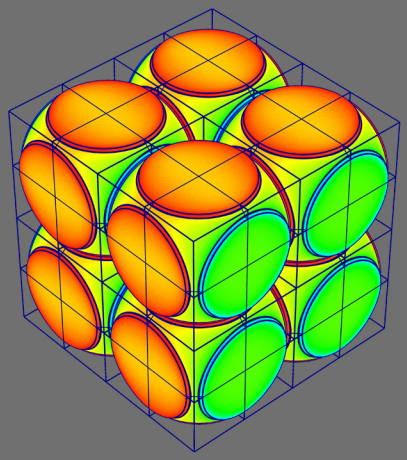
ISSN 2309-3684



Математическое моделирование и численные методы

Романчук С.П., Корчагин С.А., Терин Д.В. Моделирование характеристик нанокомпозитного материала со сферическими включениями применяя генетический алгоритм. Математическое моделирование и численные методы, 2018, № 2, с. 21–31

Источник: https://mmcm.bmstu.ru/articles/161/

Параметры загрузки:
IP: 216.73.217.22
18.11.2026 12:59:45

УДК 51-72:519.688

Моделирование характеристик нанокомпозитного материала со сферическими включениями применяя генетический алгоритм

© С.П. Романчук, С.А. Корчагин, Д.В. Терин

СГТУ имени Гагарина Ю.А., Саратов, 410054, Россия

Рассмотрен подход решения задачи подбора состава нанокомпозитного материала с требуемыми характеристиками. В качестве объекта исследования выступает нанокомпозитный материал который состоит из однородной матрицы и включений в форме, приближенной к сфероидальной. Для решения поставленной задачи реализован программный комплекс, алгоритм подбора разработан на основе генетического алгоритма. Проведен анализ эффективности разработанного метода и зависимости скорости схождения метода от различных параметров.

Ключевые слова: *математическое моделирование, нанокомпозитные материалы, генетические алгоритмы, программный комплекс.*

Введение. Нанокомпозитные материалы, в состав которых входят полупроводники, металлы и другие соединения, обладают особыми оптическими и электродинамическими характеристиками [1]. Данное обстоятельство вызывает огромный интерес исследователей во всем мире к созданию новых функциональных материалов с заданными характеристиками. Большое количество работ направлено на исследование слоистых структур и сред с включениями различной формы [2-5]. Особенностью таких исследований является огромное многообразие характеристик компонент, входящих в состав смеси, которые могут кардинально повлиять на свойства материала [6]. Что, в свою очередь, приводит к повышению сложности исследований нанокомпозитных сред.

Особый интерес вызывает решение задачи поиска состава композитного материала с заданными характеристиками. И автоматизация процесса поиска является перспективным направлением, позволяющем сократить сроки и издержки разработки и создания новых функциональных материалов. Реализовать поиск композитного материала с требуемыми свойствами на заданном многомерном множестве характеристик структуры, можно с использованием генетического алгоритма [7], который представляет собой эвристический подход к решению задачи поиска. Такой подход основан на математическом моделировании процессов в природе, таких как кроссовер, мутации, отбор, и позволяют находить оптимальные или приближенные к ним решения [8, 9]. Целью данной работы является создание программного

комплекса для подбора состава нанокомпозитного материала с заданными характеристиками на основе генетического алгоритма.

Математическая модель. Объектом исследования является нанокомпозитная среда, состоящая из однородной матрицы с помещенными в неё частицами в форме, приближенной к сфероидальной (рис. 1).

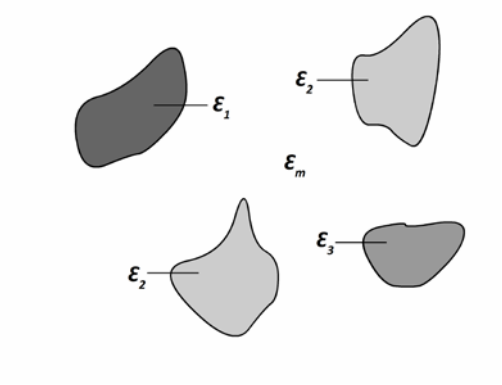


Рис. 1. Физическая модель нанокомпозитной среды

Аппроксимируя форму неоднородных частиц эллипсоидом вращения, получим модель нанокомпозита с включениями в форме сфероидов с длинами полуосей a, b, c (b = c) вдоль координатных линий (рис. 2). В рамках теории эффективной среды такую нанокомпозитную среду можно рассматривать только в случае выполнения следующего условия: длинна волны внешнего электромагнитного поля на порядок превышает размер частиц по трем направлениям и расстояние между частицами [10].

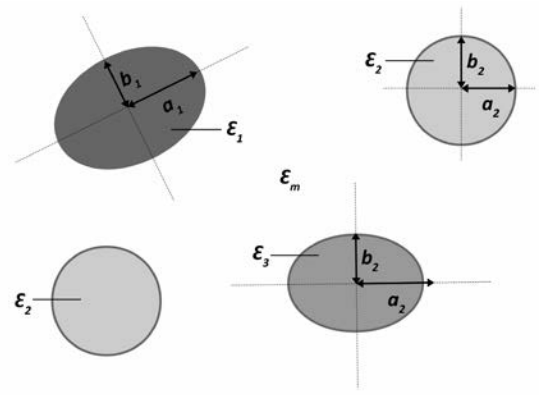


Рис. 2. Модель нанокомпозитной среды аппроксимированных по форме частиц

Эффективную диэлектрическую проницаемость статистической смеси выразим используя подход Максвелла-Гарнетта [11], для смесей с n числом компонент в общем виде:

$$\frac{\varepsilon_e - \varepsilon_m}{\rho(\varepsilon_e - \varepsilon_m) + \varepsilon_m} = \sum_{i=1}^{n} v_i \frac{\varepsilon_i - \varepsilon_m}{\rho\left(\varepsilon_i - \varepsilon_m\right) + \varepsilon_m}, \qquad (1)$$

где v_i – объемная доля i – го компонента, ε_i, ε_m, ε_e – диэлектрическая проницаемость i – го компонента, матрицы и эффективная проницаемость смеси, ρ – фактор деполяризации i – го типа частиц, $\rho\| = \frac{1}{1-\xi^2}\left[1-\xi\frac{\arcsin\left(\sqrt{1-\xi^2}\right)}{\sqrt{1-\xi^2}}\right]$, $\rho\| + 2\rho\perp = 1$, $\xi = a/b$, $a,b-$ длина полярной и экваториальной осей сфероида соответственно [12].

Метод решения поставленной задачи. Задача поиска состава нанокомпозитной матричной смеси с требуемыми характеристиками является оптимизационной с большим количеством параметров и нелинейной зависимостью свойств материала от состава. В таком случае для решения подходят эвристические методы и в частности генетический алгоритм. Генетический алгоритм является методом оптимизации, основанным на имитации естественного отбора и работает с конечным множеством решений, создавая новые путем использования «генетических» операторов скрещивания, мутации и селекции [13]. Количественная оценка свойств объекта задается векторами, называемыми внешними, внутренними и выходными параметрами.

Внешние параметры $\overline{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n)$ воздействуют на объект исследования (внешнее электромагнитное поле) и задаются как константные значения или функции. Внутренние параметры или управляющие переменные $\overline{\beta} = (\beta_1, \beta_2, \ldots, \beta_m)$ (состав композита, форма частиц и др.) характеризуют внутреннее состояние объекта и принимают значения на множестве $\overline{\beta} \in B$. Выходные параметры или качественные характеристики объекта $\overline{\gamma} = (\gamma_1, \gamma_2, \ldots, \gamma_k)$ (диэлектрическая проницаемость композита) дают численную оценку свойствам объекта исследования и зависят от управляющих переменных $\overline{\gamma} = \overline{\gamma}(\overline{\beta})$.

Для решения оптимизационной задачи необходимо выбрать наилучшее решение на основе количественного показателя φ $(\varphi(\overline{\beta}) \in \sigma)$. Где σ является шкалой выходного параметра γ_i. Выбор оптимального решения сводится к выбору только тех решений, которые соответствуют наименьшему значению критерия φ $\left(\varphi' = \varphi\left(\overline{\beta}'\right) = \min_{\beta \in B} \varphi\left(\overline{\beta}\right)\right)$, где $\overline{\beta}'$ – является оптимальным решением, $\varphi' = \varphi\left(\overline{\beta}'\right)$ – наименьшее значение критерия в области поиска. Таким образом необходимо найти такую структуру композита, значение диэлектрической проницаемости которой максимально близка к заданной.

Наименьшей неделимой единицей вида подверженной эволюционному преобразованию, является особь. В качестве особи выступает вариант композитного материала, который представлен вектором внутренних параметров или генотипом. При взаимодействии особи с внешней средой проявляются внешние признаки (взаимодействие электромагнитного излучения с композитом) или фенотип. Фенотип характеризует приспособленность особи, т.е. появляется критерий оценки отдельной особи по отношению к другим. Множество особей с близким генотипом образуют популяцию, ареалом служит ограниченное множество поиска, на котором существуют особи.

В общем виде генетический алгоритм состоит из нескольких ключевых фаз (рис. 3). На первом этапе проводится генерация стартовой популяции и оценка приспособленности особи посредством вычисления целевой функции.



Рис. 3. Обобщенная блок-схема генетического алгоритма

Зачастую генерация проводится случайным образом. Далее проводится скрещивание в популяции, после чего популяция увеличивается в численности (в зависимости от выбора механизма скрещивания, популяция может удвоиться, вырасти вчетверо или измениться в другой пропорции). Новое поколение проходит фазу мутирования, т.е. меняется генотип отдельных особей потомков в случайном режиме или по заданному алгоритму. На следующем этапе для каждой особи проводится анализ приспособленности (делается расчет целевой функции композита и определяется насколько полученные характеристики близки к искомым). После чего в популяции остаются только самые приспособленные особи, остальные уничтожаются. Если на данном шаге найден композит с требуемыми свойствами, процесс останавливается, иначе производится переход к шагу скрещивания.

Программный комплекс. Для подбора состава нанокомпозитного материала с заданными характеристиками реализован программный комплекс на языке C++. Метод подбора реализован на основе генетического алгоритма.

На рис. 4 изображены основные классы приложения. Класс Evolution моделирует процесс эволюции (скрещивание, мутации, отбор). Для возможности использования свойств материалов разработан класс MaterialList, который позволяет получать характеристики различных материалов и соединений в зависимости от длины волны внешнего электромагнитного излучения (данные о свойствах загружены из источника [14]).

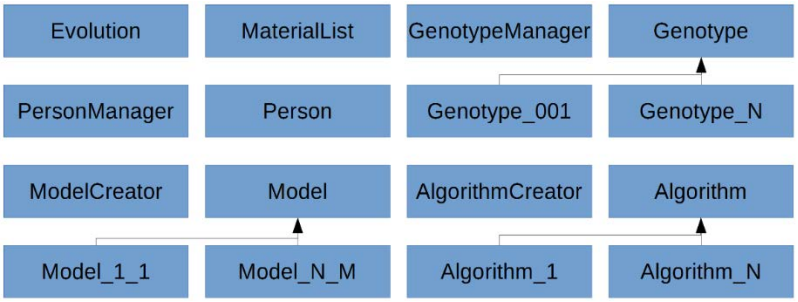


Рис. 4. Иерархия классов

Перед запуском процесса эволюции создается генотип (класс Genotype), и настраивается для текущей задачи (рис. 5). Настройка и управление генотипом производится при помощи класса GenotypeManager. GenotypeLibrary содержит набор генотипов для различных композитов (структура, количество компонент, форма включений). После чего генерируется популяция (класс Person) и запускается процесс эволюции. Для работы целевой функции разработан класс Model, который инкапсулирует метод расчета свойств композита и класс Algorithm для реализации численных методов поиска корней полиномиальных уравнений с комплексными переменными.

Численное моделирование. На результат работы генетического алгоритма сильно влияют различные параметры алгоритма, такие как численность популяции, вероятность мутаций и др. Для исследования влияния данных параметров проведен численный эксперимент.

Влияние численности популяции определялось следующим образом, для каждой численности (10, 50, 100, 500 особей) генерировалось по 100 экспериментов со случайными характеристиками генотипа и одинаковой целевой функцией. Для измерений эволюция ограничивалась количеством итераций и на основе расчетов построен график зависимости среднего значения целевой функции на каждой итерации

(рис. 6) и графики максимального, минимального и среднего значения целевой функции (рис.7).



Рис. 5. Структурная схема реализованного генетического алгоритма

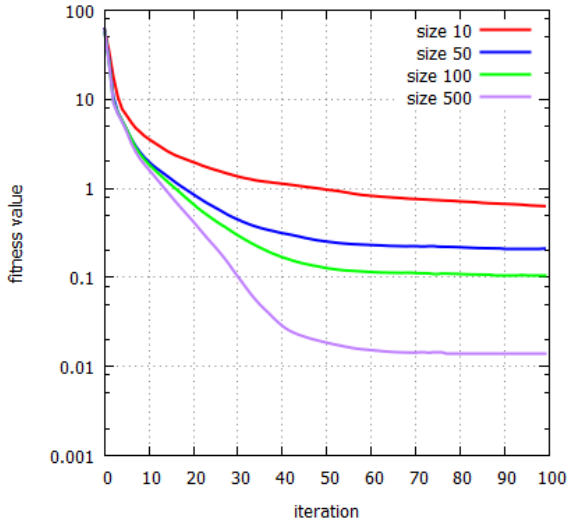
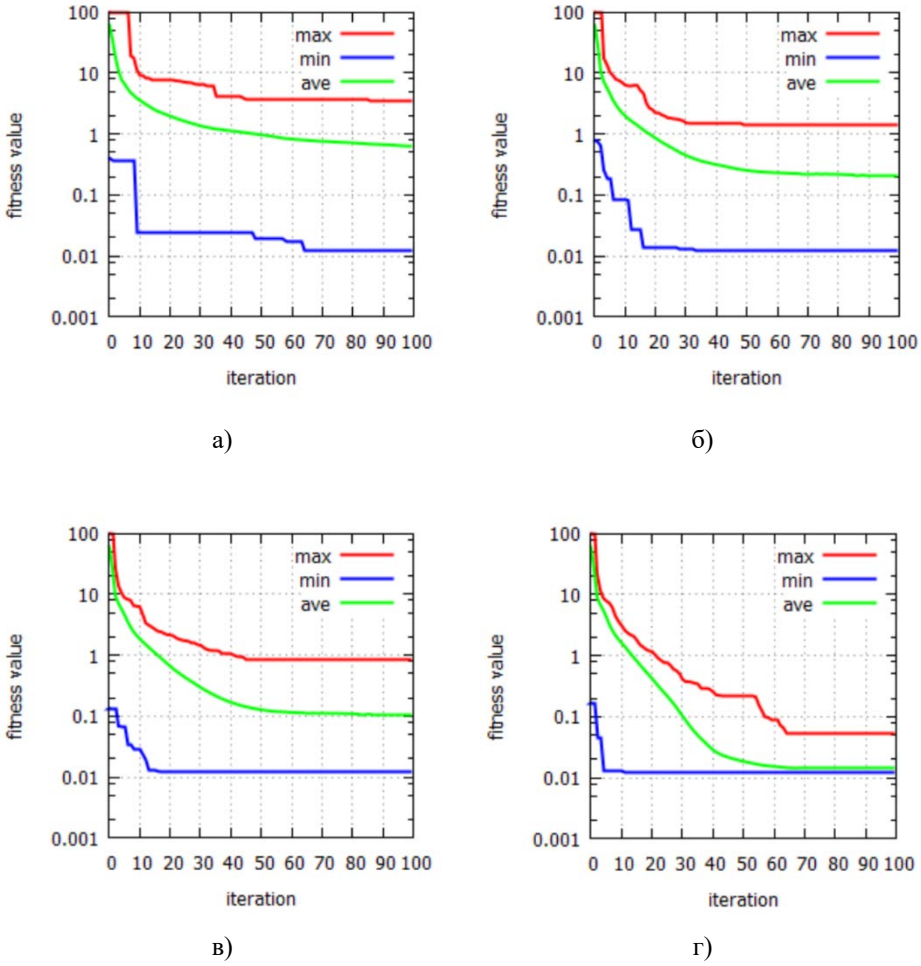


Рис. 6. Влияние численности популяции на скорость сходимости (усредненные значения)



а) б)

в) г)

Рис. 7. Влияние численности популяции на скорость сходимости:

а – численность популяции 10; б – численность популяции 50; в – численность популяции 100; г – численность популяции 500

Для оценки влияния коэффициента мутации генерировалось по 1000 экспериментов со случайными характеристиками генотипа и одинаковой целевой функцией. Для измерений эволюция ограничивалась количеством итераций и численностью популяции, на основе расчетов построены графики максимального, минимального и среднего значения целевой функции (рис.8).

Из графиков видно, что сильное влияние на скорость сходимости генетического алгоритма оказывает численность популяции. Высокая численность позволяет охватить наибольший ареал вариантов решений и произвести больше расчетов за итерацию. Коэффициент мута-

ции напротив, не оказал заметного влияния на расчеты. Это обусловлено прикладной задачей и конфигурацией генотипа особи. Данная задача отличается очень малым количеством генов, следствием чего является отсутствие зависимости от коэффициента мутации.

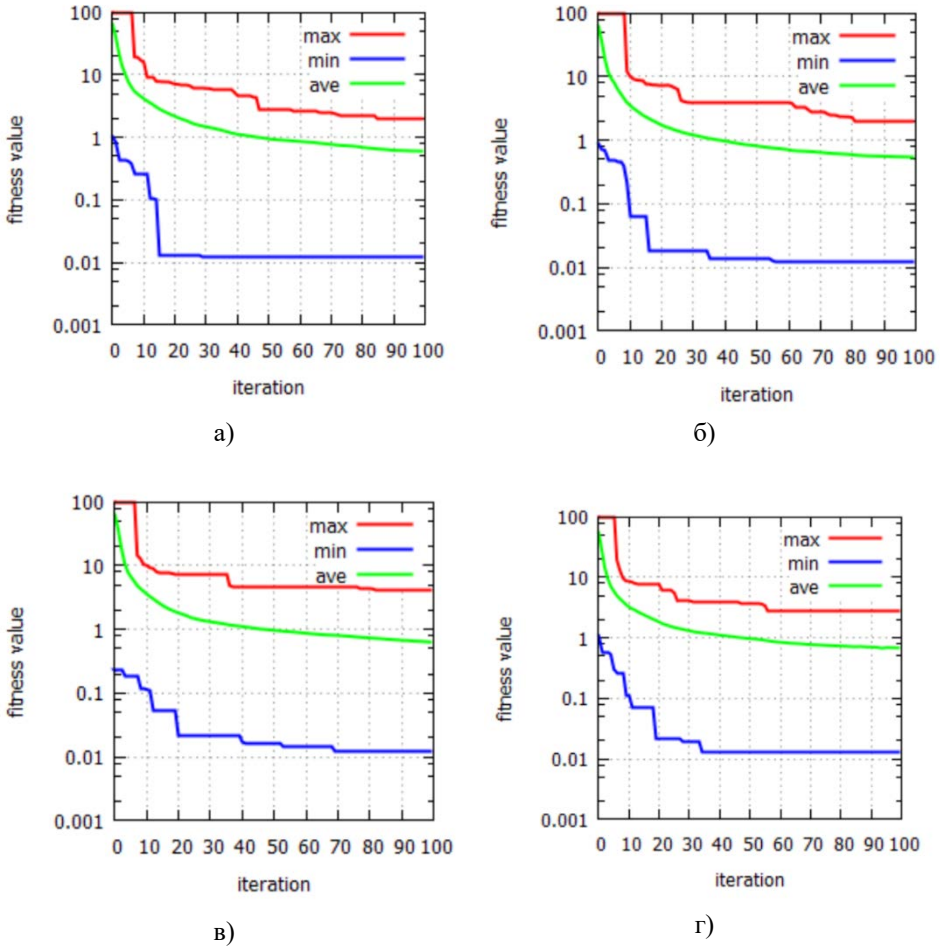


Рис. 8. Влияние коэффициента мутации на скорость сходимости:

а – оэффициент 1E-5 10; б – коэффициент 1E-4; в – коэффициент 1E-3; г – коэффициент 1E-2

Заключение. В работе приведен алгоритм решения задачи поиска состава композитного материала с заданными характеристиками, на примере нанокомпозитной среды, состоящей из однородной матрицы с помещенными в неё частицами в форме, приближенными к сфероидальной. Метод расчета основан на генетическом алгоритме, который является методом оптимизации и имитации естественного отбора. Для решения поставленной задачи разработан программный комплекс и с

его помощью проведен анализ влияния численности популяции и коэффициента мутации на скорость сходимости метода.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №18-32-00025.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Виноградов А. П., Дорофеенко А. В., Зухди С. К вопросу об эффективных параметрах метаматериалов. *УФН*. 2008. Т. 178, № 5. С. 511-518.

[2] Емец Ю.П. Эффективная диэлектрическая проницаемость трехкомпонентных композиционных материалов с анизотропной структурой. *Журнал технической физики*, 2005, т. 75, вып. 2, с. 67–72.

[3] Корчагин С.А., Терин Д.В., Клинаев Ю.В. Моделирование фрактального композита и исследование его электрических характеристик. *Математическое моделирование и численные методы*, 2017, № 1 (13), с. 22–31.

[4] Корчагин С.А., Терин Д.В., Романчук С.П. Синергетика математических моделей для анализа композиционных материалов. *Известия высших учебных заведений. Прикладная нелинейная динамика*, 2015, т. 23, № 3, с. 55–64.

[5] Димитриенко Ю.И., Губарева Е.А., Сборщиков С.В. Многомасштабное моделирование упругопластических композитов с учетом повреждаемости. *Математическое моделирование и численные методы*, 2016, № 2 (10), с. 3–23.

[6] Виноградов А.П. *Электродинамика композитных материалов*. Под ред. Б.З. Каценеленбаума. М.: Эдиториал УРСС, 2001. С. 151-163.

[7] *Генетические алгоритмы*. Л.А. Гладков, В.В. Курейчик, В.М. Курейчик. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2010. С. 368

[8] Лисов О.И. Генетические алгоритмы решения переборных задач оптимизации автоматизированных информационных систем. *Электронные информационные системы*, 2017. №1. С. 5-19.

[9] Лютов, А.Г. Оптимизация управления процессом нанесения гальванического покрытия в ваннах с многосекционными анодами с использованием генетических алгоритмов. А.Г. Лютов, А.Р. Ишкулова. *Вестник ЮУрГУ. Серия «Компьютерные технологии, управление, радиоэлектроника»*, 2017. Т. 17, № 1. С. 103–111. DOI: 10.14529/ctcr170111

[10] Головань Л.А., Тимошенко В.Ю., Кашкаров П.К. Оптические свойства нанокомпозитов на основе пористых систем. *Успехи физических наук*, 2007. Т. 177 № 6. С. 619-638.

[11] Maxwell-Garnett J. C. // Philos. Trans. R. Soc. London. 1904. P. 203, 385.

[12] Романчук С.П., Терин Д.В., Ревзина Е.М. Эффективная диэлектрическая проницаемость статистической смеси сфероидов. *Материалы Всероссийской научной школы-семинара*. Ответственный редактор Д.А. Усанов. 2015. С. 75-76.

[13] Гордиенко М.В. Об исследовании эффективности стандартного генетического алгоритма. *Актуальные проблемы авиации и космонавтики*, 2016. №12. С.492-494

[14] Palik E.D. Handbook of optical constants of solids. *Academic Press*, San Diego, 1997. P. 999.

Статья поступила 21.02.2018

Ссылку на эту статью просим оформлять следующим образом:

Романчук С.П., Корчагин С.А., Терин Д.В. Моделирование характеристик нанокомпозитного материала со сферическими включениями применяя генетический алгоритм. *Математическое моделирование и численные методы*, 2018, № 2, с. 21–31.

Романчук Сергей Петрович – ассистент кафедры «Естественные и математические науки» СГТУ имени Гагарина Ю.А. Область научных интересов: математическое и компьютерное моделирование, нанокомпозитные среды, информационные технологии. e-mail: romanchuk_sergey@bk.ru

Корчагин Сергей Алексеевич – ассистент кафедры «Естественные и математические науки» СГТУ имени Гагарина Ю.А. Область научных интересов: математическое и компьютерное моделирование, композиционные материалы, нелинейная динамика, информационные технологии. e-mail: korchaginser@gmail.com

Терин Денис Владимирович – канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры «Информационная безопасность автоматизированных систем» СГТУ имени Гагарина Ю.А. Область научных интересов: математическое моделирование микро- и наноэлектромеханических систем на основе композитных сред, свойства широкого класса ультрадисперсных материалов, нелинейная динамика, информационные технологии. e-mail: terinden@mail.ru

Simulation of the characteristics of a nanocomposite material with spherical inclusions using the genetic algorithm

© S.P. Romanchuk, S.A. Korchagin, D.V. Terin

Yuri Gagarin State Technical University of Saratov, Saratov, 410054, Russia

The approach of solving the problem of selecting the composition of a nanocomposite material with the required characteristics is considered. As an object of research is a nanocomposite material that consists of a homogeneous matrix and inclusions of a spheroidal shape. To solve this problem, a software package is implemented, the selection algorithm is developed based on the genetic algorithm. The efficiency of the developed method and the dependence of the rate of convergence of the method on various parameters are analyzed.

Keywords: *mathematical simulation, nanocomposite materials, genetic algorithms, software complex*

REFERENCES

[1] Vinogradov AP, Dorofeenko AV, Zukhdi S. *UFN – UFN*. 2008. T. 178, No. 5. S. 511-518.

[2] Emets Yu.P. *Zhurnal tekhnicheskoy fiziki — Technical Physics. The Russian Journal of Applied Physics*, 2005, vol. 75, no. 2, pp. 67–72.

[3] Korchagin S.A., Terin D.V., Romanchuk S.P. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Prikladnaya nelineynaya dinamika – Izvestiya VUZ. Applied Nonlinear Dynamics*, 2015, vol. 23, no. 3, pp. 55–64.
[4] Korchagin S.A., Terin D.V., Klinaev Yu.V. Simulating a fractal composite and studying its electrical characteristics. *Mathematical Modeling and Computational Methods*, 2017, no 1 (13), pp. 22–31.
[5] Dimitrienko Yu.I., Gubareva E.A., Sborschikov S.V. *Matematicheskoe modelirovanie i chislennye metody – Mathematical Modeling and Computational Methods*, 2016, no. 2 (10), pp. 3–23.
[6] Vinogradov A.P. *Electrodinamics of composite materials*, ed. B.Z. Katzenelenbaum. Moscow: Editorial URSS, 2001. P. 151-163.
[7] *Genetic algorithms* / L.A. Gladkov, V.V. Kureichik, V.M. Kurejchik. Moscow: FIZMATLIT, 2010. P. 368
[8] Lisov O.I. Genetic algorithms for solving search problems in optimization of automated information systems. *Electronic information systems*, 2017. no. 1. P. 5-19.
[9] Lutov A.G., Ishkulova A.R. Optimization of Control of Plating Process in Bath with Multisection Anodes with Use of Genetic Algorithms. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Computer Technologies, Automatic Control, Radio Electronics*, 2017, vol. 17, no. 1, pp. 103–111. (in Russ.) DOI: 10.14529/ctcr170111
[10] Golovan LA, Timoshenko V.Yu., Kashkarov P.K. Optical properties of nanocomposites based on porous systems, *Physics-Uspekhi*. 2007. T. 177 No. 6. pp. 619-638.
[11] Maxwell-Garnett, J. C., Philos. Trans. R. Soc. London. 1904. P. 203, 385.
[12] Romanchuk S.P., Terin D.V., Revzin E.M. *Materialy Vserossiyskoi nauchnoi shkoly-seminara – Materials of the all-Russian scientific school-seminar*. Executive editor D.A. usanov. 2015. P. 75-76.
[13] Gordienko M.V. On the investigation of the effectiveness of the standard genetic algorithm. *Actual problems of aviation and cosmonautics*. 2016. № 12. P.492-494
[14] Palik E.D. Handbook of optical constants of solids. *Academic Press*, San Diego, 1997. P. 999.

Romanchuk S.P., assistant, Department of Natural and Mathematical Sciences, Yuri Gagarin State Technical University of Saratov. Science research interests include: mathematical and computer simulation, nanocomposite materials, information technologies. e-mail: romanchuk_sergey@bk.ru

Korchagin S.A., assistant, Department of Natural and Mathematical Sciences, Yuri Gagarin State Technical University of Saratov. Science research interests include: mathematical and computer simulation, composite materials, nonlinear dynamics, information technologies. e-mail: korchaginser@gmail.com

Terin D.V., Cand. Sc. (Phys.-Math.), Assoc. Professor, Department of Information Security of Automated Systems, Yuri Gagarin State Technical University of Saratov. Science research include: mathematical simulation of micro- and nanoelectromechanical systems based on composite media, properties of a wide class of ultradisperse materials, nonlinear dynamics, information technology. e-mail: terinden@mail.ru