

Отзыв

официального оппонента на диссертацию Егорова Олега Викторовича «**Физико-математические модели интенсивностей линий поглощения нагретых газов H_2O , H_2S , SO_2 и NO_2** » представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – оптика

Диссертационная работа Егорова О.В. представляет собой теоретическое исследование в области приложений молекулярной спектроскопии для решения задач дистанционного зондирования газовых сред при повышенных температурах. **Актуальность** выбранной тематики определяется необходимостью контроля за состоянием атмосферы, негативное влияние на которую оказывают как естественные источники высокотемпературных газовых сред, так и объекты антропогенного происхождения. Одной из проблем при решении указанной задачи является недостаток надежной информации о параметрах спектральных линий молекул исследуемых газовых сред, особенно при повышенных температурах, что объясняется сложностью и трудоемкостью как теоретических расчетов, часто не обеспечивающих необходимой точности, так и постановки эксперимента. Выходом из этой ситуации, уже ставшим традиционным, служит создание для расчетов центров и интенсивностей линий многопараметрических моделей, параметры которых определяются из сопоставления с доступными экспериментальными данными. Далее эти модели экстраполируются в области иных спектральных интервалов и в области повышенных температур, что далеко не всегда позволяет получать результаты с допустимыми погрешностями. Теоретической основой создания подобных моделей служит представление параметров спектральных линий в виде степенных рядов получаемых при решении соответствующей задачи квантования. Обрывание рядов определяет число параметров в модели и зависит от скорости сходимости рядов, которая, как правило, недостаточно быстра из-за многочисленных внутримолекулярных взаимодействий и различных резонансов, что приводит к необходимости введения значительного числа подгоночных параметров (иногда до сотни и более). По этой причине представляют большой интерес работы, направленные на улучшение сходимости рядов, что позволило бы создавать модели с меньшим числом параметров. Одной из возможностей продвижения в этом направлении является использование аппроксимаций Паде, применяемых для улучшения сходимости рядов представляющих аналитические функции. На этой основе **соискателем разработан ряд математических моделей** для описания интенсивностей спектральных линий молекул типа асимметрического волчка, которые при существенно меньшем числе подгоночных параметров позволили получать результаты удовлетворительно согласующиеся с экспериментальными данными в широком диапазоне температур.

Оригинальным моментом, впервые примененным для этой цели и позволяющим устранить довольно значительные трудности, возникающие при последовательной реализации Паде аппроксимации, является априорное использование

для представления параметра, описывающего интенсивность спектральной линии, дробно-рациональной функции, элементами которой служат определенные, специально конструируемые, комбинации квантовых чисел с известными молекулярными параметрами, при достаточном, для получения удовлетворительных результатов, наборе подгоночных параметров. Данный подход позволил при существенно меньшем числе подгоночных параметров уменьшить примерно в два раза, по сравнению с традиционным подходом, величину среднеквадратического отклонения расчетов от набора экспериментальных данных по интенсивностям линий исследуемых молекул, выполнить расчеты для ряда горячих полос, не описанных в литературе, и провести экстраполяцию на случай повышенных температур.

Представляет интерес и разработанная соискателем методика использования для расчетов интенсивностей «горячих» линий молекул типа асимметричного волчка приближения симметричного волчка, что также позволило существенно сократить вычислительные трудности.

Диссертационная работа Егорова О.В. является законченной научно-квалификационной работой на актуальную тему и соответствует требованиям пунктов 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней» от 24 сентября 2013 г. № 842.

Работа, однако, **не лишена недостатков**, прежде всего относящихся к представлению материала в диссертации.

1. Так, непонятен смысл двух последних формул в (2.3), и формул (2.4), (2.5).
2. Важные для дальнейшего формулы (2.7) – (2.9) приведены без должного обоснования и ссылок на источники где они были получены.
3. Совершенно непонятен смысл формулы (2.15) в которой Паде аппроксимация применена к недиагональному оператору, в результате чего он оказался представлен дробно рациональной функцией, элементами которой служат «совокупности недиагональных операторов эффективного вращательного гамильтониана первого, второго, четвертого и шестого порядков».

Структурно работа состоит из введения и четырех глав. Список цитируемой литературы содержит 297 наименований.

Оценивая диссертационную работу Егорова О.В. **«Физико-математические модели интенсивностей линий поглощения нагретых газов H_2O , H_2S , SO_2 и NO_2 »** в целом, отмечу, что она выполнена **на достаточно высоком научном уровне** по вполне актуальной тематике, научные положения и выводы, сформулированные в диссертации, в полной мере **обоснованы**. Результаты выполненных соискателем исследований достаточно полно представлены в отечественной и мировой литературе, обсуждались на всероссийских и международных конференциях и симпозиумах. Совместно с соавторами соискателем опубликовано 14 статей в рецензируемых научных журналах, рекомендованных ВАК РФ для публикации основных научных результатов кандидатских и докторских диссертаций (из них три статьи в высокорейтинговых зарубежных журналах). Определенная часть

результатов была получена при выполнении научно-исследовательских работ в рамках ряда контрактов и грантов. Все это свидетельствует об их **достоверности и приоритетности**.

Разработанные соискателем модели и методики могут быть использованы для пополнения информации об интенсивностях спектральных линий молекул типа асимметрического волчка в известных базах спектроскопических параметров, включая высокотемпературную базу HITEMP2010, в которой недостаток подобной информации особенно ощутим.

Считаю, что, несмотря на отмеченные недостатки, работа **удовлетворяет** требованиям ВАК России, предъявляемым к диссертационным работам на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, и ее автор **заслуживает** присуждения ему искомой степени **по специальности 01.04.05 – оптика**.

Автореферат соответствует диссертации и достаточно полно отражает ее содержание.

Д.ф.-м.н, доцент, профессор кафедры
высшей математики и математической физики
ФГАОУ ВО Национального исследовательского
Томского политехнического университета
634050, г. Томск, пр. Ленина, 30

Черкасов Михаил Романович

E-mail: mrchrksv@mail.ru; Тел.: 8(3822)606335

05. 04. 2017 г.

Подпись М.Р. Черкасова удостоверяю

Ученый секретарь

Томского политехнического университета



Ананьева О.А.