

## ОТЗЫВ

**на автореферат диссертации Жабицкой Евгении Игоревны**  
«Метод асинхронной дифференциальной эволюции для численного исследования многопараметрических моделей физических систем»,  
представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности “05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ”

В диссертации Е. И. Жабицкой предложены эффективные численные методы решения многоэкстремальных обратных задач структурного анализа по данным нейтронного и рентгеновского рассеяния. **Актуальность** развития методов решения таких задач связана с тем, что, несмотря на большое количество алгоритмов и программ поиска глобального экстремума, до настоящего времени не разработано универсальных подходов, так как в общем случае невозможно учесть особенности поведения целевых функций конкретных задач. Наиболее эффективными на сегодняшний день являются генетические алгоритмы поиска, и автор обоснованно выбрал именно развитие именно этого направления. В работе развиты как сами методы генетического поиска, так и математические аспекты расчета структурных параметров по данным рассеяния. В частности, предложена микроскопическая модель пион-ядерного рассеяния, основанная на теоретически обоснованной и относительно простой модели пион-ядерного потенциала, которая адаптирована для организации параллельных расчетов при моделировании как упругого рассеяния заряженных пионов на ядрах, так и более сложных взаимодействий. Предложенная модель основана на базе микроскопического оптического потенциала и релятивистского волнового уравнения, что позволяет учесть особенности рассеяния нейтронов в большинстве случаев, что также представляет собой **актуальный** результат.

Все **новые** разработки изложены автором последовательно и подробно обоснованы. В алгоритм асинхронной дифференциальной эволюции с кроссовером, задаваемым адаптивной корреляционной матрицей, встроены адаптивная схема выбора масштабирующего фактора и процедура рестарта с автоматическим увеличением размера популяции и учетом разработанных ограничений. Полученный в результате алгоритм, одним из достоинств которого следует отметить хорошее распараллеливание, не требует настройки

параметров пользователем. Эффективность предложенного численного метода связана с модификацией операции кроссовера в методе дифференциальной эволюции. Новый тип кроссовера использует адаптивную корреляционную матрицу, динамически учитывающую в ходе процесса поиска решения выборочные парные корреляции между параметрами задачи. Предложенный алгоритм способен идентифицировать коррелированные группы переменных и благодаря этому эффективно решать задачи с разделяемыми, неразделяемыми и частично-разделяемыми переменными.

Автор подтверждает преимущества по скорости и вероятности сходимости своих подходов путем сравнения с другими известными в литературе адаптивными процедурами поиска минимума на наборах тестовых задач. Этой разработке посвящена первая глава диссертации.

Во второй главе проведен анализ модели пион-ядерного рассеяния в рамках трехпараметрического микроскопического оптического потенциала и релятивистского волнового уравнения Шредингера, основанной на теории высокоэнергетического рассеяния частиц на сложных системах в оптическом пределе. Впервые на этой основе получены и проанализированы характеристики пион-нуклонной амплитуды рассеяния в ядерной среде в сравнении с соответствующими параметрами рассеяния пионов на свободных нуклонах. Этот анализ проведен для широкого диапазона атомных масс и энергий. Показано, что указанная трехпараметрическая модель обеспечивает адекватное объяснение экспериментальных данных пион-ядерного рассеяния в области энергий, соответствующих резонансу, а предложенный алгоритм минимизации находит решение с большей вероятностью, чем известные методы (SIMPLEX и MIGRAD).

Третья глава работы посвящена численному исследованию полидисперсной популяции везикул димиристоилфосфатидилхолина (ДМФХ) по данным малоуглового рентгеновского рассеяния. Предложенный автором метод учета флуктуаций параметров бислоя оболочки везикул позволил эффективно применить метод разделенных формфакторов. Разработанный в диссертации метод поиска решения позволил впервые получить параметры, характеризующие структуру полидисперсной популяции однослойных везикул ДМФХ в 40% водном растворе сахарозы. Новизна и актуальность этой части работы связана с необходимостью получения детальной информации о структуре везикулярных систем на основе данных, полученных неразрушающими методами и возможностью практических приложений в

области фармакологии и косметологии, где везикулы используются в качестве транспортных элементов.

Изложенное выше характеризует **новизну полученных результатов и разработок.**

**Научно-практическая значимость** работы следует из формулировок представленных положений на защиту и выводов. Созданные комплексы проблемно-ориентированных программ для оценки параметров микроскопического оптического потенциала в модели пион-ядерного рассеяния и для оценки параметров везикулярных систем по данным малоуглового рассеяния позволили по каждой из этих двух моделей получить новые результаты. Предложенные методы поиска глобального экстремума представляют собой отдельный важный результат, так как могут быть применены в различных областях науки, где требуется минимизация сложных функций с разделяемыми, неразделяемыми и частично разделяемыми переменными.

#### **Замечания.**

По тексту и содержанию диссертации имеются следующие замечания:

1. В работе нет рассмотрения одного из общих методов поиска глобального экстремума - метода моделирования отжига (simulated annealing). Правда, надо отметить, что идея отжига усложняет параллельную реализацию процедур поиска.

2. В автореферате не представлены (хотя бы выборочно) полученные значения структурных параметров для растворов ДМФХ.

Количество опечаток небольшое, и они не искажают смысл текста.

Работа является вполне **законченным исследованием**, выполненным на **высоком научном уровне**. Материал изложен последовательно, все положения обосновываются. Результаты обладают высокой новизной, научным и практическим значением. Автореферат и публикации полностью отражают содержание работы.

По научному уровню, объёму выполненных исследований, актуальности и практической значимости полученных результатов автореферат диссертации соответствует требованиям "Положения о присуждении ученых степеней", утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24

сентября 2013 г. № 842, предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени кандидата наук, а ее автор Жабицкая Евгения Игоревна заслуживает присуждения степени кандидата физико-математических наук по специальности "05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ".

Ведущий научный сотрудник

Федерального государственного учреждения

"Федеральный научно-исследовательский

центр "Кристаллография и фотоника"

Российской академии наук",

Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова,

доктор химических наук

Волков Владимир Владимирович



/ Волков В. В. /

Подпись В. В. Волкова заверяю:

подпись *V.V. Volkov*  
заверяю: *Н.С. Ермаков*

*Настоящее заявление*  
*Н.С. Ермаков*



« 1 » сентября 2016 г.

Федеральное государственное учреждение "Федеральный научно-исследовательский центр "Кристаллография и фотоника" Российской академии наук", Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова (ИК РАН).

119333, г. Москва, Ленинский пр-т, д.59.

Тел. (499)135-54-50

E-mail: vvo@ns.crys.ras.ru, volkicras@mail.ru

