

Отзыв официального оппонента

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»

Актуальность темы диссертационного исследования

В настоящее время развитие средств и методов математического моделирования процессов взаимодействия сосредоточенных потоков энергии с конденсированными средами является одной из важнейших задач современной прикладной математики в связи с всевозрастающими потребностями использования современной диагностической аппаратуры. Несмотря на значительный прогресс в развитии специализированного оборудования, анализ многих важных явлений воздействия источника облучения на объект представляет многоаспектную проблему, которая не всегда поддается решению на основе экспериментальных методов.

В ряде случаев применение аппарата математического и компьютерного моделирования позволяет эффективно исследовать специфические процессы взаимодействия заряженных частиц с твердым телом. Диссертационная работа А.В. Павельчук посвящена разработке методов и средств реализации математической модели одного из эффектов воздействия электронного облучения на диэлектрические материалы – эффекта зарядки. Прогнозирование подобных явлений играет ключевую роль в методиках растровой электронной микроскопии, использующих поток электронов для диагностики и модификации материалов, в том числе, для аналитического исследования наноразмерных объектов. Возникающие при таких воздействиях процессы в математическом плане относятся к классу трудноформализуемых систем и для исследования методами математического моделирования требуют применения комплексного подхода.

Поэтому направление исследований, связанное с развитием методов математического моделирования, конструированием вычислительных схем и алгоритмов реализации компьютерных моделей процессов зарядки, индуцированных внешним источником электронов в диэлектрических материалах, несомненно, представляет, как фундаментальный научный, так и практический интерес. Кроме того, на современном этапе актуальность тематики диссертационного исследования обусловлена и широким применением прикладного программного обеспечения для исследования динамических процессов в системах, помещенных в неравновесные условия обработки и эксплуатации.

Степень обоснованности научных положений, выводов и рекомендаций сформулированных в диссертации, их достоверность

Обоснованность научных положений, сформулированных в диссертации А.В. Павельчук, подтверждается следующим. В диссертации представлен подробный междисциплинарный анализ достижений и теоретических положений отечественных и зарубежных авторов, включающий известные экспериментальные данные по исследованию процессов зарядки диэлектриков при облучении электронами; математические модели, методы и программные средства моделирования конвективно-реакционно-диффузионных

систем. Автором проведено позиционирование собственных результатов в общей системе знаний, сложившейся в данной предметной области. Обоснованность положений, выводов и рекомендаций также достигается за счет: научного подхода при формализации диффузионно-дрейфовой модели с запаздыванием; теоретического и численного обоснования устойчивости и сходимости конечно-разностных схем; интерпретации данных вычислительных экспериментов в сравнении с данными натуральных экспериментов.

Достоверность научных результатов, полученных соискателем гарантируется использованием апробированных конечно-разностных методов решения полевых задач, использованием лицензионных программных продуктов, положительными результатами тестирования программного приложения и проверки адекватности результатов моделирования.

Основное содержание диссертации достаточно полно отражено в научных публикациях автора, в числе которых 4 работы, опубликованные в журналах, рекомендованных ВАК РФ, 4 – в изданиях, цитируемых международными базами Web of Science и Scopus. Авторство программ подтверждено 2 свидетельствами об государственной регистрации программ для ЭВМ. Диссертационная работа также основательно апробирована на всероссийских и международных конференциях.

Научная новизна проведенных исследований и полученных результатов

Можно отметить ряд оригинальных результатов, полученных соискателем. Существенно, что новые результаты присутствуют одновременно в трех областях: математическом моделировании, численных методах и комплексах программ.

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 для автоматизации проводимых вычислений, экспорта данных, обработки результатов с одновременной трехмерной визуализацией характеристик процесса в установившемся и динамическом режимах.

5. Методами численного моделирования проведены комплексные исследования характеристик процесса зарядки для ряда сегнетоэлектриков при параметрах, соответствующих режимам управляемого переключения под действием электронного зонда, и установлены соотношения для процессов диффузии и дрейфа, особенности геометрии внутренних источника зарядов, оптимальные соотношения для управляющих параметров.

Значимость результатов для науки и практики

Научная значимость диссертационной работы заключается в развитии методов и средств численного моделирования сложных конвективно-диффузионных физических систем. Автором предложены математическая модель, вычислительная схема, алгоритм и программная реализация, которые позволяют проводить оценку характеристик процесса электронно-индуцированной зарядки полярных диэлектриков с учетом явления запаздывания. Теоретическая ценность результата заключается в развитии фундаментальных представлений и создании математического аппарата для моделирования неравновесных физических систем. Кроме того, результаты обладают и практической значимостью – предложенные вычислительные средства могут быть эффективно использованы в экспериментальной практике для прогнозирования поведения таких материалов.

Структура и содержание диссертации

Диссертационная работа изложена на 181 странице машинописного текста, состоит из введения, четырех глав, заключения, списка цитируемой литературы и двух приложений.

Во введении обоснована актуальность диссертационной работы, сформулированы цели исследования и положения, выносимые на защиту, отражена научная новизна и практическая значимость работы.

В первой главе диссертации представлены основные модели, описывающие процессы транспорта электронов в облучаемой мишени и эффекты электронно-индуцированной зарядки полярных материалов, и дан прекрасный обзор современного состояния проблемы.

Во второй главе рассматриваются математические модели процесса электронно-стимулированной зарядки диэлектриков с учетом эффекта запаздывания.

В третьей главе строится вычислительная схема для реализации математической модели зарядки полярных диэлектриков, основанная на предварительном имитационном вычислении плотности потока электронов в образце с последующим конечно-разностным решением системы уравнений, включающую модифицированное уравнение теплопроводности, уравнение Пуассона и выражение, связывающее напряженность с потенциалом электрического поля.

Четвертая глава содержит описание системы компьютерного моделирования и результаты ее тестирования. Проведена интерпретация и анализ данных вычислительных экспериментов.

Замечания и вопросы по содержанию диссертационной работы

1. На страницах 49, 50, 51, 69, 76, 82, 89, 93, 111, 112, 124, 145 и др. содержатся очень неудачные фразы и пропущенные слова: «... существует ограниченная константа ...», «... из теории математической физики...», «... для физико-математических задач...», «физико-математическая модель», «физико-математическая постановка», «... из основ алгебры ...», «... непрерывность задачи ...» (пропущено «решения?»), «... контроль математической замкнутости ...», «... падает перпендикулярно плоскости поверхности образца в некоторую точку под некоторым углом...», «... по общепринятой для метода переменных идеологии» (пропущено «направлений?»), «литературный анализ», «норма-максимум» (имеется ввиду равномерная норма?).

2. На страницах 57 и 59 в уравнениях параболического типа для функции «*u*» допущены опечатки, меняющие тип уравнения.
3. На странице 87 автор смело использует понятие «корректная математическая модель», полагая при этом, что данное определение широко известно. Если это действительно так, то не помешала бы соответствующая ссылка.
4. На странице 22 приведено утверждение: «значение полной длины свободного пробега оказывается меньше минимального среди значений величин средних длин свободного пробега (из числа реализуемых взаимодействий) [3]». Это утверждение очевидно и не нуждается в ссылке [3], но глагол «оказывается» наводит на мысль, что это совсем не очевидно. Возможно автор хотел сказать что-то другое?!
5. На странице 70, 71 описывается алгоритм построения траекторий электронов в облучаемой мишени. Возникает много вопросов в связи с необоснованным произволом в определении доверительных интервалов для вероятности упругого и не упругого рассеяния в разных зонах мишени, и для вероятности рассеяния в разных диапазонах изменения угловой переменной. Ведь выбор этих параметров зависит от химического состава вещества в образце, его объема и энергии облучения, и не может быть одним и тем же в разных условиях вычислительного эксперимента.
6. Не понятно, как осуществлялся контроль точности вычислений в задаче транспорта электронов с помощью метода Монте-Карло. Почему использовалось число траекторий в диапазоне от 1000 до 10 000, а не в каком-то другом диапазоне? На странице 138 приведены рассуждения по поводу точности метода Монте-Карло, вызывающие лишь дополнительные вопросы. В частности, почему метод Монте-Карло применим только при решении задач, где требуется точность порядка 5-10 процентов. Оппоненту известна масса примеров, когда это не так. Например, в задачах томографии и атмосферной оптики ошибка вычислений для различных модификаций метода Монте-Карло, основанных на понижении дисперсии оценки моделируемой величины, зачастую, не превышает 1-2 процентов.
7. На первом этапе моделирования процесса зарядки полярных диэлектриков, автор находит распределение плотности электронов в облученной мишени. Фактически на этом этапе находится решение краевой задачи для интегро-дифференциального уравнения переноса электронов с помощью модификации метода Монте-Карло, называемой «оценкой по столкновениям», и затем методом наименьших квадратов осуществляется аппроксимация полученного решения функцией Гаусса или распределением Рэлея. Спрашивается зачем? Ведь в этом случае, несмотря на положительный момент, связанный дискриминацией ошибок метода Монте-Карло, происходит нежелательное искажение реальной плотности распределения электронов в веществе. С таким же успехом можно было сразу использовать диффузионно-возрастное приближение уравнения переноса, которое по форме совпадает с распределением Рэлея (2.26), приведенном на странице 80 диссертации, причем свободные параметры распределения выражаются через мощность источника и сечение рассеяния электронов без предварительного достаточно трудоемкого имитационного моделирования траекторий.

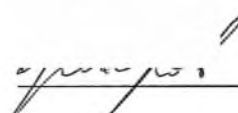
Общее заключение

Вышеперечисленные замечания не меняют общего положительного впечатления от диссертационного исследования. Считаю, что диссертация Павельчук Анны Владимировны «Математическое моделирование процессов зарядки полярных диэлектриков в условиях электронного облучения» представляет собой законченную научно-квалификационную работу на актуальную тему, в которой предложены и верифицированы новые вычислительные методики и программные средства для математического моделирования процесса зарядки диэлектриков при электронном облучении. Тематика и результаты выполненных в диссертации исследований соответствуют паспорту специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ». Полученные автором результаты являются новыми, обоснованными, достоверными и имеющими теоретическое и практическое значение. В автореферате и в публикациях соискателя в полной мере отражено содержание диссертации, а также наиболее существенные положения, выводы и рекомендации.

В целом представленная диссертационная работа удовлетворяет всем требованиям «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ «О порядке присуждения ученых степеней» от 24 сентября 2013 г. № 842, предъявляемым к кандидатским диссертациям, 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».

Официальный оппонент

«7» мая 2018 г.



Проخورов Игорь Васильевич

Проخورов Игорь Васильевич, заместитель директора по научной работе, доктор физико-математических наук.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт прикладной математики Дальневосточного отделения Российской академии наук.

690041, г. Владивосток, ул. Радио, 7,

тел. (423) 231-33-30,

e-mail: prokhorov@iam.dvo.ru

Подпись Проخورова И.В. заверяю:

