

Л. Р. Гареева (Уфа, БашГУ). Проверка корректности графа сложной химической реакции.

Работа, представленная данным сообщением, посвящена рассмотрению проблемы существования химической реакции с нетривиальными стадиями, соответствующей заданному ориентированному графу, вершины которого отвечают веществам, участвующим в реакции. А. И. Вольпертом [1], как известно, был предложен способ изображения сложной химической реакции в виде двудольного ориентированного графа, вершины которого соответствуют элементарным стадиям и веществам, участвующим в реакции. Графы такого типа были достаточно подробно рассмотрены в [2]. Большой же интерес представляют графы, вершины которых соответствуют только веществам (т.е. вершины, отвечающие реакциям, в построении графа не участвуют) [3–5].

В ходе данной работы был разработан алгоритм проверки корректности такого графа. Было показано, что восстановление исходной химической реакции возможно в предположении, что каждой стадии соответствует максимальный двудольный подграф. Приведены примеры графов, которые не могут соответствовать никакой химической реакции с нетривиальными стадиями.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Вольперт А.И., Худяев С.И. Анализ в классах разрывных функций и уравнения математической физики. М.: Наука, 1975.
2. Лебедева С. Л. Дисс. на соискание уч. ст. канд. матем. наук. Агрегирование механизмов сложных химических реакций. Уфа: 1994.
3. Яблонский Г. С., Спивак С. И. Математические модели химической кинетики. М.: Знание, 1977.
4. Гареева Л.Р. Химические реакции на языке марковских процессов. — Обозрение прикл. и промышл. матем., 2004, т. 11, в. 3, с. 535.
5. Гареева Л.Р. Проблема однозначности восстановления сложной химической реакции по заданному графу. — Обозрение прикл. и промышл. матем., 2005, т. 12, в. 3, с. 717.