

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ MODELING AND SIMULATION

doi: 10.17586/2226-1494-2025-25-6-1168-1176

УДК 66.011:519.688:004.89

Поиск оптимального температурного профиля химического процесса на основе генетического алгоритма

Эльдар Наилевич Мифтахов¹✉, Дмитрий Владимирович Иванов²

^{1,2} Уфимский университет науки и технологий, Уфа, 450076, Российская Федерация

¹ promif@mail.ru✉, <https://orcid.org/0000-0002-0471-5949>

² ivanov_dv@list.ru, <https://orcid.org/0009-0005-7117-0191>

Аннотация

Введение. Рассмотрена проблема поиска оптимального температурного профиля сложного физико-химического процесса. Наибольшие проблемы возникают при исследовании и оптимизации многокомпонентных систем. Это определяет научный и практический интерес к разработке наиболее эффективных инструментов поиска оптимальных режимов организации производства. Одним из ключевых аспектов является учет динамических ограничений, влияющих на скорость изменения управляющих параметров и обеспечивающих построение физически реализуемых траекторий изменения температуры. Для решения этой задачи предложен модифицированный генетический алгоритм, позволяющий учитывать заданные ограничения. **Метод.** Для сложного физико-химического процесса сформулирована задача оптимизации, которая заключается в поиске оптимального температурного профиля, способствующего максимизации (или минимизации) заданного целевого параметра в условиях задаваемых ограничений на скорость изменения температуры. Метод основан на дискретном разбиении всего времени протекания процесса и представлении температурного профиля в виде кусочно-линейной функции, значения которой на каждом из интервалов определяются с использованием генетического алгоритма оптимизации. Основные этапы выполнения генетического алгоритма были модифицированы и представлены в виде адаптированной схемы эволюционного поиска, учитывающей допустимые границы изменения управляющих параметров. Внесенные модификации позволили повысить устойчивость алгоритма к локальным экстремумам и обеспечить более точное соблюдение задаваемых ограничений. **Основные результаты.** Эффективность алгоритма, функциональность программного модуля и механизм взаимодействия были апробированы путем организации вычислительного эксперимента по исследованию кинетики реакции диметилкарбоната со спиртами в присутствии дикобальтотакарбоната. Результаты численного моделирования продемонстрировали, что температурный режим оказывает значительное влияние на кинетику процесса, а проведенные вычислительные испытания позволили однозначно идентифицировать оптимальный температурный профиль, поиск которого проводился в условиях ограничений на рост температуры и дополнительного требования линейного изменения концентрации целевого продукта. **Обсуждение.** Предложенная модификация генетического алгоритма позволила значительно повысить его устойчивость к локальным экстремумам и обеспечить более точное соблюдение технологических ограничений. В частности, анализ полученных профилей показал, что представленный метод позволяет находить решения, обеспечивающие более равномерное распределение концентраций целевого продукта, что особенно важно при проектировании реакционных систем с высокой чувствительностью к изменению параметров. Разработанный метод оптимизации может быть полезен при проектировании и масштабировании химико-технологических процессов, а проведенное исследование подтверждает эффективность использования численных методов и эволюционных алгоритмов для оптимизации условий химических реакций.

Ключевые слова

эвристические методы, генетический алгоритм, оптимальный температурный профиль, реакция диметилкарбоната со спиртами

Благодарности

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-21-00380, <https://rscf.ru/project/24-21-00380/>.

© Мифтахов Э.Н., Иванов Д.В., 2025

Ссылка для цитирования: Мицхахов Э.Н., Иванов Д.В. Поиск оптимального температурного профиля химического процесса на основе генетического алгоритма // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2025. Т. 25, № 6. С. 1168–1176. doi: 10.17586/2226-1494-2025-25-6-1168-1176

Optimization of the temperature profile in a chemical process using a genetic algorithm

Eldar N. Miftakhov¹✉, Dmitry V. Ivanov²

^{1,2} Ufa University of Science and Technology, Ufa, 450076, Russian Federation

¹ promif@mail.ru✉, <https://orcid.org/0000-0002-0471-5949>

² ivanov_dv@list.ru, <https://orcid.org/0009-0005-7117-0191>

Abstract

This study addresses the problem of finding an optimal temperature profile for a complex physico-chemical process. The greatest difficulties arise in the study and optimization of multicomponent systems, which determines both scientific and practical interest in developing the most effective tools for identifying optimal production regimes. One of the key aspects is the consideration of dynamic constraints that affect the rate of change of control parameters and ensure the construction of physically feasible trajectories of temperature variation. To solve this problem, a modified genetic algorithm is proposed, allowing for the incorporation of predefined constraints. An optimization problem is formulated for a complex physico-chemical process, aiming to determine the optimal temperature profile that maximizes (or minimizes) a given target parameter while satisfying constraints on the rate of temperature change. The method is based on discretizing the total process duration and representing the temperature profile as a piecewise linear function, with segment values determined using a genetic optimization algorithm. The main stages of the genetic algorithm have been modified and presented as an adaptive evolutionary search scheme that accounts for permissible control parameter variations. These modifications enhance the algorithm robustness against local extrema and ensure more precise adherence to predefined constraints. The efficiency of the algorithm, the functionality of the software module, and the interaction mechanism were tested through a computational experiment investigating the kinetics of the reaction of dimethyl carbonate with alcohols in the presence of dicobalt octacarbonyl. Numerical simulations demonstrated that the temperature regime significantly influences reaction kinetics, and computational trials enabled the unambiguous identification of the optimal temperature profile under constraints on temperature increase and an additional requirement for the linear variation of the target product concentration. The proposed modification of the genetic algorithm significantly improved its robustness against local extrema and ensured stricter compliance with technological constraints. In particular, an analysis of the obtained profiles showed that the proposed method allows for solutions that ensure a more uniform distribution of the target product concentration, which is especially important in the design of reaction systems highly sensitive to parameter variations. This optimization approach can be useful for the design and scaling of chemical-technological processes, and the conducted study confirms the effectiveness of numerical methods and evolutionary algorithms for optimizing chemical reaction conditions.

Keywords

heuristic methods, genetic algorithm, optimal temperature profile, dimethyl carbonate reaction with alcohols

Acknowledgements

The study was supported by the grant from the Russian Science Foundation No. 24-21-00380, <https://rscf.ru/en/project/24-21-00380/>.

For citation: Miftakhov E.N., Ivanov D.V. Optimization of the temperature profile in a chemical process using a genetic algorithm. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2025, vol. 25, no. 6, pp. 1168–1176 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2025-25-6-1168-1176

Введение

Оптимизация параметров химических реакций является важнейшим этапом в повышении эффективности производственных процессов и снижении их затрат. Одним из ключевых факторов, определяющих протекание процесса, является температурный профиль, который оказывает прямое влияние как на скорость элементарных реакций, так и на выход целевых и побочных продуктов. Оптимизация температурного профиля позволяет снизить энергозатраты, повысить селективность и минимизировать образование нежелательных примесей, что особенно важно для таких высокотехнологичных отраслей, как, например, фармацевтическая и нефтехимическая промышленность [1, 2].

Наибольшие сложности в решении задач управления температурным режимом возникают при исследо-

довании и оптимизации многокомпонентных систем, реакции в которых протекают в несколько стадий. Классические подходы, в основе которых лежат многократные эмпирические испытания и экспериментальный подбор, требуют значительных затрат времени и ресурсов и не могут гарантировать нахождение оптимального решения. Все это определяет огромный научный и практический интерес к разработке наиболее эффективных инструментов поиска оптимальных режимов организации производства.

В основе классического метода моделирования сложных химических процессов и систем лежит кинетический подход [3, 4], в рамках которого набор химических реакций описывается системой дифференциальных уравнений, отражающих изменение материального баланса по каждому компоненту реакции. В дальнейшем полученная система расширяется уравнениями

теплопередачи и дополнительными балансовыми соотношениями. В условиях использования кинетического подхода к моделированию для определения оптимального режима производства предлагается разбиение всего времени протекания процесса на равные промежутки и представление температурного профиля в виде кусочно-линейной функции. Задача оптимизации в этом случае сводится к идентификации вектора, определяющего значения температуры в каждой точке дискретизации с использованием соответствующих методов и алгоритмов оптимизации. При этом открытым остается вопрос выбора соответствующих численных методов, способных решать задачи идентификации достаточно большого числа неизвестных. В частности, классические методы (градиентного спуска, Лагранжа [5] и т. д.) позволяют достигать высокой точности в случае исследования систем с достаточно простой структурой и небольшим количеством переменных. Кроме того, классические методы требуют знания аналитического представления целевой функции и недостаточно эффективны для задач глобальной оптимизации.

В последнее время широкое распространение благодаря универсальности и способности решать задачи глобальной оптимизации получили эвристические методы [6], принципиально отличающиеся от классических. Эти методы не предъявляют строгих требований к целевой функции, способны эффективно работать с нелинейными и многомерными данными, допускают возможность адаптации для решения разных типов задач. Однако, эвристические методы также не лишены недостатков, поскольку могут требовать тонкой настройки своих параметров и значительных вычислительных ресурсов. В работе [7] предложено решение задачи определения оптимального начального состава реакционной смеси методом, в основе которого лежит генетический алгоритм [8]. Полученные результаты подтвердили высокую эффективность алгоритма и его потенциал для решения задач глобальной оптимизации.

Кроме того, в доминирующей части научных исследований при решении подобных задач часто ограничиваются теоретической оптимизацией, когда найденные режимы характеризуются резкими изменениями температуры. В таких случаях не учитываются тепловая инерция системы, ограничения на скорость нагрева и охлаждения, а также процессы теплообмена, которые неизбежно сопровождают любой химический процесс. Пренебрежение физическими ограничениями приводит к нереализуемым решениям, которые не могут быть воспроизведены в экспериментальных или промышленных условиях. Реальная динамика изменения температуры определяется уравнениями теплопередачи и теплоемкостью реакционной среды, что требует более комплексного подхода к оптимизации. В настоящей работе предлагается рассмотреть влияние динамических ограничений на температурный профиль с целью построения физически реализуемых траекторий.

Цель работы — разработка алгоритма поиска оптимального температурного режима сложного физико-химического процесса с учетом задаваемых динамических ограничений на скорость изменения температуры.

Постановка задачи

Сформулируем задачу идентификации оптимального температурного профиля в общем виде. Пусть химическая реакция на промежутке времени $[t_{start}, t_{end}]$ описывается системой обыкновенных дифференциальных уравнений с начальными условиями $\mathbf{X}(t_{start}) = \mathbf{X}^0$:

$$\frac{d\mathbf{X}}{dt} = \mathbf{F}(t, \mathbf{T}, \mathbf{X}(t, \mathbf{T})),$$

где $\mathbf{X}(t, \mathbf{T}) = (x_1(t, \mathbf{T}), \dots, x_n(t, \mathbf{T}))^T$ — вектор концентраций веществ; t — время; $\mathbf{T} = (T_1, \dots, T_m)$ — вектор, определяющий температуру реакционной смеси в дискретные моменты времени; \mathbf{F} — непрерывная вектор-функция; $\mathbf{X}^0 = (x_1^0, x_2^0, \dots, x_n^0)^T$ — вектор начальных концентраций; m — количество точек разбиения исходного отрезка $[t_{start}, t_{end}]$.

В качестве критерия оптимальности примем функционал общего вида:

$$H(\mathbf{T})(t_{end}) = H(x_1(t_{end}, \mathbf{T}), \dots, x_n(t_{end}, \mathbf{T})) \rightarrow \text{extr}, \quad (1)$$

который может выражать выход целевого или побочного продукта, конверсию, селективность и т. д.

С целью построения физически реализуемых траекторий введем ограничение на изменение температуры в виде:

$$|T_{i+1} - T_i| \leq \Delta T_{\max}, \quad i = 1, \dots, m - 1, \quad (2)$$

где T_i — температура реакционной смеси в момент времени t_i ; ΔT_{\max} — заданное максимально допустимое изменение температуры за один шаг. В силу технологических ограничений температура реакционной смеси может меняться в диапазоне

$$T_{\min} \leq T_i \leq T_{\max}, \quad i = 1, \dots, m. \quad (3)$$

Требуется найти оптимальный температурный профиль \mathbf{T}^* размерностью m , доставляющий оптимум функционалу (1) при выполнении ограничений (2) и (3).

В работах [9, 10] были разработаны вариации эвристических методов, успешно примененные для решения задач оптимизации различного типа. Однако в условиях заданных ограничений на искомый температурный профиль требуется модифицировать ряд шагов алгоритма, чтобы гарантированно найти глобальное решение задачи.

Описание генетического алгоритма с учетом ограничений на скорость изменения температуры

В основе предлагаемого подхода к решению задачи оптимизации лежит генетический алгоритм, основное наполнение которого представляет собой итерационное выполнение четырех основных операторов — селекции, скрещивания, мутации и создания нового поколения [11]. В условиях задаваемых ограничений на скорость изменения температуры модифицируем операторы генетического алгоритма и представим его основные этапы.

Этап 1. Инициализация популяции. Задается начальная популяция из K возможных решений, представляющая собой матрицу размерностью $K \times m$, каждая строка которой представляет собой один из возможных температурных профилей. С учетом имеющихся ограничений вида (2) и (3) рекомендуется вектор начальной популяции определить случайным образом на заданном отрезке:

$$T_{i,1} = \text{rnd}(T_{\min}, T_{\max}),$$

$$T_{i,j} = T_{i,j-1} + \text{rnd}(-\Delta T_{\max}, \Delta T_{\max}), j = 2, \dots, m,$$

для всех $i = 1, \dots, K$ при условии, что $T_{\min} \leq T_{i,j} \leq T_{\max}$. Функция $\text{rnd}(a, b)$ — возвращает случайное число из диапазона $[a, b]$.

На этапе 1 алгоритма также задается параметр $iter = 1$, определяющий порядковый номер формируемого поколения, максимальное число итераций $iMax$ и точность решения задачи $\epsilon > 0$, значение которой используется для остановки алгоритма.

Этап 2. Оценка. Проводится оценка степени приспособленности найденных «особей» путем расчета значения целевой функции для каждого предложенного на этапе 1 решения. В случае минимизации целевой функции проверяется условие $H(\mathbf{T}_i^{iter}) \leq \epsilon$, и если оно выполняется хотя бы для одного $i = 1, \dots, K$, то алгоритм следует остановить и вывести решение в качестве оптимального. Алгоритм следует также остановить в случае достижения предельного числа итераций $iter = iMax$. Если целью решения задачи является достижение максимального значения, то в качестве условия окончания итерационного поиска принимается критически малое изменение значения функции приспособленности на протяжении нескольких итераций.

Этап 3. Селекция. На основании найденных значений $H(\mathbf{T}_i^{iter})$, определяющих степень приспособленности каждой «особи», проводится процедура селекции — отбора потенциальных родителей, для выполнения которой рассчитываются соответствующие вероятности. Если хотя бы один из показателей $H(\mathbf{T}_i^{iter})$ превышает значение 1, то требуется предварительно нормализовать полученные оценки. В случае минимизации целевой функции для оценки вероятностей используется выражение:

$$p(\mathbf{T}_i^{iter}) = \frac{1 - H(\mathbf{T}_i^{iter})}{\sum_{i=1}^K (1 - H(\mathbf{T}_i^{iter}))}.$$

Затем рассчитанные значения располагаются последовательно на отрезке от 0 до 1, образуя полную группу. Далее, с помощью процедуры генерации случайных чисел, равномерно распределенных на этом отрезке, и их попадания в соответствующие интервалы, выбираются особи для формирования родительского пула.

Этап 4. Скрещивание. Из выбранного родительского пула с помощью оператора кроссинговера с некоторой вероятностью $p_x > 0$ формируется новое

поколение. Выбор оператора играет ключевую роль в обеспечении достаточной вариативности, что влияет на скорость сходимости алгоритма и качество найденных решений. Классический арифметический кроссинговер [12, 13] основан на взвешенном усреднении значений родительских особей, обеспечивая постепенную адаптацию и способствуя плавному изменению параметров. С целью повышения генетического разнообразия в настоящей работе предлагается использовать двухточечный кроссинговер [14], в основе выполнения которого лежит механизм разбиения родительских хромосом в двух случайных точках с последующим обменом центральных сегментов между ними. Это приводит к более резким и разнообразным изменениям в популяции, что особенно важно при поиске сложных оптимальных решений.

В частности, если на некоторой итерации случайным образом были выбраны две родительские особи $\mathbf{T}^1 = (T_1^1, T_2^1, \dots, T_m^1)$ и $\mathbf{T}^2 = (T_1^2, T_2^2, \dots, T_m^2)$, то в случае использования двухточечного кроссинговера генерируются две случайные точки разреза $1 \leq q_1, q_2 \leq m$, на основании которых значения вектора потомка образуются по правилу

$$\tilde{T}_i = \begin{cases} T_i^1, & \text{если } 1 \leq i < q_1 \text{ или } q_2 \leq i \leq m, \\ T_i^2, & \text{если } q_1 \leq i < q_2. \end{cases}$$

Поскольку данный тип оператора может привести к резким изменениям температуры, то проводится дополнительный контроль, позволяющий оценить разницу между соседними значениями и если условие $|T_{i+1} - T_i| \leq \Delta T_{\max}$ не выполняется хотя бы для одного из $1 \leq i < m$, то требуется принудительно изменить значение T_{i+1} , ограничив разницу величиной ΔT_{\max} .

Этап 5. Мутация. Процедура мутации проводится с некоторой вероятностью $p_m > 0$ и играет ключевую роль в поддержании генетического разнообразия, позволяющего избежать сходимости популяции к локальному экстремуму. В связи с необходимостью плавных и контролируемых изменений температурного профиля требуется, чтобы мутация происходила в пределах разумных отклонений, избегая резких скачков, которые могли бы нарушить физическую реалистичность модели. В связи с этим на этапе 5 предлагается использовать оператор мутации по Гауссу [15, 16], согласно которому каждое значение T_i (ген) изменяется по формуле

$$\tilde{T}_i = T_i + N(\mu, \sigma).$$

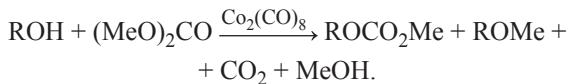
Функция $N(\mu, \sigma)$ возвращает случайное число из нормального (Гауссова) распределения, где μ — среднее значение; σ — отклонение.

Поскольку ограничение на изменение температуры известно и составляет ΔT_{\max} , то контролируемые изменения температурного профиля достигаются при значениях параметров $\mu = 0$ и $\sigma = \Delta T_{\max}$. По окончанию этапа 5 также проводится дополнительная проверка условия $|T_{i+1} - T_i| \leq \Delta T_{\max}$, $1 \leq i < m$, после которой увеличивается счетчик итераций $iter = iter + 1$ и осуществляется переход к этапу 2 с целью оценки полученных решений.

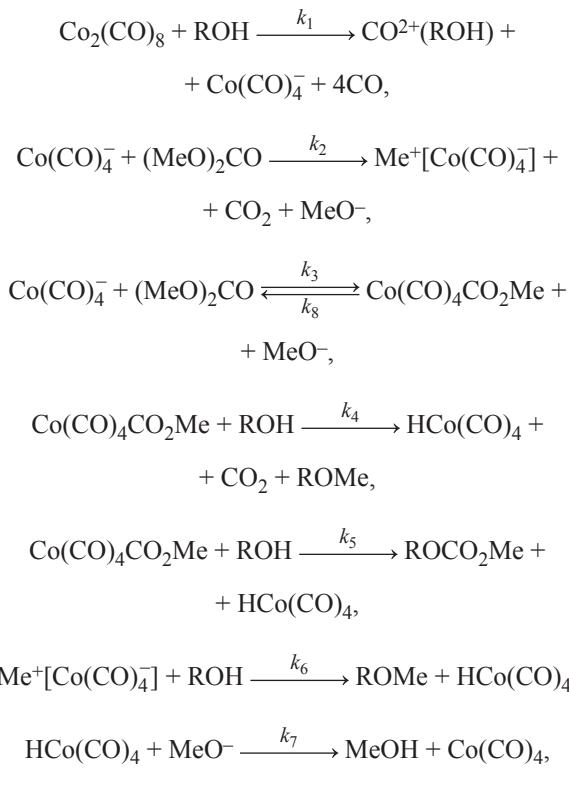
Вычислительный эксперимент

Продемонстрируем работу генетического алгоритма для решения задачи нахождения оптимального температурного режима на примере реакции диметилкарбоната со спиртами [17] в присутствии дикобальтотакарбонила. Данная реакция играет ключевую роль в развитии «зеленой» химии, поддерживая промышленный переход к более экологичным и устойчивым технологиям [18].

Брутто-реакция диметилкарбоната $(\text{MeO})_2\text{CO}$ со спиртами ROH в присутствии дикобальтотакарбонила $\text{Co}_2(\text{CO})_8$ имеет вид



Кatalитический цикл в схеме химических превращений реакции включает следующие стадии [19]:



где k_1, \dots, k_8 — константы, характеризующие скорости элементарных стадий.

В рамках кинетического подхода к моделированию данная реакция описывается системой дифференциальных уравнений

$$\left| \begin{aligned} \frac{dy_1}{dt} &= -k_1 y_3 y_1 - k_4 y_1 y_{12} - k_5 y_1 y_{12} - k_6 y_1 y_{11}, \\ \frac{dy_2}{dt} &= -k_2 y_2 y_{10} - k_3 y_2 y_{10} + k_8 y_9 y_{12}, \\ \frac{dy_3}{dt} &= -k_1 y_3 y_1; \frac{dy_4}{dt} = k_6 y_1 y_{11} + k_4 y_1 y_{12}, \\ \frac{dy_5}{dt} &= k_5 y_1 y_{12}; \frac{dy_6}{dt} = k_2 y_2 y_{10} + k_4 y_1 y_{12}, \\ \frac{dy_7}{dt} &= k_7 y_8 y_9, \\ \frac{dy_8}{dt} &= k_4 y_1 y_{12} + k_5 y_1 y_{12} + k_6 y_1 y_{11} - k_7 y_8 y_9, \\ \frac{dy_9}{dt} &= k_2 y_2 y_{10} + k_3 y_2 y_{10} - k_8 y_9 y_{12} - k_7 y_8 y_9, \\ \frac{dy_{10}}{dt} &= k_1 y_3 y_1 - k_2 y_2 y_{10} - k_3 y_2 y_{10} + k_8 y_9 y_{12} + k_7 y_8 y_9, \\ \frac{dy_{11}}{dt} &= k_2 y_2 y_{10} - k_6 y_1 y_{11}, \\ \frac{dy_{12}}{dt} &= k_3 y_2 y_{10} - k_8 y_9 y_{12} - k_4 y_1 y_{12} - k_5 y_1 y_{12}, \\ \frac{dy_{13}}{dt} &= 4k_1 y_3 y_1; \frac{dy_{14}}{dt} = k_1 y_3 y_1. \end{aligned} \right. \quad (4)$$

Система уравнений (4) имеет следующие начальные условия:

$$y_1(0) = y_1^0, y_2(0) = y_2^0, y_3(0) = y_3^0, y_i(0) = 0, i = 4, \dots, 14,$$

где y_i — концентрации (моль/л) соответствующих веществ: y_1 — ROH , y_2 — $(\text{MeO})_2\text{CO}$, y_3 — $\text{Co}_2(\text{CO})_8$ — исходные реагенты; y_4 — ROMe , y_5 — ROCO_2Me , y_6 — CO_2 , y_7 — MeOH — продукты реакции; y_8 — $\text{HCo}(\text{CO})_4$, y_9 — MeO , y_{10} — $\text{Co}(\text{CO})_4$, y_{11} — $\text{Me}^+[\text{Co}(\text{CO})_4^-]$, y_{12} — $\text{Co}(\text{CO})_4\text{CO}_2\text{Me}$, y_{13} — CO , y_{14} — $\text{Co}^{2+}(\text{ROH})$ — промежуточные реагенты; k_j — константы, характеризующие скорости элементарных стадий, которые зависят от температуры, согласно уравнению Аррениуса:

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

где k_j^0 — предэкспоненциальные множители; E_j — энергия активации; R — универсальная газовая постоянная (8,314 Дж/(моль·К)); T — абсолютная температура. Значения кинетических параметров [20] реакции представлены в таблице.

Таблица. Значения кинетических параметров

Table. Values of kinetic parameters

Параметры	Номер элементарной стадии j							
	1	2	3	4	5	6	7	8
$\ln k_j^0$	22,0	11,9	20,7	18,2	12,0	20,1	15,9	10,9
E_j , ккал/моль	24,1	8,1	13,4	15,0	5,6	21,5	10,6	9,0

Для обеспечения выполнения закона сохранения вещества в любой момент времени необходимо учитывать следующие балансовые соотношения [20]:

$$\begin{aligned} y_9 + y_7 + y_2 &= y_2^0, y_{14} + y_3 = y_3^0, y_{13} + 4y_3 = 4y_3^0, \\ y_1 - y_3 + y_8 + y_7 &= y_1^0 - y_3^0, y_4 - y_8 + y_5 - y_7 = 0, \\ y_6 + y_2 + y_{12} + y_5 &= y_2^0, y_{10} + y_3 - y_2 - y_7 = y_3^0 - y_2^0, \\ y_{11} + y_2 + y_{12} + y_8 + y_7 &= y_2^0. \end{aligned} \quad (5)$$

Использование соотношений (5) позволяет уменьшить количество независимых переменных и сократить систему (4) до 6 уравнений, сохранив при этом полноту описания процесса.

Требуется найти вектор $\mathbf{T}^* = (T_1, \dots, T_m)$, определяющий температуру реакционной смеси в дискретные моменты времени и способствующий достижению максимальной концентрации продукта y_5 в реакционной массе в конечный момент моделирования $t_{end} = 300$ мин при начальных условиях $y_1(0) = 5,882$ моль/л, $y_2(0) = 17,647$ моль/л, $y_3(0) = 0,059$ моль/л

$$H(\mathbf{T}^*)(t_{end}) = y_5(t_{end}) \rightarrow \max. \quad (6)$$

Для решения данной задачи генетический алгоритм, представленный в разделе «Описание генетического алгоритма с учетом ограничений на скорость изменения температуры», был запрограммирован с использованием языка Python (версия 3.10.12). Вычислительные испытания проводились в облачной среде с использованием следующих параметров генетического алгоритма: размер начальной популяции — 30, допустимая точность решения задачи $\varepsilon = 10^{-3}$, предельное число итераций $iMax = 10^3$, вероятность скрещивания $p_x = 0,7$, вероятность мутации $p_m = 0,2$. Температурный профиль определялся $m = 10$ точками на промежутке 0–300 мин и максимально допустимым изменением температуры $\Delta T_{max} = 5$ °C. Также учитывалось, что на температуру наложены ограничения 150 °C $\leq T_i \leq 200$ °C, $i = 1, \dots, m$.

Многократно проведенные вычислительные испытания показали, что алгоритм достаточно быстро сходится и позволяет достичь максимального значения $y_5(t_{end}) = 5,519$ моль/л, однако выделить единственный температурный профиль не удается, поскольку задача обладает целой совокупностью решений, способствующих выполнению критерия (6). Один из найденных температурных профилей и соответствующее ему изменение концентрации продукта y_5 представлены на рис. 1 и 2.

Из полученных зависимостей на рис. 2 видно, что для данного конкретного температурного профиля максимальное значение целевого продукта достигается уже после 75 мин протекания процесса. Полученные результаты позволяют сформировать дополнительное требование линейности, согласно которому максимальный выход целевого продукта y_5 достигается при условии его линейного роста во времени. Данное требование обусловлено необходимостью минимизации побочных реакций и обеспечения стабильности процесса. Линейное изменение концентрации целевого продукта свидетельствует о равномерности расхода исходных реагентов и

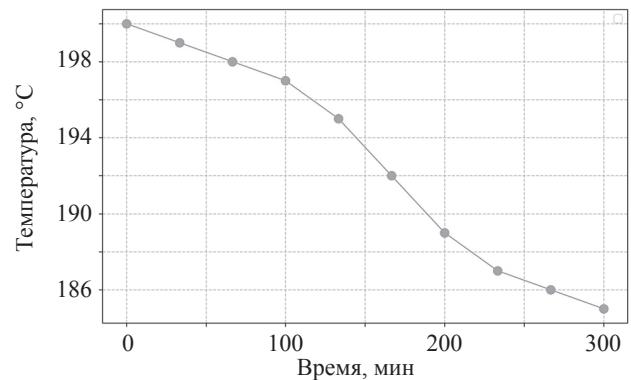


Рис. 1. Найденный температурный профиль при температурных ограничениях — 150–200 °C, $\Delta T_{max} = 5$ °C; параметры генетического алгоритма: размер популяции — 30, $\varepsilon = 10^{-3}$, $iMax = 10^3$, $p_x = 0,7$, $p_m = 0,2$

Fig. 1. Calculated temperature profile under temperature constraints of 150–200 °C, $\Delta T_{max} = 5$ °C; genetic algorithm parameters: population size — 30, $\varepsilon = 10^{-3}$, $iMax = 10^3$, $p_x = 0,7$, $p_m = 0,2$

устойчивости кинетики, что важно для промышленной реализации процесса. Кроме того, равномерный рост y_5 позволяет обеспечить предсказуемость выхода продукта, что упрощает разработку системы автоматического управления температурным режимом.

Нахождение оптимального температурного профиля, способствующего максимальному равномерному выходу целевого продукта, требует изменения вида целевой функции. Для этого на основании найденного максимального значения y_5^{\max} рассчитываются дискретные точки вектора $y_5^{line}(t_i)$, определяющего линейный тренд. Для того чтобы оценить отклонение реальных значений от целевого тренда рассчитывается величина среднеквадратичной ошибки Mean Squared Error (MSE), определяющая среднее отклонение в квадратичной форме

$$MSE = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (y_5(t_i) - y_5^{line}(t_i))^2.$$

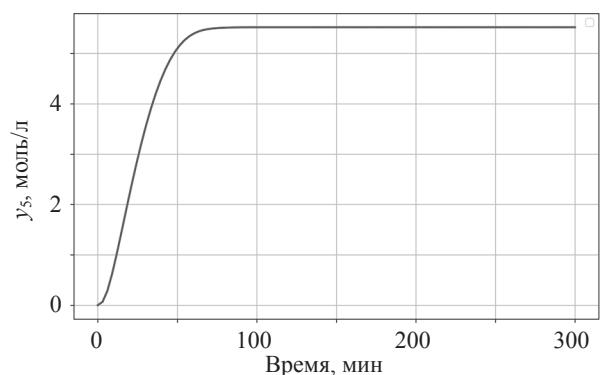


Рис. 2. Динамика концентрации ROCO₂Me при $[ROH]_0 = 5,882$ моль/л, $[(MeO)_2CO]_0 = 17,647$ моль/л, $[Co_2(CO)_8]_0 = 0,059$ моль/л; кинетические параметры (таблица)

Fig. 2. Dynamics of ROCO₂Me concentration at $[ROH]_0 = 5.882$ mol/l, $[(MeO)_2CO]_0 = 17.647$ mol/l, $[Co_2(CO)_8]_0 = 0.059$ mol/l; kinetic parameters (Table)

В таком случае целевая функция будет состоять из двух частей — отклонения конечного значения от максимального и MSE между реальным и линейным трендами:

$$H(T^*)(t_{end}) = (y_5(t_{end}) - y_5^{\max})^2 + MSE \rightarrow \min. \quad (7)$$

Параметры выполнения генетического алгоритма и ограничения на температуру для обновленной целевой функции (7) не менялись. Многочисленные вычислительные испытания позволили однозначно идентифицировать температурный профиль $T^* = [165,1, 168,1, 164,3, 159,3, 162,7, 167,7, 172,6, 177,6, 182,6, 187,6]$, способствующий достижению максимального значения целевого продукта $y_5 = 5,38$ моль/л в конечный момент моделирования $t_{end} = 300$ мин в условиях линейного роста концентрации целевого продукта. Алгоритм остановил свою работу при достижении предельного числа итераций 10^3 , при этом минимальное значение целевой функции (7) составило 0,037, а $MSE = 0,02$. Запуск алгоритма проводился многократно, однако не приводил к изменению внешнего вида и поведения профиля, визуализация которого представлена на рис. 3, а.

График изменения мольной концентрации продукта y_5 (моль/л) во времени при найденном температурном профиле представлен на рис. 3, б в виде сплошной линии. Пунктирная линия на рисунке демонстрирует линейный тренд, позволяющий оценить отклонение реальной динамики от идеализированного линейного роста. Полученный рисунок позволяет проанализировать влияние температуры на процесс и эффективность выбранного температурного режима.

Все стадии катализитического цикла протекают во всем исследуемом температурном диапазоне (150–200 °C). Температурный профиль в модели является внешним управляющим параметром, определяющим

относительные скорости стадий через температурную зависимость констант скоростей. При этом в области относительно низких температур преобладает образование комплекса $\text{HCo}(\text{CO})_4$, тогда как при более высоких температурах возрастает вклад стадий, ведущих к формированию $\text{Co}(\text{CO})_4\text{CO}_2\text{Me}$. Таким образом, оптимальные температурные профили не исключают отдельные стадии механизма, а лишь перераспределяют их относительный вклад в общий ход процесса.

С целью оценки корректности получаемых расчетных результатов задача также решалась с использованием классических подходов к оптимизации, в частности методом Нелдера–Мида, не требующего аналитического представления производной. Для соблюдения задаваемых ограничений на рост температуры целевая функция была модифицирована путем введения штрафных коэффициентов, обеспечивающих направление поиска оптимального решения в область допустимых значений. Проведенные вычислительные испытания постоянно приводили к отличающимся результатам, при этом значение MSE кратно превышало ранее найденное значение, что позволило убедиться в эффективности разработанного генетического алгоритма.

Очевидно, что минимизировать ошибку, определяемую целевой функцией вида (7), можно как в случае снятия ограничений на изменение температуры, так и изменения требований к росту целевого компонента y_5 . Требование линейности в данном случае введено для оценки эффективности разработанного генетического алгоритма, позволяющего решать задачи поиска оптимального температурного профиля, обеспечивающего равномерный рост целевого компонента. Подобные требования способствуют нахождению таких режимов нагрева, при которых реакция протекает наиболее эффективно, избегая резких скачков скорости.

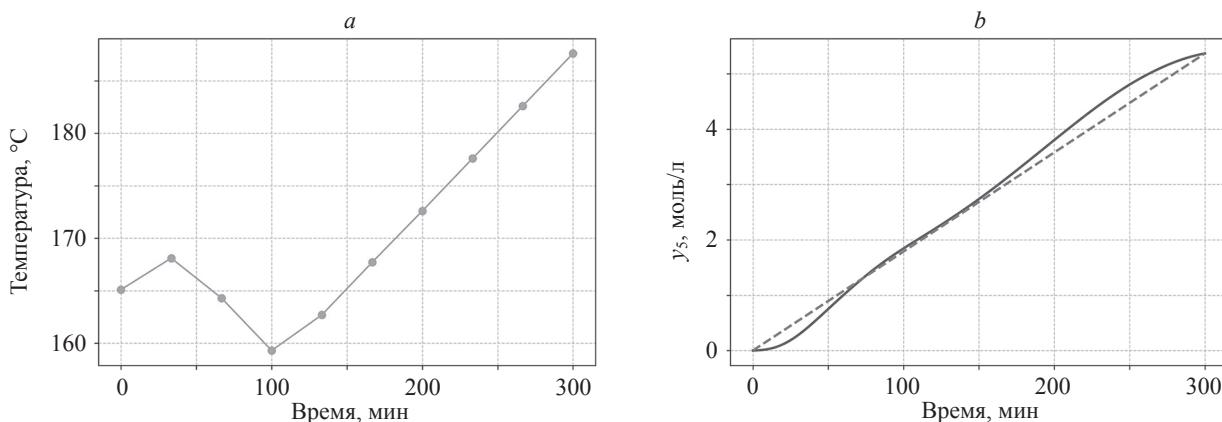


Рис. 3. Оптимальный температурный профиль при условии линейного роста концентрации ROCO_2Me (а) и соответствующая динамика (б) с наложенным линейным трендом (пунктир) при тех же начальных условиях, температурных ограничениях и параметрах алгоритма (рис. 1–2); $MSE = 0,02$

Fig. 3. Optimal temperature profile under the condition of linear growth of ROCO_2Me concentration (a) and the corresponding dynamics (b) with a superimposed linear trend (dashed line), obtained under the same initial conditions, temperature constraints, and algorithm parameters as in Figs. 1 and 2; $MSE = 0.02$

Заключение

Разработан алгоритм поиска оптимального температурного режима сложного физико-химического процесса с целью управления динамикой концентрации целевого вещества. Оптимизация температурного профиля играет ключевую роль в повышении эффективности химико-технологических процессов, влияя на скорость реакции, селективность и выход целевого продукта.

С целью построения физически реализуемых траекторий изменения температурного режима рассмотрено влияние динамических ограничений на изменение управляющих параметров. В основе предлагаемого подхода к решению задачи оптимизации лежит генетический алгоритм, который способствует нахождению глобального оптимума благодаря случайному характеру при поиске решений и возможности поддерживать их разнообразие в популяции. В условиях задаваемых ограничений на скорость изменения температуры основные этапы выполнения генетического алгоритма были модифицированы и представлены в виде адаптированной схемы эволюционного поиска, учитывающей допустимые границы изменения управляющих параметров. Внесенные модификации позволили повысить устойчивость алгоритма к локальным экстремумам и

обеспечить более точное соблюдение технологических ограничений.

Эффективность алгоритма, функциональность программного модуля и механизм взаимодействия были проверены на примере вычислительного эксперимента по исследованию кинетики реакции диметилкарбоната со спиртами в присутствии дикобальтотоксакарбонила. Результаты численного моделирования продемонстрировали, что температурный режим оказывает значительное влияние на кинетику процесса. В ходе проведенных вычислительных испытаний дополнительно было введено требование линейности концентрации целевого продукта, обусловленное необходимостью равномерного расхода исходных реагентов и устойчивости кинетики, что важно для промышленной реализации процесса. Результаты многократно проведенных вычислений позволили однозначно идентифицировать оптимальный температурный профиль, удовлетворяющий заданным условиям.

Предложенный метод оптимизации может быть полезен при проектировании и масштабировании химико-технологических процессов, а проведенное исследование подтверждает эффективность использования численных методов и эволюционных алгоритмов для оптимизации условий химических реакций.

Литература

1. Marpaung T.J. Optimization of temperature on the concentration of a mixture of substances in liquid waste treatment process palm oil // *Journal of Physics: Conference Series*. 2019. V. 1235. N 1. P. 012123. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1235/1/012123>
2. Шевчук В.П., Шаровина С.О. Управление температурным профилем ректификационной колонны тарельчатого типа // Приборы и системы. Управление, контроль, диагностика. 2013. № 3. С. 39–47.
3. Слинко М.Г. Кинетическая модель как основа математического моделирования катализитических процессов // Теоретические основы химической технологии. 1976. Т. 10. № 1. С. 137–146.
4. Быков В.И., Цыбенова С.Б. Нелинейные модели химической кинетики. М.: Ком-Книга, 2010. 350 с.
5. Васильев Ф.П. Численные методы решения экстремальных задач. М.: Наука, 1988. 552 с.
6. Пантелейев А.В., Скавинская Д.В., Алёшина Е.А. Метаэвристические алгоритмы поиска оптимального программного управления. М.: Инфра-М, 2020. 396 с.
7. Мицхахов Э.Н., Кашникова А.П., Иванов Д.В. Использование генетических алгоритмов для решения задачи поиска оптимального состава реакционной смеси // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2024. Т. 24. № 4. С. 637–644. <https://doi.org/10.17586/2226-1494-2024-24-4-637-644>
8. Katoch S., Chauhan S.S., Kumar V. A review on genetic algorithm: past, present, and future // *Multimedia Tools and Applications*. 2021. V. 80. N 5. P. 8091–8126. <https://doi.org/10.1007/s11042-020-10139-6>
9. Мицхахов Э.Н., Иванов Д.В. Поиск оптимального состава реакционной смеси с использованием алгоритма имитации отжига // Автометрия. 2024. Т. 60. № 5. С. 120–128. <https://doi.org/10.15372/AUT20240514>
10. Мицхахов Э.Н. Алгоритм поиска оптимального режима подачи регулятора в процессе получения полимерных продуктов // Инженерные технологии и системы. 2024. Т. 34. № 4. С. 597–614. <https://doi.org/10.15507/2658-4123.034.202404.597-614>
11. Awad A., Hawash A., Abdalhaq B. A Genetic Algorithm (GA) and swarm-based Binary Decision Diagram (BDD) reordering optimizer reinforced with recent operators // *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*. 2023. V. 27. N 3. P. 535–549. <https://doi.org/10.1109/tevc.2022.3170212>
12. Marpaung T.J. Optimization of temperature on the concentration of a mixture of substances in liquid waste treatment process palm oil. *Journal of Physics: Conference Series*, 2019, vol. 1235, no. 1, pp. 012123. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1235/1/012123>
13. Shevchuk V.P., Sharovina S.O. The control of the temperature profile of the rectification column dish type. *Instruments and Systems: Monitoring, Control, and Diagnostics*, 2013, no. 3, pp. 39–47. (in Russian)
14. Slinko M.G. Kinetic model as a basis for mathematical modeling of catalytic processes. *Teoreticheskie Osnovy Khimicheskoi Tekhnologii*, 1976, vol. 10, no. 1, pp. 137–146. (in Russian)
15. Bykov V.I., Tsybenova S.B. *Nonlinear Models of Chemical Kinetics*. Moscow, Kom-Kniga Publ., 2010, 350 p. (in Russian)
16. Vasilev F.P. *Numerical Methods for Extreme Problems Solving*. Moscow: Nauka Publ., 1988, 552 p. (in Russian)
17. Panteleev A.V., Skavinskaia D.V., Aleshina E.A. *Metaheuristic Algorithms for Searching of the Optimal Program Control*. Moscow: Infra-M Publ., 2020, 396 p. (in Russian)
18. Miftakhov E.N., Kashnikova A.P., Ivanov D.V. Using genetic algorithms to solve the problem of finding the optimal composition of the reaction mixture. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2024, vol. 24, no. 4, pp. 637–644. (in Russian). <https://doi.org/10.17586/2226-1494-2024-24-4-637-644>
19. Katoch S., Chauhan S.S., Kumar V. A review on genetic algorithm: past, present, and future. *Multimedia Tools and Applications*, 2021, vol. 80, no. 5, pp. 8091–8126. <https://doi.org/10.1007/s11042-020-10139-6>
20. Miftakhov E.N., Ivanov D.V. Searching for the optimal composition of the reaction mixture using a simulated annealing algorithm. *Avtometriya*, 2024, vol. 60, no. 5, pp. 120–128. (in Russian). <https://doi.org/10.15372/AUT20240514>
21. Miftakhov E.N. Algorithm for searching the optimal regulator supply mode in the process of manufacturing polymer products. *Engineering Technologies and Systems*, 2024, vol. 34, no. 4, pp. 597–614. (in Russian). <https://doi.org/10.15507/2658-4123.034.202404.597-614>
22. Awad A., Hawash A., Abdalhaq B. A Genetic Algorithm (GA) and swarm-based Binary Decision Diagram (BDD) reordering optimizer reinforced with recent operators. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 2023, vol. 27, no. 3, pp. 535–549. <https://doi.org/10.1109/tevc.2022.3170212>

References

12. Yang D., Rao K., Xu B., Sheng W. PIR sensors deployment with the accessible priority in smart home using genetic algorithm // *International Journal of Distributed Sensor Networks*. 2015. V. 11. N 11. P. 146270. <https://doi.org/10.1155/2015/146270>
13. Антипина Е.В., Мустафина С.А., Антипин А.Ф. Автоматизация поиска оптимальных значений параметров процесса олигомеризации этилена // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2024. Т. 24. № 4. С. 563–570. <https://doi.org/10.17586/2226-1494-2024-24-4-563-570>
14. Zhou T., Fang W. Two-point crossover operator in genetic algorithm for deep learning compiler // Proc. of the Companion Conference on Genetic and Evolutionary Computation. 2023. P. 347–350. <https://doi.org/10.1145/3583133.3590536>
15. Bell O. Applications of Gaussian Mutation for self adaptation in evolutionary genetic algorithms // arXiv. 2022. 10.48550/arXiv.2201.00285. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2201.00285>
16. Tinós R., Yang S. Evolution strategies with q-Gaussian mutation for dynamic optimization problems // Proc. of the 11th Brazilian Symposium on Neural Networks. 2010. P. 223–228. <https://doi.org/10.1109/sbrn.2010.46>
17. Koledina K.F., Koledin S.N., Schadneva N.A., Mayakova Y.Yu., Gubaydullin I.M. Kinetic model of the catalytic reaction of dimethylcarbonate with alcohols in the presence $\text{Co}_2(\text{CO})_8$ and $\text{W}(\text{CO})_6$ // *Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis*. 2017. V. 121. N 2. P. 425–438. <https://doi.org/10.1007/s11144-017-1181-3>
18. Fiorani G., Perosa A., Selva M. Dimethyl carbonate: a versatile reagent for a sustainable valorization of renewables // *Green Chemistry*. 2018. V. 20. N 2. P. 288–322. <https://doi.org/10.1039/c7gc02118f>
19. Коледина К.Ф., Коледин С.Н., Щаднева Н.А., Губайдуллин И.М. Кинетика и механизм каталитической реакции спиртов с диметилкарбонатом // Журнал физической химии. 2017. Т. 91. № 3. С. 422–428. <https://doi.org/10.7868/S004445371703013X>
20. Коледина К.Ф. Многокритериальная оптимизация и оптимальное управление химическими процессами на основе детализированной кинетической модели: диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук. Уфа: Уфимский федеральный исследовательский центр Российской академии наук, 2020. 334 с.
12. Yang D., Rao K., Xu B., Sheng W. PIR sensors deployment with the accessible priority in smart home using genetic algorithm. *International Journal of Distributed Sensor Networks*, 2015, vol. 11, no. 11, pp. 146270. <https://doi.org/10.1155/2015/146270>
13. Antipina E.V., Mustafina S.A., Antipin A.F. Automation of search for optimal values of the ethylene oligomerization process parameters. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2024, vol. 24, no. 4, pp. 563–570. (in Russian). <https://doi.org/10.17586/2226-1494-2024-24-4-563-570>
14. Zhou T., Fang W. Two-point crossover operator in genetic algorithm for deep learning compiler. *Proc. of the Companion Conference on Genetic and Evolutionary Computation*, 2023, pp. 347–350. <https://doi.org/10.1145/3583133.3590536>
15. Bell O. Applications of Gaussian Mutation for self adaptation in evolutionary genetic algorithms. *arXiv*, 2022, 10.48550/arXiv.2201.00285. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2201.00285>
16. Tinós R., Yang S. Evolution strategies with q-Gaussian mutation for dynamic optimization problems. *Proc. of the 11th Brazilian Symposium on Neural Networks*, 2010, pp. 223–228. <https://doi.org/10.1109/sbrn.2010.46>
17. Koledina K.F., Koledin S.N., Schadneva N.A., Mayakova Y.Yu., Gubaydullin I.M. Kinetic model of the catalytic reaction of dimethylcarbonate with alcohols in the presence $\text{Co}_2(\text{CO})_8$ and $\text{W}(\text{CO})_6$. *Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis*, 2017, vol. 121, no. 2, pp. 425–438. <https://doi.org/10.1007/s11144-017-1181-3>
18. Fiorani G., Perosa A., Selva M. Dimethyl carbonate: a versatile reagent for a sustainable valorization of renewables. *Green Chemistry*, 2018, vol. 20, no. 2, pp. 288–322. <https://doi.org/10.1039/c7gc02118f>
19. Koledina K.F., Koledin S.N., Shechadneva N.A., Gubaidullin I.M. Kinetics and mechanism of the catalytic reaction between alcohols and dimethyl carbonate. *Russian Journal of Physical Chemistry A*, 2017, vol. 91, no. 3, pp. 442–447. <https://doi.org/10.1134/s003602441703013x>
20. Koledina K.F. *Multi-Criteria Optimization and Optimal Control of Chemical Processes Based on a Detailed Kinetic Model*. Ufa, UFRC RAS, 2020, 334 p. (in Russian)

Авторы

Мифтахов Эльдар Наилевич — доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, Уфимский университет науки и технологий, Уфа, 450076, Российская Федерация, <https://orcid.org/0000-0002-0471-5949>, promif@mail.ru
Иванов Дмитрий Владимирович — кандидат физико-математических наук, доцент, Уфимский университет науки и технологий, Уфа, 450076, Российская Федерация, <https://orcid.org/0009-0005-7117-0191>, ivanov_dv@list.ru

Статья поступила в редакцию 04.04.2025
 Одобрена после рецензирования 29.09.2025
 Принята к печати 25.11.2025

Authors

Eldar N. Miftakhov — D.Sc. (Physics & Mathematics), Senior Researcher, Ufa University of Science and Technology, Ufa, 450076, Russian Federation, <https://orcid.org/0000-0002-0471-5949>, promif@mail.ru
Dmitry V. Ivanov — PhD (Physics & Mathematics), Associate Professor, Ufa University of Science and Technology, Ufa, 450076, Russian Federation, <https://orcid.org/0009-0005-7117-0191>, ivanov_dv@list.ru

Received 04.04.2025
 Approved after reviewing 29.09.2025
 Accepted 25.11.2025



Работа доступна по лицензии
 Creative Commons
 «Attribution-NonCommercial»