

Теоретические основы химической технологии
Theoretical basis of chemical technology

УДК 541.124/128

<https://doi.org/10.32362/2410-6593-2025-20-6-531-539>

EDN AQQLQV



НАУЧНАЯ СТАТЬЯ

Решение обратной задачи для химических реакций с хаотической динамикой

Б.В. Алексеев, В.Х. Федотов✉, Н.И. Кольцов

Чувашский государственный университет им. И.Н. Ульянова, Чебоксары, Чувашская Республика, 428015 Россия

✉ Автор для переписки, e-mail: fvh@inbox.ru

Аннотация

Цели. Разработка и апробация метода решения обратной задачи химической кинетики по оценке частот элементарных стадий сложных химических реакций, протекающих в хаотическом режиме.

Методы. Метод основан на представлении нестационарных экспериментальных данных о концентрациях реагентов и скоростях их изменения в виде матрицы специальной структуры.

Результаты. Эффективность метода показана на примерах реакций, протекающих по стадийным схемам, аналогичным механизму Вилламовски–Росслера, и характеризующихся незатухающими аperiodическими колебаниями.

Выводы. Метод позволяет с высокой точностью определить частоты стадий для реакций, протекающих по механизмам с немотонной динамикой любой сложности.

Ключевые слова

обратная задача химической кинетики, хаотическая динамика, нестационарные экспериментальные данные, концентрации реагентов и скорости их изменения

Поступила: 05.03.2025

Доработана: 05.05.2025

Принята в печать: 07.11.2025

Для цитирования

Алексеев Б.В., Федотов В.Х., Кольцов Н.И. Решение обратной задачи для химических реакций с хаотической динамикой. *Тонкие химические технологии*. 2025;20(6):531–539. <https://doi.org/10.32362/2410-6593-2025-20-6-531-539>

RESEARCH ARTICLE

Solution of the inverse problem for chemical reactions with chaotic dynamics

Boris V. Alekseev, Vladislav Kh. Fedotov✉, Nikolay I. Kol'tsov

I.N. Ulyanov Chuvash State University, Cheboksary, Chuvash Republic, 428015 Russia

✉ Corresponding author, e-mail: fvh@inbox.ru

Abstract

Objectives. To develop and test a method for solving the inverse problem of chemical kinetics for estimating the frequencies of elementary stages of complex chemical reactions occurring in a chaotic regime.

Methods. The method is based on the representation of nonstationary experimental data on reagent concentrations and the rates of their change in the form of a matrix of a particular structure.

Results. The effectiveness of the method is demonstrated by examples of reactions proceeding according to stage schemes similar to the Willamowski–Rossler mechanism, characterized by undamped aperiodic oscillations.

Conclusions. The method allows the frequencies of stages for reactions proceeding according to mechanisms with non-monotonic dynamics of any complexity to be determined with high accuracy.

Keywords

inverse problem of chemical kinetics, chaotic dynamics, nonstationary experimental data, reagent concentrations and rates of their change

Submitted: 05.03.2025

Revised: 05.05.2025

Accepted: 07.11.2025

For citation

Alekseev B.V., Fedotov V.Kh., Kol'tsov N.I. Solution of the inverse problem for chemical reactions with chaotic dynamics. *Tonk. Khim. Tekhnol. = Fine Chem. Technol.* 2025;20(6):531–539. <https://doi.org/10.32362/2410-6593-2025-20-6-531-539>

ВВЕДЕНИЕ

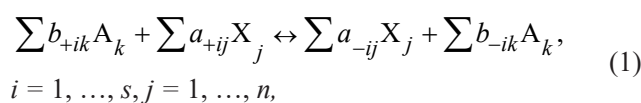
В настоящее время известны методы решения обратной задачи (ОЗ) химической кинетики на основе нестационарных данных для химических реакций, протекающих в монотонном режиме [1–3]. Методы решения ОЗ для химических реакций, характеризующихся немонотонным поведением и, особенно, критическими явлениями, практически не изучены [4, 5]. Известно также, что ОЗ является некорректной, и ее решение, как правило, неоднозначно [6]. В [7–11] приведены новые подходы по преодолению этих проблем, позволяющие повысить точность решения ОЗ. В [12] рассмотрено решение ОЗ для автоколебательной реакции Грея–Скотта [13] на основе экспериментальных амплитудно-частотных характеристик. В [14] приведен альтернативный метод решения ОЗ для этой же реакции и показано, что использование нестационарных значений концентраций реагентов и скоростей их изменения позволяет повысить однозначность и точность решения.

Первые примеры химических реакций, динамические модели которых описывают хаотические колебания в рамках закона действующих масс (ЗДМ), были

найжены Росслером [15]. Простейшим из них является механизм Вилламовски–Росслера [16–18]. В этих работах кинетические параметры стадийных схем определялись численно, исходя из условий неустойчивости решений обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ), описывающих нестационарные модели соответствующих реакций, и известных критериев хаотичности динамических систем (показатели Ляпунова и др.) [19–20]. Ниже приведен метод решения ОЗ для химических реакций с непредсказуемой хаотической динамикой на основе данных о концентрациях реагентов и скоростях их изменения.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Механизм сложной химической реакции описывается набором элементарных стадий



где $b_{\pm ik}$, $a_{\pm ij}$ — стехиометрические коэффициенты реагентов A_k и X_j соответственно в прямом и обратном направлениях стадии i . Пусть A_k — реагенты,

концентрации которых практически не меняются в ходе реакции (неключевые, медленные реагенты — в терминах принципа квазистационарности Боденштейна–Семенова [21]); X_j — ключевые реагенты, концентрации которых меняются в ходе реакции (существенные реагенты — в терминах А.М. Жаботинского [22]). Динамика такой реакции в изотермическом безградиентном реакторе, согласно ЗДМ, описывается системой ОДУ [1]:

$$x'_j = \sum (a_{-ij} - a_{+ij})(w_i \Pi_j x_j^{a_{+ij}} - w_{-i} \Pi_j x_j^{a_{-ij}}), \quad (2)$$

$$j = 1, \dots, n,$$

где $x_j = x_j(t)$ — концентрации ключевых реагентов X_j (безразмерные, б/р); t — время (с); $x_j(t_0) = x_j^0$ — начальные условия (н.у.); t_0 — начальный момент времени (с); $w_i = k_i \Pi_k A_k^{b_{+ik}}$, $w_{-i} = k_{-i} \Pi_k A_k^{b_{-ik}}$ — частоты прямых и обратных стадий, включающие множители концентрации неключевых реагентов (c^{-1}); k_i, k_{-i} — константы скоростей стадий в прямом и обратном направлениях (c^{-1}).

Система (2) при наличии экспериментальных данных о концентрациях и скоростях изменения концентраций реагентов представляет собой линейную относительно частот стадий систему алгебраических уравнений, которую можно записать в виде

$$v_j = \sum (a_{-ij} - a_{+ij})(w_i r_{ij} - w_{-i} r_{-ij}), j = 1, \dots, n, \quad (3)$$

где v_j — скорости изменения концентраций ключевых реагентов; r_{ij}, r_{-ij} — мономы скоростей стадий, т.е. скорости стадий при единичных значениях частот стадий. Разделение правой части системы (3) на мономы и частоты удобно, т.к. численные значения мономов известны из эксперимента в каждый момент времени (они равны произведению концентраций ключевых реагентов), а значения частот стадий являются искомыми параметрами ОЗ.

Система (3), как правило, включает одинаковые мономы скоростей стадий с разными значениями частот стадий. Объединим такие мономы (приведем подобные) и запишем модифицированную таким образом систему (3) в краткой (матричной) форме

$$\mathbf{v} = \mathbf{R}\mathbf{w}, \quad (3^*)$$

где \mathbf{R} — матрица различных мономов скоростей (после приведения подобных), \mathbf{w} — вектор частот стадий.

Наилучшее решение такой системы дают методы минимизации функции ошибок $f(\mathbf{w})$ (штрафной функции), например, в виде суммы квадратов отклонений

$$f(\mathbf{w}) = (\mathbf{R}\mathbf{w} - \mathbf{v})^T (\mathbf{R}\mathbf{w} - \mathbf{v}), \quad (4)$$

где T — знак транспонирования. Это решение можно записать с использованием псевдообратной матрицы \mathbf{R}^+ [23]:

$$\mathbf{w} = \mathbf{R}^+ \mathbf{v}. \quad (5)$$

В частном случае, когда исходная матрица \mathbf{R} квадратная и невырожденная, псевдообратная матрица совпадает с обратной $\mathbf{R}^+ = \mathbf{R}^{-1}$. В общем случае, когда число экспериментальных точек не равно числу искомым частот стадий, матрица \mathbf{R} имеет неполный ранг. Тогда, если произведение матриц $\mathbf{R}^T \mathbf{R}$ не вырождено, то

$$\mathbf{R}^+ = (\mathbf{R}^T \mathbf{R})^{-1} \mathbf{R}^T, \quad (6)$$

где \mathbf{R}^T — транспонированная матрица. Если и произведение $\mathbf{R}^T \mathbf{R}$ имеет неполный ранг, то

$$\mathbf{R}^+ = \lim_{\delta \rightarrow 0} (\mathbf{R}^T \mathbf{R} + \delta \mathbf{E})^{-1} \mathbf{R}^T, \quad (7)$$

где \mathbf{E} — единичная матрица. Проведенные расчеты в системах компьютерной алгебры [3, 24] показали, что для определения частот стадий достаточно использовать формулу (6).

Для сравнения используем и штрафную функцию — максимум модулей отклонений

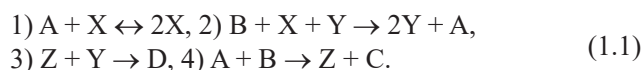
$$f(\mathbf{w}) = \max(\text{abs}(\mathbf{R}\mathbf{w} - \mathbf{v})). \quad (8)$$

Функция (8) является композицией функций \max и abs , имеющих изломы, и ее анализ сложнее, чем анализ функции (4). Минимум функции (8) можно найти, разбив все пространство возможных значений вектора \mathbf{w} на области гладкости (8), найдя минимум в каждой из этих областей и затем выбрав из этих локальных минимумов глобальный. Очевидно, что точки минимума функций (4) и (8) различны и этим минимумам соответствуют разные значения вектора \mathbf{w} .

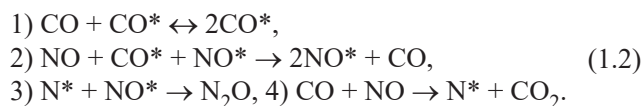
РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Применим описанный выше метод к реакциям, протекающим по стадийным схемам, аналогичным механизму Вилламовски–Росслера, характеризующимся незатухающими апериодическими (хаотическими) колебаниями [15–18, 25, 26].

Пример 1. Рассмотрим гомогенную реакцию $A + 2B \rightarrow C + D$, протекающую по схеме [25]:



где A, B, C, D — неключевые реагенты (могут быть любые); X, Y, Z — ключевые реагенты. По данной схеме может протекать реакция $\text{CO} + 2\text{NO} \rightarrow \text{N}_2\text{O} + \text{CO}_2$:



Нестационарная кинетическая модель реакций, протекающих по схемам (1.1) и (1.2),

в предположении квазистационарности по неключевым реагентам описывается ОДУ

$$\begin{aligned} x' &= w_1 x - w_{-1} x^2 - w_2 xy, \\ y' &= w_2 xy - w_3 yz, \\ z' &= -w_3 yz + w_4, \end{aligned} \quad (1.3)$$

где w_i, w_{-i} — частоты стадий в прямом и обратном направлениях, включающие концентрации неключевых реагентов; x, y и z — концентрации ключевых реагентов X, Y и Z. В [25] показано, что система (1.3) демонстрирует хаотические колебания при определенных значениях частот стадий и н.у. (рис. 1).

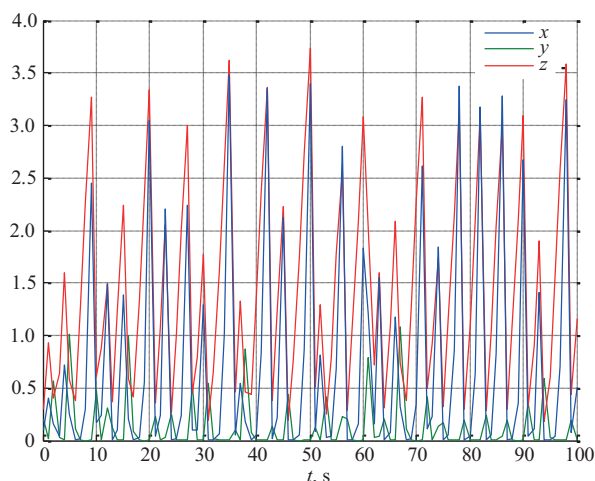


Рис. 1. Зависимости $x(t), y(t), z(t)$ в реакции $A + 2B \rightarrow C + D$, описываемой моделью (1.3) при $w_1 = 3, w_{-1} = 0.75, w_2 = 18, w_3 = 10, w_4 = 1 \text{ c}^{-1}$ и $x_0 = 0.1, y_0 = 0.2; z_0 = 0.3$

Fig. 1. Dependencies $x(t), y(t), z(t)$ in the reaction $A + 2B \rightarrow C + D$ described by model (1.3) at $w_1 = 3, w_{-1} = 0.75, w_2 = 18, w_3 = 10, w_4 = 1 \text{ s}^{-1}$, and $x_0 = 0.1, y_0 = 0.2, z_0 = 0.3$

Значения концентраций ключевых реагентов и скоростей их изменения, выбранных для расчетов в определенные моменты времени из зависимостей $x(t), y(t), z(t)$ (рис. 1), приведены в табл. 1.

Уравнения (1.3) содержат 5 различных мономов скоростей $1, x, x^2, xy, yz$. Они образуют матрицу \mathbf{R} размером $5 \times 3n$, составленную из троек строк $[0, x, -x^2, -xy, 0], [0, 0, 0, xy, -yz]$ и $[1, 0, 0, 0, -yz]$ для реагентов X, Y и Z соответственно, вычисленных для каждого эксперимента. Результаты решения ОЗ для двух вариантов штрафной функции (4) и (8) приведены в табл. 2.

Таблица 1. Концентрации реагентов и скорости их изменения* в реакции $A + 2B \rightarrow C + D$, протекающей по схеме (1.1), при $w_1 = 3, w_{-1} = 0.75, w_2 = 18, w_3 = 10, w_4 = 1, \text{ c}^{-1}$

Table 1. Concentrations of reagents and rates of their change* in the reaction $A + 2B \rightarrow C + D$, proceeding according to scheme (1.1) at $w_1 = 3, w_{-1} = 0.75, w_2 = 18, w_3 = 10, w_4 = 1, \text{ s}^{-1}$

$t, \text{ c}$ $t, \text{ s}$	0	5	10	15	20	25
$x, \text{ б/р}$ $x, \text{ a.u.}$	0.1000	0.2480	0.1663	1.3908	3.0491	0.0127
$y, \text{ б/р}$ $y, \text{ a.u.}$	0.2000	1.0100	0.4738	0.0000	0.0000	0.0009
$z, \text{ б/р}$ $z, \text{ a.u.}$	0.3000	0.5827	0.6112	2.2368	3.3339	1.0031
$x', \text{ c}^{-1}$ $x', \text{ s}^{-1}$	-0.0675	-3.8114	-0.9403	2.7217	2.1732	0.0376
$y', \text{ c}^{-1}$ $y', \text{ s}^{-1}$	-0.2400	-1.3758	-1.4775	0.0000	0.0006	-0.0088
$z', \text{ c}^{-1}$ $z', \text{ s}^{-1}$	0.4000	-4.8852	-1.8960	1.0000	0.9991	0.9910

* Скорости изменения концентраций реагентов x', y', z' рассчитаны по уравнениям (1.3).

* The rates of change of reagent concentrations x', y', z' are calculated using equations (1.3).

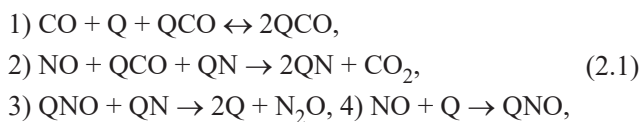
Таблица 2. Точность решения обратной задачи для реакции (1.1) в зависимости от штрафной функции

Table 2. Accuracy of the inverse problem (IP) solution for reaction (1.1) depending on the penalty function

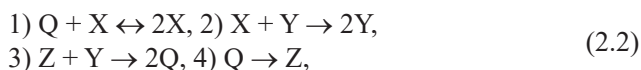
Штрафная функция Penalty function	Частоты стадий Stage frequencies	$w_1, \text{ c}^{-1}$ $w_1, \text{ s}^{-1}$	$w_2, \text{ c}^{-1}$ $w_2, \text{ s}^{-1}$	$w_3, \text{ c}^{-1}$ $w_3, \text{ s}^{-1}$	$w_4, \text{ c}^{-1}$ $w_4, \text{ s}^{-1}$	$w_{-1}, \text{ c}^{-1}$ $w_{-1}, \text{ s}^{-1}$
	Точное значение The exact value	3.00	18.00	10.00	1.00	0.75
(4)	Расчетное значение Estimated value	3.0008	18.0031	9.9998	0.9998	0.7504
	Погрешность, % Error rate, %	0.0267	0.0172	0.0020	0.0200	0.0533
(8)	Расчетное значение Estimated value	3.0004	18.0029	9.9989	0.9994	0.7503
	Погрешность, % Error rate, %	0.0133	0.0161	0.0110	0.0600	0.0400

Как видно из табл. 2, погрешности определения частот стадий описанным выше методом малы при обоих способах выбора штрафной функции.

Пример 2. Рассмотрим гетерогенно-каталитическую реакцию $2\text{NO} + \text{CO} \rightarrow \text{N}_2\text{O} + \text{CO}_2$, протекающую на платиновых металлах по стадийной схеме [26]:



в которой ключевыми реагентами являются QCO, QN, QNO — центры поверхности катализатора, занятые монооксидами углерода и азотом, а также Q — свободные центры катализатора. Кратко, без неключевых реагентов NO, CO, N₂O и CO₂, схема (2.1) имеет вид



для которой кинетическая модель (2) запишется в виде:

$$\begin{aligned} x' &= w_1 xq - w_{-1} x^2 - w_2 xy, \\ y' &= w_2 xy - w_3 yz, \\ z' &= -w_3 yz + w_4 q, \end{aligned} \quad (2.3)$$

где x, y, z и q — безразмерные концентрации ключевых веществ QCO = X, QN = Y, QNO = Z и свободных центров Q на поверхности катализатора, причем

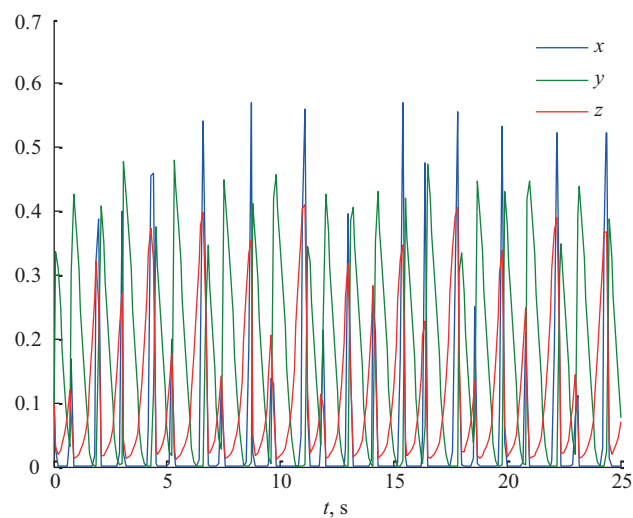


Рис. 2. Зависимости $x(t), y(t), z(t)$ в реакции взаимодействия монооксидов азота и углерода, описываемой моделью (2.3), при $w_1 = 50, w_2 = 200, w_3 = 100, w_4 = w_{-1} = 1 \text{ c}^{-1}, x_0 = y_0 = z_0 = 0.1$

Fig. 2. Dependencies $x(t), y(t), z(t)$ in reaction of interaction of nitrogen and carbon monoxides described by model (2.3) at $w_1 = 50, w_2 = 200, w_3 = 100, w_4 = w_{-1} = 1 \text{ s}^{-1}, x_0 = y_0 = z_0 = 0.1$

$x + y + z + q = 1$ (закон сохранения катализатора). Следует отметить, что концентрации ключевых веществ и свободных центров на поверхности катализатора не могут быть измерены даже современными физико-химическими методами исследования. В [26] показано, что система ОДУ (2.3) описывает хаотические колебания при определенных значениях частот стадий и н.у. (рис. 2).

Значения концентраций реагентов и скоростей их изменения, выбранных для расчетов в определенные моменты времени из зависимостей $x(t), y(t), z(t)$ (рис. 2), приведены в табл. 3.

Таблица 3. Концентрации реагентов и скорости их изменения в реакции взаимодействия монооксидов азота и углерода, протекающей по механизму (2.1) при $w_1 = 50, w_2 = 200, w_3 = 100, w_4 = w_{-1} = 1 \text{ c}^{-1}$

Table 3. Concentrations of reagents and rates of their change in the reaction of interaction of nitrogen and carbon monoxides, proceeding according to mechanism (2.1) at $w_1 = 50, w_2 = 200, w_3 = 100, w_4 = w_{-1} = 1 \text{ s}^{-1}$

t, c t, s	0	1	2	3	4	5
$x, \text{б/п}$ $x, \text{a.u.}$	0.1000	0.0000	0.3869	0.4011	0.0000	0.0002
$y, \text{б/п}$ $y, \text{a.u.}$	0.1000	0.3701	0.1965	0.0047	0.0044	0.0640
$z, \text{б/п}$ $z, \text{a.u.}$	0.1000	0.0156	0.2543	0.2714	0.1935	0.0787
x', c^{-1} x', s^{-1}	1.4900	-0.0001	-12.2097	5.9310	0.0018	0.0057
y', c^{-1} y', s^{-1}	1.0000	-0.5788	10.2050	0.2518	-0.0853	-0.5017
z', c^{-1} z', s^{-1}	-0.3000	0.0353	-4.8335	0.1940	0.7167	0.3530

Уравнения (2.3) содержат 5 различных мономов скоростей xq, xy, yz, q, x^2 . Они образуют матрицу \mathbf{R} размером $5 \times 3n$, составленную из троек строк $[xq, -xy, 0, 0, -x^2], [0, xy, -yz, 0, 0]$ и $[0, 0, -yz, q, 0]$ для реагентов X, Y и Z соответственно, вычисленных для каждого эксперимента. Решение ОЗ для штрафных функций (4) и (8) приведено в табл. 4.

Таблица 4. Зависимость точности решения обратной задачи от выбора штрафной функции для реакции взаимодействия монооксидов азота и углерода, протекающей по схеме (2.1)

Table 4. Dependence of the IP solution accuracy on the choice of the penalty function for the reaction of interaction of nitrogen and carbon monoxides, proceeding according to scheme (2.1)

Штрафная функция Penalty function	Частоты стадий Stage frequencies	w_1, c^{-1} w_1, s^{-1}	w_2, c^{-1} w_2, s^{-1}	w_3, c^{-1} w_3, s^{-1}	w_4, c^{-1} w_4, s^{-1}	w_{-1}, c^{-1} w_{-1}, s^{-1}
	Точное значение The exact value	50.00	200	100	1	1
(4)	Расчетное значение Estimated value	49.9728	199.9172	99.9609	1.0020	0.9986
	Погрешность, % Error rate, %	0.0544	0.0414	0.0391	0.2000	0.1400
(8)	Расчетное значение Estimated value	49.9533	199.9042	99.9130	1.0085	0.9953
	Погрешность, % Error rate, %	0.0934	0.0479	0.0870	0.8500	0.4700

Как видно из табл. 4, погрешности определения частот стадий для обоих вариантов штрафных функций (4), (8) достаточно малы. Найденные значения частот стадий при разных штрафных функциях практически одинаковы.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложен метод решения обратной кинетической задачи для реакций, протекающих по механизмам с хаотической динамикой. Метод основан на использовании экспериментально измеренных значений концентраций реагентов и скоростей их изменения. Основное отличие метода от известных ранее методов состоит в выделении различных мономов скоростей стадий и способе формировании матрицы экспериментальных данных. Проведенный анализ показал, что описанный метод позволяет с высокой точностью определить частоты стадий для реакций, протекающих по механизмам с динамикой любой сложности (монотонной, немонотонной, периодической и хаотической).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Исмагилова А.С., Спивак С.И. *Обратные задачи химической кинетики*. Saarbrücken: Lap Lambert Academic Publ.; 2013, 125 с. ISBN 978-36593118474. <https://www.elibrary.ru/glykiv>
- Ягола А.Г., Янфей В., Степанова И.Э., Титаренко В.Н. *Обратные задачи и методы их решения. Приложения к геофизике*. М.: Лаборатория знаний; 2021, 217 с. ISBN 978-5-93208-555-4

Вклад авторов

Б.В. Алексеев — разработка методов и алгоритмов решения обратных задач, разработка программного обеспечения, планирование и проведение вычислительных экспериментов, анализ результатов.

В.Х. Федотов — постановка задачи, планирование и проведение вычислительных экспериментов, анализ результатов, подготовка текста статьи.

Н.И. Кольцов — постановка цели и задачи исследования, анализ получаемых результатов, подготовка текста статьи.

Все авторы одобрили окончательную версию статьи.

Authors' contributions

B.V. Alekseev — development of methods and algorithms for solving inverse problems, software development, planning and conducting computational experiments, analysis of results.

V.Kh. Fedotov — problem statement, planning and conducting computational experiments, analysis of results, writing the text of the article.

N.I. Kol'tsov — statement of the research goal and objectives, analysis of the obtained results, writing the text of the article.

All authors approved the final version of the article.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

The authors declare no conflict of interest.

REFERENCES

- Ismagilova A.S., Spivak S.I. *Obratnye zadachi khimicheskoi kinetiki (Inverse Problems of Chemical Kinetics)*. Saarbrücken: Lap Lambert Academic Publ.; 2013, 125 p. (In Russ.). ISBN 978-36593118474. <https://www.elibrary.ru/glykiv>
- Yagola A.G., Yanfei V., Stepanova I.Eh., Titarenko V.N. *Obratnye zadachi i metody ikh resheniya. Prilozheniya k geofizike (Inverse Problems and Methods of their Solution. Applications to Geophysics)*. Moscow: Laboratoriya znaniy; 2021, 217 p. (In Russ.). ISBN 978-5-93208-555-4

3. Леонов А.С. *Решение некорректно поставленных обратных задач: очерк теории, практические методы и демонстрации в MATLAB*. М.: Либроком; 2024, 368 с. ISBN 978-5-9710-9965-9
4. Писаренко Е.В., Писаренко В.Н. Анализ и моделирование нелинейной кинетики химических реагирующих систем. *Теор. основы хим. технологии*. 2013;47(2):173–181. <https://doi.org/10.7868/S0040357113020061>
5. Шаталов М.Ю., Федотов С.И., Шаталов Ю.М. Новый метод определения кинетических параметров теоретических моделей на основе экспериментальных данных. *Теор. основы хим. технологии*. 2013;47(3):260–270. <https://doi.org/10.7868/S0040357113020103>
6. Gorsky V.G. *A priori parameter identifiability analysis of fixed structure models*. In: Letzky E.K. (Ed.). *Design of Experiments and Data Analysis: New Trends and Results*. Moscow: Antal; 1993. P. 92–131.
7. Федотов В.Х., Кольцов Н.И. Разработка метода решения обратной задачи химической кинетики для каталитических реакций с участием основных веществ в каждой стадии. *Хим. физика*. 2016;35(10):9–15. <https://doi.org/10.7868/S0207401X1610006X>
8. Кольцов Н.И. Метод решения обратной задачи химической кинетики многостадийных реакций. *Кинетика и катализ*. 2020;61(6):783–788. <https://doi.org/10.31857/S0453881120040127>
9. Кольцов Н.И. Метод определения констант скоростей стадий химических реакций в закрытом безградиентном реакторе. *Журн. прикладной химии*. 2020;93(10):1474–1481. <https://doi.org/10.31857/S0044461820100096>
10. Кольцов Н.И. Решение обратной задачи для химических реакций, протекающих в реакторе идеального вытеснения. *Теор. основы хим. технологии*. 2021;55(6):772–779. <https://doi.org/10.31857/S0040357121050043>
11. Кольцов Н.И., Федотов В.Х. *Инварианты и обратные задачи химической кинетики*. Чебоксары: Изд-во Чуваш. ун-та; 2022, 240 с. ISBN 978-5-7677-3431-3
12. Кацман Е.А., Соколова И.В., Темкин О.Н. Решение обратной кинетической задачи для колебательных реакций. *Теор. основы хим. технологии*. 2014;48(2):190–195. <https://doi.org/10.7868/S0040357114020067>
13. Gray P., Scott S.K. *Chemical Oscillations and Instabilities. Non-linear Chemical Kinetics*. Oxford: Clarendon Press; 1994, 470 p.
14. Алексеев Б.В., Федотов В.Х., Кольцов Н.И. Решение обратной задачи химической кинетики для колебательных реакций. *Теорет. основы хим. технологии*. 2025 (в печати).
15. Rössler O.E. Chaotic behavior in simple reaction system. *Z. Naturforsch.* 1976;A(31):259–264. <https://doi.org/10.1515/zna-1976-3-408>
16. Willamowski K.D., Rössler O.E. Irregular oscillations in a realistic abstract quadratic mass action system. *Z. Naturforsch.* 1980;35a:317–318. <https://doi.org/10.1515/zna-1980-0308>
17. Gaspard P. Rössler systems. In: *Encyclopedia of Nonlinear Science*. New York: Routledge; 2005. P. 808–811.
18. Stucki J., Urbanczik R. Entropy Production of the Willamowski-Rössler Oscillator. *Z. Naturforsch.* 2005;60a:599–607. <https://doi.org/10.1515/zna-2005-8-907>
19. Шустер Г. *Детерминированный хаос: Введение*: пер. с англ. М.: Мир; 1988, 248 с. ISBN 5-03-001373-3
20. Кузнецов С.П. *Динамический хаос*. М.: Физматлит; 2006, 356 с. ISBN 5-94052-100-2
21. Киперман С.Л. *Основы химической кинетики в гетерогенном катализе*. М.: Химия; 1979, 352 с.
22. Жаботинский А.М. *Концентрационные автоколебания*. М.: Наука; 1974, 179 с.
3. Leonov A.S. *Reshenie nekorrektno postavlennykh obratnykh zadach: ocherk teorii, prakticheskie metody i demonstratsii v MATLAB (Solution of ill-Posed Inverse Problems: Outline of theory, Practical Methods and Demonstrations in MATLAB)*. Moscow: Librokom; 2024, 368 p. (In Russ.). ISBN 978-5-9710-9965-9
4. Pisarenko E.V., Pisarenko V.N. Analysis and simulation of the nonlinear kinetics of reacting chemical systems. *Theor. Found. Chem. Eng.* 2013;47(2):128–135. <https://doi.org/10.1134/S004057951302005X> [Original Russian Text: Pisarenko E.V., Pisarenko V.N. Analysis and simulation of the nonlinear kinetics of reacting chemical systems. *Teoreticheskie Osnovy Khimicheskoi Tekhnologii*. 2013;47(2):173–181 (in Russ.). <https://doi.org/10.7868/S0040357113020061>]
5. Shatalov M.Y., Fedotov S.I., Shatalov Y.M. New methods of determination of kinetic parameters of the theoretical models from experimental data. *Theor. Found. Chem. Eng.* 2013;47(3):207–216. <https://doi.org/10.1134/S0040579513020097> [Original Russian Text: Shatalov M.Yu., Fedotov S.I., Shatalov Yu.M. New methods of determination of kinetic parameters of the theoretical models from experimental data. *Teoreticheskie Osnovy Khimicheskoi Tekhnologii*. 2013;47(3):260–270 (in Russ.). <https://doi.org/10.7868/S0040357113020103>]
6. Gorsky V.G. *A priori parameter identifiability analysis of fixed structure models*. In: Letzky E.K. (Ed.). *Design of Experiments and Data Analysis: New Trends and Results*. Moscow: Antal; 1993. P. 92–131.
7. Fedotov V.Kh., Kol'tsov N.I. Method of solving the inverse problem of chemical kinetics for catalytic reactions in which each step involves main reactants. *Rus. J. Phys. Chem. B*. 2016;10(5):753–759. <https://doi.org/10.1134/S1990793116050195> [Original Russian Text: Fedotov V.Kh., Kol'tsov N.I. Method of solving the inverse problem of chemical kinetics for catalytic reactions in which each step involves main reactants. *Khimicheskaya Fizika*. 2016;35(10):9–15 (in Russ.). <https://doi.org/10.7868/S0207401X1610006X>]
8. Kol'tsov N.I. Method for Solving the Inverse Problem of the Chemical Kinetics of Multistage Reactions. *Kinet. Catal.* 2020;61(6):833–838. <https://doi.org/10.1134/S0023158420040096> [Original Russian Text: Kol'tsov N.I. Method for Solving the Inverse Problem of the Chemical Kinetics of Multistage Reactions. *Kinetika i Kataliz*. 2020;61(6):783–788 (in Russ.). <https://doi.org/10.31857/S0453881120040127>]
9. Kol'tsov N.I. Method for Determining the Rate Constants of Chemical Reaction Stages in an Enclosed Gradientless Reactor. *Russ. J. Applied Chem.* 2020;93(10):1544–1552. <https://doi.org/10.1134/S1070427220100092> [Original Russian Text: Kol'tsov N.I. Method for Determining the Rate Constants of Chemical Reaction Stages in an Enclosed Gradientless Reactor. *Zhurnal Prikladnoi Khimii*. 2020;93(10):1474–1481 (in Russ.). <https://doi.org/10.31857/S0044461820100096>]
10. Kol'tsov N.I. Solving the Inverse Problem for Chemical Reactions Occurring in a Plug-Flow Reactor. *Theor. Found. Chem. Eng.* 2021;55(6):1238–1245. <https://doi.org/10.1134/S0040579521050237> [Original Russian Text: Kol'tsov N.I. Solving the Inverse Problem for Chemical Reactions Occurring in a Plug-Flow Reactor. *Teoreticheskie Osnovy Khimicheskoi Tekhnologii*. 2021;55(6):772–779 (in Russ.). <https://doi.org/10.31857/S0040357121050043>]
11. Kol'tsov N.I., Fedotov V.Kh. *Invarianty i obratnye zadachi khimicheskoi kinetiki (Invariants and Inverse Problems of Chemical Kinetics)*. Cheboksary: Chuvash University Publ.; 2022, 240 p. (In Russ.). ISBN 978-5-7677-3431-3

23. Выгодский М.Я. *Справочник по высшей математике*. М.: АСТ; 2019, 703 с. ISBN 978-5-17-117741-6
24. Аладьев В.З. *Системы компьютерной алгебры: Maple: Искусство программирования*. М.: Лаборатория Базовых Знаний; 2006, 792 с. ISBN 5-93208-189-9
25. Кольцов Н.И. Хаотические колебания в простейшей химической реакции. *Известия высших учебных заведений. Химия и хим. технол.* 2018;61(4-5):133–135. <https://doi.org/10.6060/tcct.20186104-05.5654>
26. Кольцов Н.И., Федотов В.Х. Хаотические колебания в простой гетерогенно-каталитической реакции. *Бутлеровские сообщения*. 2017;50(6):30–33. <https://elibrary.ru/zefnpr>
12. Katsman E.A., Sokolova I.V., Temkin O.N. Solution of reverse kinetic problem for oscillatory reactions. *Theor. Found. Chem. Eng.* 2014;48(2):175–179. <https://doi.org/10.1134/S0040579514020067>
[Original Russian Text: Katsman E.A., Sokolova I.V., Temkin O.N. Solution of reverse kinetic problem for oscillatory reactions. *Teoreticheskie Osnovy Khimicheskoi Tekhnologii.* 2014;48(2): 190–195 (in Russ.). <https://doi.org/10.7868/S0040357114020067>]
13. Gray P., Scott S.K. *Chemical Oscillations and Instabilities. Non-linear Chemical Kinetics*. Oxford: Clarendon Press; 1994, 470 p.
14. Alekseev B.V., Fedotov V.Kh., Kol'tsov N.I. Solution of the inverse problem of chemical kinetics for oscillatory reactions. *Theor. Found. Chem. Eng.* 2025. (In press).
15. Rössler O.E. Chaotic behavior in simple reaction system. *Z. Naturforsch.* 1976;A(31):259–264. <https://doi.org/10.1515/zna-1976-3-408>
16. Willamowski K.D., Rössler O.E. Irregular oscillations in a realistic abstract quadratic mass action system. *Z. Naturforsch.* 1980;35a:317–318. <https://doi.org/10.1515/zna-1980-0308>
17. Gaspard P. Rössler systems. In: *Encyclopedia of Nonlinear Science*. New York: Routledge; 2005. P. 808–811.
18. Stucki J., Urbanczik R. Entropy Production of the Willamowski-Rössler Oscillator. *Z. Naturforsch.* 2005;60a:599–607. <https://doi.org/10.1515/zna-2005-8-907>
19. Shuster G. *Determinirovanniy khaos: Vvedenie (Deterministic Chaos: An Introduction)*: transl. from Engl. Moscow: Mir; 1988, 248 p. (In Russ.). ISBN 5-03-001373-3
20. Kuznetsov S.P. *Dinamicheskii khaos (Dynamic Chaos)*. Moscow: Fizmatlit; 2006, 356 p. (In Russ.). ISBN 5-94052-100-2
21. Kiperman S.L. *Osnovy khimicheskoi kinetiki v geterogenom katalize (Fundamentals of Chemical Kinetics in Heterogeneous Catalysis)*. Moscow: Khimiya; 1979, 352 p. (In Russ.).
22. Zhabotinskii A.M. *Kontsentratsionnye avtokolebaniya (Concentration Self-Oscillations)*. Moscow: Nauka; 1974, 179 p. (In Russ.).
23. Vygodskii M.Ya. *Spravochnik po vysshei matematike (Handbook of Higher Mathematics)*. Moscow: AST; 2019, 703 p. (In Russ.). ISBN 978-5-17-117741-6
24. Alad'ev V.Z. *Sistemy komp'yuternoi algebrы: Maple: Iskustvo programmirovaniya (Computer Algebra Systems: Maple: The Art of Programming)*. Moscow: Laboratoriya Bazovykh Znaniy; 2006, 792 p. (In Russ.). ISBN 5-93208-189-9
25. Kol'tsov N.I. Chaotic oscillations in the simplest chemical reaction. *ChemChemTech = Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.* 2018;61(4-5):133–135 (in Russ.). <https://doi.org/10.6060/tcct.20186104-05.5654>
26. Kol'tsov N.I., Fedotov V.Kh. Chaotic oscillations in a simple heterogeneous catalytic reaction. *Butlerovskie soobshcheniya = Butlerov Communications*. 2017;50(6):30–33 (in Russ.). <https://elibrary.ru/zefnpr>

Об авторах

Алексеев Борис Васильевич, к.ф.-м.н., доцент кафедры физической химии и высокомолекулярных соединений, ФГБОУ ВО «Чувашский государственный университет имени И.Н. Ульянова» (428015, Россия, г. Чебоксары, Московский пр-т, д. 15). E-mail: a402539@yandex.ru. Scopus Author ID 7005563886, ResearcherID GNO-9997-2022, SPIN-код РИНЦ 7478-3333, <https://orcid.org/0000-0003-1971-0806>

Федотов Владислав Харитонович, к.х.н., доцент кафедры физической химии и высокомолекулярных соединений, ФГБОУ ВО «Чувашский государственный университет имени И.Н. Ульянова» (428015, Россия, г. Чебоксары, Московский пр-т, д. 15). E-mail: fvh@inbox.ru. Scopus Author ID 8863837600, ResearcherID B-6529-2017, SPIN-код РИНЦ 5111-9580, <https://orcid.org/0000-0001-8395-6849>

Кольцов Николай Иванович, д.х.н., профессор, заведующий кафедрой физической химии и высокомолекулярных соединений, ФГБОУ ВО «Чувашский государственный университет имени И.Н. Ульянова» (428015, Россия, г. Чебоксары, Московский пр-т, д. 15). E-mail: koltsovni@mail.ru. Scopus Author ID 7003771176, ResearcherID O-1354-2017, SPIN-код РИНЦ 4229-2226, <https://orcid.org/0000-0003-2264-1370>

About the Authors

Boris V. Alekseev, Cand. Sci. (Phys.-Math.), Associate Professor, Department of Physical Chemistry and Macromolecular Compounds, I.N. Ulyanov Chuvash State University (15, Moskovskii pr., Cheboksary, 428015, Russia). E-mail: a402539@yandex.ru. Scopus Author ID 7005563886, ResearcherID GNO-9997-2022, RSCI SPIN-code 7478-3333, <https://orcid.org/0000-0003-1971-0806>

Vladislav Kh. Fedotov, Cand. Sci. (Chem.), Associate Professor, Department of Physical Chemistry and Macromolecular Compounds, I.N. Ulyanov Chuvash State University (15, Moskovskii pr., Cheboksary, 428015, Russia). E-mail: fvh@inbox.ru. Scopus Author ID 8863837600, ResearcherID B-6529-2017, RSCI SPIN-code 5111-9580, <https://orcid.org/0000-0001-8395-6849>

Nikolay I. Kol'tsov, Dr. Sci. (Chem.), Professor, Head of the Department of Physical Chemistry and Macromolecular Compounds, I.N. Ulyanov Chuvash State University (15, Moskovskii pr., Cheboksary, 428015, Russia). E-mail: koltsovni@mail.ru. Scopus Author ID 7003771176, ResearcherID O-1354-2017, RSCI SPIN-code 4229-2226, <https://orcid.org/0000-0003-2264-1370>