

Аппроксимация нейронными сетями химической кинетики

Научный руководитель – Михальченко Елена Викторовна

Швецова Марина Александровна

Студент (специалист)

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова,

Механико-математический факультет, Москва, Россия

E-mail: marina.shvecova@math.msu.ru

Детонационная волна в газовых смесях является многомерным комплексом, формируемым ведущей ударной волной и следующей за ней зоной химической реакции. По своей природе детонационная волна не является устойчивой, что ограничивает возможности контролируемого использования детонационного горения. Особенности развития неустойчивости детонационной волны во многом определяются химической кинетикой реагирующей смеси. При этом, численное моделирование с использованием детальных кинетических механизмов требует значительных вычислительных ресурсов. В данной работе мы хотим попробовать аппроксимировать химическую кинетику искусственными нейронными сетями. Математическая постановка задачи заключается в следующем: решается система дифференциальных уравнений по числу компонент и одного алгебраического уравнения. С помощью классических численных методов были построены наборы обучающих данных. Численная реализация основана на методе Новикова из класса методов Розенброка для жестких систем дифференциальных уравнений. Набор обучающих данных генерировался из двумерной камеры сгорания. В начальный момент времени исследуемая смесь сосредоточена в левой части камеры. Моделируется горение или взрыв водородно-кислородной смеси в воздухе. Все пространство камеры разбивается на маленькие одинаковые ячейки, в которых независимо вычисляется химическая кинетика. Таким образом, мы имеем 12 млн. векторов в качестве начальных состояний для создания обучающего набора. Это количество избыточно. Поэтому имеет смысл выделить уникальные состояния. Для этой цели мы использовали метод главных компонент. В нашем случае двух первых компонент достаточно, чтобы отобразить данные без существенной потери информации. В результате применения такой процедуры ко всем 60 моментам наблюдений, из 12 млн. исходных векторов осталось только 77 299. Эти вектора и стали начальными условиями, из которых были спрогнозированы развития химических процессов на 500 шагов по времени. Полученные данные подчиняются каждому своему закону во времени и лежат в разных диапазонах. Мы прибегаем к стандартному масштабированию. Входом сети является 13-мерный вектор (временной шаг, температура и молярные плотности веществ). Далее вход передается через первый слой, который переводит 13-мерный вектор в 100-мерное пространство. Средние три полносвязных слоя имеют 100x150, 150x150, 150x100 нейронов соответственно. Затем результат покомпонентно складывается с входом, преобразуется обратно в 13-мерный вектор и передается на выход сети. Выход пятого слоя покомпонентно складывается с входом всего блока. В качестве функции активации используется одна из параметрических версий ReLU – LeakyReLU, с параметром $a = 0.01$. Полученная нейронная сеть работает в рекуррентном режиме. В данной работе в процесс обучения включено предсказание сети на несколько шагов вперед, благодаря этому сеть автоматически училась минимизировать рекуррентное накопление ошибки.

Источники и литература

- 1) Novikov E.A. Investigation of (m,2)-methods of stiff systems calculation// Calculation technologies. 2007. V. 12. 5. P. 103–115.
- 2) Tereza A.M., Medvedev S.P., Smirnov V.N. Experimental study and numerical simulation of chemiluminescence emission during the self-ignition of hydrocarbon fuels // Acta Astronautica. 2019. V. 163. P. 18–24.
- 3) Giannozzi P. Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO// J. Phys Condens Matter. 2017. V. 46(29): 465901.