

На правах рукописи *Sign*

**Ладутенко Константин Сергеевич**

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ  
ОПТИМИЗИРОВАННОЙ МНОГОСЛОЙНОЙ  
СФЕРЫ С ПЛОСКОЙ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ  
ВОЛНОЙ**

Специальность **05.13.18.** —  
«**Математическое моделирование, численные методы и  
комплексы программ**»

**Автореферат**  
диссертации на соискание учёной степени  
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург — **20XX**

Работа выполнена в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики»

Научный руководитель: уч. степень, уч. звание  
**Фамилия Имя Отчество**

Официальные оппоненты: **Фамилия Имя Отчество**,  
доктор физико-математических наук, профессор,  
Не очень длинное название для места работы,  
старший научный сотрудник  
**Фамилия Имя Отчество**,  
кандидат физико-математических наук,  
Основное место работы с длинным длинным длин-  
ным длинным названием,  
старший научный сотрудник

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное образо-  
вательное учреждение высшего профессионального  
образования с длинным длинным длинным длинным  
названием

Защита состоится **DD mmmmmmmm YYYY** г. в **XX часов** на заседании диссер-  
тационного совета **NN** на базе **Название учреждения** по адресу: **Адрес**.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке **Название библиотеки**.

Автореферат разослан **DD mmmmmmmm YYYY** года.

Ученый секретарь  
диссертационного совета  
**NN**, д-р физ.-мат. наук

*Sign*

**Фамилия Имя Отчество**

## Общая характеристика работы

**Актуальность темы.** Теория Ми входит в число основных инструментов применяемых при анализе задач рассеяния и поглощения плоской электромагнитной волны сферическими объектами. В настоящее время теория Ми была обобщена на случай многослойных сфер, что позволяет использовать её в целом ряде прикладных задач, таких как лечение рака, различные методы диагностики в медицине, разработка маскирующих суб-волновые покрытий для видимого и микроволнового диапазонов, устройств плазмоники, изучение тепловых свойств изоляторов, для повышения эффективности солнечных элементов и так далее. Как правило, при решении подобных прикладных задач возникает необходимость оптимизации дизайна многослойной сферы (радиусов и материальных параметров составных слоёв), обеспечивающего наилучшие рабочие характеристики для каждого конкретного случая с учётом фактических ограничений в предметной области.

**Целью** данной работы является создание общего подхода к проектированию оптимизированных дизайнов многослойных сфер в рамках теории Ми и реализация этого подхода в комплексе компьютерных программ.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие **задачи**:

1. Выбрать и реализовать универсальный алгоритм оптимизации.
2. Доработать численный алгоритм теории Ми и реализовать эти доработки в комплексе программ.
3. Выявить основные закономерности взаимодействия с электромагнитной волной маскирующих покрытий как на основе только диэлектриков, так и при использовании метаматериалов.
4. Исследовать поглощение света в многослойных сферических наночастицах.

### **Основные положения, выносимые на защиту:**

1. Программный комплекс, реализующий параллельный алгоритм стохастической оптимизации методом адаптивной дифференциальной эволюции.
2. Математическая модель и её программная реализация для расчёта полей в рамках теории Ми для многослойных сфер.

3. Маскирующие сферические покрытия на основе диэлектриков и метаматериалов.
4. Эффект суперпоглощения в сферических наночастицах.

Положения соответствуют пунктам 2,3,4,5,8 паспорта специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» (Развитие качественных и приближенных аналитических методов исследования математических моделей. Разработка, обоснование и тестирование эффективных вычислительных методов с применением современных компьютерных технологий. Реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента. Комплексные исследования научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента. Разработка систем компьютерного и имитационного моделирования) по физико-математическим наукам (преобладают математические методы в качестве аппарата исследований; получены результаты в виде новых математических методов, вычислительных алгоритмов и новых закономерностей, характеризующих изучаемые объекты).

#### **Научная новизна:**

1. Впервые были получены явные рекуррентные соотношения для коэффициентов Ми в многослойной сфере, выраженные через логарифмические производные функций Риккати-Бесселя.
2. Впервые метод дифференциальной эволюции был применён для изучения маскирующих сферических покрытий, показана высокая производительность метода.
3. Было выполнено оригинальное исследование поглощения света наночастицами в режиме вырождения резонансных откликов мультиполей.

**Практическая значимость.** Разработанные аналитические и численные методы для решения уравнений Максвелла в рамках теории Ми, а так же реализующий их программный комплекс с использованием стохастической оптимизации методом дифференциальной эволюции могут быть использованы при проектировании, оптимизации и анализе (включая анализ предельно достижимых рабочих характеристик) широкого спектра устройств, работающих как в оптическом, так и микроволновом диапазоне. Результаты полученные при

изучении поглощения света наночастицами могут быть использованы при разработке инновационных фотоактивных катализаторов, красителей, поглощающих эмульсий и аэрозолей.

Результаты диссертационной работы использовались при выполнении грантов Министерства образования и науки РФ (проект 11.G34.31.0020, гос. задание 2014/190, задание 3.561.2014/К), Правительства РФ (грант 074-U01), РФФИ (грант 15-57-45141 ИНД\_а).

**Достоверность** полученных результатов обеспечивается методическим подходом на каждом этапе работы. Работа оптимизатора была проверена на наборе стандартных тестовых функций. Аналитические результаты работы были проверены в системе компьютерной алгебры (IPython). Компьютерная реализация решения была проверена на наборе тестовых задач. Результаты находятся в соответствии с результатами, полученными другими авторами по теории Ми для случаев однородной сферы и сферы с одним слоем покрытия. Случаи большего числа слоёв в покрытии сравнивался с коммерческими пакетами моделирования, использующих численные методы конечных разностей во временной области (Lumerical FDTD), метод конечных элементов (Comsol) и метод конечных интегралов (CST MWS). Результаты по исследованию маскирующих покрытий и поглощения света наночастицами находятся в соответствии с результатами, полученными другими авторами для похожих систем.

**Апробация работы.** Основные результаты работы докладывались на: перечисление основных конференций, симпозиумов и т. п.

**Личный вклад.** Автор принимал активное участие ...

**Публикации.** Основные результаты по теме диссертации изложены в 6 печатных изданиях, 2 из которых изданы в журналах, рекомендованных ВАК, 2 — в тезисах докладов.

## Содержание работы

Во **введении** обосновывается актуальность исследований, проводимых в рамках данной диссертационной работы, приводится обзор научной литературы по изучаемой проблеме, формулируется цель, ставятся задачи работы, сформулированы научная новизна и практическая значимость представляемой работы.

**Первая глава** посвящена выбору универсального алгоритма оптимизации и вопросам его практической реализации. Сложность выбора обусловлена огромным количеством методов оптимизации, а так же большим числом разновидностей каждого метода. При выборе метода применительно к задаче Ми были использованы следующие предпосылки:

- Несмотря на то, что решение Ми является аналитическим и выражается в виде разложения в ряд по сферическим векторным гармоникам, одновременное нахождение производных для зависимости от радиуса и материального параметра оказывается громоздким даже в случае однородной сферы, что тем более верно для случая произвольного числа сферических слоёв. В связи с чем метод оптимизации не должен требовать для своей работы нахождения производных оптимизируемой функции. Это особенно актуально, в случае, когда одновременно оптимизируются и толщина, и показатель преломления каждого слоя.
- Решение образовано быстро-осциллирующими функциями и, как следствие, будет содержать большое количество локальных экстремумов. Таким образом, алгоритмы оптимизации, требующие особого отношения к подобным случаям, оказываются заведомо менее производительными.
- Параметры оптимизации (например, толщина и показатель преломления каждого слоя), а так же оптимизируемая величина являются вещественными числами.

Всё вместе это позволяет ограничить выбор стохастическими методами, среди которых наиболее распространёнными являются генетический алгоритм, метод роя части и метод дифференциальной эволюции. Эти алгоритмы используют метод «проб и ошибок». Несколько пробных решений (или индивидов) генерируются случайным образом и многократно улучшаются с надеждой найти некое удовлетворительное решение. Качество решения оценивается целевой функцией, возникшей из задачи, которую предстоит оптимизировать. Полная группа индивидов называется популяцией. Состояние популяции на конкретном шаге итерации называется поколением. Переход между поколениями осуществляется в соответствии с рядом относительно простых правил, которые составляют сущность определённого алгоритма.

Генетические алгоритмы обычно рассматривают вещественные числа в виде набора битов. В отличие от них, оптимизация роя частиц и дифференциальная эволюция могут работать в непрерывном пространстве вещественных входных параметров естественным образом (используя возможность сложения и вычитания векторов пробных решений), что делает их гораздо более удобными для физических задач. Производительность двух последних алгоритмов зависит от правильного выбора значений некоторых внутренних параметров алгоритма. Использование адаптивных версий алгоритмов облегчает задачу, и значения внутренних параметров настраиваются автоматически в процессе оптимизации. Как правило, адаптивным алгоритмам нужно гораздо меньше (более чем на порядок) генераций, чем неадаптивным, чтобы добиться того же результата оптимизации.

Мы использовали алгоритм JADE+ с улучшенной скоростью скрещивания (по алгоритму PMCRAGE), который является адаптивным вариантом алгоритма дифференциальной эволюции. Он имеет явное преимущество перед адаптивной оптимизацией роя частиц в ряде стандартных тестов.

картинку можно добавить так:

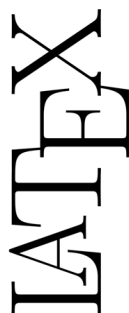


Рис. 1 — Подпись к картинке.

Формулы в строку без номера добавляются так:

$$\lambda_{T_s} = K_x \frac{dx}{dT_s}, \quad \lambda_{q_s} = K_x \frac{dx}{dq_s},$$

**Вторая глава** посвящена исследованию

**Третья глава** посвящена исследованию

**В четвертой главе** приведено описание

В **заключении** приведены основные результаты работы, которые заключаются в следующем:

1. На основе анализа ...

2. Численные исследования показали, что ...
3. Математическое моделирование показало ...
4. Для выполнения поставленных задач был создан ...

## Список литературы

7. *Фамилия И. О.* Название статьи // Журнал. — 2012. — Т. 1. — С. 100.
8. *Фамилия И. О.* название тезисов конференции // Название сборника. — 2012.
9. *Фамилия И. О.* Название статьи // Журнал. — 2013. — Т. 1, № 5. — С. 100—120.
10. *Фамилия И. О.* Название статьи // Журнал. — 2014. — Т. 1, № 5. — С. 100—120.
11. *Фамилия И. О.* название тезисов конференции // Название сборника. — 2015.
12. *Фамилия И. О.* название тезисов конференции // Название сборника. — 2015.