

Diplomamunka kivonat

Algebrai módszerek polinomiális differenciálegyenletek vizsgálatában

Virágh Eszter

Konzulensek: Dr. Drexler Dániel András, Dr. Tóth János

A dolgozatban a reakciók hőmérséklet-szabályozással való irányíthatóságával, speciálisan erősen elérhetőségével foglalkoztam. Megvizsgáltam, milyen feltételeket kell biztosítani ahhoz, hogy egy kémiai reakció erősen elérhető legyen. A kémiai rendszerek viselkedése nemlineáris polinomiális differenciálegyenlet-rendszerekkel írható le. Az erősen elérhetőség eldöntéséhez a modellben szereplő egyenletek és a bemenet által generált Lie-algebra dimenzóját vizsgáltam. A vizsgált rendszerek bemenetének a hőmérséklet változtatását tekintettem.

A dolgozat elején áttekintettem az erős elérhetőséghez szükséges fogalmakat, tételeket. Definiáltam a koncentrációk hatását leíró A és a reakciósebességi együtthatók megfelelő deriváltjait tartalmazó D mátrixot, majd ezek segítségével adtam feltételt az erősen elérhetőségre.

Ezt követően megvizsgáltam, hogy speciális alakú kémiai reakciókhoz további reakciólépéseket kapcsolva hogyan változik a folyamat erősen elérhe-

tósége. Ehhez definiáltam a D_R reakciódinamikai mátrixot. Először az elágazó reakciólépések hatását vizsgáltam az erősen elérhetőségre. Beláttam, hogy általános alakú reakcióhoz további reakciólépést kapcsolva elágazásként a folyamat erősen elérhető, ha a folyamathoz tartozó reakciódinamikai mátrix teljes rangú és a reaktáns vegyületek koncentrációi pozitívak. Ezután a csatoló reakciólépések hatását vizsgáltam speciális alakú reakciók erősen elérhetőségére. Először soros reakciókat tekintettem kiindulásként. Megmutattam, hogy a soros reakcióhoz csatoló reakciólépést kapcsolva a rendszer majdnem mindenütt erősen elérhető, ha a reaktáns vegyületek koncentrációi pozitívak és a megfelelő reakciódinamikai mátrix teljes rangú. Második lépésben párhuzamos reakciók esetében vizsgáltam a csatoló reakciólépés hatását az erősen elérhetőségre. Beláttam, hogy csatoló reakciólépést kapcsolva a párhuzamos reakcióhoz a folyamat majdnem mindenütt erősen elérhető, ha a kiindulási anyagfajta koncentrációja pozitív és a megfelelő reakciódinamikai mátrix teljes rangú.

Végül általános alakú kémiai reakciók erősen elérhetőségét vizsgáltam. Feltételt adtam a D_R reakciódinamikai mátrix teljes rangúságára, majd beláttam, hogy a kémiai reakciók a hőmérséklet változtatásával erősen elérhetőek, ha a reaktáns anyagfajták koncentrációi pozitívak és az egyes reakciólépésekhez tartozó aktivációs energiák pozitívak és különböznek.