

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

на диссертацию Сергеева Константина Сергеевича «Колебательные и волновые явления в упорядоченных и неупорядоченных ансамблях взаимодействующих частиц», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.03 – Радиофизика

Изучение поведения ансамблей большого количества локализованных в пространстве элементов (частиц), определенным образом взаимодействующих друг с другом, представляет собой актуальную проблему нелинейной физики, интерес к которой растет с каждым годом. В широком классе таких систем значительное внимание привлекают модели ансамблей, элементы которых являются активными, то есть предполагаются способными некоторым образом извлекать энергию из окружающей среды и преобразовывать ее в кинетическую энергию движения частиц; класс подобных моделей обозначается термином «активное вещество», или «ансамбли активных частиц». Диссертация К.С. Сергеева относится именно к этому актуальному направлению нелинейной динамики, являющейся неотъемлемой частью современной радиофизики.

В диссертации К.С. Сергеева решается круг задач, связанных с изучением разнообразных колебательных и волновых эффектов в ансамблях активных и консервативных частиц, нелинейным образом взаимодействующих друг с другом. Подробно анализируются различные модели одномерных и двумерных, упорядоченных и неупорядоченных ансамблей частиц, которые взаимодействуют либо посредством нелинейных потенциальных сил (потенциал Морзе, модифицированный параболический потенциал), либо связаны через общее поле скоростей. Рассматриваются различные способы моделирования неравновесных свойств активных частиц.

При выполнении диссертационной работы были использованы современные методы и подходы нелинейной динамики, в частности, численное интегрирование уравнений динамики и компьютерная обработка результатов моделирования, расчеты спектров колебаний, автокорреляционных функций, структурных факторов и др.. На этом основании можно сделать заключение о полном соответствии рассмотренных в рамках диссертационной работы проблем и методов их решения специальности 01.04.03 – Радиофизика.

Диссертация К.С. Сергеева состоит из введения, четырех глав и заключения. Во введении обосновывается актуальность темы исследований, излагаются выносимые на защиту положения, а также обосновывается научная новизна и практическая значимость результатов работы.

В первой главе описываются результаты численного моделирования динамики плотной одномерной цепочки активных частиц. Взаимодействие частиц полагается локальным и реализуется посредством упругих сил потенциала Морзе, причем частицы испытывают воздействие нелинейного знакопеременного трения Рэлея, что позволяет отнести рассматриваемую модель к классу ансамбля активных частиц. Известно, что стационарные моды такой решетки представляют собой диссипативные солитоны, которые в случае цепочки с периодическими граничными условиями равномерно распределяются по длине цепочки. Опираясь на этот факт, автор исследовал процессы перехода от произвольного распределения солитонов, часто возникающего из начального состояния частиц, к состоянию с равномерным распределением солитонов. Он установил, что при старте цепочки со стохастическим начальным распределением скоростей частиц диссипативные солитоны образуют группы (кластеры), характерный размер которых зависит от параметров цепочки. Автор также определил, что режимы с неравномерным распределением солитонов в цепочках с периодическими граничными условиями представляют собой метастабильные состояния, время жизни которых зависит от

параметров цепочки. В частности, было обнаружено, что длительность переходного процесса экспоненциально растет с увеличением количества частиц в цепочке; зависимость длительности переходного процесса от коэффициента трения Рэлея также носит экспоненциальный характер.

В качестве метода идентификации той или иной стационарной моды автором предлагается использовать такую характеристику, как динамический структурный фактор. К преимуществам такого подхода следует отнести высокую точность определения пространственных и временных характеристик исследуемой моды, в том числе в присутствии шума.

Кроме того, в работе рассматривается аналогичная цепочка активных частиц с нелокальной связью. Под термином «нелокальная связь» автор подразумевает, что каждая частица связана с двумя частицами «слева» и двумя частицами «справа». Подобный вид нелокальной связи в рассматриваемой цепочке представляется разумным, поскольку при используемых значениях параметров сила потенциала Морзе стремится к нулю на дистанциях, больших, чем два равновесных расстояния между частицами. Автор обнаружил, что в цепочке с нелокальной связью существуют не только ранее известные стационарные состояния с равномерным распределением солитонов, но также и стационарные состояния, характеризующиеся равномерным распределением по длине цепочки кластеров (групп), состоящих из различного количества солитонов. Построена диаграмма режимов на плоскости параметров «жесткость связи – коэффициент трения», отображающая области с различными типами стационарных состояний.

Исследовано также влияние шумового воздействия на динамику цепочки с локальной связью. В частности, автором обнаружено, что под влиянием шума в процессе эволюции в цепочке могут возникать и исчезать диссипативные солитоны. Подробно анализируется влияние интенсивности шумового воздействия на вероятность возникновения и исчезновения солитонов в широком диапазоне параметров, исследуются механизмы изменения количества солитонов. На основе результатов численного моделирования автором получены аналитические аппроксимации вероятностей переходов между модами с различным количеством солитонов.

Последний параграф главы 1 посвящен исследованию динамики ансамбля осцилляторов Рэлея со связью через потенциал Морзе. Автор производит асимптотический переход от цепочки активных неосциллирующих частиц («осцилляторов с нулевой частотой») к цепочке осцилляторов. При исследовании динамики цепочки осцилляторов автором были обнаружены долгоживущие возбуждения, обозначенные термином «диссипативный дискретный бризер». Определены условия существования диссипативных бризеров и установлено, что они представляют собой локализованные возбуждения, свойства которых в длинной цепочке почти не зависят от ее длины.

Во второй главе диссертации излагаются результаты исследования динамики двумерной решетки активных частиц, связь которых обусловлена модифицированным потенциалом Морзе; рассматриваемая модель представляет собой обобщение модели из главы 1 на двумерный случай. Большая часть главы посвящена поиску и систематизации различных стационарных и метастабильных режимов двумерной решетки. Диссертантом установлено, что единственным стационарным состоянием является режим полной синхронизации, обозначенный термином «трансляционное движение (трансляционная мода)». Этот режим соответствует движению всех частиц решетки в одном направлении с одинаковой скоростью. При этом пространственное распределение частиц может быть равномерным либо содержать локальные дефекты, имеющие вид вакансий и междоузельных частиц.

Автором обнаружено большое количество метастабильных режимов. Установлено, что наибольшее время жизни имеют так называемые «плоские солитоны», представляющие собой суперпозицию одномерных диссипативных солитонов. Обнаружено, что в активной решетке могут распространяться также подковообразные и

квазиодномерные диссипативные солитоны. Определено влияние вида начальных условий и параметров решетки на длительности метастабильных процессов. В частности, установлено, что по завершении всех метастабильных стадий решетка переходит в режим «трансляционного движения» (в том числе при старте со стохастическим начальным распределением частиц).

Заключительная часть второй главы посвящена изучению отклика активной решетки на локализованное внешнее воздействие. Автор исследует динамику решеток для нескольких асимптотических наборов параметров. При малом коэффициенте трения в исследуемой решетке обнаружено существование квазиодномерных диссипативных солитонов и краудионов. При большом значении коэффициента трения и малой характерной скорости частиц установлено, что активная решетка способна восстанавливать свою структуру после внешнего воздействия, а формирование краудионов невозможно при любой начальной энергии возмущения. При большом коэффициенте трения и большой характерной скорости частиц наблюдается возбуждение краудионов с большими (более 100 равновесных межузельных расстояний) длинами пробега. Значение минимальной начальной энергии, необходимой для инициации краудионов и квазиодномерных солитонов, оценено в широком диапазоне параметров.

В третьей главе диссертации излагаются результаты исследования динамических процессов в двумерном неупорядоченном ансамбле активных частиц, взаимодействующих через общее поле. Свойства «неравновесности» частиц задаются кусочно-линейным трением, а их взаимодействие сводится к выравниванию направления скорости каждой частицы со средней скоростью ансамбля. Все частицы находятся под влиянием аддитивного и мультипликативного шума.

Автор производит сопоставление результатов аналитического описания динамики бесконечно большого ансамбля с результатами, полученными в процессе численного моделирования для малых (с малым количеством частиц) ансамблей. Особое внимание уделяется индуцированным шумом переходам между упорядоченным и неупорядоченным состояниями ансамбля, в частности – эффектам бистабильности при таких переходах (здесь под бистабильностью подразумевается сосуществование двух различных стационарных состояний в некоторых областях пространства параметров). Обнаружено качественное соответствие между аналитическими результатами для больших ансамблей и результатами численного моделирования для малых ансамблей. Установлено, что при уменьшении размеров ансамбля область бистабильности в пространстве параметров смещается в сторону большей силы связи. Построены и сопоставлены вероятностные распределения компонентов скорости одной частицы и средней скорости ансамбля и исследовано, как меняется форма распределения при переходах между упорядоченным и неупорядоченным состояниями внутри области бистабильности и вне ее.

Рассмотрено влияние аддитивного шума на динамику малого ансамбля частиц. Установлено, что в пространстве параметров возникают области, в которых стационарные распределения являются бимодальными. Обнаружено, что границы области бимодальности связаны со стохастическими бифуркациями рождения и исчезновения экстремумов распределения скорости. Построена диаграмма, отображающая эффект смещения пороговых значений интенсивности мультипликативного шума, соответствующих переходам между упорядоченным и неупорядоченным состояниями, при воздействии аддитивного шума.

Четвертая глава диссертации посвящена исследованиям динамики упорядоченного ансамбля консервативных частиц, связанных нелинейными потенциальными силами двух видов. Исследуемая в этой главе цепочка представляет собой одну из моделей молекулы ДНК.

Автор численно моделирует динамику цепочки с зафиксированными концами. Главное внимание уделяется дискретным мобильным бризерам, как потенциальным

носителям зарядов в молекулах ДНК. В частности, изучаются особенности начальных условий, обеспечивающих формирование таких бризеров.

Обнаружено, что при выборе значений параметров, соответствующих реальной молекуле ДНК, в рассматриваемой цепочке можно сформировать искомые мобильные бризеры, задавая начальные возмущения скорости и смещений из положения равновесия нуклеотидов в двух-трех смежных нуклеотидных парах, расположенных около закрепленного конца молекулы. Оценены основные характеристики мобильных бризеров, такие как энергия, скорость, частота колебаний, время жизни, длина траектории и определены оптимальные начальные условия для обеспечения максимальной длины перемещения бризера.

Наиболее важные достижения диссертационной работы связаны с исследованием колебательных и волновых явлений в цепочках, решетках и ансамблях активных частиц и влиянием шума на эти эффекты, а также с изучением свойств мобильных дискретных бризеров в цепочке, моделирующей динамику ДНК. В частности, существенной научной новизной обладают следующие результаты:

1. Установлено, что длительность переходных процессов в цепочке активных частиц экспоненциально зависит от количества частиц.
2. Обнаружены стационарные моды цепочки активных частиц с нелокальной связью в виде равномерно распределенных кластеров солитон-подобных возмущений скорости.
3. Обнаружена возможность управлять модами цепочки активных частиц посредством подачи в цепочку внешнего шума.
4. Исследованы и систематизированы стационарные и метастабильные состояния двумерной плотно-упакованной решетки активных частиц.
5. Показана возможность формирования мобильных дискретных бризеров в модели ДНК с зафиксированными концами за счет начального возмущения скорости или смещения из равновесного положения частиц всего в двух-трех смежных нуклеотидных парах.

Изложенные результаты вносят существенный вклад в теорию колебаний и волн в цепочках и ансамблях взаимодействующих частиц и осцилляторов, и являются основой для дальнейших исследований различных нелинейных эффектов в динамике дискретных распределенных систем.

Обоснованность и достоверность положений и выводов диссертационной работы не вызывает сомнений, поскольку они базируются на известных результатах предшествующих исследований и хорошо согласуются с известными положениями теории колебаний и волн и нелинейной динамики в целом.

Для данных областей исследований результаты и выводы диссертации являются новыми и оригинальными. Работа представляет собой самостоятельное законченное исследование, а оформление автореферата и диссертации соответствует известным требованиям.

По диссертационной работе можно сделать следующие замечания.

1. Приведенное в п. 1.7.2 утверждение «Расстояние между кластерами, начиная с которого от кластеров начинают отделяться солитоны, косвенно характеризует устойчивость кластера» не является бесспорным, т.к. не вполне понятно, что именно автор подразумевает в данном случае под термином «устойчивость».
2. Приведенная в п. 1.7.2 диаграмма режимов (рисунок 1.17а) построена для частного случая с конкретными начальными условиями. Правильнее было бы провести усреднение по множеству начальных условий.
3. Утверждение о локализованности диссипативных бризеров (параграф 1.9) может быть оспорено, поскольку факт сохранения бризером своей конфигурации при

помещении его в цепочку с другими размерами, строго говоря, не является критерием локализованности возбуждения.

4. Представленная на рисунке 2.7 (Глава 2) зависимость длины трека подковообразного солитона от начальной ширины фронта носит линейный характер, пока ширина фронта много меньше ширины ячейки моделирования. Возникает вопрос об асимптотике указанной зависимости при приближении ширины фронта к ширине ячейки моделирования. В работе нет никаких комментариев по этому поводу.

5. В Главе 4 в качестве одного из выводов указано о возможности возбуждения в молекуле ДНК мобильных дискретных бризеров за счет начального возмущения скорости и смещения нескольких пар нуклеотидов, причем остальные полагаются невозмущенными. Однако реальные молекулы ДНК «живут» при ненулевой температуре, поэтому, строго говоря, делать вывод о существовании долгоживущих бризеров можно будет только на основании моделирования, подразумевающего ненулевую температуру молекулы. Кроме того, используемая модель является приближенной, что также не позволяет с полной уверенностью утверждать о возбуждении мобильных бризеров в реальных молекулах на основании лишь численных экспериментов.

6. В диссертации встречаются опечатки и неточности. Например, на рисунке 2.8 в подписи по оси X указаны номера частиц с 1 по 40, тогда как в описании рисунка речь идет о частицах с номерами с 243 по 263; в Главе 3, страница 114, «реализация бистабильности <...> возможно» вместо «возможна», и другие.

Отмеченные недостатки не снижают общего хорошего впечатления от диссертации, в которой содержится решение актуальной задачи радиофизики и теории колебаний и волн. Проведенные в работе исследования представляют интерес как с фундаментальной, так и прикладной точек зрения, а результаты этих исследований могут быть использованы в университетах, ведущих подготовку студентов по радиофизическим направлениям (в Нижегородском, Саратовском, Томском, Московском университетах) в курсах лекций по радиофизике и нелинейной динамике.

Автореферат корректно и достаточно полно отражает содержание диссертации и оформлен согласно известным требованиям.

По результатам диссертационного исследования опубликовано 7 статей в ведущих отечественных и зарубежных журналах, входящих в перечень ВАК для публикации материалов кандидатских и докторских диссертаций, и 5 работ в сборниках тезисов конференций. Результаты исследований прошли апробацию на 12 международных научных конференциях.

Содержание работы и представленные результаты соответствует паспорту специальности 01.04.03 - Радиофизика.

Полагаю, что диссертационная работа Сергеева Константина Сергеевича «Колебательные и волновые явления в упорядоченных и неупорядоченных ансамблях взаимодействующих частиц» удовлетворяет требованиям п. 9-11, 13, 14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24.09.2013 г., предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Сергеев Константин Сергеевич, заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.03 – Радиофизика.

Официальный оппонент:

доктор физико-математических наук по специальности 01.04.03 – Радиофизика,

профессор, заведующий отделом нелинейной динамики Федерального государственного учреждения «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики Российской академии наук (РАН)»



Некоркин Владимир Исаакович
20.11.2018 г.

Почтовый адрес:
603950, г. Нижний Новгород, БОКС-120,
ул. Ульянова, 46
Телефон: +7 (831) 4367291
E-mail : vnekorkin@neuron.appl.sci-nnoy.ru
Согласен на обработку персональных данных.

Подпись В.И. Некоркина заверяю
Ученый секретарь ИПФ РАН
кандидат физико-математических наук



И.В. Корюкин