# เจเนติกอัลกอริทึมแบบปรับปรุงด้วยเทคนิคการสุ่มตัวอย่างสำหรับการสังเคราะห์ลำดับการกลั่น

นายเชิดพงษ์ ปรีชากุล

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิศวกรรมศาสตรมหาบัณฑิต
สาขาวิชาวิศวกรรมเคมี ภาควิชาวิศวกรรมเคมี
คณะวิศวกรรมศาสตร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
ปีการศึกษา 2548

ISBN 974-53-2632-1

ลิขสิทธิ์ของจุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

I22219639

# 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.)

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

เชิดพงษ์ 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.

ปัญหาออพติไมเซชันทางวิศวกรรมเคมีโดยทั่วไปมักเกี่ยวข้องกับฟังก์ชันที่สลับซับซ้อน ซึ่งประกอบไปด้วยจุดต่ำสุดสัมพัทธ์ (local optimum point) เป็นจำนวนมาก ปัญหาในลักษณะนี้เป็นปัญหาที่ยากในการหาคำตอบ และคำตอบที่ได้รับอาจไม่ใช่ค่าที่จุดต่ำสุดสัมบูรณ์ (global optimum point) เจเนติกอัลกอริทึมคือวิธีการออพติไมเซชันที่นิยมนำมาใช้แก้ปัญหา เนื่องจากเป็นอัลกอริทึมที่สามารถแก้ปัญหาที่สลับซับซ้อนได้และง่ายในการนำมาประยุกต์ใช้ อย่างไรก็ตาม เจเนติกอัลกอริทึมมีข้อด้อยก็คือการลู่เข้าสู่คำตอบที่ช้า และคำตอบที่ได้รับอาจจะเป็นค่าที่จุดต่ำสุดสัมพัทธ์ไม่ใช่จุดต่ำสุดสัมบูรณ์ ซึ่งสาเหตุหลักของข้อด้อยประการหนึ่งนั้นเกิดจากประชากรเริ่มต้นที่ขาดความหลากหลาย

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

ภาควิชา.....วิศวกรรมเคมี.....ลายมือชื่อนิสิต.....เชิดพงษ์ 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.....Chirdpong Preechakul.....

Field of study ....Chemical Engineering.....Advisor's signature.....Soorathep Kheawhom.....

Academic year .....2005.....

# 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.

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

# 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

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

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