

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Щербань Дмитрия Сергеевича «Моделирование инфракрасных спектров щелочно-галоидных кристаллов», представленной на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Существующие математические модели упругой ионной поляризации кристаллов в рамках классической теории не полностью объясняют известные экспериментальные данные, в частности, инфракрасные спектры щелочно-галоидных кристаллов. В связи с этим, тема диссертационной работы, направленной на уточнение поляризационных характеристик спектров двухатомных кристаллов путем структурной модификации модели процесса ионной поляризации и последующего имитационного моделирования, является **актуальной**.

Научная новизна работы заключается в следующем:

1. Построена новая структурно модернизированная кибернетическая модель ионной поляризации двухкомпонентных кристаллов, отличающаяся декомпозицией параметров модели (собственных энергетических параметров кристалла и динамических параметров процесса) и учетом затухания колебаний ионов, что в итоге увеличивает точность соответствия модельных расчетов с данными измерений.

2. Разработан новый алгоритм параметрического синтеза кибернетической модели, основанный на циклическом применении алгоритма прямого перебора и метода покоординатного спуска, позволяющий осуществлять поиск собственных параметров кристалла и динамических параметров процесса ионной поляризации и проводить минимизацию отклонения моделируемого параметра от контрольных экспериментальных значений.

3. Разработан универсальный протокол автоматизированного расчета собственных энергетических параметров кристаллов и динамических параметров процесса, реализованный в виде пакета прикладных программ, позволяющих проводить имитационное моделирование инфракрасных спектров щелочно-галоидных кристаллов.

Практическая ценность состоит в том, что построенные кибернетические модели процессов ионной поляризации кристаллов и методы синтеза параметров моделей могут быть использованы для совершенствования имитаци-

онного моделирования инфракрасных спектров щелочно-галлоидных кристаллов в области их ионной поляризации, хорошо согласующихся с экспериментом.

По содержанию автореферата имеется **замечание**. Результат качественного улучшения вида расчетных кривых показателя преломления (рис. 1,4,5,6), вероятно, и есть преимущество метода параметрического синтеза, разработанного автором, тогда как отсутствие областей, где показатель преломления обращался в ноль, есть следствие учета затухания в кибернетической модели и не зависит от метода расчета.

В целом диссертационная работа выполнена на высоком научном и методологическом уровне, является законченным научным исследованием и соответствует паспорту специальности 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

По актуальности, научной новизне, практической значимости и личному вкладу соискателя диссертационная работа соответствует требованиям пунктов 9-14 Положения о присуждении ученых степеней, предъявляемым к кандидатским диссертациям. Автор, Щербань Дмитрий Сергеевич, **заслуживает присуждения ученой степени кандидата технических наук**.

Зав. кафедрой высшей математики
Института компьютерных технологий
и информационной безопасности ЮФУ
доктор физико-математических наук,
профессор
E-mail: kurovykh@sfedu.ru
тел.: 8(8634)371636
почтовый адрес: г. Таганрог, Ростовская обл.,
пер. Некрасовский 44, ГСП 17А, 347928

Г.В. Куповых

Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«ЮЖНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Личную подпись

Г.В. Куповых

ЗАВЕРЯЮ:



Г.В. Куповых
09.09.14