



ЛАБОРАТОРИЯ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

Вторник, 10 июня 2014 г. в 15.00

Ком. 310

Д.В. Вервейко

(НИЦ физики конденсированного состояния ФГБОУ ВПО
«Курский государственный университет»)

**Математическое моделирование эффектов конечного
объема при автоволновых процессах
в химическом реакторе**
(по материалам кандидатской диссертации)

Работа посвящена разработке математической модели формирования автоволн и их пространственной динамики в открытом пространственном химическом реакторе на примере модели гликолитической реакции Селькова с кубическим автокатализом. Предложен алгоритм исследования влияния конечномерных пространственных характеристик на процессы структурообразования на основе адаптированных к рассматриваемой задаче численных методов и их программного обеспечения. Реализация эффективных численных методов и алгоритмов выполнена в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента и систем компьютерного имитационного моделирования.

Исследованная модель возникновения бегущих гликолитических автоволн в открытом пространственном реакторе и программное обеспечение, разработанное для их численного моделирования, могут быть использованы для планирования дальнейших биофизических экспериментов и разработки биотехнологических процессов. Выявленные при исследовании распределенной гликолитической модели закономерности образования фазовых кластеров позволяют разрабатывать модели регуляции подобных процессов на основе явлений пространственной синхронизации.

Mathematical modelling of final volume effects at autowave processes in a chemical reactor

(materials of a PhD thesis)

D.V. Verveiko

(Research Centre of condensed matter physics, Kursk State University)

The work is devoted to the development of a mathematical model of generating autowaves and their spatial dynamics in an open spatial chemical reactor on an example of the model of glycolytic Selkov reaction with cubic autocatalysis. An algorithm of studying the influence of the finite-dimensional spatial characteristics on processes of structurization is offered on the basis of numerical methods adapted for the considered problem and their software. Realization of effective numerical methods and algorithms is executed as complexes of problem-oriented programs for carrying out computing experiment and systems of computer imitating modelling.

The investigated model of appearing running glycolytic autowaves in the open spatial reactor and the software developed for their numerical simulation, can be used for planning further biophysical experiments and developments of biotechnological processes. The laws of formation of phase clusters revealed at the study of a distributed glycolytic model allow one to develop models of regulation of similar processes on the basis of the phenomena of spatial synchronization.