

ОТЗЫВ

официального оппонента Лебедевой Елены Александровны на диссертационную работу Вервейко Дарьи Вячеславовны «Математическое моделирование эффектов конечного объёма при автоволновых процессах в химическом реакторе», представленную на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

Актуальность темы исследования

В связи с широкой распространённостью автоволновых процессов в природе и большой вариативностью их проявлений математическое моделирование автоволн представляется важным направлением современной теории динамических систем. Несмотря на интенсивные научные исследования последних лет, ряд явлений, связанных с автоволнами, до сих пор не имеет адекватного теоретического обоснования. Так, требует объяснения ряд аспектов, связанных с процессами формирования и динамики движения бегущих волн, возникающих в химическом реакторе, например, в ходе гликолитической реакции. Существующие математические модели не принимают во внимание трёхмерность области реактора, не учитывают влияние эффектов конечного объёма на динамику автоволн. С другой стороны, требует теоретического объяснения процесс формирования пространственных структур в системах типа «реакция-диффузия» при равных диффузионных коэффициентах.

В связи с этим разработка новых математических моделей, которые учитывали бы объёмность моделируемой области и объясняли влияние пространственных эффектов на динамику процесса, представляет большой научный и практический интерес. Кроме того, анализ результатов моделирования указанных процессов позволит интерпретировать результаты экспериментальных исследований, связанных с изучением автоволновых процессов в пространственных реакторах, а также прогнозировать результаты будущих исследований. Наконец, разработка новых численных методов анализа процессов структурообразования и реализующих их программных комплексов позволит не только проводить анализ результатов численного решения математических моделей, но и экспериментальных данных.

Таким образом, тема диссертационной работы В.Д. Вервейко представляется актуальной, имеющей большое значение для науки и практики.

Степень обоснованности и достоверности научных положений, выводов, рекомендаций и заключений

Обоснованность и достоверность научных положений, выводов, рекомендаций и заключений, полученных в диссертации, подтверждается корректным использованием современных методов математического моделирования, теории динамических систем, математической физики, спектрального анализа и теории численных методов. Достоверность полученных результатов подтверждается также приведенными результатами численных экспериментов, применением результатов моделирования для интерпретации натуральных экспериментов, апробацией основных результатов на конференциях и семинарах, в опубликованных работах и авторских свидетельствах.

Новизна проведенных исследований и полученных результатов

Новизна диссертационной работы заключается в численном и аналитическом исследовании процессов структурообразования автоволн в открытом пространственном реакторе, методе анализа пространственно-временных динамических структур, основанном на вейвлет-бифуркационном анализе, реализованном в виде комплекса программ. К числу наиболее существенных результатов диссертации следует отнести:

- численное и аналитическое исследование трёхмерной аксиально-симметричной модели типа «реакция-диффузия» с кубическим автокаталитическим однонаправленным реакционным членом, позволившее доказать кинематический характер автоволн, а также программный комплекс для имитационного моделирования автоволн в открытом пространственном реакторе;

- аналитическая редукция пространственной связанной модели типа «реакция-диффузия» к классической автоколебательной системе, описываемой обыкновенными дифференциальными уравнениями;

- математическая модель процесса структурообразования нетьюринговского типа в виде фазовых кластеров;

- новый численный метод вейвлет-бифуркационного анализа структурообразования в пространственно-распределённых системах, реализованный в виде комплекса программ и позволяющий выявлять точки отклонения от линейной пространственной параметризации вдоль предельного цикла при временной эволюции системы.

Значимость результатов, полученных в диссертации, для науки и практики

Научная значимость результатов заключается в развитии методов математического моделирования систем с кубическим автокатализом в области конечного объема. При этом автору впервые удалось создать метод вейвлет-бифуркационного анализа структурообразования в пространственно-

распределённых системах. Предложенный метод применим не только для случая диффузионной связи осцилляторов, рассмотренного в диссертации, но и, например, для конвективной связи. Основным условием применимости метода является задание начальных условий таким образом, чтобы в начальной невозмущенной системе распределение фаз было линейным, причем выбрано таким образом, чтобы на пространственном интервале укладывался один полный период колебания по предельному циклу. Данное условие позволяет использовать в технической реализации алгоритма схемы быстрых преобразований Фурье, что даёт выигрыш во времени исполнения программы, реализующей алгоритм. Выполнение вейвлет-преобразования на каждом шаге временной итерации решения системы дифференциальных уравнений допускает принципиальную возможность реализации алгоритма в системах распределённых или параллельных вычислений.

Научная и практическая значимость основных положений диссертации подтверждается использованием полученных результатов в ФГБОУ ВПО «Курский государственный университет» как в научной работе (методы анализа математических моделей и программное обеспечение используются в исследованиях, проводимых в НИЦ физики конденсированного состояния КГУ), так и в учебном процессе – при чтении специальных курсов.

Замечания по диссертационной работе и автореферату

1. Не приведены рекомендации по выбору масштабного коэффициента a вейвлет-преобразования и не дано объяснение выбора меньшего значения масштаба a в случае коэффициента связи $D = 10^{-5}$.

2. В формулировке теоремы п.2.2 (с. 41) не указано, что такое \tilde{v} и \tilde{w} . Далее в формулах (2.8) и (2.9) остаток имеет порядок $O(h^2)$, а не $o(h^2)$ как написано в тексте. Однако это не приводит к ошибкам в доказательстве. В формулах (2.11) потеряны коэффициенты D_1 и D_2 . В формулах, написанных на следующей строке, потеряны множители h^{-1} . В тексте следует также отметить, что переход к пределу по h происходит с использованием обобщенных функций.

3. В техническом описании программы для моделирования гликолитической реакции в открытом реакторе (Приложение А) упоминается возможность моделирования структур Тьюринга в случае пространственно неоднородно распределённой диффузии, однако в тексте диссертации не обсуждается такой механизм структурообразования тьюринговского типа и его обоснованность с точки зрения биофизики процесса.

4. В тексте работы имеется также небольшое количество опечаток, например, на стр.14 (строки 4,8 сверху) указана ссылка на формулу (1.2) вместо (1.3), на стр. 15 (строки 1-3 снизу) потеряны индексы, на стр. 70 (строка 7 сверху) потеряны x .

Заключение

Отмеченные недостатки текстового представления материала не влияют на качество работы в целом, данная диссертация выполнена на высоком научно-техническом уровне и представляет собой законченную научно-квалификационную работу.

Результаты диссертационной работы, выносимые на защиту, прошли достаточную апробацию на 7 научных конференциях и опубликованы в 12 научных трудах соискателя, включая 6 статей в рецензируемых журналах и свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ.

Автореферат полностью отражает содержание диссертации. Работа соответствует пп. 2, 4, 5 и 7 паспорта специальности 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Учитывая актуальность выполненных исследований, научную новизну и практическую значимость полученных результатов, считаю, что представленная диссертационная работа удовлетворяет всем требованиям «Положения о присуждении ученых степеней», а ее автор – Вerveйко Дарья Вячеславовна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук специальности 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Официальный оппонент,
кандидат физико-математических наук,
доцент кафедры высшей математики
Санкт-Петербургского
государственного политехнического
университета



Лебедева Елена Александровна

195251, г. Санкт-Петербург,
ул. Политехническая, 29,
ФГАОУ ВО «Санкт-Петербургский
государственный политехнический
университет»

office@spbstu.ru

Тел.: (812) 297-2095

Факс: (812) 552-6080

