

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Факультет прикладной математики и информатики

Кафедра вычислительной математики

Аннотация к дипломной работе

Компьютерное моделирование уравнений химической кинетики

Сахарчук Станислав Дмитриевич

Научный руководитель - доцент кафедры ВычМат, кандидат физ.-мат. наук,
Тетерев А.В.

Минск 2019

РЕФЕРАТ

Дипломная работа, 26 страница, 2 иллюстрации, 2 таблицы, 8 источников, 4 приложения.

Ключевые слова: химическая кинетика, уравнения химической кинетики, энергия реакции, скорость протекания реакции и константы скорости, метод Гира, Python, многошаговый метод Гира.

Объект исследования – алгоритм реализации решения систем химических уравнений.

Цель работы – разработка алгоритма решения жестких система химических уравнений.

В результате – разработан и программно реализован новый алгоритм для решения жестких систем химических уравнений.

ABSTRACT

Diploma work, 26 pages, 2 illustrations, 2 tables, 8 sources, 4 appendices.

Keywords: chemical kinetics, chemical kinetics equations, reaction energy, reaction rate, and rate constants, the Gear method, Python, the multi-step Gear method.

The object of study is an algorithm for implementing the solution of a system of chemical equations.

The purpose of the work is the development of an algorithm for solving rigid chemical equations.

As a result, a new algorithm was developed and programmatically implemented for solving rigid systems of chemical equations.

