

一种自适应差分进化算法及其在精对苯二甲酸结晶生产过程中的应用

杜文莉 钱 锋

(华东理工大学自动化研究所, 上海 200237)

摘要:提出了一种自适应差分进化算法(adaptive differential evolutionary algorithm, ADE),并将其应用于精对苯二甲酸(PTA)生产中结晶过程的优化。由于该结晶过程为 5 级结晶器串联组成,并且存在较多杂质等的影响,使得该结晶过程很难用机理数学模型来精确表达。为此首先利用神经网络技术建立了该对象模型,并对各主要操作变量对关键产品指标的影响进行系统分析,以满足结晶机理先验知识。然后利用自适应差分进化算法对该结晶模型进行操作点的寻优。该 ADE 算法是一种基于实型数值编码的并行直接搜索算法。

关键词:自适应差分进化算法;优化;神经网络建模;PTA 结晶

中图分类号:TQ021.8;TQ015.9

文献标识码:A

文章编号:0253-4320(2004)S2-0197-04

An adaptive differential evolutionary algorithm and its applications in optimizing purified terephthalic acid crystallization process

DU Wen-li, QIAN Feng

(Institute of Automation, East China University of Science and Technology, Shanghai 200237, China)

Abstract: A kind of adaptive differential evolutionary algorithm (ADE) and its applications in optimizing the crystallization process of purified terephthalic acid (PTA) is proposed. As the crystallization process are comprised of five crystallizers in series, and there lies uncertain affection from various impurity, these factors bring about difficulties to set up a mechanism mathematical model describing this process. Therefore a neural network model is built firstly for this process, then the ADE algorithm is applied to search the optimal operation conditions of PTA crystallization process. The proposed ADE algorithm is a real-valued, parallel searching algorithm, by introducing the adaptive adjustment schematic for differential and crossover operators, its convergence properties is improved, which makes it for better use in optimizing practical industrial process.

Key words: adaptive differential evolutionary algorithm; optimization; neural network modeling; PTA crystallization

优化技术在工程中的各个领域有着广泛应用,通常将优化方法分为确定性方法和随机方法^[1]。其中确定性优化方法是基于所研究的对象特性的,如基于梯度信息的拟牛顿算法、共轭梯度算法等。这些方法均具有较快的收敛速度,但是仍存在以下问题:①易受到初始点的影响而陷入局部极小;②无法解决目标函数不可微或者约束条件难以转换成常规惩罚项函数的复杂问题。

随机全局优化搜索算法近年来得到了广泛应用,代表性方法包括随机搜索算法,模拟退火算法、遗传算法、禁忌搜索算法等。这些方法都是全局搜索方法,但是收敛速度缓慢,这在一定程度上限制了其应用。由于工业对象模型的复杂性,决定了对其寻优过程是一个对高维的、高度非线性的、且存在众多局部极值点的复杂系统寻找全局最优点的过程,为此本文中提出了一种自适应差分进化算法,并将

其应用于实际工业对象的优化过程。

1 PTA 结晶工艺介绍

精对苯二甲酸(PTA)的生产过程由氧化单元和精制单元两部分组成。精制单元将氧化单元生产的粗对苯二甲酸(CTA),在浆料罐中用循环溶剂配制成一定浓度的浆料,经过预热器进行升温,经蒸汽加热后浆料被溶解成为一透明溶液,然后进入反应器进行有选择的催化加氢,反应后的物料在 5 台串联的结晶器中依次降温降压析出对苯二甲苯晶体,浆料则送入产品回收单元。在 PTA 生产过程中,连续结晶系统是由 5 台结晶器串联组成,主要用来获得满足一定指标要求的产品,如晶粒大小、产品纯度等。影响 PTA 粒径的影响因素很多,主要有浆料浓度、结晶器温度分布、结晶器中停留时间、搅拌器结构形状和搅拌强度以及溶剂的 pH 值、杂质等。通

常根据产品分析结果人工调节各结晶器操作参数,由于分析频率通常间隔较大(24 h 一次),缺乏产品粒径的实时定量信息,操作人员很难在较短时间内通过 5 台结晶器操作参数的定量调整来满足产品粒径要求。

2 自适应差分进化(ADE)算法

2.1 差分进化算法简述

差分进化算法最早由 Storn 等人在 1995 年提出,以解决复杂实型空间内的优化搜索问题。其基本思想是:在优化搜索过程中,设每代种群都包含 n 个个体,每一个个体是一个 D 维的参向量 $X_{i,G}$, $i = 0, 1, 2, \dots, NP - 1$ 。差分进化算法通过某种策略把种群中 2 个个体的向量差加权后,按一定的规则与第 3 个个体求和来产生新个体,即 $v_{i,G+1} = x_{r_1,G} + a \cdot (x_{r_2,G} - x_{r_3,G})$,其中 $r_1, r_2, r_3 \in [0, NP - 1]$,然后将新个体与当代种群中某个个体相比较。如果新个体的评判指标优于被比较的个体,则下一代就保留新个体取代旧个体。其算法流程如图 1 所示。

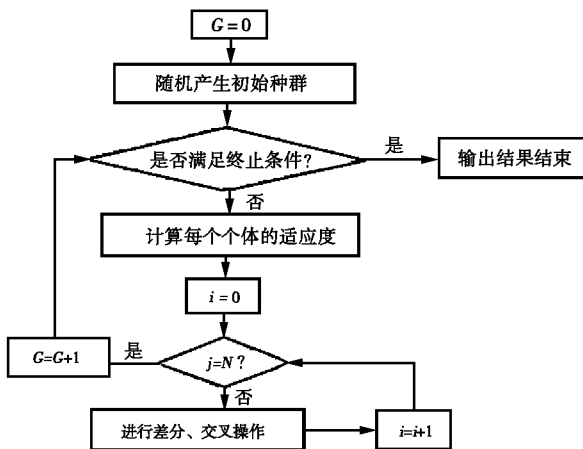


图 1 差分进化流程图

差分进化算法的实行策略一共有以下几种:

策略一:DE/RAND/1

对于个体 $X_{i,G}$, $i = 0, 1, 2, \dots, N - 1$, 根据下面的公式生成一个新的临时个体 V :

$$V = X_{r_1,G} + F * (X_{r_2,G} - X_{r_3,G})$$

其中, r_1, r_2, r_3 是区间 $[0, N - 1]$ 上随机选取的互不相同的整数,且不同于下标指数 i ; F 是 $[0, 2]$ 上一个实常数因子,其主要作用在于控制差分向量 $(X_{r_2,G} - X_{r_3,G})$ 的作用大小。 $X_{r_1,G}$ 是从种群中随机选取的,与 $X_{i,G}$ 无关。因此,DE/RAND/1 的含义就是随机挑选一个种群中的个体,并且仅仅有一个加

权的差分向量一起组成,产生一个新的临时个体。为了增加新种群的多样性还引入交叉操作,将差分产生的临时新个体和旧的个体进行交叉后,记交叉过的新个体为: $U = (u_1, u_2, \dots, u_D)^T$, 最终将 U 和 $X_{i,G}$ 进行比较,如果新的向量 U 的目标函数值优于 $X_{i,G}$,那么它在第 $G + 1$ 代中就取代原个体,否则 $X_{i,G}$ 仍然保留。

策略二:DE/BEST/1

基本上而言,策略二和策略一是相同的,差别在于用来生成临时新的向量时 $X_{r_1,G}$ 换成了当前一代中根据判定标准得出的最好的个体 $X_{best,G}$ 。其他交叉运算以及新一代个体的选择均不变。表达式如下: $V = X_{best,G} + F * (X_{r_2,G} - X_{r_3,G})$ 。

策略三:DE/RAND - to - BEST/1

这里用到了 2 个差分变量,表达式如下:

$$V = X_{i,G} + \lambda * (X_{best,G} - X_{i,G}) + F * (X_{r_2,G} - X_{r_3,G})$$

其中, λ 是附加控制变量,通过引入当前最好的个体向量来加强期望度。

2.2 自适应差分进化算法

在 DE 算法中,差分算子 F 与变异概率 CR 影响该算法性能,如收敛速度的极为重要的参数,通常需要经过多次试测来寻找某一问题的合适参数。为此,笔者引入了自适应参数调整机制,使得差分算子 F 与变异概率 CR 能够根据目标函数的变化进行自动调整。

对于优化问题:

$$\begin{aligned} \min & f(x), \\ \text{s.t.} & g_j(x) \geq 0, j = 1, 2, \dots, J; \\ & h_k(x) = 0, k = 1, 2, \dots, K \end{aligned}$$

当种群中各个体 $x_{i,G}$ 的函数值 $f(x_{i,G})$ 趋于一致或者趋于局部最优时,使得 F 和 CR 增加,而当群体函数值比较分散时,使得 F 和 CR 减小。同时,对于函数值小于群体平均目标值的个体,赋给较小的 F 和 CR ,使该解得以进入下一代;而低于群体平均目标值的个体,赋给较大的 F 和 CR ,使其被淘汰。因此,自适应的 F 和 CR 能够提供相对于某个解的最佳 F 和 CR ,能够在保持种群多样性的同时,保证遗传算法的收敛。其自适应调整机制如式(1)、(2)所示:

$$F_{\text{new}} = \begin{cases} F_1 - \frac{(F_1 - F_2)[f_{\max,G} - f(x_{i,G})]}{f_{\max,G} - f_{\text{avg},G}} & f(x_{i,G}) \geq f_{\text{avg},G} \\ F_1 & f(x_{i,G}) < f_{\text{avg},G} \end{cases} \quad (1)$$

$$CR_{new} = \begin{cases} CR_1 - \frac{(CR_1 - CR_2)[f_{max,G} - f(x_{i,G})]}{f_{max,G} - f_{avg,G}} & f(x_{i,G}) \geq f_{avg,G} \\ CR_1 & f(x_{i,G}) < f_{avg,G} \end{cases} \quad (2)$$

这里 F_1 、 CR_1 是上一步迭代过程的差分算子与变异率, F_2 、 CR_2 是群体中最小函数值个体对应的差分算子与变异率, 通常 $F_2 \in [0, 0.5]$, $CR_2 \in [0, 0.001]$ 。

3 ADE 算法在结晶过程优化中的应用

3.1 PTA 结晶过程平均粒径 (APS) 模型的建立

PTA 精制装置中, 从加氢反应器洗出的对苯二甲酸水溶液中没有晶体存在, 需要通过 5 台串联的结晶器去析出晶体, 确定粒度、粒度分布和产品的纯度。其中影响 PTA 精制产品粒度的因素很多, 如进料浓度、反应的负荷、浆料的流速、各级结晶温度和停留时间、搅拌强度以及干燥机的干燥速度等。通过变量相关性分析, 选择了 5 个变量作为模型的输入, 即: 第一结晶器与反应器的温差 x_1 和停留时间 x_2 , 第一、二结晶器的温差 x_3 和停留时间 x_4 以及前一时刻的平均粒径 x_5 来预测当前时刻的平均粒径。

这里采用了 $5 \times 7 \times 1$ 的前向神经网络结构形式实现对 APS 的建模。网络训练与拟合曲线如图 2、图 3 所示。

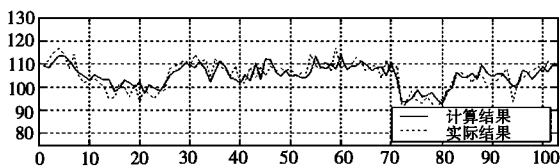


图 2 平均粒径神经网络模型训练曲线

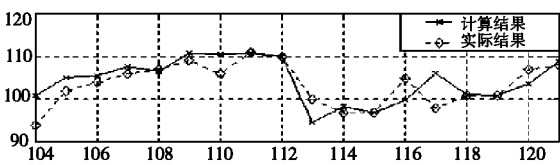


图 3 平均粒径神经网络模型预测曲线

在 APS 神经网络模型建立的基础上, 通过分别测试各输入变量在操作点附近对 APS 的影响, 来判断该模型的泛化能力 (外延性能)。在实际中, 物料的停留时间的长短可以用反应器中的液位高低来表示。停留时间延长, 则晶核具有较长的生长时间, 使得平均粒径增大。图 4、图 5 给出了模型中的停留时间 (结晶器液位) 外延性能测试曲线。

由迈尔斯过饱和理论指出, 溶液冷却速度与过

饱和程度成正比。而过饱和度越大, 晶核的生成量就多, 最终所得结晶的粒度就小。其中晶核首先在第一结晶器中生成, 然后在其他 4 台中成长为预期的晶体, 所以当第一结晶器的温度控制较低时, 晶核生成量多, 晶体粒度就可能小, 提高第一结晶器的温度以控制溶液的过饱和度以及晶核的生长速度, 则所得的晶体粒度较大。但当结晶器温度过高时, 溶液的过饱和度过大, 晶核的生成量虽然多, 但没有足够生长的晶体, 因此晶体粒度反而减小, 即 APS 的大小首先随温度升高而增大, 在拐点后随着温度的升高而降低。图 6、图 7 给出了模型中的结晶器温度的外延性能测试曲线。

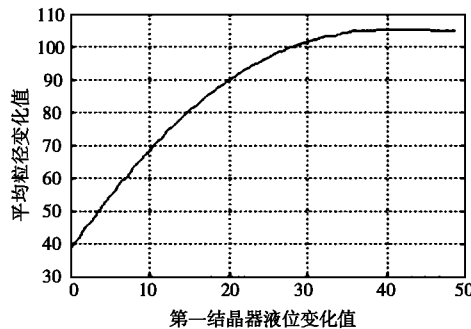


图 4 第一结晶器停留时间变化与平均粒径的关系

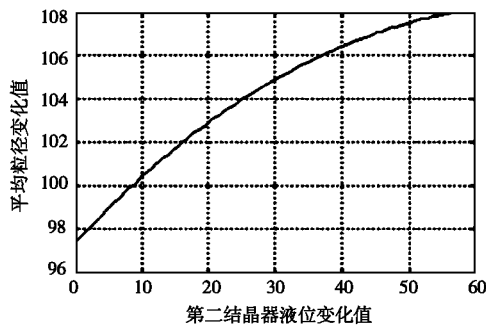


图 5 第二结晶器停留时间变化与平均粒径的关系

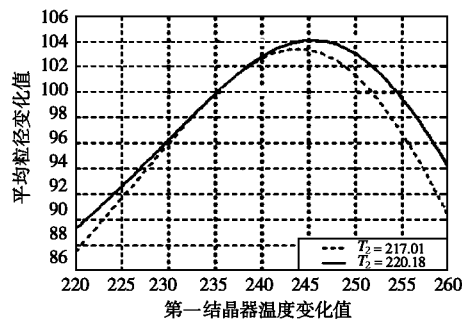


图 6 第一结晶器温度变化与平均粒径的关系

从图中可以看出, 随着停留时间的增加, 晶核生

长时间加长,平均粒径随之增大;同时结晶器温度的变化对平均粒径的影响是先增大后减小,这些曲线都是符合先验知识的,证明了该模型建立的有效性,可以以此为指导,进行 PTA 结晶过程的优化。

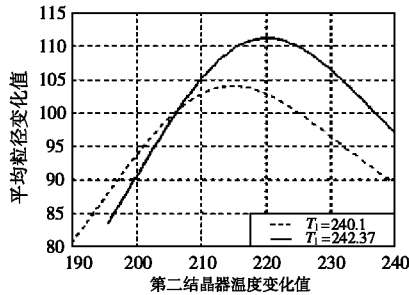


图 7 第二结晶器温度变化与平均粒径的关系

3.2 PTA 结晶过程的优化

3.2.1 调节变量的选择

根据 PTA 结晶过程的特点,即晶体的形成 90% 左右在第一、二结晶器中进行,前两个结晶器的操作条件对产品粒径的影响最大,为此第一、二结晶器的温度与停留时间是主要调节参数。其中,结晶器压力决定温度变化,结晶器液位直接影响停留时间。该优化过程的调整参数分别为第一结晶器的压力 P_1 、液位 L_1 和第二结晶器的压力 P_2 、液位 L_2 。

3.2.2 目标函数的确定

这里主要以控制 PTA 产品粒径稳定为主要指标,其约束条件是调节变量均应满足一定的工艺设定范围。其目标函数表达式为:

$$\begin{aligned} \min \quad & \| f_{APS}(x_i) - SP_{APS} \|, i = 1 \sim 5 \quad (3) \\ \text{s.t.} \quad & \Delta T_{1,\min} \leq x_1 \leq \Delta T_{1,\max}, \Delta T_{2,\min} \leq x_2 \leq \Delta T_{2,\max}, \\ & \tau_{1,\min} \leq x_3 \leq \tau_{1,\max}, \tau_{2,\min} \leq x_4 \leq \tau_{2,\max} \end{aligned}$$

其中 x_i 是模型中的第 i 个输入变量, SP_{APS} 为期望的粒径值。

3.2.3 优化过程的实施

这里采用 DE/RAND/1 优化策略,整个优化过程步骤为:

(1) 首先设置初始差分与变异算子 F 和 CR , 确定最大迭代代数 K , 当前代数 $G = 0$, 取初始可行解 $\vec{x}_{i,G}, \vec{x}_{i,G} = \{x_1, x_2, x_3, x_4\}_{i,G}, i = 1, 2, \dots, NP$; 在初始解中寻找最优个体矢量 \vec{x}_{optimal} 和 $\vec{x}_{\text{optimal},G}$ 。

(2) $G = G + 1$; 产生 3 个随机数 r_1, r_2, r_3 , 产生新向量 $\vec{V}_{i,G+1} = \vec{x}_{r_1,G} + a(\vec{x}_{r_2,G} - \vec{x}_{r_3,G}), i = 1, 2, \dots, NP$ 。

(3) 进行变异运算:

$$\vec{u}_{i,G+1} = \begin{cases} \vec{v}_{i,G+1} & \text{rand}() > CR \\ \vec{x}_{i,G} & \text{rand}() \leq CR \end{cases} \quad (4)$$

(4) 检验新向量 $\vec{u}_{i,G+1}$ 是否满足约束条件, 如果满足, 令 $\vec{u}_{i,G+1} = \vec{x}_{i,G}$; 否则, 转第 2 步。

(5) 新向量与原向量目标函数值的比较, 并以下式作为向量是否保留的判断依据:

$$\vec{x}_{i,G+1} = \begin{cases} \vec{u}_{i,G+1} & f_{APS}(\vec{u}_{i,G+1}) < f_{APS}(\vec{x}_{i,G}) \\ \vec{x}_{i,G} & f_{APS}(\vec{u}_{i,G+1}) \geq f_{APS}(\vec{x}_{i,G}) \end{cases} \quad (5)$$

(6) 根据式(1)、式(2)更新 $\vec{x}_{i,G+1}$ 的差分与变异算子 F 和 CR 。

(7) 比较当前群体的最优目标值 $\vec{x}_{\text{optimal},G}$ 与历代最优目标值 \vec{x}_{optimal} , 如果 $f_{APS}(\vec{x}_{\text{optimal},G}) < f_{APS}(\vec{x}_{\text{optimal}})$, 令 $\vec{x}_{\text{optimal}} = \vec{x}_{\text{optimal},G}$; 否则 $\vec{x}_{\text{optimal}} = \vec{x}_{\text{optimal}}$ 。

(8) 判断是否满足迭代终止条件: 如果当前代数到达最大允许迭代次数 $G = K$, 或满足优化目标 $abs(f_{APS} - SP_{APS}) \leq 0.5$, 则优化过程终止, \vec{x}_{optimal} 即为最优操作条件。否则, 转至第 2 步继续上述步骤。

5 结论

提出了一种自适应差分进化算法, 能够根据目标函数自动调整该算法中的关键参数——差分与变异算子 F 和 CR , 加快了整个优化过程的收敛速度; 并将其应用于实际工业装置的优化过程中, 获得了满意结果。

参考文献

- [1] Birbil S L. Stochastic Global Optimization Techniques[D]. Raleigh: North Carolina State University, 2002.
- [2] Medsker L R. [J]. Expert Systems with Applications, 1991, 2: 1-2.
- [3] De Jong K A. An Analysis of the Behavior of a Class of Genetic Adaptive Systems[D]. Ann Arbor: University of Michigan, 1975.
- [4] Storn R, Price K. Differential Evolution - A Simple and Efficient Adaptive Scheme for Global Optimization over Continuous Spaces[Z]. Technical Report TR-95-012, ICSI.
- [5] Srinivas M, Patnaik L M. [J]. IEEE Trans on SMC, 1994, 24(4): 656-667.
- [6] 孙静珉, 等. 聚酯工艺[M]. 北京: 化学工业出版社, 1985. ■