

## ПОИСК ОПТИМАЛЬНОГО УПРАВЛЕНИЯ КАТАЛИТИЧЕСКИМ ПРОЦЕССОМ НА ОСНОВЕ МЕТОДА ИСКУССТВЕННЫХ ИММУННЫХ СИСТЕМ

Е.В. Антипина<sup>1</sup>

С.А. Мустафина<sup>1</sup>

А.Ф. Антипин<sup>2</sup>

stepashinaev@ya.ru

mustafina\_sa@mail.ru

andrejantipin@ya.ru

<sup>1</sup> УУНиТ, Уфа, Российская Федерация

<sup>2</sup> Стерлитамакский филиал УУНиТ, Стерлитамак, Российская Федерация

---

### Аннотация

Предложен подход к поиску численного решения задачи оптимального управления каталитическим процессом. В общем виде сформулирована задача оптимального управления с ограничениями на параметр управления и фазовыми ограничениями. Для ее решения рассмотрен комбинированный способ на основе метода штрафов и искусственных иммунных систем, который применим для процессов с нелинейной динамикой и не зависит от выбора начального приближения. Управление ищется в классе кусочно-постоянных функций. На основе этого подхода проведены численные эксперименты для каталитического процесса димеризации альфа-метилстирола. Приведена математическая модель процесса, протекающего в реакторе идеального смешения. На ее основе сформулированы задачи определения оптимального температурного режима хладоагента при наличии ограничений на конверсию исходного вещества и выход побочных продуктов реакции. В качестве критерия оптимальности задан максимальный выход целевых продуктов реакции — линейных димеров. Для поиска решения построены вспомогательные функционалы метода штрафов. В результате расчетов для каждой задачи определен субоптимальный температурный режим, при котором выполняются ограничения и достигается наибольший выход целевых продуктов реакции, рассчитана динамика концентраций веществ

### Ключевые слова

Оптимальное управление, искусственные иммунные системы, метод штрафов, фазовые ограничения, каталитический процесс

Поступила 17.11.2023

Принята 16.01.2024

© Автор(ы), 2024

---

*Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России (код научной темы FZWU-2023-0002)*

**Введение.** В настоящее время одной из значимых задач математического моделирования каталитических процессов является задача поиска их оптимального управления. На основе математического описания процесса можно определить оптимальные параметры его проведения и, как следствие, заменить натурный эксперимент вычислительным. Это существенно экономит материальные ресурсы на исследование закономерностей протекания каталитического процесса. Поэтому разработка методов и алгоритмов поиска оптимального управления каталитическими процессами представляет научный и практический интерес.

Решение задач оптимального управления химическим процессом опирается на его математическую модель, которая представляет собой систему обыкновенных дифференциальных уравнений, содержащую фазовые переменные, определяющие состояние процесса и неподдающиеся непосредственному воздействию, и параметры управления, которыми можно варьировать в процессе. В задачах оптимального управления могут быть наложены ограничения не только на параметры управления, но и на фазовые переменные, что существенно усложняет решение оптимизационных задач как в теоретическом исследовании свойств оптимальных процессов, так и в реализации алгоритмов численного решения.

Существует несколько подходов к решению задач оптимального управления динамическими системами с фазовыми ограничениями. Один из них связан с получением точных необходимых условий оптимальности и построением на их основе вычислительных процедур, трудно реализуемых на практике. Другой подход предполагает применение штрафных функций, с помощью которых обеспечивается переход к задаче оптимального управления без ограничений [1]. Решение полученной задачи без ограничений ищется с использованием методов безусловной оптимизации.

Одной из особенностей задач оптимального управления каталитическим процессом и возникающих вследствие этого трудностей является нелинейность динамики процессов, которая может быть обусловлена, например, экспоненциальной зависимостью констант скоростей от температуры. Эта особенность ограничивает применимость некоторых методов оптимизации, например линейного программирования [2–4]. Наличие большого числа промежуточных веществ и стадий взаимодействия между ними ведет к увеличению размерности математической модели процесса, что затрудняет применение некоторых методов, например динамического программирования [5–7]. Недостатком большинства численных методов

решения оптимизационных задач без фазовых ограничений является чувствительность к выбору начальной точки поиска решения.

Перечисленные недостатки позволяют преодолеть применение эволюционных методов оптимизации, в частности, метода искусственных иммунных систем. Этот метод обладает легкой алгоритмической и программной реализацией, не зависит от начального приближения решения задачи и позволяет найти приближенные значения параметров оптимального управления динамическим процессом.

Метод искусственных иммунных систем широко применяют для решения задач как в отечественных [8–12], так и в зарубежных работах [13–20]. Решения задач оптимизации в энергетике и энергосистемах на основе метода искусственных иммунных систем приведены в [17, 18]. Применение искусственной иммунной системы для решения задач оптимизации мультимодальных функций рассмотрено в [18, 19]. Иммунные методы для решения основных типов задач оптимизации функций (задачи без ограничений, задачи с ограничениями, мультимодальной и многокритериальной задач) описаны в [20].

Задача поиска субоптимального программного управления для непрерывных детерминированных систем рассмотрена в [21]. Задача содержит ограничения на параметр управления и не содержит фазовые ограничения. Для ее решения приведен алгоритм на основе метода искусственных иммунных систем.

В исследованиях, посвященных разработке метода искусственных иммунных систем, рассматривают, в основном, задачи оптимизации функций. Значительно меньше работ посвящено решению задач оптимального управления. Актуальной проблемой является разработка алгоритма решения задачи оптимального управления с ограничениями, накладываемыми на фазовые переменные.

Авторами настоящей работы предложен подход к поиску численного решения задачи оптимального управления каталитическим процессом, содержащей ограничения на фазовые переменные, на основе метода штрафов и метода искусственных иммунных систем. С использованием метода штрафов следует осуществить переход к задаче оптимального управления без ограничений, а затем решить задачу методом искусственных иммунных систем.

**Материалы и методы решения задач, принятые допущения.** Пусть каталитический процесс описывается системой обыкновенных дифференциальных уравнений

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

с начальными условиями

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

где  $x_i(t)$  — фазовые переменные ( $i = \overline{1, n}$ );  $u(t) \in D_u$  — параметр управления,  $D_u$  — множество допустимых значений управления;  $t \in [0, \tau]$  — время;  $f_i(x(t), u(t), t)$  — непрерывные вместе со своими частными производными функции ( $i = \overline{1, n}$ ).

В качестве параметра управления  $u(t)$  может выступать температура, давление, скорость подачи реакционной смеси, начальное мольное соотношение реагентов и др.

Пусть параметр управления  $u(t)$  принадлежит классу кусочно-постоянных функций  $u(t) = u_j$ ,  $t \in [t_j, t_{j+1}]$ ,  $j = \overline{0, r}$ , где  $r$  — число моментов переключений при разбиении  $t_0 < t_1 < \dots < t_{r+1}$ ,  $t_0 = 0$ ,  $t_{r+1} = \tau$ .

Примем, что в конечный момент времени на фазовые переменные наложены ограничения

$$\varphi_j(x(\tau)) = 0, \quad j = \overline{1, p}, \quad (3)$$

$$\varphi_j(x(\tau)) \leq 0, \quad j = \overline{p+1, m}, \quad (4)$$

где  $\varphi_j(x)$  — непрерывно-дифференцируемые функции.

Задача оптимального управления каталитическим процессом, который описывается системой дифференциальных уравнений (1) с начальными условиями (2), заключается в том, чтобы найти управляющую функцию  $u(t) \in D_u$ , для которой выполняются условия (3), (4) и достигается минимум целевого функционала

$$I(u) = \varphi_0(x(\tau)). \quad (5)$$

Критерием оптимальности, который выражает целевой функционал (5), может быть выход продуктов реакции, прибыль, производительность процесса, рентабельность и др.

Рассмотрим способ решения задачи оптимального управления с терминальными ограничениями на основе метода штрафных функций и метода искусственных иммунных систем.

Для перехода от задачи с терминальными ограничениями к задаче без ограничений введем вспомогательный функционал

$$P(u) = I(u) + R(u, s^k), \quad (6)$$

где  $R(u, s^k)$  — штрафная функция,  $s^k$  — параметр штрафа, вычисляемый на  $k$ -й итерации. Чем больше значение  $s^k$ , тем больше штраф за невыполнение ограничений. Штрафная функция  $R(u, s^k)$  равна нулю при выполнении ограничений и больше нуля, если ограничения нарушены:

$$R(u, s^k) = \frac{s^k}{2} \sum_{j=1}^m G_j^2(u). \quad (7)$$

Здесь

$$G_j(u) = \begin{cases} |\varphi_j(x(\tau))|, & j = \overline{1, p}, \\ \max \{0, \varphi_j(x(\tau))\}, & j = \overline{p+1, m}. \end{cases}$$

Для решения задачи оптимального управления с терминальными ограничениями необходимо на  $k$ -й итерации определить управляющий параметр  $u(t)$ , доставляющий минимум функционалу (6). При переходе к следующей  $(k + 1)$ -й итерации поиск решения отталкивается от параметра  $u(t)$ , найденного на предыдущей  $k$ -й итерации.

Для нахождения решения задачи оптимального управления без ограничений в целях минимизации функционала (6) применим метод искусственных иммунных систем. Работа метода основана на имитации функционирования иммунной системы живых организмов. В природе, когда организм подвергается воздействию вредоносных патогенов, для его защиты развивается эффективный иммунный ответ. Для борьбы с патогенами вырабатываются специфические иммунные клетки — антитела. Лучшие антитела клонируются, мутируют и запоминаются организмом. Если он снова подвергается атаке этого патогена, то развивается более быстрый иммунный ответ. На основе общей схемы формирования иммунитета разработаны искусственные иммунные системы — вычислительные методы, вдохновленные биологической иммунной системой [20].

**Результаты.** Пусть математическим аналогом иммунной клетки является управление  $u = (u_0, u_1, \dots, u_r)$ , где  $u_i = u(t_i)$ ,  $t_i \in [0, \tau]$ ,  $i = \overline{0, r}$ ,  $t_0 = 0$ ,  $t_{r+1} = \tau$ . Множеством возможных решений задачи оптимального управления, называемым популяцией, будет набор из  $l$  векторов  $u_j = (u_{j0}, u_{j1}, \dots, u_{jr})$  ( $j = \overline{1, l}$ ). Каждому вектору ставится в соответствие значение функции приспособленности, которой является функционал (6).

Для этого необходимо найти численное решение системы дифференциальных уравнений (1) с начальными условиями (2).

Схема решения задачи оптимального управления каталитическим процессом (1)–(5) состоит из следующих этапов.

1. Установка начальных параметров метода штрафов и метода искусственных иммунных систем.

2. Генерирование начальной популяции иммунных клеток  $u_j = (u_{j0}, u_{j1}, \dots, u_{jr})$  ( $j = \overline{1, l}$ ) случайными значениями из области  $D_u$ .

3. Клонирование. В текущую популяцию помещаются новые копии (клоны) векторов, которым соответствует наименьшее значение функции приспособленности (6). Векторы, копиями которых пополнилась популяция, называются клетками-родителями.

4. Мутация предназначена для внесения случайных изменений в популяцию для преодоления возможного попадания решения в локальный экстремум. Мутации подвергаются компоненты векторов-клонов. Затем для них вычисляется значение функции приспособленности.

5. Селекция. Отбираются наиболее приспособленные векторы-мутанты и помещаются в популяцию вместо клетки-родителя при условии, что для вектора-мутанта значение функционала (5) меньше его значения для клетки-родителя.

6. Переход к новой популяции. Из текущей популяции удаляются наименее приспособленные клетки, т. е. клетки с наибольшим значением функционала (6).

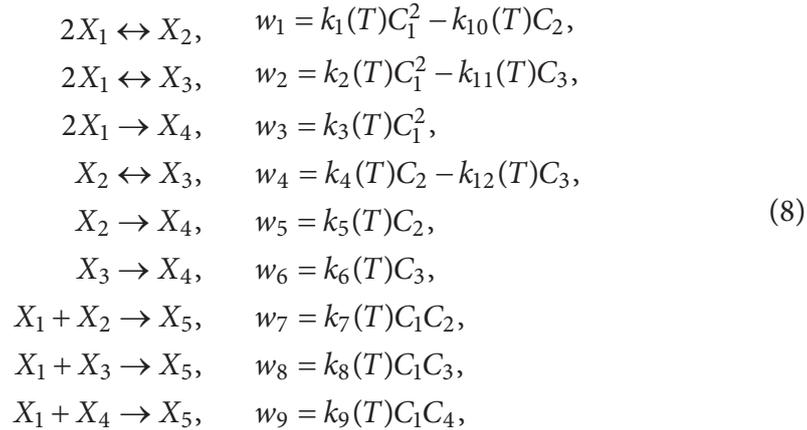
7. Процедура поиска решения задачи с использованием метода искусственных иммунных систем продолжается до тех пор, пока не будет выполнен критерий окончания вычислений. В качестве такого критерия для эволюционных вычислений применяют ограничение на максимальное число итераций или стабилизацию приспособленности популяции на нескольких итерациях метода [22]. Приближенным решением задачи оптимального управления с критерием оптимальности (5) является вектор  $u^*$  из последней популяции с наименьшим значением функционала (5).

8. Проверка условия завершения поиска решения методом штрафов. Если  $R(u^*, s^k) > \varepsilon_2$ , то увеличить значение параметра штрафа и номер итерации  $k$ , а затем перейти на этап клонирования. Если  $R(u^*, s^k) \leq \varepsilon_2$ , то завершить вычислительный процесс. Решением задачи (1)–(5) является вектор  $u^*$  из последней популяции.

Определим оптимальный температурный режим для каталитического процесса димеризации  $\alpha$ -метилстирола в присутствии цеолитного

катализатора NaNH. Линейные димеры ( $\alpha$ -димер,  $\beta$ -димер), получаемые в этом процессе, применяют в качестве регуляторов молекулярной массы полимеров, растворителей, компонентов синтетических смазочных масел, пластификаторов полимеров и каучуков.

Схема реакции димеризации  $\alpha$ -метилстирола и соответствующие кинетические уравнения стадий имеют вид [23]:



где  $X_1$  —  $\alpha$ -метилстирол;  $X_2$  —  $\alpha$ -димер;  $X_3$  —  $\beta$ -димер;  $X_4$  — циклический димер;  $X_5$  — тримеры;  $w_j$  — скорость  $j$ -й стадии реакции ( $j = \overline{1, 5}$ ), кмоль/(м<sup>3</sup> · ч);  $C_i$  — концентрация  $i$ -го вещества ( $i = \overline{1, 5}$ ), кмоль/м<sup>3</sup>;  $T$  — температура, К;  $k_j$  — константа скорости  $j$ -й стадии, м<sup>3</sup>/(кмоль · ч), рассчитываемая по уравнению Аррениуса.

Математическое описание процесса димеризации  $\alpha$ -метилстирола в реакторе идеального смешения можно представить в виде системы дифференциальных уравнений

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{F_i(x, T) - x_i F_n(x, T)}{x_6}, \quad F_i = \sum_{j=1}^9 \gamma_{ij} W_j, \quad i = \overline{1, 5}, \tag{9}$$

$$\frac{dx_6}{dt} = F_n(x, T), \quad F_n = \sum_{j=1}^9 W_j \sum_{i=1}^5 \gamma_{ij}, \tag{10}$$

$$C_p \frac{dT}{dt} = \sum_{j=1}^9 Q_j W_j + \frac{\alpha_x S_x}{C_0} (T_x - T) \tag{11}$$

с начальными условиями

$$x_i(0) = x_i^0, \quad i = \overline{1, 5}, \quad x_6(0) = 1, \quad T(0) = T^0. \tag{12}$$

Здесь  $x_i$  — концентрация вещества  $X_i$  ( $i = \overline{1,5}$ ) (мольная доля);  $x_6 = C/C_0$  — переменный реакционный объем,  $C = \sum_{i=1}^5 C_i$  — суммарная концентрация веществ, кмоль/м<sup>3</sup>,  $C_0 = \sum_{i=1}^5 C_i(0)$  — начальная суммарная концентрация веществ, кмоль/м<sup>3</sup>;  $\gamma_{ij}$  — стехиометрический коэффициент  $i$ -го вещества в  $j$ -й стадии реакции ( $i = \overline{1,5}$ ,  $j = \overline{1,9}$ ) (табл. 1),  $W_j = w_j/C_0$  — приведенная скорость  $j$ -й стадии ( $j = \overline{1,9}$ ), 1/ч;  $C_p$  — мольная теплоемкость реакционной смеси, кДж/(кмоль · К);  $Q_j$  — тепловой эффект  $j$ -й стадии реакции ( $j = \overline{1,12}$ ), кДж/моль;  $\alpha_x$  — коэффициент теплопередачи, кВт/(м<sup>2</sup> · К);  $S_x$  — удельная поверхность теплообмена, 1/м;  $T$  — температура протекания реакции, К;  $T_x$  — температура хладагента, К.

Таблица 1

Матрица стехиометрических коэффициентов веществ  $\gamma_{ij}$ 

Вещество	$w_1$	$w_2$	$w_3$	$w_4$	$w_5$	$w_6$	$w_7$	$w_8$	$w_9$
$X_1$	-2	-2	-2	0	0	0	-1	-1	-1
$X_2$	1	0	0	-1	-1	0	-1	0	0
$X_3$	0	1	0	1	0	-1	0	-1	0
$X_4$	0	0	1	0	1	1	0	0	-1
$X_5$	0	0	0	0	0	0	1	1	1

Значения кинетических и теплофизических параметров рассматриваемого процесса приведены в [23]. Параметром управления является температура хладагента  $T_x(t)$ , на значения которой наложены ограничения

$$303 \text{ K} \leq T_x(t) \leq 403 \text{ K}, \quad t \in [0, \tau]. \quad (13)$$

Целевыми продуктами реакции (8) являются  $X_2$  и  $X_3$ , поэтому в качестве целевого рассмотрим функционал

$$I(T) = x_2(\tau) + x_3(\tau), \quad (14)$$

который выражает выход линейных димеров в конце реакции ( $t = \tau$ ).

Выход целевых продуктов зависит от конверсии исходного вещества  $X_1$ , поэтому зададим уровень конверсии 99 %:

$$1 - x_1(\tau) = 0,99. \quad (15)$$

Требуется определить температурный режим  $T_x(t)$ , который с учетом ограничений (13), (15) обеспечивает достижение функционалом (14) максимального значения.

Для поиска решения задачи (8)–(15) применена программа на языке визуального программирования *Delphi*, в которой реализован предложенный авторами подход. Рассмотрен процесс продолжительностью 3 ч. Начальная суммарная концентрация веществ  $C_0 = 7,72$  кмоль/м<sup>3</sup>, коэффициент теплопередачи  $\alpha_x = 5,31$  кВт/(м<sup>2</sup> · К) [23].

Целевой функционал задачи без ограничения (14) имеет вид

$$P(T_x) = -(x_2(\tau) + x_3(\tau)) + \frac{s^k}{2} (0,01 - x_1(\tau))^2 \rightarrow \min.$$

Для решения сформулированной задачи генерировали начальную популяцию иммунных клеток размером  $l = 100$ . На этапе клонирования задавали число клеток-родителей 40 и число клонов 30. При обновлении популяции удаляли 30 наименее приспособленных иммунных клеток. На этапе мутации изменение координат векторов-клонов осуществляли по формуле [21]:

$$u_{ji} = \begin{cases} u_{ji} + \lambda_1 mut, & \lambda_3 > 0,5, \\ u_{ji} - \lambda_2 mut, & \lambda_3 \leq 0,5, \end{cases}$$

где  $\lambda_1 \in [0; 403 - u_{ji}]$ ,  $\lambda_2 \in [0; u_{ji} - 303]$ ,  $\lambda_3 \in [0; 1]$  — случайные числа;  $mut = 0,5$  — вероятность мутации,  $i = \overline{0, r}$ ,  $j = \overline{1, l}$ .

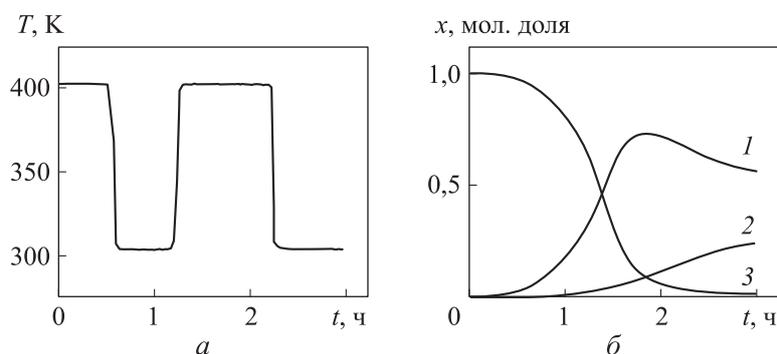
В качестве завершения поиска решения с использованием метода искусственных иммунных систем проверяли условие достижения максимального числа итераций, равного 600. Начальное значение параметра штрафа  $s^0 = 1$ . На каждой итерации значение  $s^0$  увеличивалось в 10 раз. Параметр окончания поиска решения для метода штрафов  $\varepsilon$  взят равным  $10^{-4}$ .

Для получения численного решения системы дифференциальных уравнений (9)–(11) с начальными условиями

$$x_1(0) = 1, \quad x_i(0) = 0 \quad (i = \overline{2, 5}), \quad x_6(0) = 1, \quad T(0) = 303 \text{ К} \quad (16)$$

применяли предиктор-корректорный метод Адамса второго порядка.

В результате вычислений определен температурный режим  $T_x(t)$ , при котором достигается наибольший выход линейных димеров, равный 82,8 %. Конверсия  $\alpha$ -метилстирола составляет 98,7 %. Результаты решения задачи оптимального управления (8)–(15) приведены на рис. 1.



**Рис. 1.** Субоптимальный температурный режим в задаче с ограничением (15) (а) и динамика концентраций (б)  $\alpha$ -димера (1),  $\beta$ -димера (2) и  $\alpha$ -метилстирола (3)

Пусть теперь требуется найти температурный режим  $T_x(t)$ , при котором достигается наибольший выход линейных димеров при условии, что выход побочных продуктов реакции (циклического димера и тримеров) в конечный момент времени не превышает 10 %:

$$x_4(\tau) + x_5(\tau) \leq 0,1. \quad (17)$$

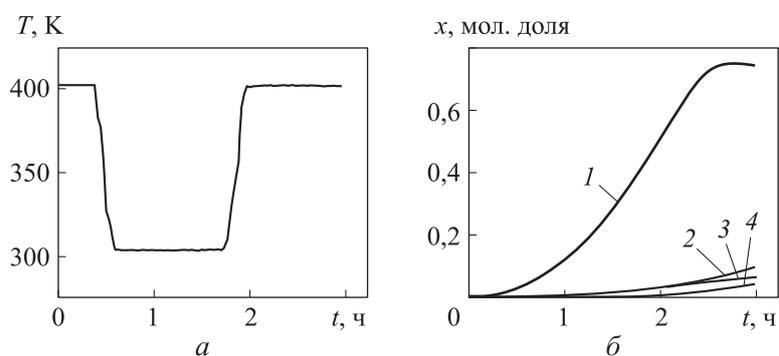
Для перехода к задаче без ограничений необходимо минимизировать функционал

$$P(T_x) = -(x_2(\tau) + x_3(\tau)) + \frac{s^k}{2} [\max\{0, x_4(\tau) + x_5(\tau) - 0,1\}]^2 \rightarrow \min.$$

Поиск решения сформулированной задачи осуществлялся с теми же параметрами методов, что и для решения задачи (8)–(15).

По результатам расчетов установлено, что при соблюдении температурного режима, показанного на рис. 2, а, наибольший выход линейных димеров составляет 83,9 %, а суммарный выход циклического димера и тримеров — 10,2 %. Изменение во времени целевых и побочных продуктов реакции приведено на рис. 2, б.

**Обсуждение полученных результатов.** Для оценки решений задач (8)–(15), (8)–(14), (17), полученных с использованием предложенного подхода, найдено численное решение системы дифференциальных уравнений (9)–(11) с начальными условиями (16) при постоянных допустимых значениях температуры хладагента  $T_x(t)$  (табл. 2). Согласно данным, приведенным в таблице, при температурных режимах, обеспечивающих незначительное отклонение от условия (15) и выполнение условия (17), значение целевого функционала (14) ниже, чем при рассчитанных



**Рис. 2.** Субоптимальный температурный режим в задаче с ограничением (17) (а) и динамика концентраций (б)  $\alpha$ -димера (1),  $\beta$ -димера (2), циклического димера (3), тримеров (4)

с помощью разработанного алгоритма температурных режимов. В связи с этим можно сделать вывод о корректности предложенного подхода к решению задач оптимального управления каталитическим процессом.

Таблица 2

**Значение показателей процесса димеризации  $\alpha$ -метилстирола при некоторых значениях температуры хладоагента**

$T, K$	Конверсия $\alpha$ -метилстирола $(1 - x_1(\tau)) \cdot 100 \%$	Выход	
		побочных продуктов $(x_4(\tau) + x_5(\tau)) \cdot 100 \%$	линейных димеров $(x_2(\tau) + x_3(\tau)) \cdot 100 \%$
303	4,4	0,1	4,3
313	9,2	0,2	9,0
323	26,7	1,0	25,6
333	83,2	6,9	76,3
343	95,6	12,4	83,2
353	98,2	17,1	81,1
363	99,0	21,7	77,3
373	99,2	26,7	72,5
383	99,3	32,7	66,6
393	99,4	39,5	59,9
403	99,4	47,1	52,3

**Заключение.** Предложенный подход на основе метода искусственных иммунных систем и метода штрафов можно применять для поиска оптимального управления каталитическим процессом. Его особенность — учет ограничений, накладываемых на фазовые переменные и параметр

управления. Преимуществом процедуры решения задач оптимального управления с использованием метода искусственных иммунных систем является отсутствие необходимости задавать начальное приближение. Это обусловлено тем, что в процессе поисковой процедуры одновременно рассматривается не одно возможное решение, а их набор из области допустимых значений управления, который на начальном этапе генерируется случайным образом. На каждой итерации поиска решение ищется в виде кусочно-постоянной функции, причем построение функции происходит не от точки к точке, а на всей временной оси. Проведенные численные эксперименты по поиску оптимального температурного режима процесса димеризации  $\alpha$ -метилстирола показали допустимость применения предложенного подхода к решению задач оптимального управления каталитическими процессами.

## ЛИТЕРАТУРА

- [1] Горнов А.Ю. Алгоритмы решения задач оптимального управления с терминальными ограничениями. *Вычислительные технологии*, 2008, т. 13, № 4, с. 44–50. EDN: KASBMN
- [2] Sahinidis N.V., Grossmann I.E. Reformulation of the multiperiod MILP model for capacity expansion of chemical processes. *Oper. Res.*, 1992, vol. 40, no. 1-1, pp. 127–144. DOI: <https://doi.org/10.1287/opre.40.1.S127>
- [3] Royce N.J. Linear programming applied to production planning and operation of a chemical process. *Oper. Res. Q.*, 1970, vol. 21, no. 1, pp. 61–80. DOI: <https://doi.org/10.2307/3007719>
- [4] Santos L., Villas-Boas F., Oliveira A.R., et al. Optimized choice of parameters in interior-point methods for linear programming. *Comput. Optim. Appl.*, 2019, vol. 73, no. 2, pp. 535–574. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10589-019-00079-9>
- [5] Biegler L.T. Integrated optimization strategies for dynamic process operations. *Theor. Found. Chem. Eng.*, 2017, vol. 51, no. 6, pp. 910–927. DOI: <https://doi.org/10.1134/S004057951706001X>
- [6] Dadebo S.A., Mcauley K.B. Dynamic optimization of constrained chemical engineering problems using dynamic programming. *Comput. Chem. Eng.*, 1995, vol. 19, iss. 5, pp. 513–525. DOI: [https://doi.org/10.1016/0098-1354\(94\)00086-4](https://doi.org/10.1016/0098-1354(94)00086-4)
- [7] Pan Y., Fei Z.-S., Zhao L., et al. Dynamic optimization for chemical process based on improved iterative dynamic programming algorithm. *East China Univ. Sci. Technol.*, 2013, vol. 39, no. 1, pp. 61–65.
- [8] Михерский Р.М. Применение искусственной иммунной системы для распознавания зрительных образов. *Компьютерная оптика*, 2018, т. 42, № 1, с. 113–117. DOI: <https://doi.org/10.18287/2412-6179-2018-42-1-113-117>

- [9] Самигулина Г.А. Разработка интеллектуальных экспертных систем прогнозирования и управления на основе искусственных иммунных систем. *Проблемы информатики*, 2010, № 1, с. 15–22. EDN: NBRZMV
- [10] Карпенко А.П. Современные алгоритмы поисковой оптимизации. Алгоритмы, вдохновленные природой. М., Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2014.
- [11] Астахова И.Ф., Ушаков С.А. Модель и алгоритм искусственной иммунной системы. *Математическое моделирование*, 2016, т. 28, № 12, с. 63–73. EDN: XRIPOR
- [12] Антипина Е.В., Мустафина С.А., Антипин А.Ф. Сравнительный анализ эволюционных методов решения задач оптимального управления. *Вестник технологического университета*, 2022, т. 25, № 11, с. 128–133. EDN: SDWWSR. DOI: [https://doi.org/10.55421/1998-7072\\_2022\\_25\\_11\\_128](https://doi.org/10.55421/1998-7072_2022_25_11_128)
- [13] Gao X.Z., Ovaska S.J., Wang X., et al. Clonal optimization-based negative selection algorithm with applications in motor fault detection. *Neural Comput. & Applic.*, 2009, vol. 18, no. 7, pp. 719–729. DOI: <https://doi.org/10.1007/s00521-009-0276-9>
- [14] Wei Y., Wang J. An artificial immune system approach to business process mining. *Adv. Mat. Res.*, 2012, vol. 472-475, pp. 35–38. DOI: <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/AMR.472-475.35>
- [15] Alonso F.R., Oliveira D.Q., Zambroni de Souza A.C. Artificial immune systems optimization approach for multiobjective distribution system reconfiguration. *IEEE Trans. Power Syst.*, 2015, vol. 30, iss. 2, pp. 840–847. DOI: <https://doi.org/10.1109/TPWRS.2014.2330628>
- [16] Lenin K., Ravindranath Reddy B., Surya Kalavathi M. An artificial immune system algorithm for solving optimal reactive power dispatch problem. *CAC2S*, 2013, pp. 51–59.
- [17] Navarro-Caceres M., Herath P., Villarrubia G., et al. An evaluation of a metaheuristic artificial immune system for household energy optimization. *Complexity*, 2018, vol. 2018, art. 9597158. DOI: <https://doi.org/10.1155/2018/9597158>
- [18] Gao X.Z., Ovaska S.J., Wang X., et al. Clonal optimization-based negative selection algorithm with applications in motor fault detection. *Neural Comput. Appl.*, 2009, vol. 18, no. 7, pp. 719–729. DOI: <https://doi.org/10.1007/s00521-009-0276-9>
- [19] de Castro L.N., Timmis J. An artificial immune network for multimodal function optimization. *CEC'02*, 2002, pp. 699–704. DOI: <https://doi.org/10.1109/CEC.2002.1007011>
- [20] Bernardino H.S., Barbosa H.J.C. Artificial immune systems for optimization. In: Chiong R. (eds). *Nature-Inspired Algorithms for Optimization. Studies in Computational Intelligence*, vol. 193. Berlin, Heidelberg, Springer, 2009, pp. 389–411. DOI: [https://doi.org/10.1007/978-3-642-00267-0\\_14](https://doi.org/10.1007/978-3-642-00267-0_14)
- [21] Пантелеев А.В., Метлицкая Д.В. Применение метода искусственных иммунных систем в задачах поиска субоптимального программного управления детерминированными системами. *Автоматика и телемеханика*, 2014, № 11, с. 38–54. EDN: TDYGWF

[22] Ле К.Х., Суркова Н.Е., Остроух А.В. Генетические алгоритмы в задачах рациональной организации информационно-вычислительных процессов. *Автоматизация и управление в технических системах*, 2014, № 4, с. 82–99.

DOI: <https://doi.org/10.12731/2306-1561-2014-4-9>

[23] Antipina E.V., Mustafina S.A., Antipin A.F. Search for the optimal regime parameters of a catalytic process based on evolutionary computations. *Theor. Found. Chem. Eng.*, 2022, vol. 56, no. 2, pp. 162–169.

DOI: <https://doi.org/10.1134/S0040579522020038>

**Антипина Евгения Викторовна** — канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник управления научных исследований и разработок УУНиТ (Российская Федерация, 450076, Уфа, ул. Заки Валиди, д. 32).

**Мустафина Светлана Анатольевна** — д-р физ.-мат. наук, профессор, заведующая кафедрой «Математическое моделирование» УУНиТ (Российская Федерация, 450076, Уфа, ул. Заки Валиди, д. 32).

**Антипин Андрей Федорович** — канд. техн. наук, доцент кафедры «Прикладная информатика и программирование» Стерлитамакского филиала УУНиТ (Российская Федерация, 453103, Стерлитамак, Ленина пр-т, д. 49).

**Просьба ссылаться на эту статью следующим образом:**

Антипина Е.В., Мустафина С.А., Антипин А.Ф. Поиск оптимального управления каталитическим процессом на основе метода искусственных иммунных систем. *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки*, 2024, № 4 (115), с. 4–20. EDN: WOVHZZ

## SEARCH FOR THE CATALYTIC PROCESS OPTIMAL CONTROL USING THE ARTIFICIAL IMMUNE SYSTEM TECHNIQUE

E.V. Antipina<sup>1</sup>

stepashinaev@ya.ru

S.A. Mustafina<sup>1</sup>

mustafina\_sa@mail.ru

A.F. Antipin<sup>2</sup>

andrejantipin@ya.ru

<sup>1</sup>Ufa University of Science and Technology, Ufa, Russian Federation

<sup>2</sup>Sterlitamak Branch of Ufa University of Science and Technology, Sterlitamak, Russian Federation

---

### Abstract

The paper proposes an approach to finding numerical solution to the problem of the catalytic process optimal control. It formulates in a general form the optimal control problem with the control parameter

### Keywords

*Optimal control, artificial immune system, penalty method, phase constraints, catalytic process*

and phase restrictions. To solve the problem, the paper proposes a combined technique based on the penalty method and the artificial immune systems. The technique is applicable in the nonlinear dynamics processes and does not depend on selection of the initial approximation. Control is sought in the piecewise constant functions class. Based on this approach, numerical experiments were carried out for the alphasethylstyrene catalytic dimerization process. Mathematical model of the process occurring in the ideal mixing reactor is presented. On its basis, problems are formulated in determining the refrigerant optimal temperature regime with restrictions on the initial substance conversion and the reaction by-products yield. Optimality criterion is set as the maximum yield of the target reaction products, i.e., the linear dimers. Auxiliary functionals of the penalty method are constructed to find the solution. Computation in each problem results in finding a suboptimal temperature regime, where restrictions are met, highest yield of the target reaction products is achieved, and dynamics of the substances' concentrations is computed

Received 17.11.2023

Accepted 16.01.2024

© Author(s), 2024

*The work was carried out with the state financial support of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (scientific code FZWU-2023-0002)*

## REFERENCES

- [1] Gornov A.Yu. Computational methods of continuum mechanics for exaflop computer systems. *Vychislitelnye tekhnologii* [Computational Technologies], 2008, vol. 13, no. 4, pp. 44–50 (in Russ.). EDN: KASBMN
- [2] Sahinidis N.V., Grossmann I.E. Reformulation of the multiperiod MILP model for capacity expansion of chemical processes. *Oper. Res.*, 1992, vol. 40, no. 1-1, pp. 127–144. DOI: <https://doi.org/10.1287/opre.40.1.S127>
- [3] Royce N.J. Linear programming applied to production planning and operation of a chemical process. *Oper. Res. Q.*, 1970, vol. 21, no. 1, pp. 61–80. DOI: <https://doi.org/10.2307/3007719>
- [4] Santos L., Villas-Boas F., Oliveira A.R., et al. Optimized choice of parameters in interior-point methods for linear programming. *Comput. Optim. Appl.*, 2019, vol. 73, no. 2, pp. 535–574. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10589-019-00079-9>
- [5] Biegler L.T. Integrated optimization strategies for dynamic process operations. *Theor. Found. Chem. Eng.*, 2017, vol. 51, no. 6, pp. 910–927. DOI: <https://doi.org/10.1134/S004057951706001X>

- [6] Dadebo S.A., Mcauley K.B. Dynamic optimization of constrained chemical engineering problems using dynamic programming. *Comput. Chem. Eng.*, 1995, vol. 19, iss. 5, pp. 513–525. DOI: [https://doi.org/10.1016/0098-1354\(94\)00086-4](https://doi.org/10.1016/0098-1354(94)00086-4)
- [7] Pan Y., Fei Z.-S., Zhao L., et al. Dynamic optimization for chemical process based on improved iterative dynamic programming algorithm. *East China Univ. Sci. Technol.*, 2013, vol. 39, no. 1, pp. 61–65.
- [8] Mikherskii R.M. Application of an artificial immune system for visual pattern recognition. *Kompyuternaya optika* [Computer Optics], 2018, vol. 42, no. 1, pp. 113–117 (in Russ.). DOI: <https://doi.org/10.18287/2412-6179-2018-42-1-113-117>
- [9] Samigulina G.A. Development of intelligent expert systems for forecasting and management based on artificial immune systems. *Problemy informatiki*, 2010, no. 1, pp. 15–22 (in Russ.). EDN: NBRZMV
- [10] Karpenko A.P. *Sovremennyye algoritmy poiskovoy optimizatsii. Algoritmy, vdokhnovlennyye prirodoy* [Modern search optimization algorithms. Algorithms inspired by nature]. Moscow, BMSTU Publ., 2014.
- [11] Astakhova I.F., Ushakov S.A. The model and algorithm of artificial immune system. *Matematicheskoe modelirovanie*, 2016, vol. 28, no. 12, pp. 63–73 (in Russ.). EDN: XRIPOR
- [12] Antipina E.V., Mustafina S.A., Antipin A.F. Comparative analysis of evolutionary methods for solving optimal control problems. *Vestnik tekhnologicheskogo universiteta* [Herald of Technological University], 2022, vol. 25, no. 11, pp. 128–133 (in Russ.). DOI: [https://doi.org/10.55421/1998-7072\\_2022\\_25\\_11\\_128](https://doi.org/10.55421/1998-7072_2022_25_11_128)
- [13] Gao X.Z., Ovaska S.J., Wang X., et al. Clonal optimization-based negative selection algorithm with applications in motor fault detection. *Neural Comput. & Applic.*, 2009, vol. 18, no. 7, pp. 719–729. DOI: <https://doi.org/10.1007/s00521-009-0276-9>
- [14] Wei Y., Wang J. An artificial immune system approach to business process mining. *Adv. Mat. Res.*, 2012, vol. 472-475, pp. 35–38. DOI: <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/AMR.472-475.35>
- [15] Alonso F.R., Oliveira D.Q., Zambroni de Souza A.C. Artificial immune systems optimization approach for multiobjective distribution system reconfiguration. *IEEE Trans. Power Syst.*, 2015, vol. 30, iss. 2, pp. 840–847. DOI: <https://doi.org/10.1109/TPWRS.2014.2330628>
- [16] Lenin K., Ravindranath Reddy B., Surya Kalavathi M. An artificial immune system algorithm for solving optimal reactive power dispatch problem. *CAC2S*, 2013, pp. 51–59.
- [17] Navarro-Caceres M., Herath P., Villarrubia G., et al. An evaluation of a metaheuristic artificial immune system for household energy optimization. *Complexity*, 2018, vol. 2018, art. 9597158. DOI: <https://doi.org/10.1155/2018/9597158>
- [18] Gao X.Z., Ovaska S.J., Wang X., et al. Clonal optimization-based negative selection algorithm with applications in motor fault detection. *Neural Comput. Appl.*, 2009, vol. 18, no. 7, pp. 719–729. DOI: <https://doi.org/10.1007/s00521-009-0276-9>

- [19] de Castro L.N., Timmis J. An artificial immune network for multimodal function optimization. *CEC'02*, 2002, pp. 699–704.  
DOI: <https://doi.org/10.1109/CEC.2002.1007011>
- [20] Bernardino H.S., Barbosa H.J.C. Artificial immune systems for optimization. In: Chiong R. (eds). *Nature-Inspired Algorithms for Optimization. Studies in Computational Intelligence*, vol. 193. Berlin, Heidelberg, Springer, 2009, pp. 389–411.  
DOI: [https://doi.org/10.1007/978-3-642-00267-0\\_14](https://doi.org/10.1007/978-3-642-00267-0_14)
- [21] Panteleev A.V., Metlitskaya D.V. Using the method of artificial immune systems to seek the suboptimal program control of deterministic systems. *Autom. Remote Control*, 2014, vol. 75, no. 11, pp. 1922–1935. DOI: <https://doi.org/10.1134/S0005117914110034>
- [22] Le K.Kh., Surkova N.E., Ostroukh A.V. Genetic algorithms in problems of rational organization of information processes. *Avtomatizatsiya i upravlenie v tekhnicheskikh sistemakh* [Automation and Control in Technical Systems], 2014, no. 4, pp. 82–99 (in Russ.). DOI: <https://doi.org/10.12731/2306-1561-2014-4-9>
- [23] Antipina E.V., Mustafina S.A., Antipin A.F. Search for the optimal regime parameters of a catalytic process based on evolutionary computations. *Theor. Found. Chem. Eng.*, 2022, vol. 56, no. 2, pp. 162–169. DOI: <https://doi.org/10.1134/S0040579522020038>

**Antipina E.V.** — Cand. Sc. (Phys.-Math.), Senior Researcher, Department of Scientific Research and Development, Ufa University of Science and Technology (Zaki Validi ul. 32, Ufa, 450076 Russian Federation).

**Mustafina S.A.** — Dr. Sc. (Phys.-Math.), Professor, Head of the Department of Mathematical Modeling, Ufa University of Science and Technology (Zaki Validi ul. 32, Ufa, 450076 Russian Federation).

**Antipin A.F.** — Cand. Sc. (Eng.), Assoc. Professor, Department of Applied Informatics and Programming, Sterlitamak Branch of Ufa University of Science and Technology (Lenin prospekt 49, Sterlitamak, 453103 Russian Federation).

**Please cite this article in English as:**

Antipina E.V., Mustafina S.A., Antipin A.F. Search for the catalytic process optimal control using the artificial immune system technique. *Herald of the Bauman Moscow State Technical University, Series Natural Sciences*, 2024, no. 4 (115), pp. 4–20 (in Russ.). EDN: WOVHSD