

УДК 004.021

Моделирование реакции сернокислотного алкилирования изобутанов олефинами методом роя частиц и генетическим алгоритмом *

Махмутова Д. Ф.¹, Еникеева Л. В.^{1,2}

Уфимский государственный нефтяной технический университет¹,
Новосибирский государственный университет²

В последнее время интенсивно развиваются алгоритмы поисковой оптимизации. Среди них наибольшую популярность набирают популяционные алгоритмы. Их эффективность часто превосходит эволюционные алгоритмы. Значительное внимание в докладе уделяется методу роя частиц и генетическому алгоритму.

Однако, для того, чтобы применять методы теории оптимизации к практическим задачам, прежде всего, необходимо построить математическую модель задачи.

Математическое моделирование – это изучение поведения объекта в тех или иных условиях путем решения уравнений и его математической модели [1]. В данной работе будет проводиться математическое моделирование химического процесса, а именно – процесса алкилирования изопарафинов олефинами, основной целью которого является получение высокооктановых добавок к бензинам.

Под роевой оптимизацией понимается класс алгоритмов, направленных на решение сложных оптимизационных задач (дискретная оптимизация, многомерная оптимизация и многокритериальная оптимизация), работа которых основана на моделировании коллективного поведения различных колоний живых организмов. Отличительной особенностью таких моделей является то, что каждый отдельный организм в этой модели выполняет очень простые действия, подчиненные своей локальной цели, взаимодействуя с ограниченным числом других организмов в рассматриваемой колонии [2].

Генетический алгоритм (ГА) представляет собой эвристический алгоритм оптимизации, в основу которого положены биологические принципы естественного отбора и изменчивости. Для работы ГА выбирают множество натуральных параметров оптимизационной проблемы и кодируют их в последовательность конечной длины в некотором алфавите. Они работают до выполнения одного из условий: 1) выполнено заданное число итераций алгоритма; 2) на некоторой генерации будет получено решение определенного качества; 3) найден локальный оптимум, т. е. возникла преждевременная сходимость и алгоритм не может найти выход из этого состояния [3].

В данной работе поиск параметров осуществляется с использованием описанных алгоритмов. Получены графики, отражающие результаты численного моделирования реакции сернокислотного алкилирования изобутанов олефинами.

Литература

1. Царева З. М., Орлова Е. А. Теоретические основы химической технологии. Киев: Высшая школа, 1986. 271 с.

*Работа выполнена при частичной финансовой поддержке гранта РФФИ проект №19-37-60014

2. J. Kennedy, R. C. Eberhart. Particle swarm optimization, Proceedings of IEEE International Conference on Neural Networks, Piscataway, NJ, 1995. pp. 1942–1948.
3. Beyer H.-G., Schwefel H.-P., Wegener I. How to analyse Evolutionary Algorithms. Technical Report No. CI-139/02. University of Dortmund, Germany, 2002.

MSC2020 68W50

Modeling the reaction of sulfuric acid alkylation of isobutanes with olefins by the particle swarm method and genetic algorithm

D. F. Makhmutova¹, L. V. Enikeeva^{1,2}

Ufa State Petroleum Technological University¹,
Novosibirsk State University²