

КИНЕТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ХАОСА В ЛИНЕЙНЫХ КАТАЛИТИЧЕСКИХ РЕАКЦИЯХ

Н.И. Кольцов

Николай Иванович Кольцов (ORCID 0000-0003-2264-1370)

Кафедра физической химии и высокомолекулярных соединений, Чувашский госуниверситет им. И.Н. Ульянова, Московский пр., 15, Чебоксары, Российская Федерация, 428015

E-mail: koltsovni@mail.ru

Хаос (хаотические колебания, странные аттракторы) представляет собой аперидические изменения тех или иных параметров исследуемой динамической системы, которые отличаются от других видов колебаний (затухающих, незатухающих, многопериодических) необычно сложным, непредсказуемым динамическим поведением и могут наблюдаться в течение сколь угодно длительного времени. Из теории динамических систем следует, что хаотические колебания могут быть описаны нелинейными системами обыкновенных дифференциальных уравнений с тремя и более независимыми переменными. До настоящего времени такие дифференциальные уравнения были использованы для построения кинетических моделей в рамках идеального закона действующих масс, описывающих хаотические колебания в гомогенных и гетерогенно-каталитических реакциях. Причем эти кинетические модели описывают хаотические колебания только для реакций, протекающих по нелинейным по промежуточным веществам стадийным схемам. В данной статье исследована возможность описания хаотических колебаний линейными системами обыкновенных дифференциальных уравнений с тремя независимыми переменными, которые в рамках неидеального кинетического закона Марселина-де Донде соответствуют линейным по промежуточным веществам стадийным схемам. Показано, что в реальных условиях, при выполнении закона Марселина-де Донде, кинетические модели линейных по промежуточным веществам механизмов позволяют описать как угодно сложное динамическое поведение каталитических реакций. Установлены четырехстадийные линейные по промежуточным веществам схемы, кинетические модели которых описывают хаотические колебания реакций взаимодействия монооксидов азота и углерода ($2\text{NO} + \text{CO} \rightarrow \text{N}_2\text{O} + \text{CO}_2$) и окисления монооксида углерода ($2\text{CO} + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{CO}_2$) на платиновых катализаторах с кинетикой Марселина-де Донде в изотермическом безградиентном реакторе.

Ключевые слова: каталитические реакции, стадийные схемы, кинетические модели, закон действующих масс, кинетика Марселина-де Донде, хаос, изотермический безградиентный реактор

KINETIC MODELS OF CHAOS IN LINEAR CATALYTIC REACTIONS

N.I. Kol'tsov

Nikolay I. Kol'tsov (ORCID 0000-0003-2264-1370)

Department of Physical Chemistry and Macromolecular Compounds, I.N. Ulyanov Chuvash State University, Moskovskiy ave., 15, Cheboksary, 428015, Russia

E-mail: koltsovni@mail.ru

Chaos (chaotic oscillations, strange attractors) are aperiodic changes in certain parameters of the dynamic system under study, which differ from other types of oscillations (damped, undamped, multi-periodic) by unusually complex, unpredictable dynamic behavior, and can be observed for an arbitrarily long time. From the theory of dynamical systems it follows that chaotic oscillations can be described by nonlinear systems of ordinary differential equations with three or more independent variables. Until now, such differential equations have been used to construct kinetic models within the framework of the ideal law of mass action, describing chaotic oscillations

in homogeneous and heterogeneous catalytic reactions. Moreover, these kinetic models describe chaotic oscillations only for reactions occurring according to stage schemes that are nonlinear with respect to intermediate substances. This article explores the possibility of describing chaotic oscillations by linear systems of ordinary differential equations with three independent variables, which, within the framework of the nonideal Marcelin-de Donde kinetic law, correspond to stage schemes linear in intermediate substances. It is shown that in real conditions, when the Marcelin-de Donde law is satisfied, kinetic models of mechanisms linear in intermediate substances make it possible to describe any complex dynamic behavior of catalytic reactions. Four-stage linear schemes in intermediate substances have been established, the kinetic models of which describe chaotic oscillations of the reactions of interaction between nitrogen monoxides and carbon monoxides ($2\text{NO} + \text{CO} \rightarrow \text{N}_2\text{O} + \text{CO}_2$) and the oxidation of carbon monoxide ($2\text{CO} + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{CO}_2$) on platinum catalysts with Marcelin-de Donde kinetics in an isothermal gradientless reactor.

Key words: catalytic reactions, stage schemes, kinetic models, law of mass action, Marcelin-de Donde kinetics, chaos, isothermal gradientless reactor

Для цитирования:

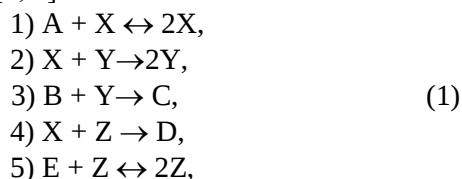
Кольцов Н.И. Кинетические модели хаоса в линейных каталитических реакциях. *Изв. вузов. Химия и хим. технология*. 2024. Т. 67. Вып. 5. С. 121–127. DOI: 10.6060/ivkkt.20246705.6956.

For citation:

Kol'tsov N.I. Kinetic models of chaos in linear catalytic reactions. *ChemChemTech [Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.]*. 2024. V. 67. N 5. P. 121–127. DOI: 10.6060/ivkkt.20246705.6956.

ВВЕДЕНИЕ

Известно [1–4], что математические модели хаотических колебаний могут быть описаны нелинейными системами обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) с тремя и более независимыми переменными. Классической гидродинамической моделью хаоса является «странный аттрактор» Лоренца [5], включающий три простых (на первый взгляд) ОДУ: $x' = -\alpha x + \alpha y$, $y' = \beta x - xz - y$, $z' = xy - \gamma z$, где $\alpha = 10$, $\beta > 28$, $\gamma = 8/3$ – константы (производные здесь и далее берутся по времени). Эти уравнения не связаны с химическими процессами, но вызвали интерес многих исследователей к возможности описания хаотических колебаний в различных областях науки. Первый пример использования аналогичных ОДУ в качестве моделей химических реакций был найден Росслером [6, 7]: $x' = -(y + z)$, $y' = x + ay$, $z' = b + z(x - c)$, где $a = 0.2$, $b = 0.2$, $c \geq 4.2$ – константы. Дальнейшие исследования этой модели позволили в рамках закона действующих масс (ЗДМ) описать хаотические колебания в гомогенной химической реакции, которая позднее стала известна как механизм Вилламовски-Росслера [8, 9]:



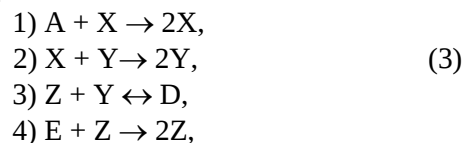
где A, B, C, D, E – основные вещества; X, Y, Z –

независимые промежуточные вещества. Этот механизм включает два маршрута I) $\text{A} + \text{B} = \text{C} + \text{D}$, II) $\text{A} + \text{E} = \text{D}$ и в квазистационарных по основным веществам условиях описывается системой ОДУ

$$\begin{aligned} x' &= w_1x - w_{-1}x^2 - w_2xy - w_4xz, \\ y' &= w_2xy - w_3y, \\ z' &= w_5z - w_{-5}z^2 - w_4xz, \end{aligned} \quad (2)$$

где x, y, z – концентрации промежуточных веществ, безразмерные величины (б/р); w_i и w_{-i} – частоты стадий в прямом и обратном направлениях (с^{-1}), включающие константы скоростей стадий и постоянные концентрации основных веществ.

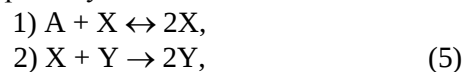
В [10–13] установлены более простые одномашутные четырехстадийные схемы гомогенных реакций, полученные модификацией стадий схемы (1). Так, в [10] исследована нелинейная схема

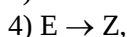
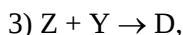


с системой ОДУ при постоянстве концентраций основных веществ

$$\begin{aligned} x' &= w_1x - w_2xy, \\ y' &= w_2xy - w_3yz + w_{-3}, \\ z' &= -w_3yz + w_{-3} + w_4z, \end{aligned} \quad (4)$$

описывающая хаос при определенных значениях частот стадий. В [11] показано, что схема с одной линейной по промежуточным веществам стадией





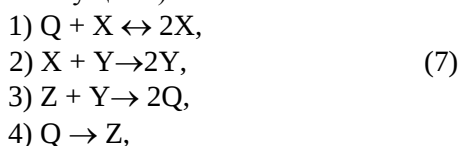
описываемая системой ОДУ

$$\begin{aligned} x' &= w_1x - w_{-1}x^2 - w_2xy, \\ y' &= w_2xy - w_3yz, \\ z' &= -w_3yz + w_4, \end{aligned} \quad (6)$$

тоже демонстрирует хаос при постоянных концентрациях основных веществ.

Отметим, что стадийные схемы и соответствующие им кинетические модели (1)–(6) могут быть использованы для описания хаотических колебаний только гомогенных химических реакций.

В [12, 13] установлена одномолекулярная схема гетерогенно-каталитической реакции (основные вещества опущены)



где X , Y , Z и Q – независимые промежуточные вещества и свободные центры катализатора. Эта схема в рамках ЗДМ при постоянстве концентраций основных веществ описывается системой ОДУ

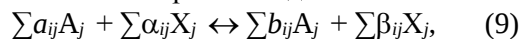
$$\begin{aligned} x' &= w_1xq - w_{-1}x^2 - w_2xy, \\ y' &= w_2xy - w_3yz, \\ z' &= -w_3yz + w_4q, \end{aligned} \quad (8)$$

где x , y , z – концентрации промежуточных веществ; $q = 1 - x - y - z$ концентрация свободных центров катализатора.

В работах [14, 15] с применением инвариантных линейных, нелинейных и неавтономных преобразований координат проведено обобщение моделей Лоренца и Росслера. Показано, что полученные модели могут демонстрировать большое разнообразие хаотических режимов. Классификация большинства известных моделей хаоса проведена в работах Спротта с соавторами [16–18]. Рассмотренные выше модели описывают хаотические режимы химических реакций, протекающих только по нелинейным механизмам. Целью данной статьи является исследование возможности описания хаотических колебаний кинетическими моделями линейных по промежуточным веществам каталитических реакций, протекающих в безградиентном изотермическом реакторе в рамках неидеального закона Марселина-де Донде (МДД) [13].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Рассмотрим каталитическую реакцию, протекающую по элементарным стадиям



где A_j – основные вещества (исходные реагенты и

продукты реакции); X_j – промежуточные вещества; i – номер стадии; j – номер реагента; a_{ij} , b_{ij} и α_{ij} , β_{ij} – стехиометрические коэффициенты основных и промежуточных веществ. Динамика этой реакции в изотермическом безградиентном реакторе идеального смешения (РИС) в квазистационарных по основным веществам условиях описывается системой обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) [19]:

$$x_j' = \sum_i (\beta_{ij} - \alpha_{ij}) r_i, \quad x_j(t_0) = x_{j0}, \quad (10)$$

где $x_j(t)$ – текущие концентрации промежуточных веществ, безразмерные (б/р); x_{j0} – начальные концентрации промежуточных веществ (начальные условия, н.у.); t – время (с); $r_i(w_{+i}, w_{-i}, f_j)$ – скорости стадий (с^{-1}); w_{+i} , w_{-i} – частоты стадий в прямом и обратном направлениях, включающие концентрации основных веществ (с^{-1}); f_j – кинетические функции неидеальности реагентов, $f_j = 0$ при $x_j = 0$ (б/р). В каталитических реакциях выполняется закон сохранения катализатора (ЗС)

$$\sum_j x_j = 1. \quad (11)$$

В стационарном состоянии (с.с.) $x_j^\infty = \lim_{t \rightarrow \infty} x_j(t)$ при $t \rightarrow \infty$ для уравнений (10) выполняются равенства

$$x_j' = 0. \quad (12)$$

Необходимые условия хаоса. Точные критерии, гарантирующие возникновение хаоса, не известны [1–4], поэтому приведем лишь некоторые их характерные признаки (необходимые условия) для системы (10), (11): 1) число независимых промежуточных веществ $n \geq 3$; 2) существуют неустойчивые с.с., в которых матрица частных производных по концентрациям промежуточных веществ (матрица Якоби)

$$J \equiv (\partial x_j' / \partial x_k), \quad j, k = 1, 2, \dots \quad (13)$$

имеет собственное число (с.ч.) λ с положительной действительной частью

$$\text{Re } \lambda > 0; \quad (14)$$

3) устойчивые с.с. недостижимы при заданных н.у. (абсолютная неустойчивость) [20, 21]; 4) показатели Ляпунова L_j (сигнатура) при больших временах ($t \rightarrow \infty$) принимают значения с разными знаками и их сумма отрицательна $\sum_j L_j < 0$. Для трехмерных автономных ОДУ знаковая сигнатура (+, 0, –) при $L_1 + L_2 + L_3 < 0$ соответствует странному аттрактору и доказывает существование хаотических колебаний [3, 4].

Как отмечено выше, в рамках классической идеальной кинетики ЗДМ только нелинейные четырех- и более стадийные механизмы могут описывать хаос в химических реакциях. Поэтому для установления линейных механизмов необходимо

исследовать стационарные и динамические характеристики реакций с тремя и более независимыми промежуточными веществами, протекающих по неклассическим кинетическим законам. Покажем, что системы ОДУ четырехстадийных линейных каталитических реакций, отдельные стадии которых протекают по неидеальному кинетическому закону МДД, могут описывать хаотические режимы.

Кинетика МДД. Рассмотрим вначале кинетический закон МДД [13], согласно которому скорости стадий (9) описываются уравнениями

$$r_i = \exp(\sum_j \alpha_{ij} \mu_j) - \exp(\sum_j \beta_{ij} \mu_j), \quad (15)$$

$$\mu_j = \ln f_j, \quad (16)$$

где μ_j – химические (с точностью до множителя) потенциалы промежуточных веществ, б/р. С учетом (15), (16) кинетические уравнения (10) запишутся

$$x_j' = \sum_i (\beta_{ij} - \alpha_{ij}) [k_{+i} \prod_j \exp(\alpha_{ij} \mu_j) - k_{-i} \prod_j \exp(\beta_{ij} \mu_j)] \quad (17)$$

Достаточными условиями термодинамичности этой неидеальной модели являются симметрия матрицы Якоби для химических потенциалов

$$M \equiv (\partial \mu_j / \partial A_k) = (\partial \mu_k / \partial A_j), \quad j, k = 1, 2, \quad (18)$$

и неотрицательность ее главных миноров (положительная определенность)

$$g_j \equiv \det_p(M) \geq 0, \quad (19)$$

где $\det$ – определитель; $p = 1, 2, \dots$ – порядок определителя.

Примем следующие дополнительные предположения к кинетике МДД: химические потенциалы реагентов μ_j , зависящие согласно (16) от кинетических функций f_j неидеальности промежуточных веществ, могут изменяться в ходе реакции под воздействием индуцированного влияния других промежуточных веществ. Это означает, что функции f_j могут быть различными в разных стадиях реакции, если они не противоречат естественным физическим требованиям.

Покажем, что при таких допущениях хаотическая динамика возможна даже в каталитических реакциях, протекающих по четырехстадийным линейным схемам в изотермическом реакторе идеального смешения, с иллюстрацией этих схем на примерах реакций взаимодействия монооксидов азота и углерода и окисления монооксида углерода, для которых экспериментально обнаружены хаотические режимы протекания на платиновых катализаторах [22, 23].

Пример 1. Рассмотрим последовательную схему превращений, полученную путем линеаризации схемы (7), т.е. заменой всех нелинейных стадий на линейные (основные вещества опущены)



где X, Y, Z и Q – независимые промежуточные вещества и свободные центры катализатора. С учетом неидеальной кинетики МДД (15)-(17) механизм (20) в квазистационарных по основным веществам условиях описывается системой ОДУ

$$\begin{aligned} x' &= w_1 f^{1)q} - w_{-1} f^{-1)x} - w_2 f^{2)x}, \\ y' &= w_2 f^{2)x} - w_3 f^{3)y}, \quad z' = w_4 f^{4)q} - w_{-4} f^{-4)z}, \\ q' &= -w_1 f^{1)q} + w_{-1} f^{-1)x} + w_3 f^{3)y} - w_4 f^{4)q} + w_{-4} f^{-4)z}, \end{aligned} \quad (21)$$

где верхние индексы соответствуют номерам стадий реакции. В этой системе ЗС (3) сохраняется $x + y + z + q = 1$, т.е. одно из промежуточных веществ является линейно зависимым и соответствующее ему уравнение может быть опущено. Зададим следующие кинетические функции неидеальности, отвечающие естественным физическим требованиям

$$\begin{aligned} f^{1)q} &= xq, \quad f^{-1)x} = x^2, \quad f^{2)x} = xy, \\ f^{3)y} &= yz, \quad f^{4)q} = q, \quad f^{-4)z} = yz. \end{aligned} \quad (22)$$

Анализ показал, что система (21), (22) при определенных значениях частот стадий и н.у. описывает сложные апериодические колебания, рис. 1.

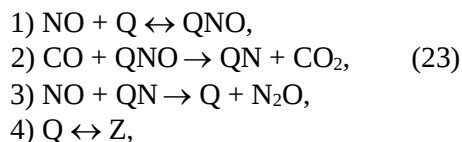
Анализ уравнений стационарности (12) для системы ОДУ (21), (22) показал, что при приведенных на рис. 1 значениях частот стадий существуют: два граничных с.с.: $x^\infty = 0, y^\infty = 0, z^\infty = 1, q^\infty = 0$ (устойчивый узел) и $x^\infty = 0, y^\infty = 1, z^\infty = 0, q^\infty = 0$ (седло – неустойчивое с.с.); два внутренних неустойчивых с.с. (фокус и узел). При выбранных н.у. единственное устойчивое с.с. становится неустойчивым (абсолютная неустойчивость).

Анализ показателей Ляпунова с помощью компьютерной программы *matds* [24] при приведенных в подписи к рис. 1 величинах частот стадий и н.у. для модели (21), (22) при $t = 100$ показал, что $L_1 \approx 0.4082$; $L_2 \approx -0.0079 \rightarrow 0$; $L_3 \approx -20.9169$. Поскольку $L_1 + L_2 + L_3 < 0$, то такая знаковая сигнатура доказывает существование странного аттрактора. Таким образом, модель (21), (22) удовлетворяет перечисленным выше необходимым условиям хаоса и показанные на рис. 1 колебания являются хаотическими.

Химические потенциалы для кинетических функций (22) запишутся $\mu^1_x = \ln x^2, \mu^2_x = \ln xy, \mu_y = \ln yz, \mu_z = \ln yz, \mu^1_q = \ln xq, \mu^{-4)q} = \ln q$. Матрица Якоби M для этих потенциалов положительно определена и может быть симметричной. Учитывая, что условия термодинамичности (18), (19) не являются необходимыми, можно считать, что мо-

дель неидеальной кинетики (21), (22) не противоречит также термодинамическим ограничениям.

Схеме (20) соответствует, например, следующий механизм взаимодействия монооксидов азота и углерода ($2\text{NO} + \text{CO} \rightarrow \text{N}_2\text{O} + \text{CO}_2$) на платиновых металлах



в котором Q – центры катализатора, QNO = X и QN = Y – промежуточные вещества, Z – буферное вещество [25].

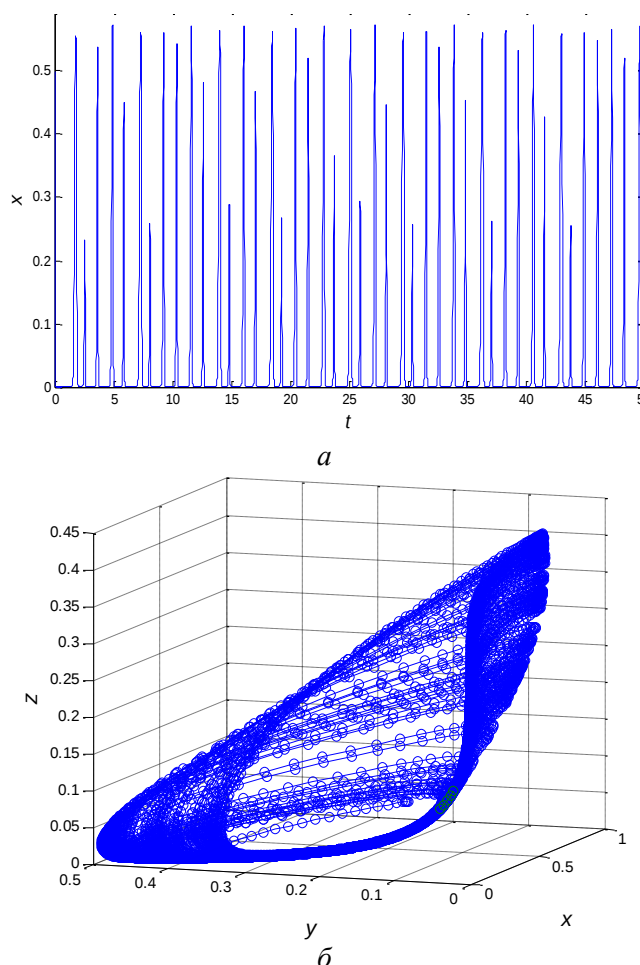


Рис. 1. Хаотические колебания в реакции, протекающей по схеме (20), описываемой моделью (21), (22) при $w_1 = 50$, $w_2 = 200$, $w_3 = 100$, $w_4 = w_{-1} = 1$, $w_{-4} = 100$ ($w_{-4} \approx w_3$) и н.у. $x_0 = y_0 = z_0 = 0.1$: а - $x(t)$; б - фазовый портрет

Fig. 1. Chaotic oscillations in a reaction proceeding according to scheme (20) described by model (21), (22) at $w_1 = 50$, $w_2 = 200$, $w_3 = 100$, $w_4 = w_{-1} = 1$, $w_{-4} = 100$ ($w_{-4} \approx w_3$) and i.c. $x_0 = y_0 = z_0 = 0.1$: а - $x(t)$; б - phase portrait

Пример 2. Рассмотрим типовой четырех-стадийный линейный механизм (основные вещества опущены)



описываемый системой ОДУ

$$\begin{aligned} x' &= w_1 f^1_q - w_{-1} f^{-1}_x - w_2 f^2_x, \\ y' &= w_2 f^2_x - w_3 f^3_y, \quad z' = \\ &= w_3 f^3_y - w_4 f^4_z + w_{-4} f^{-4}_q, \end{aligned} \quad (25)$$

в которой кинетические функции имеют вид

$$\begin{aligned} f^1_q &= xq, \quad f^{-1}_x = x^2, \quad f^2_x = xy, \\ f^3_y &= yz, \quad f^4_z = yz, \quad f^{-4}_q = q. \end{aligned} \quad (26)$$

Система (25), (26) при определенных значениях частот стадий также описывает сложные аperiodические колебания, рис. 2.

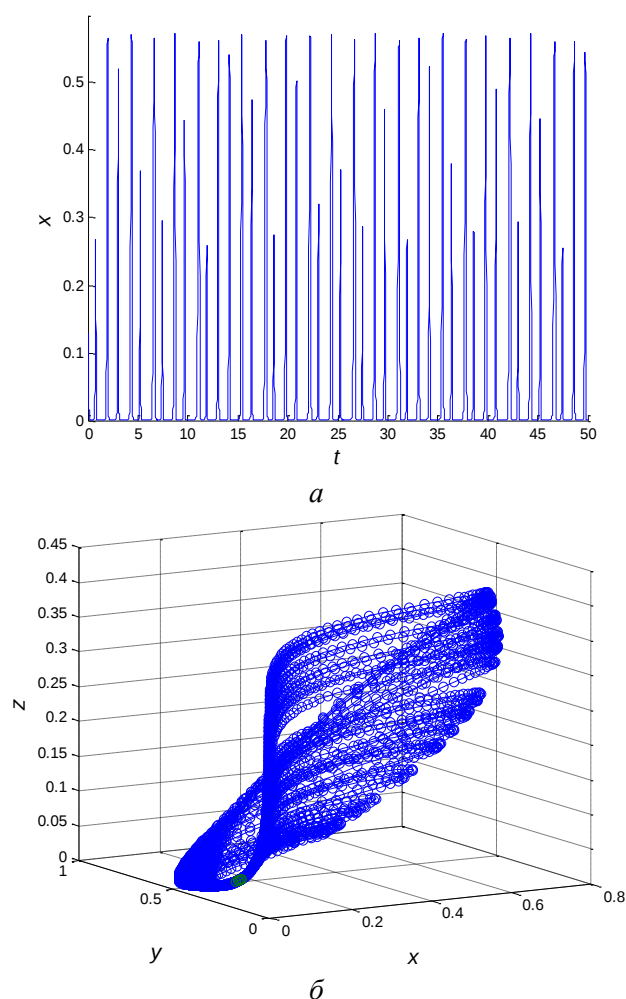


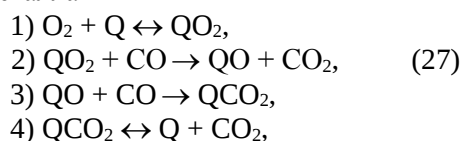
Рис. 2. Хаотические колебания в реакции, протекающей по схеме (24), описываемой моделью (25), (26) при $w_1 = 50$, $w_2 = 200$, $w_3 = 100$, $w_4 = 200$, $w_{-1} = 1$, $w_{-4} = 1$ ($w_4 \approx 2w_3$, $w_{-4} \approx w_{-1}$) и н.у. $x_0 = y_0 = z_0 = 0.1$: а - $x(t)$; б - фазовый портрет

Fig. 2. Chaotic oscillations in a reaction proceeding according to scheme (24) described by model (25), (26) at $w_1 = 50$, $w_2 = 200$, $w_3 = 100$, $w_4 = 200$, $w_{-1} = 1$, $w_{-4} = 1$ ($w_4 \approx 2w_3$, $w_{-4} \approx w_{-1}$) and i.c. $x_0 = y_0 = z_0 = 0.1$: а - $x(t)$; б - phase portrait

Стационарные характеристики системы ОДУ (25), (26) аналогичны предыдущему примеру.

При приведенных в подписи к рис. 2 величинах частот стадий и н.у. единственное устойчивое с.с. становится недостижимым (абсолютная неустойчивость), а показатели Ляпунова принимают значения $L_1 \approx 0.3806$; $L_2 \approx -0.0015 \rightarrow 0$; $L_3 \approx -16.2111$, что доказывает существование странного аттрактора. Таким образом, модель (25), (26) также удовлетворяет необходимым условиям хаоса и приведенные на рис. 2 колебания являются хаотическими.

Схема (24), может быть использована для описания хаотических режимов в реакции окисления монооксида углерода ($2\text{CO} + \text{O}_2 \rightarrow 2\text{CO}_2$) на платиновых металлах



в которой Q – свободные центры поверхности катализатора; QO_2 , QO и QCO_2 – промежуточные вещества на поверхности катализатора.

ЛИТЕРАТУРА

1. Малинецкий Г.Г., Потапов А.Б. Нелинейная динамика и хаос: Основные понятия М.: УРСС. 2018. 240 с.
2. Капица С.П., Курдюмов С.П., Малинецкий Г.Г. Синергетика и прогнозы будущего. М.: УРСС. 2019. 286 с.
3. Шашихин В.Н. Хаос и нелинейная динамика. Регулярная и хаотическая динамика. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та. 2010. 210 с.
4. Молдаванов А.В. Топология организованного хаоса. М.: Физматкнига. 2020. 70 с.
5. Малинецкий Г.Г., Потапов А.Б., Подлазов А.В. Нелинейная динамика: подходы, результаты, надежды. М.: УРСС. 2006. 279 с.
6. Gaspard P. Rossler systems. Encyclopedia of nonlinear science. NewYork: Routledge. 2005. 808 p.
7. Kharabian B., Mirinejad H. Synchronization of Rossler chaotic systems via hybrid adaptive backstepping/sliding mode control. *Res. Control Optim.* 2021. V. 4. P. 100020. DOI: 10.1016/j.rico.2021.100020.
8. Willamowski K.D., Rossler O.E. Irregular oscillations in a realistic abstract quadratic mass action system. *Z. Naturforschung.* 1980. V. 35A. P. 317-318. DOI: 10.1515/zna-1980-0308.
9. Bodalea I., Oancea V.A. Chaos control for Willamowski–Rössler model of chemical reactions. *Chaos, Solitons Fractals.* 2015. V. 78. P. 1-9. DOI: 10.1016/j.chaos.2015.06.019.
10. Кольцов Н.И. Хаотические колебания в четырехстадийной химической реакции. *Хим. физика.* 2017. Т. 36. № 11. С. 79-80. DOI: 10.7868/S0207401X17110048.
11. Кольцов Н.И. Хаотические колебания в простейшей химической реакции. *Изв. вузов. Химия и хим. технология.* 2018. Т. 61. Вып. 4-5. С. 133-135. DOI: 10.6060/tcct.2018.6104-05.5654.
12. Кольцов Н.И., Федотов В.Х. Хаотические колебания в простой гетерогенно-каталитической реакции. *Бутлеров. сообщ.* 2017. Т. 50. № 6. С. 30-33.
13. Кольцов Н.И., Федотов В.Х., Алексеев Б.В. Сложная кинетика химических реакций. Чебоксары: Изд-во Чуваш. гос. ун-та. 2023. 252 с.

ВЫВОДЫ

В рамках неидеального кинетического закона МДД показана возможность описания хаотических колебаний в каталитических реакциях, протекающих по линейным четырехстадийным схемам в безградиентном изотермическом реакторе.

БЛАГОДАРНОСТИ

Автор выражает благодарность Федотову В.Х. за обсуждения.

Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов, требующего раскрытия в данной статье

The author is grateful to V.Kh. Fedotov for discussing the work.

The author declare the absence a conflict of interest warranting disclosure in this article.

REFERENCES

1. Malinetsky G.G., Potapov A.B. Nonlinear dynamics and chaos: Basic concepts. M.: URSS. 2018. 240 p. (in Russian).
2. Kapitsa S.P., Kurdyumov S.P., Malinetskii G.G. Synergetics and forecasts of the future. M.: URSS. 2019. 286 p. (in Russian).
3. Shashikhin V.N. Chaos and nonlinear dynamics. Regular and chaotic dynamics. SPb.: Politekh. un-t, 2010. 210 p. (in Russian).
4. Moldavanov A.V. Topology of organized chaos. M.: Fizmatkniga. 2020. 70 p. (in Russian).
5. Malinetsky G.G., Potapov A.B., Podlazarov A.V. Nonlinear dynamics: approaches, results, hopes. M.: URSS. 2006. 279 p. (in Russian).
6. Gaspard P. Rossler systems. Encyclopedia of nonlinear science. NewYork: Routledge. 2005. 808 p.
7. Kharabian B., Mirinejad H. Synchronization of Rossler chaotic systems via hybrid adaptive backstepping/sliding mode control. *Res. Control Optim.* 2021. V. 4. P. 100020. DOI: 10.1016/j.rico.2021.100020.
8. Willamowski K.D., Rossler O.E. Irregular oscillations in a realistic abstract quadratic mass action system. *Z. Naturforschung.* 1980. V. 35A. P. 317-318. DOI: 10.1515/zna-1980-0308.
9. Bodalea I., Oancea V.A. Chaos control for Willamowski–Rössler model of chemical reactions. *Chaos, Solitons Fractals.* 2015. V. 78. P. 1-9. DOI: 10.1016/j.chaos.2015.06.019.
10. Kol'tsov N.I. Chaotic oscillation in for-step chemical reaction. *Russ. J. Phys. Chem. B.* 2017. V. 11. N 6. P.1047-1048. DOI: 10.1134/S1990793117060045.
11. Kol'tsov N.I. Chaotic oscillations in the simplest chemical reaction. *ChemChemTech [Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.]*. 2018. V. 61. N 4-5. P. 133-135 (in Russian). DOI: 10.6060/tcct.20186104-05.5654.
12. Kol'tsov N.I., Fedotov V.Kh. Chaotic oscillations in a simple heterogeneous catalytic reaction. *Butlerov Soobshch.* 2017. V. 50. N 6. P. 30-33 (in Russian).

14. Федотов В.Х., Кольцов Н.И. Модели хаотической динамики. Часть 1. Линейные инварианты. *Вестн. Казан. техн. ун-та*. 2013. Т. 16. № 23. С. 7-10.
15. Федотов В.Х., Кольцов Н.И. Модели хаотической динамики. Часть 2. Нелинейные и неавтономные инварианты. *Вестн. Казан. техн. ун-та*. 2013. Т. 16. № 23. С. 10-12.
16. Sprott J.C., Thio W. *Elegant Circuits: Simple Chaotic Oscillators*. Singapore: World Scientific. 2021. 357 p. DOI: 10.1142/12362.
17. Sprott J.C., Hoover W.G., Hoover C.G. *Elegant Simulations: From Simple Oscillators to Many-Body Systems*. Singapore: World Scientific, 2022. 325 p. DOI: 10.1142/13061.
18. Sprott J.C. *Elegant Automation: Robotic Analysis of Chaotic Systems*. Singapore: World Scientific. 2023. 316 p. DOI: 10.1142/13445.
19. Bykov V.I., Tsybenova S.B., Yablonsky G.S. *Chemical complexity via simple models*. Berlin, New York: Germany. De Gruyter. 2018. 364 p. DOI: 10.1515/9783110464948.
20. Кольцов Н.И. Множественность стационарных состояний химических реакций в закрытой системе. *Рос. хим. журн.* 2023. Т. 67. № 1. С. 75-80. DOI: 10.6060/rcj.2023671.11.
21. Кольцов Н.И. Описание критических форм множественности стационарных состояний в кинетике каталитических реакций. *Изв. вузов. Химия и хим. технология*. 2023. Т. 66. Вып. 8. С. 6-21. DOI: 10.6060/ivkkt.20236608.6793.
22. Sheintuch M. Bifurcations to periodic and aperiodic solutions during ammonia oxidation on a Pt wire. *J. Phys. Chem.* 1988. V. 92. N 12. P. 3404-3411. DOI: 10.1021/j100323a019.
23. Razon L.F., Chang S.M., Schmitz R.A. Chaos during the oxidation of carbon monoxide on platinum – experiments and analysis. *Chem. Eng. Sci.* 1986. V. 41. N 6. P. 1561-1576. DOI: 10.1016/0009-2509(86)85238-1.
24. Говорухин В. Вычисление показателей Ляпунова для ODE (<https://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/4628-calculation-lyapunov-exponents-for-ode>). Проверено 24 августа 2023 года.
25. Кольцов Н.И., Федотов В.Х., Алексеев Б.В. Оценка времени релаксации двухстадийной реакции с изменяющейся активностью катализатора. *Изв. вузов. Химия и хим. технология*. 1987. Т. 30. Вып. 5. С. 57-60.
13. Kol'tsov N.I., Fedotov V.Kh., Alekseev B.V. Complex kinetics of chemical reactions. *Cheboksary: Chuvash Gos. Univ.* 2023. 252 p. (in Russian).
14. Fedotov V.Kh., Kol'tsov N.I. Models of chaotic dynamics. Part 1. Linear invariants. *Vestn. Kazan. Tekhn. Un-ta*. 2013. V. 16. N 23. P. 7-10 (in Russian).
15. Fedotov V.Kh., Kol'tsov N.I. Models of chaotic dynamics. Part 2. Nonlinear and nonautonomous invariants. *Vestn. Kazan. Tekhn. Un-ta*. 2013. V. 16. N 23. P. 10-12 (in Russian).
16. Sprott J.C., Thio W. *Elegant Circuits: Simple Chaotic Oscillators*. Singapore: World Scientific. 2021. 357 p. DOI: 10.1142/12362.
17. Sprott J.C., Hoover W.G., Hoover C.G. *Elegant Simulations: From Simple Oscillators to Many-Body Systems*. Singapore: World Scientific, 2022. 325 p. DOI: 10.1142/13061.
18. Sprott J.C. *Elegant Automation: Robotic Analysis of Chaotic Systems*. Singapore: World Scientific. 2023. 316 p. DOI: 10.1142/13445.
19. Bykov V.I., Tsybenova S.B., Yablonsky G.S. *Chemical complexity via simple models*. Berlin, New York: Germany. De Gruyter. 2018. 364 p. DOI: 10.1515/9783110464948.
20. Kol'tsov N.I. The multiplicity of stationary states of chemical reactions in a closed system. *Ros. Khim. Zhurn.* 2023. V. 67. N 1. P. 75-80 (in Russian). DOI: 10.6060/rcj.2023671.11.
21. Kol'tsov N.I. Description of the critical forms of the multiplicity of stationary states in the kinetics of catalytic reactions. *ChemChemTech [Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.]*. 2023. V. 66. N 8. P. 6-21 (in Russian). DOI: 10.6060/ivkkt.20236608.6793.
22. Sheintuch M. Bifurcations to periodic and aperiodic solutions during ammonia oxidation on a Pt wire. *J. Phys. Chem.* 1988. V. 92. N 12. P. 3404-3411. DOI: 10.1021/j100323a019.
23. Razon L.F., Chang S.M., Schmitz R.A. Chaos during the oxidation of carbon monoxide on platinum – experiments and analysis. *Chem. Eng. Sci.* 1986. V. 41. N 6. P. 1561-1576. DOI: 10.1016/0009-2509(86)85238-1.
24. Govorukhin V. Calculation Lyapunov Exponents for ODE. <https://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/4628-calculation-lyapunov-exponents-for-ode>. Retrieved August 24, 2023.
25. Kol'tsov N.I., Fedotov V.Kh., Alekseev B.V. Estimation of the relaxation time of a two-stage reaction with varying catalyst activity. *ChemChemTech [Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.]*. 1987. V. 30. N 5. P. 57-60. (in Russian).

Поступила в редакцию 21.08.2023

Принята к опубликованию 28.12.2023

Received 21.08.2023

Accepted 28.12.2023