Институт математики им. С. Л. Соболева СО РАН Препринт № 67, декабрь 1999

Математические основы моделирования каталитических процессов

Т. А. Акрамов, В. С. Белоносов, Т. И. Зеленяк, М. М. Лаврентьев-мл., М. Г. Слинько, В. С. Шеплев

Введение

Математические модели каталитических процессов в общем виде достаточно сложны. Часто они представляют собой нелинейные системы дифференциальных уравнений, содержащие помимо обыкновенных уравнений также уравнения с частными производными параболического, гиперболического и других типов. Исчерпывающее исследование столь сложных систем в настоящее время не представляется возможным. Поэтому их приходится предварительно упрощать, чтобы сделать доступными для качественного и численного анализа.

Конструирование, отбор и упрощение моделей обусловлены целым набором требований, которые к этим моделям приходится предъявлять. Решения соответствующих уравнений должны иметь физический смысл, в частности величины, обозначающие концентрации реагентов или температуру, обязаны во все моменты времени принимать неотрицательные значения. Должны выполняться естественные законы сохранения массы, энергии, импульса и др. Решения обязаны существовать «в целом» по времени, причем в закрытых системах процессы должны приходить в устойчивое состояние равновесия. Не могут быть слишком жесткими требования к регулярности данных соответствующих начально-краевых задач. Нормы, в которых измеряются отклонения решений друг от друга, также диктуются физическим содержанием изучаемого явления.

Список необходимых условий можно продолжать, но и так уже ясно, что эффективное моделирование динамики нелинейных каталитических систем возможно лишь при достаточно развитой качественной теории дифференциальных уравнений, главным образом — уравнений с частными производными. Однако, несмотря на относительную завершенность и полноту классической теории обыкновенных дифференциальных уравнений, к середине шестидесятых годов выяснилось, что скольконибудь удовлетворительной качественной теории систем с распределенными параметрами не существует. Здесь имелись лишь несколько частных результатов, которые даже в минимальной степени не могли удовлетворить запросам математического моделирования каталитических процессов. Поэтому было начато систематическое изучение проблем качественной теории эволюционных уравнений с частными производными. Эта работа интенсивно продолжается по сей день, и уже можно говорить, что отдельные разделы теории практически завершены, а в других достигнуты существенные успехи. Перечислим далее основные направления, разработанные в ходе упомянутых исследований.

Прежде всего, необходимо было ликвидировать пробелы в теории начально-краевых задач для линейных эволюционных уравнений. Эти задачи хорошо изучены для простейших уравнений — теплопроводности и волнового. Что касается систем общего вида, то в параболическом случае исчерпывающие результаты о классической разрешимости имелись лишь для достаточно гладких данных и при выполнении большого количества так называемых условий согласования, а в гиперболическом случае поиски условий корректности общих начально-краевых задач только начинались.

Преодолеть указанные ограничения для параболических систем удалось при помощи специальной техники, связанной с использованием весовых гельдеровских пространств. Принципиальным новым моментом стала здесь возможность рассматривать не только дробные, как зто было ранее, но и целые гельдеровские показатели. Эти идеи сейчас используются для изучения еще более общих квазиэллиптических уравнений в специальных пространствах функций с квалифицированными модулями непрерывности. В гиперболическом случае также получены неожиданные новые результаты — указан класс начально-краевых задач, для которых с течением времени имеет место неограниченное повышение гладкости решений, характерное обычно для параболических уравнений.

Наличие хорошей линейной теории позволяет легко исследовать локальную (как по времени, так и по начальным отклонениям) разрешимость нелинейных краевых задач. Гораздо больших усилий требует получение нелокальных результатов. В известной степени образцами являются здесь исследования С. Н. Бернштейна, Е. Де Джорджи, О. А. Ладыженской и С. Н. Кружкова. Еще один новый метод изучения нелинейных задач связан с использованием так называемых обобщенных функционалов Ляпунова. Этим методом получены самые сильные на сегодняшний день нелокальные результаты для параболических уравнений второго порядка с одной пространственной переменной. Удалось не только найти близкие к необходимым достаточные условия разрешимости в целом основных краевых задач, но и получить точные априорные оценки решений, а также доказать теорему о безусловной стабилизации ограниченных решений к стационарным. Эта теорема стала исходным моментом для построения законченной качественной теории квазилинейных уравнений в одномерном случае. Была исследована структура множества стационарных решений; получены эффективные критерии их устойчивости, охватывающие всевозможные критические случаи; описаны области притяжения устойчивых стационарных решений. В дальнейшем метод обобщенных функционалов Ляпунова оказался полезным для изучения систем параболических уравнений, возникающих при моделировании химических процессов. Некоторые его модификации использованы для исследования неклассических уравнений со знакопеременными коэффициентами при старших производных.

Нетривиальным оказался переход от уравнений второго порядка к уравнениям и системам высокого порядка. Качественное поведение решений в этом случае гораздо разнообразнее. Уже для автономных систем обыкновенных дифференциальных уравнений ограниченные решения не обязаны стремиться к стационарным. Можно показать, что «почти любое» замкнутое связное множество может быть предельным для траекторий таких систем даже тогда, когда они допускают наличие обобщенного функционала Ляпунова. В связи с этим возникает задача об описании асимптотики решений параболических систем в зависимости от их структуры и, в частности, выделение класса таких задач, ограниченные решения которых стабилизируются. Эта проблема частично была решена при построении теории интегральных многообразий для нелинейных параболических систем.

Вопрос об устойчивости стационарных решений динамических задач — один из центральных в качественной теории. Классическим способом решения таких вопросов является метод линеаризации, которым часто пользуются на практике без всякого обоснования. Этот метод был обоснован для широкого класса параболических и гиперболических систем общего вида. Оказалось, что справедливость принципа линеаризации зависит от выбора норм, в которых измеряются отклонения возмущенных решений от стационарных. Если норма выбрана правильно, то изучение устойчивости решения нелинейной задачи можно заменить исследованием устойчивости линеаризованной системы.

Проблема устойчивости решений линейных задач также имеет принципиальное значение. Она связана с расположением точек спектра соответствующих стационарных дифференциальных операторов по отношению к мнимой оси. Для произвольных эллиптических операторов не существует легко проверяемых критериев устойчивости. Тем не менее, для скалярных операторов второго порядка, а также для систем любого порядка с одной переменной такие критерии удалось найти. В последнем случае построение соответствующих критериев связано с распространением так называемой теории индексов Морса, первоначально разработанной для самосопряженных систем, на произвольные несимметричные системы.

Исследование неустойчивых стационарных решений также представляет значительный интерес. Иногда именно неустойчивые режимы весьма привлекательны с тех или иных точек зрения, но практически их не удается реализовать именно ввиду неустойчивости. Если, однако, рассматриваемая система содержит достаточное число свободных параметров, которые допускается произвольно менять в известных пределах, то можно попытаться организовать управляемый процесс, сколь угодно долго развивающийся в окрестности данного неустойчивого режима. Выделены достаточно широкие классы задач, в которых такое управление действительно существует; в сочетании с экспериментами эти результаты доказывают практическую реализуемость неустойчивых процессов в химических реакторах. Сделаны также первые шаги в построении теории оптимального управления процессами с распределенными параметрами, обобщающей классический принцип максимума Л.С. Понтрягина.

Перечисленные результаты сделали возможным переход к моделированию химических процессов на качественно новом уровне. Построена математическая модель, описывающая многокомпонентные химические реакции совместно с процессами диффузионного и конвективного тепло-массопереноса. Доказано, что эта модель обладает всеми свойствами, обусловленными физико-химической постановкой задачи. При дополнительной конкретизации выражений для потоков и правых частей, выписанных согласно закону Марселена–Де Донде, методом функционалов Ляпунова установлены теоремы о стабилизации ограниченных и строго положительных решений задачи, допускающей существование положительных точек детального и комплексного равновесия, а также теоремы об устойчивости по Ляпунову таких равновесных состояний. Эти результаты составляют математическое обоснование метода локальных потенциалов И. Пригожина. Рассмотренные классы задач достаточно широки: при соответствующей интерпретации коэффициентов они включают неизотермические системы, известные законы Фика и Фурье, описывающие процессы тепло-массопереноса, законы действующих масс и Аррениуса, описывающие зависимость скоростей реакций от концентраций и температуры.

Нелинейная динамика каталитических реакций и процессов

Каталитический реактор представляет собой открытую систему, в которой протекают химические превращения и физические процессы вдали от своих состояний равновесия. Активная реакционная среда может быть многокомпонентной, гетерогенной и многофазной. В зависимости от конкретной решаемой задачи и цели исследования строение модели выбирается из некоторой иерархической структуры. При этом закономерности, полученные на моделях меньшего масштаба, входят в модели более крупного масштаба.

Теория геометрического подобия каталитических процессов неприменима для сложных реакционных систем. С изменением масштаба может существенно меняться влияние процессов переноса вещества, тепла и импульса на скорость каталитического процесса. Тем самым может меняться структура, скорость и избирательность химических превращений. Процессы совершаются в широком температурном интервале, с большим спектром времен релаксаций отдельных стадий, на значительном интервале изменения давлений и так далее.

Основными признаками, определяющими тип математических моделей являются: свойства кинетической модели, способ описания термодинамики реакций, число присутствующих при протекании процесса фаз, свойства активных сред, аэро- и гидродинамика реакционной среды, характер протекания массо-теплопереноса, а также изменение всех перечисленных признаков во времени.

Многолетний опыт моделирования промышленных каталитических процессов и решения возникающих теоретических задач позволяет сгруппировать и описать математические модели каталитических процессов по следующим разделам: модели с сосредоточенными параметрами, модели с распределенными параметрами. В отношении последних моделей выделяются системы параболических уравнений и модели, заданные гиперболическими уравнениями.

В становлении теории каталитических реакторов выдающуюся роль сыграла так называемая диффузионная модель, которая входит как составляющая во все более сложные модели. Эта модель и ее предельные варианты — модели смешения и вытеснения — оказались исключительно плодотворными и приложимыми к широкому кругу явлений.

Построение и изучение математической модели позволяет существенно упростить задачи, стоящие перед экспериментаторами. Но по-прежнему основное значение сохраняют эксперименты, в которых изучаются отдельные стороны явления, например, диффузия в зерне катализатора, тепло-массообмен потока с зерном катализатора, размытие метки вдоль слоя, теплообмен со стенкой, равномерность укладки зерен в объеме реактора, влияние масштаба на поле скоростей газа и т.д. Решающее значение имеет исследование кинетических закономерностей протекания каталитической реакции в условиях, гарантирующих отсутствие ограничений в подводе реагентов и отводе продуктов реакции и тепла. Вычленение таких исследований из общей проблемы исследования реактора — важный и нетривиальный шаг. Изучение кинетики процесса в малых специально спроектированных безградиентных установках обеспечило в итоге резкое сокращение сроков разработки новых и усовершенствования существующих процессов. В этом огромная заслуга М. И. Темкина.

Модели с сосредоточенными параметрами

Решение ряда вопросов математического моделирования кинетики химических реакций в реакторах идеального смешения, идеального вытеснения, процессов тепло- и массопереноса в пористых пластинах и др. может быть получено в рамках моделей с сосредоточенными параметрами. Это приводит к нестационарным системам обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) первого и второго порядков. Константы кинетических уравнений зависят от температуры. Поэтому ОДУ, моделирующие процессы химического превращения вещества в форме динамических зависимостей, являются нелинейными.

Перечислим некоторые из задач, возникающих при качественном анализе модельных уравнений:

- исследование математической корректности задачи (решение должно существовать, быть единственным и непрерывно зависеть от данных задачи);
- определение числа стационарных решений в зависимости от характерных параметров, в частности, условия единственности и множественности этих решений;
- исследование устойчивости стационарных решений;
- нахождение точек бифуркации стационарных и периодических решений;
- математическое обоснование предельных переходов по времени и параметрам задачи;
- исследование возможности упрощения модели с сохранением основных качественных свойств и предсказательной силы.

Задача определения числа стационарных решений возникает, например, при выборе наиболее выгодного по скорости образования полезного продукта стационарного решения и при описании соответствующих экспериментальных данных. Применение топологических методов позволяет оценить число стационарных решений. В случае наличия до трех стационарных решений были исследованы их фазовые портреты, а также вопросы устойчивости.

Для описания гистерезисной зависимости стационарной скорости окисления H_2 на никеле, палладии и платине, гидрировании CO были исследованы изотермические кинетические модели каталитических реакций с точки зрения числа стационарных решений. Получено необходимое условие множественности стационарных состояний. Приведены примеры простейших схем каталитических реакций, обладающих свойством множественности стационарных решений.

Выписанная согласно закону действующих масс система уравнений химической кинетики вместе с законами сохранения имеет одно и только одно положительное стационарное решение при данных температуре и объеме, либо температуре и давлении. Это утверждение касается точек химического (термодинамического) равновесия, так называемых положительных точек детального равновесия (птдр), которые являются стационарными точками кинетических уравнений с обратимыми реакциями.

Введены и описаны системы, допускающие необратимые реакции и имеющие положительные точки комплексного равновесия (пткр). Доказана единственность пткр в любом положительном симплексе реакций, если хотя бы одна пткр существует. Эти результаты о единственности птдр и пткр, справедливые в оговоренных дополнительных предположениях, видимо, по умолчанию переносились на более общие закрытые системы. Поэтому множественность стационарных решений уравнений химической кинетики в закрытых системах, выписанных в соответствии с законом действующих масс, была обнаружена сравнительно недавно.

Наряду с исследованием локальной устойчивости стационарных решений на практике необходимо знать поведение нестационарных решений (динамических траекторий) при большом времени. Подчас оказывается, что особый интерес представляют динамические режимы, пределы которых при большом времени не существуют. Общеизвестна важность изучения таких вопросов, как устойчивость стационарных решений и стабилизация (существование предела при $t \to \infty$) нестационарных решений.

Применение теории Пуанкаре–Бендиксона на плоскости при наличии конечного числа стационарных решений позволяет решить вопрос о стабилизации решений ОДУ, сводящихся к системам из двух уравнений. В частности, при $n = 2$ и при $n = 3$ в случае наличия закона сохранения в системах без автокатализа (т.е. в системах, когда продукты реакции не ускоряют химическое превращение) невозможны периодические решения. В случае систем дивергентного вида большей размерности стабилизация решений доказана в случае конечного числа стационарных решений. Если же число стационарных решений бесконечно, то стабилизация, вообще говоря, не имеет места даже для бесконечно гладких систем.

Моделирование стационарных процессов тепло- и массопереноса вместе с химическими реакциями на зерне и пластине катализатора приводит к двухточечным краевым задачам для ОДУ. Число решений такой задачи зависит от вида нелинейностей и размерности системы. В случаях $n = 1$ и $n = 2$ (неизотермическая реакция вида $lA \to mB$) вопрос о числе стационарных решений исследовался путем решения одного специально построенного функционального уравнения. Качественный и численный анализ этого уравнения показал, что возможно существование до трех решений соответствующей краевой задачи. Рассмотрение сферически симметричных (зависящих лишь от радиуса) решений в шаре при учете процессов диффузии показало возможность наличия пяти и более стационарных решений. Найдены условия, обеспечивающие единственность решений задач указанного типа.

Численное нахождение стационарных решений в случае их единственности может быть реализовано «методом стационирования» динамической задачи, однако он позволяет вычислять лишь устойчивые стационарные решения. В случае множественности стационарных решений эффективным оказывается метод продолжения по параметру, а в случае одной пространственной переменной — метод сведения двухточечной задачи к задаче Коши с последующим использованием метода стрельбы.

Устойчивость стационарных решений позволяет применить метод квазистационарных концентраций (КСК), понизить размерность базовой системы уравнений, разделить «быстрые» и «медленные» переменные и в конечном итоге свести задачу к системе алгебраических и дифференциальных уравнений. В приложениях к задачам химической технологии этот метод получил широкое распространение. В частности, метод КСК позволил показать, что на конечном интервале $t \in [0, T]$ поведение «химических систем» может быть достаточно сложным.

Периодическое или близкое к периодическому поведение концентраций реагирующих веществ в реальных экспериментах было анонсировано достаточно давно, но долгое время не являлось предметом моделирования как «термодинамически недопустимое». Однако реальные концентрационные колебания, обнаруженные в экспериментах, стимулировали построение моделей, отражающих автоколебательные свойства решений.

Простейшие химические модели на плоскости без эффекта автокатализа, выписанные согласно закону действующих масс, не обладают предельными циклами, поэтому были рассмотрены модели, предполагающие экспоненциальную зависимость констант скоростей реакций от степени покрытия поверхности катализатора. При увеличении размерности с учетом неизотермичности, действуя методом бифуркации рождения цикла, удается так подбирать параметры модели, что соответствующие ОДУ могут обладать как устойчивыми, так и неустойчивыми периодическими решениями.

Отметим, что бифуркационные значения параметров, при которых наблюдаются колебания, достаточно точно определяются из экспериментов. Тем самым условия наличия периодических решений (бифуркаций) накладывают определенные ограничения на параметры модели и ведут в конечном итоге к уточнению поведения решений при других значениях параметров.

Как правило химические процессы протекают в неизотермических условиях. Поэтому к кинетическим уравнениям, описывающим изменение концентраций во времени, необходимо добавить уравнение на температуру, отражающее тепловой баланс системы. Зависимость скоростей стадий от температуры представляет собой математическую запись закона Аррениуса.

Изолированная химическая система, в которой не происходит обмена с внешней средой не только веществом, но и теплом, должна обладать свойствами закрытой химической системы. В случае существования птдр справедливо:

- решения системы стабилизируются (имеют предел при $t \to \infty$);
- периодические решения отсутствуют;
- точки равновесия устойчивы.

В некоторых каталитических реакциях парциального окисления углеводородов и реакций горения наблюдается явление «движения фронта реакции» или «теплового фронта». Математическое описание такого эффекта удается получить на пути выделения автомодельных решений систем уравнений с частными производными. В терминах автомодельной переменной ξ получается система нелинейных ОДУ, для которой данные задаются при $\xi \to \pm\infty$.

Требование существования ограниченных решений с заданными пределами на бесконечности налагает условия на параметры задачи (включая скорость движения фронта). В случае совместности этих условий делается вывод о существовании автомодельных решений, т.е. «движущихся фронтов реакции». В простейших случаях (например, в реакторе идеального вытеснения с эффектом отравления катализатора) автомодельные решения удается найти аналитически. В более общем случае при адекватной постановке задачи с использованием лишь физико-химических ограничений удается доказать существование автомодельных решений для различных значений скорости движения фронта. Поэтому возникает необходимость выбора и интерпретации реализующегося автомодельного решения из множества теоретически возможных. Одним из критериев может служить устойчивость решений в соответствующих функциональных пространствах, поскольку лишь устойчивые решения могут наблюдаться в химических экспериментах.

Модели с распределенными параметрами

При описании протекания химических реакций с учетом процесса диффузии возникают краевые задачи для систем параболических уравнений. Исследованию корректности таких задач посвящено очень большое число работ. Поэтому отметим здесь только, что классическое решение с непрерывными начальными данными, удовлетворяющими условиям согласования, существует в малом, а при некоторых ограничениях на рост нелинейностей (обеспечивающих возможность применения принципа максимума и получения априорной оценки градиента решения), решение существует в целом.

Интересными как с точки зрения приложений в химической технологии, так и с теоретической точки зрения являются вопросы качественного поведения решений при $t \to \infty$, существование и число периодических и стационарных решений, их устойчивость.

Наиболее полно решены эти вопросы в скалярном случае (для одного уравнения). Обоснован принцип линеаризации при анализе устойчивости стационарного решения по первому приближению. Получен критерий асимптотической устойчивости нулевого решения линейной задачи, который удобно использовать в приложениях. Показана важность правильного выбора нормы отклонения начальных данных от стационарного решения. С точки зрения общей теории нелинейных параболических уравнений норму разности решений требуется измерять в пространствах функций, обладающих достаточной гладкостью, например в пространстве непрерывно дифференцируемых функций C^1 или в пространстве Соболева W_2^1. В то же время в приложениях наиболее доступны измерения отклонения функций в пространстве C. Это обстоятельство является принципиальным при изучении вопросов устойчивости и областей притяжения стационарных решений.

Методом функционалов Ляпунова доказана теорема о стабилизации всех ограниченных в некоторой норме решений. Рассмотрены вопросы применения метода функционалов Ляпунова для доказательства стабилизации решений вариационных задач в случае конечного числа стационарных решений, а также для систем вида реакция-диффузия.

Остановимся более подробно на вопросе устойчивости и описании областей притяжения стационарных решений. Структура областей притяжения устойчивого стационарного решения в нелинейной задаче весьма сложна. Используя принцип максимума и теорему о стабилизации, можно показать, что «естественными» подмножествами областей притяжения являются области, определяемые «соседними» стационарными решениями, то есть устойчивые и неустойчивые решения «чередуются».

Вопрос о числе стационарных решений актуален в проблеме стабилизации нестационарных решений и в задаче описания областей притяжения устойчивых стационарных решений. В скалярном случае в силу возможности «естественной параметризации» ответ на этот вопрос можно сформулировать в терминах решений задачи Коши для соответствующего стационарного уравнения. Примеры показывают, что оценки для числа стационарных решений в терминах нулей решений соответствующих задач Коши являются точными.

Для описания многокомпонентных химических реакций совместно с процессом диффузионного и конвективного тепло-массопереноса используют системы нелинейных параболических уравнений. В самом общем виде эти уравнения давно известны как законы сохранения в дифференциальной форме. Без конкретизации явного вида нелинейностей мало что можно сказать о свойствах решений этих уравнений. Поэтому первоочередная задача состоит в указании минимальной системы ограничений на вид нелинейностей, обеспечивающей:

- неотрицательность всех компонент вектора концентраций и температуры;
- сохранение суммарной массы системы в любой момент времени, если в системе нет массообмена с внешней средой через границу;
- существование решений при всех $t > 0$;
- в закрытом состоянии (нет обмена по веществам с внешней средой) система должна приходить в устойчивое равновесие (решения должны стабилизироваться).

Необходимо наложить такие ограничения на нелинейности, чтобы оставить достаточно широкий класс моделей и в то же время сохранить требуемые свойства решений. Это — проблема качественного анализа получающихся уравнений. Задача получения видов зависимости потоков от концентраций и их градиентов либо коэффициентов диффузии от концентраций и температуры весьма актуальна. Такие ограничения в виде аксиом на диффузионные потоки и нелинейности, описывающие кинетику химических реакций, были найдены. Используя эти ограничения и теорию разрешимости линейных параболических задач в пространствах Гельдера с весом, удалось доказать резрешимость в целом соответствующей нелинейной системы.

Отметим, что получаемые решения обладают всеми свойствами, предъявляемыми физико-химической постановкой задачи. При дополнительной конкретизации выражений для потоков и правых частей, выписанных согласно закону Марселена–Де Донде, методом функционалов Ляпунова доказаны теоремы о стабилизации ограниченных и строго положительных решений задачи, допускающей существование положительных точек детального (птдр) и комплексного (пткр) равновесия, а также теоремы об устойчивости по Ляпунову этих равновесий. Перечисленные результаты составляют математическое обоснование метода локальных потенциалов.

Найденные аксиомы достаточно общие: при соответствующей интерпретации коэффициентов они допускают и неизотермические системы, известные законы Фика и Фурье, описывающие процессы тепло-массопереноса, закон действующих масс и Аррениуса, описывающих зависимость скоростей реакций от концентраций и температуры. Более того, ослабление найденных ограничений или же отказ от некоторых из них ведет к потере соответственно одного или нескольких необходимых свойств решений.

При математическом исследовании вопросов о рождении периодических решений из стационарных (аналогов теоремы Андронова–Хопфа для параболических задач), обосновании принципа линеаризации, а также при управлении процессом в окрестности неустойчивых решений необходимы знания о локализации собственных значений спектральных задач, полученных при линеаризации исходной задачи в окрестности стационарных решений. Нужна информация о том, сколько собственных чисел находится в правой полуплоскости комплексного переменного и характер их перемещения в правую полуплоскость при изменении параметров задачи.

Ответы на эти вопросы даны при обобщении методов Ляпунова на краевые задачи для параболических систем. В частности, для самосопряженных задач с одной пространственной переменной получены формулы для числа положительных собственных значений, обобщающие известные формулы Морса. Вопрос об индексах неустойчивости несамосопряженных задач сведен к задаче об индексах вспомогательных задач, но уже самосопряженных, которые решены в удобной для приложений форме. Эти результаты использованы для обоснования теоретической возможности управления технологическим процессом в окрестности неустойчивых стационарных режимов.

Теория устойчивости Ляпунова, построенная для параболических задач, может быть применена при упрощении моделей и понижении их размерности путем предельного перехода по параметрам. Например, для обоснования метода КСК. Известно, что при разномасштабности параметров диффузии и реакций возникают сингулярно возмущенные параболические системы уравнений. Найдено обобщение на параболические задачи известных для ОДУ теорем А. Н. Тихонова о сингулярно возмущенных дифференциальных уравнениях с малыми параметрами при производных по времени. Это дает основание для применения метода КСК в моделях химических систем с распределенными параметрами, описываемыми параболическими уравнениями.

Для описания процесса массопереноса за счет только конвективной диффузии и химических реакций используют системы гиперболических уравнений. Они могут возникать также вследствие предельных переходов по малым коэффициентам диффузии. Модели, предложенные Лыковым, для описания потоков веществ, которые зависят не только от градиентов концентраций по пространственным переменным, но и от производной по времени, также приводят к сильно нелинейным гиперболическим задачам.

Для этих задач актуальны все рассмотренные выше вопросы качественной теории уравнений с частными производными. Следует сразу отметить, что достаточно полной теории Ляпунова по устойчивости, стабилизации, теории разрешимости, как это имеет место для параболических задач, пока не существует в силу возникающих математических трудностей, а также в силу принципиальных отличий гиперболических задач от параболических. Однако задачи из практики химической технологии стимулировали усилия математиков за последнее десятилетие. В результате для определенного класса гиперболических задач с одной пространственной переменной построена теория корректности и устойчивости. При этом получены необходимые и достаточные условия повышения гладкости решений линейных задач с течением времени. Эти результаты находят применение при качественном анализе гиперболических задач, описывающих противоточные химические реакторы. В частности, доказана применимость метода бифуркации рождения цикла (аналог теоремы Андронова–Хопфа) для поиска периодических по времени решений гиперболической задачи в окрестности стационарного решения, меняющего свою устойчивость при изменении параметров системы.

Литература

[1] *Аболиня В. Э., Мышкис А. Д.* Смешанная задача для почти линейной гиперболической системы на плоскости // Мат. сб. 1960. Т. 50 (92), № 4. С. 423–442.

[2] *Акрамов Т. А., Зеленяк Т. И.* О числе стационарных решений и областях устойчивости квазилинейных уравнений параболического типа // Математические проблемы химии, ч. 1 / АН СССР, Сиб. отделение. Вычислительный центр. Новосибирск, 1975. С. 144–150.

[3] *Акрамов Т. А., Яблонский Г. С.* О квазистационарности каталитических систем // Математические проблемы химии, ч. 1 / АН СССР, Сиб. отделение. Вычислительный центр. Новосибирск, 1975. С. 180–186.

[4] *Акрамов Т. А.* О стабилизации уравнений в частных производных, описывающих кинетику обратимых химических реакций // Динамика сплошной среды / АН СССР, Сиб. отделение. Ин-т гидродинамики. Новосибирск, 1976. Вып. 26. С. 3–16.

[5] *Акрамов Т. А., Зеленяк Т. И.* Некоторые вопросы качественной теории уравнений, возникающих в химической технологии (Тезисы доклада на Советско-Американском симпозиуме) // Кинетика и катализ. 1977. Т. 18, № 3. С. 566–567.

[6] *Акрамов Т. А.* Об одной смешанной задаче для квазилинейной параболической системы // Докл. АН СССР. 1979. Т. 244, № 3. С. 554–558.

[7] *Акрамов Т. А.* Качественный анализ дифференциальных уравнений, описывающих химические реакции с учетом диффузии. Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. — Новосибирск. 1981.

[8] *Акрамов Т. А.* Качественный анализ дифференциальных уравнений, описывающих химические реакции с учетом диффузии // Математическое моделирование каталитических реакторов / Новосибирск: Наука, Сиб. отделение. 1984. С. 102–115.

[9] *Акрамов Т. А.* Об одной гиперболической задаче, описывающей химический реактор // Динамика сплошной среды / АН СССР, Сиб. отделение. Ин-т гидродинамики. Новосибирск, 1988. Вып. 86. С. 3–23.

[10] *Акрамов Т. А.* Качественный и численный анализ модели реактора с противотоком компонентов // Математическое моделирование каталитических реакторов / Новосибирск: Наука, Сиб. отделение. 1989. С. 195–214.

[11] *Акрамов Т. А., Вишневский М. П.* Разрешимость в целом системы реакция-диффузия // Математическое моделирование. 1992. Т. 4, № 11. С. 110–120.

[12] *Акрамов Т. А., Вишневский М. П.* Некоторые качественные свойства системы реакция-диффузия // Сиб. мат. журн. 1995. Т. 36, № 1. С. 3–19.

[13] *Акрамов Т. А.* Периодические режимы в реакторах с противотоком компонентов // Труды Всесоюзной конференции «Химреактор-13», кн. 1 / Новосибирск. 1996. С. 110–114.

[14] *Акрамов Т. А.* О периодичности и стабилизации решений одной гиперболической задачи // Комплексный анализ, дифференциальные уравнения, численные методы и приложения. Т. 3 — Дифференциальные уравнения / Уфа. 1996. С. 3–13.

[15] *Андронов А. А., Витт А. А., Хайкин С. Э.* Теория колебаний. М.: ГИФМЛ, 1959.

[16] *Ахметов Д. Р.* Об изоморфизме, порождаемом уравнением теплопроводности // Сиб. мат. журн. 1998. Т. 39, № 2. С. 243–260.

[17] *Ахметов Д. Р.* О необходимых и достаточных условиях классической разрешимости задачи Коши для линейных параболических уравнений // Матем. труды / РАН, Сиб. отделение. Ин-т математики. 1998. Т. 1, № 1. С. 3–28.

[18] *Ахметов Д. Р.* Об изоморфизме, порождаемом линейным параболическим уравнением // Сиб. мат. журн. 1999. Т. 40, № 3. С. 493–511.

[19] *Ахромеева Т. С., Курдюмов С. П., Малинецкий Г. Г., Самарский А. А.* Нестационарные структуры и диффузионный хаос. М.: Наука, 1992.

[20] *Белов В. Я.* Об одной формуле Морса в критическом случае // Динамика сплошной среды / АН СССР, Сиб. отделение. Ин-т гидродинамики. Новосибирск, 1983. Вып. 60. С. 139–150.

[21] *Белоносов В. С., Зеленяк Т. И.* Нелокальные проблемы в теории квазилинейных параболических уравнений. Новосибирск: Изд-во НГУ, 1975.

[22] *Белоносов В. С., Вишневский М. П.* Об устойчивости стационарных решений нелинейных параболических систем // Мат. сб. 1977. Т. 104 (146), № 4 (12). С. 535–558.

[23] *Белоносов В. С.* Оценки параболических систем в гельдеровских классах с весом // Докл. АН СССР. 1978. Т. 241, № 2. С. 265–268.

[24] *Белоносов В. С.* Оценки решений нелинейных параболических систем в гельдеровских классах с весом и некоторые их приложения // Мат. сб. 1979. Т. 110, № 2. С. 163–188.

[25] *Белоносов В. С., Вишневский М. П., Зеленяк Т. И., Лаврентьев М. М. (мл.)* О качественных свойствах решений параболических уравнений // АН СССР, Сиб. отделение. Вычислительный центр. Новосибирск, 1983. Препринт 466.

[26] *Белоносов В. С.* Об индексах неустойчивости неограниченных операторов // Докл. АН СССР. 1983. Т. 273, № 1. С. 11–14.

[27] *Белоносов В. С.* Индексы неустойчивости дифференциальных операторов // Мат. сб. 1986. Т. 129, № 4. С. 494–513.

[28] *Белоносов В. С.* Внутренние оценки решений квазипараболических систем // Сиб. мат. журн. 1996. Т. 37, № 1. С. 20–35.

[29] *Белоносов В. С.* Классические решения квазиэллиптических уравнений // Мат. сб. 1999. Т. 190, № 9. С. 21–40.

[30] *Беляев В. Д., Слинько М. М., Тимошенко В. И., Слинько М. Г.* О возникновении автоколебаний в реакции окисления водорода на никеле // Кинетика и катализ. 1973. Т. 14, № 3. С. 810–813.

[31] *Беляев В. Д., Слинько М. М., Слинько М. Г., Тимошенко В. И.* Автоколебания в гетерогенной каталитической реакции водорода с кислородом // Докл. АН СССР. 1974. Т. 214, № 5. С. 1098–1100.

[32] *Берд Р., Стюарт В., Лайтфут Е.* Явления переноса. М.: Мир, 1974.

[33] *Боресков Г. К., Слинько М. Г.* Основы расчета контактных аппаратов для обратимых экзотермических реакций // Журн. прикл. химии. 1943. Т. 16, № 9–10. С. 377–396.

[34] *Боресков Г. К., Слинько М. Г., Филиппова А. Г.* Каталитическая активность никеля, палладия, платины в отношении реакции окисления водорода // Докл. АН СССР. 1953. Т. 92, № 2. С. 353–355.

[35] *Борисов В. Г.* О системе параболических уравнений, содержащих малый параметр при производной по t // Диф. уравнения. 1979. Т. 15, № 6. С. 1054–1058.

[36] *Борисов В. Г.* О параболических краевых задачах с малым параметром при производной по t // Мат. сб. 1986. Т. 131, вып. 3. С. 293–308.

[37] *Ваганов Д. А., Абрамов В. Г., Самойленко Н. Г.* Определение областей существования колебательных процессов в реакторах идеального смешения // Докл. АН СССР. 1977. Т. 234, № 3. С. 640–643.

[38] *Васильев В. М., Вольперт А. И., Худяев С. И.* О методе квазистационарных концентраций для уравнений химической кинетики // ЖВМ и МФ. 1973. Т. 13, № 3. С. 683–697.

[39] *Васильева А. Б., Бутузов В. Ф.* Асимптотические разложения решений сингулярно возмущенных уравнений. М.: Наука, 1973.

[40] *Вишневский М. П.* Критерий устойчивости решений смешанных задач для параболических уравнений // Краевые задачи для уравнений с частными производными. Труды семинара С. Л. Соболева / Новосибирск, 1984. № 1. С. 5–22.

[41] *Вишневский М. П.* О поведении при большом времени решений квазилинейных параболических уравнений с многими пространственными переменными // Динамика сплошной среды / АН СССР, Сиб. отделение. Ин-т гидродинамики. Новосибирск, 1988. Вып. 85. С. 34–41.

[42] *Вишневский М. П.* Периодические решения автономных параболических уравнений с многими пространственными переменными // Динамика сплошной среды / АН СССР, Сиб. отделение. Ин-т гидродинамики. Новосибирск, 1988. Вып. 89. С. 98–106.

[43] *Вишневский М. П.* О нелокальном поведении решений квазилинейных смешанных задач для уравнения параболического типа // Математическое моделирование. 1990. Т. 2, № 4. С. 67–77.

[44] *Вишневский М. П.* О стабилизации решений слабо связных кооперативных параболических систем // Мат. сб. 1992. Т. 183, № 10. С. 45–62.

[45] *Вишневский М. П., Зеленяк Т. И., Лаврентьев М. М. (мл.)* Поведение решений нелинейных параболических уравнений при большом времени // Сиб. мат. журн. 1995. Т. 36, № 3. С. 510–530.

[46] *Вишневский М. П.* Неограниченные решения автономных квазилинейных параболических уравнений // Сиб. мат. журн. 1996. Т. 37, № 3. С. 543–553.

[47] *Волокитин Е. П., Тресков С. А.* Математическая модель реакции каталитического окисления (трехпараметрический анализ). Новосибирск: Препринт СО АН СССР, Ин-т математики, 4, 1986.

[48] *Вольперт А. И., Худяев С. И.* Анализ в классах разрывных функций. М.: Наука, 1975.

[49] *Вольперт А. И., Посвянский В. С.* О положительности решений уравнений многокомпонентной диффузии // Химическая физика. 1984. Т. 3, № 8. С. 1200–1205.

[50] *Вольтер Б. В., Сальников И. Е.* Устойчивость режимов работ химических реакторов. М.: Химия, 1972.

[51] *Герасев А. П., Чумакова Н. А., Матрос Ю. Ш., Киселев О. Д.* Закономерности распространения быстрых тепловых волн в слое катализатора // ТОХТ. 1993. Т. 276, № 2. С. 165–172.

[52] *Гленсдорф П., Пригожин И.* Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуаций. М.: Мир, 1973.

[53] *Горбань А. Н., Быков В. И., Яблонский Г. С.* Очерки о химической релаксации. Новосибирск: Наука, Сиб. отделение, 1986.

[54] *Де Гроот С., Мазур П.* Неравновесная термодинамика. М.: Мир, 1964.

[55] *Доронин В. П., Лукьянова Ф. Г., Фадеев С. И.* В кн.: Методы сплайн-функций. Новосибирск: Изд-во ИМ СО АН СССР, 1977. С. 99–114.

[56] *Дьярмати И.* Неравновесная термодинамика. М.: Мир, 1974.

[57] *Еленин Г. Г.* Нелинейные коэффициенты диффузии в неидеальном слое адсорбата на поверхности монокристалла // Математическое моделирование. 1995. Т. 7, № 3. С. 51–65.

[58] *Елтышева Н. А.* К вопросу об устойчивости решений некоторых гиперболических систем // Докл. АН СССР. 1986. Т. 289, № 1. С. 30–32.

[59] *Елтышева Н. А.* Об устойчивости стационарных решений некоторых гиперболических систем. Новосибирск, 1986. Препринт СО АН СССР. Ин-т математики, 6.

[60] *Елтышева Н. А.* О качественных свойствах решений некоторых гиперболических систем на плоскости // Мат. сб. 1988. Т. 135, № 2. С. 186–209.

[61] *Ермаков А. А., Назаров В. И., Слинько М. Г.* Закономерности многокомпонентной массопередачи в условиях самоорганизованной межфазной конвекции // Докл. АН СССР. 1989. Т. 308, № 4. С. 914–918.

[62] *Жаботинский А. М.* Концентрационные автоколебания. М.: Наука, 1974.

[63] *Зеленяк Т. И., Бесков В. С., Слинько М. Г.* Качественный анализ уравнений, описывающих экзотермические процессы // Кинетика и катализ. 1966. Т. 7, № 5. С. 865–873.

[64] *Зеленяк Т. И.* Об устойчивости стационарных решений одной смешанной задачи // Докл. АН СССР. 1966. Т. 171, № 2. С. 266–268.

[65] *Зеленяк Т. И.* О стационарных решениях смешанных задач, возникающих при изучении некоторых химических процессов // Диф. уравнения. 1966. Т. 11, № 2. С. 205–213.

[66] *Зеленяк Т. И.* К вопросу об устойчивости решений смешанных задач для одного класса квазилинейных уравнений // Диф. уравнения. 1967. Т. 3, № 1. С. 19–29.

[67] *Зеленяк Т. И., Руденко Э. Н., Иванов Е. А., Белоносов В. С.* Некоторые методы исследования математических моделей химических процессов // Моделирование химических процессов и реакторов, т. 4. / Новосибирск: Изд-во ИК СО АН СССР, 1972. С. 5-50.

[68] *Зеленяк Т. И.* Качественная теория краевых задач для квазилинейных уравнений второго порядка параболического типа. Новосибирск: Изд-во НГУ, 1972.

[69] *Зеленяк Т. И.* О качественных свойствах решений квазилинейных смешанных задач для уравнений параболического типа // Мат. сб. 1977. Т. 104, № 3. С. 486–510.

[70] *Зеленяк Т. И., Слинько М. Г.* Динамика каталитических систем, 1 // Кинетика и катализ. 1977. Т. 18, № 5. С. 1235–1248.

[71] *Зеленяк Т. И., Слинько М. Г.* Динамика каталитических систем, 2 // Кинетика и катализ. 1977. Т. 18, № 6. С. 1548–1560.

[72] *Зеленяк Т. И.* Математические вопросы моделирования каталитических процессов // Математическое моделирование химических реакторов. Новосибирск: Наука, Сиб. отделение, 1984.

[73] *Зеленяк Т. И.* О локализации собственных чисел одной спектральной задачи // Сиб. мат. журн. 1989. Т. 30, № 4. С. 53–61.

[74] *Зеленяк Т. И., Люлько Н. А.* К вопросу о разрешимости в целом смешанных задач для квазилинейных параболических уравнений // Сиб. мат. журн. 1998. Т. 39, № 2. С. 317–328.

[75] *Зельдович Я. Б.* Доказательство единственности решения уравнений закона действующих масс // ЖФХ. 1938. Т. 11, № 5. С. 685–687.

[76] *Иванов Е. А.* Управление процессом в реакторе с псевдоожиженным слоем // Математическое моделирование химических реакторов. Новосибирск: Наука, Сиб. отделение, 1984. С. 116–127.

[77] *Иванова А. Н.* Условия единственности стационарного состояния кинетических систем, связанные со структурой схемы реакции. 1 // Кинетика и катализ. 1979. Т. 20, № 4. С. 1019–1023; 2. — Там же. С. 1024–1028.

[78] *Ильин А. М., Неудачин Д. И.* О влиянии малой диссипации на решения гиперболической системы, имеющие слабый разрыв // Докл. РАН. 1996. Т. 351, № 5. С. 583–585.

[79] *Киселев О. Д.* Теоретические исследования явления распространения тепловых волн в слое катализатора. Новосибирск: Институт катализа, 1993.

[80] *Кольцов Н. И., Федотов В. Х., Алексеев Б. В.* Критерий множественности стационарных состояний одномаршрутных каталитических реакций // Докл. АН СССР. 1988. Т. 302, № 1. С. 126–131.

[81] *Кольцов Н. И., Федотов В. Х., Алексеев Б. В.* О множественности стационарных состояний каталитических реакций с однородными стадийными схемами // Докл. РАН. 1995. Т. 343, № 5. С. 635–636.

[82] *Красносельский М. А.* Топологические методы в теории нелинейных интегральных уравнений. М.: Гостехиздат, 1956.

[83] *Лаврентьев М. М. (мл.), Люлько Н. А.* Повышение гладкости решений некоторых гиперболических задач // Сиб. мат. журн. 1997. Т. 38, № 1. С. 109–124.

[84] *Ладыженская О. А., Солонников В. А., Уральцева Н. Н.* Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа. М.: Наука, 1967.

[85] *Ладыженская О. А., Уральцева Н. Н.* Обзор результатов по разрешимости краевых задач для равномерно эллиптических и параболических квазилинейных уравнений второго порядка, имеющих неограниченные особенности // Успехи мат. наук. 1986. Т. 41, вып. 5. С. 59–83.

[86] *Лозгачев В. И.* О форме дифференциальных уравнений многокомпонентной диффузии // Журнал физической химии. 1973. Т. 47, № 3. С. 533–536.

[87] *Лыков А. В.* Теория теплопроводности. М.: Высшая школа, 1967.

[88] *Макеев А. Г.* Математическая модель реакции NO+CO/(Pt 100). Сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными // Математическое моделирование. 1996. Т. 8, № 2. С. 115–127.

[89] *Марсден Д., Мак-Кракен М.* Бифуркация рождения цикла и ее приложения. М.: Мир, 1980.

[90] Математическое моделирование химических реакторов. Новосибирск: Наука, Сиб. отделение, 1984.

[91] *Мещеряков В. Д., Шеплев В. С.* Математическое моделирование реакторов с кипящим слоем катализатора // Математическое моделирование химических реакторов. Новосибирск: Наука, Сиб. отделение, 1984.

[92] *Мошинский А. И.* О нелинейных уравнениях для ячеечных моделей // ТОХТ. 1993. Т. 27, № 2. С. 130–135.

[93] *Мусабеков К. С.* Теоремы существования решения в задаче оптимального управления химическим реактором // Управляемые процессы и оптимизация (Управляемые системы). Новосибирск, 1982. Вып. 22. С. 30–50.

[94] *Мусабеков К. С.* Об одном методе решения задачи оптимального управления процессом в химическом реакторе // Управляемые процессы и оптимизация (Управляемые системы). Новосибирск, 1988. Вып. 28. С. 21–33.

[95] *Мусиенко Е. И.* Управление решением некоторых параболических задач в окрестности неустойчивого стационарного решения // Динамика сплошной среды / АН СССР, Сиб. отделение. Ин-т гидродинамики. Новосибирск, 1983. Вып. 60. С. 163–169.

[96] *Мусиенко Е. И.* Управление решением некоторых параболических задач в окрестности неустойчивого стационарного решения // Диф. уравнения. 1984. Т. 20, № 12. С. 2120–2130.

[97] *Перлмуттер Д.* Устойчивость химических реакторов. Л.: Химия, Ленинградское отделение, 1976.

[98] *Петровский И. Г.* Лекции по теории обыкновенных дифференциальных уравнений. М.: Наука, 1970.

[99] Распространение тепловых волн в гетерогенных средах. Новосибирск: Наука, Сиб. отделение, 1988.

[100] *Сказка В. В.* О подсчете собственных значений, лежащих в правой полуплоскости, у спектральных задач, связанных с гиперболическими системами. I // Сиб. мат. журн. 1996. Т. 37, № 3. С. 656–676.

[101] *Скрябин Б. Н.* Качественное исследование уравнений, описывающих динамику проточного реактора // Ученые записки Горьковского государственного университета. Горький, 1973. Вып. 187. С. 188–206.

[102] *Слинько М. Г., Бесков В. С., Дубяга Н. А.* О возможности существования нескольких режимов в кинетической области гетерогенных каталитических реакций // Докл. АН СССР. 1972. Т. 204, № 5. С. 1174–1177.

[103] *Слинько М. Г., Бесков В. С., Вяткин Ю. Л., Иванов Е. А.* Число и устойчивость стационарных режимов на непористом зерне катализатора для сложной реакции // Докл. АН СССР. 1972. Т. 204, № 6. С. 1399–1402.

[104] *Слинько М. Г., Быков В. И., Яблонский Г. С., Акрамов Т. А.* Множественность стационарных состояний гетерогенных каталитических реакций // Докл. АН СССР. 1976. Т. 226, № 4. С. 876–879.

[105] *Слинько М. Г.* Моделирование химических реакторов. Новосибирск: Наука, Сиб. отделение, 1996.

[106] *Слинько М. Г.* Пленарные доклады на конференциях по химическим реакторам: «ХИМРЕАКТОР-1»–«ХИМРЕАКТОР-13». Новосибирск: Изд-во Института катализа СО РАН, 1996.

[107] *Соколова И. А.* Модели описания диффузии масс в многокомпонентных газах // Математическое моделирование. 1993. Т. 5, № 5. С. 71–91.

[108] *Терсенов Ар. С.* Разрешимость уравнения Ляпунова для несамосопряженных дифференциальных операторов второго порядка с нелокальными краевыми условиями // Сиб. мат. журн. 1998. Т. 39, № 5. С. 1184–1201.

[109] *Терсенов Ар. С.* О разрешимости некоторых краевых задач для одного класса квазилинейных параболических уравнений // Сиб. мат. журн. 1999. Т. 40, № 5. С. 1147–1156.

[110] *Тихонов А. Н.* Системы дифференциальных уравнений, содержащие малые параметры при производных // Мат. сб. 1952. Т. 31 (73), № 3. С. 575–586.

[111] *Федоров Е. Л.* Некоторые вопросы качественного исследования математической модели проточного реактора с экзотермической реакцией вида $\sum_{i=1}^{n} A_i \to B$ // Ученые записки Горьковского государственного университета. Горький, 1973. Вып. 187. С. 207–220.

[112] *Фокин М. В.* Существование функционалов Ляпунова и стабилизация решений динамических и параболических систем при $t \to \infty$ // Математические проблемы химии, ч. 1 / АН СССР, Сиб. отделение. Вычислительный центр. Новосибирск, 1975. С. 120–123.

[113] *Фокин М. В.* О предельных множествах траекторий динамических систем градиентного типа // Мат. сб. 1981. Т. 116, № 4. С. 502–514.

[114] *Хартман Ф.* Обыкновенные дифференциальные уравнения. М.: Мир, 1970.

[115] *Харьковская Е. Н., Боресков Г. К., Слинько М. Г.* Кинетика реакций взаимодействия водорода с кислородом на платине // Докл. АН СССР. 1959. Т. 127, № 12. С. 145–148.

[116] *Хессард Б., Казаринов Н., Вэн И.* Теория и приложения бифуркации рождения цикла. М.: Мир, 1985.

[117] *Холодниок М., Клич А., Кубичек М., Марек М.* Методы анализа нелинейных динамических моделей. М.: Мир, 1991.

[118] *Чумаков Г. А., Слинько М. М., Слинько М. Г., Беляев В. Д.* Кинетическая модель автоколебательной гетерогенной реакции // Докл. АН СССР. 1977. Т. 234, № 2. С. 399–402.

[119] *Чумаков Г. А., Слинько М. Г., Беляев В. Д.* Сложные изменения скорости гетерогенной каталитической реакции // Докл. АН СССР. 1980. Т. 253, № 3. С. 653–658.

[120] *Шеплев В. С.* Моделирование каталитических реакторов. Новосибирск: Изд-во НГУ, 1987.

[121] *Шеплев В. С., Слинько М. Г.* Периодические режимы в проточном реакторе смешения // Труды 13 Международной конференции по химическим реакторам. Новосибирск, 18-21 июня 1996. Ч. 1. С. 53–59.

[122] *Шеплев В. С., Слинько М. Г.* Периодические режимы в проточном реакторе смешения // Докл. Акад. Наук. 1997. Т. 352, № 6. С. 781–784.

[123] *Шобухов А. В.* Существование и единственность бифуркационного периодического решения в системах типа «реакция-диффузия» // Математическое моделирование. 1991. Т. 3, № 3. С. 70–84.

[124] *Шобухов А. В.* Устойчивость бифуркационного периодического решения в системах типа «реакция-диффузия» // Математическое моделирование. 1991. Т. 3, № 6. С. 22–28.

[125] *Яблонский Г. С., Быков В. И., Горбань А. Н.* Кинетические модели каталитических реакций. Новосибирск: Наука, Сиб. отделение, 1983.

[126] *Яблонский Г. С., Быков В. И., Елохин В. И.* Кинетика модельных реакций гетерогенного катализа. Новосибирск: Наука, Сиб. отделение, 1984.

[127] *Akramov T. A.* Mathematical models of detailed and complex balanced chemical systems // Proceedings of the conference on mathematical methods in chemical engineering. Balaton, Hungary, 5–8 May, 1986. V. 1. P. 51–59.

[128] *Akramov T. A.* Analytical and numerical analysis of counter-current chemical reactor // Proc. of 10th International congress CHISA-90. Praha, September 1990. P. 8–8.

[129] *Aris R.* The mathematical theory of diffusion and reaction in permeable catalysts, v. 1. Oxford: Clarendon Press, 1975.

[130] *Aris R.* The mathematical theory of diffusion and reaction in permeable catalysts, v. 2. Oxford: Clarendon Press, 1975.

[131] *Aronson D. G., Peletier L. A.* Global stability of symmetric and asymmetric concentration profiles in catalyst particle // Arch. Rational Mech. Anal. 1974. V. 54, № 2. P. 175–204.

[132] *Belonosov V. S.* The Lyapunov Function Method for Unbounded Operators // Siberian Journal of Differential Equations. Nova Science Publishers, Inc., New York. 1995. V. 1, № 2. P. 121–156.

[133] *Belonosov V. S.* Quasi-parabolic systems: fundamental solutions and apriori estimates // Intern. Conf. «Nonlinear Differential Equations», Abstracts. Kiev, August 21–27, 1995.

[134] *Belonosov V. S.* The Lyapunov Function Method for Unbounded Operators // Differential Equation Theory. Nova Science Publishers, Inc., New York. 1996. P. 199–234.

[135] *Bowen J. R., Acrivos A., Oppenheim A. K.* Singular perturbation refinement to quasi-steady state approximation in chemical kinetics // Chem. Eng. Sci. 1963. V. 18, № 3. P. 177–188.

[136] *Casten R. G., Holland C. J.* Instability results for reaction-diffusion equations with Neumann boudary conditions // Journal of Diff. Equations. 1978. V. 27, № 2. P. 266–273.

[137] Chemical Reactor Theory. Eds. L. Lapidus, N. R. Amundson. Prentice-Hall, New Jersey, 1977.

[138] *Feinberg M.* On chemical kinetics of a certain class // Arch. Rational Mech. Anal. 1972. V. 36, № 1. P. 1–41.

[139] *Field R. J.* Limit cycle oscillations in the reversible oregonator // J. Chem. Phys. 1975. V. 63, № 6. P. 2289–2296.

[140] *Gavalas G. R.* Nonlinear differential equations of chemically reacting systems. Berlin, New-York, Heidelberg: Springer-Verlag, 1968.

[141] *Groger K.* Asymptotic Behavior of Solutions to a Class of Diffusion-Reaction Equations // Math. Nachr. 1983. V. 112. P. 19–33.

[142] *Hamer I. W., Akramov T. A., Ray W. H.* The dynamic behavior of continuous polymerization reactors // Chem. Eng. Sci. 1981. V. 36, № 12. P. 1897–1914.

[143] *Horn F., Jackson R.* General mass action kinetics // Arch. Rational Mech. Anal. 1972. V. 47. P. 81–116.

[144] *Jaisinghani R., Ray W. H.* On the dynamic behavior of a class of gomogeneous continuous stirred tank polymerisation reactors // Chem. Eng. Sci. 1977. V. 32, № 8. P. 811–825.

[145] *Krambek F. J.* The mathematical structure of chemical kinetics in homogeneous single-phase systems // Arch. Rational Mech. Anal. 1970. V. 38, № 5. P. 317–347.

[146] *Kurkina E. S., Makeev A. G.* The mathematical model of NO+CO reaction on Pt(100). Bifurcation analysis and comparison with experimental data // Proceed. of 13 International conference on chemical reactors «CHEMREACTOR-13». Novosibirsk, June 18–21, 1996. Part 1. P. 148–151.

[147] *Matano H.* Convergence of solutions of one-dimensional semilinear diffusion equations // J. Math. Kyoto Univ. 1978. V. 18, № 2. P. 221–227.

[148] *Matano H.* Asimptotic behavior and stability of solutions of semilinear diffusion equations // Publ. RIMS Kyoto Univ. 1979. V. 15. P. 401–454.

[149] *Moravec P., Akramov T. A., Stanek V. A.* Mathematical model as a tool the rating of gas-solid reactions with special reference to iron ore reduction // Proc. of 9th International congress CHISA-87, A4.1. Praha, August 31–September 4, 1987.

[150] *Morse M.* Variational Analysis: Critical Extremals and Sturman Extensions. John Wiley & Sons, 1973.

[151] *Peterson L. D., Maple C. G.* Stability of solution of nonlinear diffusion problem // J. Math. Anal. and Appl. 1966. V. 14, № 2. P. 221–241.

[152] *Polacik P., Rybakowsky K. P.* Nonconvergent bounded traectories in semilinear heat equations. Preprint / Universita degli Studi di Trieste, Italy. 1994.

[153] *Ray W. H., Hastings S. P.* The influence of the Lewis number on the dynamic of chemically reacting systems // Chem. Eng. Sci. 1980. V. 35, № 3. P. 589–595.

[154] *Sattinger D. H.* Topics in stability and bifurcation theory. Springer Lecture Notes in Mathematics, 1973. V. 309.

[155] *Uppal A., Ray W. H., Poore A. B.* On the dynamic behavior of continuous stirred tank reactors // Chem. Eng. Sci. 1974. V. 29, № 4. P. 967–985.

[156] *Uppal A., Ray W. H., Poore A. B.* The classification of the dynamic behavior of continuous stirred tank reactors-influence of reactor residence time // Chem. Eng. Sci. 1976. V. 31, № 3. P. 205–214.

[157] *Villadsen J., Ivanov E. A.* A note on the multyplicity of the Weisz-Hicks problem for the arbitrary «geometry factor» // Chem. Eng. Sci. 1978. V. 33, № 1. P. 41–46.

[158] *Wei J.* Axiomatic treatment of chemically reacting systems // J. Chem. Phys. 1962. V. 36, № 6. P. 1578–1584.

[159] *Zelenjak T. I., Mihailov V. P.* Asymptotic behavior of the solution of certain boundary value problems of mathematical physics for $t \to \infty$ // Amer. Math. Soc. Transl. 1976. V. 105. P. 139–171.

[160] *Zelenyak T. I., Lavrentiev Jr. M. M. and Vishnevskii M. P.* Qualitative Theory of Parabolic Equations, Part 1. VSP, The Netherlands, 1997.