Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0406U002172

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 30-05-2006

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Клименко Олексій Вікторович
2. Klymenko Oleksiy Victorovich

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: ні

Шифр наукової спеціальності: 01.05.02

Назва наукової спеціальності: Математичне моделювання та обчислювальні методи

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 27-04-2006

Спеціальність за освітою: 8.08.02.02

Місце роботи здобувача: Харківський національний університет радіоелектроніки

Код за ЄДРПОУ: 02071197

Місцезнаходження: 61166, м. Харків, пр. Науки, 14

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 64.180.01

Повне найменування юридичної особи: Інститут проблем машинобудування ім. А. М. Підгорного Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534570

Місцезнаходження: вул. Пожарського 2/10, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61046, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

Повне найменування юридичної особи: Харківський національний університет радіоелектроніки

Код за ЄДРПОУ: 02071197

Місцезнаходження: 61166, м. Харків, пр. Науки, 14

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 27.29.15

Тема дисертації:

1. Математичне та комп'ютерне моделювання фотохімічних процесів та визначення їх кінетичних параметрів
2. Mathematical and computer modelling of photochemical processes and determination of their kinetic parameters

Реферат:

1. Об'єкт дослідження: гомогенні хімічні реакції, що задаються системами стехіометричних рівнянь, та фотохімічні експериментальні дані. Мета: математичне моделювання гомогенних хімічних процесів та визначення невідомих значень основних параметрів фотохімічного експерименту. У роботі застосовані чисельні методи розв'язання векторних задач Коші та методи мінімізації. Теоретичні результати включають підходи для апріорного визначення жорсткості задачі Коші та необхідної межі локальної похибки чисельного методу розв'язання ЗДР. Практичним результатом є розроблена програма "KinFitSim". Наукова новизна роботи: 1) узагальнена математична модель схеми гомогенних хімічних реакцій у вигляді задачі Коші для системи ЗДР; 2) підхід для визначення межі локальної похибки чисельного методу розв'язання ЗДР, що забезпечує збереження фізичного змісту чисельним розв'язком; 3) критерій для апріорного визначення жорсткості задачі Коші за початковими даними; 4) підхід до розв'язання задачі параметричної ідентифікації із

застосуванням одночасно декількох наборів даних; 5) програма "KinFitSim" для автоматичного моделювання будь-якої схеми хімічних реакцій та визначення кінетичних параметрів. "KinFitSim" впроваджено у 5 провідних наукових установах світу. Результати роботи можуть бути використані при розв'язанні ряду фізико-хімічних та біохімічних задач, пов'язаних з гомогенними хімічними процесами.

2. The research subject comprises homogeneous chemical reactions represented by stoichiometric equation systems and photochemical experimental data. The research objective is the mathematical and computer modelling of homogeneous chemical processes and the determination of unknown values of key parameters of a photochemical experiment. Numerical methods for ODEs and numerical minimisation methods have been utilised. Theoretical results of this study include the approaches for the a priori determination of stiffness of a Cauchy problem and the determination of the necessary local error limit of the applied numerical ODE solver. A practical result is the developed software "KinFitSim". The scientific novelty of this study is: 1) the generalised mathematical model of a homogeneous chemical process in the form of a Cauchy problem for an ODE system; 2) the approach for the determination of the local error limit of a numerical ODE solver that provides physically meaningful numerical solutions; 3) the criterionfor determining the stiffness of a given Cauchy problem from initial data; 4) the approach to parameter identification utilising simultaneously several datasets; 5) the software "KinFitSim" which allows modelling homogeneous chemical reactions and identification of their parameters. "KinFitSim" is being used in 5 major scientific institutions worldwide. The results of this study may be applied to the solution of various physicochemical and biochemical problems involving homogeneous chemical processes.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки:

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Підсумки дослідження:

Публікації:

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації:

Зв'язок з науковими темами:

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Свірь Ірина Борисівна

2. Svir Irina Borisovna

Кваліфікація: д.т.н., 01.05.02

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Яковлев Сергій Всеволодович
2. Яковлев Сергій Всеволодович

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.05.02

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Дікарєв Вадим Анатолійович
2. Дікарєв Вадим Анатолійович

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.03

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Стоян Ю.Г.
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Стоян Ю.Г.
Відповідальний за підготовку облікових документів	
Реєстратор	
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Т.А.