

ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ

на диссертационную работу Батановой Анастасии Александровны «Разработка методов моделирования, алгоритмов и программ для исследования свойств упругости электрически стабилизированных коллоидных кристаллов с изотропным начальным напряжением», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Диссертация Батановой А. А. посвящена разработке методов математического моделирования, а также постановке и проведению вычислительного эксперимента по исследованию свойств упругости электрически стабилизированных коллоидных кристаллов.

Актуальность темы исследования определяется стремительным развитием технологий создания новых материалов, включая ставшие возможными в последнее время процессы самосборки наноструктур и упорядоченных коллоидных систем, и возникающей в связи с этим потребностью в разработке методов и средств их численного моделирования. Вычислительный эксперимент позволяет понять и предсказать свойства новых материалов, а также прояснить механизмы, лежащие в основе их формирования.

Диссертация состоит из введения, 5 глав, заключения, списка литературы, приложений. Во введении автором проводится обоснование актуальности проблемы, излагаются основные полученные результаты.

В первой главе содержится характеристика существующих методов моделирования коллоидных систем, обосновывается выбор метода моделирования на основе уравнения Пуассона-Больцмана, дается обзор известных результатов натуральных и вычислительных экспериментов по исследованию свойств упругости коллоидных кристаллов. Также приводятся необходимые сведения по теории упругости сред с начальным напряжением.

Во второй главе предлагается метод математического моделирования коллоидных кристаллов в состоянии произвольной деформации, на основе

чего строятся алгоритмы определения упругих постоянных для кристаллов с начальным напряжением. Доказывается ряд утверждений, лежащих в основе предлагаемого подхода, формулируются соответствующие краевые задачи для уравнения Пуассона-Больцмана. Определен класс кристаллических структур, обеспечивающих изотропию начального напряжения. Умелый учет пространственной периодичности позволяет автору предложить универсальный подход к определению упругих постоянных, одинаково пригодный для все типов кристаллов с начальным напряжением.

Третья глава посвящена программной реализации предложенных алгоритмов и постановке вычислительного эксперимента по определению упругих постоянных коллоидных кристаллов с изотропным начальным напряжением. Программный комплекс обеспечивает измерение зависимостей напряжение-деформация и энергия-деформация при различных значениях параметров моделей и обработку полученных данных с целью определения упругих постоянных первого и второго порядков. Предложенные автором решения унифицируют шаги моделирования, что повышает эффективность вычислений.

Четвертая глава посвящена постановке и проведению компьютерных экспериментов с конкретными системами. Рассмотрен ряд ранее не исследовавшихся кристаллических структур, для которых получены значения упругих постоянных как функции плотности системы. Эксперименты основаны на измерении зависимости напряжения от деформации. Анализ результатов экспериментов, в частности, позволил автору сделать вывод о том, что эффективное взаимодействие во всех исследованных системах является существенно многочастичным. Также получены данные об устойчивости равновесных состояний различных кристаллов.

Пятая глава содержит описание экспериментов, проведенных для верификации метода и результатов вычислений. Проводится сопоставление результатов, полученных разными вариантами метода, и отмечается их согласованность и непротиворечивость. Также отмечается хорошее согласие результатов работы с известными данными, полученными путем измерения

силовых постоянных. Наконец, подтверждается качество результатов в специальном случае гексагональной решетки.

В целом диссертация представляет законченное исследование, являющееся решением важной научно-технической задачи. Результаты работы в полной мере опубликованы и апробированы.

В ходе работы над диссертацией Батанова А. А. проявила высокую степень самостоятельности, ответственности и тщательности в работе, целеустремленность и трудолюбие, а также продемонстрировала знание теории, методов математического моделирования, хорошие навыки программирования.

Считаю, что работа Батановой А. А. является актуальным законченным научным исследованием, полностью соответствующим паспорту специальности 05.13.18 – "Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ", соответствует требованиям, предъявляемым ВАК к кандидатским диссертациям, а ее автор, Батанова Анастасия Александровна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук.

Научный руководитель,
кандидат физико-математических наук
(научная специальность: 01.04.10 – Физика
полупроводников и диэлектриков),
доцент, доцент кафедры «Прикладная
математика и информатика» ФГБОУ ВО
«Ульяновский государственный
технический университет»
432027, г. Ульяновск, ул. Северный Венец, 32

П. Е. Дышло П. Е. Дышло
25.12.2019



И.М. МЕРДЕЕВ