



Математическое моделирование в ГАМ
6 сентября 2022, Санкт-Петербург, Россия

Расчет статистических сумм и теплоемкостей в высокотемпературных течениях газов с учетом электронных степеней свободы

Истомин В.А.

*канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник,
Санкт-Петербургский государственный университет*



- ▶ Введение
- ▶ Цели
- ▶ Макропараметры и кинетические уравнения
- ▶ Коэффициенты переноса
- ▶ Квантовые числа
- ▶ Статистическая сумма и внутренняя энергия
- ▶ Внутренняя энергия и теплоёмкость
- ▶ Столкновительный диаметр нейтральных и ионизованных атомов и молекул
- ▶ Приложение разработанной модели для описания течения за ударной волной
- ▶ Результаты
- ▶ Нейронные сети
- ▶ Использование ML-методов в ПО



- ▶ Исследование влияния электронного возбуждения на коэффициенты переноса локально-равновесной плазмы в поуровневом приближении с учетом электронного возбуждения [Capitelli et al. (2000–2013)].
- ▶ Расчет коэффициентов переноса в поуровневом приближении с разделением на низко- и высоколежащие электронные уровни [Johnston (2006), Magin et al. (2008), Capitelli et al. (2013)].
- ▶ В то время, как поуровневые модели широко применяются при моделировании колебательно-неравновесных течений [Nagnibeda, Kustova (2009), Capitelli et al. (2013)], их применение для электронно-возбужденных газов только начинается [Aliat et al. (2003, 2005), Capitelli et al. (2013), Guy et al. (2015)].
- ▶ Расчет коэффициентов переноса в поуровневом приближении в чистых атомарных и ионизованных атомарных газах с учетом электронного возбуждения [Istomin, Kustova (2016), Istomin, Kustova (Chemical Physics. 485-486, P. 125-139, 2017)].



- ▶ Создание программы с возможностью расчета для произвольных температуры и давления поступательной и внутренней: 1) Статистической суммы 2) Удельной энергии 3) Удельной теплоемкости при постоянном объеме
- ▶ Расчет указанных величин должен проводиться с учетом поступательных/электронных степеней свободы атомов и поступательных/электронных/колебательных/вращательных степеней свободы молекул (где вращательная энергия зависит от электронного и колебательного уровня, а колебательная от электронного уровня).
- ▶ Язык программирования - на ваш выбор. Если язык программирования объектно-ориентированный, то должны быть созданы классы: "частица", "атом" (наследуемый), "молекула" (наследуемый), с определенной/переопределенной логикой и функциональностью.



▶ Характерные времена процессов

$$\tau_{ch-tr} \sim \tau_{tr} \ll \tau_{ET} \sim \tau_{ioniz} \sim \theta$$

▶ Макроскопические уравнения

$$\frac{dn_{c_n}}{dt} + n_{c_n} \nabla \cdot \mathbf{v} + \nabla \cdot (n_{c_n} \mathbf{V}_{c_n}) = R_{c_n}^{ET} + R_{c_n}^{ioniz}, \quad c = 1, \dots, L,$$

$$c = X, X^+, e^-, \quad n = 1, \dots, L_c,$$

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} + \nabla \cdot \mathbf{P} = 0,$$

$$\rho \frac{dU}{dt} + \nabla \cdot \mathbf{q} + \mathbf{P} : \nabla \mathbf{v} = 0.$$



▶ Полная энергия

$$\rho U = \frac{3}{2}nkT + \sum_{c,k} \varepsilon_k n_{c_k} + \sum_{c,k} E_{i_c} n_{c_k}.$$

▶ Первое приближение

▶ Скорость диффузии:

$$\mathbf{V}_{c_n} = - \sum_{d,m} D_{c_n d_m} \mathbf{d}_{c_n} - D_{T c_n} \nabla \ln T,$$

▶ Поток тепла:

$$\mathbf{q} = -\lambda' \nabla T - p \sum_{c,n} D_{T c_n} \mathbf{d}_{c_n} + \sum_{c,n} \left(\frac{5}{2} kT + \varepsilon_{c_n} + E_{i_c} \right) n_{c_n} \mathbf{V}_{c_n}$$

▶ Тензор напряжений:

$$\mathbf{P} = p \mathbf{I} - 2\eta \mathbf{S}$$



n - главное квантовое число, являющееся наиболее важным квантовым числом для определения величины энергии атома. Оно может иметь значения $n = 1, 2, 3, \dots$

l - орбитальное квантовое число, определяющее величину момента импульса электрона при его движении "по орбите". Оно может иметь значения $l = 1, 2, 3, \dots, (n - 1)$.

m_l - магнитное квантовое число, определяющее величину проекции момента импульса на заданную ось и связанное с ориентацией орбиты электрона в пространстве в случае приложения внешнего магнитного поля. Оно имеет значения $-l, -(l - 1), \dots, 0, \dots, (l - 1), l$, т.е. $2l + 1$ значение для заданного l .

s - спиновое квантовое число электрона, определяющее величину момента спина, т.е. "собственного" момента импульса электрона. Оно имеет фиксированное значение, равное $\frac{1}{2}$, и поэтому его не нужно задавать для определения состояния электрона.

m_s - квантовое число, определяющее величину проекции момента спина на заданную ось и имеющее смысл при взаимодействии электрона с магнитным полем. Это число имеет два возможных значения: $+\frac{1}{2}$ и $-\frac{1}{2}$.



$$g_n = 2j + 1.$$

N		O	
$\varepsilon_n^{el,c}, [\text{cm}^{-1}]$	g_n	$\varepsilon_n^{el,c}, [\text{cm}^{-1}]$	g_n
0	4	0	5
19227.9	10	158.5	3
28839.2	6	226.5	1
83335	12	15867.7	5
86192	6	33792.4	1
88132.4	12	73767.81	5
93581	2	76794.69	3
94837	20	86625.35	3
95509	12	86627.37	5
96750	4	86631.04	7
96833	10	88630.84	5
97793	6	88630.3	3
99663	10	88631	1
103693	12	95476.43	5
104195	6	96225.5	3
104628	6	97420.24	9
104719	28	97420.37	7
104846	12	97420.5	5
104850	14	97420.5	3
105006	20	97420.5	1
105133	10	97488.14	7
106477	2	97488.14	5
106792	20	97488.14	3
107013	12	99092.64	3
107224	10	99093.31	5



Внутренняя энергия молекулы сорта c :

$$\varepsilon_{nij}^c = \varepsilon_{nij}^{el,c} + \varepsilon_{nij}^{vibr,c} + \varepsilon_{nij}^{rot,c}$$

Колебательная энергия молекулы (модель ангармонического осциллятора):

$$\frac{\varepsilon_i^{c,n}}{hc} = \omega_e^{c,n} \left(i + \frac{1}{2} \right) - \omega_e^{c,n} x_e^{c,n} \left(i + \frac{1}{2} \right)^2 + \omega_e^{c,n} y_e^{c,n} \left(i + \frac{1}{2} \right)^3 + \dots$$

Вращательная энергия молекулы:

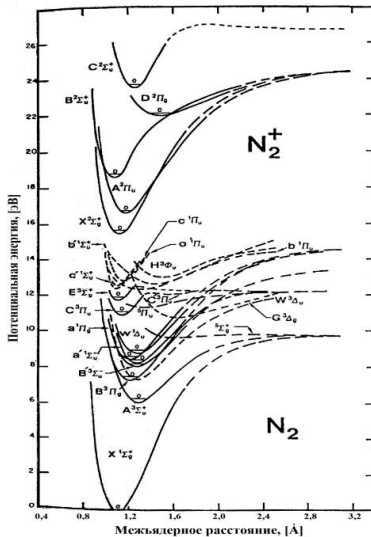
$$\frac{\varepsilon_j^{c,ni}}{hc} = B_{ni}^c j(j+1) - D_{ni}^c j^2(j+1)^2 + \dots,$$

где c – скорость света,

$$B_{ni}^c = B_{n,e}^c - \alpha_{n,e}^c \left(i + \frac{1}{2} \right) + \dots, \quad D_{ni}^c = D_{n,e}^c - \beta_{n,e}^c \left(i + \frac{1}{2} \right) + \dots$$

Спектроскопические постоянные для молекулярного азота N_2 :

n	Состояние	$\varepsilon_n^{el},$ 10^4 cm^{-1}	g_n	$\omega_e^n,$ cm^{-1}	$\omega_e^n x_e^n,$ cm^{-1}	$B_e^n,$ cm^{-1}	$\alpha_e^n,$ 10^{-3} cm^{-1}	$E_{diss}^n,$ 10^4 cm^{-1}
0	$X^1 \sum_g^+$	0	1	2358,57	14,32	1,998	17,3	7,871424
1	$A^3 \sum_u^+$	5,020360	3	1460,64	13,87	1,454	18	7,989793
2	$B^3 \Pi_g$	5,961935	6	1733,39	14,12	1,637	17,9	9,910935
3	$W^3 \Delta_u$	5,980800	6	1501,40	11,60	1,473	16,6	9,910900
4	$B^3 \sum_u^-$	6,627240	3	1516,88	12,18	1,479	16,5	10,87244





Статистическая сумма:

$$Z_c = Z_{tr,c} Z_{int,c},$$

Статистическая сумма поступательная:

$$Z_{tr,c} = \left(\frac{2\pi m_c kT}{h^2} \right)^{3/2}$$

Статистическая сумма внутренняя для атомов:

$$Z_{int,c} = \sum_n g_n^c \exp \left(-\frac{\varepsilon_n^c}{kT} \right)$$

Статистическая сумма внутренняя для молекул:

$$Z_{int,c} = \sum_{nij} g_n^c g_i^c g_j^c \exp \left(-\frac{\varepsilon_{nij}^c}{kT} \right)$$



Внутренняя энергия:

$$E_{int,c} = \frac{1}{m_c Z_{int,c}} \sum_{nij} g_{c,nij} \varepsilon_{nij}^c \exp\left(\frac{-\varepsilon_{nij}^c}{kT}\right).$$

Теплоёмкость при постоянном объёме:

$$c_V = \left(\frac{dU}{dT}\right)_V = \left(\frac{dE_{int}}{dT}\right)_V + \left(\frac{dE_{tr}}{dT}\right)_V = c_{V,int} + c_{V,tr} = c_{V,int} + \frac{3}{2} \frac{k}{m}$$

Тогда, беря производную по внутренней энергии:

$$c_V = c_{V,int} + c_{V,tr} = \frac{1}{m} \left(\frac{\sum_{nij} \varepsilon_{nij} g_n g_i g_j \exp\left(\frac{-\varepsilon_{nij}}{kT}\right)}{\sum_{nij} g_n g_i g_j \exp\left(\frac{-\varepsilon_{nij}}{kT}\right)} \right)'_T + \frac{3}{2} \frac{k}{m} =$$
$$\frac{k}{m} \left(\frac{\sum_{nij} \frac{\varepsilon_{nij}^2 g_n g_i g_j \exp\left(\frac{-\varepsilon_{nij}}{kT}\right)}{k^2 T^2}}{Z_{int}} - \left(\frac{\sum_{nij} \frac{\varepsilon_{nij}}{kT} g_n g_i g_j \exp\left(\frac{-\varepsilon_{nij}}{kT}\right)}{Z_{int}} \right)^2 \right) + \frac{3}{2} \frac{k}{m}$$



- ▶ Для определения орбиталей типа Слейтера используется волновая функция, рассчитанная с помощью численных методов:

$$\psi(r, \theta, \phi) = N r^{n^*-1} \exp^{\varsigma r/a_0} Y_{lm_l}(\theta, \phi), \quad \varsigma = \frac{Z - S}{n^*},$$

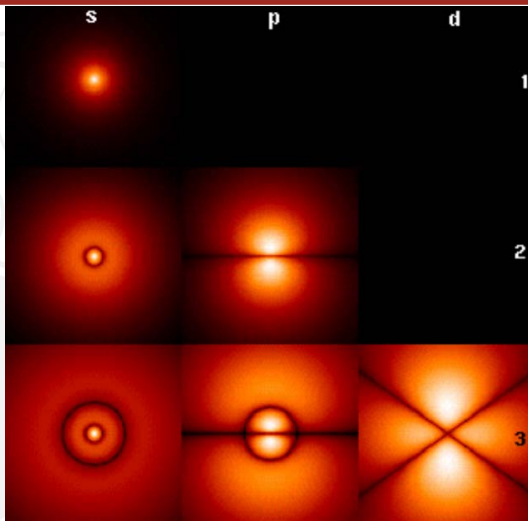
- ▶ Столкновительный диаметр может быть представлен через полуэмпирическую формулу Слэйттера:

$$\sigma_{Slaterij} = r_i + r_j + 1.8A, \quad r_k = \frac{2n_k^* + 1}{2\varsigma_k} a_0, \quad k = i, j,$$

- ▶ Для главного квантового числа $n > 6$

$$n_{h-l}^* = 1.8886 \log n + 0.9124, \quad R^2 = 0.9877$$

n	1	2	3	4	5	6	7	8	9	...
n^*	1	2	3	3.7	4	4.2	-	-	-	...
n_{h-l}^*	0.91	2.22	2.99	3.53	3.95	4.30	4.59	4.84	5.06	...



Тепловая карта нахождения электронов на атомных орбиталях
водородоподобных атомов.

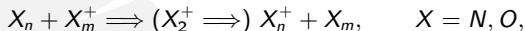


- ▶ Феноменологический потенциал межчастичного взаимодействия:

$$\varphi(x) = \varepsilon_0 \left(\frac{m}{n(x) - m} \left(\frac{1}{x} \right)^{n(x)} - \frac{n(x)}{n(x) - m} \left(\frac{1}{x} \right)^m \right),$$

$$\sigma = x_0 r_e, \quad \varphi(x_0) = 0$$

- ▶ Столкновительный диаметр при столкновении иона с родительским атомом



$$\Omega^{(l,s)*} = \sqrt{(\Omega_{el}^{(l,s)*})^2 + (\Omega_{ch-tr}^{(l,s)*})^2}, \quad l = odd,$$

$$\sigma_{ij} = 2\sigma_{eff} = 2(r_i + r_j), \quad r_k = \frac{2n_k^* + 1}{2\zeta_k} a_0$$



- Атомарный радиус основного электронного состояния:
1: Slater; 2: ESA data.

Atom	Configuration (term)	r_1 , [Å]	r_2 , [Å]	$\frac{r_1 - r_2}{r_2} \cdot 100\%$ [%]
C	2s2.2p2 (3P)	0.814	0.784	3.89
N	2s2.2p3 (4S)	0.678	0.673	0.76
O	2s2.2p4 (3P)	0.582	0.606	-4.08
Ar	2s2.2p6 (1S)	0.823	0.783	5.14
C ⁺	2s2.2p1 (2P)	0.735	0.580	26.7
N ⁺	2s2.2p2 (3P)	0.623	0.592	5.24
O ⁺	2s2.2p3 (4S)	0.540	0.546	-1.15
Ar ⁺	2s2.2p5 (2P)	0.783	0.602	29.9



- ▶ Столкновительный диаметр для основного электронного состояния:
1: Slater; 2: ESA data.

Interaction	σ_1 , [Å]	σ_2 , [Å]	$\frac{\sigma_1 - \sigma_2}{\sigma_2} \cdot 100\%$ [%]
$C(3P) - C(3P)$	3.428	3.367	1.81
$N(4S) - N(4S)$	3.157	3.147	0.32
$O(3P) - O(3P)$	2.963	3.012	-1.64
$Ar(1S) - Ar(1S)$	3.446	3.366	2.39
$C(3P) - C^+(2P)$	3.098	2.727	13.6
$N(4S) - N^+(3P)$	2.602	2.530	2.86
$O(3P) - O^+(4S)$	2.243	2.305	-2.69
$Ar(1S) - Ar^+(2P)$	3.211	2.771	15.9



► О Атомные спектры и эффективные сечения:

#	Configuration(Term)	Electronic level, [cm ⁻¹]	σ , Å
1.	2s2.2p4(3P)	0	2.96303
2.	2s2.2p4(3P)	158.265	2.96303
3.	2s2.2p4(3P)	226.977	2.96303
4.	2s2.2p4(1D)	15867.862	2.96303
5.	2s2.2p4(1S)	33792.583	2.96303
6.	2s2.2p3.3s(5S)	73768.200	8.15013
7.	2s2.2p3.3s(3S)	76794.978	8.15013
8.	2s2.2p3.3p(5P)	86625.757	8.15013
9.	2s2.2p3.3p(5P)	86627.778	8.15013
10.	2s2.2p3.3p(5P)	86631.454	8.15013
11.	2s2.2p3.3p(3P)	88630.587	8.15013
12.	2s2.2p3.3p(3P)	88631.146	8.15013
13.	2s2.2p3.3p(3P)	88631.303	8.15013
14.	2s2.2p3.4s(5S)	95476.728	18.24683

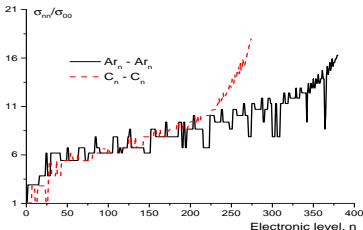
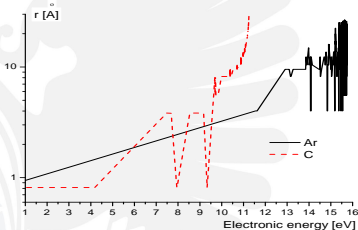
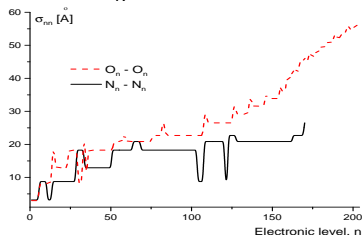
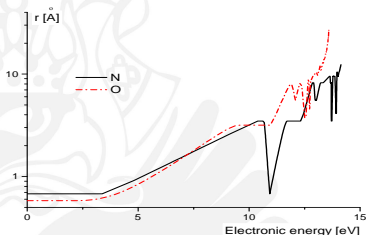


► IV Атомные спектры и эффективные сечения:

#	Configuration(Term)	Electronic level, [cm ⁻¹]	σ , Å
1.	2s2.2p3(4S)	0	3.15686
2.	2s2.2p3(2D)	19224.464	3.15686
3.	2s2.2p3(2D)	19233.177	3.15686
4.	2s2.2p3(2P)	28838.920	3.15686
5.	2s2.2p3(2P)	28839.306	3.15686
6.	2s2.2p2.3s(4P)	83284.070	8.74545
7.	2s2.2p2.3s(4P)	83317.830	8.74545
8.	2s2.2p2.3s(4P)	83364.620	8.74545
9.	2s2.2p2.3s(2P)	86137.350	8.74545
10.	2s2.2p2.3s(2P)	86220.510	8.74545
11.	2s2.2p4(4P)	88107.260	3.15686
12.	2s2.2p4(4P)	88151.170	3.15686
13.	2s2.2p4(4P)	88170.570	3.15686
14.	2s2.2p2.3p(2P)	93581.550	8.74545

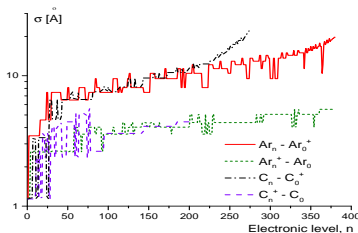
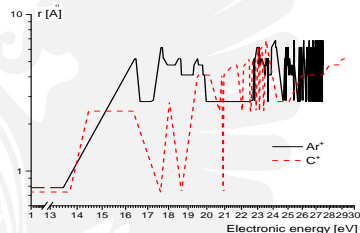
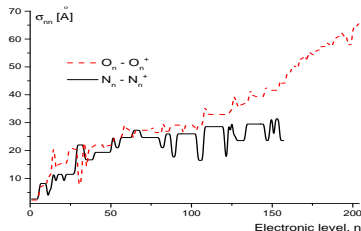
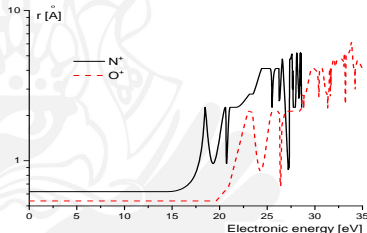
$$\sigma_{Slater_{ij}} = r_i + r_j + 1.8A,$$

$$r_k = \frac{2n_k^* + 1}{2\zeta_k} a_0, \quad k = i, j,$$



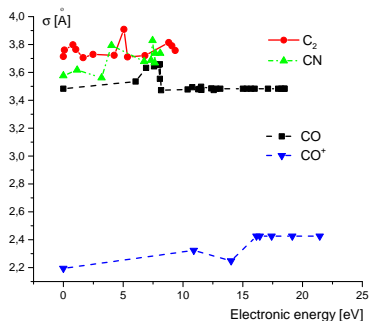
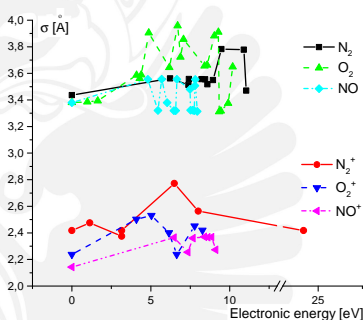
Атомарный радиус и столкновительный диаметр σ_{nn} как функция электронной энергии и номера электронного уровня.

$$\sigma_{ij} = 2\sigma_{eff} = 2(r_i + r_j), \quad r_k = \frac{2n_k^* + 1}{2\zeta_k} a_0$$



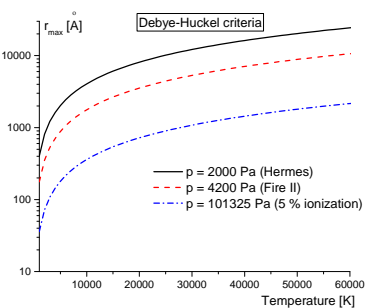
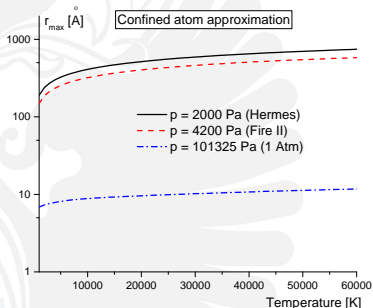
Атомарный радиус и столкновительный диаметр σ_{nm} как функция электронной энергии и номера электронного уровня.

$$\sigma_{XY_I - XY_I} = \frac{2}{3}(r_X + r_Y + r_e) + 1.8 \text{ \AA}$$



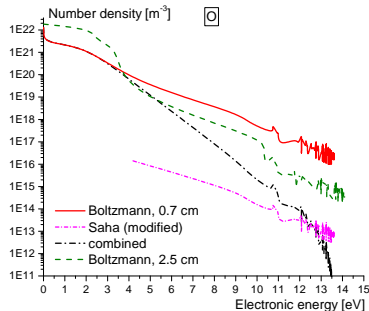
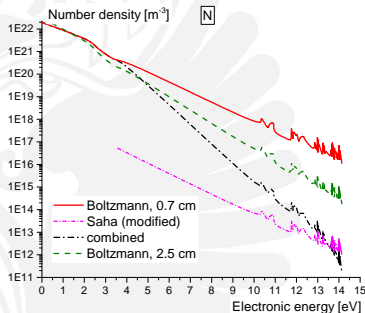
Молекулярный столкновительный диаметр σ_{nm} как функция электронной энергии.

Experiment	Pre/Post	Velocity, m/s	Temperature, K	Pressure, Pa
Hermes	Pre-Shock	7198	205	2
	Post-Shock	1207	24234	1763
Fire II (1634s)	Pre-Shock	11360	195	2
	Post-Shock	1899	62377	3827

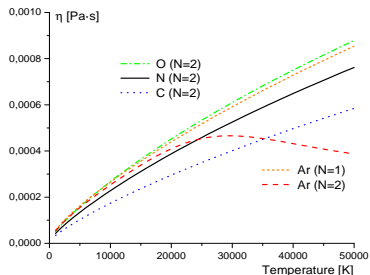
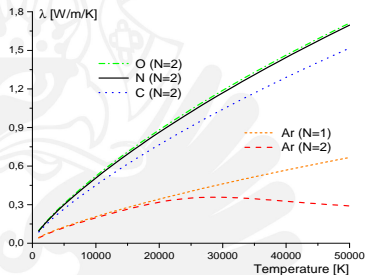


Максимально возможный атомарный радиус электронно-возбужденных частиц как функция температуры для двух моделей.

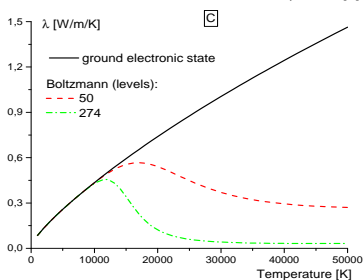
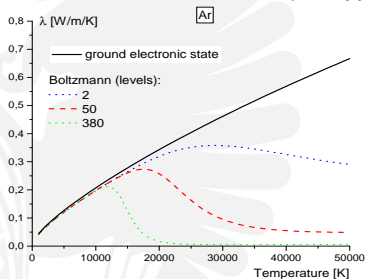
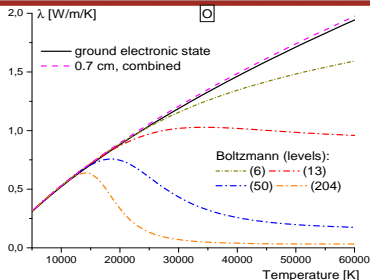
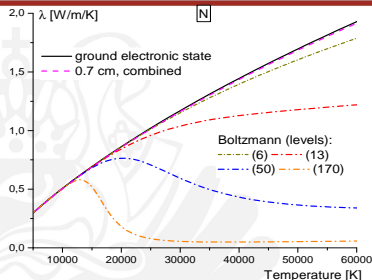
Experiment	Pre/Post	Velocity, m/s	Temperature, K	Pressure, Pa
Fire II (1634s)	Pre-Shock	11360	195	2
	Post-Shock	1899	62377	3827



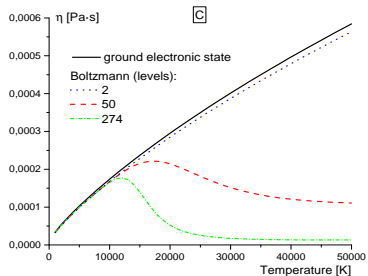
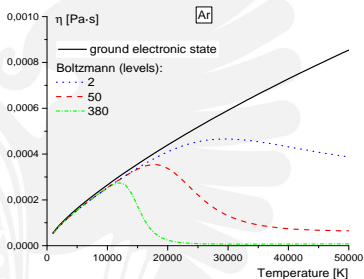
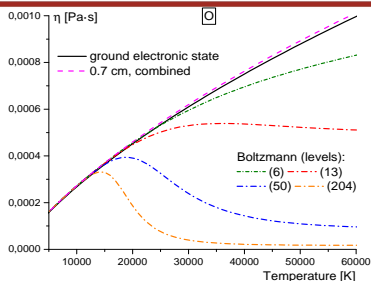
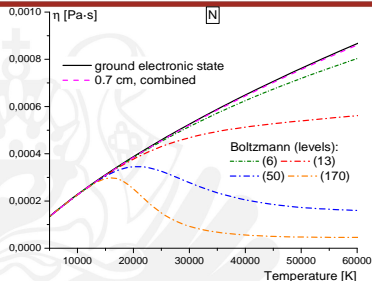
Заселенности электронных уровней N и O за ударной волной на расстоянии $x = 0.7$ см и 2.5 см для двух распределений.



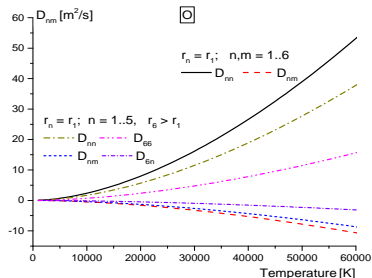
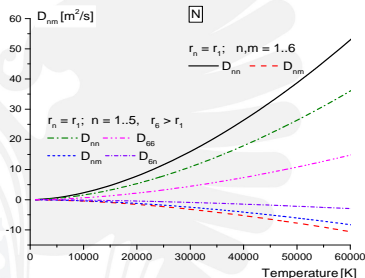
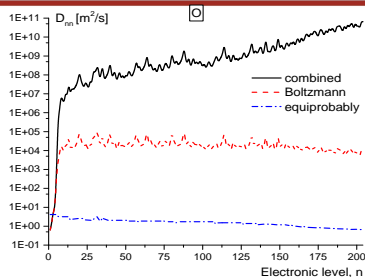
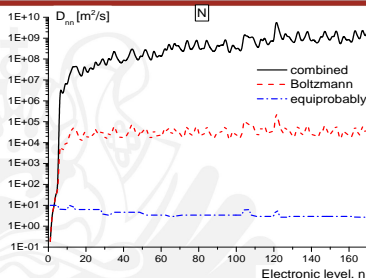
Теплопроводность λ и сдвиговая вязкость η атомарных газов как функция температуры с учетом двух нижних электронных уровней.



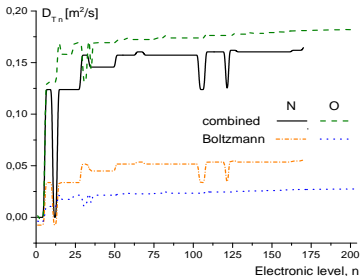
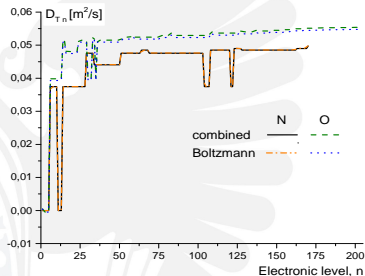
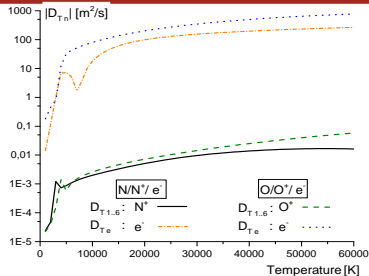
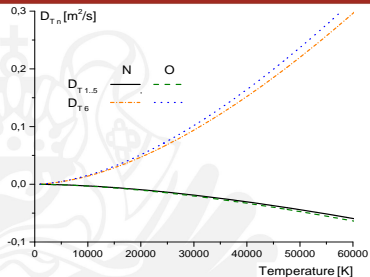
Теплопроводность λ нейтральных атомарных газов как функция температуры.



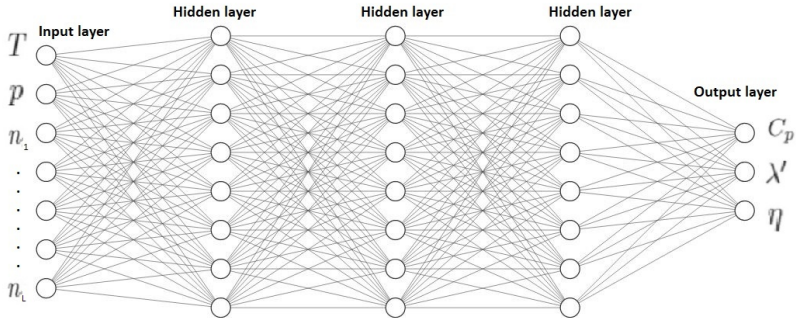
Сдвиговая вязкость η нейтральных атомарных газов как функция температуры.



Коэффициент диффузии D_{nn} как функция температуры.



Коэффициент термодиффузии D_{Tn} как функция температуры.

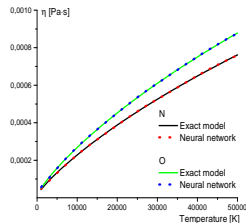
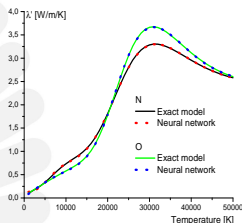
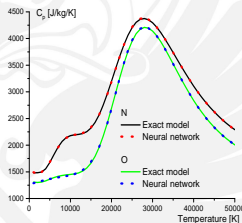


Архитектура сети для расчета теплоёмкости C_p , теплопроводности λ' и сдвиговой вязкости η произвольной смеси газов при заданных значениях температуры T и давления p .



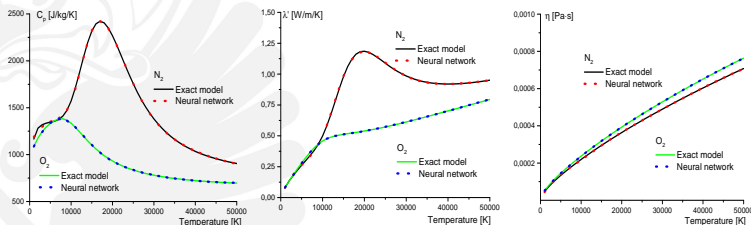
Parameters	Value
Input vector	(T, p, n_i)
Input vector ranges	$T = 1000\text{--}50000\text{ K}$; $p = 1000\text{--}202650\text{ Pa}$; $n_i = 0\text{--}1\text{ n/d}$.
2 hidden layers	8 neurons - 8 neurons
3 hidden layers	8 neurons - 8 neurons - 8 neurons
Activation function	tanh
Output vector	(C_p, λ', η)
Weights and biases	Glorot initialization
Learning rate	0.1
Momentum rate	0.01
Educational epochs	500
Education sets	3000 for one-component gas; 20000 for mixtures

Mixture	C_p	λ'	η
N	0.2 % / 0.7 %	1.7 % / 33.7 %	0.6 % / 10.1 %
O	0.5 % / 1.6 %	1.1 % / 17.1 %	0.6 % / 10.9 %



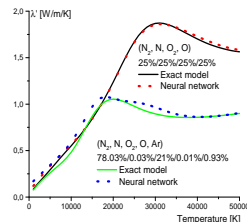
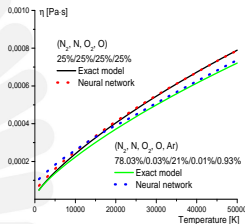
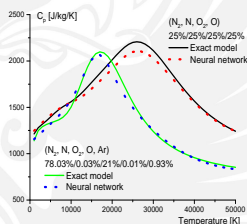
Сравнение средних и максимальных ошибок при точном расчете и симуляции посредством нейронной сети для C_p , λ' и η .

Mixture	C_p	λ'	η
N ₂	0.3 % / 2.4 %	0.5 % / 3.2 %	0.6 % / 6.5 %
O ₂	0.2 % / 0.6 %	0.2 % / 1.9 %	0.1 % / 1.2 %

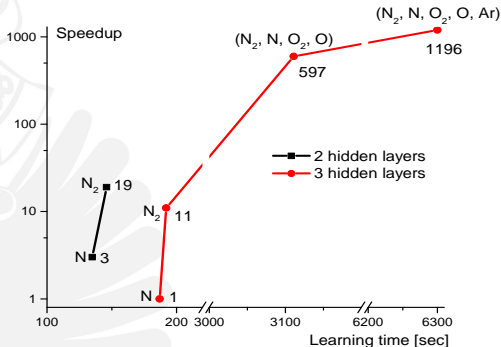


Сравнение средних и максимальных ошибок при точном расчете и симуляции посредством нейронной сети для C_p , λ' и η .

Mixture	C_p	λ'	η
(N ₂ , N, O ₂ , O)	2.5 % / 4.9 %	3.7 % / 41.6 %	4.0 % / 47.4 %
(N ₂ , N, O ₂ , O, Ar)	2.4 % / 6.4 %	12.5 % / 121.8 %	12.0 % / 122.2 %



Сравнение средних и максимальных ошибок при точном расчете и симуляции посредством нейронной сети для C_p , λ' и η .



Прирост производительности вычислений с использованием нейронной сети при расчете C_p , λ' , и η в однокомпонентных газах и смесях как функции времени обучения.



Структура программного обеспечения для задач ГАМ:

- ▶ Спроектировано на основе функциональной API библиотеки TensorFlow (Jupyter Notebook)
- ▶ Подготовка данных (NumPy format)
- ▶ Конфигурирование модели (TensorFlow 1.15 API)
- ▶ Обучение модели: различные функции потерь (Binary Crossentropy, MAE, MSE), а также возможности для спецификации процесса обучения посредством отслеживаемых метрик (Accuracy, Binary Crossentropy, MAE, MSE)
- ▶ Анализ данных (включая функциональность TensorBoard functions)



```
In [2]: data_converter_ui = basic_ui.DataConverterUI()  
data_converter_ui
```

Raw data filename:

Load raw data

☒ Headers

Samples (rows): 46800

Features (columns): 134

▼ Sheet

Left:

Right:

Top:

Bottom:

Show sheet

	1:T	2:P	3:x_N2	4:x_O2	5:x_NO	6:x_N	7:x_O	8:Eta	9:Zeta	10:Lam	11:[0]	
1000	500	50000	0.06577069	0.2861828	0.2610328	0.07210976	0.3149039	0.04293181	0.00002969215	0.00001972874	1.845445e-7	1.845445e-7
1001	500	55000	0.2555299	0.06577069	0.2861828	0.2610328	0.07210976	0.04120377	0.00002884604	0.00001938685	-4.993725e-8	-4.993725e-8
1002	500	55000	0.1648733	0.01855508	0.1298732	0.007792603	0.6789058	0.04447092	0.00003044473	0.00001926741	3.70337e-7	3.70337e-7
1003	500	55000	0.07290792	0.31117	0.2517429	0.2915336	0.0726457	0.04184377	0.00002886398	0.00001936428	8.279718e-8	8.279718e-8

► Plot

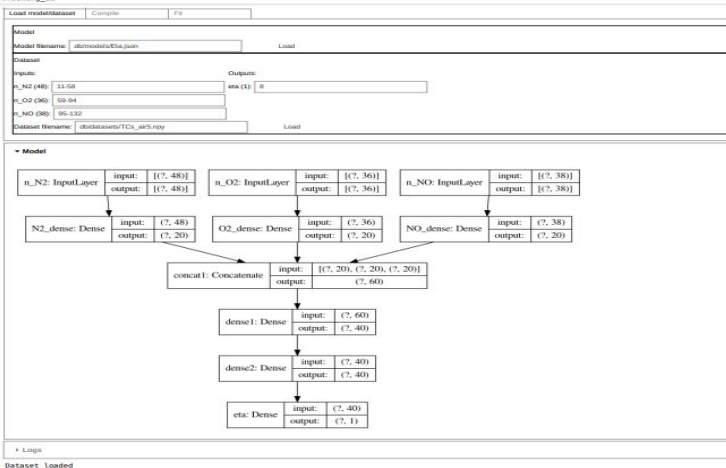
Output filename:

Save dataset

Data is loaded

Пример подготовки данных для смеси (N_2 , N , O_2 , O , NO).

```
In [5]: training_ui = basic_ui.TrainingUI()
training_ui
```



Пример конфигурирования модели для смеси (N_2 , N , O_2 , O , NO).

Использование ML-методов в ПО для задач



Saint Petersburg
State University
www.spbu.ru

```
In [3]: model_ui = basic_ui.ModelUI()
model_ui
```

Config settings

Save/load config

Model name: Eta

Create

Add new layer

Layer name: eta

Type: Dense

Units: 1

Connect to: dense2

Activation: Linear

Add

Outputs:

☐ n_N2

☐ n_O2

☐ n_NO

☐ N2_dense

☐ O2_dense

☐ NO_dense

☐ concat1

☐ dense1

☐ dense2

☒ eta

Set

Summary

Model: "Eta"

Layer (type)	Output Shape	Param #	Connected to
n_N2 (InputLayer)	[(None, 48)]	0	
n_O2 (InputLayer)	[(None, 36)]	0	
n_NO (InputLayer)	[(None, 38)]	0	
N2_dense (Dense)	(None, 20)	980	n_N2[0][0]
O2_dense (Dense)	(None, 20)	740	n_O2[0][0]
NO_dense (Dense)	(None, 20)	780	n_NO[0][0]
concat1 (Concatenate)	(None, 60)	0	N2_dense[0][0] O2_dense[0][0] NO_dense[0][0]
dense1 (Dense)	(None, 40)	2440	concat1[0][0]
dense2 (Dense)	(None, 40)	1640	dense1[0][0]
eta (Dense)	(None, 1)	41	dense2[0][0]

Total params: 6,621
Trainable params: 6,621
Non-trainable params: 0

Schema

Load complete

Пример конфигурирования модели для смеси (N_2 , N , O_2 , O , NO).



Load model/dataset Compile **Fit**

Batch size: 1024
Epochs: 500
Validation split: 0.1
Fit

Callbacks:

- ☒ CSV Logger
- ☒ Early Stopping
- ☒ Model Checkpoint
- ☒ Tensor Board
- ☒ Write graph
- ☒ Write images

Log filename: logs/Eta.log
Monitor: val_loss
Min delta: 0
Patience: 10
Model filename: logs/Eta.h5
Monitor: val_loss
Log dir: logs/graphs/Eta
Histogram frequency: 30

Model

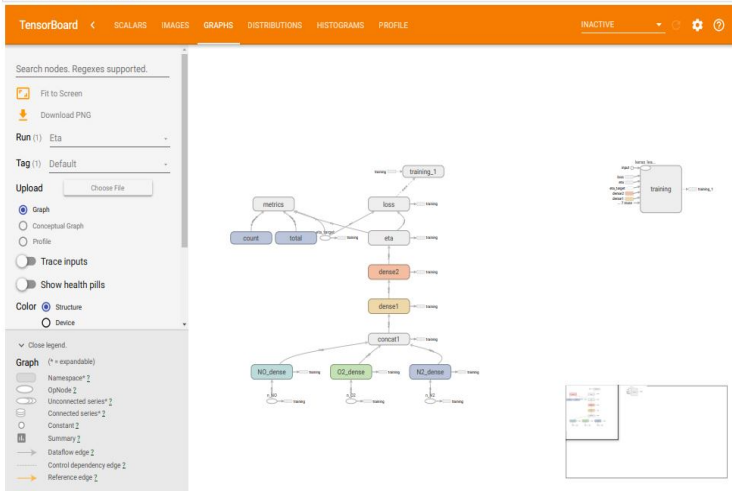
Logs

```
42120/42120 [=====] - 8s 7us/sample - loss: 0.0100 - accuracy: 0.0000e+00 - val_loss: 0.0136 - val_accuracy: 0.0000e+00
Epoch 53/500
41984/42120 [=====] - ETA: 0s - loss: 0.0172 - accuracy: 0.0000e+00
Epoch 00053: val_loss did not improve from 0.01366
42120/42120 [=====] - 8s 7us/sample - loss: 0.0172 - accuracy: 0.0000e+00 - val_loss: 0.0151 - val_accuracy: 0.0000e+00
Epoch 54/500
41984/42120 [=====] - ETA: 0s - loss: 0.0164 - accuracy: 0.0000e+00
Epoch 00054: val_loss did not improve from 0.01366
42120/42120 [=====] - 8s 7us/sample - loss: 0.0164 - accuracy: 0.0000e+00 - val_loss: 0.0160 - val_accuracy: 0.0000e+00
Epoch 55/500
41984/42120 [=====] - ETA: 0s - loss: 0.0155 - accuracy: 0.0000e+00
Epoch 00055: val_loss did not improve from 0.01366
42120/42120 [=====] - 8s 7us/sample - loss: 0.0155 - accuracy: 0.0000e+00 - val_loss: 0.0143 - val_accuracy: 0.0000e+00
Epoch 56/500
41984/42120 [=====] - ETA: 0s - loss: 0.0151 - accuracy: 0.0000e+00
Epoch 00056: val_loss did not improve from 0.01366
42120/42120 [=====] - 8s 7us/sample - loss: 0.0151 - accuracy: 0.0000e+00 - val_loss: 0.0139 - val_accuracy: 0.0000e+00
Epoch 57/500
41984/42120 [=====] - ETA: 0s - loss: 0.0141 - accuracy: 0.0000e+00
Epoch 00057: val_loss did not improve from 0.01366
```

Пример обучения модели для смеси (N_2 , N , O_2 , O , NO).



```
In [1]: %load_ext tensorboard  
%tensorboard --logdir logs/graphs
```



Пример анализа результатов для смеси (N_2 , N , O_2 , O , NO).

Спасибо за Ваше внимание!

