

Можно заключить, что существующие аналитические критерии полезны лишь при грубой оценке границ областей единственности, однако их точность невысока, поскольку они включают значение концентрации, которое изменяется в пределах от нуля до единицы и сильно влияет на границы области единственности.

Поступила в редакцию 4/VI 1982

ЛИТЕРАТУРА

1. Я. Б. Зельдович. ЖФХ, 1948, 22, 1.
2. C. V. Heerden. Ind. Engng. Chem., 1953, 45, 1249.
3. T. Matsura, M. Kato. Chem. Engng. Sci., 1967, 22, 171.
4. В. П. Доронин, М. Г. Слинько, В. С. Шепелев. ТОХТ, 1978, 12, 4.
5. J. Sinkule, J. Votruba e. a. Chem. Engng. Sci., 1976, 3, 1.
6. P. F. Marconi and N. Vatistas. Chem. Engng. Sci., 1980, 35, 2305.
7. Д. Перлмуттер. Устойчивость химических реакторов. Л.: Химия, 1976.
8. Chemical Reactor Theory (Ed. L. Lapidus and N. Amundson) Prentice — Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1977.
9. Yu. Gupato and Yu. Ryazatsev. Chem. Engng. Sci., 1969, 24, 1441.
10. T. C. Ho. Chem. Engng. Sci., 1980, 35, 867.
11. V. Hlavacek and H. Hofmann. Chem. Engng. Sci., 1970, 25, 173.
12. V. Hlavacek and H. Hofmann. Chem. Engng. Sci., 1970, 25, 187.
13. V. Hlavacek, H. Hofmann, M. Kubicek. Chem. Engng. Sci., 1971, 26, 1629.
14. Kubicek, H. Hoffmann, V. Hlavacek. Chem. Engng. Sci., 1979, 34, 593.
15. A. Varma, C. Georgakis e. a. Methods in Appl. Mech. and Engng, 1976, 8, 319.
16. D. Luss. Chem. Engng. Sci., 1968, 23, 1249.
17. Т. И. Зеленьяк. Дифференциальные уравнения, 1966, 2, 206.
18. Т. И. Зеленьяк. Дифференциальные уравнения, 1967, 3, 20.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВСЕХ СТАЦИОНАРНЫХ РЕШЕНИЙ УРАВНЕНИЙ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ С ПОМОЩЬЮ МОДИФИЦИРОВАННОГО МЕТОДА ИСКЛЮЧЕНИЯ. I. АЛГОРИТМ

Л. А. Айзенберг, В. И. Быков, А. М. Кытманов
(Красноярск)

К настоящему времени известно достаточно много химических реакций, в которых экспериментально найдены критические явления (в том числе множественность стационарных состояний) в кинетической области, например окисление водорода [1], гидрирование СО [2], окисление NH_3 и SO_2 [3, 4], разложение NH_3 [5] и др. (см. обзоры [6—12]). С математической точки зрения это означает, что соответствующие кинетические модели имеют несколько стационарных решений. Среди них могут быть как устойчивые, так и неустойчивые. Последние также важно знать при анализе кинетических уравнений.

Как показали последние исследования (см., например, [13—17]), уравнения химической кинетики, отвечающие уже достаточно простым нелинейным механизмам реакций (в том числе гетерогенных каталитических), могут иметь несколько стационарных решений. Условия возникновения критических эффектов, связанные с особенностями структуры схемы химических превращений, изучались в [18—21]. Однако наряду с этими условиями важно уметь находить и сами решения, причем все. Стандартные численные методы решения систем нелинейных уравнений, основанные на различного рода итерационных процедурах, как правило, хорошо работают лишь в том случае, когда начальное приближение выбрано уже достаточно близко к корню системы. Дополнительные трудности возникают при поиске решений, характеристика устойчивости которых имеет тип «седло». Большие возможности дают методы, основанные на движении по параметру [22, 23]. Однако и они не гарантируют отыска-

ние всех стационарных решений в заданной области, если соответствующая система уравнений при варьировании параметров допускает «изолю» (многочисленные примеры таких ситуаций в моделях автоматического управления даны в [24], впервые на возможность существования «изолю» в уравнениях химической кинетики указал Я. Б. Зельдович [25]).

Специфика рассматриваемой проблемы для химической кинетики заключается в том, что при изотермических условиях и в рамках закона действия масс уравнения стационарности — это система алгебраических нелинейных уравнений, для которой нужно найти все решения в некоторой заданной области. Последняя обычно задается требованием положительности концентрации и выполнения некоторых балансовых соотношений. В данной работе на основе многомерного логарифмического вычета [26] предлагается алгоритм исключения неизвестных, позволяющий эффективно решать поставленную задачу.

Хорошо известен классический метод исключения Кронекера [27], дающий принципиальную возможность исключить из системы нелинейных алгебраических уравнений все переменные, кроме одного; он полезен для доказательства ряда теорем в теоретической математике, но неудобен для практических вычислений, так как становится слишком громоздким, если число уравнений больше двух. Наш метод, использующий подход, теоретически развитый в [28, 29; 26, § 21], приводит к меньшим вычислениям, что позволяет в случае трех уравнений исключать неизвестные даже без использования ЭВМ. Предлагаемый модифицированный алгоритм исключения позволяет получать результат в буквенном виде, что особенно привлекательно при необходимости многократно решать данную систему вследствие варьирования входящих в нее параметров. Результаты данной работы анонсированы в [30].

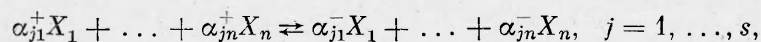
Кинетическая модель химического реактора идеального смешения имеет вид

$$\dot{c} = f(c, x) + q^0 c^0 - qc, \quad (1)$$

$$\dot{x} = g(c, x), \quad (2)$$

где c — вектор концентраций веществ, которые вводятся и выводятся из реактора; x — вектор концентраций веществ, по которым «протока» нет; $f(c, x)$, $g(c, x)$ — вектор-функции кинетических зависимостей, однозначно соответствующих механизму реакции; q^0 , q — объемные расходы реакционной смеси соответственно на входе и выходе из реактора. Модель (1), (2) отражает специфику гетерогенной каталитической системы, которая является, по существу, «полупроточной», т. е. по веществам в газовой фазе осуществляется обмен с окружающей средой, а по веществам на поверхности катализатора — нет. Для последних существует свой закон сохранения. При анализе кинетических моделей гетерогенно-каталитических реакций часто делается предположение о постоянстве концентраций веществ в газовой фазе. В этом случае рассматривается лишь система (2), где c — вектор параметров. Ее рассмотрением и ограничимся, хотя формальные стороны обсуждаемой проблемы для полной системы (1), (2) и для подсистемы (2) совершенно идентичны.

Для детального механизма, представляющего совокупность элементарных стадий



кинетическая модель (2) имеет вид

$$\dot{x} = \beta_1 w_1(x) + \dots + \beta_s w_s(x), \quad (3)$$

где $x = (x_1, \dots, x_n)$ — вектор концентраций промежуточных веществ X_i , $i = 1, \dots, n$; вектор $\beta_j = (\beta_{j1}, \dots, \beta_{jn})$, его координаты $\beta_{ji} = \alpha_{ji}^+ - \alpha_{ji}^-$; α_{ji}^+ — стехиометрические коэффициенты; скорость j -й стадии $w_j = w_j^+ - w_j^-$; w_j^\pm — скорости прямой и обратной реакций j -й стадии. В рамках закона действия масс

$$w_j^+(x) = k_j^+ x_1^{\alpha_{j1}^+} \dots x_n^{\alpha_{jn}^+}, \quad w_j^-(x) = k_j^- x_1^{\alpha_{j1}^-} \dots x_n^{\alpha_{jn}^-}, \quad (4)$$

где k_j^\pm — константы скоростей соответствующих реакций, в некоторые из которых как сомножители входят парциальные давления веществ в газовой фазе. Константы k_j^\pm аррениусовским образом зависят от температуры T , которая как и c , входит в число параметров модели (3). Система (3) должна быть дополнена законом сохранения массы

$$m_1 x_1 + \dots + m_n x_n = M, \quad (5)$$

где m_i — молекулярные веса веществ X_i ; M — общая масса системы, далее примем $M = 1$. Для простоты рассматриваем один закон сохранения (5). Если есть несколько линейно-независимых законов сохранения, то область определения системы (3) будет уже не $(n-1)$ -мерный симплекс

$$S = \{x = (x_1, \dots, x_n): x_i \geq 0, i = 1, \dots, n, m_1 x_1 + \dots + m_n x_n = 1\}, \quad (6)$$

а соответствующий многогранник реакции. Однако и это упрощение не принципиально, так как нас интересуют лишь нелинейные уравнения.

Стационарное состояние $x^* = (x_1^*, \dots, x_n^*)$ системы (3)–(5) определяется как решение системы алгебраических уравнений

$$\beta_{i1} w_1(x^*) + \dots + \beta_{is} w_s(x^*) = 0, \quad i = 1, \dots, n, \quad x^* \in S. \quad (7)$$

Как можно показать (см., например, [18]), симплекс S является инвариантным множеством для динамической системы (3), т. е. для любых начальных условий $x(0) \in S$ решения $x(t) \in S$ для всех $t > 0$. Это гарантирует существование по крайней мере одной стационарной точки $x^* \in S$.

В (5) из первых n уравнений достаточно взять какие-то $n-1$, так как в силу закона сохранения векторы β_j линейно-зависимы, а именно: $(\beta_j, m) = 0$, где $m = (m_1, \dots, m_n)$ — вектор молекулярных весов. Везде дальше для простоты знак * опускаем, так как будем анализировать лишь стационарные состояния.

Изложим схему предлагаемого алгоритма. Рассмотрим систему алгебраических уравнений

$$f_j = P_j(x) + Q_j(x) = 0, \quad j = 1, \dots, n, \quad (8)$$

где $x = (x_1, \dots, x_n)$ — точка n -мерного пространства (в общем случае комплексного); $P_j(x)$ — однородные многочлены старшей степени по совокупности переменных, имеющие только один общий нуль — начало координат. Произвольную систему нелинейных алгебраических уравнений, имеющую конечное число корней, можно преобразовать к виду (8) подводящей дробно-линейной заменой переменных (см., например, [27]). Обозначим k_j — степень многочлена $P_j(x)$ по совокупности переменных ($j = 1, \dots, n$). Система (8) имеет $N = k_1, \dots, k_n$ комплексных корней, если каждый корень считать столько раз, какова его кратность. В [29] с помощью многомерного логарифмического вычета получена формула для вычисления в замкнутом алгебраическом виде

$$\sum_{l=1}^N R(x^{(l)}), \quad (9)$$

где $R(x)$ — произвольный многочлен, $x^{(1)}, \dots, x^{(N)}$ — все корни системы (8). Зная выражение (2) для любого многочлена $R(x)$, можно получить довольно много информации о корнях системы (1). Например, указан новый метод исключения неизвестных, более простой, чем классический метод Кронекера, основанный на применении результатов. Метод исключения сводит отыскание корней системы (8) к определению корней многочленов от одного неизвестного, к хорошо изученной классической задаче. Кроме того, указаны простые алгоритмы, дающие ответы на вопросы: 1) о числе всех действительных корней системы (8), 2) о числе

корней системы (8), находящихся в заданном эллипсоиде $\{x = (x_1, \dots, x_n): a_1(x_1 - b_1)^2 + \dots + a_n(x_n - b_n)^2 \leq r^2\}$, в частности в шаре (подробнее см. в [26], в § 21).

Подробно опишем схему применения этого метода, позволяющего исключать неизвестные, применяя формулу, выписанную для вычисления (9), для системы меньшего числа уравнений, чем в (8). Эта схема фактически применялась в работе [31] (см. также [26], § 21).

Пусть $n = 3$. Система (8) примет вид

$$f_j(x, y, z) = 0, \quad j = 1, 2, 3. \quad (10)$$

Будем считать в (10) переменную z параметром и рассмотрим сначала систему

$$f_1 = 0, \quad f_2 = 0. \quad (11)$$

Многочлены f_j в (11) можно представить в виде

$$f_j(x, y, z) = P_j(x, y, z) + Q_j(x, y, z), \quad j = 1, 2,$$

где P_j — однородные многочлены степени k_j по совокупности переменных x, y , а степень многочленов Q_j по переменным x, y строго меньше, чем k_j ($j = 1, 2$). Пусть многочлены P_j ($j = 1, 2$) имеют лишь один общий нуль — начало координат для всех z , за исключением конечного числа. Последнее эквивалентно тому, что пара многочленов $P_1(x, 1)$ и $P_2(x, 1)$ (а также $P_1(1, y)$ и $P_2(1, y)$) взаимно-просты. Тогда система (11) имеет $N = k_1 k_2$ корней, если каждый корень считать столько раз, какова его кратность. Эти корни зависят от параметра z .

Определим теперь многочлены $a_{ij}(x, y)$ ($i, j = 1, 2$) так, чтобы

$$a_{11}P_1 + a_{21}P_2 = x^{k_1+k_2-1}, \quad a_{12}P_1 + a_{22}P_2 = y^{k_1+k_2-1}. \quad (12)$$

Здесь a_{ij} — однородные многочлены степени $k_2 - 1$, а a_{2j} — однородные многочлены степени $k_1 - 1$ ($j = 1, 2$). Из (12) получаем

$$a_{11}(x, 1)P_1(x, 1) + a_{21}(x, 1)P_2(x, 1) = 1 \quad (13)$$

и

$$a_{12}(1, y)P_1(1, y) + a_{22}(1, y)P_2(1, y) = 1. \quad (14)$$

Уравнения (13) и (14) разрешимы, поскольку многочлены $P_1(x, 1)$ и $P_2(x, 1)$ (а также $P_1(1, y)$ и $P_2(1, y)$) взаимно-просты. Решение этих уравнений можно найти с помощью алгоритма Евклида (см., например, [32], с. 140). Многочлены $a_{j1}(x, 1)$ и $a_{j2}(1, y)$ позволяют однозначно определить $a_{ij}(x, y)$. По многочленам $a_{ij}(x, y)$ строим функции

$$W_j = a_{j1}x^{-k_1+k_2-1} + a_{j2}y^{-k_1+k_2-1}, \quad j = 1, 2,$$

тогда

$$W_1P_1 + W_2P_2 = (\bar{x})^{k_1+k_2-1} + (\bar{y})^{k_1+k_2-1}.$$

Теперь к системе (11) применим формулу из [29] (см. также [26], § 21), которую приведем в несколько измененном виде. Пусть $R(x, y)$ — произвольный многочлен степени m по совокупности переменных. Тогда

$$\sum_{l=1}^N R(x^{(l)}, y^{(l)}) = \mathfrak{M} \left[R \Delta_1 \Delta_2 \sum_{\alpha_1 + \alpha_2 \leq m} (-1)^{\alpha_1 + \alpha_2} R_1^{\alpha_1} R_2^{\alpha_2} x^{\alpha_1(k_1+k_2-1)} y^{\alpha_2(k_1+k_2-1)} \right], \quad (15)$$

где $(x^{(l)}, y^{(l)})$ — корни системы (11), ($l = 1, \dots, N$), а Δ_1 — якобиан системы (11), т. е. $\Delta_1 = \frac{\partial (f_1, f_2)}{\partial (x, y)}$; определитель $\Delta_2 = \det \|a_{ij}\|_{i,j=1,2}$, многочлены $R_1 = a_{11}Q_1 + a_{21}Q_2$, $R_2 = a_{12}Q_1 + a_{22}Q_2$; \mathfrak{M} — линейный функционал, действующий на полиномы от x, y , $x^{-k_1+k_2-1}$, $y^{-k_1+k_2-1}$ по правилу

$$\mathfrak{M} [x^{\beta_1} y^{\beta_2} x^{-\alpha_1(k_1+k_2-1)} y^{-\alpha_2(k_1+k_2-1)}] = \begin{cases} 1, & \text{если } \beta_j = \alpha_j(k_1+k_2-1) + \\ & + k_1 + k_2 - 2 \quad (j = 1, 2), \\ 0 & \text{— в остальных случаях.} \end{cases}$$

Применим формулу (15) для вычисления выражений

$$s_j(z) = \mathfrak{M} \left[f_3^j \Delta_1 \Delta_2 \sum_{\alpha_1 + \alpha_2 < j k_3} (-1)^{\alpha_1 + \alpha_2} R_1^{\alpha_1} R_2^{\alpha_2} x^{-\alpha_1(k_1 + k_2 - 1)} y^{-\alpha_2(k_1 + k_2 - 1)} \right],$$

которые будем рассматривать как степенные суммы корней некоторого многочлена $\Omega_z(x)$, зависящего от одного переменного x и параметра z . Здесь $j = 1, \dots, N$. Пусть

$$\Omega_z(x) = x^N + b_1 x^{N-1} + \dots + b_{N-1} x + b_N.$$

Для отыскания коэффициентов $b_j = b_j(z)$ можно воспользоваться рекуррентной формулой Ньютона (см. [32]; с. 331)

$$j b_j = -s_j - s_{j-1} b_1 - \dots - s_1 b_{j-1}, \quad j = 1, \dots, N.$$

В частности, таким способом можно найти $b_N(z)$, который является с точностью до знака произведением значений многочлена f_3 в корнях системы (11). Нетрудно видеть, что $b_N(z) = 0$ для тех и только тех z , которые являются проекциями корней системы (10). Таким образом, из (10) исключая переменные x и y , получим одно уравнение

$$b_N(z) = 0. \quad (16)$$

Можно показать, что $b_N(z)$ является, вообще говоря, рациональной функцией z (т. е. отношением двух многочленов). Поскольку рассматривается не сама эта функция, а уравнение (16), то можно отбросить в (16) знаменатель и считать $b_N(z)$ в (16) многочленом. (Предполагается, что дробь $b_N(z)$ несократима.)

Такая функция $b_N(z)$ введена для любой системы уравнений (не обязательно алгебраической) в работе [33] (см. также [26], § 22) и названа результатом функции f_3 относительно системы (11).

Предположим, что корни многочлена (16) найдены любым классическим способом, который применяется для точного или приближенного отыскания корней многочлена одного переменного. Пусть эти корни $z^{(1)}, \dots, z^{(N)}$. Оказывается, если они найдены, то остальные координаты корней (x и y) найти, вообще говоря, легче, чем снова применять метод исключения. Соответствующий метод предложен в работе [34]. Он особенно прост, если все $z^{(1)}, \dots, z^{(N)}$ различны. Ограничимся этим предположением (случай, когда среди $z^{(1)}, \dots, z^{(N)}$ есть одинаковые, см. в [34]). Укажем, как находить координату x у корней системы (10). (Координата y находится аналогично.)

Пусть

$$b_N(z) = \sum_{\alpha=0}^N c_\alpha z^{N-\alpha}.$$

Рассмотрим также следующий многочлен:

$$P(z) = \sum_{\beta=1}^N a_\beta z^{N-\beta},$$

где коэффициенты a_β можно найти из соотношения

$$a_\beta = \sum_{\alpha=0}^{\beta-1} c_\alpha s_{\beta-\alpha-1,1}. \quad (17)$$

В (17) фигурируют степенные суммы корней системы (10) вида

$$s_{\gamma,1} = \sum_{l=1}^N (x^{(l)})^\gamma z^{(l)}, \quad (18)$$

которые можно определить по формуле, аналогичной (15), но написанной не для системы (11), а для (10) (об этой и более общих формулах для систем с любым числом переменных см. [29], [26], § 24). При применении метода для уравнений химической кинетики иногда можно поступить

проще. Мы рассматриваем такие уравнения, из которых легко исключить x или y , но трудно сделать дальнейший шаг: исключить еще одно неизвестное. Если нам удалось исключить y каким-либо элементарным путем, то получается система вида (11), где f_1 и f_2 — многочлены от x и z . Поэтому верна формула (15), в которой нужно y заменить на z . По этой формуле легко вычислить степенные суммы. Итак, можно найти оба многочлена $b_N(z)$ и $P(z)$. Тогда икс-овые координаты корней системы (10) получаем из равенства

$$x^{(l)} = \frac{P(z)}{\frac{d}{dz} b_N(z)} \Big|_{z=z^{(l)}}, \quad l = 1, \dots, N. \quad (19)$$

Аналогично можно найти икс-овые координаты корней системы (10).

Для применения этого способа на практике важно обсудить следующий вопрос: если корни уравнения (16) определены с некоторой точностью, то с какой точностью формула (19) позволяет рассчитать координаты $x^{(l)}$ корней системы (10) (и аналогичная формула — координаты $y^{(l)}$). Пусть $\tilde{z}^{(1)}, \dots, \tilde{z}^{(N)}$ — приближенные значения корней уравнения (16), причем $|\tilde{z}^{(l)} - z^{(l)}| < \varepsilon$, $l = 1, \dots, N$. Обозначим $\min_{l \neq j} |\tilde{z}^{(l)} - \tilde{z}^{(j)}| = n_1$, $\max_{j, l} |\tilde{z}^{(j)} - z^{(l)}| = n_2$. Пусть из вида системы (10) удалось установить, что $|x^{(l)}| \leq c_0$, $l = 1, \dots, N$. Тогда, если ε столь мало, что

$$(n_1 - \varepsilon)^{N-1} > \varepsilon(N-1)(n_2 + \varepsilon)^{N-2},$$

то приближенные и точные значения икс-овых координат корней системы (10) связаны неравенством

$$|\tilde{x}^{(l)} - x^{(l)}| \leq \varepsilon \frac{2c_0(n_2 + \varepsilon)^{N-2}(N-1)}{(n_1 - \varepsilon)^{N-1} - \varepsilon(N-1)(n_2 + \varepsilon)^{N-2}}.$$

В заключение заметим, что при рассмотрении уравнений химической кинетики система (10) имеет коэффициенты, зависящие от ряда параметров (T , c и др.). Можно показать, что рассмотренные ограничения (чтобы система (11) обладала свойством: многочлены P_1 и P_2 имеют лишь один общий нуль и т. д.) почти всегда выполняются. Более точно: параметры, для которых ограничения не имеют места, заполняют некую поверхность меньшей размерности в пространстве всех параметров.

Наконец, укажем, что при решении систем уравнений химической кинетики нужно, как правило, определять не все корни системы, а те положительные корни, которые лежат в симплексе S (6). Для определения таких корней полезно перед исключением сделать замену переменных $x_j \rightarrow x_j^2$, $j = 1, \dots, n$, (при этом симплекс перейдет в эллипсоид) и воспользоваться методом, описанным в [26], § 21 для определения числа корней, лежащих в эллипсоиде. Мы не имеем возможности описать здесь указанный метод из-за ограниченности объема статьи, к тому же иногда удобнее найти сначала все корни x , а затем выбрать из них те, которые принадлежат S . Кроме того, знание $x \notin S$ может быть полезным при изучении динамики системы (3).

Таким образом, предложен модифицированный метод исключения неизвестных из систем нелинейных алгебраических уравнений (в том числе применительно к химической кинетике). Для случая трех неизвестных метод позволяет делать исключение даже «вручную». Использование ЭВМ и особенно систем аналитических вычислений на ЭВМ [35] может существенно расширить возможности предлагаемого подхода. Он позволяет получать результат в буквенном виде и в большей степени становится эффективным при необходимости многократного решения исходной системы в силу варьирования входящих в нее параметров.

Поступила в редакцию 27/V 1982

ЛИТЕРАТУРА

1. Г. К. Боресков, М. Г. Слинько, А. Г. Филиппова. Докл. АН СССР, 1953, 92, 2, 353.
2. М. Г. Слинько, В. С. Бесков, А. Н. Дубяга. Докл. АН СССР, 1972, 204, 5, 1177.
3. В. В. Барелко, Ю. Е. Володин. Докл. АН СССР, 1973, 211, 5, 1373.
4. С. А. Жуков, В. В. Барелко.— В кн.: Кинетика-2 (материалы конф.). Т. 1. Новосибирск, 1975, с. 29.
5. J. Horiuti. *Anal. of the N.—Y. Acad. of Sciences*, Vol. 213, 1973.
6. R. A. Schmitz. A review—*Advances in Chem. Ser.*, 1975, 148, 156.
7. M. Scheintuch, R. A. Schmitz. *Catal. Rev.—Sci. Eng.*, 1977, 15, 1, 107.
8. В. Главачек. Неединственные и автоколебательные режимы в каталитических химических процессах. Препринт ИТМО АН СССР, Минск, 1977.
9. М. Г. Слинько, Г. С. Яблонский.— В кн.: Проблемы кинетики и катализа. Вып. 17. М.: Наука, 1978, с. 154.
10. В. В. Барелко, А. Г. Мержанов.— В кн.: Проблемы кинетики и катализа. Вып. 17. М.: Наука, 1978, с. 182.
11. Г. С. Яблонский, В. И. Быков.— В кн.: Механизм и кинетика каталитических процессов. Новосибирск, 1977, с. 83.
12. М. Г. Слинько. *Химическая промышленность*, 1979, 11, 21.
13. М. Г. Слинько, В. И. Быков и др. Докл. АН СССР, 1976, 226, 4, 876.
14. В. И. Быков, Г. С. Яблонский. *Кинетика и катализ*, 1977, 18, 5, 1305.
15. В. И. Быков, Г. С. Яблонский, В. И. Елохин. *Кинетика и катализ*, 1979, 20, 4, 1029.
16. V. I. Vukov, V. I. Elokhin, G. S. Yablonskii. *Reaction Kinetics and Catalysis Letters*, 1976, 4, 2, 191.
17. V. I. Vukov, G. S. Yablonskii, I. V. Kuznetzova. *Reaction Kinetics and Catalysis Letters*, 1979, 10, 4, 307.
18. В. И. Быков, Т. А. Акрамов, Г. С. Яблонский.— В кн.: Математические проблемы химии. Ч. 1. Новосибирск, 1975, с. 499.
19. А. И. Вольперт, А. Н. Иванова, Е. А. Полецкий.— В кн.: Математические проблемы химии. Ч. 1. Новосибирск, 1975, с. 151.
20. А. Н. Иванова. *Кинетика и катализ*, 1979, 20, 4, 1019.
21. А. Н. Иванова, Б. Л. Тарнопольский. *Кинетика и катализ*, 1979, 20, 6, 1541.
22. M. Kubicek. *ACM Trans. of Math. Software*, 1976, 2, 1, 98.
23. Н. К. Балабаев, Л. В. Луневская. Движение по кривой в n -мерном пространстве. Препринт НИ ВЦ АН СССР. Пущино, 1978.
24. K. Hirai, N. Sawai. *IEEE Trans. Automat. Control.*, 1978, 23, 5, 896.
25. Я. Б. Зельдович. *ЖТФ*, 1941, 6, 493.
26. Л. А. Айзенберг, А. П. Южаков. Интегральные представления и вычеты в многомерном комплексном анализе. Новосибирск: Наука, 1979.
27. Б. Л. Ван-дер-Варден. *Современная алгебра*. Ч. 2. М.—Л.: Гостехиздат, 1947.
28. Л. А. Айзенберг. Об одной формуле обобщенного многомерного логарифмического вычета и ее применении к решению систем нелинейных уравнений. Препринт. ИФ СО АН СССР, Красноярск, 1976.
29. Л. А. Айзенберг. Докл. АН СССР, 1977, 234, 3, 505.
30. Л. А. Айзенберг, В. И. Быков, А. М. Кытманов.— В кн.: Математические методы в химии. Т. 1. Ярославль: НИИМСХ, 1979.
31. Л. А. Айзенберг, А. К. Цих. *Сиб. мат. журн.* 1979, 20, 4, 699.
32. А. Г. Курош. *Курс высшей алгебры*. М.: Физматгиз, 1962.
33. А. П. Южаков, А. К. Цих. *Сиб. мат. журн.*, 1978, 19, 3, 693.
34. Л. А. Айзенберг, В. А. Болотов, А. К. Цих. Докл. АН СССР, 1980, 252, 1, 41.
35. В. П. Гердт, О. В. Тарасов, Д. В. Ширков. *УФН*, 1980, 130, 1, 113.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВСЕХ СТАЦИОНАРНЫХ РЕШЕНИЙ УРАВНЕНИЙ ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ С ПОМОЩЬЮ МОДИФИЦИРОВАННОГО МЕТОДА ИСКЛЮЧЕНИЯ. II. ПРИМЕНЕНИЯ

Л. А. Айзенберг, В. И. Быков, А. М. Кытманов, Г. С. Яблонский
(Красноярск)

В первой части работы [1] описана общая схема применения модифицированного метода исключения для определения всех стационарных решений уравнений химической кинетики. В данной работе по возможности подробно иллюстрируется применение предлагаемого алгоритма на примерах нелинейных систем алгебраических уравнений, соответствующих различным модельным механизмам каталитического окисления водорода. Отдельные такие механизмы рассматривались в работах [2—5].