

# 化工过程的多目标优化问题

韩晓霞<sup>1\*</sup>, 程 铭<sup>2</sup>, 刘树森<sup>2</sup>, 赵超凡<sup>1</sup>, 任 军<sup>2</sup>

(1. 太原理工大学信息工程学院, 山西 太原 030024; 2. 太原理工大学山西省煤科学与技术重点实验室-省部共建国家重点实验室培育基地, 山西 太原 030024)

**摘要:** 综述了常用的多目标求解方法, 并结合实例讨论了多目标优化在反应器设计、工艺优化、催化剂筛选方面的应用。多目标优化通过模拟化学反应的过程为生产工艺的优化提供理论指导, 可以大大提高化工工艺条件的筛选效率, 有效降低化工生产各个环节的成本。

**关键词:** 化工过程; 多目标优化; 反应器设计; 工艺优化; 催化剂筛选

**中图分类号:** TQ015.9

**文献标志码:** A

**文章编号:** 0253-4320(2017)11-0194-04

**DOI:** 10.16606/j.cnki.issn 0253-4320.2017.11.045

## Multi-objective optimization (MOO) of chemical process

HAN Xiao-xia<sup>1\*</sup>, CHENG Ming<sup>2</sup>, LIU Shu-sen<sup>2</sup>, ZHAO Chao-fan<sup>1</sup>, REN Jun<sup>2</sup>

(1. College of Information Engineering, Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, China;

2. Key Laboratory of Coal Science and Technology, Ministry of Education and Shanxi Province, Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, China)

**Abstract:** This paper reviewed the common methods of Multi-objective optimization (MOO), and discussed the application of MOO in the reactor design, chemical process optimization, catalyst screening combined with the specific examples. MOO can provide theoretical directions for industrial production by means of simulating the chemical reaction process, thus to improve the efficiency of parameter screening for industrial production, reduce the cost of different industrial sections, its application and spread would probably promote the development of chemical industry.

**Key words:** chemical process; multi-objective optimization (MOO); reactor design; chemical process optimization; catalyst screening

在现代生活中, 化工产品无处不在, 从化工过程本身的发展和社会现状来看, 当前人们关注的焦点集中在运行费用、操作可靠性、产品质量等指标。在化工操作中, 一部分效益来自于工人操作技术的提高, 例如增加高价值产品的产量、降低能耗、提高过程的效率、延长开工时间。然而现在的化工过程往往需要依靠大量实验获得可信数据, 造成人力与物力的极大浪费, 不能使经济效益与社会效益等指标达到最大化。因此, 想要实现对生产指标的控制, 需要对各种影响因素进行优化。而这种通过调整反应工艺条件实现生产目标优化的理念与计算机自变因变的理念相契合, 随着一些计算机软件、算法的不断发展, 化工过程的多目标优化应运而生。多目标优化也称多准则优化、多指标优化或向量优化, 目的就是要找到折中解, 以实现对多个工艺参数(如温度、压力、投料比等)的精准把握。

Ostczka<sup>[1]</sup>给出了多目标优化的定义: 寻找一个由决策变量构成的向量, 使其能够满足所有的约束条件和由目标函数组成的向量函数。通过软件与算法相结合可模拟反应过程, 得到 Pareto 最优解组成

的集合, 进而确定最佳工艺条件, 为提高产品收率、降低生产成本打下理论基础。多目标优化现已被广泛应用在反应器设计、工艺优化、催化剂筛选等领域。

## 1 多目标优化问题表述及求解方法

### 1.1 优化问题的基本特征与表述

很多优化问题的求解涉及到很多数学特性, 建立优化问题必须采用数学表达式。基于每个优化问题都含有至少 1 个要进行优化的目标函数、等式约束、不等式约束这 3 个基本特征<sup>[2]</sup>, 人们通常利用数学的相似性来开发一个能够用来研究所有问题的结构或方法, 无论复杂还是简单, 目的都是求取最优解。要实现这一点必须从建立模型和选择适宜的目标标准来引导所要进行的讨论。数学表达式如下<sup>[3]</sup>:

$$\begin{aligned} \max y &= f(x) = (f_1(x), f_2(x), \dots, f_k(x)) \\ x &= (x_1, x_2, \dots, x_n) \in X \\ y &= (y_1, y_2, \dots, y_n) \in Y \\ \text{s. t. } e_i(x) &\leq 0 \end{aligned}$$

式中,  $x_i$  表示决策向量;  $X$  表示决策空间;  $y_i$  表示目标向量;  $Y$  表示目标空间;  $e_i(x)$  为约束函数;  $n$  为决

策变量参数的个数; $k$ 为目标函数个数; $m$ 为约束条件,该式以最大化目标为例。

## 1.2 求解方法

多目标优化问题的常见求解方法有数学归纳法、传统梯度法、多目标进化法<sup>[4]</sup>。但上述方法在模型修正过程中目标函数通常具有高度非线性和多个局部极值点的特点,因此传统方法很难实现全局最优解<sup>[5]</sup>。

遗传算法作为优化算法的代表,是借鉴生物界自然选择和遗传机制所建立起的一种算法,遗传算法的发展历经了2代,第一代多目标遗传算法(MOGA)是以非劣排序遗传算法(NSGA)为主的基本遗传算法,只使用基本的遗传算子,遗传进化过程简单,容易理解,是其他遗传算法的基础。

人们在改进第一代算法的同时又开发出第二代改进的非劣性排序遗传算法(NSGA-II),相比于NSGA运算时不能在目标函数和决策变量之间建立明确的关系<sup>[6]</sup>,NSGA-II通过引进非劣解系列 $\lambda_i$ 和密集比较算子 $\pi_n$ 来克服上述缺点。同时NSGA-II又引入了多样性保持与精英策略2个阶段,降低了算法的复杂度,保持了种群的多样性,最佳个体不会丢失,大大地提高了算法的准确性。目前多目标优化大多采用遗传算法与其他元素相融合构成了混合多目标遗传算法,如神经网络系统结合遗传算法(GA-ANN)<sup>[7]</sup>、种群分布式并行遗传算法(PDPGA)<sup>[8]</sup>等,前者就是用遗传算法对神经网络(ANN)训练的结果进行优化,经过选择、交叉、变异的作用产生新的子代,经过训练后,神经网络能够对化工过程做出预测,通过比较预测数据与实验数据能够估计ANN预测化工过程的能力,反复训练后即可逼近最佳的工艺条件。

## 2 应用领域

### 2.1 反应器设计

化学反应器是化工反应过程的核心,优化反应器的设计与操作将为化工厂提供巨大的经济利益。在反应器设计阶段需要权衡诸多因素,采用多目标优化算法对目标函数求解可以有效地解决以上问题。

#### 2.1.1 管式反应器

管式反应器因体积小、效率高、加工方便等特点,现已被广泛应用于气固相、气液相反应。Fuad等<sup>[9]</sup>通过NSGA-II算法研究了列管式反应器的设计,根据Pareto解集得出乙烯氧化反应的催化剂应放置在靠近管式反应器入口处,而对于邻苯二甲酸

酐的合成,使用多种类催化剂更能提高邻苯二甲酸酐的出口组成。Bhat等<sup>[10]</sup>应用NSGA-II对单管式固定床反应器催化合成邻苯二甲酸酐反应过程中产率和催化剂总床层长度进行多目标优化研究,如图1所示,相比于反应系统1,在产物产率( $X_{PA}$ )相同的情况下反应系统2可以缩短催化剂总床层长度( $L_{cat}$ )。

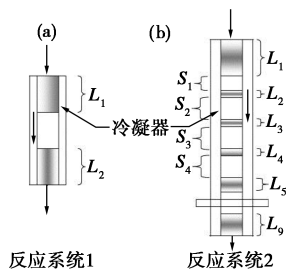


图1 邻苯二甲酸酐的合成过程

#### 2.1.2 膜反应器

膜反应器利用膜的分离特性选择性地通过某些组分从而改变反应物或者产物的浓度进而影响反应过程,以达到改变反应平衡转化率或者中间体产物选择性的目的。因此,从反应膜两侧控制反应物加入和产物的移除是改善膜反应器的关键。Cheng等<sup>[11]</sup>应用NSGA-II对催化膜反应器进行优化,研究膜反应器的尺寸(膜厚度、膜面积)对合成甲醇和制氢反应的影响,通过调节反应器尺寸对目标产物产率、反应物转化率、反应过程中能量损失3个目标函数进行优化。

#### 2.1.3 等离子体反应器

等离子体反应器如图2所示,等离子体催化反应器能提供大量高活性物种的等离子体空间,反应物通过电子碰撞、自由基碰撞和离子碰撞等方式发生作用,由于等离子体中的活性离子的平均能量高于反应物分子的键能使反应物分子的化学键打开,发生化学反应<sup>[12]</sup>。Istadi等<sup>[13]</sup>应用神经网络结合遗传算法对在等离子体催化反应器中甲烷与CO<sub>2</sub>制备C<sub>2</sub>烃类的反应进行优化,为使甲烷转化率和C<sub>2</sub>烃类选择性、H<sub>2</sub>选择性和H<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub>组目标达到最优。

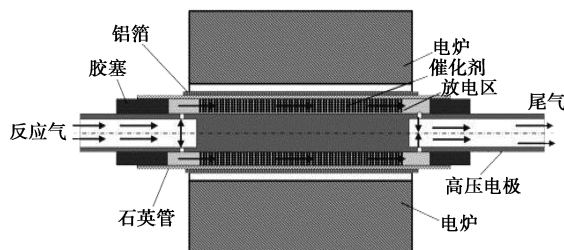


图2 等离子体反应器

## 2.2 工艺条件优化

### 2.2.1 吸收

吸收是产物分离及尾气处理的重要工艺,影响吸收效果的变量众多,每一个条件都会对操作带来很大影响,因此对吸收过程进行多目标优化势在必行。姜斌等<sup>[14]</sup>应用多目标优化软件 mode FRONTIER,结合化工流程模拟软件 PRO/II 对催化裂化吸收系统进行优化,对稳定塔进料位置塔板数、吸收剂流量、吸收塔前冷却罐温度、稳定塔冷凝罐温度、稳定塔进料换热器温度、解吸塔中间再沸器温度 6 个参数进行调变优化。岳金彩等<sup>[15]</sup>在 Aspen Plus 模拟环境下应用多目标遗传算法 NSGA-II 优化工业生产甲苯二异氰酸酯过程中光气的吸收过程,为最终确定改善光气吸收、解吸系统提供了依据。

### 2.2.2 催化裂化

石油化工在国民生产总值中占有重大比例,而催化裂化是石油加工中的关键环节,原油经过催化裂化后生产液化石油气、汽油、柴油、丙烯等产物。虽然催化裂化工艺从产生至今已有 60 多年的历史<sup>[16]</sup>,但如今依然面临诸多问题。

吴勇等<sup>[17]</sup>引入多目标优化函数并运用 NSGA-II 算法对熊俊文等<sup>[18]</sup>建立起的数学模型进行催化裂化分馏塔多目标优化仿真求解,通过优化操作条件实现汽油和轻柴油的产量分别达到 300.3、110.0 t/h,相比于熊俊文等<sup>[18]</sup>应用遗传算法、刘蓉等<sup>[19]</sup>应用自适应粒子群(AFIPSO)与申慧敏等<sup>[20]</sup>运用自适应策略(IPAGA)算法,该仿真结果显示汽油与柴油的产量变化趋势相对立但耗时较长。周晓静等<sup>[21]</sup>在熊俊文、申慧敏等人的基础上应用改进蚁群算法,在确定主要参数的初值后对催化裂化分馏塔进行多目标优化,从迭代次数分析发现,迭代为 50 次时适应度为 197.85,接近最优解,此时汽油和轻柴油产量分别达到了 298.43、110.26 t/h。

### 2.2.3 废气及废水处理

支持向量机(SVM)以结构风险最小为原则,普遍适用性优于神经网络,Liu 等<sup>[22]</sup>利用 SVM 结合遗传算法(GA)(流程图如图 3 所示)优化柴油机氮氧化物的排放过程。柴油机做功后排出的氮氧化物在尿素作用下进行催化反应以提高氮氧化物的转化率,同时得以降低氨气的排放量,对产生出的氮氧化物与氨气之间的关系进行优化处理。同时,李大中等<sup>[23]</sup>通过建立最小二乘支持向量机(LS-SVM)模型对生物质气化中污染物催化脱氨过程进行了优化研究,确定了最佳工艺条件范围,优化结果表明,通

过 LS-SVM 模型预测值与实验值相对误差不超过 5%,模型具有较好的模拟实际工况能力。

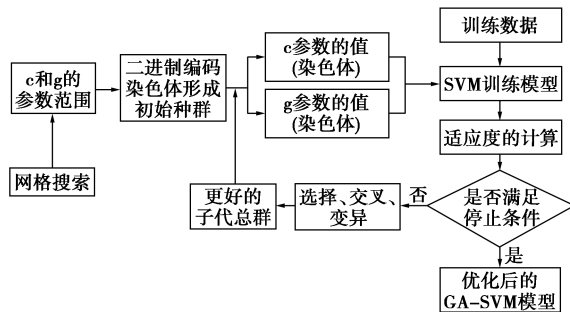


图 3 SVM 结合 GA 流程图

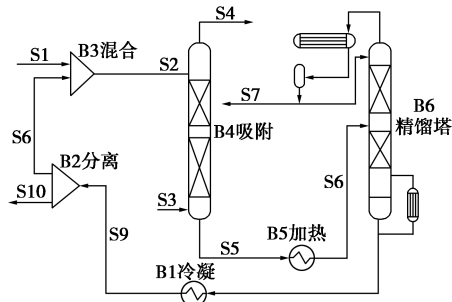
### 2.2.4 费托合成

一氧化碳与氢气反应生成烷烃是费托合成工艺(F-T)中重要的一环,Adib 等<sup>[7]</sup>应用神经网络预测 F-T 合成过程中 CH<sub>4</sub>、CO<sub>2</sub>、CO 的含量,并应用遗传算法优化操作条件,操作条件包括 3 方面:Co/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 催化剂的催化反应时间、操作压力、操作温度,通过反复实验和计算得到判定系数(CH<sub>4</sub> R<sup>2</sup>=0.94,CO<sub>2</sub> R<sup>2</sup>=0.93,CO R<sup>2</sup>=0.96)。同时,对该反应进行敏感度分析可知催化反应时间在很大程度上影响着 CH<sub>4</sub> 的含量。

### 2.2.5 精馏

油页岩是一种非常规能源,储量巨大,作为石油资源的补充,其发展前景极其广阔,经加工利用后可应用于发电、制取汽油柴油等<sup>[24]</sup>。杨薇等<sup>[25]</sup>运用 Aspen Plus 结合 NSGA-II 算法实现了对油页岩干馏过程多目标优化,在保证耗能为当前值时,相比于应用 NSGA 算法的优化结果页岩油的产量约提高了 0.8%,这是因为 NSGA-II 算法求解的 Pareto 解集的收敛性和多目标优化的分散程度要优于 NSGA 算法。

汪捷等<sup>[26]</sup>以过程利润和丙酮废料量为目标函数,精馏过程如图 4 所示,应用 NSGA-II 算法考察



B1—冷凝器;B2—分流器;B3—混合器;B4—吸收塔; B5—加热器;B6—蒸馏器

图 4 丙酮回收工艺流程图

不同遗传参数取值对丙酮回收过程的影响。结果表明,变异概率较小时劣解数量较多,非劣解曲线明显间断,种群多样性得不到保证。在种群大小方面,随着种群数量增加求解质量有所提高,但废料最少点处的废料量和利润最大点处的利润量差别不大,因此种群数量不应过大,以免降低运算效率。

### 2.3 组合催化

催化剂优化设计的目标是获得高转化率和高选择性,在催化反应中很多因素影响着催化剂的性能。因此,人们将组合化学技术引入催化研究领域,给传统的催化研究方法带来了一次新的革命。它将组合化学原理应用于催化剂的设计、制备、评价、筛选及表征等方面,能够对大量催化剂样品进行研究。NSGA-ANN可以比较简单地从大批催化剂中筛选最优的组分及制备条件,不仅可以降低催化剂开发成本、优化催化反应过程,还可以在加快催化剂评价速度、减少人为干扰因素等方面取得较好的效果。

#### 2.3.1 催化剂库的建立

“催化剂库”即指含有大量不同化合物的集合体,催化剂库合成开发的关键主要分为2步:组合库的系统控制合成和库的高通量分析(筛选)。首先以大量实验数据、文献数据等为基础,收集各类有潜在催化性能的催化剂前驱物,采用组合的方式进行合成与筛选,保证催化剂配方优选的可行域较大,最大程度地避免出现最优配方漏选问题,找出有进一步研究开发价值的催化剂前驱物。现今催化剂库的合成方法有混合裂分法、位置扫描法、正交法、平行合成法以及从库到库法等。第二步借助高通量筛选技术,选定算法,考察活性、产物选择性和寿命等因素对催化剂进行优化,得到的信息参数为最终实现工业应用提供依据。

#### 2.3.2 催化剂库的评价

最近NSGA-II成功应用于研究催化领域多目标寻优问题,并且显示出非常突出的优势。Mitra等<sup>[27]</sup>采用NSGA-II考察了Zn基、Sn基、Ti基催化剂对丙烯对苯二甲酯的聚合反应的催化性能,发现Zn基催化剂可以取代传统的Ti基催化剂。对神经网络进行不同规则的训练,利用人工神经网络结合遗传算法的方式可以得到与实验数据相吻合的结果,数据精确度远高于多元线性回归法(MLR)得到的结果。

## 3 结语

化工过程的多目标优化将化工领域与计算机领

域相结合,借助于不同算法对化工反应过程进行优化,通过对目标函数求解确立最佳反应条件。多目标优化已被广泛用于反应器设计、工艺优化、催化剂筛选等化工领域。目前多目标优化技术还刚刚起步,应用领域还比较局限,因此多目标优化技术在今后的发展中还应加强软件与算法的研发,加大技术的推广力度,使其在化工领域中的应用更为广泛。

### 参考文献

- [1] Ostezka A, Kundu S. A new method to solve generalized multicriteria optimization problems using the simple genetic algorithm[J]. *Structural Optimization*, 1995, 10(2): 94-99.
- [2] 张卫东. 化工过程优化[M]. 北京: 化学工业出版社, 2006: 8-9.
- [3] 方诗虹, 丁可伟, 陈雅茜. 多目标优化方法研究[J]. *西南民族大学学报: 自然科学版*, 2012, 38(4): 658-661.
- [4] Deb K, Pratap A, Agarwal S, et al. A fast and elitist multiobjective genetic algorithm: NSGA-II[J]. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 2002, 6(2): 182-197.
- [5] 周强. 基于遗传算法的有限元模型修正方法研究[D]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学, 2007.
- [6] Huang M Z, Han W, Wan J, et al. Multi-objective optimisation for design and operation of an anaerobic digestion using GA-ANN and NSGA-II[J]. *Journal of Chemical Technology and Biotechnology*, 2016, 91(1): 226-233.
- [7] Adib H, Haghbakhsh R, Saidi M, et al. Modeling and optimization of Fischer-Tropsch synthesis in the presence of Co(III)/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> catalyst using artificial neural networks and genetic algorithm[J]. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 2013, 10: 14-24.
- [8] 潘欣, 刘海燕, 廖安, 等. 种群分布式并行遗传算法解化工多目标优化问题[J]. *化工进展*, 2015, 34(5): 1236-1240.
- [9] Fuad M, Hussain M A. Systematic design of chemical reactors with multiple stages via multi-objective optimization approach[C]. 12th International Symposium on Process Systems Engineering and 25th European Symposium on Computer Aided Process Engineering, 2015, 869-874.
- [10] Bhat G R, Gupa S K. MO optimization of phthalic anhydride industrial catalytic reactors using guided GA with the adapted jumping gene operator[J]. *Chemical Engineering Research and Design*, 2008, 86(9): 959-976.
- [11] Cheng S H, Chen H J, Chang H, et al. Multi-objective optimization for two catalytic membrane reactors—methanol synthesis and hydrogen production[J]. *Chemical Engineering Science*, 2008, 63(6): 1428-1437.
- [12] 刘跃旭, 王少波, 原培胜, 等. 催化型低温等离子体反应器净化废气研究进展[J]. *化工进展*, 2009, 28(12): 2232-2236.
- [13] Istadi I, Amin N A S. Modelling and optimization of catalytic-dielectric barrier discharge plasma reactor for methane and carbon dioxide conversion using hybrid artificial neural network—genetic algorithm technique[J]. *Chemical Engineering Science*, 2007, 62(23): 6568-6581.

油溶性的,也有水溶性的,难以从各类食品中高效提取这些染料;其次,食品中各种染料容易被大部分吸附剂吸附,难解析。

笔者改进了 QuEChERS 方法,建立适用于低浓度多种非食用色素同时检测方法,为食品中非食用色素的风险检测提供更准确、便捷、环保的技术支持。

## 1 实验方法

### 1.1 仪器与试剂

1290-6460 液相色谱串联质谱仪,美国安捷伦公司生产;XS205 十万分之一天平,美国 Mettler Toledo 公司生产;TDL-5 离心机,上海安亭科学仪器厂生产。

碱性橙 II、罗丹明 B 和苏丹红 I ~ 苏丹红 IV 标准品, Sigma-Aldrich LAB Chemikalien GmbH 生产;乙腈、乙酸铵,色谱纯,德国 Merck 公司生产;氯化钠,分析纯,国药集团生产;0.22  $\mu\text{m}$  有机滤膜、 $\text{C}_{18}$  净化剂,上海安谱实验科技股份有限公司生产;实验室用水为超纯水。

### 1.2 标准溶液的配制

准确称取适量苏丹红 I、苏丹红 II、苏丹红 III、苏丹红 IV、罗丹明 B、碱性橙 II 标准品,用乙腈溶解,得到标准储备液,避光于 4℃ 下保存,使用前稀释。

### 1.3 样品处理

纯油基质样品:称取 2.00 g 样品于 15 mL 离心管中,加入 5 mL 乙腈,涡旋提取 5 min, 5 000 r/min 离心 2 min, -20℃ 冷冻 1 h, 取出后移取 2 mL 乙腈

层于装有 100 mg  $\text{C}_{18}$  的 15 mL 离心管中,涡旋 2 min, 5 000 r/min 离心 5 min, 过 0.22  $\mu\text{m}$  有机滤膜,待测。

非纯油基质样品:称取 2.00 g 样品于 15 mL 离心管中,加入 5 mL 乙腈、5 mL 超纯水,涡旋提取 2 min, 加入 1 g 氯化钠,涡旋震荡 2 min, 5 000 r/min 离心 2 min, -20℃ 冷冻 1 h。迅速移取 2 mL 乙腈层溶液,加入到装有 100 mg  $\text{C}_{18}$  的 15 mL 离心管中,涡旋 2 min, 5 000 r/min 离心 5 min, 过 0.22  $\mu\text{m}$  有机滤膜,待测。

### 1.4 液相色谱串联质谱条件

#### 1.4.1 液相色谱条件

色谱柱: ZORBAX-SB- $\text{C}_{18}$  (2.1 mm  $\times$  50 mm, 1.8  $\mu\text{m}$ ); 进样量: 5  $\mu\text{L}$ ; 柱温: 40℃; 流速: 0.3 mL/min; 流动相 A 为 10 mmol/L 乙酸铵水溶液, 流动相 B 为甲醇。梯度洗脱条件如表 1 所示。

表 1 梯度洗脱程序

时间/min	流速/(mL·min <sup>-1</sup> )	w(A)/%	w(B)/%
0.00	0.3	70	30
1.00	0.3	70	30
6.00	0.3	5	95
9.50	0.3	5	95
10.5	0.3	70	30

#### 1.4.2 质谱条件

离子源: ESI 正模式; 雾化气: 氮气; 雾化气压力: 15 psi; 离子喷雾电压: 3 500 V; 干燥气温度: 350℃; 干燥气流速: 15 L/min; MRM 模式监测。优化确定的质谱条件如表 2 所示。

(上接第 197 页)

[14] 姜斌, 梁士锋, 冯佳佳. 催化吸收稳定系统的多目标优化[J]. 计算机与应用化学, 2008, 25(1): 63-66.

[15] 岳金彩, 曲波, 程华农, 等. NSGA-II 用于光气吸收塔的多目标优化[J]. 计算机与应用化学, 2008, 25(2): 181-184.

[16] Palit S. The future vision of the application of genetic algorithm in designing a fluidized catalytic cracking unit and chemical engineering systems-a far-reaching review [J]. International Journal of Chemtech Research, 2015, 7(4): 1665-1674.

[17] 吴勇, 程明, 项敏建. 基于 NSGA-II 的催化裂化分馏塔的多目标优化[J]. 计算机测量与控制, 2015, 23(1): 70-72.

[18] 熊俊文, 吕翠英. 催化裂化分馏塔多目标遗传算法优化[J]. 计算机与应用化学, 2006, 23(5): 462-464.

[19] 刘蓉, 吕翠英. 自适应粒子群法于应用催化裂化分馏塔多目标的优化[J]. 计算机与应用化学, 2010, 27(6): 771-774.

[20] 申慧敏, 李鹏. 多目标遗传优化算法自适应策略及其在石油加工中的应用[J]. 石油化工自动化, 2007, (4): 29-32.

[21] 周晓静, 吕翠英. 基于改进蚁群算法的催化裂化分馏塔在线多目标优化[J]. 计算机与应用化学, 2009, 26(4): 443-446.

[22] Liu B, Yan F, Hu J, et al. Modeling and multi-objective optimization of NO<sub>x</sub> conversion efficiency and NH<sub>3</sub> slip for a diesel engine[J]. Sustainability, 2016, 8(5): 478-491.

[23] 李大中, 郭放. 生物质气化工中污染物氨催化脱除过程工况优化[J]. 可再生能源, 2013, 31(10): 115-119.

[24] 侯吉礼, 马跃, 李术元, 等. 世界油页岩资源的开发利用现状[J]. 化工进展, 2015, 34(5): 1183-1190.

[25] 杨微, 苏成利, 李平. 油页岩干馏过程的流程模拟与多目标优化[J]. 控制工程, 2015, 22(2): 270-275.

[26] 汪捷, 岳金彩, 郑世清. NSGA-II 求解丙酮回收过程的废料最少化[J]. 计算机与应用化学, 2011, 28(12): 1557-1560.

[27] Mitra K, Majumdar S. Selection of catalyst for the esterification step of the PPT polymerization process[J]. Macromolecular Theory and Simulations, 2006, 15(6): 497-506. ■