

Ячеечно-нейросетевые модели в задачах экологической безопасности

Аннотация. В статье представлена общая постановка задачи ячейечно-нейросетевого моделирования. Рассмотрены основные понятия и принципы организации ячейечно-нейросетевых моделей, предложена их классификация. Приведена схема моделирования изменения состояния среды в базовой ячейке в новый момент времени по известным текущим состояниям ее и ячеек окружения. Показан пример ячейечно-нейросетевого моделирования загрязнения атмосферы в результате аварийного выброса на промышленном объекте.

Ключевые слова: ячейечно-нейросетевая модель, ячейечная модель, искусственная нейронная сеть, моделирование, загрязнение воздуха, аварийный выброс.

Введение

Задачи экологической безопасности, такие, как прогнозирование загрязнения атмосферы в результате аварийных или постоянно действующих выбросов, идентификация источников загрязнения, принятие решений по управлению этими источниками с целью нормализации экологической ситуации, актуальны в современном индустриальном обществе. Для их решения используются математические модели и методики оценки последствий загрязнения атмосферного воздуха, основанные на сложных системах дифференциальных уравнений, описывающих динамику распространения примеси.

Вместе с этим математическое описание данных процессов предельно затруднено вследствие высокой значимости влияния дополнительных факторов: рельефа местности, метеоусловий и других. Серьезным ограничением используемых моделей и методик является невозможность или неполнота учета этих факторов в процессе длительного и многокилометрового рассеяния примеси, в связи с чем, в них принято допущение о постоянстве метеорологических характеристик, что в большинстве случаев противоречит реально наблюдаемой картине.

Учет изменения влияющих на загрязнение атмосферы факторов во временных диапазонах

оперативного прогнозирования и связанное с этим повышение точности прогноза достигаются путем применения нетрадиционных подходов и методов, таких, например, как методы искусственного интеллекта. В настоящее время в практике математического моделирования описываемых процессов достаточно широко используются искусственные нейронные сети, клеточные автоматы и другие методы, которые позволяют эффективно решать практические задачи экологической и промышленной безопасности. Данная работа посвящена применению ячейечно-нейросетевых моделей для решения задач экологической безопасности на примере оценки последствий загрязнения атмосферы в результате аварийного выброса на промышленном объекте.

1. Основные элементы ячеечно-нейросетевых моделей

Основные идеи, положенные в основу функционирования ячейечно-нейросетевых моделей, заимствованы из теорий ячейечных моделей и клеточных автоматов.

Классические ячейечные модели нашли широкое применение при решении задач физики, химии и химической технологии. Их эффек-

тивность высока при математическом описании неидеальных потоков в реакторах различных типов: последовательно соединенных аппаратах с мешалками, абсорбционных и экстракционных колоннах при некоторых гидродинамических режимах, а также, при первом приближении, в аппаратах с псевдооживленными слоями [1, 2].

В соответствии с [2], в основе ячеечной модели лежит представление об идеальном перемешивании в пределах ячеек, расположенных последовательно, и отсутствии перемешивания между ячейками. Характеристическим параметром модели служит число ячеек. В случае единственной ячейки модель представляет собой частный случай идеального смешения. При условно бесконечном количестве ячеек – модель идеального вытеснения.

Классические ячеечные модели могут описывать процесс однонаправленного движения среды, а также предусматривают возможность обратного потока между ячейками. В последнем случае при условно бесконечном количестве ячеек модель представляет собой частный случай диффузионной модели с продольным перемешиванием.

В свою очередь, клеточные автоматы используются в химической технологии и экологической безопасности для моделирования гидродинамических и газодинамических течений. Классические клеточные автоматы представляют собой дискретные динамические системы, поведение которых полностью определяется в терминах локальных зависимостей. При использовании клеточных автоматов пространство разделено равномерной сеткой, каждая клетка которой содержит определенный объем информации. Любая клетка приобретает новое состояние на каждом дискретном шаге времени за счет правил, которые определяются состояниями ее близких соседей на предыдущем временном шаге, причем правила клеточного автомата являются локальными и повсюду одинаковыми [3].

В ячеечно-нейросетевых моделях аналогично классическим ячеечным моделям все пространство среды разбивается на одинаковые ячейки, внутри которых она имеет фиксированные значения характеристик и свойств, однако при переходе от одной ячейки к другой эти значения меняются. При этом, в отличие от классических ячеечных моделей, может быть

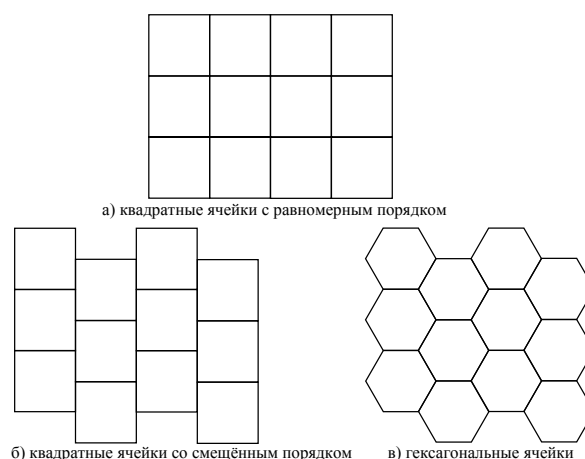


Рис. 1. Стандартные формы и порядки расположения ячеек на плоскости

смоделировано изменение состояния среды в дискретные моменты времени в ячейках, расположенных на плоскости и в трехмерном пространстве, с различной формой и порядком расположения, как в клеточных автоматах. В то же время, для каждой ячейки могут иметь место не два или несколько, а бесконечное множество состояний, определяющихся состоянием (характеристиками и свойствами) среды. Возможность же оперировать различными состояниями достигается за счет описания их изменения во времени и пространстве при помощи аппарата искусственных нейронных сетей.

Сформулируем общую постановку задачи ячеечно-нейросетевого моделирования. В качестве объекта исследования рассматривается однородная среда, характеризующаяся различными параметрами: температурой, концентрацией и другими. В общем случае параметры среды меняются во времени и в пространстве, что обусловлено внутренними и внешними условиями ее существования. Требуется разработать модель, позволяющую наилучшим образом описать состояние среды в любой ее точке в любой момент времени.

В соответствии с концепцией, заложенной в ячеечные модели, исследуемая среда должна быть разделена на одинаковые по размеру и форме ячейки (Рис. 1). Состояние среды в любой точке одной ячейки в один и тот же момент времени одинаково. Состояния в различных ячейках в один и тот же момент времени в общем случае различаются.

Изменение состояния среды зависит от движущих сил, обусловленных градиентом кон-

центрации, температуры или других физико-химических характеристик, а также от случайных внешних воздействий (возмущений), не связанных с состоянием самой среды.

В качестве входных переменных ячейечно-нейросетевой модели могут использоваться известные состояния ячеек, внешние условия, а также различные другие характеристики, непосредственно влияющие на процесс. Выходными переменными модели являются состояния тех же самых ячеек в более поздний момент времени или состояния соседних ячеек.

Связь между входными и выходными состояниями ячеек устанавливается с помощью искусственной нейронной сети прямого распространения или сети на основе радиально-симметричных функций (RBF-сети). В большинстве случаев такая сеть не потребует сложной многослойной и многонейронной структуры. Обучение сети должно происходить на основе экспериментальных данных об изменении состояния среды.

Рассмотрим основные понятия, используемые при работе с ячейечно-нейросетевыми моделями.

Ячейка – ограниченный участок пространства, однородный по состоянию среды во всех точках.

Состояние ячейки – вектор параметров среды, одинаковый во всех точках ячейки.

Характеристический размер ячейки – линейная численная характеристика, характеризующая размер ячейки. Определяется по соотношениям:

$$l = \sqrt{S_c} \quad (1)$$

или

$$l = \sqrt[3]{V_c}, \quad (2)$$

где S_c – площадь основания ячейки (для двухмерных моделей), V_c – объем ячейки (для трехмерных моделей). В зависимости от масштабов моделирования характеристический размер может измеряться в миллиметрах или метрах.

Ячеечная плотность – численная характеристика, характеризующая количество элементарных ячеек, приходящихся на единицу размера пространства:

– ячейечная плотность первого порядка – на единицу длины пространства;

– ячейечная плотность второго порядка – на единицу площади пространства;

– ячейечная плотность третьего порядка – на единицу объема.

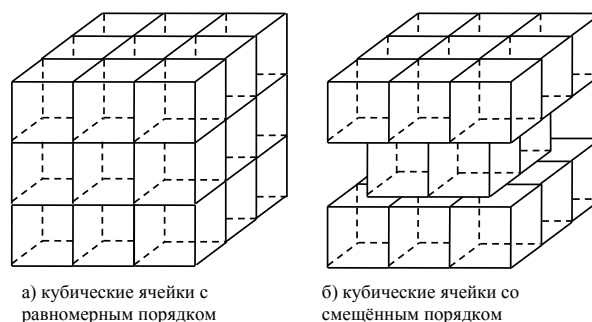


Рис. 2. Стандартные формы и порядки расположения ячеек в пространстве

Форма ячейки определяется количеством, размером и взаимным расположением граней основания ячейки. Как правило, в качестве формы выбирают правильные геометрические фигуры и тела. Так, для описания изменения состояния среды в одной плоскости, обычно используются квадратные (Рис. 1 а, б) или гексагональные ячейки (Рис. 1 в).

Анализ различных форм плоских ячеек показывает, что в случае квадратной ячейки сторона ее основания равна характеристическому размеру. В случае гексагональной ячейки сторона основания (a) и характеристический размер взаимосвязаны по соотношению:

$$l = a \cdot \sqrt[4]{6,75}. \quad (3)$$

Для описания изменения состояния среды в трехмерном пространстве наиболее целесообразно использовать кубические ячейки с равномерным порядком или со смещением (Рис. 2 а, б).

Для ячеек кубической формы характеристический размер, очевидно, совпадает с размером грани куба.

Порядок расположения ячеек определяется их взаимным местонахождением относительно друг друга. Так, например, квадратные и кубические ячейки могут располагаться равномерно (Рис. 1, 2 а) или со смещением (Рис. 1, 2 б).

Сетка – множество ячеек, имеющих одинаковые размер, форму и порядок расположения.

Узлы (узловые точки) – множество точек пространства, представляющих собой центры масс вершин оснований ячеек сетки (Рис. 3). Узлы наиболее удобно использовать при работе с ячейечно-нейросетевыми моделями, так как состояние ячеек в целом определяется именно состояниями в узловых точках. Так, например, узловые точки квадратных ячеек с равномер-

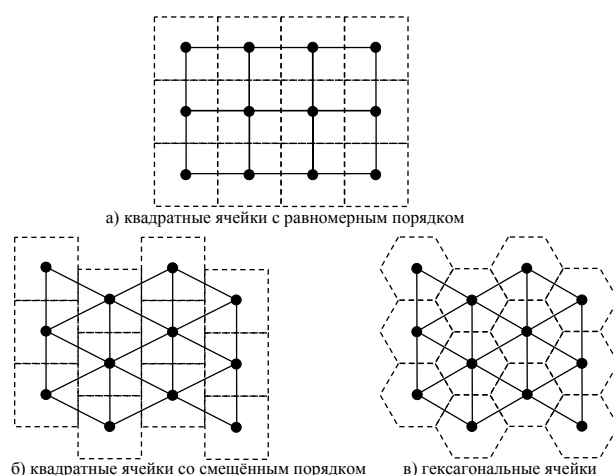


Рис. 3. Характер расположения узловых точек в ячейках различной формы и с различным порядком расположения на плоскости

ным порядком образуют вершины квадратов такого же размера, как основания ячеек; узловые точки квадратных ячеек со смещенным порядком – вершины равнобедренных треугольников с основаниями, равными сторонам квадратов базовых ячеек; узловые точки гексагональных ячеек – вершины равносторонних треугольников.

Абсолютные координаты ячейки – значения абсциссы, ординаты и аппликаты узла ячейки относительно некоторого начала отсчета, принятого в выбранной системе координат, выраженные в единицах длины. Для двухмерной сетки значения аппликат всех узлов принимаются одинаковыми и не используются при моделировании.

Уровень ячеек – группа ячеек, каждая из которых хотя бы одной гранью или вершиной прилегает соответственно к грани или вершине любой ячейки нижестоящего и вышестоящего уровней. Пример определения уровней ячеек представлен на Рис. 4. В качестве базового (нулевого) уровня выбирается единственная элементарная ячейка.

Ранг ячеек определяется степенью близости узлов ячеек окружения одного уровня, к узлу соответствующей им базовой ячейки (Рис. 5). Чем ближе расположены друг к другу две ячейки, тем сильнее влияние их состояний друг на друга. Таким образом, чем больше ранг ячеек на выбранном уровне, тем слабее они влияют на состояния ячеек меньших уровней, включая базовую ячейку. В этой связи при структурной идентификации ячеечно-нейросетевых моделей

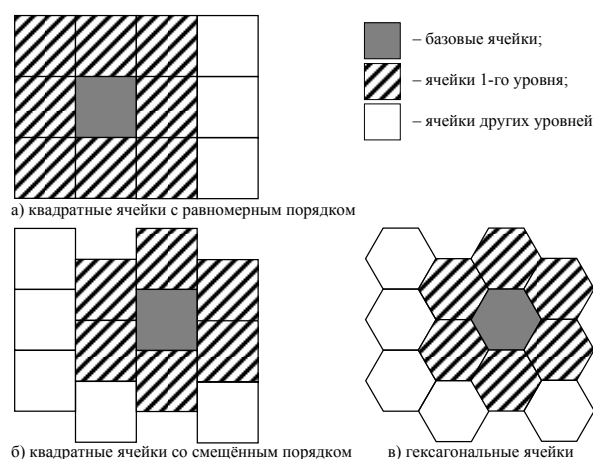


Рис. 4. Определение уровней ячеек на плоскости

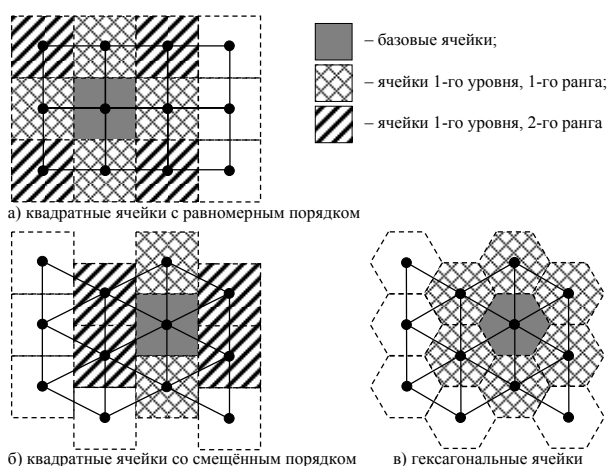


Рис. 5. Определение рангов ячеек на плоскости

можно использовать не все, а часть рангов последнего значимого уровня ячеек в наборе входных состояний среды.

В большинстве случаев при работе с ячеечно-нейросетевыми моделями используются ячейки не выше второго уровня. Использование более высоких уровней приводит к значительному повышению размерности решаемой задачи, усложнению структуры нейронной сети и, как следствие, к сложностям, возникающим при формировании выборок данных, и росту объемов вычислений.

2. Классификация ячеечно-нейросетевых моделей

Исходя из описанных выше свойств и особенностей ячеечно-нейросетевых моделей, предлагается их классифицировать следующим образом.



Рис. 6. Классификация ячейечно-нейросетевых моделей

В качестве классифицирующих признаков рассмотрим размерность пространства среды, состав выходных переменных, систему отсчета, временную глубину, форму ячеек, порядок их расположения, количество уровней и наполненность последнего уровня. Подробно классификация приведена на Рис. 6.

Рассмотрим особенности различных классов ячейечно-нейросетевых моделей.

Трехмерные модели применяются при необходимости моделирования изменения состояния среды в пространстве трех координат. Это чаще всего мелкомасштабные модели с высокой ячейечной плотностью, характерные для описания процессов, протекающих в объемном технологическом оборудовании.

Плоскостные модели используются, если поставленная задача удовлетворяет условию достаточности моделирования изменения состояния среды в двухмерном пространстве.

Модели с **единственным выходом** представляют собой нейросетевой аналог алгебраической функциональной зависимости от нескольких аргументов. Используются, если необходимо рассчитать состояние только одной ячейки.

Модели с **несколькими выходами** — это сложные многосвязные зависимости, для которых характерно влияние всего множества входных переменных на множество выходных. Кроме того, возможно присутствие скрытого

влияния выходных переменных друг на друга. К данному виду можно отнести модели, в состав выходных переменных которых входит серия состояний одной ячейки, рассчитанных для различных моментов времени, либо множество состояний различных ячеек, рассчитанных для одного момента времени.

Пространственные модели позволяют получить неизвестные состояния определенной ячейки при помощи экстраполяции по известным состояниям соседних ячеек в тот же самый момент времени.

Временные модели позволяют проследить изменение состояний ячеек пространства во времени. Здесь кроме условий внешней среды в качестве входных переменных используются переменные состояний центральной ячейки и ячеек ее окружения в последний известный момент времени (для одномоментных моделей), а также в два или более моментов (для двухмоментных и многомоментных моделей). Выходная переменная — это состояние центральной ячейки в следующий момент времени. Кроме того, для многосвязных моделей выходами будут также состояния ячеек ее окружения. В последнем случае одна обученная нейронная сеть позволяет оценить состояние на единственно возможный интервал времени вперед. Однако, подавая на вход той же сети полученные результаты вычислений, можно получить серию значений.

Особенности моделей с различной формой и порядком расположения ячеек определяются степенью взаимного влияния ячеек, что, в свою очередь, связано с уровнями и рангами ячеек.

Если на вход нейронной сети помимо условий внешней среды подается состояние только базовой ячейки, такая модель называется одноуровневой. Если, дополнительно, – первого или обоих рангов 1-го уровня – двухуровневой. В случае подачи на вход состояний группы ячеек хотя бы одного ранга 2-го или последующих уровней – многоуровневой. Наиболее часто используются двухуровневые ячейечно-нейросетевые модели как обеспечивающие достаточную точность вычислений при относительно простом составе входных переменных нейронной сети.

При необходимости усложнения состава входов нейронной сети последовательно добавляются состояния ячеек следующих рангов последнего задействованного уровня и только по исчерпанию всех рангов берут новый уровень ячеек. Таким образом, в составе входных переменных нейронной сети не могут быть использованы состояния ячеек, расположенные дальше от центра (а значит, в меньшей степени влияющие на состояние базовой ячейки), чем еще не задействованные, но ближе лежащие.

Если в составе входных переменных использованы состояния ячеек всех рангов последнего входящего в него уровня, такая модель называется полноуровневой. В противном случае модель – неполноуровневая.

3. Моделирование последствий химической аварии

Ячеечно-нейросетевые модели могут быть использованы для решения большого количества различных задач экологической безопасности, химии и химической технологии. Это обусловлено, в том числе, их разнообразием.

Рассмотрим пример ячейечно-нейросетевого моделирования состояния базовой ячейки на новый момент времени по известным состояниям ее и ячеек окружения в предыдущий момент на примере оценки последствий аварийного выброса газообразного аммиака массой 29 т, хранящегося под давлением 4 бара. Оценка последствий загрязнения воздуха заключается, прежде всего, в расчете полей концентрации вредной примеси и их изменения во времени,

так как именно они определяют размеры мгновенной и интегральной зон загрязнения, зон токсического поражения и влияют на принятие решений по снижению и ликвидации негативных последствий для окружающей среды и человека. Таким образом, состояние среды (атмосферного воздуха) в нашем случае характеризуется концентрацией аммиака. Наибольшую важность имеет моделирование поведения примеси в приземном слое, где обитает абсолютное большинство организмов, которые могут пострадать в результате загрязнения воздушного бассейна, живут и работают люди. Это обстоятельство обуславливает целесообразность допущения о рассмотрении только приземного слоя пространства распространения примеси и использование плоскостных ячейечно-нейросетевых моделей.

В качестве ячейечной структуры в примере выбрана двумерная сетка гексагональных ячеек со стороной 50 м. Входными переменными (x_i) нейронной сети – двухслойного перцептрона – являются состояния базовой ячейки и шести ячеек ее окружения (концентрации аммиака) в предыдущий момент времени и два параметра внешней среды, непосредственно влияющих на изменение концентрации во времени, – скорость и направление ветра. Единственным выходной параметр нейронной сети (y) – прогнозируемое состояние базовой ячейки на следующий момент времени. Таким образом, сеть включает 9 входных переменных и одну выходную.

Обучающая выборка была составлена на основе результатов компьютерного моделирования с использованием методики [4], ее объем составил около 10 тыс. примеров. Расчет по методике осуществлялся при следующих метеорологических параметрах и условиях окружающей местности: скорость ветра – от 0,5 до 3 м/с, все возможные направления ветра, средняя температура воздуха – +20 градусов, светлое время суток, окружающая местность – городская застройка. Для ячейечно-нейросетевого моделирования при непостоянных метеоусловиях использовался следующий сценарий их изменения с момента времени 120 мин после аварии:

Время после аварии, мин	Скорость ветра, м/с	Направление ветра, град.
120	2,0	0
130	1,0	20
140	0,5	45
150	0,5	30
160	1,0	–20

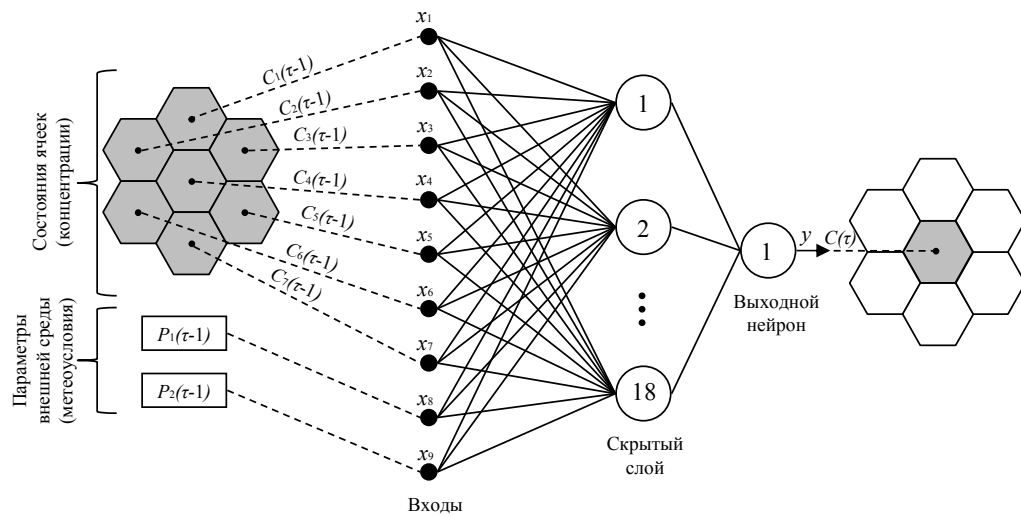


Рис. 7. Схема ячейечно-нейросетевой модели для прогнозирования концентрации аммиака

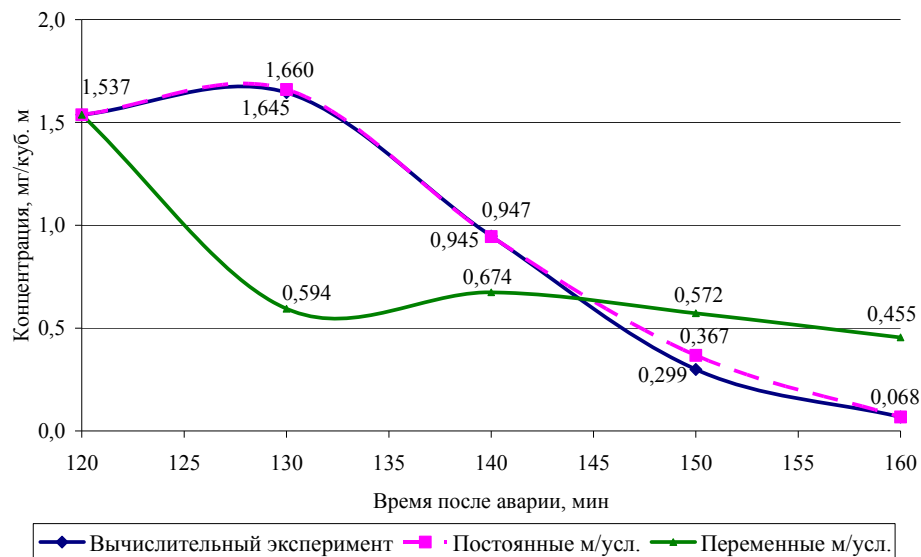


Рис. 8. Изменение концентрации аммиака во времени

Рассматривались различные структуры нейронной сети. Наиболее простая из структур, давших достаточную точность расчета – 0,01 единицы нормированной концентрации, – двухслойный перцептрон с 18 нейронами в скрытом слое. Схема ячейечно-нейросетевой модели для данного примера представлена на Рис. 7.

В общем виде модель изменения концентрации аммиака в базовой ячейке записывается следующим образом:

$$C(\tau) = f(C_1(\tau-1), C_2(\tau-1), \dots, C_7(\tau-1), P_1(\tau-1), P_2(\tau-1)), \quad (4)$$

где C , C_i – концентрации аммиака в различных ячейках ($i = 1..7$), P_1 – скорость ветра, P_2 – направление ветра.

Результаты моделирования изменения концентрации аммиака во времени для фиксированной точки пространства представлены на Рис. 8. При постоянных метеосостояниях средняя абсолютная ошибка рассчитанных концентраций составила около 0,02 мг/м³, что позволяет сделать вывод о практической идентичности полученных данных результатам компьютерного моделирования по методике [4].

В то же время, в отличие от методики [4], предложенная модель (4) позволяет учитывать изменение скорости и направления ветра в дискретные моменты времени с шагом 10 мин. С учетом выбранного сценария изменения метеосостояний была получена соответствующая зави-

симость концентрации аммиака от времени после аварии, значительно отличающаяся от такой же зависимости при постоянных скорости и направлении ветра (Рис. 8).

Различный характер распространения примеси аммиака наблюдается и на фрагментах Рис. 9, где приведены результаты моделирования зоны загрязнения, полученные с помощью пакета программ Mathlab с использованием средства Neural Network Toolbox при постоянных и переменных метеоусловиях в моменты времени 120 и 130 мин после аварии. На основе графиков (Рис. 8) и зон (Рис. 9) можно сделать следующие наблюдения: при учете изменения направления ветра и ослаблении его скорости наблюдаются:

- смещение центра облака загрязняющего вещества относительно оси постоянного направления ветра;

- уменьшение расстояния, на которое перемещается облако;

- замедление рассеяния примеси, в результате чего при выбранном сценарии изменения метеоусловий к моменту времени 160 мин не происходит падение концентрации аммиака ниже уровня максимальной разовой предельно допустимой концентрации ($0,2 \text{ мг/м}^3$), в отличие от постоянных метеоусловий (2 м/с).

Все вышеперечисленные наблюдения объясняются реальными физическими процессами, происходящими при рассеянии примеси в условиях изменяющейся внешней среды и подтверждают необходимость учета изменяющихся внешних факторов.

Заключение

Рассмотренный пример демонстрирует, что главное преимущество ячеечно-нейросетевых моделей заключается в возможности их использования в условиях неопределенности и изменчивости внешних условий, влияющих на состояние среды, когда традиционно используемые модели других классов это не позволяют сделать. Возможность наглядной визуализации результатов моделирования, вытекающая из ячейечной структуры пространства среды, де-

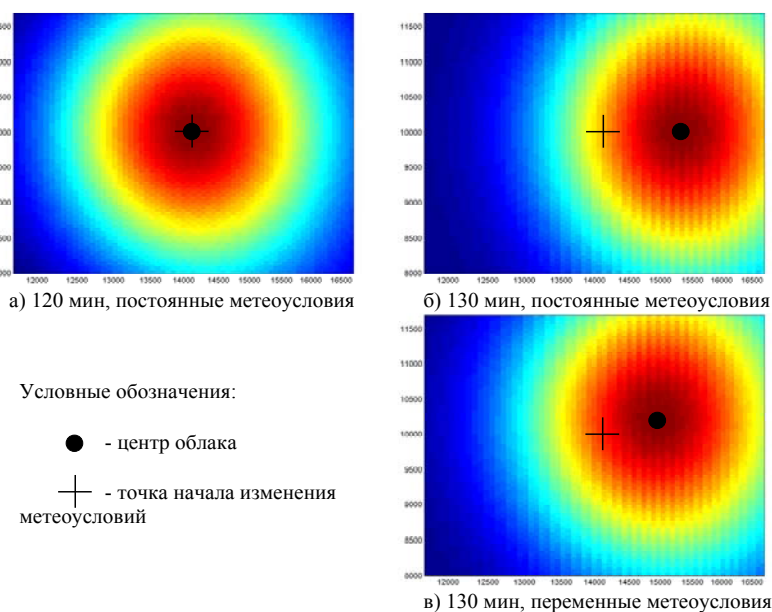


Рис. 9. Изменение положения зоны загрязнения при постоянных и переменных метеоусловиях

лает их перспективными для реализации в компьютерных программах при решении учебных и научно-исследовательских задач.

Дальнейшие исследования ячейечно-нейросетевых моделей связаны с изучением:

- особенностей применения различных архитектур нейронных сетей для описания изменения состояния среды;

- возможности описания протекания различных процессов в трехмерном пространстве;

- экстраполирующей способности моделей во времени и пространстве;

- многосвязных моделей, прогнозирующих состояние среды одновременно в нескольких соседних ячейках и на несколько последовательных моментов времени;

- моделей с различной временной глубиной пространства входных переменных.

В области решения задач экологической безопасности планируется уделить внимание применению метода ячейечно-нейросетевого моделирования:

- для оценки последствий загрязнения воздуха постоянно действующими промышленными источниками при изменяющихся метеоусловиях;

- при исследовании процесса рассеяния примеси на территории с неоднородным типом подстилающей поверхности;

- в системах поддержки принятия решений по управлению безопасностью промышленных

производств и экологической безопасностью на территории городов – промышленных центров.

Литература

1. Царева З.М. Основы теории химических реакторов (компьютерный курс): Учеб. для химико-техн. спец./ З. М. Царева, Л. Л. ТОВАЖНЯНСКИЙ, Е. И. Орлова. – Харьков: ХГПУ, 1997. – 624 с.
2. Кафаров В.В. Методы кибернетики в химии и химической технологии/ В. В. Кафаров. – М.: Химия, 1985. – 448 с.
3. Тоффли Т. Машины клеточных автоматов/ Т. Тоффли, Н. Маргулис. – М.: Мир, 1991. – 280 с.
4. Методика оценки последствий химических аварий (Методика «Токси»). Редакция 2.2/ Методики оценки последствий аварий на опасных производственных объектах: Сборник документов. Серия 27. Выпуск 2/ Колл. авт. – М.: ГУП «Научно-технический центр по безопасности в промышленности Госгортехнадзора России», 2002. – 208 с., с. 123-206.

Дударов Сергей Павлович. Доцент кафедры информационных компьютерных технологий Российского химико-технологического университета имени Д. И. Менделеева (РХТУ). Окончил РХТУ в 2000 году. Имеет ученую степень кандидата технических наук, ученое звание доцента. Автор или соавтор 96 печатных работ. Область научных интересов: методы искусственного интеллекта, математическое моделирование в экологической безопасности, автоматизированные системы обучения и контроля знаний. E-mail: dudarov@muctr.ru.

Карибова Юлия Альбертовна. Студент 4-го курса РХТУ. Область научных интересов: методы искусственного интеллекта, ячейечно-нейросетевые модели, искусственные иммунные системы. E-mail: julia.karibova@gmail.com.

Кудряшов Алексей Николаевич. Студент 4-го курса РХТУ. Область научных интересов: методы искусственного интеллекта, ячейечно-нейросетевые модели, клеточные автоматы, разработка информационно-программного обеспечения для решения прикладных задач экологической безопасности. E-mail: lexakudryashov@ya.ru.

Папаев Павел Леонидович. Студент 4-го курса РХТУ. Область научных интересов: методы искусственного интеллекта, искусственные нейронные сети, ячейечно-нейросетевые модели, разработка информационно-программного обеспечения для решения прикладных задач экологической безопасности. E-mail: pahan.p.l@inbox.ru.