

УДК 629.76, 519.615

ПРИМЕНЕНИЕ ГЕНЕТИЧЕСКИХ АЛГОРИТМОВ ДЛЯ РАСЧЕТА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИ РАВНОВЕСНЫХ СОСТАВОВ РЕАГИРУЮЩИХ СМЕСЕЙ ГАЗОВ

О. В. Мищенко¹, О. А. Воеводина²

¹mov@istu.ru, ²mien@istu.ru

ФГБОУ ВПО «Ижевский государственный технический университет имени М. Т. Калашникова» (ИжГТУ)

Поступила в редакцию 10 мая 2014 г.

Аннотация. Рассматривается задача о составе химически реагирующей смеси газов как задача математического программирования. Окончательно задача формулируется как задача безусловной оптимизации и решается с использованием генетических алгоритмов. Приведенные примеры решенных задач подтверждают высокую надежность генетического метода в применении к задачам о равновесном составе реагирующих смесей газов.

Ключевые слова: химически равновесный состав; продукты сгорания; математическая модель; система нелинейных уравнений; генетический алгоритм.

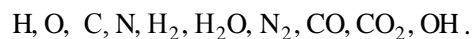
Решение задач о составе продуктов сгорания химических материалов важная задача, которая встречается в разных отраслях техники (например, [1–3]) и решается экспериментально или теоретически. Теоретические подходы позволяют свести задачу о равновесном составе реагирующей смеси газов к задаче о решении системы нелинейных алгебраических уравнений [4] либо к задаче математического программирования [5].

Недостатком первого подхода является то, что успешное решение системы нелинейных алгебраических уравнений обеспечивается при удачном задании первоначального приближения для разыскиваемых переменных (в задаче о равновесном составе химически реагирующей смеси неизвестными являются парциальные давления компонентов смеси). Для сложных составов смеси (количество веществ в смеси может исчисляться сотнями и более) выбор приемлемых начальных приближений может оказаться затруднительным.

Решение задачи о равновесном составе продуктов как задачи математического программирования в меньшей степени зависит от удачного выбора начального приближения, однако надежность решения зависит от удачного выбора метода решения задачи оптимизации [6, 7]. В связи с этим представляет интерес анализ возможности решения рассматриваемой задачи с

использованием успешно развивающихся генетических алгоритмов [8].

В качестве примера будем рассматривать расчет равновесного состава продуктов сгорания пороха Н. Условную формулу пороха можно представить в виде $H_a O_b C_d N_k$. Условная формула записана для одного килограмма вещества, индексы a, b, d, k означают, соответственно, число молей каждого элементарного продукта в веществе. Основные продукты, которые образуются в результате горения пороха и являются значимыми при определении теплофизических характеристик в решаемой задаче, – это



Будем полагать, что в продуктах отсутствует конденсат.

Введем следующие обозначения:

$p_i, i = 1, 10$ – парциальные давления компонентов смеси продуктов сгорания (значение i соответствует выше приведенному порядку следования компонентов смеси, значения давлений принимаются в атмосферах);

M_m – нормирующий множитель, связывающий парциальные давления с мольными концентрациями компонентов смеси (число молей исходных веществ);

$K_j^p(T), j = 5, 10$ – константы равновесия по парциальным давлениям для химических реак-

ций (реакций диссоциации), вычисляемые по энтропиям и энтальпиям продуктов, участвующих в реакциях [4], и зависящих от температуры продуктов реакции T .

В математической постановке задачи о равновесном составе продуктов сгорания рассматриваются уравнения сохранения массы, уравнения для коэффициентов равновесия химических реакций (реакций диссоциации), уравнение Дальтона.

В соответствии с [4] уравнения сохранения массы для рассматриваемого топлива могут быть записаны в матричном виде (1).

Уравнения для коэффициентов равновесия химических реакций (реакций диссоциации) запишутся в виде системы (2).

Система уравнений для неизвестных значений p_i и нормирующего множителя M_m замыкается уравнением Дальтона (3).

Уравнения (1)–(3) решаются при задаваемых значениях температуры продуктов реакции T и давления p_k смеси газов.

Для решения задачи о равновесном составе продуктов сгорания как задачи оптимизации построим функционал $\Phi(\mathbf{x})$ вида (4).

Функционал $\Phi(\mathbf{x})$ строится из уравнений (1), (3), в которых исключены значения p_5, \dots, p_{10} с помощью уравнений (2). Конструктивный вид функций $\varphi_1 \dots \varphi_5$ при этом принимает вид (5).

$$\begin{pmatrix} 1,00 & 0,00 & 0,00 & 0,00 & 2,00 & 2,00 & 0,00 & 0,00 & 0,00 & 1,00 \\ 0,00 & 1,00 & 0,00 & 0,00 & 0,00 & 1,00 & 0,00 & 1,00 & 2,00 & 1,00 \\ 0,00 & 0,00 & 1,00 & 0,00 & 0,00 & 0,00 & 0,00 & 1,00 & 1,00 & 0,00 \\ 0,00 & 0,00 & 0,00 & 1,00 & 0,00 & 0,00 & 2,00 & 0,00 & 0,00 & 0,00 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \\ p_4 \\ p_5 \\ p_6 \\ p_7 \\ p_8 \\ p_9 \\ p_{10} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \cdot M_m \\ b \cdot M_m \\ d \cdot M_m \\ k \cdot M_m \end{pmatrix}. \quad (1)$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{p_5}{p_1^2} &= K_5^P, \\ \frac{p_6}{p_1^2 p_2^1} &= K_6^P, \\ \frac{p_7}{p_4^2} &= K_7^P, \\ \frac{p_8}{p_2^1 p_3^1} &= K_8^P, \\ \frac{p_9}{p_2^2 p_3^1} &= K_9^P, \\ \frac{p_{10}}{p_1^1 p_2^1} &= K_{10}^P. \end{aligned} \right\}. \quad (2)$$

$$p_1 + p_2 + p_3 + p_4 + p_5 + p_6 + p_7 + p_8 + p_9 + p_{10} = p_k. \quad (3)$$

$$\Phi(\mathbf{x}) = \min \sum_{i=1}^5 (\varphi_i(p_1, p_2, p_3, p_4, M_m))^2. \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \varphi_1 &= p_1 + 2 \cdot p_1^2 \cdot K_5^P + 2 \cdot p_1^2 \cdot p_2^1 \cdot K_6^P + 1 \cdot p_1^1 \cdot p_2^1 \cdot K_{10}^P - a \cdot M_m; \\ \varphi_2 &= p_2 + 1 \cdot p_1^2 \cdot p_2^1 \cdot K_6^P + 1 \cdot p_2^2 \cdot p_3^1 \cdot K_8^P + 2 \cdot p_2^2 \cdot p_3^1 \cdot K_9^P + 1 \cdot p_1^1 \cdot p_2^1 \cdot K_{10}^P - b \cdot M_m; \\ \varphi_3 &= p_3 + 1 \cdot p_2^1 \cdot p_3^1 \cdot K_8^P + 1 \cdot p_2^2 \cdot p_3^1 \cdot K_9^P - d \cdot M_m; \\ \varphi_4 &= p_4 + 2 \cdot p_4^2 \cdot K_7^P - k \cdot M_m; \\ \varphi_5 &= p_1 + p_2 + p_3 + p_4 + p_1^2 \cdot K_5^P + p_1^2 \cdot p_2^1 \cdot K_6^P + p_4^2 \cdot K_7^P + p_2^2 \cdot p_3^1 \cdot K_8^P + p_2^2 \cdot p_3^1 \cdot K_9^P + p_1^1 \cdot p_2^1 \cdot K_{10}^P - p_k. \end{aligned} \quad (5)$$

Последовательность решения задачи о равновесном составе продуктов горения пороха при использовании генетического алгоритма устанавливается в следующем порядке:

- задается генотип (набор независимых аргументов целевой функции, состоящий из значений парциальных давлений p_i и M_m). Каждая из переменных – это конкретный ген. Хромосомой γ будем называть вектор, содержащий конкретные значения переменных p_i и M_m . Началу решения задачи соответствует популяция, состоящая из N особей, каждая из которых обладает уникальной хромосомой – $\gamma_n = \gamma(p_1^{(n)}, p_2^{(n)}, p_3^{(n)}, p_4^{(n)}, M_m^{(n)})$. Популяция из N особей обновляется за счет скрещиваний. Для данной задачи зададимся $N = 1000$;

- для каждой особи рассчитывается функционал $\Phi(x)$. Особь, соответствующая наименьшему функционалу переносится в следующее поколение;

- решением системы (2) устанавливаются новые значения p_i ($i = 5, 10$) для компонентов смеси продуктов сгорания для отобранной особи;

- если значение $\Phi(x)$ превосходит заданную точность, то принимается решение о необходимости проведения новой итерации и расчете нового поколения;

- производится обновление рассчитанной популяции за счет скрещиваний.

При очередном скрещивании хромосомы γ_n пересчитываются по алгоритму, называемому кроссовером. Кроссовер строится так, чтобы учесть значения хромосом, принимавших участие в скрещивании, и соответствующие этим

хромосомам значения целевых функций. На очередном этапе алгоритма состав популяции пересматривается. Из его состава удаляются слабые хромосомы и добавляются вновь полученные новые сильные (с точки зрения значения целевой функции) хромосомы. Новый ген, входящий во вновь рассчитываемую уникальную хромосому $\gamma = \gamma(p_1, p_2, p_3, p_4, M_m)$, на очередной итерации рассчитывается как линейная комбинация генов, входящих в хромосомы с номерами s и t

$$x_n = a \cdot x_n^{(s)} + b \cdot x_n^{(t)}.$$

Значения коэффициентов a и b могут быть рассчитаны по формулам:

$$a = 1 + \alpha - u(1 + 2\alpha), \quad b = u(1 + 2\alpha) - \alpha,$$

где $\alpha \in [0,1]$, $u \in (0,1)$.

Расчеты выполняются до тех пор, пока величина целевой функции не станет меньше заданного условия по точности.

Ниже приводятся результаты расчетов равновесного состава продуктов сгорания пороха Н, полученные при следующих исходных данных:

- давление смеси газов – 40 атм (3,922 МПа);
- температура смеси 2369 К;
- коэффициенты в условной формуле пороха $a=30,254$; $b=34,195$; $d = 23,493$; $k = 10,011$.

Решение задачи оптимизации осуществлялось по предлагаемой методике, разработанной с использованием генетического алгоритма, и по методике, в которой реализуется метод деформируемого многогранника [6]. Основные результаты, полученные в расчетах, представлены на рис. 1, 2.

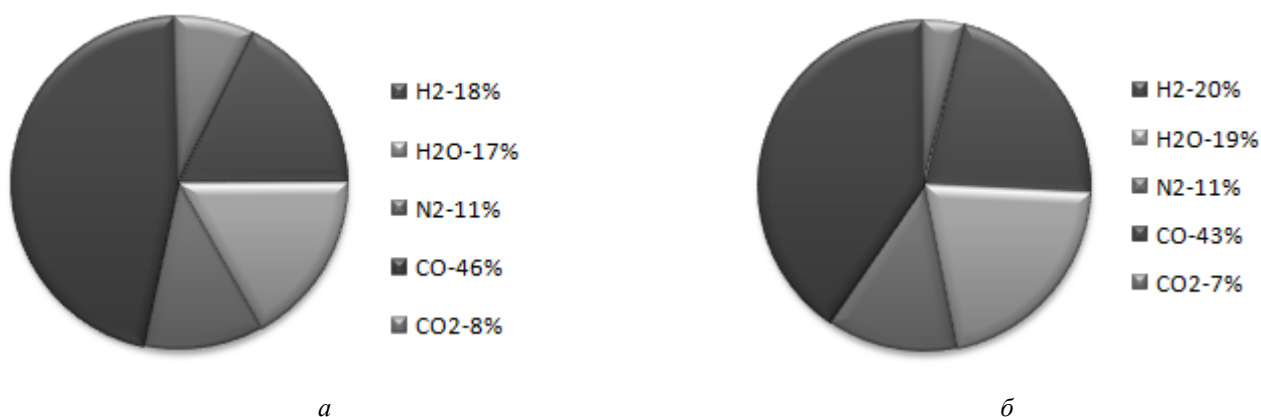


Рис. 1. Распределение массовых долей основных элементов и соединений равновесного состава топлива $H_aO_bC_dN_k$

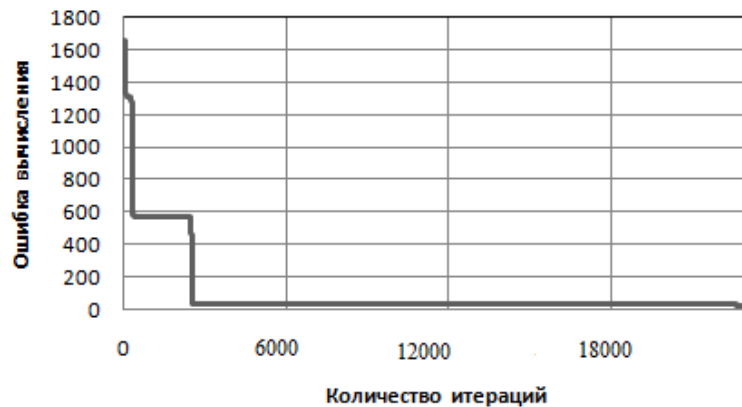


Рис. 2. Изменение ошибки вычислений при решении задачи генетическим методом

Сравнение результатов, полученных в расчетах для выбранного состава (порох Н), позволяет сделать следующие выводы:

- решение задачи с использованием генетического алгоритма (рисунок 1а) требует большого количества итераций, однако окончательные результаты обладают высокой точностью и хорошо согласуются с результатами расчетов, полученных с использованием методики [9]. На рис. 1, а приводятся круговые диаграммы, на которых представлены массовые концентрации основных компонентов смеси, полученные с использованием генетических алгоритмов;

- решение задачи с использованием метода деформируемого многогранника позволяет получить менее точные результаты (рисунок 1б), при этом в расчетах удалось достигнуть минимальное значение целевой функции $\Phi(x) \approx 29$;

- на рис. 2 представлены результаты, связанные с характером изменения ошибки вычислений по мере увеличения числа итераций. Следует заметить, что после 3000 итераций значение целевой функции не превышает значения $\Phi(x) \approx 50$, а после 19000 итераций $\Phi(x) \approx 0$.

Дополнительно следует отметить, что проведенные многочисленные расчеты, выполненные при различных исходных приближениях для искомых парциальных давлений, подтверждают высокую надежность предложенной методики в задачах о расчете равновесного состава смеси. Недостатком генетических алгоритмов при решении задач оптимизации является большое количество итераций. Однако не вызывает сомнения возможность применения данной методики для решения более сложных составов и с учетом таких явлений как выпадение конденсата или (и) твердого осадка и др. Кроме того, следует заметить, что применение генетических алгоритмов окажется эффективным при

решении задач на ЭВМ параллельной архитектуры (см., например, [10]).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Арсеньев Г. В. Энергетические установки. М.: Высш. шк., 1991. 336 с. [G. V. Arsenyev, *Power installations*, (in Russian). Moscow: Vysshaya shkola, 1991.]
- Сполдинг Д. Б. Горение и массообмен. М.: Машиностроение, 1985. 238 с. [D. B. Spalding, *Burning and mass exchange*, (in Russian). Moscow: Mashinostroenie, 1985.]
- Утилизация твердотопливных ракетных двигателей / С. И. Бурдюгов, М. А. Корепанов, Н. П. Кузнецов и др. М.:Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2008. 512 с. [S. I. Burdyugov, M. A. Korepanov, N. P. Kuznetsov, et al., *Utilization of solid propellant rocket engines*, (in Russian). Moscow–Izhevsk: Institute of computer researches, 2008.]
- Алемасов В. Е., Дергалин А. Ф., Тишин А. П. Теория ракетных двигателей / Под ред. В. Е. Алемасова. М.: Машиностроение, 1969. 548 с. [V. E. Alemasov, A. F. Dergalin, A. P. Tishin, *The theory of rocket engines*, Ed. V. E. Alemasov, (in Russian). Moscow: Mashinostroenie, 1969.]
- Соркин Р. Е. Газотермодинамика ракетных двигателей на твердом топливе. М.: Наука, 1967. 368 с. [R. E. Sorokin, *Gazotermodynamika of solid rocket engine*, (in Russian). Moscow: Nauka, 1967.]
- Химмельблау Д. Прикладное нелинейное программирование. М.: Мир, 1975. 536 с. [D. Himmelblau, *Applied nonlinear programming*, (in Russian). Moscow: Mir, 1975.]
- Алиев А. В., Мищенко О. В. Математическое моделирование в технике. Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2012. 456 с. [A. V. Aliev, O. V. Mishchenkova, *Mathematical modeling in equipment*, (in Russian). Izhevsk: Institute of computer researches, 2012.]
- Тенев В. А., Якимович Б. А. Генетические алгоритмы в моделировании систем. Ижевск: ИжГТУ, 2010. 308 с. [V. A. Tenenev, B. A. Yakimovich, *Genetic algorithms in modeling of systems*, (in Russian), Izhevsk: ISTU, 2010.]
- Корепанов М. А. Программа «Термодинамика» // Каталог инновационных разработок Ижевского государственного технического университета. Ижевск: ИжГТУ, 2001. С. 95. [M. A. Korepanov, "Thermodynamics program," in *Catalogue of innovative development of the Izhevsk state technical university*, (in Russian), pp. 95. Izhevsk: ISTU, 2010.]
- Алиев А. В., Андреев В. В. Разработка параллельных алгоритмов расчета задач газовой динамики методом крупных частиц // Интеллектуальные системы в производстве.

2006. №1. С. 4–17. [A. V. Aliyev, V. V. Andreyev, "Development of parallel algorithms of calculation of problems of gas dynamics by a method of large particles," (in Russian), *Intellectual systems in production*, no. 1, pp. 4-17, 2006.]

ОБ АВТОРАХ

МИЩЕНКОВА Ольга Владимировна, доц. каф. механики и моделирования. Дипл. инженер (ИжГТУ, 1997). Канд. физ.-мат. наук по мат. моделированию, числ. методам и комплексам программ (ИжГТУ, 2006). Иссл. в обл. мат. мод. и методов решения задач устойчивости газодинамических процессов газогенераторах на твердом топливе.

ВОЕВОДИНА Ольга Андреевна, асп. каф. ракетной техники. М-р техн. и технол. по авиа- и ракетостроению (ИжГТУ, 2010). Готовит дис. о химически реагирующих течениях в камере теплового двигателя.

METADATA

Title: application of genetic algorithms for calculation thermodynamic equilibrium structures reacting mixes of gases.

Authors: O. V. Mishchenkova¹, O. A. Voevodina²

Affiliation: Izhevsk State Technical University, Russia.

Email: ¹mov@istu.ru, ²mien@istu.ru.

Language: Russian.

Sours: Vestnik UGATU (scientific journal of Ufa State Aviation Technical University), vol. 18, no. 4 (65), pp. 173-177, 2014. ISSN 2225-2789 (Online), ISSN 1992-6502 (Print).

Abstract: The task about composition of chemically reacting mix of gases as a problem of mathematical programming is considered. Finally the task is formulated as a problem of unconditional optimization and decides with use of genetic algorithms. The given examples of the solved tasks confirm high reliability of a genetic method in application to tasks about equilibrium composition of reacting mixes of gases.

Key words: chemically equilibrium structure; combustion products of combustion; mathematical model; system of the nonlinear equations; genetic algorithm.

About authors:

MISHCHENKOVA, Olga Vladimirovna, PhD (Physics and Mathematics), Associate Professor, Izhevsk State Technical University.

VOEVODINA, Olga Andreevna, post-graduate student, Izhevsk State Technical University.