

"УТВЕРЖДАЮ"

Директор ИТЭБ РАН

чл.-корр. РАН Г.Р. Иваницкий



"10" октября 2014 г.

ОТЗЫВ

ведущей организации на диссертационную работу Вервейко Дарьи Вячеславовны «Математическое моделирование эффектов конечного объема 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 настоящее время физика открытых динамических систем является интенсивно развивающимся направлением современного естествознания, объединяющим исследования нелинейных колебательных и волновых процессов, самоорганизации и образования структур в различных областях науки и техники (физика, биология, химия, экология и т.д.). Одним из ключевых проявлений нелинейности, свойственных активным средам, в таких системах является существование автоколебательных и автоволновых режимов.

Сложность и нелинейность таких систем в большинстве случаев делает невозможным проведение их аналитического исследования. В связи с этим без применения методов математического моделирования и численного анализа нелинейных моделей проведение исследований в такой междисциплинарной области как физика открытых систем и теория динамических систем является невозможным.

Важное практическое значение имеют автоволновые структуры, возникающие в ходе ряда биохимических реакций в открытых пространственных реакторах, например, при реакции гликолиза. На сегодняшний день существует множество вопросов, связанных, в частности, с влиянием конечного объема реактора на формирование автоволновых структур, а также с синхронизацией связанных индивидуальных осцилляторов. Разработка математических моделей, позволяющих провести анализ вышеупомянутых процессов и особенностей, представляется актуальной задачей, как теоретического, так и прикладного характера.

Таким образом, тема диссертационной работы Д.В. Вервейко несомненно актуальна и имеет важное значение для науки и практики.

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

Выводы и результаты диссертационной работы Д.В. Вервейко базируются на использовании методов математического моделирования, теории динамических систем, математической физики, спектрального анализа и теории численных методов.

Предложенные в работе математические модели позволяют объяснить влияние эффектов конечного объёма на динамику автоволновых процессов на примере гликолитической реакции. Разработанный численный метод вейвлет-бифуркационного анализа позволяет проводить эффективное исследование процессов структурообразования в пространственно-распределённых системах.

Основные положения диссертации сформулированы корректно. Особенности предлагаемых математических моделей и алгоритмов, а также детали реализации структуры программного комплекса отражены в тексте диссертации и сопровождаются необходимыми пояснениями и графическими иллюстрациями. Работоспособность программного комплекса подтверждается полученным свидетельством о государственной регистрации программы для ЭВМ. 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.

Таким образом, обоснованность и достоверность научных положений, выводов, рекомендаций и заключений, сформулированных в диссертационной работе Д.В. Вервейко не вызывает сомнений.

Новизна проведенных исследований и полученных результатов

Научной новизной обладают следующие результаты, полученные в диссертационной работе Д.В. Вервейко:

- на основе численного и аналитического исследования трёхмерной аксиально-симметричной модели типа «реакция-диффузия» с кубическим автокаталитическим однонаправленным реакционным членом доказан кинематический характер автоволн и доказан предельный переход к классическим системам при уменьшении высоты трёхмерного реактора;

- предложена новая математическая модель формирования фазовых кластеров – структур нетьюринговского типа (при равных значениях пространственной связи);

- построен комплекс программ для имитационного моделирования в открытом химическом реакторе;

- разработан новый численный метод вейвлет-бифуркационного анализа структурообразования в пространственно-распределённых системах, позволяющий проводить анализ структурообразования путём выявления отклонений фазовых траекторий от линейной пространственной параметризации вдоль предельного цикла при временной эволюции системы,

а также предложена принципиально новая структура программного комплекса для его реализации.

Теоретическая значимость

Научная значимость результатов заключается в развитии методов математического моделирования, исследовании процессов формирования автоволновых режимов в химических реакторах и влияния пространственной связи (диффузии) и пространственных характеристик области реактора на динамику автоволн, а также в создании новых численных методов и алгоритмов проверки адекватности математической модели процесса на основе данных натурального эксперимента.

Кроме того, автору впервые удалось получить аналитическое доказательство эквивалентности рассмотренной трёхмерной модели и распределенной модели Селькова в случае малой высоты реактора и доказать кинематический характер автоволн и анизотропию их распространения на основе связи распределенной и локальных систем Селькова.

Предложенный метод вейвлет-анализа структурообразования в распределённых системах и реализующий его алгоритм обладают рядом преимуществ по сравнению с известными методами, сокращая время расчета локализации синхронизованных фазовых кластеров.

Ценность данной работы для практики

Результаты исследования моделей возникновения бегущих автоволн в открытом пространственном реакторе, алгоритмы и программное обеспечение, прошедшее процесс государственной регистрации библиотеки программ для ЭВМ, а также предложенный численный вейвлет-бифуркационный метод могут быть использованы для теоретического анализа процессов, протекающих в открытых реакторах, планирования дальнейших биофизических экспериментов и разработки биотехнологических процессов.

Разработанный автором комплекс программ представляет интерес для нужд биохимической промышленности, позволяя провести имитационное моделирование динамики однонаправленных химических реакций с кубическим автокатализом.

Полученные в диссертационной работе Вервейко Д.В. результаты нашли применение в научной работе центра физики конденсированного состояния ФГБОУ ВПО «Курский государственный университет», а также в учебном процессе, что подтверждает их ценность для науки и практики.

Замечания по диссертационной работе и автореферату

1. Недостаточно объяснён выбор осесимметричного параболоида в качестве моделирующей функции для втока. Неясно, оказывает ли влияние поверхность мембран на форму втока.

2. В первой главе указывается отличительная особенность автоволн, заключающаяся в аннигиляции при столкновении, однако далее следует утверждение, что поведение экспериментально наблюдаемых автоволн при

гликолитической реакции противоречит данной особенности. Следовало бы пояснить причины такого противоречия.

3. Не описаны причины смены направления распространения волн в моделируемом эксперименте.

Заключение

В целом, несмотря на отмеченные недостатки и замечания, представленная диссертация выполнена на высоком научном 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, представленная диссертационная работа удовлетворяет всем требованиям «Положения о присуждении ученых степеней», а ее автор – Вервейко Дарья Вячеславовна – заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук специальности 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Материалы диссертации, автореферат и отзыв о диссертации обсуждены на заседании секции «Биофизика сложных систем – биосинергетика» ученого совета ИТЭБ РАН, протокол № 8 от 09.10.2014г.

Ведущий научный сотрудник лаборатории
механизмов организации биоструктур ИТЭБ РАН,

д.ф.-м.н.



Цыганов Михаил Аркадьевич



Подпись:

Цыганова М.А.

УДОСТОВЕРЯЮ – Зав. Канц.

Е. П. Груздева *Евгения*

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической и экспериментальной биофизики Российской академии наук (ИТЭБ РАН)

Адрес: 142290, г. Пущино Московской области, ул. Институтская, 3, ИТЭБ РАН

Телефон: (495) 632-78-69; Факс: (4967) 33-05-53

Электронная почта: office@iteb.ru Сайт института: <http://web.iteb.psn.ru/>