

НЕЙРОСЕТЕВОЙ ПОДХОД В МОДЕЛИРОВАНИИ ИСПАРЕНИЯ КАПЛИ ЖИДКОГО КИСЛОРОДА В АТМОСФЕРЕ ГАЗООБРАЗНОГО ВОДОРОДА

А. З. Закрия^{1,a}, В. В. Тюренкова^{1,2,b}

¹ Федеральное государственное автономное учреждение «Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», г. Москва, Российская Федерация

² Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, г. Москва, Российская Федерация

^a ORCID: <https://orcid.org/0009-0008-4772-5662>, azzakria2107@gmail.com

^b ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8791-1813>, tyurenkova.v.v@yandex.ru

Аннотация: в работе представлен нейросетевой подход к моделированию неравновесного испарения капли жидкого кислорода в атмосфере газообразного водорода. Разработана глубокая нейронная сеть для аппроксимации решений системы трансцендентных уравнений, описывающих квазистационарное состояние газовой смеси в окрестности капли. Использована полносвязная архитектура с четырьмя скрытыми слоями и кусочно-линейной функцией активации. Модель обучена на выборке из 5000 точек, полученных численным решением указанной системы методом *fsolve*. Входными параметрами служат давление, температура окружающей среды, массовая доля кислорода, температура жидкости и параметр неравновесности. Достигнута высокая точность аппроксимации с коэффициентом детерминации выше 0,99 для числа Пекле, характеризующего массовую скорость испарения, и температуры поверхности капли. Средняя абсолютная ошибка для температуры поверхности составила 1,18 К. Нейросетевая модель обеспечивает ускорение вычислений более чем в 150 раз по сравнению с прямым численным решением при сохранении точности в пределах 3%. Учтено физическое ограничение на критическую температуру кислорода (154,58 К). Показано, что учет неравновесных эффектов увеличивает время жизни капли в 2–5 раз, что необходимо учитывать при проектировании камер сгорания жидкостных ракетных двигателей.

Ключевые слова: численное моделирование, испарение, нейросеть, капля, жидкий кислород.

Благодарности: работа выполнена при финансовой поддержке РФФ в рамках научного проекта № 23–71–10024.

Для цитирования: Закрия А. З., Тюренкова В. В. Нейросетевой подход в моделировании испарения капли жидкого кислорода в атмосфере газообразного водорода. *Успехи кибернетики*. 2026;7(1):130–137.

Поступила в редакцию: 23.01.2026.

В окончательном варианте: 15.03.2026.

NEURAL NETWORK APPROACH TO THE SIMULATION OF LIQUID OXYGEN DROPLET EVAPORATION IN A GASEOUS HYDROGEN ATMOSPHERE

A. Z. Zakriya^{1,a}, V. V. Tyurenkova^{1,2,b}

¹ Scientific Research Institute for System Analysis of the National Research Centre “Kurchatov Institute”, Moscow, Russian Federation

² Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russian Federation

^a ORCID: <https://orcid.org/0009-0008-4772-5662>, azzakria2107@gmail.com

^b ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8791-1813>, tyurenkova.v.v@yandex.ru

Abstract: this paper presents a neural network approach for modeling the non-equilibrium evaporation of a liquid oxygen droplet in a gaseous hydrogen atmosphere. We developed a deep neural network to approximate solutions of a system of transcendental equations describing the quasi-stationary state of the gas mixture near the droplet. The network used a fully connected architecture with four hidden layers and a piecewise linear activation function. We trained the model on a dataset of 5,000 points generated by numerically solving the system using the *fsolve* method. The input parameters include pressure, ambient temperature, oxygen mass fraction, liquid temperature, and the non-equilibrium parameter.

The model achieved high approximation accuracy, with a coefficient of determination exceeding 0.99 for both the Peclet number, which characterizes the mass evaporation rate, and the droplet surface

temperature. The mean absolute error for surface temperature was 1.18 K. The neural network provides a computational speedup of more than 150 times compared to a direct numerical solution while maintaining accuracy within 3%. We incorporated the physical constraint on the critical temperature of oxygen (154.58 K).

We demonstrated that accounting for non-equilibrium effects increases droplet lifetime by 2–5 times, which must be considered in the design of liquid rocket engine combustion chambers.

Keywords: simulation, evaporation, neural network, droplet, liquid oxygen.

Acknowledgements: this work is supported by the Russian Science Foundation (grant No. 23-71-10024).

Cite this article: Zakriya A. Z., Tyurenkova V. V. Neural Network Approach to the Simulation of Liquid Oxygen Droplet Evaporation in a Gaseous Hydrogen Atmosphere. *Russian Journal of Cybernetics*. 2026;7(1):130–137.

Original article submitted: 23.01.2026.

Revision submitted: 15.03.2026.

Введение

Как правило, испарение капель жидкого кислорода (окислитель) в атмосфере газообразного водорода (горючее) характерно для процессов, происходящих в камере сгорания жидкостного ракетного двигателя, использующего форсуночные головки со значительным числом форсунок [1]. Через форсуночную головку в камеру сгорания ежесекундно впрыскивается жидкий кислород, который должен сгореть настолько, насколько это возможно, так как несгоревшее топливо — это потеря тяги для двигателя. По центральному каналу каждой мелкомасштабной форсунки подается жидкий кислород, по периферии — газообразный водород, поступающий из полости горючего через отверстия в корпусе. Главное требование, предъявляемое к форсункам — максимально быстрое и тщательное перемешивание компонентов при поступлении в камеру, поскольку от этого зависит скорость их воспламенения и сгорания.

Сложность макрокинетики горения гетерогенных систем обусловлена многомасштабностью задачи, поскольку для увеличения точности расчетов необходимо учитывать конвективный перенос как исходных реагентов и продуктов реакции в пределах расчетной области (для двигателей этот масштаб измеряется метрами), так и гетерогенных включений: капель, частиц или горючих фрагментов (доли миллиметров), не говоря уже об учете взаимодействий между молекулами реагентов (нанометры), определяющих скорость химической реакции. Опыт последних исследований показывает, что прямое уменьшение расчетных ячеек с целью увеличения достоверности расчетов приводит к соответствующему увеличению количества шагов по времени, что при долгосрочном прогнозировании вызовет накопление ошибки вычислений, сводящей к нулю преимущества современных суперкомпьютеров. Задача расчета взаимодействия капли с несущей фазой с учетом дробления и неравновесных фазовых переходов является затратной с точки зрения используемых вычислительных ресурсов. Для каждой капли на каждом шаге по времени даже упрощенные модели сводятся к необходимости решения системы нескольких трансцендентных уравнений, что в рамках предсказательного моделирования задачи с отслеживанием миллионов модельных капель ведет к большим затратам машинного времени.

Скорость испарения капли, температура на ее поверхности и химический состав газа в ее окрестности обычно рассчитывается в рамках вспомогательной квазистационарной задачи, описывающей состояние газовой смеси в ближайшей окрестности жидкой капли. Для решения данной задачи необходимо знать характеристики самой капли (размер, масса, поверхностное натяжение и температура) и параметры окружающего газа (химический состав, температура и скорость обдува капли). Поскольку состояние всей системы изменяется во времени, то на каждом временном шаге решается указанная квазистационарная задача, представляющая собой систему трансцендентных уравнений.

Для ускорения расчетов вместо прямого численного решения системы трансцендентных уравнений можно использовать нейросетевой подход для решения данной задачи. Нейросетевая модель позволит учитывать мелкомасштабный процесс испарения капель, что приведет к увеличению достоверности результатов моделирования процессов в камере сгорания жидкостного двигателя и уменьшению времени вычислений.

В последние годы методы машинного обучения, в частности глубокие нейронные сети, активно применяются для ускорения расчетов в задачах механики сплошных сред и горения. В работе [2] предложена концепция физически-информированных нейронных сетей (PINN), позволяющих учитывать

уравнения математической физики непосредственно в процессе обучения. Обзор применения методов машинного обучения в задачах горения представлен в [3], где показана эффективность нейросетевых моделей для аппроксимации химической кинетики и турбулентного горения. Возможность использования искусственных нейронных сетей для решения задач химической кинетики также исследована в [4, 5]. Показано, что при моделировании процессов горения разработанная авторами нейросеть может служить альтернативой численному решению, увеличив производительность расчетов в 2-3 раза. В работах [6, 7] продемонстрировано применение нейронных сетей для предсказания характеристик испарения капель в условиях распыливания топлива, что подтверждает перспективность данного подхода для задач, рассматриваемых в настоящей работе.

Математическая модель

Для моделирования испарения капли с учетом влияния соседних капель используется модель, описанная в [8]. Здесь приведем только краткое описание данной модели.

Модель не учитывает влияние массовых сил, термодиффузии, градиентов давления, объемной вязкости и эффектов трения и использует равенство коэффициентов бинарной диффузии ($D_i = D$), однокомпонентность испаряющейся жидкости.

В сферически симметричной системе координат (начало — центр капли) изучается испарение равномерно прогретой капли фиксированного радиуса. Геометрия задачи: внутренняя граница ($x = x_w$) — поверхность капли; внешняя граница ($x = x_e$) — сферическая ячейка, содержащая каплю; область ($x_w < x < x_e$) заполнена газовой смесью.

Вне капли ($x > x_w$) система уравнений имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} (\rho v x^2) &= 0, \\ \frac{d}{dx} (\rho Y_i v x^2) &= \frac{d}{dx} \left(x^2 \rho D \frac{dY_i}{dx} \right), \quad i = 1, \dots, N \\ \frac{d}{dx} (\rho v h x^2) &= \frac{d}{dx} \left(x^2 \lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right), \\ p &= \rho \frac{R}{W} T = \rho R T \sum_{i=1}^N \frac{Y_i}{W_i} = p_e, \end{aligned}$$

где ρ — плотность, Y_i — массовая концентрация i -го компонента, v — скорость газа, T — температура, λ — теплопроводность газа, p_e — давление газа, D — коэффициент диффузии, h — удельная энтальпия смеси, W_i — молярная масса, индекс N соответствует парам жидкости, $1, \dots, N-1$ — компонентам газовой фазы.

Граничные условия при $x = x_w$:

$$\begin{aligned} (\rho v)_g &= (\rho v)_l = \dot{m}, \\ \dot{m} Y_{w,i} &= \left(\rho D \frac{dY_i}{dx} \right)_w, \quad i \neq N \\ \dot{m} \cdot (Y_{w,N} - 1) &= \left(\rho D \frac{dY_N}{dx} \right)_w, \\ \dot{m} \cdot (h_L(T_w) + c_{p,l}(T_w - T_l)) &= \left(\lambda \frac{dT}{dx} \right)_w, \\ p_e X_N &= p_N^*(T_w) - \Delta p_N, \end{aligned}$$

где \dot{m} — массовая скорость испарения жидкости, T_w — температура поверхности капли, T_l — средняя температура капли, c_p — удельная теплоемкость, X_N — молярная концентрация N -ого компонента, h_L — теплота испарения, p_N^* — давление насыщенных паров как функция температуры, Δp_N — отклонение парциального давления от давления насыщенных паров, индекс g соответствует газу, l — жидкости.

При $x = x_e$ граничные условия следующие:

$$T = T_e, \quad Y_i = Y_{e,i}, \quad i = 1, \dots, N.$$

После проведенных преобразований, подробно описанных в [8], зная значение параметров ($Y_{e,i}, T_e, p_e$) в сферической ячейке, содержащей каплю, значения числа Пекле Pe и температуры на поверхности капли могут быть найдены путем решения следующей системы алгебраических уравнений:

$$Y_{w,j} = Y_{e,j} \exp\left(-Pe(1-\beta^{\frac{1}{3}})\right), \quad j \neq N \quad (1)$$

$$Y_{N,w} = 1 - (1 - Y_{N,e}) \exp\left(-Pe(1 - \beta^{\frac{1}{3}})\right) \quad (2)$$

$$h_w = (h_e + h_L(T_w) - c_{p,l}T_l) \exp\left(-Pe(1 - \beta^{\frac{1}{3}})\right) - (h_L(T_w) - c_{p,l}T_l) \quad (3)$$

$$Y_{w,N} \frac{m_w}{m_N} = \frac{p_N^*(T_w)}{p_e} - Pe \cdot I_N \cdot \sqrt{\frac{m_e T_w}{m_N T_e}}, \quad (4)$$

где $I_N = \frac{D}{r_w \delta_N} \sqrt{\frac{2\pi m_e}{RT_e}}$ — безразмерный параметр, характеризующий неравновесность испарения жидкости, δ_N — коэффициент аккомодации для испаряющейся жидкости, причем бесконечная величина этого эмпирического параметра соответствует равновесной модели испарения, β — объемное содержание капли в ячейке.

В качестве примера рассмотрим испарение капли кислорода в атмосфере газообразного водорода при следующих значениях параметров:

$$\begin{aligned} m_{O_2} &= 32 \frac{\text{Г}}{\text{МОЛЬ}}, & \rho_{O_2}^{\text{жид}} &= 1141 \frac{\text{КГ}}{\text{М}^3}, & c_{p,O_2}^{\text{жид}} &= 1670 \frac{\text{ДЖ}}{\text{КГ К}}, \\ m_{H_2} &= 2 \frac{\text{Г}}{\text{МОЛЬ}}, & \rho_{H_2}^{\text{жид}} &= 0,0899 \frac{\text{КГ}}{\text{М}^3}, & c_{p,H_2}^{\text{жид}} &= 14230 \frac{\text{ДЖ}}{\text{КГ К}}. \end{aligned}$$

На рис. 1 представлена зависимость числа Пекле Pe от параметра неравновесности I_{O_2} при различных значениях массовой доли паров кислорода $Y_{O_2,e}$ в окружающей среде при $p_e = 25$ бар, $T_e = 150$ К, $T_l = 60$ К. Увеличение массовой доли паров кислорода в окружающей среде приводит к уменьшению числа Pe , т.е. к уменьшению массовой скорости испарения капли.

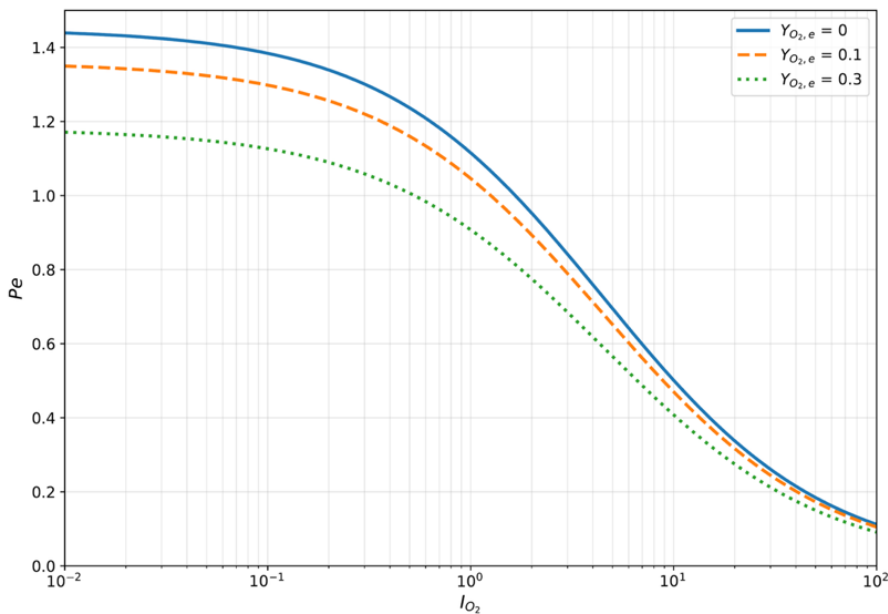


Рис. 1. Зависимость числа Пекле Pe от параметра неравновесности I_{O_2} при различных значениях массовой доли паров кислорода $Y_{O_2,e}$ в окружающей среде ($p_e = 25$ бар, $T_e = 150$ К, $T_l = 60$ К)

Нейросетевая аппроксимация

Для ускорения вычислений предлагается заменить численное решение системы уравнений (1)–(4) на каждом временном шаге нейросетевой моделью, обученной аппроксимировать зависимости: $P_e(p_e, T_e, Y_{O_2,e}, T_l, I_{O_2})$ и $T_w(p_e, T_e, Y_{O_2,e}, T_l, I_{O_2})$.

Генерация обучающей выборки

Обучающая выборка сформирована путем численного решения системы (1)–(4) методом `fsolve` для 5000 комбинаций входных параметров в следующих диапазонах: давление $p_e \in [1, 27]$ бар, внешняя температура $T_e \in [100, 300]$ К, массовая доля кислорода $Y_{O_2,e} \in [0, 0.5]$, температура жидкости $T_l \in [60, 90]$ К, параметр неравновесности $I_{O_2} \in [0.01, 100]$.

При генерации данных учитывалось ограничение $T_w \leq T_{crit} = 154,6$ К, где T_{crit} — критическая температура кислорода.

Архитектура нейронной сети

Использована полносвязная нейронная сеть со следующей архитектурой:

- входной слой: 9 признаков;
- базовые параметры: $p_e, T_e, Y_{O_2,e}, T_l, I_{O_2}$;
- инженерные признаки: $\log(p_e), \log(I_{O_2}), T_l/T_e, Y_{O_2,e} \times I_{O_2}$;
- скрытые слои: $64 \rightarrow 128 \rightarrow 64 \rightarrow 32$ нейрона с функцией активации ReLU;
- выходной слой: 2 нейрона (P_e, T_w);
- регуляризация: BatchNormalization после каждого слоя и Dropout с коэффициентами 0.1–0.2

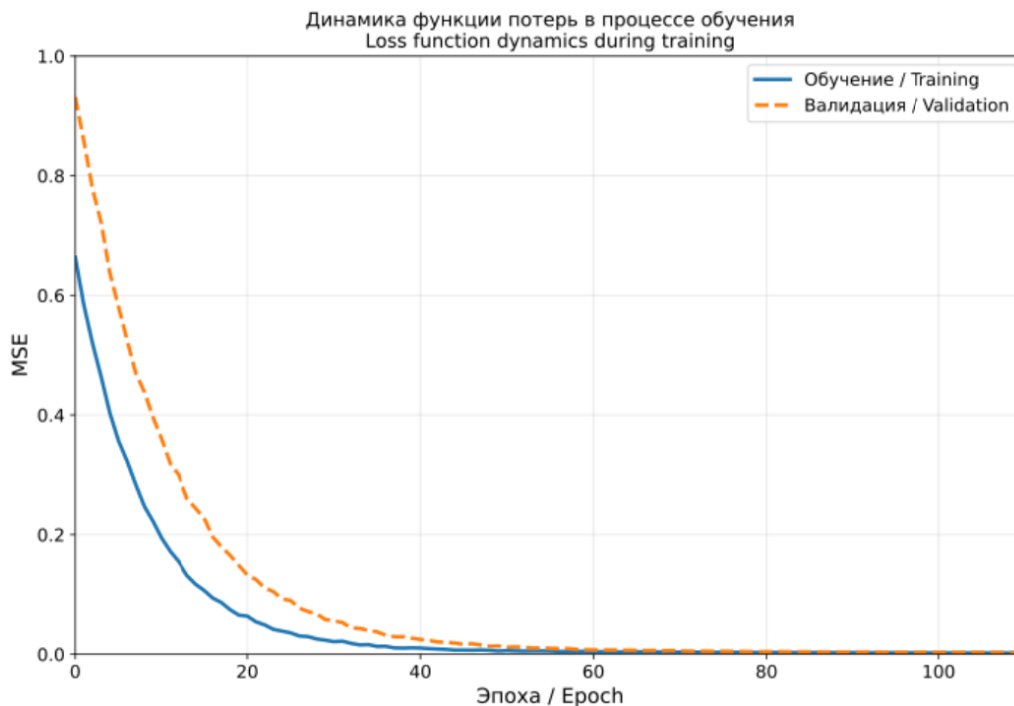


Рис. 2. Динамика функции потерь в процессе обучения нейросетевой модели

Обучение модели

Модель обучалась с использованием:

- оптимизатора Adam с начальной скоростью обучения 0,001;
- функции потерь MSE (Mean Squared Error) (рис. 2);
- разделения данных: 80% — обучение, 20% — валидация;
- адаптивного снижения скорости обучения (ReduceLROnPlateau);
- ранней остановки при отсутствии улучшения на валидационной выборке.

Результаты и обсуждение

Точность аппроксимации

Обученная модель продемонстрировала высокую точность (таблица 1).

Коэффициент детерминации $R^2 > 0,99$ для обоих параметров говорит о высоком качестве аппроксимации. Средняя абсолютная ошибка MAE для температуры поверхности составила 1,18 К, что при среднем значении $T_w \approx 105$ К соответствует относительной погрешности около 1,1% (рис. 3 и рис. 4).

Таблица 1

Оценка точности работы нейросети

Параметр	Коэффициент детерминации R^2	Средняя абсолютная ошибка MAE	Относительная ошибка, %
Pe	0,997	0,032	1,9
T_w , К	0,993	1,18	1,1

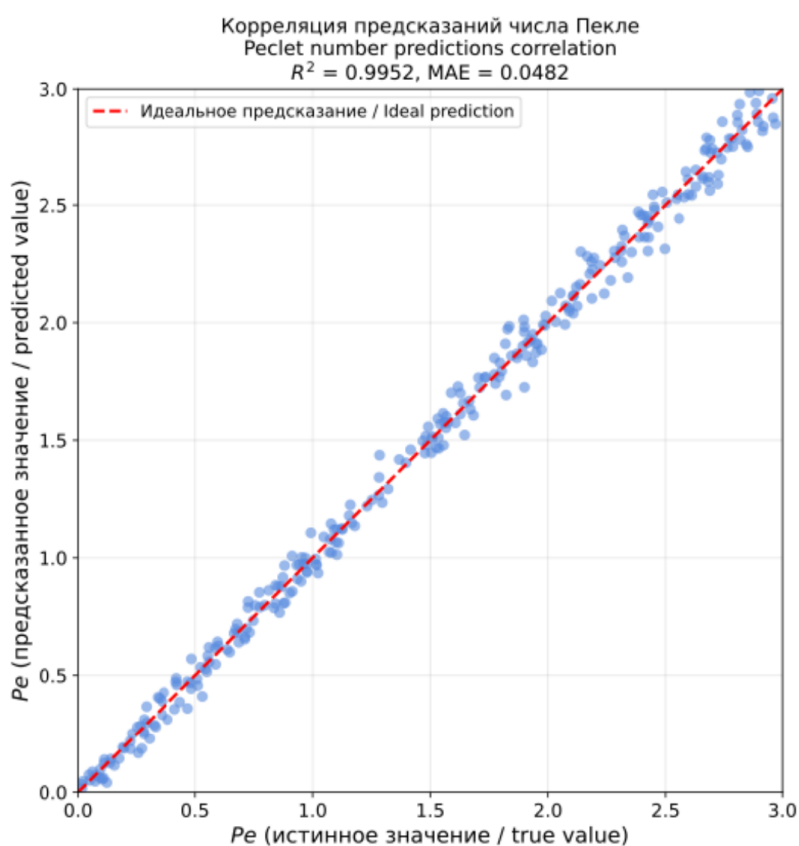


Рис. 3. Корреляция предсказаний числа Пекле ($R^2 = 0,998$, $MAE = 0,023$)

Вычислительная эффективность

Нейросетевая модель обеспечивает ускорение более чем в 150 раз по сравнению с прямым численным решением, что критически важно для моделирования процессов с миллионами капель (таблица 2).

Таблица 2

Сравнение времени вычислений

Метод	Время на точку, мс	Ускорение
Численное решение системы (1)–(4)	45,2	1×
Нейросетевая модель	0,3	151×

Влияние неравновесных эффектов

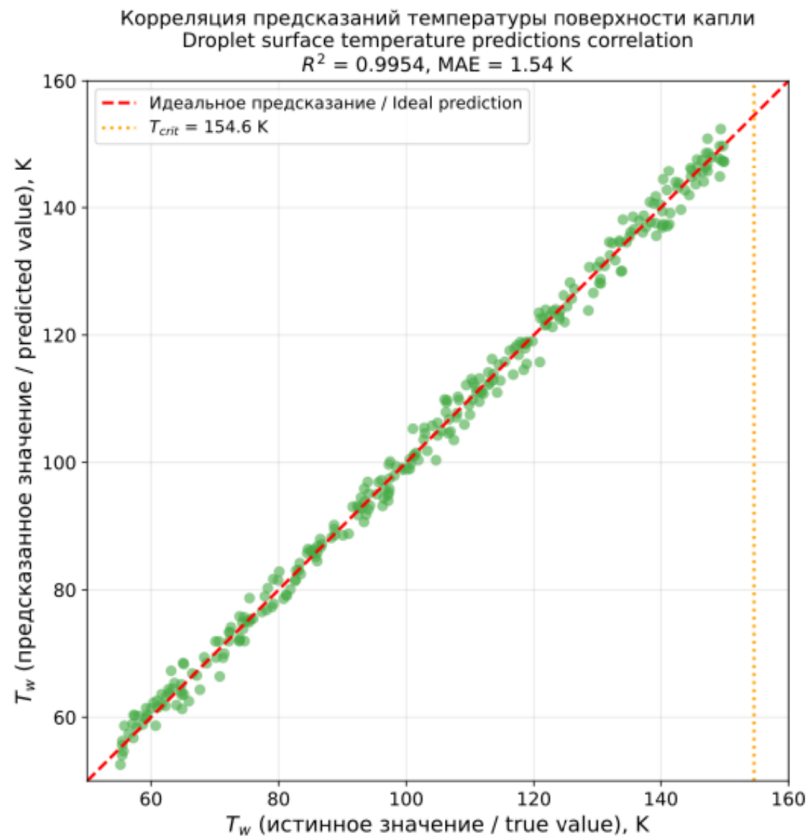


Рис. 4. Корреляция предсказаний температуры поверхности капли ($R^2 = 0,991$, MAE = 1,07 K).
Вертикальная линия — критическая температура кислорода $T_{crit} = 154,6$ K

Анализ показал, что с увеличением параметра неравновесности I_{O_2} :

- число Пекле Pe монотонно убывает, стремясь к нулю при $I_{O_2} \rightarrow \infty$;
- температура поверхности T_w приближается к внешней температуре T_e (при $T_e < T_{crit}$) или к критической температуре (при $T_e \geq T_{crit}$);
- время жизни капли увеличивается в несколько раз по сравнению с равновесной моделью.

При $I_{O_2} = 10$ время жизни капли возрастает примерно в 2,5 раза, при $I_{O_2} = 100$ — более чем в 5 раз. Это существенно влияет на длину факела распыла в камере сгорания и должно учитываться при проектировании.

Учет физических ограничений

Модель корректно воспроизводит поведение системы вблизи критической точки кислорода. При $T_e \geq T_{crit}$ и $I_{O_2} \rightarrow \infty$ температура поверхности асимптотически приближается к $T_{crit} = 154,6$ K, не превышая ее, что соответствует физической реальности.

Заключение

Разработан нейросетевой подход для моделирования неравновесного испарения капли жидкого кислорода в атмосфере газообразного водорода.

Основные результаты:

1. Создана нейросетевая модель, аппроксимирующая решения системы трансцендентных уравнений с точностью выше 0,99.
2. Достигнуто ускорение вычислений в 151 раз при сохранении относительной погрешности менее 3,5%.
3. Модель корректно учитывает физическое ограничение на критическую температуру кислорода.
4. Показано существенное влияние неравновесных эффектов на время жизни капли: увеличение в 2–5 раз в зависимости от параметра I_{O_2} .
5. Разработанный подход может быть применен для ускорения CFD-расчетов процессов в камерах сгорания жидкостных ракетных двигателей, где требуется моделирование испарения миллионов капель.

на каждом временном шаге. Учет неравновесных эффектов необходим для корректного определения длины факела распыла и обеспечения полного сгорания топлива.

ЛИТЕРАТУРА

1. Tyurenkova V. V., Smirnova M. N., Stamov L. I. Mathematical Modeling of Nonequilibrium Combustion Processes in a Liquid Rocket Engine. *Acta Astronautica*. 2024;225:454-466. DOI: 10.1016/j.actaastro.2024.09.035.
2. Raissi M., Perdikaris P., Karniadakis G. E. Physics-Informed Neural Networks: A Deep Learning Framework for Solving Forward and Inverse Problems Involving Nonlinear Partial Differential Equations. *Journal of Computational Physics*. 2019;378:686-707. DOI: 10.1016/j.jcp.2018.10.045.
3. Ihme M., Chung W. T., Mishra A. A. Combustion Machine Learning: Principles, Progress and Prospects. *Progress in Energy and Combustion Science*. 2022;91:101010.
4. Мальсагов М. Ю., Михальченко Е. В., Карандашев Я. М., Никитин В. Ф. Моделирование процесса горения водорода при различных давлениях с помощью нейронной сети. *Физика горения и взрыва*. 2023;59(2):24–30. DOI: 10.15372/fgv20230204.
5. Карандашев Я. М., Мальсагов М. Ю., Стамов Л. И., Михальченко Е. В. Моделирование горения водородо-воздушной смеси при помощи полносвязной нейронной сети UNET с целью ускорения вычислений. *Вопросы атомной науки и техники. Серия: Математическое моделирование физических процессов*. 2025;1:25–38.
6. Hwang J., Lee P., Mun S., Karathanassis I. K., Koukouvinis P., Pickett L. M., Gavaises M. Machine-Learning Enabled Prediction of 3D Spray under Engine Combustion Network Spray G Conditions. *Fuel*. 2021;293:120444. DOI: 10.1016/j.fuel.2021.120444.
7. Malekjani N., Kharaghani A., Tsotsas E. A Comparative Study of Dimensional and Non-Dimensional Inputs in Physics-Informed and Data-Driven Neural Networks for Single-Droplet Evaporation. *Chemical Engineering Science*. 2025;306:121214. DOI: 10.1016/j.ces.2025.121214.
8. Тюренкова В. В. Математическое моделирование неравновесного испарения аэрозольных капель в разбавленных спреях. *Инженерно-физический журнал*. 2026;99(2). (принята в печать)