

Факултет за физичку хемију

(Број захтева)

(Датум)

Образац 2.
УНИВЕРЗИТЕТ У БЕОГРАДУ
Веће научних области
природних наука

З А Х Т Е В

за давање сагласности на извештај о урађеној докторској дисертацији

Молимо да, сходно члану 46. став 5. тачка 3. Статута Универзитета у Београду (Гласник Универзитета", број 131/06), дате сагласност на реферат о урађеној докторској дисертацији кандидата: **мр физ. хем. Стевана (Никола) Благојевића.**

КАНДИДАТ: **мр физ. хем. Стеван (Никола) Благојевић** пријавио је докторску дисертацију под називом: "**Једнодимензионе мапе комплексних и хаотичних осцилација реакције Bray-Liebhafsky**".

Универзитет је, дана 27.03.2014. године, својим актом, 02 број: 61206-1512/2-14 МЦ од 27.03.2014. године, дао сагласност на предлог теме докторске дисертације која је гласила: "**Једнодимензионе мапе комплексних и хаотичних осцилација реакције Bray-Liebhafsky**".

Комисија за оцену и одбрану докторске дисертације **мр физ. хем. Стевана (Никола) Благојевића** образована је на седници Наставно-научног већа Факултета одржаној 20.06.2014. године, одлуком Наставно-научног већа Факултета, број 678/1 од 20.06.2014. године, у саставу:

Име и презиме члана Комисије	звање	научна област
1) др Љиљана Колар-Анић	редовни професор	физичка хемија - биофизичка хемија и динамика неравнотежних процеса
2) др Никола Вукелић	ванредни професор	физичка хемија - контрола и заштита животне средине
3) др Драгомир Станисављевић	редовни професор	физичка хемија - биофизичка хемија и динамика неравнотежних процеса
4) др Жељко Чупић	научни саветник	физичка хемија - биофизичка хемија и динамика неравнотежних процеса
5) др Ана Ивановић-Шашић	научни сарадник	физичка хемија - биофизичка хемија и динамика неравнотежних процеса

Наставно-научно веће Факултета прихватило је извештај Комисије за оцену и одбрану докторске дисертације на седници одржаној дана **11.09.2014.** године.

Прилог:

1. Извештај Комисије са предлогом,
2. Одлука Наставно-научног већа Факултета о усвајању извештаја,
3. Примедбе дате у току стављања извештаја на увид јавности, уколико је таквих примедби било.

Д е к а н
Факултета за физичку хемију

Проф. др Шћепан Миљанић

Na osnovu članova 103. i 104. Statuta Univerzitet u Beogradu - Fakulteta za fizičku hemiju, Nastavno-naučno veće Fakulteta, na XI redovnoj sednici, održanoj 11.09.2014. godine, donosi sledeću

O D L U K U

1.- Prihvata se pozitivni izveštaj Komisije za ocenu i odbranu doktorske disertacije kandidata **mr fiz. hem. Stevana (Nikola) Blagojevića**, pod nazivom: "**Jednodimenzione mape kompleksnih i haotičnih oscilacija reakcije Bray-Liebhfasky**", Komisije u sastavu:

- 1) dr Ljiljana Kolar-Anić, redovni profesor, Fakultet za fizičku hemiju,
- 2) dr Nikola Vukelić, vanredni profesor, Fakultet za fizičku hemiju,
- 3) dr Dragomir Stanisavljev, redovni profesor, Fakultet za fizičku hemiju,
- 4) dr Željko Čupić, naučni savetnik, IHTM-Centar za katalizu i hemijsko inženjerstvo,
- 5) dr Ana Ivanović-Šašić, naučni saradnik, IHTM- Centar za katalizu i hemijsko inženjerstvo,

2.- Univerzitet je, dana 27.03.2014. godine, svojim aktom 02 broj: 61206-1512/2-14 MC od 27.03.2013. godine, dao saglasnost na predlog teme doktorske disertacije koja je glasila: "**Jednodimenzione mape kompleksnih i haotičnih oscilacija reakcije Bray-Liebhfasky**".

3.- Objavljeni rezultati koji čine deo doktorske disertacije:

1. Radovi u istaknutim međunarodnim časopisima (M22)

1. S. N. Blagojevic; Ž. Čupić; A. Ivanović-Šašić; Lj. Kolar-Anić, „Mixed-mode Oscillations and Chaos in Return Maps of an Oscillatory Chemical Reaction“, INTERNATIONAL JOURNAL OF NON-LINEAR MECHANICS, Prihvaćen za štampu.

2. Radovi u međunarodnim časopisima (M23)

1. Lj. Kolar-Anić, S. M. Blagojević, N. Pejić, N. Begović, **S. N. Blagojević**, S. Anić, «New evidence of tranient complex oscillations in a closed, well-stirred Belousov-Zhabotinsky system», JOURNAL OF THE SERBIAN CHEMICAL SOCIETY, 71 (2006), 6, 605-612

2. S. M. Blagojević, S. Anić, Ž. Čupić, **S. N. Blagojević**, Lj.Kolar-Anić, “Numerical evidence of complex nonlinear phenomena of the Belousov-Zhabotinsky oscillatory reaction under batch conditions”, RUSSIAN JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A, (2013), vol. 87 br. 13, str. 2140-2145

4.- Izveštaj Komisije za ocenu i odbranu o urađenoj doktorskoj disertaciji dostavlja se Univerzitetu u Beogradu – Veću naučnih oblasti prirodnih nauka, radi davanja saglasnosti na isti.

5.- Po dobijenoj saglasnosti iz tačke 2., kandidat može da pristupi odbrani doktorske disertacije.

Odbrana doktorske disertacije je javna. Datum i mesto odbrane se oglašavaju na Web lokaciji Fakulteta i oglasnoj tabli Fakulteta, najmanje tri dana pre odbrane.

Doktorska disertacija se brani pred komisijom, koja po završenoj odbrani ocenjuje kandidata, utvrđujući da je "odbranio" ili "nije odbranio" disertaciju.

Odluku dostaviti:

- kandidatu,
- Komisiji,
- Stručnom veću
Univerziteta,
- Arhivi Fakulteta.

D e k a n
Fakulteta za fizičku hemiju

Prof. dr Šćepan Miljanić

Na IX redovnoj sednici Nastavno-naučnog veća Fakulteta za fizičku hemiju, održanoj 20.06.2014. godine, imenovani smo u Komisiju za ocenu i odbranu doktorske disertacije Stevana Blagojevića, magistra fizičko-hemijskih nauka, pod nazivom:

**"JEDNODIMENZIONA MAPE KOMPLEKSNIH I HAOTIČNIH OSCILACIJA
REAKCIJE BRAY-LIEBHAFSKY"**

Nakon pregleda rukopisa doktorske disertacije podnosimo sledeći

I Z V E Š T A J

A. Prikaz sadržaja disertacije

Disertacija Stevana Blagojevića napisana je na 71 strana kucanog teksta (formata A4) i sadrži sledeća poglavlja: **Rezime** na srpskom i engleskom jeziku u kome je jasno naglašen cilj rada, **Sadržaj disertacije**, **Cilj Rada**, **Uvod** (poglavlje 1, 13 strana), **Modeliranje mehanizama i dinamičkih stanja oscilatornih reakcionih sistema** (poglavlje 2, 4 strane), **Metode ispitivanja dinamike složenih reakcionih sistema** (poglavlje 3, 11 strana), **Numeričke simulacije** (poglavlje 4, 1 strana), **Rezultati** (poglavlje 5, 35 strana), **Zaključak** (poglavlje 6, 1 strana), **Literatura** (poglavlje 7, 8 strana), **Biografija autora** (1 strana) i **Prilozi** (prilog 1 - Izjava o autorstvu, prilog 2 – Izjava o istovetnosti štampane i elektronske verzije doktorskog rada i prilog 3 – Izjava o korišćenju).

Doktorska disertacija sadrži ukupno 49 slika i 3 tabele i 112 referenci.

B. Opis rezultata teze

U poglavlju **Cilj rada** istaknuti su sadržaj i cilj doktorske disertacije.

U poglavlju **Uvod** (poglavlje 1, 13 strana) objašnjena je problematika kojom se bavi doktorska disertacija i objašnjeni su pojmovi potrebni za njeno razumevanje, kao što su ravnotežna i neravnotežna stacionarna stanja i njihova stabilnost. Posebno su razmatrane osnovne osobine oscilatornih reakcija, pa i same Bray-Liebhafsky reakcije, kao i specifična dinamička stanja takvih sistema uključujući mešane modove i deterministički haos.

U poglavlju **Modeliranje mehanizama i dinamičkih stanja oscilatornih reakcionih sistema** (poglavlje 2, 4 strane) dati se osnovni principi modeliranja dinamičkih sistema i dat je osnovni model BL oscilatorne reakcije, sa odgovarajućim konstantama brzina.

U poglavlju **Metode ispitivanja dinamike složenih reakcionih sistema** (poglavlje 3, 11 strana) prikazane su metode ispitivanja BL oscilatorne reakcije koje su korišćene u doktorskoj tezi. Uvedeni su pojmovi analize vremenskih serija, atraktora kao i konstrukcija Poincareovog preseka i jednodimenzionih (1D) mapa. Prikazane su vremenske serije,

atraktori, preseci i 1D mape na izabranim primerima BL reakcije. Uveden je i pojam fiksne tačke.

U poglavlju **Numerička simulacija** (poglavlje 4, 1 strana) naznačena je metoda kojom su vršene simulacije i dati su parametri koji su korišćeni za numeričku simulaciju BL oscilatorne reakcije. Pored korišćenog modela date su početne koncentracije, konstante brzina reakcija i relativna i apsolutna tolerancija sistema.

U poglavlju **Rezultati** (poglavlje 5, 35 strana) dati su rezultati numeričke simulacije modela BL reakcije i interpretacija dobijenih rezultata. Prvi deo se odnosi na optimizaciju numeričkih parametara simulacije, čime je pokazana zavisnost između gustine tačaka i rezultata koje prikazuju 1D mape posmatranog sistema. Posle toga su prikazani rezultati vremenskih serija na izabranom primeru, a zatim je prikazan izbor značajnih vrsta, odnosno svođenje šestodimenzionog sistema na tro- ili dvo-dimenzioni sistem. Zatim je data analiza atraktora i izbor ravni Poincareovog preseka. U drugom delu rezultata, uvedena je nova metoda za analizu 1D povratnih mapa bazirana na vezi između „spore višestrukosti“ (manifolda) i tačaka koje reprezentuju stanja sistema. Prikazana je i analiza fiksne tačke i mrežnih mapa sistema BL oscilatorne reakcije.

Dalji prikaz rezultata odnosi se na analizu mešanih modova malih i velikih oscilacija i asimptote koja ih razdvaja. Poseban deo rezultata je posvećen analizi udvajanja perioda u funkciji protoka pomoću 1D mapa. Zatim su prikazane mape sa slikama spore višestrukosti koje prikazuju promenu dinamičkih stanja sistema, mešane modove, strukturni i nestrukturni haos.

U poglavlju **Zaključak** (poglavlje 6, 1 strana) sumirani su glavni rezultati prikazani u ovoj doktorskoj disertaciji. Tu se kaže da su u radu date mogućnosti korišćenja jednodimenzionih mapa za ispitivanje dinamike složenih nelinearnih reakcionih sistema, a posebno kompleksnih periodičnih i haotičnih stanja i prelaza između njih.

Pored toga, razvijene su nove metode primene 1D mapa u analizi vremenskih serija dinamičkih sistema. Metode su primenjene na različite tipove dinamike u oscilatornoj reakciji Bray-Liebafsky.

Za dodatno bolje opisivanje sistema u radu je razvijena i po prvi put korišćena metoda analize manifolda („spore višestrukosti“). Ovom metodom je pokazano da atraktori haotičnih sistema relativno dobro oslikavaju lokalnu strukturu ove višestrukosti, jer prekrivaju njen znatniji deo, za razliku od atraktora periodičnih sistema koji sadrže mali broj tačaka, pa se na njihovim mapama ta struktura ne vidi.

Primenom jednodimenzionih mapa i metoda koje proističu iz njih, kao što je ona bazirana na ispitivanju spore višestrukosti, ona bazirana na ispitivanju tangente u fiksnoj tački ili ona bazirana na analizi mrežnih mapa, pokazano je da se jednodimenzione mape mogu uspešno koristiti za definisanje periodičnih i aperiodičnih dinamičkih stanja složenih reakcionih sistema.

C. Uporedna analiza rezultata doktorske disertacije sa rezultatima iz literature

U literaturi se navodi da se uspešnost modeliranja na bazi predloženog modela mehanizma posmatrane reakcije procenjuje na osnovu stepena usaglašenosti simuliranih rezultata sa eksperimentalnim rezultatima. Modeliranje oscilatornih reakcija koje se odigravaju u uslovima udaljenim od termodinamičke ravnoteže je dodatno otežano kompleksnošću ovih reakcija, odnosno činjenicom, da model mehanizma oscilatorne reakcije mora da opiše i brojne dinamičke fenomene karakteristične za nelinearne sisteme: pojavu predoscilatornog perioda, oscilacija, determinističkog haosa, bifurkacija, pobudljivosti oscilatornog sistema i ostale moguće oblike nelinearnosti.

U literaturi postoje eksperimentalna i teorijska ispitivanja dinamičkih stanja oscilatorne BL reakcije. Teorijska ispitivanja su zasnovana na numeričkim simulacijama procesa, a na bazi pretpostavljenog modela BL reakcije. To je upravo urađeno u ovoj disertaciji za slučaj procesa u otvorenom-protočnom reaktoru. Rezultati su saglasni sa već postojećima da su dinamička stanja veoma osetljiva na promenu brzine protoka supstanci kroz reaktor, odnosno da se složena dinamička stanja nalaze u veoma uzanom opsegu vrednosti kontrolnog parametra j_0 , odnosno u uzanom delu koncentracionog faznog prostora.

Dinamika složenih reakcionih sistema se može ispitivati na više načina. U literaturi i u disertaciji su opisani postupci: analiza vremenskih serija, analiza atraktora, bifurkaciona analiza, Poenkareovi preseki i jednodimenzione (1D) povratne mape. 1D iteracione (povratne) mape prikazuju dinamičku strukturu Poenkareovog preseka preko zavisnost $n+1$ -ve vrednosti posmatrane veličine u tački preseka atraktora od njene n -te vrednosti u prethodnoj tački preseka istog atraktora. Ove mape se relativno retko koriste u literaturi kao metoda za ispitivanje dinamičkih stanja reakcionih sistema iako je kvalitativno ponašanje 1D mapa veoma korisno da objasni i čak i predvidi različite bifurkacije.

U disertaciji je posebno razmatrana prednost 1D mapa nad drugim metodama kada je potrebno utvrditi pri kojim protocima se javljaju periodična, a pri kojim haotična dinamička stanja, odnosno deterministički kaos. U ta dva granična slučaja objašnjena je značajna razlika u broju tačaka u odgovarajućim mapama i njihovoj organizaciji. Pokazano je da ove mape mogu da opišu načine prelaza između različitih dinamičkih stanja, kao i različite scenarije pojave periodičnih i haotičnih oscilacija u nelinearnim sistemima.

Pošto je iz literature poznato da se tokom oscilovanja dešavaju procesi koji pripadaju različitim vremenskim skalama i da dinamički sistem pre dostizanja atraktora teži da se kreće po "sporoj višestrukosti" koja predstavlja skup različitih stacionarnih stanja posmatranog sistema u njegovom koncentracionom faznom prostoru u disertaciji je osmišljena posebna metoda kojom se razvoj višestrukosti sa promenama kontrolnog parametra prati kroz ceo interval vrednosti.

U disertaciji je analiziran nagib tangente u fiksnoj tački, kao mera haotičnosti sistema.

Iz 1D povratnih mapa dobijaju se mrežne mape ili Verhulst dijagrami, što je poznato iz literature, tako što se skup od n uzastopnih tačaka mape povezuje izlomljenom linijom, po sledećem postupku: Prvo se izabere početna tačka. Zatim se crta horizontalna linija do preseka sa dijagonalnom linijom koja je pod uglom 45° na x osu i polazi iz koordinatnog početka (glavna dijagonala). Nakon toga se crta vertikalna linija do sledeće tačke. Zatim se proces ponavlja na isti način. U disertaciji se mrežne mape koriste da se prikaže prelaz dinamičkog sistema sa jedne grane mape na drugu i tako se po prvi put analizira logički redosled događaja u složenim dinamičkim stanjima BL sistema.

U disertaciji je urađena numerička simulacija u celom intervalu mešanih modova, i utvrđeno je da sa povećanjem brzine protoka dolazi do povećanja udela "oscilacija malih amplituda" (OMA) u ukupnom broju oscilacija. Pošto 1D mape jasno razdvajaju male od velikih oscilacija, pokazano je da se navedena promena dinamičkih stanja lako uočava u posmatranom sistemu: raste broj tačaka u 1D mapama u delu "oscilacija malih amplituda", a smanjuje se u delu mapa sa "oscilacijama velikih amplituda" (OVA).

D. Objavljeni ili saopšteni rezultati koji čine deo teze:

1. Radovi u istaknutim međunarodnim časopisima (M22)

1. S. N. Blagojević; Ž. Čupić; A. Ivanović-Šasić; Lj. Kolar-Anić, „Mixed-mode Oscillations and Chaos in Return Maps of an Oscillatory Chemical Reaction“, INTERNATIONAL JOURNAL OF NON-LINEAR MECHANICS, Prihvaćen za štampu.

2. Radovi u međunarodnim časopisima (M23)

1. Lj. Kolar-Anić, S. M. Blagojević, N. Pejić, N. Begović, **S. N. Blagojević**, S. Anić, «New evidence of transient complex oscillations in a closed, well-stirred Belousov-Zhabotinsky system», JOURNAL OF THE SERBIAN CHEMICAL SOCIETY, 71 (2006), 6, 605-612

2. S. M. Blagojević, S. Anić, Ž. Čupić, **S. N. Blagojević**, Lj. Kolar-Anić, “Numerical evidence of complex nonlinear phenomena of the Belousov-Zhabotinsky oscillatory reaction under batch conditions”, RUSSIAN JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A, (2013), vol. 87 br. 13, str. 2140-2145

3. Radovi saopšteni na skupovima međunarodnog značaja štampani u celini (M33)

1. **S. N. Blagojević**, S. M. Blagojević, Ž. Čupić, „Dynamical system analysis for the Bray-Liebafsky reaction under CSTR conditions“, 11th International Conference of Fundamental and Applied Aspects of Physical Chemistry- PHYSICAL CHEMISTRY 2012, September 24-28, Belgrade, Proceedings, Volume 1, pp 270-272

2. **S. N. Blagojević**, S. M. Blagojević, Ž. Čupić „Numerical evidence of complex nonlinear phenomena of the Bray-Liebafsky oscillatory reaction under CSTR conditions“, SNDMIA 2012, Booklet of Abstract p 135-136, Beograd, 1-5.10.2012

E. Zaključak

Na osnovu materijala izloženog u ovom izveštaju može se zaključiti da rezultati kandidata Stevana Blagojevića, magistra fizičko-hemijskih nauka, koji daju mogućnosti korišćenja jednodimenzionih mapa za ispitivanje dinamike složenih nelinearnih reakcionih sistema, a posebno kompleksnih periodičnih i haotičnih stanja i prelaza između njih, imaju značajan naučni doprinos razvijanju i primeni metoda za ispitivanje složenih nelinearnih reakcionih sistema koji mogu ispoljiti fenomene kao što su kompleksne oscilacije i haos.

Delovi Doktorske disertacije Kandidata publikovani su u obliku jednog rada u istaknutom međunarodnom časopisu (M22), 2 rada u međunarodnim časopisima (M23), 2 saopštenja na međunarodnim skupovima štampana u celini (M33).

Na osnovu svega izloženog, Komisija predlaže Nastavno-naučnom veću Fakulteta za fizičku hemiju Univerziteta u Beogradu da predati rukopis **Stevana Blagojevića, magistra fizičkohemijskih nauka**, pod naslovom:

**" JEDNODIMENZIONA MAPE KOMPLEKSNIH I HAOTIČNIH OSCILACIJA
REAKCIJE BRAY-LIEBHAFSKY "**

prihvati kao disertaciju za sticanje stepena Doktora fizičkohemijskih nauka i odobri njenu javnu odbranu.

U Beogradu, 2. avgusta 2014. godine

Članovi Komisije za ocenu i odbranu doktorske disertacije:

dr Ljiljana Kolar-Anić, redovni profesor
Fakultet za fizičku hemiju, Univerzitet u Beogradu

dr Nikola Vukelić, vanredni profesor
Fakultet za fizičku hemiju, Univerzitet u Beogradu

dr Dragomir Stanisavljev, redovni profesor
Fakultet za fizičku hemiju, Univerzitet u Beogradu

dr Željko Čupić, naučni savetnik
Centar za katalizu i hemijsko inženjerstvo, Institut za
hemiju, tehnologiju i metalurgiju, Univerzitet u
Beogradu

dr Ana Ivanović-Šašić, naučni saradnik
Centar za katalizu i hemijsko inženjerstvo, Institut za
hemiju, tehnologiju i metalurgiju, Univerzitet u
Beogradu