

Федеральное государственное бюджетное научное учреждение
Уфимский федеральный исследовательский центр Российской академии наук
(УФИЦ РАН)
Институт нефтехимии и катализа – обособленное структурное подразделение
Федерального государственного бюджетного научного учреждения
Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук
(ИНК УФИЦ РАН)

На правах рукописи

Шаймухаметов Денис Раисович

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ И ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ПОИСКА ОПТИМАЛЬНОГО
УПРАВЛЕНИЯ ПРОЦЕССОВ В УСЛОВИЯХ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ
КИНЕТИЧЕСКИХ ДАННЫХ

Направление 02.06.01 – Компьютерные и информационные науки
Специальность 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы
и комплексы программ

НАУЧНЫЙ ДОКЛАД (АВТОРЕФЕРАТ)

Уфа-2019

Работа выполнена в Институте нефтехимии и катализа – обособленном структурном подразделении Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук

Научный руководитель:

Спивак Семен Израилевич

доктор физико-математических наук, профессор

Рецензенты:

Кризкий Владимир Николаевич

доктор физико-математических наук,
профессор, заместитель директора по научной работе Стерлитамакского филиала Башкирского государственного университета.

Мифтахов Эльдар Наильевич

кандидат физико-математических наук,
доцент кафедры гуманитарных и естественно-научных дисциплин Уфимского государственного авиационного технического университета филиал в г. Ишимбае.

Защита научно-квалификационной работы (диссертации) состоится «29» августа 2019 года в 10⁰⁰ часов на заседании аттестационной комиссии в Институте нефтехимии и катализа – обособленном структурном подразделении Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук по адресу: 450075, г. Уфа, проспект Октября, 141.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. При проведении анализа каталитических реакций и процессов чаще всего используется метод математического моделирования, который позволяет описывать изменения состояний изучаемой системы. Использование математического аппарата в сочетании с вычислительными средствами и физико-химической теорией позволяет значительно сократить сроки перехода от лабораторных установок непосредственно к промышленным аппаратам.

Основным подходом в моделировании является построение моделей в виде системы дифференциальных уравнений. Однако для некоторых процессов, построение полных математических моделей, учитывающих все особенности химического процесса, является весьма трудоемкой задачей. Поэтому при построении систем дифференциальных уравнений часто вводится ряд упрощений и ограничений, что вносит определенные погрешности в расчеты и может существенно исказить полученные результаты.

Методические основы и методы построения математических моделей подробно описаны в работах А.И. Баяринова, В.В. Кафарова, Г.М. Островского, М.Г. Слинко и других. В конце XX столетия для изучения химико-технологических процессов применялись новые подходы, использующие современные методы и средства.

От вида модели процесса будет зависеть выбор метода решения задачи по поиску оптимальных режимов ведения процесса. На сегодняшний день имеется широкий спектр методов, позволяющих решать задачу оптимального управления. Однако, каждый из данных методов применим для конкретного класса задач, т.е. имеет узкую область применения. Поэтому актуальным становится использование некоторых новых подходов, основанных на искусственном интеллекте, например, применение искусственных нейронных сетей. Преимуществом нейронных сетей в моделировании химико-технологических процессов является возможность строить гибкие модели процессов и их дальнейшее применение для оптимизации без привязки к типу модели процесса.

Развитие математических методов оптимизации описано в работах: А. Ариса, В.И. Быкова, Л.С. Понтрягина, С.И. Спивака, С.А. Мустафиной и т.д. При решении задач оптимизации чаще всего используются методы исследования функций классического анализа, метод множителей Лагранжа, метод вариационного исчисления, динамическое программирование, линейное и нелинейное программирование, принцип максимума Понтрягина.

Применение нейронных сетей позволяет уйти от разработки сложных математических моделей и при этом максимально учесть особенности химико-технологических процессов. В

настоящее время есть цикл работ по применению искусственных нейронных сетей в химии следующих авторов: Zupan J., Gasteiger J, И.И. Баскин, А.А. Щербакова. С помощью нейронных сетей в химии решаются задачи определения зависимостей между структурами органических соединений и их физико-химическими свойствами (QSPR), а также биологической активностью (QSAR). В последнее время искусственные нейронные сети стали популярными при моделировании медицинских препаратов, различных биологических структур, химических структур на молекулярном уровне.

Другой важной задачей в оптимальном управлении является задача поиска значений управляющих параметров при двух и более критериев оптимизации, так называемая задача многоцелевой оптимизации. Среди методов решения задачи многоцелевой оптимизации следует выделить алгоритмы Парето-аппроксимации, позволяющие находить фронт Парето, как множество не улучшаемых решений. Однако, для применения данного метода необходимо находить множество допустимых значений многократно решая прямую задачу, что при сложных математических моделях весьма затрудняет использование метода.

Цель работы: разработка алгоритма, осуществляющего поиск оптимального режима ведения химического процесса на основе множества Парето с применением искусственных нейронных сетей.

Задачи исследования. Для достижения поставленной цели были сформулированы следующие задачи:

1. Проведение литературного и патентного обзора по применяемым алгоритмам и методам решения задач оптимального управления.
2. Формулировка задачи поиска оптимального управления химическими процессами (одноцелевой и многоцелевой оптимизации), разработка алгоритмов для решения поставленной задачи с применением искусственных нейронных сетей;
3. Проведение вычислительных экспериментов по обучению нейронных сетей и решению прямой задачи химической кинетики на примере реакции дегидрирования метилбутенов в изопрен и процесса димеризации α -метилстирола.
4. Разработка программных продуктов поиска оптимальных параметров для процессов дегидрирования метилбутенов в изопрен и димеризации α -метилстирола на основе разработанных алгоритмов.

Научная новизна результатов. Получены обученные нейронные сети, способные решать прямую задачу химической кинетики, для процессов дегидрирования метилбутенов в изопрен и димеризации α -метилстирола.

Разработан новый подход по решению задач многоцелевой оптимизации с использованием множества Парето и искусственных нейронных сетей.

Разработаны алгоритмы одноцелевой и многоцелевой оптимизации химического процесса на основе множества Парето с применением искусственных нейронных сетей.

Разработаны программные продукты, позволяющие решать задачу поиска оптимального управления ведения химического процесса. Были решены задачи одноцелевой и многоцелевой оптимизации. В первом случае критерием оптимизации являлся максимальный выход целевого продукта. Во втором случае в качестве критериев оптимизации выступали конверсия и селективность. Программные продукты адаптированы для процессов дегидрирования метилбутенов в изопрен и димеризации α -метилстирола.

Теоретическая и практическая значимость работы. Теоретическая и практическая значимость результатов работы состоит в разработке алгоритмов численного решения поставленных задач, которые основаны на применении искусственных нейронных сетей. На базе алгоритмов создан комплекс прикладных программ, которые позволяют решать прямые кинетические задачи и поиск оптимального управления, как для одноцелевой задачи, так и для многоцелевой.

Методология и методы исследования. Одним из основных методологических направлений в современной науке является системный подход, в основе которого лежит изучение исследуемых объектов как систем. Под системой понимают совокупность взаимодействующих и взаимосвязанных элементов, функционирующих для достижения определенной цели и взаимодействующих с окружающей средой. Системный подход ориентирует на комплексное изучение объекта в целом на основе детального анализа составных частей и выявления многообразных типов связей между ними. Данный подход реализуется через системный анализ, который решает задачи создания объектов, рассматриваемых как сложные системы, и разработки методов их исследования.

Также в качестве методологической базы исследования были использованы фундаментальные законы и методы математики, химии, физики, методы теории искусственных нейронных сетей, численные методы.

Теоретическая база состоит из теории химической кинетики, искусственных нейронных сетей, принципов теории множества Парето.

Эмпирическая база содержит в себе исследование процессов дегидрирование метилбутенов в изопрен и димеризация α -метилстирола.

Положения, выносимые на защиту.

1. Методика применения искусственных нейронных сетей для решения прямой задачи химической кинетики и решения задачи оптимального управления.

2. Разработанные алгоритмы одноцелевой и многоцелевой оптимизации химического процесса на основе множества Парето с применением искусственных нейронных сетей.

3. Построенные модели искусственных нейронных сетей для процессов дегидрирования метилбутенов в изопрен и димеризации α -метилстирола, позволяющие решать прямую задачу химической кинетики.

4. На основе разработанных алгоритмов создан программный комплекс, позволяющий решать задачи одноцелевой и многоцелевой оптимизации для рассматриваемых процессов. В качестве критериев оптимизации для задачи одноцелевой оптимизации выступал максимальный выход целевого продукта, для задачи многоцелевой оптимизации выступали конверсия и селективность.

5. Проведены вычислительные эксперименты поиска оптимальных режимных параметров рассматриваемых процессов. На основе результатов вычислительных экспериментов проведен анализ и выявлено влияния критериев оптимизации на оптимальный температурный режим и целевые показатели процесса.

Степень достоверности результатов. Достоверность результатов обеспечивается использованием фундаментальных законов и методов математики, химии, физики, методов теории искусственных нейронных сетей, численных методов. Работа основывается на теории химической кинетики, искусственных нейронных сетей, принципов теории множества Парето. Также достоверность результатов подтверждается удовлетворительным согласованием с результатами других авторов.

Апробация работы. Основные результаты научно-квалификационной работы были представлены на международных, всероссийских и региональных научных конференциях:

- Международной научно-практической конференции «Современная математика и её приложения» (Уфа, 2017),
- Международной научно-практической конференции «Актуальные проблемы науки и образования в современном ВУЗе» (Уфа, 2017),
- Международной молодежной научно-практической конференции «Математическое моделирование процессов и систем» (Стерлитамак, 2017),
- Всероссийской научно-практической конференции «Математическое моделирование процессов и систем» (Стерлитамак, 2016),
- Всероссийской научно-практической конференции «Российская нефтепереработка и нефтехимия – проблемы и перспективы» (Уфа, 2018).

Личный вклад автора. Определение темы диссертационной работы, цели и задач исследования проводились автором совместно с научным руководителем. Личный вклад

автора состоит в построении искусственных нейронных сетей, решающих прямую задачу химической кинетики, для процессов дегидрирования метилбутенов в изопрен и димеризации α -метилстирола, разработке алгоритмов одноцелевой и многоцелевой оптимизации химического процесса на основе множества Парето с применением искусственных нейронных сетей, проведении вычислительных экспериментов по определению оптимальных режимных параметров данных процессов, проведении анализа полученных результатов, подготовке результатов исследования к публикации в научной печати.

Публикации. Основные научные результаты работы опубликованы в открытой печати в количестве 12 статей, из которых 3 опубликованы в журналах из перечня SCOPUS, 1 статья в журнале из перечня ВАК. В печати находится 1 статья в журнале из перечня ВАК. Также имеется одно свидетельство о регистрации программного продукта.

Структура и объем работы. Научно-квалификационная работа (диссертация) состоит из введения, 4 глав, выводов, списка литературы. Полный объем диссертации составляет 106 страниц.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность научно-квалификационной работы, сформулированы цель и задачи исследования, аргументирована научная новизна, показана практическая значимость полученных результатов.

В первой главе проведен литературный обзор по тематике исследования. В ней рассмотрены и систематизированы работы, посвященные математическому моделированию химико-технологических процессов.

В разделе 1.1 описаны основы, связанные с моделированием химико-технологических процессов.

В разделе 1.2 рассматриваются классические подходы и методы решения задач поиска оптимального управления химико-технологическими процессами.

Во второй главе разработаны алгоритмы одноцелевой и многоцелевой оптимизации химического процесса на основе множества Парето с применением искусственных нейронных сетей.

В разделе 2.1 описывается теория по искусственным нейронным сетям. Также излагаются основные положения теории Парето – аппроксимации.

В разделе 2.2 описывается разработанный алгоритм одноцелевой оптимизации. Данный алгоритм применяется для задачи поиска оптимального температурного режима. Параметром оптимизации является максимальный выход целевого продукта.

Сам алгоритм представлен следующими шагами:

1. Осуществляем ввод исходных данных: исходный состав смеси и диапазон допустимых температур протекания процесса.
2. Варьируя температуру процесса в заданном диапазоне, при каждом значении T_i получаем решение прямой задачи химической кинетики на момент времени t_i+dt с помощью искусственной нейронной сети. В результате получаем множество допустимых значений вектора варьируемых параметров $V [T_i, C_{i1j}, C_{i2j}]$.
3. Строим целевую вектор функцию $F(V) = \beta(V)$ (где β - выход продукта) и вычисляем её значения для всего множества допустимых значений вектора варьируемых параметров.
4. Находим максимальное значение целевой функции и соответствующее ему значение вектора $V^* [T_i^*, C_{i1j}^*, C_{i2j}^*]$.
5. Найденные значения вектора $V^*[T_i^*, C_{i1j}^*, C_{i2j}^*]$ используем в качестве входных параметров в искусственной нейронной сети на следующей итерации.
6. Повторяем цикл, пока не будет достигнуто конечное время процесса.

В разделе 2.3 описывается алгоритм многоцелевой оптимизации, основанный на применении множества Парето с использованием искусственной нейронной сети. Алгоритм разработан на базе алгоритма одноцелевой оптимизации. Данный алгоритм применяется для задачи поиска оптимальных значений управляющих параметров химического процесса. Параметром оптимизации являются максимальные компромиссные значения конверсии и селективности. Алгоритм представлен следующей последовательностью шагов:

1. Осуществляем ввод исходных данных: исходный состав смеси и диапазон допустимых температур протекания процесса.
2. Варьируя управляющие параметры процесса в заданном диапазоне, при каждом значении осуществляется решение прямой задачи химической кинетики на момент времени t_i с помощью искусственной нейронной сети. В результате получаем множество допустимых значений вектора варьируемых параметров V .
3. Строим целевую вектор функцию $F(V) = (\alpha(V), S(V))$ (где α - конверсия, S – селективность) и вычисляем её значения для всего множества допустимых значений вектора варьируемых параметров, т.е. получаем множество достижимости.
4. На множестве достижимости находим фронт Парето, как множество не улучшаемых решений.
5. Из фронта Парето определяем компромиссную точку, исходя из критериев, выдвигаемых лицом, принимающим решения.
6. Повторяем цикл, пока не будет достигнуто конечное время процесса.

Третья глава посвящена решению задачи поиска оптимального управления процессов дегидрирования метилбутонов в изопрен и димеризации α -метилстирола. Задачи решаются в два этапа. На первом этапе осуществляется построение искусственных нейронных сетей для решения прямой задачи химической кинетики. На втором этапе на основе разработанных алгоритмов осуществляется поиск оптимального управления для задач одноцелевой и многоцелевой оптимизации.

В разделе 3.1 описывается постановка задачи оптимального управления химических процессов.

В разделе 3.2 рассматриваются вычислительные эксперименты по решению задач одноцелевой оптимизации для процессов дегидрирования метилбутонов в изопрен и димеризации α -метилстирола.

В разделе 3.3 рассматриваются вычислительные эксперименты по решению задач многоцелевой оптимизации для данных процессов. В научном докладе подробно остановимся на исследовании процесса дегидрирования метилбутонов в изопрен.

Рассмотрим результаты вычислительного эксперимента по одноцелевой оптимизации для данного процесса.

В качестве входных параметров для построения нейронной сети были выбраны следующие режимные параметры процесса:

- температура проведения процесса, °C (обозначим X_1) в диапазоне от 580°C до 630 °C;
- момент времени реакции, сек (обозначим X_2);
- концентрация $i-C_5H_{10}$ на текущий момент времени, доля масс (обозначим X_3);
- концентрация $i-C_5H_8$ на текущий момент времени, доля масс (обозначим X_4).

Выходными параметрами искусственной нейронной сети были:

- концентрация $i-C_5H_{10}$ в следующий момент времени,
- доля масс (обозначим Y_1);
- концентрация $i-C_5H_8$ в следующий момент времени, доля масс (обозначим Y_2).

Для обучения использовалась выборка данных по концентрациям метилбутена и изопрена при режиме работы реактора с постоянной температурой. Сеть была обучена на четырех режимах работы реактора с температурами: 570°C, 590°C, 610°C, 630°C.

Мольный состав рассматриваемых групповых компонентов представлен в таблице 1.

Таблица 1

Компоненты	Сырье, %мол.
$i - C_5H_{12}$	7,11
$i - C_5H_{10}$	90,59
$i - C_5H_8$	0,99
H_2	-
Продукты крекинга	1,31
CO_2	-

При анализе полученных нейронных сетей были отобраны пять наиболее адекватных моделей (таблица 2).

Таблица 2

№	Архитектура	Алгоритм обучения	Функция	
			активации скрытых нейронов	Функция активации выходных нейронов
1	MLP 4-28-2	BFGS 84	Логистический	Логистический
2	MLP 4-80-2	BFGS 79	Тангенс	Логистический
3	MLP 4-24-2	BFGS 107	Логистический	Тождественный
4	MLP 4-37-2	BFGS 112	Логистический	Логистический
5	MLP 4-64-2	BFGS 145	Тангенс	Тангенс

Оценка адекватности полученных моделей производилась, исходя из параметров указанных в таблице 3.

Отобранные нейронные сети имеют архитектуру многослойного персептрона с одним скрытым слоем. Для определения завершения обучения нейронных сетей применялся метод минимизации ошибок по выходным параметрам нейронной сети. Метод минимизации ошибок реализован по алгоритму второго порядка точности Бройдена-Флетчера-Гольдфарба-Шанно (BFGS). Данный метод позволяет определить глобальный экстремум, игнорируя локальные экстремумы функции ошибок по целевым параметрам. Модели нейронных сетей, указанные в таблице 3, показали хорошую предсказательную способность на обучающей, тестовой и контрольной подвыборках.

Таблица 3

№	Коэффициент детерминации на обучающей подвыборке	Коэффициент детерминации на тестовой подвыборке	Коэффициент детерминации на контрольной подвыборке	Средняя	Средняя
				абсолютная погрешность по выходному параметру Y1	абсолютная погрешность по выходному параметру Y2
1	0,9923	0,9981	0,9767	0,1200	0,1110
2	0,9928	0,9982	0,9756	0,1100	0,1200
3	0,9929	0,9979	0,9771	0,0840	0,1130
4	0,993	0,9974	0,9803	0,0860	0,0980
5	0,9928	0,9979	0,9773	0,0830	0,1100

Предсказательная способность выражена коэффициентом детерминации модели, который является параметром качества модели. Также качество модели определяется по средней абсолютной погрешности, по выходным параметрам нейронной сети. По данным в таблице 2 погрешность вычислений по целевым параметрам составила не более 12 %, что говорит о хорошей согласованности с данными вычислительного эксперимента. На рисунках 1 и 2 представлены отклонения на контрольной подвыборке по исходному веществу и целевому продукту.

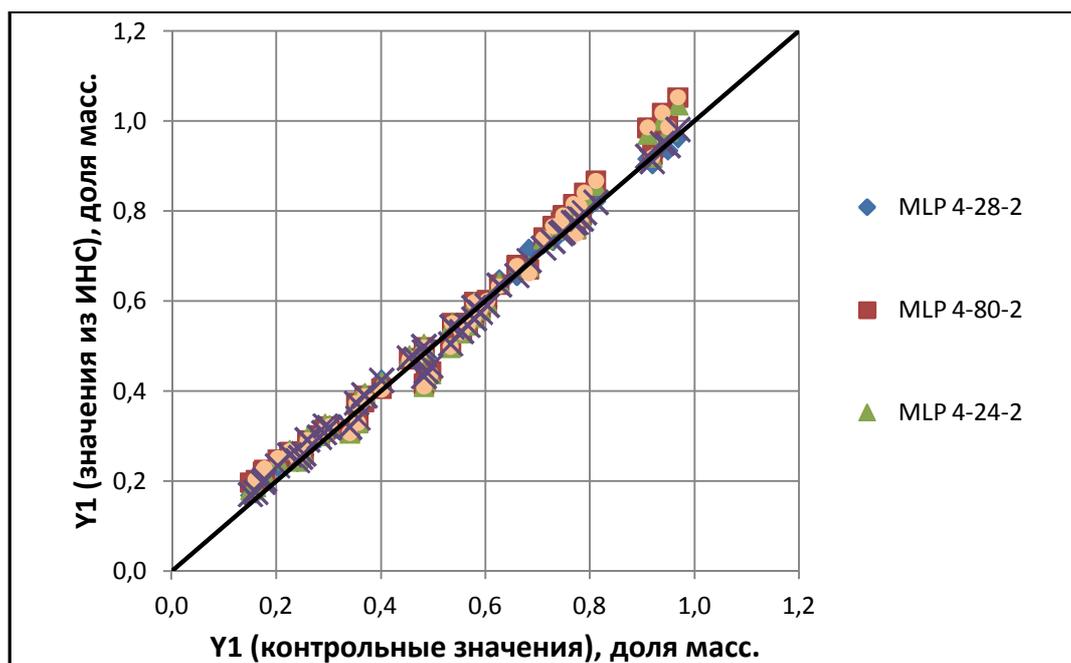


Рисунок 1. Диаграмма рассеивания предсказанных значений, полученных в искусственной нейронной сети, с данными контрольной подвыборки по исходному веществу

По полученным диаграммам рассеивания предсказанных значений видно, насколько точно нейронная сеть определила данные из контрольной подвыборки по исходному веществу - метилбутену (рисунок 1) и целевому продукту - изопрену (рисунок 2). Каждому значению контрольной подвыборки сопоставляется значение, полученное в искусственной нейронной сети. Чем ближе полученная точка на диаграмме к линии контрольных значений, тем лучше нейронная сеть предсказала данное значение.

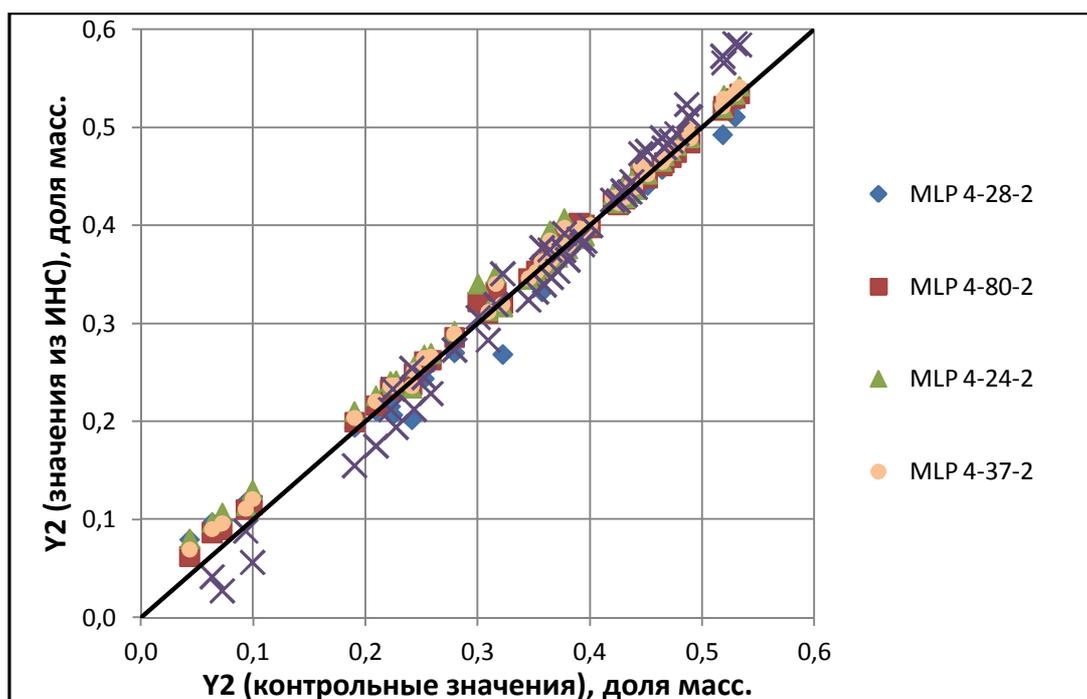


Рисунок 2. Диаграмма рассеивания предсказанных значений, полученных в искусственной нейронной сети, с данными контрольной подвыборки по целевому продукту.

Наиболее адекватная нейронная сеть прямого моделирования процесса должна иметь хорошую предсказательную способность на всех трех подвыборках. Соответственно оптимальной является модель нейронной сети №4 (таблица №2). Отметим, что нейронная сеть имеет наименьшую ошибку на контрольной подвыборке.

Программный модуль построенной нейронной сети был подключен к разработанному программному комплексу, с применением которого и была решена задача поиска оптимального температурного режима процесса. В качестве критерия оптимальности был выбран максимальный выход продукта изопрена. На основе разработанного алгоритма поиска оптимального управления с применением нейронной сети была построена зависимость оптимальной температуры процесса дегидрирования метилбутенов в изопрен от времени процесса (рисунок 3).

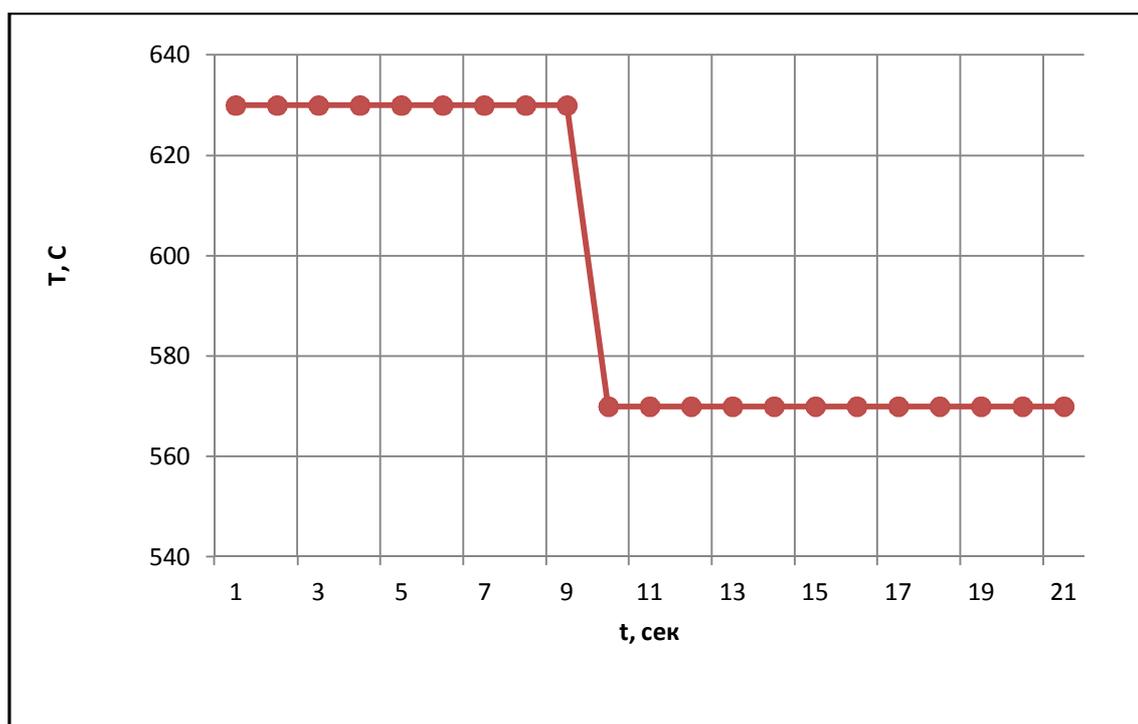


Рисунок 3. График зависимости оптимальной температуры процесса от времени.

Максимальный выход продукта изопрена достигается при следующем температурном режиме (рисунок 3). На начальный момент времени оптимальная температура достигает максимального значения (ограниченного регламентом производства), и далее удерживается на заданном значении. Далее в силу влияния побочных реакций температурный режим следует снизить до минимальной температуры из допустимого диапазона. Найденный температурный режим возможен, поскольку обучение нейронной сети осуществлялось на модели теоретического уровня, не учитывающей тепловой и материальные балансы.

Для получения оптимального температурного режима на технологическом уровне нет необходимости изменять алгоритм, достаточно лишь построить новую нейронную сеть, обученную на значениях технологического уровня, либо экспериментальных данных. Причем нейронная сеть, обученная на экспериментальных данных, будет более полно и адекватно описывать химический процесс. Преимуществом данного алгоритма является возможность применения его на сложных неизученных химических процессах без построения математической модели.

Рассмотрим результаты вычислительного эксперимента по многоцелевой оптимизации.

В качестве входных параметров были выбраны:

- X1 - температура проведения процесса, °C;
- X2 - скорость подачи реагента, ч⁻¹;

- X3 - разбавление водяным паром, моль/моль;

Выходные параметрами ИНС были:

- Y1- конверсия метилбутенов ($i\text{-C}_5\text{H}_{10}$), доля;
- Y2- селективность по изопрену ($i\text{-C}_5\text{H}_8$), доля;

Мольный состав рассматриваемых групповых компонентов представлен в таблице 1.

В системе Statistica были получены 3 наиболее адекватные модели ИНС (таблица 4).

Таблица 4

Архитектура	Точность, %	Функция активации скрытых нейронов	Функция активации выходных нейронов
MLP 3-30-2	86,7	Logistic	Exponential
MLP 3-34-2	95	Exponential	Identity
MLP 3-37-2	88	Identity	Sine

Представленные нейронные сети имеют архитектуру многослойного персептрона с одним скрытым слоем. В качестве метода минимизации ошибок использовался алгоритм BFGS. На рисунках 4 и 5 представлены отклонения на подвыборках по конверсии и селективности.

По результатам видно, что модель нейронной сети MLP 3-34-2 наиболее адекватно отражает характер изменения параметров эффективности процесса от параметров режима реактора.

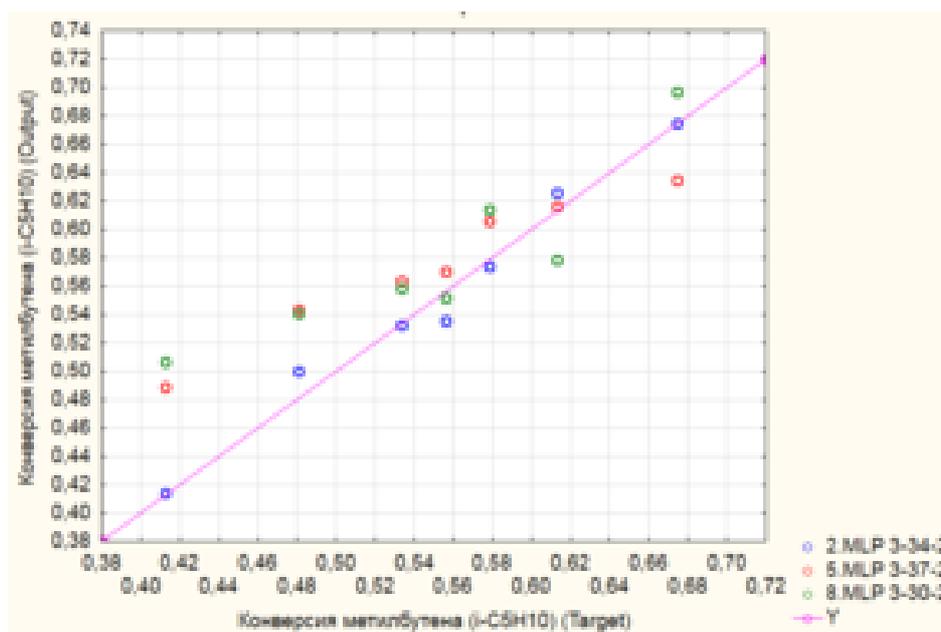


Рисунок 4. График рассеивания предсказанных значений ИНС по конверсии метилбутена.

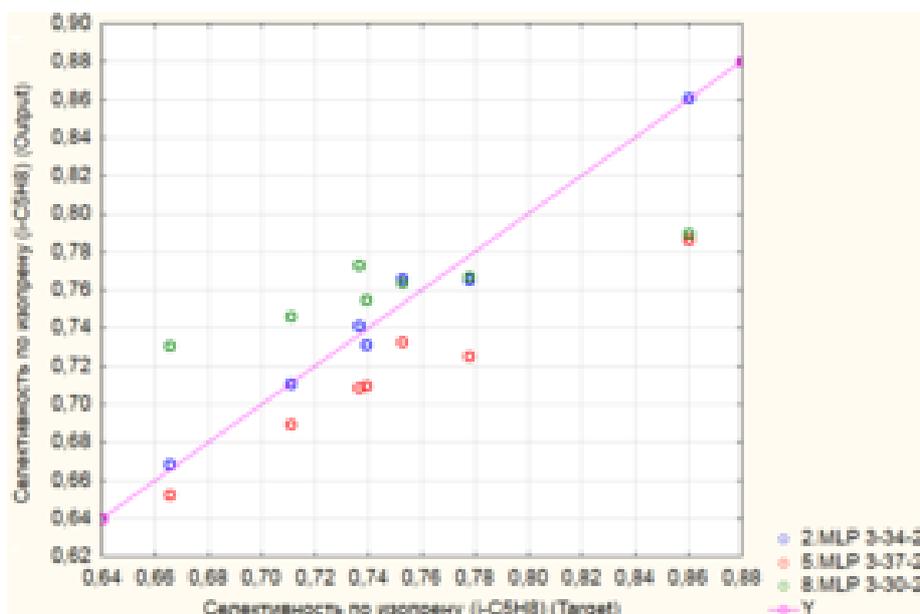


Рисунок 5. График рассеивания предсказанных значений ИНС по селективности по изопрену.

Для получения данных о характере изменения конверсии и селективности от параметров (температура, скорость подачи сырья, разбавление паром) были рассмотрены различные режимы работы реактора. В таблице 5 представлены диапазоны, в которых варьировались параметры.

Таблица 5

Параметр	Диапазон	Шаг изменения	Размерность
Температура	600...640	5	°С
Скорость подачи реагента	0,6...2,0	0,2	ч ⁻¹
Разбавление водяным паром	1/10...1/30	1/5	моль/моль

Основываясь на алгоритме Парето – аппроксимации было построено множество Парето (рисунок 6).

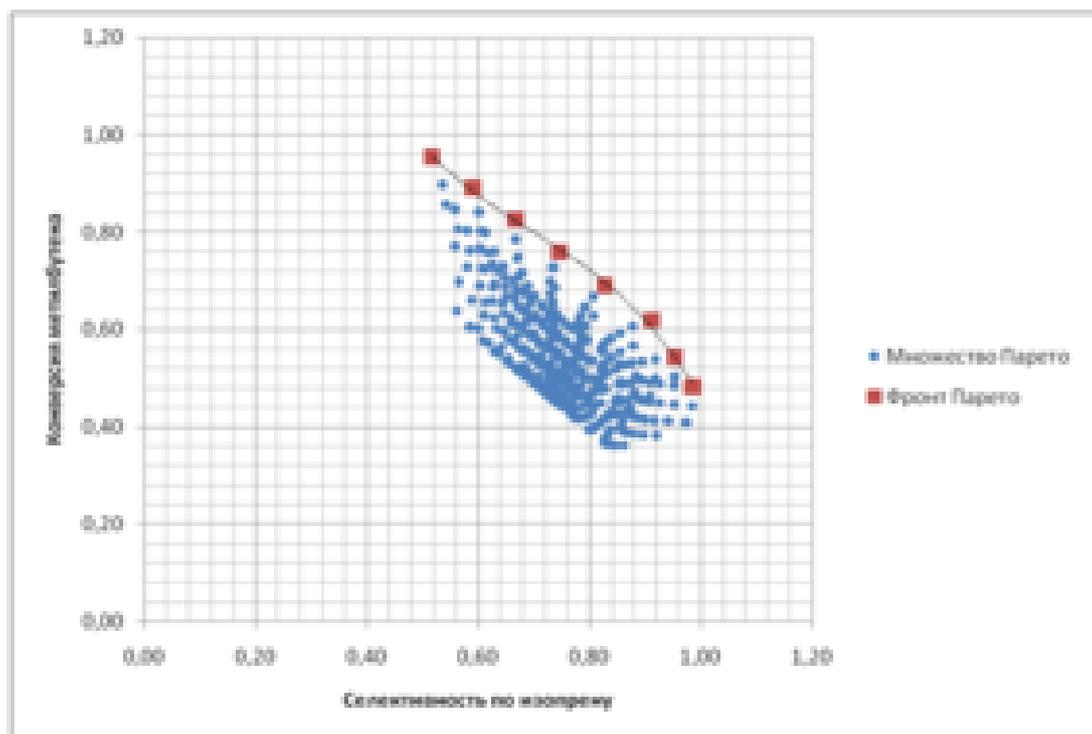


Рисунок 6. Множество Парето

Далее на основе полученного множества был выделен фронт Парето, как множество точек, в которых достигаются компромиссные максимальные значения конверсии и селективности. В итоге было определено 8 режимов работы реактора (таблица 6).

Таблица 6

№№	Температура, °С	Скорость подачи реагента, ч ⁻¹	Разбавление водяным паром, моль/моль	Конверсия метилбутена, доля	Селективность по изопрену, доля
1	635	0,6	30	0,9551	0,5164
2	635	0,8	30	0,8913	0,5906
3	630	0,8	30	0,8259	0,6672
4	635	1,2	30	0,7588	0,7461
5	635	1,4	30	0,6899	0,8274
6	635	1,6	30	0,6192	0,9114
7	630	1,8	30	0,5427	0,9531
8	625	2	30	0,4822	0,9860

По полученным результатам, можно сделать вывод, что оптимальными значениям являются:

- Температура в диапазоне 625...635 °С;
- Скорость подачи реагента 0,6...2,0 ч⁻¹;
- Разбавление паром в отношении 1/30 моль/моль.

Точные оптимальные значения анализируемых параметров будут определяться экспертом на основании степени значимости целевых функций.

В четвертой главе приведено описание структуры, основных модулей, процедур и функций программного комплекса, созданного на основе разработанных алгоритмов. Для разработки использовался язык C# в среде визуального программирования Visual Studio Community 2017.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ И ВЫВОДЫ

1. Предложена методика применения искусственных нейронных сетей для решения прямой задачи химической кинетики и решения задачи оптимального управления.
2. Разработаны алгоритмы одноцелевой и многоцелевой оптимизации химического процесса на основе множества Парето с применением искусственных нейронных сетей.
3. Построены модели искусственных нейронных сетей для процессов дегидрирования метилбутенов в изопрен и димеризации α -метилстирола, позволяющие решать прямую задачу химической кинетики.
4. Для рассматриваемых процессов решены задачи одноцелевой и многоцелевой оптимизации. В качестве критериев оптимизации для задачи одноцелевой оптимизации выступал максимальный выход целевого продукта, для задачи многоцелевой оптимизации выступали конверсия и селективность.
5. На основе разработанных алгоритмов создан комплекс программных продуктов для поиска оптимального управления задач одноцелевой и многоцелевой оптимизации. Программные продукты адаптированы для процессов дегидрирования метилбутенов в изопрен и димеризации α -метилстирола.
6. Проведены вычислительные эксперименты поиска оптимальных режимных параметров рассматриваемых процессов. На основе результатов вычислительных экспериментов проведен анализ и выявлено влияния критериев оптимизации на оптимальный температурный режим и целевые показатели процесса.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ОПУБЛИКОВАНО В СЛЕДУЮЩИХ РАБОТАХ:

1. Shaimukhametova D., Mustafina S., Shaimukhametov D. The derivation of the generalized deactivation kinetic equation for a nonlinear reaction mechanism // International Journal of Chemical Sciences. 2016. Т. 14(4). С. 2886-2890. (статья SCOPUS).
2. Shaimukhametova D., Mustafina S., Shaimukhametov D. The theoretical optimization of the process of dehydrogenation of methylbutenes with the deactivation of the catalyst // ARPN Journal of Engineering and Applied Sciences. 2017. Т. 12. № 5. С. 1692-1693. (статья SCOPUS).
3. Shaimukhametov D.R., Mustafina S.I., Shaimukhametova D.V., Mustafina S.A. Neural network modelling of the process of methylbutene dehydranation into isoprene // ARPN Journal of Engineering and Applied Sciences. 2018. Т. 13. № 21. С. 8499-8504 (статья SCOPUS).
4. Д.Р. Шаймухаметов, С.А. Мустафина, Д.В. Шаймухаметова. Прямое моделирование процесса дегидрирования метилбутенов в изопрен на основе искусственных нейронных сетей // Вестник Казанского технологического университета. 2017. Т.20. №24. С.123-127 (Статья ВАК).
5. Программный комплекс «Программа моделирования процесса дегидрирования циклогексана с учетом изменения активности катализатора». Свидетельство ИНИПИ РАО ОФЭРНиО № 22431, дата рег. 20.12.2016.
6. Шаймухаметов Д.Р., Шаймухаметова Д.В., Мустафина С.А. Постановка задачи оптимизации химико-технологических процессов // Современная математика и ее приложения: Материалы Междунар. науч.-практ. конф., 18-20 мая 2017 г., г. Уфа. – Часть II. – Стерлитамак: Стерлитамакский филиал БашГУ, 2017. – С. 388-391.
7. Шаймухаметов Д.Р., Шаймухаметова Д.В., Мустафина С.А. Нелинейный механизм дезактивации // Актуальные проблемы науки и образования в современном ВУЗе: Материалы I II Междунар. науч.-практ. конф., 7-10 июня 2017 г., г. Стерлитамак.– Часть I. / Отв. ред. А.И. Филиппов. – Стерлитамак: Стерлитамакский филиал БашГУ, 2017. С. 477-482.
8. Шаймухаметов Д.Р., Шаймухаметова Д.В., Мустафина С.А. О постановке задачи оптимизации химико-технологических процессов // Математическое моделирование процессов и систем: Материалы VI Межд. науч. конф., 18–20 мая 2017 г., г. Стерлитамак / Отв. ред. С.А. Мустафина. – Стерлитамак: Стерлитамакский филиал БашГУ, 2017, С. 219-221.
9. Шаймухаметов Д.Р. Решение прямой задачи химической кинетики на основе нейронной сетевой модели // Математическое моделирование процессов и систем:

Материалы VII Межд. молодежн. науч.-практ. конф., 7-9 декабря 2017 г., г. Уфа. – Часть II / отв. ред. С.А. Мустафина. –Стерлитамак: Стерлитамакский филиал БашГУ, 2017, С. 389-393.

10. Шаймухаметов Д.Р., Мустафина С.А., Шаймухаметова Д.В. Прямое моделирование процесса дегидрирования метилбутенов в изопрен на основе искусственных нейронных сетей // Дифференциальные уравнения и смежные системы: Труды международной научной конференции 25-29 июня 2018 г., г. Стерлитамак. С. 273 – 275.

11. Шаймухаметов Д.Р., Мустафина С.А. Многоцелевая оптимизация параметров режима реактора на основе кинетической модели с применением нейронно - сетевого подхода //Математическое моделирование процессов и систем: Материалы VIII Межд. молодежн. науч.-практ. конф., 4-7 октября 2018 г., г. Уфа – Часть III / отв. ред. С.А. Мустафина. – Уфа: БашГУ, 2018, С. 215-219.

12. Шаймухаметов Д.Р., Шаймухаметова Д.В., Мустафина С.А. Решение прямой задачи химической кинетики процесса дегидрирования метилбутенов в изопрен. // Математическое моделирование процессов и систем: Материалы V Всероссийской научно-практической конференции, приуроченной к 110-летию со дня рождения академика А.Н. Тихонова, – Уфа: РИЦ БашГУ, 2016, С. 273-279.

13. Шаймухаметов Д.Р., Мустафина С.А., Многоцелевая оптимизация параметров процесса дегидрирования метилбутенов в изопрен // Тезисы Всероссийской научно-практической конференции «Российская нефтепереработка и нефтехимия – проблемы и перспективы» к 100 – летию со дня рождения д.т.н., профессора Варфоломеева Д.Ф.: сборник материалов – Уфа: Изд-во Фонда поддержки и развития науки РБ, 2018, С. 99 – 102.

14. Шаймухаметов Д.Р., Мустафина С.А., Шаймухаметова Д.В. Создание искусственной нейронной сети для определения оптимального температурного режима ведения химического процесса // Вестник Башкирского университета (в печати).