

Для рівняння (9) умова (7) має бути доповнена:

$$C_i \Big|_{x=0}^{t=t_k} = C_i^k, \quad (10)$$

де t_k – кінцевий час електролізу; C_i^k – кінцева концентрація іонів i -го сорту.

Рішення (9) з урахуванням (8) та (10) запишеться у вигляді:

$$C_i(x, t) = C_i \exp \left[\left(Q_i - \sqrt{Q_i^2 + H/D_i} \right) x + H \cdot t \right], \quad (11)$$

$$\text{де } Q_i = \frac{B_i}{2D_i}; \quad H = \frac{1}{t_k} \ln \frac{C_i^k}{C_i^0}$$

Розв'язання (11) визначає перенесення маси в електролітові в умовах зміни складу електроліту по вмісту іонів i -го сорту.

- 1) В. И. Черненко, Л.А. Снежко, К.И. Литовченко. Теория и технология анодных процессов при высоких напряжениях. Киев: "Наукова думка", 1995.-198с.
- 2) Анодные оксидные покрытия на металлах и анодная защита / И.Н. Францевич, В.А. Лавренко. 2-е издание, перераб. и доп., Киев: «Наукова думка», 1985, - 240 с.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Болотин А.В.

ГВУЗ “Украинский государственный химико-технологический университет”,
alexandr_bolotin@mail.ru

Современные электрохимические технологии в значительной степени базируются на процессах, протекающих вдали от состояния термодинамического равновесия, когда в широко распространенных в электрохимии нелинейных системах может происходить потеря устойчивости. Потеря устойчивости в нелинейных системах на протяжении последних десятилетий интенсивно изучается специалистами в областях астрофизики, биологии, экономики, социологии и т.д. В электрохимии такие исследования малочисленны. Понимание условий возникновения и закономерностей неустойчивости различных типов может в одних случаях послужить основой для создания методов разработки режимов поведения электрохимических процессов без возникновения неустойчивости, а в других случаях использовать такие неустойчивости для разработки новых методов контроля, новых технологий.

Нами проведен комплекс экспериментальных исследований и компьютерное моделирование сложных, многостадийных электрохимических реакций, протекающих на электродах, покрытых анодными оксидными пленками при высоких анодных потенциалах [1–4]. Развита теория неустойчивости электрохимического поведения металла, покрытого анодной оксидной пленкой [2, 3]. Теоретически предсказаны и экспериментально обнаружены колебания тока нового типа [4]. Результаты математического моделирования и вычислительных экспериментов позволили найти методы стабилизации неустойчивого динамического поведения исследованных электрохимических систем и экспериментально их реализовать [2]. Математические модели колебательных процессов, предложенные для описания динамических свойств металл - оксидных систем типа $\text{Me}, \text{MeO}_x / \text{HA}$, могут быть использованы при теоретическом анализе неустойчивости процессов в других областях, например, при компьютерном моделировании процессов биологического окисления пищевых добавок в организме человека. Выводы теории могут быть применены для управления электрохимическими процессами, проводимыми в области высоких анодных потенциалов.

- 1) Болотин А.В. К теории автоколебаний в электрохимических системах // Вісник Дніпропетровського університету – Хімія. – 2001. – Вип.6. – С. 123 – 130.
- 2) Ковтун В.Н., Болотин А.В. О динамическом поведении системы $\text{Ni} - \text{H}_2\text{SO}_4$ в области высоких анодных потенциалов в зависимости от режимов электролиза // Электрохимия. – 2005. - №3. - С. 111-115.
- 3) Варгалюк В.Ф., Болотин А.В. Теоретический анализ сложных электрохимических систем, характеризующихся динамической неустойчивостью // Украинский химический журнал. – 2005. - №3. - С. 47 – 49.
- 4) Варгалюк В.Ф., Болотин А.В., Могиленко В.Ф. Некоторые особенности кинетики электроокисления катионов Cr^{3+} на платиновом аноде // Вісник Дніпропетровського університету – Хімія. – 2006. – Вип.8. – С. 3 – 5.

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ КЛАСТЕРИЗАЦИИ МОЛЕКУЛ В РАСПРЕДЕЛЕННОЙ СИСТЕМЕ DISTRIBUTE ME

Бондаренко В.В., Никитенко Е.В., Ткач Ю. Э.

Черниговский государственный технологический университет, vv.bondarenko@gmail.com

В промышленной сфере, кластеризация часто применяется к неоднородным наборам элементов, которые представлены как точки в многомерном пространстве. Учитывая соответствующую меру подобия, представляющую расстояние между точками, процесс кластеризации идентифицирует группы объектов. В основу такой классификации и кластеризации положен принцип схожести свойств, который указывает, что структурно подобные объекты имеют подобные свойства [1].

В области химии кластеризация веществ широко используется в фармацевтической промышленности для получения различных типичных наборов молекул [2]. Применение типичных наборов молекул связано с представлением их в виде обучающих наборов при создании различных структур деятельности, а также для просеивания веществ через биологические экраны и тестирования медицинских препаратов. Во всех случаях предполагается, что центральная точка кластера, имеющая определенные свойства, является представителем соответствующего набора, все элементы которого имеют схожие свойства. Существенным для успешной кластеризации набора молекул является соответствующее описание структуры молекулы, а также наличие адекватного алгоритма кластеризации. Одним из автоматических и наиболее быстрых подходов получения типичных наборов является неконтролируемая кластеризация молекул, основанная на Daylight отпечатках и индексе подобия Tanimoto [3].

Процесс получения кластеров молекул состоит из нескольких последовательных шагов (рис. 1). Входными данными задачи кластеризации являются количество молекул и пороговый индекс подобия Tanimoto, а выходными информация о принадлежности молекул к найденным кластерам вместе с отдельно выделенными молекулами, являющимися центральными точками, которые наиболее похожи на все остальные молекулы кластера.

Генерация отпечатка для каждой молекулы производится программным обеспечением фирмы Daylight.

Молекула, которая содержит наибольшее число соседей и тем самым «наиболее похожа» на остальные молекулы, при определении потенциальных центральных точек кластеров, является «хорошим кандидатом» для центральной точки кластера. Используя индекс подобия Tanimoto для идентификации таких молекул формируются списки ближайших соседей каждой молекулы исходного набора и сортируются согласно их длине в убывающем порядке.