

УПРАВЛЕНИЕ ДИНАМИЧЕСКИМИ СИСТЕМАМИ

CONTROL OF DYNAMICAL SYSTEMS

Научная статья

УДК 519.6, 004.942

doi: 10.17223/19988605/70/1

**Численный алгоритм для поиска решения задачи оптимального быстродействия
при моделировании химических процессов****Евгения Викторовна Антипина¹, Светлана Анатольевна Мустафина²,
Андрей Федорович Антипин³**^{1,2} Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия³ Стерлитамакский филиал Уфимского университета науки и технологий, Стерлитамак, Россия¹ stepashinaev@ya.ru² mustafina_sa@mail.ru³ andrejantipin@ya.ru

Аннотация. Рассматривается задача поиска оптимального по быстродействию управления химическим процессом, динамика которого описывается системой нелинейных дифференциальных уравнений. В качестве управляющего воздействия выступает температура реакционной смеси. Для решения поставленной задачи предлагается применить метод дифференциальной эволюции. Предложенный способ решения задачи оптимального быстродействия сформулирован в виде численного алгоритма, который позволяет получить решение оптимизационной задачи без необходимости выбора начального приближения. Работа алгоритма апробирована на промышленно значимом процессе синтеза фталевого ангидрида.

Ключевые слова: задача оптимального быстродействия; химический процесс; метод дифференциальной эволюции.

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

Для цитирования: Антипина Е.В., Мустафина С.А., Антипин А.Ф. Численный алгоритм для поиска решения задачи оптимального быстродействия при моделировании химических процессов // Вестник Томского государственного университета. Управление, вычислительная техника и информатика. 2025. № 70. С. 4–14. doi: 10.17223/19988605/70/1

Original article

doi: 10.17223/19988605/70/1

**Numerical algorithm for finding a solution to the problem of optimal speed
in modeling chemical processes****Evgenia V. Antipina¹, Svetlana A. Mustafina², Andrey F. Antipin³**^{1,2} Ufa University of Science and Technology, Ufa, Russian Federation³ Sterlitamak branch of the Ufa University of Science and Technology, Sterlitamak, Russian Federation¹ stepashinaev@ya.ru² mustafina_sa@mail.ru³ andrejantipin@ya.ru

Abstract. The problem of finding the optimal control speed for a chemical process, the dynamics of which is described by a system of nonlinear differential equations, is considered. The temperature of the reaction mixture acts

as a control action. To solve the problem, it is proposed to apply the differential evolution method. The proposed method for solving the problem of optimal control speed is formulated as a numerical algorithm that allows obtaining a solution to the optimization problem without the need to select an initial approximation. The algorithm has been tested on an industrially significant process of phthalic anhydride synthesis.

Keywords: optimal speed problem; chemical process; differential evolution method.

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

For citation: Antipina, E.V., Mustafina, S.A., Antipin, A.F. (2025) Numerical algorithm for finding a solution to the problem of optimal speed in modeling chemical processes. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Upravlenie, vychislitel'naja tehnika i informatika – Tomsk State University Journal of Control and Computer Science*. 70. pp. 4–14. doi: 10.17223/19988605/70/1

Введение

При исследовании процессов химической технологии часто возникает необходимость в решении оптимизационных задач. Одна из таких задач – задача оптимального быстродействия, в которой требуется выбрать значения управляющих параметров в каждый момент времени, чтобы перевести процесс из заданного начального состояния в заданное конечное состояние за минимальное время. К данному классу задач относятся задачи поиска оптимального управления периодическими химико-технологическими процессами, задачи наискорейшего перевода процесса с одного режима эксплуатации на другой, задачи выбора оптимального температурного профиля в реакторе идеального вытеснения и др.

Одной из трудностей, возникающих при решении задач на основе математического описания химических процессов, является нелинейность их динамики. Наиболее часто математическую модель химического процесса представляют в виде системы обыкновенных дифференциальных уравнений, содержащую экспоненциальную зависимость константы скорости реакции от температуры [1, 2]. Нелинейность математических моделей химических процессов усложняет их исследование и управление и приводит к необходимости применения специальных подходов. Поэтому актуальной является разработка методов и алгоритмов поиска оптимального по быстродействию управления химическими процессами.

Одним из методов, применяемых для решения нелинейных задач оптимального быстродействия, является принцип максимума Понтрягина [3]. С помощью принципа максимума исходная задача сводится к краевой задаче для системы обыкновенных дифференциальных уравнений, решение которой связано с выбором начальных значений сопряженных переменных. Основная трудность применения данного метода при решении задач оптимального управления химическими процессами – необходимость определения начальных условий для решения сопряженной системы с учетом физико-химического смысла задачи.

При управлении химическими процессами в большинстве случаев достаточно иметь приближенное решение оптимизационной задачи ввиду необходимости оперативного реагирования на быстро меняющиеся условия протекания процесса. Поэтому для решения задачи быстродействия можно применить методы эволюционных вычислений, успешно зарекомендовавшие себя при решении практических задач, когда традиционные методы неэффективны [4, 5]. Один из таких методов – метод дифференциальной эволюции [6]. Данный метод является прямым и не зависит от начального приближения решения задачи. Отсутствие чувствительности метода дифференциальной эволюции к начальному приближению достигается за счет того, что на каждой итерации оптимизируется не одно возможное решение, а одновременно рассматривается их совокупность, что позволяет увеличить область поиска. Метод дифференциальной эволюции имеет меньшее количество настраиваемых параметров, в отличие от других методов эволюционного поиска, таких как генетические алгоритмы, метод искусственных иммунных систем и др. В работе [7] показано, что для решения оптимизационных задач с помощью метода дифференциальной эволюции затрачивается меньше времени по сравнению с другими стохастическими методами оптимизации.

Цель работы – разработка численного алгоритма определения решения задачи оптимального быстрогодействия для химического процесса на основе метода дифференциальной эволюции.

1. Постановка задачи

Пусть математическое описание химического процесса представляет собой систему обыкновенных дифференциальных уравнений

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

с начальными условиями

$$x(0) = x^0, \quad (2)$$

где $x(t) = (x_1(t), \dots, x_n(t))^T$ – вектор концентраций веществ (фазовые переменные), $u(t)$ – параметр управления, $t \in [0, T]$ – время, $f(x(t), u(t), t) = (f_1(x(t), u(t), t), f_2(x(t), u(t), t), \dots, f_n(x(t), u(t), t))$ – вектор-функция, непрерывная вместе со своими частными производными.

Пусть заданы значения концентраций веществ в конечный момент времени $t = T$:

$$x(T) = x^1. \quad (3)$$

Параметром управления $u(t)$ могут выступать температура реакционной смеси, давление, скорость подачи реагентов и др. Рассмотрим в качестве управления $u(t)$ температуру реакции, на значения которой наложены ограничения

$$u_{\min} \leq u(t) \leq u_{\max}, \quad t \in [0, T]. \quad (4)$$

Будем искать температуру реакции $u(t)$ в классе кусочно-постоянных функций. Разобьем отрезок $[0, T]$ точками $t_1, t_2, \dots, t_s$ так, что $t_0 < t_1 < \dots < t_{s+1}$, $t_0 = 0$, $t_{s+1} = T$. На каждом из отрезков $t \in [t_j, t_{j+1}]$ температура принимает постоянное значение $u(t) = u_j$.

Требуется определить температурный режим $u(t)$ ($t \in [0, T]$), удовлетворяющий условию (4) и переводящий химический процесс, описываемый системой (1), из начального состояния (2) в конечное состояние (3) за минимальное время, т.е. минимизирующий целевой функционал

$$G(u) = T. \quad (5)$$

2. Алгоритм дифференциальной эволюции для решения задачи оптимального быстрогодействия

Сформулируем алгоритм поиска решения задачи (1)–(5) на основе метода дифференциальной эволюции. Работа метода основана на имитации эволюционных процессов, которым подвергаются векторы-индивиды [8, 9]. Функцией приспособленности, определяющей пригодность вектора-индивида в качестве решения задачи, выступает целевая функция. Обычно условием окончания расчетов является достижение заданного пользователем максимального количества итераций.

Введем в рассмотрение векторы-индивиды p_i ($i = \overline{1, m}$), образующие популяцию и являющиеся потенциальным решением задачи быстрогодействия. В качестве компонентов каждого вектора-индивида зададим управление $u_j = u(t_j)$, $t_j \in [0, T]$, $j = \overline{0, s}$, $t_0 = 0$, $t_{s+1} = T$, и продолжительность химической реакции:

$$p_{ij} = \begin{cases} u_{ij}, & j = \overline{0, s}, \\ T, & j = s + 1, \end{cases} \quad (6)$$

где $i = \overline{1, m}$.

Пусть функцией приспособленности является не целевой функционал (5), а функция вида:

$$Q(p_k) = \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i^k - x_i^1)^2}, \quad (7)$$

где $x_1^k, x_2^k, \dots, x_n^k$ – значения концентраций веществ, вычисленные путем решения системы дифференциальных уравнений (1) с начальными условиями (2) для вектора-индивида p_k в конечный момент времени $t = p_{k\ s+1}$ и кусочно-постоянного управления с узлами $(p_{i0}, p_{i1}, \dots, p_{is})$. Чем меньше значение $Q(p_k)$, тем точнее выполнены терминальные условия (3), поэтому вектор-индивид p_k является более приспособленным и больше других подходит в качестве решения задачи быстрогодействия.

Зададим в качестве критерия останова выполнение неравенства для некоторого вектора-индивида p_k текущей популяции:

$$Q(p_k) < \varepsilon, \quad (8)$$

где ε – заданный пользователем параметр.

Условие (8) может быть выполнено при нескольких возможных температурных режимах. Поэтому будем заносить возможные решения задачи быстрогодействия в отдельный массив векторов-индивидов *vectors*. В конце работы алгоритма из векторов-индивидов массива *vectors* выберем тот вектор p_k , у которого последний компонент $p_{k\ s+1}$, соответствующий продолжительности химической реакции, принимает наименьшее значение. Выбранный вектор-индивид будет приближенным решением задачи оптимального быстрогодействия (1)–(5).

Алгоритм дифференциальной эволюции для решения задачи (1)–(5) состоит из следующих шагов.

Шаг 1. Задать параметры алгоритма: m – количество векторов-индивидов в популяции, $\bar{T}$ – максимальная продолжительность химической реакции, s – количество точек разбиения отрезка $[0, \bar{T}]$, $kross \in [0, 1]$ – параметр скрещивания (кроссовера), $mut \in [0, 5; 1]$ – параметр мутации, ε – параметр окончания вычислений.

Шаг 2. Сгенерировать популяцию векторов-индивидов $p_i = (p_{i0}, p_{i1}, \dots, p_{is}, p_{i\ s+1})$, где

$$p_{ij} = \begin{cases} u_{\min} + \gamma_{ij}(u_{\max} - u_{\min}), & j = \overline{0, s}, \\ \gamma_{ij} \bar{T}, & j = s + 1. \end{cases} \quad (9)$$

Здесь $\gamma_{ij} \in [0, 1]$ – случайное число, $i = \overline{1, m}$.

Шаг 3. Рассчитать приспособленность каждого вектора-индивида p_i ($i = \overline{1, m}$). Для этого найти численное решение системы дифференциальных уравнений (1) с шагом разбиения интервала времени $[0, p_{i\ s+1}]$, равным $\frac{p_{i\ s+1}}{s}$.

Шаг 4. Проверить условие (8) для каждого вектора-индивида p_i ($i = \overline{1, m}$). Если оно выполнено, то поместить вектор p_i в массив *vectors*.

Шаг 5. Задать в качестве вектора-мишени первый вектор-индивид: $p_{mishen} = p_1$.

Шаг 6. Найти в популяции наиболее приспособленный вектор-индивид p_{prisp} .

Шаг 7. Выполнить операцию мутации. Выбрать случайным образом два различных вектора-индивида p_a , p_b , причем $p_a \neq p_{mishen}$, $p_b \neq p_{mishen}$, $p_a \neq p_{prisp}$, $p_b \neq p_{prisp}$. Создать вектор-мутант p_{mutant} :

$$p_{mutant} := p_{prisp} + mut(p_a - p_b).$$

Шаг 8. Выполнить операцию скрещивания для вектора-мутанта и вектора-мишени. Создать пробный вектор p_{prob} :

$$p_{prob\ j} = \begin{cases} p_{mutant\ j}, & \alpha_j \leq kross, \\ p_{mishen\ j}, & \alpha_j > kross, \end{cases} \quad j = \overline{0, s},$$

где $\alpha_j \in [0, 1]$ – случайное число.

Шаг 9. Вычислить значение функции приспособленности для пробного вектора $Q(p_{prob})$.

Шаг 10. Проверить условие (8) для пробного вектора p_{prob} . Если оно выполнено, то поместить пробный вектор в массив *vectors*.

Шаг 11. Обновить популяцию. Если $Q(p_{prob}) < Q(p_{mishen})$, то в популяцию вместо вектора-мишени поместить пробный вектор, т.е. $p_{mishen} = p_{prob}$. Иначе вектор-мишень p_{mishen} оставить в популяции.

Шаг 12. Если в качестве вектора-мишени рассмотрены все векторы-индивиды текущей популяции, т.е. $p_{mishen} = p_m$, то перейти к шагу 13. Иначе перейти к следующему в популяции вектору-мишени $p_{mishen} = p_{mishen+1}$ и перейти к шагу 6.

Шаг 13. Проверить условие (8) для векторов-индивидов текущей популяции. Если условие (8) выполнено для вектора p_i ($i = \overline{1, m}$), то поместить ее в массив *vectors* и перейти к шагу 14. Иначе перейти к шагу 5.

Шаг 14. Найти в массиве *vectors* вектор-индивид p_k , у которого последний компонент принимает наименьшее значение. В качестве наименьшей продолжительности химической реакции принять $T_{min} = p_{k\ s+1}$, а значениям температуры $u(t)$ в дискретные моменты времени присвоить значения элементов p_{kj} ($j = \overline{0, s}$) согласно формуле (6).

Сформулированный алгоритм дифференциальной эволюции для решения задачи оптимального быстрогодействия имеет следующие особенности:

- 1) структура вектора-индивида включает в себя дискретные значения параметра управления и времени;
- 2) функцией приспособленности вектора-индивида является не целевой функционал в форме (5), а отклонение между заданным конечным состоянием процесса (4) и вычисленным с помощью алгоритма;
- 3) введен специальный массив *vectors* для запоминания наиболее приспособленных векторов-индивидов, из которых в конце работы алгоритма выбирается решение с наименьшим значением времени;
- 4) условием окончания вычислительного процесса является отклонение от терминального состояния управляемого процесса.

3. Вычислительный эксперимент

Применим разработанный алгоритм для решения задач быстрогодействия на примере процесса получения фталевого ангидрида. На основе фталевого ангидрида производят различные красители, лекарственные препараты, инсектициды, присадки к смазочным маслам, добавки для авиационного топлива и др.

Введем следующие обозначения: X_1 – нафталин, X_2 – нафтохинон, X_3 – фталевый ангидрид, X_4 – углекислый газ, X_5 – малеиновый ангидрид. С учетом введенных обозначений совокупность химических превращений процесса получения фталевого ангидрида можно описать последовательностью стадий [10]:



Кинетику процесса можно описать с помощью системы обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\frac{dx_i}{dt} = f_i(t, x, u) \quad (11)$$

с начальными условиями

$$x_i(0) = x_i^0, \quad i = \overline{1, 5}, \quad (12)$$

где $x = (x_1, x_2, \dots, x_5)$ – вектор концентраций веществ (моль/л), $t \in [0, T]$ – время протекания реакции (ч), u – температура реакции (К).

Согласно закону действующих масс правыми частями системы дифференциальных уравнений (10) являются функции

$$\begin{aligned} f_1(t, x, u) &= -k_1(u)x_1 - k_3(u)x_1 - k_4(u)x_1, \\ f_2(t, x, u) &= k_1(u)x_1 - k_2(u)x_2 - k_5(u)x_2, \\ f_3(t, x, u) &= k_3(u)x_1 + k_5(u)x_2 - k_6(u)x_3, \\ f_4(t, x, u) &= k_2(u)x_2 + k_4(u)x_1, \\ f_5(t, x, u) &= k_6(u)x_3, \end{aligned}$$

где $k_j(u)$ – константа скорости j -й стадии ($1/\text{ч}$, $j = \overline{1, 6}$), зависящая от температуры u исходя из уравнения Аррениуса

$$k_j(u) = k_{0j} e^{\left(-\frac{E_j}{Ru} \right)},$$

где k_{0j} – предэкспоненциальный множитель ($1/\text{ч}$), E_j – энергия активации j -й стадии (Дж/моль), R – универсальная газовая постоянная (8,31 Дж/(моль·К)).

Численные значения кинетических параметров реакции синтеза фталевого ангидрида приведены в работе [10].

Рассмотрим в качестве управления температуру реакции $u(t)$, на значения которой наложены ограничения

$$620 \text{ K} \leq u(t) \leq 644 \text{ K}, \quad t \in [0, T]. \quad (13)$$

Пусть начальные концентрации заданы значениями (моль/л)

$$x_1(0) = 1, \quad x_i(0) = 0, \quad i = \overline{2, 5}. \quad (14)$$

Целевым продуктом реакции (10) является фталевый ангидрид X_3 . Пусть требуется, чтобы его концентрация в конце реакции составляла 0,77 моль/л:

$$x_3(T) = 0,77. \quad (15)$$

Необходимо найти управление $u(t)$ с учетом ограничений (13), переводящее процесс, описываемый системой (11), из состояния (14) в состояние (15) за минимальное время $T_{\min}$.

Для решения задачи (10)–(15) на языке программирования Delphi разработан программный комплекс, реализующий алгоритм метода дифференциальной эволюции. Алгоритм применен с параметрами: размер популяции $m = 50$, максимальная продолжительность химической реакции $\bar{T} = 5$ ч, количество точек разбиения интервала времени $s = 50$, параметр скрещивания $kross = 0,7$, параметр мутации $mut = 0,8$, параметр окончания расчетов $\varepsilon = 0,01$.

В результате вычислений установлено, что наибольшее значение концентрации фталевого ангидрида, равное 0,763 моль/л, можно получить за наименьшее время $T_{\min} = 1,45$ ч, если на протяжении всего процесса поддерживать минимальную допустимую температуру (рис. 1). Относительная погрешность выполнения терминального условия составила 0,91%.

В табл. 1 представлены результаты решения системы дифференциальных уравнений (11) с начальными условиями (14) при некоторых допустимых значениях температуры и времени протекания реакции. Из табл. 1 видно, что с помощью разработанного алгоритма вычислено наименьшее время процесса синтеза фталевого ангидрида при температуре $u = 620 \text{ K}$, при этом $x_3(T) = 0,763$ моль/л.

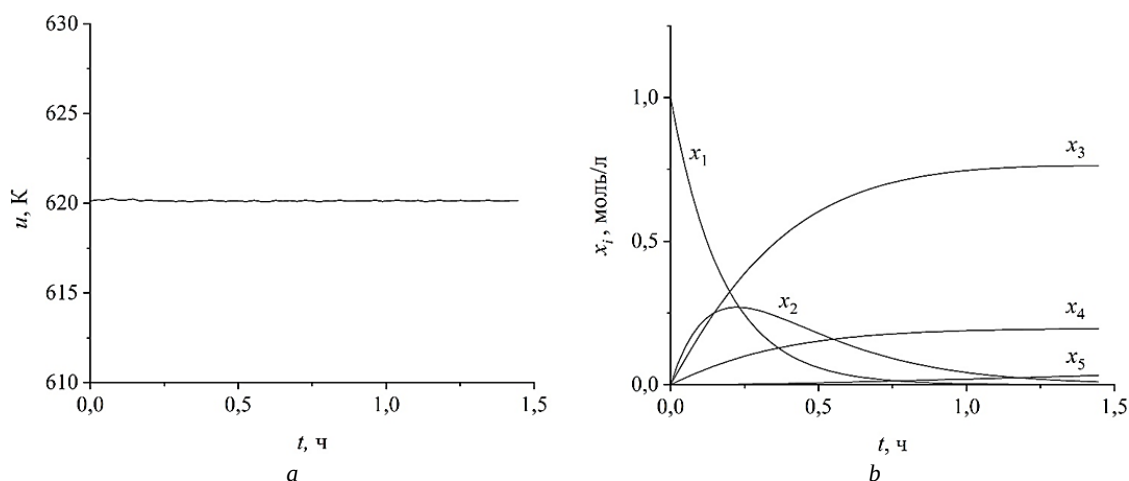


Рис. 1. Оптимальный температурный режим (а) и динамика концентраций веществ (b) в задаче (10)–(15)
Fig. 1. Optimal temperature regime (a) and dynamics of substance concentrations (b) in problem (10)–(15)

Таблица 1

Значение концентрации целевого вещества X_3 , вычисленное при различных условиях протекания реакции

u , К	T , ч	$x_3(T)$, моль/л
620	0,5	0,602
	1	0,746
	1,5	0,763
	2	0,754
	2,5	0,742
	3	0,728
628	0,5	0,632
	1	0,742
	1,5	0,742
	2	0,724
	2,5	0,703
	3	0,683
636	0,5	0,654
	1	0,728
	1,5	0,710
	2	0,680
	2,5	0,650
	3	0,621
644	0,5	0,666
	1	0,702
	1,5	0,663
	2	0,619
	2,5	0,577
	3	0,538

Рассмотрим задачу быстродействия для процесса синтеза фталевого ангидрида, в которой задана концентрация промежуточного вещества X_2 в конце реакции, равная 0,3 моль/л:

$$x_2(T) = 0,3. \quad (16)$$

С помощью разработанного алгоритма при $\varepsilon = 0,1$ вычислены оптимальный температурный режим и соответствующие концентрации веществ (рис. 2). Наименьшее время процесса составило 0,186 ч, при этом концентрация нафтохинона равна 0,286 моль/л, что на 4,7% ниже заданного значения (16).

В табл. 2 приведены значения концентрации нафтохинона, рассчитанные при варьировании продолжительности процесса для различных изотермических режимов. Из данных табл. 2 следует, что наиболее близкое значение концентрации нафтохинона к значению 0,3 моль/л (0,272 моль/л)

обеспечивается при постоянной температуре 628 К и продолжительности процесса, равной 0,2 ч. Однако погрешность выполнения условия (16) (9,3%) больше его погрешности для решения задачи, полученного с помощью алгоритма дифференциальной эволюции (4,7%). При этом время протекания процесса превышает вычисленное наименьшее значение продолжительности процесса, равное 0,186 ч.

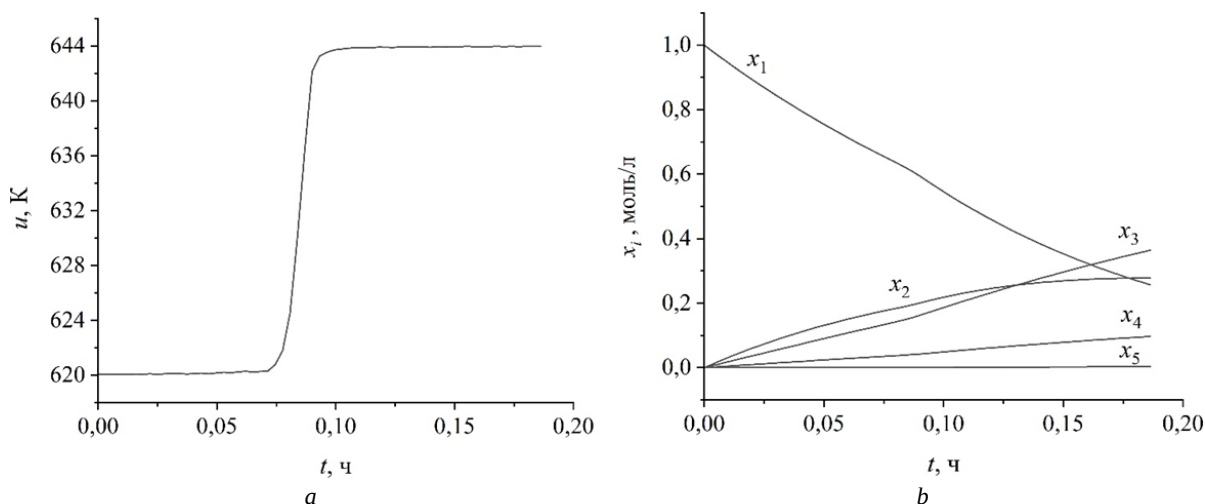


Рис. 2. Оптимальный температурный режим (а) и динамика концентраций веществ (b) в задаче (10)–(14), (16)
Fig. 2. Optimal temperature regime (a) and dynamics of substance concentrations (b) in problem (10)–(14), (16)

Таблица 2

Значение концентрации промежуточного вещества X_2 , вычисленное при различных условиях протекания реакции

u , К	T , ч	$x_2(T)$, моль/л
620	0,1	0,210
	0,2	0,268
	0,3	0,258
	0,5	0,179
	1	0,043
628	0,1	0,225
	0,2	0,272
	0,3	0,247
	0,5	0,155
	1	0,030
636	0,1	0,239
	0,2	0,271
	0,3	0,233
	0,5	0,130
	1	0,020
644	0,1	0,252
	0,2	0,266
	0,3	0,214
	0,5	0,107
	1	0,013

Пусть теперь требуется определить управление $u(t)$, при котором за наименьшее время полностью израсходуется исходное вещество – нафталин, т.е.

$$x_1(T) = 0. \quad (17)$$

Вычисления проведены с точностью $\varepsilon = 10^{-3}$. Расчеты показали, что реакцию следует проводить при максимально допустимой температуре $u = 644$ К на протяжении 1 ч (рис. 3, а). При этом в реакционной системе останется $1,61 \cdot 10^{-4}$ моль/л исходного вещества (рис. 3, b).

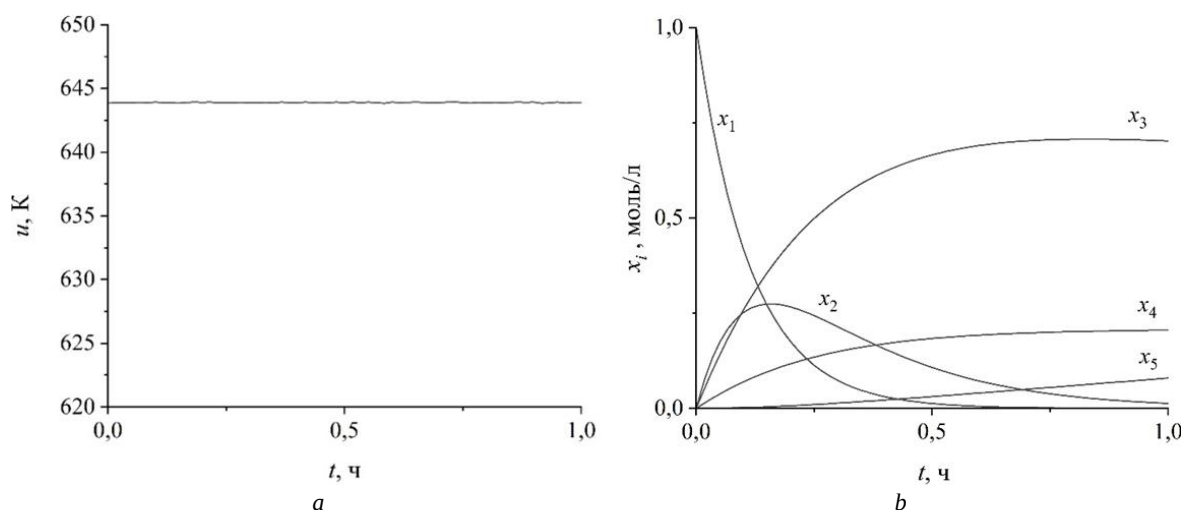


Рис. 3. Оптимальный температурный режим (a) и динамика концентраций веществ (b) в задаче (10)–(14), (17)
Fig. 3. Optimal temperature regime (a) and dynamics of substance concentrations (b) in problem (10)–(14), (17)

Значение концентрации нафталина вычислено при некоторых допустимых значениях управления u и времени T (табл. 3). Проанализировав таблицу, можно заметить, что заданной точности вычислений $\varepsilon = 10^{-3}$ с наименьшим временем протекания реакции, равной 1 ч, удовлетворяют два температурных режима: $u = 646$ К ($x_1(T) = 5,17 \cdot 10^{-4}$ моль/л) и $u = 644$ К ($x_1(T) = 1,61 \cdot 10^{-4}$ моль/л). Однако точность выполнения терминального ограничения (14) выше во втором случае. Поэтому в качестве решения задачи быстрогодействия (10)–(14), (17) можно принять значения управления u и времени $T_{\min}$, вычисленные с помощью алгоритма дифференциальной эволюции.

Таблица 3

Значение концентрации исходного вещества X_1 , вычисленное при различных условиях протекания реакции

u , К	T , ч	$x_1(T)$, моль/л
620	0,5	$0,60 \cdot 10^{-1}$
	1	$3,59 \cdot 10^{-3}$
	1,5	$2,15 \cdot 10^{-4}$
	2	$1,29 \cdot 10^{-5}$
	2,5	$7,72 \cdot 10^{-7}$
	3	$4,63 \cdot 10^{-8}$
628	0,5	$3,80 \cdot 10^{-2}$
	1	$1,45 \cdot 10^{-3}$
	1,5	$5,51 \cdot 10^{-5}$
	2	$2,09 \cdot 10^{-6}$
	2,5	$7,97 \cdot 10^{-8}$
	3	$3,03 \cdot 10^{-9}$
636	0,5	$2,30 \cdot 10^{-2}$
	1	$5,17 \cdot 10^{-4}$
	1,5	$1,17 \cdot 10^{-5}$
	2	$2,67 \cdot 10^{-7}$
	2,5	$6,06 \cdot 10^{-9}$
	3	$1,38 \cdot 10^{-10}$
644	0,5	$1,30 \cdot 10^{-2}$
	1	$1,61 \cdot 10^{-4}$
	1,5	$2,05 \cdot 10^{-6}$
	2	$2,59 \cdot 10^{-8}$
	2,5	$3,30 \cdot 10^{-9}$
	3	$4,19 \cdot 10^{-12}$

Исходя из результатов численных экспериментов, можно сделать вывод о корректной работе алгоритма поиска решения задачи оптимального быстрогодействия. Поэтому его можно применять

при исследовании закономерностей протекания химических процессов на основе их математических моделей.

Заключение

Таким образом, поиск решения задач оптимального быстродействия для химических процессов, описываемых нелинейными системами дифференциальных уравнений, можно осуществлять с помощью разработанного алгоритма дифференциальной эволюции. Особенность предложенного подхода состоит в том, что его можно применять для получения решения задач оптимального быстродействия при неизвестном начальном приближении, которое обычно задается исследователем, исходя из смысла поставленной задачи.

Работа алгоритма апробирована на процессе получения фталевого ангидрида. Вычислены оптимальный температурный режим и наименьшая продолжительность процесса при заданном значении концентрации целевого продукта реакции – фталевого ангидрида, при фиксированном содержании в реакционной смеси промежуточного вещества – нафтохинона, при условии полного израсходования исходного вещества – нафталина.

Алгоритм можно применять для решения задач быстродействия в химической технологии, в которых имеется несколько управляющих воздействий, путем модификации структуры вектора-индивида.

Список источников

1. Яблонский Г.С., Быков В.И., Горбань А.Н. Кинетические модели каталитических реакций. Новосибирск : Наука. 1983. 253 с.
2. Волков А.А., Булчевский Е.А., Лавренов А.В. Кинетика олигомеризации этилена на катализаторе $\text{NiO/B}_2\text{O}_3\text{-Al}_2\text{O}_3$ в жидкой фазе // Журнал Сибирского федерального университета. Сер. Химия. 2013. Т. 6, № 4. С. 352–360.
3. Карамзин Д.Ю. Принцип максимума Понтрягина для задачи оптимального управления с фазовыми ограничениями при ослабленных предположениях управляемости // Вопросы теории безопасности и устойчивости систем. 2018. № 20. С. 46–61.
4. Антипина Е.В., Мустафина С.И., Антипин А.Ф., Мустафина С.А. Численный алгоритм решения задачи оптимального управления с терминальными ограничениями для динамических систем // Автометрия. 2020. Т. 56, № 6. С. 132–140. doi: 10.15372/AUT20200615
5. Gulbaz R., Siddiqui A.B., Anjum N., Alotaibi A.A., Althobaiti T., Ramzan N. Balancer Genetic Algorithm–A Novel Task Scheduling Optimization Approach in Cloud Computing // Applied Sciences. 2021. V. 11, is. 14. Art. 6244. doi: 10.3390/app11146244
6. 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. V. 10. P. 253–277. doi: 10.1007/s13042-017-0711-7
7. Ковалевич А.А., Якимов А.И., Албкеират Д.М. Исследование стохастических алгоритмов оптимизации для применения в имитационном моделировании систем // Информационные технологии. 2011. № 8. С. 55–60.
8. Карпенко А.П. Эволюционные операторы популяционных алгоритмов глобальной оптимизации // Математика и математическое моделирование. 2018. № 1. С. 59–89. doi: 10.24108/mathm.0118.0000103
9. Storn R., Price K. Differential Evolution – A Simple and Efficient Heuristic for Global Optimization over Continuous Spaces // Journal of Global Optimization. 1997. V. 11. P. 341–359. doi: 10.1023/A:1008202821328
10. 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.

References

1. Yablonsky, G.S., Bykov, V.I. & Gorban, A.N. (1983) *Kineticheskie modeli kataliticheskikh reaktsiy* [Kinetic models of catalytic reactions]. Novosibirsk: Nauka.
2. Volkov, A.A., Buluchevskiy, E.A. & Lavrenov, A.V. (2013) Kinetika oligomerizatsii etilena na katalizatore $\text{NiO/B}_2\text{O}_3\text{-Al}_2\text{O}_3$ v zhidkoy faze [Kinetics of Ethylene Oligomerization on $\text{NiO/B}_2\text{O}_3\text{-Al}_2\text{O}_3$ in Liquid Phase]. *Zhurnal Sibirskogo federal'nogo universiteta. Ser. Khimiya*. 6(4). pp. 352–360.
3. Karamzin, D.Yu. (2018) Printsip maksimuma Pontryagina dlya zadachi optimal'nogo upravleniya s fazovymi ogranicheniyami pri oslablennykh predpolozheniyakh upravlyaemosti [The Pontryagin maximum principle for state constrained optimal control problem under weakened controllability hypothesis]. *Voprosy teorii bezopasnosti i ustoychivosti sistem*. 20. pp. 46–61.
4. Antipina, E.V., Mustafina, S.I., Antipin, A.F. & Mustafina, S.A. (2020) Chislennyy algoritm resheniya zadachi optimal'nogo upravleniya s terminal'nymi ogranicheniyami dlya dinamicheskikh sistem [A numerical algorithm for solving optimal control problems with terminal constraints for dynamical systems]. *Avtometriya*. 56(6). pp. 132–140. DOI: 10.15372/AUT20200615

5. Gulbaz, R., Siddiqui, A.B., Anjum, N., Alotaibi, A.A., Althobaiti, T. & Ramzan, N. (2021) Balancer Genetic Algorithm– A Novel Task Scheduling Optimization Approach in Cloud Computing. *Applied Sciences*. 11(14). pp. 6244. DOI: 10.3390/app11146244
6. Mohamed, A.W. & Mohamed, A.K. (2019) Adaptive Guided Differential Evolution Algorithm with Novel Mutation for Numerical Optimization. *International Journal of Machine Learning and Cybernetics*. 10. pp. 253–277. DOI: 10.1007/s13042-017-0711-7
7. Kovalevich, A.A., Yakimov, A.I. & Albkeirat, D.M. (2011) Issledovanie stokhasticheskikh algoritmov optimizatsii dlya primeneniya v imitatsionnom modelirovanii sistem [Research of optimization stochastic algorithms for application in simulations of systems]. *Informatsionnye tekhnologii*. 8. pp. 55–60.
8. Karpenko, A.P. (2018) Evolyutsionnye operatory populyatsionnykh algoritmov global'noy optimizatsii [Evolutionary operators for global optimization population-based algorithms]. *Matematika i matematicheskoe modelirovanie*. 1. pp. 59–89. DOI: 10.24108/mathm.0118.0000103
9. Storn, R. & Price, K. (1997) Differential Evolution – A Simple and Efficient Heuristic for Global Optimization over Continuous Spaces. *Journal of Global Optimization*. 11. pp. 341–359. DOI: 10.1023/A:1008202821328
10. Antipina, E.V., Mustafina, S.A. & Antipin, A.F. (2019) Chislennyy algoritm identifikatsii kineticheskoy modeli khimicheskoy reaktsii [Numerical algorithm of identifying the kinetic model of a chemical reaction]. *Vestnik Tekhnologicheskogo universiteta*. 22(9). pp. 13–17.

Информация об авторах:

Антипина Евгения Викторовна – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник управления научных исследований и разработок Уфимского университета науки и технологий (Уфа, Россия). E-mail: stepashinaev@ya.ru

Мустафина Светлана Анатольевна – профессор, доктор физико-математических наук, проректор по цифровой трансформации Уфимского университета науки и технологий (Уфа, Россия). E-mail: mustafina_sa@mail.ru

Антипин Андрей Федорович – доцент, кандидат технических наук, доцент кафедры прикладной информатики и программирования Стерлитамакского филиала Уфимского университета науки и технологий (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 Physical and Mathematical Sciences, Senior Researcher, Ufa University of Science and Technology, Ufa, Russian Federation). E-mail: stepashinaev@ya.ru

Mustafina Svetlana A. (Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Vice-Rector for Digital Transformation, Ufa University of Science and Technology, Ufa, Russian Federation). E-mail: mustafina_sa@mail.ru

Antipin Andrey F. (Candidate of Technical Sciences, Associate Professor, Sterlitamak branch of the Ufa University of Science and Technology, 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 30.11.2024; принята к публикации 03.03.2025

Received 30.11.2024; accepted for publication 03.03.2025