

Отзыв

на автореферат диссертационной работы Залого Александра Николаевича на тему «Автоматизация метода полнопрофильного анализа поликристаллов с использованием генетических алгоритмов», представленной к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.01 – Приборы и методы экспериментальной физики

Диссертационная работа А.Н. Залого посвящена развитию вычислительных методов определения и уточнения кристаллических структур из порошковых дифракционных данных. С каждым годом растет число новых кристаллических структур соединений, для которых получение монокристаллов хорошего качества является отдельной технологической задачей, на решение которой могут уйти годы. И тогда на помощь приходят данные порошковой дифракции и специализированные методики работы с такими данными. Несомненно, развитие таких методик требует развития вычислительных алгоритмов, причем таких алгоритмов, которые позволяют в полной мере использовать возможности распределенных вычислений. В этой связи выбранная тема исследования является актуальной, и, насколько мне известно, решением подобных задач применительно к порошковой дифракции в России никто прежде не занимался.

В автореферате подробно описаны принципы мультипопуляционного параллельного генетического алгоритма, приведены графики и таблицы, которые демонстрируют его эффективность на разнообразных примерах уже известных кристаллических структур. Видно, что автором проделана значительная работа по созданию и отладке программ, проведению тестовых расчетов в различных режимах. Также в автореферате приведены результаты определения автором двух новых кристаллических структур. Все эти результаты, достоверность которых не вызывает сомнений, позволяют надеяться, что в России появился и будет успешно функционировать и развиваться свой комплекс «порошковых» программ, реализующий возможности параллельных вычислений. А это, в свою очередь, позволит существенно расширить круг задач, решаемых с помощью порошковой дифракции.

По автореферату А.Н. Залого есть два замечания:

1. На Рис. 4 и 6 удивляет поведение разностной кривой, которая повторяет поведение экспериментально наблюдаемого фона. Каким образом моделировался фон в расчетах?
2. На с. 17, при обсуждении геометрических параметров структуры, например, длин связей в координационном полиэдре, необходимо приводить стандартные отклонения к обсуждаемым значениям (как это сделано на с. 19).

Сделанные замечания не влияют на общую положительную оценку работы, которая выполнена на высоком научном уровне и полностью соответствует требованиям ВАК РФ, а ее автор – Залого Александр Николаевич – заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.01 – «Приборы и методы экспериментальной физики».

Доктор физико-математических наук, зав. лабораторией физико-химического анализа, ведущий научный сотрудник Химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова

Чернышев Владимир Васильевич

119991 Москва, Ленинские Горы, 1-3

Email:

Тел: 84959393654

22 мая 2017 г.

