

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА
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”

Диссертация посвящена развитию эффективных методов глобальной минимизации и применению этих методов в исследовании физических систем с помощью многопараметрических моделей.

В случае многоэкстремальной и/или негладкой целевой функции глобальный минимум может быть найден с помощью методов многомерной глобальной минимизации. Их компьютерная реализация требует большого объема вычислений, что делает актуальным развитие подходов, обеспечивающих эффективную параллельную реализацию. Актуальность темы диссертации обусловлена также необходимостью повышения эффективности методов глобальной минимизации и важностью рассмотренных в работе многопараметрических моделей конкретных физических систем, требующих надежного и быстрого определения наборов параметров, обеспечивающих согласие численных результатов с экспериментальными данными. Это относится как к микроскопической модели пион-ядерного потенциала, необходимого для моделирования упругого рассеяния пионов и более сложных пион-ядерных взаимодействий, так и к задаче нахождения параметров структуры везикулярных систем, обусловленной практическими приложениями в области фармакологии и косметологии.

В диссертации сформулирован новый метод асинхронной дифференциальной эволюции (АДЭ), в котором на каждом шаге обновляется только один из членов популяции (Глава 1, Разделы 1.1 и 1.2). Впервые предложена модификация операции кроссовера метода дифференциальной эволюции (ДЭ). Новый тип кроссовера построен с использованием адаптивной корреляционной матрицы, динамически учитывающей в ходе процесса минимизации выборочные парные корреляции между параметрами задачи. В предложенный алгоритм встроены адаптивная схема выбора масштабирующего фактора и рестарт с увеличением размера популяции (Разделы 1.3 и 1.4). Новый алгоритм способен идентифицировать коррелированные группы переменных и благодаря этому эффективно решать разделяемые, неразделяемые и частично-разделяемые задачи минимизации. Он не требует настройки параметров пользователем и превосходит на наборах тестовых задач СЕС-2005 и ВВОВ-2012 другие известные в литературе адаптивные варианты ДЭ по скорости и вероятности сходимости. Получены ограничения на управляющие параметры для методов ДЭ и АДЭ. Показано, что рестарт улучшает как скорость, так и вероятность сходимости по сравнению с ДЭ и АДЭ без рестарта. На тестовых и перечисленных выше задачах подтверждена эффективность параллельной реализации АДЭ. Показано, что в режиме параллельных вычислений время нахождения глобального минимума на основе АДЭ уменьшается обратно пропорционально количеству задействованных вычислительных узлов и может быть уменьшено почти на два порядка при использовании 100 вычислительных узлов.

В данной работе впервые с использованием АДЭ получены и проанализированы характеристики пион-нуклонной амплитуды на основе микроскопического оптического потенциала и релятивистского волнового уравнения Шредингера (Глава 2).

С использованием АДЭ, также впервые получены параметры, характеризующие структуру полидисперсной популяции однослойных везикул ДМФХ в 40% водном растворе сахарозы (Глава 3). Учет флуктуаций параметров бислоя оболочки везикул

позволил эффективно применить метод разделенных формфакторов для анализа данных малоуглового рентгеновского рассеяния на везикулярных системах.

Предложенные алгоритмы обладают рядом преимуществ по сравнению с другими подходами. Они не требуют вычисления производных; позволяют получить сравнимые со стандартной ДЭ скорость и вероятность сходимости к глобальному минимуму, и в ряде случаев улучшить эти показатели; позволяют эффективно распараллелить вычисления за счет равномерной и полной загрузки доступных вычислительных узлов при расчетах в параллельном режиме.

Предложенные в диссертации методы могут эффективно использоваться для решения задач нахождения глобального минимума функции действительных переменных.

Созданы комплексы программ реализующие разработанные методы и проблемно-ориентированные для оценки параметров микроскопического оптического потенциала в модели пион-ядерного рассеяния и для оценки параметров везикулярных систем по данным малоуглового рассеяния.

Полученные результаты являются физически значимыми в области моделирования пион-ядерного рассеяния и в области исследования везикулярных систем и используются в настоящее время для дальнейших исследований в этих направлениях.

Разработанные методы глобальной минимизации АДЭ и АДЭ с адаптивной корреляционной матрицей могут быть эффективно использованы в различных областях науки.

По тексту и содержанию диссертации имеются следующие замечания:

1. Текст диссертации не свободен от опечаток и неточностей. Например, при описании модели разделенных формфакторов квадрат свертки функции контраста с амплитудой рассеяния назван формфактором, в то время как в литературе принято называть формфактором саму свертку.

2. Формат рисунков 3.5 – 3.7 выбран явно неудачно и не позволяет визуально сравнить качество описания экспериментальных данных по всей наблюдаемой области вектора рассеяния.

3. Автор сам отмечает, что при меньших энергиях хорошее описание экспериментальных данных пион ядерного рассеяния достигается только для передней области углов. Это связывается с использованием довольно простой (малопараметрической) модели потенциала. Желательно было бы рассмотреть как использование более сложной модели повлияет на зависимость амплитуды пион-нуклонного рассеяния от среды.

4. В физических задачах рассматриваемого типа известна проблема неоднозначности, обусловленная объективными физическими причинами. Функционал невязки может иметь несколько минимумов, имеющих близкие значения и претендующих на роль «глобального». Так что минимум с наименьшим значением невязки не всегда отвечает физически адекватному набору параметров. Решению этой проблемы при использовании разработанных методов в диссертации уделено мало внимания.

Указанные замечания не снижают положительной оценки диссертации.

Рассмотренная диссертация является законченной научно-исследовательской работой. Она выполнена лично автором и характеризуется высоким научным уровнем. Работы, вошедшие в диссертацию, являются достоверными и оригинальными. Результаты работы имеют как научное, так и практическое значение.

Тема диссертации соответствует паспорту научной специальности 05.13.18 - математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

По результатам опубликована 21 научная работа, включая 10 публикаций в рецензируемых изданиях. Основные положения представлялись на научных семинарах и

конференциях российского и международного уровня.

Автореферат и публикации полностью отражают содержание диссертационной работы.

По объему, научному уровню и актуальности диссертация полностью соответствует требованиям п.9 “Положения о присуждении ученых степеней”, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор — Жабицкая Евгения Игоревна заслуживает присуждения ей искомой степени кандидата физико-математических наук по специальности “05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ”.

На обработку персональных данных согласен.

Официальный оппонент,

доктор физико-математических наук,
профессор Кафедры нейтронографии Физического факультета
Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова,
Гончаров Сергей Антонович.

119991 Москва, Ленинские горы, д.1 тел.(495)9392492, gsa@srd.sinp.msu.ru.

12 сентября 2016 г.

Подпись Гончарова С.А. заверяю

Декан Физического факультета

Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова,
профессор Сыроев Н.Н.

