

ОТЗЫВ официального оппонента
на диссертацию на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук
Степановой Анны Валерьевны
на тему: «Регуляризирующие алгоритмы расчета силовых полей
многоатомных молекул методом масштабирующих множителей»
по специальности 01.01.03 — «математическая физика»

Диссертация А.В. Степановой посвящена разработке новых математических методов получения устойчивых приближенных решений обратной задачи колебательной спектроскопии — расчетов параметров молекулярного силового поля — при совместном использовании различных физико-химических экспериментальных данных и результатов квантовомеханических расчетов в рамках специальных моделей параметризации матрицы силовых постоянных в естественных и декартовых координатах. Данная задача относится к классу так называемых обратных некорректно поставленных задач, поэтому для ее решения не удастся применять стандартные численные методы (типа метода наименьших квадратов). Тем не менее, существует практическая потребность решения такого рода задач, которая стимулировала развитие и создание соответствующих регуляризирующих алгоритмов.

Актуальность развития устойчивых численных методов расчета параметров силовых полей многоатомных молекул в декартовых координатах, рассмотренных в данной диссертации, объясняется возросшим в последние годы интересом к строению и колебательным спектрам многоатомных молекулярных систем (фрагментов ДНК, производных фуллеренов, полимеров, различных наноструктур и т.п.). Необходимость создания надежных баз данных по силовым постоянным для оценок колебательных спектров соединений, являющихся недоступными или неустойчивыми для экспериментальных исследований в обычных условиях,

также ставит на повестку дня развитие физико-математических методов, позволяющих симулировать спектры и предсказывать термодинамические характеристики молекулярных структур на основе совместной обработки как экспериментальных, так и неэмпирических (квантовохимических) данных.

В такой общности постановка задачи обладает новизной, поскольку в существующей литературе подобные задачи обычно рассматривались в естественной системе координат, и для их решения не применялись регуляризирующие алгоритмы. В диссертации также приведено математическое обоснование предложенных алгоритмов, позволяющих анализировать многоатомные системы и рассчитывать масштабирующие множители в соответствующих координатах, переносимые в рядах родственных соединений.

Диссертационная работа состоит из введения, трех глав, заключения и списка литературы. Полный объем диссертации 100 страниц, список используемой литературы содержит 87 наименований. Во введении описан круг вопросов, затрагиваемых диссертацией, охарактеризованы актуальность, практическая значимость и новизна работы, а также изложено ее краткое содержание. В первой главе диссертации дается описание физических основ решения прямой задачи о колебаниях молекулы и математическая постановка обратной колебательной задачи. Рассматриваются вопросы определения априорных ограничений на матрицу силовых постоянных молекулы и выбора системы обобщенных координат. Во второй главе диссертации дается постановка обратной колебательной задачи с ограничениями в виде масштабирующей матрицы Пулаи в декартовой системе координат. Показано, что данная задача является некорректно поставленной, поэтому для ее решения приводится обоснование регуляризованного метода Пулаи в декартовой системе координат. В результате были получены три основных результата:

— построен регуляризирующий алгоритм метода масштабирующих множителей в его классическом варианте, применимом для естественной системы координат;

— предложен метод масштабирующих множителей для матриц силовых постоянных в декартовой системе координат;

— построен регуляризирующий алгоритм метода масштабирующих множителей для матриц силовых постоянных в декартовой системе координат.

В третьей главе диссертации приведены примеры применения указанных выше методов расчета, включающих в себя:

— возможность применения различных систем координат при решении обратной задачи колебательной спектроскопии с ограничениями в виде масштабирующей матрицы (в том числе декартовых, естественных, зависимых и независимых);

— широкое применение данных квантовомеханических расчетов.

Подводя итоги, можно сказать, что автор получил ряд важных научных результатов. В частности, в работе в рамках теории некорректных нелинейных задач была предложена постановка обратной спектральной задачи нахождения силового поля молекулы при его параметризации матрицей масштабирующих множителей в декартовой системе координат и был также сформулирован регуляризирующий алгоритм поиска нормального (квази)псевдорешения данной задачи. Необходимость такой постановки была обусловлена с одной стороны, все более расширяющимися возможностями квантовомеханических расчетов, которые дают возможность получать детальную информацию о силовых полях молекул, с другой стороны — переходом к анализу сложных соединений, состоящих из сотен атомов. Эти факторы приводят к необходимости постановки и решению обратной спектральной задачи именно в декартовой системе координат, поскольку построение полной естественной системы координат для очень больших

молекул является затруднительным и является препятствием на пути автоматизации процесса решения обратной задачи.

Достоверность сделанных в диссертации выводов не вызывает сомнений, так как диссертант использовал современные и наиболее надежные для решения поставленных задач математические методы, умело скомбинировав их.

По результатам диссертации опубликовано 15 печатных работ, в том числе 6 статей (4 из которых входят в перечень рецензируемых научных журналов, индексируемых в Web of Science, Scopus и RSCI, 1 — в журнале без импакт-фактора, 1 — в сборнике) и 9 тезисов докладов, представленных на международных и российской научных конференциях. Все это также может служить подтверждением адекватности примененных подходов и правильности полученных результатов.

Автореферат полностью соответствует содержанию диссертации.

К недостаткам рецензируемой диссертации я бы отнес

- (1) Не очень выразительный выбор модельных примеров молекул для демонстрации развиваемой в диссертации методики.
- (2) Отсутствие сравнения собственных результатов с результатами альтернативных методов определения матрицы силовых постоянных.

Вместе с тем, указанные замечания не умаляют значимости диссертационного исследования. Диссертация отвечает требованиям, установленным Московским государственным университетом имени М.В.Ломоносова к работам подобного рода. Содержание диссертации соответствует паспорту специальности 01.01.03 — **«математическая физика»** (по физико-математическим наукам), а также критериям, определенным пп. 2.1–2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова, а также оформлена, согласно приложениям № 5, 6 Положения о диссертационном совете Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова.

Таким образом, соискатель Степанова Анна Валерьевна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.01.03 — «математическая физика».

Официальный оппонент:

д.ф.-м.н., заведующий кафедрой лазерной химии
химического факультета
ФГБОУ ВО «Московского государственного
университета имени М.В.Ломоносова»

Столяров Андрей Владиславович

С.И.С.

16.12.2018



Специальность, по которой официальным оппонентом
защищена диссертация:

02.00.17 - Математическая и квантовая химия (физ.-мат. науки)

Адрес места работы:

119991, г. Москва, Ленинские горы, д.1, стр.3,
ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени
М.В.Ломоносова», химический факультет, кафедра лазерной химии