

Многокритериальная оптимизация химического производства в среде RStudio

К.Ф. Коледина^{1,2}, А.А. Александрова², С.Н. Коледин²

¹Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, проспект Октября, 141, Уфа, Россия, 450075

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

Аннотация

В работе приведена постановка и решение задачи многокритериальной оптимизации химического производства в среде RStudio. Объектом исследования является процесс химического производства, а именно нефтепереработки – процесс алкилирования. Согласно нелинейной модели процесса, позволяющей рассчитать прибыль, поставлена двухкритериальная задача оптимизации. Результаты решения показали, что наблюдается некоторое снижение значения октанового числа, что следует из постановки задачи.

Ключевые слова

Многокритериальная оптимизация, химическое производство, среда RStudio

1. Введение

Все реальные оптимизационные задачи можно назвать многокритериальными. 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. Однако, в среде RStudio нет соответствующих библиотек. В тоже время, 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. Поэтому многокритериальная оптимизация химического производства в среде RStudio является актуальной задачей.

2. Многокритериальная оптимизация в виде Парето-доминирования

Если вектор варьируемых параметров $X=(x_1, x_2, \dots, x_n)$ определен в области D_X . 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 [1]:

$$\max_{X \in D_X} F(X) = F(X^*) = F^*, \quad (1)$$

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).

3. Многокритериальная оптимизация химического производства в среде RStudio

Объектом исследования является процесс химического производства, а именно нефтепереработки – процесс алкилирования. В работе [2] разработана нелинейная модель процесса, позволяющая рассчитать прибыль.

$$\text{Profit, } P (\$/\text{day}) = 0.063 x_4 x_7 - 5.04 x_1 - 0.035 x_2 - 10.0 x_3 - 3.36 x_5 \rightarrow \max \quad (2)$$

$$0 \leq x_1 \leq 2,000 \quad (3)$$

$$90 \leq x_7 \leq 95 \quad (4)$$

$$3 \leq x_8 \leq 12 \quad (5)$$

$$0 \leq [x_4 = x_1(1.12 + 0.13167x_8 - 0.006667x_8^2)] \leq 5,000 \quad (6)$$

$$0 \leq [x_5 = 1.22x_4 - x_1] \leq 2,000 \quad (7)$$

$$0 \leq [x_2 = x_1 x_8 - x_5] \leq 16,000 \quad (8)$$

$$85 \leq [x_6 = 89 + (x_7 - (86.35 + 1.098x_8 - 0.038x_8^2))/0.325] \leq 93 \quad (9)$$

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

$$1.2 \leq [x_9 = 35.82 - 0.222x_{10}] \leq 4 \quad (11)$$

$$0 \leq [x_3 = 0.001 (x_4 x_6 x_9)/(98 - x_6)] \leq 120 \quad (12)$$

где x_1 – олефин, x_2 – изобутан, x_3 – скорость присоединения кислоты, x_4 – скорость производства алкилата, x_5 – изобутановое сырье, x_6 – конверсия кислоты, x_7 – октановое число, x_8 – отношение изобутана к олефину, x_9 – коэффициент разбавления кислоты, x_{10} – производительность.

Задачу оптимизации (2)-(12) можно сформулировать как многокритериальную, добавив еще один критерий оптимальности. Будем рассматривать задачу с критериями: максимизация прибыли (Profit, P) и максимизация октанового числа:

$$x_7 \rightarrow \max \quad (13)$$

Решение задачи многокритериальная оптимизация химического производства в среде RStudio [3] велось с использованием методов решения задач линейного программирования, библиотеки `Ipsolve`.

В результате, с ростом прибыли наблюдается некоторое снижение значения октанового числа, что следует из постановки задачи (2)-(12).

4. Заключение

В работе приведена постановка и решение задачи многокритериальной оптимизации химического производства в среде RStudio.

5. 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. – Vol. 57(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. – Vol. 49(2). – P. 84-92.
- [3] Золотарюк, А.В. Язык и среда программирования R / А.В. Золотарюк. – М.: Инфра-М, 2018. – 162 с.