



<https://doi.org/10.15507/2658-4123.034.202404.597-614>

EDN: <https://elibrary.ru/kwyhah>

УДК 678:004.021:004.032.2

ISSN Print 2658-4123

ISSN Online 2658-6525

<http://vestnik.mrsu.ru>

Оригинальная статья / Original article



## Алгоритм поиска оптимального режима подачи регулятора в процессе получения полимерных продуктов

Э. Н. Мифтахов ✉

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

✉ [promif@mail.ru](mailto:promif@mail.ru)

### Аннотация

**Введение.** Высокий спрос на полимерную продукцию обеспечивает необходимость постоянной модернизации технологических аспектов ее производства, повышение эффективности которого невозможно без модельного описания и решения задач оптимизации его основных технологических стадий. В условиях имеющихся сегодня потребностей по получению продуктов с заданной структурой и свойствами вопрос по созданию инструментов решения задач оптимизации является весьма актуальным. Одним из инструментов управления молекулярной массой продукта является использование режима дробной подачи регулятора, состав и дозировка которого часто подобраны эмпирически.

**Цель исследования.** Разработка методов и алгоритмов, позволяющих определить режим многоточечной подачи регулятора в непрерывном производстве полимерных продуктов с целью формирования заданных молекулярных характеристик.

**Материалы и методы.** Для решения задачи поиска оптимального режима подачи регулятора используется эвристический подход, представленный генетическим алгоритмом оптимизации. Данный алгоритм основан на механизме создания популяции потенциальных решений, которые подвергаются операциям скрещивания, мутации и отбора, имитируя процессы наследования и эволюции в природе. С целью оценки молекулярных характеристик продукта сополимеризации применяется кинетический подход к моделированию, основанный на использовании моментов молекулярно-массового распределения. Для математического описания непрерывного производства используются рекуррентные соотношения, характеризующие перенос реакционной массы между реакторами идеального перемешивания.

**Результаты исследования.** Согласно условиям организации непрерывного производства добавление регулятора возможно в начале процесса, а также в третьей и шестой по ходу батареи полимеризаторы. С целью определения режима подачи регулятора критерий оптимизации был сформирован в виде функционала, отражающего абсолютную разницу расчетных и заданных значений среднечисленной и среднемассовой молекулярных масс. Программная реализация разработанного метода и алгоритма оптимизации, проведенные вычислительные испытания позволили идентифицировать ряд решений, каждое из которых способствует получению продукта с заданными молекулярными характеристиками. Визуализация части полученных решений демонстрирует различную динамику молекулярной массы в течение всего процесса.

**Обсуждение и заключение.** С использованием разработанного метода и алгоритма была решена задача идентификации режима трехточечного регулирования молекулярной массы для непрерывного процесса получения бутадиев-стирольного сополимера. Выбор генетического алгоритма при исследовании и оптимизации сложных

© Мифтахов Э. Н., 2024



Контент доступен по лицензии Creative Commons Attribution 4.0 License.  
This work is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 License.

многофакторных физико-химических систем обоснован тем, что он позволяет осуществлять поиск одного или нескольких параметров системы как в дискретном, так и непрерывном множестве переменных и способствует нахождению глобального оптимума благодаря случайному характеру при поиске решений. Разнообразие полученных решений задачи дает возможность управления процессом синтеза полимеров в случае постоянного мониторинга физико-химических характеристик продукта.

**Ключевые слова:** бутадиен-стирольный сополимер, молекулярные характеристики, кинетический подход, регулятор, оптимизация, генетический алгоритм

**Конфликт интересов:** автор заявляет об отсутствии конфликта интересов.

**Финансирование:** исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-21-00380 (<https://rscf.ru/project/24-21-00380/>).

**Для цитирования:** Мифтахов Э. Н. Алгоритм поиска оптимального режима подачи регулятора в процессе получения полимерных продуктов // Инженерные технологии и системы. 2024. Т. 34, № 4. С. 597–614. <https://doi.org/10.15507/2658-4123.034.202404.597-614>

## Algorithm for Searching the Optimal Regulator Supply Mode in the Process of Manufacturing Polymer Products

E. N. Miftakhov ✉

*Ufa University of Science and Technology  
(Ufa, Russian Federation)*

✉ [promif@mail.ru](mailto:promif@mail.ru)

### Abstract

**Introduction.** The high demand for polymer products creates the need for constant modernization of the technological aspects of their production, increasing the efficiency of which is impossible without a model description and solving problems of optimization of its main technological stages. The current needs for manufacturing the products with a specified structure and properties make the issue of creating tools for solving optimization problems very relevant. One of the tools for controlling the product molecular weight is using the fractional mode to supply a regulator, the composition and dosage of which are often selected empirically.

**Aim of the Study.** The aim of the study is to develop methods and algorithms to determine the mode for multipoint supplying a regulator in the continuous-running manufacturing of polymer products with specified molecular characteristics.

**Materials and Methods.** To choose the optimal regulator supply mode, there is used a heuristic method represented by a genetic optimization algorithm. This algorithm is based on the mechanism for creating a population of potential solutions that are subjected to the operations of crossing, mutation and selection imitating the processes of inheritance and evolution in nature. To assess the molecular characteristics of the copolymerization product, there is applied a kinetic modeling approach based on the use of molecular weight distribution moments. For a mathematical description of continuous-running production, there are used recurrent relations characterizing the transfer of the reaction mass between ideally mixed reactors.

**Results.** According to the conditions for organizing continuous-running manufacturing, it is possible to add a regulator at the beginning of the process in the third and sixth polymerizers along the battery. In order to determine the regulator supply mode, the optimization criterion was developed in the form of a functional reflecting the absolute difference between the calculated and specified values of the number-average and mass-average molecular weights. The software implementation of the developed method and optimization



algorithm, and the computational tests carried out made it possible to identify a number of solutions, each of which contributes to manufacturing a product with specified molecular characteristics. Visualization of some resulting solutions demonstrates different molecular weight dynamics throughout the process.

*Discussion and Conclusion.* Through using the developed method and algorithm, there has been solved the problem of identifying the three-point molecular weight control regime for the continuous-running process of producing styrene-butadiene copolymer. The choice of a genetic algorithm for the study and optimization of complex multifactorial physico-chemical systems is justified by the fact that it allows searching for one or more system parameters in both a discrete and continuous set of variables and contributes to finding a global optimum due to the random nature in the search for solutions. The variety of solutions obtained for the problem makes it possible to control the process of polymer synthesis in the case of constant monitoring of the physicochemical characteristics of the product.

**Keywords:** butadiene-styrene copolymer, molecular characteristics, kinetic approach, regulator, optimization, genetic algorithm

**Conflict of interest:** The author declares no conflict of interest.

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

**For citation:** Miftakhov E.N. Algorithm for Searching the Optimal Regulator Supply Mode in the Process of Manufacturing Polymer Products. *Engineering Technologies and Systems*. 2024;34(4):597–614. <https://doi.org/10.15507/2658-4123.034.202404.597-614>

**Введение.** В условиях развития химических технологий синтез высокомолекулярных соединений становится важнейшей составляющей современной промышленности и играет ключевую роль в создании широкого спектра материалов: от пластиков и каучуков до композитов высокой прочности. Данные процессы обладают сложной динамикой, требующей тщательного планирования и контроля на всех этапах производства<sup>1</sup>.

Образующиеся полимерные продукты оценивают по молекулярным характеристикам, на численное представление которых влияют как соотношение используемой реакционной смеси, так и технологические параметры непрерывного производства. С целью ограничения чрезмерного роста молекулярной массы в полимеризационную массу добавляются регулирующие примеси [1], взаимодействующие с активными центрами полимеризации и способствующие принудительному обрыву образующихся макромолекул.

Дозировка таких примесей часто определена эмпирически, а многоточечная подача позволяет нивелировать ее стремительный расход и влияние на рост молекулярной массы полимерного продукта. Вопрос определения соответствующих дозировок и режима подачи регулятора, позволяющего получить продукт с заданными свойствами, является актуальным и не теряет своей практической значимости.

Целью данной работы является разработка методов и алгоритмов, позволяющих находить оптимальные режимы регулирования процессов синтеза полимеров, способствующие достижению заданных молекулярно-массовых характеристик.

<sup>1</sup> Кирпичников П. А., Береснев В. В., Попова Л. М. Альбом технологических схем основных производств промышленности синтетического каучука. Ленинград : Химия, 1986. 224 с.; Васильев В. А., Насыров И. Ш. Отечественные промышленные стереорегулярные каучуки. Исследования и разработки : моногр. Уфа, 2018. 288 с.

**Обзор литературы.** Сложная структура высокомолекулярных соединений и нетривиальный характер протекания элементарных реакций определяют необходимость использования эффективных методов моделирования, в основе которых лежит изучение основного кинетического механизма процесса. Концепция моделирования таких процессов полимеризации, основанных на известном реакционном механизме, подробно представлена в трудах отечественных<sup>2</sup> [2–4] и зарубежных исследователей [5–7]. Оценка влияния различных факторов, характерных при описании процессов в периодическом режиме производства, представлена в работах [8; 9].

С целью эмпирической оценки молекулярных характеристик полимерных продуктов возможно использование как кинетического [2; 10; 11], так и статистического подходов [12–14] к моделированию. В основе кинетического подхода лежит разработка математических моделей, описывающих изменение концентрации различных компонентов системы от времени, и последующее прогнозирование основных молекулярных характеристик в зависимости от условий реакции и состава исходной реакционной смеси. Статистический подход основан на использовании вероятностных законов для описания и анализа различных аспектов полимеризационных процессов. Полученные в ходе реализации статистического подхода данные справедливы лишь при организации достаточно большого количества вычислительных испытаний.

Очевидно, что при описании процессов синтеза полимеров в масштабе крупнотоннажного промышленного производства требуется учитывать особенности непрерывного потока реагентов и продуктов через реактор, включая динамику изменения параметров во времени и пространстве. В условиях организации кинетического подхода это приводит к включению в математическое описание соответствующих рекуррентных соотношений, определяющих перенос реакционной массы в ходе процесса<sup>3</sup>.

При модификации статистического подхода требуется вести постоянный учет параметров, характеризующих нахождение моделируемых макромолекул в том или ином реакторе каскада<sup>4</sup>. Кроме того, объем моделируемого ансамбля макромолекул требуется увеличить кратно количеству реакторов. Как следствие, организация вычислительных испытаний с целью эмпирической оценки продукта требует колоссальных вычислительных ресурсов и практически невозможна при постановке и решении задач оптимизации с использованием статистического подхода.

В контексте решения задач управления физико-химическими процессами предпочтение отдается тем методам оптимизации, которые позволяют в ходе итерационного поиска минимизировать количество необходимых вычислительных испытаний. Эвристические методы оптимизации<sup>5</sup> оказываются особенно привлекательными в данном контексте, предоставляя необходимые инструменты

<sup>2</sup> Берлин А. А., Вольфсон С. А. Кинетический метод в синтезе полимеров. М. : Химия, 1973. 344 с.

<sup>3</sup> Подвальный С. Л., Барабанов А. В. Структурно-молекулярное моделирование непрерывных технологических процессов многоцентрированной полимеризации. Воронеж : Научная книга, 2011. 115 с.

<sup>4</sup> Rawlings J. B., Ekerdt J. G. Chemical Reactor Analysis and Design Fundamentals. Madison : Nob Hill Publishing, 2002. 610 p.

<sup>5</sup> Пантелеев А. В., Скавинская Д. В., Алёшина Е. А. Метаэвристические алгоритмы поиска оптимального программного управления. М. : НИЦ ИНФРА-М, 2024. 396 с.

для анализа и улучшения реакционных механизмов, кинетических параметров и условий реакции.

Ведущее место среди эвристических методов оптимизации занимают генетические алгоритмы<sup>6</sup> [15]. Их способность исследования обширных пространств поиска решений представляет собой важное преимущество при выполнении сложных задач, включающих в себя множество возможных вариантов, что открывает вероятность их использования там, где невозможно применение классических алгоритмов. Впервые предложенные Холландом<sup>7</sup> генетические алгоритмы успешно применяются для решения задач оптимизации различного типа [16–18]. 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 [19]. Одним из способов, позволяющих повысить эффективность алгоритма, является использование различных видов кроссоверов – операторов, применяемых к начальным решениям для осуществления генетического «скрещивания». Оценка влияния различных типов кроссоверов на скорость и точность формирования решения представлена в работах [20–22].

**Материалы и методы.** Для решения задачи поиска оптимального режима подачи регулятора будем использовать генетический алгоритм, который представляет собой метаэвристический метод решения задач оптимизации, вдохновленный процессами естественного отбора и эволюции. Данный алгоритм основан на механизме создания популяции потенциальных решений, которые подвергаются операциям скрещивания, мутации и отбора, имитируя процессы наследования и эволюции в природе. На каждом этапе реализации алгоритма производится оценка полученных решений на основании заданного критерия эффективности. Лучшие решения используются для образования дальнейших потомков. С целью программной реализации данного алгоритма опишем его основные этапы.

*Этап 1 – формирование начальной популяции.* Задается некоторая начальная популяция из  $K$  возможных решений, порядковый номер  $iter = 1$  формируемого поколения и допустимая точность решения задачи  $\varepsilon$ . Вектор начальной популяции рекомендуется сформировать из равноудаленных точек заданного начального отрезка  $[x_i, \bar{x}_i]$ :

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

*Этап 2 – оценка степени приспособленности.* Для каждого из предложенных вариантов решений рассчитывается значение целевой функции, которое определяет критерий задачи оптимизации. В частности, если критерий оптимизации определяется некоторым функционалом  $G(X)$ , который требуется минимизировать, то при выполнении условия вида

<sup>6</sup> Simon D. Evolutionary Optimization Algorithms. Wiley, John Wiley & Sons Limited, 2013. 776 p.

<sup>7</sup> 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. 232 p.

$$G(X_j^{iter}) \leq \varepsilon, j = 1 \dots K \quad (1)$$

алгоритм следует немедленно остановить и вывести полученное решение.

*Этап 3 – выборка родителей для дальнейшей репродукции.* Для решения задачи выборки родителей с целью создания дальнейшей популяции на основании ранее полученных значений степени приспособленности рассчитывается вероятность выбора каждой особи:

$$p(X_j^{iter}) = \frac{1 - G(X_j^{iter})}{\sum_{j=1}^K (1 - G(X_j^{iter}))}.$$

Если хотя бы одно из  $G(X_j^{iter})$  превышает значение 1, то для расчета вероятностей требуется провести предварительную нормализацию полученных оценок. Найденные значения вероятностей последовательно располагаются на отрезке от 0 до 1, образуя полную группу. Далее на основании генерации равномерно распределенных случайных чисел и попадания их в заданные интервалы выбираются  $K$  особей для формирования родительского пула и дальнейшей репродукции.

*Этап 4 – формирование потомков.* Из найденного родительского пула проводится процедура получения потомков с использованием одного из заранее определенных операторов кроссинговера. В частности, в случае использования арифметического кроссинговера для двух родительских особей  $X_1 = (x_1^1, x_2^1, \dots, x_n^1)$  и  $X_2 = (x_1^2, x_2^2, \dots, x_n^2)$  значения вектора потомка будут определяться в соответствии с соотношением

$$y_i = a \cdot x_i^1 + (1 - a) \cdot x_i^2,$$

где

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

*Этап 5 – процедура мутации.* Данный этап необходим для внесения разнообразия в образованную популяцию и исследования различных решений в пространстве поиска. Для решения проблемы преждевременного «вырождения» вводится некоторый параметр мутации  $p_m$ , определяющий вероятность случайного изменения элементов вектора образованных потомков.

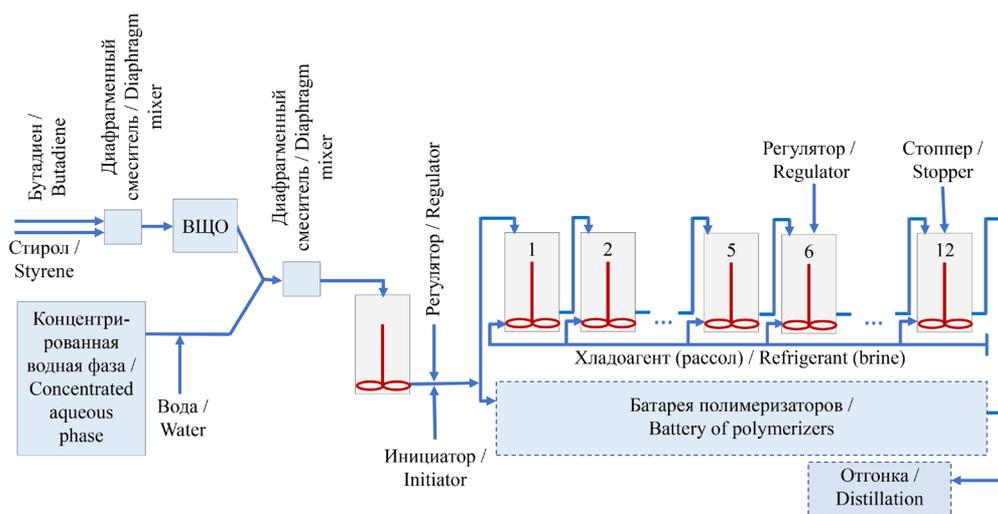
Элементы вектора, попадающие под процедуру мутации, меняются по правилу  $x_i = x_i \pm \alpha \cdot \delta$ , где  $\delta$  определяет допустимый интервал изменения, а параметр  $\alpha$  является поправочным коэффициентом и определяется в интервале от 0 до 1.

*Этап 6 – оценка новой популяции.* Для образованной популяции потомков рассчитывается значение целевой функции. В случае соответствия критерию остановки, согласно выражению (1), алгоритм следует остановить и вывести полученное решение. Иначе, перейти к 3-му этапу с целью дальнейшей репродукции потомков. Критерием остановки алгоритма может быть также достижение предельного количества итераций, задаваемого в виде отдельной переменной  $iterMAX$  и равного по умолчанию  $10^4$ .

Апробация генетического алгоритма к решению задачи оптимизации проводилась для непрерывного процесса сополимеризации бутадиена со стиролом<sup>8</sup> с целью определения оптимального режима многоточечной подачи регулятора [23], позволяющего получить продукт с заданными молекулярными характеристиками.

Образование полимера протекает по механизму инициированной радикальной полимеризации при низкой температуре 5 °С с применением в качестве инициатора окислительно-восстановительных систем. Среди технологических этапов производства синтетического каучука, оказывающих прямое влияние на молекулярные характеристики продукта, можно выделить подготовку реагентов и последующую полимеризацию при заданной температуре в каскаде реакторов до достижения заданной конверсии мономеров.

Для инициирования процесса используется гидроперекись пинана, объем которой эмпирически определяется под достижение конечной конверсии продукта. Для регулирования молекулярной массы применяется трет-додецилмеркаптан. В рамках существующего производства возможна как двух-, так и трехточечная подача регулятора. В непрерывном производстве задействовано до 12 реакторов объемом до 10,8 м<sup>3</sup>, а технология промышленного производства предполагает ввод регулятора в 1, 3 и 6-й по ходу батареи полимеризаторы (рис. 1). Соотношение бутадиена со стиролом в мономерной фазе по массовым частям составляет 70:30 и обеспечивает при достижении заданной конверсии характерные свойства продукта по составу.



Р и с. 1. Схема непрерывного процесса сополимеризации бутадиена со стиролом  
F i g. 1. Scheme of the continuous process of copolymerization of butadiene with styrene

*Примечание:* ВЦО – водно-щелочная отмывка.

*Note:* ВЦО – water-alkaline cleaning.

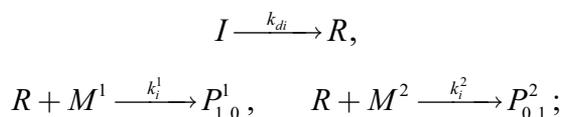
*Источник:* здесь и далее в статье все рисунки составлены автором.

*Source:* hereinafter in this article all figures are drawn up by the author.

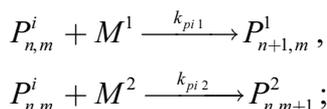
<sup>8</sup> Папков В. Н., Ривин Э. М., Блинов Е. В. Бутадиен-стирольные каучуки. Синтез и свойства : моногр. Воронеж, 2015. 315 с.

С учетом представленной технологии производства при математическом описании процесса сополимеризации обязательному учету подлежат следующие стадии кинетического механизма:

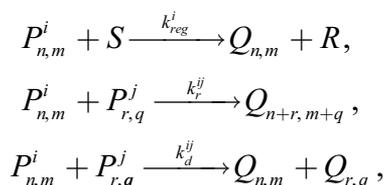
1) инициирование активных центров:



2) рост цепи с участием двух типов молекул мономера:



3) обрыв цепи в результате ее передачи на регулятор, а также механизмов рекомбинации и диспропорционирования:



где  $I$  – инициатор;  $R$  – свободный радикал;  $M^1, M^2$  – мономеры 1-го и 2-го типов;  $S$  – регулятор;  $P_{n,m}^i$  – активные цепи сополимера длиной  $n + m$ , состоящие из  $n$  звеньев мономера  $M^1$  и  $m$  звеньев мономера  $M^2$  и оканчивающиеся мономером  $M^i$ ;  $Q_{n,m}$  – неактивные цепи сополимера длиной  $n + m$ ; параметры  $i, j = 1, 2$  характеризуют тип мономера на конце растущей цепи;  $k_{di}, k_i, k_p, k_{reg}, k_r, k_d$  – константы, характеризующие скорости элементарных реакций.

В приведенном кинетическом механизме  $I$  представляет собой соединение, которое при распаде образует активные частицы (радикалы  $R$ ), запускающие цепную реакцию полимеризации мономеров бутадиена и стирола ( $M^1$  и  $M^2$ ) с целью образования высокомолекулярных соединений (сополимеров). В случае если цепи сополимера содержат реакционноспособные центры (свободные радикалы), то они могут участвовать в дальнейших цепных реакциях. Они представлены в механизме как активные цепи  $P$ , в отличие от неактивных цепей  $Q$ . Регулятор  $S$  добавляется в процесс с целью контроля молекулярной массы сополимеров путем принудительного обрыва образуемых макромолекул.

На основании представленной схемы элементарных реакций выписывается система дифференциальных уравнений, характеризующих изменение материального баланса по каждому компоненту. В силу достаточно большой длины образуемых макромолекул  $P_{n,m}^i$  и  $Q_{n,m}$  используется переход к усредненным молекулярным характеристикам с применением статистических моментов молекулярно-массового распределения:

$$\Psi_k^{M^1} = \sum_{n=0}^{+\infty} \sum_{m=0}^{+\infty} (nM_a + mM_b)^k P_{n,m}^1,$$

$$\Psi_k^{M^2} = \sum_{n=0}^{+\infty} \sum_{m=0}^{+\infty} (nM_a + mM_b)^k P_{n,m}^2,$$

$$\Psi_k^Q = \sum_{n=0}^{+\infty} \sum_{m=0}^{+\infty} (nM_a + mM_b)^k Q_{n,m},$$

где  $M_a, M_b$  – молярная масса мономеров 1-го и 2-го типов. С учетом обозначений

$$C_{M^1} = \sum_{n,m=0}^{\infty} P_{n,m}^1, \quad C_{M^2} = \sum_{n,m=0}^{\infty} P_{n,m}^2 \quad \text{система примет окончательный вид:}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dI}{dt} = -k_{di}I, \\ \frac{dM^1}{dt} = -k_{p11}M^1C_{M^1} - k_{p21}M^1C_{M^2}, \\ \frac{dM^2}{dt} = -k_{p12}M^2C_{M^1} - k_{p22}M^2C_{M^2}, \\ \frac{dS}{dt} = -k_{reg}^1SC_{M^1} - k_{reg}^2SC_{M^2}, \\ \frac{d\Psi_i^{M^1}}{dt} = G_i^1(k_{di}, k_p, k_r, k_d, k_{reg}, I, S, M^1, M^2, C_{M^1}, C_{M^2}), \\ \frac{d\Psi_i^{M^2}}{dt} = G_i^2(k_{di}, k_p, k_r, k_d, k_{reg}, I, S, M^1, M^2, C_{M^1}, C_{M^2}), \\ \frac{d\Psi_i^Q}{dt} = H_i(k_r, k_d, k_{reg}, S, C_{M^1}, C_{M^2}, \Psi^{M^1}, \Psi^{M^2}), \end{array} \right. \quad (2)$$

где  $i = 0..2$ , а функции  $G_i$  и  $H_i$  выражают зависимость моментов молекулярно-массового распределения от соответствующих компонентов [23].

С целью учета переноса реакционной массы из одного реактора в другой вводятся рекуррентные соотношения для каждого компонента системы (2), справедливые при описании реакторов идеального перемешивания:

$$\frac{d\bar{Y}^{(k)}}{dt} = \frac{(\bar{Y}^{(k-1)} - \bar{Y}^{(k)})}{\theta^{(k)}} + \bar{R}_y^{(k)},$$

где  $\theta^{(k)}$  – время нахождения реакционной смеси в  $k$ -том реакторе каскада, а вид  $\bar{R}_y^{(k)}$  определяется исходя из кинетического механизма.

Оценку потребительских свойств бутадиен-стирольного сополимера будем проводить по значениям среднечисленной и среднемассовой молекулярных масс, определяемых из соотношений:

$$M_n = \frac{\Psi_1^{M^1} + \Psi_1^{M^2} + \Psi_1^Q}{\Psi_0^{M^1} + \Psi_0^{M^2} + \Psi_0^Q}, \quad M_w = \frac{\Psi_2^{M^1} + \Psi_2^{M^2} + \Psi_2^Q}{\Psi_1^{M^1} + \Psi_1^{M^2} + \Psi_1^Q}.$$

С целью определения режима подачи регулятора критерий оптимизации был сформирован в виде функционала, отражающего абсолютную разницу расчетных и заданных значений среднечисленной  $\overline{M}_n$  и среднемассовой  $\overline{M}_w$  молекулярных масс:

$$G(X^*(0))(t_{end}) = |M_n - \overline{M}_n| + |M_w - \overline{M}_w| \rightarrow \min. \quad (3)$$

**Результаты исследования.** На основании представленного модельного описания процесса требуется определить дозировку и режим многоточечной подачи регулятора, способствующие получению продукта с заданными молекулярными характеристиками  $\overline{M}_n = 60 \cdot 10^3$  г/моль и  $\overline{M}_w = 180 \cdot 10^3$  г/моль при достижении конверсии 75 %.

Согласно условиям организации непрерывного производства добавление регулятора возможно в начале процесса, а также в 3-й и 6-й по ходу батареи полимеризаторы. В таком случае в рамках реализации генетического алгоритма требуется найти вектор из трех значений, определяющих соответствующую концентрацию регулятора, выражаемую в моль/л для каждого реактора  $X^*(0) = (S_1^*(0), S_3^*(0), S_6^*(0))$ . Поскольку критерием оптимизации является получение продукта с заданной молекулярной массой, то в качестве целевой функции используется абсолютная разность между рассчитываемыми и заданными значениями молекулярных характеристик, представленная ранее в виде функционала (3).

Для решения данной задачи описанный выше генетический алгоритм был запрограммирован с использованием языка Python (версия 3.10.12). Размер начальной популяции  $K$  на 1-м этапе реализации алгоритма определялся четырьмя вариантами решений. В соответствии с условиями организации непрерывного производства были рассчитаны молярные концентрации компонентов реакционной массы: бутадиен – 3,578 моль/л; стирол – 0,796 моль/л; инициатор –  $8,43 \cdot 10^{-4}$  моль/л. Общая концентрация регулятора была задана в интервале ( $2 \cdot 10^{-3}$ ;  $5 \cdot 10^{-3}$ ) моль/л, при этом не менее 50 % от нее должно поступать с основной реакционной смесью в 1-й реактор каскада. Перераспределение подачи регулятора и смещение основной массы в 3-й или 6-й полимеризаторы способствуют значительному повышению молекулярного веса продукта в начале процесса. В этом случае наполнение векторов  $S_1^1, S_3^1, S_6^1$  определялось в соответствии с выражениями:



$$S_1^1 = (2 \cdot 10^{-3}; 2,33 \cdot 10^{-3}; 2,67 \cdot 10^{-3}; 3 \cdot 10^{-3}),$$

$$S_3^1 = (0; 0,33 \cdot 10^{-3}; 0,67 \cdot 10^{-3}; 10^{-3}),$$

$$S_6^1 = (0; 0,33 \cdot 10^{-3}; 0,67 \cdot 10^{-3}; 10^{-3}).$$

На 1-й итерации выполнения алгоритма на основании наполнения векторов  $S_1^1, S_3^1, S_6^1$  было сформировано четыре возможных решения  $X_i^1$  ( $i = 1...4$ ):

$$X_1^1 = (2 \cdot 10^{-3}; 0; 0),$$

$$X_2^1 = (2,33 \cdot 10^{-3}; 0,33 \cdot 10^{-3}; 0,33 \cdot 10^{-3}),$$

$$X_3^1 = (2,67 \cdot 10^{-3}; 0,67 \cdot 10^{-3}; 0,67 \cdot 10^{-3}),$$

$$X_4^1 = (3 \cdot 10^{-3}; 10^{-3}; 10^{-3}).$$

Затем для каждого из  $X_i^1$  была проведена оценка степени приспособленности  $G(X_i^1)$  и после их нормализации рассчитаны соответствующие вероятности  $p(X_i^1)$  выбора каждой такой особи для формирования потомков:

$$G(X_1^1) = 391 \cdot 10^3, \quad p(X_1^1) = 0,1,$$

$$G(X_2^1) = 21,5 \cdot 10^3, \quad p(X_2^1) = 0,32,$$

$$G(X_3^1) = 61 \cdot 10^3, \quad p(X_3^1) = 0,3,$$

$$G(X_4^1) = 10^5, \quad p(X_4^1) = 0,28.$$

Для формирования родительского пула значения  $p(X_i^1)$  были последовательно расположены на отрезке от 0 до 1 с образованием интервалов –  $[0; 0,1]$ ,  $(0,1; 0,42]$ ,  $(0,42; 0,72]$  и  $(0,72; 1]$ . Последующая генерация четырех случайных чисел  $r_i$  определяла выбор соответствующих  $X_i^1$ . Поскольку в ходе вычислительных испытаний произошло двукратное попадание  $r_i$  во 2-й интервал, а также однократное в 3-й и 4-й интервалы, то было принято, что в результате стохастического отбора был сформирован родительский пул, в который вошли решения  $(X_2^1; X_2^1; X_3^1; X_4^1)$ . Далее из родительского пула образование потомков проводилось с использованием арифметического оператора кроссинговера:

$$X_{1,i}^2 = aX_{2,i}^1 + (1-a)X_{2,i}^1,$$

$$X_{2,i}^2 = aX_{2,i}^1 + (1-a)X_{3,i}^1,$$

$$X_{3,i}^2 = aX_{2,i}^1 + (1-a)X_{4,i}^1,$$

$$X_{4,i}^2 = aX_{3,i}^1 + (1-a)X_{4,i}^1,$$

где  $i = 1...3$ . В случае использования равномерного оператора кроссинговера значение  $a = 0,5$ , а потомки принимают значения:

$$X_1^2 = (2,33 \cdot 10^{-3}; 0,33 \cdot 10^{-3}; 0,33 \cdot 10^{-3}),$$

$$X_2^2 = (2,5 \cdot 10^{-3}; 0,5 \cdot 10^{-3}; 0,5 \cdot 10^{-3}),$$

$$X_3^2 = (2,67 \cdot 10^{-3}; 0,67 \cdot 10^{-3}; 0,67 \cdot 10^{-3}),$$

$$X_4^2 = (2,83 \cdot 10^{-3}; 0,83 \cdot 10^{-3}; 0,83 \cdot 10^{-3}).$$

Для очередного поколения проводится возможная процедура мутации, определяющая случайное изменение найденных элементов, и оценка степени приспособленности.

Поскольку целью решения задачи является нахождение вектора  $X^*(0) = (S_1^*(0), S_3^*(0), S_6^*(0))$ , позволяющего получить минимальное значение целевой функции вида (3), то стандартным условием прерывания алгоритма является достижение предельного количества итераций или выполнение условия допустимой точности:

$$G(X^*(0))(t_{end}) < \varepsilon,$$

где  $\varepsilon$  – точность решения задачи, равная  $10^3$  для заданных условий решения задачи.

Остановка генетического алгоритма может производиться также на основании зафиксированного критически малого изменения значения функции приспособленности в течение нескольких итераций, свидетельствующего о том, что наилучшее решение достигнуто.

В результате серии проведенных вычислительных испытаний было обнаружено, что задача имеет ряд решений, каждое из которых способствует получению продукта с заданными молекулярными характеристиками. В таблице представлена случайная выборка из 10 полученных в ходе запуска программы решений задачи.

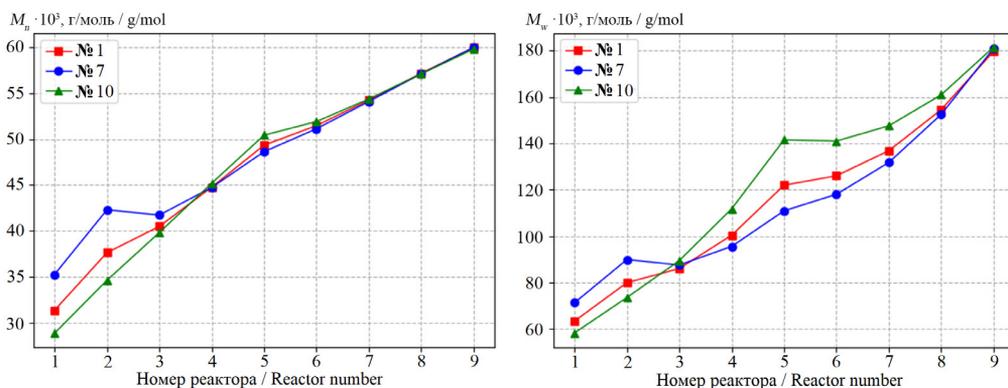
Т а б л и ц а  
T a b l e

Результаты вычислений  
Calculation results

Выборка решений задачи / Selection of the solutions for the problem	Дозировка регулятора по реакторам каскада, % / Dosage of the regulator across the cascade reactors, %			Суммарная концентрация регулятора, $10^{-3}$ моль/л / Total concentration of the regulator, $10^{-3}$ mol/l	Количество итераций / Number of iterations
	1 реактор / 1 reactor	3 реактор / 3 reactor	6 реактор / 6 reactor		
1*	78,41	12,71	8,88	3,364	93
2	76,95	14,10	8,95	3,343	16
3	78,15	12,96	8,89	3,339	24
4	74,93	17,91	7,16	3,362	56
5	73,30	19,33	7,37	3,348	41
6	75,06	16,97	7,96	3,328	37
7*	69,79	24,16	6,06	3,359	41
8	80,41	10,20	9,39	3,397	39
9	83,10	6,38	10,52	3,406	73
10*	84,87	2,68	12,45	3,380	134

Анализ полученных результатов показывает, что в большинстве проведенных вычислительных испытаний решение достигается менее чем за 100 итераций, а необходимая суммарная концентрация регулятора находится в диапазоне  $[3,3 \cdot 10^{-3}; 3,4 \cdot 10^{-3}]$  моль/л. В случаях, когда дозировку регулятора в 1-й реактор каскада рекомендуется задать в интервале 70–75 %, подача регулятора в 6-й реактор предлагается минимальной. Увеличение дозировки подачи регулятора в 1-й реактор каскада до 80–85 % способствует перераспределению остальной концентрации и необходимости увеличения дозировки в 6-й реактор каскада.

На рисунке 2 представлены зависимости среднечисленной и среднемассовой молекулярных масс, полученные для трех наиболее различающихся режимов подачи регулятора (№ 1, № 7 и № 10). Анализ рисунков показывает, что предложенные варианты решений, представленные в таблице, во всех случаях позволяют получить заданные молекулярные характеристики на выходе из последнего реактора при достижении конверсии 75 %. Динамика молекулярных характеристик в течение всего процесса полимеризации для всех трех случаев носит различный характер.



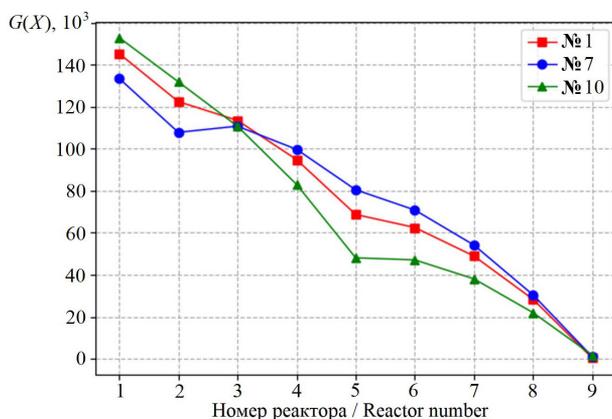
Р и с. 2. Зависимость среднечисленной  $M_n$  и среднемассовой  $M_w$  молекулярных масс от номера полимеризатора для трех различных режимов подачи регулятора (№ 1, № 7 и № 10)

F i g. 2. Dependence of the average-number and average-mass molecular weight on the polymerizer number for three different regulator supply modes (№ 1, № 7 and № 10)

В частности, кривая, построенная по условиям решения № 10, демонстрирует низкий темп роста молекулярной массы в 1-х реакторах каскада в связи с достаточно большим объемом регулятора, заложенным в начале процесса. Стремительный расход регулятора и достаточно малый остаточный объем, подаваемый в 3-й реактор каскада, способствуют опережающему темпу роста молекулярной массы в сравнении с другими кривыми. Очередная подача регулятора в 6-й реактор каскада позволяет значительно снизить темпы роста  $M_n$ ,  $M_w$  и способствовать достижению заданных значений.

Также была построена зависимость соответствующего критерия оптимизации, представленного ранее в виде функционала (3), для трех различных режимов подачи регулятора (рис. 3). Визуальный анализ полученных кривых позволяет

отметить, что скорость убывания критерия оптимизации различается в зависимости от используемого режима подачи регулятора (№ 1, № 7 или № 10), однако в конечной точке способствует достижению заданного критерия эффективности.



Р и с. 3. Зависимость критерия оптимизации  $G(X)$  от номера полимеризатора для трех различных режимов подачи регулятора (№ 1, № 7 и № 10)

F i g. 3. Dependence of the optimization criterion on the polymerizer number for three different regulator supply modes (№ 1, № 7 and № 10)

**Обсуждение и заключение.** Таким образом, разработаны метод и алгоритм решения задачи поиска оптимального режима многоточечной подачи регулятора, способствующей получению продукта с заданной молекулярной массой. В основе метода решения и его программной реализации лежит генетический алгоритм, относящийся к классу эвристических методов оптимизации и основанный на механизме создания популяции потенциальных решений с использованием вероятностных законов. Генетический алгоритм при исследовании и оптимизации сложных многофакторных физико-химических систем является предпочтительным, поскольку способствует нахождению глобального оптимума благодаря случайному характеру при поиске решений и возможности поддерживать их разнообразие в популяции.

Применение генетического алгоритма для поиска оптимального режима подачи регулятора при получении бутадиен-стирольного сополимера позволяет эффективно искать глобальные оптимумы в сложном многомерном пространстве параметров, в отличие от классических методов оптимизации, ориентированных на поиск локальных решений. Классические численные методы, реализованные во многих библиотеках и программных продуктах, часто требуют определения направления движения к оптимуму в каждой точке. Особые сложности возникают в условиях отсутствия аналитического представления оптимизируемой функции, например, в рамках реализации имитационного подхода к моделированию. Кроме того, генетический алгоритм позволяет осуществлять поиск одного или нескольких параметров системы в дискретном множестве переменных, характерном для задач поиска технологических параметров промышленного производства.



К сожалению, реализация генетического алгоритма в условиях идентификации большого количества параметров системы гораздо менее эффективна по времени ведения расчетов. Возможность интеграции технологий распараллеливания позволяет минимизировать эти потери за счет распределения задач между несколькими процессорами или вычислительными узлами. Кроме того, при решении многофакторных задач оптимизации требуется тщательная настройка параметров алгоритма, определяющая необходимость постоянного эмпирического анализа с целью оптимального использования данного метода.

В частности, с использованием разработанного метода и алгоритма была решена задача идентификации режима трехточечного регулирования молекулярной массы для непрерывного процесса получения бутадиен-стирольного сополимера. Программная реализация данного алгоритма и проведенные вычислительные испытания позволили оценить различные режимы трехточечного регулирования молекулярной массы с применением трет-додецилмеркаптана и получить серию решений задачи оптимизации, визуализация которых демонстрирует различную динамику молекулярной массы в течение всего процесса. Очевидно, что в соответствующих условиях организации промышленного производства разнообразие решений дает возможность управления процессом синтеза полимеров в случае постоянного мониторинга физико-химических характеристик продукта.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Способ регулирования процесса эмульсионной сополимеризации : патент 1466516 Российская Федерация / Грачев Г. М. [и др.]. № 4069311/05 ; заявл. 26.05.1986 ; опубл. 15.12.1994. URL: <https://clck.ru/3DzamK> (дата обращения: 15.05.2024).
2. Моделирование динамических режимов процессов синтеза полимеров на основе метода моментов для мультимодальных распределений / С. Л. Подвальный [и др.] // Известия РАН. Серия физическая. 2016. Т. 80, № 9. С. 1261–1262. EDN: [WLNMBF](https://www.elibrary.ru/WLNMBF)
3. Янборисов В. М., Козлов В. Г. Моделирование полимеризации изопрена в присутствии каталитической системы  $TiCl_4$ - $BuCl$  методом Монте-Карло // Вестник Башкирского университета. 2021. Т. 26, № 1. С. 52–57. EDN: [EWISKP](https://www.elibrary.ru/EWISKP)
4. Modified Concept of Bond Blocks and its Applications / K. A. Tereshchenko [et al.] // Chemical Engineering Journal. 2021. Vol. 433. Part 2. Article no. 133537. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2021.133537>
5. Thakur A. K., Gupta S. K., Chaudhari P. Slurry-Phase Ethylene Polymerization Processes: a Review on Multiscale Modeling and Simulations // Reviews in Chemical Engineering. 2022. Vol. 38, No. 5. P. 539–568. <https://doi.org/10.1515/revce-2020-0048>
6. Kinetic Modeling of the Synthesis of Poly(4-vinylpyridine) Macro-Reversible Addition-Fragmentation Chain Transfer Agents for the Preparation of Block Copolymers / F. Kandelhard [et al.] // Industrial & Engineering Chemistry Research. 2023. Vol. 62, Issue 22. P. 8696–8708. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.3c00607>
7. Furuya T., Koga T. Molecular Simulation of Polymer Gels Synthesized by Free Radical Copolymerization: Effects of Concentrations and Reaction Rates on Structure and Mechanical Properties // Polymer. 2023. Vol. 279. Article no. 126012. <https://doi.org/10.1016/j.polymer.2023.126012>
8. Kandelhard F., Georgopoulos P. A Kinetic and Heat Balance Model for Anionic Batch Block Copolymerization of Styrene and Isoprene // Chemie Ingenieur Technik. 2023. Vol. 95, Issue 5. P. 754–760. <https://doi.org/10.1002/cite.202200205>

9. Model-Assisted Optimization of RAFT Polymerization in Micro-Scale Reactors – A Fast Screening Approach / F. Kandelhard [et al.] // *Macromolecular Reaction Engineering*. 2021. Vol. 15, Issue 4. Article no. 2000058. <https://doi.org/10.1002/mren.202000058>
10. Kinetic Approach to Modeling the Radical Polymerization of Butyl Acrylate in the Presence Dibenzyl Trithiocarbonate / N. V. Ulitin [et al.] // *Russian Journal of Physical Chemistry B*. 2012. Vol. 6. P. 761–768. <https://doi.org/10.1134/S1990793112060218>
11. Study of Kinetics of Isoprene Polymerization in the Presence of Neodymium-Containing Catalytic Systems Modified in Turbulent Flows / E. N. Miftakhov [et al.] // *Russian Journal of Applied Chemistry*. 2021. Vol. 94. P. 77–83. <https://doi.org/10.1134/S1070427221010110>
12. Mavrantzas V. G. Using Monte Carlo to Simulate Complex Polymer Systems: Recent Progress and Outlook // *Frontiers in Physics*. 2021. Vol. 9. <https://doi.org/10.3389/fphy.2021.661367>
13. Monte Carlo Simulation of Surface-Initiated Polymerization: Heterogeneous Reaction Environment / B. Yang [et al.] // *Macromolecules*. 2022. Vol. 55, Issue 6. P. 1970–1980. <https://doi.org/10.1021/acs.macromol.1c02575>
14. Application of the Monte Carlo Method in Modeling the Isoprene Polymerization Process in the Presence of the Polycentric Titanium-Containing Catalytic System / S. Mustafina [et al.] // *Journal of Physics: Conference Series*. 2021. Article no. 012127. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1902/1/012127>
15. Katoch S., Chauhan S. S., Kumar V. A Review on Genetic Algorithm: Past, Present, and Future // *Multimedia Tools and Applications*. 2021. Vol. 80. P. 8091–8126. <https://doi.org/10.1007/s11042-020-10139-6>
16. Kasat R. B., Ray A. K., Gupta S. K. Applications of Genetic Algorithm in Polymer Science and Engineering // *Materials and Manufacturing Processes*. 2003. Vol. 18, Issue 3. P. 523–532. <https://doi.org/10.1081/AMP-120022026>
17. Polymer Design Using Genetic Algorithm and Machine Learning / C. Kim [et al.] // *Computational Materials Science*. 2021. Vol. 186. Article no. 110067. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.110067>
18. Xu D., Xu H. Application of Genetic Algorithm in Model Music Composition Innovation // *Applied Mathematics and Nonlinear Sciences*. 2023. Vol. 9, Issue 1. <https://doi.org/10.2478/amns.2023.2.00070>
19. A Multifactorial Cellular Genetic Algorithm for Multimodal Multitask Optimization / E. Osaba [et al.] // *Conference: 2022 IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC)*. 2022. P. 1–8. <https://doi.org/10.1109/CEC55065.2022.9870324>
20. Latent Crossover for Data-Driven Multifidelity Topology Design / T. Kii [et al.] // *Journal of Mechanical Design*. 2024. Vol. 146, Issue 5. <https://doi.org/10.1115/1.4064979>
21. Aladdin A. M., Rashid T. A New Lagrangian Problem Crossover – A Systematic Review and Meta-Analysis of Crossover Standards // *Systems*. 2023. Vol. 11, Issue 3. <https://doi.org/10.3390/systems11030144>
22. Pretorius K., Pillay N. Neural Network Crossover in Genetic Algorithms Using Genetic Programming // *Genetic Programming and Evolvable Machines*. 2024. Vol. 25. Article no. 7. <https://doi.org/10.1007/s10710-024-09481-7>
23. Алгоритм оценки молекулярных характеристик полимерного продукта в условиях многоточечного регулирования / Э. Н. Мифтахов [и др.] // *Инженерные технологии и системы*. 2023. Т. 33, № 2. С. 270–287. <https://doi.org/10.15507/2658-4123.033.202302.270-287>

## REFERENCES

1. Grachev G.M., Klement'ev V.A., Kudryavtsev L.D., Molodyka A.V., Papkov V.N., Polumestnyi V.N., [et al.]. [Method for Regulating the Emulsion Copolymerization Process]. Patent 1466516 Russian Federation. 1994 December 15. (In Russ.) Available at: <https://clck.ru/3DzamK> (accessed 15.05.2024).
2. Podvalny S.L., Belyanin A.M., Tikhomirov S.G., Khvostov A.A. [Modeling of Dynamic Modes of Polymer Synthesis Processes Based on the Method of Moments for Multimodal Distributions]. *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*. 2016;80(9):1261–1262. (In Russ.) EDN: WLNMBF



3. Ianborisov V.M., Kozlov V.G. Monte-Carlo Modeling of Isoprene Polymerization in the Presence of the  $\text{TiCl}_4$ - $\text{BuCl}$  Catalytic System. *Bulletin of the Bashkir University*. 2021;26(1):52–57. (In Russ., abstract in Eng.) EDN: EWISKP
4. Tereshchenko K.A., Shiyani D.A., Ulitin N.V., Kolesov S.V. Deberdeev R.Y., Kharlampidi K.E. Modified Concept of Bond Blocks and its Applications. *Chemical Engineering Journal*. 2021;433(2):133537. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2021.133537>
5. Thakur A.K., Gupta S.K., Chaudhari P. Slurry-Phase Ethylene Polymerization Processes: a Review on Multiscale Modeling and Simulations. *Reviews in Chemical Engineering*. 2022;38(5):539–568. <https://doi.org/10.1515/revce-2020-0048>
6. Kandelhard F., Pashayev E., Schymura J., Georgopoulos P. Kinetic Modeling of the Synthesis of Poly(4-vinylpyridine) Macro-Reversible Addition-Fragmentation Chain Transfer Agents for the Preparation of Block Copolymers. *Industrial & Engineering Chemistry Research*. 2023;62(22):8696–8708. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.3c00607>
7. Furuya T., Koga T. Molecular Simulation of Polymer Gels Synthesized by Free Radical Copolymerization: Effects of Concentrations and Reaction Rates on Structure and Mechanical Properties. *Polymer*. 2023;279:126012. <https://doi.org/10.1016/j.polymer.2023.126012>
8. Kandelhard F., Georgopoulos P. A Kinetic and Heat Balance Model for Anionic Batch Block Copolymerization of Styrene and Isoprene. *Chemie Ingenieur Technik*. 2023;95(5):754–760. <https://doi.org/10.1002/cite.202200205>
9. Kandelhard F., Schuldt K., Schymura J., Georgopoulos P., Abetz V. Model-Assisted Optimization of RAFT Polymerization in Micro-Scale Reactors – A Fast Screening Approach. *Macromolecular Reaction Engineering*. 2021;15(4):2000058. <https://doi.org/10.1002/mren.202000058>
10. Ulitin N.V., Nasyrov I.I., Deberdeev T.R., Berlin A.A. Kinetic Approach to Modeling the Radical Polymerization of Butyl Acrylate in the Presence of Dibenzyl Trithiocarbonate. *Russian Journal of Physical Chemistry B*. 2012;6:761–768. <https://doi.org/10.1134/S1990793112060218>
11. Miftakhov E.N., Nasyrov I.Sh., Mustafina S.A., Zakharov V.P. Study of Kinetics of Isoprene Polymerization in the Presence of Neodymium-Containing Catalytic Systems Modified in Turbulent Flows. *Russian Journal of Applied Chemistry*. 2021;94:77–83. <https://doi.org/10.1134/S1070427221010110>
12. Mavrantzas V.G. Using Monte Carlo to Simulate Complex Polymer Systems: Recent Progress and Outlook. *Frontiers in Physics*. 2021;9. <https://doi.org/10.3389/fphy.2021.661367>
13. Yang B., Liu S., Ma J., Yang Y., Li J., Jiang B.-P., [et al.]. Monte Carlo Simulation of Surface-Initiated Polymerization: Heterogeneous Reaction Environment. *Macromolecules*. 2022;55(6):1970–1980. <https://doi.org/10.1021/acs.macromol.1c02575>
14. Mustafina S., Mikhailova T., Miftakhov E., Podvalnyi E. Application of the Monte Carlo Method in Modeling the Isoprene Polymerization Process in the Presence of the Polycentric Titanium-Containing Catalytic System. *Journal of Physics: Conference Series*. 2021:012127. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1902/1/012127>
15. Katoch S., Chauhan S.S., Kumar V. A Review on Genetic Algorithm: Past, Present, and Future. *Multimedia Tools and Applications*. 2021;80:8091–8126. <https://doi.org/10.1007/s11042-020-10139-6>
16. Kasat R.B., Ray A.K., Gupta S.K. Applications of Genetic Algorithm in Polymer Science and Engineering. *Materials and Manufacturing Processes*. 2003;18(3):523–532. <https://doi.org/10.1081/AMP-120022026>
17. Kim C., Batra R., Chen L., Tran H., Ramprasad R. Polymer Design Using Genetic Algorithm and Machine Learning. *Computational Materials Science*. 2021;186:110067. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.110067>
18. Xu D., Xu H. Application of Genetic Algorithm in Model Music Composition Innovation. *Applied Mathematics and Nonlinear Sciences*. 2023;9(1). <https://doi.org/10.2478/amns.2023.2.00070>
19. Osaba E., Del Ser J., Martinez A.D., Lobo J.L. A Multifactorial Cellular Genetic Algorithm for Multimodal Multitask Optimization. *Conference: 2022 IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC)*. 2022:1–8. <https://doi.org/10.1109/CEC55065.2022.9870324>
20. Kii T., Yaji K., Fujita K., Sha Z., Seepersad C.C. Latent Crossover for Data-Driven Multifidelity Topology Design. *Journal of Mechanical Design*. 2024;146(5). <https://doi.org/10.1115/1.4064979>

21. Aladdin A.M., Rashid T.A. A New Lagrangian Problem Crossover – A Systematic Review and Meta-Analysis of Crossover Standards. *Systems*. 2023;11(3). <https://doi.org/10.3390/systems11030144>
22. Pretorius K., Pillay N. Neural Network Crossover in Genetic Algorithms Using Genetic Programming. *Genetic Programming and Evolvable Machines*. 2024;25:7. <https://doi.org/10.1007/s10710-024-09481-7>
23. Miftakhov E.N., Mustafina S.A., Nasyrov I.Sh., Morozkin N.D. Algorithm for Evaluation of the Molecular Characteristics of a Polymer Product Under Conditions of Multipoint Control. *Engineering Technologies and Systems*. 2023;33(2):270–287. (In Russ., abstract in Eng.) <https://doi.org/10.15507/2658-4123.033.202302.270-287>

*Об авторе:*

**Мифтахов Эльдар Наилевич**, доктор физико-математических наук, научный сотрудник Уфимского университета науки и технологий (450076, Российская Федерация, г. Уфа, ул. Заки Валиди, д. 32), ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-0471-5949>, Researcher ID: AAA-5885-2019, Scopus ID: 56178153800, SPIN-код: 6314-8818, [promif@mail.ru](mailto:promif@mail.ru)

*Автор прочитал и одобрил окончательный вариант рукописи.*

*Поступила в редакцию 18.08.2024; поступила после рецензирования 02.09.2024;  
принята к публикации 09.09.2024*

*About the author:*

**Eldar N. Miftakhov**, Dr.Sci. (Phys.-Math.), Research Officer, Ufa University of Science and Technology (32 Zaki Validi St., Ufa 450076, Russian Federation), ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-0471-5949>, Researcher ID: AAA-5885-2019, Scopus ID: 56178153800, SPIN-code: 6314-8818, [promif@mail.ru](mailto:promif@mail.ru)

*Author have read and approved the final manuscript.*

*Submitted 18.08.2024; revised 02.09.2024; accepted 09.09.2024*