

Исследование ячеистой структуры детонационной волны в смеси водород-воздух

Швецова М. А. Мальсагов М.Ю. Михальченко Е.В.

МГУ им. М.В. Ломоносова

Механико-математический факультет

Уравнения баланса и определяющие соотношения

$$\frac{\partial X_k}{\partial t} + \operatorname{div}(X_k \mathbf{u}) = \hat{\omega}_k(X_1, \dots, X_N; T)$$

$$\rho = \sum_{k=1}^{N_C} W_k X_k$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{u}}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) + \operatorname{grad} p = 0$$

$$X_k = \frac{\rho_k}{W_k};$$

$$\frac{\partial E_T}{\partial t} + \operatorname{div}((E_T + p)\mathbf{u}) = Q$$

$$p = R_G T \sum_{k=1}^{N_C} X_k$$

$$E_T = R_G T \sum_{k=1}^{N_C} \left(\hat{H}_k(T) - 1 \right) X_k + \frac{1}{2} \rho \mathbf{u} \cdot \mathbf{u}$$

Модель химических взаимодействий

В смеси одновременно идут все реакции, часть которых или все – обратимы. Каждая реакция характеризуется:

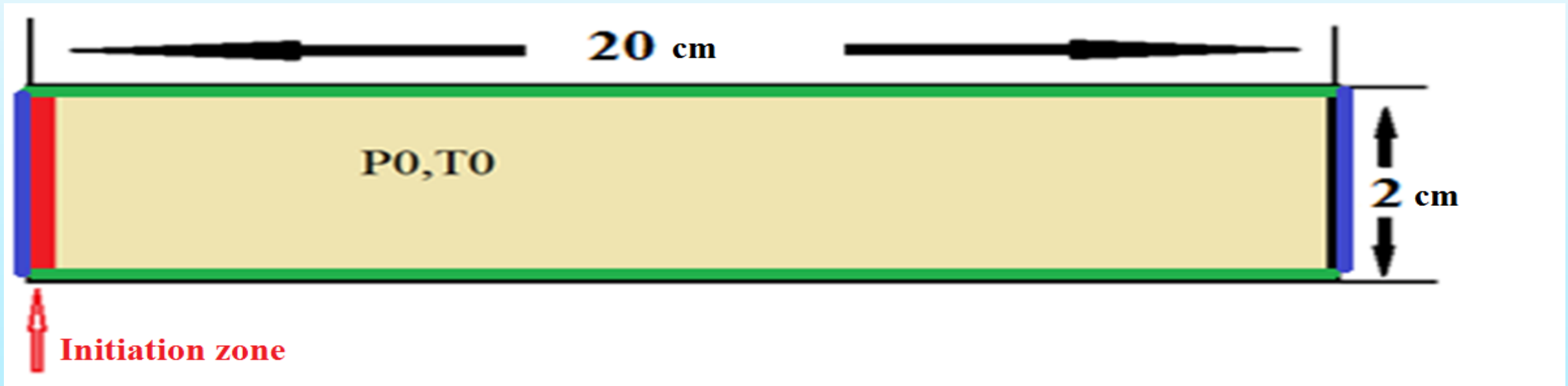
- Участвующими и преобразующимися в ней компонентами
- Участвующими, но не преобразующимися
- Параметрами, влияющими на скорость реакции

$$\sum_{k=1}^{N_C} \nu'_{rk} [X_k] + [M_r] = \sum_{k=1}^{N_C} \nu''_{rk} [X_k] + [M_r]$$

$$\hat{\omega}_k = \sum_{r=1}^{N_R} (\nu''_{kr} - \nu'_{kr}) k_r (M_r, T) \left[\prod_{k=1}^{N_C} X_k^{\nu'_{rk}} - \frac{\chi_r}{K_r(T)} \prod_{k=1}^{N_C} X_k^{\nu''_{rk}} \right]$$

Расчет дополнительных коэффициентов зависит от специфики кинетического механизма. Константа равновесия рассчитывается по термодинамическим данным меняющихся в реакции компонент (энтальпии и энтропии)

Граничные и начальные условия



Начальные условия:

$$T_0 = 500 \text{ K}$$

$$P_0 = 1 \text{ бар}$$

$$\mathbf{u}_0 = 0$$

$$[\text{H}_2] : [\text{O}_2] : [\text{N}_2] : [\text{H}_2\text{O}]$$

Открытые границы

Периодические граничные условия

$$\begin{cases} U = \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} < 0 \Rightarrow \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = 0; \\ 0 \leq U < a \Rightarrow p = P_0. \end{cases}$$

Кинетика водорода с воздухом

GriMech 3.0 (20); GRI-Mech Version 3.0 7/30/99 CHEMKINII format, at http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/.

Химические реакции и выражения скорости реакций для механизма GRI Mech 3.0 (1999) [48], подсистема H_2+O_2 . Единицы измерения: см, моль, К, кал.

Таблица содержит механизм GRI Mech 3.0 (1999) [48], подсистема горения водорода. Механизм содержит все компоненты (27), кроме OH^* . Число различных реакций в этом механизме равно 20.

Таблица

No.	Реакция	Коэффициент прямой реакции
1.	$O + O + M = O_2 + M$	$1.2 \cdot 10^{17} \cdot T^{-1}$
	$[M] = 2.4[H_2] + 15.4[H_2O] + 0.83[Ar] + 1.0[others]$	
2.	$O + H + M = OH + M$	$5.0 \cdot 10^{17} \cdot T^{-1}$
	$[M] = 2.0[H_2] + 6.0[H_2O] + 0.7[Ar] + 1.0[others]$	
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.	$H + O_2 + M = HO_2 + M$	$2.8 \cdot 10^{18} \cdot T^{-0.86}$
	$[M] = 0.0[O_2] + 0.0[H_2O] + 0.0[N_2] + 0.0[Ar] + 1.0[others]$	
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.	$H + H + M = H_2 + M$	$10^{18} \cdot T^{-1.0}$
	$[M] = 0.0[H_2] + 0.0[H_2O] + 0.63[Ar] + 1.0[others]$	
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.	$H + OH + M = H_2O + M$	$2.2 \cdot 10^{22} \cdot T^{-2.0}$
	$[M] = 0.73[H_2] + 3.65[H_2O] + 0.38[Ar] + 1.0[others]$	
10.	$H + HO_2 = H_2O + O$	$3.97 \cdot 10^{12} \cdot \exp(-671/R_G T)$

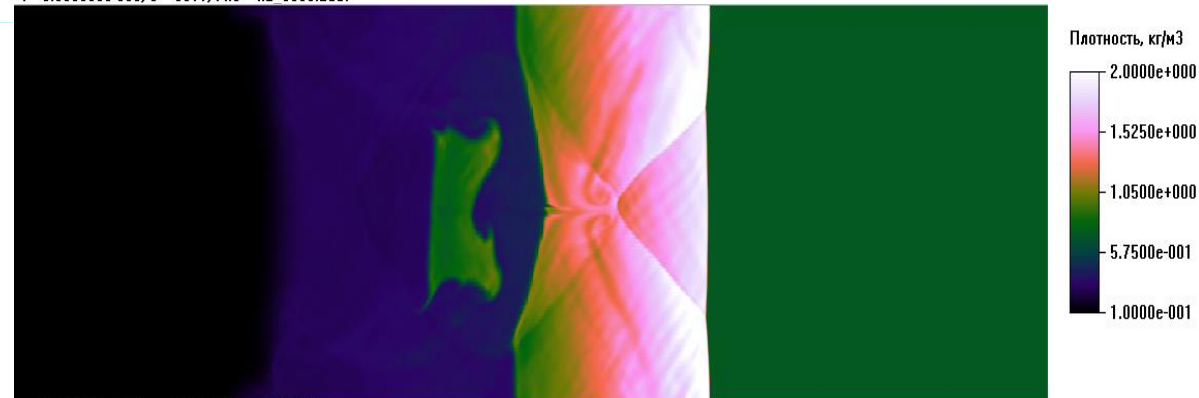
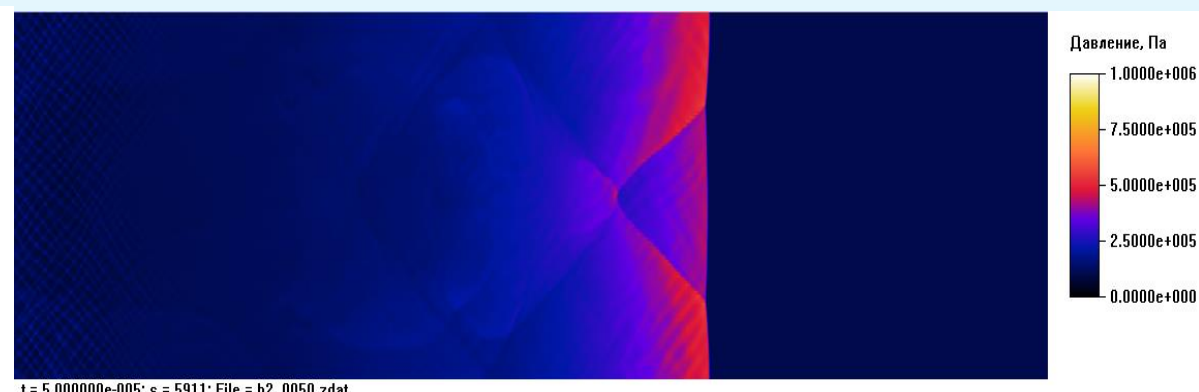
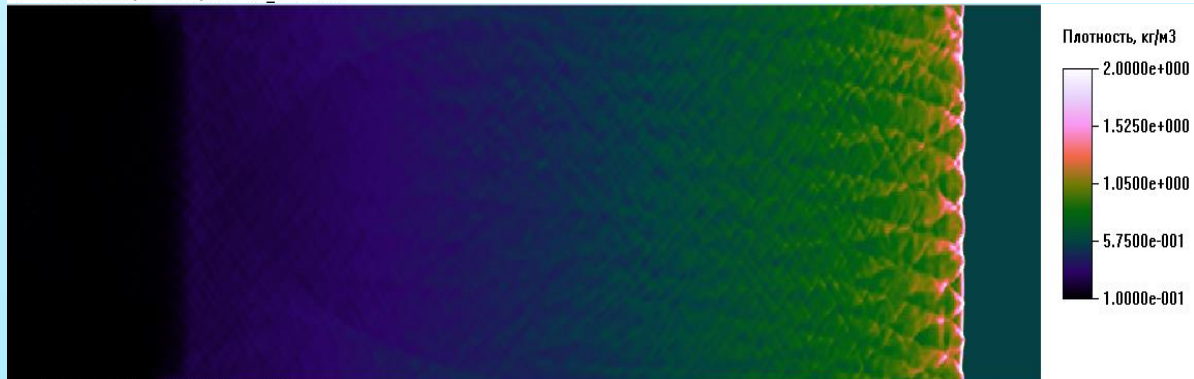
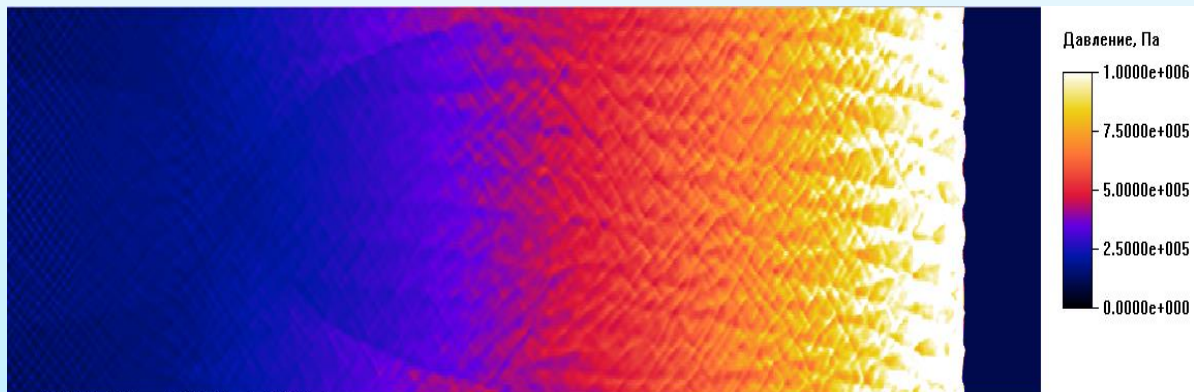
10.	$H + HO_2 = H_2O + O$	$3.97 \cdot 10^{12} \cdot \exp(-671/R_G T)$
11.	$H + HO_2 = H_2 + O_2$	$4.48 \cdot 10^{13} \cdot \exp(-1068/R_G T)$
12.	$H + HO_2 = OH + OH$	$8.40 \cdot 10^{13} \cdot \exp(-635/R_G T)$
13.	$H + H_2O_2 = HO_2 + H_2$	$1.21 \cdot 10^7 \cdot T^2 \cdot \exp(-5200/R_G T)$
14.	$H + H_2O_2 = H_2O + OH$	$10^{13} \cdot \exp(-3600/R_G T)$
15.	$OH + H_2 = H + H_2O$	$1.16 \cdot 10^8 \cdot T^{1.51} \cdot \exp(-3430/R_G T)$
16.	$OH + OH + M = H_2O_2 + M$	$k_{high} = 7.4 \cdot 10^{13} \cdot T^{-0.37}$
		$k_{low} = 2.3 \cdot 10^{18} \cdot T^{-0.9} \cdot \exp(+1700/R_G T)$
	$\alpha = 0.7346, T^{***} = 94.0, T^* = 1756, T^{**} = 5182$	
	$[M] = 2.0[H_2] + 6.0[H_2O] + 0.7[Ar] + 1.0[others]$	
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.	$HO_2 + HO_2 = O_2 + H_2O_2$	$4.2 \cdot 10^{14} \cdot \exp(-12000/R_G T)$

Богатая Смесь

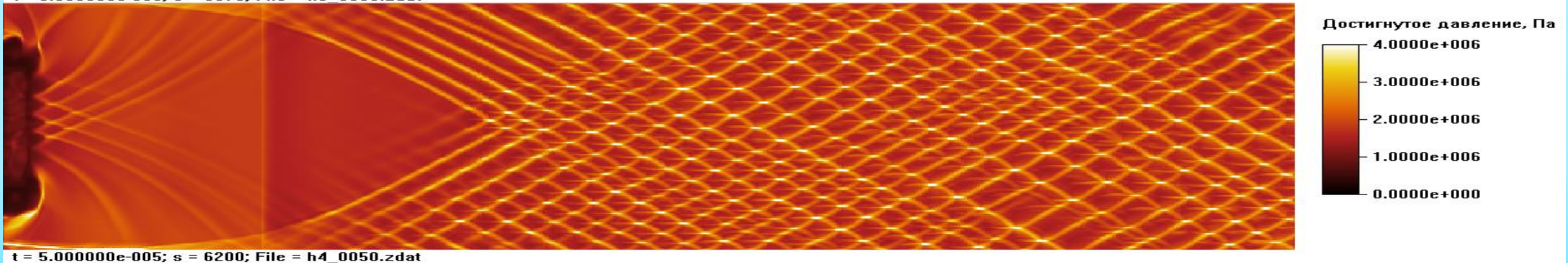
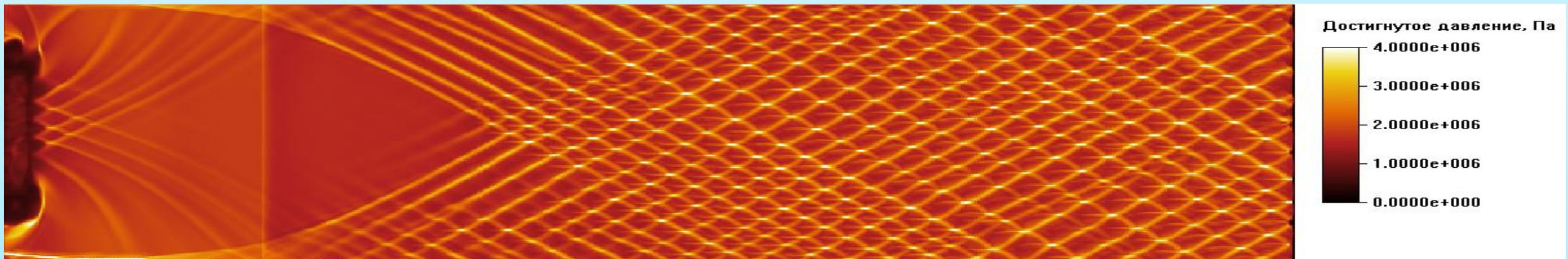
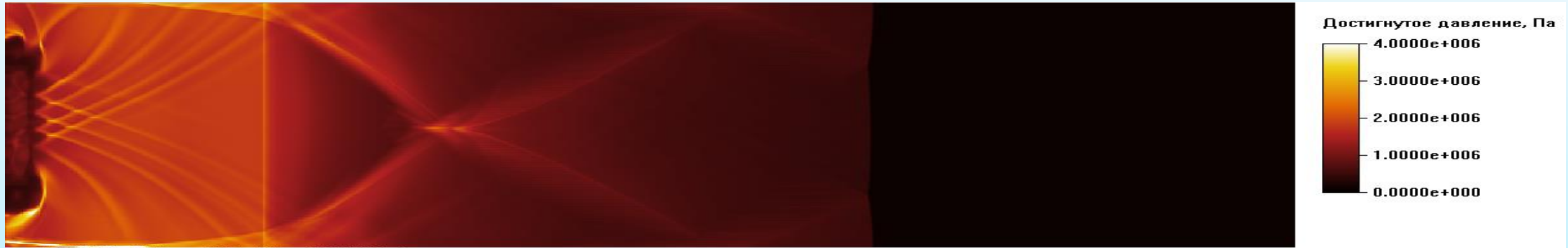
$[\text{H}_2]:[\text{O}_2]:[\text{N}_2]=3:1:4$

Бедная смесь

$[\text{H}_2]:[\text{O}_2]:[\text{N}_2]=1:1:4$



Максимально Достигнутое Давление



Нейросетевой подход

- Изучалась 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.

Описание данных

- Численная реализация основана на методе Новикова [21] из класса методов Розенброка для жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений.
- Важной частью численной реализации является полуаналитический метод вычисления якобиана правой части системы уравнений. Установка начальных условий (p_0, T_0, X_{k0}) велась произвольно.
- При таком разбросе данных ни одна нейронная сеть не может быть обучена должным образом и хорошо работать.
- Мы использовали логарифмическое масштабирование

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

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

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

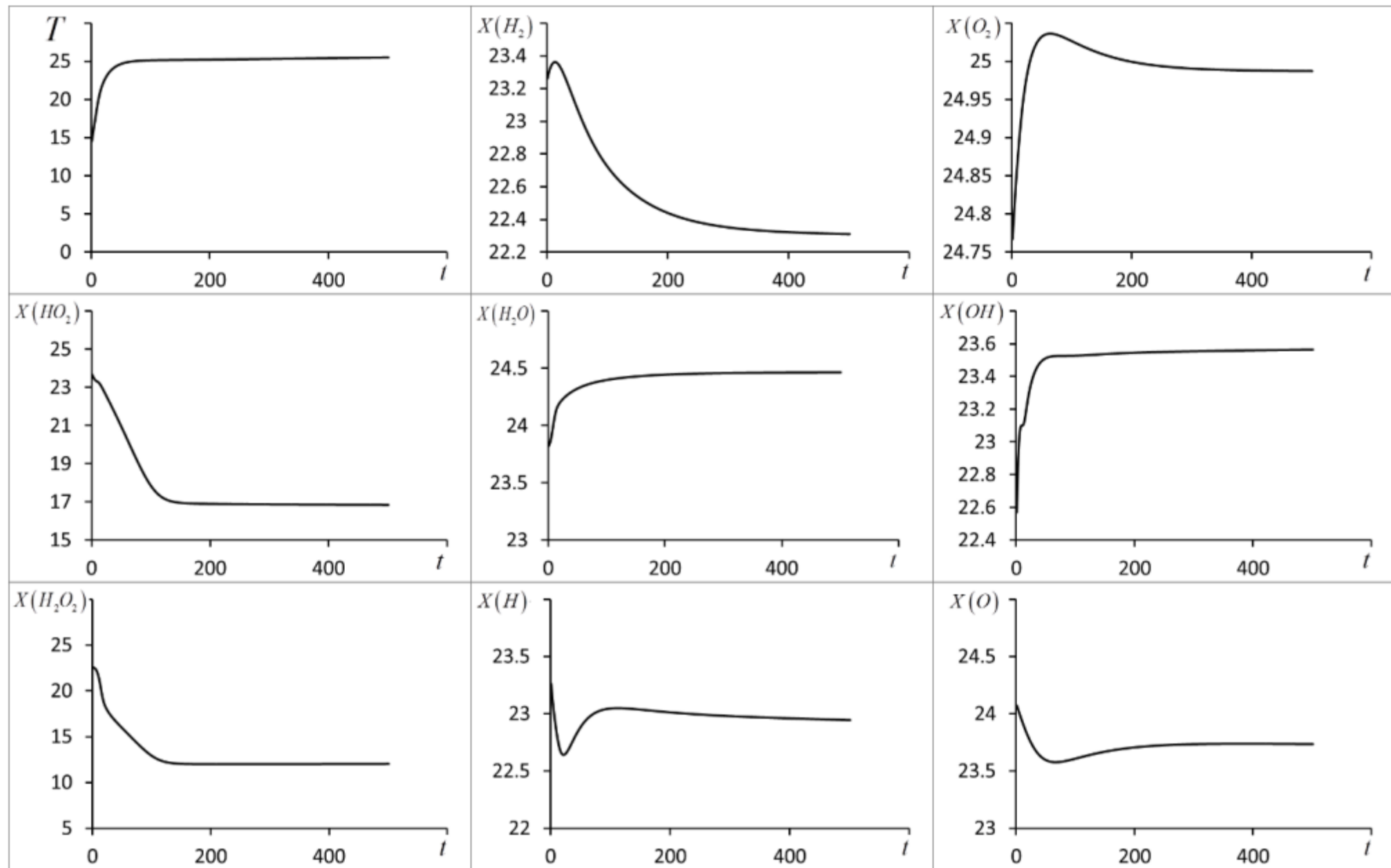


Рис. 2. Пример развития системы во времени после нормализации данных

Архитектура нейронной сети

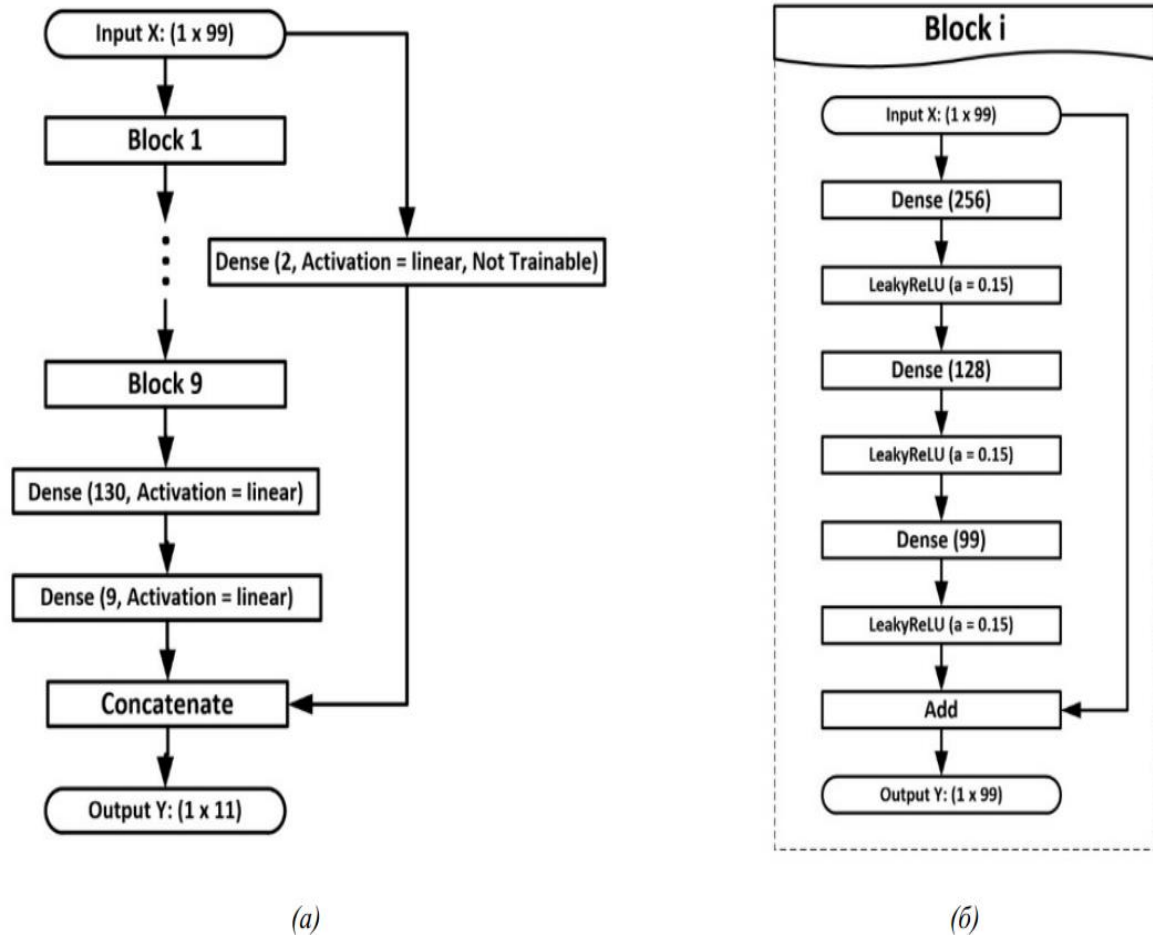
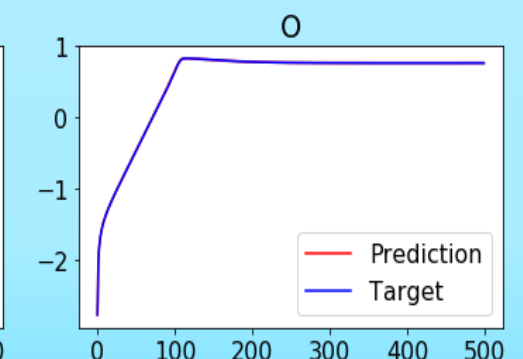
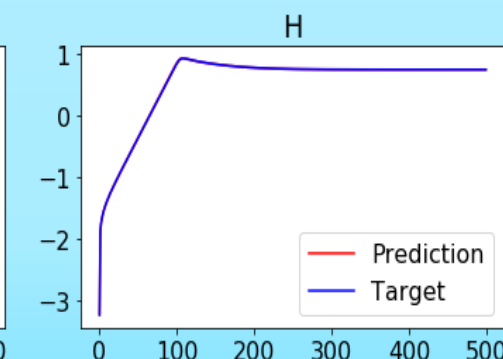
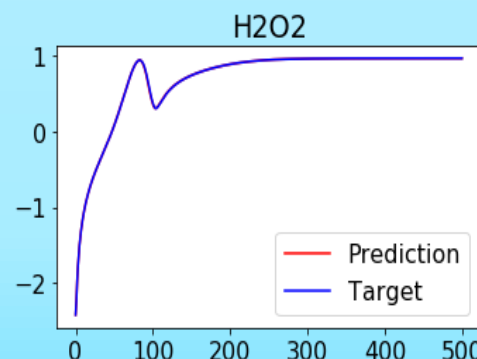
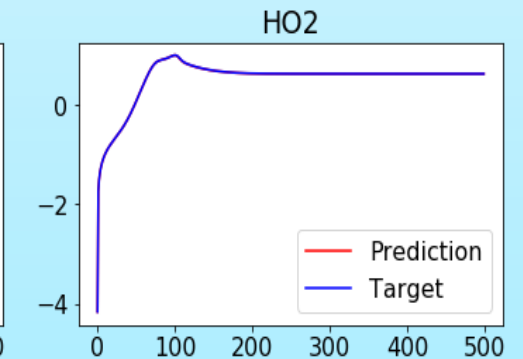
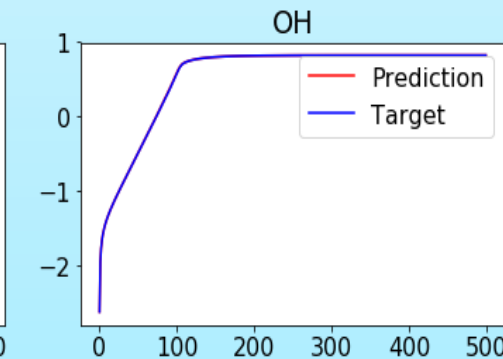
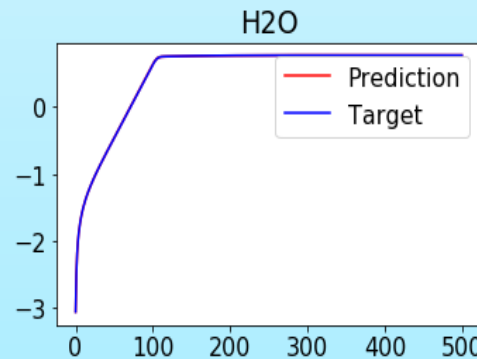
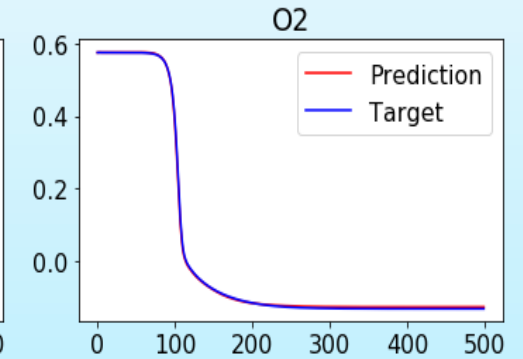
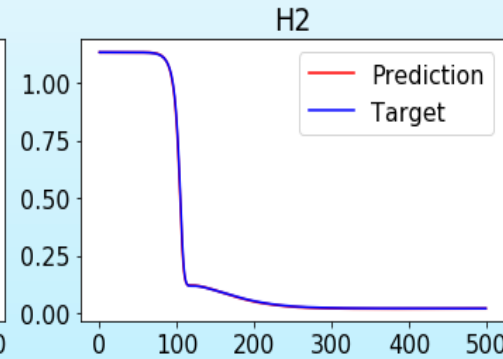
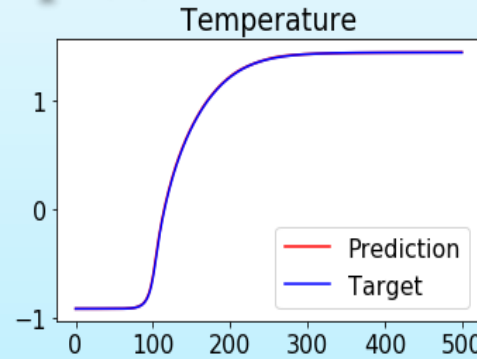
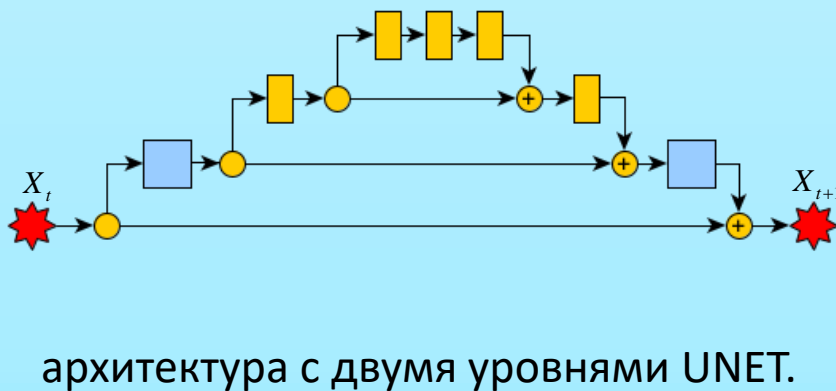
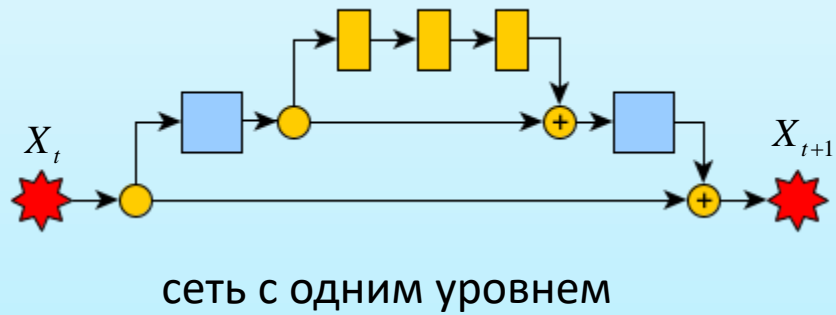


Рис. 4. Архитектура сети 1: (а) основная модель; (б) одноблочная структура

- Выходом нейронной сети будет 11-мерный вектор $Y = (T, X_1, \dots, X_{10})$. Однако этот размер слишком мал для ввода нейронной сети. 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:
 $X = (T_1, X_1^1, \dots, X_{10}^1, \dots, T_9, X_1^9, \dots, X_{10}^9)$
- Вход передается через несколько одинаковых блоков, состоящих из нескольких слоев.
- Каждый 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 $a = 0.15$.

Пример эксперимента с 1-уровневой UNET архитектурой при логарифмическом масштабировании данных, с добавлением в лосс функцию предсказания сети на 10 шагов



Спасибо за внимание!