



Instytut Chemii Fizycznej
Polskiej Akademii Nauk
Kasprzaka 44/52
01-224 Warszawa, Polska



Streszczenie rozprawy doktorskiej
DYNAMIKA UKŁADÓW CHEMICZNYCH DALEKICH OD
RÓWNOWAGI: PODEJŚCIE MIKROSKOPOWE I
MEZOSKOPOWE

Piotr Dziekan

Promotor:

dr hab. Bogdan Nowakowski,

prof. nadzw. IChF PAN

Instytut Chemii Fizycznej PAN,

Warszawa, Polska

Kopromotor:

dr hab. Annie Lemarchand

Université Pierre et Marie Curie,

Paryż, Francja

Rozprawa doktorska przygotowana w ramach Międzynarodowych Studiów Doktoranckich w Instytucie Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk. Program współfinansowany z Europejskiego Funduszu Rozwoju Regionalnego, Program Operacyjny Innowacyjna Gospodarka 2007-2013.

Rozprawa przygotowana zgodnie z umową o podwójnym promotorstwie zawartą pomiędzy Instytutem Chemii Fizycznej Polskiej Akademii Nauk w Warszawie a Université Pierre et Marie Curie w Paryżu.

Warszawa, czerwiec 2014



INNOVATIVE ECONOMY
NATIONAL COHESION STRATEGY



Foundation for Polish Science

EUROPEAN UNION
EUROPEAN REGIONAL
DEVELOPMENT FUND



Wiele układów nieliniowych w warunkach dalekich od stanu równowagi jest wysoce czułych na fluktuacje wewnętrzne. Rozprawa ta poświęcona jest badaniu na dwóch poziomach dokładności efektów stochastycznych w niektórych ogólnych modelach typu reakcja-dyfuzja. W podejściu mezoskopowym dynamikę układu opisuje równanie master, które może być rozwiązywane numerycznie bądź może służyć za podstawę symulacji metodą kinetic Monte Carlo. Natomiast na poziomie mikroskopowym używane są cząsteczkowe symulacje komputerowe. Te dwie metody stochastyczne porównane są z deterministycznymi, makroskopowymi równaniami reakcja-dyfuzja.

Moją rozprawę doktorską stanowi zbiór 6 publikacji, które są poprzedzone wprowadzeniem do tematyki rozprawy i krótkim omówieniem każdej z nich.

We Wstępie zaprezentowane są kluczowe informacje o stosowanych metodach opisu, razem z podstawami dynamiki układów nieliniowych i algorytmami numerycznymi stosowanymi w badaniach.

Pierwsza część rozdziału Wyniki poświęcona jest badaniom nad zaburzeniem rozkładu prędkości cząstek wywołanym przez szybkie reakcje chemiczne. Rozważany jest wpływ tego zaburzenia na front chemiczny i układ bistabilny. Przedstawione jest równanie master uwzględniające to zaburzenie, a jego rozwiązanie porównane jest z symulacjami mikroskopowymi.

Druga część Wyników traktuje o powstawaniu struktur przestrzennych w układach reakcja-dyfuzja w kontekście biologii rozwoju. Opracowana została metoda symulacji mikroskopowych powstawania struktur Turinga przy użyciu algorytmu direct simulation Monte Carlo. Następnie jest ona stosowana dla wyjaśnienia za pomocą mechanizmu Turinga wyników eksperymentów polegających na zaburzaniu podziału osi podłużnej zarodków kręgowców. Na koniec przedstawiony jest model reakcja-dyfuzja dla innego postulowanego mechanizmu podziału osi podłużnej, nazywanego "clock and wavefront".