

УДК 519.60

О применении генетических алгоритмов для аппроксимации экспериментальных данных термической деструкции парафина*

Мустафина С.И., Корнилова А.А., Гиззатова Э.Р.

Уфимский университет науки и технологий

Аннотация: Работа посвящена разработке математической модели для точной аппроксимации экспериментальных данных, описывающих процессы термической деструкции парафина. В качестве основного инструмента оптимизации используется генетический алгоритм, позволяющий эффективно искать решения в сложных многомерных пространствах без строгих ограничений на форму исходных данных. Рассмотрены два подхода. Первый — глобальная аппроксимация всего массива данных с помощью алгебраической суммы трёх кинетических функций (реакция третьего порядка, двумерная диффузия и поверхностная реакция). Второй — поэлементная оптимизация, при которой индивидуальная популяция параметров формируется для каждой экспериментальной точки.

Ключевые слова: генетический алгоритм, термическая деструкция парафина, аппроксимация экспериментальных данных.

1. Введение

Исследование процессов термической деструкции различных веществ, в том числе полимеров и их композитных структур, представляет собой важную задачу в области материаловедения и экологии. Понимание этих процессов необходимо для разработки экологически безопасных методов переработки отходов, а также для улучшения характеристик материалов, таких как термостойкость и долговечность.

Моделирование процессов термической деструкции помогает оптимизировать технологии переработки и снизить воздействие на окружающую среду. Однако использование традиционных кинетических схем нередко приводит к трудностям, связанным с многокомпонентностью систем, сложностью взаимодействия различных фаз и непредсказуемостью поведения материалов при высоких температурах [1]. В связи с этим для решения подобных задач все чаще обращаются к численным методам [2], использующим случайные величины. Эти методы представляют собой эффективные инструменты, так как не требуют сложных преобразований исходных данных и не накладывают жестких граничных условий [3]. Одним из таких методов является генетический алгоритм.

Генетический алгоритм – это метод оптимизации, который основывается на принципах естественного отбора и эволюции. В ходе его работы создается популяция возможных решений, которые затем подвергаются процессу «естественного отбора»: лучшие решения выбираются для «скрещивания» с другими решениями и «мутации», создавая новые возможные «особи». Этот процесс повторяется до тех пор, пока не будет найдено оптимальное решение. Генетический алгоритм хорошо подходит для задач, в которых пространство возможных решений имеет сложную структуру,

*Исследование выполнено в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (код научной темы FZWU-2023-0002).

где использование классических методов оптимизации становится крайне затруднительным.

Целью данного исследования является разработка точной математической модели для аппроксимации экспериментальных данных, полученных при термической деструкции парафина, с использованием генетического алгоритма. Рассматриваются два подхода: аппроксимация данных для всего объема экспериментальных материалов и подбор параметров аппроксимирующей кривой для каждой отдельной точки.

2. Глобальная аппроксимация

В рамках первоначального этапа разработки были предложены несколько математических функций, которые ранее использовались для расчета кинетических параметров, отвечающих за наилучшую аппроксимацию данных, полученных в процессе термической деструкции нанокompозита полипропилена. В ходе эксперимента эти функции поочередно применялись к данным, описывающим процесс деструкции парафина. Однако ни одна из предложенных функций не дала удовлетворительных результатов, что потребовало проведения дополнительного анализа.

На основании этого была выдвинута гипотеза, что более точная аппроксимация может быть получена с использованием алгебраической суммы трех функций, выбранных случайным образом на основе их формы и предполагаемой пригодности для задачи. Для этого были выбраны следующие функции: реакции третьего порядка, двумерной диффузии и двумерной реакции на границе раздела фаз.

Результат работы генетического алгоритма в ходе эксперимента представлены на рис. 1. В данном эксперименте использовались 10 итераций. Начальная популяция состояла из 50 особей, где каждая особь представляла собой набор параметров для алгебраической суммы выбранных функций, которые инициализировались случайным образом. На каждом этапе генетического алгоритма проводилось 100 операций скрещивания. В процессе мутации для 50 новых особей случайным образом изменялись параметры. После каждого этапа скрещивания и мутации проводился отбор 50 лучших особей, которые продолжали эволюцию в следующем поколении.

Результаты применения генетического алгоритма с использованием алгебраической суммы трех функций показали, что этот метод способен находить решения, которые приближаются к экспериментальным данным. Однако точность аппроксимации не соответствовала требуемому для высококачественного моделирования термической деструкции парафина уровню. Для повышения точности было принято решение о переходе к более сложному подходу – подбору параметров для каждой точки исходных данных отдельно.

3. Точечная аппроксимация

Внутри алгоритма для каждой точки создается отдельная популяция, для каждой из которых производится настройка параметров алгебраической суммы. Это означает, что для каждого значения из набора данных выполняется полный цикл генетического алгоритма с индивидуальными параметрами.

Результат работы генетического алгоритма в ходе эксперимента представлены на рис. 2. Размер популяции для каждой точки принят прежним – 50 особей. В этом эксперименте количество операций скрещивания было увеличено до 200 на каждую итерацию, количество мутаций – до 100 на каждую итерацию. После каждого этапа скрещивания и мутации 50 лучших особей из каждой популяции были отобраны и использованы для следующего поколения.

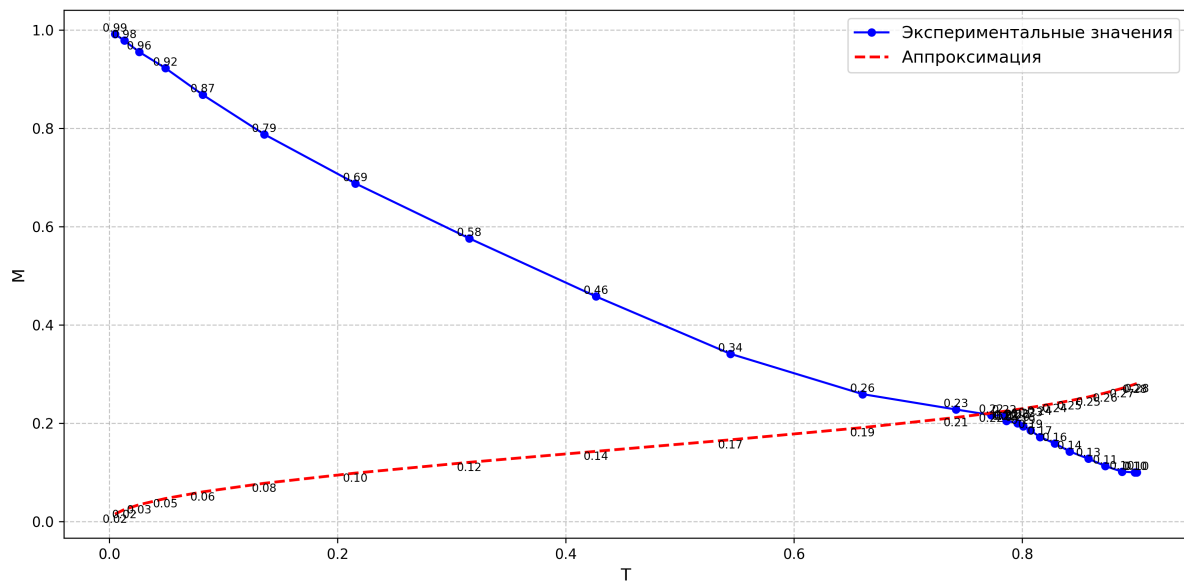


Рис. 1. Аппроксимация экспериментальных данных с использованием алгебраической суммы трех функций

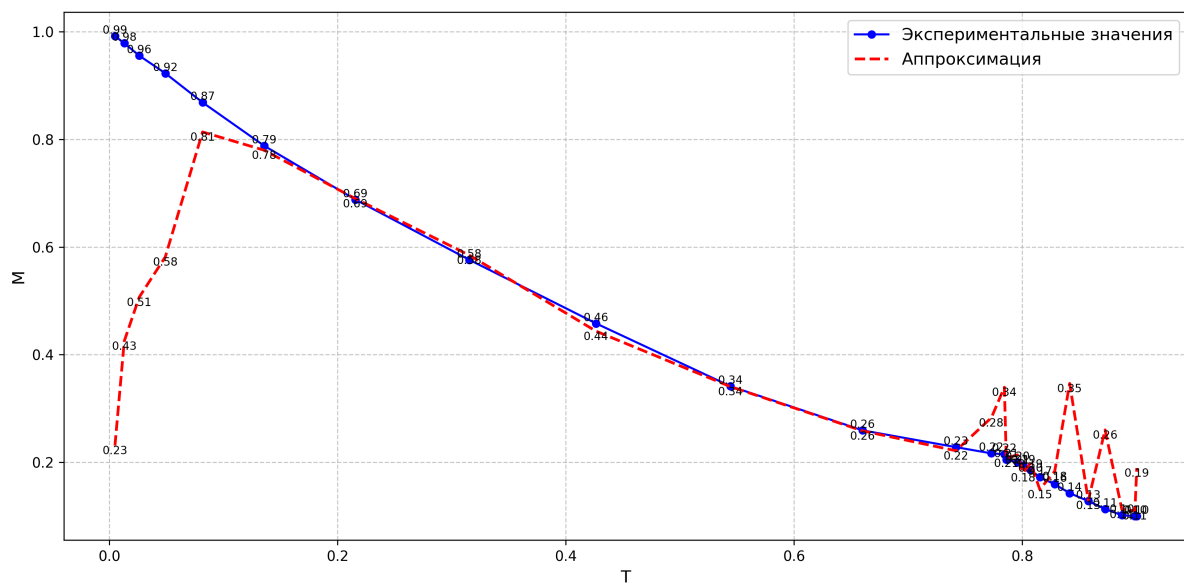


Рис. 2. Аппроксимация экспериментальных данных с подбором параметров для каждой точки данных

В результате применения этого подхода генетический алгоритм показал значительное улучшение точности аппроксимации по сравнению с первым методом. Это подтверждает, что использование более детализированного подхода для каждой точки данных позволяет достичь более высоких результатов в моделировании термической деструкции материалов, таких как парафин.

4. Заключение

По итогам исследования можно сделать вывод об эффективности использования генетического алгоритма для аппроксимации экспериментальных данных, особенно при применении метода подбора параметров для каждой точки данных отдельно.

В будущем планируется реализовать алгоритмы автоматического подбора функций из списка предложенных, а также интеграция с иными численными методами для повышения точности модели.

Литература

1. Ломакин С. М., Дубникова И. Л., Березина С. М., Заиков Г. Е. Термическая деструкция и горение нанокompозита полипропилена на основе органически модифицированного слоистого алюмосиликата // Высокомолекулярные соединения. 2006. Т. 48, № 1. С. 90-105.
2. Хамидуллина З. А., Исмагилова А. С., Спивак С. И. Программная реализация алгоритма определения кинетического уравнения химической реакции // Журнал Средневолжского математического общества. 2018. Т. 20, № 1. С. 96-102.
3. Корнилова А. А., Мустафина С. И., Корнилов Д. А., Гиззатова Э. Р., Мустафин А. Г., Галиахметов Р. Н. О кинетическом моделировании процесса деструкции твердого парафина // 6-я Международная конференция по системам управления, математическому моделированию, автоматизации и энергоэффективности (SUMMA). 2024. С. 17-21.

MSC 37N99

On the application of genetic algorithms for approximating experimental data of paraffin thermal destruction

S.I. Mustafina, A.A. Kornilova, E.R. Gizzatova
Ufa University of Science and Technology

Abstract: This work is dedicated to the development of a mathematical model for accurate approximation of experimental data describing the processes of paraffin thermal destruction. The main optimization tool used is the genetic algorithm, which effectively searches for solutions in complex multidimensional spaces without strict constraints on the form of the initial data. Two approaches are considered. The first is global approximation of the entire data set using the algebraic sum of three kinetic functions (third-order reaction, two-dimensional diffusion, and surface reaction). The second is element-wise optimization, where an individual parameter population is formed for each experimental point.

Keywords: genetic algorithm, paraffin thermal destruction, experimental data approximation.

References

1. Lomakin S. M., Dubnikova I. L., Berezina S. M., Zaikov G. E. Termicheskaya destruktziya i gorenje nanokompozita polipropilena na osnove organicheski modifitsirovannogo sloistogo alyumosilikata [Thermal degradation and combustion of polypropylene nanocomposite based on organically modified layered aluminosilicate] // Vysokomolekulyarnye soedineniya [Polymer Science]. 2006. Vol. 48, no. 1. P. 90-105. (in Russian)
2. Khamidullina Z. A., Ismagilova A. S., Spivak S. I. Programmnyaya realizatsiya algoritma opredeleniya kineticheskogo uravneniya khimicheskoi reaktsii [Software implementation of an algorithm for determining the kinetic equation of a chemical reaction] // Zhurnal Srednevolzhskogo matematicheskogo obshchestva [Journal of Middle Volga Mathematical Society]. 2018. Vol. 20, no. 1. P. 96-102. (in Russian)
3. Kornilova A. A., Mustafina S. I., Kornilov D. A., Gizzatova E. R., Mustafin A. G., Galiahmetov R. N. O kineticheskom modelirovanii protsessa destruktzii tverdogo parafina [On kinetic modeling of solid paraffin degradation process] // 6-ya Mezhdunarodnaya konferentsiya po sistemam upravleniya, matematicheskomu modelirovaniyu, avtomatizatsii i energoeffektivnosti (SUMMA) [6th International Conference on Control Systems, Mathematical Modeling, Automation and Energy Efficiency (SUMMA)]. 2024. P. 17-21. (in Russian)