

НОВЫЕ МАТЕРИАЛЫ И НАНОТЕХНОЛОГИИ  
MATERIAL SCIENCE AND NANOTECHNOLOGIES

doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-563-570

УДК 519.6, 004.942

Автоматизация поиска оптимальных значений параметров процесса  
олигомеризации этиленаЕвгения Викторовна Антипина<sup>1</sup>, Светлана Анатольевна Мустафина<sup>2</sup>,  
Андрей Федорович Антипин<sup>3</sup><sup>1,2,3</sup> Уфимский университет науки и технологий, Уфа, 450076, Российская Федерация<sup>1</sup> [stepashinaev@ya.ru](mailto:stepashinaev@ya.ru), <https://orcid.org/0000-0002-8458-9638><sup>2</sup> [mustafina\\_sa@mail.ru](mailto:mustafina_sa@mail.ru), <https://orcid.org/0000-0002-6363-1665><sup>3</sup> [andrejantipin@ya.ru](mailto:andrejantipin@ya.ru), <https://orcid.org/0000-0002-9151-4167>

## Аннотация

**Введение.** Приведено математическое описание процесса олигомеризации этилена на катализаторе NiO/B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> в среде жидкого растворителя гептана. Сформулированы задачи оптимального управления процессом. В качестве управляющих параметров приняты температура и время протекания процесса. Предложен алгоритм решения задачи оптимального управления промышленно значимым каталитическим процессом олигомеризации этилена. **Метод.** Поиск решения сформулированных задач осуществляется с применением генетического алгоритма с вещественным кодированием. Для каждой из рассматриваемых задач предложен способ представления математического аналога популяции, на основе которого выполняется поиск решения. Представлен пошаговый алгоритм определения оптимальных значений параметров процесса олигомеризации этилена. Особенностью алгоритма является одновременный поиск значений непрерывного параметра управления (температура) и дискретного параметра управления (время процесса). Разработана программа (приложение), позволяющая определить оптимальные значения параметров процесса. Приложение позволяет пользователю выбирать задачу оптимального управления, задавать значения параметров генетического алгоритма для поиска решения и визуализировать полученные результаты. **Основные результаты.** Проведен вычислительный эксперимент для процесса олигомеризации этилена. Рассчитана оптимальная продолжительность процесса в изотермических условиях, при которой достигается наибольшее значение концентрации углеводородов C<sub>4</sub>. Определены оптимальные температурный режим и продолжительность процесса олигомеризации этилена, обеспечивающие максимальную концентрацию углеводородов C<sub>6</sub>. **Обсуждение.** Проведенные численные эксперименты продемонстрировали меньшую ресурсозатратность, по сравнению с методами равномерного поиска и вариаций в пространстве управления. Предложенный алгоритм можно применять для исследования закономерностей протекания каталитических процессов, не прибегая к проведению лабораторных экспериментов, сопряженных с дополнительными материальными и временными затратами.

## Ключевые слова

задача оптимального управления, олигомеризация этилена, генетический алгоритм, математическая модель, программное обеспечение

## Благодарности

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-21-00186, <https://rscf.ru/project/24-21-00186/>.**Ссылка для цитирования:** 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. doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-563-570

## Automation of search for optimal values of the ethylene oligomerization process parameters

Evgenia V. Antipina<sup>1</sup>✉, Svetlana A. Mustafina<sup>2</sup>, Andrey F. Antipin<sup>3</sup>

<sup>1,2,3</sup> Ufa University of Science and Technology, Ufa, 450076, Russian Federation

<sup>1</sup> stepashinaev@ya.ru✉, <https://orcid.org/0000-0002-8458-9638>

<sup>2</sup> mustafina\_sa@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6363-1665>

<sup>3</sup> andrejantipin@ya.ru, <https://orcid.org/0000-0002-9151-4167>

### Abstract

A mathematical description of the process of ethylene oligomerization on a NiO/B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> catalyst in a liquid heptane solvent is given. Problems of optimal process control are formulated. The temperature and time of the process are taken as control parameters. An algorithm is proposed for solving the problem of optimal control of the industrially significant catalytic process of ethylene oligomerization. The search for solutions to the formulated problems is carried out using a genetic algorithm with real coding. For each of the problems under consideration, a method is proposed for representing a mathematical analogue of a population on the basis of which a solution is searched. A step-by-step algorithm for determining the optimal parameters for the ethylene oligomerization process is presented. A special feature of the algorithm is the simultaneous search for the values of a continuous control parameter (temperature) and a discrete control parameter (process time). A program (application) has been developed to determine the optimal values of process parameters. The application allows the user to select an optimal control problem, set the values of the genetic algorithm parameters to find a solution, and visualize the results obtained. A computational experiment was carried out for the process of ethylene oligomerization. The optimal duration of the process under isothermal conditions was calculated, at which the highest concentration of C<sub>4</sub> hydrocarbons is achieved. The optimal temperature conditions and duration of the ethylene oligomerization process were determined to ensure the maximum concentration of C<sub>6</sub> hydrocarbons. The conducted numerical experiments demonstrated lower resource consumption compared to the methods of uniform search and variations in the control space. The proposed algorithm can be used to study the patterns of catalytic processes without resorting to laboratory experiments associated with additional material and time costs.

### Keywords

optimal control problem, ethylene oligomerization, genetic algorithm, mathematical model, software

### Acknowledgements

The research was supported by the Russian Science Foundation (RSF) grant No. 24-21-00186, <https://rscf.ru/en/project/24-21-00186/>.

**For citation:** 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). doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-563-570

### Введение

Применение математического аппарата для моделирования процессов химической промышленности позволяет находить решения ряда практических задач, одной из которых является определение оптимальных условий их ведения. Поскольку при решении различных производственных задач не всегда имеется возможность провести достаточное количество экспериментов ввиду сложного состава исходного сырья или высоких материальных затрат, актуальной является разработка математических методов и компьютерных программ, позволяющих исследовать закономерности протекания каталитических процессов.

Важное практическое значение в промышленном производстве играют процессы каталитической олигомеризации и полимеризации олефинов. Продукты данных процессов применяются в крупнотоннажном промышленном производстве полиэтилена.

В настоящее время имеются исследования, в которых на основе математических методов определяются оптимальные способы ведения каталитических процессов [1, 2]. В качестве управления обычно рассматриваются температура, давление, начальный состав реакционной смеси, время процесса, скорость подачи сырья.

Методы линейного программирования применяются в химической технологии при решении задач

оптимального планирования производства [3, 4], для определения эффективного плана перевозок и т. д. В работе [5] предложен метод синтеза многостадийных систем теплообмена на основе задачи о назначениях. Линейное программирование используется для решения оптимизационных задач с линейным критерием оптимальности и линейными ограничениями, накладываемыми на область изменения переменных. Поскольку большинство каталитических процессов ввиду нестационарности чаще всего описывается нелинейными математическими моделями, то применимость данных методов для решения задач оптимального управления химическими процессами весьма ограничена.

Для оптимизации многостадийных процессов химической технологии применяется динамическое программирование, эффективность применения которого показана в работе [6]. Динамическое программирование хорошо зарекомендовало себя при решении задач, в которых на каждой стадии имеется небольшое число переменных. Его применение для сложных химических реакций, содержащих большое количество промежуточных веществ, затруднительно ввиду высокой размерности задачи и, как следствие, ресурсоемких вычислений.

Аналитические методы оптимизации процессов химической технологии (принцип максимума Понтрягина, вариационные методы) применяются для решения

задач с небольшим количеством независимых переменных [7]. С увеличением количества переменных, а также при наличии ограничений, применение аналитических методов становится затруднительным.

Часто на практике возникает также необходимость в определении значений нескольких управляющих воздействий для достижения критерием оптимальности экстремума, что усложняет поиск решения задач оптимального управления с помощью классических методов. Потому решение задач оптимального управления процессом олигомеризации этилена предлагается осуществлять с помощью генетического алгоритма. В настоящее время генетические алгоритмы широко применяются при решении задач оптимизации в молекулярном моделировании [8], многокритериальной оптимизации [9], при построении нейросетевых моделей [10], а также при решении задач планирования [11, 12] и оптимизационных задач в различных технических системах [13–15]. В зависимости от формы представления координат вектора возможного решения (гена) различают генетические алгоритмы с бинарным и вещественным кодированием. В генетических алгоритмах с бинарным кодированием ген шифруется с помощью двоичного представления. В этом случае в алгоритм включаются этапы кодирования и декодирования значений оптимизируемых параметров процесса. В генетических алгоритмах с вещественным кодированием ген представляется вещественным числом, поэтому отпадает необходимость в дополнительных операциях, связанных с перекодированием. Генетические алгоритмы легко реализовать на практике, в том числе для задач оптимального управления с несколькими управляющими параметрами и высокой размерностью вектора состояния динамической системы.

Кроме того, в задачах оптимального управления каталитическими процессами параметры управления могут быть непрерывными (например, температура реакционной смеси, давление) или дискретными величинами (например, длительность процесса, мольное соотношение реагентов). Одновременный поиск значений непрерывного и дискретного параметров управления каталитическим процессом является актуальной задачей, которая часто возникает на практике.

Целью работы является разработка численного алгоритма для решения задач оптимального управления процессом олигомеризации этилена с непрерывным и дискретным управляющими параметрами.

### Постановка задачи

Одним из перспективных способов синтеза высших  $\alpha$ -олефинов ( $C_4$ – $C_{12}$ ) является процесс олигомеризации этилена с использованием металлокомплексных катализаторов. Кинетическая модель процесса олигомеризации этилена на катализаторе  $NiO/B_2O_3-Al_2O_3$  в среде жидкого растворителя гептана, построенная на основе экспериментальных данных, приведена в работе [16].

Математическое описание процесса олигомеризации этилена позволяет определять динамику концентраций веществ в проточном реакторе и представля-

ет собой систему обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = -2k_1x_1 - k_2x_1(x_2 + x_3 + x_4 + x_5), \\ \frac{dx_2}{dt} = k_1x_1 - k_2x_1x_2 - k_3x_2(x_2 + x_3 + x_4), \\ \frac{dx_3}{dt} = k_2x_1x_2 - k_2x_1x_3 - k_3x_2x_3, \\ \frac{dx_4}{dt} = k_2x_1x_3 + k_3x_2^2 - k_2x_1x_4 - k_3x_2x_4, \\ \frac{dx_5}{dt} = k_2x_1x_4 + k_3x_2x_3 - k_2x_1x_5, \\ \frac{dx_6}{dt} = k_2x_1x_5 + k_3x_2x_4, \end{cases} \quad (1)$$

где  $x_i$  — концентрация углеводорода  $C_{2i}$ ;  $t \in [0, \tau]$  — время;  $k_j$  — константа скорости  $j$ -й стадии, определяемая по уравнению Аррениуса:  $k_j(T) = k_{0j} \exp\left(-\frac{E_j}{RT}\right)$ ,  $T$  — температура реакционной смеси,  $k_{0j}$  — кинетическая константа,  $E_j$  — энергия активации,  $R$  — универсальная газовая постоянная.

Начальные условия для системы (1):

$$x_i(0) = x_i^0, \quad i = \overline{1, 6}. \quad (2)$$

Рассмотрим в качестве управляющих параметров температуру  $T(t)$ , которая влияет на интенсивность химических превращений, и время контакта реакционной смеси  $\tau$ . Пусть на их значения наложены ограничения:

$$\underline{T} \leq T(t) \leq \overline{T}, \quad t \in [0, \tau], \quad (3)$$

$$\underline{\tau} \leq \tau \leq \overline{\tau}. \quad (4)$$

В качестве критерия оптимальности рассмотрим наибольшее значение концентрации продуктов процесса ( $C_4$ – $C_{12}$ ).

Сформулируем перечень задач поиска оптимальных значений параметров процесса олигомеризации этилена.

Задача 1. Определить оптимальный температурный режим  $T^*(t) \in [\underline{T}, \overline{T}]$ , при котором достигается максимум функционала

$$F(T^*(t)) = x_i(\tau), \quad i = \overline{2, 6}.$$

Задача 2. Найти оптимальное время контакта веществ  $\tau^* \in [\underline{\tau}, \overline{\tau}]$ , при котором достигается максимум функционала

$$F(\tau^*) = x_i(\tau^*), \quad i = \overline{2, 6}.$$

Задача 3. Определить оптимальный температурный режим  $T^*(t) \in [\underline{T}, \overline{T}]$  и оптимальное время протекания процесса  $\tau^* \in [\underline{\tau}, \overline{\tau}]$ , при которых целевой функционал

$$F(T^*(t), \tau^*) = x_i(\tau^*), \quad i = \overline{2, 6},$$

принимает максимальное значение.

### Генетический алгоритм определения оптимальных значений параметров процесса олигомеризации этилена

Для решения приведенных выше задач сформулируем генетический алгоритм с вещественным кодированием. Принцип работы генетических алгоритмов основан на имитации процессов эволюции живой природы и включает в себя циклическое применение к популяции особей операций отбора, скрещивания, мутации и обновления.

Найдем управление  $T(t)$  в классе кусочно-постоянных функций  $T(t) = T_j, t \in [t_j, t_{j+1}], j = 0, n, t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_{n+1}, t_0 = 0, t_{n+1} = \tau$ .

Для каждой из задач оптимального управления процессом олигомеризации этилена введем в рассмотрение множество векторов:

$$- \mathbf{p}_i = (T_{i1}, T_{i2}, \dots, T_{in}), i = \overline{1, s};$$

$$- \mathbf{p}_i = (\tau_i), i = \overline{1, s};$$

$$- \mathbf{p}_i = (T_{i1}, T_{i2}, \dots, T_{in}, \tau_i), i = \overline{1, s}.$$

Каждый вектор  $\mathbf{p}_i$ , представляющий собой возможное решение задачи, назовем особью, а совокупность всех векторов  $\mathbf{p}_i (i = \overline{1, s})$  — популяцией. Введем общее обозначение для элементов особи:  $\mathbf{p}_i = (p_{i1}, p_{i2}, \dots, p_{ir}) = (p_{ij}), j = \overline{1, r},$  где  $p_{ij} = T_{ij}, r = n$  — для задачи 1;  $p_{ij} = \tau_i, r = 1$  — для задачи 2;  $p_{ij} = \begin{cases} T_{ij}, j = \overline{1, n}, \\ \tau_i, j = n + 1, \end{cases} r = n + 1$  — для задачи 3.

Фитнес-функцией, определяющей, подходит ли особь в качестве решения, является целевой функционал каждой задачи. Так как осуществляется поиск максимального значения целевого функционала, наиболее подходящей (приспособленной) особи соответствует наибольшее значение целевого функционала. Чтобы вычислить значение фитнес-функции особи, необходимо найти численное решение системы дифференциальных уравнений (1) с начальными условиями (2), т. е. решить прямую кинетическую задачу.

Основные этапы работы генетического алгоритма.

**Шаг 1.** Создание начальной популяции особей  $\mathbf{p}_i, i = \overline{1, s}$ . Для каждой особи вычисляется значение фитнес-функции.

**Шаг 2.** Отбор. Из текущей популяции выбираются две особи  $\mathbf{p}_k, \mathbf{p}_m$  для последующего скрещивания с помощью одного из операторов отбора:

— панмиксия: случайным образом отбираются две особи, при этом вероятность отбора каждой из них одинакова;

— турнирный отбор: в первом турнире случайным образом выбираются две различные особи, из которых случайным образом во втором турнире отбирается одна особь.

**Шаг 3.** Кроссовер. Формируется новая особь путем применения одного из операторов кроссовера:

— простейший: создается два потомка  $\mathbf{v}_1 = (p_{k1}, \dots, p_{kq}, p_{mq+1}, \dots, p_{mr}), \mathbf{v}_2 = (p_{m1}, \dots, p_{mq}, p_{kq+1}, \dots, p_{kr}),$  где  $q \in [1, r - 1]$  — случайное число;

— арифметический: создается два потомка  $\mathbf{v}_1 = \lambda \mathbf{p}_k + (1 - \lambda) \mathbf{p}_m, \mathbf{v}_2 = \lambda \mathbf{p}_m + (1 - \lambda) \mathbf{p}_k,$  где  $\lambda \in [0, 1]$  — случайное число.

**Шаг 4.** Мутация. С целью преодоления попадания решения в точку локального экстремума сгенерированная на шаге 3 особь подвергается действию одного из операторов мутации:

— случайная — случайно выбранная координата каждого из векторов  $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2$  заменяется случайным значением из диапазонов, задаваемых неравенством (3) и/или (4);

— неравномерная — у каждого из векторов  $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2$  случайно выбранная  $l$ -я координата заменяется на значение, вычисленное по формуле:

$$v_l = \begin{cases} v_l + (p_{\max} - v_l)(1 - q^{(1 - \frac{N}{N_{\max}})^{mut}}), & z \leq 0,5, \\ v_l - (v_l - p_{\min})(1 - q^{(1 - \frac{N}{N_{\max}})^{mut}}), & z > 0,5, \end{cases}$$

где  $p_{\max} = \bar{T}, p_{\min} = \underline{T}$  и/или  $p_{\max} = \bar{\tau}, p_{\min} = \underline{\tau},$  в зависимости от решаемой задачи;  $q, z \in [0, 1]$  — случайные числа;  $N$  — номер текущей популяции;  $N_{\max}$  — максимальное количество популяций;  $mut$  — параметр мутации.

**Шаг 5.** Обновление популяции. Из текущей популяции выбирается особь с наименьшим значением фитнес-функции и заменяется вектором-мутантом. Далее осуществляется переход на шаг 2, пока не будет достигнуто условие окончания поиска. Особь с наибольшим значением фитнес-функции из последней популяции будет представлять собой решение задачи оптимального управления процессом олигомеризации этилена.

Особенностью алгоритма является возможность поиска оптимальных значений двух параметров управления, один из которых является непрерывной величиной (температура), а другой — дискретной величиной (продолжительность процесса).

В среде визуального программирования Delphi разработано приложение, позволяющее определить оптимальные значения параметров процесса олигомеризации этилена на катализаторе  $\text{NiO/B}_2\text{O}_3\text{-Al}_2\text{O}_3$ . Данное программное обеспечение дает возможность выбрать задачу оптимального управления, задавать значения параметров генетического алгоритма для поиска ее решения и визуализировать полученные результаты. В качестве критерия оптимальности можно указать достижение наибольшего выхода только для одной фракции углеводородов. Для поиска численного решения системы дифференциальных уравнений (1) с начальными условиями (2) в программе реализован предиктор-корректорный метод Адамса второго порядка.

### Вычислительный эксперимент

С помощью генетического алгоритма вычислим оптимальную продолжительность процесса олигомеризации этилена в изотермическом режиме. В качестве критерия оптимальности рассмотрим максимальное значение концентрации углеводородов фракции  $\text{C}_4$ . Тогда целевой функционал имеет вид

$$F(\tau^*) = x_2(\tau^*). \quad (5)$$

На значения управляющего параметра наложены ограничения:

$$60 \text{ с} \leq \tau \leq 1500 \text{ с}. \quad (6)$$

Пусть заданы начальные концентрации веществ, моль/л:

$$x_1(0) = 1,85, x_i(0) = 0, i = \overline{2, 6}.$$

Требуется для процесса олигомеризации этилена определить его длительность  $\tau^*$  с учетом ограничений (6), при котором функционал (5) принимает наибольшее значение.

Для решения сформулированной задачи (при  $T = 473 \text{ К}$ ) зададим следующие значения параметров генетического алгоритма: размер популяции  $s = 10$ ; количество популяций — 50; оператор отбора — панмиксия, оператор мутации — случайная мутация, оператор кроссовера — арифметический кроссовер.

Результаты расчетов показали, что наибольшее значение концентрации целевого продукта процесса, равное 0,396 моль/л, достигается при  $\tau^* = 191 \text{ с}$  (рис. 1).

Решение задачи поиска оптимальной продолжительности процесса олигомеризации этилена найдем также с помощью метода равномерного поиска. Поиск решения осуществим с шагом, равным 1 с. Оптимальная длительность процесса составила также 191 с. Однако вычислительные затраты на поиск решения с помощью метода равномерного поиска выше, по сравнению с генетическим алгоритмом. Количество обращений к целевому функционалу в первом случае составило 1441, для генетического алгоритма — 61 (10 раз — на этапе генерирования начальной популяции, 50 раз — для особи-мутанта, добавляемого в популяцию, 1 раз — в последней популяции для выбора особи, которая рассматривается в качестве решения задачи). В результате

можно сделать вывод, что разработанный генетический алгоритм менее ресурсозатратный для поиска оптимальной продолжительности процесса олигомеризации этилена, по сравнению с методом равномерного поиска.

Вычислим оптимальные температурный режим и продолжительность процесса олигомеризации этилена. Зададим в качестве критерия оптимальности максимальное значение концентрации углеводородов фракции  $C_6$ , т. е. целевой функционал имеет вид

$$F(T^*(t), \tau^*) = x_3(\tau^*). \quad (7)$$

На значения температуры наложены ограничения:

$$323 \text{ К} \leq T(t) \leq 473 \text{ К}, t \in [0, \tau]. \quad (8)$$

Необходимо найти температурный режим  $T^*(t)$  и продолжительность процесса  $\tau^*$ , удовлетворяющих условиям (6), (8), при которых целевой функционал (7) принимает наибольшее значение.

Для решения поставленной задачи применим генетический алгоритм со следующими значениями параметров: размер популяции  $s = 70$ ; количество популяций — 500; оператор отбора — панмиксия, оператор мутации — случайная мутация, оператор кроссовера — арифметический кроссовер.

В результате проведенных вычислений установлено, что для достижения наибольшей концентрации углеводородов  $C_6$ , равной 0,164 моль/л, продолжительность процесса составляет 462 с. При этом следует начинать процесс при минимальной температуре, спустя 194 с необходимо увеличить температуру до максимальной и поддерживать ее на этом уровне до конца процесса (рис. 2).

Вычисленные значения целевого функционала (7) для различных изотермических режимов (таблица) при оптимальной продолжительности процесса не превос-

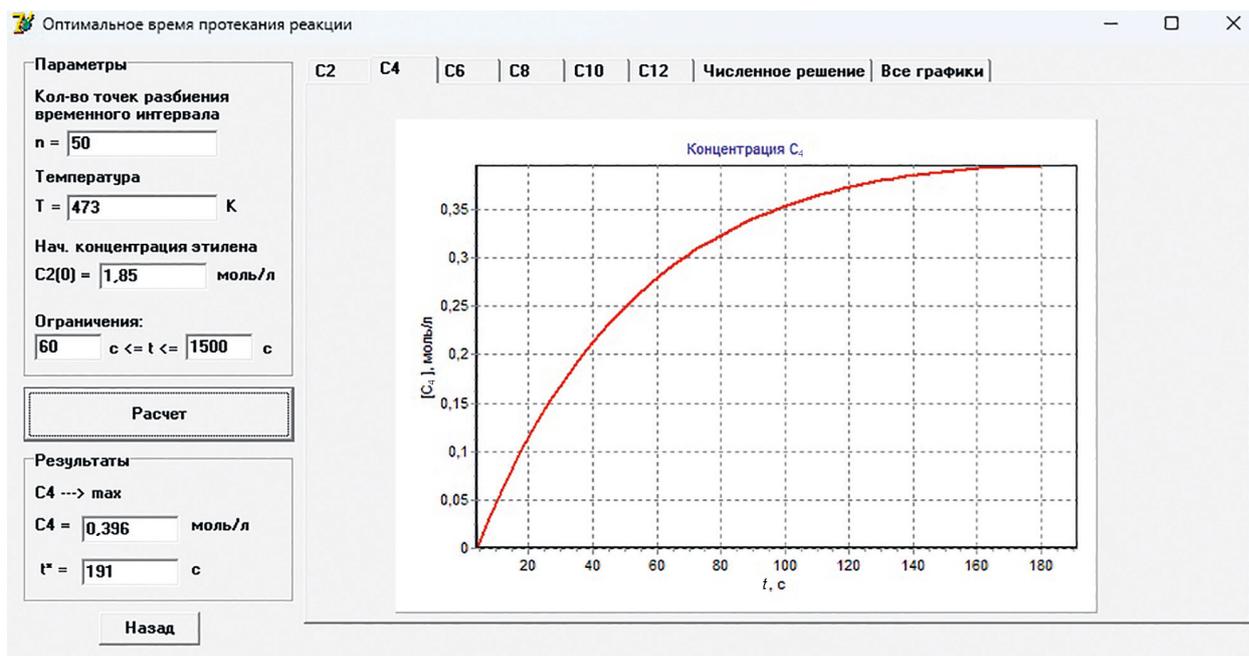


Рис. 1. Результаты решения задачи поиска оптимального времени протекания процесса олигомеризации этилена  
 Fig. 1. Results of solving the problem of finding the optimal time for the process of ethylene oligomerization

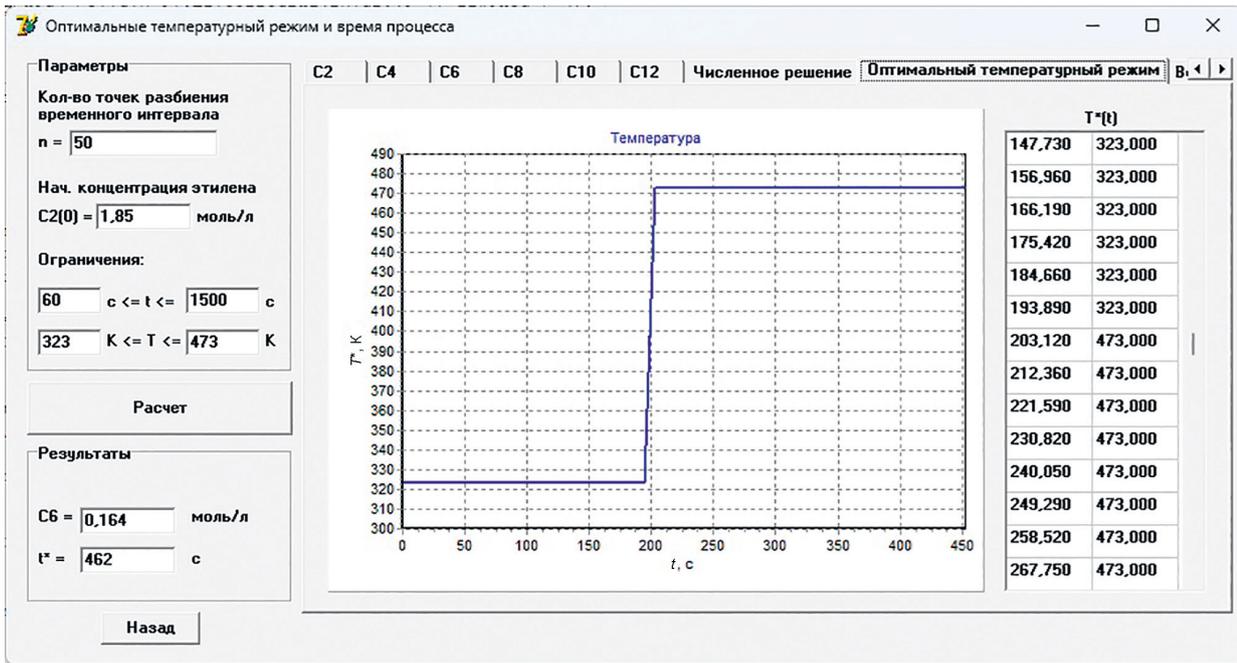


Рис. 2. Результаты решения задачи поиска оптимальных значений параметров (температуры и времени) процесса олигомеризации этилена

Fig. 2. Results of solving the problem of searching for optimal values of parameters (temperature and time) of the ethylene oligomerization process

ходят его значения, рассчитанного для оптимального температурного режима.

Задача поиска оптимального температурного режима и оптимальной продолжительности процесса олигомеризации этилена также решена с помощью метода вариаций в пространстве управлений, реализованного в программе на языке программирования Delphi. В качестве начального приближения решения задачи задана постоянная температура  $T(t) = 398 \text{ K}$  и длительность процесса  $\tau = 720 \text{ с}$ . Задача решена с шагом  $0,1 \text{ K}$  для температуры и с шагом  $1 \text{ с}$  для продолжительности процесса; количество точек разбиения интервала времени задано равным 50. Результаты расчетов показали, что наибольшее значение концентрации фракции углеводородов  $C_6$  составляет  $0,163 \text{ моль/л}$  при продолжительности процесса  $\tau^* = 458 \text{ с}$ . Структура оптимальной температурной кривой процесса близка к

температурному профилю, рассчитанному с помощью генетического алгоритма. Относительная погрешность вектора температуры составила  $3,78 \%$ . Количество обращений к целевому функционалу при решении задачи с помощью генетического алгоритма составило 571, при использовании метода вариаций в пространстве управлений — 2010. В связи с этим для поиска оптимальных значений параметров процесса олигомеризации этилена целесообразно применять разработанный генетический алгоритм.

### Заключение

Разработаны алгоритм и программное обеспечение, которые позволяют определить оптимальные значения параметров процесса олигомеризации этилена на катализаторе  $\text{NiO/B}_2\text{O}_3\text{-Al}_2\text{O}_3$ . Алгоритм сочетает в себе возможность поиска значений непрерывного параметра управления (температура) и/или дискретного параметра управления (время процесса). Алгоритм позволяет на основе математического описания процесса вычислить оптимальный температурный профиль и оптимальное время протекания процесса, при которых достигается экстремум заданного пользователем критерия оптимальности. Преимуществом программного обеспечения является возможность выбора управляющего воздействия и критерия оптимальности, что позволяет применять его для различных постановок задач оптимального управления процессом олигомеризации этилена. Проведенные численные эксперименты по определению оптимальных значений параметров процесса олигомеризации этилена продемонстрировали меньшую ресурсозатратность, по сравнению с методами равномерного поиска и вариаций в пространстве управления.

Таблица. Значение целевого функционала (7) при постоянных допустимых значениях температуры ( $\tau^* = 462 \text{ с}$ )

Table. Value of the target functional (7) at constant permissible temperature values ( $\tau^* = 462 \text{ s}$ )

T, K	$x_3(\tau^*)$ , моль/л
323	0,014
348	0,039
373	0,077
398	0,114
423	0,138
448	0,148
473	0,150

## Литература

1. Джамбеков А.М., Щербатов И.А. Оптимальное управление процессом каталитического риформинга бензиновых фракций // Вестник Тамбовского государственного технического университета. 2017. Т. 23. № 4. С. 557–571. <https://doi.org/10.17277/vestnik.2017.04.pp.557-571>
2. Антипина Е.В., Мустафина С.А., Антипин А.Ф. Теоретическая оптимизация режимных параметров каталитической реакции с переменным реакционным объемом // Вестник Тверского государственного университета. Серия: Химия. 2022. № 2(48). С. 67–78. <https://doi.org/10.26456/vtchem2022.2.8>
3. Charitopoulos V.M., Papageorgiou L.G., Dua V. Multi-parametric mixed integer linear programming under global uncertainty // *Computers & Chemical Engineering*. 2018. V. 116. P. 279–295. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2018.04.015>
4. Charitopoulos V.M., Papageorgiou L.G., Dua V. Closed-loop integration of planning, scheduling and multi-parametric nonlinear control // *Computers & Chemical Engineering*. 2019. V. 122. P. 172–192. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2018.06.021>
5. Зиятдинов Н.Н., Емельянов И.И., Туен Л.К. Метод синтеза оптимальных многостадийных систем теплообмена // Теоретические основы химической технологии. 2018. Т. 52. № 6. С. 614–627. <https://doi.org/10.1134/S0040357118060192>
6. Fu K., Zou Y., Li S. Iterative unit-based Adaptive dynamic programming with application to fluid catalytic cracker unit // Proc. of the 2019 Chinese Automation Congress (CAC). 2019. P. 5010–5015. <https://doi.org/10.1109/CAC48633.2019.8996670>
7. Cao X., Jia S., Luo Y., Yuan X., Qi Z., Yu K.-T. Multi-objective optimization method for enhancing chemical reaction process // *Chemical Engineering Science*. 2019. V. 195. P. 494–506. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2018.09.048>
8. Kozuch D.J., Stillinger F.H., Debenedetti P.G. Genetic algorithm approach for the optimization of protein antifreeze activity using molecular simulations // *Journal of Chemical Theory and Computation*. 2020. V. 16. N 12. P. 7866–7873. <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.0c00773>
9. Antipina E.V., Mustafina S.A., Antipin A.F. Algorithm of solving a multiobjective optimization problem on the basis of a kinetic chemical reaction model // *Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing*. 2021. V. 57. N 6. P. 668–674. <https://doi.org/10.3103/S8756699021060029>
10. Трокоз Д.А. Метод параметрической оптимизации для широких нейронных сетей с использованием генетических алгоритмов // Известия Самарского научного центра Российской академии наук. 2021. Т. 23. № 2. С. 51–56. <https://doi.org/10.37313/1990-5378-2021-23-2-51-56>
11. Stastny J., Skorpil V., Balogh Z., Klein R. Job shop scheduling problem optimization by means of graph-based algorithm // *Applied Sciences*. 2021. V. 11. N 4. P. 1921. <https://doi.org/10.3390/app11041921>
12. Gulbuz 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. N 14. P. 6244. <https://doi.org/10.3390/app11146244>
13. Jalali Z., Noorzai E., Heidari S. Design and optimization of form and facade of an office building using the genetic algorithm // *Science and Technology for the Built Environment*. 2020. V. 26. N 2. P. 128–140. <https://doi.org/10.1080/23744731.2019.1624095>
14. Xie L., Chen Y., Chang R. Scheduling optimization of prefabricated construction projects by genetic algorithm // *Applied Sciences*. 2021. V. 11. N 12. P. 5531. <https://doi.org/10.3390/app11125531>
15. Migov D.A., Volzhankina K.A., Rodionov A.S. Genetic algorithms for drain placement in wireless sensor networks optimal by the reliability criterion // *Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing*. 2021. V. 57. N 3. P. 240–249. <https://doi.org/10.3103/S8756699021030110>
16. Волков А.А., Булучевский Е.А., Лавренов А.В. Кинетика олигомеризации этилена на катализаторе NiO/B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> в жидкой фазе // Журнал Сибирского федерального университета. Серия: Химия. 2013. Т. 6. № 4. С. 352–360.

## References

1. Dzhambekov A.M., Shcherbatov I.A. Optimal control of the process of catalytic reforming of petrol fractions. *Transactions of the TSTU*, 2017, vol. 23, no. 4. pp. 557–571. (in Russian). <https://doi.org/10.17277/vestnik.2017.04.pp.557-571>
2. Antipina E.V., Mustafina S.A., Antipin A.F. Theoretical optimization of regular parameters of a catalytic reaction with a variable reaction volume. *Herald of Tver State University. Series: Chemistry*, 2022, no. 2(48), pp. 67–78. (in Russian). <https://doi.org/10.26456/vtchem2022.2.8>
3. Charitopoulos V.M., Papageorgiou L.G., Dua V. Multi-parametric mixed integer linear programming under global uncertainty. *Computers & Chemical Engineering*, 2018, vol. 116, pp. 279–295. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2018.04.015>
4. Charitopoulos V.M., Papageorgiou L.G., Dua V. Closed-loop integration of planning, scheduling and multi-parametric nonlinear control. *Computers & Chemical Engineering*, 2019, vol. 122, pp. 172–192. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2018.06.021>
5. Ziyatdinov N.N., Emel'yanov I.I., Tuen L.Q. Method for the synthesis of optimum multistage heat exchange network. *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*, 2018, vol. 52, no. 6, pp. 943–955. <https://doi.org/10.1134/s0040579518060167>
6. Fu K., Zou Y., Li S. Iterative unit-based Adaptive dynamic programming with application to fluid catalytic cracker unit. *Proc. of the 2019 Chinese Automation Congress (CAC)*, 2019, pp. 5010–5015. <https://doi.org/10.1109/CAC48633.2019.8996670>
7. Cao X., Jia S., Luo Y., Yuan X., Qi Z., Yu K.-T. Multi-objective optimization method for enhancing chemical reaction process. *Chemical Engineering Science*, 2019, vol. 195, pp. 494–506. <https://doi.org/10.1016/j.ces.2018.09.048>
8. Kozuch D.J., Stillinger F.H., Debenedetti P.G. Genetic algorithm approach for the optimization of protein antifreeze activity using molecular simulations. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 2020, vol. 16, no. 12, pp. 7866–7873. <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.0c00773>
9. Antipina E.V., Mustafina S.A., Antipin A.F. Algorithm of solving a multiobjective optimization problem on the basis of a kinetic chemical reaction model. *Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing*, 2021, vol. 57, no. 6, pp. 668–674. <https://doi.org/10.3103/S8756699021060029>
10. Trokoz D.A. Parametric optimization method for wide neural networks using genetic algorithms. *Izvestia of Samara Scientific Center of the Russian Academy of Sciences*, 2021, vol. 23, no. 2, pp. 51–56. (in Russian). <https://doi.org/10.37313/1990-5378-2021-23-2-51-56>
11. Stastny J., Skorpil V., Balogh Z., Klein R. Job shop scheduling problem optimization by means of graph-based algorithm. *Applied Sciences*, 2021, vol. 11, no. 4, pp. 1921. <https://doi.org/10.3390/app11041921>
12. Gulbuz 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, vol. 11, no. 14, pp. 6244. <https://doi.org/10.3390/app11146244>
13. Jalali Z., Noorzai E., Heidari S. Design and optimization of form and facade of an office building using the genetic algorithm. *Science and Technology for the Built Environment*, 2020, vol. 26, no. 2, pp. 128–140. <https://doi.org/10.1080/23744731.2019.1624095>
14. Xie L., Chen Y., Chang R. Scheduling optimization of prefabricated construction projects by genetic algorithm. *Applied Sciences*, 2021, vol. 11, no. 12, pp. 5531. <https://doi.org/10.3390/app11125531>
15. Migov D.A., Volzhankina K.A., Rodionov A.S. Genetic algorithms for drain placement in wireless sensor networks optimal by the reliability criterion. *Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing*, 2021, vol. 57, no. 3, pp. 240–249. <https://doi.org/10.3103/S8756699021030110>
16. Volkov A.A., Buluchevskiy E.A., Lavrenov A.V. Kinetics of ethylene oligomerization on NiO/B<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> in liquid phase. *Journal of Siberian Federal University. Chemistry*, 2013, vol. 6, no. 4, pp. 352–360. (in Russian)

### Авторы

**Антипина Евгения Викторовна** — кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Уфимский университет науки и технологий, Уфа, 450076, Российская Федерация, [sc 57214879770](https://orcid.org/0000-0002-8458-9638), <https://orcid.org/0000-0002-8458-9638>, [stepashinaev@ya.ru](mailto:stepashinaev@ya.ru)

**Мустафина Светлана Анатольевна** — доктор физико-математических наук, профессор, проректор по цифровой трансформации, Уфимский университет науки и технологий, Уфа, 450076, Российская Федерация, [sc 6603592002](https://orcid.org/0000-0002-6363-1665), <https://orcid.org/0000-0002-6363-1665>, [mustafina\\_sa@mail.ru](mailto:mustafina_sa@mail.ru)

**Антипин Андрей Федорович** — кандидат технических наук, доцент, доцент, Уфимский университет науки и технологий, Уфа, 450076, Российская Федерация, [sc 55904921400](https://orcid.org/0000-0002-9151-4167), <https://orcid.org/0000-0002-9151-4167>, [andrejantipin@ya.ru](mailto:andrejantipin@ya.ru)

### Authors

**Evgenia V. Antipina** — PhD (Physics & Mathematics), Senior Researcher, Ufa University of Science and Technology, Ufa, 450076, Russian Federation, [sc 57214879770](https://orcid.org/0000-0002-8458-9638), <https://orcid.org/0000-0002-8458-9638>, [stepashinaev@ya.ru](mailto:stepashinaev@ya.ru)

**Svetlana A. Mustafina** — D.Sc. (Physics & Mathematics), Professor, Vice-Rector for Digital Transformation, Ufa University of Science and Technology, Ufa, 450076, Russian Federation, [sc 6603592002](https://orcid.org/0000-0002-6363-1665), <https://orcid.org/0000-0002-6363-1665>, [mustafina\\_sa@mail.ru](mailto:mustafina_sa@mail.ru)

**Andrey F. Antipin** — PhD, Associate Professor, Associate Professor, Ufa University of Science and Technology, Ufa, 450076, Russian Federation, [sc 55904921400](https://orcid.org/0000-0002-9151-4167), <https://orcid.org/0000-0002-9151-4167>, [andrejantipin@ya.ru](mailto:andrejantipin@ya.ru)

*Статья поступила в редакцию 22.03.2024*

*Одобрена после рецензирования 11.05.2024*

*Принята к печати 18.07.2024*

*Received 22.03.2024*

*Approved after reviewing 11.05.2024*

*Accepted 18.07.2024*



Работа доступна по лицензии  
Creative Commons  
«Attribution-NonCommercial»