

УДК 517.977.58, 004.9, 66.09

Автоматизированная система идентификации условий проведения гомогенных и гетерогенных реакций в задачах многоцелевой оптимизации*

К.Ф. Коледина^{1,2}, С.Н. Коледин², И.М. Губайдуллин^{1,2}

¹Институт нефтехимии и катализа Российской академии наук, просп. Октября, 141, Уфа, 450075

²Уфимский государственный нефтяной технический университет, ул. Космонавтов, 1, Уфа, 450062

E-mails: koledinakamila@mail.ru (Коледина К.Ф.), koledinsrg@gmail.com (Коледин С.Н.), irekmars@mail.ru (Губайдуллин И.М.)

Коледина К.Ф., Коледин С.Н., Губайдуллин И.М. Автоматизированная система идентификации условий проведения гомогенных и гетерогенных реакций в задачах многоцелевой оптимизации // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2019. — Т. 22, № 2. — С. 137–151.

Автоматизированная система идентификации условий проведения гомогенных и гетерогенных реакций включает в себя математическое моделирование химической реакции, определение критериев оптимизации условий ее проведения и варьируемых параметров, постановку и решение задачи многоцелевой оптимизации и задачи оптимального управления, разработку эффективных алгоритмов вычислительного эксперимента. В работе проведено моделирование и оптимизация гомогенной и гетерогенной каталитических реакций. Определены оптимальные условия проведения реакций для достижения заданных критериев.

DOI: 10.15372/SJNM20190202

Ключевые слова: автоматизированная система идентификации условий проведения гомогенных и гетерогенных реакций, кинетическая модель, многоцелевая оптимизация, островная модель распараллеливания, декомпозиция автоматизированной системы.

Koledina K.F., Koledin S.N., Gubaydullin I.M. Automated identification system of conditions for homogeneous and heterogeneous reactions in multipurpose optimization problems // Siberian J. Num. Math. / Sib. Branch of Russ. Acad. of Sci. — Novosibirsk, 2019. — Vol. 22, № 2. — P. 137–151.

An automated system for identifying the conditions of homogeneous and heterogeneous reactions includes mathematical modeling of a chemical reaction, determination of optimization criteria conditions for variable parameters, setting and multipurpose optimization problem solution and an optimal control problem, development of efficient algorithms for a computing experiment. Modeling and optimization of a homogeneous and heterogeneous catalytic reactions are carried out. Optimal conditions for carrying out reactions to achieve the specified criteria are determined.

Keywords: automated system for identification conditions for carrying out homogeneous and heterogeneous reactions, kinetic model, multipurpose optimization, island model of parallelization, decomposition of automated system.

*Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 18-37-00015 (пп. 4, 6), проект № 18-07-00341), при поддержке стипендии Президента Российской Федерации (проект № СП-669.2018.5).

1. Введение

Разработка химических реакторов методом математического моделирования основана на всестороннем изучении и познании технологического процесса. Результатом исследования задачи химической кинетики является кинетическая модель реакции, включающая в себя кинетические уравнения, закономерность изменения концентраций веществ по времени, значения кинетических параметров, физико-химические выводы по реакции. Кинетическая модель, выписанная на основе закона действующих масс, является фундаментальным знанием о химическом процессе. На основе кинетической модели и критерия оптимизации возможна постановка оптимизационной задачи, т. е. теоретическая оптимизация: определение самых лучших в некотором смысле условий, не принимая во внимание возможность их физической реализации [1]. Нередко невозможность физических реализаций, имеющих место в земных условиях, достаточно хорошо воспроизводится в условиях космического пространства, например, в работах [2, 3] показано образование молекулярного водорода.

Постановка задачи оптимизации условий проведения реакции предполагает наличие целевых функций, варьируемых параметров и некоторых ограничений на варьируемые параметры [4]. При одновременном исследовании нескольких взаимонезависимых критериев оптимизации говорят о задаче многоцелевой оптимизации (МЦО) [5]. Кроме того, условия проведения реакции могут быть как статическими (начальное количество катализатора, постоянная температура, давление), так и динамическими (подпитка реагентами в ходе реакции, изменение температуры). Исследование таких динамических варьируемых параметров при оптимизации химической реакции является задачей оптимального управления [6, 7]. Таким образом, идентификация оптимальных условий проведения сложных каталитических реакций приводит к задачам одноцелевой оптимизации, многоцелевой оптимизации и оптимального управления.

Декомпозицию автоматизированной системы идентификации условий проведения сложных каталитических реакций проиллюстрируем с помощью методологии IDEF0 [6].

На рисунке 1 представлена контекстная диаграмма процесса идентификации условий проведения сложной каталитической реакции в задачах многоцелевой оптимизации и оптимального управления. Входными параметрами для разработки математической модели реакции являются механизм реакции, экспериментальные данные и некоторые физико-химические ограничения, характеризующие специфику процесса (эти параметры необходимы для построения кинетической модели реакции), а также некоторые известные значения кинетических параметров (при наличии). Входными параметрами для оптимизации являются критерии оптимизации, перечень варьируемых и управляющих параметров.

Результатом решения задачи (выходом) является усовершенствованный процесс: формулировка оптимальных условий проведения процесса. Управлением являются методы, используемые при решении задачи [8]: методы решения прямой кинетической задачи, оптимизационные методы и методы решения задачи многоцелевой оптимизации. Механизмом решения поставленной задачи является автоматизированная система идентификации условий проведения гомогенных и гетерогенных реакций.

На рис. 2 приведена схема взаимодействия поставленных задач. На первом этапе необходимо построить математическую модель исследуемого процесса [9]. На основе математической модели поставить и решить задачу одноцелевой оптимизации с определением оптимальных условий проведения процесса. Далее, при необходимости, провести многоцелевую оптимизацию, если имеют место более одного взаимонезависимого критерия



Рис. 1. Контекстная диаграмма идентификации оптимальных условий проведения сложных каталитических реакций

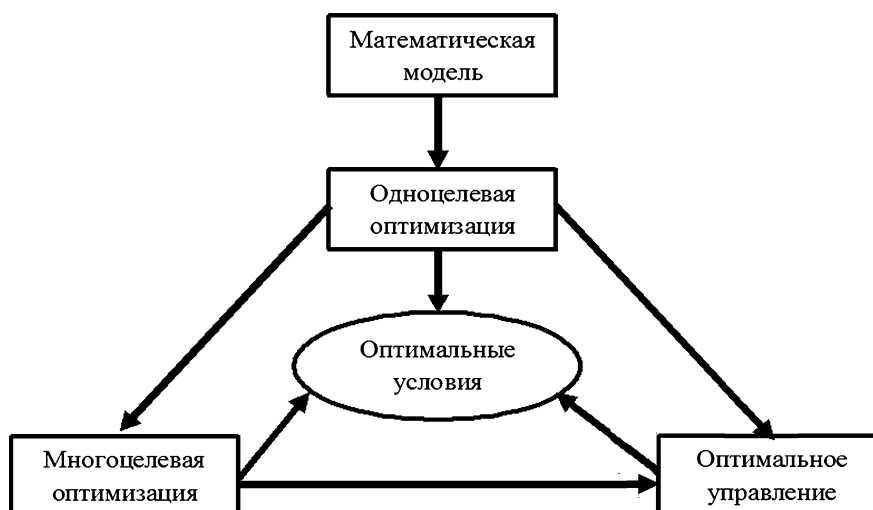


Рис. 2. Схема взаимодействия задач оптимизации условий проведения реакции

оптимизации, или поставить задачу оптимального управления, если имеется возможность управлять исследуемым процессом во времени с влиянием на рассматриваемые критерии.

2. Математическая модель гомогенных и гетерогенных каталитических реакций

Математическая модель задач химической кинетики представляет собой систему обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений (СОНДУ) с начальными данными, т. е. задачу Коши [9–11]:

$$\begin{aligned} \frac{dx_i}{dt} &= \sum_{j=1}^J \nu_{ij} w_j, \quad i = 1, \dots, I; \\ w_j &= k_j \prod_{i=1}^I x_i^{|\alpha_{ij}|} - k_{-j} \prod_{i=1}^I x_i^{\beta_{ij}}; \\ k_j &= k_j^0 \exp\left(-\frac{E_j}{RT}\right); \\ t &\in [0, t^*], \end{aligned} \quad (1)$$

с начальными условиями: $x_i(0) = x_i^0$ при $t = 0$; и где ν_{ij} — стехиометрические коэффициенты, J — количество стадий, x_i — концентрации веществ, участвующих в реакции (моль/л), I — количество веществ, w_j — скорость j -й стадии (1/мин), E_j — энергии активации прямой и обратной реакций (ккал/моль), R — газовая постоянная, равная 8.31 Дж/(моль×К), T — температура (К), α_{ij} — отрицательные элементы матрицы (ν_{ij}), β_{ij} — положительные элементы (ν_{ij}), k_j^0 — предэкспоненциальные множители (1/с), t^* — время проведения реакции (с).

При рассмотрении гетерогенных реакций возникает необходимость учета адсорбции и десорбции реагентов на поверхность катализатора с соответствующими значениями адсорбционных коэффициентов [12, 13]. В этом случае в СОНДУ (1) добавляется учет доли поверхности катализатора, занятой реагентом (2), (3),

$$\Theta_i = \frac{b_i \frac{x_i}{V}}{1 + \sum_{i=1}^I b_i \frac{x_i}{V}}, \quad (2)$$

где Θ_i — доля поверхности катализатора, занятая i -м компонентом, b_i — коэффициент адсорбции i -го вещества при применении механизма Ленгмюра–Хиншельвуда об адсорбции веществ реакции на твердом катализаторе, V — объем реакционной смеси (м³), определяемый, исходя из геометрических характеристик реактора [12],

$$\Theta^* = 1 - \sum_{i=1}^I \Theta_i, \quad (3)$$

где Θ^* — свободная доля поверхности катализатора в любой момент времени.

Объектами исследования являются каталитические реакции: гомогенная реакция диметилкарбоната со спиртами в присутствии гексакарбонилвольфрама и гетерогенная реакция дегидрирования этанола в этилацетат.

Гомогенная жидкофазная каталитическая реакция спиртов с диметилкарбонатом (ДМК) в присутствии металлокомплексного катализатора $W(CO)_6$ является новой и относится к области “зеленой химии” [14]. Диметилкарбонат является эффективным заменителем существующих токсичных реагентов: диметилсульфата и метилгалогенида [15–17]. Продуктами реакции являются алкилметиловые эфиры и алкилметилкарбонаты. Алкилметиловые эфиры применяются в качестве добавки к моторному маслу, а также используются как промежуточные продукты для получения лекарств, красителей, ароматических добавок. Карбонаты используются в качестве органических растворителей, в качестве полезных защитных групп для спиртов и фенолов в органическом синтезе, в качестве растворителя электролита в литий-ионных батареях и как мономеры для бесфосгенного синтеза полиуретанов и поликарбонатов. Ранее в работах [18, 19] была построена математическая модель реакции в виде системы обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений. На основе предложенной схемы протекания реакции построена кинетическая модель реакции. Найдены кинетические параметры для различных условий проведения реакции (таблица 1).

Таблица 1. Кинетические параметры каталитической реакции спиртов с ДМК в присутствии $W(CO)_6$ (приведенные к одной размерности)

N	Стадии	$\ln k_j^0$, мин ⁻¹	E_j , ккал/моль
1	$W(CO)_6 \rightarrow W(CO)_5^+ + CO$	38.4 ± 0.01	31.7 ± 0.01
2	$W(CO)_5^+ + MeOCO_2Me \rightarrow W(CO)_5CO_2Me + MeO^-$	30.4 ± 0.1	30.4 ± 0.6
3	$W(CO)_5CO_2Me + ROH \rightarrow ROMe + CO_2 + HW(CO)_5$	18.2 ± 0.2	17.1 ± 0.5
4	$W(CO)_5CO_2Me + ROH \rightarrow ROCO_2Me + HW(CO)_5$	20.8 ± 0.1	21.7 ± 0.3
5	$HW(CO)_5 + MeO^- \rightarrow MeOH + W(CO)_5^+$	18.9 ± 0.01	12.1 ± 0.01

Реакция дегидрирования этанола в этилацетат является реакцией из области “зеленой химии”, сырьем является биоэтанол [10]. Целевой продуктом реакции, этилацетат, является низкотоксичным. Этилацетат используют в качестве растворителя, при производстве лакокрасочных материалов и др. В работе [12] исследуется применение медь-цинк-хромовых катализаторов, приводящее к высокой селективности реакции. Газофазная реакция на металлокомплексном катализаторе является гетерогенной реакцией. В работе [12] приведено детальное исследование кинетики реакции дегидрирования этанола в этилацетат. Приведена схема протекания реакции с основными обратимыми стадиями (табл. 2). Определены значения кинетических и адсорбционных параметров [12].

Таблица 2. Схема химических превращений и кинетические уравнения реакции дегидрирования этанола в этилацетат

N	Стадии	Кинетические уравнения
1	$C_2H_5OH(\Theta_1) \rightleftharpoons CH_3CHO(\Theta_2) + H_2(\Theta_3)$	$w_1 = k_1\Theta_1 - k_3\Theta_2\Theta_3$
2	$C_2H_5OH(\Theta_1) + CH_3CHO(\Theta_2) \rightleftharpoons CH_3COOC_2H_5(\Theta_4) + H_2(\Theta_3)$	$w_2 = k_2\Theta_1\Theta_2 - k_4\Theta_4\Theta_3$

3. Оптимизация условий проведения каталитических реакций

При оптимизации каталитических реакций в качестве критериев оптимизации могут выступать как физико-химические, так и экономические показатели. Рассмотрим следующие критерии оптимизации условий проведения химических реакций на основе кинетической модели:

1) выход целевого продукта

$$x_{\text{prod}}(t^*, T, x^0) \rightarrow \max; \quad (4)$$

2) выход побочного продукта

$$x_{\text{by-prod}}(t^*, T, x^0) \rightarrow \min; \quad (5)$$

3) критерий рентабельности, равный отношению суммы доходов к объему капиталовложений,

$$P = \frac{\sum_{\text{prod}=1}^{Pr} x_{\text{prod}}(t^*, T, x^0) \eta_{\text{prod}}}{\sum_{\text{source}=1}^{Sr} x_{\text{source}}(t^*, T, x^0) \eta_{\text{source}} + \psi(t^*, T) + A}, \quad (6)$$

где x_{prod} — концентрации продуктов реакции, x_{source} — концентрации исходных реагентов, η — вектор удельных ценовых весов компонентов (нормирован к сумме цен компонентов и затрат), ψ — переменные затраты (нормированы к сумме цен компонентов и затрат), A — постоянные затраты (нормированы к сумме цен компонентов и затрат), Pr — число продуктов, Sr — число исходных реагентов, x^0 — вектор начальных концентраций веществ, P — нормированная рентабельность.

Задача оптимизации условий проведения каталитической реакции в общем виде включает [20, 21]:

- функционалы качества оптимизации $F = (f_1, f_2, \dots, f_L)$, где f_l — критерий оптимизации (один или несколько), $l = 1, 2, \dots, L$;
- варьируемые (свободные) параметры: температура, давление, начальное значение количества катализатора, начальное соотношение исходных реагентов, время проведения реакции t^* и др.;
- математическую модель вида (1)–(3);
- прямые ограничения на варьируемые параметры.

4. Многоцелевая оптимизация и методы решения задач многоцелевой оптимизации

При решении оптимизационной задачи в химии основной проблемой является то, что исследование каждого критерия выполняется отдельно. Оптимальные условия проведения реакции для разных критериев могут отличаться. Выбирается некоторый средний показатель, который являлся компромиссным для критериев качества. Еще более осложнялась ситуация во время практической реализации процесса, когда условия чистоты проведения эксперимента в лабораторных условиях практически недостижимы.

Но за последние десятилетия было предложено множество эффективных эволюционных алгоритмов, которые учитывают все научные наработки в области Парето-доми-

нирования (многоцелевой оптимизации генетических алгоритмов), позволяющих определять все множество компромиссных условий проведения реакции для достижения оптимума по нескольким критериям [6, 22].

Многоцелевая оптимизация — это область решений, значения которой лежат среди паретовских решений [5, 22]. При многоцелевой оптимизации выполняется поиск множества решений, оптимальных в смысле Парето [5]. Пользователь (лицо, принимающее решение, — ЛПР) имеет возможность выбирать оптимальное решение из этого множества.

Пусть $U = (u_1, u_2, \dots, u_{|U|})$ — вектор варьируемых параметров. Множество допустимых значений вектора U обозначим D_U . Тогда, если $F(U) = (f_1(U), f_2(U), \dots, f_{|F|}(U))$ — вектор целевых функций, то $F(U)$ отображает множество D_U в некоторое множество D_F , которое называется областью достижимости. Тогда из множества D_F можно выделить подмножество точек D_F^* , которые не доминируются другими точками (рис. 3 а). Множество D_F^* называется фронтом Парето. Подмножество точек варьируемых параметров $D_U^* \subset D_U$, соответствующее множеству D_F^* , называется множеством Парето (рис. 3 б) [5].

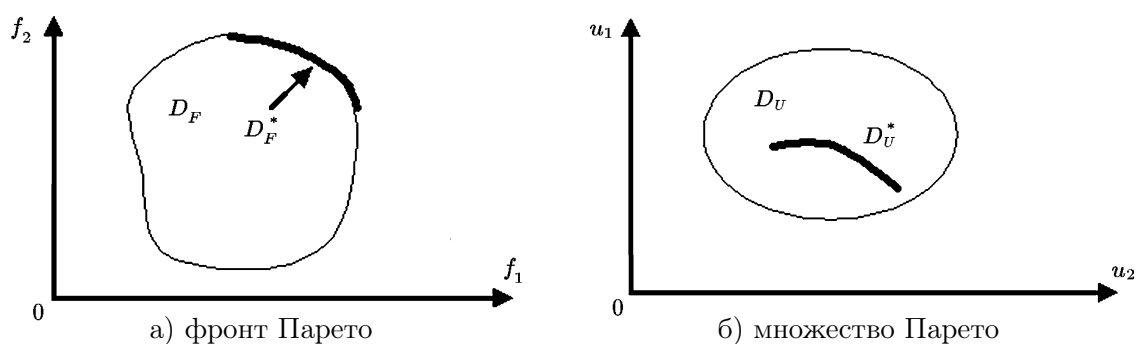


Рис. 3. Парето-аппроксимация задачи многоцелевой оптимизации

Численное определение фронта и множества Парето называется Парето-аппроксимацией.

Алгоритмов решения задачи многоцелевой оптимизации множество. Выделяют непопуляционные и популяционные алгоритмы Парето-аппроксимации [5]. Примером непопуляционных алгоритмов является сеточные алгоритмы, которые представляют собой сужение множества D_U (множество варьируемых критериев управления) до одной или нескольких точек. Такие алгоритмы покрывают множество D_U некоторой сеткой с требуемой точностью измерения. Затем в каждом узле сетки вычисляются значения целевых критериев качества [22]. Узлы сетки могут генерироваться случайным образом.

Авторы [23] исследовали эффективность метода адаптивных взвешенных сумм Adaptive Weighted Sum method (AWS-method). В данном методе используется аддитивная свертка критериев оптимизации. Недостатком метода AWS является его возможное применение для решения только двухцелевых задач Парето-аппроксимации.

В популяционных алгоритмах, в отличие от непопуляционных, происходит одновременный поиск большого числа недоминируемых точек. Наиболее эффективным методом решения задачи многоцелевой оптимизации, основанным на ранжировании, считается Non-dominated Sorting Genetic Algorithm (NSGA) [5]. Рассматриваются первые недоминируемые точки (фронт), которым ставится в соответствие некоторое значение целевой функции. Затем эти точки декомпозируются по данным значениям и исключаются из последующих аналогичных процедур. И после каждого этапа всем текущим недоминиру-

емым точкам ставится в соответствие значение меньше минимального декомпозированного значения целевой функции. В дальнейшем был разработан алгоритм Non-dominated Sorting Genetic Algorithm II (NSGA-II) [5, 24]. Основным отличием является увеличение разнообразия особей и применение элитизма для сохранения лучших решений. Метод NSGA-II показал себя наиболее точным в определении Парето-доминирующих точек по сравнению с остальными, хотя также имеет недостатки при увеличении числа критериев. Согласно принципам ранжирования, происходит присвоение каждой особи своего ранга. Недоминируемые точки имеют первый ранг, точки, которые доминируются только точками первого ранга, имеют второй ранг и т. д. Оценивается скученность полученных особей: чем больше расстояние, тем разнообразие популяции больше. При каждой итерации происходит выбор потомков на основе ранга и скученности (близости) особей. В дальнейшем в итерации выбирают лучшие точки на основе скрещивания, а также мутации, что обеспечивает разнообразие следующей популяции. Родители и потомки объединяются в одну популяцию с лучшими решениями и т. д.

Также несомненным преимуществом является реализация алгоритма NSGA-II во многих средах программирования, в частности в программной системе (ПС) Matlab (MATrix LABoratore), которая нашла широкое применение для моделирования химических реакций, а также оптимизации. Она включает пакеты расширения, необходимые для решения самых разнообразных задач, где требуются математические расчеты и моделирование [25].

Оценка качества Парето-аппроксимации осуществляется на основе характеристик:

1) среднее расстояние между решениями — евклидово расстояние всех пар решений из полученных сгущений:

$$\bar{d} = \frac{1}{|C_1||C_2|} \sum_{i \in C_1, j \in C_2} d(i, j) \rightarrow \min, \quad (7)$$

где $i \in C_1, j \in C_2$ — пары решений; C_1, C_2 — скопления, сгущения, кластеры; $d(i, j)$ — евклидово расстояние между решениями i и j ;

2) среднее рассеивание — мера равномерности распределения решений:

$$I = \sqrt{\frac{1}{|A|-1} \sum_{j=1}^{|A|} (\bar{d} - d_j)^2} \rightarrow \min, \quad (8)$$

где $|A| = |C_1| + |C_2|$ — мощность множества решений.

В соответствии с вышеизложенным блок-схема автоматизированной системы идентификации условий проведения химической реакции в задачах многоцелевой оптимизации представлена на рис. 4.

В соответствии с блок-схемой необходимо ввести в систему информацию о математической модели химической реакции, задать в системе критерии оптимизации, варьируемые параметры и ограничения на варьируемые параметры. В случае динамических параметров задача оптимального управления сводится к задаче многоцелевой оптимизации путем декомпозиции заданного временного интервала на равные промежутки. Для каждого промежутка определяется оптимальное значение. Тогда оптимальное управление определяем в классе кусочно-постоянных функций. Полученная задача МЦО решается алгоритмом NSGA-II. Для полученной Парето-аппроксимации производится оценка качества на основе характеристик (7), (8), где $\varepsilon_{\bar{d}}, \varepsilon_I$ — заданные положительные числа. В случае несоответствия решения заданным характеристикам пересматриваются критерии оптимизации, варьируемые параметры и ограничения на варьируемые параметры.

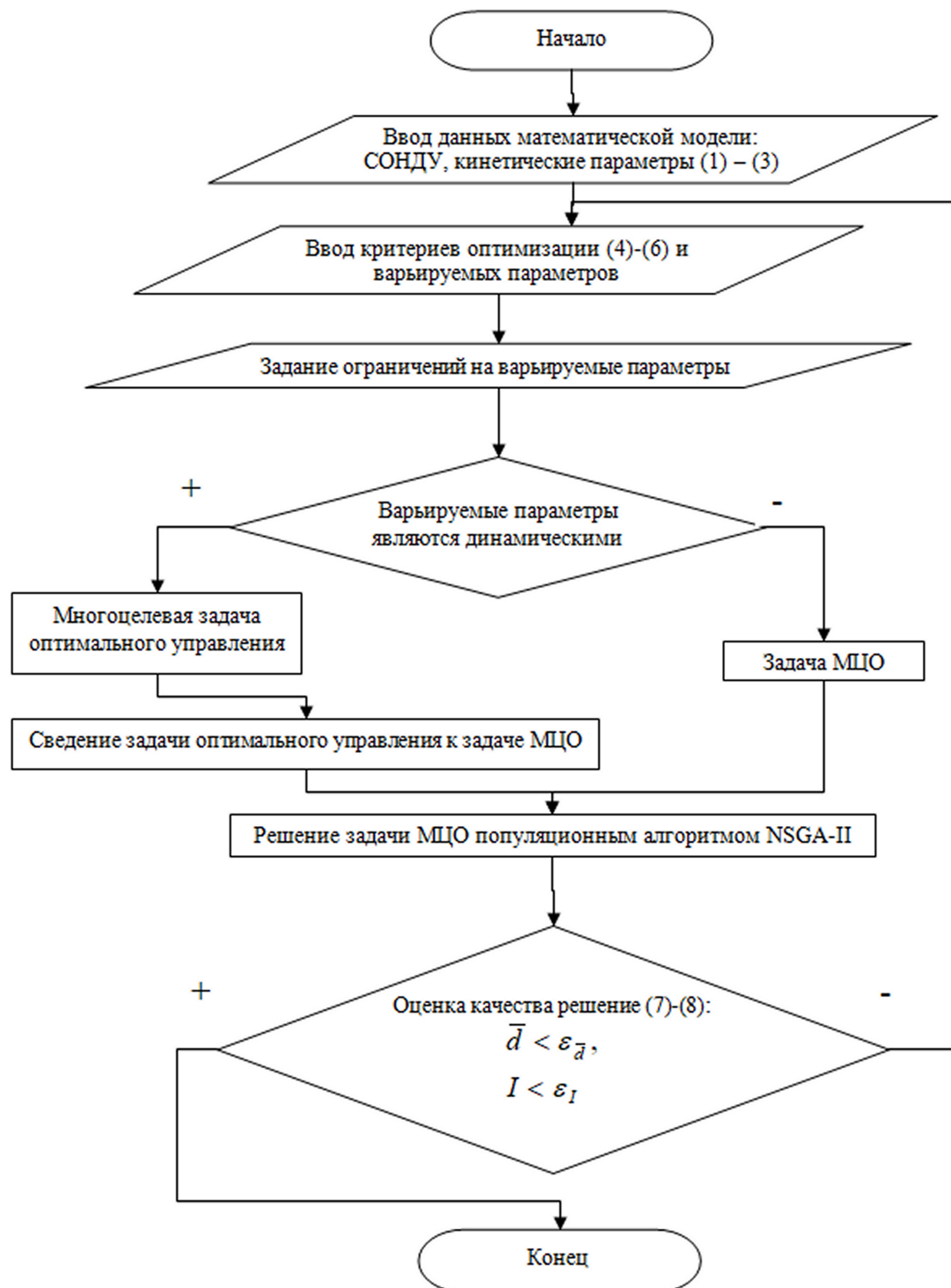


Рис. 4. Блок-схема автоматизированной системы идентификации условий проведения химической реакции

5. Применение многоцелевой оптимизации для определения условий проведения каталитических реакций

При решении задачи Парето-аппроксимации для определения оптимальных условий проведения каталитической реакции ДМК со спиртами в присутствии карбонила вольфрама были получены следующие результаты.

1. С применением сеточного алгоритма Парето-аппроксимации с выделением доминирующих точек (рис. 5 а) и алгоритма NSGA-II (рис. 5 б) были получены аппроксимации фронта Парето целевых функций для (4), (6).

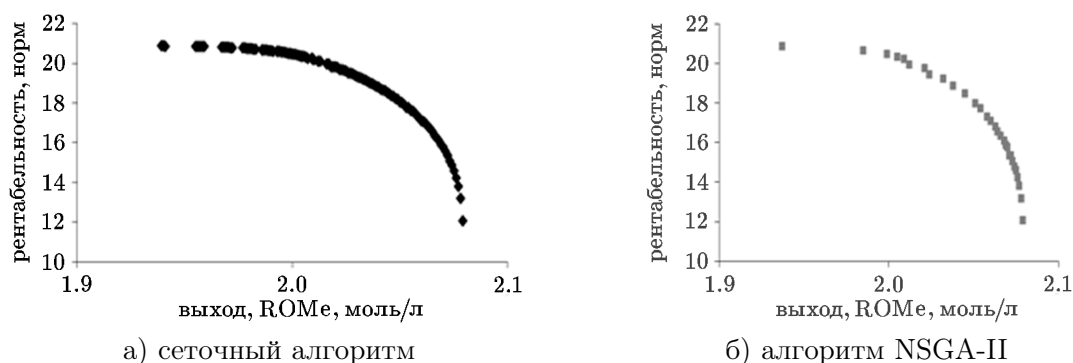


Рис. 5. Аппроксимация фронта Парето с использованием сеточного алгоритма и NSGA-II алгоритма каталитической реакции ДМК со спиртами

С некоторого времени увеличение выхода продукта приводит к снижению рентабельности, так как увеличивается время реакции, что увеличивает затраты (рис. 5) по (6).

2. Аппроксимации множества Парето варьируемых параметров для сеточного и NSGA-II алгоритмов приведены на рис. 6 а и 6 б.

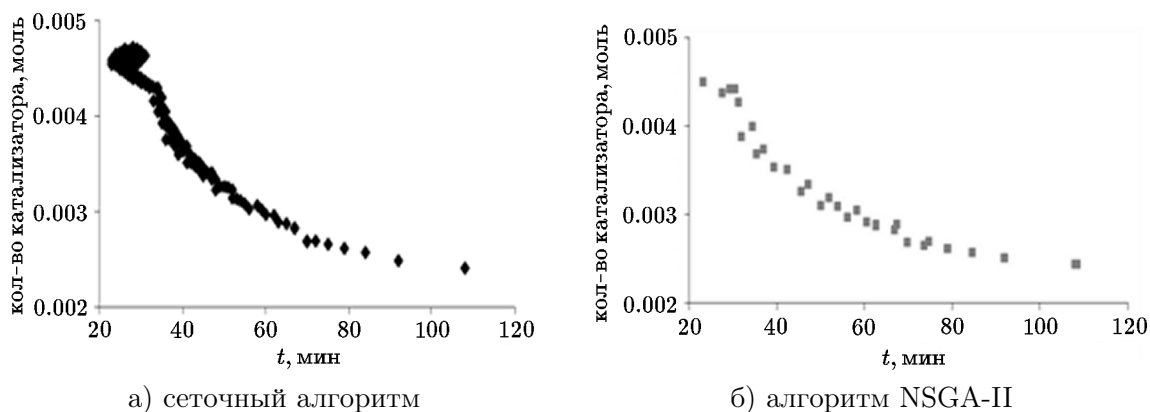


Рис. 6. Аппроксимации множества Парето с использованием сеточного алгоритма и NSGA-II алгоритма каталитической реакции спиртов с ДМК

Снижение начального количества катализатора приводит к увеличению времени проведения реакции (рис. 6), что закономерно.

Результаты, полученные сеточным алгоритмом и алгоритмом NSGA-II, практически совпадают (рис. 5 и 6).

Решение задачи многоцелевой оптимизации условий проведения гетерогенной каталитической реакции дегидрирования этанола в этилацетат производилось для двух критериев оптимизации: выход целевого продукта (4) и выход побочного продукта (5). Результаты вычислительных экспериментов представлены на рис. 7 а и 7 б.

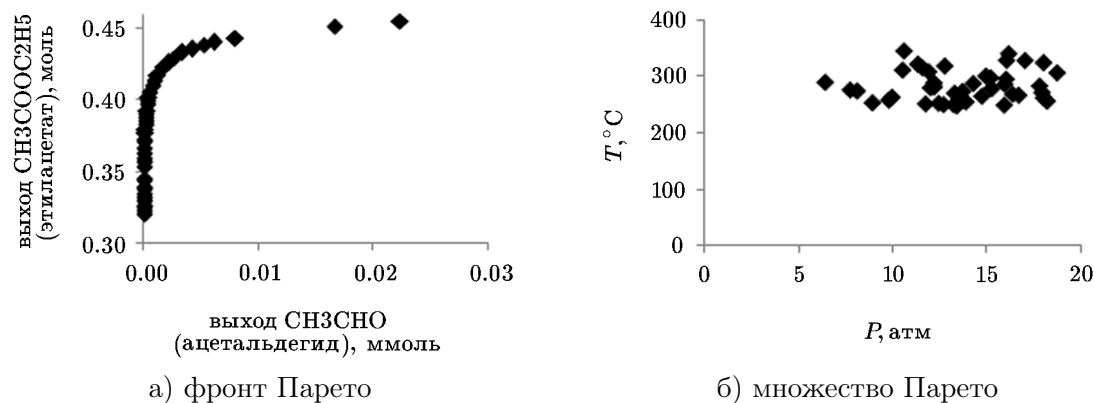


Рис. 7. Аппроксимация фронта Парето и множества Парето МЦО-задачи реакции дегидрирования этанола в этилацетат алгоритмом NSGA-II

Полученные аппроксимации фронта и множества Парето для реакции дегидрирования этанола в этилацетат позволяют ЛПР выбирать условия проведения реакции, исходя из сравнения аппроксимаций множеств Парето для соответствующих целевых функций (4) и (5) (см. рис. 7 а и 7 б). В случае, когда необходимо добиться максимального выхода целевого продукта (целевой продукт очень ценный) или минимального побочного продукта, используются соответствующие значения аппроксимации множества и фронта Парето.

6. Заключение

Разработана автоматизированная система идентификации условий проведения гомогенных и гетерогенных реакций, которая включает в себя математическое моделирование химической реакции, определение критериев оптимизации условий проведения и варьируемых параметров, постановку и решение задачи многоцелевой оптимизации. Проведено моделирование и оптимизация гомогенной и гетерогенной каталитических реакций. Определены оптимальные условия проведения реакций для достижения заданных критериев. В продолжении данной работы будут применены методы управления динамическими системами, разработанными в работах [26, 27]. В результате будут определены режимы протекания химической реакции по оптимальному расходу исходных компонентов.

Литература

1. **Слинько М.Г.** История развития математического моделирования каталитических процессов и реакторов // Теоретические основы химической технологии. — 2007. — Т. 41, № 1. — С. 16–34.
2. **Kulikov I., Chernykh I., Tutukov A.** A new hydrodynamic model for numerical simulation of interacting galaxies on Intel Xeon Phi supercomputers // J. Phys.: Conf. Series. — 2016. — Vol. 719, № 012006.

3. **Khoperskov S.A., Vasiliev E.O., Sobolev A.M., Khoperskov A.V.** The simulation of molecular clouds formation in the Milky Way // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. — 2013. — Vol. 428, № 1. — P. 2311–2320.
4. **Коледин С.Н., Коледина К.Ф., Губайдуллин И.М., Спивак С.И.** Определение оптимальных условий каталитических процессов на основе экономических критериев // *Химическая промышленность сегодня*. — 2016. — № 10. — С. 24–35.
5. **Карпенко А.П.** Современные алгоритмы поисковой оптимизации. Алгоритмы, вдохновленные природой: учебное пособие. — М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2014.
6. **Белоус В.В., Грошев С.В., Карпенко А.П., Шибитов И.А.** Оценка качества Парето-аппроксимации в задаче многокритериальной оптимизации. Обзор программных систем // *Научное издание МГТУ им. Н.Э. Баумана “Наука и образование”*. — 2014. — № 4. — С. 300–320.
7. **Коледин С.Н., Коледина К.Ф.** Оптимальное управление и чувствительность оптимума в задачах химической кинетики // *Журн. Средневолжского математического общества*. — 2016. — Т. 18, № 3. — С. 137–144.
8. **Спивак С.И., Коледина К.Ф., Коледин С.Н., Губайдуллин И.М.** Информационно-вычислительная аналитическая система теоретической оптимизации каталитических процессов // *Прикладная информатика*. — 2017. — Т. 12, № 1(67). — С. 39–49.
9. **Коледина К.Ф., Губайдуллин И.М.** Кинетика и механизм каталитических реакций гидроалюминирования олефинов алюминийорганическими соединениями // *Журн. физической химии*. — 2016. — Т. 90, № 5. — С. 671–678; Перевод: Koledina K.F., Gubaidullin I.M. Kinetics and mechanism of olefin catalytic hydroalumination by organoaluminum compounds // *Russian Journal of Physical Chemistry A*. — 2016. — Vol. 90, iss. 5. — P. 914–921.
10. **Nurislamova L.F., Gubaydullin I.M., Koledina K.F., Safin R.R.** Kinetic model of the catalytic hydroalumination of olefins with organoaluminum compounds // *Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis*. — 2016. — Vol. 117, № 1. — P. 1–14.
11. **Коледина К.Ф., Коледин С.Н., Губайдуллин И.М., Сафин Р.Р., Ахметов И.В.** Информационная система построения кинетической модели каталитической реакции, планирование экономически оптимального химического эксперимента // *Системы управления и информационные технологии*. — 2015. — Т. 61, № 3. — С. 79–84.
12. **Меньшиков В.А., Гольдштейн Л.Х., Семенов И.П.** Исследование кинетики дегидрирования этанола в этилацетат // *Кинетика и катализ*. — 2014. — Т. 55, № 1. — С. 14–19; Перевод: Men'shchikov V.A., Gol'dshtein L.Kh., Semenov I.P. Kinetics of ethanol dehydrogenation into ethyl acetate // *Kinetics and Catalysis*. — 2014. — Vol. 55, № 1. — P. 12–17.
13. **Чокендорф И., Наймантсведрайт Х.** Современный катализ и химическая кинетика. — Долгопрудный: Изд. дом “Интеллект”, 2010.
14. **Anastas P.T., Warner J.C.** *Green Chemistry: Theory and Practice*. — New York: Oxford University Press, 1998.
15. **Arico F., Tundo P.** Dimethyl carbonate: a modern green reagent and solvent // *Russian Chemical Reviews*. — 2010. — Vol. 79, № 6. — P. 479–489.
16. **Хуснутдинов Р.И., Щаднева Н.А., Маякова Ю.Ю.** Синтез алкилметиловых эфиров и алкилметилкарбонатов при взаимодействии спиртов с диметилкарбонатом в присутствии комплексов W и CO // *Журн. органической химии*. — 2014. — Т. 50, вып. 6. — С. 808–813; Перевод: Khusnutdinov R.I., Shchadneva N.A., Mayakova Yu.Yu. Synthesis of alkyl methyl ethers and alkyl methyl carbonates by reaction of alcohols with dimethyl carbonate in the presence of tungsten and cobalt complexes // *Russian Journal of Organic Chemistry*. — 2014. — Vol. 50, № 6. — P. 790–795.
17. **Shaikh A.G., Sivaram S.** *Organic carbonates* // *Chem. Rev.* — 1996. — Vol. 96. — P. 951–976.

18. **Koledina K.F., Koledin S.N., Schadneva N.A., Mayakova Y.Y., Gubaydullin I.M.** Kinetic model of the catalytic reaction of dimethylcarbonate with alcohols in the presence CO₂(CO)₈ and W(CO)₆ // Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis. — 2017. — Vol. 121, № 2. — P. 1–14.
19. **Коледина К.Ф., Коледин С.Н., Щаднева Н.А., Губайдуллин И.М.** Кинетика и механизм каталитической реакции спиртов с диметилкарбонатом // Журн. физической химии. — 2017. — Т. 91, № 3. — С. 422–428; Перевод: Koledina K.F., Koledin S.N., Shchadneva N.A., Gubaidullin I.M. Kinetics and mechanism of the catalytic reaction between alcohols and dimethyl carbonate // Russian Journal of Physical Chemistry A. — 2017. — Vol. 91, iss. 3. — P. 444–449.
20. **Коледин С.Н., Коледина К.Ф.** Планирование экономически оптимального химического эксперимента на основе кинетической модели каталитической реакции взаимодействия спиртов с диметилкарбонатом // Журн. Средневолжского математического общества. — 2015. — Т. 17, № 2. — С. 43–50.
21. **Abramson M., Charles A., Dennis J.E., Digabel J., Digabel S.** OrthoMADS: a deterministic MADS instance with orthogonal directions // SIAM J. Optimization. — 2009. — Vol. 20, № 3. — P. 948–966.
22. **Соболев И.М., Статников Р.Б.** Выбор оптимальных параметров в задачах со многими критериями: учебное пособие для вузов. — М.: Дрофа, 2006.
23. **Ryu J.H., Kim S., Wan H.** Pareto front approximation with adaptive weighted sum method in multiobjective simulation optimization // Proc. of the 2009 Winter Simulation Conference (WSC 2009). — Austin, 2009. — P. 623–633.
24. **Kalyanmoy D., Pratap A., Agarwal S., Meyarivan T.** A fast and elitist multiobjective genetic algorithm: NSGA-II // IEEE transactions on evolutionary computation. — 2002. — Vol. 6, № 2. — P. 182–197.
25. **Deb K., Mohan M., Mishra S.** Towards a quick computation of well-Spread pareto-optimal solutions // Proc. of Intern. Conf. on Evolutionary Multi-Criterion Optimization (ЕМО 2003). — Springer, 2003. — P. 222–236.
26. **Aleksandrov V.M.** Optimal resource consumption control of perturbed systems // Numerical Analysis and Applications. — 2017. — Vol. 10, № 3. — P. 185–197.
27. **Aleksandrov V.M.** Computing of optimal inertial control of a linear system // Numerical Analysis and Applications. — 2015. — Vol. 8, № 1. — P. 1–12.

Поступила в редакцию 19 апреля 2018 г.

После доработки 3 июня 2018 г.

Принята к публикации 21 января 2019 г.

Литература в транслитерации

1. **Slin'ko M.G.** Istoriya razvitiya matematicheskogo modelirovaniya kataliticheskikh protsessov i reaktorov // Teoreticheskie osnovy himicheskoy tekhnologii. — 2007. — Т. 41, № 1. — С. 16–34.
2. **Kulikov I., Chernykh I., Tutukov A.** A new hydrodynamic model for numerical simulation of interacting galaxies on Intel Xeon Phi supercomputers // J. Phys.: Conf. Series. — 2016. — Vol. 719, № 012006.
3. **Khoperskov S.A., Vasiliev E.O., Sobolev A.M., Khoperskov A.V.** The simulation of molecular clouds formation in the Milky Way // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. — 2013. — Vol. 428, № 1. — P. 2311–2320.
4. **Koledin S.N., Koledina K.F., Gubaydullin I.M., Spivak S.I.** Opredelenie optimal'nyh usloviy kataliticheskikh protsessov na osnove ekonomicheskikh kriteriev // Himicheskaya promyshlennost' segodnya. — 2016. — № 10. — С. 24–35.

5. **Karpenko A.P.** *Sovremennyye algoritmy poiskovoy optimizatsii. Algoritmy, vdohnovlennyye prirodoy: uchebnoe posobie.* — M.: Izd-vo MGTU im. N.E. Baumana, 2014.
6. **Belous V.V., Groshev S.V., Karpenko A.P., Shbitov I.A.** Otsenka kachestva Pareto-approksimatsii v zadache mnogokriterial'noy optimizatsii. *Obzor programmnyh sistem // Nauchnoe izdanie MGTU im. N.E. Baumana "Nauka i obrazovanie".* — 2014. — № 4. — S. 300–320.
7. **Koledin S.N., Koledina K.F.** Optimal'noe upravlenie i chuvstvitel'nost' optimuma v zadachah himicheskoy kinetiki // *Zhurn. Srednevolzhskogo matematicheskogo obshchestva.* — 2016. — Т. 18, № 3. — S. 137–144.
8. **Spivak S.I., Koledina K.F., Koledin S.N., Gubaydullin I.M.** Informatsionno-vychislitel'naya analiticheskaya sistema teoreticheskoy optimizatsii kataliticheskikh protsessov // *Prikladnaya informatika.* — 2017. — Т. 12, № 1(67). — S. 39–49.
9. **Koledina K.F., Gubaydullin I.M.** Kinetika i mekhanizm kataliticheskikh reaktsiy gidroalyuminirovaniya olefinov alyuminiyorganicheskimi soedineniyami // *Zhurn. fizicheskoy himii.* — 2016. — Т. 90, № 5. — S. 671–678.
10. **Nurislamova L.F., Gubaydullin I.M., Koledina K.F., Safin R.R.** Kinetic model of the catalytic hydroalumination of olefins with organoaluminum compounds // *Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis.* — 2016. — Vol. 117, № 1. — P. 1–14.
11. **Koledina K.F., Koledin S.N., Gubaydullin I.M., Safin R.R., Ahmetov I.V.** Informatsionnaya sistema postroeniya kineticheskoy modeli kataliticheskoy reaktsii, planirovanie ekonomicheskii optimal'nogo himicheskogo eksperimenta // *Sistemy upravleniya i informatsionnye tekhnologii.* — 2015. — Т. 61, № 3. — S. 79–84.
12. **Men'shchikov V.A., Gol'dshteyn L.H., Semenov I.P.** Issledovanie kinetiki degidrirovaniya etanola v etilatsetat // *Kinetika i kataliz.* — 2014. — Т. 55, № 1. — S. 14–19.
13. **Chokendorf I., Naymantsvedrayt H.** *Sovremennyy kataliz i himicheskaya kinetika.* — Dolgoprudnyy: Izd. dom "Intellekt", 2010.
14. **Anastas P.T., Warner J.C.** *Green Chemistry: Theory and Practice.* — New York: Oxford University Press, 1998.
15. **Arico F., Tundo P.** Dimethyl carbonate: a modern green reagent and solvent // *Russian Chemical Reviews.* — 2010. — Vol. 79, № 6. — P. 479–489.
16. **Husnutdinov R.I., Shcadneva N.A., Mayakova Yu.Yu.** Sintez alkilmetilovykh efirov i alkilmetilkarbonatov pri vzaimodeystvii spirtov s dimetilkarbonatom v prisutstvii kompleksov W i CO // *Zhurn. organicheskoy himii.* — 2014. — Т. 50, vyp. 6. — S. 808–813.
17. **Shaikh A.G., Sivaram S.** Organic carbonates // *Chem. Rev.* — 1996. — Vol. 96. — P. 951–976.
18. **Koledina K.F., Koledin S.N., Shcadneva N.A., Mayakova Y.Y., Gubaydullin I.M.** Kinetic model of the catalytic reaction of dimethylcarbonate with alcohols in the presence CO₂(CO)₈ and W(CO)₆ // *Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis.* — 2017. — Vol. 121, № 2. — P. 1–14.
19. **Koledina K.F., Koledin S.N., Shcadneva N.A., Gubaydullin I.M.** Kinetika i mekhanizm kataliticheskoy reaktsii spirtov s dimetilkarbonatom // *Zhurn. fizicheskoy himii.* — 2017. — Т. 91, № 3. — S. 422–428.
20. **Koledin C.N., Koledina K.F.** Planirovanie ekonomicheskii optimal'nogo himicheskogo eksperimenta na osnove kineticheskoy modeli kataliticheskoy reaktsii vzaimodeystviya spirtov s dimetilkarbonatom // *Zhurn. Srednevolzhskogo matematicheskogo obshchestva.* — 2015. — Т. 17, № 2. — S. 43–50.
21. **Abramson M., Charles A., Dennis J.E., Digabel J., Digabel S.** OrthoMADS: a deterministic MADS instance with orthogonal directions // *SIAM J. Optimization.* — 2009. — Vol. 20, № 3. — P. 948–966.

22. **Sobol' I.M., Statnikov R.B.** Vybor optimal'nyh parametrov v zadachah so mnogimi kriteriyami: uchebnoe posobie dlya vuzov. — M.: Drofa, 2006.
23. **Ryu J.H., Kim S., Wan H.** Pareto front approximation with adaptive weighted sum method in multiobjective simulation optimization // Proc. of the 2009 Winter Simulation Conference (WSC 2009). — Austin, 2009. — P. 623–633.
24. **Kalyanmoy D., Pratap A., Agarwal S., Meyarivan T.** A fast and elitist multiobjective genetic algorithm: NSGA-II // IEEE transactions on evolutionary computation. — 2002. — Vol. 6, № 2. — P. 182–197.
25. **Deb K., Mohan M., Mishra S.** Towards a quick computation of well-Spread pareto-optimal solutions // Proc. of Intern. Conf. on Evolutionary Multi-Criterion Optimization (EMO 2003). — Springer, 2003. — P. 222–236.
26. **Aleksandrov V.M.** Optimal resource consumption control of perturbed systems // Numerical Analysis and Applications. — 2017. — Vol. 10, № 3. — P. 185–197.
27. **Aleksandrov V.M.** Computing of optimal inertial control of a linear system // Numerical Analysis and Applications. — 2015. — Vol. 8, № 1. — P. 1–12.

