

Научные исследования по данной образовательной программе выполняются в том числе по направлению научно исследовательской деятельности **«Математическое моделирование физико-химических процессов и механика сплошных сред»** в рамках научной школы д.ф.-м.н., профессора Усманова С.М. «Математическое моделирование полимеризационных процессов и численное решение обратных задач химической физики». Кураторы: д.ф.-м.н., профессор Спивак С.И.(БГУ, г. Уфа). д.ф.-м.н., профессор Ягола А.Г. (МГУ, г. Москва) и направлению **«Экологический мониторинг физико-химических загрязнений окружающей среды»** Руководитель направления: д.ф.-м.н., профессора Усманова С.М.

В рамках данного направления по научной школе д.ф.-м.н., профессора Усманова С.М. «Математическое моделирование полимеризационных процессов и численное решение обратных задач химической физики» проделана следующая работа:

1. На основе статистического метода Монте-Карло разработана математическая модель, имитирующая процесс трехмерной свободно-радикальной блочной полимеризации диаллилизифталата на кубической решетке с множественным иницированием. Особенностями моментами в данной модели являются: учет механизма реакции передачи цепи на мономер с разделением вкладов эффективной и деградиационной передачи; учет влияние диффузионного торможения на кинетику полимеризационного процесса, что позволит с определенной достоверностью имитировать процесс до предельных степеней конверсии; параллельная имитация элементарных стадий процесса во времени и в реакционном объеме.

2. На основе модели разработан алгоритм и программный пакет в среде визуального программирования для проведения численных экспериментов. В ходе реализации алгоритма предполагается использование технологии проведения параллельных вычислений на многоядерных вычислительных системах. Исследован метод анализа неединственности решения обратных задач химической кинетики. Рассмотрен алгоритм определения числа и вида независимых параметрических функций констант, включающий в себя характеристики погрешности измерений. Рассмотрен теоретико-графовый метод, позволяющий разложить исходную задачу анализа выделения базиса независимых параметрических функций кинетических констант на ряд существенно более простых, соответствующих числу и виду независимых маршрутов. Для исследования блочной трехмерной свободно-радикальной полимеризации была разработана математическая модель с множественным иницированием, в основу которой был положен метод Монте-Карло. Большинство результатов по численному моделированию трехмерной свободно-радикальной блочной полимеризации диаллилизифталата на кубической решетке получены впервые.

По результатам проводимых исследований опубликовано большое количество работ различного уровня.