

Моделирование динамики горения водорода при помощи полносвязной нейронной сети UNET

Я.М.Карандашев^{1,2}, Е.В. Михальченко^{1,3}, М.Ю. Мальсагов¹, В.Ф. Никитин^{1,3}

¹ ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН, Нахимовский проспект 36к1, Москва, 117218

² Российский университет дружбы народов, ул. Миклухо-Маклая, д.6, Москва, 117198

³ МГУ имени М.В. Ломоносова, Ленинские горы, 1, Москва, 119991

Аннотация. Расчет физико-химических взаимодействий газодинамических процессов, проходящих в двигателях, является трудоемкой задачей. Если рассчитывается нестационарный процесс, включающий такие физические явления, как детонация, зажигание горючей смеси, распространение волн горения, то получение расчетных данных даже за весьма малое физическое время требует долгой работы суперкомпьютерных систем. Попытка же ускорить время расчета обычными для этого простыми методами, такими как огрубление расчетной сетки или экстраполяция результатов, полученных на начальном этапе расчета, на значительно больший временной период, не гарантирует отсутствия грубых отклонений численной от исходной математической модели. В настоящей работе рассматривается задача горения водорода с кислородом в присутствии нейтральных элементов (азот (N_2) и аргон (Ar)). В процессе горения образуются различные водородно-кислородные соединения (H_2 , O_2 , H_2O , OH , HO_2 , H_2O_2 , H , O), меняется температура смеси. Такой процесс преобразования веществ описывается 28 уравнениями химических реакций (механизм GriMech 3.0 (1999)). В итоге требуется проследить развитие данной системы от некоторого начального состояния на несколько шагов по времени. В настоящей работе показано, что нейросетевая архитектура UNET может быть успешно применена к задаче предсказания детерминированных многомерных временных рядов, а именно моделирования химических процессов горения, описываемых жёсткой системой обыкновенных дифференциальных уравнений. Используя её, нам удалось обучить компактную модель, которая может аппроксимировать изменения концентраций веществ в смеси в процессе химических реакций с высокой степенью точности, достаточной чтобы рекуррентно получать предсказание на сотни и даже тысячи шагов интегрирования вперёд, занимая при этом на порядок меньше времени вычисления, чем численное интегрирование. Данная работа является развитием идей, описанных в работе [1]. Изменив нормировку данных и немного архитектуру сети (см. рисунок), удалось не только улучшить точность и надежность нейронной сети, но и уменьшить вычислительные затраты.

Ключевые слова: численное моделирование химических процессов, горение, детонация, нейронные сети, глубокое обучение, UNET, рекуррентные сети.

[1] V.B. Betelin, B.V. Kryzhanovsky, N.N. Smirnov, V.F. Nikitin, I.M. Karandashev, M. Yu Malsagov, E.V. Mikhailchenko, Neural network approach to solve gas dynamics problems with chemical transformations, Acta Astronautica, 2020, ISSN 0094-5765, <https://doi.org/10.1016/j.actaastro.2020.11.058>

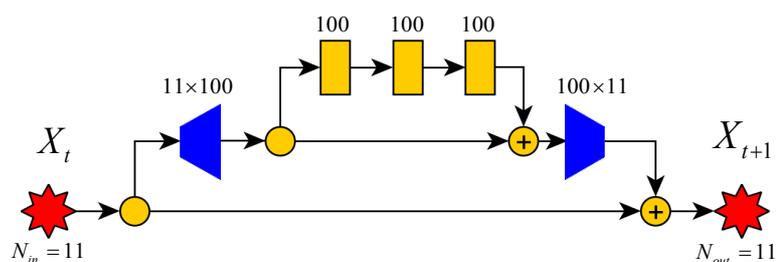


Рисунок. Архитектура сети UNET

Карандашев Яков Михайлович

к.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН
доцент Математического института им. С.М. Никольского РУДН

Simulation of hydrogen combustion dynamics using a fully connected UNET neural network

Ya.M. Karandashev^{1,2}, E.V. Mikhailchenko^{1,3}, M.Yu. Malsagov¹, V.F. Nikitin^{1,3}

¹ FGU FSC NIISI RAS, Nakhimovsky prospect 36 b.1, Moscow, Russia, 117218

² Russian Peoples' Friendship University, 6 Miklukho-Maklaya St, Moscow, Russia, 117198

³ Lomonosov Moscow State University, Leninskie gory, 1, Moscow, Russia, 119991

Annotation. Calculation of physicochemical interactions of gas-dynamic processes taking place in engines is a laborious task. If a non-stationary process is calculated, including such physical phenomena as detonation, ignition of a combustible mixture, propagation of combustion waves, then obtaining calculated data even for a very short physical time requires a long operation of supercomputer systems. An attempt to speed up the calculation time using the usual simple methods, such as coarsening of the computational grid or extrapolation of the results obtained at the initial stage of the calculation for a much longer time period, does not guarantee the absence of gross deviations of the numerical from the original mathematical model. In this work, we consider the problem of combustion of hydrogen with oxygen in the presence of neutral elements (nitrogen (N₂) and argon (Ar)). During combustion, various hydrogen-oxygen compounds are formed (H₂, O₂, H₂O, OH, HO₂, H₂O₂, H, O), the temperature of the mixture changes. This process of transformation of substances is described by 28 equations of chemical reactions (mechanism GriMech 3.0 (1999)). As a result, it is required to trace the development of this system from some initial state by several steps in time. This paper shows that the UNET architecture neural network can be successfully applied to the problem of predicting deterministic multidimensional time series, namely, modeling the chemical combustion processes described by a rigid system of ordinary differential equations. Using it, we were able to train a compact model that can approximate changes in the concentrations of substances in a mixture during chemical reactions with a high degree of accuracy, sufficient to recursively obtain predictions for hundreds and even thousands of integration steps forward, while taking an order of magnitude less computation time than numerical integration. This work is a development of the ideas described in work [1]. By changing the data normalization and the network architecture (see figure), we managed not only to improve the accuracy and reliability of the neural network, but also to reduce computational costs.

Keywords: numerical simulation of chemical processes, combustion, detonation, neural networks, deep learning, UNET architecture, recurrent networks.

[1] V.B. Betelin, B.V. Kryzhanovsky, N.N. Smirnov, V.F. Nikitin, I.M. Karandashev, M. Yu Malsagov, E.V. Mikhailchenko, Neural network approach to solve gas dynamics problems with chemical transformations, Acta Astronautica, 2020, ISSN 0094-5765, <https://doi.org/10.1016/j.actaastro.2020.11.058>

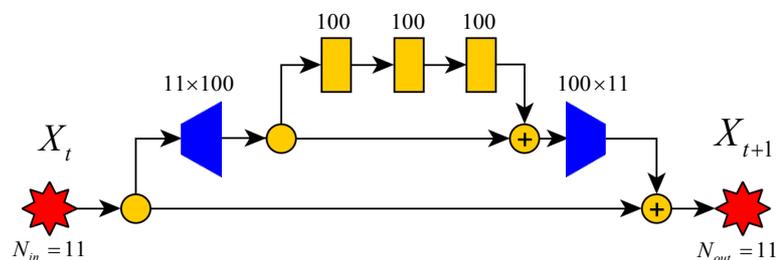


Figure. UNET neural network architecture

Iakov Karandashev

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Leading Researcher of SRISA RAS
Associate Professor of S.M. Nikolsky Mathematical Institute of RUDN