

ОТЗЫВ

официального оппонента Дмитричева Алексея Сергеевича
на диссертационную работу

Якупова Эдуарда Олеговича

«Исследование механизмов формирования пространственно-временных структур, возникающих на движущемся фронте реакции»,
представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.3. – «Теоретическая физика»

Актуальность темы исследования.

Интерес к исследованию процессов в неравновесных распределенных динамических системах не ослабевает уже достаточно длительное время, что свидетельствует о фундаментальном характере данной проблемы. Одним из наиболее ярких и удивительных явлений, наблюдаемых в широком классе распределенных систем, является формирование разнообразных пространственно-временных структур и, в частности, нелинейных волн, локализованных и диссипативных структур. Такие состояния экспериментально обнаружены в самых разнообразных по своей природе системах в физике, химии, биологии, экологии и др. Среди них можно отметить, например, в физике – структуры в газовом разряде, оптических системах и гранулированных материалах, в химии — так называемые БЖ-АОТ системы – обращенная микроэмульсия аэрозоли ОТ (ОТ – торговая марка), в которых происходит реакция Белоусова – Жаботинского, структуры Тьюринга в гомогенной химической системе хлорит-иодид-малоновой кислоты и гетерогенные каталитические реакции, в живых системах к ним относятся кластеры активности (уединенные группы нейронов в состоянии одновременной генерации потенциалов действия) в ансамбле нейронов нижних олив и системе краткосрочной памяти, в срезах различных областей неокоры крыс и др. Выявление механизмов структурообразования и закономерностей эволюции структур составляет одну из важных и актуальных проблем нелинейной физики.

Важный класс неравновесных систем, обладающих разнообразием формируемых пространственно-временных структур, образуют так называемые реакционно-диффузионные системы. Диссертационная работа Якупова Э.О. принадлежит именно этому направлению. Она посвящена целому кругу важных как с фундаментальной, так и прикладной точек зрения вопросов, связанных с описанием и исследованием процессов формирования и эволюции сложных пространственно-временных структур на движущихся фронтах реакции и применению полученного задела для объяснения экспериментально наблюдаемых структур, возникающих на фронте горения водород-

воздушных смесей при высоком давлении. В этой связи нужно заметить, что исследование механизмов формирования и эволюции нелинейных структур при горении водород-воздушных смесей критически важно для разработки эффективных и безопасных систем хранения и использования водорода в энергетических установках.

В связи с указанным актуальность диссертационного исследования не вызывает сомнений.

Цель диссертационного исследования.

Цель диссертационной работы состоит в разработке и апробации иерархического подхода к объяснению процессов и механизмов формирования сложных пространственно-временных структур, возникающих на движущемся фронте реакции, и применении этого подхода, в том числе к объяснению возникающих спиральных и ячеистых (тьюринговских) структур, экспериментально наблюдаемых при горении богатого водород-воздушного пламени при высоком давлении.

Содержание диссертации и ее завершенность.

Диссертация состоит из введения, шести глав, заключения, списка литературы и с учетом четырех приложений имеет общий объём 112 страниц.

Введение посвящено обоснованию актуальности выбранной тематики, показана научная новизна и практическая значимость представленной работы, определены основные цели и задачи.

Первая глава диссертации посвящена обзору литературы по теме исследования. В частности, приведены результаты теоретических и экспериментальных исследований возникновения пространственно-временных структур на движущихся фронтах реакции-диффузии, формирующихся за счёт различных неустойчивостей и взаимодействий. Отдельное внимание уделено работам по исследованию особенностей образованию структур в достаточно важных с прикладной точки зрения процессах горения водород-воздушных смесей. Наконец, рассматриваются базовые модели теории реакционно-диффузионных систем (Фицхью-Нагумо, Фишера-КПП, Орегонатор), позволяющие качественно описать поведение таких структур, как волна переключения, бегущий импульс и периодическая (фазовая) волна.

Вторая глава диссертации посвящена разработке и апробации иерархического подхода, позволяющего описать формирование сложных пространственно-временных структур на движущемся фронте реакции, исследовать основные закономерности эволюции таких структур и их характеристики. Подход предполагает построение блочной модели, состоящей из двух подсистем, одна из которых описывает движущийся фронт, а

вторая, параметрически зависящая от первой, - возникающие на фронте и движущиеся вместе структуры. Предложены три двумерные блочные модели (Фицхью-Нагумо – Фицхью-Нагумо, Фишера-КПП – Орегонатор, Фишера-КПП – Фицхью-Нагумо), каждая из которых была численно исследована в двух пространственных конфигурациях, а именно прямоугольной области с циклическими границами вдоль оси x и нулевыми потоками на границах вдоль оси y , а также прямоугольной области, у которой все границы с нулевыми потоками. На примере данных моделей подтверждена принципиальная применимость предложенного метода к качественному объяснению механизмов формирования сложных структур на движущихся фронтах. В частности, показано, как возникают волны, бегущие по спирали по поверхности цилиндра, и как локальный пейсмейкер, расположенный на одной из сторон двумерной области, приводит к генерации периодических волн, движущихся общим фронтом в перпендикулярном направлении. Установлены условия на параметры подсистем и связи, приводящие к формированию структур этих видов.

Третья глава диссертации посвящена применению предложенного подхода для описания и исследования процессов формирования автоволновых структур на движущемся фронте реакции в трехмерной области. Был рассмотрен трехмерный вариант блочной модели Фишера-КПП – Фицхью-Нагумо. Проведено численное исследование решений данной модели внутри кубической области, на границах которой потоки для всех переменных равны нулю. Показано, что модель может демонстрировать на движущемся фронте реакции формирование как спиральных, так и кольцевых структур. Первые возникают при задании специфических начальных условий в виде фрагмента плоской волны со свободным концом, а вторым необходим постоянный источник колебаний, т. е. часть пространства на фронте реакции должна находиться в колебательном режиме. Установлено, что в трехмерном пространстве формирование автоволновых структур на движущемся фронте критически зависит от свойств фронта. На плоскости «скорость фронта – толщина фронта» выделены области, отвечающие возникновению спиральных и кольцевых структур. Вне этих областей начальная затравка либо полностью вымирает, либо фронт полностью возбуждается и продолжает двигаться как единое целое. Показано, что в основе такого поведения лежит вынос вещества, соответствующего переменным u и v , из области фронта наружу за счет диффузии вещества через переднюю часть фронта и конвекционного потока через фронт при его движении. При этом установлено, что при больших скоростях фронта требования к его толщине для существования кольцевых структур меньше, чем для спиральных.

Четвертая глава диссертации посвящена описанию и исследованию процессов формирования неоднородных стационарных (диссипативных) структур на движущемся фронте реакции в трехмерной области. Снова рассматривалась блочная модель, введенная в третьей главе. Для ее подсистемы (модель Фицхью-Нагумо), определяющей структурообразование на движущемся фронте, были аналитически установлены условия необходимые для существования диссипативных структур, возникающих за счёт неустойчивости Тьюринга. Численное исследование показало, что при определенных свойствах фронта внутри него из случайно сгенерированного в начальный момент времени шума действительно происходит формирование устойчивых диссипативных структур. На плоскости «скорость фронта – толщина фронта» для нескольких значений параметра связи, характеризующего глубину тьюринговской неустойчивости, выделены области, отвечающие возникновению диссипативных структур. Показано, что в условиях развитой тьюринговской неустойчивости структуры могут возникать даже в достаточно тонком фронте реакции, а их толщина значительно превышает толщину слоя неустойчивости. С уменьшением глубины неустойчивости, толщина фронта, необходимая для образования структур, растет, а толщина слоя, в котором наблюдается неустойчивость, наоборот, начинает сужаться в пределах этого фронта. Кроме того, установлено, что при больших скоростях формируемые структуры становятся не стационарными. Показано, что это связано с тем, что толщина фронта, необходимая для формирования структур, становится настолько большой по сравнению с характерным масштабом структур в слое фронта, что структуры, фактически, становятся трехмерными.

Пятая глава диссертации посвящена применению иерархического подхода для теоретического описания экспериментально наблюдаемых автоволновых спиральных структур, возникающих при горении богатого водород-воздушного пламени при высоком давлении. Была проведена редукция полной модели распространения волн в водородно-воздушной смеси, основанной на детальной схеме окисления водорода, включающей в себя 38 реакций между 9 реагентами. Используя предположение о наличии в структуре пламени хорошо разрешенных низкотемпературной (ниже 1000 К; превалирует гидропероксид HO_2) и высокотемпературной (выше 1000 К; превалируют Н-радикалы) областей, получена более простая модель, учитывающая 9 реакций между 5 реагентами. Численно показано, что одномерный вариант модели может демонстрировать формирование бегущих волн устойчивого горения пламени и волн пульсирующего пламени. Построено разбиение плоскости параметров «давление – избыток горючего» на области, отвечающие установлению этих режимов. Построена зависимость частоты

пульсаций пламени от величины «избытка горючего». Показано, что наблюдается хорошее соответствие результатов полученных для редуцированной и детальной моделей. Далее в редуцированной модели был выделен блок, описывающий динамику пламени в низкотемпературном слое фронта горения смеси. Он представляет собой двухкомпонентную систему типа реакция-диффузия относительно переменных, характеризующих концентрацию гидропероксида и температуру. Установлены условия, при которых эта система обладает возбудимой кинетикой и может генерировать спиральные волны. Показано, что частота и характерная длина формируемых спиралей коррелируют со значениями, полученными в экспериментах, хотя частота вращения спиралей занижается представленной моделью. Отмечена возможность перехода системы в режим формирования хаотических структур при увеличении подпитки низкотемпературного слоя Н-радикалами из высокотемпературного слоя.

Шестая глава диссертации посвящена объяснению экспериментально наблюдаемых ячеистых (тьюринговских) структур, возникающих при горении богатого водород-воздушного пламени. На базе ранее полученной двухкомпонентной редуцированной системы установлены условия формирования таких структур, и показано, что они выполняются в широком диапазоне физически-реализуемых параметров. Численно продемонстрирована возможность формирования ячеистых структур различной морфологии: горячие (холодные) стационарные ячейки на холодном (горячем) фоне, стационарные полосатые структуры и промежуточные состояния, в которых дробление полос на ячейки и обратный процесс продолжается даже после длительного времени.

В заключении сформулированы основные выводы диссертации.

Диссертационная работа Э.О. Якупова представляет собой логично построенное, успешно выполненное и завершённое научное исследование. Все изложенные в диссертации результаты получены впервые.

Основные результаты диссертационного исследования отражены в 6 статьях в журналах из Белого списка, рекомендованных ВАК, из которых 3 относятся к первому уровню. Апробация результатов работы осуществлялась в рамках научных докладов и обсуждений на 6 всероссийских и международных конференциях.

Обоснованность и достоверность полученных результатов.

Обоснованность и достоверность результатов, полученных в диссертации, подтверждается использованием при анализе динамики предложенных и рассмотренных в диссертации математических моделей современных качественно-численных методов анализа сосредоточенных и распределенных систем, отсутствием противоречий

изложенных в диссертации результатов с результатами исследований отечественных и зарубежных авторов в данной области и экспериментальными данными, а также научной экспертизой при публикации материалов в рецензируемой научной печати.

Научная новизна и значимость диссертационной работы.

Научная новизна диссертации определяется следующими результатами:

- 1) предложен иерархический подход к описанию формирования сложных пространственно-временных структур на движущемся фронте реакции, позволяющий исследовать основные закономерности эволюции таких структур и их характеристики. Подход основан на построении блочной модели, состоящей из двух подсистем, одна из которых описывает движущийся фронт, а вторая, параметрически зависящая от первой, - возникающие на фронте и движущиеся вместе структуры.
- 2) предложены простые блочные модели, способные описать формирование автоволновых (спиральных и кольцевых) и диссипативных (тьюринговских) структур на движущемся фронте реакции. Установлено, что в трехмерном пространстве формирование структур на движущемся фронте критически зависит от свойств фронта, и, в частности, чем больше скорость фронта, тем больше минимальная необходимая для возникновения структуры толщина фронта. Показано, что в основе такого поведения лежит вынос вещества из области фронта наружу за счет диффузии вещества через переднюю часть фронта и конвекционного потока через фронт при его движении.
- 3) предложены две редуцированные модели распространения волн при горения водород-воздушных смесей. Одна предполагает наличие в структуре пламени хорошо разрешенных низкотемпературной и высокотемпературной областей и вместо 38 реакций между 9 реагентами учитывает только 9 реакций между 5 реагентами. Вторая представляет собой двухкомпонентную систему типа реакция-диффузия относительно переменных, характеризующих концентрацию гидропероксида и температуру, и описывает динамику пламени в низкотемпературном слое фронта горения смеси. Показано, что наблюдается хорошее соответствие результатов полученных для редуцированных и детальной моделей.
- 4) показано, что образование спиральных и ячеистых (тьюринговских) структур на фронте горения водород-воздушных смесей, наблюдаемых в экспериментах при высоких давлениях, в рамках принятых предположений обусловлено процессами в его низкотемпературном слое. Найдены условия возникновения структур в зависимости от параметров, в частности, от величины давления.

Полученные результаты позволяют продвинуться в понимании процессов и механизмов формирования сложных пространственно-временных структур на

движущихся фронтах реакций. В частности, развитый в работе подход уже позволил объяснить возникновение спиральных волн и ячеистых (тьюринговских) структур на фронте горения водород-воздушных смесей, наблюдаемых в экспериментах при высоких давлениях.

Нужно отметить и практическую значимость результатов, которые могут быть востребованы при разработке методов управления процессами горения и эффективных технологий сжигания топлива в энергетических установках.

Наконец, полученные в диссертации результаты могут быть использованы в учебном процессе и при проведении научных исследований в ведущих ВУЗах и научных центрах России, таких как ННГУ, СГУ, СПбГУ, МГУ, ФИАН, ИРЭ РАН, ИПФ РАН и др, занимающихся нелинейной динамикой и моделированием различных неравновесных пространственно-распределенных систем.

Замечания по диссертационному исследованию.

Диссертация О.Э. Якупова написана достаточно ясно и подробно, однако к ней имеется несколько вопросов и замечаний:

- 1) В разделах 2.1, 2.3 и главах 3 и 4 управление подсистемой на фронте (Фитцхью-Нагумо) осуществляется через параметр α . Чем был продиктован выбор именно такой связи между подсистемами соответствующих иерархических моделей? Не нашел в тексте обсуждения и обоснования такого выбора.
- 2) В третьей главе отмечено, что «условия возникновения в трехмерном пространстве структур на движущемся фронте критически зависят от его толщины из-за выноса вещества из этой области наружу вне фронта». Однако, в разделе 2.3, посвященном двумерному варианту той же модели, о такой зависимости ничего не сказано. Есть ли подобный эффект выноса вещества из области фронта в двумерном случае или структуры там могут формироваться при любых значениях параметров k и D_g ?
- 3) Рисунки 3.1, 4.3, 5.8, 6.1 не являются фазовыми портретами. Типичный фазовый портрет кроме нуль-изоклин, чьи пересечения дают положения состояний равновесия, должен включать еще характерные фазовые траектории (например предельные циклы), которые в совокупности позволяют понять динамику описываемой фазовым портретом системы.
- 4) В главах 5 и 6 установлены условия и показана принципиальная возможность возникновения в низкотемпературном слое фронта горения водород-воздушных смесей спиральных, хаотических и ячеистых структур различной морфологии. К сожалению, не

нашел обсуждения того, какие последствия для процесса горения пламени на практике несет формирование тех или иных структур.

Указанные замечания не умаляют общего высокого уровня работы и положительной оценки диссертации.

Заключение о диссертации.

Диссертация Якупова Эдуарда Олеговича является научно-квалификационной работой, которая представляет собой завершённое исследование, посвящённое актуальным вопросам, связанным с описанием и исследованием процессов формирования и эволюции сложных пространственно-временных структур на движущихся фронтах реакции и применению полученного задела для объяснения экспериментально наблюдаемых структур, возникающих на фронте горения водород-воздушных смесей при высоком давлении. Результаты работы опубликованы в ведущих российских и зарубежных реферируемых научных журналах и апробированы в том числе на международных конференциях. Автореферат полностью отражает содержание диссертации.

Работа удовлетворяет всем требованиям пп. 9-11, 13, 14 действующего «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года №842, предъявляемых к кандидатским диссертациям, а ее автор Якупов Эдуард Олегович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.3. – «Теоретическая физика».

Официальный оппонент

кандидат физико-математических наук по специальности 01.04.03 «Радиофизика», старший научный сотрудник отдела нелинейной динамики ФГБНУ «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики им. А.В. Гапонова-Грехова Российской академии наук», г. Нижний Новгород

Дмитричев Алексей Сергеевич

« 11 » апреля 2025 г.

Адрес: 603950, Нижний Новгород, БОКС-120, ул. Ульянова, д.46

Электронная почта: admitry@ipfran.ru

Телефон: +7 (831) 416-47-83

ПОДПИСЬ Дмитричев А.С.
УДОСТОВЕРЯЮ
ЗА ОТДЕЛОМ КАДРОВ
А.В. ГОРОДЕЦКАЯ

Ряд научных работ по теме рассматриваемой диссертации:

1. V.A. Khramenkov, A.S. Dmitrichev, and V.I. Nekorkin. Bistability of operating modes and their switching in a three-machine power grid, *Chaos*, V. 33, № 10, PP. 103129 (2023).
2. V.A. Khramenkov, A.S. Dmitrichev, V.I. Nekorkin. A new scenario for Braess's paradox in power grids, *Chaos*, V. 32, PP. 113116–1-14 (2022).
3. Vladislav Khramenkov, Aleksei Dmitrichev, Vladimir Nekorkin. Partial stability criterion for a heterogeneous power grid with hub structures, *Chaos, Solitons & Fractals*, V. 152, PP. 111373–1-10 (2021).
4. В.А. Храменков, А.С. Дмитричев, В.И. Некоркин, Пороговая устойчивость синхронного режима энергосети с топологией хаб-кластера, *Известия вузов. ПНД*, Т. 28, вып. 2, С. 120-139 (2020).
5. V. Khramenkov, A. Dmitrichev, V. Nekorkin, Dynamics and stability of two power grids with hub cluster topologies, *Cybernetics and Physics*, V. 8, № 1, PP. 29-33 (2019).
6. V.I. Nekorkin, A.S. Dmitrichev, J.-M. Bilbault, S. Binczak, Polymorphic and regular localized activity structures in a two-dimensional two-component reaction–diffusion lattice with complex threshold excitation, *Physica D: Nonlinear Phenomena*, V. 239, PP. 972-987 (2010).
7. А.С. Дмитричев, В.И. Некоркин, Стационарные локализованные структуры активности в двумерном ансамбле модельных нейронов Фитцхью–Нагумо с осцилляторным порогом, *Известия вузов. ПНД*, Т. 16, вып. 3, С. 71-87 (2008).
8. V.I. Nekorkin, D.S. Shapin, A.S. Dmitrichev, V.B. Kazantsev, S. Binczak, J.-M. Bilbault, Heteroclinic contours and self-replicated solitary waves in a reaction–diffusion lattice with complex threshold excitation // *Physica D: Nonlinear Phenomena*, V. 237, PP. 2463-2475 (2008).