

Szakdolgozat kivonat

Adott tulajdonságú indukáló reakciók keresése szimbolikus és numerikus módszerekkel kinetikai differenciálegyenletekhez

Zsámboki Bettina

Szakdolgozatomban a polinomiális differenciálegyenletek kémiai alkalmazásai közül mutatok be néhányat (reakciókinetika, rekeszrendszerek). Ehhez definiálok a reakció és a rekeszrendszer fogalmát, valamint a legfontosabb jellemzőiket.

Létezik olyan algoritmus (például a kanonikus realizáció módszere), amellyel adott (bizonyos feltételeket kielégítő) differenciálegyenlet-rendszerhez egy indukáló reakció könnyen megadható. Azonban a reakciók között vannak speciális tulajdonságúak (megfordíthatóak és gyengén megfordíthatóak), amelyek reakciókinetikai és matematikai szempontból rendkívül érdekes tulajdonságokkal bírnak, ugyanakkor egyéb feltételek szükségesek az ilyen típusú indukáló reakció létezésére.

Számos kérdés merült fel az eddigi ismeretek alapján, ezek közül leginkább az inverz feladatoknak van kiemelkedő jelensége, amikor egy adott differenciálegyenlet-rendszerhez keresünk bizonyos tulajdonságú indukáló reakciót vagy rekeszrendszert, ugyanis M anyagfajta esetére máig sok nyitott kérdés áll fenn.

A megoldások során a szakirodalmon túl a *Mathematica* program *Reaction-Kinetics* bővítményét használtam reakciók vizsgálatához illetve függvények írásához. $M = 1$ anyagfajta esetére sikerült egy szükséges és elégséges feltételt találni megfordítható realizáció létezésére, ami elősegítheti az általános megoldáshoz vezető utat.