

РЕФЕРАТ

Магістерська дисертація містить: 112 сторінок, 19 рисунків, 24 таблиць, 3 додатка, 23 джерела за переліком посилань.

МОДЕЛЮВАННЯ, ЧУТЛИВІСТЬ, КОЛИВАННЯ, РЕАКЦІЯ БІЛОУСОВА-ЖАБОТИНСЬКОГО, КІНЕТИКА, КОЕФІЦІЄНТИ ЧУТЛИВОСТІ, ПРОГРАМНЕ ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ

Об'єкт дослідження – комп'ютерне моделювання кінетики автоколивальних процесів на прикладі реакції Білоусова-Жаботинського, що каталізується фероїном.

Мета роботи – розробка програмного забезпечення для моделювання чутливості складних хімічних систем до зовнішнього впливу при розрахунках реакторів.

Результатом даної роботи є програмний продукт, який можна використовувати для моделювання та аналізу автоколивальних систем до зовнішнього впливу при розрахунках хімічних реакторів. Також на основі досліджень, було розроблено Startup.

Практичне значення отриманих результатів. Дослідження чутливості різноманітних режимів перебігу автоколивальної хімічної реакції Білоусова-Жаботинського можуть бути використані в аналітичних цілях та для моделювання деяких екологічних та біологічних процесів.

Актуальність роботи. На сьогоднішній день математичне моделювання стає необхідним для дослідження хімічних систем, що дозволяє не тільки пояснити існуючий експериментальний матеріал, але і прогнозувати нові ефекти. Особливо це відноситься до систем зі складною поведінкою, які демонструють критичні явища і автоколивання.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Магістерська дисертація виконувалась: в рамках договору про науково-технічне співробітництво між КПІ ім. І. Сікорського та Інститутом фізичної хімії ім. Л.В. Писаржевського НАН України, згідно до завдань Ініціативної науково-дослідної роботи кафедри КХТП «Інтелектуальна система для розроблення еко-безпечних процесів знешкодження шкідливих викидів»(№держреєстрації 0117U007338, 2017-2021).

Апробація результатів дисертації. Основні результати роботи доповідались на VII Міжнародній конференції студентів, аспірантів та молодих вчених з хімії та хімічної технології (Київ, 2018), VI Міжнародній науково-практичній конференції «Комп'ютерне моделювання в хімії і технологіях» (Київ, 2018), II Всеукраїнської студентської науково-практичної конференції з міжнародною участю (Київ, 2018).

Публікації. За матеріалами магістерської дисертації опубліковано 1 статтю та 2 тез доповідей в збірниках матеріалів конференцій.

SUMMARY

Master's graduate work consists of 112 pages, 19 figures, 24 tables, 3 addition, 23 sources.

MODELING, SENSITIVITY, FLUCTUATIONS, BELOUSOV-JABOTINSKY REACTION, KINETICS, SENSITIVITY COEFFICIENTS, SOFTWARE

The object of the study is the computer modeling of the kinetics of self-oscillating processes by the example of the Belousov-Zhabotinsky reaction catalyzed by ferroin.

The aim of the work is to develop software for modeling the sensitivity of complex chemical systems to external influences in the calculations of reactors.

The result of this work is a software product that can be used to simulate and analyze self-oscillating systems to external influences in the calculations of chemical reactors. Also based on research, Startup was developed.

The practical significance of the results. Investigation of the sensitivity of various flow regimes of the Belousov-Zhabotinsky auto-oscillatory chemical reaction can be used for analytical purposes and for modeling some environmental and biological processes.

Urgency of work. Today, mathematical modeling becomes necessary for the study of chemical systems, which will not only explain the existing experimental material, but also predict new effects. This is especially true for systems with complex behavior that demonstrate critical phenomena and self-oscillations.

Connection between work and scientific programs, plans and topics. Master's thesis was accomplished: in the scope of the agreement on scientific and technical cooperation between I. Sikorsky KPI. and L. V. Pisarzhevsky Institute of physical chemistry NAS, Ukraine, according to the tasks of the Initiative research work of the "KHTP" Department of "Intelligent system for the development of eco-safe processes of neutralization of harmful emissions" (state registration number 0117U007338, 2017-2021).

Approbation of the dissertation results. The main results of the work were reported at the VII International students', postgraduates' and young scientists' conference in chemistry and chemical technology (Kyiv, 2018), VI International scientific and practical conference "Computer modeling in chemistry and technology" (Kyiv, 2018), II Ukrainian student scientific and practical conference with international participation (Kyiv, 2018).

Publications. According to the materials of the master's thesis 1 article and 2 abstracts were published in conference proceedings.