

## Отзыв официального оппонента

на диссертационную работу «Моделирование инфракрасных спектров щелочно-галлоидных кристаллов» Щербаня Дмитрия Сергеевича, представленную на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 05.13.18 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

В настоящее время большое внимание уделяется проблеме создания интегрированных программных комплексов, позволяющих заменить существующие статистические методы исследования, основанные на проведении физико-химического анализа исследуемых образцов и последующей обработке полученных экспериментальных данных, математическим моделированием соответствующих характеристик их модельных прототипов.

В диссертационной работе автором показано, что задача разработки эффективных, вычислительных технологий, позволяющих достоверно моделировать поляризационные кристаллических диэлектриков в широком диапазоне, не решена окончательно. В этой связи проводимое соискателем исследование, тема которого связана с разработкой адекватной математической модели упругой ионной поляризации щелочно-галлоидных кристаллов, является весьма **актуальным**.

Основной **целью** диссертационной работы Д.С. Щербаня является разработка интегрированной совокупности вычислительных средств, позволяющей моделировать спектральные характеристики щелочно-галлоидных кристаллов, адекватные данным физических экспериментов в области установления процессов их упругой ионной поляризации.

Для достижения поставленной цели в диссертации поставлены и решены следующие задачи.

1. Анализ существующих детерминированных описаний процесса упругой ионной поляризации;

2. Структурный синтез математического описания, использующий в качестве основы системную модель, адекватно описывающую характеристики процесса;

3. Создание численного метода расчета структурно-энергетических параметров кристалла и динамических параметров процесса;

4. Разработка протокола, управляющего основным исполняемым модулем;

5. Создание программного продукта, позволяющего проводить компьютерное моделирование спектральных характеристик выбранной группы кристаллических диэлектриков. Анализ и сравнение полученных результатов со значениями в справочной литературе.

**Научная новизна** диссертационной работы Щербаня Д.С. заключается в следующем:

1. Впервые получена новая математическая модель процесса упругой ионной поляризации двухатомного кристалла, позволяющая выделить аналитическую взаимосвязь динамических параметров процесса с собственными физическими свойствами поляризуемых частиц. Данная модель отличается своей структурой от известных описаний.

2. Предложен оригинальный алгоритм, основанный на циклическом применении последовательности алгоритма прямого перебора и метода покоординатного спуска. Данный метод, в рамках использования разработанной модификации системной модели, позволяет получить значения эффективных зарядов ионов и коэффициентов сжимаемости щелочно-галогидных кристаллов, близкие к результатам классических расчетов. В результате расчетов получены различные значения эффективных зарядов аниона и катиона одного и того же материала, что отличается от известных справочных данных. Также было рассчитано значение коэффициента сжимаемости кристалла бромида цезия, ранее не отраженное в литературных источниках. Полученные значения физических величин



позволяют повысить эффективность моделирования инфракрасных спектров соответствующих веществ.

3. Разработан авторский протокол, который лежит в основе реализованного пакета прикладных программ. Данный пакет позволяет осуществлять автоматизированный расчет собственных энергетических параметров кристаллов и динамических параметров процесса, а также проводить имитационное моделирование инфракрасных спектров рассматриваемых материалов.

**Обоснованность и достоверность** научных положений, выносимых на защиту, основана на использовании фундаментальных положений классической теории поляризации и теории автоматизированного управления, обеспечивается общепризнанной надежностью используемых математических методов и компьютерных технологий, а также подтверждается внедрением разработанных программных комплексов в научно-исследовательскую деятельность.

**Практическое значение** диссертации заключается в том, что на базе разработанных в ее рамках математических моделей и численных методов были созданы три полезные модели и два программных продукта (прошедших процедуру официальной государственной регистрации), основное назначение которых заменить трудоемкий процесс проведения физических экспериментов с натурными объектами имитационным моделированием соответствующих характеристик прототипов изучаемых веществ.

При этом часть из разработанных продуктов внедрена в исследовательскую деятельность Дальневосточного государственного аграрного университета (г. Благовещенск), а также в учебный процесс кафедры информационных и управляющих систем Амурского государственного университета.

Следует отметить, что дальнейшее развитие предлагаемой соискателем методологии системного моделирования поляризационных процессов

щелочно-галлоидных кристаллов может быть направлено на апробацию применения полученных математических моделей к исследованию других кристаллических диэлектриков, например, всех кристаллов типа АВ.

**Характеристика работы.** Рукопись диссертационной работы состоит из введения, четырех глав, заключения, списка цитируемой литературы и четырех приложений. Представленный в ней материал, обладает внутренним единством, содержит новые научные результаты и положения, выдвигаемые для публичной защиты, отражает рекомендации по использованию ее основных научных выводов, а также свидетельствует о личном вкладе автора в науку.

Публикации по теме рассматриваемого исследования представлены 18 печатными работами, в числе которых 7 статей, опубликованных в отечественных журнальных изданиях, рекомендованных ВАК; 6 материалов докладов на международных и всероссийских научных конференциях и семинарах, три патента на полезные модели и два свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ.

Изучение содержания рукописи диссертационной работы позволяет отметить следующие **критические замечания**:

1. Содержание диссертации связано с исследованием линейных динамических моделей поляризационных процессов, однако само наличие молекулярных колебаний определяет нелинейность происходящих процессов. Кроме того автор не производит оценку ошибки, к которой приводит принятая им линеаризация модели.

2. Проведенное исследование не отражает вопросов влияния иных физических воздействий отличающихся от диэлектрических на результирующие поляризационные спектры щелочно-галлоидных кристаллов.

3. Не рассмотрены диэлектрические свойства кристаллов, отличных от идеальных (обладающих неоднородностями или примесями), которые присутствуют в реальных кристаллических образцах.



4. В рамках проведения вычислительных экспериментов автором не указано количественное выражение отклонения расчетной кривой от контрольных данных, таким образом невозможно сделать вывод – на сколько принятые меры позволяют улучшить качество моделирования поляризационных характеристик.

5. В рамках проведенных вычислительных экспериментов, автором не приведена оценка погрешности проводимых вычислений.

Отмеченные недостатки не затрагивают основные выводы, сформулированные в рамках проведенного соискателем диссертационного исследования, и не снижают общей научной значимости его результатов.

**Заключение.** Диссертация «Моделирование инфракрасных спектров щелочно-галогидных кристаллов» является законченной научно-квалификационной работой, ее содержание полностью отвечает основным требованиям действующего Положения о порядке присуждения ученых степеней, предъявляемые к кандидатским диссертациям, а ее автор – Щербань Дмитрий Сергеевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата технических наук по специальности 05.13.18 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Официальный оппонент,  
профессор кафедры прикладной математики  
ФГБОУ ВПО «Кемеровский государственный университет»,  
доктор технических наук, доцент

  
15.09.2017

Подпись Крутиков Владимир Николаевич заверяю:  
в. канцелярист 



Адрес организации: 650036, г. Кемерово, пр-т Советский, 73, 2203 В.  
Тел.: 89050775348, e-mail: [krutikovvn@rambler.ru](mailto:krutikovvn@rambler.ru)