

เจเนติกอัลกอริทึมแบบปรับปรุงด้วยเทคนิคการสุ่มตัวอย่างสำหรับการสังเคราะห์ลำดับการกลั่น



นายเชิดพงษ์ ปรีชากุล

ศูนย์วิทยทรัพยากร

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต

สาขาวิชาวิศวกรรมเคมี ภาควิชาวิศวกรรมเคมี

คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย


ปีการศึกษา 2548

ISBN 974-53-2632-1

ลิขสิทธิ์ของจุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

T ๒๒๑๙๖๓๙

A MODIFIED GENETIC ALGORITHM WITH SAMPLING TECHNIQUE FOR DISTILLATION
SEQUENCE SYNTHESIS



Mr.Chirdpong Preechakul

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements
for the Degree of Master of Engineering Program in Chemical Engineering

Department of Chemical Engineering

Faculty of Engineering

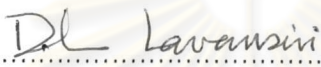
Chulalongkorn University

Academic Year 2005

ISBN 974-53-2632-1

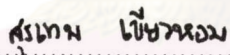
Thesis Title A MODIFIED GENETIC ALGORITHM WITH SAMPLING
 TECHNIQUE FOR DISTILLATION SEQUENCE SYNTHESIS
By Mr.Chirdpong Preechakul
Field of study Chemical Engineering
Thesis Advisor Soorathep Kheawhom, Ph.D.

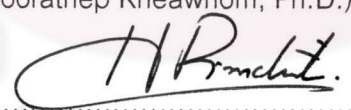
Accepted by the Faculty of Engineering, Chulalongkorn University in Partial
Fulfillment of the Requirements for the Master's Degree

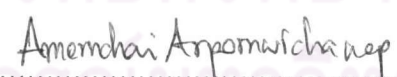

..... Dean of the Faculty of Engineering
(Professor Direk Lavansiri, Ph.D.)

THESIS COMMITTEE


..... Chairman
(Associate Professor Paisan Kittisupakorn, Ph.D.)


..... Thesis Advisor
(Soorathep Kheawhom, Ph.D.)


..... Member
(Assistant Professor Sarawut Rimdusit, Ph.D.)


..... Member
(Amornchai Apornvichanop, D.Eng.)

เจ็ดพงษ์ ปรีชากุล : เจเนติกอัลกอริทึมแบบปรับปรุงด้วยเทคนิคการสุ่มตัวอย่างสำหรับการสังเคราะห์ลำดับการกลั่น. (A MODIFIED GENETIC ALGORITHM WITH SAMPLING TECHNIQUE FOR DISTILLATION SEQUENCE SYNTHESIS) อ.ที่ปรึกษา: ดร.สุรเทพ เขียวหอม, 88 หน้า. ISBN 974-53-2632-1.

ปัญหาออปติไมเซชันทางวิศวกรรมเคมีโดยทั่วไปมักเกี่ยวข้องกับฟังก์ชันที่สลับซับซ้อน ซึ่งประกอบไปด้วยจุดต่ำสุดสัมพัทธ์ (local optimum point) เป็นจำนวนมาก ปัญหาในลักษณะนี้เป็นปัญหาที่ยากในการหาคำตอบ และคำตอบที่ได้รับอาจไม่ใช่ค่าที่จุดต่ำสุดสัมบูรณ์ (global optimum point) เจเนติกอัลกอริทึมคือวิธีการออปติไมเซชันที่นิยมนำมาใช้แก้ปัญหา เนื่องจากเป็นอัลกอริทึมที่สามารถแก้ปัญหาที่สลับซับซ้อนได้และง่ายในการนำมาประยุกต์ใช้ อย่างไรก็ตาม เจเนติกอัลกอริทึมมีข้อด้อยก็คือการลู่เข้าสู่คำตอบที่ช้า และคำตอบที่ได้รับอาจจะเป็นค่าที่จุดต่ำสุดสัมพัทธ์ไม่ใช่จุดต่ำสุดสัมบูรณ์ ซึ่งสาเหตุหลักของข้อด้อยประการหนึ่งนั้นเกิดจากประชากรเริ่มต้นที่ขาดความหลากหลาย

ดังนั้นในงานวิจัยนี้จึงได้เน้นไปที่การพัฒนาเจเนติกอัลกอริทึมด้วยเทคนิคการสุ่มตัวอย่างในการเลือกประชากรเริ่มต้นที่มีความหลากหลายเพื่อที่จะแก้ไขข้อด้อยและยังคงไว้ซึ่งข้อเด่นของเจเนติกอัลกอริทึม เทคนิคการสุ่มตัวอย่างที่นำมาประยุกต์ใช้ก็คือ Latin hypercube sampling (LHS), Faure sequence sampling (FSS), และ Hammersley sequence sampling (HSS) ประสิทธิภาพของอัลกอริทึมใหม่กับอัลกอริทึมเดิมถูกเปรียบเทียบในแง่ของค่าของคำตอบที่ได้รับกับความเร็วในการหาคำตอบ ผ่านการออปติไมซ์โจทย์ปัญหาทางออปติไมเซชันแบบต่างๆ รวมทั้งยังนำไปประยุกต์ใช้กับปัญหาการสังเคราะห์ลำดับการกลั่นของระบบเมทานอลกับน้ำ เพื่อหาลำดับการกลั่นและหาจุดดำเนินการที่เหมาะสมซึ่งทำให้ได้กำไรมากที่สุด จากผลการทดลองพบว่าด้วยค่าพารามิเตอร์เดียวกัน อัลกอริทึมที่เราพัฒนาขึ้นให้คำตอบดีกว่าอัลกอริทึมเดิม และ/หรือ สามารถลู่เข้าสู่คำตอบได้เร็วขึ้นกว่าอัลกอริทึมเดิมกว่า 4 เท่า

ภาควิชา.....วิศวกรรมเคมี.....ลายมือชื่อนิสิต.....เจ็ดพงษ์ ปรีชากุล
สาขาวิชา.....วิศวกรรมเคมี.....ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา.....สุรเทพ เขียวหอม
ปีการศึกษา.....2548.....

4770271021 : MAJOR CHEMICAL ENGINEERING

KEY WORD: GENETIC ALGORITHM / LATIN HYPERCUBE SAMPLING / FAURE SEQUENCE SAMPLING / HAMMERSLEY SEQUENCE SAMPLING

CHIRDPONG PREECHAKUL: A MODIFIED GENETIC ALGORITHM WITH SAMPLING TECHNIQUE FOR DISTILLATION SEQUENCE SYNTHESIS. THESIS ADVISOR: SOORATHEP KHEAWHOM, Ph.D., 88 pp. ISBN 974-53-2632-1.

A number of chemical engineering optimization problems generally involve highly nonlinear function, which contains numerous local optima in the feasible area. These problems are very difficult to solve and to obtain the global solution. Genetic algorithm (GA) is an optimization method widely used to solve complex optimization problems because GA can successfully solve these difficulties. Moreover, GA is easy to implement. However, GA has some shortcomings that are premature convergence and weak exploitation capabilities. The major reason of its drawbacks causes initial population lacking uniformity properties.

In this work, we develop a new efficient genetic-based optimization algorithm by introducing sampling techniques to select a good set of initial population. These are Latin hypercube sampling (LHS), Faure sequence sampling (FSS), and Hammersley sequence sampling (HSS). The performance of the proposed algorithms and a simple genetic algorithm (SGA) is compared in terms of solution quality and speed of convergence to the global optimum through several complex optimization problems and a case study. The case study involves distillation sequence synthesis of methanol/water system. The objective of this problem is to find the suitable sequence and operating points providing a maximum profit. From the results, with the same parameters, our proposed techniques provide a better solution than SGA and/or converge to the global solution more than four times as fast as SGA.

Department of....Chemical Engineering.....Student's signature.....

Field of studyChemical Engineering.....Advisor's signature.....

Academic year2005.....

Chirdpong Preechakul
Soorathep Kheawhom

ACKNOWLEDGEMENTS

No work of authorship is ever the accomplishment of one individual, and this thesis is no exception. The support is not limited only in my academic life, which the research work and writing this thesis were carried out, it also includes the support in some way, encouragement, or personal involvement during my private life. Thus, it is virtually impossible to mention all those people who have contributed to me and consequently made my life more enjoyable and happy than normal. Hence, in the first place, I would like to thank all these un-named individuals.

I am very grateful to my parents, Chalee and Nisa Preechakul, for their unconditional love and persistent support. I owe them a giant debt of gratitude. Thus, I am most of all my grateful to my parents, also my very first teacher, who has taught me to know a character. Without this support it would not be possible to prepare a work such as this.

I gratefully acknowledge my advisor Dr.Soorathep Kheawhom for his critical guidance and his firm support during years.

I would also thank all of the members of the Control and Systems Engineering Laboratory here in Chulalongkorn University. It has been nice to be here and work with them.

Finally, my appreciation goes to all those individuals who are (and also those who are not) mentioned and who contributed to my knowledge and understanding, and as such find their contribution reflected in my thesis.

TABLE OF CONTENTS

	PAGE
ABSTRACT (IN THAI).....	iv
ABSTRACT (IN ENGLISH).....	v
ACKNOWLEDGEMENTS.....	vi
TABLE OF CONTENTS.....	vii
LIST OF TABLES.....	x
LIST OF FIGURES.....	xi
CHAPTER	
I INTRODUCTION.....	1
1.1 Importance and Reason of Research.....	1
1.2 Objectives of Research.....	2
1.3 Scopes of Research.....	2
1.4 Contributions of Research.....	3
1.5 Structure of Thesis.....	3
II GENETIC ALGORITHM.....	5
2.1 Background to Genetic Algorithm (GA).....	5
2.2 The Procedure of GA.....	5
2.2.1 Chromosome Representation.....	6
2.2.2 Initialization.....	7
2.2.3 Evaluation Function.....	7
2.2.4 Selection Function.....	7
2.2.5 Crossover.....	9
2.2.6 Mutation.....	11
2.2.7 Termination.....	12
2.3 Example of Solving GA by Hand.....	13
2.4 Advantages of GA.....	17
2.5 Applications of GA.....	18
2.6 Summary.....	19
III THE IMPROVEMENT OF GA PERFORMANCE.....	20

3.1 Background to Improvement of GA Performance.....	20
3.2 Strategies for Improvement of GA Performance in This Work	21
3.3 Latin Hypercube Sampling (LHS).....	22
3.4 Low Discrepancy Sequence Sampling	24
3.4.1 Definition of Discrepancy	24
3.4.2 The Van Der Corput Sequence	25
3.4.3 Halton Sequence.....	27
3.4.4 Faure Sequence	28
3.4.5 Hammersley Sequence.....	31
3.5 Comparing Different Sampling Techniques	32
3.6 Summary	33
IV THE PROPOSED ALGORITHM.....	34
4.1 The Procedure of the Proposed Algorithm.....	34
4.2 Test Problems	35
4.2.1 Problem 1	36
4.2.2 Problem 2	38
4.2.3 Problem 3	40
4.2.4 Problem 4	42
4.2.5 Problem 5	44
4.2.6 Problem 6	46
4.3 Summary	48
V DISTILLATION OPTIMIZATION.....	49
5.1 Introduction	49
5.2 Fundamentals	50
5.2.1 The Equilibrium-Stage Concept.....	50
5.2.2 Vapor-liquid Equilibrium.....	52
5.2.3 K-values and Relative Volatility	53
5.2.4 Estimating the Relative Volatility from Boiling Point Data	55
5.2.5 Nonideal Mixtures.....	57
5.2.6 Material Balance on a Distillation Stage	61
5.2.7 Assumption about Constant Molar Flows	62

5.3 The Continuous Distillation Column.....	63
5.3.1 Material Balances.....	63
5.3.2 Energy Balances	68
5.4 Case Study.....	73
5.4.1 Problem Description.....	73
5.4.2 Model Formulation.....	76
5.4.3 Optimization Results	79
5.5 Summary	81
VI CONCLUSIONS AND FUTURE PROSPECTIVE.....	82
6.1 Conclusions	82
6.2 Future Prospective	82
REFERENCES	83
VITA	88



ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

LIST OF TABLES

	PAGE
Table 2.1 Operators used in each step for example of solving GA by hand.....	14
Table 2.2 Initial population and its $f(x)$ for example of solving GA by hand.....	14
Table 2.3 Roulette wheel selection for example of solving GA by hand	16
Table 2.4 Reproduction to the first generation for example of solving GA by hand.....	16
Table 2.5 GA application in the field of chemical engineering	18
Table 2.6 GA application in other fields	19
Table 3.1 Halton sequence for first 3 dimensions	28
Table 3.2 Faure sequence for first 3 dimensions (Base 3)	30
Table 3.3 Hammersley sequence for first 3 dimension	32
Table 4.1 Operators and parameters used in each step for all of test problems	35
Table 4.2 Test problems	35
Table 5.1 Antoine coefficients for selected substances.....	54
Table 5.2 Wilson equation parameters for selecting binary mixtures under isobaric conditions at 1 atm pressure.....	59
Table 5.3 Pure component liquid molar volumes	60
Table 5.4 Feed and column data.....	74
Table 5.5 Operators and parameters used in each step for the case study	79
Table 5.6 The optimal operating point of case study	81

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

LIST OF FIGURES

	PAGE
Figure 2.1 Procedure of GA	6
Figure 2.2 A simple function optimization example, the function $f(x) = x^2$ on the interval $[0, 31]$	13
Figure 3.1 Points in the unit square based on random and low discrepancy	25
Figure 3.2 Sample Points (100) on a unit square for various sampling	33
Figure 4.1 The proposed algorithm	34
Figure 4.2 Graph of the function $F_1(x)$	37
Figure 4.3 Comparison the performance of SGA, LHS-GA, FSS-GA, and HSS-GA: generation number versus minimum value of $F_1(x)$	37
Figure 4.4 Graph of the function $F_2(x)$	39
Figure 4.5 Comparison the performance of SGA, LHS-GA, FSS-GA, and HSS-GA: generation number versus minimum value of $F_2(x)$	39
Figure 4.6 Graph of the function $F_3(x)$	41
Figure 4.7 Comparison the performance of SGA, LHS-GA, FSS-GA, and HSS-GA: generation number versus minimum value of $F_3(x)$	41
Figure 4.8 Graph of the function $F_4(x)$ in 2 dimensions	43
Figure 4.9 Comparison the performance of SGA, LHS-GA, FSS-GA, and HSS-GA: generation number versus minimum value of $F_4(x)$	43
Figure 4.10 Graph of the function $F_5(x)$	45
Figure 4.11 Comparison the performance of SGA, LHS-GA, FSS-GA, and HSS-GA: generation number versus minimum value of $F_5(x)$	45
Figure 4.12 Graph of the function	47
Figure 4.13 Comparison the performance of SGA, LHS-GA, FSS-GA, and HSS-GA: generation number versus minimum value of $F_6(x)$	47
Figure 5.1 A distillation column.....	50
Figure 5.2 Equilibrium-stage concept.....	51
Figure 5.3 VLE for ideal binary mixture: $y = \alpha x / 1 + (\alpha - 1)x$	56

Figure 5.4 Distillation column section modeled as a set of connected equilibrium stages.	62
Figure 5.5 Combining the VLE and the operating line to compute mole fractions in a section of equilibrium stages	63
Figure 5.6 Stream labels and material balance envelopes for a simple column.....	66
Figure 5.7 Multi-effect distillation with forward integration	75
Figure 5.8 Multi-effect distillation with backward integration	75
Figure 5.9 Comparison the performance of SGA, LHS-GA, FSS-GA, and HSS-GA: generation number versus maximum value for multi-effect distillation problem.....	80



ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย