

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по научной работе
Федерального государственного
бюджетного образовательного
учреждения высшего образования
«Новосибирского государственного
технического университета», доктор
технических наук, профессор

Вострцов А.Г.



ОТЗЫВ

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

1. Актуальность диссертационной работы

В настоящее время создание новых материалов, обладающих требуемыми свойствами – это актуальная инженерная задача. В данной диссертационной работе исследуются вопросы создания более эффективной математической модели упругой ионной поляризации и соответствующего ей численного метода расчета динамических параметров, что способствует решению этой задачи, поскольку в работе на основе этих численных методов осуществлена реализация нового программного продукта, который позволяет автоматизировать процесс имитационного моделирования характеристик исследуемых материалов. Данные исследования проводились в рамках госбюджетных НИОКР и НИР, что подтверждает актуальность выполненных исследований.

2. Основные научные результаты и их значимость для науки и производства

Целью диссертации является разработка модификации системной модели процесса упругой ионной поляризации диэлектрика, направленной на увеличение точности моделируемых поляризационных характеристик; создание, на основе предлагаемой модификации модели, соответствующего ей

численного метода расчета структурно-энергетических параметров кристалла и динамических параметров процесса; разработка программного продукта, способного автоматизировать расчет исследуемых поляризационных спектров.

Научная новизна результатов работы заключается в следующем:

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;

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;

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.

3. Структура и содержание работы

Рукопись диссертации состоит из введения, четырех глав, заключения, списка цитируемой литературы и четырех приложений. Ее основное содержание изложено на 130 страницах машинописного текста, включающего 49 рисунков, 4 таблицы и 132 наименования библиографических ссылок. Полный объем диссертации – 144 с.

Во введении обоснована актуальность темы диссертационной работы, сформулированы цели и задачи исследования, представлены научные положения, выносимые на защиту, приведены основные теоретические и практические результаты.

В первой главе диссертации приведены общие понятия теории поляризации (рассмотрены понятия поляризационных процессов, их математиче-

ские модели, определены существующие зависимости оптических и диэлектрических характеристик), а также выполнено обоснование выбора наиболее эффективного математического описания его макроскопических свойств, базирующегося на микроскопических характеристиках составных элементов исследуемой физической системы. При этом в рамках рассматриваемой главы проведено оригинальное математическое моделирование диэлектрических свойств кристаллического диэлектрика на базе использования различных динамических уравнений процесса. Основным вывод первой главы заключается в том, что на сегодняшний день системная модель является наиболее адекватным описанием рассматриваемого физического явления, однако и она не лишена недостатков.

Вторая глава посвящена устранению недостатка системного описания, приведенного в конце первой главы, путем внесения структурных изменений в исходное описание процесса. Ее общее содержание позволяет на основании декомпозиции параметров модели (собственных энергетических параметров кристалла и динамических параметров процесса) ввести в рассмотрение дополнительные величины, такие как эффективные заряды частиц, и коэффициенты затухания их собственных колебаний. При этом основным результатом главы является получение новой оригинальной модификации системной модели процесса упругой ионной поляризации, позволяющей эффективно моделировать соответствующие поляризационные характеристики.

Третья глава включает в себя обзор численных методов многокритериальной оптимизации, а также синтез нового метода определения численных значений собственных параметров кристалла и динамических параметров рассматриваемого процесса. В ней показано, что комбинация двух методов многокритериальной оптимизации позволяют получить новый метод, обладающий более высокой скоростью работы и точностью. Основным результатом главы состоит в получении нового численного метода и разработке на его основе алгоритма расчета параметров модели.

Четвертая глава посвящена описанию общей структуры программного продукта и структуры основного исполняемого модуля вместе с протоколом. Также в главе освещены вопросы моделирования поляризационных спектров кристаллических диэлектриков при помощи разработанного ППП. При этом в результате вычислительных экспериментов была показана эффективность принятых мер по структурной модификации исходной модели. Также в ходе экспериментов для некоторых кристаллов пакет позволил получить новые значения коэффициентов сжимаемости и эффективных зарядов.

В заключении автором сформулированы обобщенные теоретические положения разрабатываемого научного направления, а также намечены пути его дальнейшего развития.

Приложения представляют собой копии патентов на полезную модель, свидетельств о государственной регистрации программ для ЭВМ, актов о внедрении и использовании основных результатов диссертации.

4. Практическая значимость результатов, полученных в рамках проведенного диссертационного исследования, подтверждается тем, что:

программа имитационного моделирования спектров щелочно-галоидных кристаллов (свидетельство РФ № 2011611813) и программа кибернетического расчета динамических параметров ионной поляризации щелочно-галоидных кристаллов (свидетельство РФ №2013661130) внедрены в научно-исследовательскую деятельность Дальневосточного государственного аграрного университета для компьютерного моделирования инфракрасных спектров типовых строительных бетонов с минеральными добавками в целях комплексного исследования их теплоизоляционных свойств;

ПМ имитатора процесса и разработанный пакет прикладных программ внедрены в учебный процесс кафедры ИиУС АмГУ.

5. Рекомендации по использованию результатов и выводов диссертации

1. Разработанная соискателем модификация системной модели процесса упругой ионной поляризации кристаллического диэлектрика позволяет осуществлять моделирование частотных и временных диэлектрических спектров щелочно-галоидных кристаллов, практически эквивалентных измеряемым физическим свойствам.

2. Предлагаемый автором протокол управления основным исполняемым модулем позволяет автоматизировать проведение иных расчетных процедур, использующих схожие с рассматриваемой методикой.

3. Сформированная совокупность математических моделей, численных методов и комплексов программ может быть предложена для использования в учебном процессе и научно-исследовательской деятельности специализированных университетов.

6. Полнота опубликования результатов работы

Представленные результаты диссертации достаточно полно отражены в публикациях автора. Основные положения диссертации и ее результаты были представлены на шести международных и одной Всероссийской научных конференциях. По теме диссертации опубликовано 18 печатных работ, в том числе 7 статей, рекомендуемых Высшей аттестационной комиссией. Кроме того, имеется публикация в высокорейтинговом журнале, индексируемом в международной информационно-аналитической системе научного цитирова-

ния *Scopus*. Получены три патента на полезную модель и два свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ.

7. Замечания по диссертации

При обсуждении основных результатов диссертации были высказаны следующие критические замечания:

1. В диссертационной работе не уделено достаточного внимания сопоставительной оценке используемых диссертантом подходов и методов с работами современных авторов.

2. Содержание диссертации связано с исследованием линейных динамических моделей процессов поляризации, однако наличие молекулярных колебаний определяет нелинейность происходящих процессов.

3. Реализованный соискателем алгоритм расчета параметров модели не учитывает наличия явной зависимости оптических характеристик рассматриваемых кристаллов от температуры.

4. Замечания оформительского характера:

а) *в диссертации* в разделе «Содержание» пропущено «Библиографический список с.119»; приложения А, Б, В и Г- следовало бы расшифровать («Акты внедрения» и т.д.; на стр.10 – в разделе «Публикации» сделана ссылка на «6 тезисов», но на тезисы в диссертационной работе не рекомендуется ссылаться;

б) *в автореферате* на стр.6 в разделе «Публикации» сделана ссылка на «6 тезисов», но на тезисы в автореферате не рекомендуется ссылаться; на стр.18 в пункте 8 приведена ссылка на публикацию автора, с пометкой «Принята в печать», но на неопубликованные работы автору не рекомендуется ссылаться.

8. Общее заключение по работе


Диссертационная работа Щербань Д.С. «Моделирование инфракрасных спектров щелочно-галлоидных кристаллов» представляет собой завершенную научно-квалификационную работу, посвященную решению актуальной научно-технической проблемы, отражающую новое решение поставленной задачи. Рассматриваемая диссертационная работа 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. Предложенные соискателем решения актуальных задач, входящих в состав исследуемой научно-технической проблемы, являются обоснованными, а их достоверность подтверждается соответствием теоретических расчетов данным физического эксперимента. Автореферат и опубликованные автором работы отражают основное содержание диссертации.


Работа соответствует всем требованиям, предъявляемым ВАК РФ к диссертациям на соискание ученой степени кандидата технических наук, выполняемым по специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ», а ее автор Щербань Дмитрий Сергеевич, заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата технических наук по выше указанной специальности.

Диссертационная работа и отзыв на нее обсуждены на расширенном научном семинаре кафедры Автоматики факультета Автоматики и вычислительной техники и кафедры Теоретической и прикладной информатики факультета Прикладной математики и информатики.

Протокол № 1 от 9 октября 2017 г. Присутствовали: докторов наук – 5, кандидатов технических наук – 11.

Зав. каф. Автоматики, д.т.н., доцент  В.А.Жмудь

Зав. каф. Теоретической и прикладной информатики, д.т.н., доцент  В.М.Чубич

Подписи В.А. Жмудя и В.М. Чубича заверяю:
Ученый секретарь д.т.н., профессор  Г.М. Шумский

Сведения о ведущей организации:

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Новосибирский государственный технический университет»

Адрес: 630073, Новосибирск, пр-т К. Маркса, 20

Телефон: (383) 346-08-43 (общий отдел)

Факс: (383) 346-02-09

Эл.почта: rector@nstu.ru

Веб-сайт: <http://www.nstu.ru/>



