

УДК 004.032.26+519.62+517.951

Аналитико-нейросетевая модификация метода Хойна для построения модели процессов в химическом реакторе

Васильев А.Н.¹, Тархов Д.А.¹, Шемякина Т.А.¹

Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого¹

Аннотация: В статье исследуются новые подходы к созданию адаптивных моделей, способных подстраиваться под обновляемые данные. Предлагаемый подход объединяет аналитическую модификацию классических численных методов с физически информированными нейронными сетями (PINN). При таком подходе строится иерархия приближённых решений в виде функций. Работа метода проиллюстрирована на примере модели процессов в химическом реакторе. В этой модели параметры задачи вводятся в набор входных переменных. Для построения приближённого параметрического решения применяется аналитическая модификация метода Хойна. Численные эксперименты при разных уровнях включения нейросетевого подхода показывают, что многослойные методы дают возможность строить более простые модели, не теряя точности, что упрощает их использование и адаптацию при поступлении новых данных.

Ключевые слова: неизотермический химический реактор, метод Хойна, нейронные сети, параметрическое решение.

1. Введение

Задачи нахождения приближённого решения дифференциальных уравнений решались успешно классическими численными методами [1]. Основная сложность применения этих методов к прикладным задачам состоит в том, что модель реального объекта, данная только в виде дифференциального уравнения, изначально неточна, и уточнение модели – её численного решения – с помощью использования измерений затруднено.

В процессе преодоления таких проблем появились методы приближённого решения дифференциальных уравнений с помощью физически информированных нейронных сетей (PINN) [2, 3]. Однако нейросетевое моделирование требует ресурсоёмкой процедуры обучения. В работе проведено объединение подхода PINN и подхода, основанного на аналитической модификации численных методов. В ней продолжается рассмотрение нового гибридного подхода в создании адаптивных моделей, способных подстраиваться под обновляемые данные.

Метод продемонстрирован на примере модели, описывающей процессы тепло- и массо-обмена в химическом реакторе [4]. Предлагаемый подход объединяет аналитическую модификацию [5, 6] выбранного численного метода (в частности, метода Хойна [1]) с физически информированными нейронными сетями.

2. Постановка задачи. Метод решения

Рассматривается стационарная задача о тепловом взрыве в плоскопараллельном случае в предположении, что реакция является одностадийной, необратимой, не сопровождаемая фазовыми переходами, протекает в неподвижной среде.

Математическая модель химического реактора при указанных допущениях приводится в виде нелинейного дифференциального уравнения второго порядка [4]:

$$\frac{d^2 y}{dx^2} + \delta \exp(y) = 0, \quad x \in [0, 1], \quad (1)$$

с краевыми условиями:

$$\frac{dy}{dx}(0) = 0, \quad y(1) = 0, \quad (2)$$

где δ – параметр задачи, $\delta \in [0.1, \delta_*]$, $\delta_* \approx 0,878458$.

Задача (1)-(2) сводится к системе двух обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} \frac{dy}{dx} = z(x), \\ \frac{dz}{dx} = -\delta \exp(y(x)), \end{cases} \quad (3)$$

с краевыми условиями: $y'(0) = 0$, $y(1) = 0$, $z(0) = 0$.

Обычно для такой системы строят дискретное численное решение. В данной работе мы предлагаем альтернативный подход, направленный на построение приближённого решения в функциональной форме. Мы строим приближённое решение на переменном интервале: $D = [\min(x_0, x), \max(x_0, x)]$. Комбинированная схема обобщённого метода Хойна представима в следующем виде:

$$y_{k+1} = y_k + x((1-u)z_k + uz_{k+1}) = y_k + xz_k - \delta x^2 u \exp(y_k), \quad k = \overline{0, n},$$

где u – вспомогательный параметр, $z_{k+1} = z_k - \delta x \exp(y_k)$, $z_0 = 0$, $y_0 = u \delta \exp(y_0)$, $h_k = h_k(x)$, $y_k = y_k(x)$, $y_0(x) = y_0$, тогда приближённое решение представлено в виде $y(x) \approx y_n(x)$. Число n называется числом слоёв модели. Для $n = 1$ искомое приближённое решение запишется в виде $y(x) = (1 - x^2)y_0$.

Рассматриваем три уровня моделей.

Первый уровень моделей исследуется при $y_0 = \text{const}$. Параметр u метода Хойна находим на основе минимизации функционала ошибки задачи для уравнения химического реактора.

Второй уровень моделей исследуется при $y_0 = y_0(\delta)$, т.е. состоит в поиске параметра схемы в виде нейросетевой функции параметра задачи.

Третий уровень моделей исследуется при $y_0 = y_0(x, \delta)$. При этом параметр схемы ищется в виде нейросетевой функции двух переменных – параметра задачи и независимой переменной уравнения. Для этого уровня моделей параметр y_0 представлен в виде нейронной сети:

$$y_0(x, \delta) = \sum_{i=1}^m c_i v_i(x, \delta, \mathbf{a}_i) + c_0,$$

где v_i – базовые функции, c_i – обучаемые коэффициенты, $\mathbf{a}_i$ – дополнительные параметры. Для второго уровня моделей из последней формулы исключается переменная x .

Параметры нейронной сети определяются путем минимизации функционала ошибки, определённого на множестве точек выборки. Основные потери определяются по формуле:

$$J = \sum_{j=1}^m \left(\frac{d^2 y_k}{dx^2}(M_j) + \delta \exp(y_k(M_j)) \right)^2,$$

где $M_j = (x_j, \delta_j)$, $j = \overline{0, m}$, – случайно сгенерированные точки выборки в области параметров.

3. Вычислительные эксперименты

Расчеты проведены в области $x \in [0, 1]$, $\delta \in [0.1, \delta_*]$. Результаты исследований демонстрируют эффективность и гибкость предложенного аналитико-нейросетевого подхода для решения и моделирования задач с гетерогенными данными, среди которых могут быть и нелинейные дифференциальные уравнения. Рассмотренный в данной работе метод позволил получить простые формулы для приближённого решения задачи (1)-(2). Данные формулы существенно проще формул, полученных методами, используемыми в работах [2, 3, 5, 6].

4. Заключение

Рассмотренная модельная задача подтверждает вывод о том, что многослойные методы дают возможность строить более простые модели, не теряя в точности, что упрощает их использование и адаптацию при поступлении новых данных.

Литература

1. Вержбицкий В.М. Численные методы математической физики // Директ-Медиа. 2021. 210 с.
2. Васильев А.Н., Тархов Д.А., Шемякина Т.А. Гибридный метод построения параметрической нейросетевой модели катализатора // Современные информационные технологии и ИТ-образование. 2014. Т. 1, № 10. С. 476-484.
3. Васильев А.Н., Тархов Д.А., Шемякина Т.А. Моделирование процессов в химическом реакторе на основе нейронных сетей // Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ. Материалы VII Всероссийской научной молодежной школы-семинара имени Е.В. Воскресенского с международным участием. 2016. С. 22-23.
4. Худяев С.И. Пороговые явления в нелинейных уравнениях // ФИЗМАТЛИТ. 2003. 268 с.
5. Shemyakina T.A., Tarkhov D.A., Vasilyev A.N., Velichko Y. Comparison of two neural network approaches to modeling Processes in a Chemical Reactor // Thermal Science. 2019. Т. 23, № S2. С. S583-S589.
6. Tarkhov D., Lazovskaya T., Malykhina G. Constructing Physics-Informed Neural Networks with Architecture Based on Analytical Modification of Numerical Methods by Solving the Problem of Modelling Processes in a Chemical Reactor // Sensors. 2023. Vol. 23, No. 663. DOI: 10.3390/s23020663.

MSC 004.032.26+519.62+517.951

Analytical and neural network modification of Heun's method for constructing a model of processes in a chemical reactor

A.N. Vasilyev¹, D.A. Tarkhov¹, T.A. Shemyakina¹

Peter the Great Saint Petersburg Polytechnic University¹

Abstract: The article explores new approaches to creating adaptive models that can fit to updated data. The proposed approach combines an analytical modification of classical numerical methods with physics informed neural networks (PINN). This approach builds a hierarchy of approximate solutions in the form of functions. The operation of the method is illustrated by an example of a process model in a chemical reactor. In this model, the task parameters are entered into a set of input variables. An analytical modification of Heun's method is used to construct an approximate parametric solution. Numerical experiments at different levels of the neural network approach inclusion show that multilayer methods make it possible to build simpler models without losing accuracy, which simplifies their use and adaptation when new data is received.

Keywords: non-isothermal chemical reactor, Heun's method, neural networks, parametric solution.