

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ОДНОСЛОЙНОГО И МНОГОСЛОЙНОГО РЕШЕНИЯ
ЗАДАЧИ О ПОРИСТОМ КАТАЛИЗАТОРЕ

Рассматривается новый метод [1] моделирования процессов тепломассопереноса в грануле пористого катализатора [2,3], основанный на модификации известных численных методов, позволяющей получить приближённое решение в аналитической форме. В работе [4] было установлено, что однослойное нейросетевое решение достаточно точно моделирует исследуемые процессы не только для конкретных значений параметров, но и в интервалах изменения этих параметров. В данной работе рассматривается многослойное решение задачи, которое оказалось более эффективным.

Анализ исследуемых процессов в грануле пористого катализатора при каталитической химической реакции можно свести к решению краевой задачи для обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка, построенного с учетом геометрии гранулы [2,3]. Далее рассматриваем случай плоской гранулы. Тогда задача о пористом катализаторе будет сводиться к решению дифференциального уравнения (1) с учётом краевых условий (2)

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

$$y(1) = 0, y'(0) = 0 \quad (2)$$

Особенность задачи заключается в том, что классические численные методы предназначены для решения задач Коши, а не краевых задач. Чтобы избежать данной проблемы было построено многослойное решение [1] задачи на основе известного метода Штёрмера [5], для которого неизвестное условие решения на левом конце входит в виде параметра: $y(0) = p$. Простейший вариант данного метода, который применяется к уравнению вида (3) состоит в применении рекуррентного соотношения (4).

$$y''(x) = f(x, y) \quad (3)$$

$$y_{k+1} = 2y_k - y_{k-1} + h^2 f(x_k, y_k), h = x/n \quad (4)$$

Исследовалась погрешность, получаемая при расчётах с использованием значений параметров из некоторого интервала. К каждой комбинации были введены все три параметра, изменяющиеся в пределах двух интервалов: $\alpha, \beta, \gamma \in (0;1)$ и $\alpha, \beta, \gamma \in (0;2)$. Исследуемые интервалы намного больше, чем интервалы, в которых получено решение в [4]. Так же, в данной работе все три параметра принимали значения из одного и того же интервала, например, $\alpha, \beta, \gamma \in (0;1)$ или $\alpha, \beta, \gamma \in (0;2)$, в то время как в ходе экспериментов, проводимых в [4], значения брались из различных интервалов: $\alpha \in (0,05;0,15)$, $\beta \in (0,4;0,6)$, $\gamma \in (0,8;1,2)$.

Для приближения к решению $y(x, p, \alpha, \beta, \gamma)$ (где p -параметр, получаемый в виде нейросетевой функции параметров задачи $p = p(\alpha, \beta, \gamma)$,, число слоёв в котором равно двум, получаем выражение

$$p + 0.25x^2\alpha \left(e^{-\frac{p\beta\gamma}{1-p\beta}} (1+p) \right) + \exp \left[-\frac{\left(p + 0.125e^{-\frac{p\beta\gamma}{1-p\beta}} (1+p)x^2\alpha \right) \beta\gamma}{1 - \left(p + 0.125e^{-\frac{p\beta\gamma}{1-p\beta}} (1+p)x^2\alpha \right) \beta} \right] (1+p)(1 + 0.125e^{-\frac{p\beta\gamma}{1-p\beta}} x^2\alpha).$$

Для формулы, количество слоёв в которой соответствовало двум, увеличение количества нейронов приближающей сети, не выявило значительного увеличения точности полученного нейросетевого приближения. Наименьшая ошибка была достигнута при максимальном рассматриваемом количестве нейронов - 15, она составила 0.0025 при изменении входных параметров α , β и γ в интервале (0;1).

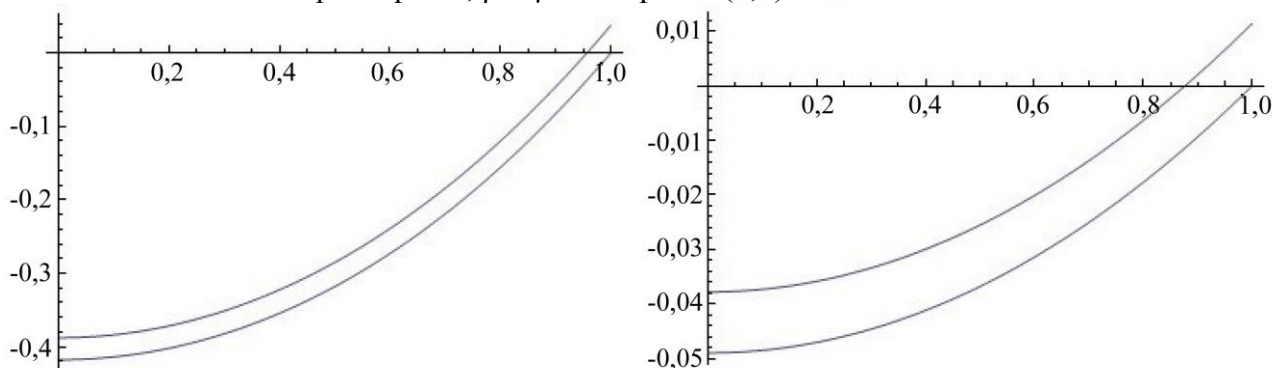


Рис.1. График решения, найденный в пакете Mathematica, для двухслойных формул с использованием приближающей сети, включающей 2 нейроны и график решения подсчитанные по приближённой формуле для интервала изменения параметров (0;1) (слева) и для интервала (0;2) (справа).

Уже при рассмотрении приближающей сети с количеством нейронов 2, 5 и 15 для количества слоёв 2, 3 и 4 наблюдалось, что для приближающей сети из двух нейронов погрешность при изменении параметров α , β и γ в интервале (0;1) меньше погрешности при их изменении в интервале (0;2) на порядок, тогда как при рассмотрении приближающей сети, включающей 5 или 15 нейронов.

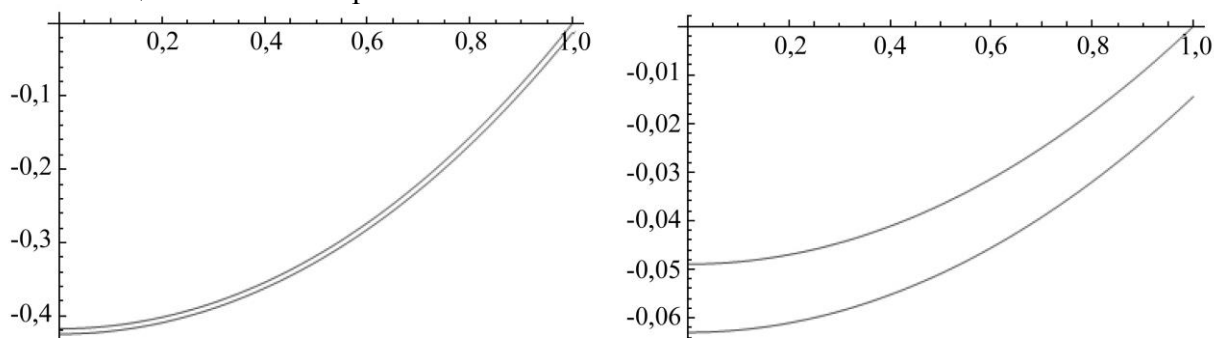


Рис.2. График решения, найденный в пакете Mathematica, для трехслойных формул с использованием приближающей сети, включающей 5 нейронов и график решения подсчитанные по приближённой формуле для интервала изменения параметров (0;1) и (0;2).

При проведении расчетов для трёхслойной и четырёхслойной формулы значительно увеличилось время получения приближённого решения и среднеквадратичных ошибок. Результаты расчётов, проводимых для трёхслойной формулы, показали, что наименьшая погрешность так же достигается при большем количестве нейронов в приближающей сети и при изменении входных параметров в меньшем интервале.

Результаты вычислений погрешностей расчётов для трёхслойных формул показали, что наиболее точный результат достигается при 5 нейронах в сети (рис.2), приближающей начальные условия. Для пробных точек для уравнения наименьшая среднеквадратичная ошибка составила 0.0025.

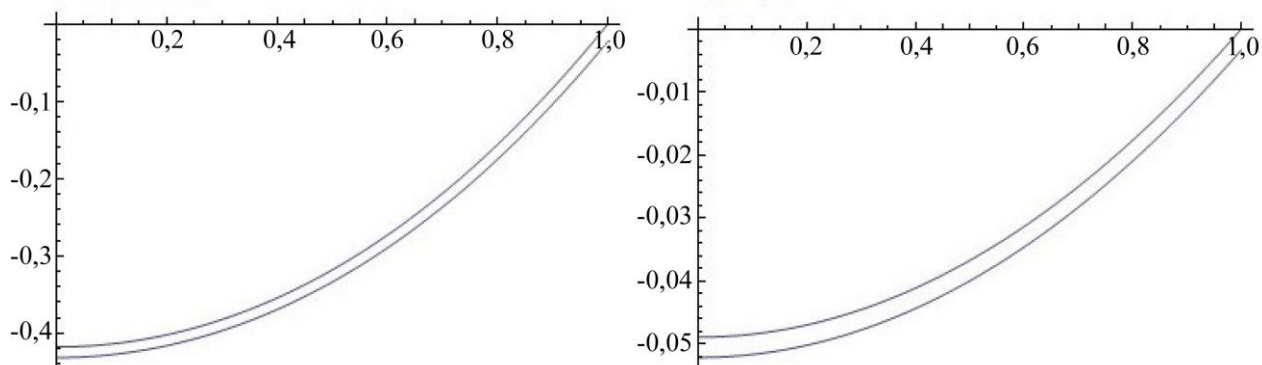


Рис.3. График решения, найденный в пакете Mathematica, для трёхслойных формул с использованием приближающей сети, включающей 15 нейронов и график решения подсчитанные по приближённой формуле для интервала изменения параметров (0;1).

Для четырёхслойной выяснилось, что наименьшая погрешность для данной серии как для интервала (0;1) изменения параметров α , β и γ , так и для интервала (0;2) была получена при 5 нейронах приближающей сети и составила 0.0020 и 0.0085 соответственно. Данные показатели стали минимальными для всех трёх серий проведённых экспериментов. Данный факт доказывает, что существует прямая зависимость между увеличением точности приближённого вычисления и числом слоёв.

Таким образом, можно заключить, что многослойный метод может оказаться эффективным для более широкого спектра задач построения приближённых решений обыкновенных дифференциальных уравнений и уравнений в частных производных.

ЛИТЕРАТУРА:

1. T. Lazovskaya, D. Tarkhov Multilayer neural network models based on grid methods, IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering 158 (2016) <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/1757-899X/158/1/01206>
2. Е.Б. Кузнецов, С.С.Дмитриев. Перенос тепла и массы в пористом катализаторе// Материалы VI Международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях – NPNJ - 2006, СПб. – М.:Вузовская книга,2006. - С.159-160.
- 3 Ц. На. Вычислительные методы решения прикладных граничных задач.- М.:Мир, 1982.- 296 с.
4. А.Н.Васильев, Д.А.Тархов. Принципы и техника нейросетевого моделирования. - СПб.:Нестор-История,2014. – 218 с.
5. E. Hairer, S. P. Norsett, G. Wanner Solving Ordinary Differential Equations I: Nonstiff Problem, Springer-Verlag, Berlin, 1987. xiv + 480 pp.