

**Павский Кирилл Валерьевич** – e-mail: pkv@isp.nsc.ru; тел.: 83833332171; зав. лабораторией вычислительных систем; д.т.н.; доцент; профессор кафедры ВС ФГОБУ ВПО СибГУТИ.

**Двуреченский Анатолий Васильевич** – e-mail: dvurech@isp.nsc.ru; тел.: 83833332466; зав. лабораторией неравновесных полупроводниковых систем; член-корреспондент РАН; д.ф.-м.н.; профессор кафедры общей физики ФФ НГУ.

**Novikov Pavel Leonidovich** – Rzhanov Institute of Semiconductor Physics Siberian Branch of Russian Academy of Sciences; e-mail: novikov@isp.nsc.ru; 630090, Novosibirsk, Lavrentyev Ave., 13; phone: +73833332624; senior researcher of the laboratory of nonequilibrium semiconductor systems; cand. of phis.-math. sc.; associate professor of general physics, NSU.

**Pavskiy Kirill Valer'evich** – e-mail: pkv@isp.nsc.ru; phone: +73833332171; head of the laboratory of computer systems; dr. of eng. sc.; associate professor; professor of the department.

**Dvurechenskiy Anatoliy Vasil'evich** – e-mail: dvurech@isp.nsc.ru; phone: +73833332466; head of the laboratory of nonequilibrium semiconductor systems; corresponding member of RAS; dr. of phis.-math. sc.; professor of the department of general physics, NSU.

УДК 519.683

DOI 10.23683/2311-3103-2018-8-153-163

**К.Ф. Коледина, М.К. Вовденко, И.М. Губайдуллин, С.Н. Коледин**

#### **АНАЛИЗ ЭФФЕКТИВНОСТИ РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИЯ РАСЧЕТА КИНЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ СЛОЖНОЙ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ\***

*Целью исследования является расчет кинетических параметров реакции окисления изопропилбензола по нескольким схемам химических превращений с применением алгоритмов распараллеливания вычислительной задачи и анализом эффективности. Рассмотрены основные этапы распараллеливания решения обратной кинетической задачи: первая группа объединяет все механизмы, предложенные для химической реакции; для каждого механизма рассматриваются все эксперименты реакции; по каждому эксперименту происходит разделение параметрической плоскости для поиска кинетических параметров. Решение обратной кинетической задачи относится к задачам оптимизации, для которых существуют модели распараллеливания вычислительного процесса: островная модель, клеточная модель, глобальная модель «Хозяин – Работник». Объектом исследования является реакция окисления изопропилбензола кислородом воздуха. Реакция является одной из стадий в технологическом процессе получения фенола и ацетона кумольным способом. На сегодняшний день этот метод является самым распространённым в мире промышленным способом синтеза данных веществ. Реакция относится к радикально-цепному процессу. Рассмотрены основные элементарные реакции для стадий инициирования цепи, развития цепи, затухания цепи. Для решения прямой и обратной кинетической задач с целью определения кинетических параметров для элементарных стадий применялись такие математические методы, как Рунге-Кутта 4-ого порядка, метод переменного порядка в программной среде MATLAB. Для трех реакционных схем реакции окисления изопропилбензола разработаны кинетические модели. Проведено сравнение. При разработке кинетических моделей применены модели распараллеливания. Проведен анализ эффективности распараллеливания. Эффективность распараллеливания решения обратной задачи рассматриваемой реакции генетическим алгоритмом с островной моделью распараллеливания вычислительного процесса на персональном 4-х ядерном компьютере Intel Core I5 составляет 65%.*

*Распараллеливания обратной кинетической задачи; реакция окисления изопропилбензола; модели распараллеливания; эффективность; кинетическая модель; островная модель.*

\* Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ 18-07-00341, № 18-37-00015 (п. 2), Стипендии Президента РФ СП-669.2018.5.

**K.F. Koledina, M.K. Vovdenko, I.M. Gubaydullin, S.N. Koledin**

## **ANALYSIS OF THE KINETIC PARAMETERS CALCULATION PARALLELING EFFICIENCY IN THE COMPLEX CHEMICAL REACTION**

*The aim of this study is to calculate the kinetic parameters of the reaction isopropylbenzene oxidation on several schemes chemical transformations with the use of the parallelizing computational problem analysis algorithms and the efficiency analysis. The main stages of parallelization for solving the inverse kinetic problem are the following: the first group includes all mechanisms proposed for chemical reaction; for each mechanism, all reaction experiments are considered; for each experiment, the parametric plane is separated to search for kinetic parameters. The solution of an inverse kinetic problem relates to optimization problems for which there are models for parallelizing a computational process: the island model, the cell model, the global Master-Worker model. The object of the study is the reaction of isopropylbenzene oxidation with atmospheric oxygen. The reaction is one of the stages in the technological process of producing phenol and acetone by the cumene method. This method is most common industrial method in the world for the synthesis of these substances. The reaction refers to a radical chain process. The basic elementary reactions for the stages of chain initiation, chain development, chain attenuation are considered. To solve direct and inverse kinetic problems, in order to determine the kinetic parameters for elementary stages, mathematical methods such as the 4th-order Runge, the variable order method in the MATLAB software environment are used. Kinetic models have been developed for the three reaction schemes of isopropylbenzene oxidation. A comparison is made. When developing kinetic models, parallelization models are applied. The analysis of parallelization efficiency is conducted. The efficiency of parallelization in solution of an inverse problem of reaction under consideration by the genetic algorithm with the island model of parallelization of the computational process on a personal 4-core Intel Core I5 computer is 65 %.*

*Parallelization in inverse kinetic problem; isopropylbenzene oxidation reaction; parallelizing models; efficiency; kinetic model, island model.*

**1. Введение.** Для расчета оптимальных условий проведения сложной химической реакции необходимо на первом этапе разработать кинетическую модель реакции. Кинетическая модель реакции подразумевает схему химических превращений, состоящую из элементарных стадий, значения кинетических параметров элементарных стадий: константы скорости, предэкспоненциальный множитель, энергия активации [1]. Определение значений кинетических параметров стадий ведется путем решения обратных задач восстановления значений параметров при соответствии расчетных значений концентраций веществ экспериментальным данным. Имеет место задача химической кинетики. На каждом этапе решения поставленной задачи возникает вопрос о сокращении времени расчетов. Возникает необходимость распараллеливания вычислительного процесса [2].

**2. Распараллеливание решения задачи химической кинетики.** При изучении сложных химических реакций возникают следующие трудности [3]:

◆ существует несколько гипотетических механизмов протекания реакции, каждый из которых необходимо обработать и выбрать лучший;

◆ существует несколько экспериментов, проведенных при разных условиях (обычно более 5); учитывая существование погрешности эксперимента, обрабатываются все и выбираются 2 (или 3) лучших, то есть по которым расчетные значения наиболее близки к экспериментальным данным;

◆ каждый из кинетических параметров определяется неоднозначно; существует зависимость от правильного выбора начального приближения, исходя из физико-химических предположений.

Поэтому для последовательного решения всех этих задач иногда необходимы существенные затраты времени (от нескольких месяцев до года), что привело к идее последовательно-параллельного ведения расчета. Предлагается сгруппировать задачи, по которым можно вести параллельный расчет, в несколько групп, а расчет по этим группам вести последовательно (рис. 1) [4].

Первая группа объединяет все механизмы, предложенные для рассматриваемой реакции (Этап 1). Для каждого механизма рассматриваются все эксперименты реакции (Этап 2). И по каждому эксперименту происходит разделение параметрической плоскости для поиска кинетических параметров (Этап 3).

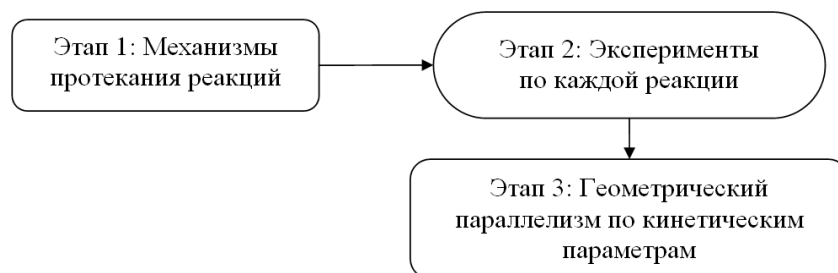


Рис. 1. Схема распараллеливания вычислительного процесса решения задачи химической кинетики

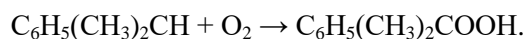
Однако, при больших размерностях области определения, применяются популяционные алгоритмы решения задачи оптимизации и соответствующие модели их распараллеливания [5]. Применение генетического алгоритма [6] решения задачи оптимизации предполагает применение моделей распараллеливания [7]:

- ◆ Островная модель (Island Model). Подразумевающая создание мультипопуляций, состоящих из числа субпопуляций (островов), равного числу используемых процессоров. Каждый остров обрабатывает свой процессор системы. В течение заданного периода, субпопуляции развиваются независимо, а затем для синхронизации островов используют дополнительный процесс, который осуществляет обмен данными.

- ◆ Клеточная модель (Cellular Model). Подразумевает разбиение области по числу процессоров. Каждый процесс может взаимодействовать только с четырьмя своими соседями (сверху, снизу, слева, справа). В каждой ячейке находится ровно одна особь. По мере работы такого алгоритма возникают эффекты, похожие на островную модель.

- ◆ Глобальная модель «Хозяин – Работник» (Global model Worker/Farmer). Рабочие станции отвечают за процессы воспроизводства, мутации и вычисления функции пригодности особей для их отбора в новое поколение. Все созданные и оцененные «Работники» особи поступают на рабочую станцию «Хозяина», которая затем проводит отбор особей согласно оценке их пригодности в новую популяцию. Отобранные особи передаются «Хозяином» к рабочим станциям «Работникам».

**3. Объект исследования.** Реакция окисления изопропилбензола (ИПБ) кислородом воздуха является одной из стадий в технологическом процессе получения фенола и ацетона кумольным способом [8]. На сегодняшний день этот метод является самым распространённым в мире промышленным способом синтеза данных веществ. Брутто-формула реакции представлена в (1):



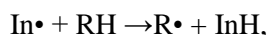
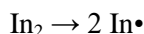
В качестве основных реакционных стадий выделяют стадию окисления ИПБ до гидроперекиси изопропилбензола (ГП ИПБ), в ходе которой ИПБ окисляется кислородом воздуха, и стадию разложения ГП ИПБ на фенол и ацетон.

Реакция окисления изопропилбензола относится к реакциям радикально-цепного типа, т.е. к реакциям, в которых в один момент времени в реакционном пространстве протекает одновременно большое количество элементарных реакций

различных видов между различными частицами (радикалами, молекулами) [8–10]. При этом существуют устоявшиеся направления (цепи) из последовательных элементарных стадий, протекающих между определенными радикалами; причём данные цепи могут быть как самовоспроизводящимися, так и обрывающимся. Как правило, в радикально-цепном процессе элементарные стадии можно подразделить на 3 группы:

1. Иницирование.
2. Развитие цепи.
3. Затухание цепи.

Стадию иницирования для радикально-цепного процесса в общем виде можно записать:



где  $\text{In}_2$  – какой-либо инициатор, в реакции (2) распадающийся на радикалы  $\text{In}\cdot$ , которые в дальнейшем реагируют с углеводородом  $\text{RH}$  (в нашем случае  $\text{R}\cdot$  – кумилрадикал,  $\text{C}_6\text{H}_5(\text{CH}_3)_2\text{C}\cdot$ ).

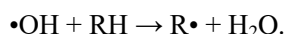
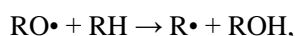
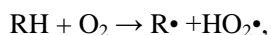
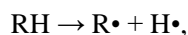
В ходе иницирования некое вещество (инициатор), распадается на радикалы, либо же провоцирует распад на радикалы одного из реагентов. Данные реакции протекают преимущественно в начале процесса. Благодаря данной группе реакций в реакционной среде образуются свободные радикалы, которые впоследствии приводят к зарождению цепей, в ходе которых образуется целевой продукт.

В ходе стадии развития цепи в реакционной среде содержится достаточное количество радикалов для поддержания самовоспроизводящейся цепи.

В ходе стадии затухания цепи, при большом количестве свободных радикалов, происходит образование побочных продуктов, обрыв цепи, или же протекание побочных цепей, приводящих к лавинообразному увеличению количества образующихся побочных продуктов.

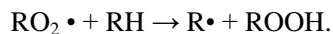
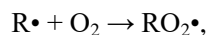
Различные авторы приводят различные реакционные схемы реакционных превращений в ходе окисления изопропилбензола, которые могут отличаться [8–10]. В работе [8] приведена модель радикально-цепного механизма.

Элементарные стадии, относящиеся к группе иницирующих:



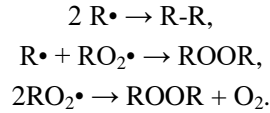
В представленных выше реакциях иницирования показана как возможность автокатализа реакционной смеси гидроперекисью (в последовательности реакций 6→7, так и распадом самого изопропилбензола на радикалы.

В дальнейшем, при накоплении свободных радикалов происходит увеличение скорости реакций, относящихся к развитию и рост цепи:



Элементарная стадия (9) является целевой, в ходе которой происходит образование ГП ИПБ, и кумил-радикала, вступающего в реакцию с непрерывно поступающим в реакционную среду кислородом (8), и образующим гидроксикумилрадикал, который в реакции (1) отнимая атом водорода у кумола образует ГП ИПБ и кумил-радикал и т.д.

Реакции, приводящие к образованию побочных продуктов, и обрыву цепи, представлены ниже:



**4. Математическая модель.** Для решения прямой и обратной кинетической задачи, с целью определения кинетических параметров для элементарных стадий применялись такие математические методы, как Рунге-Кутта 4-ого порядка, метод переменного порядка в программной среде MATLAB. Для решения данной математических моделей составлялась система дифференциальных уравнений

$$\frac{dc_i}{dt} = \sum_{j=1}^J v_{ij} w_j (k_j, k_{0j}, E_j, T, c_i), \quad i = 1, \dots, I, \quad (1)$$

где  $c_i$  – концентрация  $i$ -того вещества, [моль/л],  $i$  – номер вещества, участвующего в элементарной реакции,  $I$  – общее количество веществ, присутствующих в данной реакционной схеме,  $j$  – номер конкретной элементарной реакции в реакционной схеме,  $k_j$  – константа  $j$ -той элементарной реакции,  $k_{0j}$  – предэкспоненциальный коэффициент для  $j$ -той элементарной реакции,  $T$  – температура,  $w_j$  – скорость  $j$ -ой элементарной реакции, [моль\*мин],  $E_j$  – энергия активация  $j$ -ой реакции [КДж/моль] [11].

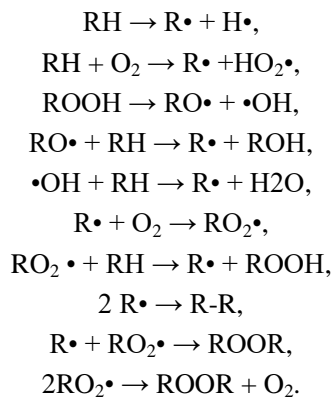
Определяемыми кинетическими параметрами системы дифференциальных уравнений являются  $k_j, E_j$ . Неизвестные параметры определяются из условия минимизации функционала [11–14].

$$\sum_{p=1}^P \sum_{i=1}^I \gamma_i (c_{pi}^e - c_{pi}^r) \rightarrow \min, \quad (2)$$

где  $c_{pi}^e$  и  $c_{pi}^r$  – экспериментальные и расчетные значения концентраций компонентов,  $\gamma_i$  – весовой коэффициент,  $I$  – количество веществ,  $P$  – количество точек замера по времени наблюдаемых веществ в ходе реакции.

**5. Кинетические модели по реакционным схемам превращений.** Представленные стадии (1)–(13) были декомпозированы на три реакционные схемы превращений. Для оптимизации значений кинетических параметров реакции был применен генетический алгоритм решения задачи оптимизации с островной моделью распараллеливания вычислительного процесса [15–18]. Расчеты проводились на персональном 4-х ядерном компьютере Intel Core I5.

1) Реакционная схема превращения (1)



Начальные данные:  $\omega_{\text{ИПБ0}}=98\%$ ,  $\omega_{\text{ГПИПБ0}}=2\%$ ,  $T = 391\text{ К}$ .

На рис. 2 приведены расчетные значения концентраций целевых продуктов реакции окисления ИПБ.

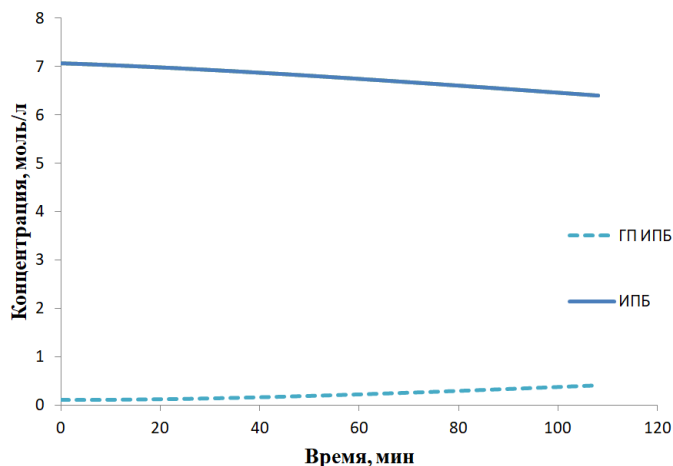


Рис. 2. Расчетные значения концентраций целевых продуктов реакции окисления ИПБ по реакционной схеме превращений (1)

2) Реакционная схема превращения (2)

$$\frac{dC_{\text{ИПБ}}}{dt} = -k_3 C_{\text{ИПБ}} C_{\text{НРИПБ}} - k_2 C_{\text{ИПБ}} A - k_{19} B. \quad (3)$$

$$\frac{dC_{\text{НРИПБ}}}{dt} = k_3 C_{\text{ИПБ}} C_{\text{НРИПБ}} + 2k C_{\text{НРИПБ}}^2 + k_2 C_{\text{ИПБ}} A - (k_3 + 3k_{20}) B. \quad (4)$$

$$A = \sqrt{\frac{k_3 C_{\text{ИПБ}} C_{\text{НРИПБ}} + k C_{\text{НРИПБ}}^2}{k_{20} - k_{19}}}. \quad (5)$$

$$B = \frac{k_3 C_{\text{ИПБ}} C_{\text{НРИПБ}} + k C_{\text{НРИПБ}}^2}{k_{20} - k_{19}}. \quad (6)$$

Начальные данные:  $\omega_{\text{ИПБ0}}=98\%$ ,  $\omega_{\text{ГПИПБ0}}=2\%$ ,  $T = 391\text{ К}$ .

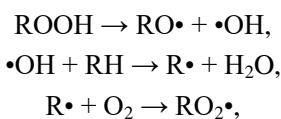
В табл. 1 приведены значения кинетических параметров стадий реакционной схемы превращений (2).

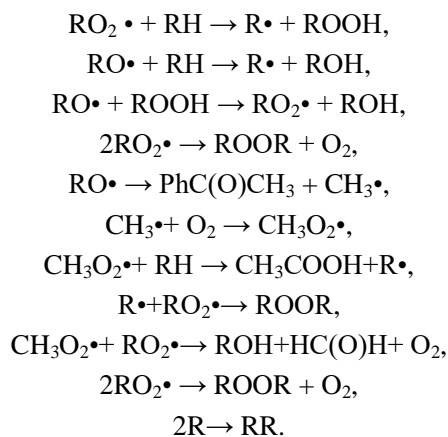
Таблица 1

**Кинетические параметры стадий реакционной схемы превращений**

$k_i$ , л/моль·с	$k_i^0$ , л/моль·с	$E_{aj}$ , кДж/моль
$k_2 \cdot 10^{-4}$	$3,154 \cdot 10^6$	42,343
$k_3 \cdot 10^3$	$2,367 \cdot 10^7$	108,680
$k \cdot 10^2$	$6,600 \cdot 10^4$	80,674
$k_{19} \cdot 10^{-9}$	$3,795 \cdot 10^8$	24,913
$k_{20} \cdot 10^{-9}$	$5,973 \cdot 10^8$	24,913

3) Реакционная схема превращения (3) [2]





Начальные данные:

$$\omega_{\text{ИПБ}} = 98 \%, \omega_{\text{ГПИПБ}} = 2 \%, T = 391 \text{ К.}$$

На рис. 3, 4 приведено сравнение результатов, полученных по реакционным схемам химических превращений.

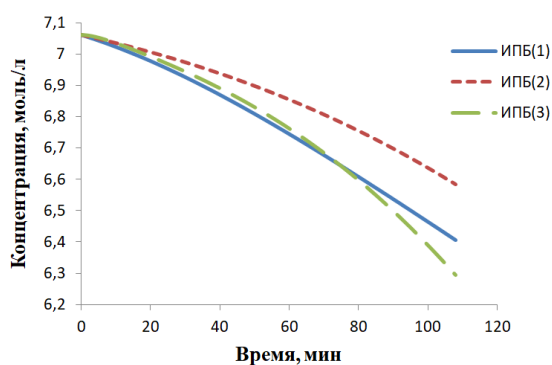


Рис. 3. Изменение расчетных значений концентраций изопротилбензола, полученных по реакционным схемам химических превращений (1), (2), (3)

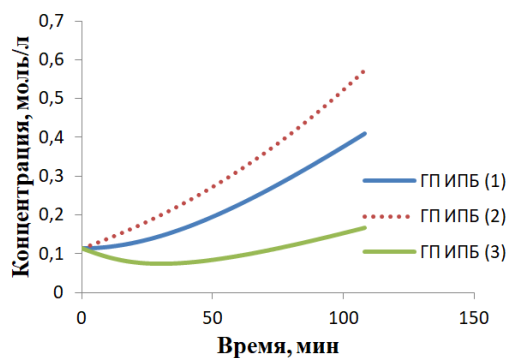


Рис. 4. Изменение расчетных значений концентраций гидроперекиси изопротилбензола, полученных по реакционным схемам химических превращений (1), (2), (3)

Согласно графикам, представленным на рис. 2–4 видно, что наиболее значительно меняется во времени концентрация ИПБ в случае модели (3), однако при этом же итоговое значение концентрации ГП ИПБ по данной модели наименьшее из всех трёх. Также по графику изменения ГП ИПБ видно, в случае схемы три происходит вначале убывание ГП ИПБ, а только затем рост. Вероятно, это происходит из-за разных механизмов инициации между реакционными схемами.

**6. Эффективность распараллеливания расчета кинетических параметров.** Эффективность параллельного алгоритма решения задачи определяется соотношением (где  $S_p$  ускорение для  $p$  процессоров) [19–20]:

$$E_p = \frac{S_p}{p},$$

т.е. как средняя доля времени выполнения алгоритма, в течение которой процессоры реально задействованы для решения задачи.

Эффективность распараллеливания решения обратной задачи рассматриваемой реакции генетическим алгоритмом с островной моделью распараллеливания вычислительного процесса на персональном 4-х ядерном компьютере Intel Core I5 составила 65 %. Не достигается идеальная эффективность распараллеливания, по-видимому, в связи с затратами времени на синхронизацию данными между островами.

#### БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Слинко М.Г. История развития математического моделирования каталитических процессов и реакторов // Теоретические основы химической технологии. – 2007. – Т. 41, № 1. – С. 16-34.
2. Губайдуллин И.М., Линд Ю.Б., Коледина К.Ф. Методология распараллеливания при решении многопараметрических обратных задач химической кинетики // Вычислительные методы и программирование. – 2012. – Т. 13, № 1. – С. 28-36.
3. 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.
4. Новичкова А.В., Бобренева Ю.О., Губайдуллин И.М., Коледина К.Ф. Информационный комплекс построения кинетической модели реакции гидроалюминирования олефенов триизобутилалюминием // Электротехнические и информационные комплексы и системы. – 2014. – Т. 10, № 4. – С. 58-63.
5. Карпенко А.П. Основные сущности популяционных алгоритмов для задачи глобальной оптимизации // Информационные и математические технологии в науке и управлении. – 2016. – № 2. – С. 8-17.
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. 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.
8. Kazuo Hattori, Yuxi Tanaka, Hiroyuki Suzuki, Tsuneo Ikawa, Hiroshi Kubota. Kinetics of liquid phase oxidation of cumene in bubble column // Journal of Chemical Engineering of Japan. – 1970. – P. 72-78.
9. Bhattacharya A. Kinetic modeling of liquid phase autoxidation of cumene // Chemical Engineering Journal. – 2008. – P. 308-319.
10. Popov S.V., Serebryakov B.P., Kirichenko G.S., Golyushyeva G.P. Kinetic model of high-temperature isopropylbenzene oxidation // Petrorefinery and Petrochemistry. – 1983. – No. 5. – P. 31-33.
11. Koledina K.F., Koledin S.N., Schadneva N.A., Mayakova Y.Yu., 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. DOI: 10.1007/s11144-017-1181-3.



12. 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.
13. Гламаздин Е.С., Новиков Д.А., Цветков А.В. Управление корпоративными программами: информационные системы и математические модели. – М.: ИПУ РАН, 2003. – 159 с.
14. 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.
15. Коледина К.Ф., Коледин С.Н., Шаднева Н.А., Губайдуллин И.М. Кинетика и механизм каталитической реакции спиртов с диметилкарбонатом // Журнал физической химии. – 2017. – Т. 91, № 3. – С. 422-428.
16. Габитов С.А., Вовденко М.К., Коледина К.Ф., Губайдуллин И.М. Параллельные вычисления при моделировании реактора окисления кумола // Параллельные вычислительные технологии – XII международная конференция, ПАВТ'2018, г. Ростов-на-Дону, 2–6 апреля 2018 г. Короткие статьи и описания плакатов. – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2018. – С. 402.
17. Vovdenko M.K., Gubaidulin I.M., Koledina K.F., Koledin S.N. Isopropylbenzene oxidation reaction computer simulation // CEUR Workshop Proceedings. – 2017. – Vol. 1966. – P. 20-23.
18. Vovdenko M.K., Gabitov S.A., Koledina K.F., Ahmerov E.A., Sannikov A.D. Mathematical modeling of isopropylbenzene oxidation reaction and oxidation reactor // IOP Conf. Series: Journal of Physics: Conf. Series 1096 (2019) 012189.
19. Koledina K.F., Koledin S.N., Gubaydullin I.M. Optimization of chemical reactions by economic criteria based on kinetics of the process // CEUR Workshop Proceedings. – 2017. – Vol. 1966. – P. 5-9.
20. Коледина, К.Ф., Коледин С.Н., Губайдуллин И.М., Карпенко А.П. Многоцелевая параллельная задача нелинейной оптимизации условий проведения каталитических процессов // Параллельные вычислительные технологии – XI международная конференция, ПАВТ'2017, г. Казань, 3–7 апреля 2017 г. Короткие статьи и описания плакатов. – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2017. – С. 377-385.

#### REFERENCES

1. Slin'ko M.G. Istoriya razvitiya matematicheskogo modelirovaniya kataliticheskikh protsessov i reaktorov [History of development of mathematical modeling of catalytic processes and reactors], *Teoreticheskie osnovy khimicheskoy tekhnologii* [Theoretical bases of chemical technology], 2007, Vol. 41, No. 1, pp. 16-34.
2. Gubaydullin I.M., Lind Yu.B., Koledina K.F. Metodologiya rasparallelivaniya pri reshenii mnogoparametricheskikh obratnykh zadach khimicheskoy kinetiki [Methodology of parallelization in solving multiparametric inverse problems of chemical kinetics], *Vychislitel'nye metody i programmirovaniye* [Computational methods and programming], 2012, Vol. 13, No. 1, pp. 28-36.
3. Koledin S.N., Karpenko A.P., Koledina K.F., Gubaydullin I.M. Informatsionnaya sistema dlya otsenki vzaimosvyazi tselevykh funktsiy i issledovaniya optimal'nykh usloviy provedeniya slozhnoy kataliticheskoy reaksii metodami mnogotselevoy optimizatsii [Information system for evaluation of interrelation of target functions and investigation of optimal conditions of complex catalytic reaction by methods of multi-purpose optimization], *Elektrotekhnicheskie i informatsionnye komplekсы i sistemy* [Electrical and information systems and systems], 2017, Vol. 13, No. 4, pp. 71-81.
4. Novichkova A.V., Bobreneva Yu.O., Gubaydullin I.M., Koledina K.F. Informatsionnyy kompleks postroeniya kineticheskoy modeli reaksii gidroaluminirovaniya olefenov triizobutilaluminium [Information complex of construction of the kinetic model of the reaction hydroalumination reactions of olefinov triisobutylaluminum], *Elektrotekhnicheskie i informatsionnye komplekсы i sistemy* [Electrotechnical and information complexes and systems], 2014, Vol. 10, No. 4, pp. 58-63.
5. Karpenko A.P. Osnovnyye sushchnosti populyatsionnykh algoritmov dlya zadachi global'noy optimizatsii [The main essence of population algorithms for the problem of global optimization], *Informatsionnye i matematicheskie tekhnologii v nauke i upravlenii* [Information and mathematical technologies in science and management], 2016, No. 2, pp. 8-17.

6. Sobol' I.M., Statnikov R.B. *Vybor optimal'nykh parametrov v zadachakh so mnogimi kriteriyami: ucheb. posobie dlya vuzov* [Selection of optimal parameters in problems with many criteria: a textbook for universities]. 2nd ed. Moscow: Drofa, 2006, 175 p.
7. Deb K., Mohan M., Mishra S. *Towards a Quick Computation of Well-Spread Pareto-Optimal Solutions, Evolutionary Multi-Criterion Optimization*. Springer, 2003, pp. 222-236.
8. Kazuo Hattori, Yuxi Tanaka, Hiroyuki Suzuki, Tsuneo Ikawa, Hiroshi Kubota. Kinetics of liquid phase oxidation of cumene in bubble column, *Journal of Chemical Engineering of Japan*, 1970, pp. 72-78.
9. Bhattacharya A. Kinetic modeling of liquid phase autoxidation of cumene, *Chemical Engineering Journal*, 2008, pp. 308-319.
10. Popov S.V., Serebryakov B.P., Kirichenko G.S., Golyushyeva G.P. Kinetic model of high-temperature isopropylbenzene oxidation, *Petrorefinery and Petrochemistry*, 1983, No. 5, pp. 31-33.
11. Koledina K.F., Koledin S.N., Schadneva N.A., Mayakova Y.Yu., 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*. DOI: 10.1007/s11144-017-1181-3.
12. Koledina K.F., Koledin S.N., Gubaydullin I.M. Mnogokriterial'naya optimizatsiya usloviy provedeniya kataliticheskoy reaktsii degidrirovaniya etanola v etilatsetat [Multicriteria optimization of conditions for catalytic reaction of ethanol dehydration in ethyl acetate], *Vestnik Bashkirskogo universiteta* [Bulletin of Bashkir University], 2018, Vol. 23, No. 2, pp. 385-389.
13. Glamazdin E.S., Novikov D.A., TSvetkov A.V. Upravlenie korporativnymi programmami: informatsionnye sistemy i matematicheskie modeli [Corporate program management: information systems and mathematical models]. Moscow: IPU RAN, 2003, 159 p.
14. Koledina K.F., Gubaydullin I.M., Safin R.R., Akhmetov I.V. Informatsionnaya sistema postroeniya kineticheskoy modeli kataliticheskoy reaktsii, planirovanie ekonomicheskogo optimal'nogo khimicheskogo eksperimenta [Information system for constructing a kinetic model of a catalytic reaction, planning an economically optimal chemical experiment], *Sistemy upravleniya i informatsionnye tekhnologii* [Management systems and information technologies], 2015, No. 3 (61), pp. 79-84.
15. Koledina K.F., Koledin S.N., Shchadneva N.A., Gubaydullin I.M. Kinetika i mekhanizm kataliticheskoy reaktsii spirtov s dimetilkarbonatom [Kinetics and mechanism of catalytic reaction of alcohols with dimethyl carbonate], *Zhurnal fizicheskoy khimii* [Journal of physical chemistry], 2017, Vol. 91, No. 3, pp. 422-428.
16. Gabitov S.A., Vovdenko M.K., Koledina K.F., Gubaydullin I.M. Parallelnye vychisleniya pri modelirovanii reaktora okisleniya kumola [Parallel calculations in the simulation of the cumol oxidation reactor], *Parallelnye vychislitel'nye tekhnologii – XII mezhdunarodnaya konferentsiya, PaVT'2018, g. Rostov-na-Donu, 2–6 aprelya 2018 g. Korotkie stat'i i opisaniya plakatov* [Parallel computational technologies XII international conference, PCT '2018, Rostov-on-don, 2-6 April 2018 Short articles and descriptions of posters]. – Chelyabinsk: Izdatel'skiy tsentr YuUrGU, 2018, pp. 402.
17. Vovdenko M.K., Gubaidulin I.M., Koledina K.F., Koledin S.N. Isopropylbenzene oxidation reaction computer simulation, *CEUR Workshop Proceedings*, 2017, Vol. 1966, pp. 20-23.
18. Vovdenko M.K., Gabitov S.A., Koledina K.F., Ahmerov E.A., Sannikov A.D. Mathematical modeling of isopropylbenzene oxidation reaction and oxidation reactor, *IOP Conf. Series: Journal of Physics: Conf. Series* 1096 (2019) 012189.
19. Koledina K.F., Koledin S.N., Gubaydullin I.M. Optimization of chemical reactions by economic criteria based on kinetics of the process, *CEUR Workshop Proceedings*, 2017, Vol. 1966, pp. 5-9.
20. Koledina, K.F., Koledin S.N., Gubaydullin I.M., Karpenko A.P. Mnogotsel'evaya parallelnaya zadacha nelineynoy optimizatsii usloviy provedeniya kataliticheskikh protsessov [Multi-purpose parallel problem of nonlinear optimization of conditions of catalytic processes], *Parallelnye vychislitel'nye tekhnologii – XI mezhdunarodnaya konferentsiya, PaVT'2017, g. Kazan', 3–7 aprelya 2017 g. Korotkie stat'i i opisaniya plakatov* [Parallel computing technologies-XI international conference, Pavt '2017, Kazan, 3-7 April 2017. Short articles and descriptions of posters]. Chelyabinsk: Izdatel'skiy tsentr YuUrGU, 2017, pp. 377-385.

Статью рекомендовала к опубликованию д.т.н. А.В. Никитина.

**Коледина Камила Феликсовна** – Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН; e-mail: koledinakamila@mail.ru; Уфа, просп. Октября, 71; тел.: 89872557810; доцент кафедры «Математика»; к.ф.-м.н.; научный сотрудник.

**Вовденко Михаил Константинович** – e-mail: mikhail\_vovdenko@rambler.ru; тел.: 89174439899; аспирант.

**Губайдуллин Ирек Марсович** – e-mail: irekmars@mail.ru; тел.: 89173405022; профессор кафедры «Технология нефти и газа»; д.ф.-м.н.; доцент; с.н.с.

**Коледин Сергей Николаевич** – e-mail: koledinsrg@gmail.com; тел.: 89872557811; доцент кафедры «Математика»; к.ф.-м.н.

**Koledina Kamila Feliksovna** – Institute of Petrochemistry and Catalysis, UFIC RAS; e-mail: koledinakamila@mail.ru; 71, pr. Oktyabrya, Ufa, Russia; phone: +79872557810; associate professor of math department; cand. of phis.-math. sc.; researcher.

**Vovdenko Mikhail Kostantinovich** – e-mail: mikhail\_vovdenko@rambler.ru; phone: +79174439899; graduate student.

**Gubaydullin Irek Marsovich** – e-mail: irekmars@mail.ru; phone: +79173405022; professor of the petroleum and gas technology department; dr. of phis.-math. sc.; associate professor; senior researcher.

**Koledin Sergey Nikolaevich** – e-mail: koledinsrg@gmail.com; phone: +79872557811; associate professor of math department; cand. of phis.-math. sc.

УДК 621.396

DOI 10.23683/2311-3103-2018-8-163-173

**Е.Е. Завтур, И.И. Маркович, А.И. Паньчев**

### **ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОСТИ ФИЛЬТРА ПОДАВЛЕНИЯ БОКОВЫХ ЛЕПЕСТКОВ ПРИ СОГЛАСОВАННОЙ ФИЛЬТРАЦИИ СИГНАЛОВ БАРКЕРА**

*Целью исследования является синтез дополнительного фильтра подавления боковых лепестков, обеспечивающего компромисс между ухудшением отношения сигнал-шум и уменьшением уровня боковых лепестков на выходе фильтра, согласованного с сигналами на основе кодов Баркера. Для достижения поставленной цели находятся коэффициенты фильтра подавления боковых лепестков и оценивается его эффективность. Цифровой фильтр подавления боковых лепестков синтезирован на основе решения оптимизационной задачи поиска условного максимума относительного значения главного лепестка выходного сигнала неоптимального фильтра при условии ограничения величины его боковых лепестков. Исследованы фильтры подавления боковых лепестков при согласованной фильтрации сигналов, сформированных на основе последовательностей Баркера различной длины. Получены количественные оценки величины подавления боковых лепестков и ухудшения отношения сигнал-шум на выходе синтезированного фильтра. Установлено, что максимальное подавление боковых лепестков достигается в случае пятиэлементного (11,65 дБ) и 13-элементного (11,7 дБ) кодов Баркера. Величина боковых лепестков в выходном сигнале при этом составляют минус 25,63 дБ и минус 33,98 дБ соответственно. Минимальный проигрыш в отношении сигнал-шум получен для сигналов на основе 11-элементного (1,56 дБ) и 13-элементного (0,73 дБ) кодов Баркера. Для сигнала с пятиэлементным кодом Баркера этот показатель составляет 1,75 дБ. Таким образом, оптимальное соотношение между степенью подавления боковых лепестков и ухудшением отношения сигнал-шум при обработке выходного сигнала согласованного фильтра дополнительным несогласованным фильтром достигается для сигналов 13-элементного кода Баркера. В тех случаях, когда наложены существенные ограничения на длительность выходного сигнала, предпочтительным является использование пятиэлементного кода Баркера.*

*Радиолокация; согласованный фильтр; код Баркера; подавление боковых лепестков.*