

## Нейросетевое моделирование кинетики горения водородовоздушных смесей

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.shvetcova@math.msu.ru*

Во многих случаях задача расчета газодинамических процессов включает в себя моделирование физико-химических взаимодействий. Расчет этих взаимодействий, в частности химической кинетики, представляет собой сложную математическую задачу, традиционно решаемую методами, которые занимают большую часть расчетного времени. В данной работе представлен вариант аппроксимации химической кинетики искусственными нейронными сетями. Используется кинетический механизм Tereza (2019) [1]. Набор обучающих данных построен с помощью численной реализации, основанной на методе Новикова из класса методов Розенброка для жестких систем дифференциальных уравнений [2]. В качестве начальных вектором для численного метода брались результаты моделирования двумерной камеры горения на 60 микросекунд, разбитой на сетку 1000:200. В каждый момент времени выделяется фронт размером 50:200, из выбранных точек сформирован набор начальных векторов, произведено моделирование процесса на 200 шагов вперед. Таким образом был сформирован набор обучающих данных, он разделен на тренировочную выборку, валидационную выборку и тестовую выборку.

Была получена пятислойная полносвязная нейронная сеть. Во внутренних слоях в качестве функции активации используется ReLU – LeakyReLU, с параметром  $a = 0.01$ . Процесс обучения включает в себя проход сети на 50 шагов вперед. Таким образом нейронная сеть учится учитывать рекуррентное накопление ошибки. Входом сети является 13-мерный вектор: временной шаг, температура и молярные плотности веществ. Полученная нейронная сеть работает в рекуррентном режиме. Сеть достаточно точно научилась предсказывать необходимые зависимости с минимальной ошибкой.

### Источники и литература

- 1) 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. A.A. Sidorov et al., J. Nucl. Mater., Vol. 5, 2001, p. 1042-1045.
- 2) Novikov E.A. Investigation of (m,2)-methods of stiff systems calculation// Calculation technologies. 2007. V. 12. 5. P. 103–115.