

ГЕНЕТИЧЕСКИЙ АЛГОРИТМ ДЛЯ МНОГОКРИТЕРИАЛЬНОЙ ОПТИМИЗАЦИИ ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ С БЕСКОНЕЧНОМЕРНОЙ МОДЕЛЬЮ

Е.В. Антипина, С.А. Мустафина, А.Ф. Антипин

Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, Российская Федерация

E-mail: stepashinaev@ya.ru

Аннотация. Исследуется многокритериальная задача оптимизации параметров процесса полимеризации, математическая модель которого описывается бесконечной системой обыкновенных дифференциальных уравнений. Для её решения предложен генетический алгоритм, основанный на принципе Парето-доминирования. Ключевой особенностью алгоритма является процедура редукции бесконечной системы уравнений к конечному виду с помощью метода моментов. Приведены результаты вычислительного эксперимента для процесса полимеризации бутадиена на неодимсодержащей каталитической системе. В ходе эксперимента определены такие параметры, как продолжительность синтеза и начальные концентрации мономера и алюминийорганического соединения, которые обеспечивают максимальную конверсию мономера при заданном значении индекса полидисперсности конечного продукта.

Ключевые слова: многоцелевая оптимизация; процесс полимеризации; генетический алгоритм; метод моментов.

Введение

Математическое моделирование процессов синтеза полимеров является важным инструментом для оптимизации условий их протекания, позволяющим повысить эффективность процессов и качество получаемых продуктов. Сложность математического описания процесса полимеризации обусловлена тем, что реакционная система содержит неограниченное количество компонентов. Поэтому математическая модель полимеризационного процесса представляет собой бесконечномерную систему дифференциальных уравнений [1]. При определении оптимальных значений параметров полимеризационных процессов часто возникает необходимость одновременно учитывать не один, а несколько критериев оптимальности, выражающих заранее заданные свойства полимеров. Высокая размерность математической модели процесса и нелинейность его динамики создают трудности при поиске решения задачи многоцелевой оптимизации и требуют разработки специальных алгоритмов.

Одним из направлений решения многокритериальных задач является применение методов скаляризации, в которых осуществляется переход от нескольких критериев оптимальности к одному критерию [2, 3]. Наиболее распространенным среди них методом является метод взвешенной суммы [4, 5]. Данный метод основан на сведении многокритериальной задачи к однокритериальной путем введения обобщенного критерия, представленного в виде суммы исходных критериев, взвешенных коэффициентами. Весовые коэффициенты выражают степень значимости каждого критерия оптимизации. Метод взвешенной суммы эффективно применяется для решения задач с выпуклым целевым множеством. При решении задач оптимизации технологических процессов часто приходится сталкиваться с невыпуклой и овражной структурой минимизируемых функционалов. Поэтому для решения задач многоцелевой оптимизации процессов синтеза полимеров применимость метода взвешенной суммы ограничена.

К методам скаляризации относится также метод главного критерия [6]. Суть метода заключается в том, что в качестве оптимизируемой функции выбирается лишь один из критериев оптимизации, а остальные критерии рассматриваются в качестве ограничений задачи. Метод применим для решения многоцелевых задач, в которых можно четко выделить главный критерий. В

общем случае при применении метода главного критерия можно потерять эффект взаимного влияния второстепенных критериев, а также возникают трудности вычислительного характера в случае нелинейных функций-ограничений.

К другому классу методов решения задач многокритериального выбора относятся методы, основанные на концепции Парето-доминирования, в частности, генетические алгоритмы [7–10]. Различие в работе алгоритмов состоит в определении пригодности особей в качестве решения и в механизме селекции [11]. Генетические алгоритмы применяются, в основном, для решения многокритериальных задач оптимизации функций или динамических процессов, которые описываются конечными системами дифференциальных уравнений. Поэтому предлагается расширить область их применения для оптимизации параметров процессов синтеза полимеров, математическое описание которых представляется бесконечными системами дифференциальных уравнений.

Целью работы является разработка генетического алгоритма для решения задачи многокритериальной оптимизации процесса синтеза полимеров на основе его математической модели.

Постановка задачи

Пусть математическое описание полимеризационного процесса представляется системой дифференциальных уравнений [1]:

$$\frac{dR_l}{dt} = \sum_{i=1}^{\infty} a_{li} R_i + \sum_{i,j=1}^{\infty} b_{lij} R_i R_j, \quad 1 \leq l \leq \infty, \quad (1)$$

с начальными условиями

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

где R_l – компонент реакционной смеси (инициатор I , свободный радикал R , мономер M , активные центры P_1 , активная P_i и неактивная Q_i цепи полимера длиной i), $t \in [0, \tau]$ – время, a_{li} , b_{lij} – константы скорости реакции.

В качестве оптимизируемых параметров рассмотрим начальные концентрации k веществ $R_1(0)$, ..., $R_k(0)$, и продолжительность процесса τ , для которых область допустимых значений Ω задается неравенствами:

$$R_i^{\min} \leq R_i(0) \leq R_i^{\max}, \quad i = \overline{1, k}, \quad (3)$$

$$\tau^{\min} \leq \tau \leq \tau^{\max}. \quad (4)$$

Пусть задан вектор критериев оптимизации:

$$J(R_1(0), \dots, R_k(0), \tau) = (J_1(R_1(0), \dots, R_k(0), \tau), \dots, J_m(R_1(0), \dots, R_k(0), \tau)). \quad (5)$$

Необходимо определить начальные концентрации реагентов $R_1(0)$, ..., $R_k(0)$ и продолжительность процесса τ с учетом ограничений (3) и (4), при которых каждый критерий оптимизации достигает своего минимального значения:

$$J_s(R_1(0), \dots, R_k(0), \tau) \rightarrow \min, \quad s = \overline{1, m}. \quad (6)$$

Алгоритм многоцелевой оптимизации процесса полимеризации

Сформулируем численный алгоритм многоцелевой оптимизации условий протекания полимеризационного процесса на основе метода FFGA (Fonseca and Fleming's Multiobjective Genetic Algorithm) [8], в котором поиск решения осуществляется путем ранжирования особей с применением принципов Парето-доминирования.

Основная идея Парето-оптимальности заключается в том, что невозможно улучшить решение по одному из показателей, не ухудшив, при этом, по другому [12].

Пусть $x = (R_1(0), \dots, R_k(0), \tau) \in \Omega$, $y = (R_1(0), \dots, R_k(0), \tau) \in \Omega$.

Решение $x \in \Omega$ называется эффективным (недоминируемым), если в Ω не существует решения y , которое по критериям оптимизации было бы не хуже, чем x ($J_l(y) \leq J_l(x)$), и по крайней мере по одному s -му критерию было бы строго лучше, чем x ($J_s(y) < J_s(x)$).

Решение x доминирует решение y , если $J(x) < J(y)$.

Если решение x недоминируемо относительно Ω , то оно называется Парето-оптимальным.

Множество всех эффективных точек называется множеством Парето в пространстве переменных, а их образ в пространстве целевых функций – фронтом Парето [11].

Пусть в качестве популяции выступает наборов оптимизируемых параметров процесса:

$$u_i = (u_{i1}, \dots, u_{ir}) = (R_1(0), \dots, R_k(0), \tau),$$

где u_i – особь, u_{ij} – j -й ген i -й особи, $i = \overline{1, P}$, P – размер популяции, $r = k + 1$.

Каждой i -й особи поставим в соответствие ранг $rang_i$ [13]:

$$rang_i = 1 + g, \quad (7)$$

где g – количества доминирующих решений. Качество особи u_i определяется ее рангом: чем меньше ранг $rang_i$, тем приспособленность особи выше, и, следовательно, она больше подходит в качестве решения оптимизационной задачи, чем особи с меньшей приспособленностью (большим рангом).

Поскольку система дифференциальных уравнений (1) является незамкнутой, применим метод моментов для ее преобразования к конечному виду [14]. Получив численное решение конечной системы дифференциальных уравнений, можно вычислить значения целевых функционалов (6), и определить приспособленность каждой особи путем вычисления ее ранга.

Алгоритм многоцелевой оптимизации процесса полимеризации состоит из следующих шагов.

Шаг 1. Заполнить начальную популяцию оптимизируемых параметров процесса полимеризации случайными значениями из области Ω :

$$\begin{aligned} u_{ij}^0 &= R_j^{\min} + \alpha_j (R_j^{\max} - R_j^{\min}), \quad j = \overline{1, r-1}, \\ u_{ij}^0 &= \tau^{\min} + \alpha_j (\tau^{\max} - \tau^{\min}), \quad j = r, \end{aligned}$$

где $\alpha_j \in [0, 1]$ – случайное число, $i = \overline{1, P}$.

Шаг 2. Преобразовать систему (1) к конечному виду, подставив в нее выражения для моментов цепей полимера и их производных:

$$\mu_n = \sum_{i=2}^{+\infty} i^n P_i, \quad \eta_n = \sum_{i=2}^{+\infty} i^n Q_i, \quad \frac{d\mu_n}{dt} = \sum_{i=2}^{\infty} i^n \frac{dP_i}{dt}, \quad \frac{d\eta_n}{dt} = \sum_{i=2}^{\infty} i^n \frac{dM_i}{dt}, \quad (8)$$

где μ_n, η_n – моменты n -го порядка активных и неактивных цепей полимера P_i, Q_i соответственно [1].

Шаг 3. Решить полученную систему дифференциальных уравнений с начальными условиями $(u_{i1}^0, \dots, u_{ir-1}^0)$, $t \in [0, u_{ir}^0]$, $i = \overline{1, P}$. Для каждого набора оптимизируемых параметров вычислить значения целевых функционалов $J_s(u_i^0)$, $s = \overline{1, m}$.

Шаг 4. Определить приспособленность особей начальной популяции. Для этого вычислить ранг $rang_i$ каждой особи u_i^0 , $i = \overline{1, P}$.

Шаг 5. Установить счетчик итераций равным 1: $iter = 1$.

Шаг 6. Выполнить процедуру селекции. Из наиболее приспособленных особей выбрать случайным образом две особи-родителя u^{r1}, u^{r2} .

Шаг 7. Выполнить процедуру кроссовера. Сгенерировать три особи-потомка u^{p1}, u^{p2}, u^{p3} :

$$u^{p1} = \frac{u^{r1} + u^{r2}}{2}, \quad u^{p2} = \frac{3u^{r1} - u^{r2}}{2}, \quad u^{p3} = \frac{3u^{r2} - u^{r1}}{2}.$$

Шаг 8. Выполнить процедуру мутации для потомков u^{p1}, u^{p2}, u^{p3} , в результате которой сформировать три особи-мутанта u^{m1}, u^{m2}, u^{m3} . Для этого случайным образом выбрать l -й ген каждого из потомков. Если $l \in \{1, \dots, r-1\}$, то заменить его случайным значением из диапазона (3). Если ген соответствует продолжительности процесса τ ($l = r$), то заменить его случайным значением из промежутка (4).

Шаг 9. Вычислить приспособленность особей u^{m1} , u^{m2} , u^{m3} путем вычисления рангов. Для этого решить систему, полученную на шаге 2, с начальными условиями $(u_{i1}^{mj}, u_{i2}^{mj}, \dots, u_{i_{r-1}}^{mj})$, $t \in [0, u_{ir}^{mj}]$, $i = \overline{1, P}$, $j = 1, 2, 3$.

Шаг 10. Сформировать множество наименее приспособленных особей u_l^{bad} , $l = \overline{1, q}$.

Шаг 11. Выбрать из u^{m1} , u^{m2} , u^{m3} наиболее приспособленную особь и заменить ею случайно выбранную особь из множества u_l^{bad} , $l = \overline{1, q}$.

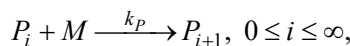
Шаг 12 Объединить множество u_l^{bad} , $l = \overline{1, q}$ с остальной частью популяции.

Шаг 13. Если $iter \leq N$ (N – заданное количество итераций), то $iter = iter + 1$ и перейти на шаг 6. Иначе выбрать множество особей с наименьшим рангом, которое является приближенным решением задачи многоцелевой оптимизации процесса полимеризации.

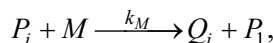
Вычислительный эксперимент

С помощью сформулированного алгоритма найдем приближенное решение задачи многоцелевой оптимизации для процесса полимеризации бутадиена на неодимсодержащей каталитической системе. Кинетическая схема данного процесса состоит из следующих стадий [15]:

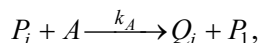
1) рост цепи:



2) передача цепи на мономер:



3) передача цепи на алюминийорганическое соединение (АОС):



где P_i , Q_i – активные и неактивные цепи полимера длиной i соответственно, M – мономер, A – АОС, k_P , k_M , k_A – константы скоростей реакций роста цепи, передачи цепи на мономер и передачи цепи на АОС соответственно.

Математическое описание процесса полимеризации бутадиена представляется бесконечномерной системой дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{dM}{dt} &= -MC_a(k_P + k_M), \\ \frac{dA}{dt} &= -k_A AC_a, \\ \frac{dP_1}{dt} &= -k_P MP_1 + (k_M M + k_A A) \sum_{i=2}^{\infty} P_i, \\ \frac{dQ_1}{dt} &= k_M MP_1 + k_A AP_1, \\ \frac{dP_i}{dt} &= k_P M(P_{i-1} - P_i) - k_M MP_i - k_A AP_i, \quad i \geq 2, \\ \frac{dQ_i}{dt} &= k_M MP_i + k_A AP_i, \quad i \geq 2, \end{aligned} \tag{9}$$

с начальными условиями:

$$M(0) = M^0, A(0) = A^0, P_1(0) = C_a, Q_1(0) = 0, P_i(0) = Q_i(0) = 0, i \geq 2, \tag{10}$$

где $C_a = \sum_{i=1}^{\infty} P_i(t)$ – концентрация активных центров.

С помощью формул (8) приведем систему (9) к конечной системе дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned}
 \frac{dM}{dt} &= -MP_1(k_P + k_M) - M\mu_0(k_P + k_M), \\
 \frac{dA}{dt} &= -k_AAP_1 - k_AA\mu_0, \\
 \frac{dP_1}{dt} &= -k_PMP_1 + (k_MM + k_AA)\mu_0, \\
 \frac{dQ_1}{dt} &= k_MMP_1 + k_AAP_1, \\
 \frac{d\mu_0}{dt} &= k_PMP_1 - (k_MM + k_AA)\mu_0, \\
 \frac{d\eta_0}{dt} &= (k_MM + k_AA)\mu_0, \\
 \frac{d\mu_1}{dt} &= 2k_PMP_1 + k_PM\mu_0 - (k_MM + k_AA)\mu_1, \\
 \frac{d\eta_1}{dt} &= (k_MM + k_AA)\mu_1, \\
 \frac{d\mu_2}{dt} &= 4k_PMP_1 + k_PM\mu_0 + 2k_PM\mu_1 - (k_MM + k_AA)\mu_2, \\
 \frac{d\eta_2}{dt} &= (k_MM + k_AA)\mu_2, \\
 \frac{d\mu_3}{dt} &= 8k_PMP_1 + 3k_PM(\mu_2 + \mu_1) + k_PM\mu_0 - (k_MM + k_AA)\mu_3, \\
 \frac{d\eta_3}{dt} &= (k_MM + k_AA)\mu_3,
 \end{aligned} \tag{11}$$

с начальными условиями

$$M(0) = M^0, A(0) = A^0, P_1(0) = C_a, Q_1(0) = 0, \mu_n(0) = \eta_n(0) = 0, n = \overline{0,3}. \tag{12}$$

Численное решение системы (11) позволяет определить средние молекулярные характеристики молекулярно-массового распределения полимеров:

1) среднечисленную молекулярную массу

$$M_n = m_0 \frac{\mu_1 + \eta_1}{\mu_0 + \eta_0};$$

2) среднемассовую молекулярную массу

$$M_w = m_0 \frac{\mu_2 + \eta_2}{\mu_1 + \eta_1},$$

где m_0 – молекулярная масса бутадиена.

Одним из показателей физико-химических свойств полимера является его полидисперсность Pd , характеризующая неоднородность макромолекул по структуре и размерам:

$$Pd = \frac{M_w}{M_n}.$$

Если индекс полидисперсности равен 2, то есть среднемассовая молекулярная масса в 2 раза больше среднечисленной молекулярной массы, то в полимерах присутствует значительное количество молекул с различными молекулярными массами, что свидетельствует о широком распределении молекулярных масс.

Пусть оптимизируемыми параметрами процесса полимеризации бутадиена являются начальные концентрации мономера $M(0)$ и алюминийорганического соединения $A(0)$, на значения которых наложены ограничения (моль/л):

$$0,5 \leq M(0) \leq 8, \tag{13}$$

$$0,00001 \leq A(0) \leq 0,05. \tag{14}$$

Также варьируемым параметром является время контакта веществ τ , допустимые значения которого задаются в виде неравенства (мин):

$$10 \leq \tau \leq 100. \quad (15)$$

Требуется определить продолжительность процесса полимеризации τ , начальные концентрации мономера $M(0)$ и АОС $A(0)$, при которых достигается максимальная конверсия мономера, и значение индекса полидисперсности полимеров равно 2, то есть

$$J_1(M(0), A(0), \tau) = \left(1 - \frac{M(\tau)}{M(0)}\right) \cdot 100\% \rightarrow \max, \quad (16)$$

$$J_2(M(0), A(0), \tau) = |Pd - 2| \rightarrow \min. \quad (17)$$

Задача (9)–(17) решена с помощью программы, написанной на языке Delphi, с параметрами алгоритма: $P = 50$, $N = 100$. Поиск численного решения системы дифференциальных уравнений (11) с начальными условиями (12) осуществлялся с помощью предиктор-корректорного метода Адамса второго порядка.

Результаты решения задачи (9)–(17) приведены на рис. 1, 2. Для обеспечения максимальной конверсии мономера и полидисперсности получаемых полимеров нужно придерживаться одного из десяти режимов протекания процесса полимеризации бутадиена (табл. 1).

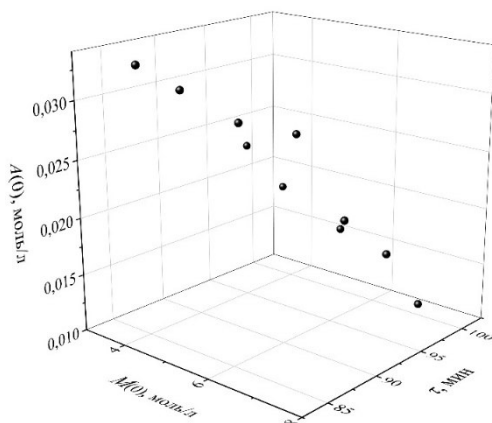


Рис. 1. Аппроксимация множества Парето

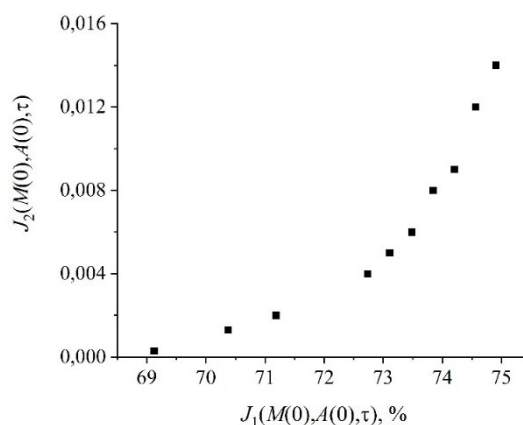


Рис. 2. Аппроксимация фронта Парето

Таблица 1

Оптимальные условия протекания процесса полимеризации бутадиена

$M(0)$, моль/л	$A(0)$, моль/л	τ , мин	Конверсия мономера, %	Pd
3,854	0,033	85	69,13	2,0003
4,112	0,03	88	70,38	2,0013
4,989	0,028	90	71,19	2,002
6,508	0,02	94	72,74	1,996
5,211	0,026	95	73,11	2,005
7,044	0,017	96	73,48	1,994
3,556	0,023	97	73,85	1,992
5,627	0,017	98	74,20	1,991
4,015	0,019	99	74,56	1,988
7,045	0,011	100	74,91	1,986

Также решены задачи однокритериальной оптимизации процесса полимеризации бутадиена по каждому из критериев (16), (17). Расчет проведен с помощью разработанной авторами программы на языке Delphi, реализующей генетический алгоритм с вещественным кодированием [16]. Полученные результаты вычислений представлены в табл. 2.

Значение наибольшей конверсии мономера, найденной в результате расчетов с помощью алгоритма многоцелевой оптимизации, равно 74,91 % (последняя строка табл. 1), при этом $Pd = 1,986$. При решении однокритериальной задачи максимизации конверсии мономера получе-

но значение индекса полидисперсности полимеров, равное 1,713 (первая строка табл. 2). Отсюда видно, что применение алгоритма многоцелевой оптимизации позволило уменьшить отклонение значения Pd от целевого значения, равного 2, с 14,35% до 0,7%.

Таблица 2

Результаты решения задач однокритериальной оптимизации процесса полимеризации бутадиена

Критерий оптимизации	$M(0)$, моль/л	$A(0)$, моль/л	τ , мин	Конверсия мономера, %	Полидис- персность
$J_1(M(0), A(0), \tau) \rightarrow \min$	1,7	0,0017	99	74,56	1,713
$J_2(M(0), A(0), \tau) \rightarrow \min$	4,47	0,045	68	60,94	1,992

Аналогично, при решении многокритериальной задачи (9)–(17) увеличено наибольшее значение конверсии мономеров на 13,44 % (значение конверсии 69,13 % при наименьшем отклонении полидисперсности от значения 2), по сравнению с решением задачи оптимизации с одним критерием (17) (значение конверсии 60,94 %). Поэтому для одновременного поиска наибольших значений критериев оптимизации (16), (17) целесообразно применять разработанный алгоритм.

Заключение

Разработанный алгоритм решения задачи многоцелевой оптимизации можно использовать для определения оптимальных значений параметров процесса синтеза полимеров, математическая модель которого может быть представлена бесконечной системой обыкновенных дифференциальных уравнений. Алгоритм, сформулированный на основе метода FFGA, включает в себя процедуру преобразования бесконечной системы дифференциальных уравнений к конечному виду. Преимуществом алгоритма является отсутствие необходимости задавать приоритеты критериям оптимизации.

Алгоритм реализован в виде программы на языке Delphi для промышленно значимого процесса полимеризации бутадиена. Сформулирована задача многоцелевой оптимизации процесса, в которой варьируемыми параметрами являются время контакта веществ, начальные концентрации мономера и алюминийорганического соединения. В качестве критериев оптимальности заданы максимальная конверсия мономера и достижение показателя полидисперсности полимеров заданного значения, который определяет молекулярные характеристики конечного продукта. В результате работы алгоритма получено множество Парето-оптимальных решений рассматриваемой многокритериальной задачи. Сравнение решения задачи многоцелевой оптимизации процесса полимеризации бутадиена с решениями, полученными в результате минимизации каждого критерия по отдельности, показало, что применение разработанного алгоритма позволяет существенно улучшить показатели наибольшей конверсии мономера и индекса полидисперсности полимеров.

Исследование выполнено в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (код научной темы FRRR-2026-0007).

Литература

1. Антипина, Е.В. Поиск оптимального начального состава реакционной смеси процесса полимеризации с помощью искусственных иммунных систем / Е.В. Антипина, С.А. Мустафина, А.Ф. Антипин // Прикладная информатика. – 2004. – Т. 19, № 6. – С. 59–67.
2. О решении многокритериальных задач принятия решений на основе парных сравнений / Н.К. Кривулин, Т. Абиляев, В.Д. Горшечникова и др. // Компьютерные инструменты в образовании. – 2020. – № 2. – С. 27–58.
3. Nakayama, H. Sequential Approximate Multiobjective Optimization using Computational Intelligence / H. Nakayama, Y. Yun, M. Yoon. – Berlin: Springer, 2009. – 200 p.
4. Воробьева, М.В. Анализ методов многокритериального принятия решений / М.В. Воробьева // Региональная и отраслевая экономика. – 2022. – № 1. – С. 24–28.
5. Островский, Г.М. Многокритериальная оптимизация технологических процессов в условиях неопределенности / Г.М. Островский, Ю.М. Волин // Автоматика и телемеханика. – 2007. – № 3. – С. 165–180.
6. Владимирова, Л.В. Многокритериальная оптимизация динамики пучков / Л.В. Владимирова // Известия Иркутского государственного университета. Серия «Математика». – 2014. – Т. 7. – С. 3–18.

7. Coello, C.A. A Comprehensive Survey of Evolutionary-Based Multiobjective Optimization Techniques / C.A. Coello // Knowledge and Information Systems. – 1999. – Vol. 1. – P. 269–308.
8. Fonseca, C.M. Multiobjective Optimization and Multiple Constraint Handling with Evolutionary Algorithms. I: A Unified Formulation / C.M. Fonseca, P.J. Fleming // IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics. Part A: Systems and Humans. – 1998. – Vol. 28, Iss. 1. – P. 26–37.
9. Zitzler, E. Multiobjective Evolutionary Algorithms: A Comparative Case Study and the Strength Pareto Approach / E. Zitzler, L. Thiele // IEEE transactions on evolutionary computation. – 1999. – Vol. 3, no. 4. – P. 257–271.
10. A Fast and Elitist Multiobjective Genetic Algorithm: NSGA II / K. Deb, A. Pratap, S. Agarwal, T. Meyarivan // IEEE Transactions on Evolutionary Computation. – 2002. – Vol. 6, no. 2. – P. 182–197.
11. Антипина, Е.В. Алгоритм решения задачи многоцелевой оптимизации на основе кинетической модели химической реакции / Е.В. Антипина, С.А. Мустафина, А.Ф. Антипин // Автоматизация. – 2021. – Т. 57, № 6. – С. 124–131.
12. Подиновский, В.В. Парето-оптимальные решения многокритериальных задач / В.В. Подиновский, В.Д. Ногин. – М.: Физматлит, 2007. – 255 с.
13. Исследование эффективности генетических алгоритмов многокритериальной оптимизации / С.Ю. Белецкая, Ю.А. Асанов, А.Д. Поваляев, А.В. Гаганов // Вестник Воронежского государственного технического университета. – 2015. – Т. 11, № 1. – С. 24–27.
14. Подвальный, С.Л. Моделирование промышленных процессов полимеризации на основе метода моментов / С.Л. Подвальный // Вестник Воронежского государственного технического университета. – 2015. – Т. 11, № 1. – С. 11–16.
15. Обратная кинетическая задача ионно-координационной полимеризации диенов / Т.С. Усманов, Э.Р. Максютова, И.К. Гатауллин и др. // Высокомолекулярные соединения. Серия А. – 2003. – Т. 45, № 2. – С. 181–187.
16. Search for the Optimal Composition of the Reaction Mixture based on a Genetic Algorithm / E. Antipina, S. Mustafina, A. Antipin, A. Akimov // Match: communications in mathematical and computer chemistry. – 2025. – Vol. 94, no. 2. – P. 309–324.

Поступила в редакцию 24 октября 2025 г.

Сведения об авторах

Антипина Евгения Викторовна – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, управление научных исследований и разработок, Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, Российская Федерация, e-mail: stepashinaev@ya.ru.

Мустафина Светлана Анатольевна – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра математического и компьютерного моделирования, Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, Российская Федерация.

Антипин Андрей Федорович – кандидат технических наук, доцент, кафедра прикладной информатики и программирования, Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, Российская Федерация.

GENETIC ALGORITHM FOR MULTI-OBJECTIVE OPTIMIZATION OF DYNAMIC SYSTEMS USING AN INFINITE-DIMENSIONAL MODEL

E.V. Antipina, S.A. Mustafina, A.F. Antipin

Ufa University of Science and Technology, Ufa, Russian Federation

E-mail: stepashinaev@ya.ru

Abstract. This article investigates the multi-objective problem of optimizing polymerization process parameters. The complexity of the mathematical description of the polymerization process stems from the fact that the reaction system contains an unlimited number of components. Therefore, the mathematical model of the polymerization process is an infinite-dimensional system of differential equations. To solve this multi-objective problem of polymerization process optimization, the article proposes a genetic algorithm based on the Pareto dominance principle. A key feature of the algorithm is the procedure for reducing the infinite system of equations to a final form using the moment method. An advantage of the algorithm is the absence of the need to prioritize the optimization criteria. The article presents the results of a computational experiment on the polymerization of butadiene on a neodymium-containing catalytic system. The experiment allowed determining such parameters as the synthesis duration and the initial concentrations of the monomer and organoaluminum compound that ensure maximum monomer conversion at a given polydispersity index of the final product. The solution to the problem of the multi-objective optimization of the butadiene polymerization process was compared to the solutions obtained by minimizing each criterion separately. It was found that the use of the developed algorithm allows for a significant improvement in the indicators of the highest monomer conversion and the polydispersity index of polymers.

Keywords: multi-objective optimization; polymerization process; genetic algorithm; moment method.

References

1. Antipina E., Mustafina S., Antipin A. Search for the Optimal Initial Composition of the Reaction Mixture of the Polymerization Process using Artificial Immune Systems. *Journal of Applied Informatics*, 2004, Vol. 19, no. 6, pp. 59–67. (in Russ.). DOI: 10.37791/2687-0649-2024-19-6-59-67
2. Krivulin N., Abildaev T., Gorshechnikova V., Kapatsa D., Magdich E., Mandrikova A. On Solving Multicriteria Decision Making Problems Based on Pairwise Comparisons. *Computer Tools in Education*, 2020, no. 2, pp. 27–58. (in Russ.). DOI: 10.32603/2071-2340-2020-2-27-58
3. Nakayama H., Yun Y., Yoon M. *Sequential Approximate Multiobjective Optimization Using Computational Intelligence*. Berlin: Springer, 2009, 200 p. DOI: 10.1007/978-3-540-88910-6
4. Vorobieva M.V. Analysis of Methods of Multi-Criteria Decision Making. *Regional and sectoral economy*, 2022, no. 1, pp. 24–28. (in Russ.). DOI: 10.47576/2782-4578_2022_1_24.
5. Volin Yu.M., Ostrovskii G.M. Multicriteria Optimization of Technological Processes under Uncertainty Conditions. *Automation and Remote Control*, 2007, Vol. 68, no. 3, pp. 523–538. DOI: 10.1134/S0005117907030125
6. Vladimirova L. Multicriteria Optimization of Beam Dynamics. *Bulletin of Irkutsk State University. Series Mathematics*, 2014, Vol. 7, pp. 3–18. (in Russ.).
7. Coello C.A. A Comprehensive Survey of Evolutionary-Based Multiobjective Optimization Techniques. *Knowledge and Information Systems*, 1999, Vol. 1, pp. 269–308. DOI: 10.1007/bf03325101
8. Fonseca C.M., Fleming P.J. Multiobjective Optimization and Multiple Constraint Handling with Evolutionary Algorithms. I: A Unified Formulation. *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics. Part A: Systems and Humans*, 1998, Vol. 28, Iss. 1, pp. 26–37. DOI: 10.1109/3468.650319
9. Zitzler E., Thiele L. Multiobjective Evolutionary Algorithms: A Comparative Case Study and the Strength Pareto Approach. *IEEE transactions on evolutionary computation*, 1999, Vol. 3, no. 4, pp. 257–271. DOI: 10.1109/4235.797969

10. Deb K., Pratap A., Agarwal S., Meyarivan T. A Fast and Elitist Multiobjective Genetic Algorithm: NSGA II. *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, 2002, Vol. 6, no. 2, pp. 182–197. DOI: 10.1109/4235.996017
11. Antipina E.V., Antipin A.F., Mustafina S.A. 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. DOI: 10.3103/S8756699021060029
12. Podinovskiy V.V., Nogin V.D. *Pareto-optimal'nye resheniya mnogokriterial'nykh zadach* (Pareto-Optimal Solutions to Multi-Criteria Problems). Moscow, Fizmatlit Publ., 2007, 256 p. (in Russ.).
13. Beletskaja S.Yu., Asanov Yu.A., Povalyaev A.D., Gaganov A.V. Research of the Efficiency of Multiobjective Optimization Genetic Algorithms. *Vestnik Voronezhskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta*, 2015, Vol. 11, no. 1, pp. 24–27. (in Russ.).
14. Podvalny S.L. Modeling of Industrial Polymerization Processes Based on The Method of Moments. *Vestnik Voronezhskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta*, 2015, Vol. 11, no. 1, pp. 11–16. (in Russ.).
15. Usmanov T.S., Maksyutova E.R., Gataullin I.K., Spivak S.I., Usmanov S.M., Monakov Yu.B. Inverse Kinetic Problem for Ion-Coordination Polymerization of Dienes. *Vysokomolekulyarnye soedineniya. Seriya A*, 2003, Vol. 45, no. 2, pp. 181–187. (in Russ.).
16. Antipina E., Mustafina S., Antipin A., Akimov A. Search for the Optimal Composition of the Reaction Mixture based on a Genetic Algorithm. *Match: communications in mathematical and computer chemistry*, 2025, Vol. 94, no. 2, pp. 309–324. DOI: 10.46793/match.94-2.309A

Received October 24, 2025

Information about the authors

Antipina Evgenia Viktorovna is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Senior Staff Scientist of the Department of Scientific Research and Development, Ufa University of Science and Technology, Ufa, Russian Federation, e-mail: stepashinaev@ya.ru.

Mustafina Svetlana Anatolievna is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor of the Department of Mathematical and Computer Modeling, Ufa University of Science and Technology, Ufa, Russian Federation.

Antipin Andrey Fedorovich is Cand. Sc. (Engineering), Associate Professor of the Department of Applied Informatics and Programming, Ufa University of Science and Technology, Ufa, Russian Federation.