

Нейросетевой подход к решению задач газовой динамики с химическими превращениями

Научный руководитель – Никитин Валерий Федорович

Михальченко Е.В.¹, Карандашев Я.М.²

1 - Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Механико-математический факультет, Кафедра газовой и волновой динамики, Москва, Россия, *E-mail: Vi-Velena@rambler.ru*; 2 - Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований РАН, Москва, Россия, *E-mail: ya_rad_wsem@mail.ru*

Реализован нейросетевой подход для расчета шага химической кинетики. С помощью данного алгоритма возможно получить увеличение быстродействия на задачах горения и подземной гидродинамики с химическими превращениями. Во-первых, создан датасет, в котором начальная смесь состоит только из молекулярного кислорода и водорода при различных их концентрациях и температурах. Благодаря тому, что в первоначальной смеси отсутствуют радикалы, такая реакция носит более плавный характер и крайне медленно развивается вначале (на временной шкале порядка десятков-сотен микросекунд). Во-вторых, для моделирования была выбрана архитектура нейронной сети, в которой присутствует обходная связь (skip-connection) от входа к выходу. Таким образом нейронной сети необходимо лишь выучить изменение концентрации веществ во времени, что позволяет параметрам нейронной сети обучаться более быстро (обычно 50-100 эпох обучения достаточно). В-третьих, было предложено проведение предсказания на несколько шагов вперед, а также учет данных предсказания при расчёте функции ошибки. Благодаря этому нейронная сеть учится намного точнее, а ошибка уменьшается на 2-3 порядка. Наконец, благодаря всем приведённым модификациям, нейронная сеть показывает намного лучшие результаты предсказания и учится значительно быстрее, при том что количество слоёв в ней значительно меньше, чем в прошлой работе (5 слоёв вместо 27)[1].

Работа выполнена за счет субсидии, выделенной ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН на выполнение государственного задания по теме No. 0580-2021-0021 «Разработка алгоритмической компоновки и программ для расчета многомасштабных процессов и горения».

Источники и литература

- 1) V. B. Betelin, B. V. Kryzhanovsky, N. N. Smirnov, V. F. Nikitin, I. M. Karandashev, M. Yu Malsagov, and E. V. Mikhailchenko. Neural network approach to solve gas dynamics problems with chemical transformations. *Acta Astronautica*, 180:58–65, 2021