

## ОТЗЫВ

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

Диссертационная работа Батановой А.А. направлена на разработку и развитие математических моделей и методов моделирования процессов деформации и определения деформационных зависимостей напряжения и энергии электрически стабилизированных коллоидных кристаллов, а также на комплексное исследование их упругих свойств в рамках предложенных в работе моделей и методов. *Актуальность* темы исследования Батановой А.А. несомненна и связана, прежде всего, с использованием стабилизированных коллоидных систем, например, для создания электродных материалов для целей водородной энергетики.

Коллоидные кристаллы, исследуемые автором, представляют собой «систему одинаково заряженных частиц твердой фазы, погруженных в жидкий электролит». Устойчивость такой системы по отношению к агрегированию частиц обеспечивается взаимодействием двойных слоев, а коллоидного кристалла – внешним давлением. В качестве основы моделирования и исследования упругих свойств коллоидных кристаллов автором используется нелинейное уравнение Пуассона-Больцмана, поскольку естественно предположить, что за эти упругие взаимодействия ответственно поле электрического потенциала. В первой модели в качестве граничного условия используется условие Дирихле – потенциал на границе задается равным некоторому постоянному потенциалу  $\varphi_0$ . Во второй модели используется условие Неймана, в котором на границе частиц твердой фазы задается равенство нормальной производной потенциала постоянному поверхностному заряду  $\sigma$ . Строго говоря, на границе частицы, помещенной в электролит, на ее границе выполняется равенство нормальных компонент электрического смещения. В обеих этих моделях  $\varphi_0$  и  $\sigma$  являются внешними параметрами задачи. Поскольку величины  $\varphi|_{\Gamma}$  и  $\partial\varphi/\partial n|_{\Gamma}$  неизвестны, по моему мнению, автору следовало бы использовать смешанное граничное условие, частными случаями которого являются как условие Дирихле, так и условие Неймана.

Тем не менее, несмотря на указанное замечание, автору удалось получить в целом ряд новых и интересных результатов:

- На основе решения нелинейного уравнения Пуассона-Больцмана сформулирован новый метод математического моделирования деформационных зависимостей напряжения и энергии коллоидных кристаллов, который дает возможность нахождения их упругих постоянных средствами прямого вычислительного эксперимента, не требующего априорного задания эффективных потенциалов взаимодействия частиц твердой фазы.
- Предложен численный метод и алгоритмы, реализованные в виде оригинального комплекса программ. Его оригинальность подтверждена Свидетельством о государственной регистрации программ для ЭВМ №2018664359 от 15.11.2018.

- Получены зависимости упругих постоянных коллоидных кристаллов с изотропным начальным напряжением от плотности системы, данные об их механической устойчивости по отношению к деформациям различных видов, а также о вкладе многочастичных взаимодействий.
- Путем компьютерного эксперимента установлено отклонение в исследуемых моделях от известного из механики упругих сред соотношения Коши, что, по мнению автора, «свидетельствует о значительном вкладе многочастичных взаимодействий в общее взаимодействие частиц в этих системах».

На основании выше изложенного можно заключить, что диссертационная работа «Разработка методов моделирования, алгоритмов и программ для исследования свойств упругости электрически стабилизированных коллоидных кристаллов с изотропным начальным напряжением» удовлетворяет требованиям к кандидатским диссертациям, установленным в п. 9 «Положения о присуждении учёных степеней», утверждённого постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г., а её автор, Батанова Анастасия Александровна, несомненно, заслуживает присуждения искомой ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Отзыв главным научным сотрудником лаборатории нелинейной динамики Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института электрофизики Уральского отделения Российской академии наук (ИЭФ УрО РАН), доктором физико-математических наук, старшим научным сотрудником Волковым Николаем Борисовичем.

Д.ф.-м.н., 01.04.13 – электрофизика, старший научный сотрудник,  
главный научный сотрудник  
лаборатории нелинейной динамики ИЭФ УрО РАН  
620016, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, д. 106  
8-(343)-267-86-60, [nbv@iep.uran.ru](mailto:nbv@iep.uran.ru)

Н.Б. Волков

Подпись д.ф.-м.н. Волкова Николая Борисовича заверяю:

Заместитель директора по НР ИЭФ УрО РАН,  
д.ф.-м.н.  
620016, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, д. 106  
8-(343)- 267-88-18, [Grey@iep.uran.ru](mailto:Grey@iep.uran.ru)



Г.Ш. Болтачев

28 февраля 2020 г.

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации,  
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки,  
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт электрофизики  
Уральского отделения Российской академии наук (ИЭФ УрО РАН)  
620016, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, д. 106  
8-(343)-267-87-96, [ss@iep.uran.ru](mailto:ss@iep.uran.ru)

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы

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

Для современной коллоидной науки характерен переход от изучения сравнительно простых дисперсий к системам со сложной микроскопической или мезоскопической структурой. В этом случае применение классических методов механики сплошной среды, термодинамики или статистической физики оказывается крайне ограниченным. Для предсказания поведения таких систем обычно используют методы молекулярной динамики, но, к сожалению, ограниченный ресурс вычислительных устройств также не позволяет определить многие детали структурной организации. Поэтому крайне важным оказывается использование общих моделей, позволяющих оценить свойства сложных систем. Одна такая модель и рассматривается в диссертации А. А. Батановой, посвященной разработке методов расчета механических свойств коллоидных кристаллов в рамках этой модели. Актуальность темы диссертационной работы не вызывает сомнения. Хотя разработке методов численного решения краевых задач для уравнения Пуассона – Больцмана посвящено большое число работ, до сих пор эти методы не применялись для оценки характеристик упругости коллоидных кристаллов. Поэтому полученные результаты, безусловно, оказываются новыми.

Коллоидный кристалл из одноименно заряженных частиц может существовать в двух случаях, либо когда к нему прикладывается внешнее давление (создается жесткая оболочка), либо когда между частицами действуют силы, отличные от электростатических. В диссертационной работе А. А. Батановой рассматривается только первый случай. Такой подход представляет интерес, прежде всего, с точки зрения разработки новых численных методов. Однако для сравнения с результатами физического эксперимента был бы более интересен второй случай. Очевидно, что его рассмотрение уже выходит за рамки одной диссертационной работы. В то же время какие-либо рекомендации по возможному обобщению развиваемых в диссертации подходов были бы полезны.

На основе автореферата можно констатировать, что представленная диссертационная работа выполнена на достаточно высоком уровне, имеет важное

практическое значение, является самостоятельным, завершённым исследованием и удовлетворяет требованиям ВАК РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям.

Считаю, что автор диссертационной работы «Разработка методов моделирования, алгоритмов и программ для исследования свойств упругости электрически стабилизированных коллоидных кристаллов с изотропным начальным напряжением» Батанова Анастасия Александровна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.13.18 — «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Отзыв подготовил: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет», Институт химии, профессор кафедры коллоидной химии, д.х.н.

Носков Б.А.

Шифр специальности, по которой защищена диссертация Носкова Б.А.:  
02.00.11 — «Коллоидная химия»

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет», 199034, Санкт-Петербург, Университетская наб., д. 7–9  
Интернет-сайт: [spbu@spbu.ru](mailto:spbu@spbu.ru)  
Телефон: +7(812)4284093  
e-mail: [b.noskov@spbu.ru](mailto:b.noskov@spbu.ru)

Подпись Носкова Б.А. заверяю:

ЛИЧНУЮ ПОДПИСЬ ЗАВЕРЯЮ  
НАЧАЛЬНИК ОТДЕЛА КАДРОВ №3



*Handwritten signature and date: 20.02.2020*

ДОКУМЕНТ  
ПОДГОТОВЛЕН  
ПО ЛИЧНОЙ  
ИНИЦИАТИВЕ

Этот документ размещен  
в открытом доступе  
на сайте СПбГУ по адресу  
<http://spbu.ru/science/expert.html>

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации

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

Диссертация Батановой А.А. направлена на разработку и развитие математических моделей и методов моделирования процесса деформации и определения деформационных зависимостей напряжения и энергии коллоидных кристаллов, а также на проведение на этой основе вычислительного эксперимента по комплексному исследованию упругих свойств коллоидных кристаллов с изотропным начальным напряжением.

Первая глава содержит теоретические подходы к моделированию электрически стабилизированных коллоидных кристаллов. Во второй главе рассматривается предлагаемый метод определения упругих постоянных электрически стабилизированных коллоидных кристаллов с изотропным начальным напряжением. В третьей главе приведено описание численных алгоритмов и комплекса программ для моделирования коллоидных кристаллов с изотропным начальным напряжением и определения их упругих свойств. Показано, что разработанный программный комплекс реализует два основных алгоритма: первый описывает вычислительный эксперимент по определению зависимостей напряжения от деформации при изменении параметра решетки, а второй - обработку результатов вычислительных экспериментов и определение упругих постоянных. В четвертой главе предложены модели коллоидных кристаллов с тремя и семью парами граней решетки, гексагональной решеткой и проведено комплексное исследование упругих свойств указанных кристаллов. В пятой главе приведены результаты сравнения полученных данных моделирования в соответствии с предложенными моделями с данными, полученными другими методами.

Актуальность и новизна работы несомненна, поскольку математическое моделирование и вычислительные эксперименты позволяют более подробно изучить происходящие физические процессы, исключить ошибки постановки физических экспериментов и зафиксировать данные, которые в реальном эксперименте не могут быть зафиксированы в силу различных причин (размеры, погрешность или инерционность датчиков, вносимые искажения в физическую картину и т. п.). И предлагаемые средства

моделирования позволяют восполнить пробел средств моделирования коллоидных систем.

В качестве замечаний к автореферату следует указать следующие.

1. Не показано обоснование выбора полиномов для аппроксимации, возможно использование сплайнов позволит наилучшим способом описать полученные данные.
2. Не отражено влияние порядка конечных элементов на получаемые результаты, а также не показаны обоснование выбора тетраэдральных конечных элементов и влияние размеров конечных элементов на сходимость результатов.

При этом считаю, что эти недостатки не являются существенными и они не влияют на положительную оценку представленной работы.

Считаю, что диссертационная работа А.А. Батановой «Разработка методов моделирования, алгоритмов и программ для исследования свойств упругости электрически стабилизированных коллоидных кристаллов с изотропным начальным напряжением» соответствует всем требованиям ВАК РФ, представляемым к работам, представленным на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, и её автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Ведущий инженер отдела по науке  
и инновационному развитию, к.т.н.



02.03.2020г.

М.Ю. Сорокин

Сорокин Михаил Юрьевич, научная специальность 05.13.05 - Элементы и устройства  
вычислительной техники и систем управления

105318, г. Москва, ул. Ткацкая, д.19, тел. (495) 363-23-01

e-mail: SorokinMU@aeroprivor.ru

Акционерное общество «Аэроприбор-Восход»

Подпись Сорокина Михаила Юрьевича подтверждаю

*Начальник группы кадрового  
администрирования  
АО «АП Восход»*



*Боровских Л. В.*

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы  
Батановой Анастасии Александровны «Разработка методов моделирования, алгоритмов и программ для исследования свойств упругости электрически стабилизированных коллоидных кристаллов с изотропным начальным напряжением», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.13.18 — «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

В диссертационной работе Батановой А.А. разрабатываются и исследуются математические модели для исследования упругих свойств коллоидных кристаллов с изотропным начальным напряжением. Поскольку методы математического описания, допускающие возможность компьютерного моделирования, для таких систем в настоящее время интенсивно развиваются, актуальность работы представляется несомненной. Теоретическая и практическая значимость диссертации обусловлена разработкой методов и средств математического моделирования упругих свойств коллоидных кристаллов, выявлением новых закономерностей их упругого поведения, а также возможностью применения предлагаемых подходов и программных средств к разработке новых материалов и технологических процессов с участием коллоидных кристаллов.

К наиболее интересным и важным результатам работы следует отнести разработку метода математического моделирования деформационных зависимостей напряжения и энергии коллоидных кристаллов, позволяющего определять их упругие постоянные средствами прямого вычислительного эксперимента подобно тому, как это делается в натуральных статических экспериментах. Разработка метода доведена до программной реализации, позволяющей проводить вычислительный эксперимент по определению упругих постоянных как исследуемых кристаллов, так и более широкого класса систем.

По материалам диссертации опубликовано достаточное количество работ, которые полно отражают ее содержание. Автореферат написан логично, доказательно, ясным научным языком, хотя в тексте встречаются отдельные опечатки.

Указанные недостатки являются несущественными и не снижают ценность представленной работы.

Считаю, что диссертация Батановой А.А. «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 требованиям ВАК России, предъявляемым к работам, представленным на соискание ученых степеней, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.13.18 — «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Отзыв подготовил:

ФГБОУ ВО «МГУ им. Н. П. Огарёва»,  
заведующий кафедрой физической химии,  
кандидат химических наук, доцент

Томилин О.Б.  
02.03.2020

Шифр специальности, по которой защищена диссертация Томилина О.Б.:  
02.00.08 — «Химия элементоорганических соединений»

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Мордовский государственный университет им. Н. П. Огарёва»  
Адрес: 430005, Республика Мордовия, г. Саранск, ул. Большевистская, д. 68.  
Интернет-сайт: <https://www.mrsu.ru/>  
Телефон: +7 (8342) 479924, 89272747230  
e-mail: tomilinob@mail.ru

Подпись Томилина О.Б. заверяю:

