



РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

ЗНЧ | ЗАБАБАХИНСКИЕ
НАУЧНЫЕ ЧТЕНИЯ
2025

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ СТОХАСТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ОПТИМИЗАЦИИ НА ПРИМЕРЕ ПОЛУЭМПИРИЧЕСКОГО МНОГОФАЗНОГО УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ АЛЮМИНИЯ

В. Н. Михайлов, В. М. Елькин

Российский Федеральный Ядерный Центр – Всероссийский НИИ технической физики
имени академика Е.И. Забабахина, Снежинск, Россия

Докладчик: Михайлов Вадим Николаевич

Ведущий инженер математик

19.05-23.05.2025



Мотивация и цель

В процессе создания современных полуэмпирических уравнений состояния (УРС) часто возникает проблема нахождения параметров, которые невозможно получить из эксперимента. Как правило, приходится решать задачу поиска минимума функции многих переменных с заданными ограничениями. Проблема может сильно усложниться, если исследуемое вещество имеет несколько фаз, поскольку это приводит к кратному увеличению неизвестных параметров. Помимо этого, расчеты вдоль границ фазовых превращений обычно требуют больших вычислительных затрат.

Для решения задач подобного типа в РФЯЦ-ВНИИТФ используются различные варианты **генетического алгоритма** [1]. Однако в последнее время стали появляться работы где в качестве метода параметризации УРС используется **метод роя частиц** [2, 3].

Основным стимулом появления данной работы явилось отсутствие публикаций где сравниваются эти методы применительно к параметризации УРС. Необходимо понимать есть ли преимущества у метода роя частиц по сравнению с генетическим алгоритмом и в каких ситуациях методы будут наиболее эффективными.



Генетический алгоритм

Генетические алгоритмы (Real genetic algorithm, RGA) – это класс методов, основанный на имитации процессов, протекающих в природе, в частности таких как естественный отбор, скрещивание и мутация.

Общую схему алгоритма можно записать в символьном виде:

1. Случайным образом формируется популяция состоящая из m особей (хромосом) размером n

$$P^0 = \{\vec{X}_1^0, \vec{X}_j^0, \dots, \vec{X}_m^0\} \quad \vec{X}_j^0 = (x_{j,1}^0, x_{j,i}^0, \dots, x_{j,n}^0)$$

2. Формируется промежуточная популяция путем отбора особей обладающих лучшей пригодностью. Используется турнирная селекция, когда последовательно берутся два соседних элемента популяции и лучший помещается промежуточную $P^{1/2}$

3. С некоторой вероятностью P_c происходит скрещивание случайно выбранной пары из промежуточной популяции (смешанное скрещивание, Blend crossover BLX-a [6])

$$A = (x_1, \dots, x_n) \quad B = (\alpha x_1 + (1-\alpha)x'_1, \dots, \alpha x_n + (1-\alpha)x'_n)$$

$$A' = (x'_1, \dots, x'_n) \quad B' = (\alpha x'_1 + (1-\alpha)x_1, \dots, \alpha x'_n + (1-\alpha)x_n) \quad \text{где } \alpha \in [-0.5; 1.5]$$

4. С некоторой вероятностью P_m каждый параметр особи подвергается мутации

$$x_i^{t+1} = x_i^t + r(E_i - x_i^t)(1 - \frac{t}{G})^b \quad p_m(B, B') = p_{m \max}(1 - \text{dist}(B, B'))$$

$$\text{dist}(B, B') = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\frac{|x_i - x'_i|}{\max_i - \min_i} \right)^{0.2}$$



Метод роя частиц

Метод роя частиц (Particle Swarm Optimization, PSO), предложенный Р.Эберхартом и Дж.Кеннеди в 1995 году, основан на упрощенной модели поведения птиц (рыб) в стае. В PSO задается некая группа частиц, где положение каждой частицы является возможным решением задачи оптимизации. Решение о перемещении частица принимает на основании трех факторов: ее текущей скорости, которая тянет частицу продолжить движение и исследовать новые регионы в области поиска; знания о собственном лучшем состоянии и о лучшем состоянии некоторой окрестности частицы (соседей) или всего роя.

Общую схему алгоритма можно записать в символьном виде:

1. Случайным образом формируется рой из m частиц размером n параметров

$$P^0 = \{\vec{X}_1^0, \vec{X}_j^0, \dots, \vec{X}_m^0\} \quad \vec{X}_j^0 = (x_{j,1}^0, x_{j,i}^0, \dots, x_{j,n}^0) \quad V_i^0 = \alpha_i \cdot (\max_i - \min_i) / 10$$

2. Вычисляются новые скорости и значения параметров

$$V_{ji}^{t+1} = w \cdot V_{ji}^t + c \cdot \alpha_i \cdot (p_{ji}^t - x_{ji}^t) + s \cdot \beta_i \cdot (g_i^t - x_{ji}^t)$$

$$x_{ji}^{t+1} = x_{ji}^t + V_{ji}^{t+1}$$

$$x_{ji}^{t+1} = \min(x_{ji}^{t+1}, \max_i) \quad x_{ji}^{t+1} = \max(x_{ji}^{t+1}, \min_i)$$

Критерии остановки: количество итераций (5000), точность решения (0.1%), схождение роя/популяции

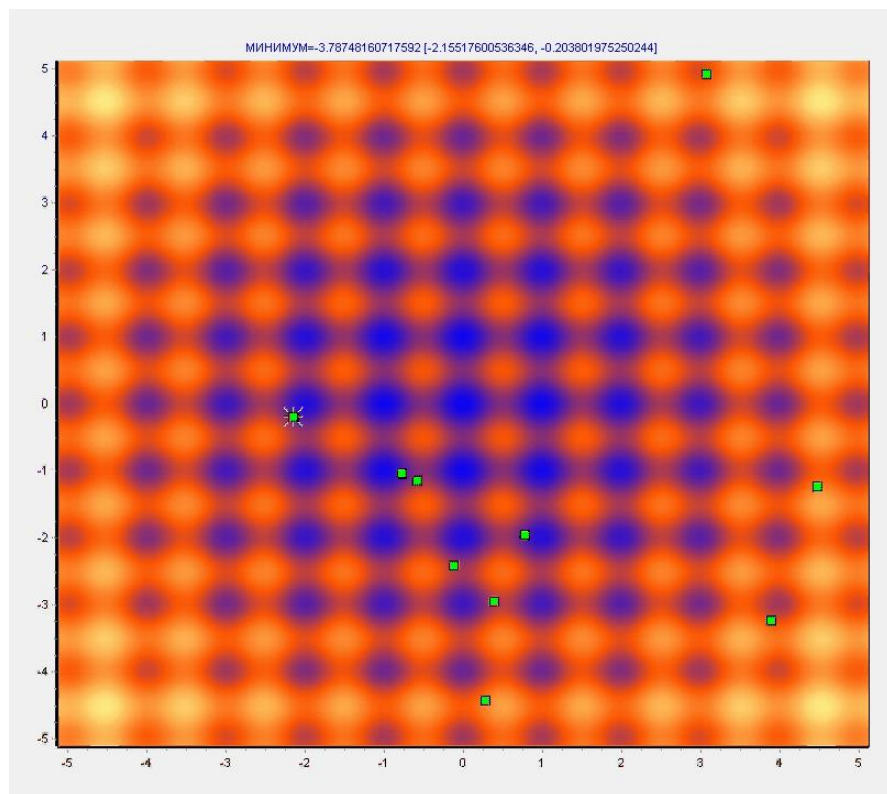
$$\frac{1}{n \cdot m} \sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^n \frac{|x_{best,i} - x_{j,i}|}{\max_i - \min_i} < 10^{-12}$$



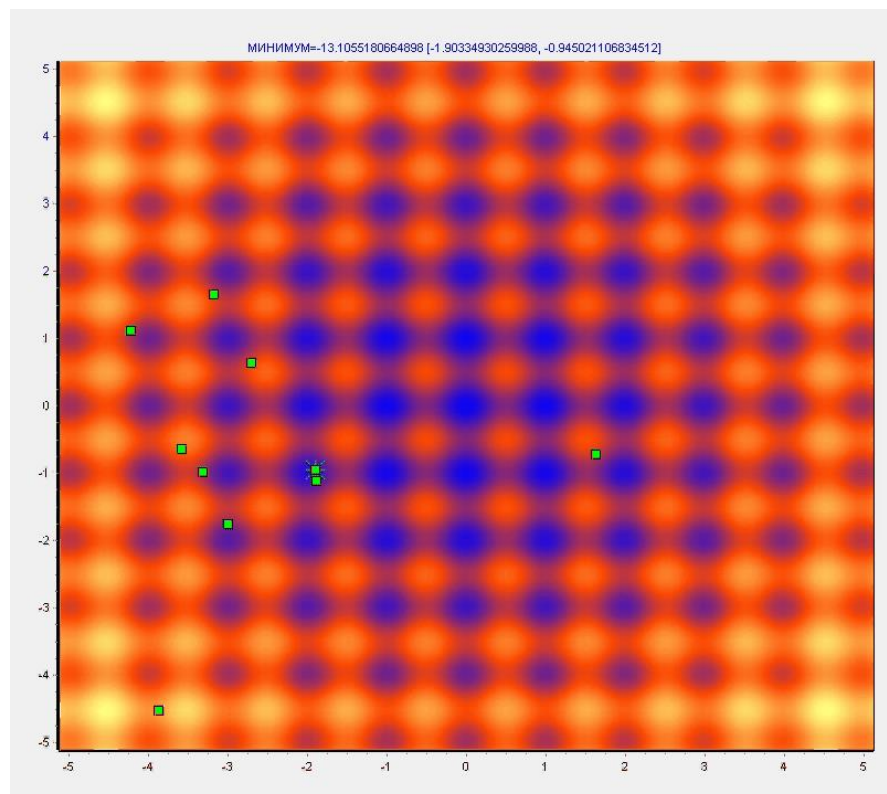
Тестовые функции

Функция Растригина: $\Phi(x, y) = x^2 + y^2 - 10 \cos(2\pi x) - 10 \cos(2\pi y)$

RGA: $P_c=0.9$, $P_m=0.3$



PSO: $W=0.73$, $S=1.49$, $C=1.49$





Целевая функция

В данной работе в качестве целевой функции используется дисперсия между расчетными и «экспериментальными» функциями различных термодинамических величин уравнения состояния (энергии, давления, плотности и т.д.).

$$\Phi(\vec{X}) = \frac{1}{\beta_0} \sum_{i=1}^L \left[\frac{\beta_i}{M_i^2 N_i} \sum_{k=1}^{N_i} \left(y_k^{p,i}(\vec{X}) - y_k^{э,i} \right)^2 \right]$$

где L – полное количество используемых термодинамических величин

$y_k^{э,i}$, $y_k^{p,i}$ – k -е экспериментальное и расчетное значение для i -ой термодинамической функции при некотором наборе параметров уравнения состояния $\vec{X} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$

$M_i = y_{\max}^{э,i} - y_{\min}^{э,i}$ – диапазон изменения i -ой термодинамической функции, зафиксированный в эксперименте;

β_i – коэффициент доверия (степень достоверности) к экспериментальным значениям i -ой термодинамической функции.



Уравнение состояния

В данной работе, для сравнения методов оптимизации, используется многофазное уравнение состояния (в упрощенном виде):

$$F(V, T) = E_C(V) + F_A(V, T) + F_E(V, T)$$

Холодная составляющая:

$$E_C(y) = 9B_{0K} \frac{V_{0K}}{\eta^2} \left\{ \exp[\eta(1-y)] \cdot (\eta(1-y) - 1) + 1 \right\} + E_{0K}$$
$$y = x^{1/3} \quad x = V / V_{0K} \quad \eta = \frac{3}{2} (B'_{0K} - 1)$$

Квазигармоническая составляющая:

$$F_A(V, T) = 3RT \left\{ \frac{3}{8} \tau + \ln[1 - \exp(-\tau)] - \frac{1}{3} D(\tau) \right\} \quad D(\tau) = \frac{3}{\tau^3} \int_0^\tau \frac{t^3 dt}{e^t - 1}$$
$$\tau = \frac{\theta(V)}{T}, \quad \Gamma(V) = -\frac{\partial \ln \theta(V)}{\partial \ln V} \quad \Gamma(V) = \frac{2}{3} + \frac{(\Gamma_0 - 2/3)(B_A^2 + D_A^2)}{B_A^2 + (D_A - \ln x)^2}$$

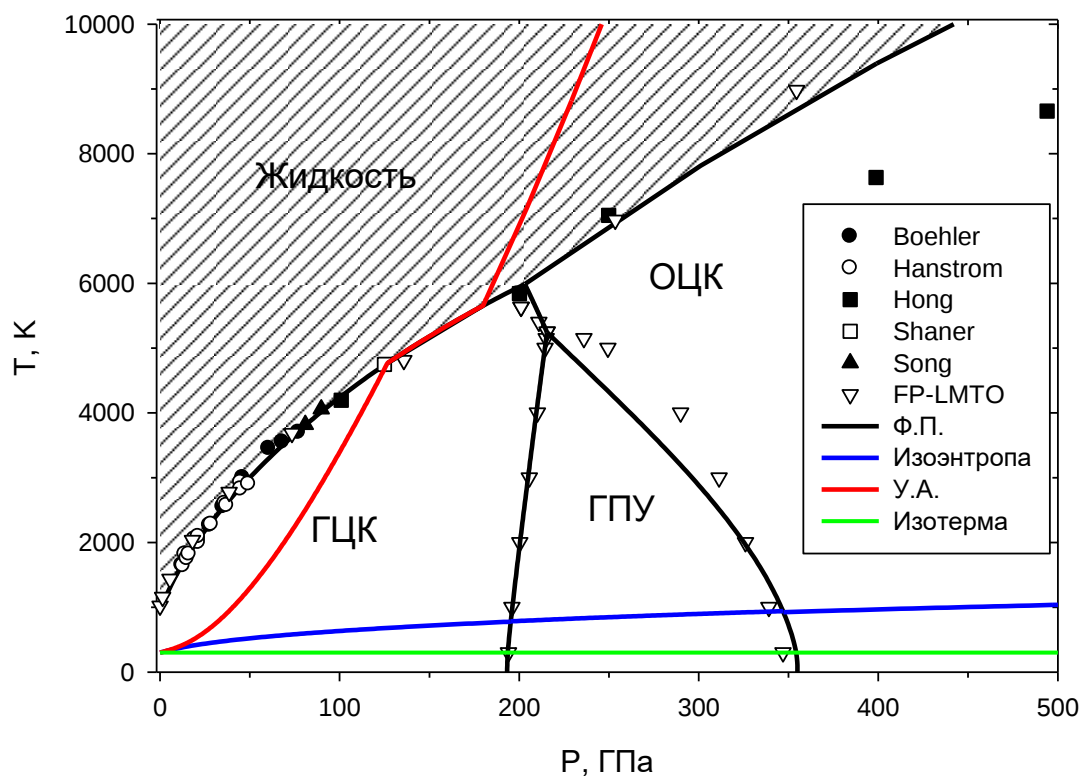
Электронная составляющая:

$$F_E(V, T) = -\frac{1}{2} D_E x^{\Gamma_{0E}} T^2$$



Параметры УРС алюминия

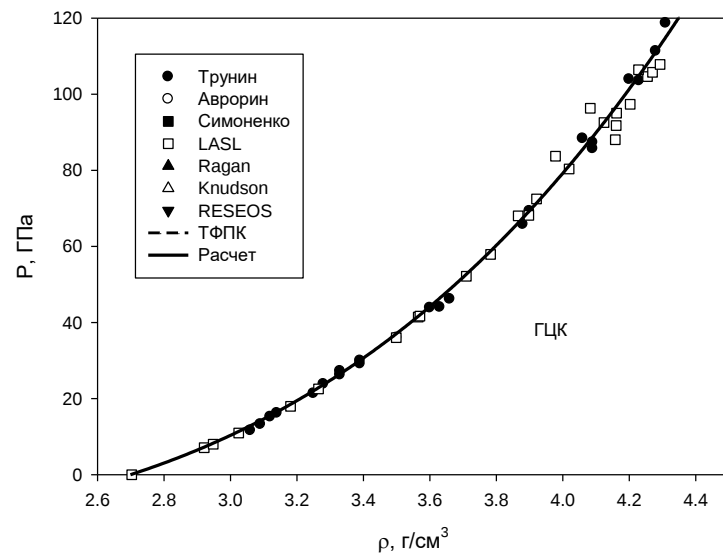
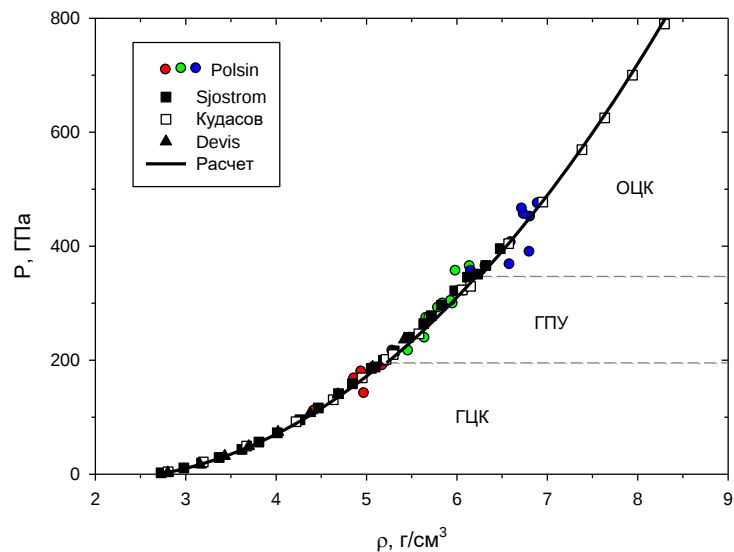
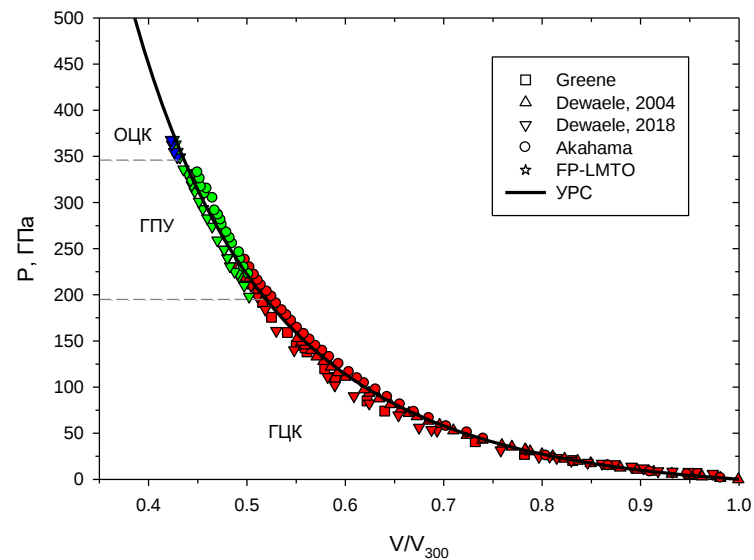
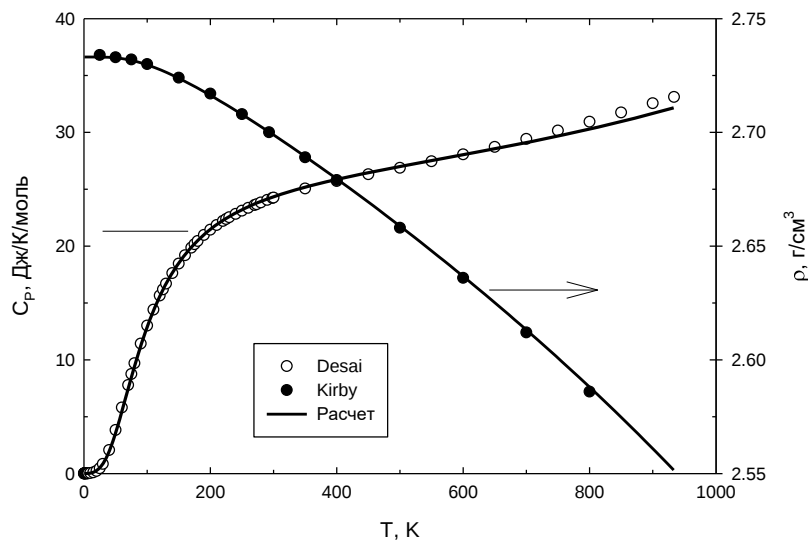
Параметры уравнения состояния подбирались исходя из хорошего описания области твердофазного состояния в диапазоне плотностей $2.7 < \rho < 7 \text{ г/см}^3$, температур $0 < T < 6 \text{ кК}$ и давлений $0 < P < 500 \text{ ГПа}$.



Параметр	ГЦК	ГПУ	ОЦК
$\rho_{0K} \text{ (г/см}^3\text{)}$	2.7593	2.7299	2.6826
$B_{0K} \text{ (ГПа)}$	83.4525	71.6912	64.8695
B'_{0K}	4.4219	4.7187	4.7949
$E_{0K}/R \text{ (К)}$	0	1196.804	1672.29
$\theta_D \text{ (К)}$	407.2193	390.5732	350.1236
Γ_0	2.0789	1.8136	2.2367
B_A	0.1	0.5449	0.5209
D_A	0.7706	0.02525	0.2512
$D_E/R \text{ (10}^{-3}/\text{К)}$	0.18977	0.19106	0.15231
Γ_{E0}	0.6666	0.6666	0.1038

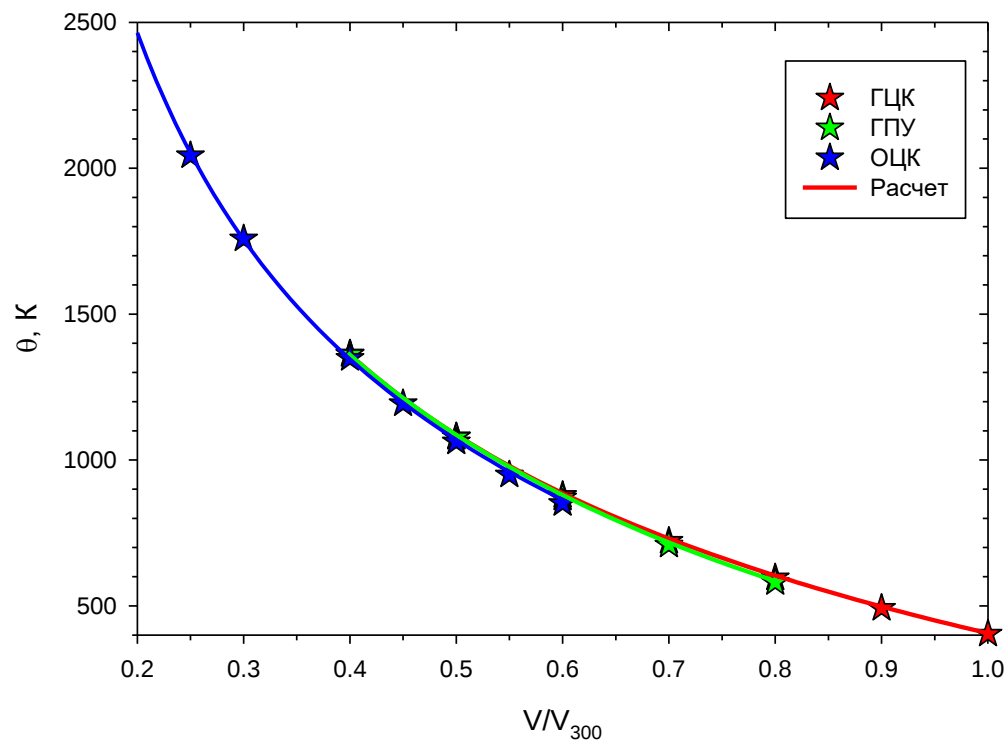


Экспериментальные данные





Расчетные данные





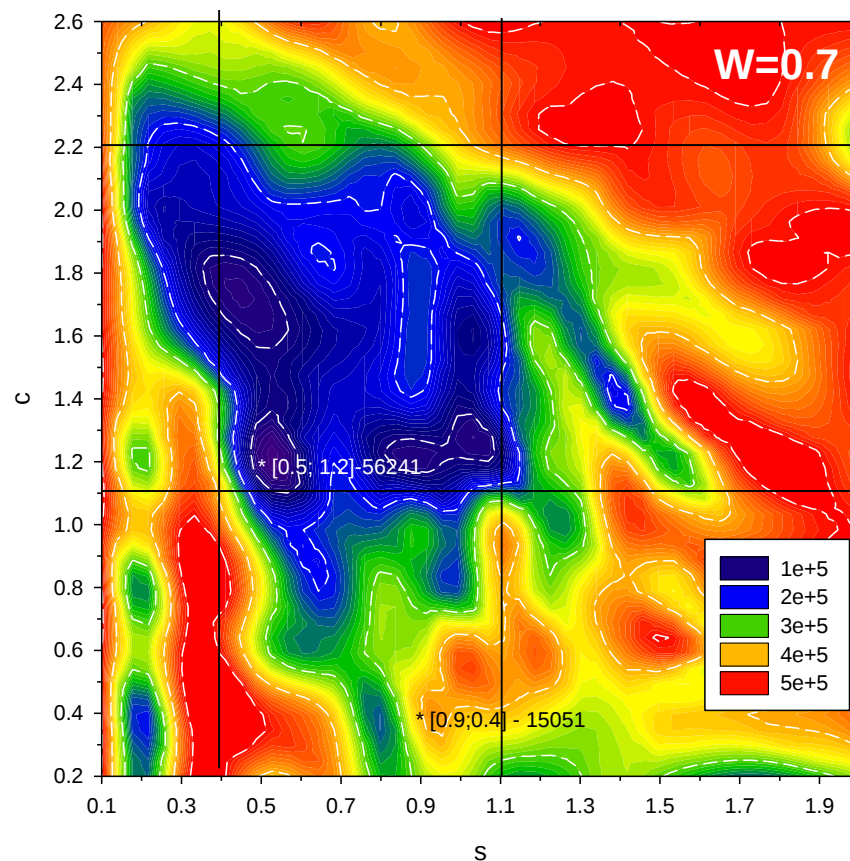
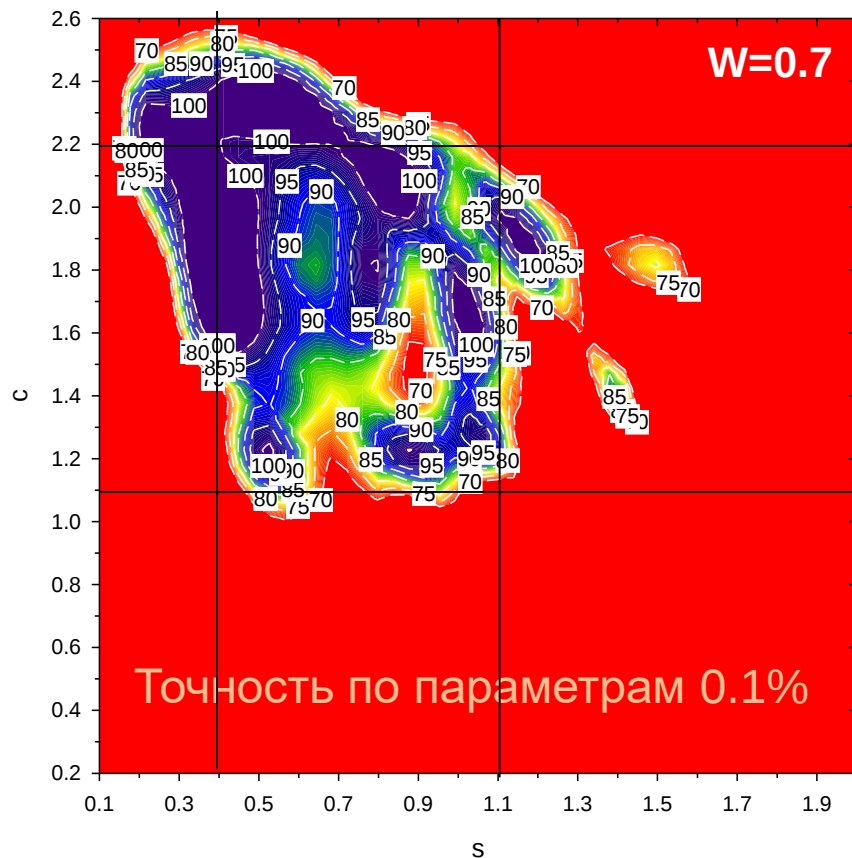
Параметрическое исследование

min: 15051 [0.9; 0.4]

min: 56241 [0.6; 1.2]

$S=[0.4; 1.1]$

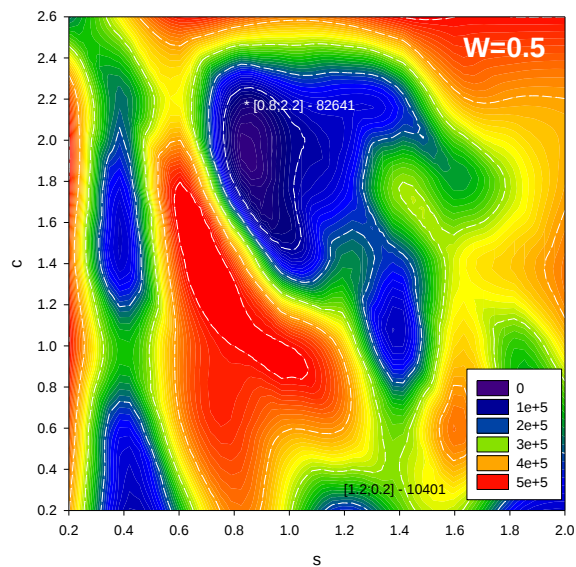
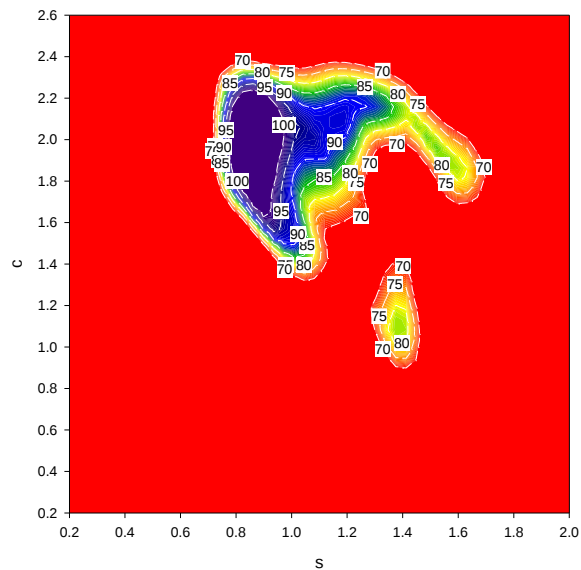
$C=[1.1; 2.2]$



Количество вызовов функции в зависимости от когнитивного и социального весов. С шагом 0.1 по параметру при 25 запусках.



Параметрическое исследование

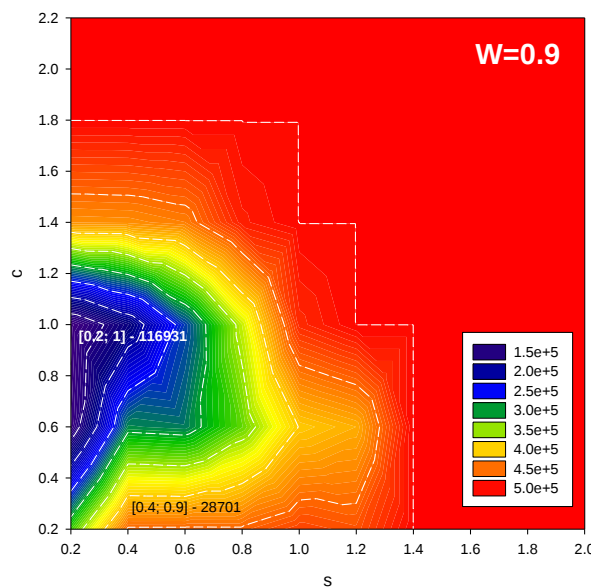
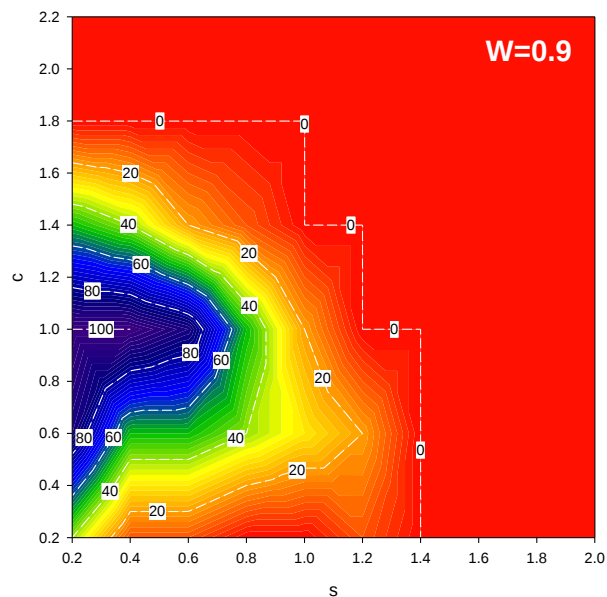


min: 10401 [1.2; 0.2]

min: 82641 [0.8; 2.2]

S: [0.8; 1.4]

C: [1.6; 2.3]



min: 28701 [0.4; 0.9]

min: 116931 [0.2; 1]

S: [0.2; 0.6]

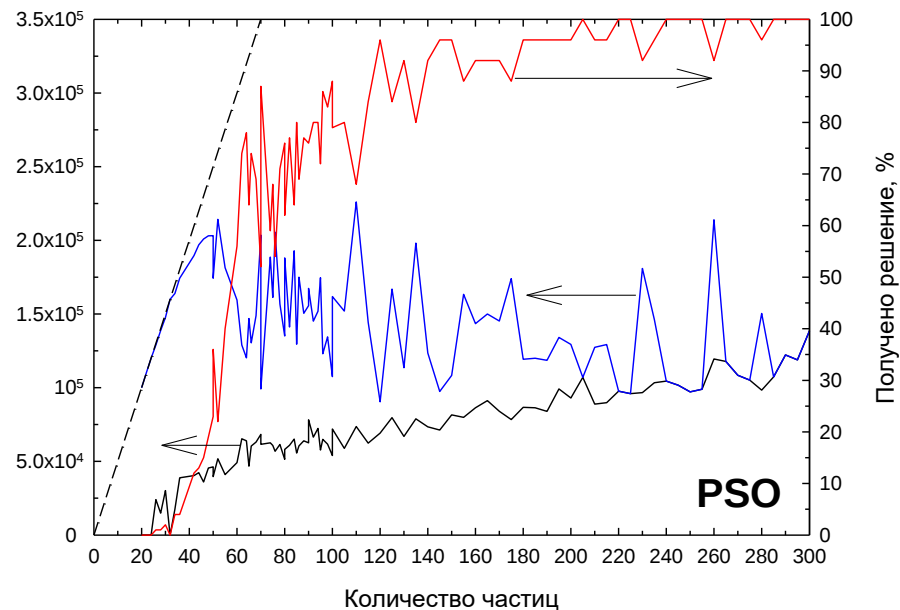
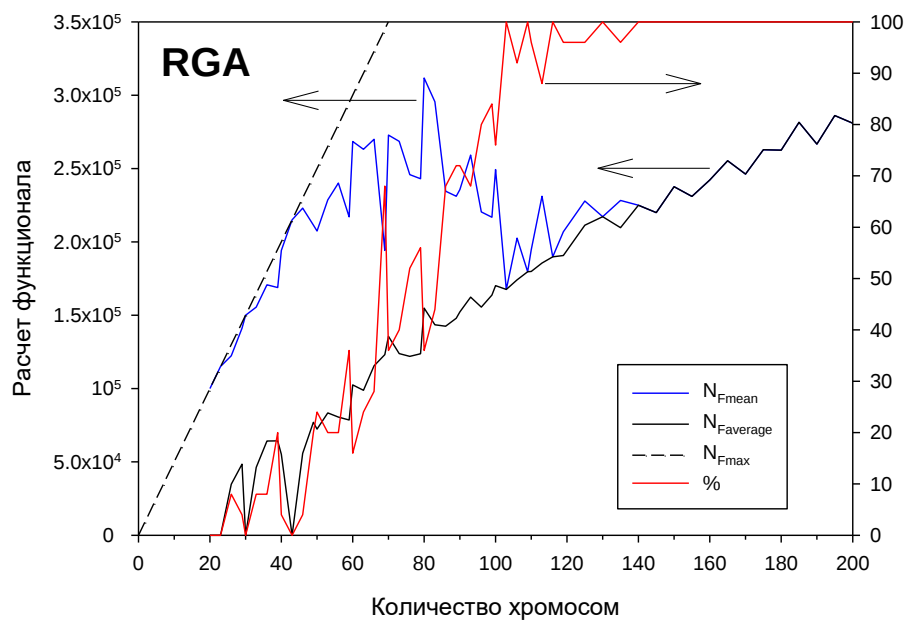
C: [0.5; 1.2]



Сравнение методов

$P_c=0.9$
 $P_m \max=0.3$

$W=0.7$
 $S=0.6$
 $C=1.2$



Необходимое количество частиц/хромосом стабильного нахождения оптимума. С шагом 2 частицы/хромосомы при 100 запусках.



Заключение

- Предложено уравнение состояния алюминия для трех твердых фаз, хорошо описывающее экспериментальные данные и первопринципные расчеты в диапазоне плотностей $2.7 < \rho < 7 \text{ г/см}^3$, температур $0 < T < 6 \text{ кК}$ и давлений $0 < P < 500 \text{ ГПа}$.
- Проведено параметрическое исследование метода роя частиц при решении обратной задачи, в которой необходимо найти заранее известные параметры УРС с точностью 0.1% за минимальное количество итераций.
- Определена область в которой весовые коэффициенты метода роя частиц дают наилучший результат: $W=0.7$, $S: [0.4; 1.1]$, $C: [1.1; 2.2]$.
- Показано, что при одинаковом количестве частиц/хромосом и достаточно хороших внутренних параметров алгоритмов, метод роя частиц сходится в $\sim 2-3$ раза быстрее генетического алгоритма.

Главный минус метода роя частиц заключается в его зависимости от вида целевой функции. Поэтому заранее не известно какие весовые коэффициенты дадут хорошую сходимость, а при каких сходимости вообще не будет. В итоге после определения функционала целесообразно проводить хотя бы минимальное параметрическое исследование.