

基于改进差分进化算法的裂解反应动力学系数辨识

叶贞成, 王鑫, 梅华

(华东理工大学化工过程控制和优化技术教育部重点实验室, 上海 200237)

摘要: Kumar 模型一次反应方程选择性系数辨识问题由于其非线性强、维度高、计算时间长、要求精度高等特点, 标准差分进化算法(DE)在解决该问题时易早熟、陷入局部最小。针对这一问题, 提出了一种新的分类变异参数自适应差分进化算法, 结合分类变异策略与改进的控制参数自适应进化策略, 使适应度较好的优秀个体着重增加局部搜索能力, 适应度较差的个体增强全局搜索能力, 同时加快趋向最优解的收敛速度, 加快了种群整体收敛速度, 并平衡了种群开发能力。与 DE 算法、控制参数自适应进化差分进化算法(jDE)进行对比, 结果表明本文算法的耗时相对 DE 算法和 jDE 算法分别降低了 40% 与 35%, 证明了该算法对 Kumar 模型一次选择性系数的辨识问题具有显著的改进效果。

关键词: 算法; 参数估值; 选择性系数; Kumar 模型; 石脑油

中图分类号: TP181

文献标志码: A

石脑油热裂解是生产乙烯、丙烯和丁二烯等重要化工原料的主要来源之一^[1], 由于石脑油烃类组成庞大, 裂解反应网络十分复杂, 各烃类之间可能生成成千上万的反应, 并且众多反应的参数尚不明确, 对该过程的研究与建模一直是裂解过程建模领域的重要问题之一^[2-3]。

前人对石脑油的裂解过程进行了大量研究, 提出了各种经验模型^[4-7]、机理模型^[8-9]和分子反应动力学模型^[10-11]。经验模型简单实用, 但适用范围较窄。机理模型具有良好的外延性能, 但活化能、指前因子等参数的获取比较困难, 仍需借助大量的实验数据。分子反应动力学模型形式简单、适用性强, 能在较宽的裂解条件范围内较准确地描绘裂解过程, 其中, Kumar 等^[12]提出的分子反应动力学模型(Kumar 模型)应用十分广泛。该模型将石脑油假设为具有平均分子式的单一烃, 并将石脑油的裂解表征为 1 个一次反应方程和 21 个二次反应方程。然而, Kumar 模型的精度与一次反应的选择性系数密切相关, 不

同性质的石脑油原料选择性系数也不相同, 并且 Kumar 模型具有很强的非线性和高维性, 一次方程选择性系数之间相互耦合影响, 这些因素使得一次方程选择性系数的辨识异常复杂。传统的优化方法, 如单纯形法、最速下降法、共轭梯度法等, 虽具有计算效率高、理论比较成熟等优点, 但对目标函数的表达式具有较高的要求, 如要求函数具有一定程度的光滑性等, 因此, 传统的优化方法无法有效地解决一次方程选择性系数辨识问题。

近年来, 各种随机性优化算法发展迅速, 如遗传算法(Genetic Algorithm, GA)、进化规划(Evolution Programming, EP)、差分进化(Differential Evolution, DE)算法等, 其中, 差分进化算法作为一种新型、高效的启发式并行搜索算法, 通过舍弃现有算法随机变异的操作特点, 加入差分变异算子, 具有收敛快、控制参数少且参数设置原则简洁、优化结果稳健等优点, 对 Kumar 模型一次方程选择性系数辨识等非线性的优化问题展示出了极强的能力^[13-15]。标准的

收稿日期: 2019-09-10

基金项目: 国家自然科学基金重大项目(61590923); 国家杰出青年科学基金(61725301); 国家自然科学基金重点项目(61533003); 中央高校基本科研业务费专项资金(222201917006)

作者简介: 叶贞成(1977—), 男, 湖北人, 副研究员, 博士生, 主要研究方向为化工过程建模与优化。E-mail: yzc@ecust.edu.cn 梅华, E-mail: hmei2006@ecust.edu.cn

DE 算法也具有搜索能力与开发能力相矛盾的现象, 容易造成早熟、搜索停滞等诸多问题。为了克服这些缺陷, 国内外专家、学者进行了大量的算法改进工作, 主要集中在以下 4 个方面: (1) 对 DE 算法控制参数设置规则的改进^[16]。如 Qin 等^[17]提出的自适应差分进化(SaDE)算法, 其控制参数的设置均通过学习历代优秀个体的参数值自适应生成, 避免了通过试错过程寻找优秀控制参数的大量计算成本与时间成本; (2) 改善 DE 算法的变异策略。如 Fan 等^[18]提出的三角变异策略, 使得算法能够在收敛速度和鲁棒性之间取得更好的平衡。Das 等^[19]基于邻域拓扑的思想, 将邻域搜索与全局搜索相结合加入变异策略中, 平衡了算法的开发能力与勘探能力; (3) 改善 DE 算法结构和工作原理。徐斌等^[20]提出了一种自适应多策略差分进化(SMDE)算法, 通过引入候选集合的概念, 并以种群过去信息为基准, 自适应地从候选集合中选择变异策略与控制参数, 有效提高了算法的搜索精度与收敛速度。Das 等^[21]通过将局部搜索引入 DE 算法, 改善了算法对高维函数优化问题的处理能力; (4) 与其他算法进行混合^[22-23]。如魏民等^[24]将化学反应算法与 DE 算法相结合, 利用化学反应算法良好的全局搜索能力与 DE 算法收敛速度快的特点, 提高了算法计算精度与搜索能力。

Kumar 模型一次方程参数辨识问题具有强非线性、计算时间长、要求精度高等特点, 为解决这一问题, 算法须同时具备快速收敛能力与深度搜索能力, 而标准 DE 算法及其改进算法仍无法高效求解该问题的情况。在充分研究待优化问题的基础上, 本文分别对算法的工作原理与控制参数设置进行改进, 充分考虑了种群个体的差异, 提出了分类变异策略, 并对传统控制参数自适应进化策略的局限性进行改进, 然后结合分类变异策略与控制参数自适应进化策略, 提出了一种分类变异参数自适应差分进化算法(Classification Variation Parameter Adaptive Differential Evolution Algorithm, CVPADE), 并将其应用于石脑油裂解反应过程一次反应选择性系数的辨识过程。以石脑油的实际裂解产率与模型预测裂解产率差值的平方和为目标函数, 通过算法改进规则不断地更新一次选择性系数的值, 使目标函数值达到最小。

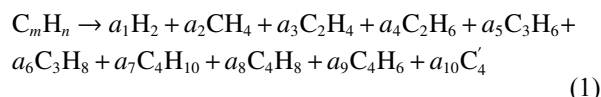
1 问题描述

烃类的热裂解涉及复杂的传热、传质过程, 是化工过程最复杂的问题之一。影响工业装置裂解反应

产物组分分布的因素众多, 如炉管结构、裂解条件、原料性质等。在应用 Kumar 模型建立石脑油裂解反应模型时, 影响模型裂解产物分布的最主要原因是一次反应方程选择性系数的准确性。

Kumar 将石脑油假定为具有平均分子式的单一烃(C_mH_n), 并用包含 10 个裂解产物的一次反应描述其裂解性能, 这 10 个产物的反应系数即为选择性系数。且一次反应的裂解产物作为二次反应的反应物, 进行复杂的二次反应。

Kumar 模型的一次反应方程式如下:



假设一次选择性系数为 $A = \{a_i | i=1, 2, \dots, 10\}$, 操作条件为 C , 原料性质为 Ω , $Y = \{y_i | i=1, 2, 3, \dots, 10\}$ 为裂解气主要组成, 裂解炉模型为 H 。则基于 Kumar 模型的裂解反应模型可以描述为

$$Y = H(A, \Omega, C) \quad (2)$$

在给定操作条件 C 、裂解炉模型 H 以及原料性质 Ω 的情况下, 裂解产物组成 Y 由一次选择性系数 A 唯一确定。因此, 该问题的目标函数可以采用工业实际裂解气组成数据 Y^s 与模型输出数据 Y^m 平方差和的形式描述。

另外, 一次选择性参数 A 与原料性质 Ω 息息相关, 根据原料性质 Ω , 可以将石脑油表示为 C_mH_n 的形式, 因此, A 的选择必须满足一次反应前后质量守恒与原子守恒。

综上所述, 可以将该优化问题转变成带约束的非线性优化问题:

$$\text{Min} f = \sum_{i=1}^{10} (y_i^s - y_i^m)^2 \quad (3)$$

$$\text{s.t.} \begin{cases} m = \sum_{i=1}^{10} a_i \cdot C_i \\ n = \sum_{i=1}^{10} a_i \cdot H_i \end{cases} \quad (4)$$

结合工业生产过程的实际情况, 本文对上述优化问题描述进行如下修正:

(1) 由于裂解气组成众多, 使众裂解气组成完全一致是非常困难的, 通常使用乙烯、丙烯等主要产品的收率评价模型精度, 所以在目标函数中, 应把评价重点放在主要产物上, 应使乙烯、丙烯误差最小, 丁二烯、氢气误差尽量小, 其余产品误差不大。

(2) 对于约束条件, 原子守恒存在一定的容错空间, 且一次选择性参数具有物理意义, 需要对其实施

上下界约束。

对式(3)、式(4)调整后,一次选择性系数辨识问题可表述为

$$\text{Min} f = \sum_{i=1}^{10} p_i (y_i^s - y_i^m)^2 \quad (5)$$

$$\text{s.t.} \begin{cases} \left| m - \sum_{i=1}^{10} a_i \cdot C_i \right| < \varepsilon_1, a_i \leq a_i \leq a_h \\ \left| n - \sum_{i=1}^{10} a_i \cdot H_i \right| < \varepsilon_2, a_i \leq a_i \leq a_h \end{cases} \quad (6)$$

式中: p_i 为各裂解气组分所占权重且乙烯、丙烯等主要产品所占权重较大; a_i 、 a_h 为 a_i 取值的上下界,根据经验一般取值为 [0.001, 2]; ε_1 、 ε_2 分别是碳、氢原子守恒的允许误差。

2 DE 算法及特性分析

2.1 DE 算法简介

DE 算法的基本思想是从某一随机生成的初始种群开始,利用从种群中随机选取的两个个体的差向量 D_{ab}^g 作为第 3 个个体的随机变化源,将差向量加权后按照一定的规则与第 3 个个体求和而产生变异个体 M_i^g ,该步骤称为变异^[25-26]。

$$D_{ab}^g = A_a^g - A_b^g \quad (7)$$

$$M_i^g = A_i^g + F \cdot D_{ab}^g \quad (8)$$

其中: F 为缩放因子,是 DE 算法主要控制参数之一。然后,变异个体与某个预先决定的目标个体进行交叉操作,生成试验个体 T_i 。

$$T_{i,j}^g = \begin{cases} M_{i,j}^g, \text{rand} \leq CR \\ A_{i,j}^g, \text{otherwise} \end{cases} \quad (9)$$

$i=1, 2, \dots, NP$
 $j=1, 2, \dots, n$

式中: rand 为 [0,1] 的随机数; CR 为交叉概率因子。如果试验个体的适应度优于目标个体的适应度,则在下一代中试验个体取代目标个体,否则目标个体仍然保存下来,该操作称为贪婪选择。

在每一代的进化中,DE 算法通过不断迭代计算,保留优良个体,淘汰劣质个体,从而引导搜索过程向全局最优点逼近^[27]。

2.2 DE 算法控制参数与变异策略分析

DE 算法的控制参数相对较少,种群规模 NP 、缩放因子 F 和交叉概率因子 CR 这 3 个控制参数对算法的搜索能力、收敛速度和稳定性具有较大的影响^[28],对 3 个控制参数进行分析,将有益于设置控制参数,提升算法能力。

首先, NP 对种群多样性及算法收敛速度具有直接的影响, NP 太小会使种群很快丧失多样性,陷入局部最小,但收敛速度增快。 NP 过大效果相反。通常, NP 的大小一般为优化问题决策变量维数 n 的 5~10 倍。

F 决定了变异操作中差分矢量对变异个体的扰动程度,体现了变异的幅度。 F 较大,扰动程度大,易保持种群多样性,但收敛速度降低; F 较小,扰动较小,收敛速度增快,易使算法陷入局部最小而发生早熟收敛现象。

CR 控制试验个体中变异个体所占分量的比例。 CR 较大时,试验个体 T_i 中变异个体 M_i 对其贡献较大,有利于增大种群多样性和全局搜索。 CR 较小时效果相反。

DE 算法的核心是变异步骤,目前常见并且应用较为广泛的变异策略主要有以下几种:

(1) DE/rand/1

$$M_i^g = A_i^g + F \cdot D_{ab} \quad (10)$$

(2) DE/best/1

$$M_i^g = A_{\text{best}}^g + F \cdot D_{ab} \quad (11)$$

(3) DE/rand/2

$$M_i^g = A_i^g + F \cdot D_{ab} + \lambda \cdot D_{de} \quad (12)$$

(4) DE/best/2

$$M_i^g = A_{\text{best}}^g + F \cdot D_{ab} + \lambda \cdot D_{de} \quad (13)$$

(5) DE/current-to-rand/1

$$M_i^g = A_i^g + F \cdot D_{ab} + \lambda \cdot (A_m^g - A_i^g) \quad (14)$$

(6) DE/current-to-best/1

$$M_i^g = A_i^g + F \cdot D_{ab} + \lambda \cdot (A_{\text{best}}^g - A_i^g) \quad (15)$$

式中: λ 为缩放因子,与 F 作用类似; A_m^g 为 g 代种群中的一个随机个体。

不同变异策略按照对算法性能的影响不同可大概分为 3 类,其中策略 (1)、(3)、(5) 代表第 1 类传统变异策略。策略 (2)、(4) 代表第 2 类变异策略,在搜索策略中加入最优个体,引导搜索方向转向最优个体下降方向,使算法的收敛速度大大增加,但会增大陷入局部最优的可能性。策略 (6) 代表第 3 类,特点是由最优个体构成差分矢量,通过两个缩放因子的调节,平衡收敛速度与搜索能力,具有更高的灵活性。

通过以上的分析可以得出,控制参数与变异策略都对算法的收敛速度以及种群多样性有很显著的影响,并且影响是相矛盾的。为达到增大全局搜索与加快收敛速度的目的,控制参数的设置一定要合理或者提出一种行之有效的设置方法,而变异策略

必须针对优化问题以及种群的特点选用最为合适的变异策略。

3 分类变异参数自适应差分进化算法

Kumar 模型一次选择性参数辨识问题属于带约束的非线性规划问题,该问题具有计算时间较长、模型计算精度要求较高的特点。由于约束条件的限制,会使符合条件的选择性参数约束在一定范围内。因此,对优化算法的设计提出以下要求:

(1)尽可能减少模型计算时间,加快算法收敛速度。

(2)在加快收敛速度的前提下,增强算法广度与深度搜索能力,扩大算法搜索范围,避免陷入局部最小。

传统 DE 算法往往存在收敛速度与种群多样性相矛盾的问题,在 DE 算法中, NP 较大,势必造成较长的计算时间。为满足算法要求,设计算法时, NP 取较小值,取为变量维数 n 的 1.5 倍,以加快算法收敛速度。在这个前提下,由于 NP 较小,种群多样性大大降低,增大了陷入局部最小的可能性。因此,需合理选择变异策略与控制参数,以平衡种群多样性与收敛速度的矛盾。为解决这一矛盾,本文提出在采用较小种群规模的前提下,采用分类变异策略与控制参数自适应进化策略相结合,由此组成分类变异参数自适应差分进化算法(CVPADE),并将其用于 Kumar 模型一次选择性参数辨识问题。

3.1 分类变异策略

在已有改进差分进化的方法中,有学者提出了几种不同的变异策略,如二次变异策略(Secondary Mutation Strategy, SM)、两段式变异策略(Two-Stage Strategy, TS)等,其特点都是根据不同算法阶段的特点对变异策略进行改进,能够有效地提高种群的多样性,增大搜索范围。其缺点是没有充分考虑种群中每个个体的特点,且对于收敛速度要求较高的优化问题,该策略具有一定的限制。

Kumar 模型一次方程的参数辨识问题需要算法具有较快的收敛速度,同时兼顾算法搜索范围,因此,上述变异策略无法有效满足算法需求,一种合适的变异策略亟待提出。

对 DE 算法的变异操作进行分析可知,变异操作实际上可以理解为一种局部搜索操作,种群中的每个个体即为局部搜索的中心,变异策略为搜索方式。而在进化过程中,每一代种群个体的适应度都存在着较大的差异,部分个体适应度较好,部分个体

适应度较差。这就意味着适应度较好的个体离最优解较近,适应度较差的个体离最优解较远,因此,充分考虑种群个体的差异,在进化过程中依据个体适应度大小的差异进行分类变异,不同类别的个体分别采用不同的变异方式。因此,充分利用个体间的差异将有利于提高种群的整体收敛速度,平衡算法的探索开发能力,有利于解决 Kumar 模型一次方程选择性系数辨识问题。

分类变异策略(Classified Variation Strategy, CV)的主要思想是将每一代中的个体按照适应度值的大小由小到大排序,取前 1/3 的个体为一类个体或优秀个体,取后 2/3 的个体为二类个体或者较差个体。优秀个体适应度较好,处于较优秀的解空间,应采用第一类变异策略,增强搜索能力,减慢该组个体收敛速度,避免过快丧失种群多样性。对于较差个体,应采用第 3 类变异策略,配合控制参数,增大趋向优秀解的收敛速度,提高种群整体收敛速度。

综上所述,一类个体选择 DE/rand/1 变异策略;二类个体选择 DE/current-to-best/1 变异策略,其中 F 控制搜索范围, λ 控制趋向最优解的速度。两类个体间各司其职,根据个体自身特点进化,避免了盲目搜索所导致的计算量大、收敛速度慢的缺陷,加快了种群的收敛速度,满足为解决该优化问题所提的算法要求。

3.2 控制参数自适应进化策略

控制参数大小以及设置原则对算法性能有重要的影响,算法中若采用了不合适的参数,可能会导致算法早熟或收敛停滞。为了避免手动设置控制参数带来的影响,许多参数自适应调整方法相继被提出^[29-31]。其中控制参数自适应进化策略(jDE)^[32-33]非常简单且有效,该策略极大地增强了 DE 算法的鲁棒性,在大规模优化问题中表现出良好的性能。该策略的具体措施如下:

因为每一代种群中其个体的适应度不同,变异程度也应不同,因此将变异参数 F 、 CR 加入个体中,第 g 代第 i 个个体组成为

$$A_i^g = (a_{i,1}, a_{i,2}, a_{i,3}, \dots, a_{i,10}, F_i^g, CR_i^g) \quad (16)$$

F_i , CR_i 的更新机制为

$$F_i^{g+1} = \begin{cases} F_{\min} + \Delta F \cdot \text{rand}_1, & \text{if } \text{rand}_2 < \tau_1 \\ F_i^g, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (17)$$

$$CR_i^{g+1} = \begin{cases} \text{rand}_3, & \text{if } \text{rand}_4 < \tau_2 \\ CR_i^g, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (18)$$

其中: rand_1 、 rand_2 、 rand_3 、 rand_4 都为 0~1 之间的随机数; F_{\min} 是 F 的下限; ΔF 是 F 的变化量; τ_1 、 τ_2 为控制

参数更新概率因子。

相对于标准 DE 算法,采用 jDE 策略的优势在于控制参数在给定范围内随机变化,能在一定程度上平衡算法的收敛速度与搜索空间,增强算法鲁棒性,防止搜索停滞,增大了跳出局部最小的可能性。

针对 Kumar 模型选择性系数辨识问题, jDE 策略的劣势有二:其一,控制参数随机选择时,匹配到较差的控制参数将导致计算量增大,收敛速度降低;其二, jDE 策略的控制参数取值范围无法根据进化代数与个体适应度大小自适应改变。为改善 jDE 策略在处理本优化问题时的两个劣势,对 jDE 策略进行了如下改进:

(1) jDE 策略的优点在于控制参数的更新,当种群个体匹配到较为优秀的控制参数 F 、 λ 以及 CR 时,收敛速度增加,但匹配到不合适的控制参数时,会导致迭代次数增多,收敛速度降低,因此,需要增大匹配到优秀控制参数的概率。

结合分类变异策略,对控制参数更新机制调整如下:

$$F_i = \begin{cases} F_{\min,g} + \Delta F_{i,g} \cdot \text{rand}_g, & \text{if } \text{rand}_1 < \tau_{F,1} \parallel i \leq 0.5n \\ F_{\min,p} + \Delta F_{i,p} \cdot \text{rand}_p, & \text{if } \text{rand}_1 < \tau_{F,1} \parallel i > 0.5n \\ F_i^1, \tau_{F,1} \leq \text{rand}_1 \leq \tau_{F,2} \\ F_i^2, \tau_{F,2} < \text{rand}_1 \end{cases} \quad (19)$$

$$\lambda_i = \begin{cases} \lambda_{\min,p} + \Delta \lambda_{i,p} \cdot \text{rand}_p, & \text{if } \text{rand}_2 < \tau_{\lambda,1} \parallel i > 0.5n \\ \lambda_i^1, \tau_{F,1} \leq \text{rand}_2 \leq \tau_{F,2} \\ \lambda_i^2, \tau_{F,2} < \text{rand}_2 \end{cases} \quad (20)$$

$$CR_i = \begin{cases} CR_{\min,g} + \Delta CR_{i,g} \cdot \text{rand}_g, & \text{if } \text{rand}_3 < \tau_{CR,1} \parallel i \leq 0.5n \\ CR_{\min,p} + \Delta CR_{i,p} \cdot \text{rand}_p, & \text{if } \text{rand}_3 < \tau_{CR,1} \parallel i > 0.5n \\ CR_i^1, \tau_{CR,1} \leq \text{rand}_3 \leq \tau_{CR,2} \\ CR_i^2, \tau_{CR,2} < \text{rand}_3 \end{cases} \quad (21)$$

其中:

$$\begin{cases} F_i^2 = F_i^1, F_i^1 = F_i \\ \lambda_i^2 = \lambda_i^1, \lambda_i^1 = \lambda_i \\ CR_i^2 = CR_i^1, CR_i^1 = CR_i \end{cases} \quad \text{if } \varphi_f > \theta \quad (22)$$

$$\varphi_f = (\text{fitness}_i^{g-1} - \text{fitness}_{i-1}^g) / \text{fitness}_i^{g-1} \quad (23)$$

式中: $F_{\min,g}$ 、 $CR_{\min,g}$ 为优秀个体的控制参数; $F_{\min,p}$ 、 $\lambda_{\min,p}$ 、 $CR_{\min,p}$ 为较差个体的控制参数; $\tau_{F,1}$ 、 $\tau_{F,2}$ 、 $\tau_{\lambda,1}$ 、 $\tau_{\lambda,2}$ 、 $\tau_{CR,1}$ 、 $\tau_{CR,2}$ 、 θ 皆为控制参数更新概率因子; φ_f 代表种群个体进化后适应度改变幅度,当 $\varphi_f > \theta$ 时,判定此时的控制参数为优秀控制参数,增大其保留以及被选中的概率。

(2) 在算法进行初期,由于种群个体差异较大,种群个体在解空间内较为分散,应增强种群搜索能力,增大种群多样性,因此, F 、 λ 以及 CR 应采用较大

的值,以增大搜索到全局最优解的概率。随着进化过程的进行,在算法进行后期,应加速较差个体向全局最优解的进化速度,促进种群收敛,应采用较小的 F 、 λ 以及 CR 值。另外,由于 F 与 λ 作用不同, F 控制搜索范围, λ 控制趋向最优解的速度,因此,两种缩放因子下降速度应取不同,即取值范围应取不同, F 下降速度要快, λ 下降速度要慢,以保证达到前期增大搜索范围后期加快收敛的目的。

基于上述指导思想,对 F 、 λ 与 CR 的更新机制中的随机项进行改进:

$$\begin{cases} \Delta F = \log_2^\omega(F_{\max} - F_{\min}) \\ \Delta \lambda = \log_2^\omega(\lambda_{\max} - \lambda_{\min}) \\ \Delta CR = \log_2^\omega(CR_{\max} - CR_{\min}) \\ \omega = 1 + 0.5 \cdot \left(1 - \frac{\text{nowgen}}{\text{maxgen}}\right) + 0.5 \cdot \left(\frac{f_i^g - f_{\min}^g}{f_{\max}^g - f_{\min}^g}\right) \end{cases} \quad (24)$$

其中: nowgen 为算法当前迭代代数; maxgen 为设置的最大迭代次数; F_{\min} 、 F_{\max} 、 λ_{\min} 、 λ_{\max} 代表一类与二类个体缩放因子的取值上下界; CR_{\min} 、 CR_{\max} 代表交叉概率的取值上下界。通过更新机制,可以保证控制参数可以跟随进化过程以及个体适应度自适应改变。

3.3 分类变异自适应差分进化算法实现步骤

分类变异自适应差分进化算法流程如图 1 所示,实现步骤如下:

(1) 种群初始化。确定初始种群规模 $NP=1.5n$, 初始进化代数 nowgen , 最大进化代数 maxgen , 优化精度 ε 以及控制参数变化的上下限。随机生成 NP 个个体构成初始种群 $A(x)$ 。

(2) 计算个体适应度 Fitness 以及种群平均适应度 Fitness_avg , 得到最优个体适应度 BestFitness 。

(3) 判断是否满足精度要求 $\text{BestFitness} < \varepsilon$ 或者是否达到最大迭代次数 maxgen , 若满足则退出, 否则执行下一步。

(4) 分类变异、交叉, 种群中的个体按适应度大小排序进行分类, 选出一类个体与二类个体。然后执行分类变异策略, 产生变异个体 M_i 。接着变异个体 M_i 与父代个体进行交叉操作产生试验个体 T_i 。

(5) 计算试验个体 T_i 适应度, 判断试验个体适应度进化大小是否满足控制参数更新条件, 进行控制参数的更新。

(6) 贪婪选择, 将父代个体与试验个体 T_i 的适应度进行两两比较, 选择适应度较小的个体选为子代个体。

(7) 计算种群最优个体的适应度 Best fitness , 然后转至步骤(4)。

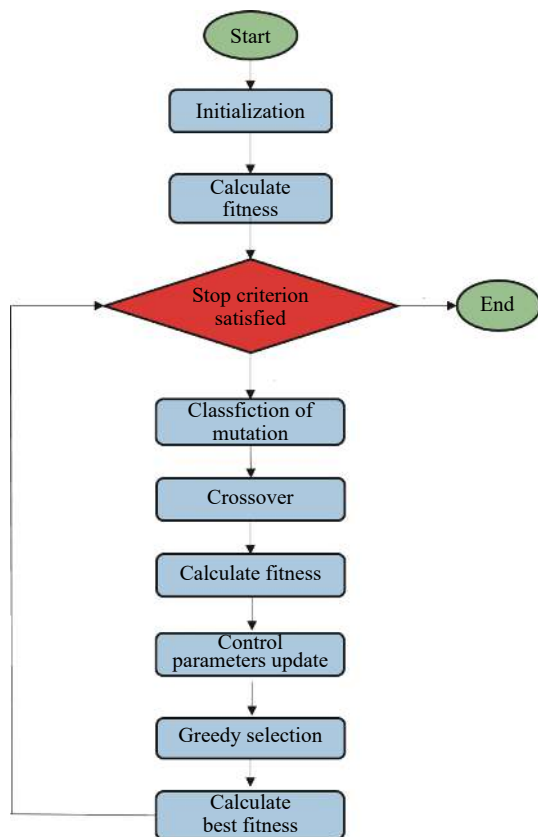


图 1 CVPADe 算法流程图

Fig. 1 Flow chart of CVPADe algorithm

4 结果分析

为了验证 CVPADe 算法对解决 Kumar 模型一次方程选择性系数辨识问题的有效性,以某工厂一台裂解炉为建模对象,选取一种石脑油油品数据,进行 Kumar 模型一次反应选择性系数的辨识。石脑油油品特性与裂解炉操作工况见表 1。

表 1 原料特性与操作工况

IBP	FBP	Ma	PONA/%			DS	COT/°C	COP/kpa
			P	N	A			
47.2	186.5	107.3	64.7	22.7	12.6	0.6	832	95

首先,分别将分类变异策略(CV)与二次变异策略(SM)、分段变异策略(TS)进行对比,不同初始种群下最优个体适应度的进化曲线如图 2 所示。

图 2(a) 中,二次变异策略的进化曲线出现 a、b 两个大小不同的峰值,原因可能是算法进行过程中,判断算法陷入局部最小时,随机二次变异所导致。在算法进行初期,针对不同的初始种群,分段变

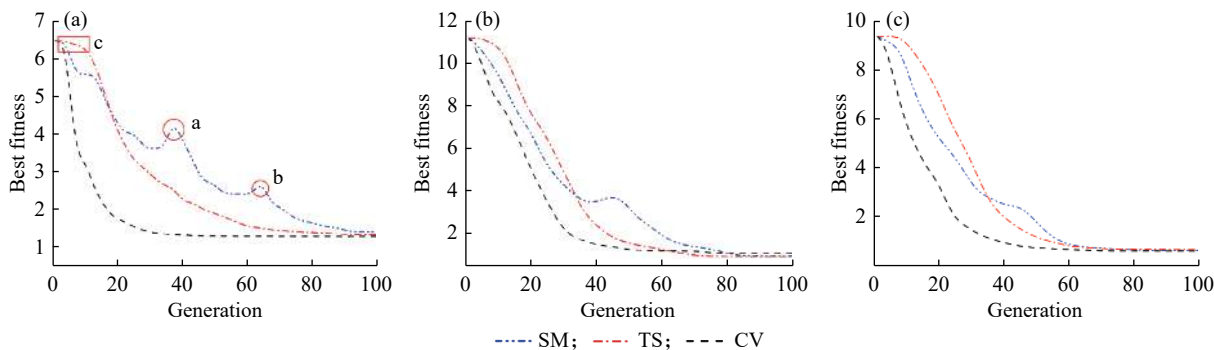


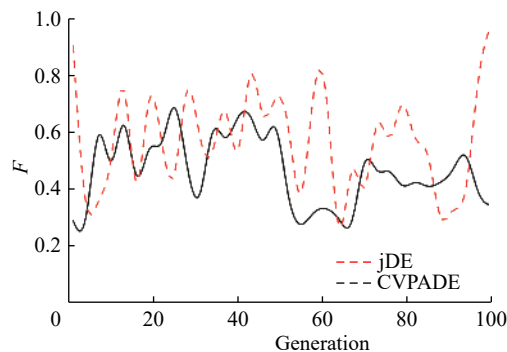
图 2 不同变异策略对比

Fig. 2 Comparison of different variation strategies

异策略收敛速度都较慢。通过对比发现,尽管 3 种策略最优解相差不大,但分类变异策略较二次变异策略与两段变异策略明显具有更快的收敛速度与稳定性,因此,在解决 Kumar 模型一次方程选择性系数辨识问题时分类变异更具有优势。

以种群中最优个体的控制参数 F 变化数据为参考,对控制参数自适应进化策略进行分析,jDE 与 CVPADe 控制参数 F 的变化曲线如图 3 所示。

从图 3 可以看出,与 jDE 相比,CVPADe 控制参数的变化频率要低,且随着进化过程的推进, F 有下降的趋势,这说明控制参数自适应进化策略不仅能

图 3 控制参数 F 变化曲线Fig. 3 Variation curves of control parameter F

增大优秀控制参数被选择的概率还可以根据进化进程及个体适应度大小自适应改变。算法迭代过程中,不同控制参数 F 与 λ 的变化趋势如图 4 所示。通过给 F 与 λ 不同的取值变化范围,并控制变化速率,使 F 下降较快, λ 下降较慢,以达到前期着重增大种群多样性,后期加速收敛的目的。可以看出,控制参数自适应进化策略通过增大优秀控制参数被选择的概率并使控制参数随着进化过程以及适应度自适应改变,但能够有效平衡算法收敛速度与开发能力。

将结合了两种策略的 CVPAD 算法与标准 DE 算法、jDE 算法进行对比,图 5、图 6 分别示出了进化过程中 3 种算法对应的种群平均适应度进化曲线与乙烯、丙烯等主要产品的质量收率进化曲线,图 6 中的虚线代表产品的实际质量分率。通过对比可以发现,CVPAD 算法能够准确快速收敛于目标值,且波动幅度不大,有较高的稳定性。由此可见,CVPAD 算法较 DE 算法与 jDE 算法在解决 Kumar 模型一次方程选择性系数辨识问题时具有更高的收敛速度、模型精确度与稳定性。

通过以上分析可知,CVPAD 算法不仅加快了收敛速度,也在一定程度上避免了由于种群规模较小带来的种群多样性不够丰富的问题,并且控制参数自适应进化,使算法具有更强的稳定性,避免陷入局部最小,能够有效解决 Kumar 模型一次方程选择性系数辨识问题的强非线性与计算时间长等问题,对解决 Kumar 模型一次方程选择性系数辨识等一类问题具有指导意义,对比于 DE 算法与改进的 DE 算法,采用 CVPAD 算法是十分有效且必要的。

表 2 列出了 3 种算法下种群最优个体的适应度以及算法收敛时间,可以看出 CVPAD 算法在收敛时间上分别较标准 DE 算法与 jDE 算法提升近 40% 与 35%。

表 3、表 4 分别列出了 Kumar 模型的计算值与

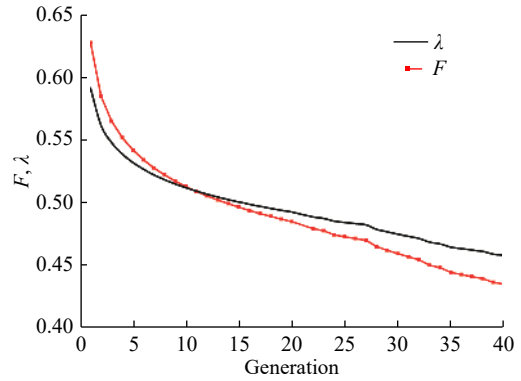


图 4 控制参数进化趋势曲线

Fig. 4 Control parameter evolution trend curves

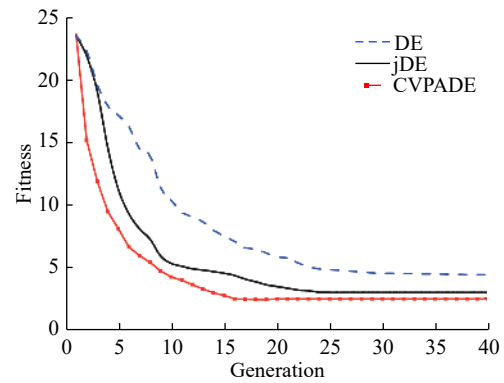


图 5 种群平均适应度进化曲线对比

Fig. 5 Comparison of population mean fitness evolution curves

文献值的对比与各组实际质量收率、仿真收率与原 Kumar 模型系数计算的质量收率的对比,从表 4 可以看出主要产物的仿真收率与实际收率相差极小,满足精度要求。

通过以上分析可知,CVPAD 算法通过结合分类变异策略与控制参数自适应进化策略,对 Kumar 模型一次方程选择性系数辨识方面有着较好的效果,不仅计算结果较为精确更大大缩短了计算时间,为 Kumar 模型在裂解炉建模中的应用打下了坚实的基础。

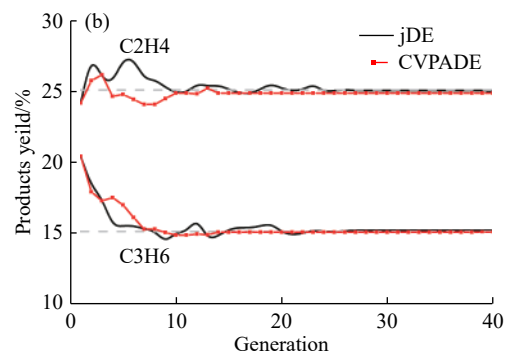
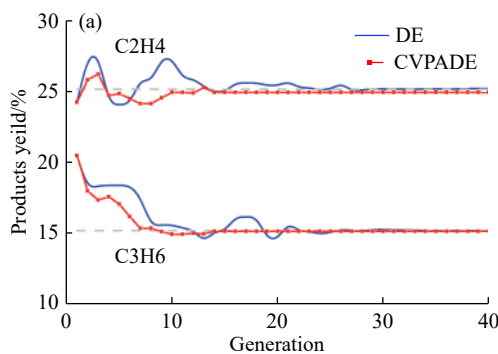


图 6 组分质量收率进化曲线

Fig. 6 Evolution curves of component mass yield

表2 最优适应度与收敛时间对比

Table 2 Comparison of optimal fitness and convergence time

Algorithm	BestFitness	Convergence time/h
DE	4.359	120.17
jDE	2.948	111.05
CVPADE	2.426	72.2

表3 计算的 Kumar 模型参数与原参数对比

Table 3 Contrast of the calculated Kumar model parameters and the original parameters

Coefficient	Calculated	Literature	Coefficient	Calculated	Literature
a_1	0.376 1	0.58	a_6	0.024 2	0.02
a_2	0.678 1	0.68	a_7	0.068 3	0.035
a_3	0.937 7	0.88	a_8	0.127 8	0.2
a_4	0.167 6	0.1	a_9	0.148 2	0.07
a_5	0.635 0	0.6	a_{10}	0.371 3	0.09

表4 产品实际收率与计算收率对比

Table 4 Contrast of the actual yield and the calculated yield

Product	Yield/%				
	Actual	Calculated	Deviation	Literature	Deviation
H ₂	0.739	0.745	0.810	1.180	59.90
CH ₄	12.297	12.340	0.350	12.93	5.16
C ₂ H ₄	25.143	25.185	0.167	28.000	11.30
C ₂ H ₆	3.180	3.212	1.010	2.180	31.00
C ₃ H ₆	15.219	15.200	0.125	15.000	1.42
C ₃ H ₈	0.319	0.337	5.600	0.600	88.12
C ₄ H ₁₀	0.410	0.431	5.120	1.160	182.80
C ₄ H ₈	4.336	4.293	0.990	4.420	1.97
C ₄ H ₆	5.921	5.916	0.084	3.500	40.00

5 结论

本文针对 Kumar 模型一次方程选择性系数的辨识问题,提出了分类变异参数自适应差分进化算法,通过将分类变异策略与控制参数自适应进化策略相结合,在较小种群规模的情况下,平衡了算法的收敛速度以及搜索能力。分别采用标准 DE、jDE 和本文提出的 CVPADE 算法对裂解动力学系数进行寻优,结果表明本文所述改进方法,对于诸如石脑油裂解反应具有高维、强非线性的模型参数辨识问题具有更快的收敛速度和更强的全局搜索能力,为研究复

杂化工过程石脑油裂解反应动力学建模提供了更高效的算法,有效节约了计算资源并缩短了模型开发周期,为实时提供模型数据、建立准确的石脑油裂解炉工艺数学模型打下了良好的基础,并为进一步研究石脑油油品性质与 Kumar 模型一次方程选择性系数间的关系提供了有力保障。

参考文献:

- [1] 李雪琴,曹利,于胜楠,等.石脑油高效资源化研究进展[J].化工学报,2015,66(9):3287-3295.
- [2] 赵岩,何小荣,邱彤,等.乙烯热裂解炉模拟平台的开发及应用[J].计算机与应用化学,2006,23(11):1065-1068.
- [3] 张利军,张永刚,王国清.石脑油裂解反应模型研究及应用进展[J].化工进展,2010,29(8):1411-1417.
- [4] 王国清,杜志国,张利军,等.应用BP神经网络预测石脑油热裂解产物收率[J].石油化工,2007,36(7):699-704.
- [5] 郝红,熊国华,张粉艳,等.烃类裂解烯烃产率分布模型[J].西北大学学报(自然科学版),2001,31(2):135-138.
- [6] KEYVANLOO K, SEDIGHI M, TOWFIGHI J. Genetic algorithm model development for prediction of main products in thermal cracking of naphtha: Comparison with kinetic modeling[J]. *Chemical Engineering Journal*, 2012, 209: 255-262.
- [7] 张红梅,王宗祥.轻质油裂解炉反应管的二维数学模型[J].石油学报(石油加工),1995,11(4):68-77.
- [8] SUNDARAM K M, FROMENT G F. Modeling of thermal cracking kinetics. 3. Radical mechanisms for the pyrolysis of simple paraffins, olefins, and their mixtures[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 1978, 17(3): 174-182.
- [9] JOO E, PARK S, LEE M. Pyrolysis reaction mechanism for industrial naphtha cracking furnaces[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2001, 40(11): 2409-2415.
- [10] HIRATO M, YOSHIOKA S. Simulations of the pyrolysis of naphtha, kerosene, and gas oil with a tubular reactor[J]. *International Chemical Engineering*, 1973, 13(12): 347-354.
- [11] WANG F, XU Y, REN J, *et al.* Experimental investigation and modeling of steam cracking of Fischer-Tropsch naphtha for light olefins[J]. *Chemical Engineering and Processing*, 2010, 49(1): 51-58.
- [12] KUMAR P, KUNZRU D. Modeling of naphtha pyrolysis[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Process Design & Development*, 1985, 24(3): 774-782.
- [13] STORN R, PRICE K. Differential evolution: A simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces[J]. *Journal of Global Optimization*, 1997, 11(4): 341-359.
- [14] PRICE K V, STORN R M, LAMPINEN J A. Differential

- evolution: A practical approach to global optimization[J]. *Natural Computing*, 2005, 141(2): 341-359.
- [15] 刘波, 王凌, 金以慧. 差分进化算法研究进展[J]. *控制与决策*, 2007, 22(7): 3-11.
- [16] GHOSH A, DAS S, CHOWDHURY A, *et al.* An improved differential evolution algorithm with fitness-based adaptation of the control parameters[J]. *Information Sciences*, 2011, 181(18): 3749-3765.
- [17] QIN A K, HUANG V L, SUGANTHAN P N. Differential evolution algorithm with strategy adaptation for global numerical optimization[J]. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 2009, 13(2): 398-417.
- [18] FAN H Y, LAMPINEN J. A trigonometric mutation operation to differential evolution[J]. *Journal of Global Optimization*, 2003, 27(1): 105-129.
- [19] DAS S, ABRAHAM A, CHAKRABORTY U K, *et al.* Differential evolution using a neighborhood-based mutation operator[J]. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 2009, 13(3): 526-553.
- [20] 徐斌, 陶莉莉, 程武山. 一种自适应多策略差分进化算法及其应用[J]. *化工学报*, 2016, 67(12): 5190-5198.
- [21] DAS S, SUGANTHAN P N. Differential evolution: A survey of the state-of-the-art[J]. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 2011, 15(1): 4-31.
- [22] SUN J, ZHANG Q, TSANG E P K. DE/EDA: A New Evolutionary Algorithm for Global Optimization[M]. USA: Elsevier Science Inc. 2005.
- [23] HAO Z F, GUO G H, HUANG H. A particle swarm optimization algorithm with differential evolution[C]// International Conference on Machine Learning & Cybernetics. Hong Kong, China: IEEE, 2007: 1031-1035.
- [24] 魏民, 杨明磊, 钱锋. 带有精英保留机制的混合差分化学反应算法[J]. *化工学报*, 2015, 66(1): 316-325.
- [25] STORN R, PRICE K. Differential evolution: A simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces[J]. *Journal of Global Optimization*, 1997, 11(4): 341-359.
- [26] MALLIPEDDI R, SUGANTHAN P N, PAN Q K, *et al.* Differential evolution algorithm with ensemble of parameters and mutation strategies[J]. *Applied Soft Computing*, 2011, 11(2): 1679-1696.
- [27] PAVLIDIS N G, PLAGIANAKOS V P, TASOULIS D K, *et al.* Human designed vs. genetically programmed differential evolution operators[C]//IEEE International Conference on Evolutionary Computation. Canada: IEEE, 2006: 1880-1886.
- [28] LIU J, LAMPINEN J. A fuzzy adaptive differential evolution algorithm[J]. *Soft Computing*, 2005, 9(6): 448-462.
- [29] BREST J, GREINER S, BOSKOVIC B, *et al.* Self-adaptive control parameters in differential evolution: a comparative study on numerical benchmark problems[J]. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 2006, 10(6): 646-657.
- [30] BREST J, BOŠKOVIĆ B, GREINER S, *et al.* Performance comparison of self-adaptive and adaptive differential evolution algorithms[J]. *Soft Computing*, 2007, 11(7): 617-629.
- [31] 方强, 陈德钊, 俞欢军, 等. 基于优选策略的差分进化算法及其化工应用[J]. *化工学报*, 2004, 55(4): 598-602.
- [32] ZHANG J Q, SANDERSON A C. JADE: Adaptive differential evolution with optional external archive[J]. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 2009, 13(5): 945-958.
- [33] NERI F, TIRRONEN V. Recent advances in differential evolution: A survey and experimental analysis[J]. *Artificial Intelligence Review*, 2010, 33(1/2): 61-106.

Kinetic Parameter Identification of Cracking Reaction Based on Improved Differential Evolution Algorithm

YE Zhencheng, WANG Xin, MEI Hua

(Key Laboratory of Advanced Control and Optimization for Chemical Processes, Ministry of Education, East China University of Science and Technology, Shanghai 200237, China)

Abstract: Traditional optimization methods, such as simplex method, steepest descent method and conjugate gradient method, have the advantages of high computational efficiency, strong reliability and mature theory, but it is difficult to solve the optimization problem without clear mathematical model, and for many high-dimensional optimization problems, it is easy to fall into the local minimum. Due to the characteristics of strong nonlinearity, high dimension, long computation time and high precision, the parameters identification problem of the first-order reaction equation in Kumar model cannot be solved effectively by traditional optimization algorithm. In recent years, various

stochastic optimization algorithms have developed rapidly, such as genetic algorithm and differential evolution algorithm. Among them, differential evolution algorithm(DE) has the advantages of fast convergence, few control parameters and simple parameter setting principle, showing a strong ability to nonlinear optimization problems. However, when solving the optimization problem, the standard DE algorithm and its improved algorithm cannot solve the problem efficiently, the convergence speed is very slow and it is easy to fall into the local minimum. To solve this problem, a new classification variation parameter adaptive differential evolution algorithm(CVPADE) is proposed. By combining the classification variation strategy with the control parameter adaptive evolution strategy, CVPADE algorithm not only increases the convergence speed, but also avoids the problem that the population diversity is not rich enough due to the small population size. Moreover, the adaptive evolution strategy of parameters is controlled to make the algorithm more stable and avoid falling into local minimization, which can effectively solve the selectivity coefficient identification problem of Kumar model primary equation. Compared with the standard differential evolution algorithm and control parameter adaptive differential evolution algorithm(jDE), the results show that the time consumption of the algorithm in this paper is 40% and 35% lower than that of DE and jDE, respectively. It is proved that the algorithm has a significant improvement effect on the parameters identification problem of the first-order reaction equation in Kumar model compared with the comparison method.

Key words: algorithm; parameter estimation; selectivity coefficient; Kumar model; naphtha