

ОТЗЫВ

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

Актуальность темы диссертации

В настоящее время *актуальной проблемой* является изучение и создание новых материалов, обладающих заданными свойствами. Решение задач идентификации закономерностей определяющих структуру и свойства разрабатываемых материалов, основываются, как правило, на использовании экспериментальных данных. Важно отметить, что ограниченность ресурсов затрудняет эмпирические методы поиска образцов с необходимыми физическими свойствами.

Таким образом, возникает необходимость использования подходов, основывающихся на математическом моделировании эксплуатационных характеристик искомых материалов. В работе решается *актуальная задача* создания математической модели упругой ионной поляризации и соответствующего ей численного метода расчета динамических параметров, а также реализация на их основе нового программного продукта, способного автоматизировать процесс адекватного имитационного моделирования поляризационных характеристик образца.

Во введении обоснована актуальность диссертационной работы, сформулированы основные цели, перечислены задачи, которые требуется решить для успешной реализации поставленных целей. Показана научная новизна и практическая ценность выполненных исследований, представлены научные положения, выносимые на защиту.

В первой главе проводится исследование различных физико-математических моделей процесса упругой ионной поляризации двухкомпонентного кристалла. Выясняется, что модель процесса коллективной поляризации выделенной ионной пары имеет недостаток, связанный с потенциальным исключением диэлектрических потерь, который можно устранять учитывая перекрестные обратные связи, что позволяет получить уравнения комплексных поляризуемостей каждого из ионов в отдельности.

Показывается, что математическое описание процессов упругой поляризации, обусловленных и независимыми, и коллективными колебаниями ионов кристалла, позволяет синтезировать новую модель в виде системы уравнений (см. п. 1.3.3). Выясняется, что предложенная системная модель является наиболее адекватным описанием рассматриваемого физического явления.

Вторая глава посвящена изучению процесса упругой ионной поляризации двухкомпонентного кристалла для проведения расчетов его диэлектрических спектров. Предлагается на базе системного описания процесса провести его структурную модификацию, которая повышает качество имитационного моделирования поляризационных характеристик. Структурные изменения включают в себя: анализ параметров, входящих в модель; выделение расчетных формул параметров; подстановка выбранных параметров в модель с последующим приведением подобных. В результате была построена оригинальная модификация системной модели изучаемого процесса, выражающая математическую взаимосвязь собственных и динамических параметров частиц исследуемого диэлектрического образца.

В третьей главе исследуются проблемы, связанные с нахождением численного решения системы вида (2.30), которая относится к классу недоопределенных систем уравнений. Выяснено, что использование только одного численного метода для синтеза коэффициентов модели рассматриваемого процесса не позволяет получить адекватные результаты за приемлемое время. Разработанный алгоритм параметрического синтеза

является комбинацией различных численных методов оптимизации, что позволяет быстро определять коэффициенты модели. Предложенная модификация системной модели апробирована на ряде кристаллов для определения неизвестных параметров кристалла и процесса по набору данных поляризационных спектров.

В четвертой главе решаются вопросы реализации предложенных подходов и алгоритмов с помощью компьютерного моделирования. На основе алгоритма параметрического синтеза и модели упругой ионной поляризации кристаллического диэлектрика разработан пакет прикладных программ «Моделирование инфракрасных спектров щелочно-галогидных кристаллов типа АВ», решающий следующие задачи:

- 1) расчет собственных параметров кристалла (эффективные заряды и коэффициент сжимаемости кристалла);
- 2) расчет динамических параметров процесса (коэффициенты затухания колебаний);
- 3) расчет частотных диэлектрических спектров кристаллических диэлектриков типа АВ;
- 4) автоматизированное построение подробных спектров всех поляризационных характеристик процесса.

Разработанный пакет универсален, так как позволяет моделировать инфракрасные спектры набора различных щелочно-галогидных кристаллов, и обладает свойством открытости, т.е. может быть адаптирован для моделирования имитационных спектров других групп кристаллов типа АВ.

Диссертационная работа изложена на 130 страницах, список литературы включает 132 наименования. В приложении приведены акты внедрения результатов работы, патенты и свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ. В работе приведены 42 рисунка и 4 таблицы.

Результаты исследований используются в научно-исследовательской деятельности Дальневосточного государственного аграрного университета

(г. Благовещенск) для компьютерного моделирования инфракрасных спектров типовых строительных бетонов с минеральными добавками Амурской области в целях комплексного исследования их теплозащитных свойств в рамках НИР № 21 «Строительство».

Достоверность полученных результатов подтверждается математическим обоснованием созданных моделей упругой ионной поляризации кристаллического диэлектрика и моделированием в разработанном пакете прикладных программ. Также результаты теоретических исследований и моделирования подтверждаются результатами тестовых испытаний, например, для кристаллов АВ с типами решетки *NaCl* и *CsBr*.

Научную новизну составляют следующие положения:

1. Новая математическая модель процесса упругой ионной поляризации двухатомного кристалла, позволяющая установить аналитическую взаимосвязь динамических параметров процесса с собственными физическими свойствами поляризуемых частиц.
2. Оригинальный алгоритм, основанный на циклическом применении последовательности алгоритма прямого перебора и метода покоординатного спуска, что позволило получить значения эффективных зарядов ионов и коэффициентов сжимаемости щелочно-галогидных кристаллов, близкие к результатам классических расчетов, а также позволило найти ранее неизвестное значение коэффициента сжимаемости кристалла бромида цезия.
3. Протокол расчета, связывающий все компоненты пакета прикладных программ и управляющий модулем, который позволяет проводить вычислительные процедуры при автоматизированном расчете собственных энергетических параметров кристаллов и динамических параметров процесса. Важно отметить, что этот протокол также позволяет проводить и имитационное моделирование инфракрасных спектров рассматриваемых материалов.

Содержание автореферата в полной мере отражает основное содержание диссертационной работы и полученных научных и практических результатов.

Основные **результаты** исследования **опубликованы** в 18 печатных работах, которые включают 7 статей в журналах, рекомендуемых ВАК РФ, 6 тезисов и материалов докладов международных и всероссийских научных конференций, три патента и два авторских свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ.

Тема диссертационной работы **соответствует паспорту специальности** 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

По диссертации имеются следующие замечания.

1. Считаю, что в диссертации недостаточное внимание уделено теоретическому и практическому изучению устойчивости (чувствительности) предложенных алгоритмов оценивания параметров модели к ошибкам “дополнительных величин и коэффициентов” (см. с. 64). По-видимому, существуют области, где эта проблема требует особого внимания (с. 34 для классической модели, с. 43 для системной модели).
2. Согласно главе 3 непонятно, нужно ли проверять достаточные условия экстремума для критериальных функций, используемых в работе, при нахождении “оптимальных” параметров модели.
3. Теоретические исследования сходимости и точности разработанных вычислительных процедур носят фрагментарный характер.

Сделанные замечания не снижают научной и практической ценности диссертации, носят, в основном, характер пожеланий и не влияют на общую положительную оценку результатов исследований.

Диссертационная работа Щербаня Дмитрия Сергеевича «**Моделирование инфракрасных спектров щелочно-галогидных кристаллов**» является **завершенной научно-квалификационной работой**, выполненной на актуальную

тему, в которой решена важная научно-техническая проблема синтеза и анализа математической модели упругой ионной поляризации, на базе которой разработан новый программный продукт, способный автоматизировать процесс адекватного имитационного моделирования поляризационных характеристик образца. По своей актуальности, научной новизне, объему выполненных исследований и практической значимости полученных результатов представленная работа соответствует п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а ее автор Щербань Дмитрий Сергеевич заслуживает присуждения ему степени кандидата технических наук по специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Доктор физико-математических наук, профессор,
 профессор кафедры теоретической кибернетики Института прикладной математики и компьютерных наук Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования
 «Национальный исследовательский Томский государственный университет»



Кошкин Геннадий Михайлович

09.10.17г.

Почтовый адрес: 634050, г. Томск, пр. Ленина, 36.

Телефон: (3822) 529828

E-mail: kgm@mail.tsu.ru



Подпись

УДОСТОВЕРЯЮ
 УЧЕНЫЙ СЕКРЕТАРЬ ТГУ

Н. А. САЗОНОВА

