

Нейросетевой подход к описанию колебательной кинетики углекислого газа*

В. И. Гориховский, Е. В. Кустова

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

Для цитирования: Гориховский В. И., Кустова Е. В. Нейросетевой подход к описанию колебательной кинетики углекислого газа // Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия. 2022. Т. 9 (67). Вып. 4. С. 665–678.
<https://doi.org/10.21638/spbu01.2022.409>

Работа посвящена моделированию неравновесной колебательной кинетики углекислого газа с учетом сложных механизмов релаксации и межмодовых обменов энергией. Изучены возможности применения методов машинного обучения для повышения производительности численного моделирования неравновесных течений углекислого газа. Рассмотрены различные стратегии повышения эффективности гибридной четырехтемпературной модели кинетики CO_2 . Наиболее перспективным оказался предложенный авторами нейросетевой подход к расчету скорости колебательной релаксации в каждой из мод. Для задачи о пространственно однородной релаксации проведены оценки погрешности и вычислительных затрат разработанного алгоритма, продемонстрирована его высокая точность и эффективность. Впервые проведено моделирование течения углекислого газа за плоской ударной волной в полном поуровневом приближении. Выполнено сравнение с результатами, полученными в рамках гибридного четырехтемпературного подхода, показана эквивалентность подходов. Это позволяет рекомендовать построенные многотемпературные приближения в качестве основного инструмента решения задач неравновесной кинетики и газовой динамики. Гибридный четырехтемпературный подход, использующий нейросетевой способ вычисления релаксационных членов, показал ускорение численного моделирования по времени более чем на порядок при сохранении точности. Данная методика может быть рекомендована для решения сложных многомерных задач неравновесной газодинамики, включающих поуровневые химические реакции.

Ключевые слова: скорость колебательной релаксации, поуровневая и многотемпературная кинетика, углекислый газ, нейронные сети, машинное обучение.

1. Введение. Исследование неравновесной кинетики углекислого газа необходимо для моделирования входа спускаемых аппаратов в атмосферы Марса и Венеры, для разработки методов снижения концентрации продуктов техногенной деятельности человека в атмосфере Земли, в химии низкотемпературной плазмы и лазерных технологиях. Особенностью молекулы CO_2 является наличие трех колебательных мод (симметричная, деформационная, антисимметричная), что дает несколько тысяч связанных колебательных состояний и приводит к сложным механизмам обменов колебательной энергией. Детальное поуровневое моделирование,

*Работа выполнена при финансовой поддержке СПбГУ (ID проекта: 93022273). Авторы благодарят А. А. Косареву за предоставленный код для расчета кинетики CO_2 в трехтемпературном приближении, в результате чего был впервые опробован описываемый нейросетевой подход.

© Санкт-Петербургский государственный университет, 2022

основанное на решении жестких дифференциальных уравнений для каждого состояния, необычайно требовательно к вычислительным ресурсам. Следовательно, возникает необходимость разработки сокращенных моделей и эффективных численных методов.

Для снижения вычислительных затрат при моделировании неравновесных течений CO_2 построено несколько современных многотемпературных моделей, учитывающих межмодовый обмен энергией [1, 2]. Основная проблема при использовании многотемпературных моделей — корректное моделирование скорости колебательной релаксации с учетом различных механизмов энергообмена. В разработанной в [2] гибридной четырехтемпературной модели предложено вычислять релаксационные члены на основе осредненных поуровневых скоростей процессов, из-за этого модель сохраняет точность, однако теряет вычислительную эффективность.

Наравне с традиционными численными методами в последние годы популярен подход, заключающийся в обучении нейронных сетей для решения систем дифференциальных уравнений [3, 4]. В подобных методах нейронные сети обучаются на основе ряда численных решений системы дифференциальных уравнений и позволяют эффективно вычислять решения систем для различных наборов входных условий параметров с высокой степенью достоверности. Хотя такой подход неприменим при решении задачи поуровневой кинетики из-за высокой размерности системы, его использование представляется перспективным для многотемпературных моделей.

Помимо явного использования нейронных сетей для решения систем дифференциальных уравнений методы машинного обучения могут применяться для нахождения локальных параметров течения или аппроксимации различных характеристик. Например, нейронные сети применялись для нахождения коэффициентов переноса [5, 6]. В работах [7, 8] рассматривалось применение ряда методов машинного обучения в поуровневом моделировании скорости колебательной релаксации в смесях компонентов воздуха, однако полученные результаты не удается использовать в многотемпературных подходах. Более того, при моделировании кинетики углекислого газа методы машинного обучения ранее не применялись. Единственная попытка в работе [9] была связана со спектральной кластеризацией энергетических уровней.

Цель настоящей работы — оптимизация расчета скорости колебательной релаксации в гибридных многотемпературных моделях на основе методов машинного обучения, оценка точности и эффективности нейросетевых подходов при решении задач неравновесной газовой динамики, численное моделирование задач о пространственно однородной релаксации и неравновесном течении углекислого газа за плоской ударной волной.

2. Теоретическая модель. Применение полной поуровневой модели [10, 11] при изучении кинетики CO_2 вызывает значительные сложности в связи с необходимостью численного решения большого числа дифференциальных уравнений для заселенностей колебательных уровней. Поэтому на практике часто используются многотемпературные подходы, основанные на том, что скорости обменов колебательной энергией могут различаться на несколько порядков, что приводит к установлению квазистационарных колебательных распределений в различных колебательных модах. Для моделирования кинетики углекислого газа наиболее часто используются многотемпературные подходы [2, 12] со скоростями колебательной релаксации, описываемыми приближенными формулами Ландау — Теллера. Ограничения данных подходов обсуждаются в [1, 2, 11]. В частности, в [1] показано, что модель Ландау —

Теллера пригодна лишь при слабых отклонениях от равновесия, а в [11] сделан вывод о том, что учет различных температур в симметричной и деформационной модах обеспечивает наилучшее согласие с результатами полного поуровневого моделирования. В данной работе рассматривается четырехтемпературная модель.

Четырехтемпературная модель основана на предположении о том, что внутримодовые VV_m -обмены ($m = 1, 2, 3$) колебательной энергией являются быстрыми процессами, а все межмодовые VV_{m-k} -обмены и VT_m -переходы колебательной энергии в поступательную — медленными [2]. При таком условии набор макропараметров для замкнутого описания неравновесного течения включает плотность ρ и скорость газа $\mathbf{v}$, полную удельную энергию U , температуры всех колебательных мод T_1, T_2, T_3 . При этом заселенности колебательных уровней задаются квазистационарными распределениями Тринора (для ангармонического осциллятора) или Больцмана (для гармонического осциллятора). Распределение Тринора в CO_2 имеет вид [11]

$$n_{i_1, i_2, i_3} = \frac{n s_{i_1, i_2, i_3}}{Z^{\text{vibr}}(T, T_1, T_2, T_3)} \exp \left(-\frac{\varepsilon_{i_1, i_2, i_3} - (i_1 \varepsilon_{1,0,0} + i_2 \varepsilon_{0,1,0} + i_3 \varepsilon_{0,0,1})}{k_B T} - \frac{i_1 \varepsilon_{1,0,0}}{k_B T_1} - \frac{i_2 \varepsilon_{0,1,0}}{k_B T_2} - \frac{i_3 \varepsilon_{0,0,1}}{k_B T_3} \right), \quad (1)$$

где n — числовая плотность газа; $s_{i_1, i_2, i_3} = i_2 + 1$ — колебательный статистический вес; $\varepsilon_{i_1, i_2, i_3}$ — колебательная энергия уровня (i_1, i_2, i_3) ; k_B — постоянная Больцмана; Z^{vibr} — колебательная статистическая сумма. В такой постановке полная удельная энергия является функцией температуры газа и всех колебательных температур. Для гармонического осциллятора первые слагаемые под экспонентой равны нулю, и распределение (1) переходит в распределение Больцмана.

Система уравнений для идеального газа содержит уравнения сохранения массы, количества движения и полной энергии, дополненные релаксационными уравнениями для удельных чисел колебательных квантов в различных модах W_m :

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (2)$$

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} + \nabla p = 0, \quad (3)$$

$$\rho \frac{dU}{dt} + p \nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (4)$$

$$\rho \frac{dW_m}{dt} = R_m, \quad m = 1, 2, 3, \quad (5)$$

где p — давление; R_m — скорость релаксации в m -й моде. Удельные числа колебательных квантов W_m в m -й моде вводятся формулами:

$$\rho W_m(T, T_1, T_2, T_3) = \sum_{i_1, i_2, i_3} i_m n_{i_1, i_2, i_3}, \quad m = 1, 2, 3, \quad (6)$$

i_m — колебательное квантовое число, соответствующее m -й моде. Введение полной удельной энергии U и удельного числа колебательных квантов W_m в каждой моде колебаний в качестве макроскопических переменных эквивалентно введению температуры газа T и трех колебательных температур симметричной, деформационной и асимметричной мод молекул CO_2 (T_1, T_2, T_3).

Важной особенностью представленной многотемпературной (4Т) модели является отказ от использования приближенных формул Ландау — Теллера для расчета релаксационных членов R_m . В данной модели они вычисляются на основании осреднения поуровневых релаксационных членов R_{i_1, i_2, i_3}^{vibr} [2]:

$$R_m = \sum_{i_1, i_2, i_3} i_m R_{i_1, i_2, i_3}^{vibr}, \quad m = 1, 2, 3. \quad (7)$$

Например, для VT-обмена в деформационной моде релаксационный член имеет вид

$$R_{i_1, i_2, i_3}^{VT_2} = n_{i_1, i_2-1, i_3} k_{i_2-1 \rightarrow i_2} + n_{i_1, i_2+1, i_3} k_{i_2+1 \rightarrow i_2} - n_{i_1, i_2, i_3} (k_{i_2 \rightarrow i_2-1} + k_{i_2 \rightarrow i_2+1}), \quad (8)$$

где $k_{i \rightarrow i'}$ — коэффициенты скорости соответствующих переходов.

Преимуществом такого гибридного подхода является хорошее совпадение результатов моделирования неравновесных течений углекислого газа с результатами полного поуровневого расчета, а также существенное сокращение числа дифференциальных уравнений: от нескольких тысяч до шести. Тем не менее недостатком гибридного подхода являются высокие вычислительные затраты при расчете релаксационных членов, сравнимые с использованием полного поуровневого подхода.

Для решения системы (2)–(5) требуется вычисление коэффициентов скорости переходов энергии в каждом из колебательных состояний. В некоторых ситуациях можно использовать экспериментальные данные, однако эти данные ограничены нижними состояниями и низкими температурами (меньше 2000 К) и описывают не все типы энергообменов. При отсутствии результатов экспериментальных данных приходится использовать приближенные теоретические модели. В настоящей работе коэффициенты скорости переходов энергии находятся из формул Шварца, Славского и Герцфельда [13], обобщенных на случай ангармонического осциллятора (модель SSH). Для повышения эффективности расчета коэффициентов используется описанная в предыдущей работе [14] структура данных.

3. Нейросетевые подходы к оптимизации расчетов. Рассмотрим некоторые подходы к оптимизации поставленной выше задачи. Первая выбранная стратегия предполагала применение методов машинного обучения к непосредственному решению системы дифференциальных уравнений. Классическим способом оптимизации решения динамической системы является замена решателя на нейронную сеть, обученную на ряде решений. В работе [4] показана эффективность такого подхода для систем обыкновенных дифференциальных уравнений и систем уравнений в частных производных. Однако в случае с жесткими системами приходится брать слишком большую выборку значений и проводить обучение в течение большого числа эпох, что приводит к проблеме переобучения: ситуации, когда нейронная сеть дает точные предсказания на элементах из тестовой выборки и существенные отклонения на остальных значениях.

Альтернативным подходом к ускорению моделирования кинетики является использование алгоритмов искусственного интеллекта для быстрого выполнения вычислительно сложных шагов численного метода, таких как расчет релаксационных членов. В [8] было показано, что методы машинного обучения значительно менее чувствительны к увеличению размерности системы дифференциальных уравнений, чем традиционные численные алгоритмы. Анализ возможности использования методов машинного обучения для предсказания значений релаксационных членов в

системе уравнений полной поуровневой кинетики углекислого газа показал, что такой подход не даст положительного эффекта, поскольку количество вычисляемых релаксационных членов асимптотически равняется числу действий, выполняемых при явном их расчете. Таким образом, более реалистичным является улучшение алгоритма моделирования кинетики углекислого газа в гибридном 4-температурном приближении за счет аппроксимации значений релаксационных членов.

Наиболее распространенными подходами для аппроксимации функций с помощью алгоритмов машинного обучения являются: регрессионный анализ; методы, основанные на алгоритме k ближайших соседей (k -NN); нейросетевой подход. Нахождение регрессионной модели, позволяющей достичь высокой точности аппроксимации для релаксационных членов каждой из мод, является крайне сложной задачей вследствие сильной нелинейности зависимости этих значений от температур. Простые линейные и нелинейные методы применимы в узком диапазоне температур (интервал не превышает 50 K). Для охвата всей четырехмерной области значений температур нужно обучить тысячи простых регрессионных моделей для каждого уровня энергии, и использование такого подхода не будет эффективнее, чем прямое вычисление.

В работе [7] рассматривалась применимость аппроксимаций, основанных на методах k -NN и градиентного бустинга, для расчета релаксационных членов при моделировании кинетики бинарной смеси в поуровневом приближении. По результатам сравнения подход, основанный на k -NN, показал себя наиболее эффективным при расчетах, базирующихся на коэффициентах скорости переходов энергии по вычислительно затратной модели нагруженного гармонического осциллятора (FHO) [1, 15]. Однако при использовании экономичной SSH-теории явный расчет значительно более эффективен, чем рассмотренные методы машинного обучения. Поскольку в данной работе используются модель SSH и основанные на ее регрессии аппроксимации, был сделан вывод о нецелесообразности применения методов k -NN и градиентного бустинга.

Рассмотрим иную стратегию, основанную на нейросетевом подходе. Согласно теореме Цыбенко (Universal Approximation Theorem), искусственная нейронная сеть прямой связи с одним скрытым слоем может аппроксимировать любую непрерывную функцию многих переменных с любой точностью. Условия для такой аппроксимации: достаточное количество нейронов скрытого слоя, удачный подбор весов между входными нейронами и нейронами скрытого слоя, весов между связями от нейронов скрытого слоя и выходным нейроном и смещений для нейронов входного слоя.

Для численных экспериментов использовались три нейронных сети со следующей топологией (рис. 1):

- однослойная модель топологии сети с прямым доступом, в связи с тем, что нейронная сеть применяется в качестве регрессионной модели;
- размер входного слоя соответствует числу входных переменных — четыре значения температуры;
- размер выходного слоя соответствует числу искомых значений — один релаксационный член для соответствующей колебательной моды;
- скрытый слой состоит из 100 нейронов для первой и второй моды и 200 для третьей;
- в качестве активационной функции использовался гиперболический тангенс.

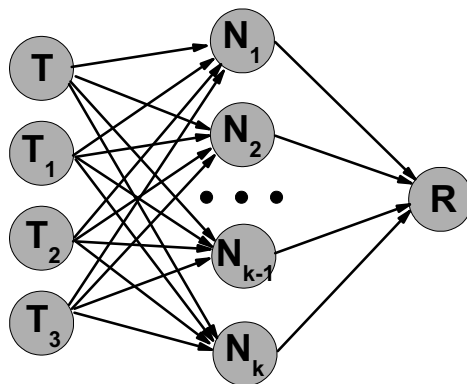


Рис. 1. Граф топологии нейронной сети.

Для обучения нейронных сетей были сгенерированы выборки, состоящие примерно из 5,000,000 векторов температур (T, T_1, T_2, T_3) и соответствующих им релаксационных членов ($R_1(T, T_1, T_2, T_3), R_2(T, T_1, T_2, T_3), R_3(T, T_1, T_2, T_3)$). Эти векторы выбирались с учетом плотности распределения значений температур, возникающих на шагах решения задачи моделирования пространственно однородного углекислого газа в 4-температурном приближении. Обучение нейронной сети проводилось на языке *Python* с помощью библиотеки *scilearn*. Создание обучающей и тестировочной выборки — вычислительно крайне затратная по времени операция — занимает около двух недель. Обучение каждой нейронной сети требует около 4 ч. При этом обучение нейронных сетей выполняется только один раз, а результаты обучения используются при решении различных задач.

Обученная нейронная сеть позволяет получать предсказанные значения релаксационных членов, близкие к точным, для температур, отдаленных от границ интервала, на котором проводилось обучение. При значениях температуры от 2200 до 8000 К разница между предсказанными и вычисленными явно значениями релаксационных членов не превышает 1 %. Попытка расширения области с подобной точностью приводит к переобучению нейронной сети. Поэтому, если в рассматриваемой гидродинамической задаче диапазон изменения температур предполагается шире, необходимо построение нескольких нейронных сетей, соответствующих различным подмножествам полного диапазона температур. При этом использование нескольких нейронных сетей не приводит к заметному усложнению задачи и уменьшению скорости расчета.

Полученные нейронные сети были интегрированы в код для моделирования пространственно однородной релаксации углекислого газа в гибридном 4-температурном приближении. Для этого на основе полученных весовых коэффициентов нейронные сети были реализованы на языке C++. После проверки нейронных сетей на тестовых выборках было проведено моделирование пространственно однородного углекислого газа в четырехтемпературном приближении на основе предсказанных значений релаксационных членов. Данные были разделены на обучающую и тестовую выборку в пропорции 2 : 3. Относительная погрешность решения, основанного на аппроксимации релаксационных членов, не превышает 4 %.

4. Результаты и обсуждение. При численном моделировании пространственно однородного углекислого газа в поуровневом и четырехтемпературном приближении использовался код, основанный на численной схеме AT-EBDF-4 [10]. Было рассмотрено несколько тестовых случаев с различными начальными условиями, характерными для разных типов течений. Во всех случаях начальное давление принималось равным 100 Па. Начальные значения температуры и колебательных температур каждой из мод:

- TC1: $T = 5000\text{ K}$, $T_1 = T_2 = T_3 = 1000\text{ K}$;
- TC2: $T = 3000\text{ K}$, $T_1 = T_2 = T_3 = 1000\text{ K}$;
- TC3: $T = 490\text{ K}$, $T_1 = T_2 = 490\text{ K}$, $T_3 = 2000\text{ K}$;
- TC4: $T = 400\text{ K}$, $T_1 = T_2 = 500\text{ K}$, $T_3 = 1070\text{ K}$;
- TC5: $T = 3000\text{ K}$, $T_1 = 300\text{ K}$, $T_2 = 700\text{ K}$, $T_3 = 1200\text{ K}$.

На рис. 2 приведены зависимости от времени температур T , T_1 , T_2 , T_3 для случаев TC1 и TC2, соответствующих условиям в ударных волнах. Температуры рассчитаны в гибридном 4Т-приближении с явным вычислением релаксационных членов и с использованием нейросетевого подхода. Решения, полученные с использованием нейронных сетей, хорошо согласуются с точными 4Т-решениями: максимальная ошибка для всех температур не превышает 1.5 %, что является очень хорошим результатом. В обоих случаях самая быстрая релаксация наблюдается в деформационной моде, а антисимметричная мода выходит на равновесие значительно медленнее остальных. При повышении начальной температуры скорости релаксации первой и второй мод становятся близки, а время выхода на полное равновесие уменьшается.

Теперь рассмотрим два примера с начальными условиями, характерными для разрядов (рис. 3). Случай TC3 соответствует капиллярным разрядам в лазерных смесях; при этом антисимметричная мода существенно возбуждена, а симметричная и деформационная находятся в равновесии с поступательно-вращательными модами. Распределение температур, рассчитанное в 4Т-приближении для данного случая, показывает, что в процессе релаксации не происходит нарушения равновесия между T , T_1 и T_2 и релаксация идет через антисимметричную моду (V_{T_3} и межмодовые $V_{V_{2-3-}}$, $V_{V_{1-2-3}}$ -обмены). Тестовый пример TC4 соответствует условиям тлеющего разряда с небольшим возбуждением симметричной и деформационной мод

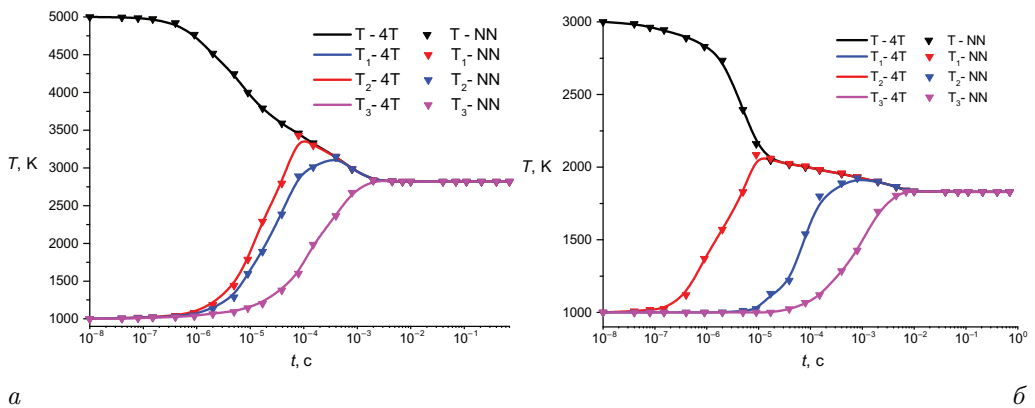
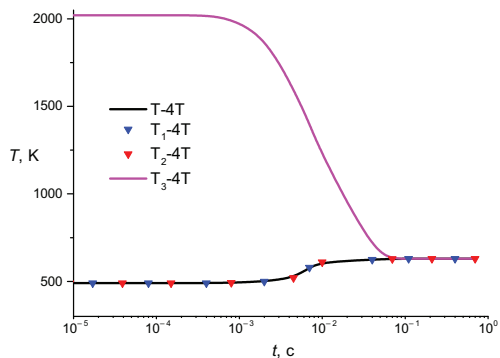
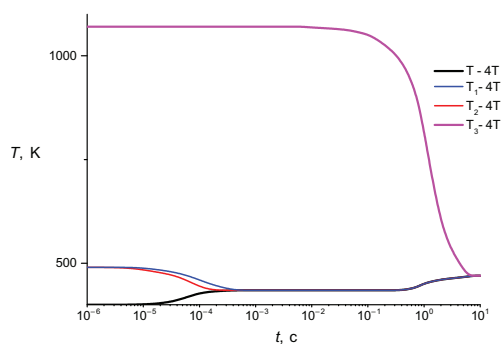


Рис. 2. Распределение температур в гибридном многотемпературном приближении для явного (4Т) и нейросетевого (NN) способов вычисления релаксационных членов в условиях TC1 (а) и TC2 (б).



a



б

Рис. 3. Распределение температур в гибридном многотемпературном приближении для явного способа вычисления релаксационных членов в условиях $TC3$ (а) и $TC4$ (б).

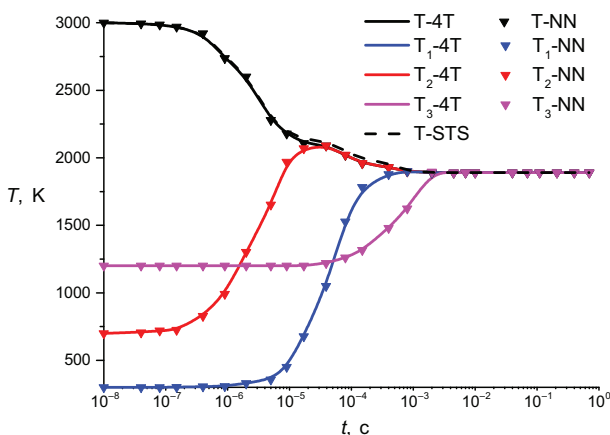


Рис. 4. Распределение температур в поуровневом (STS), гибридном многотемпературном приближении для явного (4Т) и нейросетевого (NN) способов вычисления релаксационных членов в условиях $TC5$.

и существенным возбуждением антисимметричной моды. В этом случае релаксация первой и второй мод происходит быстро — менее чем за микросекунду, в то время как релаксация антисимметричной моды продолжается несколько секунд. Заметна небольшая разница в скорости релаксации T_1 и T_2 ; температура деформационной моды сравнивается с T несколько раньше.

Тестовый пример $TC5$ с существенно различающимися начальными температурами всех мод был выбран для демонстрации работоспособности предложенных подходов. Он не имеет явно выраженного физического аналога, однако может служить тестом на корректность работы кода. Использование всех подходов (полного поуровневого, 4Т с различными способами вычисления релаксационных членов) дает близкие результаты (рис. 4), однако нейросетевой подход значительно более эффективен вычислительно.

Сравнение эффективности различных подходов приведено в табл. 1. При использовании нейросетевого подхода скорость вычисления релаксационных членов в

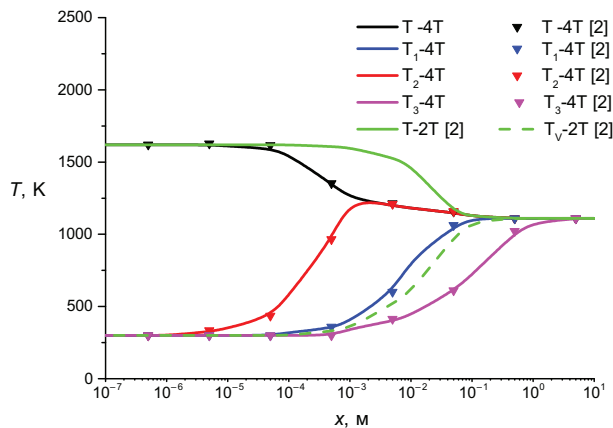


Рис. 5. Распределение температур за фронтом ударной волны. $M=5$. Сравнение с результатами [2].

многотемпературном приближении возросла более чем в 17 раз. Общее решение системы достигается на порядок быстрее. Отметим, что максимальная относительная ошибка решения пространственно однородной задачи с использованием регрессионных формул для нахождения коэффициентов скорости переходов энергии относительно прямого использования формул SSH-теории составляет 2 %, что не превышает погрешность вычислений.

При численном исследовании течения за ударной волной были рассмотрены следующие условия в набегающем потоке: $T_0 = 300$ К, $\rho = 1.18 \cdot 10^{-4}$ кг/м³, $p = 6.66$ Па, число Маха варьировалось от 5 до 10. Заселенности колебательных уровней предполагались равновесными (распределения Больцмана с температурой газа T_0).

Для верификации модели сравним результаты, полученные для $M=5$, с результатами работы [2], где в рамках 4-температурной модели проводились расчеты в пакете MATLAB (рис. 5). Линии на рисунке соответствуют данной работе, символы — результатам [2]. Видно, что результаты хорошо согласуются. Кроме того, на рисунке приведены результаты, полученные для более грубой двухтемпературной модели колебательной релаксации с использованием формул Ландау — Теллера для релаксационных членов [12]. Распределение температуры, полученное в рамках двухтемпературной модели, существенно отличается, релаксация начинается заметно позже, а полное равновесие достигается раньше. Поскольку двухтемпературная модель не учитывает межмодовых обменов энергии, можно сделать вывод о значительном вкладе этих процессов в характер релаксации за ударными волнами.

Таблица 1. Эффективность по времени расчета релаксационных членов ($TIME_R$), времени, затрачиваемого на численный метод ($TIME_{num}$), и общего времени решения системы ($TIME_{sys}$) для полного поуровневого, гибридного 4Т и предсказанного нейронной сетью 4Т подходов в задаче о пространственно однородной релаксации

Подходы	$TIME_R$, с	$TIME_{num}$, с	$TIME_{sys}$, с
STS	1130	370	1507
4Т	890	80	982
NN	65	80	148

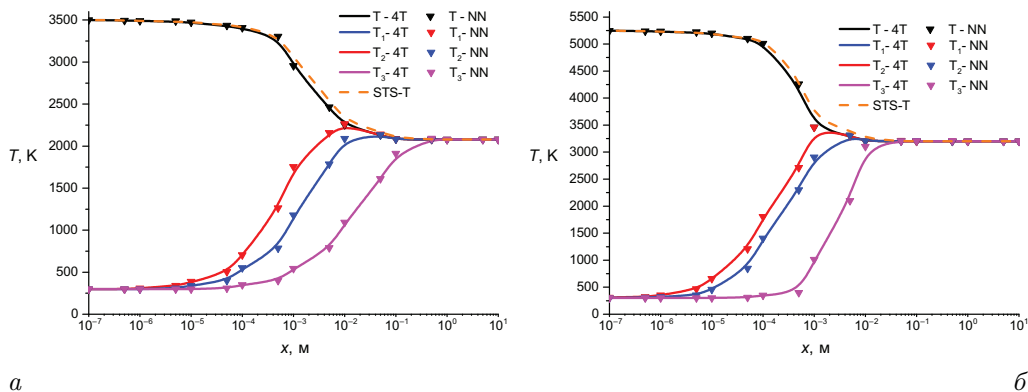


Рис. 6. Распределение температур за фронтом ударной волны при $M=8$ (а) и $M=10$ (б).

На рис. 6 представлено распределение температур за фронтом ударной волны при числах Маха 8 и 10. Сравниваются решения, полученные в рамках полного поуровневого приближения (STS), гибридного многотемпературного с явным расчетом релаксационных членов (4T) и многотемпературного с использованием нейронных сетей (NN). Для поуровневого приближения приводится только температура газа T . Моделирование течения за ударной волной в полном поуровневом приближении ранее не проводилось. Во всех рассмотренных случаях наиболее медленным процессом является колебательная релаксация антисимметричной моды, а наиболее быстрым — релаксация деформационных колебаний. С ростом температуры увеличивается скорость VV_{1-2} -обмена, что ведет к быстрому обмену энергией между первой и второй модами. Поэтому с увеличением числа Маха скорость релаксации в этих модах выравнивается.

Как показало сравнение результатов, все рассмотренные подходы дают близкие распределения температур за ударной волной, среднее отклонение от эталонного поуровневого решения (STS) составляет 2.5–3 %, максимальное — 4–6 % для чисел Маха выше 6. Для более низких чисел Маха значение максимальной относительной ошибки чуть выше (9 %), но абсолютные значения относительных погрешностей близки для всех тестовых случаев. При этом достигнутый при решении задачи выигрыш в производительности оказывается существенным, что подтверждает перспективность использования многотемпературных моделей в комбинации с нейросетевым расчетом скорости релаксации.

В табл. 2 приведено сравнение эффективности решения задачи в полном поуровневом приближении и гибридном многотемпературном приближении с явным и нейросетевым способом вычисления релаксационных членов. Временные затраты на расчет релаксационных членов близки к таковым при решении задачи моделирования пространственно однородной кинетики. Тем не менее время, затрачиваемое на использование численного метода в поуровневом приближении, выросло на порядок, тогда как для гибридной модели эти показатели близки. Это связано с высокой размерностью системы уравнений, из-за которой сильно растет вычислительная сложность решения систем линейных алгебраических уравнений. Многотемпературный подход позволяет избежать этой проблемы и почти вдвое более эффективен при явном вычислении релаксационных членов и в 12 раз более эффективен с применением нейронных сетей. Следовательно, при дальнейшем усложнении задачи, напри-

Таблица 2. Эффективность по времени расчета релаксационных членов ($TIME_R$), времени, затрачиваемого на численный метод ($TIME_{num}$), и общего времени решения системы ($TIME_{sys}$) для полного поуровневого, гибридного 4Т и предсказанного нейронной сетью 4Т подходов в задаче об ударной волне

Подходы	$TIME_R$, с	$TIME_{num}$, с	$TIME_{sys}$, с
STS	1214	1090	2310
4Т	1186	80	1270
NN	106	85	190

мер при моделировании двумерного или трехмерного потока, выгода от применения гибридного подхода и нейронных сетей может вырасти еще в несколько раз.

5. Заключение. Рассмотрены различные стратегии повышения эффективности моделирования кинетики CO_2 с помощью методов машинного обучения. Показано, что применение нейронных сетей к непосредственному решению дифференциальных уравнений не дает желаемого результата. Наиболее перспективным оказывается нейросетевой подход к расчету скорости колебательной релаксации в гибридной многотемпературной модели: скорость решения пространственно однородной задачи увеличилась более чем на порядок.

Впервые проведено моделирование течения CO_2 за ударной волной в полном поуровневом приближении. Проведена оценка точности и эффективности полученных результатов. Проведено сравнение с работами других авторов, показывающее, что отклонение полученных решений не превышает погрешности вычислений. Гибридный 4-температурный подход, использующий нейросетевой способ вычисления релаксационных членов, показал наилучшие результаты по времени при сохранении точности моделирования. Ожидается, что в более сложных двумерных и трехмерных задачах и при учете химических реакций выигрыш будет еще более существенным.

Литература

1. Kustova E. V., Mekhonoshina M. A. Multi-temperature vibrational energy relaxation rates in CO_2 . *Physics of Fluids* **32**, 096101 (2020). <https://doi.org/10.1063/5.0021654>
2. Kosareva A. A., Kunova O. V., Kustova E. V., Nagnibeda E. A. Four-temperature kinetic model for CO_2 vibrational relaxation. *Physics of Fluids* **33** (1), 016103 (2021). <https://doi.org/10.1063/5.0035171>
3. Regazzoni F., Dede' L., Quarteroni A. Machine learning for fast and reliable solution of time-dependent differential equations. *J. Comput. Phys.* **397**, 108852 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2019.07.050>
4. Gorikhovskii V. I., Evdokimova T. O., Poletanskii V. A. Neural networks in solving differential equations. *Journal of Physics: Conference Series* **2308** (1), 012008 (2022). <https://doi.org/10.1088/1742-6596/2308/1/012008>
5. Stokes P. W., Cocks D. G., Brunger M. J., White R. D. Determining cross sections from transport coefficients using deep neural networks. *Plasma Sources Science Technology* **29** (5), 055009 (2020). <http://dx.doi.org/10.1088/1361-6595/ab85b6>
6. Istomin V. A., Kustova E. V. PAIneT: Implementation of neural networks for transport coefficients calculation. *Journal of Physics: Conference Series* **1959** (1), 012024 (2021). <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1959/1/012024>
7. Бушмакова М. А., Кустова Е. В. Моделирование скорости колебательной релаксации с помощью методов машинного обучения. *Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия* **9** (67), вып. 1, 113–125 (2022). <https://doi.org/10.21638/spbu01.2022.111>

8. Campoli L., Kustova E., Maltseva P. Assessment of machine learning methods for state-to-state approaches. *Mathematics* **10** (6), 928 (2022). <https://doi.org/10.3390/math10060928>
9. Sahai A., Lopez B. E., Johnston C. O., Panesi M. Adaptive coarse graining method for energy transfer and dissociation kinetics of polyatomic species. *J. Chem. Phys.*, **147**, 054107 (2017). <https://doi.org/10.1063/1.4996654>
10. Гориховский В. И., Нагнибеда Е. А. Оптимизация моделирования колебательной кинетики углекислого газа в полном поуровневом приближении. *Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия* **7** (65), вып. 3, 527–538 (2020). <https://doi.org/10.21638/spbu01.2020.315>
11. Kunova O. V., Kosareva A. A., Kustova E. V., Nagnibeda E. A. Vibrational relaxation of carbon dioxide in various approaches. *Physical Review Fluids* **5**, 123401 (2020). <https://doi.org/10.1103/PhysRevFluids.5.123401>
12. Park C. *Nonequilibrium Hypersonic Aerothermodynamics*. New York; Chichester; Brisbane; Toronto; Singapore, J. Wiley and Sons (1990).
13. Schwartz R. N., Slawsky Z. I., Herzfeld K. F. Calculation of vibrational relaxation times in gases. *J. Chem. Phys.*, **20** (10), 1591–1599 (1952).
14. Гориховский В. И., Нагнибеда Е. А. Коэффициенты скорости переходов колебательной энергии при столкновениях молекул углекислого газа: оптимизация вычислений. *Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия* **6** (64), вып. 4, 659–671 (2019). <https://doi.org/10.21638/11701/spbu01.2019.402>
15. Adamovich I. V., Macheret S. O., Rich J. W., Treanor C. E. Vibrational energy transfer rates using a forced harmonic oscillator model. *J. Thermophys. Heat Transf.* **12** (1), 57–65 (1998).

Статья поступила в редакцию 6 мая 2022 г.;
доработана 8 июня 2022 г.;
рекомендована к печати 9 июня 2022 г.

Контактная информация:

Гориховский Вячеслав Игоревич — ст. преп.; v.gorikhovskii@spbu.ru

Кустова Елена Владимировна — д-р физ.-мат. наук, проф.; e.kustova@spbu.ru

Neural network approach in modelling vibrational kinetics of carbon dioxide*

V. I. Gorikhovskii, E. V. Kustova

St Petersburg State University, 7–9, Universitetskaya nab., St Petersburg, 199034, Russian Federation

For citation: Gorikhovskii V. I., Kustova E. V. Neural network approach in modelling vibrational kinetics of carbon dioxide. *Vestnik of Saint Petersburg University. Mathematics. Mechanics. Astronomy*, 2022, vol. 9 (67), issue 4, pp. 665–678. <https://doi.org/10.21638/spbu01.2022.409> (In Russian)

The study is devoted to modeling nonequilibrium vibrational kinetics of carbon dioxide taking into account complex mechanisms of relaxation and intermode energy exchanges. The possibilities of using machine learning methods to improve the performance of numerical simulation of non-equilibrium carbon dioxide flows are studied. Various strategies for increasing the efficiency of the hybrid four-temperature model of CO₂ kinetics are considered. The neural network approach proposed by the authors to calculate the rate of vibrational relaxation in each mode turned out to be the most promising. For the problem of spatially homogeneous relaxation, estimates of the error and computational costs of the developed algorithm are carried out, and its high accuracy and efficiency are demonstrated. For the first time, the carbon dioxide flow behind a plane shock wave was simulated in a full

*The work is supported by St Petersburg State University (project ID: 93022273). The authors thank A. A. Kosareva for providing the code for calculating the kinetics of CO₂ in a three-temperature approximation with which the described neural network approach was tested for the first time.

state-to-state approximation. A comparison with the results obtained in the framework of the hybrid four-temperature approach is carried out, and the equivalence of the approaches is shown. This makes it possible to recommend developed multitemperature approximations as the main tool for solving problems of nonequilibrium kinetics and gas dynamics. The hybrid four-temperature approach using the neural network method for calculating relaxation terms showed the acceleration of numerical simulation in time by more than an order of magnitude, while maintaining accuracy. This technique can be recommended for solving complex multidimensional problems of nonequilibrium gas dynamics, including state-to-state chemical reactions.

Keywords: vibrational relaxation rate, state-to-state and multi-temperature kinetics, artificial neural network, carbon dioxide, machine learning.

References

1. Kustova E. V., Mekhonoshina M. A. Multi-temperature vibrational energy relaxation rates in CO₂. *Physics of Fluids* **32**, 096101 (2020). <https://doi.org/10.1063/5.0021654>
2. Kosareva A. A., Kunova O., Kustova E., Nagnibeda E. Four-temperature kinetic model for CO₂ vibrational relaxation. *Physics of Fluids* **33** (1), 016103 (2021). <https://doi.org/10.1063/5.0035171>
3. Regazzoni F., Dede' L., Quarteroni A. Machine learning for fast and reliable solution of time-dependent differential equations. *J. Comput. Phys.* **397**, 108852 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2019.07.050>
4. Gorikhovskii V. I., Evdokimova T. O., Poletanskii V. A. Neural networks in solving differential equations. *Journal of Physics: Conference Series* **2308** (1), 012008 (2022). <https://doi.org/10.1088/1742-6596/2308/1/012008>
5. Stokes P. W., Cocks D. G., Brunger M. J., White R. D. Determining cross sections from transport coefficients using deep neural networks. *Plasma Sources Science Technology* **29** (5), 055009 (2020). <http://dx.doi.org/10.1088/1361-6595/ab85b6>
6. Istomin V. A., Kustova E. V. PAINeT: Implementation of neural networks for transport coefficients calculation. *Journal of Physics: Conference Series* **1959** (1), 012024 (2021). <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1959/1/012024>
7. Bushmakova M. A., Kustova E. V. Modeling the vibrational relaxation rate using machine-learning methods. *Vestnik of Saint Petersburg University. Mathematics. Mechanics. Astronomy* **9** (67), iss. 1, 113–125 (2022). <https://doi.org/10.21638/spbu01.2022.111> (In Russian) [Eng. transl.: *Vestnik St Petersburg University. Mathematics*, **55**, iss. 1, 87–95 (2022). <https://doi.org/10.1134/S1063454122010022>].
8. Campoli L., Kustova E., Maltseva P. Assessment of machine learning methods for state-to-state approaches. *Mathematics*, **10** (6), 928 (2022). <https://doi.org/10.3390/math10060928>
9. Sahai A., Lopez B. E., Johnston C. O., Panesi M. Adaptive coarse graining method for energy transfer and dissociation kinetics of polyatomic species. *J. Chem. Phys.*, **147**, 054107, 2017. <https://doi.org/10.1063/1.4996654>
10. Gorikhovskii V. E., Nagnibeda E. A. Optimization of CO₂ vibrational kinetics modeling in the full state-to-state approach. *Vestnik of Saint Petersburg University. Mathematics. Mechanics. Astronomy* **7** (65), iss. 3, 527–538 (2020). <https://doi.org/10.21638/spbu01.2020.315> (In Russian) [Eng. transl.: *Vestnik St Petersburg University. Mathematics* **53**, iss. 3, 358–365 (2020). <https://doi.org/10.1134/S1063454120030085>].
11. Kunova O. V., Kosareva A. A., Kustova E. V., Nagnibeda E. A. Vibrational relaxation of carbon dioxide in various approaches. *Physical Review Fluids* **5**, 123401 (2020). <https://doi.org/10.1103/PhysRevFluids.5.123401>
12. Park C. *Nonequilibrium Hypersonic Aerothermodynamics*. New York; Chichester; Brisbane; Toronto; Singapore, J. Wiley and Sons (1990).
13. Schwartz R. N., Slawsky Z. I., Herzfeld K. F. Calculation of vibrational relaxation times in gases. *J. Chem. Phys.*, **20**, 1591–1599 (1952).
14. Gorikhovskii V. I., Nagnibeda E. A. Energy exchange rate coefficients in modeling carbon dioxide kinetics: Calculation optimization. *Vestnik of Saint Petersburg University. Mathematics. Mechanics. Astronomy* **6** (64), iss. 1, 659–671 (2019). <https://doi.org/10.21638/11701/spbu01.2019.402> (In Russian) [Eng. transl.: *Vestnik St Petersburg University, Mathematics* **52**, iss. 4, 428–435 (2019). <https://doi.org/10.1134/S1063454119040046>].

15. Adamovich I. V., Macheret S. O., Rich J. W., Treanor C. E. Vibrational energy transfer rates using a forced harmonic oscillator model. *J. Thermophys. Heat Transfer* **12** (1), 57–65 (1998).

Received: May 6, 2022

Revised: June 8, 2022

Accepted: June 9, 2022

Authors' information:

Viacheslav I. Gorikhovskii — v.gorikhovskii@spbu.ru

Elena V. Kustova — e.kustova@spbu.ru