

Глубокое обучение в химической физике

Научный руководитель – Крыжановский Михаил Владимирович

*Мальсагов Магомед Юсупович**Кандидат наук*

Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований РАН, Москва, Россия

E-mail: Magomed.Malsagov@gmail.com

В работе исследуется возможность решения задач химической кинетики с использованием искусственных нейронных сетей. Для исследования выбрана модель горения водорода с кислородом в воздушной среде. В реакции при высокой температуре (500–4000 К) взаимодействуют водород H_2 , кислород O_2 , их производные (H , O , OH , H_2O , HO_2 , H_2O_2), а так же нейтральные элементы аргон Ar и азот N_2 . Весь процесс описывается 28 химическими реакциями. Удалось построить многослойную нейронную сеть, состоящую из нескольких одинаковых блоков. Подобная сеть в состоянии довольно точно прогнозировать развитие процесса на 1000 временных шагов. Среднеквадратичная ошибка работы такой сети составила $MSE=5.4 \cdot 10^{-04}$, а вычислительная сложность $\sim 10^6$ операций. В отличие от прочих методов, данная нейронная сеть может быть обучена на другой модели с большим числом параметров, при этом сохраняются ее свойства.

Иллюстрации

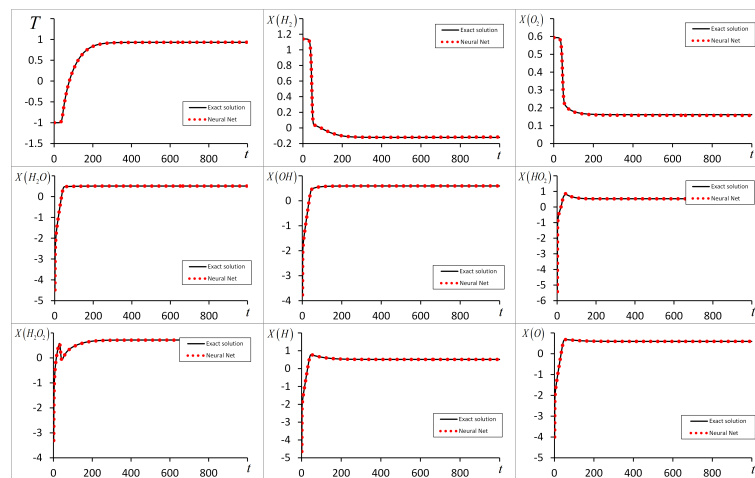


Рис. 1. Результат работы сети