

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

на диссертационную работу **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”

Диссертационная работа посвящена развитию методов глобальной минимизации, а также численному исследованию, с использованием предложенных новых алгоритмов, многопараметрических моделей физических систем, а именно – модели упругого пион-ядерного рассеяния и модели полидисперсной системы везикул димиристоилфосфатидилхолина (ДМФХ) на многопроцессорных вычислительных кластерах.

Задачи минимизации действительных целевых функций, определенных в многомерном пространстве вещественных аргументов, естественно возникают в различных областях научных исследований. Этим обусловлена актуальность темы диссертации. Решение задач глобальной минимизации, как правило, требует значительных затрат компьютерного времени. Поэтому важным является развитие алгоритмов, обеспечивающих возможность эффективной параллельной реализации для вычислений на многопроцессорных системах.

В диссертации на основе широко применяемого метода глобальной минимизации, метода дифференциальной эволюции (ДЭ) предложен новый алгоритм асинхронной дифференциальной эволюции (АДЭ), а также его модификация – АЛЭ с кроссовером, задаваемым адаптивной корреляционной матрицей. Эффективность этих методов подтверждена тестовыми расчетами и успешным решением рассмотренных в диссертации физических приложений.

Значимость исследованных с помощью предложенного метода АДЭ многопараметрических моделей физических систем также не вызывает сомнений. Микроскопическая модель пион-ядерного рассеяния позволяет найти характеристики пион-нуклонного рассеяния внутри ядра-мишени

по экспериментальным данным рассеяния заряженных пионов на ядрах и на этой основе проанализировать влияние ядерной среды на процесс пион-нуклонного рассеяния. Исследование другой модели, модели полидисперсных везикулярных систем фосфолипидов, важно как с точки зрения получения новых фундаментальных знаний о структуре и свойствах биологических мембран, так и в рамках практических приложений в области биофизики, фармакологии и косметологии. Поэтому разработка эффективных методов компьютерного анализа данных малоуглового рассеяния нейтронов и рентгеновских лучей на везикулярных системах безусловно является актуальной проблемой.

Алгоритм ДЭ, который лежит в основе разработанных в диссертации новых подходов – один из широко применяемых методов поиска глобального минимума, относящийся к классу эволюционных алгоритмов, не требующий вычисления производных и применимый в случаях многоэкстремальной и/или негладкой целевой функции.

В первой главе диссертации представлены разработанные на базе ДЭ алгоритмы асинхронной дифференциальной эволюции (АДЭ), сохраняющие имеющиеся преимущества метода ДЭ, улучшающие скорость и/или вероятность сходимости для задач с частично-разделяющимися переменными и позволяющие эффективнее, по сравнению с ДЭ, использовать имеющиеся вычислительные мощности в режиме параллельных вычислений. Сформулирован математический подход для оценки границ допустимых значений управляющих параметров алгоритма. Получены ограничения, налагаемые на управляющие параметры для стратегий АДЭ и стратегии *best/1/bin* метода ДЭ, соответствующие необходимым условиям предупреждения преждевременной сходимости алгоритмов. Описана реализация метода АДЭ с рестартом, который позволил сбалансировать хорошую скорость сходимости с высокой вероятностью сходимости. Показано, что рестарт улучшает как ожидаемую скорость, так и вероятность сходимости по сравнению с ДЭ и АДЭ без рестарта. Проанализирована зависимость скорости и вероятности сходимости от величины параметров рестарта. Предложен метод АДЭ с адаптивным кроссовером, определяемым адаптивной корреляционной матрицей (АДЭ-АКМ). Описаны особенности компьютерной реализации методов и параллельные версии АДЭ. Показано, что асинхронизация ускоряет вычисления при расчетах в параллельном режиме.

Во второй главе на базе метода глобальной минимизации АДЭ проведен анализ модели пион-ядерного рассеяния на основе трехпараметрического микроскопического оптического потенциала и релятивистского волнового уравнения Шредингера. Проведен анализ данных по дифференциальным сечениям упругого рассеяния заряженных пионов на ядрах ^{28}Si , ^{40}Ca , ^{54}Ni , ^{208}Pb при кинетических энергиях налетающих пионов $T=130\div 290$ МэВ, покрывающих область энергии возбуждения $\Delta(1232)\text{P}_{33}$ -резонанса пион-нуклонного рассеяния. Показано, что в заданной области метод АДЭ находит минимум с большей вероятностью, чем широко применяемые методы минимизации SIMPLEX и MIGRAD, реализованные в пакете MINUIT. Таким образом, подтверждена эффективность применения метода АДЭ для решения поставленной задачи.

В третьей главе с применением АДЭ проведено численное исследование экспериментальных спектров малоуглового синхротронного рассеяния на полидисперсной популяции однослойных везикул ДМФХ в 40% растворе сахарозы. Определение параметров, отвечающих в модели разделенных формфакторов за структуру указанной везикулярной системы, требует глобальной минимизации многоэкстремальной функции с 9 частично-коррелированными переменными. Реализованный на базе АДЭ-минимизатора с использованием технологии MPI комплекс программ позволил эффективно распараллелить вычисления на многопроцессорном кластере ЦИВК (ЛИТ ОИЯИ), более чем в 50 раз уменьшив время расчетов. Проведено сравнение эффективности использования метода АДЭ и методов минимизации, реализованных в пакете MINUIT, для нахождения параметров везикулярных систем. Получено, что вероятность определения оптимального набора параметров системы методом АДЭ значительно превосходит вероятность нахождения тех же параметров с теми же начальными условиями методами SIMPLEX и MIGRAD.

В целом, работа производит благоприятное впечатление, несмотря на объективный недостаток математической и терминологической сложности. Автором проведено серьезное исследование проблемы, рассмотрен широкий спектр подходов, аккуратно проанализированы их достоинства и недостатки. Автор грамотно подошел к разработке методов решения поставленных в диссертации задач, разработал и протестировал новые алгоритмы глобальной минимизации, успешно применил их для исследования двух актуальных

многопараметрических моделей физических систем.

Новизна полученных результатов и их научная ценность заключаются в следующем: (1) впервые предложен и реализован метод асинхронной дифференциальной эволюции для эффективной глобальной минимизации функций действительных аргументов; (2) в результате численного исследования с использованием предложенных подходов получены новые физически значимые результаты. Практическая значимость предложенных алгоритмов состоит в существенном повышении эффективности расчетов на параллельных вычислительных системах.

По тексту и содержанию диссертации имеются следующие замечания:

1. При рассмотрении метода АДЭ с рестартом и автоматическим увеличением размера популяции не реализована схема уменьшения размера популяции.

2. В работе мало внимания уделено сравнению с алгоритмами типа «Роя частиц» и «Муравьиным алгоритмом», не приведено количественного сопоставления скоростей и вероятностей сходимости этих методов (для типичных целевых функций), из которого была бы очевидна потребность в предложенных автором алгоритмах.

3. Следовало бы более подробно осветить вопрос о влиянии величины параметров новых алгоритмов с адаптивным кроссовером (параметра адаптации корреляционной матрицы ν и способа выбора параметра отсечения c_{thr}) на поведение оптимизатора. Пожелание: более подробно исследовать и реализовать программно возможности автоматического подбора этих параметров в методе АДЭ-АКМ.

4. В диссертации отсутствует исследование вопроса о том, какова чувствительность ускорения параллельных вычислений к скорости и к латентности соединений между узлами.

Указанные замечания не снижают положительной оценки диссертации, которая представляет собой выполненное на высоком научном уровне законченное исследование в рамках выдвинутых целей и имеет как научное, так и практическое значение.

Разработанные в диссертации методы АДЭ и АДЭ-АКМ являются эффективными инструментами анализа данных с возможностью их применения

при решении широкого круга задач (в том числе выходящих за рамки данной работы) и в режиме последовательных вычислений, и на параллельных вычислительных системах.

Основные результаты работы опубликованы, в 21 научной работе, включая 10 публикаций в рецензируемых изданиях, представлены на научных семинарах и конференциях российского и международного уровня.

Диссертационная работа Е.И. Жабицкой выполнена на высоком научном уровне. Результатом работы является решение задачи, имеющей существенное значение в развитии и компьютерной реализации новых методов нахождения глобального минимума многоэкстремальных, многопараметрических, возможно негладких функций действительных аргументов и их использовании для численного исследования многопараметрических моделей физических систем.

Приведенные результаты можно классифицировать как новые, обоснованные и имеющие большое практическое и научное значение.

Диссертация написана грамотно и аккуратно оформлена. Автореферат соответствует основному содержанию диссертации.

Работа полностью соответствует требованиям «Положения о порядке присуждения ученых степеней», а ее автор Жабицкая Евгения Игоревна заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности «05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

доктор физико-математических наук,
профессор кафедры прикладной математики

Московского государственного технологического университета «СТАНКИН»

Щетинин Евгений Юрьевич

