

## ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

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».

Диссертационная работа А.А. Батановой посвящена аналитическому и численному исследованиям математических моделей коллоидных кристаллов с постоянным потенциалом и постоянной плотностью заряда частиц на основе уравнения Пуассона — Больцмана и определение упругих свойств таких структур при различной симметрии кристаллической решетки. В настоящее время рассматриваемые задачи востребованы в многочисленных приложениях. Решение таких задач требуют разработки и реализации новых численных методов и алгоритмов. В диссертации строятся численные алгоритмы решения поставленных задач, которые реализуются в виде комплекса компьютерных программ.

### 1. Актуальность диссертационного исследования

Актуальность работы обусловлена как теоретической, так и практической значимостью разрабатываемых и исследуемых в диссертации моделей, а также методов их построения и анализа. Методы моделирования структурированных коллоидных систем востребованы на теоретическом и практическом уровне. Это связано как с разработкой теоретических моделей таких систем, так и с их практическими приложениями. В последнее время активно конструируются, исследуются и применяются коллоидные системы, состоящие из Янус-подобных частиц. Их интересные и полезные новые свойства направленного взаимодействия открывают новые возможности для исследований в области новых материалов, а также для применения в других дисциплинах и в технологиях, таких как электронная бумага и другие.

**Объектом** исследования в работе являются упругие свойства коллоидных кристаллов с изотропным начальным напряжением. **Предметом** исследования

выступают математические модели, численные методы и алгоритмы, позволяющие проводить вычислительные эксперименты с целью изучения свойств упругости коллоидных кристаллов с изотропным начальным напряжением. **Целью** диссертационной работы является разработка и развитие математических моделей и методов моделирования процесса деформации и определения деформационных зависимостей напряжения и энергии коллоидных кристаллов, а также постановка и проведение на этой основе вычислительного эксперимента по комплексному исследованию упругих свойств коллоидных кристаллов с изотропным начальным напряжением.

Стоит особенно отметить, что сложность математического описания таких систем заключается в их уникальности и математической трудности решаемых задач при моделировании их поведения при внешних воздействиях.

В работе для достижения указанной цели решается ряд **задач**: разработка математических моделей механических и электрических свойств коллоидных кристаллов в состоянии произвольной однородной деформации; анализ моделей и исследование их свойств симметрии, выделение группы кристаллов с изотропным начальным напряжением; разработка метода математического моделирования деформации модельных коллоидных кристаллов и определения их упругих постоянных по зависимостям напряжения и энергии от деформации; разработка численных методов и алгоритмов и их реализация в виде комплекса программ для проведения вычислительных экспериментов по определению упругих постоянных коллоидных кристаллов; проведение комплексного исследования упругих свойств модельных коллоидных кристаллов при различных геометрических и электрических параметрах моделей средствами вычислительного эксперимента.

Построение моделей и разработка метода моделирования коллоидных кристаллов в диссертационной работе основаны на допущении, что свойства моделируемых систем полностью описываются нелинейным дифференциальным уравнением Пуассона — Больцмана. Деформация кристалла представлена как последовательность статических состояний, каждое из которых описывается соответствующей краевой задачей. Решение краевых задач осуществлялось хорошо апробированным методом конечных элементов, дополненным учетом периодических граничных условий для потенциала и его градиента, а также унифицированным способом генерации последовательности геометрических областей. При исследовании упругих свойств использовались



методы теории упругости сред с начальным напряжением, при этом механическое напряжение в коллоидной системе изначально описывалось тензором (а не скаляром), что позволило учесть анизотропию, в общем случае, упругих свойств кристалла. Программы, входящие в состав программного комплекса, написаны на языках высокого уровня Python 3, C++, Fortran 90, MATLAB.

## **2. Научная новизна исследований и основных результатов**

**Научная новизна и достоверность** диссертационной работы, всех основных ее результатов безусловна и подтверждается соответствующими публикациями. В работе разработаны математические модели кристаллов в состоянии произвольной однородной деформации, свободные от использования априори заданных эффективных потенциалов. Доказана изотропия начального напряжения модельных кубических кристаллов и кристаллов с квадратной и гексагональной решеткой, а также достаточные условия для определения их упругих постоянных первого и второго порядков. Разработан метод математического моделирования деформационных зависимостей напряжения и энергии коллоидных кристаллов, позволяющий определять их упругие постоянные средствами прямого вычислительного эксперимента. Численный метод и алгоритмы, реализованные в виде комплекса программ, позволяющие осуществлять вычислительный эксперимент по определению упругих постоянных первого и второго порядков кристаллов с изотропным начальным напряжением при различных значениях параметров модели. Результаты комплексного исследования коллоидных кристаллов с изотропным начальным напряжением, полученные средствами вычислительного эксперимента, включающие в себя зависимости упругих постоянных от плотности системы, данные о механической устойчивости систем по отношению к деформациям различных видов и о вкладе многочастичных взаимодействий.

## **3. Степень обоснованности и достоверности основных положений и выводов**

Достоверность положений диссертации обеспечивается корректным применением математического аппарата и численных методов, использованием

современных и актуальных методов при построении алгоритмов, сравнением результатов с результатами, полученными альтернативными методами, а также использованием при разработке программного комплекса апробированных библиотек программного обеспечения.

#### **4. Значимость для науки и практики выводов и рекомендаций диссертанта**

В результате исследований получены существенные продвижения в моделировании упругих свойств коллоидных кристаллов. Результаты, полученные при исследовании данных математических моделей, могут быть полезны в области исследований новых материалов, а также для применения в других дисциплинах и в технологиях. На основе построенных численных алгоритмов разработаны комплексы программ и проведены вычислительные эксперименты. Представленные результаты вычислительных экспериментов свидетельствуют об адекватности проведенного математического моделирования и эффективности выбранного численного метода решения поставленных задач, что создает основу для дальнейшего развития численных исследований моделей коллоидных кристаллов.

Результаты работы могут найти применение в теоретических и практических изысканиях университетов и научно-исследовательских организаций, таких как: Казанский ГУ, Ульяновский ГУ, Мордовский ГУ, Сургутский ГУ, Московский ГУ, Институт механики МГУ и других учреждениях.

#### **5. Структура и содержание диссертации**

**Объем** диссертации - 131 страница. Работа состоит из введения, пяти глав, каждая из которых завершается выводами, заключения, списка литературы (131 наименований отечественных и зарубежных источников) и пяти приложений. Объем основного текста работы составляет 126 страниц.

Во **введении** автором проводится обоснование актуальности проблемы, сформулированы цели и задачи, научная новизна, положения, выносимые на защиту; обозначены теоретическая и практическая значимость работы, внедрение результатов, методология и методы исследования, степень



достоверности результатов; приведены сведения об апробация работы и личном вкладе автора.

В **главе 1** рассмотрены теоретические подходы к моделированию электрически стабилизированных коллоидных кристаллов. Содержится обзор существующих методов моделирования коллоидных систем с обоснованием выбора метода моделирования на основе уравнения Пуассона — Больцмана, сформулированы модельные предположения и постановка задачи.

Коллоидные кристаллы, рассматриваемые в данной работе, представляют собой систему частиц твердой фазы, погруженных в жидкий бинарный симметричный одновалентный электролит. Диэлектрическая проницаемость электролита существенно превышает диэлектрическую проницаемость материала частиц. Все частицы в системе — идентичные твердые диэлектрические шары. Тепловое движение частиц пренебрежимо мало. В силу трансляционной симметрии кристалла достаточно рассмотреть только одну элементарную ячейку. При отсутствии деформации в качестве элементарной ячейки выбирается ячейка Вигнера — Зейтца. Приводится обзор имеющихся литературных данных о математическом моделировании упругих свойств в коллоидных системах и структурах. Отмечено использование ячеечных моделей для моделирования как упорядоченных (кристаллы), так и неупорядоченных систем. В конце главы содержатся краткие выводы.

В **главе 2** предложен метод определения упругих постоянных электрически стабилизированных коллоидных кристаллов с изотропным начальным напряжением. При этом приводится описание математических моделей, доказательство изотропии начального напряжения для модельных коллоидных кристаллов с простой кубической, объемноцентрированной кубической, гранецентрированной кубической, квадратной и гексагональной кристаллическими решетками. Как результат сформулировано следующее предложение: модельные кубические кристаллы, а также двумерные кристаллы с квадратной и гексагональной решетками, являются кристаллами с изотропным начальным напряжением.

Так же в этой главе дается описание метода определения упругих постоянных первого и второго порядков кристаллов с изотропным начальным напряжением и алгоритма определения упругих постоянных первого и второго порядков типа по зависимостям напряжения от деформации. В конце главы сформулированы краткие выводы.

**Глава 3** посвящена описанию численных алгоритмов и комплекса программ для моделирования коллоидных кристаллов с изотропным начальным напряжением и определения их упругих свойств. Разработанный программный комплекс реализует два основных алгоритма: первый описывает вычислительный эксперимент по определению зависимостей напряжения от деформации при изменении параметра решетки; второй — обработку результатов вычислительных экспериментов и определение упругих постоянных. Данные алгоритмы подробно описываются. Алгоритмы реализованы в виде программы на языке Python 3 с использованием библиотеки Open CASCADE Technology и языке MATLAB. В конце главы содержатся краткие выводы.

В **главе 4** предложены модели коллоидных кристаллов с различной симметрией решетки и проведено комплексное исследование их упругих свойств.

В **главе 5** проведено сопоставление результатов, представленных в главе 4, но полученными другими методами.

Материал диссертации изложен последовательно, выводы (как по главам, так и заключительные) ясны и обоснованы. На основании анализа работы можно заключить, что цель работы была достигнута, а сформулированные задачи решены.

#### **Замечания:**

1) В разделе 5.2.3 (стр. 107-108) проводится сравнение данных прямого вычислительного эксперимента по определению упругих постоянных с результатами их вычисления через силовые постоянные и делается справедливый вывод о преимуществах прямого подхода. Однако аргумент в пользу этого, приведенный в последнем предложении раздела 5.2.3, сформулирован некорректно. На самом деле, и это следует из материалов диссертации, преимущество прямого подхода обусловлено отсутствием необходимости проводить явное суммирование вкладов от соседей всех порядков, как это требуется во втором случае. Более того, как это и показано в разделах 5.2.1 и 5.2.2, для коллоидных кристаллов такое суммирование может быть эффективно проведено только для ближайших соседей не выше второго порядка.



- 2) Приведенная литература по процессам самоорганизации и самосборки упорядоченных структур достаточно старая (2005-2006 г.г.). В настоящее время очень много современных результатов по данной теме.
- 3) Поскольку рассматривается статика, то полезно было бы в диссертации сделать определенные оценки о пригодности предлагаемого подхода для динамики рассматриваемой системы.
- 4) Имеются опечатки. Так в автореферате на стр. 9 в предложении «Раздел 1.2 посвящен обзору имеющихся литературных данных о математическом моделировании упругих в коллоидных системах и структурах» пропущено слово «свойств».

## **6. Заключение**

Отмеченные недостатки являются несущественными и не влияют на общую положительную оценку диссертационной работы Батановой Анастасии Александровны «Разработка методов моделирования, алгоритмов и программ для исследования свойств упругости электрически стабилизированных коллоидных кристаллов с изотропным начальным напряжением». Данная работа представляет собой завершённое научное исследование, выполненное современными методами, и является самостоятельной законченной квалификационной работой, соответствует следующим пунктам паспорта специальности 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ: (п. 1) разработка новых математических методов моделирования объектов и явлений; (п. 4) реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительных экспериментов; (п. 5) комплексные исследования научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента.

Автореферат полностью отражает содержание работы, оформление которой соответствует требованиям ВАК России, предъявляемым к кандидатским диссертациям. Учитывая вышеизложенное, считаю, что диссертационная работа «Разработка методов моделирования, алгоритмов и программ для исследования свойств упругости электрически стабилизированных коллоидных кристаллов с изотропным начальным напряжением», представленная на соискание ученой степени кандидата

физико-математических наук соответствует пп. 9-11, 13, 14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. № 842, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.13.18 — «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Официальный оппонент:

БУ ВО «Сургутский  
государственный университет»,  
научно-образовательный центр  
политехнического института,  
главный научный сотрудник,  
д. ф.- м. н., профессор

Мартынов С.И.  
27.02.2020

Шифр специальности, по которой защищена диссертация Мартынова С.И.:  
01.02.05 — «Механика жидкости, газа и плазмы»

БУ ВО «Сургутский государственный университет»  
628412, Тюменская область, Ханты-Мансийский автономный округ — Югра,  
г. Сургут, пр. Ленина, д. 1  
Интернет-сайт: <http://www.surgu.ru/>  
Телефон: +7 (932) 436-82-79  
e-mail: [martynovsi@mail.ru](mailto:martynovsi@mail.ru)

Подпись Мартынова С.И. заверяю:

Ученый секретарь ученого совета  
БУ ВО «Сургутский  
государственный университет»  
доктор медицинских наук, профессор



Кузьмина Н. В.