

## РАЗРАБОТКА КИНЕТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ СЛОЖНЫХ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ МЕТОДОМ СЕТЕВОГО ОПЕРАТОРА

Губайдуллин И.М.<sup>1</sup>, Дивеев А.И.<sup>2</sup>, Константинов С.В.<sup>3</sup>, Софронова Е.А.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>ФГБУН «Институт нефтехимии и катализа Российской академии наук», Уфа, Россия (450075, Уфа, проспект Октября, 141), e-mail: irekmars@mail.ru

<sup>2</sup>ФБГУН «Вычислительный центр им. А.А. Дородницына Российской академии наук», Москва, Россия (119333, Москва, ул. Вавилова, 40), e-mail: aidiveev@mail.ru

<sup>3</sup>ФГАОУ ВО «Российский университет дружбы народов», Москва, Россия (117198, Москва, ул. Миклухо-Маклая, 6), e-mail: svkonstantinov@mail.ru

---

В работе представлен новый метод идентификации математических моделей сложных химических реакций. Авторы обращают внимание, что закон действующих масс в химической кинетике, не всегда позволяет адекватно описывать сложные химические реакции, и для таких случаев предлагают использовать метод сетевого оператора. Метод сетевого оператора используется для представления математической модели в матричном виде. Для поиска оптимальной модели используется многокритериальный вариационный генетический алгоритм, осуществляющий поиск на множестве малых вариаций некоторых заданных возможных решений. В вычислительном эксперименте рассматривается химическая реакция гидроалюминирования олефинов алюминийорганическими соединениями в присутствии катализатора. Результаты вычислительного эксперимента показывают адекватное описание сложных химических реакций и подтверждают эффективность метода сетевого оператора для вывода кинетических уравнений.

---

Ключевые слова: кинетическая модель, идентификация математической модели, метод сетевого оператора.

## DEVELOPMENT OF KINETIC MODELS FOR THE COMPLEX CHEMICAL REACTIONS BY THE NETWORK OPERATOR

Gubaydullin I.M.<sup>1</sup>, Diveev A.I.<sup>2</sup>, Konstantinov S.V.<sup>3</sup>, Sofronova E.A.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Institution of Petrochemistry and Catalysis of RAS, Ufa, Russia (450075, Ufa, Otyabrya av., 141), e-mail: irekmars@mail.ru

<sup>2</sup>Institution of Russian Academy of Sciences Dorochnyn Computing Centre of RAS, Moscow, Russia (119333, Moscow, Vavilov st., 40), e-mail: aidiveev@mail.ru

<sup>3</sup>Peoples' friendship university of Russia, Moscow, Russia (117198, Moscow, Mikluho-Maklaya st., 6), e-mail: svkonstantinov@mail.ru

---

A new method for the identification of mathematical models of complex chemical reactions is presented. The authors note that the principle of mass action in chemical kinetics doesn't always describe the complex chemical reactions adequately, and for such cases suggest to use the network operator method. The network operator method is used to present a mathematical model in a matrix form. To find the optimal model authors use multicriterial variational genetic algorithm that searches on a set of small variations of given possible solutions. In the computational experiment it is considered a chemical reaction of olefine hydroalumination by organoaluminum compounds in the presence of a catalyst. Results of computational experiments show an adequate description of complex chemical reactions and confirm the effectiveness of the network operator method for deriving kinetic equations.

---

Keywords: kinetic models, identification of mathematical model, Network Operator Method.

Кинетическая модель – это система уравнений, описывающих химические реакции в условиях, где отсутствует сопротивление массо- и теплопереносу, в зависимости от концентраций реагирующих веществ в газовой фазе и на поверхности катализатора, температуры, давления, изменяющихся во всей области параметров, которые встречаются при практической реализации процесса [7]. Кинетическая модель является первым и необходимым этапом при моделировании химических процессов и аппаратов. Поэтому от

степени адекватности математического описания кинетической модели зависит выбор оптимальных условий проведения сложной химической реакции [8]. Для прогнозирования поведения химических реакций в любой момент времени в любых условиях используют разработанный ещё в 19 веке закон Гульдберга-Вааге (закон действующих масс). Данный закон утверждает, что скорость изменения концентрации вещества в ходе реакции, пропорциональна произведению концентраций веществ, участвующих в реакции, в соответствующих степенях. Закон действующих масс не всегда позволяет адекватно описывать сложные химические гетерогенные реакции. Особенно те химические системы, когда в реакции одновременно протекают очень медленные и быстрые стадии (когда их скорости сравнимы на 2 и более порядка) [5].

Используя закон действующих масс в качестве базисного, в данной работе мы предложили эволюционному алгоритму уточнить соотношение Гольдберга-Вааге в соответствии с полученными экспериментальными данными. Для уточнения соотношения мы используем метод сетевого оператора, который кодирует композицию функций математического выражения в форме целочисленной матрицы. В качестве эксперимента была взята сложная химическая реакция, в которой участвует 15 веществ, и математическая модель которой содержит 15 дифференциальных уравнений.

#### **Задача идентификации модели химической реакции**

Заданы экспериментальные данные по результатам наблюдения прохождения химической реакции

$$Y = \left( (y^0, t_0), (y^1, t_1), \dots, (y^M, t_M) \right), \quad (1)$$

где  $y^j$  - вектор наблюдаемых параметров химической реакции в момент  $t_j$ ,

$$y^j = \left[ y_1^j \dots y_K^j \right]^T.$$

Известны соотношения, которые описывают зависимость значений параметров реакций от концентраций веществ, участвующих в реакции.

$$y = v(x), \quad (2)$$

где  $x$  - вектор концентраций веществ в реакции  $x = [x_1 \dots x_N]^T$ .

Задана в общем виде математическая модель химической реакции в форме системы обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\dot{x} = Ah(x), \quad (3)$$

где  $h$  - вектор взаимодействий веществ,  $h = [h_1 \dots h_R]^T$ ,  $A$  - числовая матрица размерностью  $N \times R$ .

Компоненты вектора  $\mathbf{w}$  взаимодействия веществ известны с точностью до веществ, участвующих в взаимодействии. Предполагаем, что во взаимодействии участвуют не более двух веществ

$$h_k = w_{i,j}, k = 1, 2, \dots, R, 0 \leq i, j \leq N, \quad (4)$$

где

$$w_{i,j} = g(q_k, x_i, x_j), 1 \leq i, j \leq N, \quad (5)$$

$$w_{0,j} = g(q_k, 1, x_j), w_{i,0} = g(q_k, x_i, 1), \quad (6)$$

где  $q_k$  - искомые значения компонент вектора параметров  $\mathbf{q} = [q_1 \dots q_R]^T$ ,  $g(q_k, \alpha, \beta)$  - искомая функция, описывающая взаимодействие веществ  $\alpha, \beta$ .

Заданы начальные значения концентраций веществ

$$\mathbf{x}(t_0) = [x_1(t_0) \dots x_N(t_0)]^T. \quad (7)$$

Заданы уравнения химического баланса, которые в терминах задач оптимизации обычно называются ограничениями в виде равенств

$$d_i(\mathbf{x}) = 0, i = 1, 2, \dots, l. \quad (8)$$

Необходимо найти функцию  $\tilde{g}(q_k, \alpha, \beta)$  и значения вектора параметров  $\tilde{\mathbf{q}} = [\tilde{q}_1 \dots \tilde{q}_R]^T$ , которые для решения  $\tilde{\mathbf{x}}(t)$  уравнений (3) дают минимум функционалам

$$J_1 = \sqrt{\sum_{i=1}^K \sum_{j=1}^M (y_i^j - v(\tilde{\mathbf{x}}(t_j)))^2} + \sum_{r=1}^l \sum_{j=1}^M |d_r(\mathbf{x}(t_j))|, \quad (9)$$

$$J_2 = \max_{i,j} \left\{ |y_i^j - v(\tilde{\mathbf{x}}(t_j))| : i = \overline{1, K}, j = \overline{1, M} \right\} + \sum_{r=1}^l \sum_{j=1}^M |d_r(\mathbf{x}(t_j))|. \quad (10)$$

## 1. Метод сетевого оператора и алгоритм интеллектуальной эволюции

Для решения используем метод сетевого оператора. Данный метод применяет кодировку математического выражения в форме вложенных друг в друга композиций функций. Метод использует только функции с одним или двумя аргументами. Код композиций функций представляется в виде целочисленной верхнетреугольной матрицы, содержащей номера функций. Номера функций с двумя аргументами или бинарных операций указываются на диагонали матрицы. Номера функций с одним аргументом или унарных операций указываются над главной диагональю матрицы. Подробно правила кодирования математических выражений в форме матрицы сетевого оператора изложены в работах [1-3].

Используем многокритериальный вариационный генетический алгоритм или метод интеллектуальной эволюции [4]. Алгоритм осуществляет поиск оптимального математического выражения на множестве малых вариаций некоторых заданных возможных решений, называемых базисными. В алгоритме используем следующие вариации: изменение номера унарной операции, добавление унарной операции, удаление унарной операции и изменение номера бинарной операции. В коде вариации указываем также номер базисного решения, к которому применяются данные вариации.

Множество возможных решений задаем в виде упорядоченного множества базисных матриц сетевого оператора

$$\mathbf{B}_0 = (\Psi^{0,1}, \dots, \Psi^{0,p}), \quad (11)$$

где  $\Psi^{0,k}$  - матрица сетевого оператора базисного решения  $k$ ,  $\Psi^{0,k} = [\psi_{i,j}^{0,k}]$ ,  $i, j = \overline{1, L}$ ,  $k = \overline{1, p}$ , и множества наборов вариаций

$$\mathbf{W} = (\mathbf{W}_1(k_1), \dots, \mathbf{W}_H(k_H)), \quad (12)$$

где

$$\mathbf{W}_j(k_j) = (k_j, \Delta_{j,1}, \dots, \Delta_{j,m}), \quad (13)$$

$k_j$  - номер базисной матрицы,  $1 \leq k_j \leq p$ ,  $\Delta_{j,i}$  - вариация матрицы сетевого оператора,  $1 \leq i \leq m$ ,  $m$  - заданная длина вариации.

Каждое новое возможное решение получаем после вариации соответствующего базисного решения

$$\Psi^j = \mathbf{W}_j(k_j) \circ \Psi^{0,k_j}, \quad (14)$$

где

$$\mathbf{W}_j(k_j) \circ \Psi^{0,k_j} = \Delta_{j,m} \circ \dots \circ \Delta_{j,1} \circ \Psi^{0,k_j}.$$

Генетические операции скрещивания и мутации выполняем с упорядоченными множествами наборов вариаций (13).

Одновременно с поиском оптимальной структуры математического выражения в форме матрицы сетевого оператора (14) ищем оптимальное значение вектора параметров  $\mathbf{q} = [q_1 \dots q_R]^T$ . Каждое возможное решение представляет собой матрицу сетевого оператора  $\Psi^j$  и вектор параметров  $\mathbf{q}^j = [q_1^j \dots q_R^j]^T$ ,  $1 \leq j \leq H$ .

Для оценки возможных решений  $(\Psi^j, \mathbf{q}^j)$  используем ранг Парето, который указывает на количество возможных решений в эволюционирующем множестве, которые лучше в смысле отношения Парето, чем решение  $(\Psi^j, \mathbf{q}^j)$ .

$$\Lambda_j = \sum_{i=1}^H \lambda_i(j), \quad (15)$$

где

$$\lambda_i(j) = \begin{cases} 1, & \text{если } ((J_1(i) < J_1(j)) \wedge (J_2(i) \leq J_2(j))) \vee ((J_1(i) \leq J_1(j)) \wedge (J_2(i) < J_2(j))) \\ 0 & \text{иначе} \end{cases}, \quad (16)$$

$J_\alpha(\beta)$  - значение функционала  $J_\alpha$ , вычисленное для возможного решения  $(\Psi^\beta, \mathbf{q}^\beta)$ ,  $\alpha \in \{1, 2\}$ ,  $\beta \in \{1, \dots, H\}$ .

## 2. Вычислительный эксперимент

В качестве примера рассматриваем химическую реакцию гидроалюминирования олефеинов алюминийорганическими соединениями в присутствии катализатора  $(C_5H_5)_2ZrCl_2$  [6]. Математическая модель реакции имеет следующий вид

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= -w_{2,2} - w_{1,0} - w_{1,5} - w_{1,9} \\ \dot{x}_2 &= w_{9,10} - 2w_{2,2} + 2w_{1,0} - w_{2,3} + w_{1,5} - w_{2,5} + w_{5,7} + w_{5,10} - w_{2,9} \\ \dot{x}_3 &= -w_{2,3} - w_{3,8} \\ \dot{x}_4 &= w_{2,3} + w_{3,8} - w_{4,5} \\ \dot{x}_5 &= w_{2,3} - w_{1,5} - w_{2,5} + 2w_{3,8} - w_{4,5} - w_{5,7} - w_{5,15} + w_{10,0} - w_{5,10} + w_{2,9} \\ \dot{x}_6 &= w_{4,5} - w_{6,11} + w_{9,19} \\ \dot{x}_7 &= w_{4,5} - w_{5,7} - w_{7,9} \\ \dot{x}_8 &= w_{1,5} + w_{2,5} - w_{3,8} + w_{1,9} \\ \dot{x}_9 &= -w_{9,15} + w_{8,11} - w_{9,18} - w_{9,10} - w_{1,9} - w_{7,9} + w_{6,11} - w_{9,19} + w_{5,10} - w_{2,9} \\ \dot{x}_{10} &= w_{9,18} - w_{9,10} + w_{1,9} + w_{7,9} + w_{5,15} - w_{10,0} - w_{5,10} + w_{2,9} \\ \dot{x}_{11} &= w_{9,15} - w_{8,11} + w_{9,10} - w_{6,11} + w_{9,19} \\ \dot{x}_{13} &= w_{9,18} + w_{9,10} \\ \dot{x}_{15} &= -w_{9,15} + w_{8,11} - w_{5,15} + w_{10,0} \\ \dot{x}_{18} &= w_{9,15} - w_{8,11} + w_{9,18} \\ \dot{x}_{19} &= w_{6,11} - w_{9,19} \end{aligned} \quad (17)$$

где  $x_1 = [Cp_2ZrH_2 \cdot ClAlBu_2]_2$ ,  $x_2 = [Cp_2ZrH_2 \cdot ClAlBu_2]$ ,  $x_3 = CH_2CHR$ ,  
 $x_4 = Cp_2ZrCl(CH_2CH_2R)$ ,  $x_5 = HAlBu_2$ ,  $x_6 = Bu_2Al(CH_2CH_2R)$ ,  $x_7 = Cp_2ZrHCl$ ,  
 $x_8 = [Cp_2ZrH_2Cl \cdot HAlBu_2 \cdot ClAlBu_2]$ ,  $x_9 = ClAlBu_2$ ,  $x_{10} = [Cp_2ZrHCl \cdot ClAlBu_2]$ ,

$x_{11} = Cl_2 Al Bu$ ,  $x_{13} = C_4 H_8$ ,  $x_{14} = Al Bu_3$ ,  $x_{15} = Cp_2 Zr Cl_2$ ,  $x_{18} = Cp_2 Zr Cl Bu$ ,  
 $x_{19} = Cl Bu Al(CH_2 CH_2)$ , значения  $R$  зависит от используемого в реакции олефина  
 $(R = C_5 H_{11} \cdot C_6 H_{13} \cdot C_7 H_{15} \cdot C_8 H_{17})$ ,  $Bu = C_4 H_9$ ,  $Cp = C_5 H_5$ ,  $w_{i,j} = g(q_k, x_i, x_j)$  -  
 неизвестная функция от трех аргументов,  $q_k$  - неизвестные значения постоянных  
 параметров,  $i \neq 0$ ,  $j \neq 0$ ,  $w_{i,0} = g(q_k, x_i, 1)$

Для данной системы дифференциальных уравнений были заданы следующие начальные  
 условия:  $x_1(0) = 0$ ,  $x_2(0) = 0$ ,  $x_3(0) = 0,451$ ,  $x_4(0) = 0$ ,  $x_5(0) = 0$ ,  $x_6(0) = 0$ ,  $x_7(0) = 0$ ,  
 $x_8(0) = 0$ ,  $x_9(0) = 0,541$ ,  $x_{10}(0) = 0$ ,  $x_{11}(0) = 0$ ,  $x_{13}(0) = 0$ ,  $x_{15}(0) = 0,008$ ,  $x_{18}(0) = 0$ ,  
 $x_{19}(0) = 0$ .

Уравнения баланса имеют вид:

$$\begin{aligned}
 d_1(\mathbf{x}) &= 60x_1 + 30x_2 + 3x_3 + 14x_4 + 19x_5 + 22x_6 + 11x_7 + 49x_8 + 18x_9 + 29x_{10} + \\
 &+ 9x_{11} + 8x_{13} + 67x_{15} + 19x_{18} + 13x_{19} - 11,63 \\
 d_2(\mathbf{x}) &= 36x_1 + 18x_2 + 2x_3 + 12x_4 + 8x_5 + 10x_6 + 10x_7 + 26x_8 + 8x_9 + 18x_{10} + \\
 &+ 4x_{11} + 4x_{13} + 10x_{15} + 14x_{18} + 6x_{19} - 5,31 \\
 d_3(\mathbf{x}) &= 2x_1 + x_2 + x_5 + x_6 + 2x_8 + x_9 + x_{10} + x_{11} + x_{19} - 0,541 \\
 d_4(\mathbf{x}) &= 2x_1 + x_2 + x_4 + x_7 + x_8 + x_9 + 2x_{10} + 2x_{11} + 2x_{15} + x_{18} + x_{19} - 0,56 \\
 d_5(\mathbf{x}) &= 2x_1 + x_2 + x_4 + x_7 + x_8 + x_{10} + x_{15} + x_{18} - 0,008 \\
 d_6(\mathbf{x}) &= x_3 + x_4 + x_6 + x_{19} - 0,451
 \end{aligned} \tag{19}$$

Экспериментальные значения концентрации веществ и моменты времени, в которые она  
 определена, приведены в табл. 1.

При решении данной задачи использовался метод сетевого оператора. Для поиска  
 решения был выбран вариационный генетический алгоритм с множественным базисом.  
 Алгоритм имел следующие значения параметров:

- количество возможных решений в начальной популяции: 256
- число поколений: 2048
- число возможных скрещиваемых пар в поколении: 128
- число вариаций в одном решении: 4
- вероятность мутации: 0,7
- число базисов: 5
- число элитарных решений: 8
- число поколений между сменой базисов: 16

Для реализации поиска на ЭВМ была использована модифицированная программа идентификации математических моделей методом сетевого оператора, осуществляющая промежуточный анализ и сохранение данных популяций. Вычисления проводились на ЭВМ с 4-х ядерным процессором с тактовой частотой 2,8 ГГц. Общее время вычислений составило приблизительно 140 часов.

В результате вычислений был получен сетевой оператор:

$$\Psi = \begin{pmatrix} 0 & 15 & 0 & 23 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 8 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 14 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 13 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 23 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (20)$$

который соответствует следующему уравнению:

$$g(q_{i,j}, x_i, x_j) = \operatorname{arctg}(qA) + qA^2 + qA^3 + \frac{1-e^{-A}}{1+e^{-A}} - \left( \operatorname{arctg}(qA) + qA^2 + qA^3 + \frac{1-e^{-A}}{1+e^{-A}} \right)^3, \quad (21)$$

где  $A = x_j(x_i - x_i^3)$ .

Графики, построенные на экспериментальных и вычисленных с использованием полученной математической модели значениях, показывающие изменения отношения концентрации веществ  $x_3$  и  $x_{19}$  во времени  $t$ , приведены на рис. 1 и рис. 2. Графики изменения отклонений  $\Delta$  в уравнениях баланса (19) приведены на рис. 3.

Таблица 1

Экспериментальные данные изменения отношения концентрации веществ  $x_3$  и  $x_{19}$ .

t, мин	$x_3/(x_3+x_{19})$	$x_{19}/(x_3+x_{19})$
5	0,9621	0,0379
10	0,9386	0,0614
15	0,9034	0,0966
20	0,8975	0,1025
25	0,8994	0,1006
30	0,8988	0,1012
35	0,9053	0,0947
40	0,9112	0,0888
45	0,9216	0,0784
50	0,9094	0,0906
55	0,9073	0,0927
62	0,8901	0,1099
70	0,8897	0,1103
75	0,8858	0,1142
80	0,8877	0,1123
85	0,8857	0,1143
90	0,8882	0,1118
95	0,8779	0,1221
100	0,8701	0,1299
105	0,8642	0,1358
115	0,8466	0,1534
125	0,832	0,168
135	0,7371	0,2629
145	0,6411	0,3589
155	0,5517	0,4483
165	0,4474	0,5526
170	0,3965	0,6035

t, мин	$x_3/(x_3+x_{19})$	$x_{19}/(x_3+x_{19})$
175	0,3437	0,6563
180	0,2938	0,7062
190	0,287	0,713
200	0,2791	0,7209
210	0,2713	0,7287
220	0,2624	0,7376
230	0,2595	0,7405
240	0,2498	0,7502
250	0,2419	0,7581
260	0,24	0,76
270	0,2302	0,7698
280	0,2263	0,7737
290	0,2184	0,7816
300	0,2106	0,7894
310	0,2087	0,7913
320	0,1969	0,8031
330	0,191	0,809
340	0,1852	0,8148
350	0,1774	0,8226
360	0,1707	0,8293
370	0,1656	0,8344
380	0,1617	0,8383
390	0,1558	0,8442
400	0,15	0,85
410	0,146	0,854
420	0,1393	0,8607



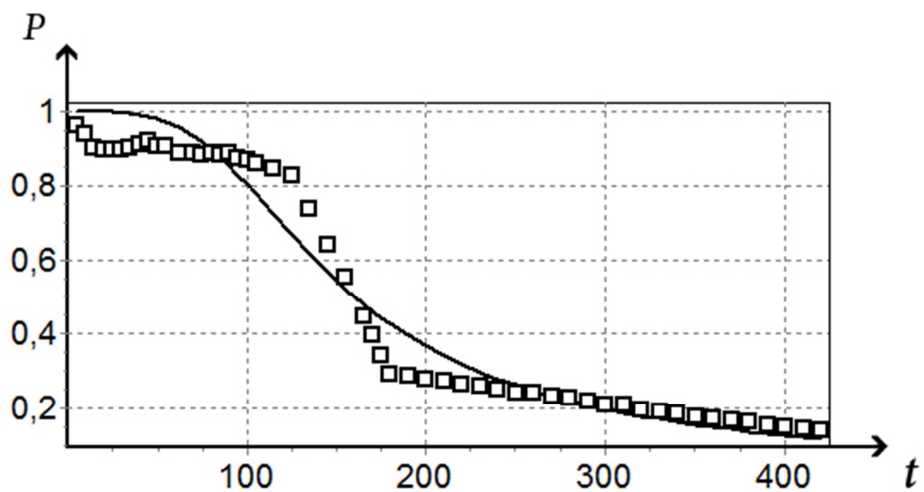


Рис. 1 Экспериментальные ( $\square$ ) и расчетные (—) значения изменения отношения концентрации вещества  $x_3$  ( $P = x_3/(x_3 + x_{19})$ )

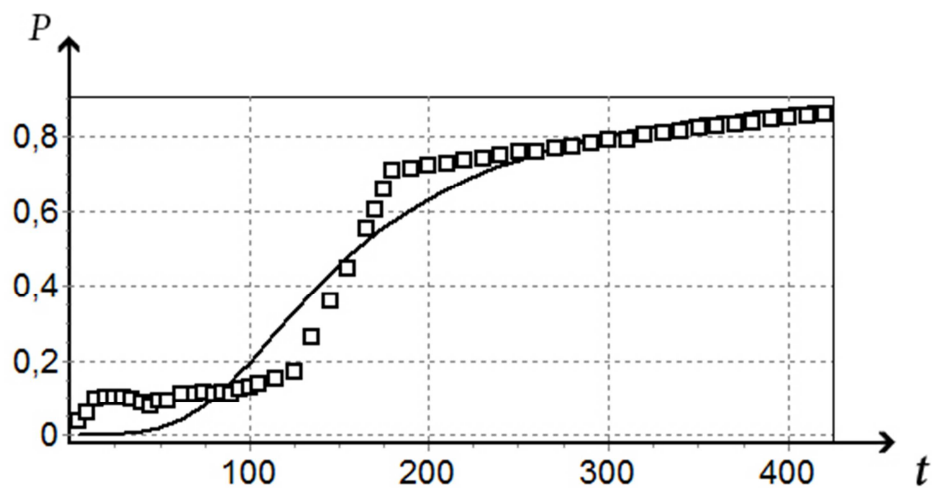


Рис. 2 Экспериментальные ( $\square$ ) и расчетные (—) значения изменения отношения концентрации вещества  $x_{19}$  ( $P = x_{19}/(x_3 + x_{19})$ )

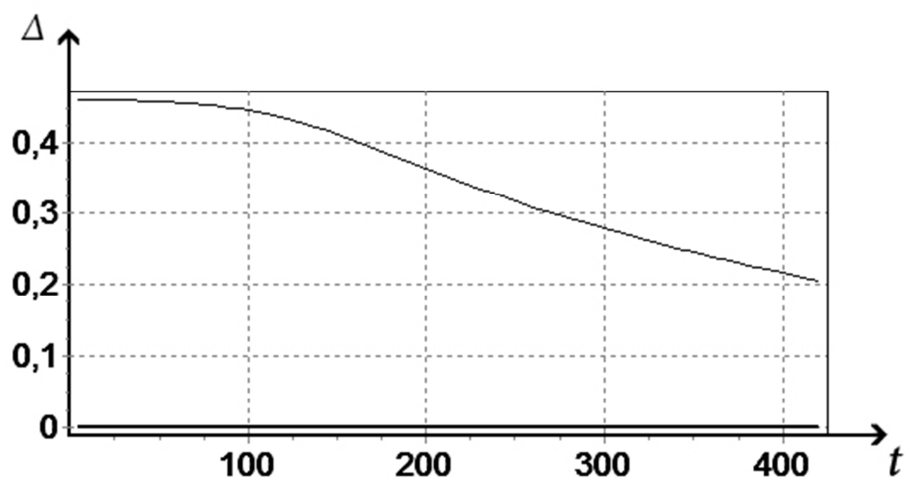


Рис. 3 Графики изменения отклонений  $\Delta$  в уравнениях баланса (\*)

## Заключение

Сравнение данных экспериментального и вычислительного экспериментов (рис. 1 и рис. 2) показывает, что предложенный авторами метод вывода кинетических уравнений даёт адекватное описание сложных химических реакций. При этом полученные зависимости изменения концентраций участвующих в реакции веществ от времени сохраняют экспериментально наблюдаемые индукционные периоды. Предсказания условий возникновения и устойчивого существования индукционных периодов позволяют избежать те режимы ведения химических процессов, при которых могут возникнуть нежелательные взрывные процессы, а также прогнозировать реакционную способность исходных реагентов. Например, в рассматриваемых реакциях гидроалюминирования можно количественно описать реакционную способность олефинов.

Данные результаты получены только при одной концентрации катализатора  $Cp_2ZrCl_2$ . В дальнейшем планируется рассмотреть варианты при разных концентрациях катализатора, с разными типами алюминийорганических соединений.

*Работа выполнена по темам грантов РФФИ №13-08-00523-а и № 12-07-00324-а*

## Список литературы

1. Дивеев А.И. Метод сетевого оператора. М.: ВЦ РАН, 2010. 178 с.
2. Дивеев А.И., Софронова Е.А. Метод сетевого оператора и его применение в задачах управления. М.: РУДН, 2012. 182 с.
3. Дивеев А.И., Шмалько Е.Ю. Синтез системы управления мобильным роботом методом сетевого оператора и алгоритмом интеллектуальной эволюции // Нелинейный мир, Т.12. № 7, 2014. С. 42-47.
4. Крылов О.В. Гетерогенный катализ // Москва: ИКЦ «Академкнига». – 2004. – 679 с.
5. Парфенова Л.В., Печаткина С.В., Халилов Л.М., Джемилев У.М. Исследование механизма гидроалюминирования олефинов алкилаланами, катализируемого  $Cp_2ZrCl_2$  // Изв. АН. Сер. хим.- 2005.- №2.- С. 311-322
6. Слинко М.Г. Основы и принципы математического моделирования каталитических процессов. Новосибирск, 2004. 488 с.
7. Яблонский Г.С., Быков В.И., Горбань А.Н. Кинетические модели каталитических реакций. Новосибирск: Наука, 1983. 255 с.

8. Diveev A.I., Sofronova E.A. The Network Operator Method for Search of the Most Suitable Mathematical Equation// Chapter in the book Bio-Inspired Computational Algorithms and Their Applications/ Edited by Shangce Gao. Intech. Printed 2012. February, Croatia. P. 19-42.

**Рецензенты:**

Карпенко А.П., д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой ФГБОУ ВПО МГТУ им. Н.Э. Баумана, г.Москва;

Никульчев Е.В., д.т.н., профессор, проректор по научной работе  
НОУ ВО Московский технологический институт, г.Москва.