

DOI: 10.37791/2687-0649-2024-19-6-59-67

# Поиск оптимального начального состава реакционной смеси процесса полимеризации с помощью искусственных иммунных систем

*Е. В. Антипина<sup>1\*</sup>, С. А. Мустафина<sup>1</sup>, А. Ф. Антипин<sup>1</sup>*

*<sup>1</sup>Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

*\*stepashinaev@ya.ru*

**Аннотация.** Для установления закономерностей протекания полимеризационных процессов целесообразно применять методы математического моделирования. На основе математического описания процесса можно определить оптимальные условия его протекания, обеспечивающие повышение его эффективности, а также качество выпускаемых полимеров. Одной из задач оптимизации процессов полимеризации является задача определения начального состава реакционной смеси, который обеспечивает достижение заданных количественных или качественных показателей процесса. Целью работы является разработка алгоритма определения начальных концентраций компонентов реакции синтеза полимеров. Приведена постановка задачи поиска оптимальных концентраций компонентов процесса синтеза полимеров и численный алгоритм для ее решения. Так как кинетическая модель процесса полимеризации представляет собой бесконечную систему обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений, то при ее решении с помощью классических методов оптимизации возникают трудности вычислительного характера. Поэтому для расчета оптимального начального состава реакционной смеси полимеризационного процесса предлагается применить метод искусственных иммунных систем. Данный метод позволяет преодолевать локальные экстремумы в многомерных пространствах поиска и его легко реализовать для конкретного процесса при изменении количества оптимизируемых параметров. Разработанный алгоритм на основе метода искусственных иммунных систем включает в себя процедуру преобразования бесконечной системы дифференциальных уравнений, описывающих кинетику полимеризационного процесса, к конечному виду с помощью метода моментов. Работа алгоритма апробирована на промышленно значимом процессе полимеризации бутадиена на неодимсодержащей каталитической системе. Вычислены оптимальные концентрации реагентов, обеспечивающие получение полимера с заданными свойствами.

**Ключевые слова:** искусственные иммунные системы, биоинспирированные алгоритмы, метод моментов, процесс полимеризации, реакционная смесь

**Для цитирования:** Антипина Е. В., Мустафина С. А., Антипин А. Ф. Поиск оптимального начального состава реакционной смеси процесса полимеризации с помощью искусственных иммунных систем // Прикладная информатика. 2024. Т. 19. № 6. С. 59–67. DOI: 10.37791/2687-0649-2024-19-6-59-67

# Search for the optimal initial composition of the reaction mixture of the polymerization process using artificial immune systems

E. Antipina<sup>1\*</sup>, S. Mustafina<sup>1</sup>, A. Antipin<sup>1</sup>

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

\*stepashinaev@ya.ru

**Abstract.** To establish regularities of polymerization processes, it is advisable to use methods of mathematical modeling. On the basis of mathematical description of the process it is possible to determine the optimal conditions of its course, providing an increase in its efficiency, as well as the quality of produced polymers. One of the problems of optimization of polymerization processes is the problem of determining the initial composition of the reaction mixture, which ensures the achievement of given quantitative or qualitative indicators of the process. The aim of the work is to develop an algorithm for determining the initial concentrations of polymer synthesis reaction. The statement of the problem of searching for optimal concentrations of components of the polymer synthesis process and a numerical algorithm for its solution are given. Since the kinetic model of the polymerization process is an infinite system of ordinary nonlinear differential equations, its solution using classical optimization methods encounters computational difficulties. Therefore, it is proposed to apply the method of artificial immune systems to calculate the optimal initial composition of the reaction mixture of the polymerization process. This method allows to overcome local extrema in multidimensional search spaces and it is easy to implement for a particular process when the number of optimized parameters is changed. The developed algorithm based on the method of artificial immune systems includes a procedure for converting an infinite system of differential equations describing the kinetics of the polymerization process to a finite form using the method of moments. The algorithm has been tested on an industrially significant polymerization process of butadiene on a neodymium-containing catalytic system. The optimum concentrations of reagents that provide the polymer with the desired properties have been calculated.

**Keywords:** artificial immune systems, bioinspired algorithms, method of moments, polymerization process, reaction mixture

**For citation:** Antipina E., Mustafina S., Antipin A. Search for the optimal initial composition of the reaction mixture of the polymerization process using artificial immune systems. *Prikladnaya informatika*=Journal of Applied Informatics, 2024, vol.19, no.6, pp.59-67 (in Russian). DOI: 10.37791/2687-0649-2024-19-6-59-67

## Введение

**М**атематическое моделирование полимеризационных процессов является важным инструментом для установления закономерностей их протекания и оптимизации условий реакций полимеризации, позволяющим повысить

эффективность процессов синтеза полимеров и качество получаемых продуктов. Одним из таких условий реакции полимеризационного процесса являются начальные концентрации реакционной смеси.

Поскольку реакционная система процесса полимеризации содержит неогра-