

УТВЕРЖДАЮ

Проректор

д.т.н., профессор И. Н. Пугачев

«19» августа 2018 г.

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ
на диссертационную работу Павельчук Анны Владимировны
«Математическое моделирование процессов зарядки
полярных диэлектриков в условиях электронного облучения»,
представленную на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук
по специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ»

Диссертационная работа Павельчук А.В. «Математическое моделирование процессов зарядки полярных диэлектриков в условиях электронного облучения» посвящена построению, развитию методов реализации и алгоритмизации математических моделей процесса зарядки в полярных диэлектриках при электронном облучении, а также решению ряда актуальных задач из данной предметной области на основе результатов вычислительных экспериментов.

Актуальность темы диссертационного исследования

В настоящее время проведение комплексных исследований научных и технических проблем в области диагностики и прогнозирования свойств перспективных материалов невозможно представить без применения современной технологии математического моделирования. Подобные прикладные задачи неизбежно требуют разработки, обоснования и тестирования эффективных методов и алгоритмов для решения задач математической физики специальных видов. Кроме того, одну из ключевых позиций в общей схеме построения и реализации математической модели физической системы занимает разработка сопутствующего программного обеспечения, предназначенного для постановки и проведения вычислительных экспериментов. Сложность построения и реализации математических моделей физических процессов часто обусловлена требованиями многопрофильной квалификации на каждом этапе – от глубокого понимания предметной области до владения методами численной математики и навыками алгоритмизации и программирования подобных систем.

Диссертационная работа Павельчук А.В. направлена на решение одной из таких комплексных задач – разработку математического, алгоритмического и программного обеспече-

ния для моделирования и анализа процесса зарядки в облученных электронами диэлектриках. Средства и методы математического и компьютерного моделирования в области, представляющей интерес для соискателя, традиционно применяют для решения следующих прикладных задач: моделирование транспорта электронов в облучаемой мишени, расчет структурных изменений материала при электронном облучении, моделирование тепловых и зарядовых процессов, обусловленных инжекцией пучка в образец, моделирование формирования изображения топографии поверхности. В основе создания и алгоритмических реализаций таких моделей лежат методы, относящиеся к различным классификационным категориям: стохастический метод Монте-Карло, методики квантово-механических расчетов, численные методы реализации детерминированных моделей, методы обработки изображений и др. Известно, что практическая реализация экспериментальных исследований часто затруднена временными, материальными затратами и сложностью интерпретации результатов натурального эксперимента, обусловленных спецификой исследуемых объектов. Это стимулирует развитие фундаментальных основ и применение методологии математического моделирования для решения задач прогнозирования свойств и поведения физических систем в условиях электронного облучения.

Математическая постановка задачи моделирования процессов типа «конвекция-реакция-диффузия» в большинстве приложений сводится к начально-граничным задачам для многомерных уравнений параболического типа. В прикладной задаче соискателя это уравнение приобретает вид «диффузионно-реакционно-дрейфового» уравнения. Как известно, для решения подобного рода уравнений разработан широкий ряд методов: методы конечных разностей, метод конечных элементов, метод конечных объемов, проекционные методы и др. В фундаментальных основах вычислительной математики применимость и эффективность различных схем и алгоритмов демонстрируется на тест-задачах, для которых известны аналитические решения. В практике математического моделирования сложных физических систем основная проблема часто заключается в выборе наиболее оптимальной методики в зависимости от специфики решаемой прикладной задачи: размерности, аналитического представления функции источника, вида граничных условий, формы записи уравнения в зависимости от способа формирования отклика системы на внешнее воздействие и др. Также подобные аспекты часто затрудняют или делают невозможным использование стандартных пакетов прикладных программ (COMSOL Multiphysics, ANSYS, NASTRAN и т.п.) для решения задач специального назначения. Это дает основание утверждать, что научная проблема, сформулированная в диссертации, как развитие подхода для математического и компьютерного моделирования динамических процессов зарядки в полярных диэлектриках при электронном облучении, требует детальной проработки и представляется достаточно актуальной.

Оценка содержания диссертации и автореферата

Рукопись диссертации состоит из четырех глав, первая из которых является обзорной, результаты оригинальных исследований автора представлены в последующих трех главах. Общий объем диссертации составляет 181 страницу, библиографический список содержит 201 наименование. 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 дает полное представление обо всех этапах проведенных исследований. В автореферате четко обозначен личный вклад соискателя в работах, выполненных в соавторстве.

В первой главе автором представлен литературный обзор по математическому моделированию инжекционных и полевых эффектов в полярных материалах при электронном облучении. Проведен анализ исследований в области разработки методов и средств математического моделирования формирования отклика физических систем на воздействие внешних источников. Акцент сделан на применении метода конечных разностей для численного моделирования процессов типа «конвекция-реакция-диффузия». Представлены базовые подходы для моделирования систем, характеризующихся эффектом с запаздыванием по времени. Общая концепция диссертации формулируется как развитие программно-целевого подхода к численному моделированию процесса электронно-стимулированной зарядки полярных диэлектриков на основе построения эффективных вычислительных методик и разработки проблемно-ориентированного программного обеспечения.

Вторая глава посвящена формулировке физико-математической модели процесса электронно-стимулированной зарядки диэлектриков и ее модификации наследственности. Соискатель формулирует содержательную и концептуальную постановку задачи, приводит описание специфических особенностей предметной области: режимов сканирования, геометрии образца и внутреннего источника, физических характеристик объекта, условий экспериментального наблюдения. На основе фундаментальных основ математической физики автор формулирует различные подходы к построению серии математических моделей процесса зарядки диэлектриков. Во второй главе также описываются схема построения стохастической модели транспорта электронов в облученной мишени и способ аналитического задания функции внутреннего источника. Один из разделов главы посвящен описанию математической постановки задачи моделирования зарядки диэлектриков электронным зондом с учетом собственной радиационно-стимулированной проводимости материала. Особого внимания заслуживает предложенная автором модификация математической модели процесса зарядки диэлектриков с учетом эффекта запаздывания по времени.

В третьей главе диссертации конструируется гибридная вычислительная схема для реализации математической модели. Автор использует синтез алгоритмов стохастического моделирования транспорта электронов в облученной мишени и конечно-разностной схемы

решения задачи математической физики. Приведено формальное представление алгоритма моделирования транспорта электронов методом Монте-Карло. Для решения диффузионно-реакционно-дрейфового уравнения предложена вычислительная методика, основанная на модификации метода переменных направлений и использовании схемы Роберта-Вейсса. Проведен качественный анализ построенной схемы: аппроксимации, устойчивости и монотонности, сформулирован вывод о сходимости. Схема адаптирована к решению задачи с запаздыванием. Формализован алгоритм расчета характеристик процесса электронно-стимулированной зарядки.

В главе 4 представлены результаты разработки системы компьютерного моделирования, проведены проверка адекватности результатов моделирования, интерпретация и анализ данных вычислительных экспериментов. Описаны спецификация требований программного обеспечения, структура и режимы работы программного комплекса. Отмечено, что комплекс программ имеет модульную структуру и решает следующие задачи: стохастическое моделирование транспорта электронов; расчет характеристик процессов стационарной и нестационарной зарядки диэлектриков. Для управления режимами работы программы разработан пользовательский интерфейс с возможностью настройки параметров вычислительных экспериментов и графического представления полученных данных. Для проверки адекватности результатов математического моделирования представлено сопоставление данных с результатами других авторов на примере тестовых задач. Показана практическая сходимость вычислительных схем на основе многоаспектного тестирования схем реализации стационарной и нестационарной моделей при варьировании управляющих параметров. Показана серия вычислительных экспериментов по моделированию характеристик электронно-индуцированной зарядки на примере перспективных сегнетоэлектриков. Для реализации математической модели проведены инициализация и обоснование выбора параметров облучения, параметров материалов и параметров управления вычислительным процессом. Использование технологии вычислительного эксперимента позволяет подбирать оптимальные режимы для наблюдения инверсии полярной структуры сегнетоэлектриков при модификации таких объектов с помощью методик электронной микроскопии.

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. Предложена гибридная вычислительная схема реализации математической модели нестационарного процесса электронно-стимулированной зарядки полярных диэлектриков, основанная на расчете методом Монте-Карло транспорта электронов в облученной мишени и

конструировании процесса решения диффузионно-реакционно-дрейфового уравнения с использованием модификации экономичного метода переменных направлений.

2. Предложены авторская математическая модель динамической зарядки диэлектриков в присутствии эффекта запаздывания и вычислительный алгоритм для реализации модели, построенный с использованием эффективной схемы расщепления.

3. Проведен синтез вычислительных алгоритмов для реализации комплексной системы дискретно-стохастического моделирования процессов инжекции электронов и непрерывно-детерминированного моделирования зарядки диэлектриков.

4. Разработан программный комплекс, интегрирующий модули расчета электронных траекторий и характеристик процесса зарядки. Разработанное программное приложение предоставляет возможности автоматизации проводимых вычислений, экспорта данных, обработки результатов и одновременно трехмерной визуализации характеристик процесса в установленном и динамическом режимах.

5. С использованием технологии математического моделирования и на основе вычислительных экспериментов впервые проведены комплексные исследования характеристик процесса зарядки (распределение потенциала, напряженности поля и поляризации) для ряда сегнетоэлектриков при параметрах, соответствующих режимам управляемого переключения под действием электронного зонда.

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

Степень обоснованности и достоверности научных положений, выводов и рекомендаций

Автор 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 математическому моделированию процессов воздействия электронных пучков на твердые тела. Для создания математических моделей полевых эффектов (процессов зарядки) электронного облучения используются фундаментальные законы природы, выбор которых научно обоснован. Математические постановки прикладных задач отвечают требованию корректности. 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 общепризнанных и эффективных методов реализации дискретно-стохастических и непрерывно-детерминированных моделей динамических систем, в том числе моделей динамических процессов с учетом наследственности. Развиваемые в работе подходы и методы 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 из 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 Павельчук А.В., обладают научной значимостью. Теоретическая значимость работы заключается в разработке абсолютно устойчивой и монотонной вычислительной схемы решения задач типа «конвекция-диффузия», которая может быть использована для численного моделирования широкого ряда явлений: химические превращения, тепломассоперенос, экологическое прогнозирование, формирование цен в опционах и др. Фундаментальной ценностью обладает математическая модель процесса зарядки диэлектриков с запаздыванием, которая расширяет границы знаний в соответствующей предметной области и служит задачам разработки теории моделирования физических систем с наследственностью.

Практическая значимость состоит в возможности получения новых закономерностей, характеризующих процессы зарядки диэлектриков, с помощью разработанных программных решений и проведенных вычислительных экспериментов. В частности, результаты диссертации позволяют прогнозировать изменение полярного состояния сегнетоэлектриков при воздействии пучка электронов. Это может найти свое применение в соответствующем направлении нанотехнологий.

Как следует из диссертации, разработанные математические модели и программные средства, отраженные в диссертации, 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 24 наименования, в том числе: 4 статьи в ведущих рецензируемых журналах, рекомендованных ВАК РФ; 4 статьи в реферируемых изданиях, цитируемых международными базами Web of Science и Scopus; 4 статьи в региональных изданиях; 12 материалов докладов в сборниках международных, всероссийских и региональных конференций. Получены два свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ.

Основные результаты по материалам диссертационной работы соискателя были широко представлены и обсуждались на отечественных и международных конференциях, симпозиумах и научных школах.

Общие замечания и вопросы по диссертационной работе

Диссертация А.В. Павельчук имеет ряд недостатков, которые по итогам обсуждения можно сформулировать в виде следующих замечаний и вопросов.

1. При построении конечно-разностной схемы автор использует различные подходы для аппроксимации нелинейного слагаемого в правой части уравнения параболического типа: в первой подсхеме используется явное значение с k -го слоя $-(\rho_{ij}^k)^2$, а во второй – произведение $\rho_{ij}^k \cdot \rho_{ij}^{k+1}$ (а не, например, $(\rho_{ij}^{k+1/2})^2$). Этот выбор требует дополнительного пояснения при изложении результатов диссертации.

2. Использование цилиндрической симметрии при постановке математической постановке задачи требует обоснования. Возникает вопрос, почему автор не использует сферическую симметрию?

3. Автору следовало уделить внимание пояснению смысла вводимых граничных условий для дифференциальной задачи.

4. В диссертации уделено внимание только двум методам приближенного решения уравнений математической физики – методу конечных разностей и методу конечных элементов. Из текста диссертации не следует мнение автора о возможности применения альтернативных подходов, например, аналитико-приближенных методов проекционной группы.

5. По структуре диссертации и стилю ее оформления можно сделать следующие замечания. Обзорная глава 1 диссертации является «перегруженной» (объем составляет около 50 страниц), в связи с чем представляется, что более удачная логика и последовательность изложения позволили бы оптимизировать объем материала в этой главе. В заключительных разделах глав и заключении диссертации встречаются затрудняющие восприятие излишне длинные фразы (представляющие абзацы из 6-8 строк), которые для лучшего восприятия следовало бы разделить на несколько предложений, правильно расставив акценты при таком изложении. В автореферате неверно сделаны ссылки на соответствующие разделы диссертации: раздел 3.1, раздел 3.2.

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 научные результаты достоверны, выводы и заключения 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 А.В. Павельчук представляет собой законченную научно-квалификационную работу, в которой содержится решение важной научной задачи, имею-

шей значение для развития подходов к математическому моделированию сложных физических процессов: предложена новая математическая модель процесса зарядки диэлектриков с учетом запаздывания, разработаны и реализованы эффективная вычислительная схема и алгоритмы в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента. На основании детального анализа материалов диссертации соискателя, можно заключить, что результаты выполненных исследований обладают значимостью для развития научной специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

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 Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 № 842, а ее автор, Павельчук Анна Владимировна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Отзыв составил:

Э.М. Вихтенко

Вихтенко Элина Михайловна, канд. физ.-мат. наук, доцент, доцент кафедры программного обеспечения вычислительной техники ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет», 680035, г. Хабаровск, ул. Тихоокеанская, 136, ауд. 324 п, тел.: +7(4212) 37-52-03, e-mail: vikht.el@gmail.com

Доклад по диссертационной работе А.В. Павельчук был заслушан на научном семинаре кафедры программного обеспечения вычислительной техники и автоматизированных систем факультета компьютерных и фундаментальных наук ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет». Отзыв на диссертацию обсужден и утвержден на этом же семинаре в качестве официального отзыва ведущей организации, протокол № 1 от «18» апреля 2018 г.

Председатель семинара

«18» 04. 2018 г.

А.З. Син

Син Александр Земсуевич, канд. физ.-мат. наук, доцент, декан факультета компьютерных и фундаментальных наук ФГБОУ ВО «Тихоокеанский государственный университет», 680035, г. Хабаровск, ул. Тихоокеанская, 136, ауд. 326 п, тел.: +7(4212) 76-17-37, e-mail: sin@mail.khstu.ru