали активно применять искусственные нейронные сети, которые при моделировании процессов подменяют собой неизвестные функции. Нейронные сети могут быть использованы для аппроксимации решений дифференциальных уравнений, что позволяет без поиска явного аналитического решения учесть сложные и нелинейные зависимости между параметрами процессов.

Например, при описании процессов нестационарной диффузии широко используется 2-й закон Фика, который для случая массообмена в направлении только лишь одной оси x выражается в следующей дифференциальной форме:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}, \quad (1)$$

где C – концентрация диффундирующего вещества, кмоль/м³; D – коэффициент диффузии, м²/с; t – время, с; x – координата, м.

Решением дифференциального уравнения (1) является неизвестная функция $C = f(x, t)$ при заданных граничных и начальных условиях:

$$C(x, 0) = C_0; \quad C(x_1, t) = C_1; \quad C(x_2, t) = C_2, \quad (2)$$

где C_0 – начальная концентрация во всей области x , кмоль/м³; C_1 и C_2 – граничные концентрации в фиксированных точках x_1 и x_2 , кмоль/м³.

Неизвестная функция $f(x, t)$ может быть выражена не аналитической зависимостью, а нейронной сетью с двумя входными параметрами x и t , и одним выходным – концентрацией C . Обучение такой сети должно выполняться на основе функции ошибки S , которая рассчитывает отклонение $f(x, t)$ от дифференциального уравнения (1) и установленных граничных и начальных условий (2):

$$S = \sum_{i=1}^N df_i^2 + bgn^2 + lmt_1^2 + lmt_2^2,$$

где df – отклонение от дифференциального уравнения в множестве точек x и t ;

bgn – отклонение от начального условия; lmt_1 и lmt_2 – отклонения от граничных условий; N – количество точек в множестве значений x и t .

Производные от нейронной сети $f(x, t)$ при определении функции ошибки должны быть заменены на свои конечно-разностные варианты. В этой связи ошибка, связанная с отклонением результатов расчета сети от исходного дифференциального уравнения (1), может быть выражена как:

$$df = \frac{f(x, t + \Delta t) - f(x, t)}{\Delta t} - D \frac{f(x + \Delta x, t) - 2f(x, t) + f(x - \Delta x, t)}{\Delta x^2},$$

где Δx и Δt – конечно-разностные шаги переменных x и t .

Отклонения от начального и граничных условий соответственно рассчитываются как:

$$bgn = f(x, 0) - C_0;$$

$$lmt_1 = f(x_1, t) - C_1;$$

$$lmt_2 = f(x_2, t) - C_2.$$

Обучение сети $f(x, t)$ в этом случае будет заключаться в нахождении значений весов ее искусственных нейронов в широком диапазоне значений входных переменных x и t , при которых итоговая суммарная функция ошибки S примет свое минимально возможное значение.

Достоинством такого подхода к поиску неизвестных функций, а, следовательно, и математического описания процесса заключается в том, что помимо теоретических зависимостей в функцию ошибки S могут включаться слагаемые, учитывающие данные фактического процесса. В этой связи модель $f(x, t)$ в себе будет учитывать не только искомый теоретический закон, но и отклонение от него в условиях эксперимента или производственного процесса.

Искусственная нейронная сеть представляет собой сложную математическую модель с большим количеством неизвестных параметров. Процесс ее обучения заключается в нахождении оптимальных значений этих параметров на основе имеющейся выборки данных. Такая сложная математическая задача требует от инженеров и ученых определенных навыков, которыми обладает лишь небольшое число узких специалистов.

Для упрощения работы с нейронными сетями на языке программирования Python был создан модуль Keras, который используется для разработки и обучения различных типов нейронных сетей. Keras известен своей простотой и удобством использования, что делает его популярным как среди новичков, так и среди опытных специалистов в области машинного обучения [1].

Keras предоставляет множество классов и функций, которые упрощают создание моделей нейронных сетей без необходимости углубляться в детали

их основной реализации. Используя Keras, инженеры и ученые могут создавать разнообразные типы нейронных сетей, такие как:

- стандартные нейронные сети для создания классификаторов и регрессионных моделей;
- сверточные нейронные сети для обработки изображений;
- рекуррентные нейронные сети для анализа и прогнозирования последовательных данных.

Keras обладает гибкостью и совместимостью с другими платформами машинного обучения, что позволяет специалистам использовать мощные возможности этих инструментов. В области техники и технологии Keras широко применяют в следующих направлениях:

- Анализ обширных данных. Нейронные сети позволяют выявлять ценную информацию и закономерности, которые могут оставаться скрытыми при использовании традиционных методов. Это особенно полезно в такой области, как проектирование сложных систем, где анализ данных может привести к более обоснованным решениям.

- Прогнозирование технического обслуживания. Нейронные сети могут быть использованы в различных отраслях промышленности для предсказания времени выхода оборудования или машин из строя. Анализируя исторические данные и данные с датчиков в реальном времени, нейронные сети помогают инженерам планировать техническое обслуживание заранее, что позволяет сократить время простоя и связанные с ними расходы.

- Разработка систем автоматизации и робототехники. Нейронные сети играют важную роль в создании автономных систем, таких как цифровые операторы процессов, роботы, дроны и другие. Инженеры используют нейронные сети для обеспечения возможности таким системам воспринимать окружающую среду, взаимодействовать с ней и принимать соответствующие управляющие решения.

Кроме традиционных вышеназванных путей использования нейронных сетей, методы модуля Keras позволяют упростить поиск решений дифференциальных уравнений для случаев моделировании действующих технологических процессов. Keras дает широкий набор стандартных алгоритмов обучения, предоставляя при этом возможность ручного определения функции ошибки.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Джулли, А.** Библиотека Keras – инструмент глубокого обучения. Пер. с англ. / А. Джулли, С. Пал – М.: ДМК Пресс, 2018. – 294 с.