

УПРАВЛЕНИЕ ДИНАМИЧЕСКИМИ СИСТЕМАМИ

CONTROL OF DYNAMICAL SYSTEMS

Научная статья

УДК 519.688, 004.942

doi: 10.17223/19988605/59/1

Алгоритм поиска приближенного решения задачи оптимального управления химическим процессом при наличии терминальных ограничений**Евгения Викторовна Антипина¹, Светлана Анатольевна Мустафина²,
Андрей Федорович Антипин³**^{1,3} *Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета, Стерлитамак, Россия*² *Башкирский государственный университет, Уфа, Россия*¹ *stepashinaev@ya.ru*² *mustafina_sa@mail.ru*³ *andrejantipin@ya.ru*

Аннотация. Разрабатывается численный алгоритм поиска приближенного решения задачи оптимального управления химическим процессом с терминальными ограничениями. Сформулирована в общем виде постановка задачи оптимального управления для химического процесса с ограничениями на параметр управления и фазовые переменные. Для ее решения описан пошаговый алгоритм, в основу которого положены метод штрафов и генетический алгоритм. Проведена апробация алгоритма на примере реакции аминотетирования тиолов. Определены приближенные оптимальные концентрации веществ и приближенный оптимальный температурный режим, обеспечивающий близкий к максимальному выход целевого продукта реакции при выполнении терминальных ограничений.

Ключевые слова: задача оптимального управления; терминальные ограничения; метод штрафов; генетические алгоритмы; реакция аминотетирования тиолов

Благодарности: Исследование выполнено в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (код: FZWU-2020-0027).

Для цитирования: Антипина Е.В., Мустафина С.А., Антипин А.Ф. Алгоритм поиска приближенного решения задачи оптимального управления химическим процессом при наличии терминальных ограничений // Вестник Томского государственного университета. Управление, вычислительная техника и информатика. 2022. № 59. С. 4–12. doi: 10.17223/19988605/59/1

Original article

doi: 10.17223/19988605/59/1

Algorithm for finding an approximate solution of the problem of optimal control of a chemical process in the presence of terminal restrictions**Evgenia V. Antipina¹, Svetlana A. Mustafina², Andrey F. Antipin³**^{1,3} *Sterlitamak Branch of the Bashkir State University, Sterlitamak, Russian Federation*² *Bashkir State University, Ufa, Russian Federation*¹ *stepashinaev@ya.ru*

² mustafina_sa@mail.ru

³ andrejantipin@ya.ru

Abstract. The article is devoted to the development of a numerical algorithm for finding an approximate solution to the problem of optimal control by a chemical process with terminal constraints. One of the most important tasks of mathematical modeling of chemical processes is the task of determining the optimal conditions for their conduct, as well as the creation of automated complexes for their calculation. The search for optimal methods for conducting chemical processes leads to optimal control problems, including restrictions on phase variables and control parameters, since their permissible values are limited by technological limits. The presence of restrictions on phase variables significantly complicates the search for solutions to optimization problems, including in the course of computer implementation of their numerical methods for finding optimal control. Therefore, the development of algorithms and programs for solving optimal control problems with phase constraints is an urgent problem and is of practical interest. To construct realizable algorithms for solving the optimal control problem with phase constraints, the penalty method is often used. The main idea of this method is to replace a problem with constraints on a problem without constraints by adding a "penalty" to the optimality criterion, the sequence of solutions of which gives a solution to the original problem. It is possible to overcome the difficulties arising from the use of classical optimization methods, such as the nonlinearity of mathematical models of processes, the requirements for the continuity of the objective function and its derivatives, the large dimension of the problem, by using genetic algorithms. Genetic algorithms make it possible to find an approximate solution to the optimal control problem, which is acceptable from a practical point of view. An important advantage of genetic algorithms is the independence of the solution found with their help from the choice of the starting point of the search. Genetic algorithms can be easily modified for different processes and tasks by changing the number of phase variables and control parameters. The article formulates a general formulation of the optimal control problem for a chemical process with constraints on the control parameter and phase variables. To solve it, a step-by-step algorithm is described, the operation of which is based on two methods: the method of penalties and the genetic algorithm. Using the penalty method, the original problem with terminal constraints is reduced to a problem without constraints on the phase variables. The resulting new optimal control problem with a new optimality criterion is solved using a genetic algorithm. This algorithm is implemented as a software tool in the Delphi visual programming environment, which allows the user to configure the parameters of the penalty method and the genetic algorithm. The algorithm was tested on the example of the aminomethylation reaction of thiols. The formulation of the problem of finding the optimal temperature regime for a given reaction with restrictions on the control parameter (reaction temperature) and terminal restrictions (selectivity of formation of the target substance, conversion of substances) is formulated to determine the maximum yield of the reaction product. The suboptimal temperature regime and the corresponding concentrations of substances at which the terminal restrictions are fulfilled have been calculated. The values of the selectivity of the target reaction product, the conversion of substances, and the values of the optimality criterion at some permissible temperature values are given. It is shown that the suboptimal concentration of the target substance calculated using the algorithm exceeds the values of its concentrations determined under other temperature conditions.

Keywords: optimal control problem; terminal restrictions; penalty method; genetic algorithms; thiol aminomethylation reaction

Acknowledgments: The research was carried out within the framework of the state task of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (code FZWU-2020-0027).

For citation: Antipina, E.V., Mustafina, S.A., Antipin, A.F. (2022) Algorithm for finding an approximate solution of the problem of optimal control of a chemical process in the presence of terminal restrictions. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Upravlenie, vychislitel'naja tehnika i informatika – Tomsk State University Journal of Control and Computer Science*. 59. pp. 4–12. doi: 10.17223/19988605/59/1

Одной из важнейших задач математического моделирования химических процессов является задача определения оптимальных условий их ведения, а также создание автоматизированных комплексов для их расчета. Математическую модель химического процесса можно представить системой обыкновенных дифференциальных уравнений [1], включающей в себя фазовые переменные, определяющие состояние процесса, но не поддающиеся непосредственному воздействию, и управляющие параметры, которые можно варьировать и влиять тем самым на течение процесса. В качестве фазовых переменных для химических процессов можно выбрать концентрации веществ, количество веществ, адсорбированных на катализаторе, давление, температуру и т.д. Параметрами управления могут быть температура, скорость подачи или состав реакционной смеси.

Поиск оптимальных способов ведения химических процессов приводит к задачам оптимального управления, включающим ограничения на фазовые переменные и управляющие параметры,

поскольку их допустимые значения ограничены технологическими пределами. Если ограничения на переменные состояния заданы в конечный момент времени функционирования системы, то такие ограничения являются терминальными ограничениями. Наличие ограничений на фазовые переменные существенно усложняет поиск решения оптимизационных задач, в том числе и в ходе компьютерной реализации численных методов поиска оптимального управления. Поэтому разработка алгоритмов и программ для решения задач оптимального управления с фазовыми ограничениями является актуальной проблемой и представляет практический интерес.

Общая схема вывода условий оптимальности для задач оптимального управления с ограничениями, накладываемыми на фазовые переменные, получена в работах [2, 3]. Однако при практической реализации данного подхода возникают трудности, связанные с исследованием свойств решений и разработкой численных алгоритмов для их расчета.

Для построения реализуемых алгоритмов решения задачи оптимального управления с фазовыми ограничениями нередко применяют метод штрафов [4]. Основная идея данного метода состоит в замене задачи с ограничениями на задачу без ограничений путем добавления «штрафа» к критерию оптимальности, последовательность решений которой дает решение исходной задачи. В работе [5] показано решение задачи оптимального управления на основе метода штрафов, при этом решение задачи без ограничений найдено с помощью градиентного метода. Однако решения, найденные градиентными методами, зависят от выбора начальной точки поиска решения, что создает дополнительные трудности, поскольку от исследователя требуется знание некоторого приближения этой начальной точки хотя бы из физических соображений поставленной задачи.

Математическое описание химического процесса представляет собой систему нелинейных дифференциальных уравнений, причем высокой размерности, связанной со сложностью процесса. Это создает ряд трудностей для применения некоторых методов оптимизации, например линейного и динамического программирования [6–8]. Наличие ограничений на фазовые переменные и управление затрудняет использование методов вариационного исчисления.

Преодолеть перечисленные трудности можно путем применения генетических алгоритмов. Генетические алгоритмы позволяют найти приближенное решение задачи оптимального управления, но которое при этом является приемлемым с практической точки зрения. В процессе поиска решения оптимизационной задачи с помощью генетических алгоритмов обрабатывается одновременно несколько точек пространства поиска, в отличие от традиционных методов, в которых осуществляется последовательный переход от точки к точке [9, 10]. Данная особенность генетических алгоритмов позволяет преодолеть попадание решения в точку локального экстремума полимодальной целевой функции. В процессе работы генетических алгоритмов не требуется вычисления производной целевой функции, а также отсутствуют требования ее непрерывности и непрерывности производных. Важным достоинством генетических алгоритмов является независимость найденного решения от начального приближения. Показателями эффективности работы генетического алгоритма являются скорость и устойчивость поиска. Скорость работы генетического алгоритма определяется временем, затрачиваемым на достижение заданного количества итераций или качества популяции. Устойчивость поиска определяется возможностью преодоления попадания в точки локальных экстремумов, а также способностью из поколения в поколение повышать качество популяции. Кроме того, генетические алгоритмы можно легко модифицировать для разных процессов и задач, изменяя количество фазовых переменных и параметры управления.

1. Постановка задачи

Сформулируем задачу поиска оптимального температурного режима химического процесса с терминальными ограничениями.

Пусть динамика химического процесса на интервале $[0, t_{end}]$ описывается следующей системой обыкновенных дифференциальных уравнений [11]:

$$\frac{dx_i}{dt} = f_i(x(t), T(t), t) \quad (1)$$

с начальными условиями

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

где $x(t) = (x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t))^T$ – вектор концентраций (фазовых переменных), $T(t)$ – температура (параметр управления), t – время, $f_i(x(t), T(t), t)$ – непрерывные вместе со своими частными производными функции.

Управление $T(t)$ принадлежит классу кусочно-постоянных функций $T(t) = T_j, \quad t \in [t_j, t_{j+1}], \quad j = \overline{0, N}$, где N – число моментов переключений при разбиении $t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_{N+1}, \quad t_{N+1} = t_{end}$.

Пусть на фазовые переменные (значения концентраций в конце протекания реакции) наложены ограничения вида равенств и (или) неравенств

$$\begin{aligned} h_j(x(t_{end})) &= 0, \quad j = \overline{1, r}, \\ h_j(x(t_{end})) &\leq 0, \quad j = \overline{r+1, m}, \end{aligned} \quad (3)$$

где $h_j(x(t_{end}))$ – непрерывно-дифференцируемые функции по всем аргументам.

На значения параметра управления (значения температуры реакции) наложены ограничения вида:

$$T_{\min} \leq T(t) \leq T_{\max}, \quad (4)$$

где $T_{\min}, T_{\max}$ – минимальное и максимальное допустимые значения температуры соответственно.

Пусть критерием оптимальности является некоторая функция от значений концентраций веществ в конечный момент времени протекания реакции

$$I(T) = h_0(x(t_{end})). \quad (5)$$

Необходимо определить температурный режим $T^*(t)$ из класса кусочно-постоянных функций для химического процесса, описываемого системой дифференциальных уравнений (1) с начальными условиями (2), такой что выполнены терминальные ограничения (3) и ограничения на температуру (4), при этом критерий оптимальности (5) должен достигать экстремального значения.

Для определенности будем рассматривать задачу на поиск минимума критерия (5). Для того чтобы решить задачу на максимум, нужно заменить знак перед функцией (5) на противоположный, т.е.

$$I(T^*) = \max_{T_{\min} \leq T^* \leq T_{\max}} h_0(x(t_{end})) = - \min_{T_{\min} \leq T^* \leq T_{\max}} [-h_0(x(t_{end}))]$$

2. Алгоритм поиска приближенного решения задачи оптимального управления с терминальными ограничениями для химического процесса

Сформулируем алгоритм поиска приближенного оптимального температурного режима с терминальными ограничениями, применяя метод штрафов и генетический алгоритм.

Введем в рассмотрение вспомогательную функцию [12]:

$$W(T) = I(T) + G(T, q^k) \rightarrow \min, \quad (6)$$

где $G(T, q^k)$ – штрафная функция, зависящая от управления T и параметра штрафа q^k (k – номер итерации). Чем больше значение параметра штрафа q^k , тем больше штраф за нарушение ограничений.

Построение штрафной функции осуществляется исходя из следующих условий: $G(T, q^k) = 0$, если ограничения (3) выполняются; $G(T, q^k) > 0$, если ограничения (3) не выполняются.

Если ограничения (3) нарушены и $q^k \rightarrow \infty$ при $k \rightarrow \infty$, то $G(T, q^k) \rightarrow \infty$ при $k \rightarrow \infty$.

В качестве штрафной функции рассмотрим функцию вида:

$$G(T, q^k) = \frac{q^k}{2} \left(\sum_{j=1}^r [h_j(x)]^2 + \sum_{j=r+1}^m [h_j^+(x)]^2 \right),$$

где $h_j^+(x)$ – срезка функции, определяемая по правилу: $h_j^+(x) = 0$, если $h_j(x) \leq 0$; $h_j^+(x) = h_j(x)$, если $h_j(x) > 0$.

Задача оптимального управления (1)–(5) с терминальными ограничениями сводится к задаче оптимального управления без ограничений путем поиска управляющего параметра $T^*(t)$, который доставляет минимум критерию оптимальности (6). При этом на каждой итерации метода штрафа найденный вектор $T^*(t)$ является начальным для следующей итерации.

Для решения задачи без ограничений воспользуемся генетическим алгоритмом. Работа генетического алгоритма заключается в последовательной смене поколений особей, при котором наследуются лучшие свойства родителей и приобретаются новые полезные свойства, позволяющие выживать наиболее приспособленным особям. Будем применять генетический алгоритм с вещественным кодированием (Real-Coded Genetic Algorithm, RGGA) [13], поскольку применение вещественного кодирования повышает точность решения и скорость поиска глобального экстремума за счет отсутствия операций кодирования-декодирования.

Пусть математическим аналогом особи выступает параметр управления (температура) $T = (T_0, T_1, \dots, T_N)$, где T_i будем называть геном, $T_i = T(t_i)$, $t_i \in [0, t_{end}]$ ($i = \overline{1, N}$): $t_{i+1} > t_i \quad \forall i = \overline{0, N}$, $t_0 = 0$, $t_{N+1} = t_{end}$. Тогда в качестве популяции из P живых организмов будем рассматривать набор векторов $T_j = (T_{j0}, T_{j1}, \dots, T_{jN})$, $j = \overline{1, P}$. Функцией приспособленности будет выступать критерий оптимальности (6), для вычисления значения которого необходимо решить систему дифференциальных уравнений (1) с начальными условиями (2).

Сформулируем пошаговую работу алгоритма решения задачи поиска оптимального температурного режима химического процесса с терминальными ограничениями.

Шаг 1. Задать начальные параметры для метода штрафов: номер текущей итерации $k = 0$, начальное значение штрафа q^0 , параметр для увеличения штрафа S (рекомендуется выбрать число от 4 до 10 [14]), положительную константу ε для окончания работы алгоритма. Задать начальные параметры генетического алгоритма: P – количество особей в популяции, N – количество генов, G_Max – максимальное количество поколений, номер текущей итерации генетического алгоритма $G_k=0$. Сгенерировать случайным образом на интервале $[T_{min}, T_{max}]$ начальную популяцию $T_j^0 = (T_{j0}^0, T_{j1}^0, \dots, T_N^0)$, $j = \overline{1, P}$. Вычислить для каждой особи значение функции приспособленности.

Шаг 2. Селекция. На данном шаге отбираются две особи – $a = (a_0, a_1, \dots, a_N)$, $b = (b_0, b_1, \dots, b_N)$ – из текущей популяции для последующего скрещивания. Оператор селекции «турнирный отбор» выполняет случайный выбор двух особей из текущей популяции и последующий случайный отбор одной особи из двух особей, выбранных на первом турнире.

Шаг 3. Кроссовер. На данном шаге создаются потомки из двух особей-родителей, отобранных на предыдущем шаге. Арифметический кроссовер создает два потомка – $c = (c_0, c_1, \dots, c_N)$, $d = (d_0, d_1, \dots, d_N)$ – по правилу [10]:

$$c_i = \gamma a_i + (1 - \gamma) b_i, \quad d_i = \gamma b_i + (1 - \gamma) a_i, \quad i = \overline{0, N},$$

где $\gamma \in (0, 1)$ – случайное число.

Шаг 4. Мутация. На данном шаге преобразуются гены потомков с целью приобретения новых генов и повышения приспособленности популяции в целом. Случайная мутация осуществляет случайный выбор гена каждого из потомков c , d и его замену случайным значением из интервала $[T_{min}, T_{max}]$. Для каждой особи необходимо вычислить значение приспособленности.

Шаг 5. Обновление популяции. Случайным образом выбрать один из потомков-мутантов и поместить в текущую популяцию вместо особи с наихудшей приспособленностью. Для задачи на минимум наихудшая приспособленность есть наибольшее значение критерия оптимальности (6).

Шаг 6. Проверка условия окончания работы генетического алгоритма. Если значение текущего номера итерации G_k не превышает максимального количества поколений G_Max , то увеличить счетчик итераций $G_k = G_k + 1$ и перейти на шаг 2. В противном случае выбрать из последней популяции особь $T^*(t)$ с наилучшим значением функции приспособленности.

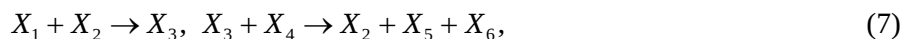
Шаг 7. Проверка условия окончания поиска решения. Если $G(T^*(t), q^k) > \varepsilon$, то положить $q^{k+1} = S \cdot q^k$, $T_j^0(t) = T^*(t)$, $j = \overline{1, P}$, $G_k = 0$, $k = k + 1$, и перейти на шаг 2. Иначе остановить поиск. В качестве приближенного решения задачи оптимального управления (1)–(5) принять особь $T^*(t)$ из последней популяции с наилучшим значением функции приспособленности.

Данный алгоритм реализован в виде программного средства в среде визуального программирования Delphi, которое позволяет пользователю осуществлять настройку параметров метода штрафов и генетического алгоритма.

3. Вычислительный эксперимент

Используя сформулированный алгоритм, решим задачу поиска оптимального управления с терминальными ограничениями для реакции аминотетирования тиолов.

Азот и серосодержащие органические соединения находят широкое применение в качестве эффективных средств защиты растений, антиокислительных, противокоррозионных, противоизносных присадок к топливам и маслам. Экспериментальные исследования реакции аминотетирования тиолов проводятся с помощью тетраметилметандиамина. Механизм данной реакции описывается совокупностью стадий [14]:



где $X_1 = N_2(CH_3)_4$, $X_2 = Sm$, $X_3 = N_2(CH_3)_4 \cdot [Sm]$, $X_4 = HSC_5H_{11}$, $X_5 = (CH_3)_2NSC_5H_{11}$, $X_6 = (CH_3)_2NH$.

Кинетические уравнения скоростей стадий определяются согласно закону действующих масс и имеют вид:

$$\omega_1 = k_1 x_1 x_2, \quad \omega_2 = k_2 x_3 x_4, \quad (8)$$

где $x = (x_1, x_2, \dots, x_6)^T$ – вектор концентраций веществ (моль/л), k_1, k_2 – кинетические константы реакции (л/(моль·с)), рассчитываемые исходя из уравнения Аррениуса:

$$k_j = k_{0j} \exp\left(-\frac{E_j}{RT}\right), \quad j = 1, 2,$$

где k_{0j} – предэкспоненциальный множитель (л/(моль·с)), E_j – энергия активации j -й стадии (Дж/моль), T – температура протекания реакции (К), R – универсальная газовая постоянная (Дж/(моль·К)).

Динамика концентраций веществ описывается системой дифференциальных уравнений

$$\frac{dx_i}{dt} = \sum_{j=1}^2 \gamma_{ij} \omega_j, \quad i = \overline{1, 6}, \quad (9)$$

с начальными условиями

$$x_i(0) = x_i^0, \quad i = \overline{1, 6}, \quad (10)$$

где (γ_{ij}) – матрица стехиометрических коэффициентов веществ реакции (7).

В системе дифференциальных уравнений (9) фазовыми переменными являются концентрации веществ x_i ($i = \overline{1, 6}$), управляющим параметром – температура в реакторе $T(t)$.

Целевым продуктом реакции (7) является вещество X_5 . В связи с этим критерий задачи оптимального управления – максимальный выход X_5 в конечный момент времени протекания реакции:

$$I(T) = x_5(t_{end}) \rightarrow \max. \quad (11)$$

Поскольку выход X_5 зависит от селективности его образования и конверсии веществ X_3, X_4 , наложим на решение задачи следующие ограничения:

1) селективность образования X_5 не менее 60%:

$$S_{X_5} \geq 0,6; \quad (12)$$

2) конверсия X_3, X_4 в конце реакции составляет 90%:

$$1 - \frac{x_3(t_{end}) + x_4(t_{end})}{x_3(0) + x_4(0)} = 0,9. \quad (13)$$

Допустимые значения температуры задаются неравенством

$$293 \text{ K} \leq T(t) \leq 333 \text{ K}. \quad (14)$$

Начальные концентрации веществ заданы значениями [14]:

$$x_1(0) = 0,445, \quad x_2(0) = 0,223, \quad x_3(0) = 0, \quad x_4(0) = 0,367, \quad x_5(0) = x_6(0) = 0. \quad (15)$$

Необходимо определить оптимальный температурный режим $T^*(t)$ реакции (7), описываемой системой дифференциальных уравнений (9) с начальными условиями (15), с учетом ограничений на параметр управления (14) и терминальных ограничений (12), (13), доставляющий максимальное значение критерию оптимальности (11).

В ходе поиска решения поставленной задачи система дифференциальных уравнений (9) с начальными условиями (15) решалась методом Рунге–Кутты четвертого порядка. Численные значения кинетических параметров реакции аминотилирования тиолов с помощью тетраметилметандиамина приведены в работе [14]. Время протекания реакции $t_{\text{end}} = 1$ ч. Генетический алгоритм для поиска безусловного экстремума применен со следующими параметрами: количество особей в популяции $P = 60$, максимальное количество поколений $G_{\text{Max}} = 2000$, количество генов $N = 450$. Для метода штрафов установлены следующие параметры: начальное значение штрафа $q^0 = 0,1$, параметр увеличения штрафа $S = 10$, параметр для окончания работы алгоритма $\varepsilon = 0,01$.

Результаты расчета показали, что для обеспечения максимального выхода продукта реакции X_5 и выполнения ограничений (12)–(14) необходимо на протяжении 0,75 ч удерживать температуру на постоянном уровне 298 К, а затем вести процесс оставшееся время при максимальной допустимой температуре 333 К (рис. 1).

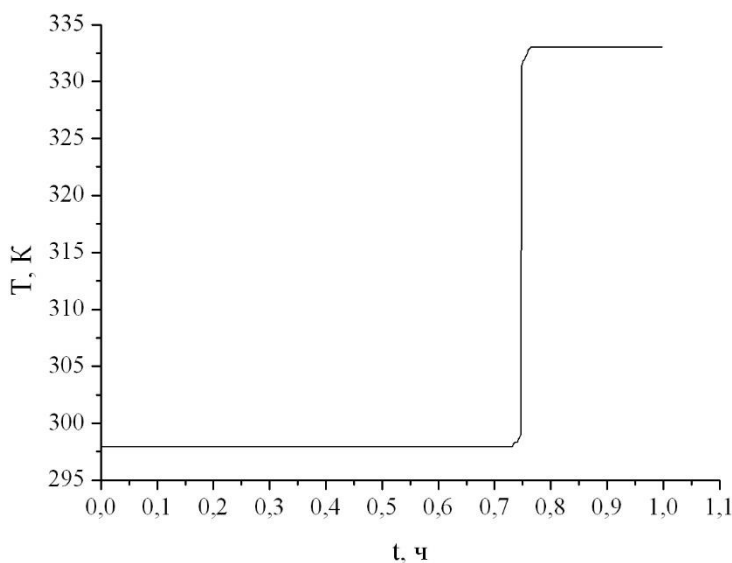


Рис. 1. Субоптимальный температурный режим
Fig. 1. Suboptimal temperature regime

Вычислены концентрации веществ, соответствующие субоптимальному температурному режиму. При соблюдении рассчитанного температурного режима концентрация целевого вещества составит 0,34 моль/л, селективность $S_{X_5} = 61\%$, конверсия X_3, X_4 в конце реакции 89,8%.

Результаты расчета показателей реакции аминотилирования тиолов

№	T, К	Селективность образования X_5 , %	Конверсия X_3, X_4 , %	Концентрация X_5 , моль/л
1	293	59,1	89,7	0,217
2	303	59,9	89,9	0,307
3	313	60,1	89,6	0,311
4	323	59,8	90,1	0,317
5	333	60,2	89,8	0,321

Для реакции аминометилирования тиолов решена прямая кинетическая задача при некоторых значениях температуры из допустимого диапазона. На основе ее решения рассчитаны значения селективности образования X_5 и конверсии веществ X_3 , X_4 (таблица). Видно, что концентрация целевого вещества X_5 меньше соответствующей концентрации, полученной при температурном режиме, рассчитанном с помощью сформулированного алгоритма.

Заключение

Таким образом, сформулированный алгоритм позволяет находить приближенное решение задачи оптимального управления химическим процессом с терминальными ограничениями и ограничениями на управляющий параметр. В основу работы алгоритма положены два метода: метод штрафов и генетический алгоритм. С помощью метода штрафов исходная задача с терминальными ограничениями сводится к задаче без ограничений на фазовые переменные. Полученная новая задача оптимального управления с новым критерием оптимальности решается с помощью генетического алгоритма. Разработанный алгоритм позволяет преодолеть трудности, возникающие в ходе решения оптимизационных задач для химических процессов, такие как нелинейность математических моделей процессов, требования непрерывности целевой функции и ее производных, большая размерность задачи. При этом найденное решение не зависит от выбора начального приближения.

С помощью разработанной на основе алгоритма программы проведен вычислительный эксперимент для реакции аминометилирования тиолов. Рассчитаны субоптимальный температурный режим и соответствующие ему концентрации веществ, при которых выполняются терминальные ограничения. Приведены значения селективности целевого продукта реакции, конверсии веществ и значения критерия оптимальности при некоторых допустимых значениях температуры. Показано, что вычисленная с помощью алгоритма субоптимальная концентрация целевого вещества превосходит значения его концентраций, определенных при других температурных режимах.

Список источников

1. Антипина Е.В., Мустафина С.А., Антипин А.Ф. Численный алгоритм идентификации кинетической модели химической реакции // Вестник Технологического университета. 2019. Т. 22, № 9. С. 13–17.
2. Понтрягин Л.С., Болтянский В.Г., Гамкрелидзе Р.В., Мищенко Е.Ф. Математическая теория оптимальных процессов. М. : Химия, 1976. 392 с.
3. Дикусар В.В., Милютин А.А. Качественные и численные методы в принципе максимума. М. : Наука, 1989. 144 с.
4. Васильев Ф.И. Численные методы решения экстремальных задач : учеб. пособие для вузов. М. : Наука, 1988. 552 с.
5. Jiang C., Lin Q., Yu C., Teo K.L., Duan G.R. An Exact Penalty Method for Free Terminal Time Optimal Control Problem with Continuous Inequality Constraints // Journal of Optimization Theory and Applications. 2012. V. 154. P. 30–53.
6. Островский Г.М., Зиятдинов Н.Н., Емельянов И.И. Синтез оптимальных систем простых ректификационных колонн с рекуперацией тепла // Доклады Академии наук. 2015. Т. 461, № 2. С. 189–192.
7. Santos L., Villas-Boas F., Oliveira A.R.L., Perin C. Optimized choice of parameters in interiorpoint methods for linear programming // Computational Optimization and Applications. 2019. V. 73. P. 535–574.
8. Biegler L.T. Integrated Optimization Strategies for Dynamic Process Operations // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. 2017. V. 51, № 6. P. 910–927.
9. Mustafina S., Antipin A., Antipina E., Odinkova E., Tuchkina L., Kolyazov K., Mustafina S. Numerical algorithm for finding optimal initial concentrations of chemical reactions // IIUM Engineering Journal. 2020. V. 21, № 1. P. 167–174.
10. Пантелеев А.В., Скавинская Д.В. Метаэвристические алгоритмы глобальной оптимизации. М. : Вузовская книга, 2019. 332 с.
11. Антипина Е.В., Антипин А.Ф. Алгоритм расчета оптимальных начальных концентраций веществ химических реакций // Вестник Технологического университета. 2017. Т. 20, № 13. С. 84–87.
12. Пантелеев А.В., Летова Т.А. Методы оптимизации в примерах и задачах : учеб. пособие. М. : Высшая школа, 2005. 544 с.
13. Herrera F., Lozano M., Verdegay J.L. Tackling real-coded genetic algorithms: operators and tools for the behaviour analysis // Artificial Intelligence Review. 1998. V. 12, № 4. P. 265–319.
14. Новичкова А.В. Численный анализ реакционной способности олефинов и алюминийорганических соединений на основе кинетических моделей частных и общих реакций : дис. ... канд. физ.-мат. наук. Уфа, 2015. 110 с.

References

1. Antipina, E.V., Mustafina, S.A. & Antipin, A.F. (2019) Numerical algorithm of identifying the kinetic model of a chemical reaction. *Vestnik Tekhnologicheskogo universiteta*. 22(9). pp. 13–17.
2. Pontryagin, L.S., Boltyanskii, V.G., Gamkrelidze, R.V. & Mishchenko, E.F. (1976) *Matematicheskaya teoriya optimal'nykh protsessov* [The Mathematical Theory of Optimal Processes]. Moscow: Khimiya.
3. Dikusar, V.V. & Milyutin, A.A. (1989) *Kachestvennye i chislennye metody v printsipe maksimuma* [Qualitative and Numerical Methods in the Maximum Principle]. Moscow: Nauka.
4. Vasiliev, F.I. (1988) *Chislennye metody resheniya ehkstremal'nykh zadach* [Numerical methods for solving extreme problems]. Moscow: Nauka.
5. Jiang, C., Lin, Q., Yu, C., Teo, K.L. & Duan, G.R. (2012) An Exact Penalty Method for Free Terminal Time Optimal Control Problem with Continuous Inequality Constraints. *Journal of Optimization Theory and Applications*. 154. pp. 30–53. DOI: 10.1007/s10957-012-0006-9
6. Ostrovskii, G.M., Ziyatdinov, N.N. & Emelyanov, I.I. (2015) Synthesis of optimal systems of simple distillation columns with heat recovery. *Doklady Akademii nauk*. 461(1). pp. 89–92.
7. Santos, L., Villas-Boas, F., Oliveira, A.R.L. & Perin, C. (2019) Optimized choice of parameters in interior point methods for linear programming. *Computational Optimization and Applications*. 73. pp. 535–574. DOI: 10.1007/s10589-019-00079-9
8. Biegler, L.T. (2017) Integrated Optimization Strategies for Dynamic Process Operations. *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*. 51(6). pp. 910–927. DOI: 10.1134/S004057951706001X
9. Mustafina, S., Antipin, A., Antipina, E., Odinkova, E., Tuchkina, L., Kolyazov, K. & Mustafina, S. (2020) Numerical algorithm for finding optimal initial concentrations of chemical reactions. *IIUM Engineering Journal*. 21(1). pp. 167–174. DOI: 10.31436/iiumej.v21i1.1180
10. Panteleev, A.V. & Skavinskaya, D.V. (2019) *Metaevristicheskie algoritmy global'noy optimizatsii* [Metaheuristic Algorithms for Global Optimization]. Moscow: Vuzovskaya kniga.
11. Antipina, E.V. & Antipin, A.F. (2017) Algorithm for calculating the optimal initial concentrations of substances in chemical reactions. *Vestnik Tekhnologicheskogo universiteta*. 20(13). pp. 84–87.
12. Panteleev, A.V. & Letova, T.A. (2005) *Metody optimizatsii v primerakh i zadachakh* [Optimization methods in examples and tasks]. Moscow: Vysshaya shkola.
13. Herrera, F., Lozano, M. & Verdegay, J.L. (1998) Tackling real-coded genetic algorithms: operators and tools for the behaviour analysis. *Artificial Intelligence Review*. 12(4). pp. 265–319. DOI: 10.1023/A:1006504901164
14. Novichkova, A.V. (2015) *Chislennyy analiz reaktsionnoy sposobnosti olefinov i alyuminiyorganicheskikh soedineniy na osnove kineticheskikh modeley chastnykh i obshchikh reaktsiy* [Numerical analysis of the reactivity of olefins and organoaluminum compounds based on kinetic models of partial and general reactions]. Physics and Mathematics Cand. Diss. Ufa.

Информация об авторах:

Антипина Евгения Викторовна – кандидат физико-математических наук, младший научный сотрудник научно-инновационного управления Стерлитамакского филиала Башкирского государственного университета (Стерлитамак, Россия). E-mail: stepashinaev@ya.ru

Мустафина Светлана Анатольевна – профессор, доктор физико-математических наук, проректор по научной и инновационной работе Башкирского государственного университета (Уфа, Россия). E-mail: mustafina_sa@mail.ru

Антипин Андрей Федорович – доцент, кандидат технических наук, доцент кафедры прикладной информатики и программирования Стерлитамакского филиала Башкирского государственного университета (Стерлитамак, Россия). E-mail: andrejantipin@ya.ru

Вклад авторов: все авторы сделали эквивалентный вклад в подготовку публикации. Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Information about the authors:

Antipina Evgenia V. (Candidate of Physics and Mathematics, Junior Researcher, Science and Innovation Management, Sterlitamak Branch of the Bashkir State University, Sterlitamak, Russian Federation). E-mail: stepashinaev@ya.ru

Mustafina Svetlana A. (Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Vice-rector for Scientific and Innovative work, Bashkir State University, Ufa, Russian Federation). E-mail: mustafina_sa@mail.ru

Antipin Andrey F. (Candidate of Technical Science, Associate Professor, Department of Applied Informatics and Programming, Sterlitamak Branch of the Bashkir State University, Sterlitamak, Russian Federation). E-mail: andrejantipin@ya.ru

Contribution of the authors: the authors contributed equally to this article. The authors declare no conflicts of interests.

Поступила в редакцию 10.08.2021; принята к публикации 30.05.2022

Received 10.08.2021; accepted for publication 30.05.2022