

Отзыв научного руководителя
на диссертацию Степановой Анны Валерьевны

“Регуляризирующие алгоритмы расчета силовых полей многоатомных молекул методом масштабирующих множителей”,
представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности
01.01.03 — математическая физика.

Работа А. В. Степановой связана с широким классом задач интерпретации результатов экспериментальных и теоретических исследований в области колебательной спектроскопии. В рамках традиционно используемых моделей молекулярные спектры могут быть рассчитаны по известным силовым постоянным; сами эти постоянные, обладая свойствами переносимости в рядах родственных соединений, могут быть затем использованы для предсказания свойств новых соединений. Обратная задача рассматривается как определение набора силовых постоянных по известным из эксперимента спектральным данным. В большинстве случаев эта задача оказывается существенно недоопределенной.

Необходимость новых подходов к решению задачи восстановления силовых постоянных по спектроскопическим данным, которые и предлагаются в диссертации, была обусловлена двумя факторами: с одной стороны, успехами квантовой химии, которая позволяет рассчитывать детальную информацию о силовых полях молекул, с другой стороны – переходом к анализу все более сложных соединений, состоящих из сотен и тысяч атомов. Первое из этих соображений приводит к идее построения решения обратной задачи на основе параметрической модификации квантовомеханического решения; эта идея уже была реализована ранее в виде метода масштабирующих множителей для представления силовых полей в естественных колебательных координатах. Второй фактор приводит

к желательности постановки и решения этой же задачи в декартовой системе координат, поскольку построение полной естественной системы координат в случае больших молекул является препятствием к полной автоматизации процесса решения обратной задачи.

Решение задачи восстановления силовых постоянных по спектрам на основе масштабирования квантовомеханических матриц оказывается нетривиальным и существенно отличным от “классического” метода масштабирования, поскольку силовые постоянные должны удовлетворять известным ограничениям, гарантирующим независимость решения от смещения и вращения молекулы как целого. Строгая формулировка соответствующих условий на масштабирующие множители и учет этих ограничений в процессе решения обратной задачи – один из интересных результатов предлагаемой работы.

Другим существенным результатом является построение регуляризирующих алгоритмов решения указанной обратной задачи, поскольку даже при параметризации матрицы силовых постоянных ограниченным числом параметров задача, как правило, имеет неединственное решение. Это относится как к исходной формулировке метода масштабирующих множителей (даже при малом числе параметров), так и к его варианту, использующему декартовы координаты. В диссертации приводятся примеры неединственности решения.

Обратная задача формулируется как нелинейное конечномерное операторное уравнение. Регуляризирующие алгоритмы основываются на обобщенном принципе невязки; доказаны теоремы их сходимости. Построенные алгоритмы реализованы в виде программного модуля, совместимого с программными пакетами, используемыми в практике анализа спектральных данных.

А. В. Степанова уже в течение долгого времени работает на кафедре физической химии химического факультета МГУ; за это период она участвовала в спектроскопических и структурных исследованиях многих

практически важных соединений. Результаты диссертации имеют непосредственное отношение к этим исследованиям, поскольку структурные исследования, особенно нежестких молекул, широко используют идею масштабирования и результаты квантовохимических вычислений.

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. Диссертация Степановой Анны Валерьевны рекомендуется к защите по специальности 01.01.03 — математическая физика в диссертационном совете МГУ.01.06.

Д. ф.-м. н.

Программист лаборатории вычислительного
эксперимента и моделирования НИВЦ МГУ



И.В. Кочкиков

14.11.2018

Подпись И.В. Кочкикова заверяю

Начальник отдела кадров

НИВЦ МГУ им. М.В.Ломоносова



Н. Н. Паутова