

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Полупроводниковые приборы: Учебник для вузов/Н. М. Тугов, Б. А. Глебов, Н. А. Чарыков; Под ред. В. А. Лабунцова. – М.: Энергоатомиздат, 1990. – 576 с.: ил.(38)
2. Квантовая механика /А. С. Давыдов – М.: Государственное издательство физико-математической литературы, 1963. – 748 с. (191)

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ С ПОМОЩЬЮ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

Бахметова Н.А., Токарев С.В.

*Дзержинский политехнический институт
Дзержинск, Россия*

В литературе описывается большое количество методов построения математических моделей различных объектов. При этом среди них следует выделить методы построения математических моделей именно технологических процессов. При составлении математических моделей технологических процессов редко располагают необходимой полной априорной информацией о технологическом объекте и окружающей его среде. Даже если известны системы уравнения, описывающие поведение системы, то часто оказывается, что нет данных о величине отдельных параметров, и к тому же нередко имеющиеся модели слишком сложны и адаптация таких моделей ста-

новится довольно трудоемкой и длительной. В дальнейшем оказывается, что принятая при проектировании модель только приблизительно отражает объект, из-за чего возникает ошибка при управлении с помощью такой модели. Построение содержательной аналитической модели сложного объекта проблематично, и порой невозможно, т.к. неизвестен порядок динамической системы и наличие различных нелинейностей. Поэтому желательно построение моделей других классов.

Альтернативным методом моделирования являются искусственные нейронные сети (НС). НС являются математическим аналогом биологических нейронов мозга. НС можно рассматривать как направленный граф со взвешенными связями, в котором искусственные нейроны являются узлами. Эти модели различаются по строению отдельных нейронов, по топологии связей между ними и по алгоритмам обучения.

Существуют некоторые рекомендации относительно необходимой топологии нейронной сети, позволяющие использовать их для решения задач моделирования. В основе этих рекомендаций лежит фундаментальная для теории нейронных сетей теорема А.Н. Колмогорова и В.И. Арнольда о представлении непрерывных функций многих переменных в виде суперпозиции непрерывных функций одной переменной и сложения:

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n) = \sum_{k=1}^{2n+1} g_k \left(\sum_{j=1}^n h_{jk}(x_j) \right), \quad (1)$$

где g_k и h_{jk} – некоторые функции одной переменной.

А Теорема Хехт-Нильсена доказывает представимость функции многих переменных достаточно общего вида с помощью двухслойной нейронной сети с прямыми полными связями с n нейронами входного слоя, $(2n+1)$ нейронами скрытого слоя с заранее известными ограниченными функциями активации (например, сигмоидальными) и m нейронами выходного слоя с неизвестными функциями активации.

Важным следствием из теоремы Хехт-Нильсена является представимость любой многомерной функции нескольких переменных с помощью нейронной сети фиксированной размерности. Неизвестными остаются следующие характеристики функций активации нейронов. Про функции активации нейронов выходного слоя из теоремы Хехт-Нильсена известно только то, что они представляют собой нелинейные функции общего вида. В одной из работ, продолжающих развитие теории, связанной с рассматриваемой теоремой, доказывается, что функции

активации нейронов выходного слоя должны быть монотонно возрастающими. Это утверждение в некоторой степени сужает класс функций, которые могут использоваться при реализации отображения с помощью двухслойной нейронной сети. На практике требования теоремы Хехт-Нильсена к функциям активации удовлетворяются следующим образом. В нейронных сетях как для первого (скрытого), так и для второго (выходного) слоя используют сигмоидальные передаточные функции с настраиваемыми параметрами. То есть в процессе обучения индивидуально для каждого нейрона задается максимальное и минимальное значение, а также наклон сигмоидальной функции. Т.о. из объединенной теоремы Колмогорова–Арнольда–Хехт–Нильсена следует, что для любого алгоритма существует НС, которая его реализует. Что говорит о том, что НС является универсальным вычислительным средством для аппроксимирования функций.

Позже было доказано, что двухслойная нейронная сеть, описываемая выражением

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n) = \sum_{k=1}^m c_k g\left(\sum_{j=1}^n c_{jk} x_j + c_{0k}\right) + c_0, \quad (2)$$

где $g(z) = 1/(1 + \exp(-z))$, способна аппроксимировать с любой точностью любую непрерывную функцию многих переменных. Эта сеть имеет n входных, $2n+1$ скрытых и один выходной нейрон. В этом случае неопределенным остается только число нейронов первого слоя. Оно подбирается в зависимости от размерности входного и выходного сигнала, а также от числа элементов обучающей выборки.

Таким образом, приведенные рекомендации позволяют облегчить построение нейронных сетей и тем самым успешно применять их в решении задач моделирования технологических процессов.

КОНФОРМАЦИОННАЯ ИЗОМЕРИЗАЦИЯ 4-ЗАМЕЩЕННЫХ 1,3,2- ДИОКСАБОРИНАНОВ

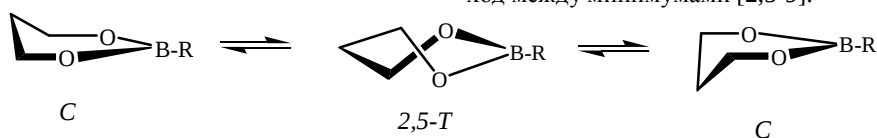
Валиахметова О.Ю.¹, Бочкор С.А.¹,
Кузнецов В.В.²

¹Уфимский государственный нефтяной
технический университет

²Институт физики молекул и кристаллов
Уфимского научного центра РАН

Интерес к циклическим эфирам борных кислот с гетероатомами кислорода - 1,3-диокса-2-борадициклоалканам – обусловлен все более возрастающим значением этих соединений в тонком органическом синтезе (получение энантиомерных спиртов и полиенов), комплексом практически полезных свойств (биологически активные вещества, ингибиторы коррозии, компоненты полимерных и горюче-смазочных материалов), а также особенностями строения (электронные и стерические внутримолекулярные взаимодействия) [1-6]. Последнее в немалой степени обусловлено присутствием электроно-дефицитного атома бора и электроно-донорных гетероатомов кислорода в одной молекуле [1,2].

Известно, что поверхность потенциальной энергии (ППЭ) молекул шестичленных борных эфиров – 1,3,2-диоксаборинанов – содержит один или два (для замещенных аналогов) минимума – конформеры *софы* (C) – и один максимум – форму 2,5-*твист* (2,5-T), а конформационная изомеризация в отличие от неборных аналогов – 1,3-диоксанов – предполагает однобарьерный переход между минимумами [2,5-9].



Ранее [10,11] нами была подробно изучена применимость квантово-химических методов к определению структурных и геометрических характеристик циклических борных эфиров. Целью настоящей работы является исследование маршрута конформационной изомеризации молекул

модельных 4-замещенных 1,3,2-диоксаборинанов **1-6** с помощью полуэмпирического (AM1) и неэмпирических (RHF//STO-3G, RHF//3-21G) методов в рамках программного обеспечения HyperChem [12].