

УДК 517.977.58, 004.9, 66.09

Математическое моделирование и вычислительные аспекты многокритериальной оптимизации условий проведения лабораторной каталитической реакции*

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

¹Институт нефтехимии и катализа Уфимского федерального исследовательского центра 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.), irekmars@mail.ru (Губайдуллин И.М.), koledinsrg@gmail.com (Коледин С.Н.)

Английская версия этой статьи печатается в журнале “Numerical Analysis and Applications” № 2, Vol. 15, 2022.

Коледина К.Ф., Губайдуллин И.М., Коледин С.Н. Математическое моделирование и вычислительные аспекты многокритериальной оптимизации условий проведения лабораторной каталитической реакции // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2022. — Т. 25, № 2. — С. 129–140.

На основе ранее разработанной кинетической модели каталитической реакции синтеза бензилалкиловых эфиров проведена двух- и трехкритериальная оптимизация условий реакции. Сформулирована задача многокритериальной оптимизации с определением варьируемых параметров (температура, молярные соотношения реагентов, время проведения), критериев оптимальности (выход целевого и побочных продуктов), ограничений на варьируемые параметры. Рассмотрены вычислительные аспекты многокритериальной оптимизации сеточным алгоритмом (зондирования). Рассчитанные значения фронта (критерии оптимальности) и множества (варьируемые параметры) Парето определяют исчерпывающие значения условий проведения реакции и позволяют лицу, принимающему решение, подобрать наиболее оптимальные. Такой подход позволит дать технологические рекомендации по промышленной реализации процесса синтеза бензилбутилового эфира в присутствии металлокомплексного катализатора с максимальным выходом целевых продуктов и минимальным содержанием побочных.

DOI: 10.15372/SJNM20220203

Ключевые слова: многокритериальная оптимизация, кинетическая модель, бензилалкиловые эфиры, молярные соотношения исходных реагентов, Парето-аппроксимация.

Koledina K.F., Gubaydullin I.M., Koledin S.N. Mathematical modeling and computational aspects of multi-criteria optimization of the conditions of the laboratory catalytic reaction // Siberian J. Num. Math. / Sib. Branch of Russ. Acad. of Sci. — Novosibirsk, 2022. — Vol. 25, № 2. — P. 129–140.

Based on the previously developed kinetic model of the catalytic reaction of the synthesis of benzylalkyl ethers, two- and three-criteria optimization of the conditions was carried out. The problem of multicriteria optimization is formulated with the definition of variable parameters: reaction temperature, proportionality coefficient of the starting reagents, reaction time; optimality criteria: yield of a target and by-products; restrictions on variable parameters. The computational aspects of multicriteria optimization by a grid algorithm (sensing) are examined. The calculated front values (optimality criteria) and Pareto sets (variable parameters) determine the exhaustive values of the reaction conditions and allow the decision maker to choose the most optimal ones. This made it possible to give technological recommendations for the industrial implementation

*Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 19-71-00006).

of the synthesis of a benzyl butyl ether in the presence of a metal complex catalyst with a maximum yield of target products and a minimum content of by-products.

Keywords: *multicriteria optimization, kinetic model, benzylalkyl ethers, molar ratios of initial reagents, Pareto approximation.*

1. Введение

Целью моделирования лабораторных каталитических реакций является определение оптимальных условий их проведения для дальнейшего внедрения в производство. Моделирование и последующая оптимизация проводятся по кинетическим моделям, основанным на законах химии и физики (закон действующих масс, поверхностей, движения потока и др.) и описывающим экспериментальные данные. Первоначальными и основными критериями оптимальности новых каталитических реакций является выход целевых и побочных продуктов. Необходимо определение условий, обеспечивающих одновременное достижение экстремумов по заданным критериям, что является задачей многокритериальной оптимизации [1–3].

Объектом исследования данной работы является каталитическая реакция синтеза бензилалкиловых эфиров. Целевой продукт реакции — бензилбутиловый эфир, который является крупнотоннажным промышленным продуктом и широко применяется для ароматизации продуктов парфюмерной, косметической и пищевой промышленности [4]. Исходными реагентами реакции являются бензиловый и алифатические спирты [5–7].

Цель исследования данной работы — постановка и решение задачи многокритериальной оптимизации для рассматриваемого многостадийного химического процесса на основе ранее разработанной кинетической модели.

2. Кинетическая модель каталитической реакции синтеза бензилалкиловых эфиров

В работе [8] разработана кинетическая модель реакции синтеза бензилбутилового эфира межмолекулярной дегидратацией бензинового и н-бутилового спиртов в присутствии металлокомплексного катализатора CuBr_2 . Математическая модель кинетики процесса разработана на основе закона действующих масс [9–11] и имеет вид системы обыкновенных нелинейных дифференциальных уравнений:

$$\frac{dy_i}{dt} = \sum_{j=1}^J \nu_{ij} k_j^0 \exp\left(-\frac{E_j}{RT}\right) \prod_{i=1}^I y_i^{|\alpha_{ij}|}, \quad i = 1, \dots, I, \quad (1)$$

с начальными условиями: $t = 0$, $y_i(0) = y_i^0$; $t \in [0, t^*]$. Здесь y_i — концентрации веществ, участвующих в реакции, моль/л; t — время, мин; J — число стадий; I — число реагентов; ν_{ij} — коэффициенты стехиометрической матрицы; k_j^0 — предэкспоненциальные множители констант скоростей стадий, 1/мин; α_{ij} — отрицательные элементы матрицы ν_{ij} ; E_j — энергии активации стадий, ккал/моль; R — газовая постоянная, 2 кал/(моль*К); T — температура, К.

В уравнениях химической кинетики, в частности в рассматриваемом процессе, приводится описание процессов, в которых образуются быстрореагирующие активные частицы (радикалы, ионы, возбужденные молекулы и др.) и стабильные молекулы. Наличие разных частиц приводит к различным временным характеристикам описания протекающих

в системе процессов, что обуславливает жесткость задачи. Поэтому численные методы решения прямой кинетической задачи должны обладать свойством численного интегрирования жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Согласно математической модели (1), была решена прямая и обратная задачи расчета кинетических параметров с применением многоступенчатого метода Гира переменного порядка [12] и алгоритмов однокритериальной оптимизации (генетический алгоритм [13] и алгоритм Хука–Дживса [14]). Схема химических превращений реакции и соответствующие значения кинетических параметров стадий приведены в таблице 1 [8].

Таблица 1. Стадии химических превращений и значения кинетических параметров каталитического синтеза бензилбутилового эфира ($[k_j] = [\ln k_j^0] = \text{л}/(\text{моль} \cdot \text{мин})$, $j=1,2,4,6,7,9$; $[k_j] = [\ln k_j^0] = 1/\text{мин}$, $j=3,5,8$; $[E_j] = \text{ккал}/\text{моль}$)

N	Стадии химических превращений	E_j	$\ln k_j^0$
1	$\text{PhCH}_2\text{OH}(Y_1) + \text{CuBr}_2(Y_2) \rightarrow [\text{PhCH}_2]^+[\text{CuBr}_2(\text{OH})]^- (Y_3)$	5.366	7.049
2	$[\text{PhCH}_2]^+[\text{CuBr}_2(\text{OH})]^- (Y_3) + \text{BuOH}(Y_4) \rightarrow$ $[\text{PhCH}_2\text{OBu}]H^+[\text{CuBr}_2(\text{OH})]^- (Y_5)$	12.18	15.45
3	$[\text{PhCH}_2\text{OBu}]H^+[\text{CuBr}_2(\text{OH})]^- (Y_5) \rightarrow$ $\text{PhCH}_2\text{OBu}(Y_6) + \text{H}_2\text{O}(Y_7) + \text{CuBr}_2(Y_2)$	10.31	9.49
4	$[\text{PhCH}_2]^+[\text{CuBr}_2(\text{OH})]^- (Y_3) + \text{PhCH}_2\text{OH}(Y_1) \rightarrow$ $[\text{PhCH}_2\text{OHCH}_2\text{Ph}]^+[\text{CuBr}_2(\text{OH})]^- (Y_8)$	13.96	17.61
5	$[\text{PhCH}_2\text{OHCH}_2\text{Ph}]^+[\text{CuBr}_2(\text{OH})]^- (Y_8) \rightarrow$ $\text{PhCH}_2\text{OCH}_2\text{Ph}(Y_9) + \text{H}_2\text{O}(Y_7) + \text{CuBr}_2(Y_2)$	21.69	24.15
6	$\text{BuOH}(Y_4) + \text{CuBr}_2(Y_2) \rightarrow [\text{Bu}]^+[\text{CuBr}_2(\text{OH})]^- (Y_{10})$	15.029	10.67
7	$[\text{Bu}]^+[\text{CuBr}_2(\text{OH})]^- (Y_{10}) + \text{BuOH}(Y_4) \rightarrow$ $[\text{BuOHBu}]^+[\text{CuBr}_2(\text{OH})]^- (Y_{11})$	18.46	20.38
8	$[\text{BuOHBu}]^+[\text{CuBr}_2(\text{OH})]^- (Y_{11}) \rightarrow \text{BuOBu}(Y_{12}) + \text{H}_2\text{O}(Y_7) + \text{CuBr}_2(Y_2)$	35.108	34.14
9	$[\text{Bu}]^+[\text{CuBr}_2(\text{OH})]^- (Y_{10}) + \text{PhCH}_2\text{OH}(Y_1) \rightarrow$ $[\text{PhCH}_2\text{OBu}]H^+[\text{CuBr}_2(\text{OH})]^- (Y_5)$	11.93	12.38

Реакция проходит через несколько стадий с образованием целевого бензилбутилового эфира $\text{PhCH}_2\text{OBu}(Y_6)$ двумя возможными путями, а также побочных дибензилового эфира $\text{PhCH}_2\text{OCH}_2\text{Ph}(Y_9)$ и дибутилового эфира $\text{BuOBu}(Y_{12})$. Последующее внедрение процесса в производство требует определения оптимальных условий проведения реакции с целью получения наибольшего выхода целевого продукта и наименьшего выхода побочных продуктов. На основании рассчитанных значений кинетических параметров и сравнительного анализа энергий активаций всех стадий схемы химических превращений с определением возможных путей протекания реакции возможна постановка задачи многокритериальной оптимизации (МКО) [15–17].

3. Многокритериальная оптимизация условий проведения каталитической реакции синтеза бензилалкиловых эфиров

Химические эксперименты проводились в интервале температур от 140°С до 175°С и начальном соотношении реагентов. Опыты проводились при следующих мольных соотношениях катализатора и реагентов: $[\text{CuBr}_2] : [\text{BuOH}] : [n - \text{BuOH}] = [Y_2] : [Y_1] : [Y_4] = 1 : 100 : 150, 1 : 100 : 200, 1 : 100 : 300, 1 : 100 : 400$. В рассматриваемом диапазоне температур и мольных соотношений необходимо определить оптимальные значения для достижения экстремумов по критериям оптимальности реакции [18, 19]. Тогда варьируемыми параметрами являются: температура реакции, мольные соотношения исходных

реагентов и время — с соответствующими физико-химическими ограничениями [20].

В указанных условиях в результате реакции бензилового и н-бутилового спиртов образуются целевой бензилбутиловый эфир Y_6 , дибензиловый эфир Y_9 , дибутиловый эфир Y_{12} . В этом случае задача многокритериальной оптимизации условий проведения каталитической реакции синтеза бензилбутилового эфира имеет вид:

- вектор варьируемых параметров $X = (x_1, x_2, x_3)$, где x_1 — температура реакции, T ; x_2 — мольное соотношение реагентов бутилового спирта к бензиловому спирту $N = [Y_4] : [Y_1]$; x_3 — время проведения реакции, t^* ; размерность вектора варьируемых параметров $|X| = 3$;
- вектор функция критериев оптимальности $F(X) = (f_1(X), f_2(X), f_3(X))$: f_1 — выход продукта Y_6 , максимизация; f_2 — выход продукта Y_9 , минимизация; f_3 — выход продукта Y_{12} , минимизация;
- $F(X)$ со значениями в целевом пространстве $\{F\} = R^{(F)} = R^3$ определено в области $D_X \subset \{X\} = R^{|X|} = R^3 : T \in [T_{\min}; T_{\max}], N \in [N_{\min}; N_{\max}], t^* \in [t_{\min}^*; t_{\max}^*]$.

Тогда необходимо максимизировать критерии оптимальности в области D_X с определением оптимальных значений варьируемых параметров X^* (множества Парето) и критериев оптимальности F^* (фронт Парето) по формуле

$$\max_{X \in D_X} F(X) = F(X^*) = F^*. \quad (2)$$

4. Вычислительные аспекты многокритериальной оптимизации

Задача многокритериальной оптимизации предполагает множество решений, относящихся к паретовским решениям [3, 21]. Лицо, принимающее решение, (ЛПР) получает на основе математических расчетов совокупность компромиссных решений. Точки, входящие в решение, должны быть недоминируемые (неулучшаемые).

При решении задачи многокритериальной оптимизации сеточным алгоритмом (алгоритм зондирования) вся область определения варьируемых параметров D_X разбивается на подобласти (ячейки). В каждой ячейке проводится расчет, и по совокупности ячеек определяется фронт Парето D_f^* — недоминируемые точки. В данных точках выводится значение варьируемых параметров (множество Парето) (рисунок 1).

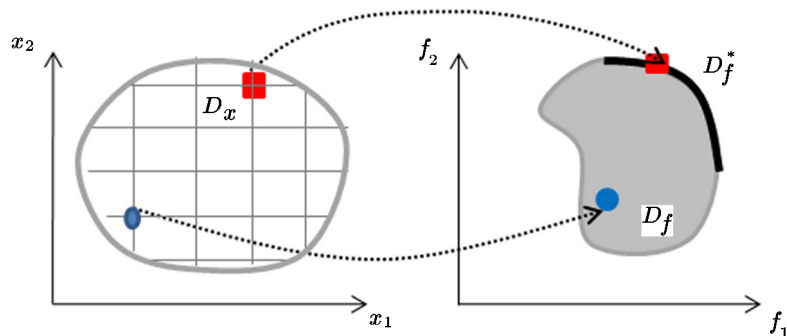


Рис. 1. Сеточный алгоритм (зондирования): x_1, x_2 — варьируемые параметры; f_1, f_2 — критерии оптимальности

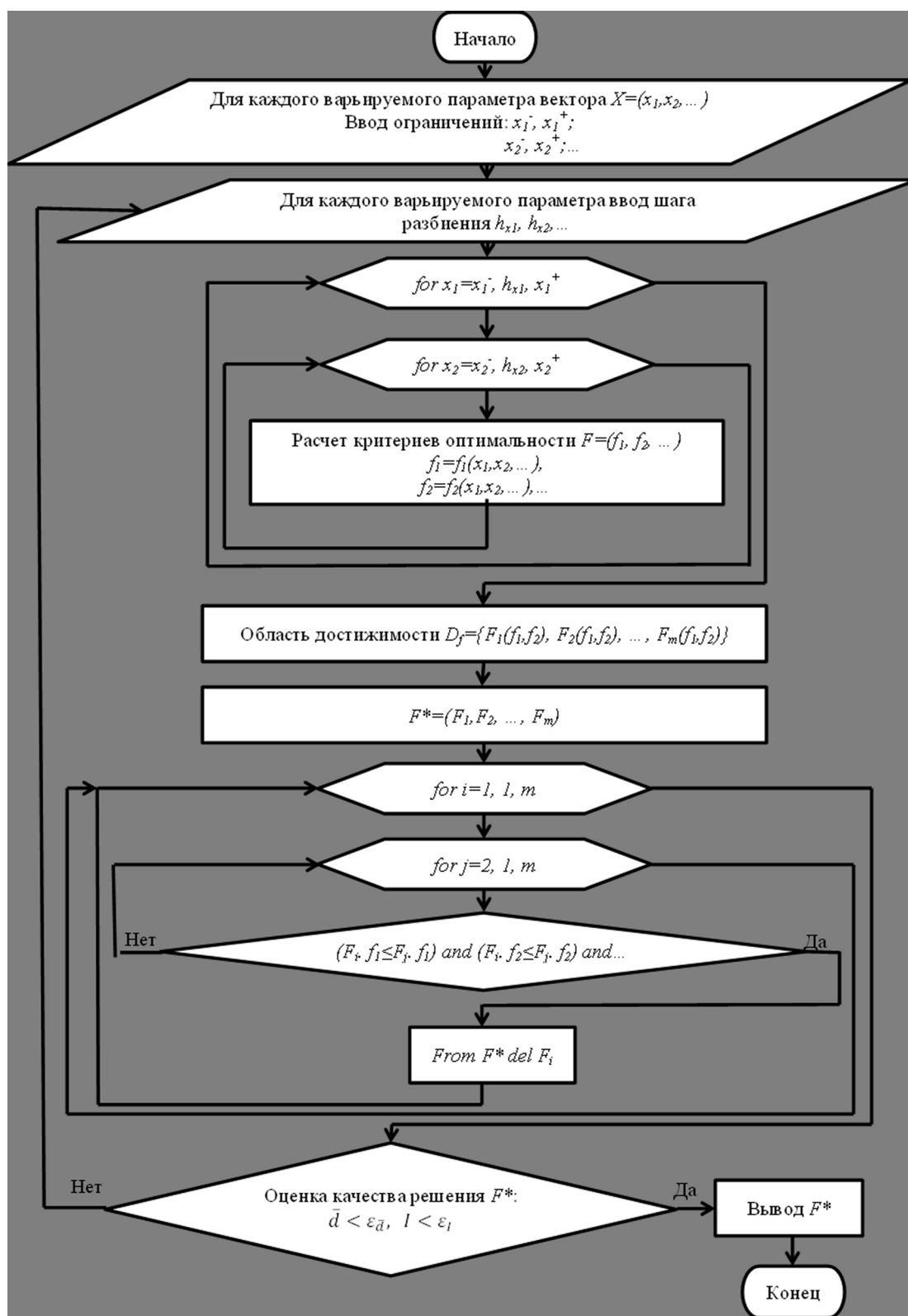


Рис. 2. Блок-схема работы алгоритма зондирования

Для решения задач многокритериальной оптимизации программно реализован алгоритм зондирования (или сеточный алгоритм). На рис. 2 приведена блок-схема работы алгоритма зондирования. Входными данными для алгоритма зондирования являются прямые ограничения на каждый из варьируемых параметров и шаг разбиения каждого параметра. В соответствии с этими данными на область определения накладывается сетка, и в каждом узле сетки определяются значения всех критериев оптимальности f_i . Все рассчитанные значения образуют область достижимости D_f . В вектор F^* помещаются все найденные точки. Затем удаляются из F^* те точки, которые по всем координатам (значениям критериев) не лучше других точек. В результате в F^* остаются только неуплучшаемые значения критериев (фронт Парето). Проводится оценка качества решения по параметрам [18]: среднее расстояние и рассеивание; и, при необходимости, меняется шаг разбиения. На выходе из алгоритма получается множество неуплучшаемых значений критериев оптимальности F^* .

Алгоритм зондирования реализован в виде дополнительного модуля автоматизированной системы идентификации условий проведения гомогенных и гетерогенных реакций в задачах многоцелевой оптимизации [22] с применением распараллеливания [23–25].

5. Результаты и обсуждение

На рис. 3–5 и табл. 2 приведены результаты решения задачи многокритериальной оптимизации условий проведения реакции синтеза бензилбутилового эфира в присутствии металлокомплексного катализатора.

На рис. 3 приведена аппроксимация фронта Парето МКО-задачи реакции синтеза бензилбутилового эфира в присутствии металлокомплексного катализатора. Кривая I — случай трех варьируемых параметров: температуры, мольных соотношений реагентов и времени реакции; кривая II — случай двух варьируемых параметров: температуры и мольных соотношений реагентов, а время постоянное и равно 600 мин в соответствии с экспериментом.

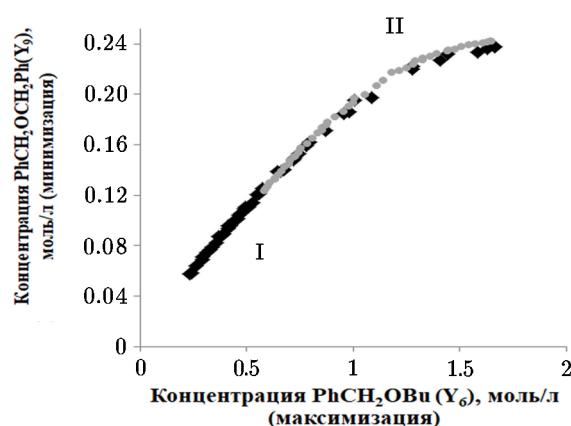


Рис. 3. Аппроксимация фронта Парето МКО-задачи реакции синтеза бензилбутилового эфира в присутствии металлокомплексного катализатора: I — три варьируемых параметра, II — два варьируемых параметра

Дополнительное варьирование продолжительности реакции позволяет добиться уменьшения выхода побочного продукта дибензилового эфира (Y_9), но с уменьшени-

ем выхода целевого бензилбутилового эфира (Y_6). На рис. 3 черным маркером выделен участок, не пересекающийся с кривой II. Соответствующие значения варьируемых параметров, т. е. множество Парето, приведены на рис. 4.

На рис. 4а приведены значения варьируемых параметров: температуры реакции и мольных соотношений реагентов, позволяющие достичь экстремумов критериев оптимальности по рис. 3 (кривая II). Ввод третьего варьируемого параметра — времени реакции в оптимизацию — позволяет получить значения условий проведения реакции, обозначенные на рис. 4б.

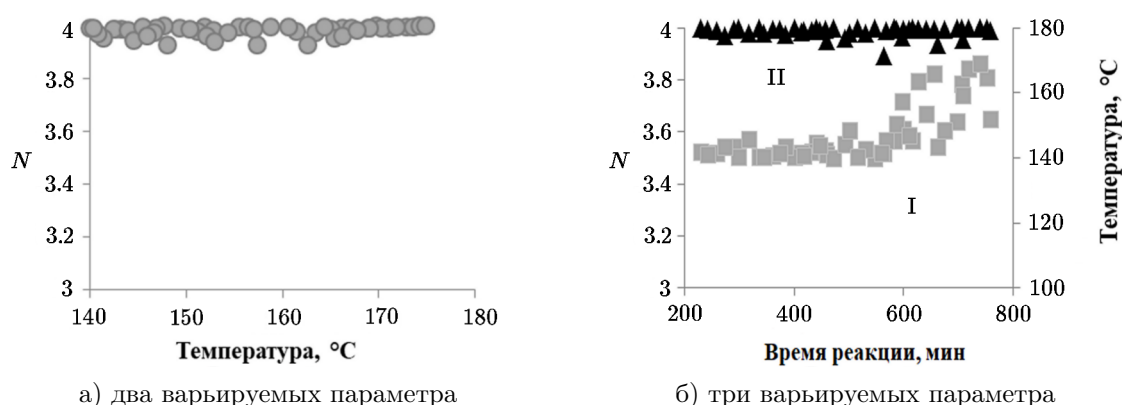


Рис. 4. Аппроксимация множества Парето МКО-задачи реакции синтеза бензилбутилового эфира в присутствии металлокомплексного катализатора

Множество I на рис. 4б отражает зависимость времени реакции и температуры, множество II — зависимость времени реакции и мольного соотношения реагентов. Оптимальным значением мольного соотношения реагентов является значение 4, что означает оптимальность начальных соотношений исходных реагентов $[\text{CuBr}_2] : [\text{BuOH}] : [n - \text{BuOH}] = [Y_2] : [Y_1] : [Y_4] = 1 : 100 : 400$.

Исследование трехкритериальной задачи оптимизации (f_1 — выход продукта Y_6 , максимизация; f_2 — выход продукта Y_9 , минимизация; f_3 — выход продукта Y_{12} , минимизация) с тремя варьируемыми параметрами: температура, мольное соотношение реагентов и время — позволяет получить условия проведения реакции, указанные в табл. 2, и соответствующие значения критериев оптимальности.

Значение мольного соотношения реагентов N при трех критериях оптимальности варьируется от 1 до 4 в связи с тем, что при минимальных концентрациях исходного бутилового спирта выход побочного дибутилового эфира также является минимальным (см. значение в первой строке табл. 2). Соответственно при максимальных значениях мольного соотношения реагентов N выход дибутилового эфира увеличивается при одновременном увеличении выхода целевого бензилбутилового эфира (см. значение во второй строке табл. 2).

Таблица 2. Аппроксимация множества и фронта Парето МКО-задачи реакции синтеза бензилбутилового эфира в присутствии металлокомплексного катализатора

N	$T, ^\circ\text{C}$	$t, \text{мин}$	$N = [Y_4] : [Y_1]$	$[Y_6], \text{моль/л}$	$[Y_9], \text{моль/л}$	$[Y_{12}], \text{моль/л}$
A	144.8	655	1.15	0.64	0.41	4.36E-05
B	168.1	765	3.95	1.66	0.23	0.011
C	144.9	389	3.40	0.43	0.11	4.72E-05

Графическое изображение фронта Парето приведено на рис. 5. На этом рисунке точки с экстремальными значениями по одному из критериев обозначены А, В, С. Точка С соответствует минимальным значениям побочных продуктов Y_9 и Y_{12} , но и выход целевого продукта минимален. Увеличение содержания дибензилового эфира позволяет добиться роста выхода целевого бензилбутилового эфира — точка А. Максимальный выход целевого Y_6 соответствует максимальному значению побочного дибутилового эфира и дибензилового эфира — точка В. Рассчитанные значения полностью соответствуют экспериментальным данным [8], что определяет точность полученных результатов.

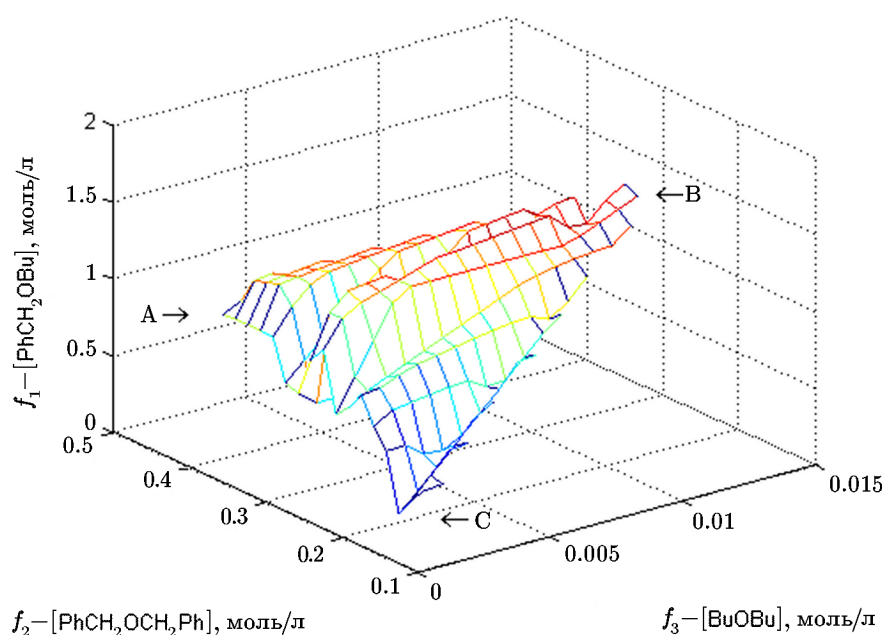


Рис. 5. Аппроксимация фронта Парето МКО-задачи реакции синтеза бензилбутилового эфира в присутствии металлокомплексного катализатора при трех критериях оптимальности

Таким образом, значения множества Парето (варьируемые параметры) и фронта Парето (критерии оптимальности), приведенные в табл. 2 и на рис. 5, для поставленной задачи многокритериальной оптимизации каталитической реакции синтеза бензилбутилового эфира определяют исчерпывающие значения условий проведения реакции и позволяют лицу, принимающему решение, подобрать наиболее оптимальные значения для температуры, мольного соотношения реагентов и времени проведения реакции.

Адекватность полученных решений многокритериальной оптимизации реакции синтеза бензилбутилового эфира в присутствии металлокомплексного катализатора CuBr_2 основывается на соответствии экспериментальным данным [5].

В настоящей работе на основе ранее разработанной кинетической модели проведена двух- и трехкритериальная оптимизация условий проведения исследуемого процесса. Применяемый алгоритм реализован в виде отдельного модуля автоматизированной системы на основе алгоритма зондирования, что позволило определить технологические рекомендации по промышленной реализации процесса синтеза бензилбутилового эфира в присутствии катализатора CuBr_2 с максимальным выходом целевых продуктов и минимальным содержанием побочных.

Литература

1. **Aleksandrov V.M.** Optimal resource consumption control of perturbed systems // Numerical Analysis and Applications. — 2017. — Vol. 10, № 3. — P. 185–197.
2. **Aleksandrov V.M.** Computing of optimal inertial control of a linear system // Numerical Analysis and Applications. — 2015. — Vol. 8, № 1. — P. 1–12.
3. **Koledina K.F., Koledin S.N., Karpenko A.P., Gubaydullin I.M., Vovdenko M.K.** Multi-objective optimization of chemical reaction conditions based on a kinetic model // J. of Mathematical Chemistry. — 2019. — Vol. 57, iss. 1. — P. 484–493.
4. **Войткевич С.А.** 865 душистых веществ для парфюмерии и бытовой химии. — М.: Пищевая промышленность, 1994.
5. **Байгузина А.Р., Гималетдинова Л.И., Хуснутдинов Р.И.** Синтез бензилалкиловых эфиров межмолекулярной дегидратацией бензилового спирта с алифатическими спиртами под действием медьсодержащих катализаторов // Журн. органической химии. — 2018. — Т. 54, № 8. — С. 1140–1146.
6. **Yu J.-L., Wang H., Zou K.-F. et al.** Selective synthesis of unsymmetrical ethers from different alcohols catalyzed by sodium bisulfite // Tetrahedron. — 2013. — Vol. 69, iss. 1. — P. 310–315.
7. **Khusnutdinov R.I., Bayguzina A.R., Mukminov R.R., Gimaletdinova L.I., Dzhemilev U.M.** Synthesis of 1-adamantyl alkyl ethers by intermolecular dehydration of 1-adamantanol with alcohols catalyzed by copper compounds // Arkivoc. — 2014. — Vol. 2014, № 4. — P. 342–349.
8. **Коледина К.Ф., Губайдуллин И.М., Коледин С.Н. и др.** Кинетика и механизм синтеза бензилбутилового эфира в присутствии медьсодержащих катализаторов // Журн. физ. химии. — 2019. — Т. 93, № 11. — С. 1–6.
9. **Коледина К.Ф., Губайдуллин И.М.** Кинетика и механизм каталитических реакций гидроалюминирования олефинов алюминийорганическими соединениями // Журн. физ. 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 J. of Physical Chemistry A. — 2016. — Vol. 90, iss. 5. — P. 914–921.
10. **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.
11. **Коледина К.Ф., Коледин С.Н., Щаднева Н.А., Губайдуллин И.М.** Кинетика и механизм каталитической реакции спиртов с диметилкарбонатом // Журн. физ. 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 J. of Physical Chemistry A. — 2017. — Vol. 91, iss. 3. — P. 444–449.
12. **Gear C.V.** Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations. — Englewood Cliffs: Prentice-Hall, 1971.
13. **Poli R., Langdon W.B., McPhee N.F.** A Field Guide to Genetic Programming. — 2008. — URL: <http://www.gp-field-guide.org.uk>.
14. **Аттетков А.В., Галкин С.В., Зарубин В.С.** Метод Хука–Дживса. Методы оптимизации. — М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2003.
15. **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.
16. **Соболь И.М., Статников Р.Б.** Выбор оптимальных параметров в задачах со многими критериями: учебное пособие для вузов. — М.: Дрофа, 2006.

17. **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).— Austin, 2009.— P. 623–633.
18. **Карпенко А.П.** Современные алгоритмы поисковой оптимизации. Алгоритмы, вдохновленные природой: учебное пособие. — М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2014.
19. **Koledina K.F., Koledin S.N., Gubaydullin I.M.** Optimal conditions for single-cycle and multi-cycle reactions based on a kinetic model // J. Phys.: Conf. Ser.— 2018.— Article id. 1096 012077.
20. **Спивак С.И., Коледина К.Ф., Коледин С.Н., Губайдуллин И.М.** Информационно-вычислительная аналитическая система теоретической оптимизации каталитических процессов // Прикладная информатика.— 2017.— № 1(67).— С. 39–49.
21. **Deb K., Mohan M., Mishra S.** Towards a quick computation of well-spread Pareto-optimal solutions // Evolutionary Multi-Criterion Optimization.— Springer, 2003.— P. 222–236.
22. **Koledina K.F., Koledin S.N., Gubaydullin I.M.** Automated system for identification of conditions for homogeneous and heterogeneous reactions in multiobjective optimization problems // Numerical Analysis and Applications.— 2019.— Vol. 12, № 2.— P. 116–125.
23. **Titarenko S.S., Hildyard M., Kulikov I.M. et al.** Multilevel parallelization: grid methods for solving direct and inverse problems // Communications in Computer and Information Science.— Springer, 2016.— P. 118–131.
24. **Kulikov I., Chernykh I., Tutukov A.** A new hydrodynamic model for numerical simulation of interacting galaxies on Intel Xeon Phi supercomputers // J. Phys.: Conf. Ser.— 2016.— Vol. 719.— Article id. 012006.
25. **Alonso P., Argueso F., Cortina R., Ranilla J., Vidal A.M.** Non-linear parallel solver for detecting point sources in CMB maps using Bayesian techniques // J. of Mathematical Chemistry.— 2013.— Vol. 51, № 4.— P. 1153–1163.

Поступила в редакцию 18 сентября 2020 г.

После исправления 4 июля 2021 г.

Принята к печати 27 января 2022 г.

Литература в транслитерации

1. **Aleksandrov V.M.** Optimal resource consumption control of perturbed systems // Numerical Analysis and Applications.— 2017.— Vol. 10, № 3.— P. 185–197.
2. **Aleksandrov V.M.** Computing of optimal inertial control of a linear system // Numerical Analysis and Applications.— 2015.— Vol. 8, № 1.— P. 1–12.
3. **Koledina K.F., Koledin S.N., Karpenko A.P., Gubaydullin I.M., Vovdenko M.K.** Multi-objective optimization of chemical reaction conditions based on a kinetic model // J. of Mathematical Chemistry.— 2019.— Vol. 57, iss. 1.— P. 484–493.
4. **Voitkevich S.A.** 865 dushistykh veschestv dlya parfyumerii i bytovoi khimii.— М.: Pischevaya promyshlennost', 1994.
5. **Baiguzina A.R., Gimaletdinova L.I., Khusnutdinov R.I.** Sintez benzilalkilovykh efirov mezhmolekulyarnoi degidratatsiei benzilovogo spirta s alifaticheskimi spirtami pod deistviem med'soderzhaschikh katalizatorov // Zhurn. organicheskoi khimii.— 2018.— Т. 54, № 8.— S. 1140–1146.
6. **Yu J.-L., Wang H., Zou K.-F. et al.** Selective synthesis of unsymmetrical ethers from different alcohols catalyzed by sodium bisulfite // Tetrahedron.— 2013.— Vol. 69, iss. 1.— P. 310–315.

7. **Khusnutdinov R.I., Bayguzina A.R., Mukminov R.R., Gimaletdinova L.I., Dzhemilev U.M.** Synthesis of 1-adamantyl alkyl ethers by intermolecular dehydration of 1-adamantanol with alcohols catalyzed by copper compounds // *Arkivoc.* — 2014. — Vol. 2014, № 4. — P. 342–349.
8. **Koledina K.F., Gubaidullin I.M., Koledin S.N. i dr.** Kinetika i mekhanizm sinteza benzilbutilovogo efira v prisutstvii med'soderzhaschikh katalizatorov // *Zhurn. fiz. khimii.* — 2019. — T. 93, № 11. — S. 1–6.
9. **Koledina K.F., Gubaidullin I.M.** Kinetika i mekhanizm kataliticheskikh reaktsii gidroaluminirovaniya olefinov alyuminiorganicheskimi soedineniyami // *Zhurn. fiz. khimii.* — 2016. — T. 90, № 5. — S. 671–678. *Perevod: Koledina K.F., Gubaidullin I.M. Kinetics and mechanism of olefin catalytic hydroalumination by organoaluminum compounds // Russian J. of Physical Chemistry A.* — 2016. — Vol. 90, iss. 5. — P. 914–921.
10. **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 $\text{CO}_2(\text{CO})_8$ AND $\text{W}(\text{CO})_6$ // *Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis.* — 2017. — Vol. 121, № 2. — P. 1–14.
11. **Koledina K.F., Koledin S.N., Schadneva N.A., Gubaidullin I.M.** Kinetika i mekhanizm kataliticheskoi reaktsii spirtov s dimetilkarbonatom // *Zhurn. fiz. khimii.* — 2017. — T. 91, № 3. — S. 422–428. *Perevod: 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 J. of Physical Chemistry A.* — 2017. — Vol. 91, iss. 3. — P. 444–449.
12. **Gear C.V.** Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations. — Englewood Cliffs: Prentice-Hall, 1971.
13. **Poli R., Langdon W.B., McPhee N.F.** A Field Guide to Genetic Programming. — 2008. — URL: <http://www.gp-field-guide.org.uk>.
14. **Attetkov A.V., Galkin S.V., Zarubin V.S.** Metod Khuka–Dzhivsa. Metody optimizatsii. — M.: Izd-vo MGTU im. N.E. Bauman, 2003.
15. **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.
16. **Sobol' I.M., Statnikov R.B.** Vybor optimal'nykh parametrov v zadachakh so mnogimi kriteriyami: uchebnoe posobie dlya vuzov. — M.: Drofa, 2006.
17. **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).* — Austin, 2009. — P. 623–633.
18. **Karpenko A.P.** Sovremennye algoritmy poiskovoi optimizatsii. Algoritmy, vdokhnovlennyye prirodoy: uchebnoe posobie. — M.: Izd-vo MGTU im. N.E. Bauman, 2014.
19. **Koledina K.F., Koledin S.N., Gubaydullin I.M.** Optimal conditions for single-cycle and multi-cycle reactions based on a kinetic model // *J. Phys.: Conf. Ser.* — 2018. — Article id. 1096 012077.
20. **Spivak S.I., Koledina K.F., Koledin S.N., Gubaidullin I.M.** Informatsionno-vychislitel'naya analiticheskaya sistema teoreticheskoi optimizatsii kataliticheskikh protsessov // *Prikladnaya informatika.* — 2017. — № 1(67). — S. 39–49.
21. **Deb K., Mohan M., Mishra S.** Towards a quick computation of well-spread Pareto-optimal solutions // *Evolutionary Multi-Criterion Optimization.* — Springer, 2003. — P. 222–236.
22. **Koledina K.F., Koledin S.N., Gubaydullin I.M.** Automated system for identification of conditions for homogeneous and heterogeneous reactions in multiobjective optimization problems // *Numerical Analysis and Applications.* — 2019. — Vol. 12, № 2. — P. 116–125.

23. **Titarenko S.S., Hildyard M., Kulikov I.M. et al.** Multilevel parallelization: grid methods for solving direct and inverse problems // Communications in Computer and Information Science. — Springer, 2016. — P. 118–131.
24. **Kulikov I., Chernykh I., Tutukov A.** A new hydrodynamic model for numerical simulation of interacting galaxies on Intel Xeon Phi supercomputers // J. Phys.: Conf. Ser. — 2016. — Vol. 719. — Article id. 012006.
25. **Alonso P., Argueso F., Cortina R., Ranilla J., Vidal A.M.** Non-linear parallel solver for detecting point sources in CMB maps using Bayesian techniques // J. of Mathematical Chemistry. — 2013. — Vol. 51, № 4. — P. 1153–1163.