ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу

Мороз Любови Игоревны «Дробно-дифференциальный подход к численному моделированию динамических откликов сегнетоэлектриков как фрактальных физических систем», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

Актуальность темы диссертационного исследования. В связи с высокой востребованностью сегнетоэлектриков в радиотехнике, акустике, оптоэлектронике, пиро- и пьезотехнике, вычислительной технике, исследование неравновесной динамики доменной структуры, фазовых переходов и гистерезисных явлений в таких материалах имеет ключевое значение. Указанные процессы часто носят комплексный характер и, несмотря на значительный прогресс в развитии специализированного оборудования, анализ многих важных явлений не всегда удается осуществить с использованием экспериментальных методик.

Диссертационная работа Л.И. Мороз посвящена развитию методов математического моделирования формирования поляризационных откликов сегнетоэлектрических материалов на основе дробно-дифференциального подхода. Научное направление, развиваемое соискателем, представляется достаточно актуальным в связи с тем, что решение поставленных задач позволяет выполнить анализ динамических откликов в сегнетоэлектрических материалах, получая информацию о поведении физических систем с использованием математических моделей и вычислительного эксперимента.

Структура и объем работы. Диссертационная работа, изложенная на 204 страницах, состоит из введения, четырех глав, заключения, библиографического списка из 297 наименований и 1 приложения. Первая глава представляет обзор литературы по предметной области, главы со второй по четвертую включают результаты собственных исследований автора, все главы взаимосвязаны. Во второй главе описаны математические модели динамических процессов, наблюдаемых в сегнетоэлектриках в условиях внешнего воздействия: инжекции электронов, нагрева, приложенного поля.

Третья глава включает конечно-разностные схемы и вычислительные алгоритмы для реализации введенных в рассмотрение математических моделей (гибридной дробно-дифференциально-стохастической модели переключения поляризации, оценки пирооткликa сегнетоэлектрика при интенсивном тепловом нагреве, дробно-дифференциальных моделей формирования поляризационных откликов на внешнее воздействие электрического поля). Четвертая глава содержит: результаты разработки системы компьютерного моделирования, проверку адекватности результатов расчетов, интерпретацию и анализ данных вычислительных экспериментов.

Научная новизна диссертационной работы заключается в следующем:

– автором разработаны: дробно-дифференциально-стохастическая модель электронно-индуцированного переключения поляризации сегнетоэлектриков на основе синтеза метода Монте-Карло и конечно-разностной схемы в концепции дробной производной Капуто; эредитарная модификация модели пирооткликa в условиях интенсивного нагрева; дробно-дифференциальная модификация термодинамической модели Ландау – Гинзбурга – Девоншира – Халатникова, позволяющая описать динамику доменной границы и гистерезисную зависимость поляризации от приложенного поля;

– для реализации каждой из представленных моделей сконструированы вычислительные алгоритмы на основе применения метода конечных разностей при решении дробно-дифференциальных задач; для нелинейных дробно-дифференциальных уравнений предложены комбинированные подходы, объединяющие итерационные процедуры и модификации конечно-разностных схем;

– представлены авторские реализации программ для ЭВМ в ППП Matlab, интегрированные в комплекс, интерфейс которого ориентирован на расчет и визуализацию нестационарных характеристик поляризационных откликов сегнетоэлектриков.

Фундаментальная и прикладная значимость работы. Основным достижением автора можно считать разработанные и представленные в диссертации дробно-дифференциальные модификации моделей формирования динамических откликов сегнетоэлектриков под внешним

воздействием, вычислительные схемы и программные средства реализации предметно-ориентированных моделей. Разработанные в диссертационной работе алгоритмы, вычислительные средства и система компьютерного моделирования позволяют проводить комплексный анализ характеристик переключения поляризации типичных сегнетоэлектриков и служат основой для прогнозирования закономерностей поведения исследуемых систем по данным вычислительного эксперимента.

Обоснованность научных положений, выводов и рекомендаций и достоверность результатов обеспечиваются использованием фундаментальных законов при построении математических моделей; корректным применением метода Монте-Карло для моделирования динамики доменов и сеточных методов для решения дифференциальных уравнений дробного порядка в присутствии эффекта памяти; верификацией результатов моделирования; согласованием с экспериментальными данными.

Общая оценка работы. Оценивая диссертационную работу в целом, можно отметить, что материал логически построен, все расчеты, приведенные с применением разработанных соискателем комплексов программ, а также аппарата математического моделирования и численных методов, выполнены на высоком научном уровне. В диссертации получены оригинальные результаты одновременно в трех областях: математическом моделировании, численных методах и комплексах программ. Автором предложен ряд математических моделей для описания динамических откликов сегнетоэлектриков как фрактальных физических систем. Разработана методика реализации математической модели и сконструированы вычислительные схемы на основе метода Монте-Карло, конечно-разностных алгоритмов, итерационной процедуры решения нелинейных дробно-дифференциальных уравнений. Проведено проектирование и программная реализация системы компьютерного моделирования.

По содержанию и оформлению диссертационной работы можно сделать отдельные **замечания**.

1. Первое положение, выносимое на защиту, сформулировано недостаточно конкретно. «Значительность» расширения функционала аппарата математического и компьютерного моделирования нестационарных откликов труднодоказуема.

2. Одна из проблем, возникающих при использовании дробных производных, заключается в том, что не существует их однозначного определения. Численные методы решения задач для уравнений с дробными производными привязаны к виду выбранной производной, поэтому возникает необходимость анализа и сравнения результатов, полученных при использовании разных определений и численных методов. В частности, для дробных производных известны определения Римана – Лиувилля, Капуто, Грюнвальда – Летникова, Рисса, Маршо, Вейля и др. Однако автор в своей работе ограничивается сравнением результатов моделирования, полученных с использованием только двух определений (Капуто и Грюнвальда – Летникова) – возможность использования альтернативных подходов не рассматривается.

3. При реализации модели Ландау – Халатникова автор допускает вариацию начальных и граничных условий. Эта часть работы изложена недостаточно системно с точки зрения обоснования физического смысла вводимых условий.

4. В четвертой главе «Комплекс программ моделирования динамических откликов…» характеристикам прикладным программ уделено недостаточно внимания. В частности, из текста не следует мнение автора о производительности и масштабируемости программ. Кроме того, алгоритм решения первой задачи о движении «зубчатой» границы допускает простое распараллеливание.

5. Поскольку основные макроскопические функции состояния, характеризующие резкое изменение поляризации сегнетоэлектриков, таких, как зависимость координаты от времени при движении доменной стенки, ток и плотность тока переключения поляризации, пиросигнал, пьезосигнал и другие, могут иметь разрывы различного рода, вопрос об условиях, при которых правомочна применимость дифференциально-интегральных методов, по определению требующих непрерывность функций, остался в работе без рассмотрения.

6. Несмотря на то что работа написана хорошим русским языком, в ней встречаются отдельные пунктуационные ошибки, пропущенные пробелы, англицизмы, возможно, как результаты прямого перевода с английского языка, например, на стр. 18: «С целью акцентирования сложного скейлинга…».

Указанные недостатки не влияют на общую положительную оценку диссертационной работы. Следует отметить, что представленная к защите диссертация носит междисциплинарный характер, работа потребовала от соискателя не только владения аппаратом математического моделирования, знаний численных методов и навыков программирования, но и глубокого погружения в прикладную область – физику сегнетоэлектрических явлений.

Заключение. Диссертация Мороз Л.И. «Дробно-дифференциальный подход к численному моделированию динамических откликов сегнетоэлектриков как фрактальных физических систем» является законченной научно-квалификационной работой, в которой содержится решение задач, имеющих значение для развития средств и методов математического и компьютерного моделирования динамических откликов сложных физических систем.

Следует отметить достаточно высокий научный уровень работы, теоретическое и прикладное значение. По материалам диссертации были опубликованы 20 работ, в числе которых 8 публикаций – в изданиях, цитируемых международными наукометрическими базами Web of Science и SCOPUS. Получены свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ. Работа прошла апробацию на научных мероприятиях национального и международного уровня. Результаты диссертации достаточно полно изложены в опубликованных работах и автореферате, полностью отражают ее содержание и выводы. Фундаментальную значимость результатов также подтверждает тот факт, что исследования, выполняемые соискателем в рамках диссертации, поддержаны грантом РФФИ.

Основные положения и результаты, полученные в диссертации Л.И. Мороз, соответствуют паспорту научной специальности 1.2.2 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» по следующим пунктам паспорта специальности: 1) реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента; 2) комплексные исследования научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента; 3) разработка систем компьютерного и имитационного моделирования.

Таким образом, диссертационная работа «Дробно-дифференциальный подход к численному моделированию динамических откликов сегнетоэлектриков как фрактальных физических систем» соответствует требованиям «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ «О порядке присуждения ученых степеней» от 24.09.2013, № 842, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а ее автор, Мороз Любовь Игоревна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Нефедев Константин Валентинович

«06» декабря 2021 г.

Официальный оппонент

Нефедев Константин Валентинович, доктор физико-математических наук, доцент, профессор департамента теоретической физики и интеллектуальных технологий.

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Дальневосточный федеральный университет»

690922, г. Владивосток, о. Русский, п. Аякс, 10,

тел. +79089620000,

e-mail: nefedev.kv@dvfu.ru

Подпись Нефедева К.В.
удостоверяю Начальник отдела
кадрового делопроизводства
ДВФУ