



И.В. Леонова, С.А. Ляшева

ПРИМЕНЕНИЕ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ В ПРОГНОЗИРОВАНИИ ХАРАКТЕРИСТИК БЫСТРОПРОТЕКАЮЩИХ ПРОЦЕССОВ

(ФГБОУ ВО Казанский национальный исследовательский технический университет им. А.Н.Туполева – КАИ)

При решении научных и технических проблем значительную роль играют вопросы исследования быстропротекающих процессов. Экспериментальные способы исследования процессов такого рода, как правило, дороги, а зачастую вообще не осуществимы. В этих условиях особое значение приобретает выполняемый с использованием компьютера вычислительный эксперимент, который позволяет анализировать состояния и процессы исследуемых объектов на основании расчетно-теоретических представлений.

Искусственные нейросети являются моделями нейронной структуры мозга, который, главным образом, учится на опыте. Базовый модуль нейронных сетей - искусственный нейрон - моделирует основные функции естественного нейрона (рис. 1).

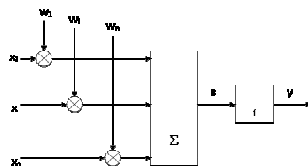


Рис. 1. Базовый искусственный нейрон

При функционировании нейрон получает множество входных сигналов одновременно. Каждый вход имеет свой собственный синаптический вес, который влияет на него и необходим для функции сумматора. Вес является мерой важности входных связей и моделирует поведение синапсов биологических нейронов. Веса могут изменяться в соответствии с обучающими примерами, архитектурой сети и правилами обучения.

В настоящее время для прогнозирования с помощью нейронных сетей можно использовать различные инструментальные средства: NeuralBase, Deductor Studio, STATISTICA, Excel Neural Package [4, 5].

В данном исследовании использовалась аналитическая платформа Deductor Studio компании BaseGroup Labs. Основным преимуществом данного программного обеспечения является визуальное проектирование логики без написания кода, а также документация и техническая поддержка на русском языке.

С помощью пакета Deductor Studio осуществлена попытка прогнозирования энтальпии образования ВВ. Энтальпией образования называется однозначная функция H состояния термодинамической системы при независимых пара-



метрах энтропии S и давлении p , которая связана с внутренней энергией U соотношением

Энтальпия системы (от греч. enthalpo нагреваю) – это однозначная функция H состояния термодинамической системы при независимых параметрах энтропии S и давлении p , которая связана с внутренней энергией U соотношением

$$H = U + pV$$

где V – объем системы. [1]

В химии рассматривают изобарические процессы ($p = \text{const}$), и тепловой эффект в этом случае называют изменением энтальпии системы или энтальпией процесса:

$$Q_p = \Delta H$$

$$\Delta H = \Delta U + p\Delta V$$

Стандартная энтальпия образования $\Delta H^{\circ}_{обр}$ – тепловой эффект реакции образования одного моля вещества из простых веществ, его составляющих, находящихся в устойчивых стандартных состояниях (при стандартных условиях $p = 101,325$ кПа, $T = 298$ К).

Энтальпия имеет размерность энергии (кДж). Ее величина пропорциональна количеству вещества; энтальпия единицы количества вещества (моль) измеряется в кДж/моль (в исследовании энтальпия образования измерялась в ккал/кг).

В термодинамической системе выделяющуюся теплоту химического процесса условно считают отрицательной (экзотермический процесс, $\Delta H < 0$), а поглощение системой теплоты соответствует эндотермическому процессу, $\Delta H > 0$.

Для прогнозирования энтальпии образования сформирована база данных, в которую вошли следующие характеристики: количество углерода С, водорода Н, кислорода О и азота N в составе высокоэнергетических веществ, молярная масса вещества, плотность, теплота взрыва, теплота образования, объем продуктов взрыва и энтальпия образования высокоэнергетических веществ (определенная экспериментально). Для обучения, настройки и валидации работы нейросети использовались данные 39 высокоэнергетических веществ. Часть исходных данных приведена в таблице 1.

Таблица 1

ВВ	количество				молярная масса, г/моль	плотность, г/см ³	теплота взрыва, МДж/кг	теплота образования, ккал/кг	объем продуктов взрыва, л/кг	энтальпия образования, ккал/кг
	С	Н	О	N						
Тетразен	2	8	1	10	188,15	1,635	2,3	270,2	425	240,2
Гексаметиленди пероксидиамин	6	12	6	2	208,17	1,3	3,29	-384,3	1097	-413,7
ДНБ	6	4	4	2	164,077	1,567	3,43	-21,1	670	-38,7
ТНБ	6	3	6	3	213,0825	1,688	4,45	42,23716166	711	-48,8
протил	7	5	6	3	227,13	1,663	4,19	-17,8	730	-70,6
2,4,6-Тринитроксилол	8	7	6	3	241,2	1,604	4,06	-82,1	700	-101,7
2,4,6-Тринитроанизол	7	5	3	7	243,1305	1,708	3,66	-131	740	-150,6
ТНФ	6	3	7	3	229,1	1,763	4,4	-51,7	730	-259,3
Пикрат аммония	6	6	7	4	246,14	1,717	3,36	-381,8964817	680	-375,4



Разработка нейронной сети средствами Deductor Studio начинается с импорта исходных данных. Далее необходимо задать входы и выходы системы, а также нормализовать данные в определенном диапазоне.

В основу входного слоя нейросети помещены данные, находящиеся в интервале столбцов таблицы со второго по десятый (Таблица 1), в последнем столбце находятся данные выходного слоя. Нормализация данных проводилась в диапазоне [-1; 1].

На следующем этапе была разработана структура нейронной сети – определены передаточные функции и количество нейронов для скрытого слоя. Исходя из условных правил построения нейронных сетей (количество связей между нейронами должно быть в несколько раз меньше, чем количество обучающих примеров) в скрытом слое выделен один нейрон. Структура сети представлена на рис. 2.

Перед началом обучения сети были заданы параметры его остановки, а также тестовое и валидационное множество.

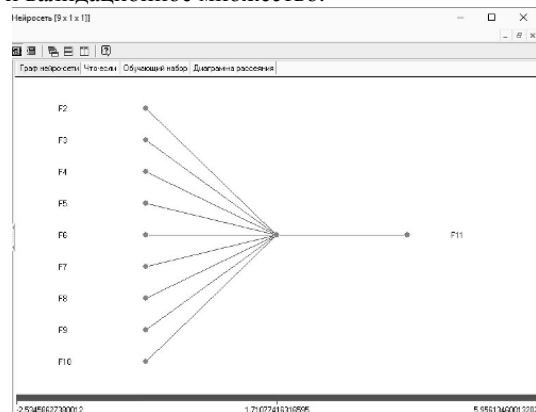


Рис. 2. Структура нейронной сети

Опытным путем установлено, что при указанной структуре сети (рис.2) оптимальным временем обучения является 15000 эпох [2, 3].

Прогнозирование энтальпии образования высокоэнергетических веществ на тестовом и валидационном множествах показывает, что нейронная сеть выдает результаты, с некоторой ошибкой, в основном не превышающей доверительный интервал. Данные, полученные в результате прогнозирования, частично представлены на рис. 3 в столбце «F11_OUT» (на белом фоне таблицы располагаются примеры из обучающего множества данных; на светло-сером – из тестового множества; на темно-сером – из валидационного).

Пакет Deductor Studio позволяет также отследить полученные результаты в графическом виде на «Диаграмме рассеяния» (рис. 4), которая создается автоматически. Здесь окружностями выделены экспериментальные значения энтальпии образования, а черными кружками – спрогнозированные. Есть не-



сколько режимов просмотра диаграммы, в зависимости от интересующего множества данных. На рис. 4 представлены все три множества: обучающее, тестовое, валидационное. Все точки, не вошедшие в доверительный интервал (за исключением одной на отметке [-289; -1050], она относится к тестовому множеству), относятся к обучающему множеству.

F1	F2	F3	F4	F5	F6	F7	F8	F9	F10	F11	F11_OUT	F11_ERR
Запирин	2	8	1	10	188,15	1,635	2,3	270,2	425	240,2	137,8562298166	0,00552951034594721
Гексаметилентрипероксидданин	6	12	6	2	208,17	1,3	3,29	-384,3	1097	-413,7	-419,962621245609	2,06245158345098E-5
ДНБ	6	4	4	2	164,077	1,567	3,43	-21,1	670	-38,7	-59,6624894541241	0,000209556370106669
ТНБ	6	3	6	3	213,025	1,688	4,45	42,23716166	711	48,8	45,1807806409181	6,8881291311836E-6
тропил	7	5	6	3	227,13	1,663	4,19	-17,8	730	-70,6	-60,7405686772235	5,40749453275501E-6
2,4,6-Тринитроксиол	8	7	6	3	241,2	1,604	4,06	-82,1	700	-101,7	-94,8289235299362	2,48268163430767E-6
2,4,6-Тринитроксиол	7	5	3	7	243,1305	1,708	3,66	-131	740	-150,6	-52,923608932275	0,00501707596759779
ТНФ	6	3	7	3	229,1	1,763	4,4	-51,7	730	-259,3	-161,900360340009	0,004906820272425
Пироксиданол	6	6	7	4	246,14	1,717	3,36	-391,0864817	680	-375,4	-424,510547637544	0,00126829716505873
ЭДНА	2	6	4	4	151,04	1,75	5,36	32,89	908	39,48	-21,2447436106257	0,00193911179164533
нитроанилин	6	8	18	6	452,0954	1,8	6,09	-336,2	723	-357,2	-221,741942146389	0,00564887445809811
Тетранитрометан	1	0	8	4	196,033	1,64	1,915	65	670	46,9	41,5289577467678	1,917010654071E-5
Нитрат гуанидина	1	6	3	4	122,084	1,436	1,87	-726,1	896	-761,7705842	-737,891393572948	0,00029854570343774

Рис. 3. Спрогнозированные значения энтальпии образования ВВ

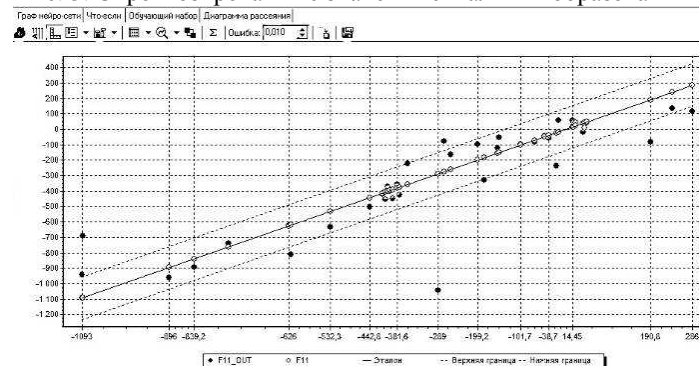


Рис. 4. Диаграмма рассеяния

Диаграмма рассеяния (рис.4) показывает адекватность разработанной нейронной сети. Ошибок обучения сети можно избежать, если увеличить количество эпох обучения, однако из-за малого набора исходных данных нейросеть «переобучается» и как следствие становится не способной прогнозировать адекватные результаты для других высокоэнергетических веществ. Для получения более точных результатов прогноза необходимо экспериментировать с входным набором аргументов и увеличить базу данных.

Все данные для исследования были взяты из справочной литературы [1].

Литература

1. Пироправка [Электронный ресурс] / Справочник по взрывчатым веществам, порохам и пиротехническим составам. Издание 6 – Режим доступа <http://www.exploders.info/sprawka/>



2. Ляшева, С.А. Нейросетевое прогнозирование параметров быстропротекающих процессов / С.А. Ляшева, О.Д. Гришина // Информационные технологии и нанотехнологии (ИТНТ-2015). [Электронный ресурс]: материалы Международной конференции и молодежной школы. - Электрон. текстовые и граф. дан. (4,2 Мбайт). - Самара, Изд-во СамНЦ РАН, 2015. - 1 эл. опт. диск (CD-ROM). 2015. – С.179-182.

3. Спицин, А.Н. Автоматизированная система прогнозирования параметров быстропротекающих процессов с использованием искусственной нейронной сети / А.Н. Спицин, С.А. Ляшева // Прогрессивные технологии и процессы [Текст]: Сборник научных статей 2-й Международной молодежной научно-практической конференции (24-25 сентября 2015 года), в 3-х томах, Том 3, Юго-Зап. гос. ун-т., ЗАО «Университетская книга», Курск, 2015.- С.55-57.

4. Ляшева, С.А. Прогнозирование скорости детонации индивидуальных взрывчатых веществ с использованием нейронной сети / С.А. Ляшева, М.П. Шлеймович, А.П. Кирпичников, А.Н. Спицин // Вестник Казанского технологического университета: Т. 18 №15; М-во образ. и науки Рос, Казан.нац.исслед.технолог.ун-т. – Казань: Изд-во КНИТУ, 2015. – С.226-230.

5. Ляшева, С.А. Нейросетевое прогнозирование fugасности индивидуальных взрывчатых веществ / С.А. Ляшева, М.П. Шлеймович, А.П. Кирпичников, О.Д. Гришина // Вестник Казанского технологического университета: Т. 18 №17; М-во образ. и науки Рос, Казан.нац.исслед.технолог.ун-т. – Казань: Изд-во КНИТУ, 2015. – С.171-174.

И.А. Лёзин, Р.П. Селянко

АВТОМАТИЗИРОВАННАЯ СИСТЕМА ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ФИНАНСОВЫХ КОТИРОВОК РАДИАЛЬНО-БАЗИСНОЙ СЕТЬЮ

(Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королёва)

Целью данной работы является изучение возможностей нейронных сетей для прогнозирования финансовых котировок, проектирование и реализация системы данных на основе модели радиально-базисной сети с одним скрытым слоем для исследования работы данного вида сети, сравнение полученных результатов при различных настройках параметров сети.

Применительно к задачам прогнозирования в качестве исходной информации выступает набор данных (векторов), которые нужно распознать. Назовем этот набор $\mathbf{X}=\{x_1, x_2, \dots, x_{N_p}\}$. Каждый вектор $x_i, i=1, \dots, N_p$ состоит из p элементов. Где элементами вектора являются некие переменные. Таким образом, каждый вектор x_i представляет собой точку в p -мерном пространстве [1].

Для упрощения задачи будем рассматривать двухмерное пространство: плоскость, представленную осями x и y . Ось x представляет набор временных промежутков наблюдаемого объекта. Ось y – ось значений, которые принимает



наблюдаемый объект. Значит, нейронная сеть математически может быть представлена в виде графа, причем необязательно полносвязного, который состоит из множества узлов и множества взвешенных ребер, означающих связи между узлами. Под весом будем понимать скалярную величину, определяемую разностью значений наблюдаемого объекта в соседних временных промежутках. Значение веса ребра соответствует значению некоторой определенной величины. Тогда целевая функция будет выглядеть как $f(\mathbf{X})=f(x_1, x_2, \dots, x_n)$, которая способна не только интерполировать, но и экстраполировать данные. Целевая функция будет представлять собой прямую, аналогичную аппроксимирующей прямой, вычисляемой методом наименьших квадратов. Задача прогнозирования в данном случае будет сводиться к вычислению критерия зависимости между исследуемыми величинами: поданными на вход и ожидаемым известным значением.

Структура радиально-базисной сети представлена на рисунке 1 [2].

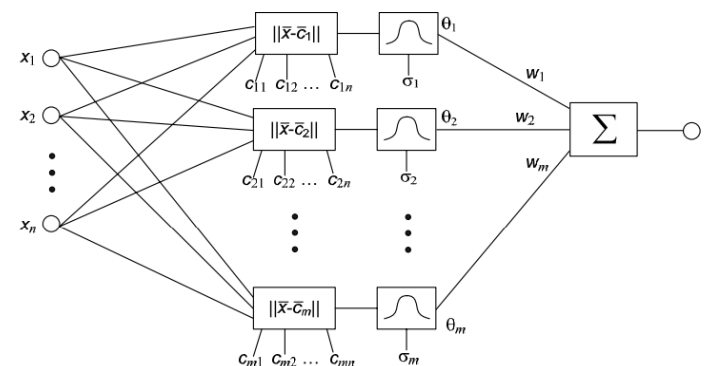


Рисунок 1 – Обобщенная структура радиально-базисной сети

Сеть состоит из двух слоев. Входные сигналы поступают на элементы первого слоя без изменений. На нём использованы обозначения: p – количество элементов в первом слое; x_1, x_2, \dots, x_n – входные сигналы; m – количество элементов во втором слое; $c_{i1}, c_{i2}, \dots, c_{in}$ – координаты центра i -го элемента; σ_i – ширина радиальной функции i -го элемента; θ_i – выходной сигнал i -го элемента; w_i –весовой коэффициент выходной связи i -го элемента; y – выходной сигнал сети.

Выходной сигнал каждого элемента определяется функцией Гаусса:

$$\theta = \exp\left(-\frac{\sum_{j=1}^n (x_j - c_{ij})^2}{2\sigma_i^2}\right)$$

Выходной сигнал нейронной сети вычисляется как

взвешенная сумма сигналов элементов: $y = \sum_{i=1}^m w_i \theta_i$.

Для обучения нейронной сети используется алгоритм обратного распространения ошибки, основанный на минимизации целевой функции ошибки сети. В соответствии с этим алгоритмом для каждого элемента вычисляются ве-