О Т З Ы В

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

Диссертация Л.И. Мороз посвящена весьма важной и актуальной теме применения дробно-дифференциального подхода к исследованию сегнетоэлектриков как фрактальных физических систем. В настоящее время методы фрактального и мультифрактального анализа все более широко используются при математическом моделировании сложно-структурированных физических сред. В связи с этим диссертация Л.И.Мороз, целью которой является разработка математического, алгоритмического и программного обеспечения для численной реализации дробно-дифференциальных моделей формирования нестационарных откликов фрактальных физических систем с памятью в приложении к задачам прогнозирования характеристик переключения поляризации типичных сегнетоэлектриков, представляет значительный интерес.

Диссертация состоит из введения, четырех глав и заключения.

Во введении обосновывается актуальности темы диссертации и степень ее разработанности, цель и задачи, методы исследования, научная новизна, практическая значимость работы и основные положения, выносимые на защиту.

Первая глава диссертации содержит весьма подробный литературный обзор основ дробно-дифференциального подхода, а также его использования для математического моделирования фрактальных физических систем, в частности сегнетоэлектрических материалов. Отмечается, что сегнетоэлектрические материалы во многих отношениях ведут себя как эредитарные среды («среды с памятью»), обладающие фрактальной структурой. Отмечается, что в современной литературе модели в постановке дробно-дифференциальных уравнений практически не представлены.

Во второй главе приведены разработанные на основе дробно-дифференциального подхода ряд математических моделей для моделирования динамических процессов в сегнетоэлектриках при внешних воздействиях.

В частности, предложена гибридная дробно-дифференциально-стохастическая модель в виде начальной задачи для обыкновенного дифференциального уравнения дробного порядка электронно-индуцированной кинетики переключения сегнетоэлектриков в которую включен механизм сквозного роста доменов. Сформулирована дробно-дифференциальная модель теплопроводности применительно к задаче исследования пироотклика сегнетоэлектрика в условиях интенсивного

нагрева. Представлены эредитарные модификации нестационарных моделей Ландау – Гинзбурга – Девоншира – Халатникова, описывающие полярное состояние сегнетоэлектриков на основе термодинамического подхода. Сформулирован эредитарный аналог обобщенной модели Ландау – Гинзбурга – Девоншира – Халатникова в постановке начально-граничной задачи для полулинейного уравнения с частными производными с дробной производной по времени.

Третья глава диссертационной работы посвящена разработке вычислительных схем, реализующих математические модели формирования динамических откликов сегнетоэлектриков.

Разработана вычислительная схема для реализации гибридной дробно-дифференциально-стохастической модели переключения поляризации сегнетоэлектриков. Построена схема типа «предиктор-корректор» на основе формулы Грюнвальда – Летникова и введена схема прогноза и коррекции на основе определения Капуто. Сформулирован вычислительный алгоритм для решения задачи оценки пироотклика сегнетоэлектрика при интенсивном тепловом нагреве. Предложены вычислительные алгоритмы реализации дробно-дифференциальных моделей формирования поляризационных откликов на внешнее воздействие электрического поля. Конечно-разностная схема для реализации аналога модели Ландау – Халатникова в постановке задачи Коши для обыкновенного дробно-дифференциального уравнения строится с использованием определения Капуто. Для реализации обобщенной модели Ландау – Халатникова в постановке начально-краевых задач для уравнения с частными производными дробного порядка построены две альтернативные схемы – на основе определения Грюнвальда – Летникова и на основе определения Капуто, являющиеся комбинациями метода конечных разностей и итерационных процедур и позволяющими строить вычислительные алгоритмы для решения полулинейных дробно-дифференциальных задач.

Четвертая глава диссертации посвящена анализу результатов разработки системы компьютерного моделирования и численному исследованию построенной вычислительной схемы.

В частности, анализ погрешностей позволяет заключить, что неявная схема, построенная с использованием определения Капуто, дает возможность проводить численное моделирование более эффективно, чем неявная схема, полученная на основе определения Грюнвальда – Летникова. Вычислены скорость сходимости вычислительного процесса и показано, что моделирование процесса аномальной диффузии при полной «памяти процесса» требует существенных вычислительных затрат, в то время как использование математических моделей с частичной «памятью» позволяет значительно снизить нагрузку на вычислительную систему.

Проведено моделирование тока переключения поляризации сегнетоэлектрика в режиме инжекции электронов на примере кристалла триглицинсульфата (ТГС) и показано, что наилучшее приближение соответствует порядку дробной производной, равному 0.73. Таким образом,

использование дробно-дифференциального подхода позволяет численно оценить «степень эредитарности» процесса переключения сегнетоэлектриков в инжекционном режиме и проводить моделирование тока переключения поляризации.

Представлены результаты моделирования пирооткликa кристалла ТГС в окрестности температуры фазового перехода. Продемонстрировано поведение температурной динамики при реализации дробно-дифференциальной модели с различными значениями порядка дифференцирования и показано, что наиболее адекватной является модель процесса теплопроводности с порядком дробного дифференцирования равным 0.7.

Проведено численное исследование дробно-дифференциальных реализаций базовых моделей (модель Ландау – Халатникова, обобщенная модель Ландау – Халатникова и квазистационарный аналог) на примере расчета гистерезисной зависимости поляризации от поля для титаната бария. Показано, что обобщенная и классическая модели приводят к одинаковым результатам для объемных кристаллов. Показано, что приемлемое согласование с экспериментальными данными соответствует порядку дробного дифференцирования равному 0.85.

Представлены результаты моделирования движения доменной границы в процессе переключения поляризации на основе дробно-дифференциального аналога обобщенной модели Ландау – Халатникова и отмечена зависимость характера движения доменной границы от порядка дробной производной по времени. Таким образом, порядок дробного дифференцирования является численной характеристикой эффекта памяти в сегнетоэлектриках, и его вариация предоставляет исследователю дополнительные возможности для проведения адекватного математического моделирования динамических откликов таких систем.

В заключении сформулированы основные результаты диссертации.

Переходя к оценке диссертационной работы Л.И.Мороз, следует, прежде всего, отметить, что она посвящена крайне актуальной теме применения подхода на основе дробного дифференцирования к исследованию сложных физических объектов – сегнетоэлектрических материалов. Этот тот случай, когда физически объект и математический аппарат для его изучения идеально подходят друг к другу. В работе получен ряд интересных и важных результатов, имеющих научное и прикладное значение.

Автореферат логичен, написан хорошим языком и полностью отражает содержание диссертационной работы.

Но есть и огрехи. Например, оформление и подпись к рис.1. Левый рисунок в подписи значится, как *a*, а на рисунке как *A*. На левом рисунке фигурирует вектор P_s черного цвета, а на правом – красного. Из рисунка не ясно, почему, показанный на правом рисунке отрезок y, можно считать шириной основания, а доменная граница x на рисунке совсем не показана.

Считаю, что диссертационная работа Любови Игоревны Мороз полностью соответствует всем требованиям ВАК Российской Федерации,

предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор достоин присуждения степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

А.Н. Боголюбов

«9» 11 2021

Боголюбов Александр Николаевич, заведующий отделением прикладной математики физического факультета федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», доктор физико-математических наук, профессор
Адрес: г. Москва, набережная Тараса Шевченко, дом 3, корп. 3, кв. 103.
Тел.: 8 (916) 492-11-40
E-mail: bogan7@yandex.ru

Я, Боголюбов Александр Николаевич, автор отзыва на автореферат диссертации 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.

А.Н. Боголюбов

Подпись профессора А.Н. Боголюбова заверяю. Нач-к /Л.К. Ковалева/

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова • Физический факультет • КАНЦЕЛЯРИЯ • МОСКВА