МНОГОКРИТЕРИАЛЬНАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ РЕАКЦИИ СИНТЕЗА БЕНЗИЛАЛКИЛОВЫХ ЭФИРОВ НА PYTHON

@ А.А. Александрова, К.Ф. Коледина

nastena1425@gmail.com, koledinakamila@mail.ru

УДК 622.24.051

DOI: 10.33184/mnkuomsh2t-2021-10-06.51.

На основе кинетической модели каталитической реакции синтеза бензилалкиловых эфиров рассмотрена задача многокритериальной оптимизации в зависимости от изменяемых параметров температуры, мольного соотношения реагентов и времени проведения, имеющих ограничения. В роли критериев оптимальности использованы выход целевого и побочных продуктов. При помощи средств языка программирования Python построен фронт Парето, приведено решение задачи многокритериальной оптимизации с использованием библиотеки Platypus, метода идеальной точки и метода лексико-графического упорядочивания.

Ключевые слова: многокритериальная оптимизация, задача нелинейного программирования, фронт Парето, кинетическая модель, мольные соотношения исходных реагентов, Python.

Multi-criteria optimization of the synthesis reaction of benzylalkyl esters in Python

Based on the kinetic model of the catalytic reaction of the synthesis of benzylalkyl esters, the problem of multi-criteria optimization is considered depending on the variable parameters of temperature, the molar ratio of reagents and the time of conducting, which have limitations. The yield of the target and by-products are used as optimality criteria. Using the tools of the Python programming language, the Pareto front is constructed, the solution of the multi-criteria optimization problem is given using the Platypus library, the ideal point method and the lexico-graphical ordering method.

Keywords: multi-criteria optimization, nonlinear programming problem, Pareto front, kinetic model, molar ratios of initial reagents, Python.

Кинетическая модель каталитической реакции синтеза бензилалкиловых эфиров выглядит следующим образом [1]:

$$\frac{dy_i}{dt} = \sum_{j=1}^J \nu_{ij} k_j^0 \exp\left(-\frac{E_j}{RT}\right) \prod_{i=1}^I y_i^{|a_{ij}|}, i = 1, \dots, I \quad (1)$$

Александрова Анастасия Александровна, студент, УГНТУ (Уфа, Россия); Alexandrova Anastasya Alexandrovna (Ufa State Petroleum Technical University)

Коледина Камила Феликсовна, к.ф.-м.н., доцент кафедры ИТМ, УГНТУ (Уфа, Россия); Koledina Kamila Felixovna (Ufa State Petroleum Technical University of Ufa, Russia)

С начальными условиями $t = 0, y_i(0) = y_i^0, t \in [0, t^*]$.

Здесь y_i - концентрации веществ, участвующих в реакции, моль/л; t -время, мин; J -число стадий; I -число реагентов; ν_{ij} -коэффициенты стехиометрической матрицы; k_j^0 -предэкспоненциальные множители констант скоростей стадий, 1/мин; a_{ij} -отрицательные элементы матрицы k_j^0 ; E_j -энергии активации стадий б ккал/моль; R -газовая постоянная, 2 кал/(моль*К); T -температура, К;

Критерии оптимальности для задачи многокритериальной оптимизации:

$$f_1(X) = y_{PhCH_2OBu(Y_6)}(t^*, T, N) \rightarrow \max \quad (2)$$

$$f_2(X) = y_{PhCH_2OCH_2Ph(Y_9)}(t^*, T, N) \rightarrow \min \quad (3)$$

$$f_3(X) = y_{BuOBu(Y_{12})}(t^*, T, N) \rightarrow \min \quad (4)$$

Постановка задачи нелинейного программирования [2]:

Минимизировать

$$f(x), x \in E^n \quad (5)$$

при m линейных или нелинейных ограничениях в виде равенств

$$h_j(x) = 0, j = 1, \dots, m \quad (6)$$

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

$$g_j(x) \geq 0, j = m + 1, \dots, p \quad (7)$$

При решении задачи был построен фронт Парето. Оптимальность по Парето — такое состояние системы, при котором ни один показатель системы не может быть улучшен без ухудшения какого-либо другого показателя.

Решение СДУ средствами языка python

Математическая модель химического процесса является системой обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений. Для решения СДУ используем функцию `odeint`, находящуюся в модуле `scipy.integrate`. Поиск решения задачи оптимизации средствами языка Python

Поиск решения задачи многокритериальной оптимизации проводилось с использованием библиотеки для работы с многоцелевой оптимизацией - `Platypus` и описания методов идеальной точки и лексикографического упорядочивания.

Литература

1. Коледина К.Ф., Губайдуллин И.М., Коледин С.Н., Байгузина А.Р., Галлямова Л.И., Хуснутдинов Р.И. Кинетика и механизм синтеза бензилбутилового эфира в присутствии медьсодержащих катализаторов // Журнал физической химии., 2019. Т. 93. № 11. С. 1–6.
2. David M. Himmelblau Applied nonlinear programming, 1972, pp.19-20.
3. Eyal Wirsansky Hands-On Genetic Algorithms with Python, 2020.