

DOI: 10.15643/mmcct-2023-7

Прямые и обратные задачи кинетики сложных химических реакций

В. И. Быков

Институт биохимической физики им. Н. М. Эмануэля РАН
Россия, 119334 г. Москва, ул. Косыгина, 4.

Email: vbykov@mail.ru

Дано краткое описание вклада профессора С.И. Спивака в развитие работ по математическому моделированию сложных химических реакций.

Ключевые слова: математическое моделирование, химическая кинетика, сложные химические реакции.

Важным разделом химической кинетики является решение прямых и обратных задач. В данном сообщении мы остановимся на решении обратных задач, рассмотрению которых значительное внимание было уделено доктором физико-математических наук Семёном Израилевичем Спиваком.

Базовая кинетическая модель сложной химической кинетики имеет вид

$$\frac{dx}{dt} = f(x, p),$$

где x – вектор концентраций веществ реагентов, p – вектор параметров (температура, давление и т.п.), f – функция, отвечающая механизму химических превращений. Решение прямых задач химической кинетики также представляет собой серьезную проблему. Но мы сконцентрируем внимание на обратных задачах: определение по экспериментальным данным механизма химических превращений и соответствующих кинетических параметров. Именно в этой области работал С.И. Спивак.

С.И. Спивака я знал еще по совместной учебе в Новосибирском государственном университете (НГУ). Примерно на третьем курсе мехмата НГУ к нам из Института катализа СО АН пришел А.В. Федотов и пригласил нас математиков писать дипломный проект по химии. Он говорил, что это очень важно и перспективно. На его призывы

откликнулось несколько человек, в том числе С.И. Спивак, В.И. Быков, Е.А. Иванов. Придя в Институт катализа в отдел моделирования, который в то время возглавлял член-корреспондент АН М.Г. Слинько, мы определились с темами наших дипломных проектов: В.И. Быков – оптимизация, Е.А. Иванов – устойчивость, С.И. Спивак – обратные задачи.

Значительно позднее, уже защитив диссертации (С.И. Спивак и В.И. Быков свои докторские диссертации защищали в Черноголовке Московской области, где уже сформировался крупный научный центр), мы провели ряд семинаров по математическим проблемам химической кинетики.



На берегу реки Енисей на фоне комфортабельного теплохода «Антон Чехов», 1982 г. Слева направо: С.И. Спивак, Э.М. Царёва, В.И. Быков, Г.С. Яблонский.

В то время названная тематика была и важна, и актуальна. Надо сказать, что С.И. Спивак остался верен выбранному направлению всю жизнь. Значительный вклад в решение обратных задач внесла уфимская школа в данной области. Здесь действовал диссертационный совет, где защищались важные и интересные научные работы в

обозначенном направлении (кандидатские и докторские диссертации). Например, в качестве оппонента выступал известный специалист в области синергетики Г.Г. Малинецкий.

Научная школа С.И. Спивака развивается и растет: пишутся научные работы, защищаются кандидатские и докторские диссертации, проводятся научные конференции, решаются актуальные для науки и химической промышленности задачи. Уфимская школа по математической химии неразделима с именем С.И. Спивака.