

УДК 519.6:501

ПРИМЕНЕНИЕ БИОИНСПИРИРОВАННЫХ МЕТОДОВ ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ТОКСИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОРШНЕВЫХ ДВИГАТЕЛЕЙ ВНУТРЕННЕГО СГОРАНИЯ*

Д.С. ГИРШ, Е.Н. ЛАДОША, С.Н. ХОЛОДОВА, Д.С. ЦЫМБАЛОВ

(Донской государственный технический университет)

Предложены оригинальные модификации генетических алгоритмов для расчета стационарных состояний динамических систем химической природы, в том числе двигателей внутреннего сгорания, при заданных термодинамических параметрах. Особенностью разработки является разнесение малых и больших параметров уравнений между уравнениями и алгоритмом их решения. Наряду с известными нейросетевыми методами разработка интегрируется в состав имитационной системы «Мотор».

Ключевые слова: генетические алгоритмы, нейросети, горение, выхлопные газы, токсичность.

Введение. При изучении внутрицилиндровых процессов в поршневом двигателе внутреннего сгорания (ДВС) методами нелинейной динамики две практически важные задачи проблематично решить регулярными численными методами [1]. Первая состоит в отыскании стационарных и/или равновесных состояний, вторая – в быстром прогнозировании отклика эволюционирующей физико-химической системы на управляющие воздействия. Источник трудностей – высокая размерность и многомасштабность рабочего процесса ДВС как динамической системы. Определенные надежды в предметных исследованиях возлагаются на генетические алгоритмы и нейросети [2].

Применительно к компьютерной имитации рабочего процесса в ДВС авторами разработаны оригинальные вычислительные методы:

- генетический алгоритм отыскания равновесного и/или стационарного состояния физико-химической системы с реакциями и фазовыми переходами;
- процедура оценивания решения задачи Коши применительно к впрыску, смесеобразованию, горению и образованию токсичных веществ в условиях ДВС.

Постановка задачи. Определение равновесного состава некоторой фиксированной массы реагирующей, например, однофазной среды при заданных температуре и давлении, осуществляется путем минимизации суммарного термохимического потенциала системы [3]

$$G = \sum_j \frac{m_j}{\mu_j} \cdot \left[g_j + RT \left(\ln(M \cdot P) + \ln \left(\frac{m_j}{\mu_j} \right) \right) \right] \rightarrow \min \quad (1)$$

при материальных ограничениях

$$\alpha \mathbf{m} - \mathbf{m}_a = 0. \quad (2)$$

В (1), (2) α – массовая доля атомов i -го сорта в веществе j , $\alpha = \{\alpha_{i,j}\}$; $\mathbf{m}$ – вектор масс веществ, $\mathbf{m} = \{m_j\}$; $\mathbf{m}_a$ – вектор масс атомов сорта, $\mathbf{m}_a = \{m_{ai}\}$; μ_j и g_j – молярная масса j -го вещества и его химический потенциал соответственно; M и P – общие масса и давление соответственно; $g_j(T) = H_j + Cp_j(T - 298) - T(S_j + Cp_j \ln T / 298)$, где H_j , Cp_j , S_j – энтальпия образования, теплоемкость при постоянном давлении и энтропия j -го вещества при температуре $T = 298$ К соответственно.

* Работа выполнена при поддержке Фонда ALCOA.

Минимизированию (1), (2) посредством известных генетических алгоритмов [1] препятствуют жесткие ограничения (2): обычно вместо условного минимума (1), (2) ищут абсолютный минимум модифицированного функционала

$$G = \sum_j \frac{m_j}{\mu_j} \left[g_j + RT \left(\ln(MP) + \ln \left(\frac{m_j}{\mu_j} \right) \right) \right] + \lambda (\alpha \mathbf{m} - \mathbf{m}_a)^2 \rightarrow \min. \quad (3)$$

Метод решения. Классические генетические алгоритмы применяют для задач минимизации на компакте параметров:

$$F(\bar{x}) \rightarrow \min \quad (4)$$

$$a_i \geq x_i \geq b_i, \quad i = 1, 2 \dots N. \quad (5)$$

Если в задаче имеются еще ограничения типа

$$\bar{g}(\bar{x}) \leq \bar{0} \quad - \text{покомпонентно}, \quad (6)$$

их модифицируют следующим образом:

$$\tilde{g}(x, \sigma) = \bar{g}(\bar{x}) + \bar{\sigma} = \bar{0}, \quad \sigma_j \geq 0, \quad j = 1, 2 \dots M. \quad (7)$$

Задача сводится к

$$\tilde{F}(\bar{x}, \bar{\sigma}, \bar{\lambda}) = F(\bar{x}) + \sum_{j=1}^M \lambda_j \cdot \|\tilde{g}_j(\bar{x}, \sigma_j)\| \rightarrow \min \quad (8)$$

с ограничением (5), где $\lambda_j > 0$, $j = 1, 2 \dots M$ подбирается исследователем из расчета

$\lambda_j \sim \frac{\|F(\bar{x})\|}{\|\tilde{g}_j(\bar{x}, \sigma_j)\|}$. Норму здесь берут евклидову $\|\tilde{g}_j(\bar{x}, \bar{\sigma})\| = (\tilde{g}_j(\bar{x}, \bar{\sigma}))^2$, а для подбора $\bar{\lambda}$ исполь-

зуют норму Чебышева, т. е. $\lambda_j \sim \frac{\max_{a_i \geq x_i \geq b_i} (|F(\bar{x})|)}{\max_{a_i \geq x_i \geq b_i} (\tilde{g}_j(\bar{x}, \sigma_j))}$.

При высокой размерности i, j задачи вероятность выхода популяции на ограничения (1) ничтожна, и процесс поиска приходится обрывать в одном из локальных минимумов. Понижение размерности системы путем исключения компонентов на основании (1) приводит к артефактам типа отрицательных концентраций или масс.

Принципиальная новизна предлагаемого подхода состоит в переносе ограничений (2) из адаптивной функции в кодировку хромосома: в классическом алгоритме кодировка гена ограничена фиксированным интервалом $[a, b]$, а в модифицированном этот интервал приобретает определенную подвижность в соответствии с ограничениями (2). При каждой генерации гена ищутся граничные значения a и b с учетом реализации предыдущего гена и ограничений (2). Физические соображения позволяют заметно сузить интервал локализации экстремума как сверху (ресурсом свободных атомов), так и снизу (устранением невязки материального баланса). Фактически алгоритм позволяет выбрать базовые компоненты. Резюмируя, грубые локализирующие свойства ограничений (2) выносятся в алгоритм, а тонкие уточняющие сохраняются в самих уравнениях.

Если в классическом алгоритме кодировка гена ограничена фиксированным интервалом $[a, b]$, то в модифицированном этот интервал приобретает определенную подвижность в соответствии с ограничениями (5), (6). При каждой генерации гена ищутся граничные значения a и b с учетом реализации предыдущего гена и действующих ограничений, т. е. для каждого i -го гена $i = 1 \dots N - 1$ ищется максимум при линейных ограничениях (10) и условии (11):

$$m_i \rightarrow \max \quad (9)$$

при линейных ограничениях

$$\begin{cases} \alpha_{1i}m_i + \alpha_{12}m_{i+1} + \dots + \alpha_{1N}m_N = m_{a1} - \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{1j}m_j \\ \alpha_{2i}m_i + \alpha_{22}m_{i+1} + \dots + \alpha_{2N}m_N = m_{a2} - \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{2j}m_j \\ \dots \\ \alpha_{Mi}m_i + \alpha_{Mi}m_{i+1} + \dots + \alpha_{MN}m_N = m_{aM} - \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{Mj}m_j \end{cases} \quad (10)$$

$$N + 1 - i$$

и условиях

$$m_i \geq m_{\min i}, \quad i = 1, 2 \dots N. \quad (11)$$

В результате находится верхний предел значения m_i , т. е. соответствующее значение b . Генерация гена происходит также случайно, но уже с вновь вычисленным значением b , т. е. $m_i \in [a, b(m_k)]$, где $k = 1 \dots i - 1$. Соответственно первый элемент зависит только от ограничений (2). Решая на каждом шаге систему (9) – (11), например симплекс-методом, находим вектор m . Так формулируется универсальная методика нахождения минимума функционала с линейными ограничениями при помощи генетического алгоритма. Важно отметить, что система уравнений имеет высокую размерность только для первых m .

Предложенная здесь модификация гарантирует выполнение различных сложных ограничений. При использовании в алгоритме гена большой длины (обычно применяют кодирование минимальной длиной 2 байта) и умеренного числа элементов этот алгоритм быстрее классического. Максимальное число итераций для классического алгоритма $P_{\text{кл}}$ и модифицированного $P_{\text{м}}$ можно рассчитать по формулам

$$P_{\text{кл}} = 2^L M, \quad (12)$$

$$P_{\text{м}} = N^2 M, \quad (13)$$

где L – длина гена, M – число ограничений, N – число элементов в системе. Из формул (12), (13) следует, что модифицированный алгоритм эффективен при $N < 2^{L/2}$. При хорошей точности $N < 2^{16/2} = 256$, а при высокой – $N < 2^{32/2} = 65536$.

Усовершенствованный алгоритм в сочетании со стандартным симплекс-методом решения (9)–(11) требует объемных вычислений при каждой генерации гена и таким образом оказывается неэффективным при решении задачи (1), (2). Поэтому здесь можно воспользоваться свойством системы $\alpha_{ij} \geq 0$ и не решать (9)–(11), а просто ограничить следующий генерируемый ген остатками масс элементов:

$$b_i = \min_{k \in [1, M]} \left(\frac{m_{ak} - \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{kj}m_j}{\alpha_{ki}} \right). \quad (14)$$

Фактически предлагаемый способ реализует выбор самим генетическим алгоритмом базовых компонентов в реагирующей системе, однако при этом не гарантируется строгое соблюдение материального баланса. Это несовершенство метода легко устраняется классической коррекцией, состоящей в замене минимизации (1), (2) на минимизацию (3). Таким способом локализуемые масштабные свойства ограничений (2) вынесены в алгоритм, а тонкие уточняющие – в уравнения. В основу предложенного разделения масштабов положены естественные физические соображе-

ния: они позволяют заметно сузить интервал локализации экстремума как сверху – ресурсом свободных атомов, так и снизу – устранением невязки материального баланса.

При введении в систему свободных химических элементов (что не противоречит физическим законам, но в некоторых случаях нежелательно ввиду их низкой концентрации) ограничение по минимальному остатку элемента удовлетворяет условиям (2) всегда: остаток элемента выступает как компонент системы. Такой подход является более общим при рассмотрении систем с большим числом элементов, компонентов и реакций.

Реализация и результаты вычислительного эксперимента. Интерфейс компьютерной реализации алгоритма показан на рис. 1. Термодинамические константы реагентов, продуктов и промежуточных веществ хранятся в проблемно-ориентированной БД. На данный момент также реализованы функции импорта первичной термодинамической информации из стандарта программы STANJAN [4].

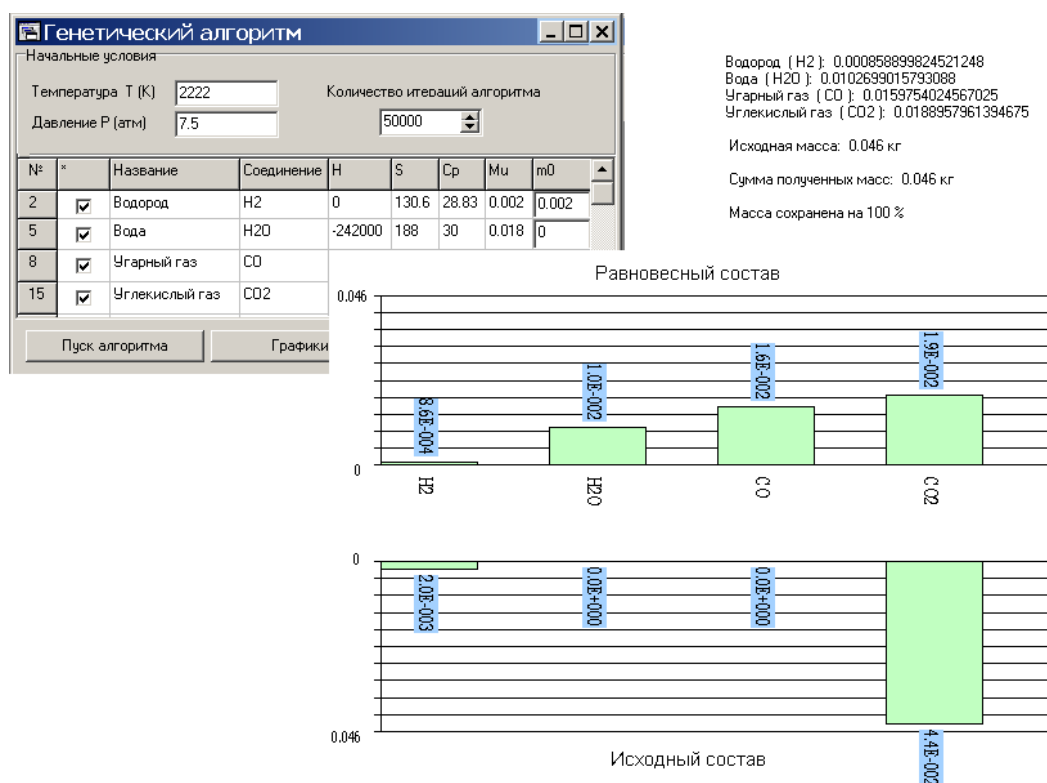


Рис. 1. Результат расчета равновесного состава в системе CO_2 (1 моль) + H_2 (1 моль) $\leftrightarrow$ CO + H_2O при $T = 2222 \text{ K}$, $P = 7,5 \text{ атм}$

Верификация алгоритма осуществлялась на интересных для авторов системах: крекинг углеводородов, горение традиционных нефтегазовых и перспективных спиртовых моторных топлив, продукты сгорания различных ракетных топлив. Пример такого сопоставительного расчета приведен на рис. 2: посредством усовершенствованного генетического алгоритма определен равновесный состав системы $\text{H}_2\text{O} - \text{H}_2 - \text{OH} - \text{O}_2 - \text{O} - \text{H}$ при давлении 5 атм в диапазоне температур 2000–6000 К. Результаты сопоставления рассчитанного равновесного состава продуктов сгорания различных моторных и ракетных топлив с данными работ [5], [6] свидетельствуют, что главные компоненты химического равновесия определяются предложенным методом вполне надежно.

Во всех изученных системах содержание основных компонентов определялось при помощи усовершенствованного генетического алгоритма с приемлемой погрешностью. Зная содержание всех ведущих компонентов, нетрудно рассчитать также важные, например, в плане токсичности, малые составляющие равновесной смеси. Это ценно, поскольку размерность задачи существенно

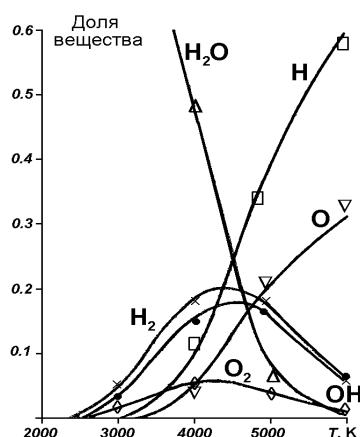


Рис. 2. Рассчитанные парциальные концентрации компонентов:
 Δ – H_2O , $\times$ – H_2 , $\bullet$ – OH , $\diamond$ – O_2 ,
 $\square$ – H , ∇ – O (сплошные линии – эталонные данные [6])

зависит от того, насколько верно удастся априорно выбрать номенклатуру главных компонентов в химическом равновесии.

Перспективы развития биоинспирированных методов. Отрабатываемый авторами нейросетевой алгоритм быстрого оценивания решения задачи Коши сейчас «обучается» на фрагментных задачах:

- имитация динамики распыла – испарения в условиях дизеля;
- прогнозирование мощности и экономичности рабочего цикла по входным параметрам;
- определение содержания токсичных веществ в отработавших газах.

Следует отметить, что если «обучение» возможностям первой и второй задачи удастся ограничить расчетными «обучающими» данными, для уверенного прогнозирования токсичности выхлопа придется привлекать экспериментальный материал. Тем не менее, об адекватности этого алгоритма целям совершенствования программного комплекса «Мотор» [7], [8] свидетельствует успешность «обучения» нейросети на результатах представительного множества численных расчетов. Сеть позволяет прогнозировать токсичность выхлопа известного ей двигателя в пределах обучающей выборки. Однако в силу существенной нелинейности внутрицилиндровой физико-химической кинетики надежность такого прогнозирования пока недостаточна.

Внедрение новых биоинспирированных имитационно-аналитических средств в состав системы «Мотор», интерфейс и некоторые возможности которой показаны на рис. 3, расширяет ее функциональность, прежде всего, в части приспособленности для комплексной оптимизации и управления внутрицилиндровыми процессами.

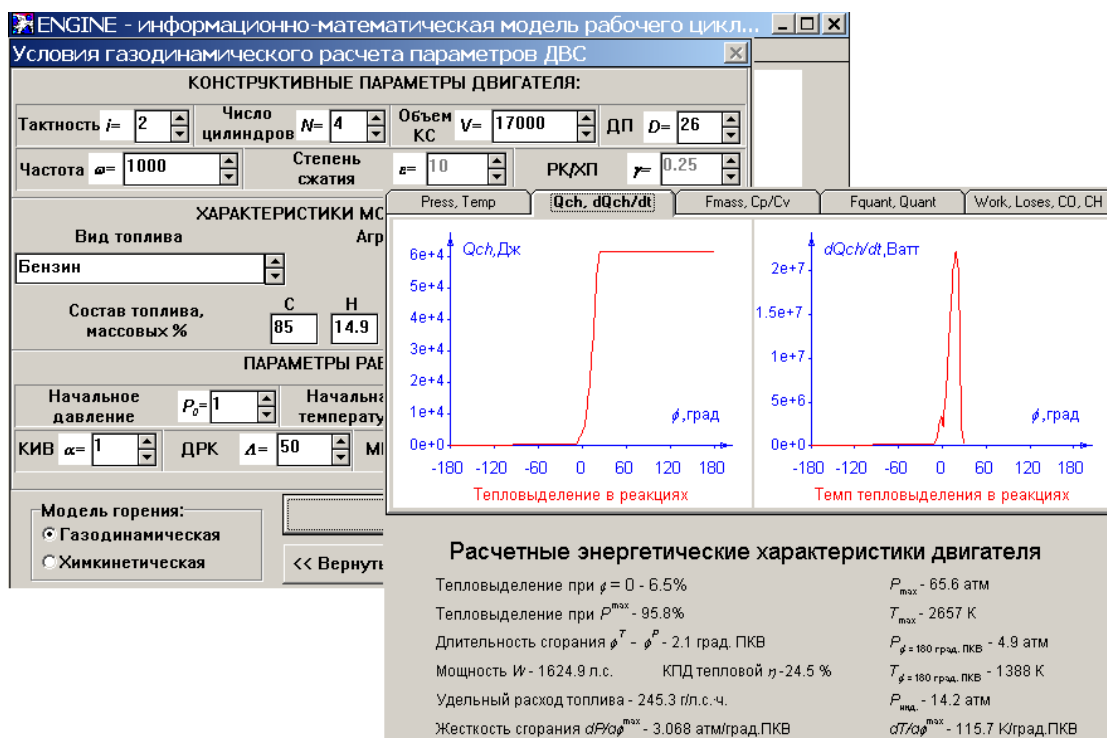


Рис. 3. Интерфейс и функциональность программного комплекса «Мотор» [8]

Заключение. Предложено усовершенствование генетического алгоритма для расчета стационарных состояний динамических систем химической природы, например, двигателя внутреннего сгорания. Особенностью разработки является разнесение малых и больших параметров уравнений между уравнениями и алгоритмом их решения.

На данный момент интегрированная в комплекс «Мотор» [7], [8] система моделей и методов, в том числе биоинспирированных, позволяет:

- рассчитывать энергетические характеристики ДВС и токсичность выхлопа по CO , C_xH_y , RCHO , NO при использовании различных топлив и на переходных режимах;
- выявлять ведущие физико-химические процессы во внутрицилиндровой кинетике;
- анализировать динамику внутрицилиндровых процессов и вырабатывать способы их оптимизации;
- формулировать критерии параметрической оптимизации;
- разрабатывать эффективные способы управления.

Библиографический список

1. Физико-химические процессы в газовой динамике: компьютеризованный справочник / под ред. Г.Г. Черного, С.А. Лосева. – М.: Изд-во МГУ, 1995. – 434 с.
2. Рутковская Д. Нейронные сети, генетические алгоритмы и нечеткие системы / Д. Рутковская, М. Пилиньский, Л. Рутковский; пер. с польск. И.Д. Рудинского. – М.: Горячая линия – Телеком, 2006. – 216 с.
3. Джонсон К. Численные методы в химии: пер. с англ. / К. Джонсон. – М.: Мир, 1983. – 288 с.
4. Reynolds W.C. The element potential method for chemical equilibrium analysis: implementation in the interactive program STANJAN version 3 / W.C. Reynolds. – Stanford: Dept. of Engineering, Stanford University, 1986.
5. Щетинков Е.С. Физика горения газов / Е.С. Щетинков. – М.: Наука, 1965. – 740 с.
6. Алемасов В.Е. Теория ракетных двигателей / В.Е. Алемасов. – М.: Оборонгиз, 1962. – 476 с.
7. Моделирование кинетики неравновесных физических процессов и реакций в многокомпонентном турбулентном заряде поршневых двигателей внутреннего сгорания / В.Н. Бакулин, Е.Н. Ладоша, В.А. Потопахин, О.В. Яценко // Мат. моделирование. – 2007. – Т. 19, № 12. – С. 81–97.
8. Системная имитация динамики поршневого ДВС: фазовые переходы, турбулентность, реакции / Е.Н. Ладоша, О.В. Яценко, Д.С. Цымбалов: свид. об офиц. рег. ПрЭВМ № 2009615832. – М.: РОСПАТЕНТ, 2009.

Материал поступил в редакцию 15.07.11.

References

1. Fiziko-ximicheskie processy` v gazovoj dinamike: komp`yuterizovanny`j spravochnik / pod red. G.G. Chyornogo, S.A. Loseva. – M.: Izd-vo MGU, 1995. – 434 s. – In Russian.
2. Rutkovskaya D. Nejronny`e seti, geneticheskie algoritmy` i nechytokie sistemy` / D. Rutkovskaya, M. Pilin`skij, L. Rutkovskij; per. s pol`sk. I.D. Rudinskogo. – M.: Goryachaya liniya – Telekom, 2006. – 216 s. – In Russian.
3. Dzhonson K. Chislenny`e metody` v ximii: per. s angl. / K. Dzhonson. – M.: Mir, 1983. – 288 s. – In Russian.
4. Reynolds W.C. The element potential method for chemical equilibrium analysis: implementation in the interactive program STANJAN version 3 / W.C. Reynolds. – Stanford: Dept. of Engineering, Stanford University, 1986.
5. Shhetinkov E.S. Fizika gorenija gazov / E.S. Shhetinkov. – M.: Nauka, 1965. – 740 s. – In Russian.
6. Alemasov V.E. Teoriya raketny`x dvigatelej / V.E. Alemasov. – M.: Oborongiz, 1962. – 476 s. – In Russian.
7. Modelirovanie kinetiki neravnovesny`x fizicheskix processov i reakcij v mnogokomponentnom turbulentnom zaryade porshnevy`x dvigatelej vnutrennego sgoraniya / V.N. Bakulin, E.N. Ladosha, V.A. Potopaxin, O.V. Yacenko // Mat. modelirovanie. – 2007. – T. 19, # 12. – S. 81–97. – In Russian.
8. Sistemnaya imitaciya dinamiki porshneвого DVS: fazovy`e perexody`, turbulentnost`, reakcii / E.N. Ladosha, O.V. Yacenko, D.S. Cy`mbalov: svid. ob ofic. reg. PrE`VM # 2009615832. – M.: ROSPATENT, 2009. – In Russian.

APPLICATION OF BIO-INSPIRED TECHNIQUES TO MODEL TOXIC PARAMETERS OF INTERNAL COMBUSTION ENGINE

D.S. GIRSH, E.N. LADOSHA, S.N. KHOLODOVA, D.S. TSYMBALOV

(Don State Technical University)

Some original modifications of the genetic algorithms for analyzing the stationary states of the chemical dynamic systems at the defined thermodynamic parameters, IC engines among others, are offered. The development feature is allocation of small and large equation parameters among the equations and their solutions. Along with the known neuronet methods, the development can be integrated in 'Engine' simulation system.

Keywords: genetic algorithms, neuronets, combustion, exhaust, toxicity.