

УДК 517.97

Поиск оптимального температурного режима процесса димеризации α -метилстирола на основе генетических алгоритмов

© Е. В. Степашина¹, С. А. Мустафина²

Аннотация. В работе построен генетический алгоритм с вещественным кодированием для решения задачи поиска оптимального управления промышленно значимым процессом димеризации α -метилстирола. Получен оптимальный температурный профиль и оптимальные концентрации реагентов.

Ключевые слова: процесс димеризации α -метилстирола, генетический алгоритм, оптимальное управление.

1. Введение

В настоящее время возможности повышения производительности реакторов за счет увеличения их размеров практически исчерпаны. В связи с этим возникает задача интенсификации каталитических процессов за счет новых способов их ведения.

Кинетическая модель химического процесса описывается системой нелинейных дифференциальных уравнений. Применение для ее решения численных методов, реализующих соответствующие необходимые и достаточные условия оптимальности, нередко связано с большими вычислительными затратами, трудностями в достижении сходимости процесса, неэффективностью алгоритмов при увеличении размерности вектора состояния объекта. В настоящее время широкую популярность приобретают генетические алгоритмы, позволяющие эффективно отыскивать глобальный оптимум за приемлемое время [1]. Основная идея генетических алгоритмов состоит в том, что они имитируют в своей работе природные способы оптимизации: наследование и естественный отбор. Суть механизма естественного отбора заключается в том, что в процессе эволюции выживают и размножаются наиболее приспособленные особи. Благодаря механизму генетического наследования их потомки сохраняют основные качества родителей, и, подвергаясь случайным мутациям, приобретают ряд новых свойств. Если новые свойства полезны, то они сохраняются и наследуются.

Классические генетические алгоритмы применимы к решению задачи оптимизации целевой функции $f(x) = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$, определенной на множестве допустимых решений $D \subseteq R^n$, и позволяют найти ее условный глобальный максимум на заданном множестве, т.е. такую точку $x^* \in D$, что $f(x^*) = \max_{x \in D} f(x)$. Задача поиска минимума функции $f(x)$ сводится к задаче поиска максимума путем замены знака перед функцией на противоположный: $f(x^*) = \min_{x \in D} f(x) = -\max_{x \in D} [-f(x)]$.

Рассматриваемая целевая функция $f(x)$ эквивалентна понятию приспособленности живого организма. Вектор параметров $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ целевой функции называется *фенотипом*, а отдельные его параметры x_i – *признаками* ($i = \overline{1, n}$).

¹ Аспирант кафедры математического моделирования, Стерлитамакская государственная педагогическая академия, г. Стерлитамак; zhenja05@gambler.ru.

² Заведующий кафедрой математического моделирования, Стерлитамакская государственная педагогическая академия, г. Стерлитамак.

Кодированное представление компонентов вектора аргументов служит *генотипом*. Набор генов называют *хромосомой* или *особью*, которая определяет точку в пространстве поиска. Совокупность особей представляет собой *популяцию*.

Наиболее распространенным способом перевода фенотипа в генотип является бинарное кодирование. В этом случае хромосома представляет собой битовую строку. Двоичное представление хромосом влечет за собой определенные трудности при выполнении поиска в непрерывных пространствах, которые связаны с большой размерностью пространства поиска. В связи с этим был разработан новый тип генетических алгоритмов – генетический алгоритм с вещественным кодированием. Основная его идея заключается в том, чтобы представлять гены в виде вещественных чисел, т.е. генотип объекта становится идентичным его фенотипу. Вектор хромосомы состоит из вектора вещественных чисел, и точность найденного решения будет определяться не количеством разрядов для кодирования битовой строки, а будет ограничена возможностями ЭВМ, на которой реализуется вещественный генетический алгоритм. Применение вещественного кодирования может повысить точность найденных решений и повысить скорость нахождения глобального минимума или максимума. Скорость повышается из-за отсутствия процессов кодирования и декодирования хромосом на каждом шаге алгоритма.

Сильной стороной генетических алгоритмов является их способность решать многоэкстремальные задачи без наложения условий на вид оптимизируемой функции (отсутствуют требования на непрерывность самой функции и ее производных). Важным достоинством генетических алгоритмов является то, что для них неважно начальное приближение.

2. Постановка задачи

В задачах химической кинетики теоретическая оптимизация осуществляется на основе кинетической модели с последующим выбором технологической схемы реактора, позволяющим наилучшим образом приблизиться к теоретическому оптимальному режиму. Полученный оптимальный режим определяет предельные возможности технологии. При осуществлении процесса в реальном аппарате технологические показатели, например, выхода полезного продукта могут быть ниже полученных характеристик на этапе теоретической оптимизации. Последние являются некоторой оценкой сверху качества той или иной выбранной технологии.

Рассмотрим математически формализованную постановку задачи оптимального управления. Пусть управляемый процесс представлен системой обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\frac{dx_i}{dt} = f_i(t, x, u), \quad (2.1)$$

где x – вектор состояния системы, $x = (x_1, \dots, x_n)^T \in R^n$; u – вектор управления, $u = (u_1, \dots, u_q)^T \in U \subseteq R^q$, U – некоторое заданное множество допустимых значений управления; t – время, $t \in [t_0, t_N]$ – промежуток времени функционирования системы; $f_i(t, x, u)$ – непрерывные вместе со своими частными производными функции.

При $t = 0$ заданы все начальные значения фазовых переменных x_i :

$$x_i(0) = x_{i0}, \quad i = \overline{1, n}. \quad (2.2)$$

Правый конец траектории свободен.

Множество допустимых процессов $D(t_0, x_0)$ – это множество пар $d = (x(t), u(t))$, включающих траекторию $x(t)$ и управление $u(t) \in U$, удовлетворяющих системе (2.1) и начальному условию (2.2).

На множестве допустимых процессов определен функционал качества управления $I(d) = F(x(t_N))$, где $F(x)$ – заданная непрерывная функция.

Требуется найти такую пару $d^* = (x^*(t), u^*(t)) \in D(t_0, x_0)$, что $I(d^*) = \max_{d \in D(t_0, x_0)} I(d)$.

Схема работы генетического алгоритма состоит из следующих основных шагов:

Шаг 1. Создание начальной популяции. Случайным образом на множестве допустимых значений управления формируется начальная популяция:

$$u^k = (u_{11}^k, \dots, u_{1q}^k, u_{21}^k, \dots, u_{2q}^k, \dots, u_{N1}^k, \dots, u_{Nq}^k) = (u_1^k, u_2^k, \dots, u_n^k),$$

где m – размер популяции, N – число шагов, $n = N \cdot q$, $k = \overline{1, m}$.

Вычисляется значение функции приспособленности для каждой особи.

Шаг 2. Селекция – это операция, которая осуществляет отбор особей (хромосом) в соответствии со значениями функции приспособленности для последующего их скрещивания. В генетических алгоритмах может применяться стратегия элитизма. Ее суть в том, что небольшое количество особей переходит в следующее поколение без изменений, не участвуя в селекции и последующем скрещивании. Результатом шага 2 являются две особи, выбранные в качестве родительской пары с помощью одного из операторов селекции.

Шаг 3. Скрещивание – это операция, при которой из нескольких, обычно двух хромосом (особей), называемых родителями, порождается одна или несколько новых, называемых потомками, путем обмена частями родительских хромосом.

Шаг 4. Мутация – это преобразование хромосомы, случайно изменяющее обычно один (реже несколько) из ее генов. Оператор мутации предназначен для того, чтобы поддерживать разнообразие особей в популяции.

Шаг 5. Формирование новой популяции. С вероятностью 0,5 выбирается один из потомков, выбранный потомок добавляется в популяцию вместо хромосомы, которой соответствует наименьшее среди элементов популяции значение функции приспособленности.

Шаг 6. Проверка условия окончания работы генетического алгоритма (сформировано заданное количество популяций). Если условие не выполнено, то переходим к шагу 2. Если условие окончания работы выполнено, то в качестве решения выбирается особь с лучшим значением функции приспособленности из текущей популяции. Значение целевой функции при этом будет равно $I(d^*) = I(x^*, u^*)$.

3. Вычислительный эксперимент

Используя генетические алгоритмы, решим задачу поиска оптимального управления промышленно значимым процессом димеризации α -метилстирола. Совокупность химических превращений, описывающих данную реакцию, представляется следующей схемой стадий [2]:



где X_1 – α -метилстирол, X_2 – α -димер, X_3 – β -димер, X_4 – циклический димер, X_5 – тримеры. Согласно закону действующих масс кинетические уравнения, соответствующие схеме химических превращений (3.1), можно выразить уравнениями:

$$\begin{aligned}\omega_1 &= k_1 x_1^2 - k_{10} x_2, \\ \omega_2 &= k_2 x_1^2 - k_{11} x_3, \\ \omega_3 &= k_3 x_1^2, \\ \omega_4 &= k_4 x_2, \\ \omega_5 &= k_5 x_3, \\ \omega_6 &= k_6 x_2 x_1, \\ \omega_7 &= k_7 x_1 x_3, \\ \omega_8 &= k_8 x_1 x_4, \\ \omega_9 &= k_9 x_2 - k_{12} x_3,\end{aligned}\tag{3.2}$$

где $\omega_i(t, x)$ – скорость i -й стадии (моль/л/ч), $i = \overline{1, 9}$; $t \in (0, 3)$ – время реакции (ч); $x = (x_1, \dots, x_5)^T$ – вектор концентраций компонентов (мольные доли); $k = (k_1, \dots, k_{12})^T$ – вектор кинетических констант скоростей j -й реакции, причем $k_j = k_j^0 \exp(-\frac{E_j}{RT})$, $j = \overline{1, 12}$, энергии активации E_j (Дж/моль) и универсальная газовая постоянная R (Дж/мольК) – константы, $T = T(t)$ – температура (К).

Кинетическая модель процесса димеризации α -метилстирола с учетом изменения реакционного объема в ходе протекания реакции представляется системой:

$$\begin{aligned}\frac{dx_i}{dt} &= \frac{F_i(x, T) - x_i F_n(x, T)}{N}, \quad \text{где } F_i = \sum_{j=1}^9 \nu_{ij} \omega_j, \quad i = \overline{1, 5}; \\ \frac{dN}{dt} &= F_n(x, T), \quad \text{где } F_n = \sum_{j=1}^9 \omega_j \sum_{i=1}^5 \nu_{ij},\end{aligned}\tag{3.3}$$

с начальными условиями:

$$x_i(0) = x_i^0, \quad i = \overline{1, 5}; \quad N(0) = 1,\tag{3.4}$$

где N – переменный реакционный объем, (ν_{ij}) – матрица стехиометрических коэффициентов ($i = \overline{1, 5}, j = \overline{1, 9}$).

Пусть параметром оптимизации является температура в реакторе. Задача поиска оптимального управления формулируется как задача нахождения оптимального температурного режима процесса, описываемого системой (3.3) с заданными начальными условиями (3.4). Критерий оптимальности – максимальный выход линейных димеров при минимальном выходе циклических димеров

$$x_2(\tau_k) + x_3(\tau_k) - x_4(\tau_k) \rightarrow \max, \quad \tau_k = 3(\text{ч})\tag{3.5}$$

Исходя из технологических соображений на выбор оптимального значения температуры наложены ограничения $30^\circ\text{C} \leq T \leq 130^\circ\text{C}$. Для решения поставленной задачи использовался генетический алгоритм с вещественным кодированием со следующими параметрами: количество особей в популяции – 60, количество популяций – 5000, оператор селекции – турнирный отбор, оператор скрещивания – арифметический кроссовер, оператор мутации – случайная мутация. Для численного решения системы дифференциальных уравнений применялся метод прогноза и коррекции.

4. Результаты

По результатам вычислительного эксперимента получены оптимальный температурный режим и оптимальные концентрации реагентов, представленные на рис.1.

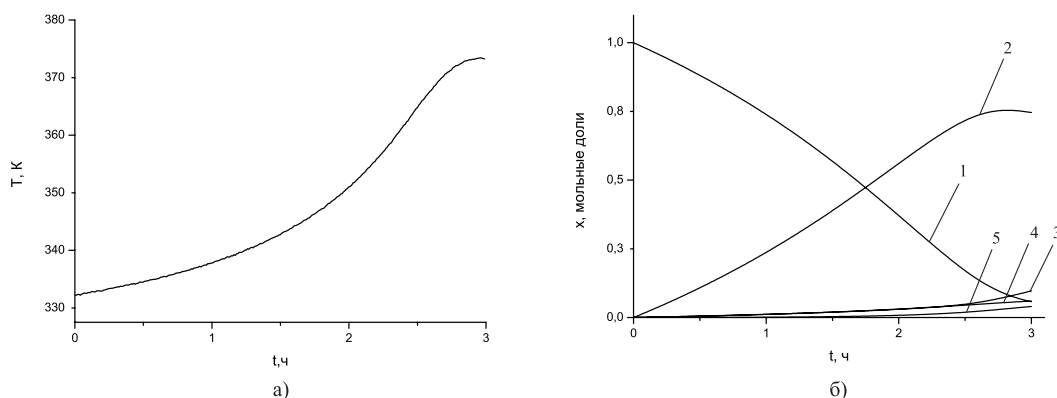


Рис.1. а) Оптимальный температурный режим; б) Оптимальные концентрации реагентов (1 – α -метилстирол, 2 – α -димер, 3 – β -димер, 4 – циклический димер, 5 – тримеры).

Ранее было получено решение задачи поиска теоретического оптимального температурного режима процесса димеризации α -метилстирола на основе принципа максимума Понтрягина. Сравнительный анализ результатов численного решения задачи представлен ниже в таблице.

| | Концентрации реагентов, полученные с помощью принципа максимума Понтрягина | Концентрации реагентов, полученные с помощью генетического алгоритма | Относительная погрешность |
|--------------------------------------|--|--|---------------------------|
| Линейные димеры | 80,2 % | 84,26 % | 4,8 % |
| Циклический димер | 7,6 % | 6,5 % | 16,9 % |
| Тримеры | 4,8% | 4,1% | 17 % |
| Селективность α -метилстирола | 92,4 % | 94,86% | 2,6 % |

Таблица 2: Сравнение результатов решения задачи поиска оптимального управления процессом димеризации α -метилстирола

Время счета генетического алгоритма меньше (6 мин) по сравнению с алгоритмом на основе принципа максимума Понтрягина (11 мин). Таким образом, построенный генетический алгоритм с вещественным кодированием можно применять для решения задачи поиска оптимального управления химическим процессом.

На основе построенного генетического алгоритма с вещественным кодированием разработан программный продукт, который носит универсальный характер, поскольку при замене блока реакций может быть адаптирован к другим химическим процессам для решения задачи поиска оптимального управления.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Пантелеев А. В., Метлицкая Д. В., “Генетические алгоритмы поиска оптимального управления непрерывными детерминированными системами”, *Электронный журнал «Труды МАИ»*, 2011, № 45, 33–37.
2. Степашина Е. В., Мустафина С. А., “Формирование математической модели каталитических процессов с переменным реакционным объемом на основе теоретико-графового подхода”, *Известия Томского политехнического университета*, **320**:3 (2012), 31–36.
3. Гнатенко Ю. А., *Математическое моделирование и теоретическая оптимизация процесса олигомеризации α -метилстирола*, дисс. ... канд. физ.-матем. наук, Стерлитамак, 2005, 143 с.

Search the optimal temperature of the process of dimerization α -methylstyrene based on genetic algorithms.

© E. V. Stepashina³, S. A. Mustafina⁴

Abstract. In this paper the genetic algorithm with real coding solutions for the optimal control problem of the significant industrial process of dimerization α -methylstyrene is designed. Obtained optimal temperature profile and the optimal concentration of reagents.

Key Words: process of dimerization α -methylstyrene, genetic algorithm, optimal control.

³ Graduate student of mathematical modeling, Sterlitamak State Pedagogical Academy, Sterlitamak; zhenja05@rambler.ru.

⁴ Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Head of Mathematical Modelling Chair, Sterlitamak State Pedagogical Academy, Sterlitamak.