

ПРИМЕНЕНИЕ ИСКУССТВЕННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ В ХИМИЧЕСКОЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ

Шангитова Ж. Е., Оспанова Т. Т., Марков А. В.

Кафедра информационных систем, Евразийский Национальный Университет им. Л.Н. Гумилева,
Нур-Султан, Республика Казахстан

Кафедра систем управления, Белорусский государственный университет информатики и
радиоэлектроники, Минск, Республика Беларусь

zhanna.shangitova@mail.ru

E-mail: markov@bsuir.by

В статье исследована актуальность и перспективы применения искусственных нейронных сетей (далее ИНС) в химической промышленности. Рассмотрена классификация и архитектура нейронных сетей и сравнены основные алгоритмы обучения нейронных сетей. Результаты исследования будут использованы в дальнейших статьях.

ВВЕДЕНИЕ

При исследовании каталитических реакций и процессов чаще всего используются методы математического моделирования, которые позволяют описывать изменения состояний изучаемой системы. Однако для некоторых процессов построение полных математических моделей, учитывающих все особенности химико-технологического процесса, является весьма трудоемкой задачей. В этом случае при создании моделей вводят ряд упрощений и ограничений, которые в свою очередь вносят погрешности в численные расчеты и могут существенно исказить получаемые результаты. Альтернативным подходом при моделировании химико-технологических процессов может быть применение ИНС, позволяющих максимально учесть особенности изучаемых процессов. Преимущество ИНС при моделировании химических процессов определяется возможностью строить гибкие модели процессов, которые описываются сложными математическими многомерными функциями. Следует также отметить, что нейронные сети являются наиболее эффективным инструментом при решении задач прогнозирования и управления в условиях, когда имеется связь между переменными-предикторами (входами) и прогнозируемыми переменными (выходами), даже если эта связь имеет очень сложную природу и ее трудно выразить в обычных терминах корреляций или различий между группами. Поэтому создание алгоритмов решения задачи оптимального управления на основе модели ИНС является актуальной задачей [1].

I. ВВЕДЕНИЕ

При исследовании каталитических реакций и процессов чаще всего используются методы математического моделирования, которые позволяют описывать изменения состояний изучаемой системы. Однако для некоторых процессов построение полных математических моделей, учитывающих все особенности химико-

технологического процесса, является весьма трудоемкой задачей. В этом случае при создании моделей вводят ряд упрощений и ограничений, которые в свою очередь вносят погрешности в численные расчеты и могут существенно исказить получаемые результаты. Альтернативным подходом при моделировании химико-технологических процессов может быть применение ИНС, позволяющих максимально учесть особенности изучаемых процессов. Преимущество ИНС при моделировании химических процессов определяется возможностью строить гибкие модели процессов, которые описываются сложными математическими многомерными функциями. Следует также отметить, что нейронные сети являются наиболее эффективным инструментом при решении задач прогнозирования и управления в условиях, когда имеется связь между переменными-предикторами (входами) и прогнозируемыми переменными (выходами), даже если эта связь имеет очень сложную природу и ее трудно выразить в обычных терминах корреляций или различий между группами. Поэтому создание алгоритмов решения задачи оптимального управления на основе модели ИНС является актуальной задачей [1].

II. СТРУКТУРА ИНС

Нейронная сеть – это система, состоящая из многих простых вычислительных элементов, работающих параллельно, функция которых определяется структурой сети, силой взаимосвязанных связей, а вычисления производятся в самих элементах или узлах [2]. Работу искусственного нейрона можно описать показанным на рисунке 1 образом.

III. ЭТАПЫ РАЗРАБОТКИ ИНС

Можно выделить 4 основных этапа в процессе разработки ИНС для решения прикладной задачи [3]:

1. Сбор данных. На этом этапе необходимо составить набор признаков для описания и ясно понимать сущность задачи. После выбора признаков необходимо установить, насколько значимы они и не отражают ли другие существенные признаки.;
2. Преобразование данных. Основная цель преобразования данных заключается в приведении их к одним единицам, например, в интервале $[0;1]$ или $[-1;1]$;
3. Построение модели сети. Одним из важных факторов в построении модели сети является определение ее топологии (рис. 2);

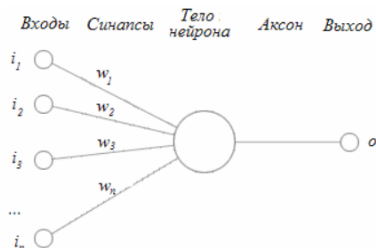


Рис. 1 – Нейрон



Рис. 2 – Топология (архитектура) нейронных сетей

4. Обучение. Немаловажную роль в успешном обучении сети играет активационная функция нейронов. Выделим перечень наиболее используемых функций активации (рис. 3).

IV. АЛГОРИТМЫ ОБУЧЕНИЯ ИНС

Для решения задач обучения могут быть использованы следующие (итерационные) алгоритмы:

- Алгоритмы локальной оптимизации с вычислением частных производных первого порядка.;
- Алгоритмы локальной оптимизации с вычислением частных производных первого и второго порядка;
- Стохастические алгоритмы оптимизации;
- Алгоритмы глобальной оптимизации.

V. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Согласно работе [4] наилучшим образом обучаются сети, методом тренировки которых являются метод градиентного спуска с адаптивным обучением или метод градиентного спуска с учетом моментов и адаптивным обучением. Метод градиентного спуска является наиболее оптимальным методом обучения ИНС и будет использован в дальнейших работах для исследования химического процесса.

VI. СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Шаймухаметов, Д. Р., Мустафина, С. А., Шаймухаметова, Д. В. Создание искусственной нейронной сети для определения оптимального температурного режима ведения химического процесса // Вест. Башкир.ун-та. – 2019. – № 24. – С. 551–558.
2. Теория нейронных сетей / А. И. Галушкин. – Минск.: ИПРЖР, 2000.
3. Рутковская, Д., Пилиньский, М., Рутковский, Л. Нейронные сети, генетические алгоритмы и нечеткие системы // Горячая линия. – 2006. – С. 452.
4. Федосин, С. А., Ладяев, Д. А., Марьина, О. А. Анализ и сравнение методов обучения нейронных сетей // Вестн. Мордов. ун-та. – 2010. – № 4. – С. 79–88.

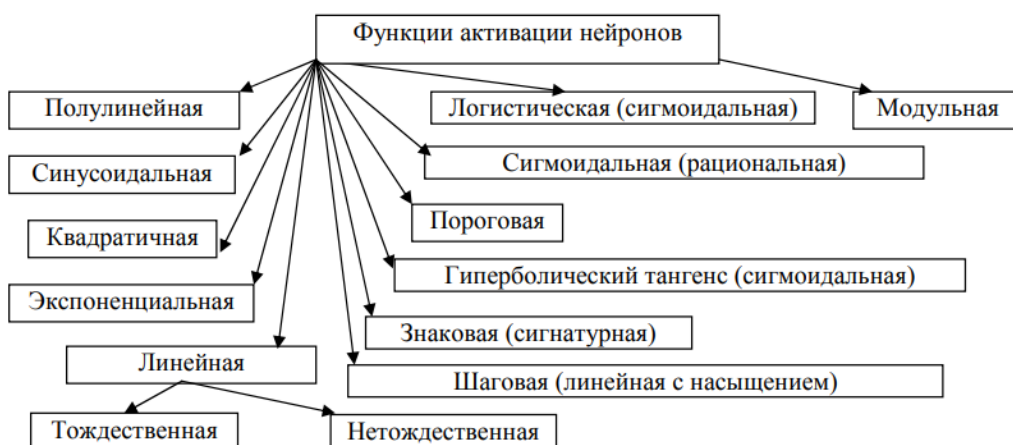


Рис. 3 – Функция активации нейрона