

doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-637-644

УДК 519.688, 517.977.5

Использование генетических алгоритмов для решения задачи поиска оптимального состава реакционной смеси

Эльдар Наилевич Мифтахов¹✉, Анастасия Павловна Кашникова²,
Дмитрий Владимирович Иванов³

^{1,3} Уфимский университет науки и технологий, Уфа, 450076, Российская Федерация

² Стерлитамакский филиал Уфимского университета науки и технологий, Стерлитамак, 453103, Российская Федерация

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

² a.kashnikova98@yandex.ru, <https://orcid.org/0009-0000-0264-0114>

³ ivanov_dv@list.ru, <https://orcid.org/0009-0005-7117-0191>

Аннотация

Введение. Представлен эвристический подход к оптимизации сложных физико-химических процессов в виде генетического алгоритма решения задач. В сравнении с другими эволюционными методами генетический алгоритм позволяет работать с большими пространствами поиска и сложными функциями оценки, что особенно важно при исследовании многофакторных физико-химических систем. В связи с достаточно высокой потребностью в вычислительных ресурсах при работе с крупными и сложными пространствами поиска оптимизация имеющихся схем организации расчетов положительно влияет на точность получаемых результатов. В работе предложен модифицированный генетический алгоритм, позволяющий минимизировать количество итераций для достижения заданной точности при решении задачи поиска оптимального состава исходной реакционной смеси. **Метод.** Для сложного физико-химического процесса сформулирована задача оптимизации, которая заключается в поиске состава исходной реакционной смеси, способствующего максимизации (или минимизации) заданного целевого параметра. Критерий оптимальности определяется типом решаемой задачи и при организации вычислений ориентирован на максимальный выход целевого продукта. Основные этапы реализации генетического алгоритма включают в себя создание начального набора решений и последующую итерационную оценку их качества для дальнейшего комбинирования и изменения до достижения оптимальных значений с использованием механизмов, схожих с биологической эволюцией. Для повышения эффективности метода и сокращения числа итераций предложена модификация генетического алгоритма, которая сводится к динамической оценке параметра «мутации», зависящей от разнообразия особей в образованной популяции решений. **Основные результаты.** На основании серии вычислительных экспериментов проведен анализ влияния параметров генетического алгоритма на точность и эффективность решения задачи на примере исследования кинетики ферментативной реакции Михаэлиса–Ментен. Результаты вычислений по определению оптимального состава реакционной смеси показали, что динамическое определение параметра «мутации» способствует повышению точности решения задачи и кратному снижению относительной величины ошибки, достигающей 0,77 % при выполнении 200 итераций и 0,21 % — при 400 итераций. **Обсуждение.** Представленный модифицированный подход к решению задачи оптимизации не ограничен типом и наполнением изучаемого физико-химического процесса. Проведенные вычисления показали высокую степень влияния параметра «мутации» на точность и эффективность решения задачи, а динамическое управление величиной данного параметра позволило повысить скорость работы генетического алгоритма и уменьшить количество итераций для достижения оптимального решения заданной точности. Это особенно актуально при исследовании многофакторных систем, когда влияние параметров носит нетривиальный характер.

Ключевые слова

эволюционные методы, генетический алгоритм, задача оптимизации, реакция Михаэлиса–Ментен

Благодарности

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

© Мифтахов Э.Н., Кашникова А.П., Иванов Д.В., 2024

Ссылка для цитирования: Мифтахов 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. doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-637-644

Using genetic algorithms to solve the problem of finding the optimal composition of the reaction mixture

Eldar N. Miftakhov^{1✉}, Anastasia P. Kashnikova², Dmitry V. Ivanov³

^{1,3} Ufa University of Science and Technology, 450076, Ufa, Russian Federation

² Branch of Ufa University of Science and Technology, 453103, Sterlitamak, Russian Federation

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

² a.kashnikova98@yandex.ru, <https://orcid.org/0009-0000-0264-0114>

³ ivanov_dv@list.ru, <https://orcid.org/0009-0005-7117-0191>

Abstract

A heuristic approach to optimization of complex physicochemical processes in the form of a genetic algorithm for solving problems is presented. In comparison with other evolutionary methods, the genetic algorithm allows working with large search spaces and complex evaluation functions, which is especially important in the study of multifactor physicochemical systems. Due to the relatively high need for computing resources when working with large and complex search spaces, optimization of existing calculation organization schemes has a positive effect on the accuracy of the calculated results. The paper presents a modified genetic algorithm that minimizes the number of iterations to achieve a given accuracy when solving the problem of finding the optimal composition of the initial reaction mixture. For a complex physicochemical process, an optimization problem is formulated which consists in finding the composition of the initial reaction mixture that promotes maximization (or minimization) of a given target parameter. The optimality criterion is determined by the type of the problem being solved and, when organizing calculations, is focused on the maximum yield of the target product. The main steps of implementing the genetic algorithm include creating an initial set of solutions and subsequent iterative evaluation of their quality for subsequent combination and modification until optimal values are achieved using mechanisms similar to biological evolution. To improve the efficiency of the method and reduce the number of iterations, a modification of the genetic algorithm is proposed which boils down to a dynamic estimate of the “mutation” parameter, depending on the diversity of individuals in the formed population of solutions. In a series of computational experiments, an analysis was made of the influence of the genetic algorithm parameters on the accuracy and efficiency of solving the problem using the example of studying the kinetics of the Michaelis-Menten enzymatic reaction. The results of calculations to determine the optimal composition of the reaction mixture showed that the dynamic determination of the “mutation” parameter contributes to an increase in the accuracy of the problem solution and a multiple decrease in the relative error value reaching 0.77 % when performing 200 iterations and 0.21 % when performing 400 iterations. The presented modified approach to solving the optimization problem is not limited by the type and content of the studied physicochemical process. The calculations performed showed a high degree of influence of the “mutation” parameter on the accuracy and efficiency of the problem solution, and dynamic control of the value of this parameter allowed increasing the speed of the genetic algorithm and reduce the number of iterations to achieve an optimal solution of a given accuracy. This is especially relevant in the study of multifactorial systems when the influence of parameters is non-trivial.

Keywords

evolutionary methods, genetic algorithm, optimization problem, Michaelis-Menten reaction

Acknowledgements

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

For citation: 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). doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-4-637-644

Введение

Одной из значимых задач исследования сложных физико-химических процессов является решение задачи планирования производства, предполагающего оптимизацию всех производственных циклов и поиск оптимальных решений для улучшения производственной эффективности и снижения всех затрат. Решение таких задач предполагает многократные эмпирические исследования, которые в условиях действующего лабораторного и промышленного производств невозможно реализовать из-за дороговизны исходных компонентов и непрерывной работы действующей технологической

линии. Все более актуальными становятся математические методы, позволяющие путем организации серии вычислительных экспериментов оценить необходимые закономерности протекания процесса и определить оптимальные условия его проведения.

Математическое описание сложного физико-химического процесса должно учитывать все значимые факторы производства, влияющие на скорость протекания процесса и свойства получаемого продукта. Высокая размерность и нелинейный характер математического описания определяет необходимость использования нетривиальных подходов и методов, позволяющих минимизировать количество необходимых вычислительных

испытаний и найти оптимальное решение за наиболее короткое время. При использовании классических методов необходимо ориентироваться на те подходы, которые не требуют аналитического представления функции. В первую очередь, к ним можно отнести метод сопряженных градиентов, существенным недостатком которого является необходимость вычисления направления движения к оптимуму в каждой точке. В условиях отсутствия аналитического представления оптимизируемой функции нахождение производной осуществляется численно. Огромный интерес также вызывают методы безусловной оптимизации, которые не требуют расчета производной, однако не применимы без дополнительных преобразований в случае наличия явных ограничений на искомые параметры системы. К сожалению, данные методы не гарантируют сходимости к глобальному экстремуму и могут быть неэффективными или неустойчивыми в случае, если область поиска содержит разрывы.

В контексте решения задач управления физико-химическими процессами наиболее ярко себя демонстрируют эвристические методы оптимизации [1, 2], предоставляя необходимые инструменты для анализа и улучшения реакционных механизмов, кинетических параметров и условий реакции. Использование классических методов невозможно в силу высокой размерности пространства параметров или наличия большого количества локальных решений. В совокупности с современными вычислительными технологиями эти методы открывают новые возможности для понимания и управления химическими процессами и системами.

Среди эвристических методов оптимизации особо стоит выделить эволюционные алгоритмы, обладающие мощными характеристиками надежности и гибкости для поиска глобальных решений сложных задач оптимизации. Применительно к физико-химическим процессам огромным преимуществом перед другими эволюционными алгоритмами обладают генетические алгоритмы [3, 4], поскольку позволяют работать с большими пространствами поиска и сложными функциями оценки, что особенно важно в контексте исследования многофакторных физико-химических систем. Впервые предложенные Холландом [5] генетические алгоритмы успешно применяются для решения задач оптимизации различного типа [6–8]. Среди группы эвристических методов также заслуживает внимания алгоритм, основанный на методе имитации отжига (Simulated Annealing). Однако, как и сам алгоритм, так и его модификации чаще всего применяются для решения таких дискретных задач как задача маршрутизации, балансировка нагрузки и разработка цифровых схем.

К основным недостаткам генетического алгоритма относят высокую потребность в вычислительных ресурсах при работе с крупными и сложными пространствами поиска. Однако стремительное развитие информационных технологий и облачных вычислений позволяет сегодня успешно интегрировать технологии параллельных расчетов в случае решения объемных многофакторных задач [9]. В работах [10, 11] предложен модифицированный алгоритм метода виртуальной субпопуляции, позволяющий минимизировать

время поиска. С целью повышения эффективности алгоритма в ряде работ предлагается использовать различные варианты мультиродительского кроссовера: с унимодальным распределением [12], симплексный [13], родительско-центрический [14] и треугольный [15]. К существенным недостаткам генетического алгоритма также относят низкую его эффективность в случаях, когда параметры алгоритма не адаптированы для конкретной задачи оптимизации [16]. Все перечисленные особенности алгоритма определяют огромный интерес к исследованию значимости его параметров на эффективность решения задачи оптимизации.

Цель работы — разработка модифицированного генетического алгоритма, позволяющего минимизировать количество итераций для достижения оптимального решения заданной точности при решении задачи поиска оптимального состава исходной реакционной смеси.

Постановка задачи

Пусть физико-химический процесс характеризуется протеканием ряда последовательных и параллельных элементарных реакций с участием активных частиц. Математическая модель такого процесса представляет собой систему дифференциальных уравнений, характеризующих изменение материального баланса по каждому компоненту реакции с начальными условиями $\mathbf{X}_i(0) = \mathbf{X}_i^0$:

$$\frac{d\mathbf{X}_i}{dt} = \mathbf{F}_i(t, \mathbf{X}_i(t)), i = 1, \dots, n,$$

где $\mathbf{X}(t)$ — вектор, определяющий концентрации всех исходных компонентов реакции в момент времени $t \in [0, t_{end}]$; $\mathbf{F}$ — непрерывная вектор-функция.

Введем в рассмотрение некоторое выходное состояние системы $\tilde{\mathbf{X}}$, которое является целью планирования эксперимента. Определим вектор начальных концентраций исходных компонентов системы $\mathbf{X}^*(0) = (x_1^*(0), x_2^*(0), \dots, x_n^*(0))$, при котором в момент конечного времени моделирования эксперимента t_{end} система перейдет в необходимое состояние $\tilde{\mathbf{X}}$. Будем считать, что на каждый из элементов искомого вектора $\mathbf{X}^*(0)$ действуют ограничения:

$$\underline{x}_i \leq x_i^*(0) \leq \bar{x}_i, i = 1, \dots, n. \quad (1)$$

В этом случае в качестве критерия оптимальности можно рассматривать функционал вида

$$G(\mathbf{X}^*(0)) = \sum_{i=1}^m (\mathbf{X}_i(t_{end}) - \tilde{\mathbf{X}}_i) \rightarrow \min, m \leq n, \quad (2)$$

где m — количество требуемых состояний системы.

Критерий оптимальности зависит от типа решаемой задачи оптимизации (максимальный выход целевого продукта, требуемая скорость протекания процесса, экономические показатели и т. д.). В случаях, когда требуется найти максимальный выход одного из конечных продуктов x_m , целевая функция примет вид

$$G(\mathbf{X}^*(0)) = x_m(t_{end}) \rightarrow \max, m \leq n.$$

Описание модифицированного генетического алгоритма

Для решения задачи оптимизации применим генетический алгоритм, который представляет собой эвристический алгоритм поиска оптимального решения путем последовательного комбинирования и вариации искомых параметров с использованием механизмов, напоминающих биологическую эволюцию. Основное наполнение генетического алгоритма представляет собой итерационное выполнение четырех основных операторов: селекции, кроссинговера (скрещивания, репродукции), мутации, создания нового поколения. В результате операторов скрещивания и мутации с последующей оценкой приспособленности получим новое поколение, которое в итерационном режиме исполнения алгоритма будет стремиться к оптимальному решению задачи.

Опишем основные этапы генетического алгоритма применительно к поставленной задаче.

Этап 1. Задается начальная популяция из K возможных решений для каждого из компонентов, представляющая собой двумерный вектор размерностью $n \times K$. Вводится параметр $iter = 1$, определяющий порядковый номер формируемого поколения. Каждая строка двумерного вектора будет представлять собой один из возможных векторов решения задачи оптимизации. С учетом имеющихся ограничений вида (1) рекомендуется вектор начальной популяции для каждого из используемых компонентов определить из точек заданного отрезка на равном удалении друг от друга:

$$\mathbf{X}^{iter} = x_{ij}(0) = \underline{x}_i + \frac{\bar{x}_i - \underline{x}_i}{(K-1)}(j-1), j = 1, \dots, K.$$

Этап 2. Проводится оценка степени приспособленности каждой особи популяции путем расчета значения целевой функции для каждого из предложенных на этапе 1 решений. Причем, если значение целевой функции (2) для каждого из них соответствует критерию остановки

$$G(\mathbf{X}_j^{iter}) \leq \varepsilon, j = 1, \dots, K, \quad (3)$$

где ε — заданная точность решения задачи, то алгоритм следует остановить и вывести найденное решение.

Этап 3. Проводится выборка K родителей из популяции посредством оператора селекции для дальнейшей репродукции. Вероятность выбора родителей напрямую определяется степенью их приспособленности. Для исполнения данного этапа требуется на основании найденных значений степени приспособленности определить вероятности выбора каждой особи. В случае максимизации целевой функции используется выражение:

$$p(\mathbf{X}_j^{iter}) = \frac{G^2(\mathbf{X}_j^{iter})}{\sum_{j=1}^K G^2(\mathbf{X}_j^{iter})}.$$

Затем следует расположить найденные значения в виде дискретных точек $p_s = \sum_{j=1}^s p(\mathbf{X}_j^{iter})$ на отрезке от 0 до 1.

Вызывая K раз генератор случайных чисел получим ряд равномерно распределенных на отрезке от 0 до 1 чисел, которые используются для выбора очередной особи в качестве родителя. Очевидно, что если для некоторого решения степень приспособленности окажется значительно выше, чем у других, то наиболее вероятно, что оно будет выбрано для продолжения рода неоднократно.

Этап 4. Из найденного на этапе 3 родительского пула с помощью оператора кроссинговера проводится процедура получения K потомков. Стоит отметить, что в качестве оператора кроссинговера можно использовать как простейший арифметический кроссинговер (равномерный или неравномерный), так и более сложные (кроссинговер смешивания или Лапласа) [17].

В частности, если на некоторой итерации случайным образом были выбраны две родительские особи $\mathbf{X}^1 = (x_1^1, x_2^1, \dots, x_n^1)$ и $\mathbf{X}^2 = (x_1^2, x_2^2, \dots, x_n^2)$, то в случае использования арифметического кроссинговера значения вектора потомка образуются по правилу

$$y_i = ax_i^1 + (1-a)x_i^2, i = 1, \dots, n,$$

где

$$a = \frac{\max G(\mathbf{X}_j)}{\max G(\mathbf{X}_j) + \min G(\mathbf{X}_j)}, j = 1, \dots, K.$$

Этап 5. Для образованных на этапе 4 потомков проводится процедура мутации с некоторой заданной вероятностью p_m . Нередки случаи, когда все особи сходятся к локальному экстремуму и занимают всю популяцию, что приводит к ее преждевременному «вырождению». Для того чтобы противостоять алгоритму сходимости к локальному экстремуму, используется оператор «мутации», основная цель которого ввести некоторое генетическое разнообразие в популяцию.

Ранее проведенные испытания показали, что значение вероятностного параметра p_m оказывает огромное влияние на количество итераций алгоритма. В случае, когда величина p_m являлась фиксированной в ходе всех итераций, сходимость генетического алгоритма была достаточно низкой. В связи с этим в рамках решения поставленной задачи предлагается модифицировать генетический алгоритм и придать величине p_m динамический характер, основным критерием для которого является степень разнообразия особей в образованной популяции. Математическим выражением подобного разнообразия является дисперсия значений образованного списка

$$\sigma_j^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (\mathbf{X}_{ij}^{iter} - \bar{\mathbf{X}})^2}{n}, j = 1, \dots, K. \quad (4)$$

Если дисперсия (4) не превышает заданное пороговое значение $\sigma_{\min}^2$, то следуеткратно увеличить значение $\hat{p}_m = \text{Mut} \cdot p_m$, чтобы внести большее разнообразие в популяцию.

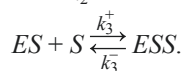
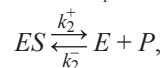
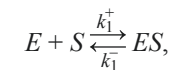
Этап 6. Проводится оценка степени приспособленности каждой особи в новой популяции. В случае, если значение целевой функции (2) соответствует критерию остановки алгоритма

$$G(\mathbf{X}_j^{iter}) \leq \varepsilon, j = 1, \dots, K,$$

то алгоритм следует остановить и вывести найденное решение. В противном случае переходим к исполнению этапа 3 с целью дальнейшей репродукции и получения более приспособленных потомков. Поскольку условие (3) может никогда не выполняться, то проводится дополнительная проверка по достижению максимального количества итераций. Если параметр *iter* превышает заданное максимальное значение, то алгоритм следует остановить и вывести текущее решение.

Вычислительный эксперимент

Используем представленный модифицированный генетический алгоритм для решения задачи определения начальных концентраций реагентов при исследовании кинетики ферментативной реакции Михаэлиса–Ментен [18]. Данная реакция широко используется в научных исследованиях, а также в медицине и промышленности, и остается одной из ключевых моделей в биохимической кинетике. Реакция Михаэлиса–Ментен описывает процесс ферментативного катализа, в котором фермент (энзим) — *E* связывается с молекулой субстрата — *S*, образуя фермент-субстратные комплексы, представляющие собой промежуточные продукты реакции — *ES*, *ESS*, которые затем могут разлагаться на продукт — *P* и восстанавливать фермент. Кинетический механизм такого процесса можно представить в виде набора обратимых реакций:



С использованием обозначений [*E*] — x_1 , [*S*] — x_2 , [*ES*] — x_3 , [*ESS*] — x_4 , [*P*] — x_5 система дифференциальных уравнений, описывающих изменение материального баланса по каждому компоненту реакции, примет вид:

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dt} = -k_1^+ x_1 x_2 + k_1^- x_3 - k_2^- x_1 x_5 + k_2^+ x_3, \\ \frac{dx_2}{dt} = -k_1^+ x_1 x_2 + k_1^- x_3 - k_3^+ x_2 x_3 + k_3^- x_4, \\ \frac{dx_3}{dt} = k_1^+ x_1 x_2 - k_1^- x_3 + k_2^- x_1 x_5 - k_2^+ x_3 - k_3^+ x_2 x_3 + k_3^- x_4, \\ \frac{dx_4}{dt} = k_3^+ x_2 x_3 - k_3^- x_4, \\ \frac{dx_5}{dt} = -k_2^- x_1 x_5 + k_2^+ x_3, \end{cases}$$

с начальными условиями $x_1(0) = x_1^0$, $x_2(0) = x_2^0$, $x_3(0) = 0$, $x_4(0) = 0$, $x_5(0) = 0$ и соответствующими значениями кинетических параметров: $k_1^+ = 1,2$ л/(моль·мин); $k_2^+ = 1,1$ мин⁻¹; $k_3^+ = 2,3$ л/(моль·мин); $k_1^- = 0,9$ мин⁻¹; $k_2^- = 0,9$ л/(моль·мин); $k_3^- = 0,3$ мин⁻¹, характеризующих скорости элементарных реакций.

Требуется найти вектор начальных концентраций исходных компонентов системы [*E*] — x_1 и [*S*] — x_2 в виде $\mathbf{X}^*(0) = (x_1^*(0), x_2^*(0))$, который обеспечит максимальную концентрацию конечного продукта [*P*] — x_5 в реакционной массе в конечный момент моделирования $t_{end} = 10$ мин, при условии, что $0 \leq x_i^*(0) \leq 2$ моль/л

$$G(\mathbf{X}^*(0))(t_{end}) = \frac{x_5(t_{end})}{x_1(t_{end}) + x_2(t_{end}) + x_3(t_{end}) + x_4(t_{end}) + x_5(t_{end})} \rightarrow \max. \quad (5)$$

Для решения данной задачи генетический алгоритм, описанный в разделе «Описание модифицированного генетического алгоритма», был запрограммирован с использованием языка Python (версия 3.10.12). Размер начальной популяции *K* на этапе 1 реализации алгоритма определен четырьмя особями на равном расстоянии друг от друга и для каждого из компонентов x_1 , x_2 рассчитан в соответствии с выражением

$$\mathbf{X}_i^1 = \mathbf{X}_2^1 = (0; 0,67; 1,34; 2).$$

Поскольку целью решения задачи является поиск вектора $\mathbf{X}^*(0) = (x_1^*(0), x_2^*(0))$, позволяющего получить максимальное значение функции вида (5), то для окончания генетического алгоритма часто руководствуются критически малым изменением значения функции приспособленности, свидетельствующем о том, что решение достигнуто. Однако большой интерес вызывает влияние параметров реализации генетического алгоритма на точность получаемых расчетных результатов. Для получения подобной детализированной картины проведена серия вычислительных экспериментов, в которых варьировались параметры «мутации», определяющие реализацию этапа 5 алгоритма, и по полученным результатам (таблица) оценивалось влияние параметров генетического алгоритма на максимальную погрешность решения задачи. Для каждого из представленного набора параметров осуществлено не менее 100 запусков программы, чтобы оценить и зафиксировать максимальное отклонение полученного результата. Во всех случаях с целью выбора потомков для дальнейшего роста популяции в качестве оператора кроссинговера использован простейший арифметический кроссинговер.

Анализ полученных результатов позволяет сделать вывод о том, что динамическое определение параметра «мутации», критерием для которого является разнообразие особей в образованной популяции, положительно влияет на точность получаемых расчетных результатов. Из таблицы видно, что рост параметра «мутации» в диапазоне $0,05 \leq p_m \leq 0,3$ (строки 1–20) благоприятно сказывался на точности получаемых расчетных результатов, однако дальнейшее увеличение значения параметра p_m и проведение расчетов для $p_m = 0,4$ и $p_m = 0,5$ (строки 21 и 22) привело лишь к росту погрешности. В то же время в каждом отдельном случае видно, что введение модифицированного параметра «мутации» для каждого из рассмотренных значений p_m привело к увеличению точности получаемого решения.

Таблица. Влияние параметров генетического алгоритма на точность результатов

Table. The influence of genetic algorithm parameters on the accuracy of results

Номер строки	Параметр «мутации» p_m	Множитель «мутации» Mut	Модифицированный параметр «мутации» $\tilde{p}_m$	Отклонение от результата, %	
				50 итераций	100 итераций
1	0,05	1	0,05	10,9	5,88
2	0,05	2	0,10	9,90	4,81
3	0,05	4	0,20	7,64	4,18
4	0,05	6	0,30	8,15	4,45
5	0,05	8	0,40	8,13	3,77
6	0,10	1	0,10	6,45	3,41
7	0,10	2	0,20	6,14	1,84
8	0,10	3	0,30	5,94	1,93
9	0,10	4	0,40	6,03	2,83
10	0,20	1	0,20	3,79	1,67
11	0,20	3/2	0,30	3,47	1,58
12	0,20	2	0,40	3,78	1,60
13	0,20	5/2	0,50	3,77	1,47
14	0,20	3	0,60	3,60	1,86
15	0,30	1	0,30	3,08	1,53
16	0,30	4/3	0,40	3,00	1,51
17	0,30	5/3	0,50	2,89	1,47
18	0,30	2	0,60	2,96	1,36
19	0,30	7/3	0,70	2,72	1,47
20	0,30	8/3	0,80	2,90	1,46
21	0,40	1	0,40	3,01	1,59
22	0,50	1	0,50	3,23	1,63

В частности, для $p_m = 0,1$ (строки 6–9) относительная величина ошибки снизилась на 46 % со значения 3,41 % до 1,84 %. Минимальное влияние было зафиксировано для случая $p_m = 0,3$ (строки 15–20), когда относительная ошибка снизилась со значения 1,53 % до 1,36 %.

В частности, для рассматриваемой задачи наилучшее решение достигнуто для параметров «мутации» $p_m = 0,3$ и $\tilde{p}_m = 0,6$, дальнейшее использование которых при очередном запуске программы на 200 итераций позволило снизить максимальную погрешность до 0,77 %, а в случае 400 итераций — до 0,21 %.

С целью оценки корректности и точности полученного решения представленная задача была решена также методом градиентного спуска, позволившего получить аналогичное оптимальное значение целевой функции, представленное максимальной концентрацией продукта $x_5 = 31,49$ %, при начальных концентрациях исходных веществ $x_1 = 0,43$ моль/л и $x_2 = 1,09$ моль/л. Изменение концентрации всех участвующих в реакции компонентов при найденных значениях x_1 , x_2 представлено на рисунке.

Отметим, что в условиях отсутствия аналитического представления оптимизируемой функции требовалось каждый раз численно рассчитывать значение производной, что приводило к неоднократным обращениям

к целевой функции. К альтернативному подходу, не требующему расчета производной, можно отнести метод Нелдера–Мида, часто применяющийся при выборе

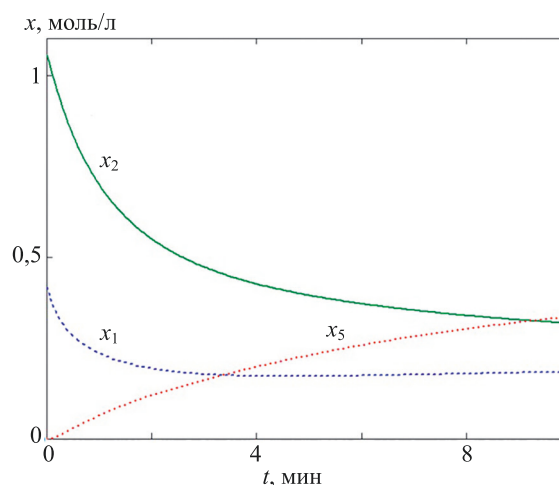


Рисунок. Динамика изменения концентраций исходных компонентов E, S и целевого продукта P

Figure. Dynamics of changes in concentrations of initial components E, S and target product P

параметров в задачах машинного обучения. Решение задачи на языке Python средствами библиотеки SciPy позволило подтвердить ранее найденное решение. Однако оба этих метода относятся к классу методов безусловной оптимизации и определяют необходимость дополнительных преобразований при постановке задачи. В частности, в работе [19] с использованием метода штрафов исходная задача планирования эксперимента была сведена к задаче безусловной оптимизации. Кроме того, данные методы не гарантируют нахождение оптимального решения в случае наличия у оптимизируемой функции нескольких экстремумов.

Несмотря на то, что для получения решения той же точности в рамках реализации генетического алгоритма потребовалось большее количество итераций, использование данного подхода при исследовании и оптимизации сложных многофакторных физико-химических систем является предпочтительным. Особенности реализации генетического алгоритма способствуют нахождению глобального оптимума благодаря случайному характеру при поиске решений и возможности поддерживать их разнообразие в популяции. Кроме того, данный алгоритм позволяет осуществлять поиск одного или нескольких параметров системы в дискретном множестве переменных. Часто такая необходимость возникает при решении задач оптимизации технологических параметров промышленного производства, когда область их возможных значений ограничена. В этом случае использование эвристических методов оптимизации является единственным способом решения задачи.

Заключение

Представленный эвристический подход к оптимизации сложных физико-химических процессов успешно справляется с решением задач планирования эксперимента, независимо от вида целевой функции и задаваемых ограничений. Модифицированный генетический алгоритм и проведение серии вычислительных экспериментов показали большое влияние, оказываемое процедурой «мутации» на точность расчетных результатов. Анализ получаемого на каждом этапе решения и гибкое управление параметрами генетического алгоритма позволяет минимизировать количество итераций для достижения оптимального решения.

Программная реализация представленной модификации генетического алгоритма позволила решить задачи планирования эксперимента при исследовании кинетики ферментативной реакции Михаэлиса–Ментен. В ходе серии вычислительных экспериментов были определены начальные концентрации исходных компонентов — ферментов, выступающих в роли катализатора, обеспечивающих максимальную концентрацию конечного продукта. Тип физико-химического процесса и его наполнение не влияют на представленный генетический алгоритм и его программную реализацию, однако эффективность алгоритма будет выше в случае обновленной настройки параметров «мутации», определяющих реализацию этапа 5 алгоритма. Разработанный на основе алгоритма программный продукт может использоваться для решения задачи планирования эксперимента при исследовании многофакторных физико-химических систем.

Литература

1. Пантелеев А.В. Метаэвристические алгоритмы поиска глобального экстремума. М.: Изд-во МАИ-ПРИНТ, 2009. 160 с.
2. Пантелеев А.В., Скавинская Д.В., Алешина Е.А. Метаэвристические алгоритмы поиска оптимального программного управления. М.: Инфра-М, 2020. 396 с. <https://doi.org/10.12737/18293>
3. Карпенко А.П. Современные алгоритмы поисковой оптимизации. Алгоритмы, вдохновленные природой: учеб. пособие. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2014. 448 с.
4. Саймон Д. Алгоритмы эволюционной оптимизации: практическое руководство / пер. с англ. А.В. Логунова. М.: ДМК Пресс, 2020. 940 с.
5. Holland J.H. *Adaptation in Natural and Artificial Systems: An Introductory Analysis with Applications to Biology, Control, and Artificial Intelligence*. University of Michigan Press, 1992. 211 p.
6. Goldberg D.E. *Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning*. Addison-Wesley, 1989. 412 p.
7. Long Q., Wu Ch., Huang T., Wang X. A genetic algorithm for unconstrained multi-objective optimization // *Swarm and Evolutionary Computation*. 2015. V. 22. P. 1–14. <https://doi.org/10.1016/j.swevo.2015.01.002>
8. Mohamed A.W., Mohamed A.K. Adaptive guided differential evolution algorithm with novel mutation for numerical optimization // *International Journal of Machine Learning and Cybernetics*. 2019. V. 10. N 2. P. 253–277. <https://doi.org/10.1007/s13042-017-0711-7>
9. Andraws S., Shmatkov S., Bulavin D. Using genetic algorithms for solving the comparison-based identification problem of multifactor estimation model // *Journal of Software Engineering and Applications*. 2013. V. 6. N 7. P. 349–353. <https://doi.org/10.4236/jsea.2013.67044>
10. Gholizadeh S., Salajegheh E., Torkzadeh P. Structural optimization with frequency constraints by genetic algorithm using wavelet radial

References

1. Panteleev A.V. *Metaheuristic Algorithms for Finding the Global Extremum*. Moscow, MAI-PRINT Publ., 2009, 160 p. (in Russian)
2. Panteleev A., Skavinskaya D.V., Aleshina E. *Metaheuristic Algorithms of Search of Optimum Program Control*. Moscow, Infra-M Publ., 2020, 396 p. (in Russian). <https://doi.org/10.12737/18293>
3. Karpenko A.P. *Modern Search Engine Optimization Algorithms. Algorithms Inspired by Nature*. Moscow, Bauman Moscow State Technical University Publ., 2014, 448 p. (in Russian)
4. Simon D. *Evolutionary Optimization Algorithms*. Wiley, 2013, 784 p.
5. Holland J.H. *Adaptation in Natural and Artificial Systems: An Introductory Analysis with Applications to Biology, Control, and Artificial Intelligence*. University of Michigan Press, 1992, 211 p.
6. Goldberg D.E. *Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning*. Addison-Wesley, 1989, 412 p.
7. Long Q., Wu Ch., Huang T., Wang X. A genetic algorithm for unconstrained multi-objective optimization. *Swarm and Evolutionary Computation*, 2015, vol. 22, pp. 1–14. <https://doi.org/10.1016/j.swevo.2015.01.002>
8. Mohamed A.W., Mohamed A.K. Adaptive guided differential evolution algorithm with novel mutation for numerical optimization. *International Journal of Machine Learning and Cybernetics*, 2019, vol. 10, no. 2, pp. 253–277. <https://doi.org/10.1007/s13042-017-0711-7>
9. Andraws S., Shmatkov S., Bulavin D. Using genetic algorithms for solving the comparison-based identification problem of multifactor estimation model. *Journal of Software Engineering and Applications*, 2013, vol. 6, no. 7, pp. 349–353. <https://doi.org/10.4236/jsea.2013.67044>
10. Gholizadeh S., Salajegheh E., Torkzadeh P. Structural optimization with frequency constraints by genetic algorithm using wavelet radial basis function neural network. *Journal of Sound and Vibration*, 2008,

- basis function neural network // *Journal of Sound and Vibration*. 2008. V. 312. N 1-2. P. 316–331. <https://doi.org/10.1016/j.jsv.2007.10.050>
11. Salajegheh E., Gholizadeh S. Optimum design of structures by an improved genetic algorithm using neural networks // *Advances in Engineering Software*. 2005. V. 36. N 11-12. P. 757–767. <https://doi.org/10.1016/j.advengsoft.2005.03.022>
 12. Ono I., Kita H., Kobayashi S. A real-coded genetic algorithm using the unimodal normal distribution crossover // *Advances in Evolutionary Computing*. Springer, 2003. P. 213–237. https://doi.org/10.1007/978-3-642-18965-4_8
 13. Tsutsui S., Yamamura M., Higuchi T. Multi-parent recombination with simplex crossover in real coded genetic algorithms // *Proc. of the 1st Annual Conference Genetic and Evolutionary Computation (GECCO'99)*. V. 1. 1999. P. 657–664.
 14. Rolland L., Chandra R. The forward kinematics of the 6-6 parallel manipulator using an evolutionary algorithm based on generalized generation gap with parent-centric crossover // *Robotica*. 2016. V. 34. N 1. P. 1–22. <https://doi.org/10.1017/s0263574714001362>
 15. Elfeky Eh.Z., Sarker R.A., Essam D.L. Analyzing the simple ranking and selection process for constrained evolutionary optimization // *Journal of Computer Science and Technology*. 2008. V. 23. N 1. P. 19–34. <https://doi.org/10.1007/s11390-008-9109-z>
 16. Антипина Е.В., Мустафина С.А., Антипин А.Ф. Поиск оптимальных начальных концентраций веществ каталитической реакции на основе кинетической модели // *Автоматизация*. 2023. Т. 59. № 4. С. 78–87. <https://doi.org/10.15372/AUT20230409>
 17. Thakur M., Meghwani S.S., Jalota H. A modified real coded genetic algorithm for constrained optimization // *Applied Mathematics and Computation*. 2014. V. 235. P. 292–317. <https://doi.org/10.1016/j.amc.2014.02.093>
 18. Hangos K.M., Szederkényi G. Mass action realizations of reaction kinetic system models on various time scales // *Journal of Physics: Conference Series*. 2011. V. 268. P. 012009. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/268/1/012009>
 19. Антипина Е.В., Мустафина С.А., Антипин А.Ф. Численный алгоритм поиска оптимального состава реагирующей смеси на основе кинетической модели реакции // *Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики*. 2023. Т. 23. № 6. С. 1128–1135. <https://doi.org/10.17586/2226-1494-2023-23-6-1128-1135>
 - vol. 312, no. 1-2, pp. 316–331. <https://doi.org/10.1016/j.jsv.2007.10.050>
 11. Salajegheh E., Gholizadeh S. Optimum design of structures by an improved genetic algorithm using neural networks. *Advances in Engineering Software*, 2005, vol. 36, no. 11-12, pp. 757–767. <https://doi.org/10.1016/j.advengsoft.2005.03.022>
 12. Ono I., Kita H., Kobayashi S. A real-coded genetic algorithm using the unimodal normal distribution crossover. *Advances in Evolutionary Computing*. Springer, 2003, pp. 213–237. https://doi.org/10.1007/978-3-642-18965-4_8
 13. Tsutsui S., Yamamura M., Higuchi T. Multi-parent recombination with simplex crossover in real coded genetic algorithms. *Proc. of the 1st Annual Conference Genetic and Evolutionary Computation (GECCO'99)*. V. 1, 1999, pp. 657–664.
 14. Rolland L., Chandra R. The forward kinematics of the 6-6 parallel manipulator using an evolutionary algorithm based on generalized generation gap with parent-centric crossover. *Robotica*, 2016, vol. 34, no. 1, pp. 1–22. <https://doi.org/10.1017/s0263574714001362>
 15. Elfeky Eh.Z., Sarker R.A., Essam D.L. Analyzing the simple ranking and selection process for constrained evolutionary optimization. *Journal of Computer Science and Technology*, 2008, vol. 23, no. 1, pp. 19–34. <https://doi.org/10.1007/s11390-008-9109-z>
 16. Antipina E.V., Mustafina S.A., Antipin A.F. Search for the optimal initial concentrations of catalytic reaction compounds on the basis of a kinetic model. *Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing*, 2023, vol. 59, no. 4, pp. 461–469. <https://doi.org/10.3103/S8756699023040027>
 17. Thakur M., Meghwani S.S., Jalota H. A modified real coded genetic algorithm for constrained optimization. *Applied Mathematics and Computation*, 2014, vol. 235, pp. 292–317. <https://doi.org/10.1016/j.amc.2014.02.093>
 18. Hangos K.M., Szederkényi G. Mass action realizations of reaction kinetic system models on various time scales. *Journal of Physics: Conference Series*, 2011, vol. 268, pp. 012009. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/268/1/012009>
 19. Antipina E.V., Mustafina S.A., Antipin A.F. Numerical algorithm for finding the optimal composition of the reacting mixture on the basis of the reaction kinetic model. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2023, vol. 23, no. 6, pp. 1128–1135. (in Russian). <https://doi.org/10.17586/2226-1494-2023-23-6-1128-1135>

Авторы

Мифтахов Эльдар Наилевич — доктор физико-математических наук, научный сотрудник, Уфимский университет науки и технологий, Уфа, 450076, Российская Федерация, [sc 56178153800](https://orcid.org/0000-0002-0471-5949), <https://orcid.org/0000-0002-0471-5949>, promif@mail.ru

Кашникова Анастасия Павловна — аспирант, Стерлитамакский филиал Уфимского университета науки и технологий, Стерлитамак, 453103, Российская Федерация, [sc 57221470510](https://orcid.org/0009-0000-0264-0114), <https://orcid.org/0009-0000-0264-0114>, a.kashnikova98@yandex.ru

Иванов Дмитрий Владимирович — кандидат физико-математических наук, доцент, Уфимский университет науки и технологий, Уфа, 450076, Российская Федерация, [sc 57197070892](https://orcid.org/0009-0005-7117-0191), <https://orcid.org/0009-0005-7117-0191>, ivanov_dv@list.ru

Authors

Eldar N. Miftakhov — D.Sc. (Physics & Mathematics), Scientific Researcher, Ufa University of Science and Technology, 450076, Ufa, Russian Federation, [sc 56178153800](https://orcid.org/0000-0002-0471-5949), <https://orcid.org/0000-0002-0471-5949>, promif@mail.ru

Anastasia P. Kashnikova — PhD Student, Branch of Ufa University of Science and Technology, 453103, Sterlitamak, Russian Federation, [sc 57221470510](https://orcid.org/0009-0000-0264-0114), <https://orcid.org/0009-0000-0264-0114>, a.kashnikova98@yandex.ru

Dmitry V. Ivanov — PhD (Physics & Mathematics), Associate Professor, Ufa University of Science and Technology, 450076, Ufa, Russian Federation, [sc 57197070892](https://orcid.org/0009-0005-7117-0191), <https://orcid.org/0009-0005-7117-0191>, ivanov_dv@list.ru

Статья поступила в редакцию 02.04.2024

Одобрена после рецензирования 12.06.2024

Принята к печати 22.07.2024

Received 02.04.2024

Approved after reviewing 12.06.2024

Accepted 22.07.2024



Работа доступна по лицензии
Creative Commons
«Attribution-NonCommercial»