

**ЧИСЛЕННЫЙ АЛГОРИТМ ПОИСКА ОПТИМАЛЬНЫХ УСЛОВИЙ
ПРОТЕКАНИЯ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ***Е.В. Антипина¹, С.А. Мустафина¹, А.Ф. Антипин¹*¹Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, Российская Федерация

В статье рассматривается задача оптимального управления каталитической реакцией с ограничениями, в которой параметрами управления являются температура, продолжительность реакции и начальные концентрации компонентов реакционной смеси. На значения управляющих параметров наложены ограничения. Для численного решения задачи сформулирован алгоритм на основе метода дифференциальной эволюции. Особенностью алгоритма является учет физико-химических особенностей задачи. Алгоритм позволяет осуществлять одновременный поиск оптимальных значений параметров управления, являющихся функцией и константами. В качестве параметра управления-функции выступает температура реакции, которая ищется в классе кусочно-постоянных функций. Проведены численные эксперименты для каталитической реакции получения бензилиденбензиламина. В результате применения алгоритма вычислены значения управляющих параметров, при которых достигается наибольшая концентрация целевого продукта реакции – бензилиденбензиламина. Проведено сравнение полученного решения с решением, вычисленным с методом вариаций в пространстве управлений. В результате сравнения показана меньшая ресурсозатратность разработанного алгоритма.

Ключевые слова: оптимальное управление; каталитическая реакция; дифференциальная эволюция; эволюционные вычисления; кинетическая модель.

Введение

Применение методов математического моделирования для расчета и анализа процессов химической промышленности позволяет определять оптимальные условия их ведения. Оптимизация каталитических процессов является ключевым аспектом в химической инженерии и промышленной химии, так как она позволяет улучшить эффективность процессов и снизить материальные затраты. Поэтому разработка математических методов определения оптимальных значений параметров каталитических процессов и программных средств, позволяющих проводить виртуальные эксперименты с различными условиями и экономить время и ресурсы, является актуальной задачей и представляет научный интерес.

Оптимизация каталитических процессов является комплексной задачей, включающей в себя подбор оптимальных условий для проведения реакций, подбор наиболее эффективных катализаторов и их концентраций, управление временем, температурой, скоростью подачи сырья. Для определения оптимальных условий используются различные математические методы.

Линейное программирование применяется для решения таких задач химической технологии, как рациональное распределение сырья между различными процессами, определение наиболее экономичного способа производства химической продукции и др. [1, 2]. Для решения задач оптимального управления каталитическими процессами применение методов линейного программирования ограничено ввиду нестационарности процессов и нелинейности их математического описания.

Применение аналитических методов для решения задач оптимизации, таких как принцип максимума Понтрягина, вариационные методы [3, 4] и др., при достаточно большом числе независимых переменных сопряжено с рядом трудностей вычислительного характера, связанных с технологическими особенностями химических процессов.

В тех случаях, когда химический процесс можно разбить на последовательность взаимосвязанных этапов, для поиска оптимальных значений параметров можно использовать динамическое программирование [5]. Однако для сложных химических реакций, описываемых системами дифференциальных уравнений высокой размерности, использовать его нецелесообразно ввиду ресурсоемких вычислений.

В настоящее время для решения сложных оптимизационных задач применяются методы эволюционных вычислений [6–8], одним из которых является метод дифференциальной эволюции [9–11]. При использовании данного метода не требуется вычислять градиенты функции, а благодаря механизмам мутации и скрещивания он способен преодолевать попадание в локальный экстремум.

В задачах оптимального управления каталитическими реакциями параметры управления могут представляться в виде констант (например, продолжительность реакции, мольное соотношение реагентов) или в виде функций (например, температура, давление). Целью работы является разработка численного алгоритма, позволяющего осуществлять одновременный поиск оптимальных значений управляющих параметров-функций и параметров-констант.

1. Постановка задачи

Пусть динамика состояния каталитической реакции определяется системой дифференциальных уравнений:

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x(t), T(t)) \quad (1)$$

с начальными условиями

$$x_j(0) = x_j^0, \quad j = \overline{1, n}, \quad (2)$$

где $x(t) = (x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t))^T$ – вектор фазовых переменных, $t \in [0, t_{end}]$ – время, $T(t)$ – температура, $f(t, x(t), T(t)) = (f_1(t, x(t), T(t)), f_2(t, x(t), T(t)), \dots, f_n(t, x(t), T(t)))^T$ – вектор-функция, непрерывная вместе со своими частными производными.

Начальные условия (2) выражают состав реакционной смеси в начальный момент времени $t = 0$.

Пусть концентрации реагентов выражены в мольных долях. Тогда их значения связаны соотношением:

$$\sum_{j=1}^n x_j(0) = 1. \quad (3)$$

В качестве управляющих параметров рассмотрим температуру реакции $T(t)$, длительность процесса t_{end} и начальные концентрации веществ в исходной смеси $x(0) = (x_1(0), x_2(0), \dots, x_n(0))$. Пусть на их значения наложены ограничения:

$$T_{min} \leq T(t) \leq T_{max}, \quad t \in [0, t_{end}], \quad (4)$$

$$t_{min} \leq t_{end} \leq t_{max}, \quad (5)$$

$$0 \leq x_j(0) \leq 1, \quad j = \overline{1, n}. \quad (6)$$

Требуется для реакции определить температурный режим $T^*(t)$, время контакта веществ t_{end}^* , вектор начальных концентраций реагентов $x^*(0) = (x_1^*(0), x_2(0), \dots, x_n^*(0))$, удовлетворяющие условиям (3) – (6) и обеспечивающие достижение максимального значения целевым функционалом

$$G(T^*(t), t_{end}^*, x^*(0)) = g(x(t_{end}^*)), \quad (7)$$

где $g(x(t_{end}^*))$ – непрерывно-дифференцируемая функция, $x(t_{end}^*)$ – вектор концентраций веществ в конце реакции.

2. Алгоритм определения оптимальных значений параметров каталитической реакции

Сформулируем численный алгоритм для определения значений параметров протекания каталитической реакции, используя метод дифференциальной эволюции.

Набор потенциальных решений оптимизационной задачи, называемый популяцией векторов-индивидов, подвергается воздействию операторов отбора, мутации и кроссовера. Затем рассматривается возможность перехода модифицированного вектора в новую популяцию.

Будем искать параметр управления $T(t)$ в классе кусочно-постоянных функций управления. На интервале $[0, t_{end}]$ введем сетку дискретизации с шагом $h = \frac{t_{end}}{m}$ и узлами t_0, t_1, \dots, t_m , такими, что $t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_m$, $t_0 = 0$, $t_m = t_{end}$, в которых будем искать значения $T(t)$. Для получения промежуточных значений температуры используем кусочно-постоянную аппроксимацию

$$T(t) = T(t_k) = T_k, \quad t \in [t_k, t_{k+1}], \quad k = \overline{0, m-1}.$$

Введем в рассмотрение множество векторов-индивидов (особей):

$$v_i = (T_{i0}, T_{i1}, \dots, T_{im-1}, t_{endi}, x_{i1}(0), \dots, x_{in}(0)), \quad i = \overline{1, s},$$

каждый из которых представляет собой возможное решение задачи. Совокупность всех векторов v_i ($i = \overline{1, s}$) является популяцией. Введем обозначение для элементов вектора-индивида: $v_i = (v_{i0}, v_{i1}, \dots, v_{ir}) = (v_{ij})$, $j = \overline{0, r}$, где

$$v_{ij} = \begin{cases} T_{ij}, & j = \overline{0, m-1}, \\ t_{endi}, & j = m, \\ x_i(0), & j = \overline{m+1, r}, \end{cases} \quad r = m + n + 1.$$

В качестве фитнес-функции, определяющей приспособленность каждой особи, выступает целевой функционал (7). Особь v_k является более приспособленной, чем особь v_l , если $G(v_k) > G(v_l)$.

Поскольку вектор-индивид содержит значения нескольких параметров управления, то введем в алгоритм решения задачи (1) – (7) операцию нормировки для перехода к одинаковым ограничениям для всех компонентов вектора.

Алгоритм решения задачи (1) – (7) состоит из следующих шагов.

Шаг 1. Сформировать начальную популяцию векторов v_i ($i = \overline{1, s}$) путем заполнения случайными значениями из диапазонов, задаваемых неравенствами (4) – (6):

$$v_{ij} = \begin{cases} T_{min} + \alpha_{ij}(T_{max} - T_{min}), & j = \overline{0, m-1}, \\ t_{min} + \alpha_{ij}(t_{max} - t_{min}), & j = m, \\ \alpha_{ij}, & j = \overline{m+1, r}, \end{cases}$$

где $\alpha_{ij} \in [0, 1]$ – случайное число.

Установить счетчик итераций $z = 1$.

Шаг 2. Для каждого вектора v_i ($i = \overline{1, s}$) проверить выполнение условия равенства суммарной концентрации веществ единице (условие (3)). Если $\sum_{j=m+1}^r v_{ij} = 1$ ($i = \overline{1, s}$), то перейти на шаг 3, иначе пересчитать компоненты вектора v_i , начиная с $m+1$, так, чтобы они в сумме дали единицу:

$$v_{ij} = \frac{v_{ij}}{\sum_{k=m+1}^r v_{ik}}, \quad j = \overline{m+1, r}.$$

Шаг 3. Для каждого вектора v_i ($i = \overline{1, s}$) рассчитать значение фитнес-функции (7).

Шаг 4. Вычислить компоненты нормированного вектора-индивида \tilde{v}_i ($i = \overline{1, s}$) по формулам:

$$\tilde{v}_{ij} = \begin{cases} (v_{ij} - T_{min}) / (T_{max} - T_{min}), & j = \overline{0, m-1}, \\ (v_{ij} - t_{min}) / (t_{max} - t_{min}), & j = m, \\ v_{ij}, & j = \overline{m+1, r}, \end{cases}$$

После выполнения шага 4 значения компонентов векторов \tilde{v}_i удовлетворяют условию:

$$0 \leq \tilde{v}_{ij} \leq 1, \quad i = \overline{1, s}, \quad j = \overline{0, r}. \quad (8)$$

Шаг 5. Установить вектор-мишень $\tilde{v}_{mish} = \tilde{v}_1$.

Шаг 6. Среди векторов-индивидов, за исключением вектора-мишени \tilde{v}_{mish} , случайным образом выбрать четыре вектора $\tilde{v}_k, \tilde{v}_l, \tilde{v}_p, \tilde{v}_q$.

Шаг 7. Из оставшихся векторов-индивидов найти вектор \tilde{v}_{max} , которому соответствует наибольшее значение функции приспособленности.

Шаг 8. Из отобранных векторов создать вектор-мутант, рассчитываемый по формуле

$$\tilde{v}_{mut} = \tilde{v}_{max} + \mu(\tilde{v}_k + \tilde{v}_l - \tilde{v}_p - \tilde{v}_q),$$

где $\mu \in [0, 5; 1]$ – параметр мутации, задаваемый пользователем [13].

Шаг 9. Проверить условие выхода значения компоненты вектора-мутанта за границы допустимого диапазона (8). Если $\tilde{v}_{mutj} < 0$ или $\tilde{v}_{mutj} > 1$, то $\tilde{v}_{mutj} = \beta$, где $\beta \in [0, 1]$ – случайное число.

Шаг 10. Проверить выполнение условия (3) для компонентов вектора-мутанта \tilde{v}_{mut} , являющихся начальными концентрациями. Если условие (3) не выполнено, то осуществить пересчет значений компонентов вектора-мутанта по формуле:

$$\tilde{v}_{mutj} = \frac{\tilde{v}_{mutj}}{\sum_{k=m+1}^r \tilde{v}_{mutk}}, \quad j = \overline{m+1, r}.$$

Шаг 11. Сгенерировать пробный вектор \tilde{v}_{prob} :

$$\tilde{v}_{probj} = \begin{cases} \tilde{v}_{mutj}, & \lambda_j \leq \rho, \\ \tilde{v}_{mishj}, & \lambda_j > \rho, \end{cases} \quad j = \overline{0, r},$$

где $\lambda_j \in [0, 1]$ – случайное число, $\rho \in [0, 1]$ – параметр скрещивания [13].

Шаг 12. Проверить выполнение условия (3) для последних n компонентов пробного вектора \tilde{v}_{prob} , которые являются значениями концентраций взаимодействующих веществ.

Если $\sum_{j=m+1}^r \tilde{v}_{probj} \neq 1$, то пересчитать значения последних n компонентов пробного вектора, чтобы условие (3) выполнялось:

$$\tilde{v}_{probj} = \frac{\tilde{v}_{probj}}{\sum_{k=m+1}^r \tilde{v}_{probk}}, \quad j = \overline{m+1, r}.$$

Шаг 13. Вычислить значения управляющих параметров пробного вектора:

$$v_{probj} = \begin{cases} T_{min} + \tilde{v}_{probj}(T_{max} - T_{min}), & j = \overline{0, m-1}, \\ t_{min} + \tilde{v}_{probj}(t_{max} - t_{min}), & j = m, \\ \tilde{v}_{probj}, & j = \overline{m+1, r}. \end{cases}$$

Шаг 14. Для пробного вектора v_{prob} вычислить значение фитнес-функции (7).

Шаг 15. Если вектор v_{prob} является более приспособленным, чем вектор \tilde{v}_{mish} , то вектор-мишень заменить вектором \tilde{v}_{prob} . Иначе перейти к шагу 16.

Шаг 16. Если в качестве вектора-мишени рассмотрены все векторы текущей популяции, то перейти на шаг 17. Иначе $\tilde{v}_{mish} = \tilde{v}_{mish+1}$ и перейти на шаг 6.

Шаг 17. Завершить вычисления, если на протяжении d поколений выполнены условия ($z \geq 2$):

$$\sqrt{\sum_{j=0}^r (\tilde{v}_{ij}(z) - \tilde{v}_{ij}(z-1))^2} < \varepsilon, \quad (9)$$

$$|G(v_i(z)) - G(v_i(z-1))| < \varepsilon, \quad (10)$$

где $\tilde{v}_i(z)$, $\tilde{v}_i(z-1)$ – векторы текущей и предыдущей популяций ($i = \overline{1, s}$), ε – параметр завершения поиска решения. Иначе увеличить счетчик итераций z на 1 и перейти к шагу 5.

Шаг 18. Выбрать из последней популяции вектор \tilde{v}_i с наибольшим значением фитнес-функции (7) и вычислить значения параметров:

$$v_{ij} = \begin{cases} T_{min} + \tilde{v}_{ij}(T_{max} - T_{min}), & j = \overline{0, m-1}, \\ t_{min} + \tilde{v}_{ij}(t_{max} - t_{min}), & j = m, \\ \tilde{v}_{ij}, & j = m+1, r. \end{cases}$$

Вектор v_i является приближенным решением задачи (1) – (7).

Разработанный алгоритм учитывает ряд особенностей, связанных с физико-химическим смыслом задачи оптимального управления (1) – (7):

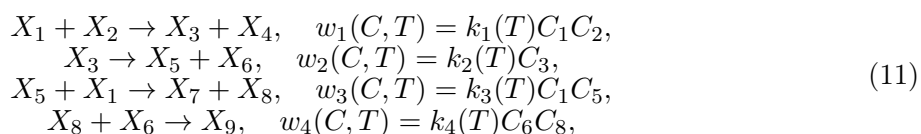
1) на этапе формирования начальной популяции предусмотрен пересчет значений начальных концентраций в случае нарушения условия (3) (шаг 2);

2) на этапе мутации проверяется условие выхода значений компонентов вектора-мутанта за границы допустимого диапазона (шаг 9);

3) осуществляется проверка выполнения условия (3) для вектора-мутанта и пробного вектора, и производится пересчет значений их компонентов в случае нарушения условия равенства суммарной концентрации единице (шаги 10, 12).

3. Вычислительный эксперимент

Найдем решение задачи оптимального управления реакцией синтеза бензилиденбензиламина под действием $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, математическое описание которой разработано в лаборатории математической химии Института нефтехимии и катализа РАН. Схема и кинетические уравнения стадий рассматриваемой реакции имеют вид [14]:



где X_1 – бензиламин, X_2 – четыреххлористый углерод, X_3 – хлорбензиламин, X_4 – хлороформ, X_5 – 1-фенилметанимин, X_6 – хлористый водород, X_7 – бензилиденбензиламин, X_8 – аммиак, X_9 – хлористый аммоний, C_i – значение концентрации i -го вещества (моль/л, $i = \overline{1, 9}$), k_j – константа скорости j -й стадии реакции (л/(моль·ч) для $j = 1, 3, 4$; 1/ч для $j = 2$), рассчитываемая исходя из уравнения Аррениуса:

$$k_j(T) = k_0 \exp \left(- \frac{E_j}{RT} \right),$$

где k_0 – предэкспоненциальный множитель (л/(моль·ч) для $j = 1, 3, 4$; 1/ч для $j = 2$), E_j – значение энергии активации j -й стадии (Дж/моль), T – температура (К), R – универсальная газовая постоянная (8,31 Дж/(моль·К)).

Математическое описание реакции (11) представляется системой [14]:

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{F_i(x, T) - x_i F_n(x, T)}{N}, \quad F_i = \sum_{j=1}^4 \nu_{ij} W_j, \quad i = \overline{1, 9}, \quad (12)$$

$$\frac{dN}{dt} = F_n(x, T) = \frac{1}{V} \sum_{j=1}^4 W_j \sum_{i=1}^9 \nu_{ij}, \quad (13)$$

с начальными условиями:

$$x_i(0) = x_i^0, \quad i = \overline{1, 9}, \quad N(0) = 1, \quad (14)$$

где x_i – концентрация i -го вещества, мольная доля ($i = \overline{1, 9}$); $N = C/C_0$ – относительное изменение числа молей реакционной среды, C и C_0 – суммарная концентрация веществ и

ее начальное значение, моль/л; (ν_{ij}) – матрица стехиометрических коэффициентов ($i = \overline{1,9}$, $j = \overline{1,4}$); $W_j = w_j/C_0$ – приведенная скорость j -й стадии реакции, 1/ч; V – объем реакционного пространства.

Значения кинетических параметров реакции (11) приведены в работе [14].

Исходными веществами реакции (11) являются X_1 и X_2 . Поэтому значения их концентраций в начале реакции должны удовлетворять условиям:

$$0 < x_1(0) < 1, \quad 0 < x_2(0) < 1, \quad (15)$$

$$x_1(0) + x_2(0) = 1. \quad (16)$$

Концентрации остальных веществ:

$$x_i(0) = 0, \quad i = \overline{3,9}.$$

На значения температуры и времени протекания реакции наложены ограничения:

$$285\text{K} \leq T(t) \leq 373\text{K}, \quad t \in [0, t_{\text{end}}], \quad (17)$$

$$0,5\text{ч} \leq t_{\text{end}} \leq 8\text{ч}. \quad (18)$$

Требуется найти температурный режим $T^*(t)$, продолжительность реакции t_{end}^* и начальные концентрации реагентов $x_1^*(0)$, $x_2^*(0)$, удовлетворяющие условиям (15) – (18), при которых достигается наибольшая концентрация бензилиденбензиламина:

$$G(T^*(t), t_{\text{end}}^*, x^*(0)) = x_7(t_{\text{end}}^*) \rightarrow \max. \quad (19)$$

Решение задачи (11) – (19) найдено с помощью разработанного алгоритма со следующими параметрами: $\mu = 0,7$, $\rho = 0,8$, $d = 5$, $\varepsilon = 10^{-3}$. Установлено, что наибольшую концентрацию бензилиденбензиламина, равную 0,345 мольных долей, можно получить при $t_{\text{end}}^* = 8$ ч и начальных концентрациях реагентов (мольная доля):

$$x_1^*(0) = 0,688, \quad x_2^*(0) = 0,312. \quad (20)$$

При этом необходимо соблюдать температурный режим, показанный на рис. 1.

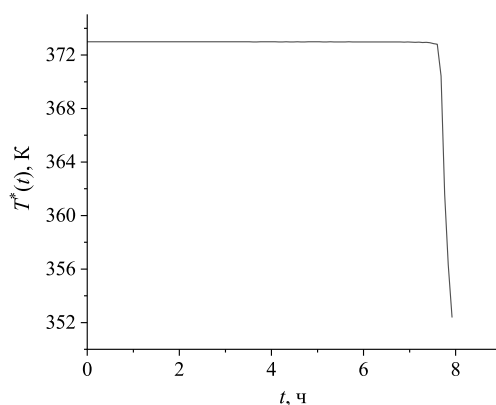


Рис. 1. Оптимальный температурный профиль

На рис. 2 приведено изменение концентраций во времени бензилиденбензиламина и исходных веществ (бензиламина и четыреххлористого углерода). На рис. 3 показаны значения концентрации бензилиденбензиламина, вычисленные при допустимых значениях начальной концентрации бензиламина от 0,1 до 0,9 мольных долей с шагом 0,2 мольные доли, для продолжительности реакции от 0,5 до 8 ч с шагом 1,5 ч и постоянной температуре, равной 373 К. Для указанного изотермического режима при начальных концентрациях реагентов $x_1(0) = x_2(0) = 0,5$ мольных долей и продолжительности реакции, равной 8 ч, достигается наибольшее значение концентрации бензилиденбензиламина, равное 0,176 мольных долей.

На рис. 4 представлены результаты решения системы дифференциальных уравнений, полученные при начальных условиях (20), постоянной температуре, задаваемой значениями из промежутка (17) с шагом 22 К, и некоторых допустимых значениях длительности реакции. В этом случае наибольшее значение целевого функционала (19), равное 0,171 мольных долей, достигается при $T = 373$ К и $t_{end} = 8$ ч. Наибольшее значение концентрации бензилиденбензиламина, найденное при варьировании концентрации бензиламина и постоянной температуры ($t_{end} = 8$ ч) составляет 0,176 мольных долей (рис. 5).

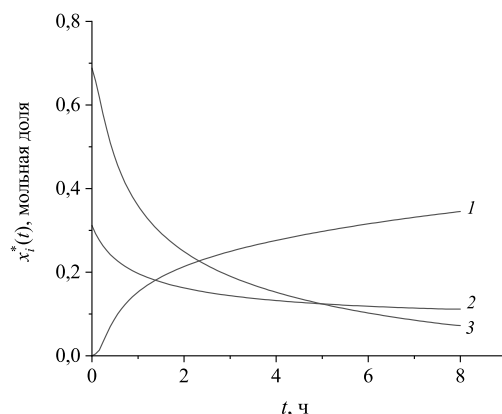


Рис. 2. Динамика концентраций веществ: 1 – X_7 , 2 – X_2 , 3 – X_1

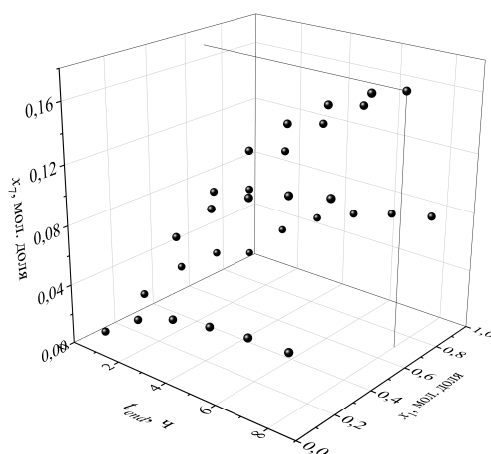


Рис. 3. Зависимость концентрации бензилиденбензиламина от начального состава реакционной смеси и времени протекания реакции

Результаты приведенных расчетов показывают, что рассчитанные наибольшие значения концентраций бензилиденбензиламина меньше значения его концентрации, найденного при вычисленных оптимальных значениях управляющих параметров.

Решение задачи (11) – (19) также найдено с помощью метода вариаций в пространстве управлений [15]. В качестве начального приближения решения задачи заданы значения управляющих параметров: $T(t) = 329$ К, $t_{end} = 4$ ч, $x_1(0) = x_2(0) = 0,5$ мольных долей. Задача решена с шагом 0,1 К для температуры, с шагом 0,1 ч для времени реакции и с шагом 0,001 мольных долей для начальных концентраций. Получено наибольшее значение концентрации бензилиденбензиламина, равное 0,335 мольных долей при $t_{end}^* = 8$ ч и $x_1^*(0) = 0,676$ мольных долей, $x_2^*(0) = 0,324$ мольных долей. Структура оптимальной температурной кривой процесса близка к температурному профилю, рассчитанному с помощью алгоритма дифференциальной эволюции. Количество обращений к целевому функционалу при решении задачи с помощью разработанного алгоритма составило 2131, а при использовании метода вариаций – 10232. Поэтому для поиска оптимальных значений параметров

реакции получения бензилиденбензиламина целесообразно применять разработанный алгоритм.

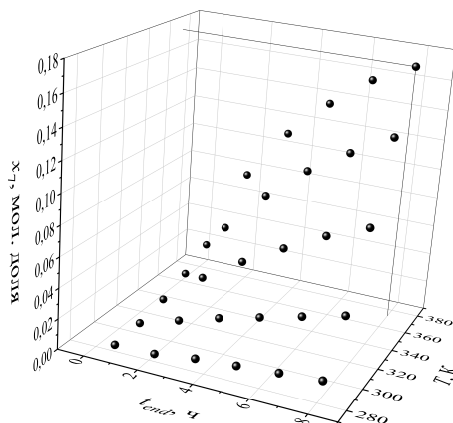


Рис. 4. Зависимость концентрации бензилиденбензиламина от температуры реакции и ее продолжительности

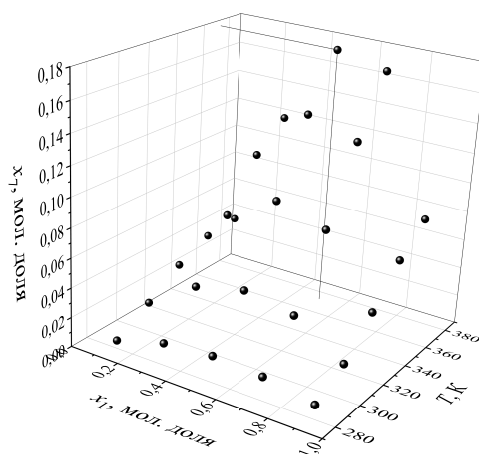


Рис. 5. Зависимость концентрации бензилиденбензиламина от начального состава реакционной смеси и температуры реакции

Закключение

Таким образом, разработанный алгоритм позволяет определять оптимальные значения параметров каталитической реакции. Алгоритм сочетает в себе возможность поиска параметров управления, являющихся функцией (температура реакции) и константами (время реакции, оптимальные начальные концентрации веществ). Алгоритм основан на применении метода дифференциальной эволюции и учитывает физико-химические особенности задачи оптимального управления каталитической реакцией. Проведен вычислительный эксперимент для реакции получения бензилиденбензиламина, в результате которого определены температурный режим, продолжительность реакции и набор начальных концентраций реагентов, при которых достигается наибольшая концентрация целевого продукта реакции – бензилиденбензиламина. Сравнение полученных результатов решения оптимизационной задачи с решением, рассчитанным методом вариаций в пространстве управлений, подтверждает корректную работу алгоритма. При этом вычислительные затраты разработанного алгоритма ниже, по сравнению с методом вариаций. Разработанный алгоритм можно применять для каталитических реакций с целью определения стратегии управления процессом, не прибегая к проведению лабораторного эксперимента.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-21-00186, <https://rscf.ru/project/24-21-00186/>.

Литература

1. Charitopoulos, V.M. Multi-Parametric Mixed Integer Linear Programming under Global Uncertainty / V.M. Charitopoulos, L.G. Papageorgiou, V. Dua // *Computers and Chemical Engineering*. – 2018. – V. 116. – P. 279–295.
2. Charitopoulos, V.M. Closed-Loop Integration of Planning, Scheduling and Multi-Parametric Nonlinear Control / V.M. Charitopoulos, L.G. Papageorgiou, V. Dua // *Computers and Chemical Engineering*. – 2019. – V. 122. – P. 172–192.
3. Шатхан, Ф.А. Применение принципа максимума к задачам оптимизации параллельных химических реакций / Ф.А. Шатхан // *Автоматика и телемеханика*. – 1964. – Т. 25, № 3. – С. 368–373.
4. Xuepu Cao. Multi-Objective Optimization Method for Enhancing Chemical Reaction Process / Xuepu Cao, Shengkun Jia, Yiqing Luo, Xiangang Yuan, Zhiwen Qi, Kuo-Tsong Yu // *Chemical Engineering Science*. – 2019. – V. 195. – P. 494–506.
5. Fu Kaixin. Iterative Unit-Based Adaptive Dynamic Programming with Application to Fluid Catalytic Cracker Unit / Kaixin Fu, Yuanyuan Zou, Shaoyuan Li // *2019 Chinese Automation Congress (CAC)*. – 2019. – P. 5010–5015.
6. Трокоз, Д.А. Метод параметрической оптимизации для широких нейронных сетей с использованием генетических алгоритмов / Д.А. Трокоз // *Известия Самарского научного центра Российской академии наук*. – 2021. – Т. 23, № 2. – С. 51–56.
7. Карпенко, А.П. Эволюционные операторы популяционных алгоритмов глобальной оптимизации / А.П. Карпенко // *Математика и математическое моделирование*. – 2018. – № 1. – С. 59–89.
8. Антипина, Е.В. Алгоритм решения задачи оптимального управления химико-технологическим процессом с терминальными ограничениями / Е.В. Антипина, С.А. Мустафина, А.Ф. Антипин, Н.Д. Морозкин // *Инженерные технологии и системы*. – 2022. – Т. 32, № 3. – С. 410–422.
9. Пупков, К.А. Алгоритм дифференциальной эволюции для задач технического проектирования / К.А. Пупков, В.А. Феоктистов // *Информационные технологии*. – 2004. – № 8. – С. 25–31.
10. Антипина, Е.В. Численный алгоритм идентификации кинетической модели химической реакции / Е.В. Антипина, С.А. Мустафина, А.Ф. Антипин // *Вестник технологического университета*. – 2019. – Т. 22, № 9. – С. 13–17.
11. Mohamed, A.W. Adaptive Guided Differential Evolution Algorithm with Novel Mutation for Numerical Optimization / A.W. Mohamed, A.K. Mohamed // *International Journal of Machine Learning and Cybernetics*. – 2019. – № 10. – P. 253–277.
12. Ковалевич, А.А. Исследование стохастических алгоритмов оптимизации для применения в имитационном моделировании систем / А.А. Ковалевич, А.И. Якимов, Д.М. Албекират // *Информационные технологии*. – 2011. – № 8. – С. 55–60.
13. Storn, R. Differential Evolution – A Simple and Efficient Heuristic for Global Optimization over Continuous Spaces / R. Storn, K. Price // *Journal of Global Optimization*. – 1997. – № 11. – P. 341–359.
14. Ахметов, И.В. Математическое моделирование и оптимизация реакций синтеза ароматических соединений / И.В. Ахметов, И.М. Губайдуллин, К.Ф. Коледина, Р.Р. Сафин // *Электротехнические и информационные комплексы и системы*. – 2015. – Т. 11, № 2. – С. 53–58.
15. Григорьев, И.В. О численном алгоритме метода вариаций в пространстве управлений / И.В. Григорьев, Т.А. Михайлова, С.А. Мустафина // *Фундаментальные исследования*. – 2015. – № 5-2. – С. 279–283.

Евгения Викторовна Антипина, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, управление научных исследований и разработок, Уфимский университет науки и технологий (г. Уфа, Российская Федерация), stepashinaev@ya.ru.

Светлана Анатольевна Мустафина, доктор физико-математических наук, профессор, кафедра математического и компьютерного моделирования, Уфимский университет науки и технологий (г. Уфа, Российская Федерация), mustafina_sa@mail.ru.

Андрей Федорович Антипин, кандидат технических наук, доцент, кафедра прикладной информатики и программирования, Уфимский университет науки и технологий (г. Уфа, Российская Федерация), andrejantipin@ya.ru.

Поступила в редакцию 9 февраля 2025 г.

NUMERICAL ALGORITHM FOR SEARCHING FOR OPTIMAL CONDITIONS FOR A CATALYTIC REACTION

E.V. Antipina¹, S.A. Mustafina¹, A.F. Antipin¹

¹Ufa University of Science and Technology, Ufa, Russian Federation

E-mail: mustafina_sa@mail.ru, andrejantipin@ya.ru, stepashinaev@ya.ru

The article considers the problem of optimal control of a catalytic reaction with constraints, in which the control parameters are temperature, reaction duration and initial concentrations of the reaction mixture components. Constraints are imposed on the values of the control parameters. For the numerical solution of the problem, an algorithm is formulated based on the differential evolution method. A feature of the algorithm is that it takes into account the physicochemical characteristics of the problem. The algorithm allows for a simultaneous search for optimal values of the control parameters, which are a function and constants. The reaction temperature, which is sought in the class of piecewise constant functions, acts as a control function parameter. Numerical experiments are carried out for the catalytic reaction of obtaining benzyldene benzylamine. As a result of applying the algorithm, the values of the control parameters are calculated at which the highest concentration of the target reaction product, benzyldene benzylamine, is achieved. A comparison of the obtained solution with the solution calculated using the method of variations in the control space is carried out. As a result of the comparison, lower resource consumption of the developed algorithm is shown.

Keywords: optimal control; catalytic reaction; differential evolution; evolutionary computation; kinetic model.

References

1. Charitopoulos V.M., Papageorgiou L.G., Dua V. Multi-Parametric Mixed Integer Linear Programming under Global Uncertainty. *Computers and Chemical Engineering*, 2018, vol. 116, pp. 279–295. DOI: 10.1016/j.compchemeng.2018.04.015
2. Charitopoulos V.M., Papageorgiou L.G., Dua V. Closed-Loop Integration of Planning, Scheduling and Multi-Parametric Nonlinear Control. *Computers and Chemical Engineering*, 2019, vol. 122, pp. 172–192. DOI: 10.1016/j.compchemeng.2018.06.021
3. Shatkhan F.A. [Application of the Maximum Principle to Problems of Optimization of Parallel Chemical Reactions]. *Avtomatika i telemekhanika* [Automation and Telemekhanics], 1964, vol. 25, no. 3, pp. 368–373. (in Russian)
4. Cao Xuepu, Jia Shengkun, Luo Yiqing, Yuan Xiangang, Qi Zhiwen, Yu Kuo-Tsong. Multi-Objective Optimization Method for Enhancing Chemical Reaction Process. *Chemical Engineering Science*, 2019, vol. 195, pp. 494–506. DOI: 10.1016/j.ces.2018.09.048
5. Fu Kaixin, Zou Yuanyuan, Li Shaoyuan. Iterative Unit-Based Adaptive Dynamic Programming with Application to Fluid Catalytic Cracker Unit. *2019 Chinese Automation Congress (CAC)*, 2019, pp. 5010–5015. DOI: 10.1109/CAC48633.2019.8996670
6. Trokoz D.A. Parametric Optimization Method for Wide Neural Networks Using Genetic Algorithms. *Izvestiya of the Samara Science Center of the Russian Academy of The Sciences*, 2021, vol. 23, no. 2, pp. 51–56. DOI: 10.37313/1990-5378-2021-23-2-51-56
7. Karpenko A.P. Evolutionary Operators for Global Optimization Population-Based Algorithms. Experience of Systematization. *Mathematics and Mathematical Modeling*, 2018, no. 1, pp. 59–89. DOI: 10.24108/mathm.0118.0000103
8. Antipina E.V., Mustafina S.A., Antipin A.F., Morozkin N.D. Algorithm for Solving the Problem of Optimal Control of a Chemical-Technological Process with Terminal Constraints. *Engineering Technologies and Systems*, 2022, vol. 32, no. 3, pp. 410–422. DOI: 10.15507/2658-4123.032.202203.410-422
9. Pupkov K.A., Feoktistov V.A. [Differential Evolution Algorithm for Engineering Design Problems]. *Informatsionnye tekhnologii* [Information Technology], 2004, no. 8, pp. 25–31. (in Russian)
10. Antipina E.V., Mustafina S.A., Antipin A.F. Numerical Algorithm of Identifying the Kinetic Model of a Chemical Reaction. *Bulletin of the Technological University*, 2019, vol. 22, no. 9, pp. 13–17.
11. Mohamed A.W., Mohamed A.K. Adaptive Guided Differential Evolution Algorithm with Novel Mutation for Numerical Optimization. *International Journal of Machine Learning and Cybernetics*, 2019, no. 10, pp. 253–277. DOI: 10.1007/s13042-017-0711-7
12. Kovalevich A.A., Yakimov A.I., Albkeirat D.M. [Research of Optimization Stochastic Algorithms for Application in Simulations of Systems]. *Informatsionnye tekhnologii* [Information Technology], 2011, no. 8, pp. 55–60. (in Russian)
13. Storn R., Price K. Differential Evolution – A Simple and Efficient Heuristic for Global Optimization over Continuous Spaces. *Journal of Global Optimization*, 1997, no. 11, pp. 341–359. DOI: 10.1023/A:1008202821328

14. Akhmetov I.V., Gubaydullin I.M., Koledina K.F., Safin R.R. Mathematical Modeling and Optimization Fusion Reactions Aromatic Compounds. *Electrical and Information Complexes and Systems*, 2015, vol. 11, no. 2, pp. 53–58.
15. Grigor'ev I.V., Mikhaylova T.A., Mustafina S.A. About Numerical Algorithm Method of Variation in the Control Area. *Fundamental Research*, 2015, no. 5-2, pp. 279–283.

Received February 9, 2025