

«УТВЕРЖДАЮ»

Заместитель директора по научной работе

НИЦ «Курчатовский институт» ФГБУ

Петербургский институт ядерной физики

им. Б.П. Константинова

Воронин В.В.

« 20 » июня 2016 г.



### ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», ФГБУ Петербургского института ядерной физики им. Б.П. Константинова, на диссертацию Жабицкой Евгении Игоревны «Метод асинхронной дифференциальной эволюции для численного исследования многопараметрических моделей физических систем», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности "05.13.18 - математическое моделирование, численные методы и комплексы программ"

**Актуальность** темы диссертации не вызывает сомнений, учитывая развитие исследований физических систем на синхротронных и нейтронных источниках, ускорителях протонов и тяжелых ионов. Универсальность выбранных подходов позволяет применить их как в ядерной физике, так и в нейтронных опытах на молекулярных системах, а также в перспективе для моделирования физических, химических и биологических объектов, популяций клеток и микроорганизмов и крупных экосистем, глобальных процессов в экономических и социальных сферах. Созданная автором математическая база расширяет спектр численных методов для экспериментаторов, изучающих физические системы. Найденные алгоритмы надежного и быстрого поиска их параметров обеспечивают наилучшее согласие численных результатов с экспериментальными данными.

Диссертация включает введение, три главы, заключение, список литературы, три приложения. В сумме это 136 с, 40 рис. в основном тексте и дополнительные иллюстрации в приложениях, 19 таблиц в основном тексте. Введение отражает актуальность, новизну, цели и задачи, положения, выносимые на защиту, данные по апробации работы, вкладе автора и публикациях. Ключевой является первая глава, где дан анализ состояния проблемы, приведены результаты автора по методу асинхронной дифференциальной эволюции (АДЭ), описано семейство методов АДЭ, свойства разработанных алгоритмов и их преимущества

благодаря высокопроизводительным вычислениям на многопроцессорных системах. Реализация алгоритмов выполнена на двух типах систем (гл. 2, 3). В области физики высоких энергий анализ модели пион-ядерного рассеяния методом **асинхронной дифференциальной эволюции** (гл.2) важен для расшифровки данных пион-ядерного упругого рассеяния, оценки влияния ядерной среды на пион-нуклонное рассеяния внутри ядра (in-medium эффект). Третья глава посвящена методологии поиска параметров моделей везикулярных систем, востребованных в биомедицине, фармакологии, косметологии в качестве носителей лекарств.

**Научная новизна работы** заключается в том, что сформулирован метод асинхронной дифференциальной эволюции (АДЭ), разработан эволюционный алгоритм на основе метода дифференциальной эволюции (ДЭ), повышена эффективность параллельных вычислений, предложена модификация операции кроссовера методов ДЭ и АДЭ, построен новый тип кроссовера, динамически учитывающий в ходе минимизации выборочные парные корреляции между параметрами задачи. Это позволяет эффективно решать задачи с разделяемыми, неразделяемыми, частично-разделяемыми переменными без настройки параметров пользователем. Результаты на тестовых задачах превосходят известные адаптивные варианты ДЭ по скорости и вероятности сходимости. Используя новые подходы, автор для трехпараметрической модели на основе микроскопического оптического потенциала и релятивистского волнового уравнения рассчитал дифференциальные сечения упругого рассеяния заряженных пионов на ядрах в диапазоне кинетических энергий налетающих пионов  $T=130-290$  МэВ для ядер  $^{28}\text{Si}$ ,  $^{40}\text{Ca}$ ,  $^{58}\text{Ni}$ ,  $^{208}\text{Pb}$ , определил характеристики пион-нуклонной амплитуды в ядерной среде в сравнении с параметрами рассеяния пионов на свободных нуклонах. Кроме этого автором предложен метод учета флуктуации параметров бислоя оболочки везикул по модели разделенных формфакторов. Из анализа данных рентгеновского рассеяния на везикулярных системах с использованием АДЭ найдены параметры структуры полидисперсной популяции однослойных везикул в водном растворе сахарозы.

Объем и содержание исследований свидетельствуют о **научной и практической значимости работы**. Разработанные алгоритмы глобальной минимизации обладают преимуществами относительно известных подходов: не требуют вычисления производных; позволяют не только получить сравнимые со стандартной ДЭ скорость и вероятность сходимости к глобальному минимуму, но и улучшить эти показатели и обеспечить равномерную полную загрузку вычислительных узлов при расчетах в параллельном режиме. Созданы комплексы проблемно-ориентированных программ для оценки параметров микроскопического оптического потенциала в модели пион-ядерного рассеяния и

характеристик везикулярных систем по данным малоуглового рассеяния. Полученные на основе численного исследования результаты физически значимы и реально применяются для моделирования указанных систем. На тестовых и перечисленных выше задачах подтверждена эффективность параллельной реализации АДЭ, когда время нахождения глобального минимума на основе АДЭ снижается на два порядка при использовании 100 и более вычислительных узлов, что расширяет потенциальные применения методов глобальной минимизации АДЭ и АДЭ с адаптивной корреляционной матрицей.

Из содержания диссертации ясно, что её **результаты являются обоснованными и достоверными**. Эффективность алгоритмов глобальной минимизации подтверждена вычислениями с тестовыми задачами, расчетами с помощью других методов минимизации. Аналитические оценки ограничений на управляющие параметры АДЭ подтверждены расчетами. Численные результаты по исследованию многопараметрических моделей физических систем согласуются с данными экспериментов и теоретическими оценками.

**Соискателем выполнена законченная квалификационная работа**, которая надлежащим образом оформлена. При большом объеме и высоком качестве результатов диссертация не свободна от некоторых недостатков. **В качестве замечаний** по содержанию диссертации можно отметить следующее.

1. Отсутствует четкое определение параметров пион-нуклонного и пион - ядерного рассеяния.
2. На с. 59 «Представлено численное исследование модели пион - ядерного рассеяния с использованием метода АДЭ для оценки параметров пион - нуклонной амплитуды в рамках микроскопической модели пион - ядерного рассеяния с использованием микроскопического оптического потенциала по данным о дифференциальных сечениях упругого рассеяния пионов на ядрах при энергиях Делта(1232) P33-резонанса.» Однако остается неясным, что понимается под «микроскопической моделью пион - ядерного рассеяния». Обычно имеется в виду пион - нуклонная амплитуда, определяемая из исследования чисто пион - нуклонного рассеяния. В этом смысле другие нуклоны ядра являются внешним фактором, искажающим картину чисто пион - нуклонного взаимодействия.
3. Не совсем понятно, что автор понимает под упругим рассеянием пионов на ядрах. В обычном смысле это рассеяние на ядре как целом.
4. При моделировании везикулярных систем автор модифицировал модель РФФ с учетом разброса параметров внутренней структуры липидного слоя в популяции везикул. Очевидно,

что эти параметры зависят от радиуса кривизны поверхности частиц. Хотелось бы понять, как этот фактор сказывается на качестве моделирования указанных поли дисперсных систем.

5. Полученные результаты опираются на модель РФФ. В этой связи возникает вопрос о том, в какой мере ограничения данной модели сказываются на точности моделирования развитыми автором численными методами.

6. Возможен ли в рамках предложенных алгоритмов учет отклонений формы везикул от сферической, а также влияние структурного фактора при умеренных концентрациях везикул на полученные результирующие параметры внутренней структуры везикул.

Недостатки оформления: многочисленные сокращения, на рис.3.5. данные для разных моделей трудноразличимы, в прил. III надписи на графиках на английском языке, в табл. 2.1. для ядер указаны значения радиуса для расчета формфактора ядерной плотности (2.12), но не указано, какие именно значения использовали для получения результатов, приведенных на рис. 2.3 - 2.5 и в табл. 2.3 и 2.4.

Замечания не снижают общей положительной оценки работы, имеющей фундаментальное и практическое значение, надежно апробированной при моделировании физических систем. Развитые методы эффективны для расчетов в последовательном режиме и на параллельных вычислительных системах при минимизации сложных функций (не дифференцируемых, не являющихся непрерывными с разделяемыми, неразделяемыми и частично разделяемыми переменными). Автореферат и публикации полностью отражают содержание работы. Оригинальные результаты обладают новизной, опубликованы в рецензируемых российских и зарубежных журналах, доложены на семинарах и конференциях российского и международного уровня.

Материалы диссертации могут быть **рекомендованы** для использования в научных и образовательных организациях «Объединенный институт ядерных исследований», «НИИ ядерной физики имени Д.В. Скобельцына МГУ им. М.В. Ломоносова», «Курчатовский институт НИЦ "Курчатовский институт" (Москва)» и НИЦ КИ ФГБУ «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П.Константинова (ПИЯФ, Гатчина)», «Санкт-Петербургский государственный университет», «Российский университет дружбы народов», ГБОУ ВО МО «Университет Дубна», ФГБНУ «НИИ биомедицинской химии им. В.Н. Ореховича», а также в других научных центрах, связанных с исследованиями рассеяния элементарных частиц на ядрах, нейтронными и синхротронными экспериментами на молекулярных структурах.

Диссертация Жабицкой Евгении Игоревны «Метод асинхронной дифференциальной эволюции для численного исследования многопараметрических моделей физических систем» соответствует всем требованиям и критериям,

предъявляемым к диссертационным работам на соискание ученой степени кандидата наук согласно п. 9-14 "Положения о присуждении ученых степеней", утвержденного Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. №842 (ред. от 21.04. 2016), а её автор, Жабицкая Е. И., заслуживает присуждения степени кандидата физико-математических наук по специальности "05.13.18 - математическое моделирование, численные методы и комплексы программ".

Отзыв составлен по итогам обсуждения доклада Жабицкой Е. И. на объединенном научном семинаре лабораторий мезонной физики, квантовой химии, нейтронных физико-химических исследований НИЦ КИ ФГБУ ПИЯФ 20.06.2016 г.

Сумачев Викторин Владиславович доктор  
физико-математических наук, заведующий  
лабораторией мезонной физики НИЦ  
"Курчатовский институт" ФГБУ  
"Петербургский институт ядерной физики  
им. Б.П. Константинова"

Титов Анатолий Владимирович  
доктор физико-математических наук,  
заведующий лабораторией квантовой химии  
НИЦ "Курчатовский институт"  
ФГБУ "Петербургский институт ядерной  
физики им. Б.П. Константинова",

Лебедев Василий Тимофеевич,  
доктор физико-математических наук,  
заведующий лабораторией,  
нейтронных физико-химических исследований  
НИЦ "Курчатовский институт"  
ФГБУ "Петербургский институт ядерной физики  
им. Б.П. Константинова"

