

Алгоритм гравитационного поиска при определении оптимальных кинетических параметров реакции низкотемпературной паровой конверсии C2+-углеводородов

Л.В. Еникеева^{1,2}, М.Р. Еникеев², В.Ф. Шамшович², Р.Ф. Абуталипов²,
И.М. Губайдуллин^{2,3}

¹Новосибирский государственный университет, ул. Пирогова 1, Новосибирск, Россия, 630090

²Уфимский государственный нефтяной технический университет, ул. Космонавтов 1, Уфа, Россия, 450062

³Институт нефтехимии и катализа Российской академии наук, проспект Октября 141, Уфа, Россия, 450075

Аннотация. Алгоритм гравитационного поиска в данной работе применялся для определения оптимальных кинетических параметров реакции низкотемпературной паровой конверсии C2+-углеводородов в смеси с высоким содержанием метана. В рамках данной работы проведено математическое моделирование процесса предриформинга пропана при давлениях 1 атм и 5 атм, скоростях потока 4000 и 12000 ч⁻¹ и температурах 220-380 °С. Решение обратной задачи проводилось алгоритмом гравитационного поиска. Для моделирования эксперимента было найдено решение обратной задачи в виде дробной зависимости по механизму Лэнгмюра-Хиншельвуда. Показано, что модель корректно описывает экспериментальные данные и может использоваться для описания процесса предриформинга пропана и предсказания конверсии пропана при заданных условиях реакции.

1. Введение

Алгоритм гравитационного поиска (*Gravitational Search algorithm, GS*) предложен Рашеди (E. Rashedi) и другими авторами в 2009 г. Алгоритм использует аналогию движения тяжелых тел вследствие их гравитационного взаимодействия. Алгоритм GS является развитием детерминированного алгоритма глобального многомерного поиска, получившего название алгоритма оптимизации центральной силой [1]. Алгоритм использует аналогию движения тяжелых тел вследствие их гравитационного взаимодействия. Силу гравитации между двумя такими телами, имеющими массу m_1 , m_2 , определяет закон всемирного тяготения, в соответствии с которым эта сила равна:

$$F = \gamma \frac{m_1 m_2}{r^2},$$

где γ – гравитационная постоянная, а r – евклидово расстояние между центрами масс гравитирующих тел. По второму закону Ньютона ускорение, которое приобретает тело массой m под воздействием этой силы, равно

$$a = \frac{F}{m}.$$

В последние годы были разработаны различные эвристические методы оптимизации. Многие из этих методов основаны на аналогичных явлениях в природе. Если сравнивать алгоритм гравитационного поиска с другими алгоритмами, то данный метод один из самых эффективных в решении различных задач оптимизации нелинейных функций [2].

В статье [3] продемонстрирован подход к решению задач кластеризации методом k -средних путём сведения их к задачам непрерывной оптимизации и применения к ним метаэвристических алгоритмов оптимизации. В качестве примера рассмотрено решение задачи цветового квантования изображения с помощью алгоритма гравитационного поиска. Предложенный метод продемонстрировал высокое качество результатов по сравнению со стандартными средствами цветового квантования математических пакетов (в частности, из состава математического пакета Wolfram Mathematica) при более низкой скорости работы [3].

В работе [4] авторами была исследована эффективность применения алгоритма гравитационного поиска для решения задачи классификации данных. Эффективность классификаторов, настроенных алгоритмом гравитационного поиска, подтверждена с помощью статистического критерия Манна–Уитни–Уилкоксона. Алгоритм способен значительно сокращать размерность пространства признаков и демонстрирует хорошие способности к обучению и прогнозированию.

Разработана программа для настройки параметров нечетких термов для увеличения точности прогнозирования нечеткого классификатора. Особенность программы состоит в использовании метаэвристического алгоритма оптимизации, имитирующего систему частиц, между которыми действуют силы притяжения [5].

В статье [6], основываясь на различных подходах, в соответствии с конечным потреблением электрической энергии, представлено соответствующее экономическое планирование подачи электроэнергии. При этом, подробности конечного потребления энергии заменяются информацией о сети электроснабжения, учитывая эффективность сети и электростанций. Работа электростанций основана на оптимизации энергии, производимой ею. Используя предложенный метод и алгоритм гравитационного поиска, можно минимизировать общую стоимость электрической энергии. Результаты моделирования и численных исследований показывают лучшую сходимость алгоритма гравитационного поиска по сравнению с другими существующими методами в данной области.

В работе [7] рассматривается задача глобальной оптимизации многоэкстремальных функций с помощью алгоритма гравитационного поиска. Классический алгоритм является стохастическим и основан на гравитационном взаимодействии совокупностей масс (зондов) и законах движения. На основе сил определяются векторы скорости и ускорения каждого зонда для дальнейшего его перемещения. Данный алгоритм схож с методом роя частиц, так как базируется на развитии многоагентной системы. В ходе исследования классического алгоритма был выявлен недостаток, связанный с сильным снижением оценки вероятности попадания в глобальный экстремум при наличии аддитивной равномерно распределенной помехе. В связи с этим предложен модифицированный алгоритм. Улучшение основано на внедрении ядерной функции, что позволяет лучше выделять истинный экстремум при воздействии помехи, а также увеличить точность решения при ее отсутствии. Также предлагается использовать динамический закон изменения количества зондов, что повлечет сокращение количества измерений целевой функции по сравнению со статическим количеством точек [7]. Алгоритм также нашел применение в задачах электроэнергетики [8], оптимизации траектории полета ракет [9] и др.

2. Суть алгоритма

Алгоритм гравитационного поиска (GS) в общем случае использует 3 вида гравитирующих масс – активная m^A , пассивная m^P и инертная m^I массы. Полагаем, что гравитационная сила $F_{i,j}$, которая действует на массу m_i со стороны массы m_j , равна

$$F_{i,j} = \gamma \frac{m_i^P m_j^A}{r_{i,j}}, i, j \in [1:|S|], i \neq j,$$

то есть обратно пропорциональна не квадрату расстояния $r_{i,j}$ между зондами, а лишь первой степени этого расстояния. Ускорение, приобретаемое массой m_i в результате действия силы $F_{i,j}$, определяет формула

$$a_i = \frac{F_{i,j}}{m_i^I}.$$

Алгоритм *GS* использует следующее правило вычисления силы, действующей на массу m_i со стороны массы m_j по k -му измерению:

$$F_{i,j,k} = \gamma \frac{m_i^P m_j^A}{r_{i,j} + \varepsilon} (x_{j,k} - x_{i,k}), k \in [1:|X|].$$

Здесь ε – малая константа, $r_{i,j}$ – текущее евклидово расстояние между массами m_i, m_j . Гравитационную постоянную γ уменьшаем с ростом числа итераций по правилу

$$\gamma(t) = \gamma(0) \left(\frac{1}{t} \right)^d, d \in (0,1),$$

где $\gamma(0)$ – ее начальное значение, а d – свободный параметр алгоритма.

Суммарную силу $F_{i^*,k}$, действующую на зонд s_i по k -му измерению, полагают случайной величиной, равной

$$F_{i^*,k} = \sum_{j=1, j \neq i}^{|S|} U_1(0;1) F_{i,j,k}.$$

Ускорение указанного зонда по тому же измерению находим по формуле

$$a_{i^*,k} = \frac{F_{i^*,k}}{m_i^I}.$$

Если положение зонда s_i по k -му измерению на данной итерации есть $x_{i,k}$, то на следующей итерации его определяет выражение

$$x'_{i,k} = x_{i,k} + v'_{i,k}, i \in [1:|S|], k \in [1:|X|],$$

где скорость $v'_{i,k}$ равна

$$v'_{i,k} = U_1(0;1) v_{i,k} + a_{i^*,k}.$$

Обозначим S^{**} текущий набор лучших (самых тяжелых) зондов, а I^{**} – совокупность номеров этих зондов. Число $|S^{**}|$ лучших зондов с ростом числа итераций уменьшают, например, по линейному закону, так что в конце остается лишь один зонд, притягивающий остальные зонды.

Поскольку в общем случае каждый зонд гравитационно связан со всеми остальными, движение каждого зонда определяет все остальные зонды. Зонд, имеющий большую массу, имеет больший радиус притяжения. Поэтому агенты популяции имеют тенденцию двигаться в сторону лучшего (с точки зрения фитнес-функции) агента [1].

3. Математическое моделирование и результаты

Алгоритм гравитационного поиска в данной работе применялся для определения оптимальных кинетических параметров реакции низкотемпературной паровой конверсии C2+-углеводородов в смеси с высоким содержанием метана. Данный процесс на сегодняшний день является актуальным [10 – 11].

Разработана программа для моделирования процесса с использованием гравитационного алгоритма, за основу взят код [<https://github.com/himanshuRepo/Gravitational-Search-Algorithm>]. Программа написана на языке программирования Python 3 с использованием библиотек numpy,

randas, scipy. двухстадийная макрокинетическая модель протекания реакции, включающая реакции паровой конверсии пропана (реакция (1)) и метанирования CO₂ (реакция (2)):



а также найдены выражения для скоростей реакций паровой конверсии пропана и метанирования CO₂ (3) и (4):

$$W_{ref} = \frac{k_{ref} \exp \frac{-E_{ref}}{RT} C_{C_3H_8}}{(1 + B \cdot C_{C_3H_8})^{deg}} \quad (3)$$

$$W_{met} = k_{met} \exp \frac{-E_{met}}{RT} C_{H_2} \left[1 - \frac{P_{CH_4} P_{H_2O}^2}{K_{eq} P_{CO_2} P_{H_2}^4} \right] \quad (4)$$

где W_{ref} , W_{met} – скорости реакций, моль/(м³·сек) (1) и (2), k_{ref} , k_{met} – предэкспоненциальные множители реакций (1) и (2), 1/сек, E_{ref} , E_{met} – энергии активации реакций (1) и (2), Дж/моль, K_{eq} – константа равновесия реакции метанирования CO₂, атм⁻²; $C_{C_3H_8}$ и C_{H_2} – концентрации пропана и водорода, моль · м⁻³; P_{CH_4} , P_{CO_2} , P_{H_2O} и P_{H_2} – парциальные давления CH₄, CO₂, H₂O и H₂, соответственно, атм; R – универсальная газовая постоянная, 8.31 Дж · моль⁻¹ · К⁻¹; T – температура, К. Решение обратной задачи проводилось в рамках механизма Лэнгмюра-Хиншельвуда.

Данная схема используется для описания экспериментальных данных в рамках математической модели (5) [8], представляющей собой систему уравнений материального баланса.

$$\begin{cases} G \frac{dy_i}{dl} = (v_i^{ref} W_{ref} + v_i^{met} W_{met}) m_i, \\ 0 \leq l \leq L, i \in \{C_3H_8, CH_4, H_2O, H_2, CO_2\}, \\ l = 0 : y_i = y_{i0}, \end{cases} \quad (5)$$

где G – массовый поток смеси, кг/(м²·сек); y_i – массовая доля i -го компонента; v_i – стехиометрический коэффициент i -го компонента; m_i – молярная масса i -го компонента, кг/моль; l – координата вдоль каталитического слоя, м; L – длина каталитического слоя, равная 0.033 м.

В выражении скорости W_{ref} величина B варьируется от 0 до 5, а deg варьируется от 0 до 2. Также при решении обратной задачи варьировались величины значения E_{ref} , E_{met} , k_{ref} и k_{met} . Результаты приведены в таблице 1.

Таблица 1. Значения B , deg , E_{ref} , E_{met} , k_{ref} и k_{met} , полученные в результате решения обратной задачи в рамках модели Лэнгмюра-Хиншельвуда. Энергии активации в кДж/моль.

E_{ref}	E_{met}	k_{ref}	k_{met}	M	B
106.4	36.1	$1.2 \cdot 10^{10}$	$3.9 \cdot 10^4$	0.81	0.055

Данные величины были использованы для решения прямой задачи. На рисунках 1(а-г) и 2(а-г) приведены результаты расчетов для экспериментов по предриформингу пропана при 1 атм и 5 атм соответственно.

Видно, что модель, основанная на механизме Лэнгмюра-Хиншельвуда, корректно описывает полученные экспериментальные данные.

В рамках данной работы проведено математическое моделирование процесса предриформинга пропана при давлениях 1 атм и 5 атм, скоростях потока 4000 и 12000 ч⁻¹ и температурах 220-380 °С. Решение обратной задачи проводилось алгоритмом гравитационного поиска. Для моделирования эксперимента было найдено решение обратной задачи в виде

дробной зависимости по механизму Лэнгмюра-Хиншельвуда. Показано, что модель корректно описывает экспериментальные данные и может использоваться для описания процесса предриформинга пропана и предсказания конверсии пропана при заданных условиях реакции.

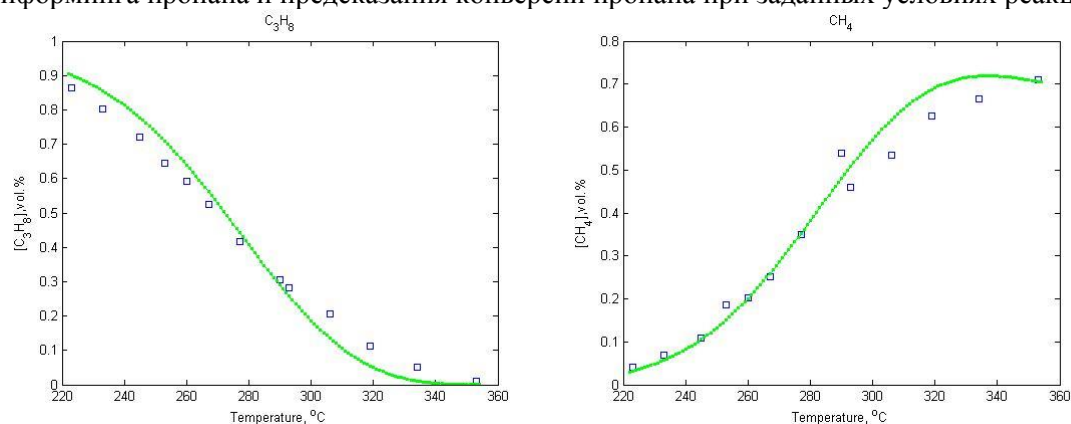


Рисунок 1. Температурные зависимости выходных концентраций пропана (а) и метана (б) в процессе предриформинга пропана. Точки – эксперимент, линии – моделирование. Условия эксперимента: 25 об. % пропана, 75% воды, давление 1 атм, GHSV = 4000 ч⁻¹. Решение обратной задачи в рамках механизма Лэнгмюра-Хиншельвуда.

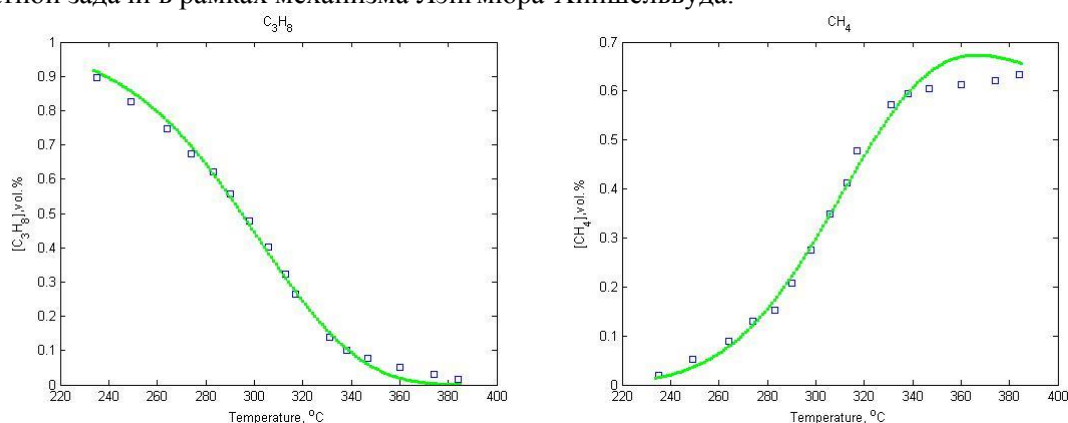


Рисунок 2. Температурные зависимости выходных концентраций пропана (а) и метана (б) в процессе предриформинга пропана. Точки – эксперимент, линии – моделирование. Условия эксперимента: 25 об. % пропана, 75% воды, давление 1 атм, GHSV = 12000 ч⁻¹. Решение обратной задачи в рамках механизма Лэнгмюра-Хиншельвуда.

4. Благодарности

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-37-60014.

5. Литература

- [1] Карпенко, А.П. К26 Современные алгоритмы поисковой оптимизации. Алгоритмы, вдохновленные природой: учебное пособие / А. П. Карпенко – 2-е изд. – Москва: Издательство МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2017. – 446 с.
- [2] Википедия [Электронный ресурс]. – Режим доступа: https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%A0%D0%BE%D0%B5%D0%B2%D0%BE%D0%B9_%D0%B8%D0%BD%D1%82%D0%B5%D0%BB%D0%BB%D0%B5%D0%BA%D1%82.
- [3] Лисин, А.В. Применение метаэвристических алгоритмов к решению задач кластеризации методом k-средних / А.В. Лисин, Р.Т. Файзуллин // Компьютерная оптика. – 2015. – Т. 39, №3 – С. 406-412. DOI: 10.18287/0134-2452-2015-39-3-406-412.

- [4] Ходашинский, И. А. Построение нечеткого классификатора алгоритмом гравитационного поиска / И. А. Ходашинский, М. Б. Бардамова, В. С. Ковалев // Доклады ТУСУР. – 2017. – Т. 20, № 2. – С. 84-87. DOI: 10.21293/1818-0442-2017-20-2-84-87.
- [5] Бардамова, М.Б. Свид. 201861431. Россия. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ. Программа настройки параметров нечеткого классификатора на основе алгоритма гравитационного поиска / М.Б. Бардамова, И.А. Ходашинский; правообладатель ФГБОУ ВО «Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники» (ТУСУР). – номер заявки: 2017662551. Дата регистрации 04.12.2017. Дата публикации 04.04.2018.
- [6] Montazeri, Z. Optimal utilization of electrical energy from power plants based on final energy consumption using gravitational search algorithm / Z. Montazeri, T. Niknam // Electrical Engineering & Electromechanics. – 2018. – Vol. 4. – P. 70-73. DOI: 10.20998/2074-272X.2018.4.12.
- [7] Воронов, В.С. Помехоустойчивый вариант алгоритма гравитационного поиска глобального минимума // Сборник научных трудов НГТУ. – 2018. – № 3(93). – С. 101-115. DOI: 10.17212/2307-6879-2018-3-4-101-115.
- [8] Kumar, J. Strategic bidding using fuzzy adaptive gravitational search algorithm in a pool based electricity market // Appl. Soft Comput. – 2013. – Vol. 13. – P. 2445-2455.
- [9] Su, Z. A novel robust hybrid gravitational search algorithm for reusable launch vehicle approach and landing trajectory optimization / Z. Su, H. Wang // Neurocomputing. – 2015. – Vol. 162. – P. 116-127.
- [10] Uskov, S.I. Fibrous alumina-based Ni-MO_x (M=Mg, Cr, Ce) catalysts for propane pre-reforming / S.I. Uskov, D.I. Potemkin, N. Kamboj, P.V. Snytnikov, V.P. Pakharukova, L.V. Enikeeva, I.M. Gubaydullin, I. Hussainova // Materials Letters. – 2019. – Vol. 257. – P. 126741. DOI: 10.1016/j.matlet.2019.126741.
- [11] Akhmadullina, L.F. Numerical methods for reaction kinetics parameters: identification of low-temperature propane conversion in the presence of methane / L.F. Akhmadullina, L.V. Enikeeva, I.M. Gubaydullin // Procedia Engineering. – 2017. – Vol. 201. – P. 612-616. DOI: 10.1016/J.PROENG.2017.09.654.

The gravity search algorithm for determining the optimal kinetic parameters of the reaction of low-temperature steam conversion of C₂ + hydrocarbons

L.V. Enikeeva^{1,2}, M.R. Enikeev², V.F. Shamshovich², R.F. Abutalipov²,
I.M. Gubaydullin^{2,3}

¹Novosibirsk State University, Pirogova str. 1, Novosibirsk, Russia, 630090

²Ufa State Petroleum Technological University, Kosmonavtov str. 1, Ufa, Russia, 450062

³Institute of Petrochemistry and Catalysis, Russian Academy of Sciences, prospekt Oktyabrya 141, Ufa, Russia, 450075

Abstract. The gravitational search algorithm in this work was used to determine the optimal kinetic parameters of the reaction of low-temperature steam conversion of C₂ + hydrocarbons in a mixture with a high methane content. In the framework of this work, mathematical modeling of the propane preforming process was carried out at pressures of 1 atm and 5 atm, flow rates of 4000 and 12000 h⁻¹, and temperatures of 220-380 °C. The inverse problem was solved by the gravitational search algorithm. To simulate the experiment, a solution to the inverse problem was found in the form of a fractional dependence by the Langmuir-Hinshelwood mechanism. It is shown that the model correctly describes the experimental data and can be used to describe the process of propane preforming and prediction of propane conversion under given reaction conditions.