

0.1. Казаков Г.И., Иванов К.О., Пененко А.В. Построение суррогатных нейронных моделей для решения задачи химической кинетики горения метана.

Задача моделирования процессов горения является одним из перспективных направлений науки в области математического моделирования. Его развитие имеет большое значение в условиях стремительных технологических изменений, так как помогает оптимизировать работу двигателей и повысить их КПД. Однако классические подходы к решению этой задачи сильно страдают от “проклятия размерности” - более детализированные химические механизмы, требуют решения жестких и комплексных систем ОДУ, что затруднительно при моделировании большого количества ячеек реактора.

Для оптимизации вычислительного процесса, в рамках нашего исследования мы разрабатываем и тестируем фреймворк для работы с различными системами хим. кинетики с помощью нейронных сетей. В первом блоке методов, мы рассматриваем различные архитектуры для интегрирования оригинальной системы: MLP, UNet и KAN. Для их более эффективного обучения рассматриваются различные подходы к предобработке данных и тренировке сетей: Power Transform, авторегрессия, progressive time scaling, BatchNorm, L2-регуляризация, кластеризация. Далее, рассматривается второй блок подходов, направленных на понижение размерности исходной системы, среди которых наиболее многообещающими являются использование AutoEncoder архитектур и алгоритма SINDy для выявления динамики полученной подсистемы. Второй блок методов позволяет разрабатывать гибридные решения, так как может быть скомбинирован как с первым блоком, так и с классическими подходами интегрирования систем ОДУ.

В качестве системы для теста рассматривается GriMech3.0 - горение метана. Сначала, данный механизм моделируется на уровне одного реактора, затем мы объединяем реакторы и добавляем эффект диффузии между ними. С данной постановкой проверяется точность, скорость, затраты ресурсов и надежность разработанной библиотеки инструментов по сравнению с традиционными методами интегрирования жестких систем ОДУ.