

Параллельные эвристические методы в обратных задачах химической кинетики на примере кинетики процесса ароматизации углеводородов C₅

Л.В. Сайфуллина¹, И.М. Губайдуллин¹, О.Ю. Забейворота²

Институт нефтехимии и катализа РАН¹, Башкирский государственный университет²

Каталитическое превращение легких предельных и непредельных углеводородов C₂-C₅ в более ценные продукты, такие как бензол, толуол и ксилолы (БТК), привлекает достаточно серьезное внимание различных исследователей. В данной статье рассматривается процесс ароматизации углеводородов C₅. Процесс описывается жесткими системами нелинейных дифференциальных уравнений, что приводит к необходимости использования параллельных вычислений при оптимизации параметров системы.

Каталитическое превращение легких предельных и непредельных углеводородов C₂-C₅ в более ценные продукты, такие как бензол, толуол и ксилолы (БТК), привлекает достаточно серьезное внимание различных исследователей [1]. В данной статье рассматривается процесс ароматизации углеводородов C₅.

Схема химических превращений и соответствующие им кинетические уравнения для реакции ароматизации углеводородов C₅H₁₂ имеют вид [1]. Изменение концентраций веществ во времени рассматриваемых реакций описывается следующей системой обыкновенных дифференциальных уравнений.

Исследование процесса ароматизации углеводородов включает в себя решение как прямой задачи (решение системы при заданных начальных параметрах), так и обратной (восстановление параметров модели по имеющемуся экспериментальному материалу).

Решение обратной кинетической задачи сводится к прогону серии прямых задач и минимизации критерия отклонения расчета от эксперимента:

$$F = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^n |x_{ij}^{calc} / x_{ij}^{exp} - 1|, x_{ij}^{exp} > 0,$$

где x_{ij}^{calc} – расчетные значения; x_{ij}^{exp} – экспериментальные данные; N – количество точек эксперимента; n – количество веществ, участвующих в реакции.

Решение обратной задачи проводится параллельными вариантами генетического алгоритма и метода имитации отжига. Применение генетического алгоритма в обратных задачах химической кинетики получило широкое распространение ввиду несложности его распараллеливания на многопроцессорных системах, тогда как метод имитации отжига в данных задачах требует дальнейшего развития, что делает исследование актуальным. В этом подходе переменные, характеризующие решение, представлены в виде генов в хромосоме [2].

Имитация отжига (simulated annealing) представляет собой эвристическую процедуру поиска, которая допускает случайные переходы, что ведет к более дорогостоящим (и соответственно, худшим) решениям. Это выглядит как шаг назад, но позволяет удержать поиск от заикливания на оптимальном локальном решении. Идея имитации отжига является аналогией физического процесса остывания расплавленных материалов и сопутствующего перехода в твердое состояние [2].

Планируется провести детальное сравнение данных методов на примере задачи оптимизации процесса ароматизации углеводородов C₅.

Литература

1. Кутепов Б.И., Белоусова О.Ю. Ароматизация углеводородов на пентасилсодержащих катализаторах. – М.: Химия, 2000. – 95с.
2. Скиена С. Алгоритмы. Руководство по разработке. – СПб: БХВ-Петербург, 2011. – 720 с.