

Санкт–Петербургский государственный университет
Saint–Petersburg State University

Х Поляховские чтения

Материалы
международной научной конференции по механике,
23–27 сентября 2024 г., Санкт–Петербург, Россия

X Polyakhov's Reading

Proceedings
of the International Scientific Conference on Mechanics,
September 23–27, 2024, Saint–Petersburg, Russia

Санкт–Петербург
2024

УДК 531/534+537+539+51-7+52

ББК 22.2

Д 37

Д 37 X Поляховские чтения : Материалы международной научной конференции по механике, 23–27 сентября 2024 г., Санкт–Петербург, Россия. — СПб.: Издательство ВВМ, 2024. 755 с.

ISBN 978-5-9651-1587-7

В сборник включены материалы докладов, представленных на международную научную конференцию по механике «X Поляховские чтения», которая посвящена 300-летию Санкт-Петербургского университета и 300-летию Российской Академии наук. Материалы содержат информацию о проведенных исследованиях и представляют собой статьи небольшого размера, в которых даётся обобщённое изложение полученных результатов. Обсуждаются современные проблемы теоретической и прикладной механики, динамики естественных и искусственных небесных тел, гидроаэромеханики, физико-химической аэромеханики, механики деформируемого твёрдого тела, устойчивости и стабилизации механических и электромеханических систем, биомеханики, физической механики, применения методов искусственного интеллекта в задачах механики и истории механики.

Под редакцией:

Е.В. Кустовой, А.А. Тихонова, О.В. Куновой, Г.В. Павилайнен, А.В. Орехова.

ISBN 978-5-9651-1587-7

© Авторы, 2024

Нейросетевой подход в вычислении коэффициентов скорости химических реакций

Максудова З.М., Савельев А.С., Кустова Е.В.

st076791@student.spbu.ru, aleksey.schumacher@gmail.com, e.kustova@spbu.ru

Санкт-Петербургский государственный университет,

199034, Российская Федерация, Санкт-Петербург, Университетская наб., 7–9

Аннотация. Работа посвящена оптимизации расчета поуровневых коэффициентов скорости химических реакций (реакций диссоциации, рекомбинации и обмена), зависящих от температуры и колебательных состояний реагентов. Используются нейросетевые методы как мощный инструмент для обобщения и ускорения теоретических расчетов. Изложенный в работе подход к представлению и обработке данных при учете электронного возбуждения молекулы позволяет достичь ускорения вычислений на 1–2 порядка без существенных потерь точности.

Ключевые слова: коэффициенты скорости химической реакции, поуровневая кинетика, оптимизация численных расчётов, нелинейная регрессия, нейронные сети.

Введение. Изучение коэффициентов скорости химических реакций в поуровневом приближении важно для моделирования неравновесных высокотемпературных течений (см. работы [1, 2, 3]). Однако большинство моделей ограничиваются учетом только состояний распадающейся или обменивающейся молекулы, не учитывая при этом состояния остальных участников столкновения и продуктов реакции. В недавнем исследовании [4] с учетом работы [5] была разработана обобщенная модель для вычисления коэффициентов скорости химических реакций в поуровневом приближении, которая позволяет учитывать колебательное и электронное возбуждение любого числа реагентов и продуктов реакции. Кроме того, было обнаружено, что модели Маррона–Тринора [6] и Алиата [7] являются частными предельными случаями данной формулы. Недостатком модели [4] является высокая вычислительная сложность, поэтому для ее применения в практических задачах необходима оптимизация расчетов.

Теоретическая модель. Согласно работе [4], обобщенная формула для вычисления коэффициентов скорости реакций диссоциации и обмена с учетом колебательного и электронного возбуждения всех участников реакции представляется следующим образом:

$$k_{V_r \rightarrow V_p}^{\text{ex,diss}} = k^{\text{eq}}(T) \cdot B(T) \cdot \exp \left(- \frac{\Delta E_{V_r \rightarrow V_p} \cdot \Theta(\Delta E_{V_r \rightarrow V_p})}{k} \left(\frac{1}{T} + \frac{1}{U} \right) \right), \quad (1)$$

$$\Delta E_{V_r \rightarrow V_p} = E_a + E_p - E_r, \quad (2)$$

где k — постоянная Больцмана, V_r, V_p — внутренние состояния реагентов и продуктов реакции, E_r, E_p — соответствующие энергии, $\Theta(x)$ — функция Хевисайда, E_a — энергия активации реакции, T — температура, U — параметр модели, имеющий размерность температуры, $k^{\text{eq}}(T)$ — равновесный коэффициент скорости реакции, определяемый по закону Аррениуса, B — нормирующий множитель:

$$B(T) = \left(\sum_{V_r^*, V_p^*} \left[\exp \left(- \frac{\Delta E_{V_r^* \rightarrow V_p^*} \cdot \Theta(\Delta E_{V_r^* \rightarrow V_p^*})}{k} \left(\frac{1}{T} + \frac{1}{U} \right) \right) \prod_{l=1}^{M_r} n_{V_{r,l}^*}^{\text{eq}} \right] \right)^{-1}, \quad (3)$$

M_r — число реагентов, $n_{V_{r,l}^*}^{\text{eq}}$ — приведенное равновесное распределение Больцмана l -го реагента при температуре T .

При вычислении нормирующего множителя необходимо суммировать экспоненты от энергии и температуры по всем возможным энергетическим состояниям участников реакции (3). Если ограничиваться учетом только колебательного возбуждения распадающейся молекулы в воздухе, количество суммируемых экспонент составляет несколько десятков. Однако при учете всех колебательных состояний всех частиц, участвующих в реакции, нам придется рассматривать полное декартово произведение колебательных состояний, что приведет к десяткам и сотням тысяч слагаемых, даже без учета электронного возбуждения. Подобная проблема большого числа слагаемых возникает и при моделировании более сложных газов.

Применение нейросетевого подхода. В недавних работах [8, 9] использование алгоритмов машинного обучения показало хорошие результаты в оптимизации различных задач неравновесной гидроаэромеханики. Повысить эффективность расчета коэффициентов скорости химических реакций может полиномиальное приближение, но оно имеет недостаток: в отличие от универсальной теоретической модели, которую можно применять для любого колебательного спектра молекулы и любой степени детализации расчетов, предложенный метод требует отдельного исследования и создания большого количества формул для каждого конкретного случая. Этот подход может значительно ускорить проведение систематических расчетов с фиксированными химическими моделями, однако он неудобен с исследовательской точки зрения. В настоящей работе было принято решение оценить возможность применения нейронных сетей для предсказания коэффициентов скорости химических реакций.

В качестве входных данных предлагается использовать температуру газа, тип реакции (O_2+O , O_2+O_2 , N_2+N , N_2+O , N_2+N_2 , $\text{NO}+\text{N}$ или $\text{NO}+\text{O}$), а также энергию нулевого уровня для молекул O_2 , NO , N_2 . Для предсказания логарифмов всех коэффициентов была реализована архитектура Feedforward

Neural Network (FNN), представленная на рис. 1. В случае учета колебательно-электронного возбуждения размерность исследуемых данных увеличивается: для каждого электронного состояния выбранной молекулы реализуется полный спектр колебательных уровней, вплоть до энергии диссоциации. В таком случае можно распрямить данные (преобразование Flatten) или использовать Multi-Head подход, который сохраняет идеи одномерного случая, но на последнем слое использует несколько выводов, соответствующих электронным состояниям молекулы (см. рис. 2).

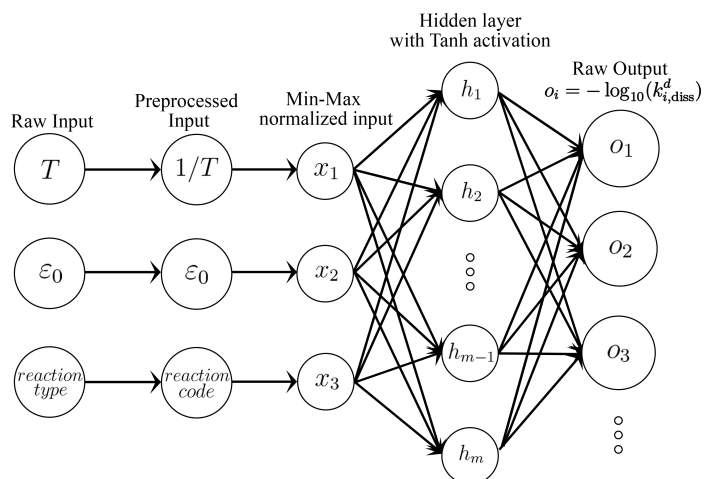


Рис. 1. FNN сеть с одномерными данными на выходе.

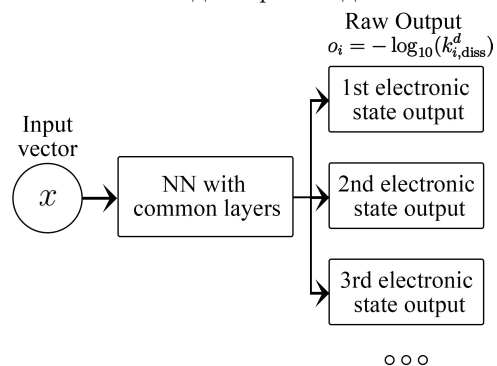


Рис. 2. Multi-Head сеть для учета электронного возбуждения.

Результаты исследования. Описанный в данной работе подход к представлению и обработке данных был реализован для реакций диссоциации в воздухе в диапазоне температур от 1000 К до 10000 К. Подход легко масштабируется и, например, при учете электронного возбуждения молекулы, позволяет добиться выигрыша по времени на 1–2 порядка с относительной процентной ошибкой не более 10%. В итоге данное исследование показало, что использование нейронных сетей позволяет получать коэффициенты скорости химических реакций с высокой степенью точности без проведения прямых расчетов по ресурсоемким теоретическим формулам непосредственно в рабочем коде. В то же время такой результат достигается путем серьезной предварительной работы и требует получения больших массивов предварительных данных, описывающих все варианты использования формул.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 22-11-00078.

Литература

- [1] Esposito F., Armenise I., Capitta G., Capitelli, M. O–O₂ state-to-state vibrational relaxation and dissociation rates based on quasiclassical calculations // *Chemical Physics*. 2008. Vol. 351. Iss. 1. P. 91–98. doi: 10.1016/j.chemphys.2008.04.004
- [2] Baluckram V. T., Andrienko D. A. First-principle simulation of vibrational activation and dissociation in oxygen shock flows // *AIAA Scitech 2021 Forum*. 2021. Vol. 2021. Art. 0447. doi: 10.2514/6.2021-0447
- [3] Armenise I., Esposito F. Dissociation-recombination models in hypersonic boundary layer O₂/O // *Chemical Physics*. 2012. Vol. 398. P. 104–110. doi: 10.1016/j.chemphys.2007.05.015
- [4] Kustova E., Savelev A. Generalised model for state-resolved chemical reaction rate coefficients in high-temperature air // *Journal of Physics: Conference Series*. 2021. Vol. 1959. Iss. 1. Art. 012033.
- [5] Arsentiev I., Loukhovitski B., Starik A. Application of state-to-state approach in estimation of thermally nonequilibrium reaction rate constants in mode approximation // *Chemical Physics*. 2012. Vol. 398. P. 73–80. doi: 10.1088/1742-6596/1959/1/012033
- [6] Marrone P. V., Treanor C. E. Chemical Relaxation with Preferential Dissociation from Excited Vibrational Levels // *Phys. Fluids*. 1963. Vol. 6. Iss. 9. P. 1215–1221. doi: 10.1063/1.1706888
- [7] Aliat A. State-to-state dissociation–recombination and chemical exchange rate coefficients in excited diatomic gas flows // *Physica A*. 2008. Vol. 387. P. 4163–4182. doi: 10.1016/j.physa.2008.02.004
- [8] Гориховский В. И., Кустова Е. В. Нейросетевой подход к описанию колебательной кинетики углекислого газа // *Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия*. 2022. Т. 9. № 4. С. 665–678. doi: 10.21638/spbu01.2022.409

- [9] Campoli L., Kustova E., Maltseva P. Assessment of Machine Learning Methods for State-to-State Approach in Nonequilibrium Flow Simulations // Mathematics. 2022. Vol. 10. Iss. 6. Art. 928. doi: 10.3390/math10060928

Машинное обучение и определение момента перехода к следующей стадии ползучести

Орехов А.В.

a.orekhov@spbu.ru

Санкт-Петербургский государственный университет,
199034, Российская Федерация, Санкт-Петербург, Университетская наб., 7–9

Аннотация. Рассматривается задача аналитического определения момента перехода к следующей стадии ползучести в классическом случае, описанном акад. Ю. Н. Работновым. Моменты перехода к новой стадии ползучести определяются как особые точки (аномалии) соответствующей кривой. Обнаружение этих аномалий возможно методами машинного обучения без учителя при помощи аппроксимационно-оценочных критериев. Приведены результаты вычислительного эксперимента.

Ключевые слова: кривая ползучести, машинное обучение без учителя, обнаружение аномалий, метод локтя, аппроксимационно-оценочные критерии.

Ползучесть — это, как правило, медленная, происходящая во времени, деформация твёрдого тела под воздействием постоянной нагрузки. Она описывается так называемой «кривой ползучести», которая представляет собой зависимость деформации от времени при постоянных температуре и силовых воздействиях. Механизмы ползучести зависят и от вида материала, и от условий, в которых она происходит. Её физический механизм имеет преимущественно диффузионную природу, чем и отличается от пластической деформации, которая связана с быстрым скольжением вдоль атомных плоскостей зёрен поликристалла [1, 2].

Классическую кривую ползучести (см. рис. 1) условно делят на три участка (стадии): участок неустановившейся ползучести (стадия I), когда скорость ползучести замедляется, участок установившейся ползучести, когда деформация

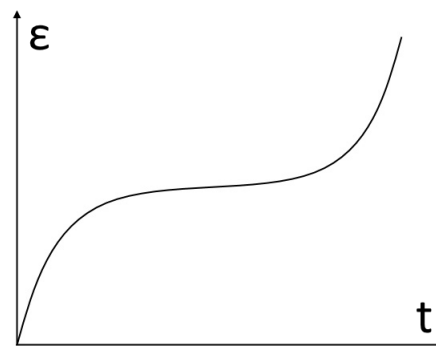


Рис. 1. Классическая кривая ползучести (по Работнову) [2].

Научное издание

X Поляховские чтения

Материалы международной научной конференции по механике

Компьютерная верстка: Кунова О.В., Орехов А.В.

Подписано в печать с оригинал-макетов авторов 04.09.2024. Формат $60 \times 84^{1/8}$
Бумага офсетная. Гарнитура Century Schoolbook. Печать офсетная и цифровая.
Усл.печ.л 87,65. Тираж 60 экз. Заказ № 2355.

Отпечатано в Издательстве ВВМ
198095, Санкт-Петербург, ул. Швецова, 41, литер А, пом. 06н