

ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ  
УРАВНЕНИЯ  
И  
ПРОЦЕССЫ УПРАВЛЕНИЯ  
N. 4, 2023  
Электронный журнал,  
рег. Эл № ФС77-39410 от 15.04.2010  
ISSN 1817-2172  
<http://diffjournal.spbu.ru/>  
e-mail: [jodiff@mail.ru](mailto:jodiff@mail.ru)

Компьютерное моделирование динамических и управляемых систем

## Алгоритм оптимизации начальных условий протекания химической реакции на основе кинетической модели

Антипина Е.В.<sup>1,\*</sup>, Мустафина С.А.<sup>1,\*\*</sup>, Антипин А.Ф.<sup>2,\*\*\*</sup>

<sup>1</sup>Уфимский университет науки и технологий

<sup>2</sup>Стерлитамакский филиал Уфимского университета науки и технологий

\* stepashinaev@ya.ru

\*\* mustafina\_sa@mail.ru

\*\*\* andrejantipin@ya.ru

**Аннотация.** Разработан численный алгоритм поиска оптимальных значений концентраций реагентов химической реакции. Сформулирована постановка задачи определения оптимальных начальных концентраций исходных веществ на основе кинетической модели реакции, представляющей собой систему обыкновенных дифференциальных уравнений. Для решения поставленной задачи приведен генетический алгоритм с вещественным кодированием. Алгоритм модифицирован с учетом ограничения на значения начальных концентраций и условия, накладываемого на суммарную начальную концентрацию реагентов. Проведен вычислительный эксперимент для реакции синтеза бензилбутилового эфира под действием медьсодержащих катализаторов. Определены начальные концентрации исходных веществ, при которых достигается наибольшие значения концентраций целевых продуктов реакции.

**Ключевые слова:** генетический алгоритм, оптимальные начальные концентрации, кинетическая модель реакции, задача оптимизации, условия протекания реакции.

### 1. Введение

В настоящее время применение методов математического моделирования химико-технологических процессов позволяет находить решения ряда практических задач, одной из которых является определение оптимальных условий их ведения. При исследовании

закономерностей протекания химических процессов не всегда имеется возможность провести достаточное количество экспериментов ввиду высоких затрат на сырье и оборудование. Поэтому разработка математических методов и алгоритмов, позволяющих на этапе вычислительного эксперимента имитировать лабораторный эксперимент, является актуальной научной задачей.

Одним из основных уровней математического моделирования химического процесса является кинетическая модель реакции. Кинетическая модель химической реакции включает в себя перечень реагентов, отдельных стадий их превращения, уравнение скоростей стадий, зависящих от концентраций реагентов и температуры. Математическое описание изменения концентраций реагирующих веществ во времени можно представить в виде системы обыкновенных дифференциальных уравнений, начальные условия которой определяют начальный состав реагирующей смеси.

В качестве условий протекания химической реакции, подлежащих оптимизации с целью достижения заданного уровня количественных и качественных показателей процесса, можно рассматривать температуру, давление, состав реакционной смеси, скорость ее подачи, длительность процесса и т.д. Практически значимой задачей исследования химических реакций является прогнозирование свойств получаемого продукта в зависимости от соотношения концентраций веществ, вступивших в реакцию. Иными словами, требуется определить начальный состав реакционной системы, чтобы обеспечить максимальный выход целевых продуктов реакции, минимальный выход побочных веществ, добиться определенного уровня конверсии исходных веществ и т.д. Решение данной задачи можно получить путем ее формализации на основе кинетического моделирования химической реакции и применения численных методов оптимизации.

Решению задач оптимизации и оптимального управления в химии и химической технологии посвящены работы как российских, так и зарубежных исследователей.

Для поиска оптимального управления химическими процессами широко используется принцип максимума Понтрягина, который является фундаментальной концепцией теории оптимального управления. В работе [1] рассматривается задача оптимального управления параллельными химическими реакциями, в которой в качестве управления выступает температура, давление и константы скоростей реакций. В работе [2] принцип максимума Понтрягина применен для определения оптимального температурного режима каталитического процесса в каскаде реакторов. Однако применение принципа максимума требует дополнительной проверки найденного решения на оптимальность, что, в свою очередь, является ресурсоемкой задачей.

Для оптимизации многостадийных процессов химической технологии применяется динамическое программирование, эффективность применения которого показана в работе [3]. Динамическое программирование хорошо зарекомендовало себя при решении задач, в которых на каждой стадии имеется небольшое число переменных. Его применение для сложных химических реакций, содержащих большое количество промежуточных веществ, затруднительно ввиду высокой размерности задачи и, как следствие, ресурсоемких вычислений.

Ввиду особенностей математических моделей химических процессов, таких как нелинейность, большая размерность, фазовые ограничения, возникают трудности вычислительного характера при численной реализации алгоритмов, основанных на классических оптимизационных методах.

Преодолеть перечисленные недостатки большинства методов оптимизации позволяет применение генетических алгоритмов [4]. Генетические алгоритмы являются методом эволюционных вычислений, работа которых основана на имитации процессов эволюции живых организмов [5]. В зависимости от формы представления координат вектора возможного решения (гена) различают генетические алгоритмы с бинарным и вещественным кодированием. В генетических алгоритмах с бинарным кодированием ген кодируется с помощью двоичного представления. В этом случае в алгоритм включаются этапы кодирования и декодирования оптимизируемых параметров процесса. В генетических алгоритмах с вещественным кодированием ген представляется вещественным числом, поэтому отпадает необходимость в дополнительных операциях, связанных с перекодированием.

В настоящее время генетические алгоритмы широко применяются при решении задач оптимизации в молекулярном моделировании [6], многокритериальной оптимизации [7], при построении нейросетевых моделей [8], при решении задач планирования [9, 10], а также при решении оптимизационных задач в различных технических системах [11-13].

В работе [14] приведен алгоритм расчета оптимальных начальных концентраций веществ химических реакций на основе эвристического метода искусственных иммунных систем, который апробирован на промышленно значимом процессе синтеза бензилиденбензиламина. Однако недостатком данного алгоритма является отсутствие этапа проверки выполнения условия равенства суммы рассчитанных начальных концентраций заданному значению (например, единице, если концентрация выражена в мольных долях). Поэтому алгоритм можно использовать для реакций, в которых содержится два исходных вещества, тогда как сложные химические превращения, которые описывает схема реакции, содержат три и более исходных веществ.

Целью работы является разработка численного алгоритма решения задачи определения оптимальных начальных концентраций химической реакции на основе кинетической модели. Базовым является генетический алгоритм с вещественным кодированием, который позволяет преодолеть перечисленные выше трудности, возникающие при решении задач моделирования химических процессов, и обладает следующими преимуществами:

- 1) алгоритм применим для расчета начальных концентраций сложных химических реакций, описываемых, как правило, системой нелинейных дифференциальных уравнений;
- 2) алгоритм применим для поиска начальных концентраций веществ реагирующей системы, состоящей из трех и более компонентов;
- 3) в алгоритме предусмотрено выполнение ограничений, накладываемых на значения концентраций веществ в начальный момент времени;
- 4) алгоритм легко реализуем на практике, и его можно модифицировать при увеличении размерности модели, описывающей химические превращения.

## 2. Постановка задачи

Пусть динамика концентраций веществ сложной химической реакции описывается системой обыкновенных дифференциальных уравнений:

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

с начальными условиями

$$x_i(0) = x_i^0, i = \overline{1, n}, \quad (2)$$

где  $x(t) = (x_1(t), \dots, x_n(t))^T$  – вектор концентраций веществ,  $t \in [0, \tau]$  – время,  $T$  – температура,  $f(t, x(t), T) = (f_1(t, x(t), T), \dots, f_n(t, x(t), T))^T$  – непрерывная вместе со своими частными производными вектор-функция.

Пусть значения концентраций веществ выражены в мольных долях. Тогда в начальный момент времени выполняется соотношение

$$\sum_{i=1}^n x_i^0 = 1. \quad (3)$$

При этом имеются ограничения на значения начальных концентраций веществ:

$$0 \leq x_i^0 \leq 1, i = \overline{1, n}. \quad (4)$$

Рассмотрим задачу оптимизации функции вида

$$J(x^0) = \varphi(x(\tau)). \quad (5)$$

Тогда задача оптимизации начальных концентраций химической реакции состоит в поиске вектора  $x^0 = (x_1^0, \dots, x_n^0)$ , при котором выполнены условия (3), (4), и функция (5) достигает максимального значения.

### 3. Алгоритм поиска оптимальных концентраций реагентов химической реакции

Для решения данной задачи сформулируем генетический алгоритм с вещественным кодированием. Работа генетического алгоритма заключается в смене поколений векторов-особей, которые представляют собой возможные решения оптимизационной задачи (1)-(5). Множество векторов-индивидов образует популяцию [15]. Поэтому рассмотрим в качестве популяции совокупность  $m$  векторов:

$$x_j^0 = (x_{j1}^0, x_{j2}^0, \dots, x_{jn}^0), j = \overline{1, m}, \quad (6)$$

где  $x_j^0$  –  $j$ -я особь. Элементы вектора  $x_j^0$  являются генами, над которыми производятся операции скрещивания (кроссовера) и мутации. Качество каждой особи (возможного решения) определяется значением фитнес-функции, или функции приспособленности. В задаче оптимизации (1)-(5) функцией приспособленности является функция (5). Поскольку решается задача на максимум, то наиболее приспособленной особи соответствует наибольшее значение функции приспособленности. Для того чтобы вычислить значение функции приспособленности, необходимо найти численное решение системы дифференциальных уравнений (2) с начальными условиями (3).

Задача оптимизации (1)-(5) имеет ряд особенностей, связанных с ее физико-химическим смыслом. Во-первых, на этапе заполнения начальной популяции случайными значениями из области, задаваемой неравенством (4), необходимо предусмотреть, чтобы сумма компонентов вектора (6) не превышала единицу, т.е. выполнялось условие (3). Во-вторых, на этапах скрещивания и мутации необходимо также контролировать выполнение условия (3), так как в большинстве случаев оно может нарушиться. Например, можно провести нормировку координат вектора-индивида. Поэтому в генетический алгоритм с вещественным кодированием необходимо внести корректировку значений компонентов векторов (6) с учетом условий (3), (4).

Модифицируем генетический алгоритм для решения задачи поиска оптимальных начальных концентраций веществ химической реакции.

Шаг 1. Задать параметры алгоритма: размер популяции  $m$ , параметры окончания работы алгоритма  $q, \varepsilon > 0$ . Установить счетчик популяций  $k = 0$ .

Шаг 2. Сгенерировать начальную популяцию  $x_j^0(0)$ , заполнив ее случайными числами из области, задаваемой неравенством (4), с учетом ограничений (3).

Шаг 3. Для каждого вектора начальных концентраций  $x_j^0(k), j = \overline{1, m}$ , текущей  $k$ -й популяции вычислить значение функции приспособленности (5).

Шаг 4. Применить к текущей популяции оператор селекции «рулетка». Для каждого вектора начальных концентраций вычислить вероятность отбора

$$p(x_j^0(k)) = \frac{J(x_j^0(k))}{\sum_{j=1}^m J(x_j^0(k))}, j = \overline{1, m}.$$

Выбрать два вектора начальных концентраций  $x_l^0(k)$ ,  $x_s^0(k)$ , которым соответствуют наибольшие значения вероятностей отбора. Результатом шага 4 является родительская пара  $y^1 = x_l^0(k)$ ,  $y^2 = x_s^0(k)$ .

Шаг 5. Применить оператор простейшего кроссовера к векторам  $y^1$ ,  $y^2$ , выбранным на шаге 4. Создать два вектора-потомка  $r^1$ ,  $r^2$ , значения координат которых задать по правилу:

$$r_i^1 = \begin{cases} y_i^1, & i \leq c, \\ y_i^2, & c < i \leq n; \end{cases}$$

$$r_i^2 = \begin{cases} y_i^2, & i \leq c, \\ y_i^1, & c < i \leq n, \end{cases}$$

где  $c$  – случайное число из отрезка  $[1, n-1]$ .

Для каждого из векторов  $r^1$ ,  $r^2$  проверить выполнение условия (3). Если оно не выполнено, то следует преобразовать координаты вектора  $r^j$ ,  $j = 1, 2$ , следующим образом:

$$r_i^j := \frac{r_i^j}{\sum_{l=1}^n r_l^j}. \quad (7)$$

Шаг 6. Создать векторы-мутанты из векторов-потомков  $r^1$ ,  $r^2$  путем применения оператора случайной мутации. У каждого вектора  $r^j$ ,  $j = 1, 2$ , выбрать случайным образом ген  $r_l^j$ , значение которого заменить на случайное число из интервала, задаваемого неравенством (4). В результате применения оператора мутации сумма значений компонентов вектора  $r^j$  может отличаться от 1, т.е. нарушается условие (3). В этом случае необходимо преобразовать координаты вектора  $r^j$  по формуле (7).

Шаг 7. Обновить текущую популяцию. Среди векторов начальных концентраций найти вектор, при котором функция (5) принимает наименьшее значение. Заменить данный вектор случайно выбранным вектором-мутантом и вычислить для него значение функции приспособленности. Увеличить счетчик популяций  $k$  на 1 и перейти к шагу 8.

Шаг 8. Проверить условие окончания поиска решения. Вычислить расстояние между векторами текущей  $x_j^0(k)$  и предыдущей  $x_j^0(k-1)$  популяций  $\rho_{ij}$ ,  $i, j = \overline{1, m}$ , и изменение функций приспособленности  $\Delta_{ij}$ :

$$\rho_{ij} = \rho(x_i^0(k), x_j^0(k-1)) = \|x_i^0(k) - x_j^0(k-1)\| = \sqrt{\sum_{l=1}^n (x_{il}^0(k) - x_{jl}^0(k-1))^2},$$

$$\Delta_{ij} = \Delta(x_i^0(k), x_j^0(k-1)) = |J(x_i^0(k)) - J(x_j^0(k-1))|, i, j = \overline{1, m}.$$

Если на протяжении  $q$  поколений выполнены условия  $\rho_{ij} < \varepsilon$ ,  $\Delta_{ij} < \varepsilon$ , т.е. происходит незначительное изменение популяции и функции приспособленности, то остановить поиск решения. Из последней популяции найти вектор начальных концентраций  $x_j^0$ , которому соответствует наибольшее значение функции приспособленности. Выбранный вектор  $x_j^0$  является приближенным решением задачи определения оптимальных начальных концентрации химической реакции. В противном случае перейти к шагу 4.

#### 4. Вычислительный эксперимент

Используя сформулированный численный алгоритм, вычислим оптимальные начальные концентрации реагентов для реакции синтеза бензилбутилового эфира под действием медьсодержащих катализаторов. Механизм данной реакции описывается следующими стадиями химических превращений [16]:



где  $X_1$  – PhCH<sub>2</sub>OH,  $X_2$  – CuBr<sub>2</sub>,  $X_3$  – [PhCH<sub>2</sub>]<sup>+</sup>[CuBr<sub>2</sub>(OH)]<sup>-</sup>,  $X_4$  – BuOH,  $X_5$  – [PhCH<sub>2</sub>OBu]H<sup>+</sup>[CuBr<sub>2</sub>(OH)]<sup>-</sup>,  $X_6$  – PhCH<sub>2</sub>OBu,  $X_7$  – H<sub>2</sub>O,  $X_8$  – [PhCH<sub>2</sub>OHCH<sub>2</sub>Ph]<sup>+</sup>[CuBr<sub>2</sub>(OH)]<sup>-</sup>,  $X_9$  – PhCH<sub>2</sub>OCH<sub>2</sub>Ph,  $X_{10}$  – [Bu]<sup>+</sup>[CuBr<sub>2</sub>(OH)]<sup>-</sup>,  $X_{11}$  – [BuOHBu]<sup>+</sup>[CuBr<sub>2</sub>(OH)]<sup>-</sup>,  $X_{12}$  – BuOBu.

Согласно закону действующих масс уравнения скоростей стадий реакции имеют вид:

$$\begin{aligned}
 w_1(C, T) &= k_1(T)C_1C_2, \\
 w_2(C, T) &= k_2(T)C_3C_4, \\
 w_3(C, T) &= k_3(T)C_5, \\
 w_4(C, T) &= k_4(T)C_1C_3, \\
 w_5(C, T) &= k_5(T)C_8, \\
 w_6(C, T) &= k_6(T)C_2C_4, \\
 w_7(C, T) &= k_7(T)C_1C_4, \\
 w_8(C, T) &= k_8(T)C_{11}, \\
 w_9(C, T) &= k_9(T)C_1C_{10},
 \end{aligned}
 \tag{9}$$

где  $C_i$  – концентрация вещества  $X_i$  (моль/л,  $i = \overline{1,12}$ ),  $T$  – температура (К),  $k_j(T)$  – кинетическая константа (л/(моль·мин),  $j = 1,2,4,6,7,9$ ; 1/мин,  $j = 3,5,8$ ), рассчитываемая по уравнению Аррениуса

$$k_j(T) = k_{0j} \exp\left(-\frac{E_j}{RT}\right),$$

где  $k_{0j}$  – предэкспоненциальный множитель (л/(моль·мин),  $j = 1,2,4,6,7,9$ ; 1/мин,  $j = 3,5,8$ ),  $E_j$  – энергия активации  $j$ -й стадии (ккал/моль),  $R$  – универсальная газовая постоянная (1,987

кал/(моль·К)). Значения констант скоростей  $k_j$  и энергий активации  $E_j$  ( $j = \overline{1,9}$ ) стадий реакции синтеза бензилбутилового эфира приведены в табл. 1 [16].

Таб. 1. Кинетические параметры реакции синтеза бензилбутилового эфира ( $T = 448$  К)

| $j$ | $k_j$ , л/(моль·мин),<br>$j=1,2,4,6,7,9$ ;<br>1/мин, $j=3,5,8$ | $E_j$ , ккал/моль |
|-----|--|-------------------|
| 1   | 2,8  | 5,366             |
| 2   | 6,54   | 12,18             |
| 3   | 0,1411   | 10,31             |
| 4   | 7,02   | 13,96             |
| 5   | 0,85   | 21,69             |
| 6   | 0,0028   | 15,029            |
| 7   | 0,62   | 18,46             |
| 8   | 0,005  | 35,108            |
| 9   | 0,5  | 11,93             |

Пусть  $x_i = C_i/C_0$  – концентрация вещества  $X_i$ , выраженная в мольных долях,  $C_0$  – начальная суммарная концентрация веществ (моль/л). Тогда изменение концентраций веществ реакции (8) во времени описывается системой обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned}
 \frac{dx_1}{dt} &= -w_1 - w_4 - w_9, \\
 \frac{dx_2}{dt} &= -w_1 + w_3 + w_5 - w_6 + w_8, \\
 \frac{dx_3}{dt} &= w_1 - w_2 - w_4, \\
 \frac{dx_4}{dt} &= -w_2 - w_6 - w_7, \\
 \frac{dx_5}{dt} &= w_2 - w_3 + w_9, \\
 \frac{dx_6}{dt} &= w_3, \\
 \frac{dx_7}{dt} &= w_3 + w_5 + w_8, \\
 \frac{dx_8}{dt} &= w_4 - w_5, \\
 \frac{dx_9}{dt} &= w_5, \\
 \frac{dx_{10}}{dt} &= w_6 - w_7 - w_9, \\
 \frac{dx_{11}}{dt} &= w_7 - w_8, \\
 \frac{dx_{12}}{dt} &= w_8,
 \end{aligned} \tag{10}$$

с начальными условиями

$$x_i(0) = x_i^0, i = \overline{1,12}, \quad (11)$$

где  $x(t) = (x_1(t), \dots, x_{12}(t))^T$  – вектор концентраций веществ (мольная доля),  $t \in [0, \tau]$  – время.

Исходными веществами реакции (8) являются  $X_1, X_2, X_4$ . Значения начальных концентраций данных веществ должны удовлетворять условиям:

$$0 < x_i^0 < 1, i = 1,2,4, \quad (12)$$

$$x_1^0 + x_2^0 + x_4^0 = 1. \quad (13)$$

Продуктами реакции (8) являются бензилбутиловый эфир  $X_6$  и дибензиловый эфир  $X_9$ , которые широко применяются в качестве ароматизаторов в парфюмерной и косметической отраслях.

Будем искать максимальное значение концентрации в конце реакции ( $t = \tau$ ) целевого продукта реакции – бензилбутилового эфира:

$$x_6(\tau) \rightarrow \max. \quad (14)$$

Требуется определить начальные концентрации исходных веществ  $x_1^0, x_2^0, x_4^0$ , при котором функция (14) достигает наибольшего значения.

Для решения задачи (8)-(14) разработана программа на языке Delphi, в которой реализован разработанный авторами алгоритм. Решение задачи найдено для реакции, продолжительностью  $\tau = 600$  мин при следующих параметрах алгоритма: размер популяции  $m = 60$ , параметры окончания работы алгоритма  $q = 5, \varepsilon = 10^{-4}$ .

Для решения системы дифференциальных уравнений (10) с начальными условиями (11) применен предиктор-корректорный метод Адамса второго порядка.

В результате вычислений получены следующие значения начальных концентраций реагентов (мольная доля)

$$x_1^0 = 0,4921, x_2^0 = 0,0082, x_4^0 = 0,4997, \quad (15)$$

при которых наибольшее значение концентрации бензилбутилового эфира составляет 0,233 мольные доли.

На рис. 1 показана динамика концентраций исходных веществ и целевого продукта реакции (8), вычисленная при наборе начальных концентраций (15).

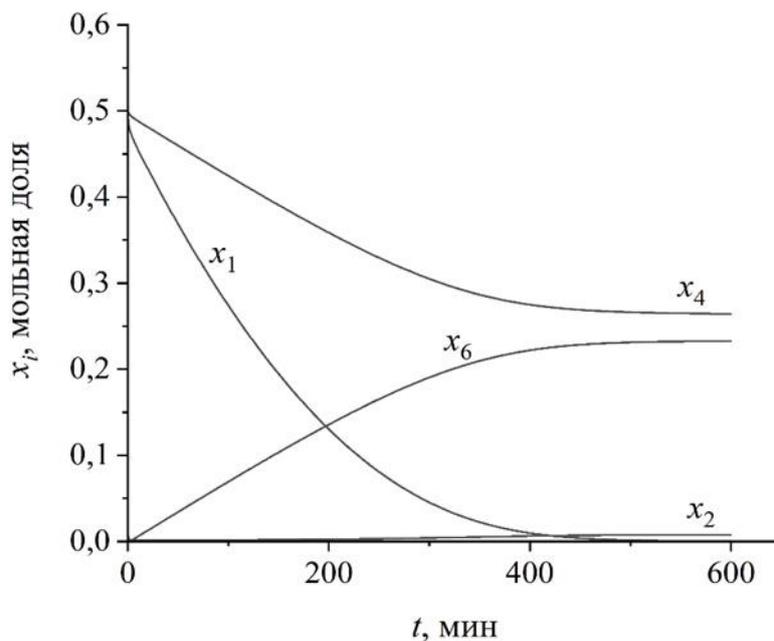


Рис. 1. Динамика концентраций веществ  $X_1$ ,  $X_2$ ,  $X_4$ ,  $X_6$

Зададим теперь в качестве целевого продукта реакции (8) дибензиловый эфир  $X_9$  и вычислим оптимальные начальные концентрации веществ, при которых достигается максимум функции

$$x_9(\tau) \rightarrow \max. \quad (16)$$

Для поиска оптимальных начальных концентраций применен генетический алгоритм с тем же набором параметров, что и для задачи получения максимального выхода бензилбутилового эфира. В результате получен следующий набор оптимальных концентраций реагентов (мольная доля):

$$x_1^0 = 0,99582, x_2^0 = 0,00372, x_4^0 = 0,00046, \quad (17)$$

и наибольшее значение концентрации дибензилового эфира  $x_9(\tau) = 0,496$  мольных долей (рис. 2).

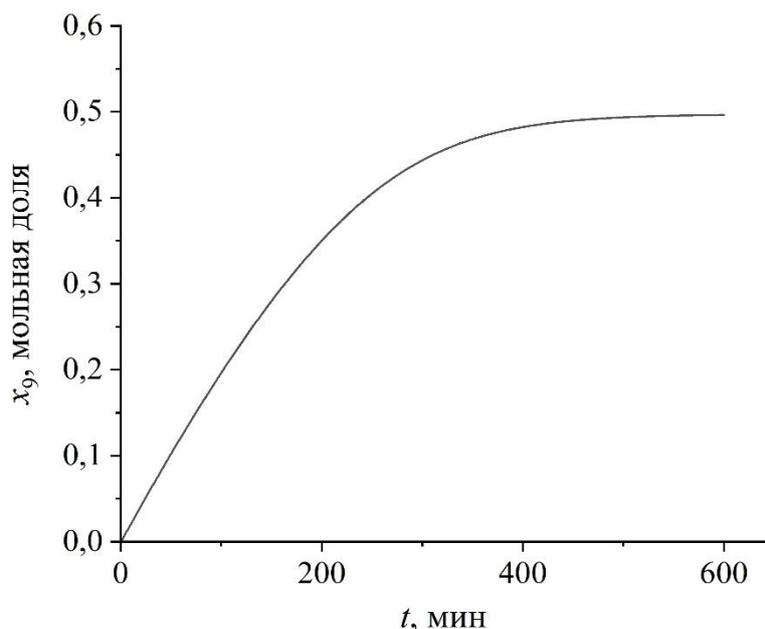


Рис. 2. Динамика концентрации дибензилового эфира

Также найдено численное решение системы дифференциальных уравнений (10) с различными наборами начальных условий (11) (табл. 1). Из таблицы видно, что вычисленные значения концентрации бензилбутилового эфира  $x_6$  в конечный момент времени не превосходят значения, найденного для начальных концентраций (8) (строка 15). Также для дибензилового эфира значение его концентрации, рассчитанное при наборе начальных концентраций (17), больше значений его концентрации, вычисленных при произвольных соотношениях исходных веществ. Поэтому можно сделать вывод о корректной работе разработанного алгоритма определения оптимальных концентраций реагентов химической реакции.

Таб. 2. Зависимость концентрации бензилбутилового эфира и дибензилового эфира от начальных концентраций исходных веществ

| № эксперимента | $x_1^0$ , мольная доля | $x_2^0$ , мольная доля | $x_4^0$ , мольная доля | $x_6(\tau)$ , мольная доля | $x_9(\tau)$ , мольная доля |
|----------------|------------------------|------------------------|------------------------|----------------------------|----------------------------|
| 1              | 0,1                    | 0,01                   | 0,89                   | 0,088                      | 0,0058                     |
| 2              | 0,2                    | 0,01                   | 0,79                   | 0,155                      | 0,023                      |
| 3              | 0,89                   | 0,01                   | 0,1                    | 0,086                      | 0,407                      |
| 4              | 0,79                   | 0,01                   | 0,2                    | 0,15                       | 0,32                       |
| 5              | 0,495                  | 0,01                   | 0,495                  | 0,232                      | 0,131                      |
| 6              | 0,4995                 | 0,001                  | 0,4995                 | 0,051                      | 0,054                      |
| 7              | 0,2                    | 0,001                  | 0,799                  | 0,05                       | 0,012                      |
| 8              | 0,799                  | 0,001                  | 0,2                    | 0,035                      | 0,144                      |
| 9              | 0,45                   | 0,1                    | 0,45                   | 0,214                      | 0,118                      |
| 10             | 0,3                    | 0,1                    | 0,6                    | 0,192                      | 0,054                      |
| 11             | 0,6                    | 0,1                    | 0,3                    | 0,19                       | 0,205                      |
| 12             | 0,4                    | 0,2                    | 0,4                    | 0,195                      | 0,102                      |
| 13             | 0,3                    | 0,2                    | 0,5                    | 0,183                      | 0,058                      |
| 14             | 0,5                    | 0,2                    | 0,3                    | 0,184                      | 0,158                      |
| <b>15</b>      | <b>0,4921</b>          | <b>0,0082</b>          | <b>0,4997</b>          | <b>0,233</b>               | <b>0,13</b>                |
| <b>16</b>      | <b>0,9958</b>          | <b>0,0037</b>          | <b>0,0005</b>          | <b>0,0005</b>              | <b>0,496</b>               |

## 5. Заключение

Разработанный генетический алгоритм позволяет найти приближенное решение задачи определения оптимальных начальных концентраций химической реакции. В качестве вектора-индивида, оптимизируемого в процессе работы алгоритма, рассматривается вектор начальных концентраций реагентов. В классический генетический алгоритм с вещественным кодированием внесены модификации с учетом физико-химического смысла поставленной задачи. Изменения касаются этапа заполнения начальной популяции случайными значениями из области допустимых значений так, чтобы сумма значений начальных концентраций не превышала единицу. Также выполнение данного условия проверяется на этапах скрещивания и мутации. В случае его нарушения предусмотрено преобразование координат вектора-особи.

Работа генетического алгоритма апробирована на реакции синтеза бензилбутилового эфира. Определены начальные концентрации реагентов, при которых достигается наибольшие значения концентраций продуктов реакции бензилбутилового эфира и дибензилового эфира. Сравнение полученных значений концентраций целевых продуктов реакции с их значениями, вычисленными при других начальных концентрациях, показало, что рассчитанные с помощью алгоритма наборы начальных концентраций реагентов обеспечивают достижение наибольших значений концентраций целевых продуктов реакции.

## 6. Благодарности

Исследование выполнено в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (код научной темы FZWU-2023-0002).

## 7. Литература

- [1] Шатхан Ф.А. Применение принципа максимума к задачам оптимизации параллельных химических реакций // Автоматика и телемеханика. 1964. Т. 25, № 3. С. 368–373.
- [2] Байтимерова А.И., Мустафина С.А., Спивак С.И. Оптимизация каталитического процесса димеризации  $\alpha$ -метилстирола на основе его кинетической модели // Башкирский химический журнал. 2008. Т. 15, № 22. С. 86–88.
- [3] Dadebo S.A., Mcauley K.B. Dynamic Optimization of Constrained Chemical Engineering Problems Using Dynamic Programming // Computers & Chemical Engineering. 1995. Vol. 19, Issue 5. P. 513–525.
- [4] Katoch S., Chauhan S.S., Kumar V. A Review on Genetic Algorithm: Past, Present, and Future // Multimedia Tools and Applications. 2021. Vol. 80. P. 8091–8126.
- [5] Antipina E.V., Antipin A.F., Mustafina S.A. Search for the Optimal Regime Parameters of a Catalytic Process Based on Evolutionary Computations // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2022. Vol. 56, Issue 2. P. 162–169.
- [6] Kozuch D.J., Stillinger F.H., Debenedetti P.G. Genetic Algorithm Approach for the Optimization of Protein Antifreeze Activity Using Molecular Simulations // Journal of Chemical Theory and Computation. 2020. Vol. 16, Issue 12. P. 7866–7873.
- [7] Antipina E.V., Mustafina S.A., Antipin A.F. Algorithm for Solving a Multiobjective Optimization Problem on the Basis of a Kinetic Chemical Reaction Model // Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing. 2021. Vol. 57, Issue 6. P. 668–674.
- [8] Трокоз Д.А. Метод параметрической оптимизации для широких нейронных сетей с использованием генетических алгоритмов // Известия Самарского научного центра Российской академии наук. 2021. Т. 23, № 2. С. 51–56.
- [9] Stastny J, Skorpil V, Balogh Z, Klein R. Job Shop Scheduling Problem Optimization by Means of Graph-Based Algorithm // Applied Sciences. 2021. Vol. 11, Issue 4. P. 1921.

- [10] Gulbaz R., Siddiqui A.B., Anjum, N. Balancer Genetic Algorithm—A Novel Task Scheduling Optimization Approach in Cloud Computing // *Applied Sciences*. 2021. Vol. 11, Issue 14. P. 6244.
- [11] Jalali Z., Noorzai E., Heidari S. Design and optimization of form and facade of an office building using the genetic algorithm // *Science and Technology for the Built Environment*. 2020. Vol. 26, Issue 2. P. 128–140.
- [12] Xie L., Chen Y., Chang R. Scheduling Optimization of Prefabricated Construction Projects by Genetic Algorithm // *Applied Sciences*. 2021. Vol. 11, Issue 12. P. 5531.
- [13] Migov D.A., Volzhankina K.A., Rodionov A.S. Genetic Algorithms for Drain Placement in Wireless Sensor Networks Optimal by the Reliability Criterion // *Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing*. 2021. Vol. 57, Issue 3. P. 240–249.
- [14] Антипина Е.В., Антипин А.Ф. Алгоритм расчета оптимальных начальных концентраций веществ химических реакций // *Вестник Технологического университета*. 2017. Т. 20, № 13. С. 84–87.
- [15] Карпенко А.П. Эволюционные операторы популяционных алгоритмов глобальной оптимизации // *Математика и математическое моделирование*. 2018. № 1. С. 59–89.
- [16] Koledina K.F., Gubaidullin I.M., Koledin S.N., et al. Kinetics and Mechanism of the Synthesis of Benzylbutyl Ether in the Presence of Copper-Containing Catalysts // *Russian Journal of Physical Chemistry*. 2019. Vol. 93, Issue 11. P. 2146–2151.

## **Algorithm for Optimizing the Initial Conditions for a Chemical Reaction Based on a Kinetic Model**

Antipina E.V.<sup>1,\*</sup>, Mustafina S.A.<sup>1,\*\*</sup>, Antipin A.F.<sup>2,\*\*\*</sup>

<sup>1</sup>Ufa University of Science and Technology

<sup>2</sup>Sterlitamak branch of Ufa University of Science and Technology

\* stepashinaev@ya.ru

\*\* mustafina\_sa@mail.ru

\*\*\* andrejantipin@ya.ru

**Abstract.** A numerical algorithm has been developed to search for the optimal values of the concentrations of chemical reaction reagents. The statement of the problem of determining the optimal initial concentrations of the initial substances on the basis of the kinetic model of the reaction, which is a system of ordinary differential equations, is formulated. To solve the problem, a genetic algorithm with real coding is given. The algorithm is modified taking into account the restriction on the values of the initial concentrations and the condition imposed on the total initial concentration of the reagents. A computational experiment was carried out for the reaction of the synthesis of benzyl butyl ether under the action of copper-containing catalysts. The initial concentrations of the initial substances are determined, at which the highest values of the concentrations of the target reaction products are achieved.

**Keywords:** genetic algorithm, optimal initial concentrations, reaction kinetic model, optimization problem, reaction conditions.

**Acknowledgements:** This research was funded by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (scientific code FZU-2023-0002).