Томский Государственный Университет

Кафедра физической химии ТГУ

Лаборатория каталитических исследований

Применение метаэвристических алгоритмов для решения нелинейных обратных задач и нелинейных задач физической химии

Томский семинар по вычислительному интеллекту, Томск, ТПУ, 25 декабря 2010

http://qai.narod.ru/TomskWorkshop/index.html

Докладчик: Д.В. Новиков

PhysChemMod@gmail.com

www.PhysChemMod.org

ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

PhysChemMod

$$P_n(x)=\frac{1}{2^n}\sum_{k=0}^{n/2}(-1)^k\binom{n}{k}\binom{2n-2k}{n}x^{n-2k}$$

Be Careful: We Live in a Complex, Non-linear World!

Professor **Ted Woodcock**

Часть 1. Применение метаэвристических алгоритмов для решения нелинейных обратных задач

ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

PhysChemMod

Постановка обратной задачи для ДУ

Известно:

- вид уравнения

$$\frac{dy}{dx} = f(\mathbf{P}_o, y, x)$$

- решение (эксперимент)

$$\{x_i, y_i\}, i = \overline{1, N}$$

Требуется найти:

- вектор параметров уравнения:

$$\mathbf{P}_o = \left(p_o^1 \quad p_o^2 \quad \dots \quad p_o^k\right)^T$$

Способ решения:

- минимизация суммы квадратов невязок в пространстве возможных значений параметров M:

$$\Omega(\mathbf{P}) = \sum_{i=1}^{N-1}\left[lhs(y_i, x_i) - rhs(\mathbf{P}, \overline{y_i}, \overline{x_i})\right]^2$$

$$\mathbf{P}_o = \arg\left\{\inf_{P \in M \subset R^k}\left[\Omega(\mathbf{P})\right]\right\}$$

ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

PhysChemMod

Таким образом, физическая ***обратная задача*** *сводится к* ***задаче условной оптимизации.***

Характеристики задачи оптимизации задаются типом исходного уравнения (системы):

Обратная задача	***Экв. Задача оптимизации***
1. Нелинейность уравнения	***1. Нелинейность минимизируемого функционала***
2. Корректность постановки *(ill-posed)*	***2. Тип минимизируемого функционала*** *(СКО или функционал Тихонова)*
3. Вид конкретной задачи	***3. Топология минимизируемого функционала*** *(мерность, сепарабельность, структурированность, мульти-модальность)*

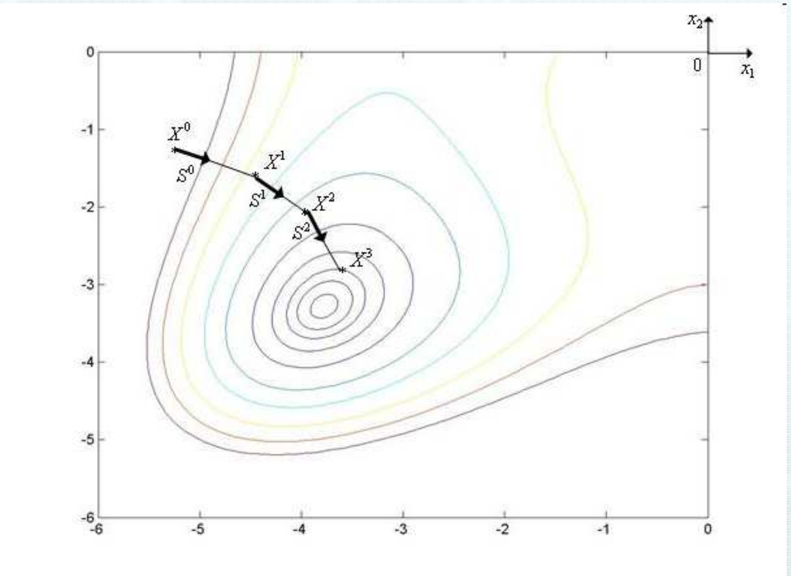
Классические алгоритмы решения задач оптимизации:

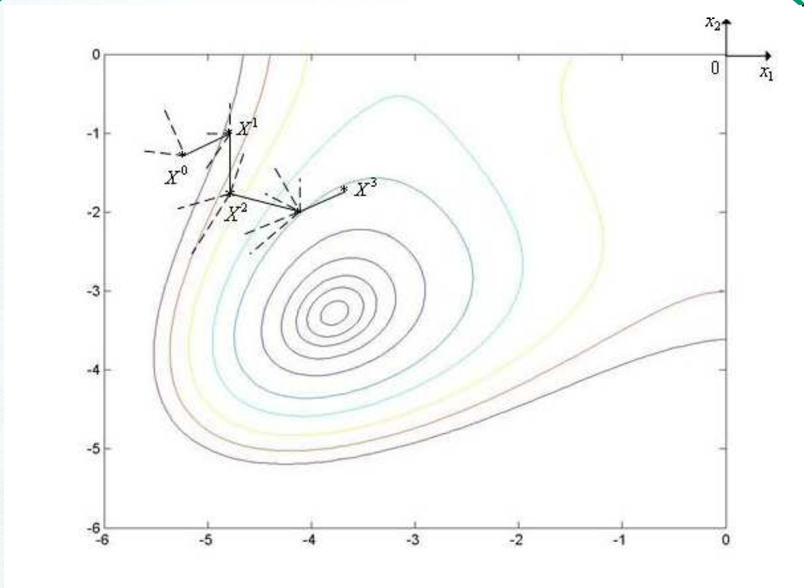
Детерминистические:

- Метод обобщенных градиентов *(derivative-base)*
- КвазиНьютоновские методы *(derivative-base)*
- Левенберга-Марквардта *(derivative-base)*
- Нелдера-Мида *(derivative-free)*

Стохастические:

- Прямой Монте-Карло
- Гибридные стохастические (stochastic-base детерминистические, случайно-наравленный поиск)

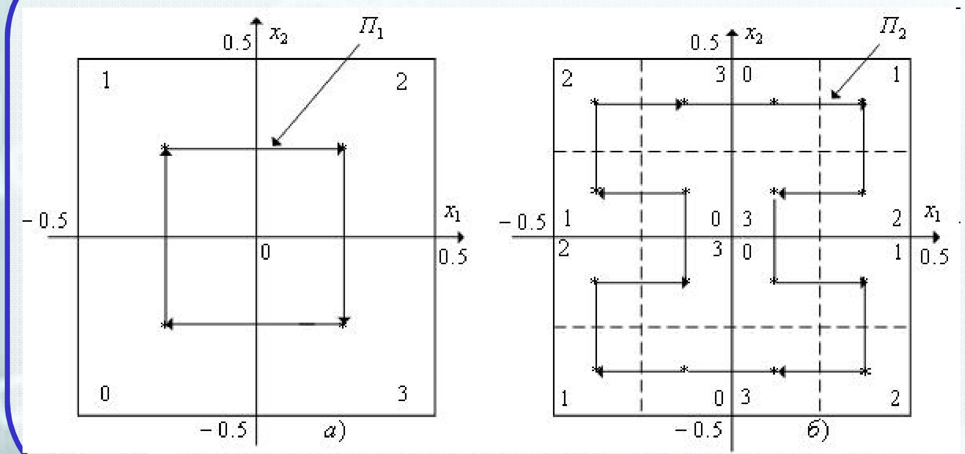


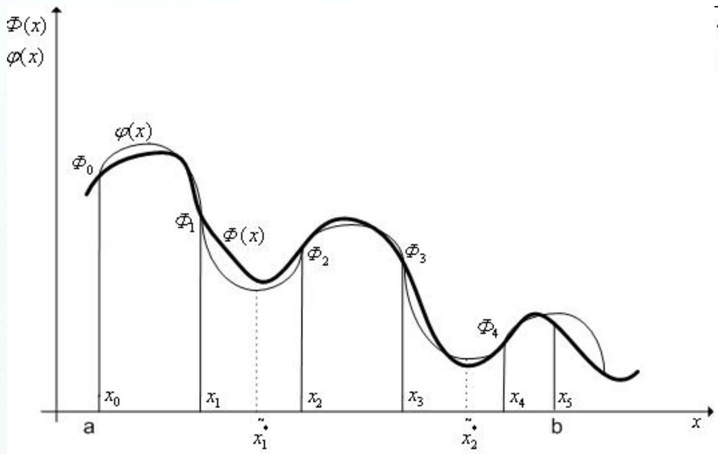


Методы “снижения сложности” задач оптимизации:

Снижение размерности:
- Метод развертки Пеано

Методы упрощения задачи:
- Линеаризация
- Метод аппроксимирующих моделей





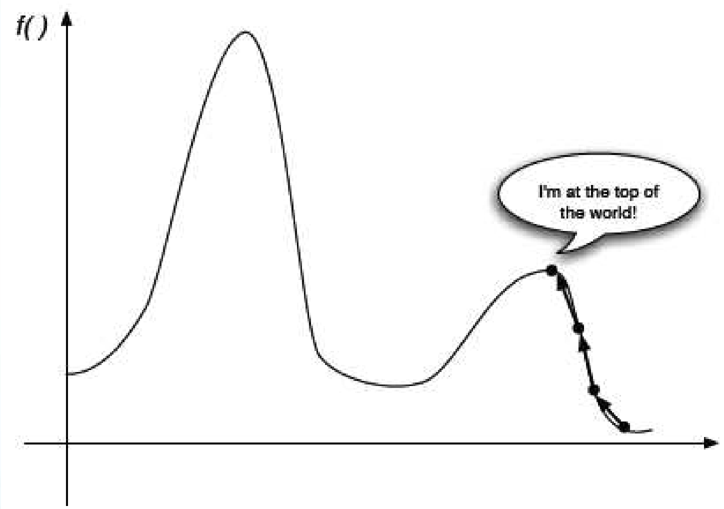
Применение методов снижения сложности требует некоторого априорного знания о свойствах пространства поиска

ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

PhysChemMod

$P_n(x) = \frac{1}{2^n}\sum_{k=0}^{n/2}(-1)^k \binom{n}{k}\binom{2n-2k}{n} x^{n-2k}$

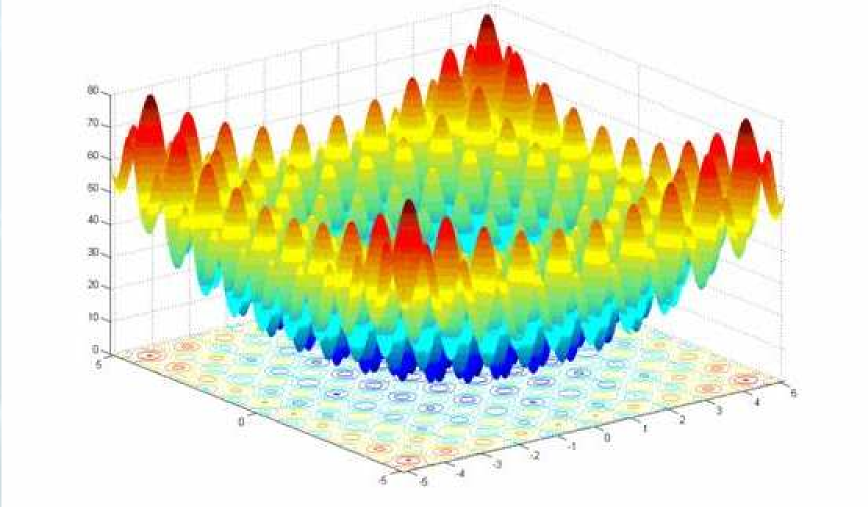
Алгоритмы решения задач оптимизации:



1. ***Детерминистические:***
- Метод обобщенных градиентов *(derivative-base)*
- Квазиньютоновские методы *(derivative-base)*
- Левенберга-Марквардта *(derivative-base)*
- Нелдера-Мида *(derivative-free)*

No free lunch theorem!

2. ***Стохастические:***
- Прямой Монте-Карло
- Гибридные стохастические (stochastic-base детерминистические, случайно-наравленный поиск)



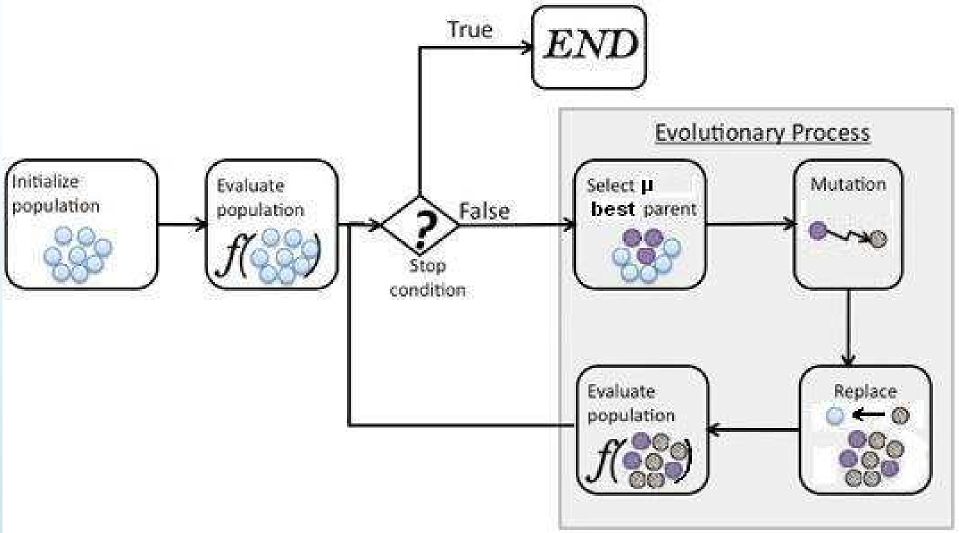
3. ***Метаэвристические:***
- GA (RCGA, BCGA)
- ES ((λ,μ) ES, (λ+μ) ES, CMA ES)
- PSO (RPSO)
- HS, DE, Ant colony, GSO, act.
- Hybrid methaheuristics

(λ + μ) ES Эволюционная стратегия

- Из λ особей популяции выбирается μ лучших

- Оставшиеся (λ- μ) особей погибают

- Каждая выжившая особь дает по (λ - μ) / μ потомков, которые соревнуются с μ выжившими особями



Оператор неоднородной мутации с изменяемым диапазоном

если rnd(0,1) = 1

да:

$$P_k^{i+1} = P_k^{i} + mut * \left(ULR_k - P_k^{i}\right) * \left(1 - rnd(0..1)^{\left(1 - \frac{gen}{maxgen}\right)^2}\right)$$

нет:

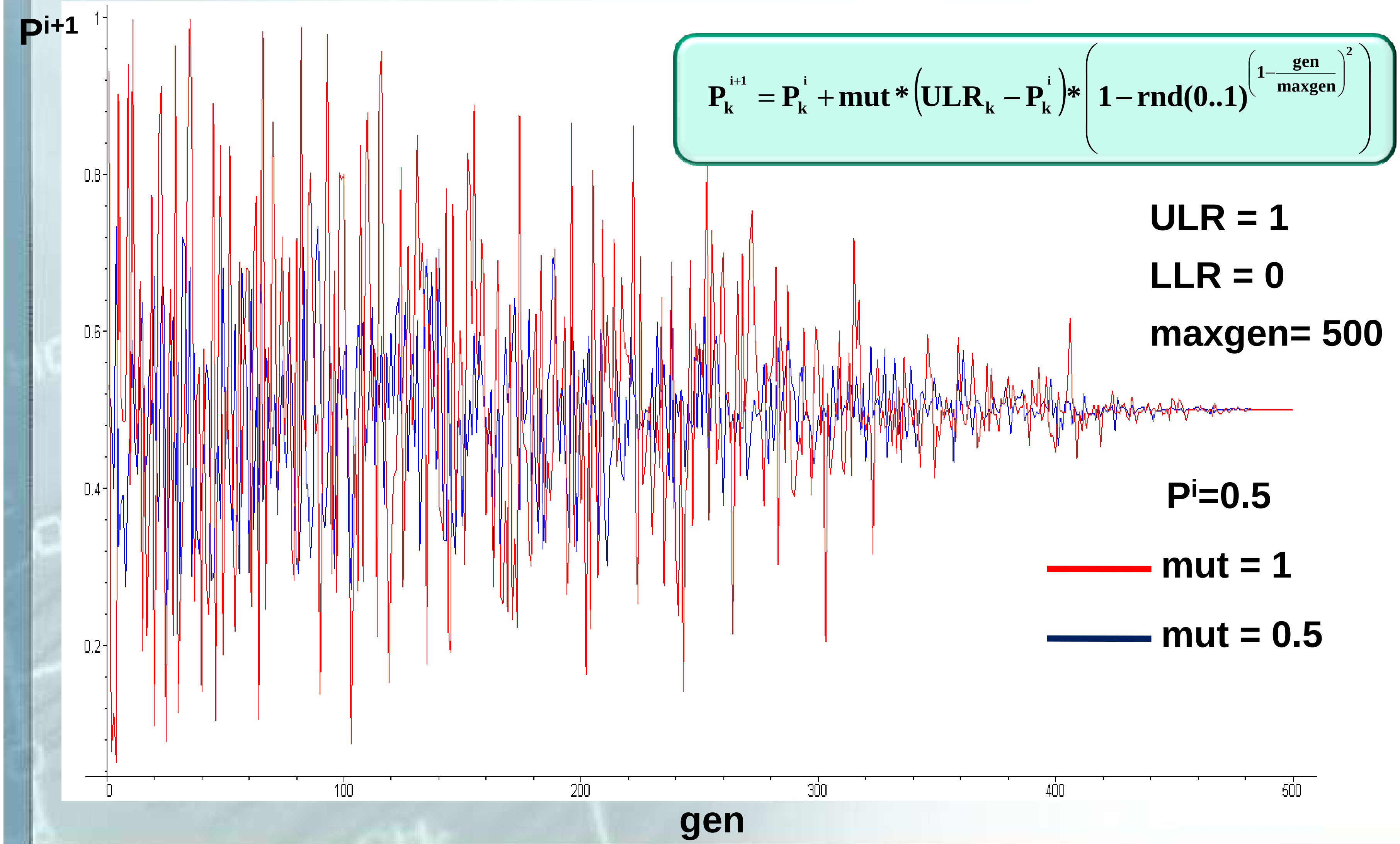
$$P_k^{i+1} = P_k^{i} + mut * \left(P_k^{i} - LLR_k\right) * \left(1 - rnd(0..1)^{\left(1 - \frac{gen}{maxgen}\right)^2}\right)$$

ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

PhysChemMod

$$P_n(x)=\frac{1}{2^n}\sum_{k=0}^{n/2}(-1)^k\binom{n}{k}\binom{2n-2k}{n}x^{n-2k}$$

Оператор неоднородной мутации с изменяемым диапазоном



$$P_k^{i+1} = P_k^i + mut * \left(ULR_k - P_k^i\right) * \left(1 - rnd(0..1)^{\left(1-\frac{gen}{maxgen}\right)^2}\right)$$

ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

PhysChemMod

$P_n(x)=\frac{1}{2^n}\sum_{k=0}^{n/2}(-1)^k\binom{n}{k}\binom{2n-2k}{n}x^{n-2k}$

Задача (задача 1)

$$-\frac{dy(x)}{dx}=A\exp(-E/x)y(x)^n$$

$$\{x_i,y_i\},i=\overline{1,N}$$

$$\mathbf{P}=\begin{pmatrix}A & E & n\end{pmatrix}^T$$

Целевая функция

$$\Omega\begin{pmatrix}A\\E\\n\end{pmatrix}=\sum_{i=1}^{N}\left[-\frac{y_{i+1}-y_i}{x_{i+1}-x_i}-A\exp(-E/\overline{x_i})\overline{y_i}^{\,n}\right]^2$$

Решение задачи

$$\begin{pmatrix}A_o\\E_o\\n_o\end{pmatrix}=\arg\left\{\inf_{\mathbf{P}\in M\subset R^k}[\Omega(\mathbf{P})]\right\}$$

M *– гиперпаралелепипед со сторонами*

Реализация в Maple

```
ES(Ω, λ, μ, mut, n=0..3, A=10^-2.. 10^17, E/R=0..20000):
```

λ – размерность популяции

μ – размер элитной части (проходят в следующее поколение, мутируют в потомков)

mut – фактор величины мутации

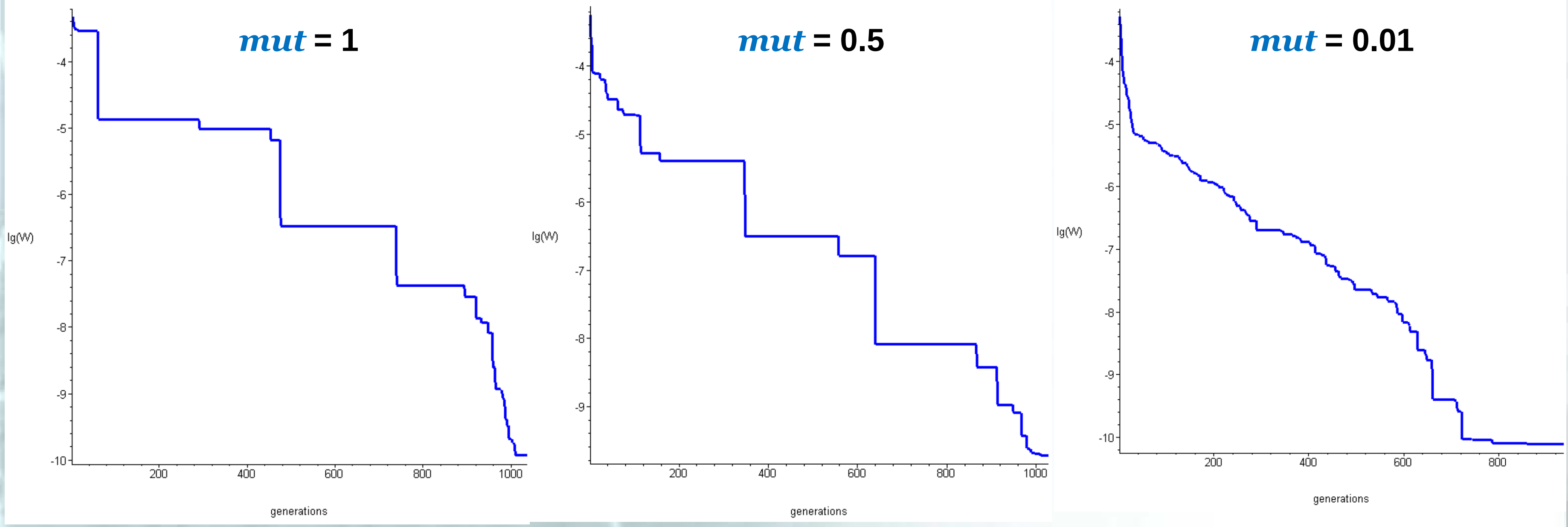
Ω – минимизируемая функция

Процедура ***ES*** *подгружается из библиотеки, запускается с требуемыми параметрами. Невязка* **Ω** *формируется в расчетном файле ранее на основании массива экспериментальных данных. Начальные приближения для параметров задаются рандомно в заданном диапазоне*

Сходимость (*60* + *20*) *ES* задаче *1 для различных величин фактора величины мутации mut*

$$P_k^{i+1} = P_k^{i} + \mathbf{mut} * \left(ULR_k - P_k^{i}\right) * \left(1 - \mathbf{rnd}(0..1)^{\left(1-\frac{\mathbf{gen}}{\mathbf{maxgen}}\right)^2}\right)$$

ES(Ω, *60*, *20*, *mut*, n=0..3, A=10^{-2}.. 10^{17}, E/R=0..20000):

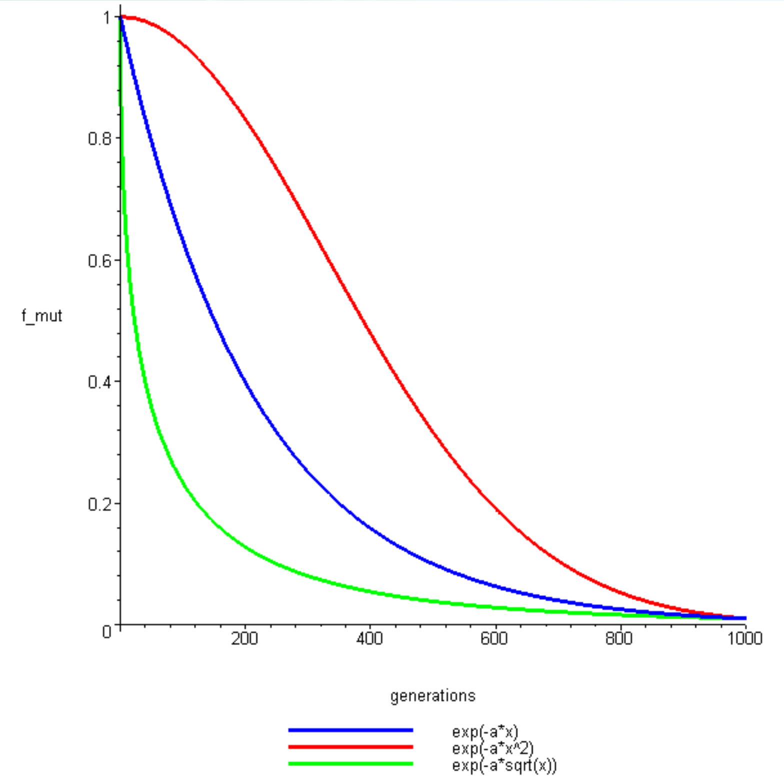


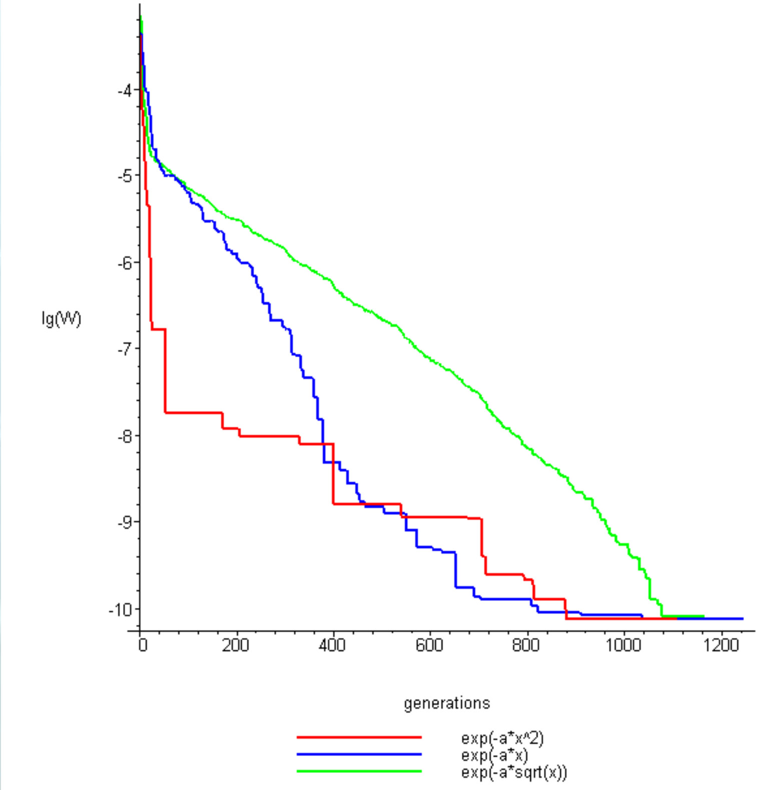
Влияние скорости убывания верхнего порога величины мутации на сходимость ($\lambda + \mu$) ES алгоритма с неоднородными мутациями_v_2

$$\mathbf{P}_k^{\mathbf{i+1}} = \mathbf{P}_k^{\mathbf{i}} + f_{mut}\mathbf{P}_k^i(-1+2*\mathbf{rnd}(0..1))$$

mut **= f(*gen*)**

Фактор величины мутации – изначально заданная функция номера поколения



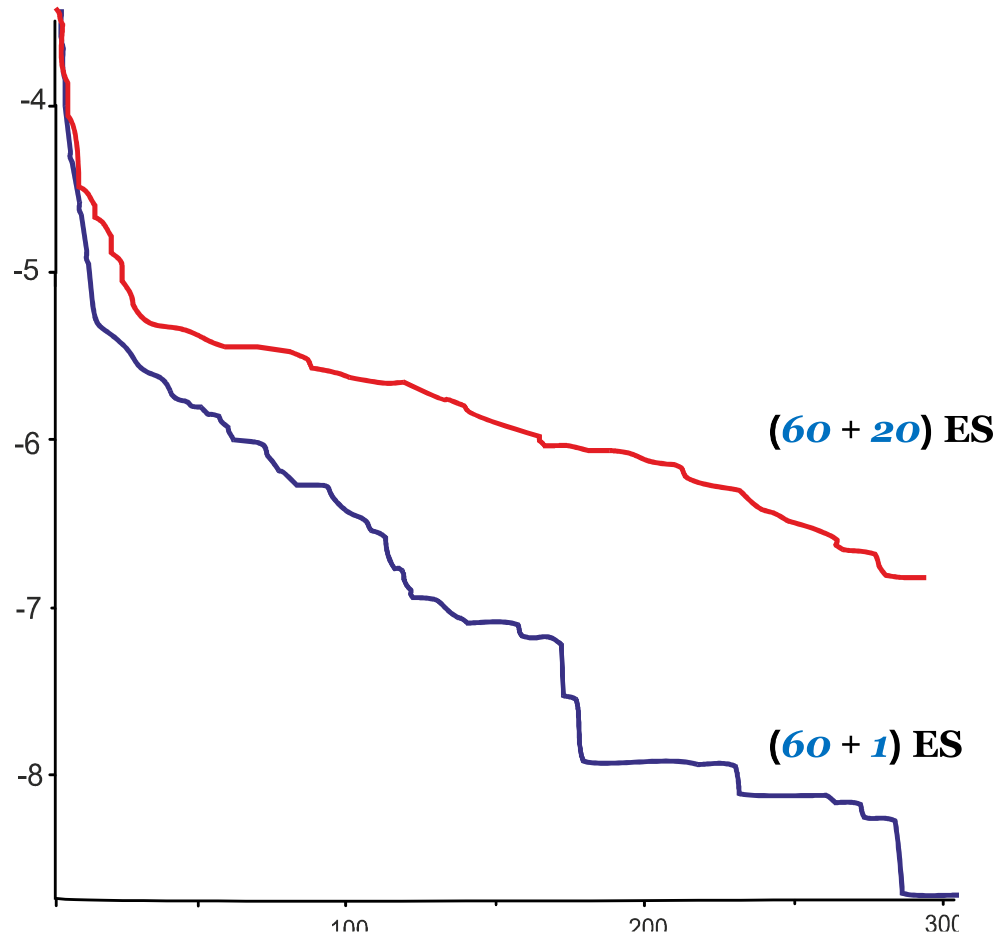


ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

PhysChemMod

$$P_n(x)=\frac{1}{2^n}\sum_{k=0}^{n/2}(-1)^k\binom{n}{k}\binom{2n-2k}{n}x^{n-2k}$$

Сходимость (*60* + *μ*) **ES задаче 1** ***для различных величин размера элитной части μ (при mut=0,01)***



Влияние μ

- **Малое** ***μ***
  – *хорошая сходимость*
  – *низкие поисковые сопособности*
- **Большое** ***μ***
  – *меньшая сходимость*
  – *высокие поисковые сопособности*
- **Требуется нати: оптимальное** ***μ***, ***которе зависит от задачи***

Влияние λ

- **Требуется достаточное для поддержание diversity** ***λ***
  – *Уменьшение* ***λ*** *и увеличение области поиска неэквивалентны*

ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

PhysChemMod

$$P_n(x)=\frac{1}{2^n}\sum_{k=0}^{n/2}(-1)^k\binom{n}{k}\binom{2n-2k}{n}x^{n-2k}$$

Результат решения задачи

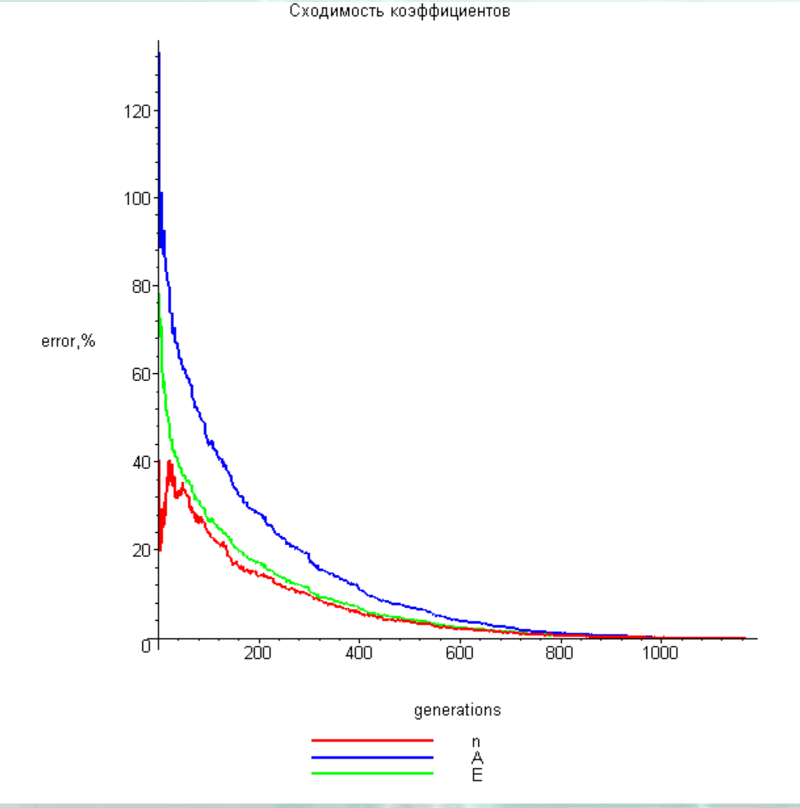
$$\begin{pmatrix} A_o \\ E_o \\ n_o \end{pmatrix} = \arg\left\{\inf_{P\in M\subset R^k}[\Omega(\mathbf{P})]\right\}$$

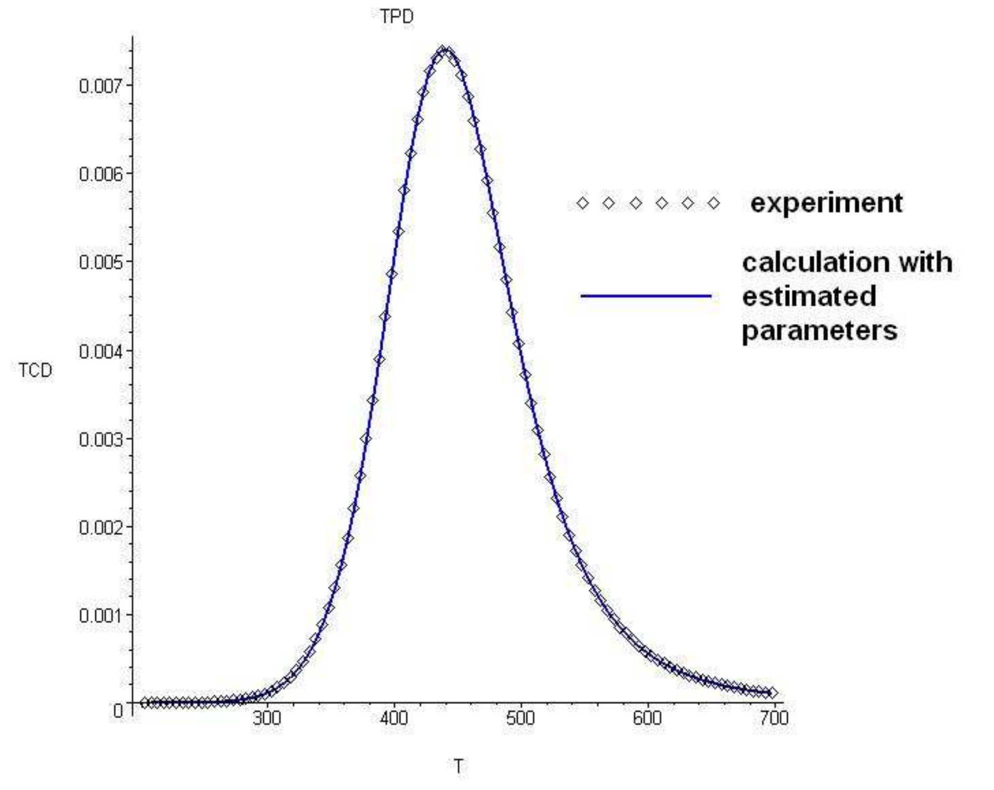
ES(Ω,60,20,0.01,n=0..3,A=10^{-2}.. 10^{17},E/R=0..20000):

Параметры работы алгоритма

Диапазон возможных значений параметров

	Невязка	n	A	E/R
Заложено:		2.0	2000.0	5000.0
Найдено:	5.417732017e-10	2.001661567	1997,501	4999.407352





ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

PhysChemMod

Вектор погрешностей δ *(погрешность в определении параметров)*

По эксперименту

$$\varepsilon = \varepsilon_{\text{алгоритм}} + \varepsilon_{\text{аппрокс}} + \varepsilon_{\text{машинн}} + \varepsilon_{\text{эксперимент}} + \varepsilon_{\text{модели}}$$

Для симулированных данных

$$\varepsilon = \varepsilon_{\text{алгоритм}} + \varepsilon_{\text{аппрокс}} + \varepsilon_{\text{машинн}}$$

$$\varepsilon_{\text{алгоритм}} = \Omega(\mathbf{P}_o) - \Omega(\mathbf{P}_o + \delta_{\textit{алгоритм}})$$

*ГОСТ Р ИСО 5725, ГОСТ 8.207 содержат информацию о способах расчета погрешности эксперимента

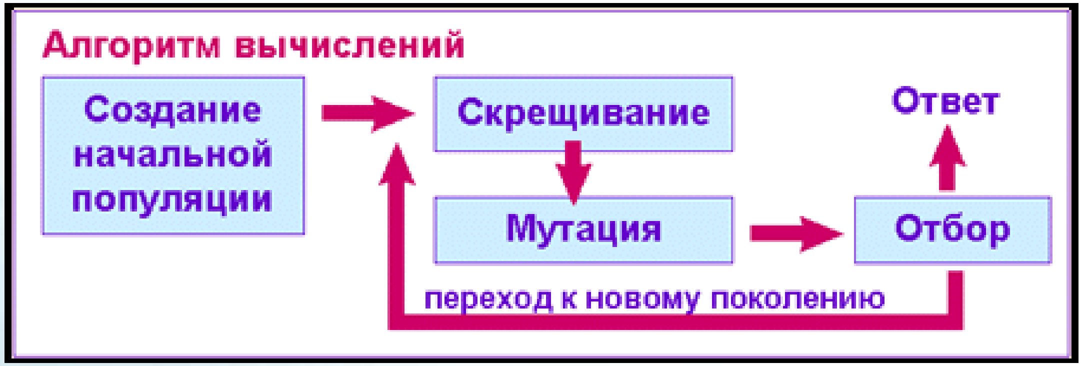
RCGA – *генетический алгоритм с вещественным кодированием*

Отбор (селекция)

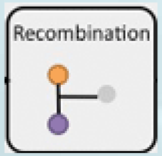
• Элитный **GA** – отбор ***s*** лучших из ***N***

•Оставшиеся (*N* - *s*) особей погибают

•Выжившие ***s*** особей учавствуют в кроссовере, проходят следующее поколение и соревнуются с потомками



Кроссовер (скрещивание)



$$\mathbf{Claild_1 = aParent_1 + (1\text{-}a)Parent_2}$$
$$\mathbf{Claild_2 = aParent_2 + (1\text{-}a)Parent_1}$$

a=**rnd**(1..0)

GA(Ω,*N[-1]*,*N*, *s*, *s_cross*,n=0..3,A=10^{-2}.. 10^{17},E/R=0..20000):

N[-1] – размер минус первой популяции

N – размер популяции

s – размер элитной (выживающей части особей, которые проходят в следующее поколение

s_cross –размер подпопуляции особей, участвующих в скрещивании

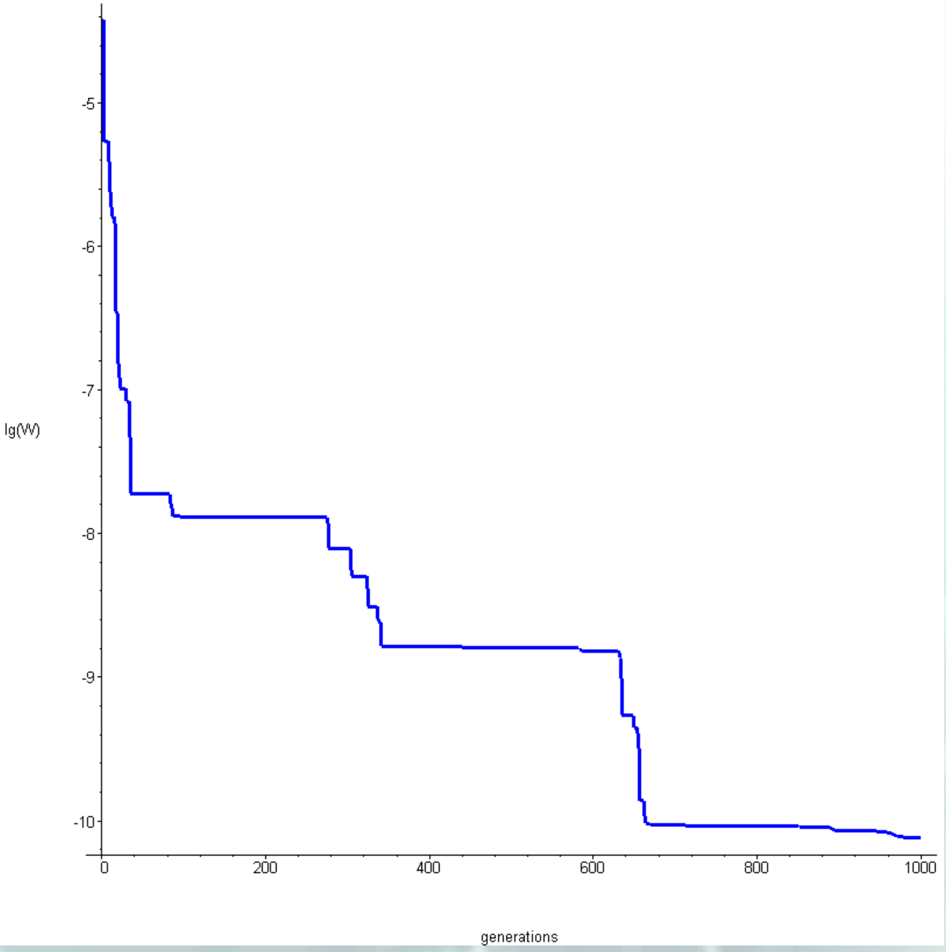
Ω –минимизируемая функция

ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

PhysChemMod

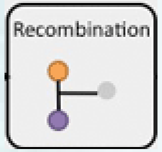
RCGA ***результаты***
(на задаче 1)

GA(Ω,*N[-1]*,*N*, *s*, *s_cross*,n=0..3,A=10^{-2}.. 10^{17},E/R=0..20000):



*N[-1]=**1000*** – размер минус первой популяции
*N=**100*** – размер популяции
*s=**10*** **–** размер элитной (выживающей части особей, которые проходят в следующее поколение
*s_cross=**50*** – размер подпопуляции особей учавствующих в скрещивании
Ω – минимизируемая функция

Неоднородный **кроссовер с изменяемым диапазоном**



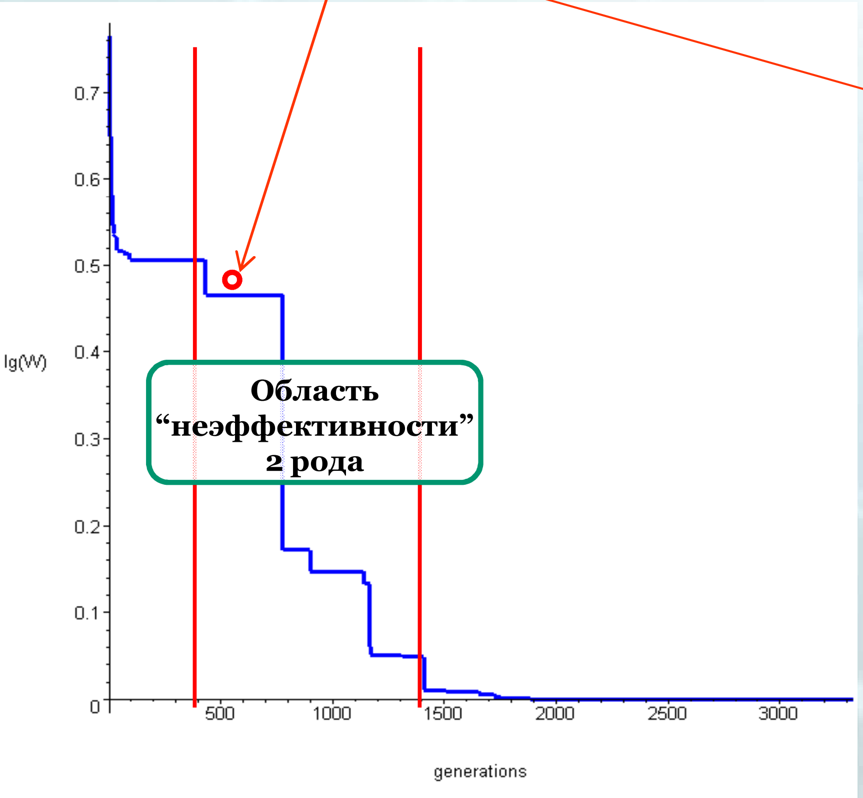
$$\mathbf{Claild_1=aParent_1 + (1\text{-}a)Parent_2}$$
$$\mathbf{Claild_2=aParent_2 + (1\text{-}a)Parent_1}$$

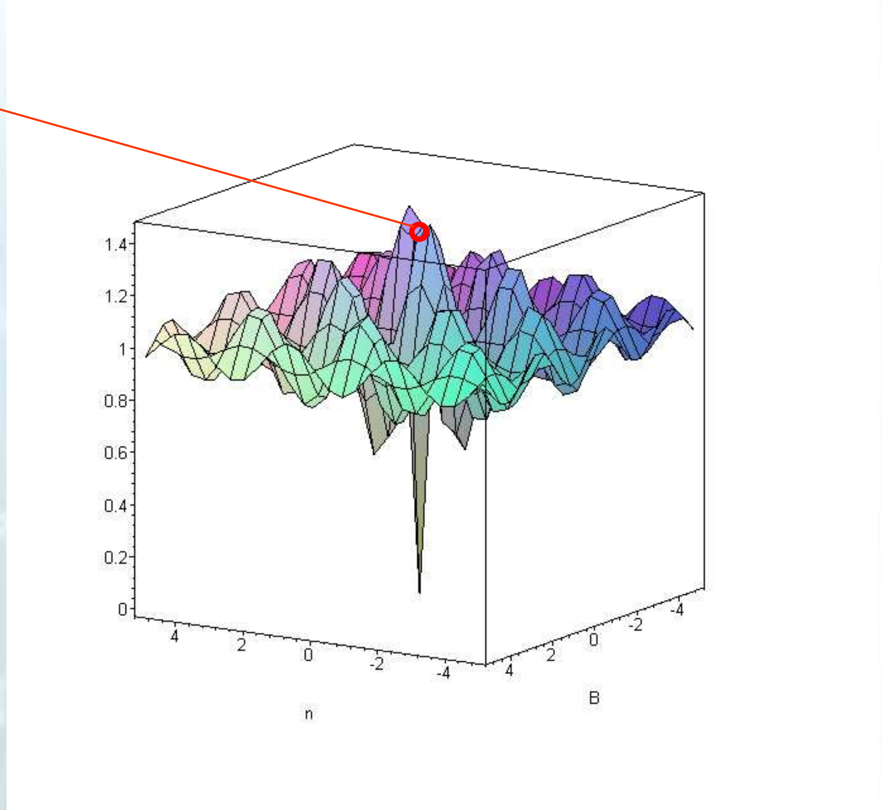
$$\mathbf{a} = \left(1-\mathbf{rnd}(0..1)^{\left(1-\frac{\mathbf{gen}}{\mathbf{maxgen}}\right)^2}\right)$$

Эффективность работы алгоритма Vs Поисковые способности

Снижение эффективности эвристического алгоритма может быть обусловлено

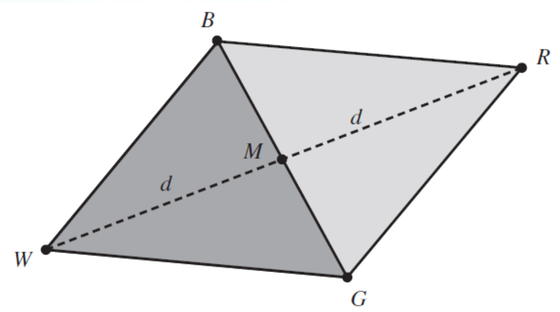
1. *“Застреванием” в локальном минимуме*
2. *Низкой сходимостью в области притяжения некоего минимума*





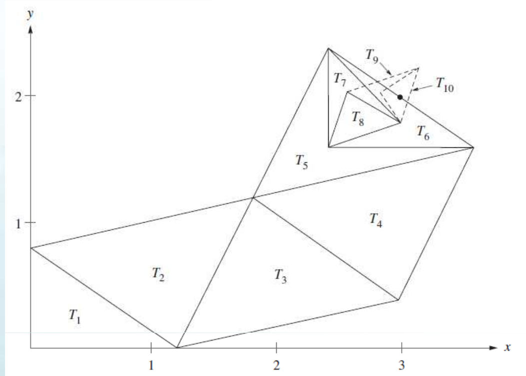
Алгоритм Нелдера-Мида

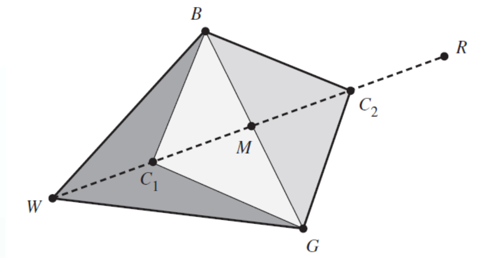
(локальный derivative-free алгоритм)



Оптимизация по деформируемому симплексу

Количество вершин симплекса= мерность пространства +1

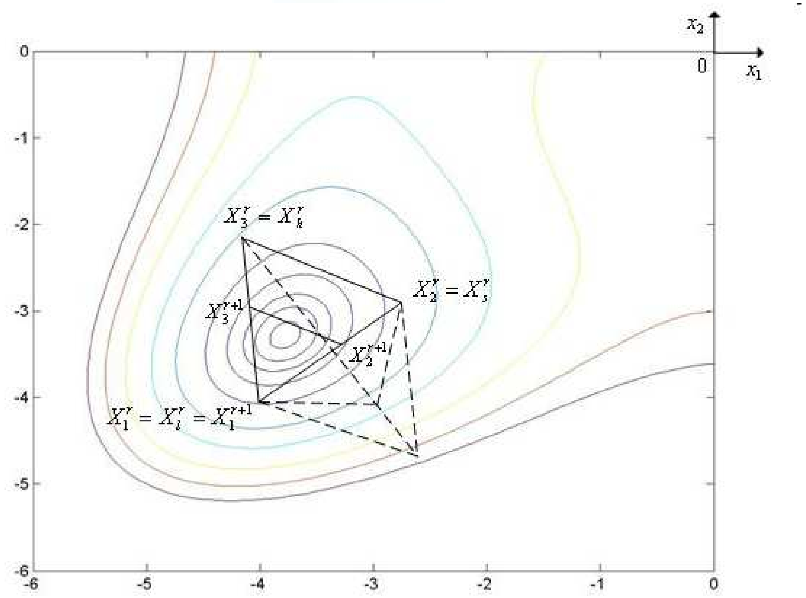




Основные операции:

- ***Отражение худшей точки***
- ***Сжатие симплекса***
- ***Глобальное сжатие***
- ***Замена худшей точки симплекса на результат операци***

- за одну итерацию по алгоритму Нелдера-Мида, по крайней мере худшая точка симплекса улучшится



ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

PhysChemMod

Hybrid (λ + μ) ES

гибрид эволюционной стратегии и локального алгоритма Нелдера-Мида

(μ+ λ) ES Hybrid algorithm(maxgen, demention_number, demention_range, popul_size, loc_iter, mut, simp_disp_factor) procedure

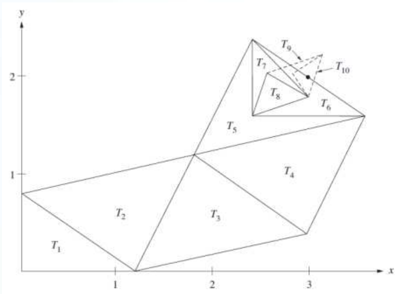
```
Initilize population H =
gen:=0 # number of generations
Global loop (while)
    Sort(H)← H
    # Chaild population generation
        H_elite:=seq(H[i],i=1.. μ)
        for i from 1 to μ do
            for j from 1 to (λ-μ)/ μ do
                H_chaild[j]:=Nu_Mut(H[i], gen, mut, demention_range)
            od
        od
        H_chaid:= seq(H_chaild[j],i=1.. (λ-μ))
    # New population formed
    H:=[H_elite, H_chaid]
    Local_optimize(H, simp_disp_factor, loc_iter)
    gen:=gen+1
od  #stopping condition satisfied
```

1. После мутации μ лучших особей формируется новая популяция **{[*μ*[, [*chaild*]}**

2. Каждая особь новой популяции достраивает точки в n-мерном пространстве для формирования симплекса ***Simplex*** = {***H***[i], [rnd[j](***simp_disp_factor***, ***H***[i])], j=1..k-1 }

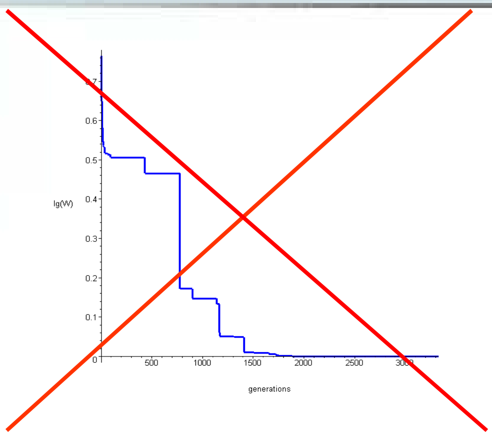
3. Оптимизация симплекса по алгоритму Нелдера-Мида (***local_iter*** итераций)

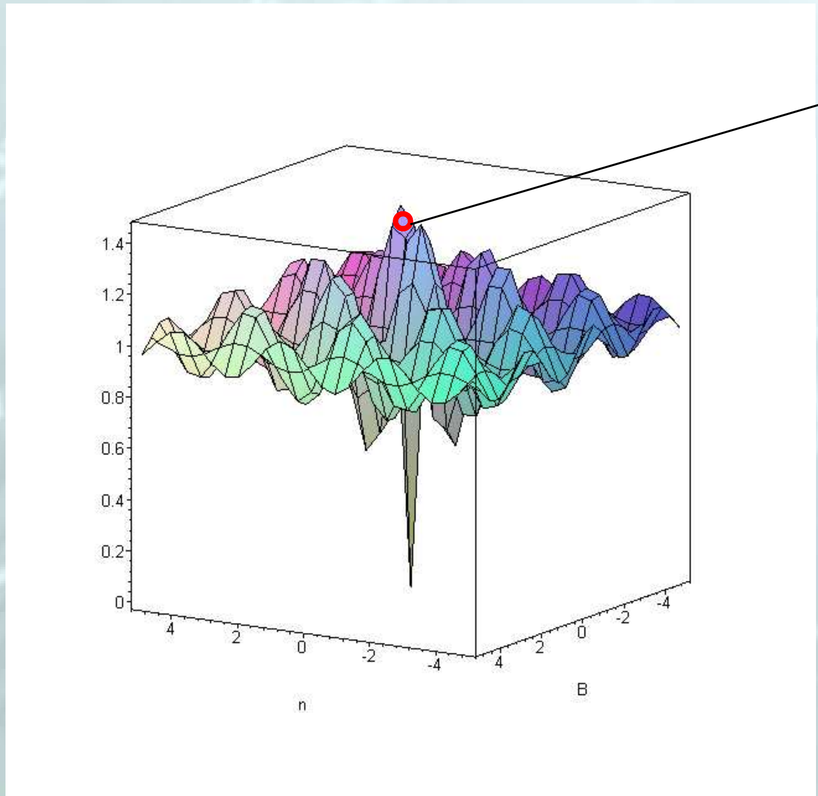
4. Замена особи на лучшую вершину

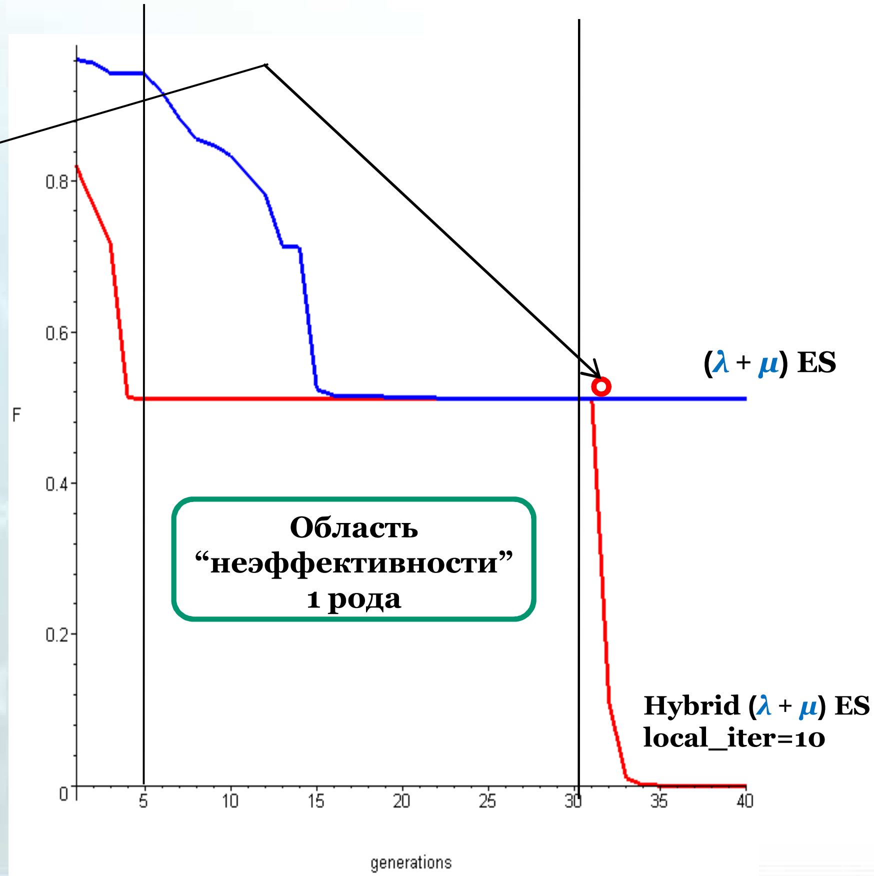


Эффективность работы алгоритма Vs Поисковые способности

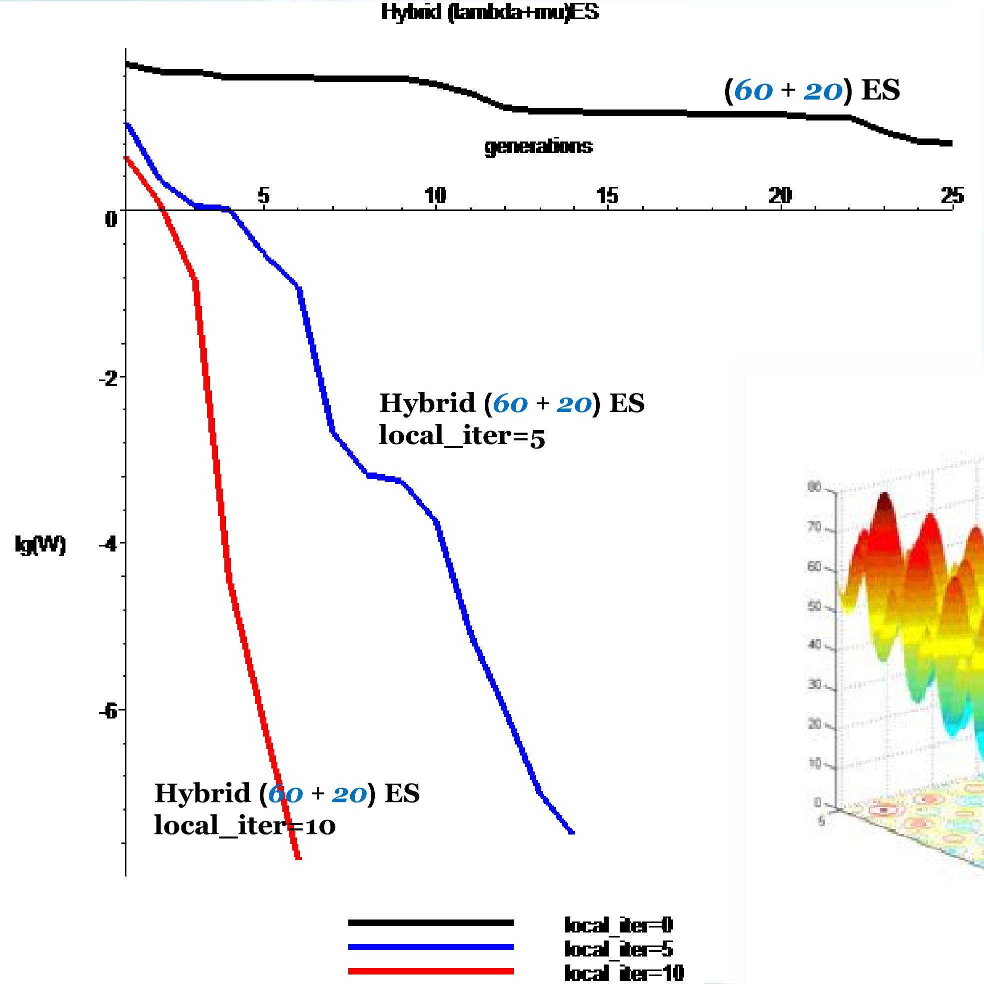
Неэффективность 2 рода (связанная с низкой сходимостью) **устранена** за счет подключения локального алгоритма с хорошей сходимостью



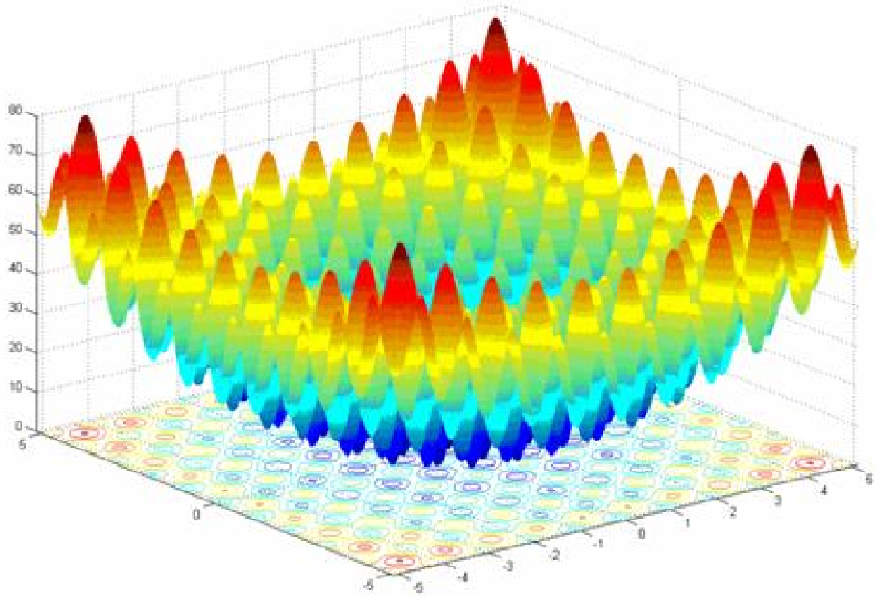




Сходимость *Hybrid* (λ + μ) *ES* на *Rastrigin's function*



λ =60, μ =20
n=2, -500<x[i]<500

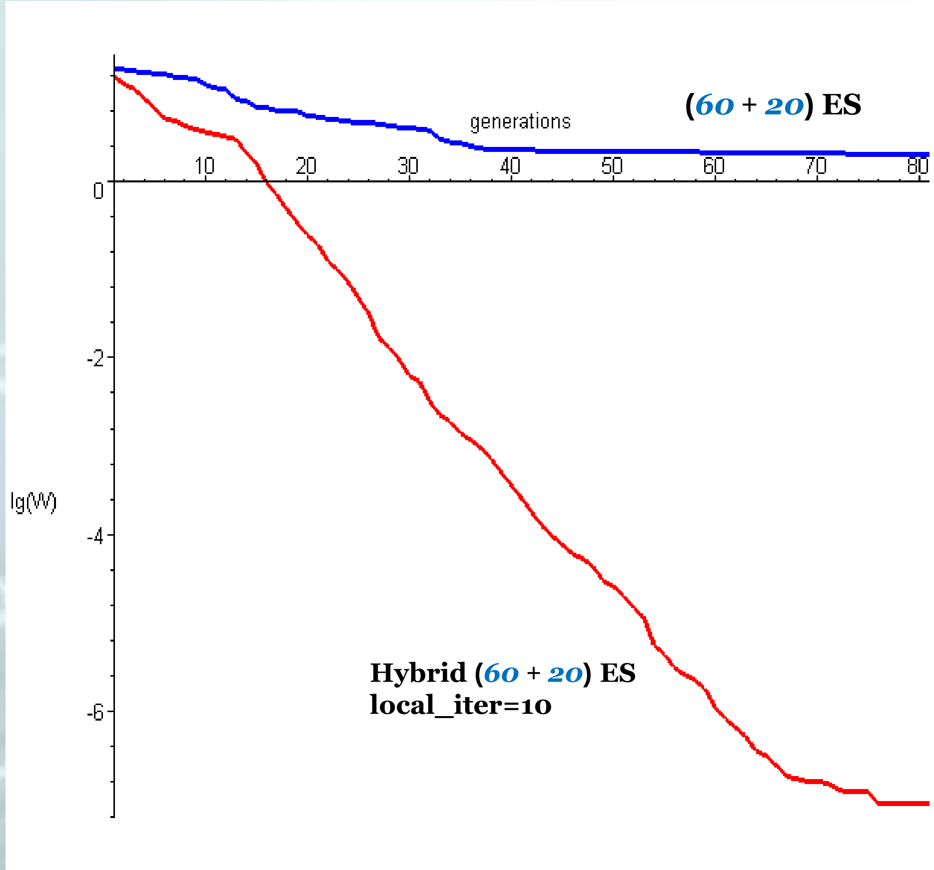


ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

PhysChemMod

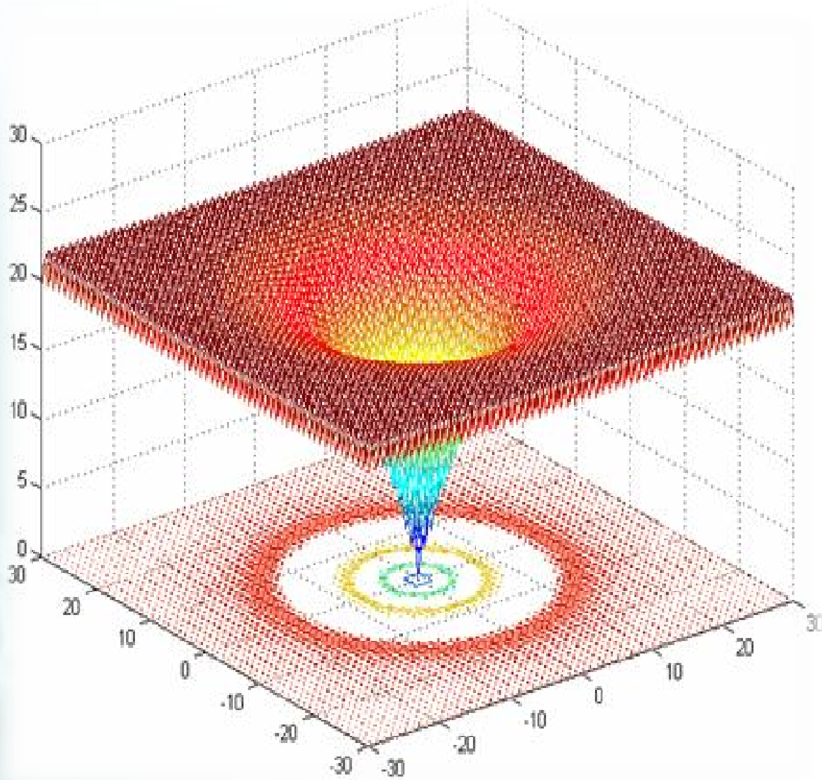
$$P_n(x)=\frac{1}{2^n}\sum_{k=0}^{n/2}(-1)^k\binom{n}{k}\binom{2n-2k}{n}x^{n-2k}$$

Сходимость *Hybrid* (λ + μ) *ES* на *Ackley function*



λ =60, μ =20

n=7, -32.768 <x[i]< 32.768, i=1:n

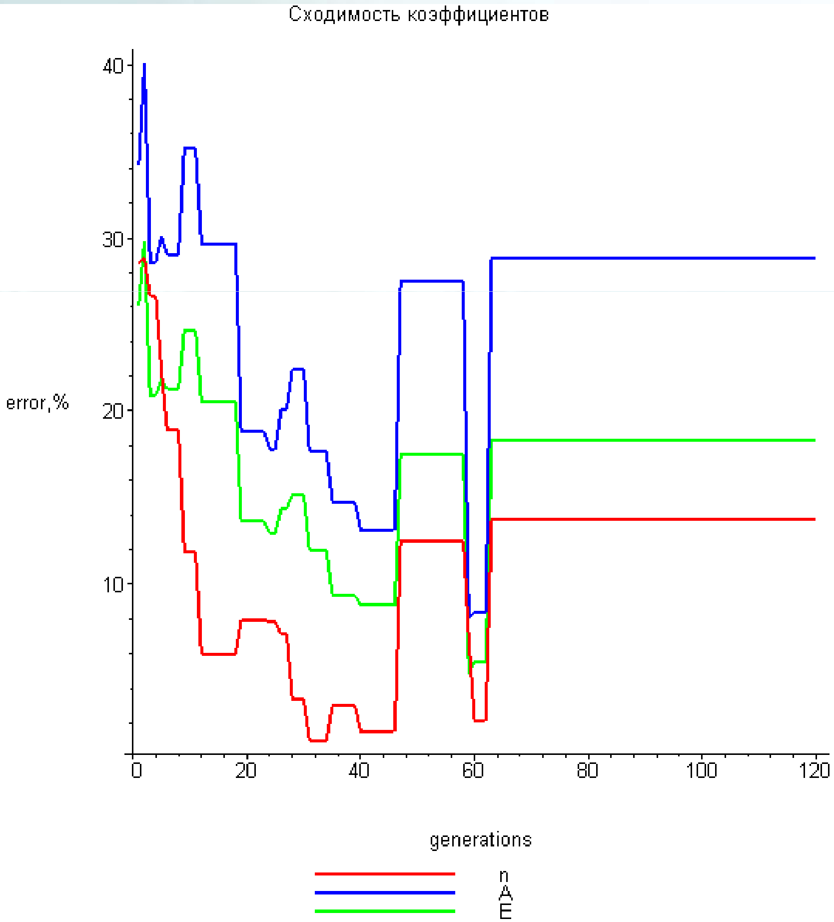


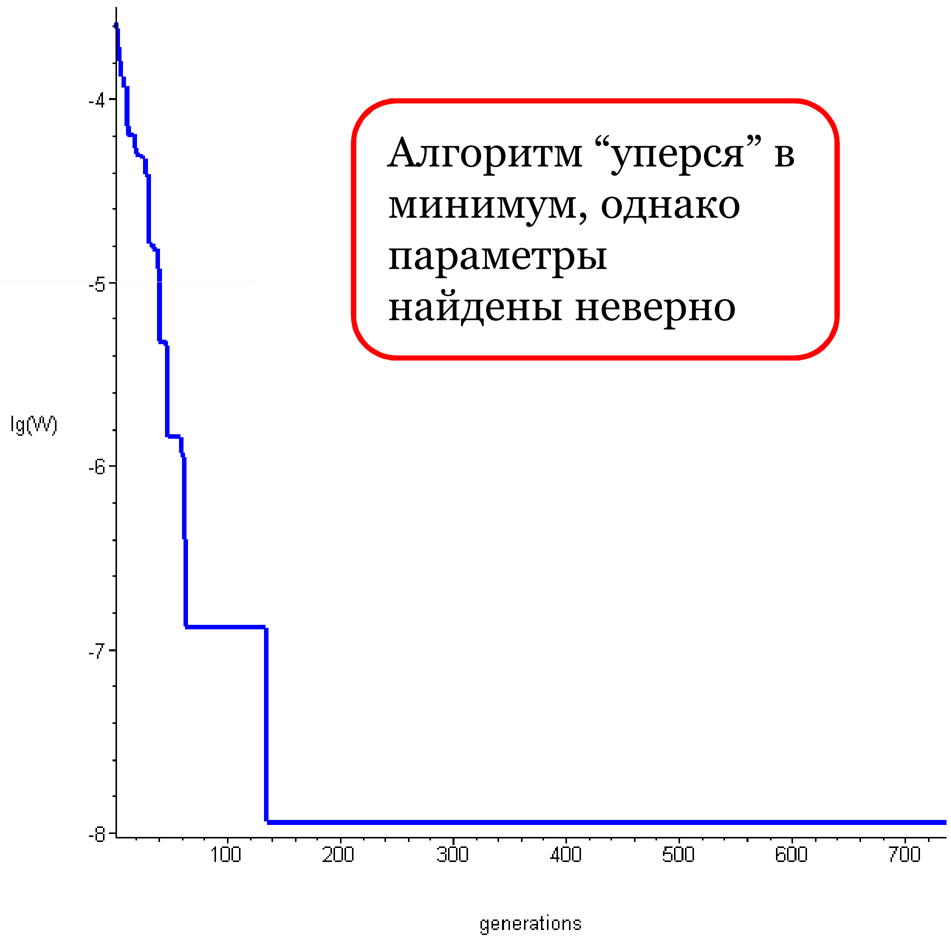
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

PhysChemMod

$$P_n(x)=\frac{1}{2^n}\sum_{k=0}^{n/2}(-1)^k\binom{n}{k}\binom{2n-2k}{n}x^{n-2k}$$

Нелинейные обратные задачи со сложной топологией минимизируемого функционала (“плохой” алгоритм)





Алгоритм “уперся” в минимум, однако параметры найдены неверно

ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

PhysChemMod

Пути повышения эффективности и точности метаэвристическх алгоритмов:

- *Применение* ***специальных неоднородных*** *эволюционных операторов*

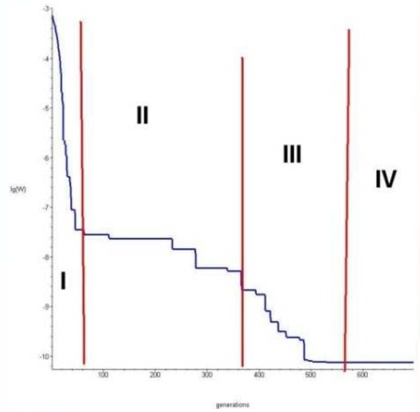
Andre Neubauer, Adaptive non-uniform mutation for genetic algorithms, Lecture notes in computer science,* ***1997**, Volume 1226/1997, 24-34*
Shengxiang Yang Statistics-Based Adaptive Non-uniform Mutation for Genetic Algorithms, Lecture notes in computer science,* ***2003**, Volume 2724/2003, 208*
F. Herrera, M. Lozano, A.M. Sanchez Hybrid crossover operators for* real-coded genetic algorithms:an experimental study, *Soft. Comput.* (2005**) 9: 280–298

- *Создание* ***гибридов*** *метаэвристик с локальными алгоритмами оптимизации*

http://www.physchemmod.org/metaheuristic-algorithm/hybrid-methaheuristic - подборка

- *Использование* ***самоадаптации*** *(классической, CMA)*

**Silja Meyer-Nieberg and Hans-Georg Beyer Self-Adaptation in Evolutionary Algorithms*
http://www.springerlink.com/content/ch80772055507811/
*Nicolaus Hansen homepage (CMA ES)
http://www.lri.fr/~hansen/index.html



- *Применение* ***рестартов*** *(перезапусков)*

Anne Auger and Nikolaus Hansen, A Restart CMA Evolution Strategy With Increasing PopulationSize, Proceedings of the IEEE Congress on Evolutionary Computation, CEC* ***2005**, pp.1769-1776*

- *Разработка* ***параллельных*** *(несколько популяций) алгоритмов*

**N. Hansen. Benchmarking a BI-population CMA-ES on the BBOB-2009 function testbed. In Rothlauf , pages 2389–2396. и др.*

ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

PhysChemMod

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n}\sum_{k=0}^{n/2}(-1)^k\binom{n}{k}\binom{2n-2k}{n}x^{n-2k}$$

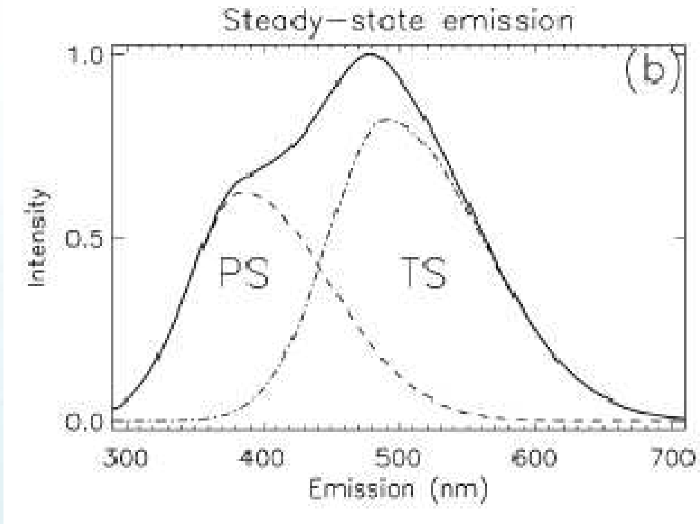
Часть 2. Применение метаэвристических алгоритмов для решения нелинейных задач физической химии

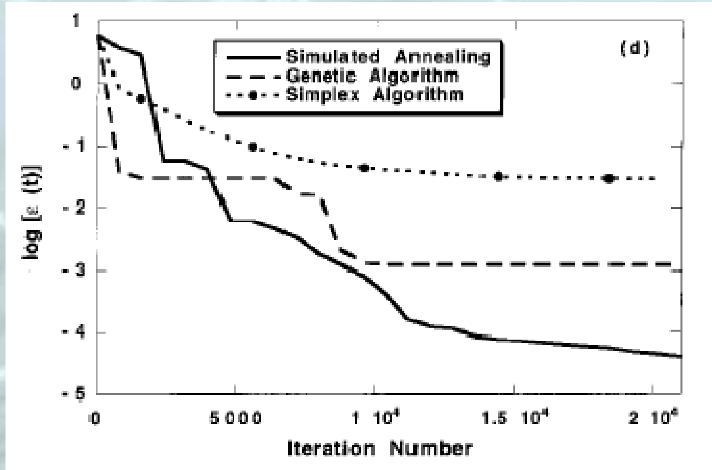
Нелинейные обратные задачи для дифф.уравнений физической химии (нахождение параметров ДУ из эксперимента)

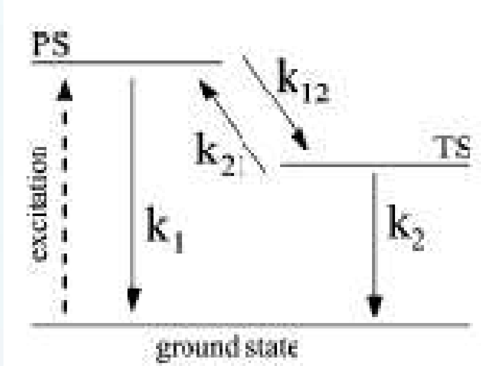
David B. Terry, Michael Messina Heuristic search algorithms for the determination of rate constants and reaction mechanisms from limited concentration data *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **1998,** *38,* 1232-1238

David B. Terry, Jessica L. Bader, Michael Messina Simulated annealing search algorithm for the determination of activation energies and arrhenius Prefactors from limited experimental kinetic data *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **1999,** *39,* 1204-1210

Sheth, Pratik N. and Babu, B. V, Differential Evolution Approach for Obtaining Kinetic Parameters in Nonisothermal Pyrolysis of Biomass, *Materials and Manufacturing Processes,* 24: 1, 47 — 52 , **2009**







Jacek J. Fisz Combined Genetic Algorithm and Multiple Linear Regression (GA-MLR) Optimizer:Application to Multi-exponential Fluorescence Decay Surface, *J. Phys. Chem. A,* **2006,** *Vol. 110, No. 48*

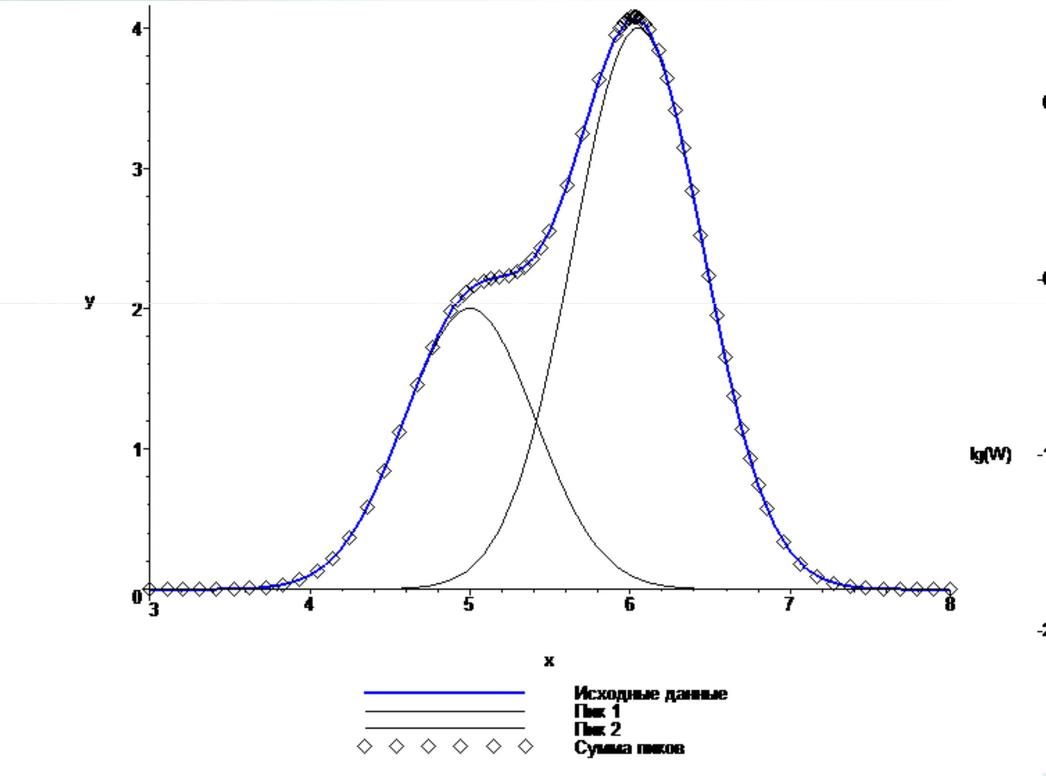
Нахождение констант флуоресценции и внутренних переходов

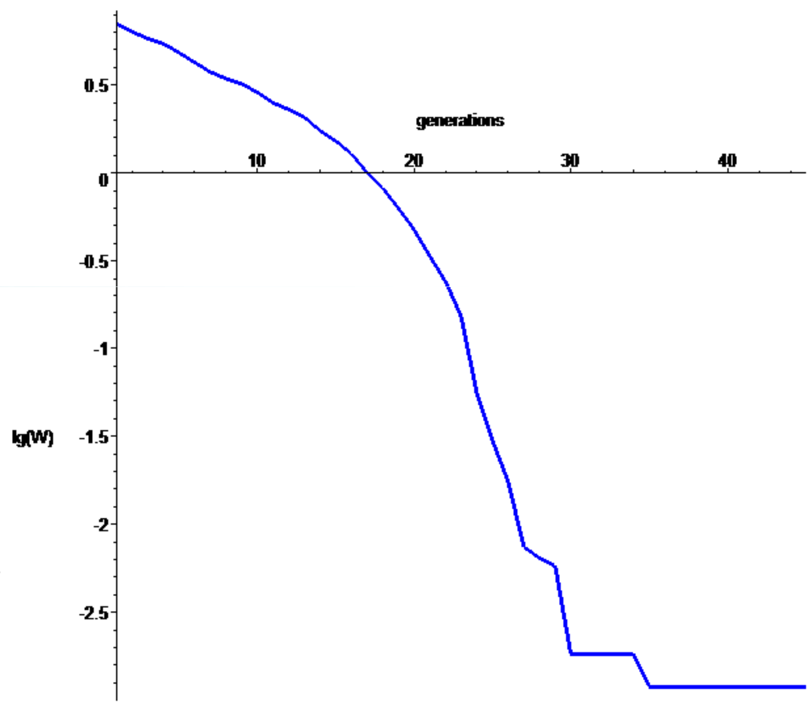
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

PhysChemMod

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n}\sum_{k=0}^{n/2}(-1)^k \binom{n}{k}\binom{2n-2k}{n} x^{n-2k}$$

Нелинейные обратные задачи (нахождение параметров из эксперимента), интерпретация спектров, деконволюция





Результат деконволюции (разделения) двух модельных сигналов с помощью **(*60* + *20*) ES**

ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

PhysChemMod

$$P_n(x)=\frac{1}{2^n}\sum_{k=0}^{n/2}(-1)^k\binom{n}{k}\binom{2n-2k}{n}x^{n-2k}$$

Некорректно поставленные задачи (задачи решения интегральных уравнений Фредгольма I рода) – задачи на нахождение функции распределения

$$\int_a^b K(x,t)y(t)dt = f(x)$$

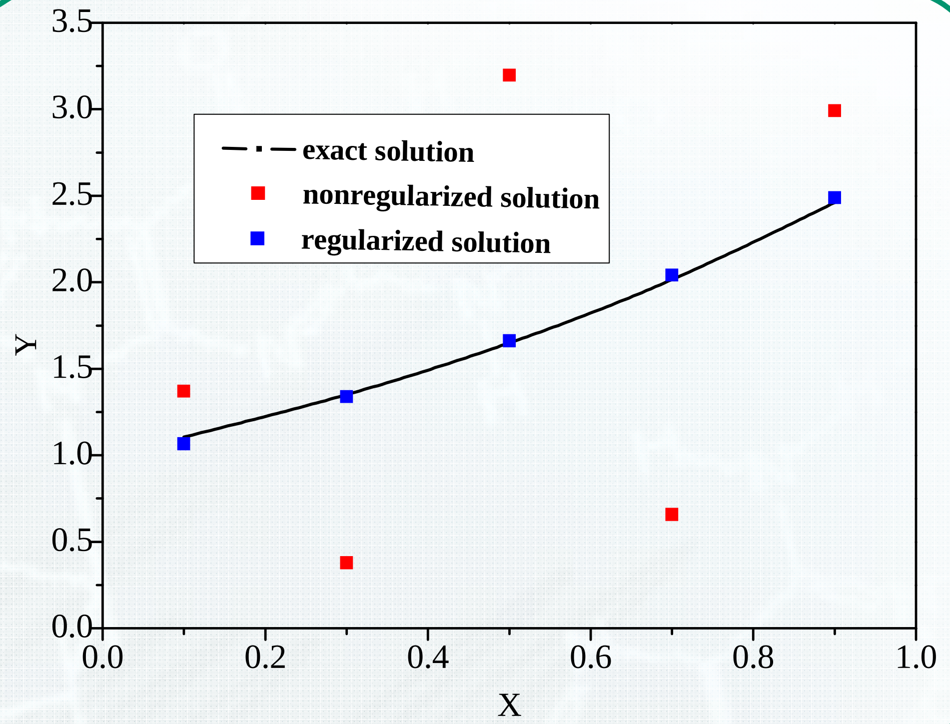
$$\sum_{j=1}^{n} c_j K(x_i,x_j)y(x_j) = f(x_i),\, i=\overline{1,n}$$

$$Ky = f$$

$$M^{\alpha}[y,f] = \|Ky-f\|_{L_2}^2 + \alpha\|y\|_{L_2}^2$$

$$y^{\alpha} = \arg\left[\min\left(M^{\alpha}[y,f]\right)\right]$$

$$y_{optimal}^{\alpha} = \arg\left[\inf\|Ky^{\alpha}-f\|_{L_2}^2\right]$$



$$\int_0^1 e^{x^2 t} y(t)\mathrm{d}t = \frac{e^{x^2+1}-1}{x^2+1}.$$

Оптимизация параметра регуляризации α с помощью метаэвристик

ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

PhysChemMod

Задачи оптимизации технологических процессов

(максимизация прибыли/в день)

Objective function for the profit is given by:

$$f = 2.84x_1 - 0.22x_2 - 3.33x_3 + 1.09x_4 + 9.39x_5 + 9.51x_6.$$

+

Constraints:

a). Cracker capacity of 200,000 lb/hr,

$$1.1x_1 + 0.9x_2 + 0.9x_3 + 1.0x_4 + 1.1x_5 + 0.9x_6 \le 200{,}000$$

b). Ethylene processing limitation of 50,000lb/hr,

$$0.5x_1 + 0.35x_2 + 0.2x_3 + 0.25x_4 + 0.5x_5 + 0.35x_6 \le 50{,}000$$

c). Propylene processing limitation of 20,000lb/hr,

$$0.01x_1 + 0.15x_2 + 0.15x_3 0.18x_4 + 0.01x_5 - 0.15x_6 \le 20{,}000.$$

d). Ethane recycle

$$0.4x_1 + 0.06x_2 + 0.04x_3 + 0.05x_4 - 0.6x_5 + 0.06x_6 = 0.$$

e). Propane recycle

$$0.1x_2 + 0.01x_3 + 0.01x_4 - 0.9x_6 = 0.$$

f). Heat Constraints

$$-6857.6x_1 + 364x_2 + 2032x_3 - 1145x_4 - 6857.6x_5 + 364x_6 + 21520x_7 - 20{,}000{,}000.$$

Where f = profit function (cents/ hr.)

x_1 = Fresh ethane feed (lb/hr.)

x_2 = Fresh propane feed (lb/hr.)

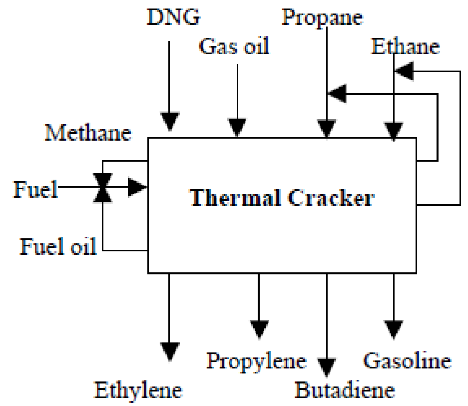
x_3 = Gas-oil feed (lb/hr.)

x_4 = DNG feed (lb/hr.)

x_5 = Ethane recycle (lb/hr.)

x_6 = Propane recycle (lb/hr.)

x_7 = Fuel added (lb/hr.)



Оптимизация

Table 1. Results of LP Simplex and DE.

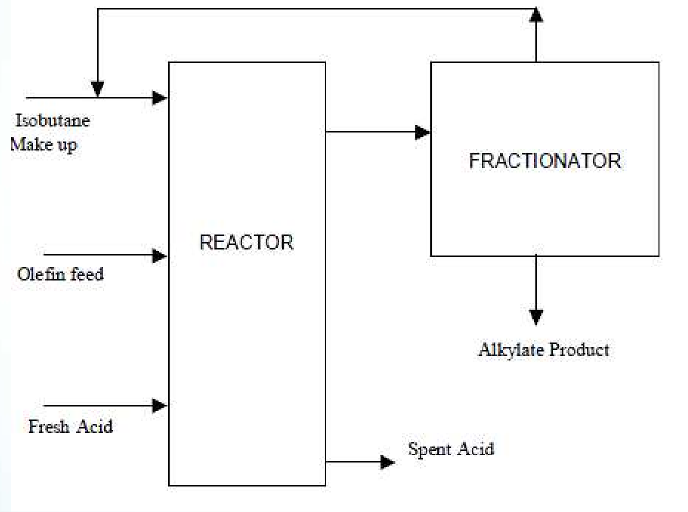
Stream	Flow Rate (lb\hr.) **Using DE**	Flow rate (lb\hr.) using **LP Simplex**
Fresh Ethane feed (x_1)	60,000	60,000
Fresh propane feed (x_2)	0	0
Gas-oil feed (x_3)	0	0
DNG feed (x_4)	0	0
Ethane recycle (x_5)	40,000	40,000
Propane recycle (x_6)	0	0
Fuel added (x_7)	32795.539	32795.539
Ethylene	50,000	50,000
Propylene	1000	1000
Butadiene	1000	1000
Gasoline	1000	1000
Methane	7000	7000
Fuel oil	0	0
Objective function (cents\hr.)	369560.00	369560.00

B.V. Babu and Rakesh Angira OPTIMIZATION OF THERMAL CRACKING OPERATION USING DIFFERENTIAL EVOLUTION

Получены условия ведения процесса, при которых прибыль максимальна

Задачи оптимизации технологических процессов

(максимизация прибыли/в день)



Symbol	Variable	Lower Bound	Upper Bound
x_1	Olefin feed rate (barrels/day)	1500	2000
x_2	Acid addition rate (thousands of pounds/day)	1	120
x_3	Alkylate yield (barrels/day)	3000	3500
x_4	Acid strength (wt. %)	85	93
x_5	Motor octane no.	90	95
x_6	External Isobutane-to-olefin Ratio	3	12
x_7	F-4 performance no.	145	162

$$0.0059553571x_6^2 x_1 + 0.88392857x_3 - 0.1175625x_6 x_1 - x_1 \le 0$$
$$1.1088x_1 + 0.1303533x_1 x_6 - 0.0066033x_1 x_6^2 - x_3 \le 0$$
$$6.66173269x_6^2 + 172.39878x_5 - 56.596669x_4 - 191.20592x_6 - 10000 \le 0$$
$$1.08702x_6 + 0.32175x_4 - 0.03762x_6^2 - x_5 + 56.85075 \le 0$$
$$0.006198x_7 x_4 x_3 + 2462.3121x_2 - 25.125634x_2 x_4 - x_3 x_4 \le 0$$
$$161.18996x_3 x_4 + 5000.0x_2 x_4 - 489510.0x_2 - x_3 x_4 x_7 \le 0$$
$$0.33x_7 - x_5 + 44.333333 \le 0$$
$$0.022556x_5 - 0.007595x_7 - 1.0 \le 0$$
$$0.00061x_3 - 0.0005x_1 - 1.0 \le 0$$
$$0.819672x_1 - x_3 + 0.819672 \le 0$$
$$24500.0x_2 - 250.0x_2 x_4 - x_3 x_4 \le 0$$
$$1020.4082x_4 x_2 + 1.2244898x_3 x_4 - 100000x_2 \le 0$$
$$6.25x_1 x_6 + 6.25x_1 - 7.625x_3 - 100000 \le 0$$
$$1.22x_3 - x_6 x_1 - x_1 + 1.0 \le 0$$

Max. $\text{Profit} = 1.715x_1 + 0.035x_1 x_6 + 4.0565x_3 + 10.0x_2 - 0.063x_3 x_5$

\+

Оптимизация

The maximum profit as reported in [23] is: $1772.77 per day, and the optimal variable values are $x_1 = 1698.18$, $x_2 = 53.66$, $x_3 = 3031.3$, $x_4 = 90.11$, $x_5 = 95.0$, $x_6 = 10.50$, $x_7 = 153.53$.

Получены условия ведения процесса, при которых прибыль максимальна (1172$ в день)

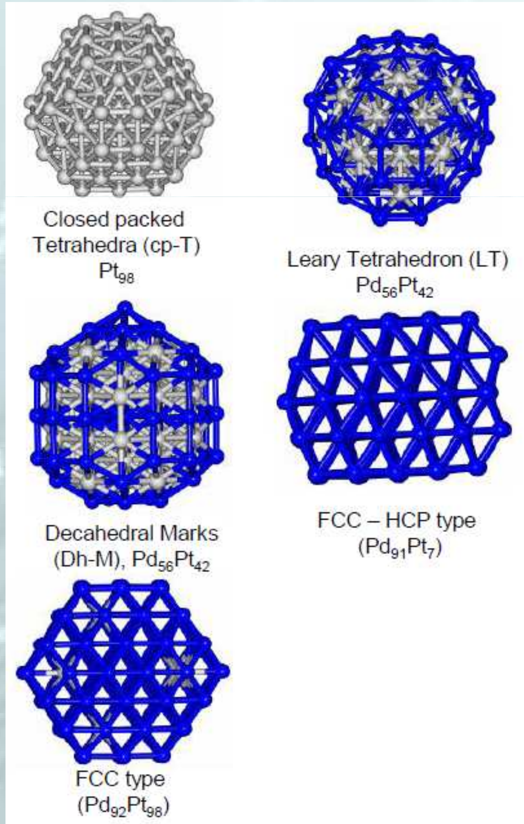
*Angira R., B. V. Babu Evolutionary computation for global optimization of non-linear chemical engineering processes

ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

PhysChemMod

Задачи **оптимизации молекулярных структур** (нахождения глобального минимума энергии)

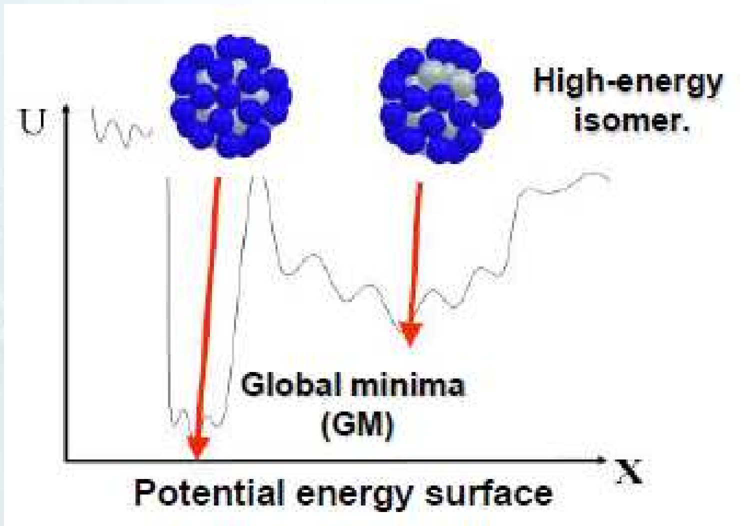
Метод **DFT** – ab inito метод расчета равновесной конфигурации и Электронной структуры молекулярных и кристаллических стурктур



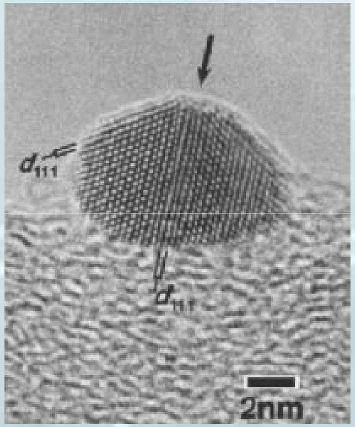
Целевая функция – потенциальная энергия системы как функция положений (координат) атомомв

$$V = \sum_{i=1}^{N}\left\{\sum_{j=1(j\neq i)}^{N} A_{ij}\exp\left(-p_{ij}\left(\frac{r_{ij}}{r_{ij}^{0}}-1\right)\right)-\left[\sum_{j=1(j\neq i)}^{N}\xi_{ij}^{2}\exp\left(-2q_{ij}\left(\frac{r_{ij}}{r_{ij}^{0}}-1\right)\right)\right]^{12}\right\}$$

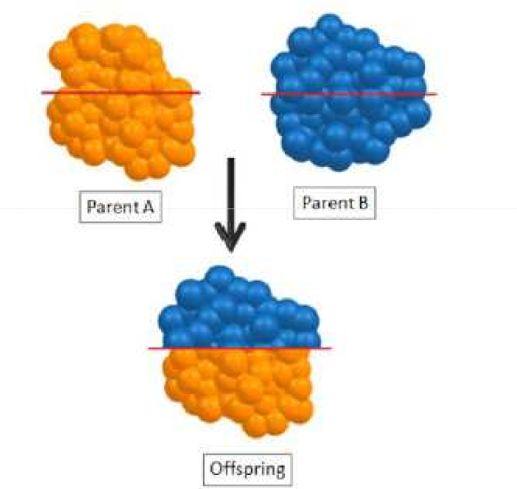
***Lauro Oliver Paz Borbón**
Computational studies of 2 nd and 3 rdrow transition metals: DFT and genetic algorithm approach,
TheoryGroupCoffeeTalk
31 thAugust2009
-Berlin, DE1



Birmingham Cluster Genetic Algorithm (BCGA): Uses operators which are analogues of evolutionary principles [3]. Step 1

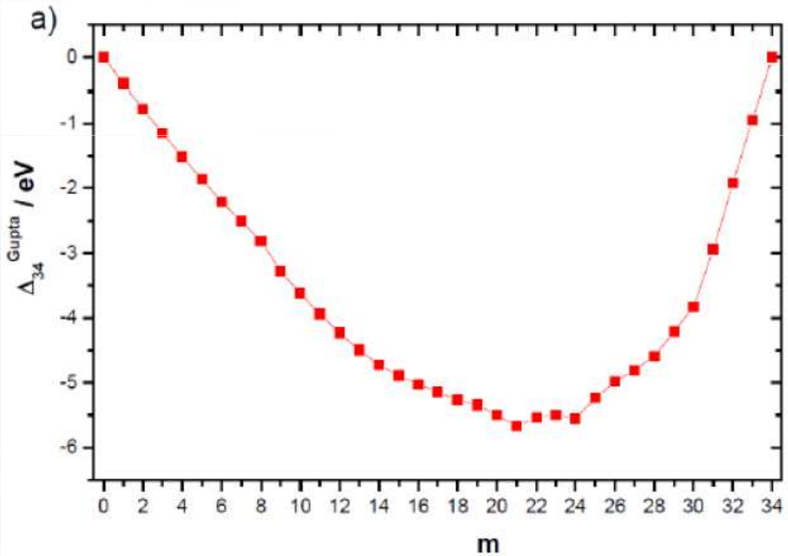


***Кластер** золота в аморфном углероде (ПЭМ ВР)*



Deaven and Ho's "cut and paste" crossover operator

Зависимость энергии кластера на атом от количества атомов (энергия связи на атом)



$$\Delta_{34}^{\rm Gupta} = E_{\rm total}^{\rm Gupta}(\mathrm{Pd}_m\mathrm{Pt}_n) - m\frac{E_{\rm total}^{\rm Gupta}(\mathrm{Pd}_{34})}{34} - n\frac{E_{\rm total}^{\rm Gupta}(\mathrm{Pt}_{34})}{34}$$

Lauro Oliver Paz Borbón** Computational studies of 2nd and 3rd row transition metals: DFT and genetic algorithm approach, ***TheoryGroupCoffeeTalk 31 thAugust2009 *Berlin, DE1*

Перспективы применения метаэвристик в физической химии

• ***Нелинейные обратные задачи*** *для дифф.уравнений физической химии (нахождение параметров ДУ из эксперимента)*

• *Линейные и нелинейные* ***некорректно поставленные задачи*** *(задачи решения интегральных уравнений Фредгольма I рода) – задачи на нахождение функции распределения (оптимизация параметра регуляризации)*

• *Задачи* ***оптимизации химико-технологических процессов*** *и реакторов - задача на условный супремум неявно заданной многопараметрической функции, многокритериальная оптимизация (нахождение границы Парето)*

•***Построение аппроксиматоров*** *на основе нечетких схем с последующей оптимизацией (проф. И.А. Ходашинский, ТУСУР, Томск)*

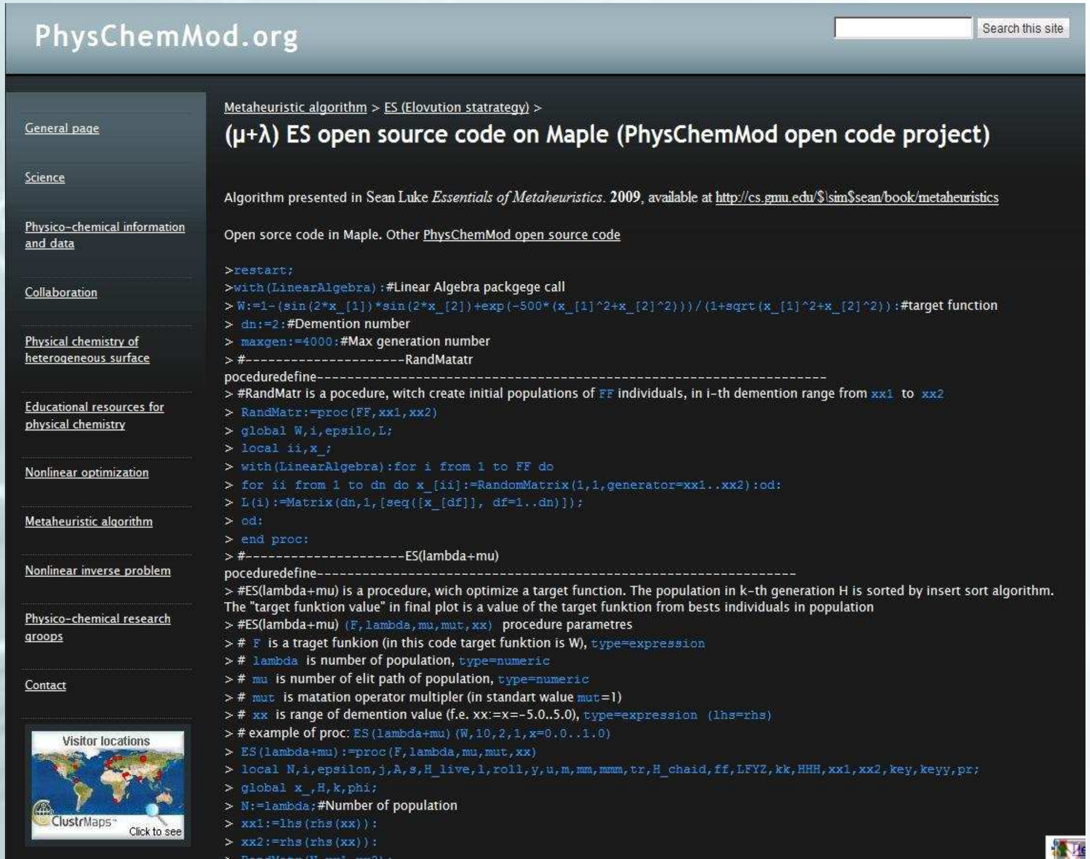
• ***Оптимизация молекулярных структур*** *(глобальный минимум энергии структуры) – применение в квант. мех. расчетов в рамках DFT*

ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

PhysChemMod

Открытые исходные коды алгоритмов, подборка литературы по затронутым вопросам, подробная информация:

www.PhysChemMod.org


PhysChemMod.org

Search this site

General page
Science
Physico-chemical information and data
Collaboration
Physical chemistry of heterogeneous surface
Educational resources for physical chemistry
Nonlinear optimization
Metaheuristic algorithm
Nonlinear inverse problem
Physico-chemical research groops
Contact

Visitor locations
ClustrMaps
Click to see

Metaheuristic algorithm > ES (Elovution statrategy) >

(μ+λ) ES open source code on Maple (PhysChemMod open code project)

Algorithm presented in Sean Luke *Essentials of Metaheuristics*. 2009, available at http://cs.gmu.edu/$\sim$sean/book/metaheuristics

Open sorce code in Maple. Other PhysChemMod open source code

```
>restart;
>with(LinearAlgebra):#Linear Algebra packgege call
> W:=1-(sin(2*x_[1])*sin(2*x_[2])+exp(-500*(x_[1]^2+x_[2]^2)))/(1+sqrt(x_[1]^2+x_[2]^2)):#target function
> dn:=2:#Demention number
> maxgen:=4000:#Max generation number
> #--------------------RandMatatr
pocedurедefine-------------------------------------------------------------------
> #RandMatr is a pocedure, witch create initial populations of FF individuals, in i-th demention range from xx1 to xx2
> RandMatr:=proc(FF,xx1,xx2)
> global W,i,epsilo,L;
> local ii,x_;
> with(LinearAlgebra):for i from 1 to FF do
> for ii from 1 to dn do x_[ii]:=RandomMatrix(1,1,generator=xx1..xx2):od:
> L(i):=Matrix(dn,1,[seq([x_[df]], df=1..dn)]);
> od:
> end proc:
> #--------------------ES(lambda+mu)
pocedurедefine-------------------------------------------------------------
> #ES(lambda+mu) is a procedure, wich optimize a target function. The population in k-th generation H is sorted by insert sort algorithm. The "target funktion value" in final plot is a value of the target funktion from bests individuals in population
> #ES(lambda+mu) (F,lambda,mu,mut,xx) procedure parametres
> # F is a traget funkion (in this code target funktion is W), type=expression
> # lambda is number of population, type=numeric
> # mu is number of elit path of population, type=numeric
> # mut is matation operator multipler (in standart walue mut=1)
> # xx is range of demention value (f.e. xx:=x=-5.0..5.0), type=expression (lhs=rhs)
> # example of proc: ES(lambda+mu)(W,10,2,1,x=0.0..1.0)
> ES(lambda+mu):=proc(F,lambda,mu,mut,xx)
> local N,i,epsilon,j,A,s,H_live,l,roll,y,u,m,mm,mmm,tr,H_chaid,ff,LFYZ,kk,HHH,xx1,xx2,key,keyy,pr;
> global x_,H,k,phi;
> N:=lambda;#Number of population
> xx1:=lhs(rhs(xx)):
> xx2:=rhs(rhs(xx)):
```

наш логотип:
(баннер)

PhysChemMod

$$P_n(x)=\frac{1}{2^n}\sum_{k=0}^{n/2}(-1)^k\binom{n}{k}\binom{2n-2k}{n}x^{n-2k}$$

электронная почта

PhysChemMod[at]gmail.com

Спасибо за внимание

Авторы выражают благодарность доц. **Ю.Р.Цою** (ТПУ) за ценные консультации по вопросу настройки эволюционных операторов, а так же проф. **В.И.Биматову** (ТГУ) за идею использовать генетические алгоритмы для решения обратных задач