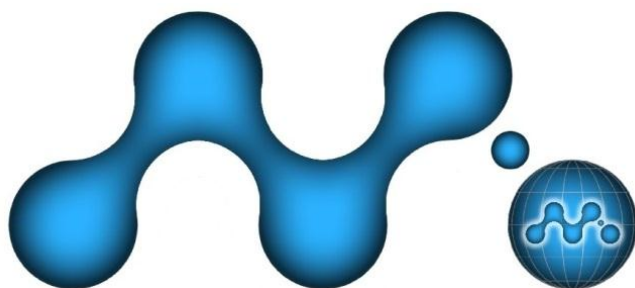


# **VIII International Youth Scientific-Practical Conference**

## **MATHEMATICAL MODELING OF PROCESSES AND SYSTEMS**



4-7 October 2018  
Ufa

**Part 1**

**MINISTRY OF SCIENCE AND HIGHER EDUCATION OF  
THE RUSSIAN FEDERATION**

**ACADEMY OF SCIENCE OF  
THE REPUBLIC OF BASHKORTOSTAN**

**FEDERAL STATE BUDGETARY EDUCATIONAL  
ESTABLISHMENT OF HIGHER EDUCATION  
«BASHKIR STATE UNIVERSITY»**

**STERLITAMAK BRANCH  
OF THE FEDERAL STATE BUDGETARY EDUCATIONAL  
ESTABLISHMENT OF HIGHER EDUCATION  
«BASHKIR STATE UNIVERSITY»**

**COLLECTIVE MONOGRAPH  
BASED ON THE PLENARY REPORTS  
VIII INTERNATIONAL YOUTH  
SCIENTIFIC-PRACTICAL CONFERENCE**

**Part I**

4-7 October 2018  
Ufa

Ufa  
2018

UDK 519.85  
BBK 22.186  
M 34

*The conference was funded by RFBR according  
to the research project № 18-31-10029*

***Reviewers:***

chair of mathematical modeling (Sterlitamak Branch of the Bashkir State University);  
chair of automated technological and information systems (Ufa State Petrol Technical  
University in Sterlitamak); Professor E.A. Muraveva (Ufa State Petrol Technical  
University in Sterlitamak)

Chief Editor – Professor **S.A. Mustafina** (Sterlitamak Branch of the Bashkir State  
University).

***Editorial Board:***

A.M. Akhtyamov, Professor; S.V. Viktorov, Associate Professor; I.M. Gubaidullin,  
Professor; I.V. Grigoryev, Senior Lecturer; A.S. Ismagilova, Professor;  
L.M. Kozhevnikova, Professor; V.N. Krizsky, Professor; T.A. Mikhailova, Associate  
Professor; P.N. Mikhailov, Professor; S.I. Spivak, Professor; M. K. Hasanov, Associate  
Professor

**MATHEMATICAL MODELING OF PROCESSES AND SYSTEMS:**

**M 34** Collective monograph on the materials of plenary reports of the VIIIth  
International Youth Scientific-Practical Conference,  
4-7 October 2018, Ufa. – Part I / Chief Editor S.A. Mustafina. – Sterlitamak:  
Sterlitamak Branch of the Bashkir State University, 2018. – 296 p. – ISBN  
978-5-7477-4722-7

The collective monograph contains plenary reports of participants of the VIII  
International Youth Scientific and Practical Conference "Mathematical Modeling of  
Processes and Systems", which took place on October 4-7, 2018 in the Bashkir State  
University.

The monograph is addressed to teachers, post-graduate students and students  
studying in the natural sciences and physics and mathematics.

ISBN 978-5-7477-4722-7

© Collective of authors, 2018  
© Bashkir State University, 2018  
© Sterlitamak Branch of the  
Bashkir State University, 2018

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

**АКАДЕМИЯ НАУК РЕСПУБЛИКИ БАШКОРТОСТАН**

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ  
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

**СТЕРЛИТАМАКСКИЙ ФИЛИАЛ  
ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО  
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
«БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ  
ПРОЦЕССОВ И СИСТЕМ**

**Коллективная монография  
по материалам пленарных докладов  
VIII Международной молодежной  
научно-практической конференции**

**Часть I**

4-7 октября 2018 г.  
г. Уфа

Уфа  
2018

*Конференция проводится при финансовой поддержке Российского фонда  
фундаментальных исследований, проект № 18-31-10029*

**Рецензенты:**

кафедра математического моделирования (Стерлитамакский филиал БашГУ);  
кафедра автоматизированных технологических и информационных систем  
(филиал Уфимского государственного нефтяного технического университета в г.  
Стерлитамаке); доктор технических наук, профессор Е.А. Муравьева (филиал  
Уфимского государственного нефтяного технического университета в  
г. Стерлитамаке)

Ответственный редактор – доктор физико-математических наук, профессор  
**С.А. Мустафина** (Стерлитамакский филиал БашГУ)

**Редакционная коллегия:**

д.ф.-м.н., проф. А.М. Ахтямов; к.ф.-м.н., доц. С.В. Викторов; д.ф.-м.н., проф. И.М.  
Губайдуллин; ст. преп. И.В. Григорьев; д.ф.-м.н., проф. А.С. Исмагилова; д.ф.-  
м.н., проф. Л.М. Кожевникова; д.ф.-м.н., проф. В.Н. Кризский; к.ф.-м.н., доц.  
Т.А. Михайлова; д.ф.-м.н., профессор П.Н. Михайлов; д.ф.-м.н., проф.  
С.И. Спивак; к.ф.-м.н., доц. Хасанов М.К.

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ И СИСТЕМ:** Коллективная монография по материалам пленарных докладов VIII Межд. молодежн. науч.-практ. конф., 4-7 октября 2018 г., г. Уфа. – Часть II / отв. ред. С.А. Мустафина. – Стерлитамак: Стерлитамакский филиал БашГУ, 2018. – 296 с. ISBN 978-5-7477-4722-7

В коллективной монографии публикуются пленарные доклады участников VIII Международной молодежной научно-практической конференции «Математическое моделирование процессов и систем», состоявшейся 4-7 октября 2018 г. в Башкирском государственном университете.

Монография адресована преподавателям, аспирантам и студентам, обучающимся на естественнонаучных и физико-математических направлениях.

ISBN 978-5-7477-4722-7

© Коллектив авторов, 2018  
© Башкирский государственный университет, 2018  
© Стерлитамакский филиал БашГУ, 2018

Иванов А.Н., Морозкин Н.Д. ©

**ПРИМЕНЕНИЕ НЕЙРОСЕТЕЙ С ПСЕВДОСЛУЧАЙНЫМ  
РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ СВЯЗЕЙ НА ПРИМЕРЕ  
РЕЖИМА РАБОТЫ РТУТНОГО ЭЛЕКТРОЛИЗЕРА**

*В работе представлено устройство и принципы работы искусственных нейронных сетей с псевдослучайным распределением связей, их преимущества по сравнению с уже существующими нейросетями. Показана эффективность применения данного типа сетей для моделирования режима работы ртутного электролизера.*

*Ключевые слова: нейронные сети, моделирование, электролизер.*

**Alexander Ivanov, Nikolay Morozkin**

**APPLICATION OF NEURAL NETWORKS WITH PSEUDORANDOM  
DISTRIBUTION OF LINKS ON THE EXAMPLE OF THE MODE OF  
OPERATION OF A MERCURY ELECTROLYSER**

*The paper presents the structure and principles of artificial neural networks with pseudo-random distribution of connections, their advantages over existing neural networks. The efficiency of application of this type of networks for modeling the mode of operation of mercury electrolyzer is shown.*

*Key words: neural networks, modeling, electrolyzer.*

Использование средств машинного обучения стало одним из самых востребованных и актуальных подходов для моделирования технологических, в частности, химико-технологических процессов. При этом наиболее перспективным средством являются искусственные нейронные сети, которые способны эффективно обучаться на достаточно больших наборах данных и при этом их обучение не требует знаний внутренних зависимостей и законов исследуемого процесса.

В работе проведено исследование режима работы ртутного электролизёра с использованием нейронных сетей. Работа ртутного электролизёра происходит в условиях повышенной температуры электролита и высокого давления. Образующиеся в процессе его работы газообразный хлор является высокотоксичным соединением 2 класса опасности, а водород, выделяющийся в разлагателе, крайне взрывоопасен. Используемая в качестве одного из электродов жидкая ртуть (особенно ее пары) также является токсичным соединением. В результате не соблюдения вольт-амперного режима работы электролизёра

может возникнуть перегрев и закипание электролита, а также разгерметизация аппарата и даже его взрыв. Подобная ситуация чревата человеческими жертвами и серьёзным ухудшением экологической обстановки вследствие выброса вредных веществ. Таким образом, моделирование режима работы ртутного электролизёра является достаточно актуальной задачей не только с научной, но и с практической точки зрения. Однако сочетания множества факторов: химических, электрических, электрохимических, физических, конструктивных и др., приводит к сложности построения точных детерминированных моделей электролизёров. В таких случаях более рационально применять нейронные сети, позволяющие моделировать сложные нелинейные зависимости.

### **Выбор архитектуры нейросети.**

Существующее на сегодняшний день разнообразие архитектур искусственных нейронных сетей обусловлено широким спектром задач, для решения которых они применяются. Для кластеризации применяются многослойные перцептроны, самоорганизующиеся карты и сети Кохонена, а также сети адаптивного резонанса. Для решения задачи сжатия данных и выработки ассоциативной памяти наиболее эффективны перцептроны и нейронные сети Хопфилда.

Для одного и того же семейства проблем исследователи применяют искусственные нейронные сети различной архитектуры. В свою очередь, одна и та же архитектура нейронной сети может применяться для решения различных классов задач.

Поиск оптимальной архитектуры нейронной сети является одним из первых этапов нейросетевого моделирования. Выбирая ту или иную сеть, исследователь ориентируется, прежде всего, на класс решаемой задачи, формат входных данных, а также руководствуется собственным опытом и опытом исследователей, работавших над схожими задачами. Несмотря на это, первоначально выбранная архитектура нейронной сети далеко не всегда оказывается наиболее эффективной. Исследователю необходимо испытывать различные нейронные сети, каждая из которых требует использования специфических алгоритмов обучения и тонкой настройки параметров. Отсюда можно сделать вывод, что выбор архитектуры нейронной сети является нетривиальной задачей и существенно усложняет процесс моделирования.

### **Архитектура нейронной сети с псевдослучайным распределением связей.**

Несмотря на то, что прообразом первых искусственных нейронных сетей были нейроны, ни одна из существующих архитектур нейросетей не является моделью центральной нервной системы. Так, в головном мозге

отсутствуют четко выраженные слои и группы нейронов, а характер их взаимосвязи различен для разных участков нервной системы. Нейроны в мозговом веществе связаны между собой по принципу близости, при этом непосредственное соседство двух нейронов не гарантирует наличие синаптической связи между ними. Вероятность связанности нейронов снижается по мере увеличения расстояния между ними.

Следует отметить, что подобное вероятностное распределение связей нейронов не приводит к потере нейронной сетью своих качеств. Примером может служить человеческий мозг, который способен выполнять решение задач прогнозирования, классификации, распознавания, ассоциативной памяти и др. Сети со случайными связями способны решать тот же самый спектр прикладных задач, которые решают прочие архитектуры.

Кроме того, применение вероятностного распределения связей позволяет формировать как известные архитектуры искусственных нейронных сетей (такие как перцептроны или глубинные сети), так и их различные комбинации, а также промежуточные состояния.

Вопрос о разработке и применении подобных искусственных нейронных сетей поднимался с начала XXI века. Однако предлагаемые реализации обладали рядом недостатков:

- 1) для формирования связи вероятность выбора пары нейронов определялась генераторами случайных чисел, которые в большинстве случаев представляют собой конечные последовательности значений;
- 2) необходимость хранения информации обо всех связях нейронной сети для последующего воспроизведения;
- 3) относительная сложность программной реализации.

В данной работе предлагается использование новой архитектуры нейронных сетей, реализующей псевдослучайные связи между нейронами. Для описания таких сетей вводятся дополнительные гиперпараметры: ключ сети и связность.

В данной сети все нейроны можно представить в виде одномерного вектор-массива нейронов длины  $n$ . В качестве входных и выходных нейронов могут быть выбраны любые элементы данного массива. В целях удобства предлагается принять первые нейроны в качестве входных, а последующие в качестве выходных (рис. 1). Оставшиеся элементы массива будут выполнять роль скрытых нейронов.



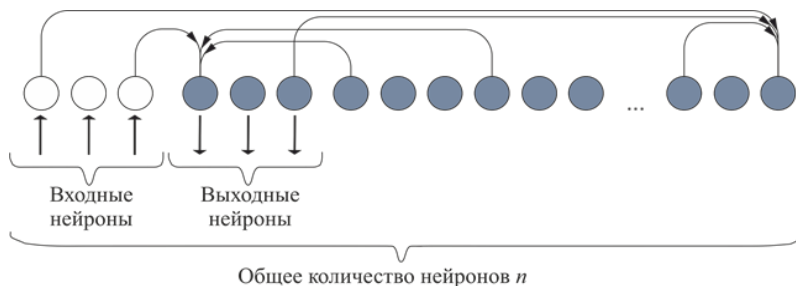


Рис. 1. Графическое представление архитектуры нейронной сети с псевдослучайным распределением связей

Под связностью  $s$  нейронной сети будем понимать количество входных синаптических связей (входов) для каждого из нейронов сети (за исключением входных). Для унификации архитектуры примем связность всех нейронов одинаковой. Так, например, на рис. 1 связность сети равна 3 (показаны входы только части нейронов).

С целью формирования случайного распределения связей в сети, а также упрощения её развертывания, предлагается использовать специальный гиперпараметр – ключ сети, который формирует искомую последовательность связей.

Учитывая, что в качестве входного сигнала к текущему нейрону может быть использован выходной сигнал от любого из  $n$  нейронов (включая его самого для рекуррентных сетей), рационально применять модульную арифметику, используя в качестве модуля число нейронов  $n$ . Тогда генерируемые значения  $k$  будут лежать в интервале  $[0, n - 1]$ , что соответствует номеру нейрона в массиве при индексации с нуля.

Учитывая постоянную связность нейронов, общее число синаптических связей будет составлять  $(s \cdot n)$ . Каждой такой связи можно присвоить уникальный индекс  $x$ , который для  $i$ -ой входной связи  $j$ -го нейрона будет равен (индексация во всех случаях с нуля):

$$x = i + j \cdot s. \quad (1)$$

Полученный номер далее служит аргументом при вычислении значения хэш-функции. Функции хэширования производят преобразование выходных данных произвольной длины в конечную битовую строку фиксированной длины, которая далее может быть приведена в число десятичной системы счисления. В ходе выполнения алгоритмов хэширования близкие значения аргумента могут давать различные результаты в результате «лавинного эффекта». Данная особенность позволяет эффективно применять хэш-функции в процессах шифрования данных, а также использовать их в генераторах псевдослучайных чисел.

Результат работы алгоритма хэширования берется по модулю  $n$ . Полученное значение является псевдослучайным, так как, несмотря на кажущееся отсутствие закономерности получаемых значений, они однозначно определяются номером синаптической связи и общим количеством нейронов в искусственной нейронной сети.

$$k = \text{hash}(x) \bmod n. \quad (2)$$

Характерной особенностью большинства современных алгоритмов хэширования является тот факт, что распределение получаемых значений близко к равномерному. На этом основании вытекает следствие о равномерности распределения вычисляемого значения  $k$ .

Данное следствие было проверено при помощи численного вычисления значений функций распределения псевдослучайной величины  $k$ . Величина модуля для всех наблюдений была выбрана равной 100, а в качестве хэш-функции использовался алгоритм MD5. Данный алгоритм был разработан Рональдом Ривестом в 1991 году. Как видно из рис. 2, с увеличением количества итераций график функции распределения принимает линейный вид, что свидетельствует о равномерном законе распределения псевдослучайной величины.

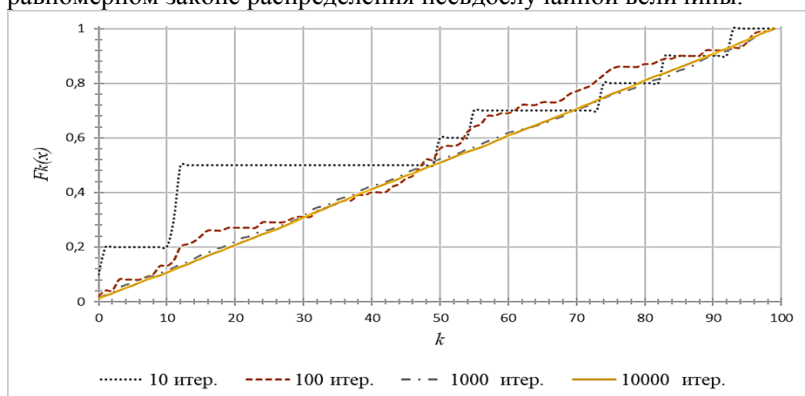


Рис. 2. График функции распределения псевдослучайной величины при использовании алгоритма SHA-3-512 в зависимости от числа итераций

В качестве хэш-функции использовался алгоритм MD5. Аргументом хэш-функции служило строковое представление порядкового номера синаптической связи.

Также в качестве хэш-функции был испытан алгоритм хэширования SHA 3 или Кескак, который на сегодняшний день является одним из самых эффективных и криптостойких. Данный алгоритм был предложен в 2012 году группой исследователей, во главе которой стоял Йоан

Даймен. В том же году алгоритм стал победителем на конкурсе криптографических алгоритмов Национального института стандартов и технологий США, благодаря чему был утверждён в качестве нового криптографического стандарта FIPS 202.

Результаты расчета графика функции распределения также свидетельствуют о равномерном законе распределения псевдослучайной величины (рис. 3). При работе данного алгоритма использовался максимальный размер хэша, равный 512 бит.

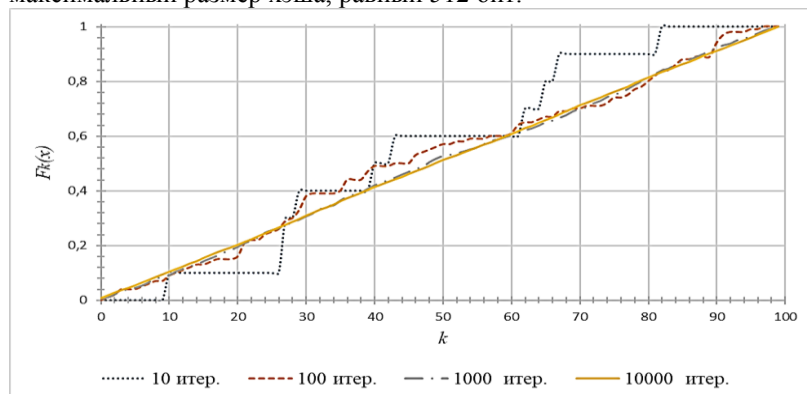


Рис. 3. График функции распределения псевдослучайной величины при использовании алгоритма SHA-3-512 в зависимости от числа итераций

С целью получения других значений  $k$  для тех же нейронов и их входов, достаточно сместить номера связей  $x$  на произвольную величину  $key$ , которую будем называть ключом сети. Учитывая, что последовательное увеличение значения ключа приводит к лишь сдвигу соответствующих значений  $k$ , целесообразно величину смещения выбирать случайным образом в широком интервале значений. Длина интервала может быть неограниченно большой, так как алгоритмы хэширования работают с входными данными произвольной размерности.

С учетом ключа нейронной сети формула (1) примет следующий вид:

$$x = key + i + j \cdot s. \quad (3)$$

Таким образом, можно выделить следующие гиперпараметры, влияющие на архитектуру искусственной нейронной сети с псевдослучайным распределением связей:

- 1) количество входных нейронов,  $n_{in}$ ;
- 2) количество выходных нейронов,  $n_{out}$ ;
- 3) общее количество нейронов в сети,  $n$ ;

- 4) связность сети,  $s$ ;
- 5) ключ сети,  $key$ .

Для указанных гиперпараметров применяются следующие ограничения:

$$\begin{aligned} n_{in} &\geq 1, \\ n_{out} &\geq 1, \\ n &\geq n_{in} + n_{out}, \\ 2 &\leq s \leq (n - n_{in}). \end{aligned} \tag{4}$$

Ключ сети может принимать нулевое, а также любые положительные целочисленные значения. Следует избегать применения вещественных чисел, так как в ходе преобразования значения  $x$  в строку, оно может быть выражено с различной точностью в зависимости от способа реализации, платформы и типа устройства.

Значение связности не рекомендуется брать меньше 2, так как в данном случае значительная доля нейронов может оказаться отсечена от графа, содержащего входные и выходные нейроны. В этом случае данные нейроны не будут задействованы в работе нейронной сети, что снизит производительность и эффективность обучения всей сети.

Анализируя вышеприведенный алгоритм формирования связей в нейросети, можно выделить следующее:

- 1) В ходе работы алгоритма возможно возникновение связей между входом и выходом одного нейрона, или на языке теории графов, могут образовываться петли.
- 2) В ходе работы алгоритма также не исключается возникновение кратных связей.

В зависимости от требований, предъявляемых к создаваемой сети, данные следствия могут оказывать как позитивное, так и негативное влияние.

Наличие циклов и петель (как циклов единичной длины) в графе нейронной сети позволяет отнести такую сеть к рекуррентной. Данные сети имеют преимущество перед прочими нейронными сетями, так как обладают внутренней «памятью» и способны поэлементно или фрагментно обрабатывать: временные ряды, последовательности, звуковые и визуальные потоки. Результат вычисления таких сетей зависит не только от входных сигналов, но также от состояния сети после обработки предыдущих сигналов. Таким образом, использование рекуррентных сетей для решения задач аппроксимации неэффективно.

В случае возникновения кратных связей происходит фактическое их вырождение в одну с результирующим весом, равным сумме исходных весов связей. В ходе обучения сети веса кратных связей выравниваются.

Для нейронов, у которых среди входных связей имеются кратные, происходит фактическое локальное уменьшение числа связности  $s$ . Данный факт может быть использован с целью создания сетей, нейроны которых будут иметь различное число входов. Также следует отметить, что исключение связей из структуры нейронной сети является одним из наиболее эффективных методов вербализации и прореживания сетей с целью их упрощения и повышения устойчивости.

Анализируя вышесказанное, можно сделать вывод о необходимости исключения возможности образования кратных связей и петель в одних случаях, и о допустимости их *iter* образования в других.

С целью исключения образования тех или иных связей следует использовать увеличение значения аргумента хэш-функции, введя переменную *iter*, первоначально равную 1. В случае, если найденное значение  $k$  не удовлетворяет условиям отсутствия петель и кратных связей (при наличии указанных ограничений), последовательно возрастает с шагом равным 1 до тех пор, пока не будут выполнены все условия. В конечном счете, формулы для расчета связи между нейронами будут выглядеть следующим образом:

$$x = (key + i + j \cdot s) \cdot iter, \quad i = 1 \dots s, \quad j = 1 \dots n, \quad iter = 1. \quad (5)$$

$$k = hash(x) \bmod n. \quad (6)$$

Обработка данных в искусственной нейронной сети с псевдослучайным распределением связей происходит «с конца», путём последовательного обхода выходных нейронов. Обход сети происходит «в глубину», при этом за один проход каждый из нейронов может активироваться не более одного раза. Для этого ведётся учет активированных нейронов. Порядок передачи активаций от дочерних нейронов к текущему определяется порядковым номером соответствующего входа.

Следует учитывать тот факт, что порядок опроса выходных нейронов влияет на результат. Таким образом, в процессах обучения и обработки данных необходимо придерживаться единой последовательности обхода.

### **Технологические сведения о процессе.**

Электролизом называется физико-химический процесс разложения растворов или расплавов соединений под действием прямого электрического тока. С помощью электролиза в промышленных масштабах осуществляют производство различных цветных металлов, газов и других соединений. Процесс ведут в специальных аппаратах, называемых электролизерами, включающих в свою конструкцию электроды: в основном металлические или графитовые контакты.

Электролиз водного раствора поваренной соли позволяет получать такие ценные продукты химического производства, как водород, хлор и каустик (гидроксид натрия). Существует несколько способов технологической реализации данного процесса, одним из которых является ртутный электролизер.

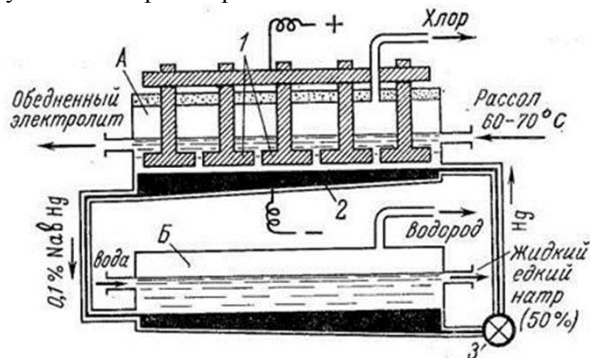
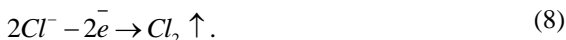
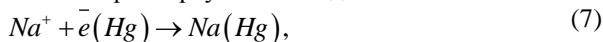


Рис. 4. Устройство ртутного электролизера

Данное устройство представляет собой горизонтальную ванну А с раствором соли. При этом на дне ванны находится слой ртути (жидкой амальгамы натрия), представляющей собой катод 2. Анод 1, состоящий из металлоксидных пластин, при помощи специальных рам опускается в раствор соли.

В ходе электролиза водного раствора хлористого натрия происходит разложение данного соединения с образованием газообразного хлора на аноде и металлического натрия в ртутном катоде.



В разлагателе Б производится обработка амальгамы натрия водой с образованием каустической соды и газообразного водорода. Регенерированная ртуть возвращается на стадию электролиза.

Согласно справочным данным [25], теоретическое значение напряжения, необходимого для осуществления указанных реакций, составляет 3,1 В. Однако, практическое значение требуемого напряжения несколько выше. Это связано с сопротивлением раствора соли, которое значительно усиливается в результате его газонаполнения пузырьками хлора.

Установлено, что результирующее напряжение между электродами в ртутном электролизере определяется следующими факторами [23]:

- 1) силой тока;

- 2) температурой раствора;
- 3) межэлектродным расстоянием.

Напряжение является одним из важнейших показателей, отвечающих за качество и безопасность осуществления процесса электролиза. В связи с этим, актуальной задачей является моделирование данного процесса с целью расчета напряжения для различных режимов работы аппарата. Задача сводится к аппроксимации зависимости напряжения электролизера от вышеперечисленных факторов.

Для обучения нейронных сетей на основе экспериментальных данных была подготовлена обучающая выборка в формате CSV. Размер выборки – 525 записей.

Каждая запись содержит следующие значения:

- 1) Сила тока, кА. Значения целого типа, расположенные в интервале [90; 425]. Входной параметр.
- 2) Температура раствора, °C. Значения целого типа, расположенные в интервале [60; 80]. Входной параметр.
- 3) Расстояние между электродами, мм. Значения целого типа, расположенные в интервале [5; 7]. Входной параметр.
- 4) Напряжение, В. Значения вещественного типа с точностью до 2 знаков, расположенные в интервале [3,41; 5,56]. Выходной параметр.

Значения входных параметров были нормализованы в интервал [-1; 1].

Так как в ходе работы электролизера напряжение способно изменяться в широком диапазоне, то выходное значение было нормализовано из интервала [0; 1] в интервал [3; 6].

Для обучения использовались нейронные сети со следующим набором параметров:

- стабилизация активаций отсутствует;
- логистическая функция активации;
- скорость обучения – 0,1;
- случайные значения ключа в диапазоне [1;  $10^9$ ];
- крутизна активационной функции, равная 1;
- инициализация весов случайными значениями в диапазоне [-0,5; 0,5] с равномерным законом распределения;
- регуляризация весов отсутствует;
- функционал ошибки 2-го порядка;
- запрет образования петель;
- запрет образования кратных связей;
- количество входных нейронов – 3;
- все входы сети – непрерывные;
- количество выходных нейронов – 1;

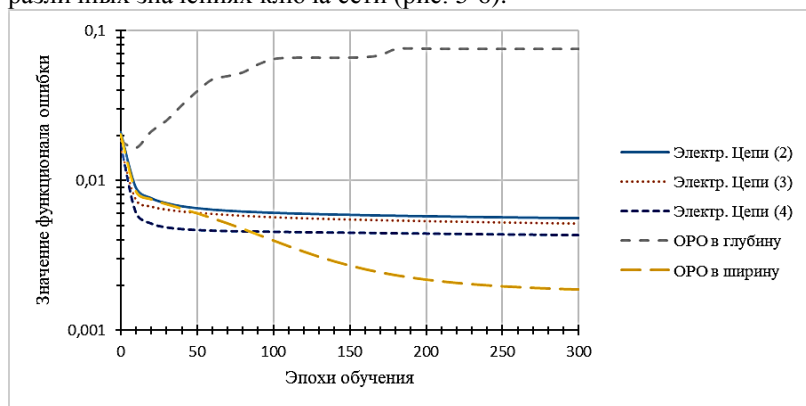
- выход непрерывный;
- количество скрытых нейронов – 4;
- связность сети – 3.

Процесс обучения осуществлялся с применением различных алгоритмов обучения с целью сравнения их эффективности. Были апробированы алгоритмы «электрической цепи» с 2, 3 и 4 повторами обучения, а также алгоритмы обратного распространения ошибки с обходом графа в глубину и ширину.

В качестве обучающей выборки использовался весь массив исходных данных. На каждой итерации обучения записи выборки обрабатывались в случайном порядке. Длительность обучения составляла 300 эпох.

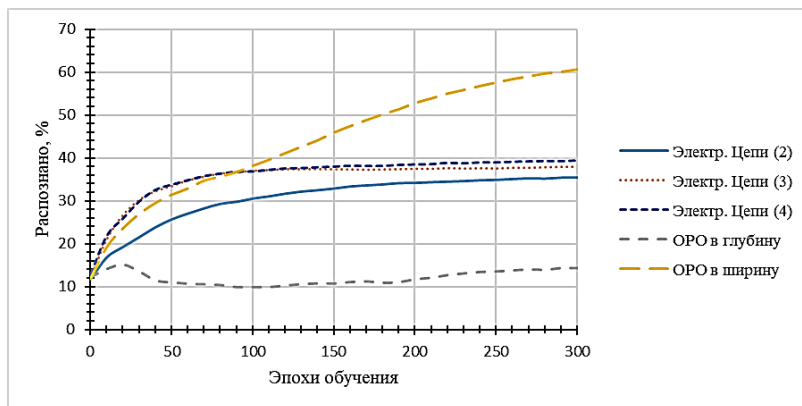
Пример считался распознанным, если абсолютная ошибка составляла не более 0,1 В.

С целью статистической оценки эффективности алгоритмов для каждого варианта обучения расчет производился с 10 повторами на различных значениях ключа сети (рис. 5-6).



*Рис. 5. График средних значений функционала ошибки в процессе обучения*

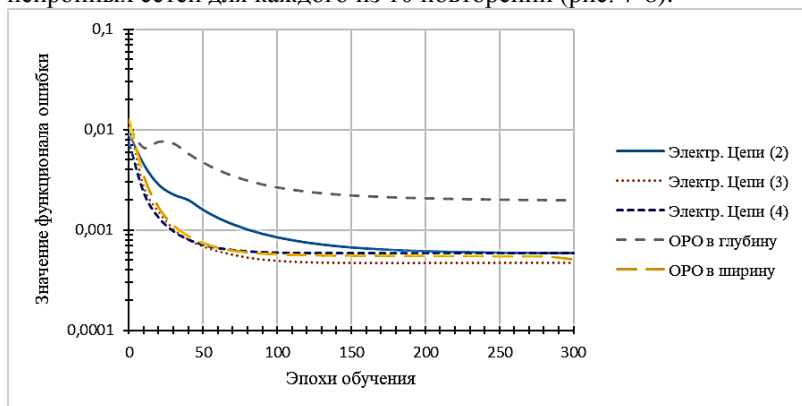




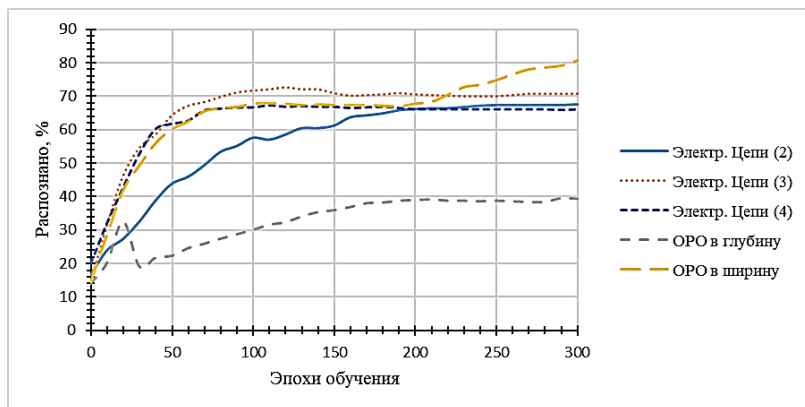
*Рис. 6. График средней эффективности обучения различными методами*

Как видно из графиков, при решении данной задачи аппроксимации, наибольшую эффективность показывает алгоритм обратного распространения ошибки с обходом графа в ширину. Алгоритм обратного распространения ошибки с обходом графа в глубину, напротив, в большинстве случаев приводит к увеличению значения ошибки.

Также было произведено сравнение наиболее эффективных нейронных сетей для каждого из 10 повторений (рис. 7-8).



*Рис. 7. График наименьших функционалов ошибки в процессе обучения*



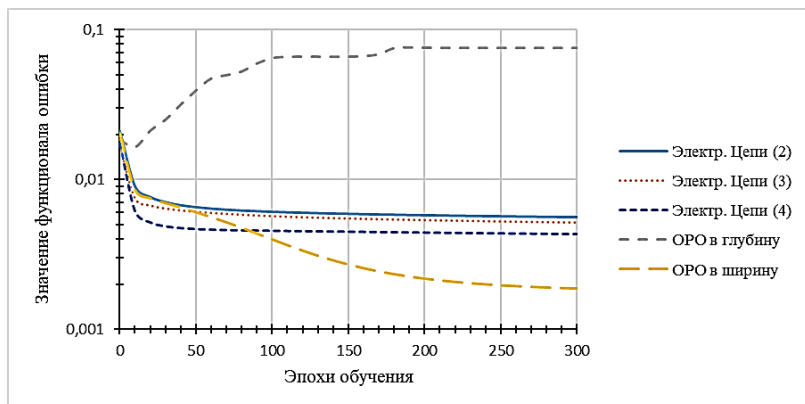
*Рис. 8. График эффективности лучших результатов обучения различными методами*

Из графиков обучения сетей, показавших наилучший результат видно, что метод обратного распространения ошибки в глубину также способен приводить к снижению ошибки и увеличению числа распознанных примеров. Однако, низкая скорость снижения ошибки и высокая вероятность противоположного эффекта, дают основания считать данный метод неэффективным.

Следует также отметить, что рассматриваемая задача моделирования режима работы электролизера не требует анализа предыдущих значений, то есть является статической. Однако вследствие наличия циклов в структуре применяемых нейронных сетей происходит накопление активаций от предыдущих наборов входных данных. Фактически осуществляется обработка входных данных как значений некоторого временного ряда.

С целью исключения влияния предыдущих примеров были рассмотрены нейронные сети с включенной стабилизацией активаций. Нейрон считался стабилизированным, если при повторной обработке того же набора входных данных значение его активации менялось не более, чем на 0,0033. Данное значение было выбрано в связи с тем, что при нормализации выходного сигнала указанная погрешность будет составлять 0,01 В, то есть будет соответствовать точности экспериментальных данных.

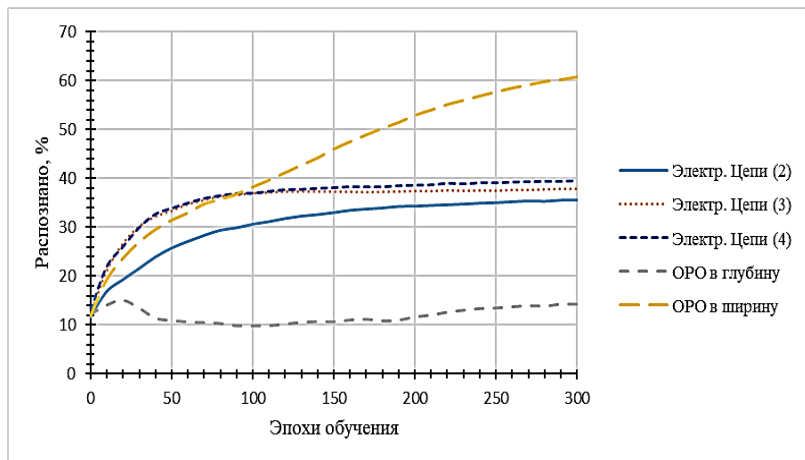
Прочие параметры были оставлены с теми же значениями, как и в предыдущем случае. Результаты обучения представлены на рисунках 9-12.



*Рис. 9. График средних значений функционала ошибки в процессе обучения нейронных сетей со стабилизацией*

Оценки средней эффективности обучения для различных методов по окончании 300 эпох в зависимости от наличия или отсутствия стабилизации представлены в таблице 1.

Незначительное снижение эффективности распознавания примеров для остальных методов связано со статистической ошибкой результатов.



*Рис. 10. График средней эффективности обучения нейронных сетей со стабилизацией различными методами*

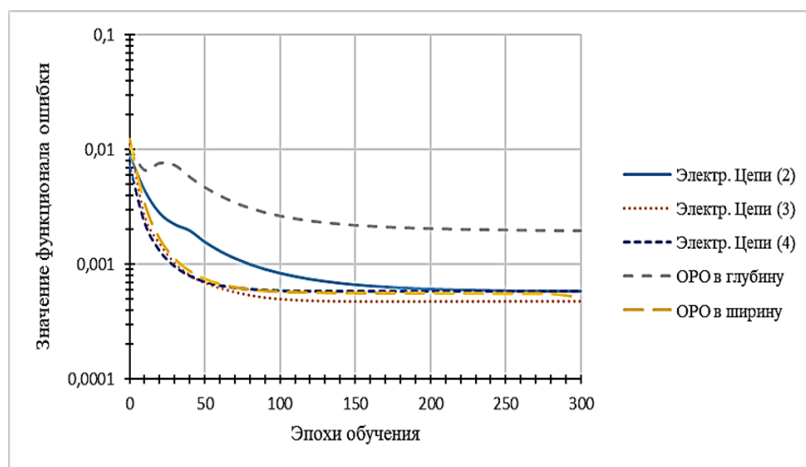


Рис. 11. График функционала ошибки лучших результатов обучения нейронных сетей со стабилизацией различными методами

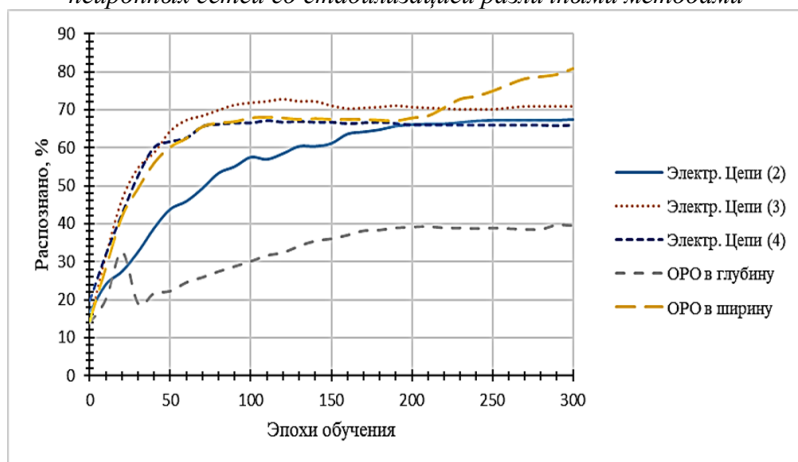


Рис. 12. График эффективности лучших результатов обучения нейронных сетей со стабилизацией различными методами

Таблица 1. Средняя эффективность обучения

Метод	Без стабилизации, %	Со стабилизацией, %
Метод электрической цепи, 2 повтора обучения	27,8287	35,4476

Метод электрической цепи, 3 повтора обучения	35,2572	37,9047
Метод электрической цепи, 4 повтора обучения	42,8380	39,4666
Метод обратного распространения ошибки с обходом графа в глубину	15,5810	14,3239
Метод обратного распространения ошибки с обходом графа в ширину	47,3524	60,7047

Таким образом, применение стабилизации активаций нейронов приводит к увеличению эффективности процесса обучения:

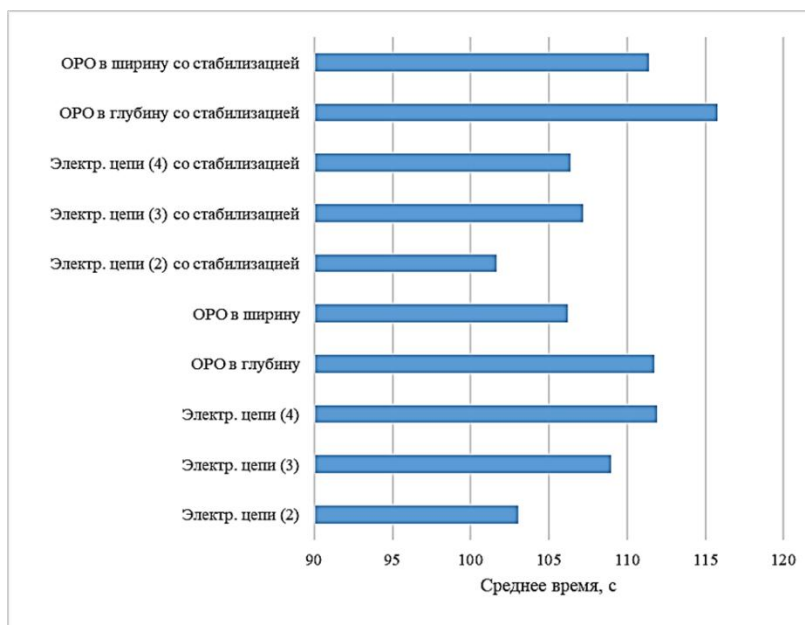
- для метода обратного распространения ошибки с обходом графа в ширину;

- для метода электрической цепи при малых значениях повторений обучения (по сравнению со связностью сети).

Также была произведена оценка времени выполнения различных алгоритмов обучения. Для тестирования использовался ноутбук со следующими характеристиками:

- процессор Intel Core i5-7200U с 2-мя ядрами;
- частота процессора 2,7 ГГц с поддержкой увеличения частоты по технологии Turbo Boost до 3,1 ГГц;
- оперативная память DDR4 12 Гб;
- операционная система 64-разрядная Windows 10 Домашняя для одного языка версии 1803 сборки 17134.81;
- Python 3.6.5.

Диаграмма среднего значения длительности процесса обучения приведена на рисунке 13.



*Рис. 13. Средняя длительность различных алгоритмов обучения*

Результаты бенчмаркинга свидетельствуют о том, что длительность обучения для различных алгоритмов различается незначительно. Использование стабилизации (при выбранной точности) приводит к увеличению длительности лишь на 0,1 %.

Достигнутая эффективность обучения составляет 93,333 % распознанных примеров. Это свидетельствует о достаточно высокой эффективности предложенных нейронных сетей при решении задач моделирования химико-технологических процессов на примере режима работы ртутного электролизёра.

Создание высокоточной математической модели для данного аппарата позволит повысить стабильность поддержания заданного технологического режима, а также позволит предупредить возникновение аварийных ситуаций.

### ***Библиографический список***

1. Арзамасцев А. А., Рыков В. П. Модель искусственной нейронной сети (ИНС) с реализацией модульного принципа обучения //Вестник Тамбовского университета. Серия: Естественные и технические науки, 2012. – Т. 17. – №. 4.

2. Байков И. Р., Китаев С. В., Фарухшина Р. Р. Определение показателей энергоэффективности газоперекачивающих агрегатов с применением нейронных сетей //Электронный научный журнал Нефтегазовое дело, 2015. – №. 1. – С. 141-152.

3. Белявский Г. И., Пучков Е. В., Лиля В. Б. Алгоритм и программная реализация гибридного метода обучения искусственных нейронных сетей //Программные продукты и системы, 2012. – №. 4. – С. 96-100.

4. Бова В. В., Дуккардт А. Н. Применение искусственных нейронных сетей для коллективного решения интеллектуальных задач //Известия Южного федерального университета. Технические науки, 2012. – Т. 132. – №. 7. – С. 131-138.

5. Варламов А. Д., Шарапов Р. В. Использование нейронных сетей в задачах мониторинга экзогенных процессов дистанционными методами //Геоинформатика, 2014. – Т. 63. – №. 4. – С. 62-68.

6. Галушка В. В., Фатхи В. А. Формирование обучающей выборки при использовании искусственных нейронных сетей в задачах поиска ошибок баз данных //Инженерный вестник Дона, 2013. – Т. 25. – №. 2 (25).

7. Гладышев А. И., Жуков А. О. Достоинства и недостатки имитационного моделирования с использованием нейронных сетей //Вестник Российского нового университета, 2013. – №. 4. – С. 53-55.

8. Горбачевская Е. Н. Классификация нейронных сетей //Вестник Волжского университета им. В.Н. Татищева, 2012. – №. 2 (19). – С. 128-134.

9. Злобин В. К., Ручкин В. Н. Нейросети и нейрокомпьютеры – СПб.: БХВ-Петербург, 2011. – 256 с.

10. Кабак И. С. Создание больших аппаратно-программных нейронных сетей для систем управления //Авиационная промышленность, 2012. – №. 4. – С. 57-61.

11. Колесенков А. Н., Костров Б. В., Ручкин В. Н. Нейронные сети мониторинга чрезвычайных ситуаций по данным ДЗЗ //Известия Тульского государственного университета. Технические науки, 2014. – №. 5. – С. 220-225.

12. Лиля В. Б. Алгоритм и программная реализация адаптивного метода обучения искусственных нейронных сетей //Инженерный вестник Дона, 2012. – Т. 19. – №. 1. – С. 55-59.

13. Ляхов А. Л., Алешин С. П. Искусственная нейронная сеть как измерительный инструмент адекватности модели с адаптивным классом точности //Математические машины и системы, 2010. – Т. 1. – №. 2. С. 61-66.

14. Манжула В. Г., Федяшов Д. С. Нейронные сети Кохонена и нечеткие нейронные сети в интеллектуальном анализе данных //Фундаментальные исследования, 2011. – №. 4. – С. 108-114.

15. Мурашкина Е. Н., Михеев М. Ю. Иммитационное моделирование нейросетевой идентификации сигналов сложной формы //Труды Международного симпозиума «Надежность и качество», 2014. – Т. 1. – С. 203-206.

16. Постарнак Д. В. Критический анализ моделей нейронных сетей //Вестник Тюменского государственного университета. Социально-экономические и правовые исследования, 2012. – №. 4. – С. 162-167.

17. Проталинский О. М., Щербатов И. А., Беляев И. О. Гибридный метод обучения нейронных сетей для классификации каталитической стадии процесса Клауса //Вестник Саратовского государственного технического университета, 2010. – Т. 4. – №. 2 (50). – С. 38-43.

18. Пятакович В. А., Василенко А. М., Хотинский О. В. Аналитическая конструкция и исходные структуры искусственной нейронной сети, техническая реализация модели математического нейрона //Интернет-журнал Науковедение, 2017. – Т. 9. – №. 3 (40). – С. 89.

19. Стариков А. Нейронные сети – математический аппарат //BaseGroup Labs, 2011.

20. Степашина Е. В., Мустафина С. А. Графовый подход при моделировании каталитических процессов с переменным реакционным объемом //Системы управления и информационные технологии, 2012. – Т. 47. – № 1. – С. 14-18.

21. Татьянкин В. М. Алгоритм формирования оптимальной архитектуры многослойной нейронной сети //Новое слово в науке: перспективы развития, 2014. – №. 2. – С. 187-188.

22. Хайкин С. Нейронные сети: полный курс – 2-е изд., испр. – М.: Вильямс, 2006. – 1103 с.

23. Шулаева Е. А., Шулаев Н. С., Коваленко Ю. Ф. Моделирование параметров электролизера в производстве едкого натра, хлора и водорода //Нефтегазовое дело, 2016. – Т. 14. – №. 4. – С. 103-107.

24. Янчи С. О., Дударов С. П. Использование объектно-ориентированного подхода при разработке программных средств нейросетевого моделирования //Успехи в химии и химической технологии, 2008. – Т. 22. – № 1 (81). – С. 55-60.

25. Pletcher D., Walsh. F. C. Industrial electrochemistry /–Springer Science & Business Media, 2012. PP. 672.

### **Сведения об авторах**



Иванов Александр Николаевич, аспирант БашГУ. E-mail: sanekclubstr@mail.ru

Морозкин Николай Данилович, доктор физико-математических наук, профессор БашГУ. E-mail: morozkin@bashedu.ru

**Исмагилова А.С., Спивак С.И.®**

### **ТЕОРЕТИКО-ГРАФОВЫЙ ПОДХОД ПРИ РЕШЕНИИ ЗАДАЧ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ**

*Цель настоящей работы – создание методов анализа графов, соответствующих механизмам сложных химических реакций. Такое математическое и программное обеспечение станет основой широкого использования этих алгоритмов. Описан алгоритм поиска базисных маршрутов и выписывания суммарных уравнений сложных химических реакций на основе характеристики об индексах вершин.*

*Ключевые слова: механизм химической реакции, базис маршрутов, граф Вольперта.*

**Ismagilova AS, Spivak SI**

### **THEORETICAL-GRAPHIC APPROACH AT THE DECISION OF CHEMICAL KINETICS PROBLEMS**

*The aim of this work was to develop methods for the analysis of graphs that correspond to the mechanisms of complex chemical reactions. This mathematical support and software will become the basis of the wide use of these algorithms. An algorithm was described for searching the basic routes and writing the overall equations of complex chemical reactions based on the characteristics of node indices.*

*Keywords: mechanisms of chemical reactions, of routes basis, Volpert graph.*

Обратные задачи химической кинетики – это задачи установления механизма реакции. Традиционная постановка обратных задач химической кинетики ставит на первый план константы скоростей элементарных стадий. Считается, что если известны величины всех констант, то математическая модель процесса определена и ее можно использовать для решения целевых задач (задач управления, оптимизации, прогнозирования и т.д.)

## СОДЕРЖАНИЕ

<i>Mamedov Kh. R.</i> AN EXPANSION FORMULA FOR STURM-LIOUVILLE OPERATOR WITH A NON-LINEAR SPECTRAL PARAMETER IN BOUNDARY CONDITION.....	5
<i>Ранов Е. Ю.</i> ON GENERALIZED SOLUTIONS TO LINEAR TRANSPORT EQUATIONS WITH DISCONTINUOUS COEFFICIENTS .....	18
<i>Алиев А.Р., Алимйрзоев Э.Э.</i> КОМПЬЮТЕРНАЯ МОДЕЛЬ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ МАРШРУТИЗАЦИИ ТРАФИКА В ДИСТРИБУТИВНОЙ СИСТЕМЕ .....	52
<i>Ахтямов А.М.</i> ОБЗОР ИССЛЕДОВАНИЙ ПО ВЫРОЖДЕННЫМ КРАЕВЫМ УСЛОВИЯМ .....	62
<i>Баталев В.Ю., Баталева Е.А., Рыбин А. К., Александров П. Н., Матюков В.Е., Непеина К. С., Забинякова О. Б., Казначеев П.А.</i> ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОБОСНОВАНИЯ ИССЛЕДОВАНИЙ ДЕФОРМАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В ЛИТОСФЕРЕ ЗЕМЛИ НА ОСНОВЕ СЕЙСМИЧЕСКИХ И ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ ЭНДОГЕННОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ .....	95
<i>Билалов Биал Тельман оглы</i> МЕТОД КРАЕВЫХ ЗАДАЧ УСТАНОВЛЕНИЯ БАЗИСОВ ИЗ ВОЗМУЩЕННЫХ ТРИГОНОМЕТРИЧЕСКИХ СИСТЕМ И НЕКОТОРЫЕ ЕГО АБСТРАКТНЫЕ ОБОБЩЕНИЯ .....	123
<i>Григорьев И.В., Мустафина С.А.</i> РАЗРАБОТКА ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ КИНЕТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ РАДИКАЛЬНОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ .....	145
<i>Гусейнов И.М., Исмайлова А.И., Курбанов В.М., Набиев И.М.</i> ВОССТАНОВЛЕНИЕ ОПЕРАТОРОВ ШТУРМА-ЛИУВИЛЛЯ НА ОТРЕЗКЕ.....	167
<i>Иванов А.Н., Морозкин Н.Д.</i> ПРИМЕНЕНИЕ НЕЙРОСЕТЕЙ С ПСЕВДОСЛУЧАЙНЫМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ СВЯЗЕЙ НА ПРИМЕРЕ РЕЖИМА РАБОТЫ РТУТНОГО ЭЛЕКТРОЛИЗЕРА .....	183

*Научное издание*

## **МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ И СИСТЕМ**

**Коллективная монография  
по материалам пленарных докладов  
VIII Международной молодежной  
научно-практической конференции**

### **Часть I**

4-7 октября 2018 г.  
г. Уфа

**Компьютерный набор, верстка И.В. Григорьев**

*Материалы печатаются в авторской редакции.*

Лицензия на издательскую деятельность  
ЛР №021319 от 05.01.99 г.

Подписано в печать 24.09.2018 г. Формат 60х84/16.  
Усл. печ. л. 17.02. Уч.-изд. л. 17.76.  
Тираж 500 экз. Изд. № 149. Заказ 379.

*Редакционно-издательский центр  
Башкирского государственного университета  
450076, РБ, г. Уфа, ул. Заки-Валиди, 32.*

*Отпечатано на множительном участке  
Башкирского государственного университета  
450076, РБ, г. Уфа, ул. Заки-Валиди, 32.*