

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 720.001.04

на базе Объединенного института ядерных исследований
по диссертации на соискание ученой степени кандидата
физико-математических наук

аттестационное дело No _____

решение диссертационного совета от 30 сентября 2016 г. No 66

О присуждении Жабицкой Евгении Игоревне, Россия,
ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Метод асинхронной дифференциальной эволюции для численного исследования многопараметрических моделей физических систем» по специальности «05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» принята к защите 17 июня 2016 г., протокол № 65, диссертационным советом Д 720.001.04, созданным 11 апреля 2012 г., приказ 105/нк, на базе Объединенного института ядерных исследований, 141980, Московская область, г. Дубна, ул. Жолио-Кюри, 6.

Соискатель – Жабицкая Евгения Игоревна, 1976 года рождения, в 2000 году окончила с отличием Физический факультет Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова с присуждением квалификации «Физик» по специальности «Физика». Работает старшим преподавателем в университете «Дубна» и младшим научным сотрудником в Лаборатории информационных технологий Объединенного института ядерных исследований (ЛИТ ОИЯИ). Диссертация выполнена в ЛИТ ОИЯИ.

Научные руководители – доктор физико-математических наук Земляная Елена Валериевна, ведущий научный сотрудник ЛИТ ОИЯИ; доктор физико-математических наук Киселев Михаил Алексеевич, ведущий научный сотрудник ЛНФ ОИЯИ.

Официальные оппоненты:

– Щетинин Евгений Юрьевич, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры прикладной математики Московского государственного технологического университета «СТАНКИН».
– Гончаров Сергей Антонович, доктор физико-математических наук, профессор Кафедры нейтронографии Физического факультета Московского государственного университета имени М. В. Ломоносова.

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – ФГБУ Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова (ПИЯФ) НИЦ "Курчатовский институт" (г. Гатчина Ленинградской области) – в своем положительном отзыве, принятом на объединенном начном семинаре лабораторий мезонной физики, квантовой химии, нейтронных физико-химических исследований НИЦ КИ ФГБУ ПИЯФ 20.06.2016 и утвержденном заместителем директора по научной работе НИЦ «Курчатовский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова Ворониным В.В., указала, что диссертационная работа Жабицкой Е. И. представляет собой законченную квалификационную работу, результаты которой являются обоснованными и достоверными, характеризуется актуальностью, научной новизной, научной и практической значимостью. 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)», «Петербургский институт ядерной физики НИЦ "Курчатовский институт" имени 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» и других научных центрах, связанных с исследованиями рассеяния частиц на ядрах, нейтронными и синхротронными экспериментами по изучению молекулярных структур. Приведены несколько замечаний, которые, по мнению ведущей организации, не снижают общей положительной оценки работы.

В заключительной части отзыва ведущей организации указывается, что диссертационная работа соответствует специальности «05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» и полностью удовлетворяет всем требованиям "Положения о присуждении ученых степеней", а её автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается их широкой известностью своими достижениями в области, в которой выполнено диссертационное исследование, и способностью компетентно, всесторонне и объективно оценить работу.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы: от Зубавичуса Яна Витаутасовича, доктора физико-математических наук, начальника отдела

синхротронных станций Курчатовского комплекса синхротронно-нейтронных исследований НИЦ «Курчатовский институт»; от Джилия Бруновича Понтекорво, доктора физико-математических наук, ведущего научного сотрудника Лаборатории ядерных проблем им. В. П. Джелепова Объединенного института ядерных исследований; Николая Михайловича Ершова, кандидата физико-математических наук, старшего научного сотрудника кафедры автоматизации научных исследований факультета ВМК МГУ им. М.В. Ломоносова; Владимира Владимировича Волкова, доктора химических наук, ведущего научного сотрудника Федерального государственного учреждения «Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» Российской академии наук», Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова. Отзывы положительные, в них отмечается актуальность диссертационного исследования, научная новизна и практическая ценность полученных результатов. Подчеркивается, что разработанные автором алгоритмы и комплексы программ успешно применены для анализа микроскопической модели пион-ядерного рассеяния и модели малоуглового синхротронного рассеяния на полидисперсной популяции везикул димиристоилфосфатидилхолина.

Соискатель имеет 31 опубликованную работу, в том числе по теме диссертации 21 работу, 10 из которых опубликованы в рецензируемых научных изданиях. В опубликованных работах соискателя отражены основные результаты диссертации и положения, выносимые на защиту. Вклад диссертанта в указанные публикации является определяющим.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Жабицкая, Е. И., Жабицкий, М. В. Решение оптимизационных задач на распределенных вычислительных системах с помощью алгоритма асинхронной дифференциальной эволюции // Математическое моделирование, 2012, т. 24, № 12, с. 33–37.

2. Жабицкая, Е.И., Жабицкий, М.В., Земляная, Е.В., Лукьянов, К.В. Расчет параметров микроскопического оптического потенциала упругого рассеяния π -мезонов на ядрах с применением алгоритма асинхронной дифференциальной эволюции // Компьютерные исследования и моделирование, 2012, т. 4, № 3, сс. 585–595.

3. Жабицкая, Е. И., Земляная, Е. В., Киселев М. А. Исследование структуры однослойных везикул DMPC с использованием параллельного алгоритма асинхронной дифференциальной эволюции // Вестник

Российского университета дружбы народов. Серия: Математика. Информатика. Физика, 2014, № 2, сс. 253–259.

4. Лукьянов, В.К., Земляная, Е.В., Лукьянов, К.В., Жабицкая, Е.И., Жабицкий, М.В. Моделирование пион-ядерного микроскопического оптического потенциала при энергиях $(3, 3)$ -резонанса и влияние ядерной среды на пион-нуклонную амплитуду // Ядерная физика, 2014, т. 77, № 1, сс. 103–112.

5. Киселев, М.А., Земляная, Е.В., Жабицкая, Е.И., Аксенов, В.Л. Исследование однослойных везикул ДМФХ в водных растворах сахарозы методами малоуглового рассеяния нейтронов и рентгеновских лучей // Кристаллография, 2015, т. 60, сс. 140–145.

6. Жабицкая, Е.И., Земляная, Е.В., Киселев, М.А. Численный анализ экспериментальных данных по синхротронному рассеянию на полидисперсных везикулярных системах с использованием метода Асинхронной Дифференциальной Эволюции // Математическое моделирование, 2015, т. 27, № 7, сс. 58–64.

7. Zhabitskaya, E.I. Constraints on Control Parameters of Asynchronous Differential Evolution. // Mathematical Modeling and Computational Science. (MMCP-2011). Lecture Notes in Computer Science, Springer Berlin Heidelberg, 2012, v. 7125, pp. 322–327.

8. Zhabitskaya, E.I., Zhabitsky, M.V. Asynchronous Differential Evolution // Mathematical Modeling and Computational Science. (MMCP-2011). Lecture Notes in Computer Science, Springer Berlin Heidelberg, 2012, v. 7125, pp. 328–333.

9. Zhabitskaya, E., Zhabitsky, M. Asynchronous Differential Evolution with Restart // In I. Dimov, I. Farag, and L. Vulkov (Eds.): Numerical Analysis and Its Applications (NAA'2012). Lecture Notes in Computer Science, Springer Berlin Heidelberg, 2013, v. 8236, pp. 555–561.

10. Zhabitskaya, E.I., Zhabitsky, M.V. Asynchronous Differential Evolution with Adaptive Correlation Matrix // Proceeding of the 15th Annual Conference on Genetic and Evolutionary Computation, USA, New York, 2013, pp. 455–462.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

1. Разработан метод асинхронной дифференциальной эволюции (АДЭ) для глобальной минимизации функции действительных аргументов. В рамках АДЭ предложена модификация операции кроссовера с адаптивной корреляционной матрицей (АКМ). АДЭ-АКМ с адаптивным выбором масштабирующего фактора и процедурой рестарта с автоматическим увеличением размера популяции не требует настройки параметров пользователем и превосходит при этом другие известные в литературе адаптивные варианты ДЭ по скорости и вероятности сходимости на наборах тестовых задач СЕС-2005 и ВВОВ-2012 и на реальных задачах.
2. Показана эффективность применения параллельных версий АДЭ для тестовых и реальных задач.
3. Численно исследована микроскопическая модель пион-ядерного рассеяния. Определены параметры амплитуды упругого рассеяния заряженных пионов на ядрах ^{28}Si , ^{40}Ca , ^{58}Ni , ^{208}Pb в диапазоне кинетической энергии налетающих пионов от 130 до 291 МэВ, что позволило проанализировать эффект ядерной среды на процесс рассеяния пионов.
4. Численно исследована модель популяции везикул ДМФХ в 40% растворе сахарозы на основе метода разделенных форм факторов (РФФ) с учетом флуктуации параметров структуры бислоя. Найдены параметры, определяющие структуру этой системы.

Теоретическая значимость исследования состоит в следующем:

- Показано, что предложенные в диссертации методы могут быть эффективно использованы для решения задач нахождения глобального минимума функции действительных переменных.
- Показано, что теоретический подход на основе трехпараметрического микроскопического оптического потенциала в высокоэнергетическом приближении и релятивистского волнового уравнения обеспечивает согласующиеся с экспериментальными данными значения сечений упругого пион-ядерного рассеяния.
- Показано, что модифицированная модель разделенных формфакторов с учетом флуктуаций значений параметров бислоя применима

для исследования структуры полидисперсных везикулярных систем на основе данных малоуглового рентгеновского рассеяния.

- На тестовых и перечисленных выше физических 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.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

- Созданы проблемно-ориентированные комплексы программ для оценки параметров микроскопического оптического потенциала в модели пион-ядерного рассеяния и для оценки параметров везикулярных систем по данным малоуглового рассеяния, которые в настоящее время активно используются для численных исследований.
- Полученные на основе проведенного численного исследования 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.

Достоверность и обоснованность результатов, полученных в диссертации, подтверждены тем, что

- заключения об эффективности предложенных алгоритмов глобальной минимизации подтверждены вычислениями с использованием тестовых наборов задач СЕС-2005 и ВВОВ-2012, а также сравнительными расчетами с использованием других часто используемых методов минимизации;
- достоверность и обоснованность аналитических оценок, касающихся ограничений на управляющие параметры АДЭ, подтверждена тестовыми

расчетами;

– достоверность и обоснованность полученных численных результатов в рамках исследования многопараметрических моделей физических систем подтверждена согласием с экспериментальными данными и теоретическими оценками, а также согласием с опубликованными результатами других авторов.

Личный вклад соискателя состоит в том, что диссертант в сотрудничестве с коллегами и соавторами из ОИЯИ и других научных центров участвовал в математической постановке рассмотренных в работе задач, проверке и улучшении соответствующих математических моделей, в разработке методов их численного исследования, в анализе и интерпретации получаемых численных результатов. Положения и результаты, представленные в диссертации, получены при определяющем участии соискателя. В разработку представленных в диссертации вычислительных схем и комплексов программ, в получение численных результатов, в анализ их точности и достоверности автором внесен определяющий вклад.

Основные результаты диссертации Е.И. Жабицкой можно квалифицировать как решение задачи, имеющей существенное значение в развитии и компьютерной реализации новых методов глобальной минимизации многоэкстремальных возможно негладких функций большого количества действительных аргументов, а также использовании этих методов для численного исследования многопараметрических моделей физических систем.

Диссертация соответствует критерию внутреннего единства, что подтверждается наличием четкого плана исследований, правильным выбором методологических подходов и средств, взаимосвязи концепции работы с полученными результатами и выводами.

Диссертационным советом сделан вывод о том, что диссертация представляет собой научно-квалификационную работу, которая соответствует критериям, установленным "Положением о присуждении ученых степеней". На заседании 30 сентября 2016 г. диссертационный совет принял решение присудить Жабицкой Евгении Игоревне ученую степень кандидата физико-математических наук.

На заседании из 21 члена совета присутствовало 14 членов диссертационного совета, из них докторов по профилю рассматриваемой

диссертации – 5. Роздано бюллетеней – 14, в урне бюллетеней – 14. Проголосовали **за** ходатайство о присуждении Жабицкой Евгении Игоревне ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности «05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» – **14**, против – **нет**, недействительных бюллетеней – **нет**.

Председатель заседания
диссертационного совета

_____ Игорь Викторович Пузынин

Ученый секретарь
диссертационного совета

_____ Иосиф Моисеевич Иванченко

«30» сентября 2016 г.