

DOI: 10.51790/2712-9942-2021-2-4-2

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ЗАДАЧ ГОРЕНИЯ

**Б. В. Крыжановский^{1,a}, Н. Н. Смирнов^{1,2,b}, В. Ф. Никитин^{1,2,c}, Я. М. Карандашев^{1,d},
М. Ю. Мальсагов^{1,e}, Е. В. Михальченко^{1,2,f}**

¹ Федеральное государственное учреждение «Федеральный научный центр
Научно-исследовательский институт системных исследований Российской академии наук»,
г. Москва, Российская Федерация

² Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, г. Москва, Российская
Федерация

^a ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-0901-6370>, kryzhanov@mail.ru

^b ORCID: <http://orcid.org/0000-0001-6280-1522>, mech.math.msu@inbox.ru

^c ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-8944-637X>, vnikster@gmail.com

^d ORCID: <http://orcid.org/0000-0001-8483-072X>, karandashev@niisi.ras.ru

^e ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-7962-3387>, malsagov@niisi.ras.ru

^f ORCID: <http://orcid.org/0000-0001-9473-7932>, mikhailchenkolena@yandex.ru

Аннотация: моделирование горения является ключевым аспектом полномасштабного трехмерного моделирования современных и перспективных двигателей для авиационно-космических силовых установок. В данной работе изучается возможность решения задач химической кинетики с использованием искусственных нейронных сетей. С помощью классических численных методов были построены наборы обучающих данных. Выбирая среди различных архитектур многослойных нейронных сетей и настраивая их параметры, мы разработали достаточно простую модель, способную решить эту проблему. Полученная нейронная сеть работает в рекурсивном режиме и может предсказывать поведение химической многовидовой динамической системы за много шагов.

Ключевые слова: химическая кинетика, моделирование горения, искусственные нейронные сети, многослойные сети, рекурсивный режим.

Благодарности: работа выполнена за счет субсидии, выделенной ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН на выполнение государственного задания № 0580-2021-0021 (рег. № 121031300100-8) и № 0580-2021-0003 (рег. № 121031300111-4).

Для цитирования: Крыжановский Б. В., Смирнов Н. Н., Никитин В. Ф., Карандашев Я. М., Мальсагов М. Ю., Михальченко Е. В. Использование нейронных сетей для моделирования задач горения. Успехи кибернетики. 2021;2(4):15–29. DOI: 10.51790/2712-9942-2021-2-4-2.

NEURAL NETWORKS APPLICATIONS TO COMBUSTION PROCESS SIMULATION

**Б. В. Kryzhanovsky^{1,a}, Н. Н. Smirnov^{1,2,b}, В. Ф. Nikitin^{1,2,c}, Я. М. Karandashev^{1,d},
М. Ю. Malsagov^{1,e}, Е. В. Mikhalkenko^{1,2,f}**

¹ Federal State Institution “Scientific Research Institute for System Analysis of the Russian Academy of Sciences”, Moscow, Russian Federation

² Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russian Federation

^a ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-0901-6370>, kryzhanov@mail.ru

^b ORCID: <http://orcid.org/0000-0001-6280-1522>, mech.math.msu@inbox.ru

^c ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-8944-637X>, vnikster@gmail.com

^d ORCID: <http://orcid.org/0000-0001-8483-072X>, karandashev@niisi.ras.ru

^e ORCID: <http://orcid.org/0000-0002-7962-3387>, malsagov@niisi.ras.ru

^f ORCID: <http://orcid.org/0000-0001-9473-7932>, mikhailchenkolena@yandex.ru

Abstract: combustion process simulations are the key aspect enabling full-scale 3D simulations of advanced aerospace engines. This work studies solving chemical kinetics problems with artificial neural networks. The training datasets were generated by classical numerical methods. Choosing a multi-layer neural network architecture and fine-tuning its parameters, we developed a simple model that can solve the problem. The neural network obtained works is recursive, and by running many iterations it can predict the behavior of a chemical multimodal dynamic system.

Keywords: chemical kinetics, combustion simulation, artificial neural networks, multi-layer networks, recursive approach.

Acknowledgements: the work was financially supported by SRISA under the government programs No. 0580-2021-0021 (reg. No. 121031300100-8) and No. 0580-2021-0003 (reg. No. 121031300111-4).

Cite this article: Kryzhanovsky B. V., Smirnov N. N., Nikitin V. F., Karandashev Ia. M., Malsagov M. Yu., Mikhalkchenko E. V. Neural Networks Applications to Combustion Process Simulation. *Russian Journal of Cybernetics*. 2021;2(4):15–29. DOI: 10.51790/2712-9942-2021-2-4-2.

Введение

В многих случаях задача расчета газодинамических процессов в двигателях, силовых установках включает моделирование физических и химических взаимодействий. В полномасштабном трехмерном моделировании современных и перспективных ракетных двигателей часто используются топлива, которые описываются подробными химическими механизмами, включающими сотни, а иногда и тысячи элементарных реакций между десятками и сотнями компонент. Объединение вычислительной газодинамики и моделирование горения является сложной вычислительной задачей из-за необходимости объединения нелинейных уравнений химической кинетики с уравнениями газодинамики и явлениями переноса. Узким местом всего подхода является расчет химической кинетики, который требует интеграции в решение трехмерных газодинамических задач стадии решения жесткой системы обыкновенных дифференциальных уравнений в численный процесс с мелким шагом по времени. Прямая интеграция подробных химических механизмов с большим числом компонент и реакций в трехмерные газодинамические задачи в настоящее время ограничена доступными вычислительными ресурсами [1–4].

Чтобы сократить время вычислений, многие программные коды используют сокращенные кинетические механизмы. Существуют различные методы получения редуцированных механизмов из подробных данных. Вот их краткий перечень: вычислительное одиночное варьирование (CSP, Computational Singular Perturbation) [5]; внутренние низкоразмерные многообразия (ILDM, Intrinsic Low Dimensional Manifolds) [6]; уровень значимости (LOI, Level of Importance) [7]; программа компьютерного сокращения механизма (CARM, Computer Assisted Reduction Mechanism Code) [8–9]; ограниченное равновесие, определяемое интенсивностью реакций (RCCE, Rate Controlled Constrained Equilibrium) [10–11]; направленный граф отношений (DRG, Directed Relation Graph) [12]. При использовании сокращенных механизмов необходимо выбрать правильный механизм для задачи рассматриваемого, чтобы соблюсти ограничения механизмов в выбранных диапазонах параметров [13]. Но даже при значительном сокращении кинетический шаг использует значительную часть общего времени вычислений.

Другими способами сокращения времени вычислений являются методы, в которых термохимическое состояние пространства вычисляется во время моделирования и сохраняется в таблицах для дальнейшего повторного использования [14–15].

В настоящее время подход с использованием нейронных сетей является многообещающим для ускорения такого рода вычислений. Методы машинного обучения получили широкое распространение благодаря многочисленным достижениям в алгоритмах и доступности вычислительных мощностей. Существует множество работ по применению этой техники к задачам химической кинетики. В [16] моделирование методом больших вихрей (LES) метано-водородного пламени, стабилизированного обтекаемым телом, было выполнено с использованием двух методов химического представления, а именно традиционной техники структурированных таблиц и искусственных нейронных сетей. В работе [17] представлена методика составления таблиц механизмов горения с использованием искусственных нейронных сетей. Искусственные нейронные сети обучались с использованием выборок, созданных на основе абстрактной задачи, таким образом, чтобы они покрывали фазовое пространство семейства задач горения. В [18] был предложен подход к составлению таблиц химии, основанный на равновесии с управляемой скоростью реакций и искусственными нейронными сетями, с дальнейшим применением этого метода к моделированию пламени в смеси $\text{CH}_4 / \text{H}_2 / \text{N}_2$. Для обучения, тестирования и моделирования искусственных нейронных сетей использовалась самоорганизующаяся карта — концепция многослойного персептрона для выполнения задач распознавания образов и прогнозирования временной эволюции ведущих видов.

В настоящей работе мы заменили численное дифференцирование жесткой системы обыкновенных дифференциальных уравнений нейросетевым решением. Получающаяся в результате нейронная сеть может, работая в рекурсивном режиме, предсказывать на много шагов вперед развитие химической

системы, состоящей из большого числа компонент. Изменив нормировку данных и немного архитектуру сети, мы смогли не только повысить точность и надежность нейронной сети, но и уменьшить вычислительные затраты.

Математическая модель

В качестве реагирующей смеси рассматривалась смесь идеальных газов, описанных с помощью уравнения Клапейрона–Менделеева. Его термодинамическое состояние определяется температурой, давлением, плотностью и концентрацией веществ. Термодинамическое состояние смеси определяется молярными плотностями компонент и температурой, другие параметры рассчитываются на их основе с помощью своих определений и с применением уравнения состояния.

В таблице 1 приведены реакции из кинетического механизма GriMech 3.0 (1999), подсистема для горения на воздухе водорода без реакций окисления азота и взаимодействия между азотом и водородом. Эти реакции исключены из-за их достаточно медленных скоростей и, как следствие, слабого влияния на процесс распространения пламени. Азот играет роль разбавителя; он также участвует в трехмолекулярных реакциях как фактор, влияющий на скорость последних. В механизме также учитывается аргон, он нейтрален вместе с азотом. Рассматриваемая проблема горения включает всего 10 видов, два из которых нейтральные: азот (N_2), аргон (Ar) и 8 видов изменяемых компонент: H_2 , O_2 , H_2O , OH , HO_2 , H_2O_2 , H , O . Между ними существует 28 химических реакций, показанных в таблице 1, в некоторых из них участвуют аналогичные входящие и выходные компоненты, помимо третьего тела, но используются разные внутренние пути, что приводит к разной скорости реакции. Если мы объединим эти дубликаты, механизм будет включать 20 различных реакций. Их номенклатура в крайнем левом столбце таблицы обозначает это, отмечая дубликаты дополнительными буквами. Единицы измерения в таблице: см, моль, К, калории. У реакций распада есть два выражения для коэффициентов скорости: предельный коэффициент высокого давления k_{high} и низкого давления k_{low} . Для этих реакций коэффициенты α , T^{***} , T^* , T^{**} взяты из Троу [20]. Выражение для $[M]$ обозначает эффективную молярную плотность третьего тела, участвующего в выражении скорости реакции; это линейная комбинация молярных плотностей компонент с определенными весовыми коэффициентами, по умолчанию эти коэффициенты являются единицами. Если вместо этих коэффициентов есть явные нули, это означает, что реакция с этими компонентами в качестве третьих тел идет другим путем, и выражение для ее скорости отличается от общей формы. Другие обозначения в таблице 1: T – температура, R_G – универсальная газовая постоянная. Все реакции обратимы, и коэффициент скорости обратной реакции рассчитывается с использованием прямого коэффициента скорости, деленной на константу равновесия, которая зависит только от термодинамических свойств компонент, участвующих в реакции.

Динамика системы описывается системой обыкновенных дифференциальных и алгебраических уравнений, как линейных, так и нелинейных, следующим образом:

$$\frac{\partial X_k}{\partial t} = \sum_{r=1}^{N_R} \nu_{rk} \omega_r (T, X_1, \dots, X_{N_C}), \quad k \notin S, \quad (1)$$

$$X_j = X_{j0} + \sum_{k \notin S} \lambda_{jk} (X_k - X_{k0}), \quad j \in S, \quad (2)$$

$$E (T, X_1, \dots, X_{N_C}) = R_G T \sum_{k=1}^{N_C} (\hat{H}_k (T) - 1) X_k = E_0. \quad (3)$$

Здесь X_k – молярные плотности компонент (молярные концентрации на единицу объема; исходное состояние обозначается X_{k0}), T – температура, ν_{rk} – алгебраические стехиометрические коэффициенты, N_C – количество компонент, N_R – число реакций, ω_r – интенсивность реакции (молярные концентрации на единицу объема), λ_{jk} – константы, зависящие от стехиометрических коэффициентов, отвечающих за законы сохранения элементов, E – внутренняя энергия смеси на единицу объема (E_0 – начальное значение), $\hat{H}_k(T)$ – безразмерные энталпии частиц в зависимости от температуры, полученные из данных термодинамической таблицы, S – набор показателей представителей элементов среди компонент, который выбирается следующим образом: $S = \{H_2, O_2, N_2, Ar\}$. Все компоненты, кроме этого набора, здесь и ниже называются независимыми, а компоненты этого набора называются зависимыми.

Таблица 1

Химические реакции и выражения скоростей для механизма GriMech 3.0 (1999)

No.	Реакция	Коэффициент прямой реакции
1.	$O + O + M = O_2 + M$	$1.2 \cdot 10^{17} \cdot T^{-1}$
	$[M] = 2.4[H_2] + 15.4[H_2O] + 0.83[Ar] + 1.0[\text{others}]$	
2.	$O + H + M = OH + M$	$5.0 \cdot 10^{17} \cdot T^{-1}$
	$[M] = 2.0[H_2] + 6.0[H_2O] + 0.7[Ar] + 1.0[\text{others}]$	
3.	$O + H_2 = H + OH$	$3.87 \cdot 10^4 \cdot T^{2.70} \cdot \exp(-6260/R_G T)$
4.	$O + HO_2 = OH + O_2$	$2.0 \cdot 10^{13}$
5.	$O + H_2O_2 = OH + HO_2$	$9.63 \cdot 10^6 \cdot T^{2.0} \cdot \exp(-4000/R_G T)$
6a.	$H + O_2 + M = HO_2 + M$	$2.8 \cdot 10^{18} \cdot T^{-0.86}$
	$[M] = 0.0[O_2] + 0.0[H_2O] + 0.0[N_2] + 0.0[Ar] + 1.0[\text{others}]$	
6b.	$H + O_2 + O_2 = HO_2 + O_2$	$2.08 \cdot 10^{19} \cdot T^{-1.24}$
6c.	$H + O_2 + H_2O = HO_2 + H_2O$	$1.126 \cdot 10^{19} \cdot T^{-0.76}$
6d.	$H + O_2 + N_2 = HO_2 + N_2$	$2.60 \cdot 10^{19} \cdot T^{-1.24}$
6e.	$H + O_2 + Ar = HO_2 + Ar$	$7.0 \cdot 10^{17} \cdot T^{-0.8}$
7.	$H + O_2 = O + OH$	$2.65 \cdot 10^{16} \cdot T^{-0.67} \cdot \exp(-17041/R_G T)$
8a.	$H + H + M = H_2 + M$	$10^{18} \cdot T^{-1.0}$
	$[M] = 0.0[H_2] + 0.0[H_2O] + 0.63[Ar] + 1.0[\text{others}]$	
8b.	$H + H + H_2 = H_2 + H_2$	$9.0 \cdot 10^{16} \cdot T^{-0.6}$
8c.	$H + H + H_2O = H_2 + H_2O$	$6.0 \cdot 10^{19} \cdot T^{-1.25}$
9.	$H + OH + M = H_2O + M$	$2.2 \cdot 10^{22} \cdot T^{-2.0}$
	$[M] = 0.73[H_2] + 3.65[H_2O] + 0.38[Ar] + 1.0[\text{others}]$	
10.	$H + HO_2 = H_2O + O$	$3.97 \cdot 10^{12} \cdot \exp(-671/R_G T)$
11.	$H + HO_2 = H_2 + O_2$	$4.48 \cdot 10^{13} \cdot \exp(-1068/R_G T)$
12.	$H + HO_2 = OH + OH$	$8.40 \cdot 10^{13} \cdot \exp(-635/R_G T)$
13.	$H + H_2O_2 = HO_2 + H_2$	$1.21 \cdot 10^7 \cdot T^2 \cdot \exp(-5200/R_G T)$
14.	$H + H_2O_2 = H_2O + OH$	$10^{13} \cdot \exp(-3600/R_G T)$
15.	$OH + H_2 = H + H_2O$	$1.16 \cdot 10^8 \cdot T^{1.51} \cdot \exp(-3430/R_G T)$
16.	$OH + OH + M = H_2O_2 + M$	$k_{high} = 7.4 \cdot 10^{13} \cdot T^{-0.37}$
		$k_{low} = 2.3 \cdot 10^{18} \cdot T^{-0.9} \cdot \exp(+1700/R_G T)$
		$\alpha = 0.7346, T^{***} = 94.0, T^* = 1756, T^{**} = 5182$
		$[M] = 2.0[H_2] + 6.0[H_2O] + 0.7[Ar] + 1.0[\text{others}]$
17.	$OH + OH = H_2O + O$	$3.57 \cdot 10^4 \cdot T^{2.40} \cdot \exp(+2110/R_G T)$
18.	$OH + HO_2 = H_2O + O_2$	$1.45 \cdot 10^{13} \cdot \exp(+500/R_G T)$
19a.	$OH + H_2O_2 = HO_2 + H_2O$	$2.00 \cdot 10^{12} \cdot \exp(-427/R_G T)$
19b.	$OH + H_2O_2 = HO_2 + H_2O$	$1.7 \cdot 10^{18} \cdot \exp(-29410/R_G T)$
20a.	$HO_2 + HO_2 = O_2 + H_2O_2$	$1.3 \cdot 10^{11} \cdot \exp(+1630/R_G T)$
20b.	$HO_2 + HO_2 = O_2 + H_2O_2$	$4.2 \cdot 10^{14} \cdot \exp(-12000/R_G T)$

Система (1) соответствует химической кинетической динамике для независимых частиц. Система (2) соответствует закону сохранения элементов в химических реакциях, она связывает молярные плотности зависимых частиц с независимыми посредством линейных выражений, так что массы каждого элемента не меняются. Система (3) – это условие сохранения внутренней энергии смеси. Модель рассчитана на условия сохранения внутренней энергии и плотности смеси; первое условие (3) явно, а второе условие является следствием сохранения элемента (2), и оно выполняется неявно.

Начальные условия для динамической системы (1)–(3) задаются молярной плотностью частиц и температурой; по ним вычисляется начальная внутренняя энергия:

$$X_k = X_{k0}, T = T_0, E_0 = R_G T_0 \sum_{k=1}^{N_C} (\hat{H}_k(T_0) - 1) X_{k0,t} = 0. \quad (4)$$

Тест самовоспламенения

Задача, сформулированная уравнениями (1)–(4), имеет единственное решение, полученное численно с использованием метода Новикова для решения жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений [21]. Его решение моделирует самовоспламенение горючей смеси водорода с воздухом, предварительно нагретого, чтобы обеспечить быстрый процесс воспламенения в адиабатических и сохраняющих объем условиях. Исходное состояние: $T_0 = 1000$ К, $p_0 = 1$ бар, молярные концентрации $[H_2] : [O_2] : [N_2] = 2 : 1 : 4$. Для получения исходных молярных плотностей из этих значений использовалось следующее выражение:

$$X_{k0} = \frac{p_0 C_{k0}}{R_G T_0 \sum_{j=1}^{N_C} C_{j0}}, \quad (5)$$

где C_{k0} являются ненормированными молярными концентрациями, то есть числами в выражении с соотношением концентраций. На рисунке 1 показаны результаты теста для этих начальных условий: на левом графике 1а – изменение температуры во времени для различных кинетических механизмов, среди которых имеется и GriMech, а правый график 1б представляет развитие молярных долей для компонент в случае кинетического механизма GriMech, данные кинетики которого приведены в таблице 1.

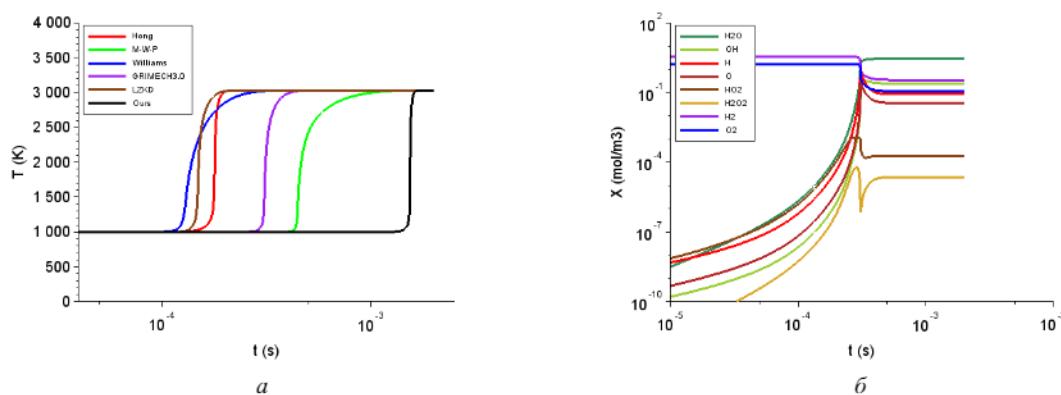


Рис. 1. а) тест самовоспламенения в водородно-воздушной смеси, температура в зависимости от времени, различные кинетические механизмы; б) развитие концентраций молярных долей во времени для кинетики GriMech 3.0 (1999)

Шкала времени на рис. 1 логарифмическая, и рис. 1а показывает, что для различных кинетических механизмов время самовоспламенения (то есть задержка момента резкого роста температуры) изменяется на порядок. Кинетический механизм GriMech показан фиолетовым цветом на рисунке 1а, а время самовоспламенения у него среднее по сравнению с другими. Правая часть рисунка 1 показывает, что сначала концентрации свободных радикалов растут экспоненциально, достигают некоторого

критического значения и запускают быстрый процесс воспламенения при значительном изменении концентраций топлива и окислителя. После этого система приходит в состояние химического равновесия.

Такой характер динамики самовоспламенения демонстрирует цепной характер кинетического механизма, то есть процесс начинается с образования и накопления радикалов, а затем цепочки превращений резко обрываются, приводя к конечным продуктам. Первоначально основной реакцией, приводящей к образованию радикальных частиц, является $H_2 + O_2 = H + HO_2$ (обратный путь реакции 11 в таблице 1). Это видно по разнице между концентрациями радикалов OH и HO₂: несколько порядков на начальном этапе их накопления.

Нейронная сеть: описание данных

Для обучения сети требуется большой набор данных, поэтому численное решение системы (1)–(3) было обработано для большого набора исходных данных [22]. Численная реализация основана на методе Новикова [21] из класса методов Розенброка для жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений; существующая система алгебраических и дифференциальных уравнений была адаптирована для метода, который первоначально описывает только дифференциальную систему. Важной частью численной реализации является полуаналитический метод вычисления якобиана правой части системы уравнений. Установка начальных условий (p_0, T_0, X_{k0}) велась произвольно.

В таблице 2 приведен фрагмент результата численного решения системы дифференциальных уравнений (1)–(3). Он представляет начальное состояние химической системы в нулевой момент времени, а также динамику развития системы через равные промежутки времени. Отметим некоторые неблагоприятные особенности полученных данных. Процесс самовоспламенения быстрый, поэтому и за короткий срок температура и молярные плотности компонент переходят в состояние равновесия, тем самым сокращая объем данных для обучения. Сами концентрации компонент варьируются в разных диапазонах, иногда принимая довольно небольшие значения. Например, $T = 2000$ К, молярная плотность некоторого нестабильного радикала (H, OH и т. д.) может оказаться 10^{-23} моль/м³, и стабильные компоненты (H₂, O₂) могут быть по крайней мере 1.53 моль/м³. При этом азот и аргон в течение всего процесса совершенно не меняют своих значений.

Таблица 2
Образец ненормализованных данных

t, μ s	T, K	H ₂	O ₂	H ₂ O	OH	HO ₂	H ₂ O ₂	H	O	N ₂	Ar
0	1484.000	1.539	1.026	0.000	0.616	0.616	0.821	0.616	0.308	1.436	1.129
1	1565.928	1.548	1.052	0.066	0.607	0.617	0.767	0.580	0.303	1.436	1.129
2	1662.566	1.557	1.079	0.157	0.571	0.643	0.689	0.546	0.298	1.436	1.129
3	1777.822	1.565	1.107	0.279	0.507	0.695	0.582	0.512	0.293	1.436	1.129
4	1909.072	1.573	1.138	0.425	0.420	0.766	0.454	0.476	0.288	1.436	1.129
5	2043.755	1.581	1.173	0.574	0.333	0.831	0.325	0.441	0.282	1.436	1.129
6	2167.177	1.588	1.213	0.705	0.267	0.869	0.220	0.407	0.275	1.436	1.129
7	2272.697	1.593	1.255	0.807	0.226	0.873	0.145	0.376	0.268	1.436	1.129
8	2360.898	1.597	1.299	0.884	0.207	0.852	0.097	0.350	0.260	1.436	1.129
...

При таком разбросе данных ни одна нейронная сеть не может быть обучена должным образом и хорошо работать. Стандартный подход в такой ситуации — вычислить среднее значение и дисперсию по всей обучающей выборке и нормализовать к ним все данные. Однако в данном случае значения молярных плотностей положительны и имеют диапазоны значений, различающиеся на несколько порядков, поэтому мы предпочли использовать логарифмическое масштабирование. В результате мы применили различные типы нормализации температуры и молярной плотности:

$$\begin{cases} \tilde{T} = \frac{T}{100} \\ \tilde{X}_k = \begin{cases} X_k/\varepsilon, & X_k \leq \varepsilon \\ 1 + \ln(X_k/\varepsilon), & X_k > \varepsilon \end{cases} \end{cases} . \quad (6)$$

Таблица 3

Статистические свойства ненормализованных данных

	Minimal value	Maximal value	Average	Deviation
Temperature	1000	3673.9132	2594.9325	434.9893
H ₂	0.0537	5.3122	0.9234	0.6021
O ₂	0.0789	6.5225	1.8614	0.8277
H ₂ O	0	5.376	1.8453	0.7456
OH	0	3.0753	0.5862	0.2847
HO ₂	0	3.2864	0.0849	0.1958
H ₂ O ₂	0	2.9112	0.0551	0.1976
H	0	3.5606	0.6016	0.3827
O	0	3.2738	0.4819	0.289
N ₂	0.0744	4.7689	1.0154	0.5869
Ar	0.0681	4.4438	1.0076	0.5838

Таблица 4

Статистические свойства нормализованных данных

	Minimal value	Maximal value	Average	Deviation
Temperature	10	36.7391	25.9493	4.3499
H ₂	21.1009	25.6959	23.7406	0.658
O ₂	21.4867	25.9011	24.5378	0.4937
H ₂ O	0	25.7078	24.5289	0.7361
OH	0	25.1493	23.1813	1.2997
HO ₂	0	25.2157	18.7431	2.5412
H ₂ O ₂	0	25.0944	15.0357	3.7273
H	0	25.2958	23.2302	1.0573
O	0	25.2118	22.9787	1.1684
N ₂	21.427	25.588	23.8247	0.7329
Ar	21.3388	25.5174	23.8162	0.7331

В таблицах 3 и 4 показаны некоторые статистические свойства набора обучающих данных до и после процесса нормализации. Видно, что нам удалось значительно уравнять среднее значение и диапазоны данных с исходным состоянием. Отклонение по-прежнему различается для разных данных, и мы надеемся найти лучшее решение для этого в будущем. Константа $\varepsilon = 10^{-10}$ была выбрана для сближения средних значений нормированной температуры и концентраций.

На рис. 2 показан пример изменения температуры и молярной плотности во время развития химической системы. Зависимости часто немонотонны, изменения происходят за короткий промежуток времени, а затем либо достигают асимптоты, либо изменяются очень медленно. То есть структура прогнозируемых данных сложна и варьируется даже после нормализации. На выходе нейронной сети мы должны получить состояние химической системы в следующий момент времени. Тем самым выходом сети будет 11-мерный вектор $Y = (T, X_1, \dots, X_{10})$. Однако этот размер слишком мал для ввода нейронной сети, то есть состояния системы в предыдущий момент. Для получения наилучшего результата необходимо подать на вход сети максимально информативные данные. Поэтому было решено формировать входной вектор из 9 предыдущих состояний системы, учитывая историю развития процесса. Таким образом, размерность входного вектора была расширена до значения 99: $X = (T^1, X_1^1, \dots, X_{10}^1, \dots, T^9, X_1^9, \dots, X_{10}^9)$.

Наконец, все генерированные данные были разделены на три набора данных: обучение, проверка и тестирование. Набор обучающих данных — это данные, на которых обучается нейронная сеть; набор данных проверки используется для управления процессом обучения; набор тестовых данных —

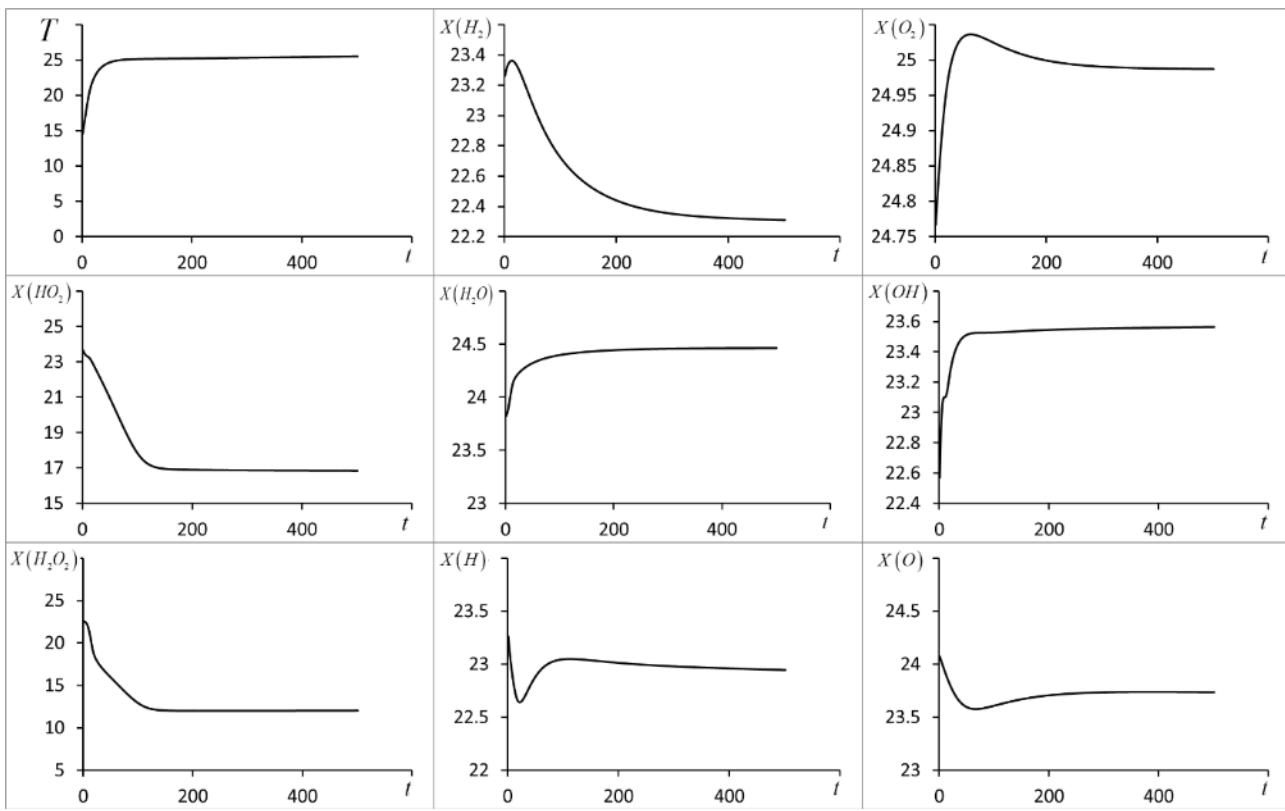


Рис. 2. Пример развития системы во времени после нормализации данных

это окончательная оценка обученной сети. В таблице 5 обобщена информация о размерах и измерениях наборов данных.

Таблица 5
Структура сгенерированных данных

Training sample		Validation sample		Test sample	
X	(2,000,000; 99)	X	(200,000; 99)	X	(400,000; 99)
Y	(2,000,000; 11)	Y	(200,000; 11)	Y	(400,000; 11)

Описание нейронной сети и результаты ее работы

Искусственная нейронная сеть — это система, состоящая из множества простых элементов (нейронов), связанных между собой, в основном, однотипных. Нейроны часто делятся на группы и слои, связи между которыми и внутри которых задаются весовыми коэффициентами. На рисунке 3а показан пример полностью подключенной сети прямого распространения. Он состоит из входного слоя X , выходного слоя Y и два скрытых слоя h_i , отношения между слоями определяются весами W_i .

Нейронные сети не программируются в обычном понимании этого слова, они обучаются. Обучение — одно из главных преимуществ нейронных сетей перед традиционными алгоритмами. Технически обучение заключается в нахождении коэффициентов связей (или весов) между нейронами. В процессе обучения нейронная сеть определяет сложные зависимости между входными и выходными данными, а также выполняет обобщение. Это означает, что в случае успешного обучения сеть способна вернуть правильный результат на основе данных, которые отсутствовали в обучающей выборке, а также неполных, зашумленных или частично искаженных данных.

На рисунке 3а показано, какие вычисления производятся при прохождении данных по сети. Входной сигнал от всех нейронов предыдущего слоя X умножается на матрицу весовых коэффициентов, которые определяют связи нейрона следующего слоя с предыдущим слоем, затем смещение добавлением b . Результат проходит через некоторую нелинейную функцию $f(*)$, и сигнал получается

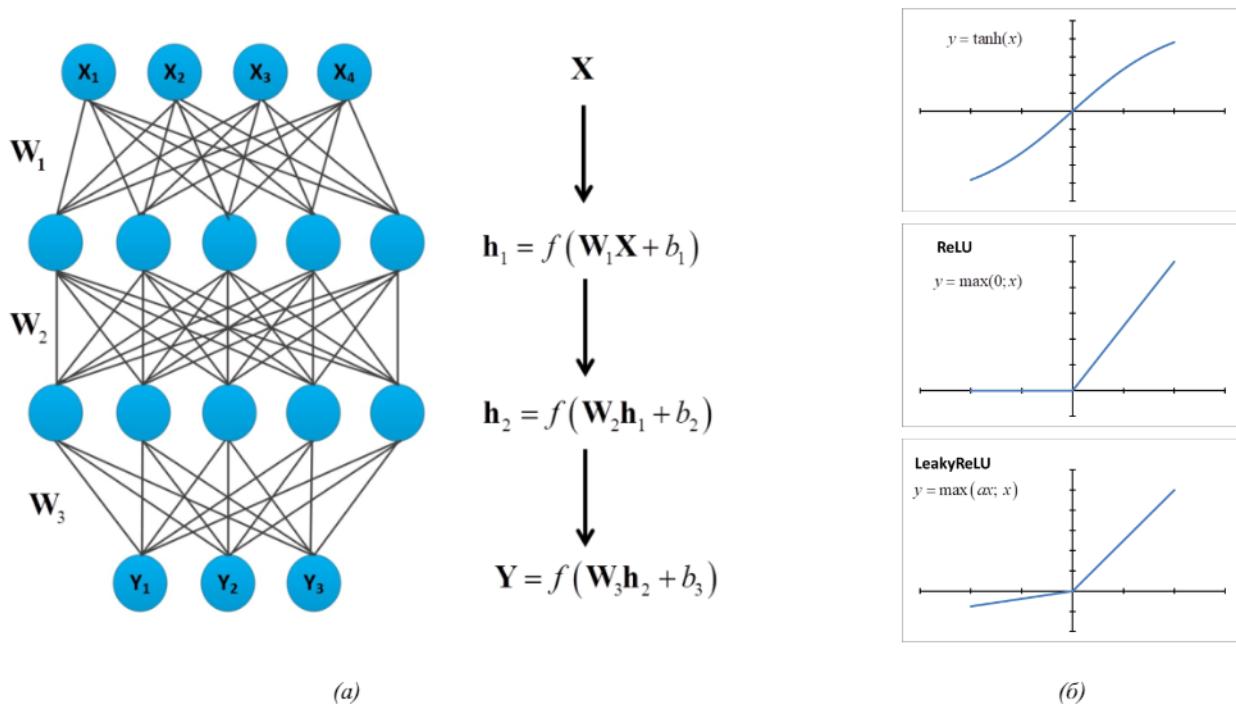


Рис. 3. (а) пример полносвязной нейронной сети и вычислений; (б) примеры функций активации: гиперболический тангенс; выпрямленные линейные блоки (ReLU); параметрический ReLU (LeakyReLU)

на нейроне следующего слоя. Теперь эти состояния нейронов первого слоя, а h_1 аналогично переносятся на другой слой h_2 , становясь вкладом. От слоя к слою входной сигнал передается от входа сети к ее выходу Y . Выходной сигнал сети сравнивается с желаемым эталонным значением \tilde{Y} , вычисляется ошибка, затем параметры веса и смещения корректируются соответствующим образом, чтобы уменьшить ошибку сети.

Важной частью любой сети является функция активации $f(*)$, которая привносит нелинейность при передаче данных от уровня к уровню. Без нее нейронные сети просто выполняли бы линейное преобразование и было бы невозможно построить эффективную многослойную систему. На рисунке 3б показаны некоторые из наиболее часто используемых функций активации.

Архитектура нейронной сети 1

Архитектура нейронной сети 1 показана на рисунке 4. Входом сети является вектор размерности 99, то есть состояние химической системы в 9 последовательных временных точках. Затем ввод передается через 9 одинаковых блоков, состоящих из нескольких слоев. За блочной системой следует полностью связанный слой из 130 нейронов с линейной функцией активации, а затем еще один слой того же типа с 9 нейронами. Фактически выходной сигнал этого слоя уже является выходным состоянием системы за исключением двух нейтральных компонент, то есть азота и аргона. Поскольку азот и аргон не меняют своего состояния в процессе, значения концентрации этих веществ могут быть сразу же переданы на выход сети, что делает обходной слой из 2 нейронов. Слой конкатенации объединяет сетьевой выход и нейтральные компоненты, и мы получаем состояние системы в следующий момент времени. Теперь рассмотрим структуру блоков. Блок состоит из трех полностью связанных слоев, в первом слое 256 нейронов; второй слой состоит из 128 нейронов, а третий состоит из 99 нейронов с точки зрения размерности входного вектора. Одна из параметрических версий ReLU функция LeakyReLU с параметром $a = 0.15$, он используется как функция активации. Выход третьего полно связного слоя покомпонентно добавляется ко входу всего блока, остаточной связи [23]. Результат передается дальше по основной сети.

Таким образом была построена многослойная нейронная сеть прямой передачи с остаточными связями. Всего в ней 29 полностью связанных слоев и почти 600 000 параметров для обучения.

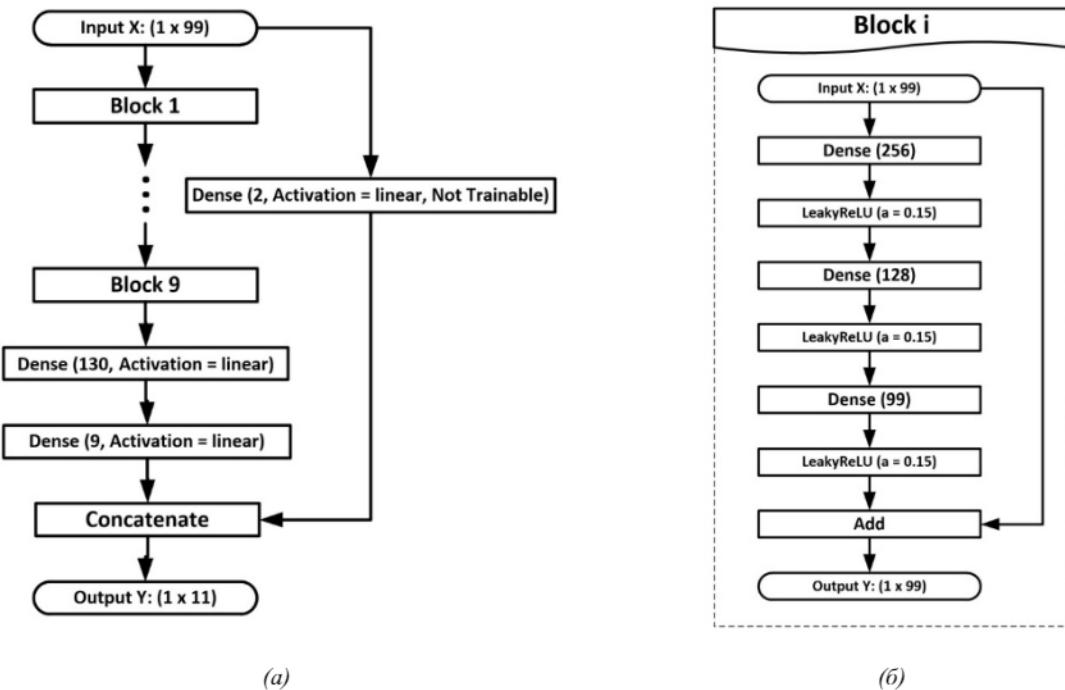


Рис. 4. Архитектура сети 1: (а) основная модель; (б) одноблочная структура

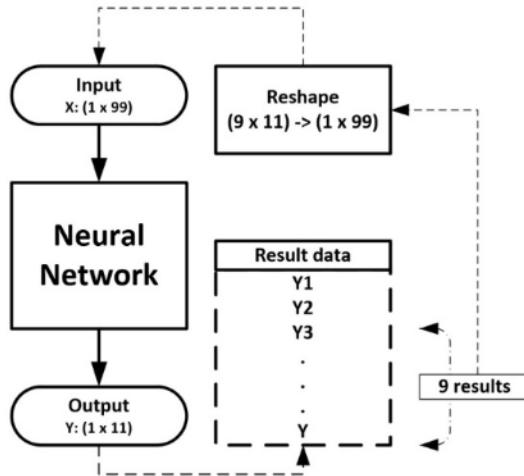


Рис. 5. Сетевой алгоритм

В результате обработки эта нейронная сеть предсказывает состояние химической системы из предыдущих девяти. Следовательно, если нам необходимо получить динамику развития процесса во времени, необходимо циклически обновлять сетевой ввод. Данный алгоритм представлен на рисунке 5.

Первые состояния получаются путем решения системы дифференциальных уравнений (1)–(3) каким-либо вычислительным методом. Затем формируется входной вектор и подается в нейронную сеть. Полученный результат добавляется в итоговый отчет, откуда выбираются последние состояния системы и снова поступают на сетевой вход. Этот цикл повторяется столько раз, сколько потребуется.

Главный недостаток этого алгоритма — накопление ошибок. На каждом этапе сеть выдает результат с некоторой неточностью. Независимо от того, насколько мала ошибка, она передается на следующий шаг, причем искаженный входной сигнал применяется к сетевому входу. Это означает, что выходной сигнал сети будет все больше и больше отклоняться от идеального результата с каждым циклом.

лом. Предпоследний полностью связанный слой (130 нейронов) частично борется с этой проблемой, но тем не менее полностью ее не решает.

Результаты для нейронной сети 1

Сеть была обучена на карте RTX2070 8Gb. Результат работы сети по ранее описанной схеме (рис. 5) показан на рис. 6. Маркеры представляют результаты нейронной сети, а сплошная линия — эталонные значения, которые должна была получить сеть. Напомним, что обучающие данные состояли из 10 000 процессов с 200 временными шагами наблюдения. Рисунок 7 показывает, что обученная сеть хорошо предсказывает развитие процесса горения даже на 1000 шагов. В этом примере ошибки прогноза были следующими:

$$\begin{aligned} MAE &= 0.017, \\ MSE &= 0.0014. \end{aligned}$$

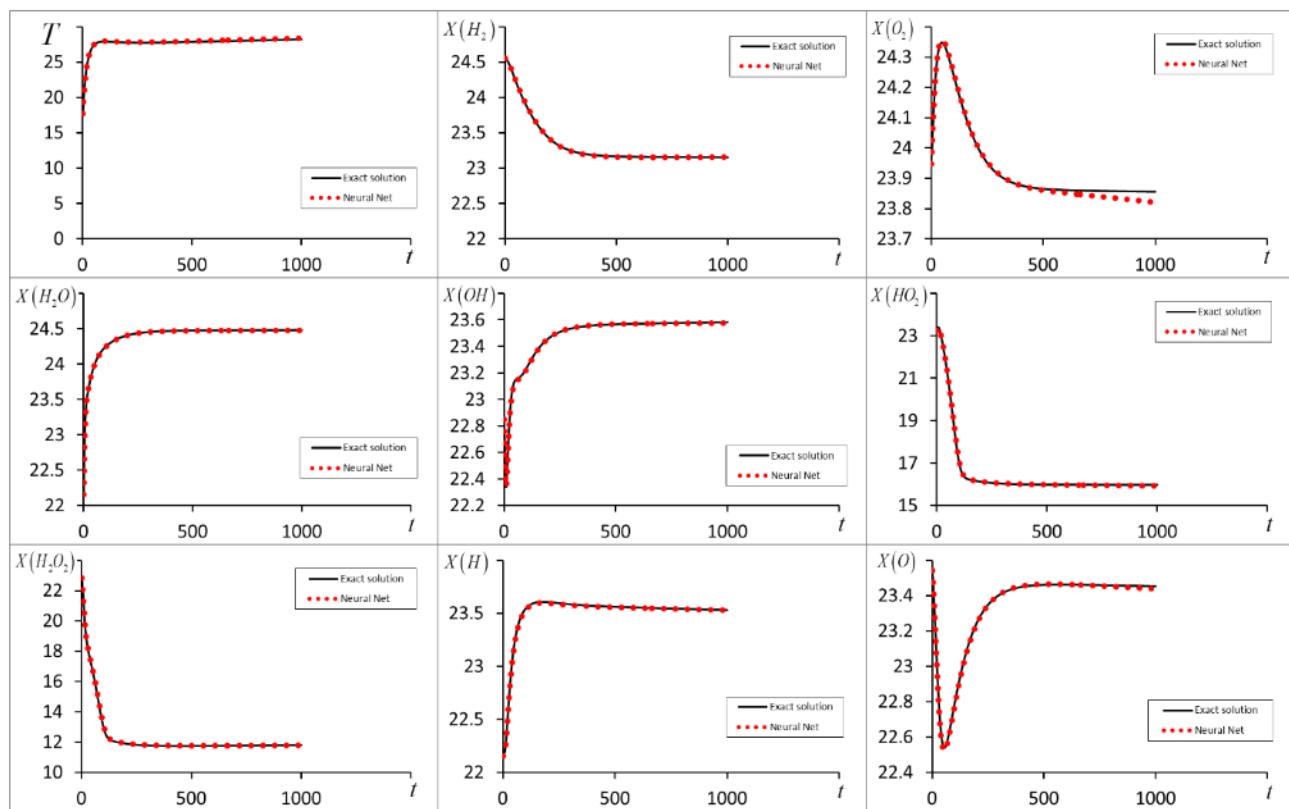


Рис. 6. Результаты обработки нейронной сетью 1 за 1000 последовательных шагов

Конечно, нужно понимать, что нейронная сеть еще не всегда работает так эффективно. График для O_2 показывает сильное отклонение прогноза после 600-го шага. Для уверенной и стабильной работы сети желательно увеличить обучающую выборку в 10–100 раз.

Если повторить численный эксперимент с обученной сетью 100 раз и усредненными ошибками, мы получим: $\langle MAE \rangle = 0.015$, $\langle MSE \rangle = 0.0016$.

На рис. 7 показаны ошибки для различных вычислительных экспериментов. За исключением случайных выбросов, сеть дает довольно хорошие результаты. Выбросы связаны с плохой обучающей выборкой, которая, по-видимому, не включает в себя ни одного типичного случая.

Структура нейронной сети довольно проста, хотя и имеет большие размеры. Все вычисления ограничиваются умножением матрицы на вектор и вычислением функции активации. Таким образом, вычислительная сложность алгоритма может быть легко оценена. Чтобы пройти по сети от входного уровня к выходному, потребуется $\approx 1.3 \cdot 10^6$ операций сложения и умножения. И это последняя вычислительная сложность. Добавление других веществ в химическую систему увеличит количество компонент и химических реакций. Количество дифференциальных уравнений увеличится, а значит, сложность проблемы возрастет. Время работы стандартных вычислительных методов будет увеличиваться экспоненциально. В этом случае в нейросети изменится только размерность входного и выход-

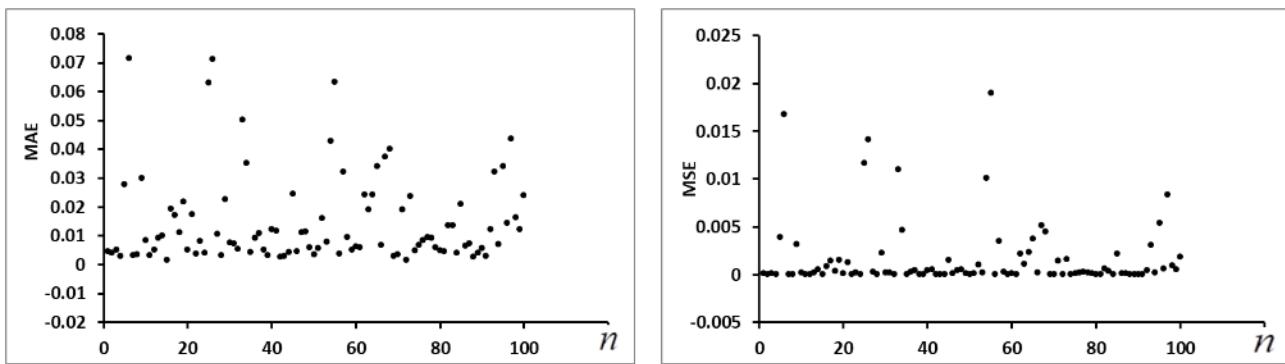


Рис. 7. Колебания ошибки прогноза в различных экспериментах

ного слоев, а общее количество вычислений практически не изменится. Да, потребуется обучающая выборка большего размера, и сеть будет обучаться дольше, но в конечном итоге обученная модель решит проблему так же быстро с большим количеством реагентов.

Архитектура нейронной сети 2

Архитектура нейронной сети представлена на рисунке 2. Входом сети является вектор размерности 11, то есть состояние химической системы (температура и молярные плотности веществ). Далее вход передается через несколько одинаковых блоков, состоящих из нескольких слоев. Затем результат покомпонентно складывается с входом и передается на выход сети.

Рассмотрим структуру блоков. Блок состоит из трех полносвязных слоев, в первом слое 256 нейронов, второй состоит из 128 нейронов, а третий по размерности входного вектора — из 11 нейронов. В качестве функции активации используется одна из параметрических версий ReLU — LeakyReLU, с параметром $a = 0.15$ (LeakyReLU). Выход третьего полносвязного слоя покомпонентно складывается со входом всего блока. Результат передается дальше по основной сети.

Таким образом, получилась нейронная многослойная сеть прямого распространения с обходными связями. Число блоков можно менять, чтобы добиться большей точности и надежности либо скорости работы. Вычислительная сложность блока составляет порядка 74 000 операций.

В результате своей работы данная нейронная сеть предсказывает состояние химической системы по предыдущему. Поэтому, если требуется получить динамику развития процесса во времени, необходимо циклически обновлять вход сети, подавая полученный выход на вход. Основным недостатком такого алгоритма является нарастание ошибки. Сеть на каждом шагу выдает результат с некоторым отклонением, неточный результат. Какой бы маленькой ни была ошибка, она приводит к тому, что на следующем шаге на вход сети подается искаженный вход. А значит, выход сети с каждым циклом будет все больше отклоняться от идеального результата. Увеличение числа блоков в сети и остаточная связь позволяют частично бороться с этой проблемой и получать качественный результат приблизительно на 1000 шагов.

Результаты для нейронной сети 2

Результат работы сети с девятью блоками представлен на рисунке 9. Маркерами изображены результаты нейронной сети, а сплошная линия — эталонные значения, которые сеть должна была получить. На рисунке видно, что обученная сеть неплохо может предсказывать развитие процесса горения на 1000 шагов, без заметного нарастания ошибки при циклическом процессе работы. В данном примере ошибки прогноза оказались следующими:

$$\begin{aligned} MAE &= 0.0014, \\ MSE &= 4.415 \cdot 10^{-6}. \end{aligned}$$

Это всего один пример. Если запускать сеть 2 для различных стартовых конфигураций химической системы, то результат будет разниться. На рисунке 10 показано, как менялась среднеквадратичная ошибка при 200 случайных экспериментах. Как видно из рисунка, большая часть экспериментов дает хороший результат, ошибка близка к нулю. Но случаются выбросы, которые говорят, что происходят еще нехарактерные процессы, которым сеть не обучилась. Скорее всего, это связано с тем, что

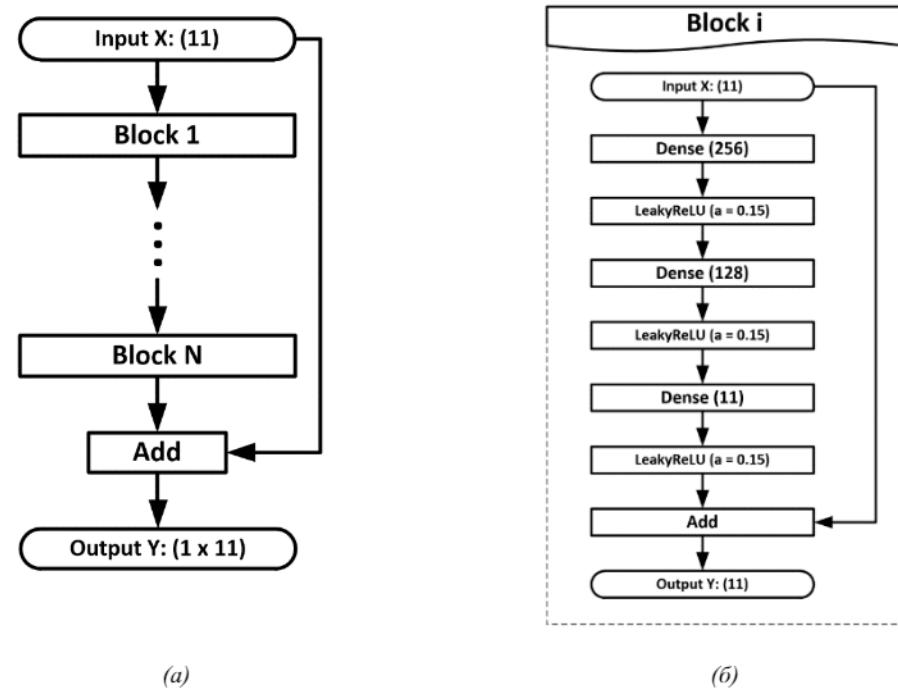


Рис. 8. Архитектура сети 2: (а) основная модель; (б) одноблоччная структура

обучающая выборка недостаточно репрезентативна, то есть в ней отсутствуют некоторые ключевые процессы. Так как обучающие примеры генерировались случайным образом, то единственный способ уменьшить такие отклонения — это увеличить число обучающих примеров.

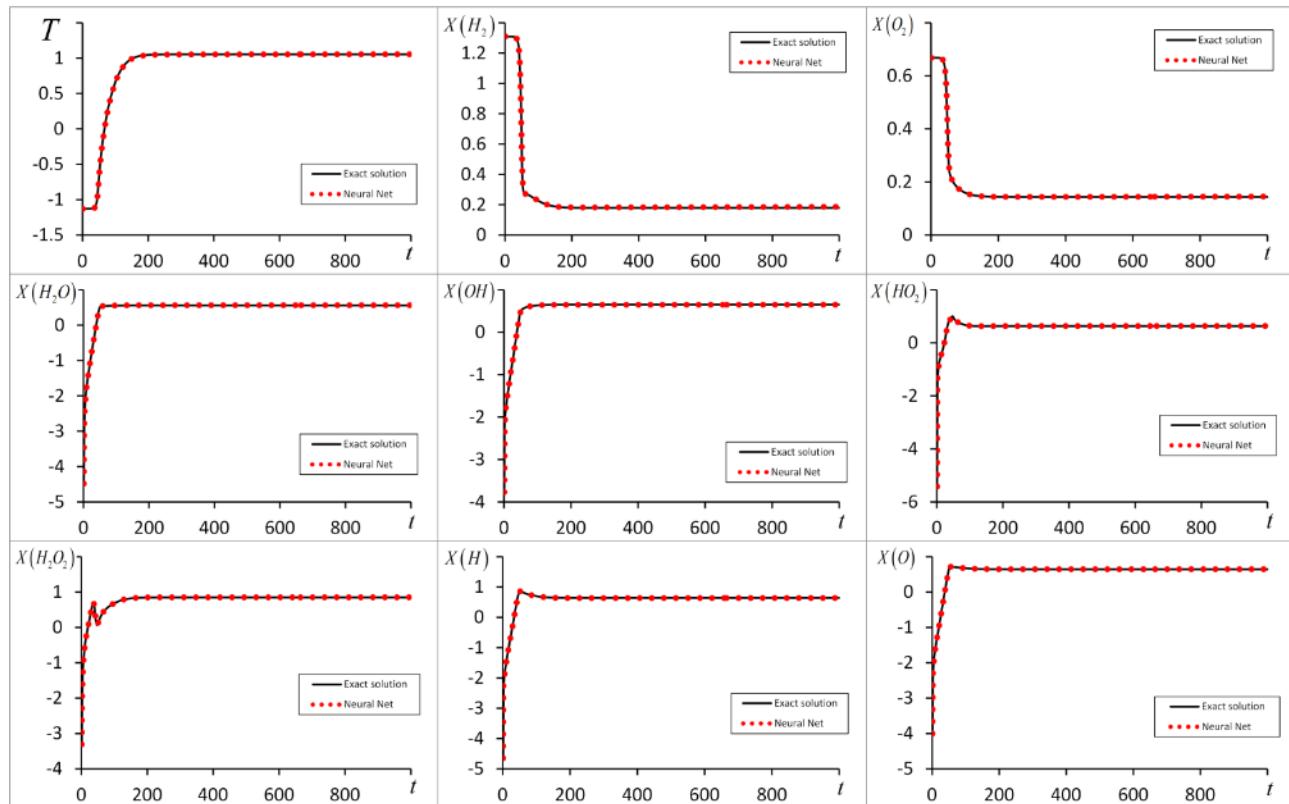


Рис. 9. Результат работы нейронной сети 2 (9 блоков) в течение 1000 шагов

В таблице 6 показано, как меняется ошибка работы сети от числа блоков. Усреднение прово-

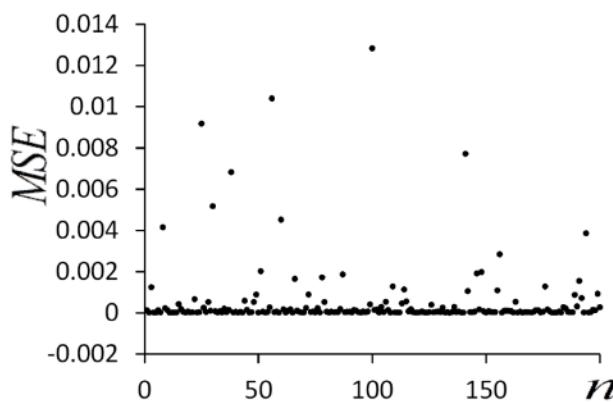


Рис. 10. Работа нейронной сети 2 с 9 блоками. 200 случайных экспериментов

дились по 100 экспериментам. Нейронные сети обучались на одном и том же наборе. Как видно из таблицы, увеличение числа блоков заметно улучшает качество ее работы: уменьшается ошибка и диапазон отклонений. Однако надо понимать, что бездумное увеличение глубины сети имеет недостаток: увеличивается вычислительная сложность алгоритма. Как упоминалось выше, каждый блок требует около 70 000 операций сложения и умножения, а значит, девятиблочная сеть потребует порядка вычислительных операций только для вычисления одного состояния сети.

Таблица 6
Структура сгенерированных данных

Число блоков	MSE
3	0.0064 ± 0.00280
4	0.0017 ± 0.0088
5	0.0013 ± 0.0040
6	0.0012 ± 0.0034
7	0.0008 ± 0.0024
8	0.0006 ± 0.0018
9	0.0005 ± 0.0016
11	0.0004 ± 0.0011

Выводы

В статье рассматривается возможность решения задачи химической кинетики с помощью искусственных нейронных сетей. Перечисляя и настраивая различные архитектуры многослойных нейронных сетей, можно получить относительно простую модель, способную решить проблему. Полученная нейронная сеть может предсказывать развитие химической системы, состоящей из большого числа компонент, на много шагов вперед, работая в рекурсивном режиме. Более того, вычислительная сложность модели практически не зависит от количества веществ, участвующих в реакции. Моделирование нейронной сети может частично или полностью заменить дорогостоящие вычислительные методы численного моделирования при сохранении количественно точных результатов.

Возможно использование моделей на основе нейронных сетей сверточного типа. Такой подход должен улучшить качество решения и увеличить скорость работы модели, а также позволяет получить гибридные методы на основе сеточных методов, явных или неявных численных схем и нейросетевого подхода для повышения точности решений.

ЛИТЕРАТУРА

- Pantano C. Direct Simulation of Non-Premixed Flame Extinction in a Methane–Air Jet with Reduced Chemistry. *J. Fluid Mech.* 2004;514:231–270. DOI: 10.1017/S0022112004000266.

2. Smirnov N. N., Betelin V. B., Nikitin V. F., Stamov L. I., Altoukhov D. I. Accumulation of Errors in Numerical Simulations of Chemically Reacting Gas Dynamics. *Acta Astronautica*. 2015;117:338–355. DOI: 10.1016/j.actaastro.2015.08.013.
3. Smirnov N. N., Betelin V. B., Nikitin V. F., Phylippov Y. G., Koo J. Detonation Engine Fed by Acetylene–Oxygen Mixture. *Acta Astronautica*. 2014;104:134–146. DOI: 10.1016/j.actaastro.2014.07.019.
4. Smirnov N. N., Penyazkov O. G., Sevrouk K. L., Nikitin V. F., Stamov L. I., Tyurenkova V. V. Onset of Detonation in Hydrogen-Air Mixtures due to Shock Wave Reflection inside a Combustion Chamber. *Acta Astronautica*. 2018;149:77–92. DOI: 10.1016/j.actaastro.2018.05.024.
5. Lam S., Goussis D. Understanding Complex Chemical Kinetics with Computational Singular Perturbation. *Symp. (Int.) Combust.* 1989;22(1):931–941. DOI: 10.1016/S0082-0784(89)80102-X.
6. Maas U., Pope S. B. Simplifying Chemical Kinetics: Intrinsic Low-Dimensional Manifolds in Composition Space. *Combust. Flame*. 1992;88(3–4):239–264. DOI: 10.1016/0010-2180(92)90034-M.
7. Lovas T. Automatic Generation of Skeletal Mechanisms for Ignition Combustion Based on Level of Importance Analysis. *Combust. Flame*. 2009;156(7):1348–1358. DOI: 10.1016/j.combustflame.2009.03.009.
8. Chen J. Y. Development of Reduced Mechanisms for Numerical Modeling of Turbulent Combustion. *Workshop on “Numerical Aspects of Reduction in Chemical Kinetics”*, CERMICS-ENPC Cite Descartes – Champs sur Marne, France. 1997.
9. Sung C., Law C., Chen J.-Y. An Augmented Reduced Mechanism for Methane Oxidation with Comprehensive Global Parametric Validation. *Symp. (Int.) Combust.* 1998;27(1):295–304. DOI: 10.1016/S0082-0784(98)80416-5.
10. Jones W. P., Rigopoulos S. Reduced Chemistry for Hydrogen and Methanol Premixed Flames via RCCE. *Combust. Theor. Model.* 2007;11:755–780. DOI: 10.1080/13647830701206866.
11. Koniavitis P., Rigopoulos S., Jones W. P. A Methodology for Derivation of RCCE-reduced Mechanisms via CSP. *Combust. Flame*. 2016;183:126–143. DOI: 10.1016/j.combustflame.2017.05.010.
12. Lu T., Law C. K. Toward Accommodating Realistic Fuel Chemistry in Large-Scale Computations. *Prog. Energy Combust. Sci.* 2009;35(2):192–215. DOI: 10.1016/j.pecs.2008.10.002.
13. Mikhachenko E. V., Nikitin V. F., Goryachev V. D. Simulation of the Operation of a Detonation Engine. *Lecture Notes in Mechanical Engineering*. 2021. (In press.)
14. Pope S. B. Computationally Efficient Implementation of Combustion Chemistry Using in situ Adaptive Tabulation. *Combust. Theory Modell.* 1997;1(1):41–63. DOI: 10.1080/713665229.
15. Tonse S. R., Moriarty N. W., Brown N. J., Frencklach M. PRISM: Piecewise Reusable Implementation of Solution Mapping. An Economical Strategy for Chemical Kinetics. *Israel J. Chem.* 1999;39(1):97–106.
16. Ihme M., Schmitt C., Pitsch H. Optimal Artificial Neural Networks and Tabulation Methods for Chemistry Representation in LES of a Bluff-Body Swirl-Stabilized Flame. *Proceedings of the Combustion Institute*. 2009;32:1527–1535. DOI: 10.1016/J.PROCI.2008.06.100.
17. Franke L. L., Chatzopoulos A. K., Rigopoulos S. Tabulation of Combustion Chemistry via Artificial Neural Networks (ANNs): Methodology and Application to LES-PDF Simulation of Sydney Flame L. *Combustion and Flame*. 2017;185:245–260. DOI: 10.1016/j.combustflame.2017.07.014.
18. Chatzopoulos A. K., Rigopoulos S. A Chemistry Tabulation Approach via Rate-Controlled Constrained Equilibrium (RCCE) and Artificial Neural Networks (ANNs), with Application to Turbulent Non-Premixed CH₄/H₂/N₂ Flames. *Proceedings of the Combustion Institute*. 2013;34:1465–1473. DOI: 10.1016/j.proci.2012.06.057.
19. GRI-Mech Version 3.0 7/30/99 CHEMKIN-II format.
20. CHEMKIN. A Software Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical and Plasma Kinetics. *CHE-036-1. Chemkin Collection Release 3.6*. Reaction Design, September 2000.
21. Новиков Е. А. Исследование (m,2)-методов решения жестких систем. *Вычислительные технологии*. 2007;12(5):103–115.
22. Betelin V. B., Nikitin V. F., Mikhachenko E. V. 3D Numerical Modeling of a Cylindrical RDE with an Inner Body Extending out of the Nozzle. *Acta Astronautica*. 2020;176:628–646. DOI: 10.1016/j.actaastro.2020.03.051.
23. He K., Zhang X., Ren S., Sun J. Deep Residual Learning for Image Recognition. *IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*. 2016. DOI: 10.1109/CVPR.2016.90.