

DOI: 10.33184/dokbsu-2021.5.2

Многомерная оптимизация процесса алкилирования в среде RStudio

А. А. Александрова^{1*}, К. Ф. Коледина^{1,2}

¹Уфимский государственный нефтяной технический университет
Россия, Республика Башкортостан, 450064 г. Уфа, улица Космонавтов, 1.

²Институт нефтехимии и катализа РАН
Россия, Республика Башкортостан, 450075 г. Уфа, проспект Октября, 141.

*Email: nastena1425@gmail.com

Задачи многокритериальной оптимизации актуальны во многих сферах науки и повседневной жизни. Многомерная оптимизация подразумевает собой поиск экстремума двух критериев данного процесса при соблюдении ограничений. Решение задачи производится на основе математической модели процесса алкилирования в среде программирования RStudio.

Ключевые слова: многокритериальная оптимизация, химическое производство, задача нелинейного программирования, фронт Парето.

Реальные оптимизационные задачи включают в себя несколько целевых критериев, которые конфликтуют между собой. При исследовании химического производства возникают проблемы с максимизацией выхода целевого продукта, минимизацией выхода побочного продукта и увеличением производительности или прибыли. Математическая постановка такой задачи определяет задачу многокритериальной оптимизации. В различных программных системах реализованы эволюционные алгоритмы многокритериальной оптимизации. Язык программирования R является языком обработки и анализа данных и имеет множество библиотек с соответствующими функциями. Результаты решения задачи многокритериальной оптимизации возможно проанализировать с применением этих библиотек.

Постановка задачи нелинейного программирования

Результат решения задач оптимизации – поиск экстремума (минимума или максимума) целевой функции. Целевая функция – это вещественная и целочисленная функция нескольких переменных, характеризующих некоторые параметры (цена, вес, эффективность, прибыль и т. п.) при определенных ограничениях.

Пусть непрерывная функция $f(x)$ – целевая функция, $h_1(x) \dots h_m(x)$ задают ограничения в виде равенств, а $g_{m+1}(x) \dots g_p(x)$ – ограничения в виде неравенств, где $x = [x_1, \dots, x_n]^T$ – вектор столбец компонент x_1, \dots, x_n в n -мерном евклидовом пространстве.

Исходя из этого, формулировка задачи нелинейного программирования выглядит следующим образом [5]:

Минимизировать $f(x)$,

$$x \in E^n, \quad (1)$$

при m линейных или нелинейных ограничениях в виде равенств

$$h_j(x) = 0, j = 1, \dots, m \quad (2)$$

и $(p - m)$ линейных или нелинейных ограничениях в виде неравенств

$$g_j(x) \geq 0, j = m + 1, \dots, p \quad (3)$$

Общая задача нелинейного программирования может сводиться к решению частных задач линейного и квадратичного программирования. Если и функция (1), и уравнения (2), и ограничения (3) линейны, то перед нами задача линейного программирования. Если же целевая функция (1) квадратична, а ограничения линейны – это задача квадратичного программирования:

минимизировать

$$f(x) = a_0 + c^T x + x^T Q x \quad (4)$$

при ограничениях

$$a^T x \geq b, \quad (5)$$

$$x \geq 0, \quad (6)$$

где Q – положительно определенная или неотрицательно определенная квадратичная симметрическая матрица, а a и b – матрицы коэффициентов.

Многокритериальная оптимизация в виде Парето-доминирования

Если вектор варьируемых параметров $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ определен в области Dx , а целевая вектор-функция $F(x) = (f_1(X), f_2(X), \dots, f_m(X))$. Тогда задача многокритериальной оптимизации в виде Парето-доминирования имеет вид [5]:

$$\max F(X) = F(X^*) = F^* \quad (7)$$

$$X \in Dx \quad (8)$$

где X^* – множество неулучшаемых решений в области варьируемых параметров – множество Парето (искомое решение в области варьируемых параметров), F^* – множество неулучшаемых решений в области целевых функций – фронт Парето (искомое решение в области целевых функций).

Модель процесса алкилирования

Алкилирование – введение алкильного заместителя в молекулу органического соединения. Типичными алкилирующими агентами являются алкилгалогениды, алкены, эпоксисоединения, спирты, реже альдегиды, кетоны, эфиры, сульфиды, диазоалканы.

В работе [1] разработана нелинейная модель процесса, позволяющая рассчитать прибыль.

$$Profit, P \left(\frac{\$}{hour} \right) = 0.063x_4x_7 - 5.04x_1 - 0.035x_2 - 10.0x_3 - 3.36x_5 \rightarrow \max \quad (9)$$

$$0 \leq x_1 \leq 2000 \quad (10)$$

$$90 \leq x_7 \leq 95 \quad (11)$$

$$3 \leq x_8 \leq 12 \quad (12)$$

$$0 \leq x_4 = [x_1(1.12 + 0.13167x_8 - 0.006667x_8^2)] \leq 5000 \quad (13)$$

$$0 \leq [x_5 = 1.22x_4 - x_1] \leq 2000 \quad (14)$$

$$0 \leq [x_2 = x_1x_8 - x_5] \leq 16000 \quad (15)$$

$$85 \leq \left[x_6 = 89 + \frac{x_7 - (86.35 + 1.098x_8 - 0.038x_8^2)}{0.325} \right] \leq 93 \quad (16)$$

$$145 \leq [x_{10} = -133 + 3x_7] \leq 162 \quad (17)$$

$$1.2 \leq [x_9 = 35.82 - 0.222x_{10}] \leq 4 \quad (18)$$

$$0 \leq \left[x_3 = 0.001 \frac{x_4x_6x_9}{98-x_6} \right] \leq 120 \quad (19)$$

где x_1 – концентрация олефина, моль/л, x_2 – концентрация изобутана, моль/л, x_3 – скорость присоединения кислоты, моль/л*ч, x_4 – скорость производства алкилата, моль/л*ч, x_5 – изобутановое сырье, моль/л, x_6 – конверсия кислоты, x_7 – октановое число, x_8 – отношение изобутана к олефину, x_9 – коэффициент разбавления кислоты, x_{10} – производительность.

При оптимизации процесса алкилирования параметры связаны ограничениями, полученными опытным путем. Поэтому группа ограничений состоит из функциональных связей.

Данная задача не включает ограничения в виде равенств и имеет шесть остаточных степеней свободы. Это означает, что все шесть переменных можно изменять, соблюдая при этом ограничения к задаче.

Задачу оптимизации (9)–(19) можно сформулировать как многокритериальную, добавив еще один критерий оптимальности. Будем рассматривать задачу с критериями: максимизация прибыли (Profit, P) и минимизация изобутанового сырья:

$$x_5 \rightarrow \min \quad (20)$$

Решение задачи многокритериальной оптимизации химического производства в среде RStudio [3] велось с использованием методов решения задач нелинейного программирования и пакета graphics. Для решения задачи многокритериальной оптимизации был использован метод идеальной точки и лексико-графического упорядочивания.

Результаты выполнения программы

Результат решения задачи многокритериальной оптимизации методом «идеальной точки»:

$$Profit, P = 4711.427 \frac{\$}{hour} \quad (21)$$

$$x_5 = 1222.446 \frac{\text{моль}}{\text{л}} \quad (22)$$

Результат решения задачи многокритериальной оптимизации методом «лексико-графического упорядочивания»:

$$Profit, P = 4918.853 \frac{\$}{hour} \quad (23)$$

$$x_5 = 1983.964 \frac{\text{моль}}{\text{л}} \quad (24)$$

В результате выполнения программы видно, что при увеличении прибыли, увеличивается количество изобутанового сырья.

Работа выполнена по теме «Разработка новых теоретических подходов и программного обеспечения для моделирования сложных химических процессов и поиска соединений с заданными физико-химическими свойствами» (Регистрационный номер: АААА-А19-119022290011-6).

Литература

1. Koledina, K. F. Multi-objective optimization of chemical reaction conditions based on a kinetic model / K. F. Koledina, S. N. Koledin, A. P. Karpenko, I. M. Gubaydullin, M. K. Vovdenko // Journal of Mathematical Chemistry February . – 2019. – Volume 57, Issue 2. – P. 484–493.
2. Sauer, R. N. Computer Points the Way to More Profits / R. N. Sauer, Jr. Colville, C. W. Burwick // Hydrocarbon Processing & Refiner. – 1964. – Volume 49, No. 2. – P. 84–92.
3. А. В. Золотарюк. Язык и среда программирования R: учеб. пособие. М. Инфра-М, 2018. 162 с.
4. Phillip, E. Gill. Practical optimization/Phillip E. Gill, Walter Murray, Margaret H. Wright//Systems Optimization Laboratory. – 1981. – P. 208–212.
5. Applied nonlinear programming / David M. Himmelblau. – 1972 – P.19–20.

Статья рекомендована к печати кафедрой технологии нефти и газа Уфимского государственного нефтяного технического университета (д-р.физ.-мат. наук, проф. И. М. Губайдуллин)

Multidimensional optimization of the alkylation process in the RStudio environment

A. A. Alexandrova^{1*}, K. F. Koledina^{1,2}

¹*Ufa State Petroleum Technical University*

1 Kosmonavtov Street, 450064 Ufa, Republic of Bashkortostan, Russia.

²*Institute of Petrochemistry and Catalysis, Russian Academy of Sciences*

141 Prospekt Oktyabrya, 450075 Ufa, Republic of Bashkortostan, Russia.

**Email: nastena1425@gmail.com*

The tasks of multi-criteria optimization are relevant in many areas of science and everyday life. Multidimensional optimization implies a search for the extremum of two criteria of this process, subject to restrictions. The solution of the problem is based on a mathematical model of the alkylation process in the RStudio programming environment.

Keywords: multi-criteria optimization, chemical production, nonlinear programming problem, Pareto front.