УТВЕРЖДАЮ:
Проректор по науке
федерального государственного
автономного образовательного
учреждения высшего образования
«Уральский федеральный
университет имени первого
Президента России Б.Н.Ельцина»,
доктор физико-математических
наук, профессор
_____ Германенко А.В.
«28» октября 2021 г.

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ
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

Диссертационная работа Мороз Любови Игоревны посвящена построению, развитию методов и алгоритмов реализации дробно-дифференциальных моделей нестационарных процессов во фрактальных физических системах, а также решению ряда актуальных задач из данной предметной области на основе результатов вычислительных экспериментов.

В современных условиях проведение комплексных исследований в области диагностики и прогнозирования поведения функциональных материалов невозможно без применения методов и средств математического моделирования. Описание состояния и определение динамических характеристик многих физических систем, обладающих сложной структурой, свойствами самоподобия или эредитарностью, приводят к привлечению специального математического аппарата, выходящего за классические рамки. Одним из направлений, активно развиваемых в последние десятилетия, является дробно-дифференциальное исчисление, которое используется для математического моделирования сложных динамических процессов в самых разнообразных предметных областях. Подобные прикладные задачи часто требуют адаптации известных или разработки новых эффективных численных методов для решения дифференциальных задач специальных видов. Кроме этого, численная реализация моделей, имеющих неклассические постановки, оказывается затруднительной или невозможной при использовании стандартных пакетов конечно-элементного анализа таких, как COMSOL Multiphysics, ANSYS, NASTRAN и др. Поэтому важнейшим элементом в общей схеме построения дробно-дифференциальных моделей физических систем занимает разработка сопут-

ствующего программного обеспечения, предназначенного для постановки и проведения вычислительных экспериментов. Это дает основание утверждать, что такое научное направление, как развитие дробно-дифференциальных подходов к математическому и компьютерному моделированию процессов, протекающих в сложно структурированных физических средах, представляется современным, перспективным и актуальным.

Оценка содержания диссертации и автореферата

Диссертационная работа включает четыре главы, первая из которых представляет литературный обзор по развиваемой научной тематике, последующие три главы обобщают результаты оригинальных исследований соискателя. Общий объем диссертации составляет 204 страницы, библиографический список содержит 297 наименований. Структура диссертации отвечает общепринятым требованиям. Каждая глава включает ряд разделов, в конце глав представлены обобщающие выводы. По всей совокупности результатов работы сформулированы выводы в итоговом заключении.

Автореферат диссертации написан лаконично и грамотно, материал изложен в логической последовательности, объем автореферата отвечает общеизвестным требованиям. Текст автореферата последовательно следует положениям ВАК и ГОСТ, дает полное представление обо всех этапах проведенных исследований. В автореферате четко обозначен личный вклад соискателя в работах, выполненных в соавторстве.

В первой главе автором представлены основы применения концепций дробно-дифференциального исчисления для математического моделирования динамических систем. Приведены базовые положения теории дробно-дифференциальных уравнений, сделан акцент на численных методах решения начальных задач для дробно-дифференциальных уравнений и начально-граничных задач для дробно-дифференциальных уравнений с частными производными. Описаны примеры применения аппарата дробного дифференцирования для моделирования сложных физических сред. Определен объект приложений обобщенных математических моделей диссертационной работы как динамические отклики класса полярных диэлектриков – сегнетоэлектрических материалов. Сформулирована гипотеза диссертационного исследования.

Вторая глава посвящена математической формализации моделей формирования откликов сегнетоэлектриков в режиме инжекции пучка электронов, интенсивного нагрева и в условиях переключения. С учетом специфики предметной области автор вводит дробно-дифференциальные модификации моделей динамики доменной границы, теплопроводности и переключения поляризации в сегнетоэлектриках. В математической форме представлены два класса задач: начальная задача для дробно-дифференциального уравнения первого порядка и начально-граничная задача для уравнения аномальной диффузии. Особенного внимания заслуживает впервые предложенный дробно-дифференциальный аналог модели Ландау-Гинзбурга-Девоншира-Халатникова для описания сегнетоэлектрического гистерезиса.

В третьей главе диссертации конструируются вычислительные схемы и формализуются алгоритмы, предназначенные для реализации математических моделей. В силу прикладной направленности диссертационной работы, автор «встраивает» численные методы решения дробно-дифференциальных задач в общие гибридные вычислительные схемы реализации моделей. В первом разделе приведены схемы типа «предиктор-корректор» решения

дробно-дифференциального уравнения (на основе определений Грюнвальда-Летникова и Капуто), которые далее комбинируются с процедурой метода Монте-Карло (имитирующей рост доменов) и численным расчетом тока переключения. Во втором разделе численная схема решения дробно-дифференциального уравнения теплопроводности лежит в основе алгоритма расчета пироэлектрического тока. Третий раздел включает численную методику решения дробно-дифференциального уравнения с частными производными как в составе модели Ландау-Халатникова, так и в обобщенной постановке уравнения аномальной диффузии.

В четвертой главе представлены результаты разработки системы компьютерного моделирования, проведены проверка адекватности результатов моделирования, интерпретация и анализ данных вычислительных экспериментов. Описаны спецификация требований программного обеспечения, архитектура и режимы работы программного комплекса. Отмечено, что комплекс программ имеет модульную структуру и решает все рассмотренные классы задач. Для проверки адекватности работы алгоритмов представлено сопоставление данных с результатами решения тестовых задач. Показана практическая сходимость вычислительных схем на основе их тестирования при варьировании параметров, отвечающих за разностные сетки. Проведена серия вычислительных экспериментов по реализации моделей динамических откликов сегнетоэлектриков. Для реализации моделей проведены инициализация и обоснование выбора параметров, соответствующих данным натурных экспериментов, и параметров управления вычислительным процессом.

В заключении соискателем приведены основные результаты.

Перечисленный объем проведенных исследований указывает на достаточно высокий научный уровень соискателя, владеющего специальными знаниями в научных областях: численные методы, математическое и компьютерное моделирование. Представленный материал свидетельствует о том, что автор способен формулировать научные гипотезы, ставить и решать теоретические и прикладные задачи, в частности, применительно к конкретной предметной области, проводить интерпретацию и анализ полученных результатов.

Новизна диссертационного исследования

Диссертантом получены следующие новые результаты:

1. Разработан и реализован гибридный дробно-дифференциально-стохастический подход к математическому моделированию электронно-индуцированной кинетики переключения поляризации сегнетоэлектриков на основе синтеза конечно-разностной схемы типа «предиктор-корректор» в концепции определения дробной производной Капуто и метода Монте-Карло для имитации процесса зародышеобразования при перестройке доменной структуры сегнетоэлектрика.

2. Предложена модификация модели эредитарного процесса формирования пироэлектрического отклика сегнетоэлектрика в условиях интенсивного нагрева. Сконструирована и программно реализована вычислительная схема, которая строится на базе аналога схемы Кранка – Николсон при аппроксимации производной дробного порядка Грюнвальда – Летникова для решения нелинейного дробно-дифференциального уравнения теплопроводности.

3. Предложена дробно-дифференциальная модификация термодинамической модели Ландау – Гинзбурга – Девоншира – Халатникова, описывающая динамику процесса перестройки доменов сегнетоэлектрика в процессе переключения и гистерезисную зависимость поляризации от приложенного поля. Разработана вычислительная схема повышенного по-

рядка точности для численного решения уравнения аномальной «реакции-диффузии», лежащей в основе математической модели. Вычислительная методика построена на основе комбинации итерационного подхода и неявной конечно-разностной схемы для решения полулинейного дробно-дифференциального уравнения с частными производными Капуто.

4. Предложенные вычислительные алгоритмы реализованы в виде прикладных программ в ППП Matlab, интегрированных в комплекс. Интерфейс системы компьютерного моделирования ориентирован на расчет и визуализацию нестационарных характеристик поляризационных откликов сегнетоэлектриков в различных режимах.

5. С использованием технологии вычислительного эксперимента проведены исследования закономерностей изменения полярного состояния типичных сегнетоэлектрических материалов в неравновесных внешних условиях: инжекции электронного пучка, интенсивного нагрева и воздействия внешнего периодического поля.

Основные и оригинальные результаты, полученные соискателем, сформулированы в виде научных положений, выносимых на защиту.

Степень обоснованности и достоверности научных положений, выводов и рекомендаций

Диссертант достаточно корректно использует известные научные методы обоснования полученных результатов, выводов и рекомендаций. Соискателем изучены и критически проанализированы известные достижения и теоретические положения других исследователей, работы которых посвящены численному моделированию рассматриваемого вида физических систем на основе дробно-дифференциального подхода. Для формализации математических моделей динамических откликов сегнетоэлектриков используются фундаментальные законы природы и уже апробированные классические физико-математические модели, выбор которых научно обоснован. Автор четко определяет границы применимости математических моделей: принятые в работе системы допущений и ограничений обоснованы и отражены в полном объеме. Предлагаемые в работе алгоритмы строятся на основе эффективных численных методов решения дробно-дифференциальных задач. Развиваемые в работе подходы реализации математических моделей логичны по построению, аргументированы и корректно применены. Этапы проектирования и разработки программного обеспечения детально описаны и отвечают стандартным требованиям. Выбор объектов и параметров моделирования для проведения вычислительных экспериментов обосновывается автором исходя их практических приложений и условий постановки физических экспериментов.

Достоверность результатов обеспечивается использованием современных средств и методов математического моделирования при проведении исследований, непротиворечивостью и логичностью конструируемых алгоритмов решения задач, обоснованностью используемых приближений. Адекватность результатов, полученных с помощью вычислительных экспериментов для ряда модельных объектов, контролируется практической сходимостью результатов численного моделирования с результатами аналитических расчетов для предельных режимов и, в допустимых случаях, сравнением с экспериментальными данными.

Теоретическая и практическая значимость.

Результаты, полученные в диссертационной работе Мороз Л.И., обладают научной значимостью. Теоретическая значимость работы заключается в разработке подходов к мате-

матическому описанию формирования динамических откликов сегнетоэлектриков на внешние воздействия различной природы (облучение, нагрев, внешнее поле). Автором предложена концепция обобщения дифференциальных моделей в этой предметной области на основе построения дробно-дифференциальных аналогов, которые во многих случаях позволяют варьировать динамические режимы и находить решения, еще более точно соответствующие данным натурных экспериментов. Численный алгоритм решения уравнения аномальной диффузии может быть адаптирован и к реализации математических моделей из других областей знаний: химические превращения, тепломассоперенос, экологическое прогнозирование, формирование цен в опционах и др.

Практическая значимость состоит в возможности прогнозирования (с помощью разработанных программных решений и проведенных вычислительных экспериментов) закономерностей, характеризующих процессы перестройки доменной структуры и переключения поляризации – базовые процессы, обуславливающие широкий спектр применения этих материалов в качестве функциональных элементов микроэлектронной техники.

Как следует из диссертации, разработанные математические модели и программные средства используются в учебном процессе Амурского государственного университета, в курсовом проектировании, выполнении научно-исследовательских работ и написании выпускных квалификационных работ студентами, обучающимися по направлениям подготовки «Прикладная математика и информатика».

Публикация и апробация основных научных результатов диссертации

Список научных работ автора представляется достаточным и включает 20 наименований, в том числе: 3 статьи в ведущих рецензируемых журналах, рекомендованных ВАК РФ; 6 публикаций в реферируемых изданиях, цитируемых международными базами Web of Science и Scopus; 2 статьи в региональных изданиях; 9 материалов докладов в сборниках международных, всероссийских и региональных конференций. Получены три свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ.

Основные результаты по материалам диссертационной работы соискателя были представлены и обсуждались на научных мероприятиях регионального, всероссийского и международного уровня.

Общие замечания и вопросы по диссертационной работе

Диссертация Л.И. Мороз имеет ряд недостатков, которые по итогам обсуждения можно сформулировать в виде следующих замечаний и вопросов.

1. Первая глава диссертации, где даются вводные сведения и делается обзор научных результатов по теме работы, написан подробно, порой даже слишком подробно. Однако не упомянуты пионерские работы Мухамеда Хабаловича Шханукова-Лафишева в области численных методов решения дробных дифференциальных уравнений, например, М.Х. Шхануков. О сходимости разностных схем для дифференциальных уравнений с дробной производной // Доклады АН, 1996, т. 348, № 6, С. 746 – 748, написанные задолго до упомянутых в обзоре работ. Нет и упоминания работ его учеников А.А. Алиханова, М.Х. Бештокова, которые сейчас активно работают в данном направлении.

2. В разделе 3.1 изложен численный метод (типа прогноз-коррекция) решения начальной задачи для дробного дифференциального уравнения, который затем применяется в рас-

четах. В автореферате указан порядок аппроксимации без обоснований, а в диссертации на странице 107 стоит ссылка на работу [59], где рассматривается совсем другой объект, этого утверждения нет. Хотелось бы знать свойства этого метода, в частности, порядок сходимости.

3. Подобный вопрос возникает для численного метода решения линейного дробного уравнения диффузии, описанного в разделе 3.2. Хотя метод состоит из комбинации известных методик, в целом численный метод требует проведения дополнительного теоретического исследования.

4. В разделе 3.3 описывается методика численного решения нелинейного дробного по времени уравнения параболического типа. Основной момент методики состоит в итерационном процессе, на каждом шаге которого решаются линейные уравнения. Возникает вопрос об исследовании сходимости приближенного решения к точному решению исходной задачи.

5. В целом диссертация аккуратно оформлена, однако встречаются опечатки, стр. 35 первая строка, стр. 55, пятая строка. На стр. 22 нет расшифровки обозначения «AC». После уравнения (1.16) вводится расшифровка обозначений, но введенная величина A в уравнении не используется. С некоторыми терминами автор обращается достаточно вольно, без соответствующих определений: «практическая сходимость» (стр. 8 и далее); «нерегулярные» структуры (стр. 38); определение «синергетика», данное на стр. 48, слишком вольное. На стр. 68 фраза о прототипе и саттелите проблематики выглядит слишком формальной. На стр. 76 стоит сомнительная ссылка на использование «метода неподвижной точки Садовского». На стр. 117 написана сомнительная фраза «Использование приближения высокого порядка может привести только к соответствующей устойчивости численной схемы».

Тем не менее, отмеченные недостатки, отсутствующие пояснения и возникшие вопросы к соискателю не влияют на главные теоретические и практические результаты диссертации и не меняют общую положительную оценку диссертации.

Заключение

Полученные соискателем результаты достоверны, выводы и заключения научно обоснованы. Материал диссертации изложен вполне конструктивно и содержит большой потенциал новизны одновременно в трех научных областях: математическом моделировании, численных методах и комплексах программ. Оформление текста соответствует требованиям, предъявляемым к диссертационным работам, научный стиль диссертации выдержан. Основные научные результаты достаточно полно опубликованы в работах соискателя. Автореферат диссертации отражает ее основное содержание.

Диссертационная работа Л.И. Мороз представляет собой законченную научно-квалификационную работу, в которой содержится решение важной научной задачи, имеющей значение для развития подходов к математическому и компьютерному моделированию сложных физических систем. На основании детального анализа материалов диссертации соискателя, можно заключить, что результаты выполненных исследований обладают значимостью для развития научной специальности 1.2.2 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» (05.13.18).

Таким образом, по своей актуальности, научной новизне, объему выполненных исследований и практической значимости полученных результатов диссертационная работа отвечает критериям Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного Постановлени-

ем Правительства РФ от 24.09.2013 № 842, 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».

Доклад по диссертационной работе Л.И. Мороз был заслушан на научном семинаре кафедры вычислительной математики и компьютерных наук федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина». Отзыв на диссертацию обсужден и утвержден на этом же семинаре в качестве официального отзыва ведущей организации, протокол № 7 от «27» октября 2021 г.

Отзыв подготовил: В.Г. Пименов

«27» октября 2021 г.

Пименов Владимир Германович, заведующий кафедрой вычислительной математики и компьютерных наук федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина», доктор физико-математических наук, профессор
Адрес: 620000, Екатеринбург, пр. Ленина, 51.
Телефон: +7(343)389-94-29
Адрес электронной почты: v.g.pimenov@urfu.ru

Я, Пименов Владимир Германович, автор отзыва ведущей организации на диссертацию Мороз Любови Игоревны на тему «Дробно-дифференциальный подход к численному моделированию динамических откликов сегнетоэлектриков как фрактальных физических систем» в соответствии с требованиями Федерального закона от 27.07.2006 №152-ФЗ «О персональных данных» настоящим даю согласие Федеральному государственному бюджетному учреждению науки Институту автоматики и процессов управления ДВО РАН, место нахождения: 690041, г. Владивосток, ул. Радио, д. 5, на базе которого создан диссертационный совет Д 24.1.027.01, на обработку моих персональных данных, связанных с работой диссертационного совета.

В.Г. Пименов

«27» октября 2021 г.

ПОДПИСЬ Пименова В.Г.
ЗАВЕРЯЮ.
УЧЕНЫЙ СЕКРЕТАРЬ УРФУ
МОРОЗОВА В.А.