

МНОГОКРИТЕРИАЛЬНАЯ ОПТИМИЗАЦИЯ УСЛОВИЙ ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ С ВЫБОРОМ «ИДЕАЛЬНОЙ» ТОЧКИ

¹**Коледин С.Н. ORCID ID 0000-0003-3291-9794,**

²**Коледина К.Ф. ORCID ID 0000-0001-8555-0543**

¹Федеральное государственное образовательное бюджетное учреждение высшего образования «Финансовый университет при Правительстве Российской Федерации», Москва, Российской Федерации;

²Институт нефтехимии и катализа Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Уфимский федеральный исследовательский центр Российской академии наук», Уфа, Российской Федерации, e-mail: koledinakamila@mail.ru

Оптимизация химических процессов представляет собой задачу с несколькими противоречивыми критериями: максимальный выход целевого продукта при минимальном выходе побочного продукта, при наиболее мягких условиях реакции. Поэтому актуальны постановка и решение задачи одновременной многокритериальной оптимизации в виде Парето-аппроксимации. Причем необходим инструмент выбора наилучшего решения из оптимальных. Целью исследования является многокритериальная оптимизация условий химической реакции с выбором «идеальной» точки из всего множества Парето на примере каталитического синтеза бензилбутилового эфира. Задача многокритериальной оптимизации решается алгоритмом NSGA-II. Метод идеальной точки заключается в нахождении на границе Парето точки, ближайшей к «идеальной» точке по всем параметрам. Результаты получены для многокритериальной оптимизации процесса каталитического синтеза бензилбутилового эфира, на основе кинетической модели. С помощью расстояния Минковского была найдена ближайшая к идеальной точка из всей области решения. Для данной точки значения варьируемых параметров следующие: температура 167,4 °C, соотношение исходных реагентов [BnOH]:[n-BuOH] = 4:1, время реакции 694 мин. В работе предложен метод выбора значения из множества оптимальных, получаемых при решении задачи многокритериальной оптимизации. Однако в реальных задачах не всегда достаточно только близости к «идеальному» решению. Зачастую существуют неформализованные требования к решению, потому необходимо предоставлять все множество неулучшаемых решений, с возможностью выбора.

Ключевые слова: многокритериальная оптимизация, метод идеальной точки, бензилбутиловый эфир, расстояние Минковского, кинетическая модель, максимальный выход целевого продукта

MULTICRITERIA OPTIMIZATION OF CHEMICAL PROCESS CONDITIONS WITH THE SELECTION OF AN “IDEAL” POINT

¹**Koledin S.N. ORCID ID 0000-0003-3291-9794,**

²**Koledina K.F. ORCID ID 0000-0001-8555-0543**

*¹Federal State Educational Budgetary Institution of Higher Education
“Financial University under the Government of the Russian Federation”,
Moscow, Russian Federation;*

*²Institute of Petrochemistry and Catalysis of the Federal State Budgetary Scientific
Institution “Ufa Federal Research Center of the Russian Academy of Sciences”,
Ufa, Russian Federation, e-mail: koledinakamila@mail.ru*

Optimization of chemical processes presents a challenge with several conflicting criteria: maximizing the yield of the target product while minimizing the yield of a by-product, all under the mildest reaction conditions. Therefore, the formulation and solution of a simultaneous multi-criteria optimization problem using Pareto approximation is relevant. Furthermore, a tool for selecting the best solution from among the optimal ones is required. The objective of this study is multi-criteria optimization of chemical reaction conditions, selecting the “ideal” point from the entire Pareto set using the catalytic synthesis of benzyl butyl ether as an example. The multi-criteria optimization problem is solved using the NSGA-II algorithm. The ideal point method involves finding the point on the Pareto frontier closest to the “ideal” point across all parameters. Results were obtained for multi-criteria optimization of the catalytic synthesis of benzyl butyl ether based on a kinetic model. Using the Minkowski distance, the closest point to the ideal point from the entire solution domain was found. For this point, the variable parameter values are as follows: temperature 167.4°C, reactant ratio [BnOH]:[n-BuOH] = 4:1, reaction time 694 min. This paper proposes a method for selecting a value from a set of optimal values obtained by solving a multicriteria optimization problem. However, in real-world problems, proximity to the “ideal” solution is not always sufficient. Solution requirements are often not formalized, so it is necessary to provide the entire set of non-improvable solutions, with the ability to select.

Keywords: multicriteria optimization, “ideal” point method, benzyl butyl ether, Minkowski distance, kinetic model, maximum yield of target product

Введение

Основной целью математического моделирования сложных химических процессов является определение оптимальных условий их проведения. Зачастую оптимизация химических процессов представляет собой задачу с несколькими противоречивыми критериями: максимальный выход целевого продукта при минимальном выходе побочного продукта, при наиболее мягких условиях реакции. Постановка оптимизационной задачи при наличии нескольких критериев ранее проводилась путем исследования каждого критерия по отдельности. Например, определялись условия для максимального выхода целевого продукта. Далее определялись условия достижения экстремума по другому показателю, например объем реагентов и т.д. Получались два набора условий достижения максимума по каждому критерию. Это было ответом оптимизационной задачи [1, с. 14–18]. В условиях проведения практической реализации химической реакции полученные наборы становились труднодостижимыми, поэтому выбирался средний (компромиссный) набор условий для достижения экстремума по двум критериям [2]. Кроме того, лабораторные условия в практической реализации труднодостижимы. Ценность теоретических работ и лабораторных экспериментов по определению экстремумов реакций в реальных условиях снижается. Поэтому актуальны постановка и решение задачи одновременной многокритериальной оптимизации (МКО) в виде Парето-аппроксимации [3, 4].

Как бы ни развивались информационные технологии (увеличивалось быстродействие компьютеров, увеличивались возможности

хранения данных), но моделирование химических процессов базируется на фундаментальных законах химии, физики и математики [5]. В связи с этим моделирование и последующая оптимизация должны вестись математическими методами на основе кинетической модели процесса, что позволит организовать планирование оптимального химического эксперимента и определить оптимальные условия проведения промышленного процесса. Deb K. и соавт. [6] рассматривают метод решения задачи Парето-аппроксимации методом NSGA-II на основе генетического алгоритма, который позволяет для сложных задач обеспечить приемлемую точность. D. Соте и соавт. [7] рассматривают модификации алгоритма хищник – жертва. M. Sakharov и A. Карпенко [5] на ряде известных тестовых и практически значимых задач многокритериальной оптимизации показывают сравнительную эффективность Парето-аппроксимации с помощью класса эволюционных алгоритмов с формированием фитнес-функции (функция пригодности для оценки качества каждой популяции).

Задача многокритериальной оптимизации предполагает множество решений, относящихся к паретовским решениям [8]. Лицо, принимающее решение (ЛПР), получает на основе математических расчетов совокупность компромиссных решений. Точки, входящие в решение, должны быть недоминируемые (неулучшаемые) [9].

В реальных задачах многокритериальной оптимизации (МКО) невозможно прийти к такому решению, которое было бы оптимальным для всех целевых функций, вместо него можно искать множество Парето оптимальных значений. Множество Парето описывается формулой

$$\forall x^* \in X^* \nexists x \in X : x \succ x^*,$$

где $x \succ x^* \Leftrightarrow (\forall i \in 1 \dots K, (f_i(x) \geq f_i(x^*)) \wedge (\exists i \in 1 \dots K, (f_i(x) > f_i(x^*)))$.

Выражение $x \succ x^*$ означает, что x доминирует над x^* : x доминирует над x^* по Парето в том случае, если x не хуже x^* по всем критериям и хотя бы по одному критерию превосходит x^* . В таком случае в выборе x^* нет смысла, так как x не только не уступает x^* , но и доминирует в некоторых случаях. Если рассматривать область пространства, доминируемую решением А на примере двухкритериальной оптимизационной задачи (оба критерия максимизируются), то эта область является замкнутой, а элементы на границы решения также являются доминируемыми решением А (рис. 1).

На рис. 1 показана граница Парето для возможных решений в двухкритериальном пространстве.

Задачи многокритериальной оптимизации различаются по типу целевой функции (задачи линейного, нелинейного, квадратичного программирования), количества оптимизируемых критериев (однокритериальные и многокритериальные) и условий (условные и безусловные). От вида оптимизационной задачи зависит выбор метода решения. На рис. 2 представлена классификация методов решения оптимизационных задач [10, 11].

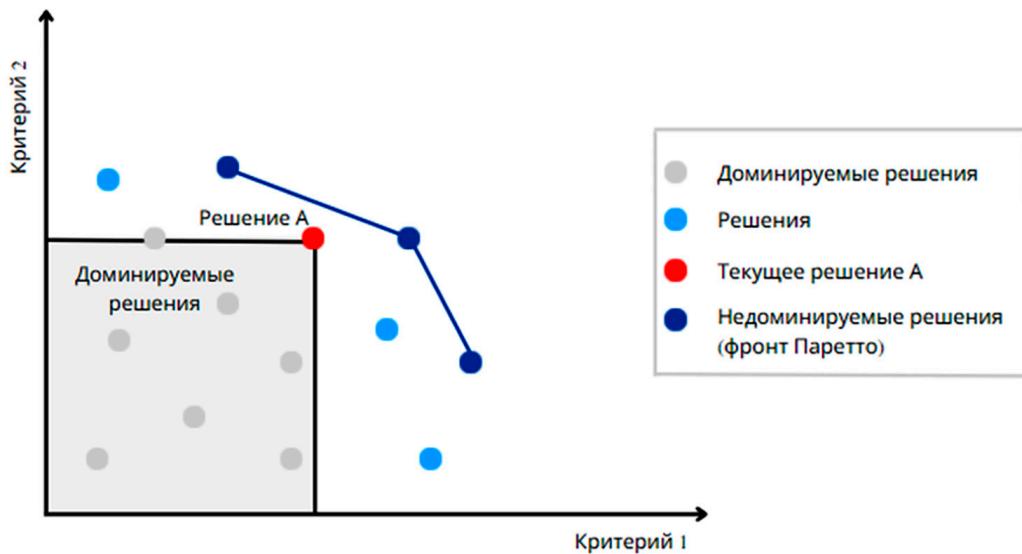


Рис. 1. Парето-аппроксимация решения многокритериальной оптимизации – фронт Парето
Примечание: составлено авторами

Цель исследования – многокритериальная оптимизация условий химической реакции с выбором «идеальной» точки из всего множества Парето на примере катализитического синтеза бензилбутилового эфира.

Материалы и методы исследования

В данной работе будет рассмотрена задача условной многокритериальной оптимизации с определением решения в виде Парето-аппроксимации и выделение наилучшего значения методом «идеальной» точки.

Под «идеальной» точкой многокритериальной оптимизации в этом исследовании понимается некоторое решение, которое одновременно достигает наилучшего возможного значения для каждого из критериев оптимальности. В общем случае идеальная точка не реализуется из-за противоречивости критериев задачи, и тогда ее называют «точкой утопии».

Метод идеальной точки заключается в нахождении на границе Парето точки, ближайшей к «идеальной» точке по всем параметрам. Метод идеальной точки состоит из двух этапов. На первом этапе решаются п задач следующего вида:

$$u_i^0 = \max u_i(x), x \in X,$$

где u_i – значение целевой функции в i -й точке.

Определяется «идеальная» точка, которая в реальной задаче с ограничениями не входит в область определения, поэтому на втором этапе осуществляется поиск точки, ближайшей к идеальной (4):

$$R(u(x), u^0) \rightarrow \min, x \in X,$$

В этой формуле R – дистанционная метрика, расстояние от $u(x)$ до u^0 .

В качестве дистанционной метрики принимаются различные функции [12]:

– расстояние Минковского:

$$R = \left(\sum_{i=1}^m (u_i^0 - u_i(x))^l \right)^{\frac{1}{l}} \quad (1)$$

где l – параметр метрики, $l \geq 1$.

– Манхэттен расстояние:

$$R = \sum_{i=1}^n |u_i^0 - u_i(x)| \quad (2)$$

– расстояние Махalanобис:

$$R = \sqrt{(U - V) \cdot COV^{-1} \cdot (U - V)^T}, \quad (3)$$

где COV – ковариационная матрица. Расстояние Махalanобис – это мера расстояния между двумя случайными точками U и V .

Элементы ковариационной матрицы $cov_{a,b}$ рассчитываются по формуле

$$cov_{a,b} = \frac{1}{|C|-1} \sum_{X \in C} (X_a - \mu_a) \cdot (X_b - \mu_b),$$

где μ_a и μ_b – математическое ожидание по признакам a и b ; $|C|$ – количество точек в классе.

Результат оптимизации напрямую зависит от выбранного метода. При использовании метода идеальной точки результатом является решение наиболее близкое к рассчитанной «идеальной» точке: максимизируется выход целевого продукта, а выход побочных – минимизируется.

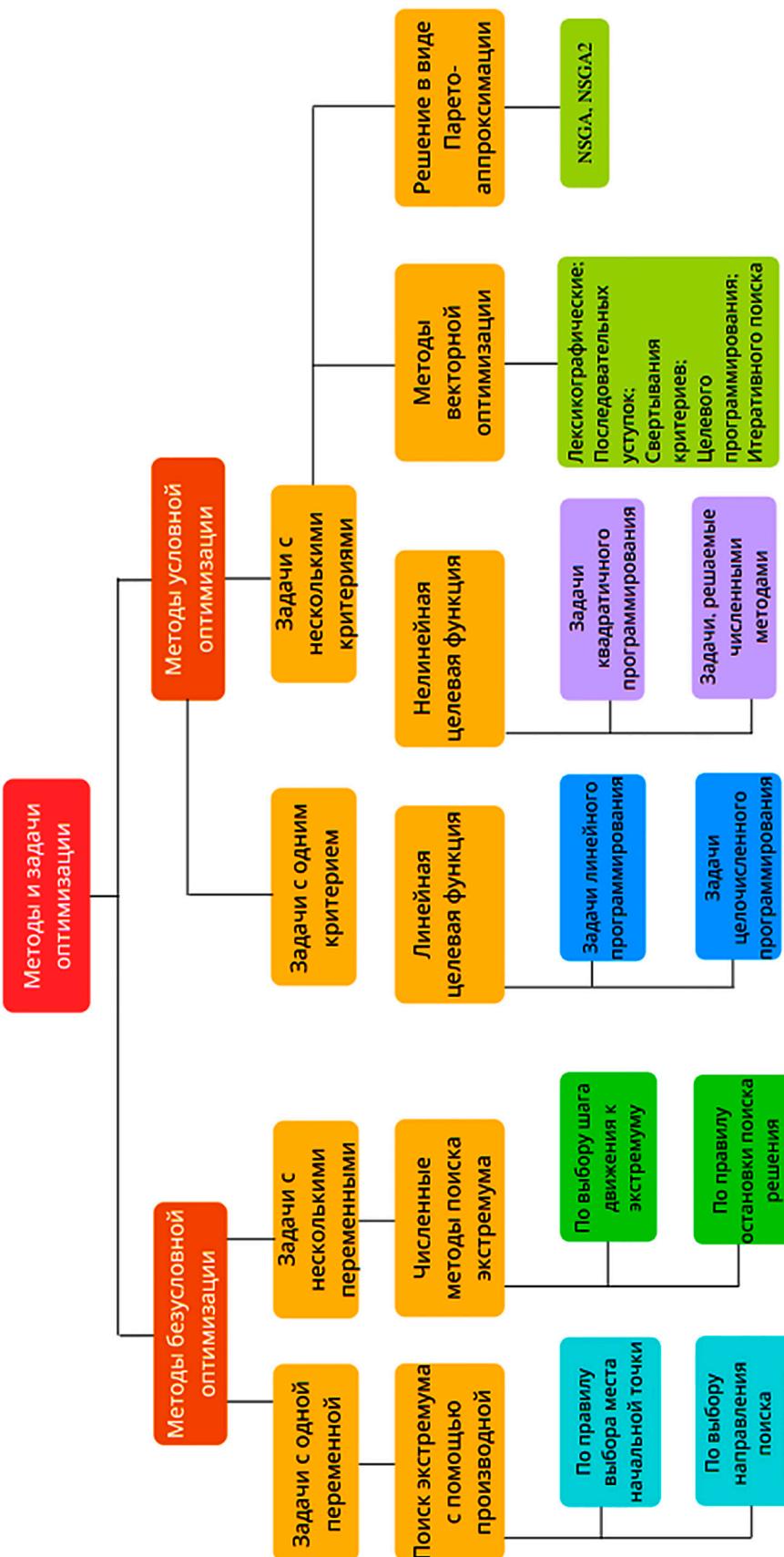


Рис. 2. Классификация методов решения оптимизационных задач
Примечание: составлен авторами на основе источника [1]

Алгоритм вычисления расстояния между двумя точками:

Шаг 1. Вычислить математическое ожидание значений признаков.

Шаг 2. Вычислить среднеквадратическое отклонение значений признаков.

Шаг 3. Вычислить ковариации между парами признаков точек класса, составить ковариационную матрицу.

Шаг 4. При обратимости матрицы вычислить расстояние по Махalanобису. Если матрица необратима, используются методы для сведения матрицы к обратимой.

Из формулы (3) следует, что перед применением данного метода необходимо проверить ковариационную матрицу на обратимость. Значения ковариационной матрицы и ее определитель были рассчитаны с помощью средств языка Python.

Результаты исследования и их обсуждение

Результаты, полученные в ходе применения метода идеальной точки с применением метрики Минковского, применялись для оптимизации процесса каталитического синтеза бензилбутилового эфира [13]. Кинетическая модель была ранее разработана [14]. Бензилбутиловый эфир широко применяется в качестве ароматизатора в различ-

ных отраслях промышленности. Является крупнотоннажным, промышленным продуктом. Получение эфиров в реакции дегидратации бензилового и бутилового спиртов лучше всего проходит в присутствии катализаторов с содержанием меди, в частности CuBr_2 [15]. В данной реакции происходит образование трех эфиров – бензилбутиловый (целевой), дibenзиловый, дубутыловый (побочные). Поэтому задача оптимизации условий проведения реакции представляет собой многокритериальную оптимизацию с максимальным выходом целевого продукта и минимальным – побочных продуктов. На выход эфиров влияют следующие условия, которыми можно управлять через разработанную кинетическую модель: температура реакции, мольные соотношения исходных реагентов $[\text{BnOH}]:[\text{n-BuOH}]$ и время проведения реакции.

Тогда задача МКО условий реакции синтеза бензилбутилового эфира имеет следующий вид:

– Вектор варьируемых параметров $X=(x_1, x_2, x_3)$, где x_1 – температура реакции, Т; x_2 – мольное соотношение реагентов бутилового спирта к бензиловому спирту; x_3 – время проведения реакции.

– Вектор функция критерии оптимальности $F(X) = (f_1(X), f_2(X))$.

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

$$f_2(X) = y_{PhCH_2OCH_2Ph}(Y_9)(x_1, x_2, x_3) + y_{BuOBu}(Y_{12})(x_1, x_2, x_3) \rightarrow \min .$$

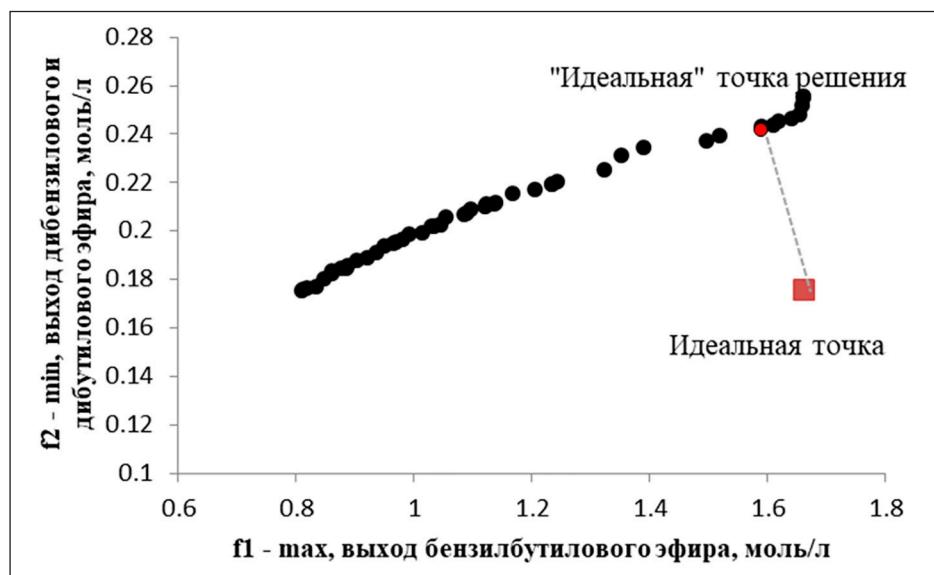


Рис. 3. Аппроксимация фронта Парето МКО-задачи реакции синтеза бензилбутилового эфира в присутствии металлокомплексного катализатора. Выбор «идеальной» точки решения

Примечание: составлен авторами по результатам данного исследования

Решение задачи МКО проводилось алгоритмом Парето-аппроксимации NSGA-II в Matlab с применением распараллеливания. Условием выхода из алгоритма являлось минимальное изменение значения критерия оптимальности.

На рис. 3 приведены результаты решения задачи МКО условий реакции синтеза бензилбутилового эфира в присутствии металлокомплексного катализатора в пространстве критериев оптимальности.

На данном графике отмечена «идеальная» точка по всем параметрам. В реальных оптимизационных задачах такой исход недостижим. С помощью расстояния Минковского была найдена ближайшая к идеальной точки из решения задачи МКО.

Среди всех неулучшаемых решений МКО-задачи реакции синтеза бензилбутилового эфира в присутствии металлокомплексного катализатора можно выбрать наиболее близкую к идеальной – выделена цветом на графике фронта Парето. Для данной точки значения варьируемых параметров следующие: 167,4°C, [BnOH]:[n-BuOH] = 4:1, время реакции 694 мин. Однако, согласно определению фронта Парето, все остальные точки графика также являются оптимальными и ЛПР имеет возможность выбора.

Заключение

В работе предложен метод выбора значения из множества оптимальных, получаемых при решении задачи многокритериальной оптимизации. Однако в реальных задачах не всегда достаточно только близости решения к «идеальной» точке. Зачастую ЛПР имеет неформализованные требования к решению, потому необходимо предоставить все множество неулучшаемых решений, с возможностью выбора.

Список литературы

- Глебов М.Б., Кафаров В.В. Математическое моделирование основных процессов химических производств: учебное пособие. М.: Юрайт, 2020. 400 с. ISBN 978-5-534-07524-3.
- Карпенко А.П. Параметрический синтез популяционных алгоритмов глобальной оптимизации // Системы компьютерной математики и их приложения. 2023. № 24. С. 135–148. URL: https://elibrary.ru/download/elibrary_54895624_53362710.pdf (дата обращения: 22.10.2025).
- Karpenko A., Kuzmina I. Meta-heuristic algorithm for the global optimization: intelligent ice fishing algorithm // Lecture Notes in Networks and Systems. 2021. Т. 204. С. 147–160. DOI: 10.1007/978-981-16-1395-1_12.
- Белоус В.В., Грошев С.В., Карпенко А.П. Веб-ориентированная среда визуализации многомерного фронта Парето // Информационные и математические технологии в науке и управлении. 2017. № 1 (5). С. 94–101. URL: https://elibrary.ru/download/elibrary_28922574_10229012.pdf (дата обращения: 22.10.2025).
- Sakharov M., Karpenko A. Parallel multi-memetic global optimization algorithm for optimal control of polyarylene-naphthalide's thermally-stimulated luminescence // Advances in Intelligent Systems and Computing. 2020. Т. 991. С. 191–201. DOI: 10.1007/978-3-030-21803-4_20.
- Deb K., Mohan M., Mishra S. Towards a quick computation of well-spread Pareto-optimal solutions // Evolutionary Multi-Criterion Optimization. Springer. 2003. P. 222–236. DOI: 10.5555/1760102.1760120.
- Corne D., Jerram N., Knowles J., Oates M. Pesa-II: Region-based selection in evolutionary multiobjective optimization // GECCO 2001: Proceedings of the Genetic and Evolutionary Computation Conference. 2001. P. 283–290. URL: https://www.researchgate.net/publication/239062948_PESA-II_Region-based_selection_in_evolutionary_multiobjective_optimization (дата обращения: 22.10.2025).
- Коледина К.Ф. Многокритериальная интервальная оптимизация химических реакций на основе кинетической модели // Математическое моделирование. 2022. Т. 34. № 8. С. 97–109. DOI: 10.20948/mm-2022-08-06.
- Emmerich M., Deutz A. Multicriteria Optimization and Decision Making: master course // Leiden: Leiden University Publishing. 2014. Vol. 102. P. DOI: 10.48550/arXiv.2407.00359.
- Грицко А.К. Алгоритм поддержки принятия решений в многокритериальных задачах оптимального выбора // Модели, системы, сети в экономике, технике, природе и обществе. 2016. № 1 (17). URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/algoritm-podderzhki-prinyatiya-resheniy-v-mnogokriterialnyh-zadachah-optimalnogo-vybora> (дата обращения: 22.10.2025).
- Rebelo C.M., Martins M.A.F., Santana D.D., Rodrigues A.E., Loureiro J.M., Ribeiro A.M., Nogueira I.B.R. From a Pareto Front to Pareto Regions: A Novel Standpoint for Multiobjective Optimization // Mathematics. 2021. № 9. P. 3152. DOI: 10.3390/math9243152.
- Осколкова С.С. Обзор типов метрик, используемых для решения разного рода прикладных задач // Информационные технологии и прикладная математика. 2016. С. 113–119. URL: https://elibrary.ru/download/elibrary_26072294_17166879.pdf. (дата обращения: 22.10.2025).
- Koledina K.F., Gubaydullin I.M., Koledin S.N. Multicriteria optimization of the catalytic reaction for the synthesis of benzyl butyl ether based on the kinetic model // Reac Kinet Mech Cat. 2022. Т. 135. Р. 155–167. DOI: 10.1007/s11144-021-02101-w.
- 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. DOI: 10.1134/S0044453719110153.
- Koledin S., Kolledina K., Gubaydullin I. Multiobjective optimization of a metal complex catalytic reaction based on a detailed kinetic model with parallelization of calculations // Mathematics. 2023. Vol. 11 (9). P. 2051. DOI: 10.3390/math11092051.

Конфликт интересов: Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Conflict of interest: The authors declare that there is no conflict of interest.