

## **М.А.ЛАВРЕНТЬЕВ И МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ КАТАЛИЗА**

М. Слинко,  
НИФХИ им. Я. Карпова, Москва;  
В. Пармон,  
Институт катализа  
им. Г. К. Борескова СО РАН.

**Михаил Алексеевич Лаврентьев был разносторонне одаренным человеком. Но мы хотели бы остановиться только на одной из областей его деятельности, точнее, на той выдающейся роли, которую он сыграл в становлении очень важной составляющей современного катализа -- его математических основ.**

Начиная рассказ, вспомним, что в первом Постановлении СМ СССР об организации Сибирского отделения Академии наук СССР (май 1957 г.) в составе новосибирского Академгородка не значились ни Институт катализа, ни Новосибирский институт органической химии. Это не было случайным: по мнению целого ряда ведущих химиков АН СССР, эти два института не могли быть академическими, так как предполагалась их глубокая связь с промышленностью. Было предложено организовать оба института в Иркутске.

Выражаясь современным языком, можно предположить, что среди химиков Академии наук того поколения нередко царило неправильное понимание соотношения фундаментальной и прикладной науки, преобладало "линейное мышление", в котором, в частности, роль математики в химии сводилась только к проведению расчетов. Интересно, что в момент организации химфака (ныне -- факультета естественных наук) Новосибирского государственного университета при приеме студентов были отменены экзамены по математике.

Данное отношение химиков к математике не совпадало с мировоззрением М. Лаврентьева. Для него все точное естествознание, включая математику и технику, существовало как единое целое, и он регулярно подчеркивал огромное значение математики для развития всех естественных, технических и экономических наук. Редко встречаются ученые, так глубоко и полно владеющие не только своей областью науки, но и обладающие широким кругозором, огромной энергией в научно-организационной деятельности. Никто отчетливее и острее М. Лаврентьева не понимал тогда огромных возможностей математики и ЭВМ для развития науки, техники и экономики.

Стиль и организация науки в СО АН СССР во многом отличались от уклада московской научной деятельности. В Сибири формировались научные коллективы с новыми идеями, сохраняя при этом лучшие традиции русской науки: высокий научный уровень, объединение людей различных взглядов, различного возраста, взаимодополняющих друг друга, глубокая связь с актуальными проблемами жизни общества. Такой подход давал возможность проводить междисциплинарные исследования, быстро продвигаться в решении важнейших научно-технических проблем и задач. Все это способствовало созданию научных школ, определяющих высокий научный уровень российской науки.

В 1957--58 гг. в стране осуществлялись крупные мероприятия по развитию отраслей химической промышленности, обеспечивавших многочисленные потребности людей, устойчивое развитие общества и национальную безопасность страны. Связано это в решающей степени с развитием теории и практики промышленного катализа.

Катализ -- одна из самых наукоемких и сложных областей химии, физической химии и химической технологии. Развитие катализа без опоры на единство теории и практики, единство фундаментальных и прикладных проблем нередко приводило в прошлом с одной стороны -- к абстрактному наукообразию, а с другой -- к грубому эмпиризму при решении практических задач. Поэтому и было предложено организовать Институт катализа, в котором предусматривалось бы решение следующих задач:

1. Обеспечение единства теории и практики катализа, решение его фундаментальных и прикладных проблем.
2. Создание теории катализа, сочетающей физико-химическую истину с математической строгостью.
3. Широкое применение физических методов исследования процессов, начиная с молекулярного уровня.
4. Изыскание новых высокоэффективных катализаторов и определение их активности в безградиентных условиях.
5. Математическое моделирование реакций, процессов и реакторов на основе исследования кинетики и механизма реакций и ЭВМ.
6. Приготовление опытно-промышленных партий катализаторов.

М.Лаврентьев понимал важность и своевременность перечисленных задач, не потерявших свою актуальность и в настоящее время. Поэтому во время майского (1958 г.) Пленума ЦК КПСС он согласился с предложением включить в решение Пленума пункт об организации Института катализа в составе новосибирского Академгородка.

После создания института М.Лаврентьев активно содействовал привлечению к проблемам катализа академика С.Соболева и возглавляемый им Институт математики. Уже в 1959 г. было закончено математическое моделирование каталитического процесса и реактора для окисления двуокиси серы в трехокись серы в производстве серной кислоты с использованием ЭВМ типа М-20. А в недостроенном еще здании Института катализа была смонтирована большая аналоговая ЭВМ МН-14. Позднее, всего за 9 месяцев, институту построили специальный корпус для обеспечения математического моделирования.



На снимке из архива Института катализа: заседание Бюро Президиума СО АН в доме М.А.Лаврентьева с участием Г.Борескова и С.Беляева (1961 год).

Математические модели каталитических процессов представляют собой нелинейные системы дифференциальных уравнений, содержащих помимо обыкновенных уравнений также уравнения с частными производными параболического и гиперболического типов. До середины шестидесятых годов не существовало качественной теории уравнений, описывающих каталитические системы с распределенными параметрами.

Понимание каталитических процессов на основе качественных методов стоит намного выше того, что можно достичь с помощью традиционных для катализа математических подходов. Отличительная особенность качественного анализа -- здесь рассматриваются все возможные решения при всех возможных параметрах, и изучаются особые свойства этих решений (устойчивость и др.). Результаты такого анализа позволяют не только объяснить, но и прогнозировать возможное поведение каталитических систем.

Сегодня отечественные химики-каталитики должны быть особенно благодарны академику С.Соболеву и проф. Т.Зеленяку с сотрудниками из Института математики СО РАН за их огромную работу по созданию математических основ моделирования каталитических процессов и, главное, за предвидение острой необходимости решения проблем качественного анализа математических задач катализа.

Конечно, не все достижения прошедших лет и направления математических исследований принадлежат самому М.Лаврентьеву, Но именно он вызвал к активной жизни это новое направление, опирающееся, с одной стороны, на современную математику, а с другой, -- на ЭВМ и вычислительный эксперимент.

Сравним ситуацию в катализе 1957 г. с современной ситуацией. Что, в частности, было достигнуто в ходе совместной работы Института катализа и Института математики?

Показана возможность множественности стационарных состояний нелинейных каталитических систем, в то время как долгое время существовало мнение о единственности стационарных состояний и вытекающего из этого вывода следствия об единственности и поэтому постоянстве состояния поверхности катализатора. Катализатор и реакционная смесь являются единой системой и оказывают взаимовлияние друг на друга.

Выведены критерии устойчивости стационарных состояний. Показана большая роль неустойчивых состояний в наблюдаемых явлениях самоорганизации в каталитических системах. Необходимо отметить, что долгое время вместо понимания важности явления устойчивости стационарного состояния развивалось понятие температур зажигания и погасания катализатора.

Показана возможность существенного различия в механизме протекания каталитического процесса вблизи и вдали от термодинамического равновесия. До этого общепринятым было мнение, что механизм реакции одинаков, и на этом основании отрицались нелинейные явления типа автоколебаний и скорости реакции автоволновых процессов.

Создана научная методология масштабного перехода от лабораторных исследований к промышленным условиям. Прежде переход осуществлялся только путем создания сложной многоступенчатой системы пилотных, опытных и опытно-промышленных установок. При такой системе внедрение новых технологий в промышленность требовалось не менее 10 лет и значительных материальных затрат.

Открыта химическая турбулентность (хаотические автоколебания в реакции).

Созданы основы нелинейной динамики реакций, процессов и реакторов, являющейся теорией и практикой промышленного катализа, начиная с молекулярного уровня.

Создан ряд новых катализаторов высокой избирательности и активности, разработаны новые каталитические процессы и реакторы с организованной структурой.

В середине 60-х годов М.Лаврентьев обратил внимание одного из авторов данной статьи (М.Слинько) на возможность возникновения отрывных течений в реакторах. Отрыв возникает в каналах уступом при входе реакционной смеси в реактор и выходе ее из реактора, а также при обтекании внутренних конструктивных деталей. Наличие отрывных течений вызывает в ряде случаев изменение направления движения реакционной смеси через слой катализатора на обратное. Возникновение отрывных течений снижает эффективность работы реактора и существенно влияет на аэродинамическое моделирование реакторов.

Данное замечание Михаила Алексеевича оказалось особенно важным в последние годы, когда начались широкие эксперименты с реакторами, использующими блочные катализаторы с высокими скоростями потока реакционной среды, и широкое практическое использование таких реакторов.

Обычные термины не очень пригодны для оценки деятельности и характеристики М.Лаврентьева в целом. Он был одновременно и классиком науки, и ее романтиком, щедро делившимся с окружающими своими идеями и догадками. При этом он отличался партийностью, прямоотой, честностью и заслужил огромное уважение ученых Академгородка и всех других ученых, преданных отечественной науке.

стр.