Коледин С.Н.
Koledin S.N.

старший преподаватель
кафедры «Математика»
Уфимского
государственного
нефтяного
технического
университета,
г. Уфа,
Российская Федерация

Коледина К.Ф.
Koledina K.F.

кандидат физико-математи-
ческих наук, научный
сотрудник лаборатории
математической химии
Института нефтехимии и
катализа
УФИЦ РАН, доцент
кафедры «Математика»
Уфимского
государственного нефтя-
ного технического
университета, г. Уфа,
Российская Федерация

Губайдуллин И.М.
Gubaydullin I.M.

доктор физико-математи-
ческих наук, доцент, стар-
ший научный сотрудник
лаборатории математиче-
ской химии Института
нефтехимии и катализа
УФИЦ РАН, профессор
кафедры «Технология нефти
и газа» Уфимского госуда-
рственного нефтяного тех-
нического университета,
г. Уфа,
Российская Федерация

Муллаянова А.Ф.
Mullayanova A.F.

аспирант лаборатории математической
химии Института нефтехимии и катализа
УФИЦ РАН, г. Уфа
Российская Федерация

Габитов С.А.
Gabitov S.A.

магистрант Уфимского государственного
нефтяного технического университета,
г. Уфа,
Российская Федерация

УДК 517.977.5

DOI:

ИНФОРМАЦИОННАЯ СИСТЕМА ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОГО АНАЛИЗА КАТАЛИТИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ МАТЕМАТИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ

В работе приведена схема информационной системы последовательного анализа катали-
тических реакций математическими методами. Анализ начинается с построения кинетиче-
ской модели и заканчивается оптимизацией условий проведения химического процесса,

базируясь на кинетической модели как на фундаментальных закономерностях его протекания.

Задача оптимизации кинетических параметров стадий представлена в виде основных модулей: 1) ввод данных; 2) прямая кинетическая задача расчета концентраций веществ по заданным параметрам; 3) обратная кинетическая задача восстановления кинетических параметров по экспериментальным данным; 4) вывод результатов. В каждом модуле определены входные параметры и выполняемые функции. При решении обратной кинетической задачи происходит восстановление кинетических параметров исходя из соответствия экспериментальных данных и расчетных значений. Вводятся несколько параметров: вид функционала невязки; метод решения обратной задачи. При выборе численного метода расчета обратной кинетической задачи необходимо комбинировать методы для глобального поиска и поиска локального экстремума. Наиболее быстрые методы, то есть методы за меньшие сроки приводящие к требуемому функционалу невязки: глобальный поиск (global search) и multistart, метод Хука-Дживса (pattern search), генетический алгоритм, симуляция отжига (simulated annealing) и др.

Ключевые слова: каталитические реакции, обратная кинетическая задача, схема последовательного анализа каталитической реакции, метод глобального поиска, метод Хука-Дживса, генетический алгоритм, симуляция отжига, Matlab, функционал невязки, планирование эксперимента.

INFORMATION SYSTEM OF CONSISTENT ANALYSIS OF CATALYTIC REACTIONS BY MATHEMATICAL METHODS

The paper presents a diagram of an information system for the sequential analysis of catalytic reactions by mathematical methods. The analysis begins with the construction of a kinetic model and ends with the optimization of the conditions of the chemical process, based on the kinetic model, as the fundamental laws governing its occurrence.

The task of optimizing the kinetic parameters of the stages is presented in the form of basic modules: 1) data entry; 2) the direct kinetic problem of calculating the concentrations of substances according to given parameters; 3) the inverse kinetic problem of restoring kinetic parameters from experimental data; 4) output results. Each module defines the input parameters and functions performed. When solving the inverse kinetic problem, the kinetic parameters are restored, based on the fit of the experimental data and the calculated values. Several parameters are introduced: type of residual functional; method for solving the inverse problem. When choosing a numerical method for calculating an inverse kinetic problem, it is necessary to combine methods for global search and search for a local extremum. The fastest methods, that is, methods in less time lead to the required functional of the discrepancy: global search (global search) and multistart; Hook-Jeeves method (pattern search); genetic algorithm; simulated annealing (simulated annealing) and others.

Key words: catalytic reactions, inverse kinetic problem, sequential analysis scheme of the catalytic reaction, global search method, Hook-Jeeves method, genetic algorithm, annealing simulation, Matlab, residual functional, experimental design.

Введение

На сегодняшний день исследования в области оптимизации сложных каталитических реакций в основном проводятся индивидуально для каждого рассматриваемого процесса. Однако общие закономерности протекания каталитических реакций – кинетические модели – позволяют разработать

единую методологию оптимизации процессов по различным параметрам: условия проведения реакции, начальные количества исходных реагентов, цикличность проведения процесса [1]. Кроме того, в данных исследованиях целевыми функциями оптимизации зачастую являются физико-химические показатели: выход продукта, селектив-

ность, конверсия. Однако для внедрения процессов в производство кроме физико-химических показателей необходимо рассматривать экономические, экологические факторы. Причем решение задачи оптимизации необходимо вести по нескольким заданным независимым критериям одновременно, что приведет к получению компромиссных значений параметров оптимизации и позволит принимать решения об условиях проведения процесса на производстве [2, 3].

Объединение понятий «информационная технология» и «технологии каталитических реакций» в единую систему позволяет решить сложные задачи оптимизации и управления, которые невозможно решить в отдельности [4].

Методы оптимизации при исследовании каталитических реакций необходимы на всех уровнях. На первом этапе необходимо построить кинетическую модель реакции, определить значения кинетических параметров с помощью решения обратной кинетической задачи. Решение такой задачи ведется алгоритмами оптимизации с целью минимизации функционала отклонения расчетных значений исследуемых параметров от экспериментальных данных [5]. На следующих этапах проводится оптимизация условий реакции с целью достижения экстремумов функционалов качества проведения процесса. Эти задачи могут быть задачами одноцелевой оптимизации, многоцелевой оптимизации или оптимального управления [6].

Разработка единой информационной системы алгоритмов оптимизации при иссле-

довании каталитических реакций позволит проводить исследования широкого класса каталитических реакций и объективно анализировать их с целью последующего внедрения в производство [7, 8]. Полученная информационная система трансформирует входящие данные с лабораторных установок для выработки оптимальных решений по управлению сложными каталитическими процессами, с учётом технологических, экономических и экологических критериев [9].

1. Задача оптимизации кинетических параметров стадий

Задача оптимизации кинетических параметров стадий представлена в виде основных модулей: 1) ввод данных; 2) прямая кинетическая задача расчета концентраций веществ по заданным параметрам; 3) обратная кинетическая задача восстановления кинетических параметров по экспериментальным данным; 4) вывод результатов. В каждом модуле необходимо определить входные параметры и выполняемые функции.

Ввод данных. В данном модуле при решении задач оптимизации для каталитических реакций требуется определить программную среду, где будут происходить расчеты (Matlab, Python). Во многих вычислительных программах уже реализованы многие алгоритмы, что снизит затраты времени на создание программного кода вычисления. На следующем этапе при совместной работе с химиками экспериментаторами вводятся экспериментальные данные реакции (рис. 1).

Рисунок 1. Параметры модуля «Ввод данных»

Заполнение блока разделено на теоретическую и экспериментальную части, что связано с логикой проведения химической реакции. В теоретической части, исходя из литературных источников, составляются предположительные схемы протекания реакций. По предложенным схемам и известным активационным параметрам выдвигается гипотеза о количестве веществ и возможных стадиях протекания каталитической реакции. На экспериментальной части в систему вводятся начальные данные концентраций веществ, время проведения реакции, начальные значения кинетических параметров. В ходе проведения реакции вводятся экспериментальные данные наблюдаемых веществ. На данном этапе химики-экспериментаторы могут проводить корректировку теоретической части. При наблюдении промежуточных веществ можно изменить схемы протекания реакции, количество веществ и количество стадий.

На данном этапе необходимо тесное взаимодействие между химиками-экспериментаторами и специалистами по математическому моделированию, по информационным технологиям (по базам данных, по технологии параллельных вычислений и т.д.). При необходимости проводятся дополнительные эксперименты при различной температуре, давлении, начальном количестве катализатора и пр.

2. Прямая кинетическая задача расчета концентраций веществ по заданным параметрам

В данном модуле входящим параметром будет вид математической модели в зависимости от предположительной схемы протекания каталитической реакции. Если схем несколько, тогда составляется несколько математических моделей, и расчеты по каждой проводятся независимо, параллельно. Также выбирается численный метод расчета в зависимости от известных условий. Методы могут быть явными, неявными; для жестких, нежестких задач; различного порядка и пр. (Рунге-Кутты, Гира, Кутты-Мерсона и др.). Определяется сходимость и устойчивость методов. Правильно выбранный метод позволяет проводить расчеты с

наименьшим отклонением от реального результата, с наилучшей сходимостью.

Основная функция данного модуля – это формирование математической модели в виде системы дифференциальных уравнений с начальными данными. В зависимости от характера протекания реакции системы дифференциальных уравнений могут основываться на законах действующих масс, действующих поверхностей, на эмпирических законах.

Так, при рассмотрении изотермической нестационарной реакции, протекающей в закрытой системе, без изменения числа молей, математическое описание примет вид системы дифференциальных уравнений (1) [10, 11]:

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

С начальными условиями: при $t=0$, $x_i(0)=x_i^0$; где t – время реакции, мин или ч; ν_{ij} – коэффициенты стехиометрии; J – число стадий, x_i – концентрации реагентов, моль/л; I – число веществ; w_j – скорость стадии, 1/мин; k_j, k_{-j} – константы скорости стадии (приведенные), 1/мин; E_j^+, E_j^- – энергии активации стадий, ккал/моль; T – температура, К; α_{ij} – отрицательные элементы матрицы (ν_{ij});

β_{ij} – положительные элементы (ν_{ij}); k_j^0, k_{-j}^0 –

предэкспоненциальные множители, 1/мин; R – универсальная газовая постоянная, равная 8,31 Дж/(моль*К).

Система (1) представляет собой задачу Коши [12]. Под прямой задачей определяют расчет концентраций реагентов в зависимости от времени при заданных константах скоростей (k_j). Под обратной задачей – расчет таких значений констант скоростей, путем решения системы (1) с которыми приходим к значениям x_i , максимально приближенным к экспериментальным данным [13, 14].

3. Обратная кинетическая задача восстановления кинетических параметров по экспериментальным данным

В данном модуле происходит восстановление кинетических параметров, исходя из соответствия экспериментальных данных и расчетных значений. Вводятся несколько параметров: вид функционала невязки, метод решения обратной задачи.

Функционал невязки выбирается в зависимости от условий проведения эксперимента. Все методы имеют свои преимущества и недостатки [15]. Методы можно разделить на устойчивые к резким выбросам в экспериментальных данных и неустойчивые.

$F = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M (x_{ij}^e - x_{ij}^c)^2$ – не устойчивое к резким выбросам в экспериментальных данных.

$F = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M |(x_{ij}^e - x_{ij}^c)|$ – устойчивое к резким выбросам в экспериментальных данных.

Очевидно, что в случае когда нет резкого выброса в экспериментальных данных, лучше применять метод наименьших квадратов.

$F = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M \psi_j (x_{ij}^e - x_{ij}^c)^2$ (где ψ_j – весовой коэффициент реагента) – применяется, когда необходимо учитывать значимость и точность отдельных наблюдений.

Следующий параметр – метод решения обратной задачи. Так как обратная задача относится к некорректно поставленным задачам и не имеет единственное решение, то при выборе численного метода расчета необходимо комбинировать методы для глобального поиска и поиска локального экстремума. Наиболее быстрые методы, то есть за меньшие сроки приводящие к требуемому функционалу невязки, – глобальный поиск (global search) и multistart, метод Хука-Дживса (pattern search), генетический алгоритм, симуляция отжига (simulated annealing) и др. [16].

1. Глобальный поиск (global search) и multistart. В основе лежат алгоритмы расчета градиента. Расчет начинается из нескольких начальных точек, с определением локального и глобального решений.

2. Метод Хука-Дживса (pattern search). Реализует алгоритм Хука-Дживса или алго-

ритм прямого поиска. Не накладывает ограничение дифференцируемости функции.

3. Генетический алгоритм. Имитирует принципы биологической эволюции, с изменением популяции отдельных точек. Имеет случайный характер, что позволяет определять глобальный экстремум. Не накладывает ограничение дифференцируемости функции.

4. Симуляция отжига (simulated annealing). Каждая итерация моделируемого алгоритма отжига стремится улучшить текущий минимум, медленно снижая объем поиска.

Последним модулем является *вывод результатов*:

- вывод концентраций веществ численно в таблицы;
- вывод концентраций веществ графически;
- вывод скоростей стадий численно или графически.

4. Схема последовательного анализа химического процесса

На рисунке 2 представлен пошаговый алгоритм построения кинетической модели химической реакции [17]. На первом шаге необходимо определить номенклатуру реагентов процесса, соответствующие начальные данные, условия проведения химической реакции, предполагаемые схемы химических превращений. На втором шаге – определить систему дифференциальных уравнений (1). Затем (шаг 3) задаются начальные приближения кинетических параметров. Одновременно с этим, на 4-м шаге, задаются ограничения на параметры. На 5-м шаге решается прямая кинетическая задача расчета зависимостей изменения концентраций участвующих в реакции веществ.

Рисунок 2. Схема последовательного анализа каталитической реакции

Решение обратной задачи (шаг 6) является основным этапом анализа. Позволяет определить адекватность разработанной кинетической модели. На данном шаге рассчитываются значения кинетических параметров. Происходит выбор (дискриминация) моделей для уточнения схемы химических превращений. Решение обратной кинетической задачи позволяет планировать эксперимент (шаг 7) и определять адекватную кинетическую модель (шаг 8), что позволяет проводить оптимизацию химического процесса (шаг 9).

При этом подсистемы информационной системы, такие как модуль решения прямой задачи или модуль решения обратной задачи химической кинетики, позволяют успешно решать частные задачи. Например, разработка кинетических моделей реакций с участием металлокомплексных катализаторов на основе лабораторных данных [19] или обработка данных из нефтеперерабатывающих заводов [20]. С использованием некоторых модулей информационной системы проводилось редуцирование сложных механизмов [21]. Результаты решения частных задач хранятся в базе данных информационной системы, которые в будущем могут использоваться для оптимизации вышеуказанных процессов.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ № 18-37-00015 (п. 1-3), 18-07-

00341, Стипендии Президента РФ СП-669.2018.5.

Список литературы

1. Слинко М.Г. История развития математического моделирования каталитических процессов и реакторов // Теоретические основы химической технологии. – 2007. – Т. 41. – № 1. – С. 16-34.
2. Коледин С.Н., Карпенко А.П., Коледина К.Ф., Губайдуллин И.М. Информационная система для оценки взаимосвязи целевых функций и исследования оптимальных условий проведения сложной каталитической реакции методами многоцелевой оптимизации // Электротехнические и информационные комплексы и системы. – 2017. – Т. 13. – № 4. – С. 71-81.
3. Коледина К.Ф., Коледин С.Н., Губайдуллин И.М. Многокритериальная оптимизация условий проведения каталитической реакции дегидрирования этанола в этилацетат // Вестник Башкирского университета. – 2018. – Т. 23. – № 2. – С. 385-389.
4. Гламаздин Е.С., Новиков Д.А., Цветков А.В. Управление корпоративными программами: информационные системы и математические модели. – М.: ИПУ РАН, 2003. – 159 с.
5. Новичкова А.В., Бобренева Ю.О., Губайдуллин И.М., Коледина К.Ф. Инфор-

мационный комплекс построения кинетической модели реакции гидроалюминирования олефинов триизобутилалюминием // Электротехнические и информационные комплексы и системы. – 2014. – № 4. – Т. 10. – С. 58-63.

6. Соболев И.М., Статников Р.Б. Выбор оптимальных параметров в задачах со многими критериями: учеб. пособие для вузов; 2-е изд., перераб. и доп. – М.: Дрофа, 2006. – 175 с.

7. Коледина К.Ф., 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. – № 3 (61). – С. 79-84.

8. Спивак С.И., Коледина К.Ф., Коледин С.Н., Губайдуллин И.М. Информационно-вычислительная аналитическая система теоретической оптимизации каталитических процессов // Прикладная информатика / Journal of applied informatics. – 2017. – Т. 12. – № 1 (67). – С. 39-49.

9. Коноплева И.А., Хохлова О.А., Денисов А.В. Информационные технологии. – М.: ТК Велби, Изд-во Проспект, 2007 – 304 с.

10. Коледина К.Ф., Коледин С.Н., Щаднева Н.А., Губайдуллин И.М. Кинетика и механизм каталитической реакции спиртов с диметилкарбонатом // Журнал физической химии. – 2017. – Т. 91. – № 3. – С. 422-428.

11. Koledina, K. F. Kinetic model of the catalytic reaction of dimethylcarbonate with alcohols in the presence $\text{Co}_2(\text{CO})_8$ and $\text{W}(\text{CO})_6$ / K. F. Koledina, S. N. Koledin, N. A. Schadneva, Y. Yu. Mayakova, I. M. Gubaydullin // Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis. DOI: 10.1007/s11144-017-1181-3

12. Коледин, С.Н. Оптимальное управление и чувствительность оптимума в задачах химической кинетики / С.Н. Коледин, К.Ф. Коледина // Журнал СВМО. 2016. Т. 18. № 3. – С. 137-144.

13. Коледин, С.Н. Определение оптимальных условий каталитических процессов на основе экономических критериев / С.Н. Коледин, К.Ф. Коледина, И.М. Губайдуллин, С.И. Спивак // Химическая промышленность сегодня. №10. 2016г. стр. 24-35.

14. Коледин, С.Н. Планирование экономически оптимального химического эксперимента на основе кинетической модели каталитической реакции взаимодействия спиртов с диметилкарбонатом/ С.Н. Коледин, К.Ф.

Коледина // Журнал СВМО. 2015. Т.17. №2. С.43-50.

15. Нурисламова Л.Ф. Разработка компактной кинетической модели пиролиза пропана методами анализа чувствительности / Л.Ф. Нурисламова - диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук: Башкирский государственный университет. Уфа, 2015.

16. Карпенко, А.П. Основные сущности популяционных алгоритмов для задачи глобальной оптимизации/ А.П. Карпенко // Информационные и математические технологии в науке и управлении. – 2016. – № 2. – С. 8-17.

17. Димитров, В.И Простая кинетика / В.И Димитров – Новосибирск: Наука и жизнь, 1982. – 380с.

18. Новичкова, А.В. Информационные системы моделирования реакционной способности алкенов в реакции гидроалюминирования олефинов триизобутилалюминием. / А.В. Новичкова, Ю.О. Бобренева, И.М. Губайдуллин, К.Ф. Коледина // Электротехнические и информационные комплексы и системы. № 3, т. 10, 2014. С. 55-61.

19. Губайдуллин, И.М. Структурная и параметрическая идентификация кинетических моделей химических реакций с участием металлоорганических соединений на основе информационно-вычислительной аналитической системы / И.М. Губайдуллин, К.Ф. Коледина, С.И. Спивак // Химическая промышленность сегодня. 2014. № 11. С. 18-27.

20. Зайнуллин, Р.З. Кинетика каталитического риформинга бензина // Кинетика и катализ / Р.З. Зайнуллин, К. Ф. Коледина, А. Ф. Ахметов, И. М. Губайдуллин., 2017, т. 58, № 3, С. 1-12.

21. Нурисламова, Л.Ф., Редукция детальных схем химических превращений окислительных реакций формальдегида и водорода на основании результатов анализа чувствительности математической модели / Л.Ф. Нурисламова, И.М. Губайдуллин // Вычислительные методы и программирование: новые вычислительные технологии. 2014. Т. 15. № 4. С. 685-696.

References

1. Slinko, M. G. The history of the development of mathematical modeling of catalytic processes and reactors / M. G. Slinko // Theoretical foundations of chemical technology. 2007. Vol. 41. No. 1. P. 16-34.

2. Koledin, S.N. Information system for assessing the relationship of objective functions and the study of optimal conditions for a complex catalytic reaction using multi-purpose optimization methods / S.N. Koledin, A.P. Karpenko, K.F. Koledina, I.M. Gubaidullin // *Electrotechnical and information complexes and systems*. 2017. V. 13. No. 4. P. 71-81.
3. Koledina, K.F. Multi-criteria optimization of the conditions for the catalytic reaction of ethanol dehydrogenation to ethyl acetate / K. F. Koledina, S. N. Koledin, I. M. Gubaidullin // *Bulletin of Bashkir University*. 2018. Vol. 23. No. 2, pp. 385-389.
4. Glamazdin, E.S., Management of corporate programs: information systems and mathematical models / E.S. Glamazdin, D.A. Novikov, A.V. Tsvetkov - Moscow: IPU RAS, 2003. - 159 p.
5. Novichkova, A.V. Information complex for constructing a kinetic model for the reaction of hydroalumination of olefins by triisobutylaluminum. / A.V. Novichkova, Yu.O. Bobreneva, I.M. Gubaydullin, K.F. Koledina // *Electrical and information systems and systems*. № 4, t. 10, 2014. p. 58-63
6. Sable, I.M. The choice of optimal parameters in problems with many criteria: study guide for universities / I.M. Sable, R.B. Statnikov. - 2nd ed., Pererab. and add. - M.: Drofa, 2006. -175c.
7. Koledina, K.F. Information system for constructing a kinetic model of a catalytic reaction, planning an economically optimal chemical experiment / S.N. Koledin, I.M. Gubaydullin, R.R. Safin, I.V. Akhmetov // *Control Systems and Information Technologies*, №3 (61), 2015. - P. 79-84.
8. Spivak, S. I. Information-computational analytical system of theoretical optimization of catalytic processes / S. I. Spivak, K. F. Koledina, S. N. Koledin, I. M. Gubaidullin // *Applied Informatics / Journal of applied informatics*. Volume 12. Number 1 (67). 2017. with. 39-49
9. Konopleva, I.A. Information technologies / I.A. Konopleva, O.A. Khokhlova, A.V. Denisov - M.: TK Velbi, Prospect Publishing House. 2007 - 304 p.
10. Koledina, K. F. Kinetics and the mechanism of the catalytic reaction of alcohols with dimethyl carbonate / K. F. Koledina, S. N. Koledin, N. A. Schadneva, I. M. Gubaidullin // *Journal of Physical Chemistry*, 2017, volume 91, № 3, p. 422-428
11. Koledina, K. F. Kinetic model of the catalytic reaction of dimethylcarbonate with alcohols in the presence of Co₂ (CO) 8 and W (CO) 6 / K. F. Koledina, S. N. Koledin, N. A. Schadneva, Y. Yu. Mayakova, I. M. Gubaydullin // *Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis*. DOI: 10.1007 / s11144-017-1181-3
12. Koledin, S.N. Optimal control and optimum sensitivity in problems of chemical kinetics / S.N. Koledin, K.F. Koledina // *Journal SVMO*. 2016. V. 18. No. 3. - P. 137-144.
13. Koledin, S.N. Determination of optimal conditions for catalytic processes based on economic criteria / S.N. Koledin, K.F. Koledina, I.M. Gubaydullin, S.I. Spivak // *Chemical industry today*. №10. 2016 pp. 24-35.
14. Koledin, S.N. Planning an economically optimal chemical experiment based on a kinetic model of the catalytic reaction of the interaction of alcohols with dimethyl carbonate / S.N. Koledin, K.F. Koledina // *Journal SVMO*. 2015. T.17. №2. P.43-50.
15. Nurislamova L.F. Development of a compact kinetic model of propane pyrolysis using sensitivity analysis methods / L.F. Nurislamova - dissertation for the degree of Candidate of Physical and Mathematical Sciences: Bashkir State University. Ufa, 2015.
16. Karpenko, A.P. Main essences of population algorithms for the global optimization problem / A.P. Karpenko // *Information and mathematical technologies in science and management*. 2016. № 2. p. 8-17.
17. Dimitrov, V.I. Simple kinetics / V.I. Dimitrov - Novosibirsk: Science and Life, 1982. – 380p.
18. Novichkova, A.V. Information systems for modeling the reactivity of alkenes in the reaction of hydroalumination of olefins with triisobutylaluminum. / A.V. Novichkova, Yu.O. Bobreneva, I.M. Gubaydullin, K.F. Koledina // *Electrical and information systems and systems*. № 3, t. 10, 2014. pp. 55-61.
19. Gubaydullin, I.M. Structural and parametric identification of kinetic models of chemical reactions with the participation of organometallic compounds based on information-computational analytical system / I.M. Gubaydullin, K.F. Koledina, S.I. Spivak // *Chemical industry today*. 2014. No. 11. P. 18-27.
20. Zaynullin, R.Z. Kinetics of catalytic reforming of gasoline // *Kinetics and catalysis* / R.Z. Zainullin, K. F. Koledina, A. F. Akhmetov, I. M. Gubaidullin., 2017, vol. 58, No. 3, P. 1–12.
21. Nurislamova, L.F. Reduction of detailed schemes for chemical transformations of oxidative reactions of formaldehyde and hydrogen based on the results of a sensitivity analysis of a mathematical model / L.F. Nurislamova, I.M. Gubaidullin // *Computational methods and programming: new computing technologies*. 2014. Vol. 15. No. 4. P. 685-696.