

# Моделирование реакционной способности химических реакций на основе многоядерных вычислительных систем\*

И.В. Ахметов, И.М. Губайдуллин, Р.Р. Сафин

Обратные задачи химической кинетики относятся к таким физико-химическим задачам, которые предполагают значительный объем вычислений. В настоящее время активно внедряются вычислительные системы с многоядерными процессорами, преимуществами которых являются доступность и легкость использования, что расширяет возможности их применения в научных исследованиях. В данной работе предложен параллельный метод решения обратных кинетических задач на многоядерных системах.

## 1. Введение

Каталитические реакции синтеза ароматических и гетероциклических соединений, таких как N-бензилиденбензиламин и метиловый эфир 5-ацетил-2-пирролкарбоновой кислоты обладают широким спектром применения. N-бензилиденбензиламин известен как индикатор количественного определения литийорганических соединений титриметрическим методом и является исходным соединением для синтеза ряда гетероциклов. Метиловый эфир 5-ацетил-2-пирролкарбоновой кислоты представляет большой интерес для получения порфиринов и лекарственных препаратов [1].

Для изучения механизмов вышеуказанных реакций необходимо построить кинетические модели, решение обратных кинетических задач для которых усложнено тем обстоятельством, что данный этап разработки кинетической модели является наиболее трудоемким и требует больших временных затрат.

Применение параллельных вычислений становится все более востребованным методом математической обработки экспериментальных данных в связи с увеличивающейся сложностью получения детальной информации о химических реакциях.

Обратные задачи химической кинетики относятся к таким физико-химическим задачам, которые предполагают значительный объем вычислений. Использование высокопроизводительных вычислительных систем принципиально изменило возможности анализа сложных химических процессов: стал доступным детальный анализ достаточно сложных кинетических моделей с большим количеством экспериментальной информации; во много раз сократилось время построения кинетических моделей; повысилась точность решений.

В настоящее время предложены решения обратных кинетических задач с применением параллельных вычислений на кластерных системах и графических процессорах. Активно внедряются вычислительные машины с многоядерными процессорами, преимуществами которых являются доступность и легкость использования, что расширяет возможности их применения в научных исследованиях.

В данной работе предложен метод поиска кинетических параметров, использующий технологию параллельных вычислений на многоядерных системах, для построения кинетических моделей химических реакций металлокомплексного катализа с целью сокращения сроков изучения и освоения новых каталитических процессов.

## 2. Кинетические модели реакций синтеза ароматических и гетероциклических соединений

Для понимания физико-химической сущности каталитической реакции, последующего математического моделирования каталитического процесса и определения условий его про-

---

\* Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (госконтракт № 02.740.11.0631) и поддержана грантом РФФИ 12-07-00324

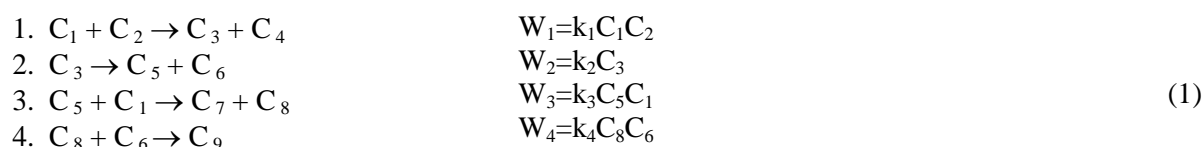
мышленной реализации необходима, прежде всего, разработка его кинетической и математической моделей [2].

Основополагающей, базисной основой моделирования каталитических процессов являются, прежде всего, детальные исследования физико-химической сущности химических реакций, поскольку полученные в натуральных и уточненные в вычислительных экспериментах количественные характеристики позволят построить кинетические модели, которые станут надежной основой последующих разработок.

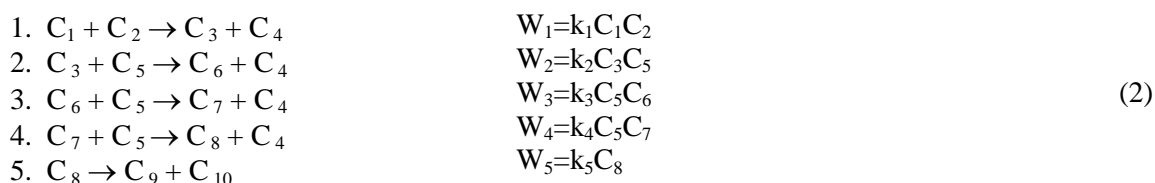
Кинетическая модель процесса представляет собой совокупность элементарных стадий, реакций и уравнений, характеризующих зависимость скорости химического превращения от параметров реакции: давления, температуры, концентраций реагентов и др. Подобные зависимости определяются на основе экспериментальных данных, полученных в области изменения параметров реакции, охватывающей практически все ведения процесса в промышленных условиях. Построенная таким образом кинетическая условия модель является первым уровнем модели каталитического реактора и базисом для решения статических и динамических задач, возникающих при разработках технологических процессов.

Разработка кинетических моделей, приведенная в данной работе, основана на экспериментальных данных по синтезу ароматических соединений (на примере бензилиденбензиламина) и гетероциклических соединений (на примере метилового эфира 5-ацетил-2-пирролкарбоновой кислоты), полученных в лаборатории химии углеводов ИНК РАН. В ходе экспериментов разработан новый метод введения в соединения пиррольного ряда карбоксильной группы по оригинальной методике, основанной на взаимодействии пирролов с системой  $\text{CCl}_4\text{-CH}_3\text{OH}$ -катализатор.

На основе анализа экспериментальных данных и результатов их математической обработки [3] предложены следующие схемы химических превращений в реакциях синтеза ароматических и гетероциклических соединений под действием металлокомплексных катализаторов и соответствующие им кинетические уравнения (1)-(2):



$\text{C}_i$  – концентрации компонентов, моль/л:  $\text{C}_1 = \text{C}_7\text{H}_9\text{N}$  – бензиламин,  $\text{C}_2 = \text{CCl}_4$  – четыреххлористый углерод,  $\text{C}_3 = \text{C}_7\text{H}_8\text{NCl}$  – хлорбензиламин,  $\text{C}_4 = \text{CHCl}_3$  – хлороформ,  $\text{C}_5 = \text{C}_7\text{H}_7\text{N}$  – 1-фенилметанимин,  $\text{C}_6 = \text{HCl}$  – хлористый водород,  $\text{C}_7 = \text{C}_{14}\text{H}_{13}\text{N}$  – бензилиденбензиламин,  $\text{C}_8 = \text{NH}_3$  – аммиак,  $\text{C}_9 = \text{NH}_4\text{Cl}$  – хлористый аммоний;  $k_j$  – кинетическая константа скорости  $j$ -ой реакции,  $\text{л}\cdot\text{моль}^{-1}\cdot\text{ч}^{-1}$  ( $j=1, 3, 4$ ),  $\text{ч}^{-1}$  ( $j=2$ ).



где  $\text{C}_i$  – концентрации компонентов, моль/л:  $\text{C}_1 = \text{C}_6\text{H}_7\text{NO}$  – 2-ацетилпиррол,  $\text{C}_2 = \text{CCl}_4$  – четыреххлористый углерод,  $\text{C}_3 = \text{C}_7\text{H}_6\text{NOCl}_3$  – 2-ацетил-5-трихлорметилпиррол,  $\text{C}_4 = \text{HCl}$  – соляная кислота,  $\text{C}_5 = \text{CH}_4\text{O}$  – метанол,  $\text{C}_6 = \text{C}_8\text{H}_9\text{Cl}_2\text{NO}_2$  – 2-ацетил-5-дихлор(метокси)метанпиррол,  $\text{C}_7 = \text{C}_9\text{H}_{12}\text{ClNO}_3$  – 2-ацетил-5-диметокси(хлор)метанпиррол,  $\text{C}_8 = \text{C}_{10}\text{H}_{15}\text{NO}_4$  – 2-ацетил-5-триметоксиметанпиррол,  $\text{C}_9 = \text{C}_8\text{H}_9\text{NO}_3$  – метиловый эфир 5-ацетил-2-пирролкарбоновой кислоты,  $\text{C}_{10} = \text{CH}_3\text{OCH}_3$  – формальдегид;  $k_j$  – кинетическая константа скорости  $j$ -ой реакции,  $\text{л}\cdot\text{моль}^{-1}\cdot\text{ч}^{-1}$  ( $j=1, 2, 3, 4$ ),  $\text{ч}^{-1}$  ( $j=5$ ).

В (1) и (2)  $\text{W}_j$  – скорость  $j$ -ой реакции, моль/(л·ч).

Кинетические уравнения схемы превращений (1)–(2) проанализированы в рамках закона действующих масс. Корректным описанием лабораторного реактора с мешалкой является модель идеального смешения [4].

Суммарный баланс изотермического реактора идеального смешения для  $i$ -того компонента в элементе объема реактора ( $\Delta V$ ) для варианта, когда молярная плотность газа или жидкости (или суммарная концентрация  $C$ , кмоль/м<sup>3</sup>) изменяется во времени, т.е. когда реакция протекает с изменением числа молей, определяется за счет изменения:

- было в момент времени ( $t$ ):  $C_i(t) \cdot \Delta V = C(t) \cdot X_i(t) \cdot \Delta V$
- стало в момент времени ( $t+\Delta t$ ):  $C_i(t+\Delta t) \cdot \Delta V = C(t+\Delta t) \cdot X_i(t+\Delta t) \cdot \Delta V$
- изменилось за время ( $\Delta t$ ) за счет химических реакций:  $\left( \sum_{j=1}^J \nu_{ij} W_j \right) \cdot \Delta V \cdot \Delta t$ ,

где  $X_i = C_i/C$  – концентрация  $i$ -того компонента в молярных долях.

Тогда, материальный баланс изотермического реактора идеального смешения описывается уравнением:

$$C(t) \cdot X_i(t) \cdot \Delta V - C(t+\Delta t) \cdot X_i(t+\Delta t) \cdot \Delta V + \left( \sum_{j=1}^J \nu_{ij} W_j \right) \cdot \Delta V \cdot \Delta t = 0$$

или

$$C(t) \cdot X_i(t) - C(t+\Delta t) \cdot X_i(t+\Delta t) + \left( \sum_{j=1}^J \nu_{ij} W_j \right) \Delta t = 0.$$

В пределе, при  $\Delta t$ , стремящемся к нулю, получим систему дифференциальных уравнений:

$$\frac{d(CX_i)}{dt} = \sum_{j=1}^J \nu_{ij} W_j \quad (3)$$

с начальными условиями –  $t = 0$ :  $X_i = X_i^o$ ,  $C = C_o$ .

Система уравнений (3) замыкается условием нормировки по компонентам реакционной среды:  $\sum_{i=1}^I X_i = 1$ .

При кинетических исследованиях экспериментальные данные получают, как правило, в изотермических условиях при постоянном давлении. Для газофазных реакций молярная плотность газа ( $C_o$ ) может быть рассчитана из уравнения состояния, например, уравнения Менделеева-Клапейрона для идеальных газов:  $PV = \frac{m}{M} RT = nRT$  или  $P = C_o RT$ ,  $C_o = P/(RT)$ , где

$$C_o = \frac{m}{MV} = \frac{n}{V}.$$

Начальная молярная плотность жидкости ( $C_o$ ) постоянна при любых температурах.

Тогда, разделив (3) на  $C_o$ , получим систему дифференциальных уравнений:

$$\frac{d(\bar{N}x_i)}{dt} = \sum_{j=1}^J \nu_{ij} \omega_j \quad (4)$$

где  $\bar{N} = C/C_o$  – относительное изменение числа молей реакционной среды,  $\omega_j = W_j / C_o$  – приведенные скорости химических реакций.

Суммируя уравнения (4) с учетом условия нормировки, получим:

$$\frac{d\bar{N}}{dt} = F_N = \sum_{j=1}^J \omega_j \sum_{i=1}^I \nu_{ij} \quad (5)$$

Продифференцировав уравнения (5), получим:

$$x_i \frac{d\bar{N}}{dt} + N \frac{dx_i}{dt} = F_i = \sum_{j=1}^J v_{ij} \omega_j \quad (6)$$

Умножим (5) на  $X_i$  и вычтем из (6). Тогда, с учетом правой части уравнения (5), получим систему дифференциальных уравнений материального баланса периодического реактора идеального смешения (7)-(8):

$$\frac{d\bar{N}}{dt} = F_N, \quad F_N = \frac{1}{V_0} \sum_{j=1}^J \delta_j \omega_j, \quad \delta_j = \sum_{i=1}^I v_{ij} \quad (7)$$

$$\frac{dX_i}{dt} = \frac{F_i - X_i F_N}{\bar{N}} \quad (8)$$

с начальными условиями: при  $t=0 - X_i = X_i^0, \bar{N} = 1,$

где  $\bar{N} = C/C_0$  – относительное изменение числа молей реакционной смеси;  $C$  и  $C_0$  – мольная плотность и ее начальное значение, моль/л;  $X_i = C_i/C$  – концентрации компонентов, мольные доли;  $V_0$  – объем реакционного пространства, л;  $\omega_j = W_j/C_0$  – приведенные скорости реакций,  $\text{ч}^{-1}$ ;  $J$  – число стадий химического превращения;  $I$  – количество компонентов.

Правые части систем уравнений (7)-(8) для реакций синтеза ароматических и гетероциклических соединений имеют следующий вид:

– Синтез бензилиденбензиламина реакцией бензиламина с четыреххлористым углеродом под действием  $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$

$F_1 = -\omega_1 - \omega_3; F_2 = -\omega_1; F_3 = \omega_1 - \omega_2; F_4 = \omega_1; F_5 = \omega_2 - \omega_3; F_6 = \omega_2 - \omega_4; F_7 = \omega_1; F_8 = \omega_3 - \omega_4; F_9 = \omega_4; F_n = \omega_2 - \omega_4.$

– Синтез метилового эфира 5-ацетил-2-пирролкарбоновой кислоты

$F_1 = -\omega_1; F_2 = -\omega_1; F_3 = \omega_1 - \omega_2; F_4 = \omega_1 + \omega_2 + \omega_3 + \omega_4; F_5 = \omega_2 - \omega_3 - \omega_4; F_6 = \omega_2 - \omega_3; F_7 = \omega_1 - \omega_4; F_8 = \omega_4 - \omega_5; F_9 = \omega_5; F_{10} = \omega_5; F_n = \omega_5.$

### 3. Метод решения обратных кинетических задач с использованием многоядерных систем

Расчет кинетических параметров химической реакции в присутствии металлокомплексного катализатора – длительный процесс. Для ускорения решения обратной задачи химической кинетики была разработана программа на языке C++ с технологией многопоточного программирования OpenMP [5].

Созданный программный комплекс реализует расчеты с помощью многопоточности, в которой мастер-поток создает набор управляемых потоков и распределяет задачу между ними. Вычисления выполняются параллельно в системе с несколькими ядрами.

Описание задач, выполняемых параллельно несколькими потоками, и данных, используемых в этих задачах, осуществляется с помощью специальных директив языка программирования [6].

Количество создаваемых потоков необязательно совпадает с количеством ядер. Это регулируется при помощи вызова специальной библиотеки, а также переменных окружения.

При решении обратной кинетической задачи генерируется набор из  $n$  исходных констант скоростей стадий, основанный на методах регрессионного анализа. Существует  $2^n$  вариантов изменения набора констант в сторону увеличения или уменьшения на шаги  $\Delta_i$ , равные заданному проценту от предыдущих значений для всех кинетических констант, т.е.:  $K^m = K^{m-1}(1 + \Delta_i/100)$ , где  $K^m$  и  $K^{m-1}$  – значения новых констант и констант, полученных на предыдущем шаге расчетов.

В табл.1 и табл.2 приведены все возможные варианты изменения набора констант для синтеза бензилиденбензиламина взаимодействием бензиламина с четыреххлористым углеродом под действием  $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  при  $n=4$  и синтеза метилового эфира 5-ацетил-2-пирролкарбоновой кислоты при  $n=5$ .

Набор с наиболее удовлетворяющими решениями выбирается как исходный набор констант скоростей стадий. Для нового набора констант выполняют такие же операции, что и для предыдущего.

Процесс поиска оптимальных кинетических параметров останавливают при достижении заданной точности.

В качестве критерия отклонения расчетных и экспериментальных данных выбран следующий функционал:

$$EE = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M |X_{ij}^p - X_{ij}^э| \rightarrow \min, \quad (9)$$

где  $X_{ij}^p$  – расчетные значения концентраций наблюдаемых веществ, мольные доли;  $X_{ij}^э$  – экспериментально полученные значения концентраций наблюдаемых веществ, мольные доли;  $N$  – количество точек эксперимента;  $M$  – количество веществ реакции.

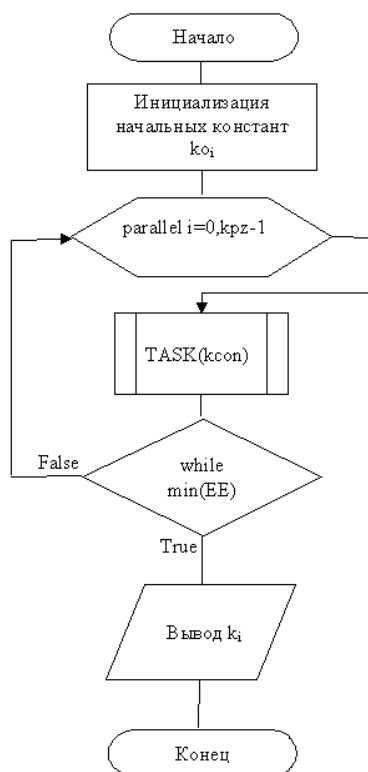
**Таблица 1.** Вариации четырех констант для реакции синтеза бензилиденбензиламина

№	K <sub>1</sub>	K <sub>2</sub>	K <sub>3</sub>	K <sub>4</sub>	№	K <sub>1</sub>	K <sub>2</sub>	K <sub>3</sub>	K <sub>4</sub>
1	+	+	+	+	9	+	-	+	+
2	+	+	+	-	10	+	-	-	+
3	+	+	-	-	11	+	-	+	-
4	+	-	-	-	12	+	+	-	+
5	-	+	+	+	13	-	+	-	+
6	-	-	+	+	14	-	+	+	-
7	-	-	-	+	15	-	+	-	-
8	-	-	-	-	16	-	-	+	-

**Таблица 2.** Вариации пяти констант для реакции синтеза метилового эфира 5-ацетил-2-пирролкарбоновой кислоты

№	K <sub>1</sub>	K <sub>2</sub>	K <sub>3</sub>	K <sub>4</sub>	K <sub>5</sub>	№	K <sub>1</sub>	K <sub>2</sub>	K <sub>3</sub>	K <sub>4</sub>	K <sub>5</sub>
1	+	+	+	+	+	17	-	+	+	+	+
2	+	+	+	+	-	18	-	+	+	+	-
3	+	+	+	-	+	19	-	+	+	-	+
4	+	+	+	-	-	20	-	+	+	-	-
5	+	+	-	+	+	21	-	+	-	+	+
6	+	+	-	+	-	22	-	+	-	+	-
7	+	+	-	-	+	23	-	+	-	-	+
8	+	+	-	-	-	24	-	+	-	-	-
9	+	-	+	+	+	25	-	-	+	+	+
10	+	-	+	+	-	26	-	-	+	+	-
11	+	-	+	-	+	27	-	-	+	-	+
12	+	-	+	-	-	28	-	-	+	-	-
13	+	-	-	+	+	29	-	-	-	+	+
14	+	-	-	+	-	30	-	-	-	+	-
15	+	-	-	-	+	31	-	-	-	-	+
16	+	-	-	-	-	32	-	-	-	-	-

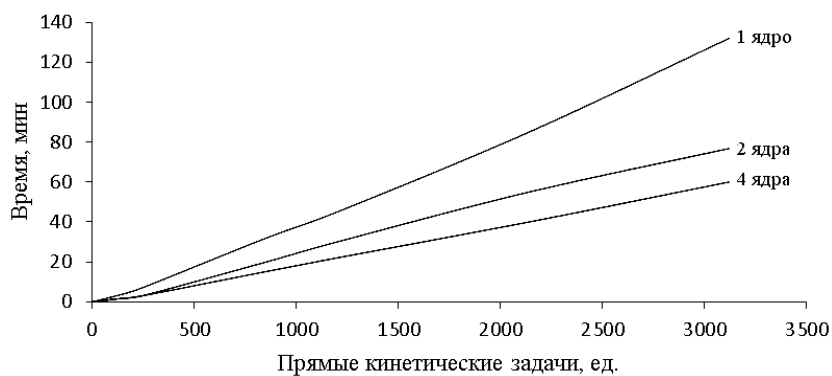
Для всех комбинаций набора констант (см. табл. 1 и 2) решается прямая кинетическая задача: уравнения (7)-(8). Схема метода решения прямых задач с учетом распараллеливания на все доступные ядра приведена на рис. 1.



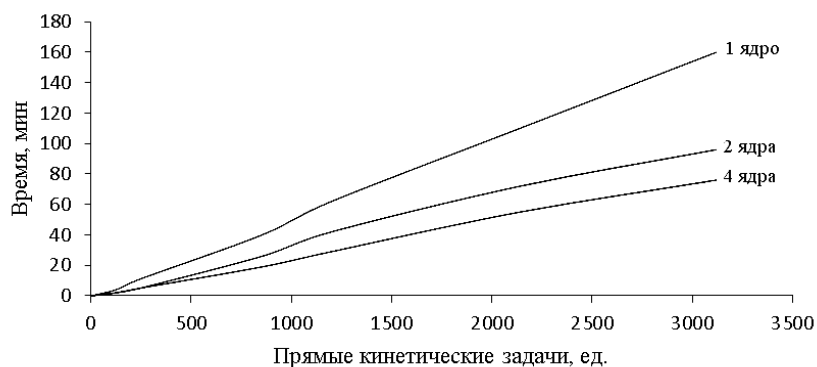
**Рис.1.** Алгоритм метода решения обратной кинетической задачи на основе многоядерных систем

При распараллеливании алгоритма решения обратной кинетической задачи время расчетов на 2 ядрах для достижения заданной точности решения сокращается на 35-40%, а на 4 ядрах – на 50-55%.

Зависимости времени расчетов прямых кинетических задач для двух исследованных реакций представлены на рис.2 и рис.3.



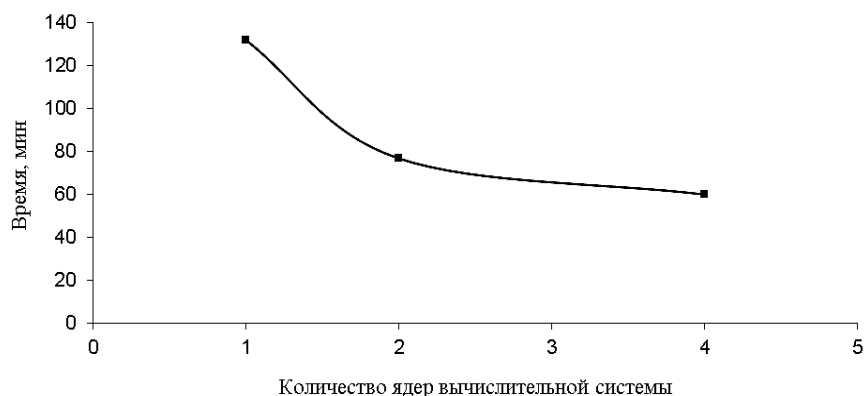
**Рис.2.** Зависимость времени расчетов прямых кинетических задач на многоядерных системах для синтеза бензилиденбензиламина взаимодействием бензиламина с четыреххлористым углеродом под действием  $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$



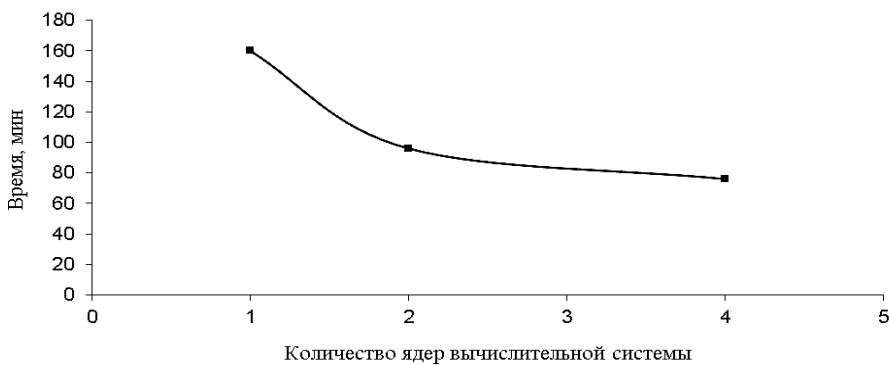
**Рис.3.** Зависимость времени расчетов прямых кинетических задач на многоядерных системах для синтеза метилового эфира 5-ацетил-2-пирролкарбоновой кислоты

Для решения обратных кинетических задач разработан программный комплекс KinMP, тестирование которого проведено на 4-ядерном компьютере ИНК РАН с процессором AMD Phenom II X4 940 Black 3.0 ГГц.

При увеличении в ходе расчетов количества ядер процессора от 1 до 4 произведено измерение времени выполнения программы при решении обратных кинетических задач для реакций синтеза бензилиденбензиламина взаимодействием бензиламина с четыреххлористым углеродом под действием  $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  (рис.4) и синтеза метилового эфира 5-ацетил-2-пирролкарбоновой кислоты (рис.5).

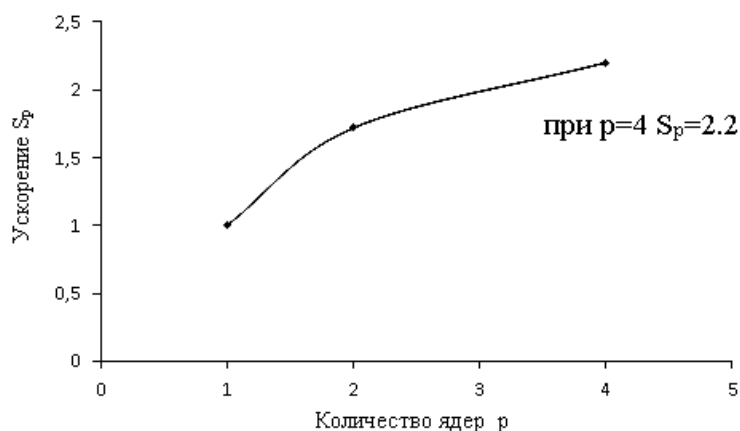


**Рис.4.** Зависимость времени выполнения программы от количества ядер для реакции синтеза бензилиденбензиламина

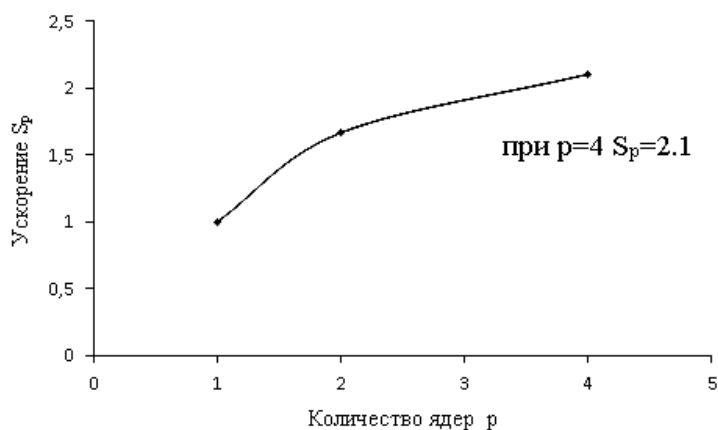


**Рис.5.** Зависимость времени выполнения программы от количества ядер для реакции синтеза метилового эфира 5-ацетил-2-пирролкарбоновой кислоты

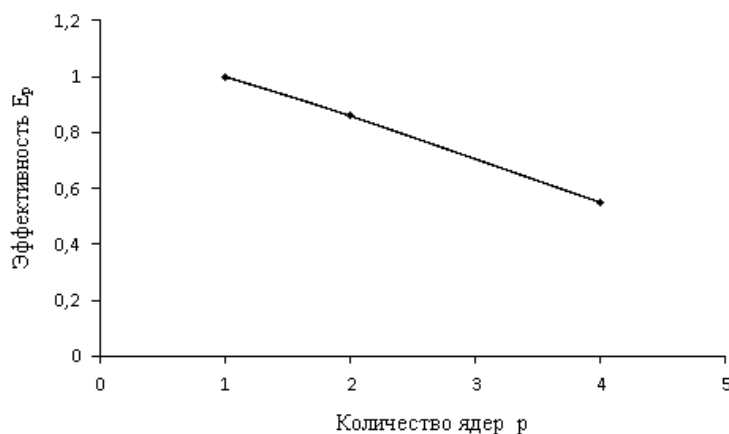
Рассчитано получаемое ускорение и эффективность выполнения программы для реакций синтеза бензилиденбензиламина взаимодействием бензиламина с четыреххлористым углеродом под действием  $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  (см. рис.6, рис.8) и метилового эфира 5-ацетил-2-пирролкарбоновой кислоты (см. рис.7, рис.9).



**Рис.6.** Зависимость ускорения выполнения программы от количества ядер для синтеза бензилиденбензиламина взаимодействием бензиламина с четыреххлористым углеродом под действием  $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$

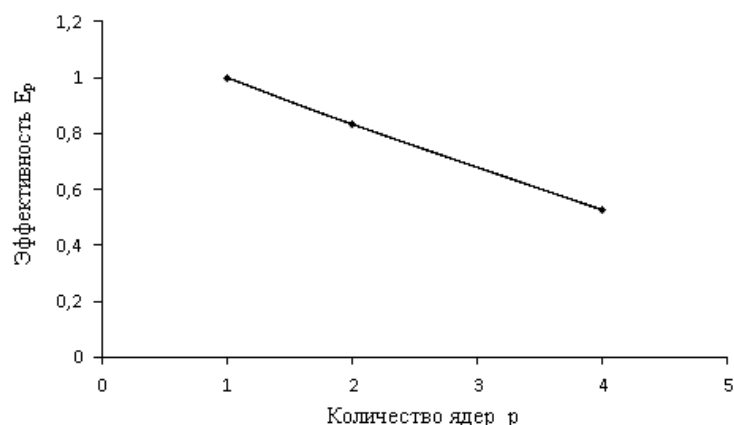


**Рис.7.** Зависимость ускорения выполнения программы от количества ядер для синтеза метилового эфира 5-ацетил-2-пирролкарбоновой кислоты



**Рис.8.** Зависимость эффективности выполнения программы от количества ядер для синтеза бензилиденбензиламина взаимодействием бензиламина с четыреххлористым углеродом под действием  $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$





**Рис.9.** Зависимость эффективности выполнения программы от количества ядер для синтеза метилового эфира 5-ацетил-2-пирролкарбоновой кислоты

При расчете кинетических параметров и использовании четырех ядер для реакции синтеза бензилиденбензиламина взаимодействием бензиламина с четыреххлористым углеродом под действием  $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  получено ускорение в 2.2 раза, а для синтеза метилового эфира 5-ацетил-2-пирролкарбоновой кислоты – 2.1.

#### 4. Результаты вычислительных экспериментов

Численные значения найденных констант скоростей стадий и энергий активации для синтеза бензилиденбензиламина и синтеза метилового эфира 5-ацетил-2-пирролкарбоновой кислоты (МЭАПКК) приведены соответственно в табл.3 и табл.4. В реакции получения метилового эфира 5-ацетил-2-пирролкарбоновой кислоты лимитирующей оказалась совокупность стадий 2, 3 и 4. Наиболее энергоемкой является первая стадия – алкилирование 2-ацетилпиррола.

**Таблица 3.** Кинетические параметры для синтеза бензилиденбензиламина

Кинетические константы при температуре 23°C, ч <sup>-1</sup>		E <sub>i</sub> , ккал/моль
K <sub>1</sub>	1.5×10 <sup>-2</sup>	10.6
K <sub>2</sub>	4.7	7.7
K <sub>3</sub>	13.4	1.6
K <sub>4</sub>	0.6	0.4

**Таблица 4.** Кинетические параметры для синтеза метилового эфира 5-ацетил-2-пирролкарбоновой кислоты

Кинетические константы при температуре 105°C, ч <sup>-1</sup>		E <sub>i</sub> , ккал/моль
K <sub>1</sub>	4.9×10 <sup>-2</sup>	23.8
K <sub>2</sub>	4.3×10 <sup>-3</sup>	3.6
K <sub>3</sub>	4.1×10 <sup>-2</sup>	4.4
K <sub>4</sub>	7×10 <sup>-4</sup>	9.7
K <sub>5</sub>	6.4	3.1

#### 5. Заключение

Таким образом, разработан алгоритм использования многоядерных вычислительных систем для решения обратных задач химической кинетики. Метод реализован в виде программного комплекса, который включает в себя базу данных кинетических исследований, последова-

тельные и параллельные алгоритмы решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений, реализованные на одноядерных и многоядерных вычислительных системах.

Разработана информационно-аналитическая система, успешное применение которой при построении кинетических моделей реакций синтеза ароматических и гетероциклических соединений показало универсальность предлагаемого системного подхода решения обратных кинетических задач.

Система позволяет пользователям достаточно легкую адаптацию при разработке кинетических моделей различных реакций за счет формирования новых блоков в базе экспериментального данных, выбора или добавления новых методов обработки данных, построения математических моделей исследуемых объектов разной сложности.

## 5.1 Основные результаты и выводы

1. Предложен новый метод параллельных вычислений на многоядерных системах при построении кинетических моделей химических реакций металлокомплексного катализа.

При решении обратной кинетической задачи генерируется набор из  $n$  исходных констант скоростей стадий, основанный на методах регрессионного анализа.

2. На основе разработанного подхода построены кинетические модели для реакций: синтеза бензилиденбензиламина взаимодействием бензиламина с четыреххлористым углеродом под действием  $\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  и метилового эфира 5-ацетил-2-пирролкарбоновой кислоты. Показано, что использование четырехъядерной системы позволяет в 2,1-2,2 раза ускорить вычислительный процесс.

## Литература

1. Хуснутдинов Р.И., Байгузина А.Р., Аминов Р.И. Синтез N-бензилиденбензиламина из бензиламина при действии железосодержащих катализаторов в  $\text{CCl}_4$  // Журнал органической химии. 2012. С. 1063-1065.
2. Слинько М.Г. Моделирование химических реакторов. Новосибирск: Наука, 1968. 96 с.
3. Хуснутдинов Р.И., Байгузина А.Р., Мукминов Р.Р., Ахметов И.В., Губайдуллин И.М., Спивак С.И., Джемилев У.М. Новый метод синтеза эфиров 2-пирролкарбоновой и 2,5-пирролдикарбоновой кислот реакцией пирролов с  $\text{CCl}_4$  и алифатическими спиртами под действием Fe-содержащих катализаторов // Журнал органической химии. 2010. С.1054-1060.
4. Губайдуллин И.М. Информационно-аналитическая система решения многопараметрических обратных задач химической кинетики // Дисс. ... доктора физико-математических наук. Уфа, 2012. 243 с.
5. Гергель В.П. Теория и практика параллельных вычислений. М.: БИНОМ, 2010. 423 с.
6. Воеводин В.В., Воеводин Вл.В. Параллельные вычисления. СПб: БХВ-Петербург, 2002. 608 с.