

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию

Залога Александра Николаевича “Автоматизация метода полнопрофильного анализа поликристаллов с использованием генетических алгоритмов”,
представленную на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук по специальности
01.04.01 – Приборы и методы экспериментальной физики.

Диссертация А.Н. Залога посвящена разработке методов определения кристаллической структуры вещества по рентгеновским дифрактограммам порошковых образцов. В работе предложен поиск структуры среди структур, моделируемых в прямом пространстве параллельным генетическим алгоритмом, с передачей перспективной информацией между популяциями, что приводит к увеличению эффективности структурного анализа. Предложенный алгоритм хорошо приспособлен для параллельных вычислений и реализован автором на многоядерных ПК и суперкомпьютерах.

Актуальность темы диссертации связана с тем, что с каждым годом растет количество веществ, физические и химические свойства которых представляют интерес для исследователей, при этом описание и понимание природы свойств невозможно без знания их кристаллической структуры. При сложности получения монокристаллических образцов первые структурные исследования ведутся на порошковых образцах. Однако, даже самые популярные на текущий момент методы определения структуры по рентгеновским дифрактограммам (Монте-Карло, имитация отжига, переворачивание заряда «Charge flipping», некоторые генетические алгоритмы) обладают существенным ухудшением работоспособности с усложнением химического состава вещества и ростом числа перебираемых в этом случае параметров (структур), что связано с наличием огромного количества локальных минимумов критерия поиска (R-фактора). Это делает проблематичным определение структуры указанными методами. Почти каждый год разные коллективы ученых предлагают какие-то новые способы

06.06.2017 г

356-03/6215-149

решения этой задачи, но в основном комбинируют уже известные методы, и успех достигается только для узкого ряда структур.

О степени обоснованности научных положений, сформулированных в диссертации, и научной новизне. Предложенный автором работы мультипопуляционный параллельный генетический алгоритм (МПГА) максимально использует ресурсы параллельных вычислений и особенности развития популяций параллельных взаимодействующих эволюционных процессов, что значительно увеличивают, как экспериментально установлено автором, вероятность сходимости вычислительного процесса к глобальному экстремуму критерия и, следовательно, определения «истиной» структуры вещества. Этому также способствует периодический запуск методов прямого поиска минимума критерия методом полнопрофильного анализа Ритвельда и нового метода «минимизации производной разности» на лучших по пригодности индивидах (структур). Передача информации о лучших индивидах популяций, улучшенных локальным поискам, через управляющее ядро другим популяциям приводит к общему синергетическому эффекту и увеличению вероятности сходимости процесса поиска к «истиной» структуре.

Значимость для науки и практики полученных автором результатов. Созданная автором программная система, реализующая эти алгоритмы, пока не является универсальной, и для каждого отдельного случая необходимо подбирать ряд параметров, управляющих эволюцией популяций - количеством исходных популяций, типом мутаций, видом скрещивания и др., что возможно только обладая опытом работы с подобными алгоритмами.

Но показанный автором реальный успех в определении структур неизвестных комплексных соединений вызывает оптимизм и можно без преувеличений сказать, что появился новый инструмент определения структур, по рентгеновским дефрактограммам, который, я уверен, будет в арсенале у многих структурщиков, занимающихся расшифровкой кристаллических структур реально сложных веществ, а новый комбинированный алгоритм определения структуры веществ по

рентгеновским дифрактограммам порошков найдет своё место в прикладных вычислительных пакетах программ.

О содержании диссертации. Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения и двух приложений. Её объем 149 машинописных страниц, включая 50 рисунков в основном тексте и 20 в приложениях. Список литературы содержит 144 наименования.

В первой главе приводится обзор используемых в настоящее время методов анализа рентгеновских дифрактограмм порошковых образцов, включающий все этапы определения кристаллической структуры от индицирования рефлексов и поиска пространственных групп до определения координат атомов. Представлены самые современные способы решения этих проблем, а также дан обзор наиболее популярных программ. Довольно подробно описаны генетические алгоритмы в целом как средство решения оптимизационных задач.

Во второй главе подробно описан процесс подготовки исходных данных из рентгенографического эксперимента для запуска МПГА, приведено описание генетических операторов, алгоритмов штрафования и оптимизации, а также правила взаимодействия популяций через управляющее ядро. Описаны характеристики и правила работы с созданной автором программной системой. Представлены результаты тестирования МПГА алгоритмов программной системы на 11 различных веществах химических соединений различной сложности с известными кристаллическими структурами. По результатам вычислений оценена надежность поиска (оценка вероятности нахождения правильной кристаллической структуры) и сравнены характеристики эффективности определения структур по МПГА на 4-х ядерном ПК, суперкомпьютерном кластере и с использованием однопопуляционного генетического алгоритма (ГА). Данные убедительно показывают, что «надежность» структурного анализа по МПГА на 4-х ядерном ПК повышается в 2 - 3 раза, а на 24-ядерном кластере – еще во столько же по сравнению однопопуляционном ГА. Увеличение числа вычислительных ядер позволяет определять более сложные структуры. В частности, структура $\text{Er}_{10}\text{W}_2\text{O}_{21}$, которая за 10

запусков ни разу не была найдена программами FOX и DASH при отсутствии знаний о структурных фрагментах, программой автора, использующей МПГА алгоритм, была успешно определена.

В третьей главе приводится решение задачи определения кристаллических структур по дифрактограммам порошков двух неизвестных ранее структур комплексных соединений $[Pt(NH_3)_5Cl]Br_{2.4}Cl_{0.6}$ и $[Pd(CH_3NH_2)_4][PdBr_4]$ методом МПГА. Найденные структуры не вызывают сомнений, контроль корректности структуры проведен при помощи on-line сервиса IUCr CheckCIF/PLATON.

В заключении приводятся основные выводы диссертации.

Первое приложение демонстрирует универсальность алгоритма при работе с разными дифрактометрическими данными, второе содержит описание разработанного визуализатора изменения перспективных структур при эволюции популяций.

Считаю, что представленная диссертация является *законченным* научно-исследовательским трудом, посвящённых методам обработки экспериментальных рентгенометрических данных, и выполнена на высоком научном уровне. Описанные результаты вносят заметный вклад в способы обработки экспериментальных данных рентгеновских измерений. Результаты работы могут быть использованы в организациях, занимающихся исследованием или определением кристаллических структур материалов, а это практически все исследовательские центры, занимающиеся изучением физических и химических свойств твердых материалов.

В качестве замечаний, не умаляющих научной и практической значимости работы, можно отметить следующее:

1. В программе реализована полезная функция динамической заселенности. Когда два однотипных атома сближаются друг с другом, то заполняемость атомной позиции каждого из них постепенно снижается. Было бы полезным реализовать подобную динамическую заполняемость для атомов разного типа.
2. Настройки вычислительной системы автора допускают задавать жёсткие фрагменты молекулярной структуры заданием координат атомов, что не

всегда удобно. Этот способ может быть удобным для задания простых полиэдров в случае неорганических соединений, но для органических молекул гораздо проще использовать Z-матрицы (Fenske-Hall Z-matrix) в которых каждый последующий атом задается при помощи расстояния до предыдущего атома, и набора углов (валентного и торсионного).

3. Используемый в локальной оптимизации квадратичный критерий (R -фактор) излишне чувствителен к выбросам (шум, форма полосы рефлекса). Стоило бы использовать другие, более устойчивые критерии, что, возможно, улучшило бы сходимость процесса поиска точки локального экстремума.

4. На стр. 62 и 63 предложенный алгоритм позиционируется как 2-х уровневый генетический алгоритм. При этом второй уровень описывается как прямой оптимизационный (по Ритвельду или по МПР), т.е. он не является генетическим.

5. Недостатки оформления:

5.1. Не соблюдается однотипность оформления формул по тексту: индексы и некоторые идентификаторы функций и переменных пишутся то курсивом (j), то прямым шрифтом (j). Например,

- стр. 17 в формуле (3) обозначение Q_{mn} , а в формуле (4) Q_{mn} ;
- на стр.66 обозначения V_i , B_i^{up} , B_i^{law} , а на стр.67 они уже пишутся как V_i , B_i^{up} , B_i^{law} ;
- в формулах на стр.59 обозначения $Y^{\text{mod}}(\bar{P}, \theta_j)$ и $Y^{\text{эксп.}}(\theta_j)$ в формуле (14) строкой ниже уже имеют вид $Y^{\text{mod}}(\bar{P}, \Theta_j)$ и $Y^{\text{эксп.}}(\Theta_j)$;
- в формуле (5) вектор обозначен как \bar{r} , а в тексте как r , и т.п.

Хотя это не мешает прочтению материала.

5.2. Стр. 46, строка 12 и 21. “тетраэдральной или октаэдральной” должно быть “тетраэдрической или октаэдрической”.

5.3. На рис. 24 и 31 в разделе легенды приведены пункты, отсутствующие на рисунках.

Результаты диссертационной работы исчерпывающе опубликованы в российских и зарубежных рецензируемых журналах и представлены на конференциях.

Автореферат полностью соответствует содержанию диссертации. По содержанию диссертация соответствует специальности 01.04.01 - «приборы и методы экспериментальной физики».

Таким образом, диссертация Залога Александра Николаевича является научно-квалификационной работой, в которой содержится решение задачи определения кристаллической структуры вещества по порошковым дифрактограммам с использованием нового эффективного алгоритма, имеющей значение для развития методов обработки и интерпретации экспериментальных данных, что соответствует требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. № 842, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а ее автор заслуживает присуждения искомой ученой степени по специальности 01.04.01 – Приборы и методы экспериментальной физики.

Официальный оппонент,

Доктор физ.-мат. наук (01.04.07), профессор,

профессор кафедры

системного анализа и исследования операций

Сибирского государственного университета науки и технологий
имени академика М.Ф. Решетнёва.

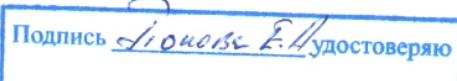
г. Красноярск, пр. им. газ. Красноярский рабочий 31,

тел. 8-902-916-94-10, E-mail: epopov1951@mail.ru

(подпись)

/ Попов Е.А. /

(расшифровка подписи)



Согласен на об

30 мая 2017 г.

иональных данных.

Список основных публикаций Попова Е.А.. по теме диссертации за последние 5 лет

1. Проектирование ансамблей классификаторов самоконфигурируемыми эволюционными алгоритмами. Семенкин Е.С., Семенкина М.Е., Попов Е.А./ Системы управления и информационные технологии. 2016. Т. 66. № 4. С. 38-43.
2. Наноструктуры ферромагнитный металл/полупроводник на основе силицидов железа. Овчинников С.Г., Варнаков С.Н., Лященко С.А., Тараков И.А., Яковлев И.А., Попов Е.А., Жарков С.М., Великанов Д.А., Тараков А.С., Жандун В.С., Замкова Н.Г./ ФТТ. 2016. № 11. С. 2195-2200.
3. Многоагентный алгоритм проектирования баз нечетких правил для задач классификации. Становов В.В., Бежитский С.С., Бежитская Е.А., Попов Е.А./ Вестник Сибирского государственного аэрокосмического университета им. академика М.Ф. Решетнева. 2015. Т. 16. № 4. С. 842-848.
4. Оптимизация структуры сверточной нейронной сети с помощью самоконфигурируемого эволюционного алгоритма в одной задаче идентификации. Федотов Д.В., Попов Е.А., Охорзин В.А./ Вестник Сибирского государственного аэрокосмического университета им. академика М.Ф. Решетнева. 2015. Т. 16. № 4. С. 857-863.
5. Исследование оптических и магнитооптических спектров магнитных силицидов $Fe_5 Si_3$ и $Fe_3 Si$ методом спектральной магнитоэллипсометрии. Лященко С.А., Попов З.И., Варнаков С.Н., Попов Е.А., Молокеев М.С., Яковлев И.А., Кузубов А.А., Овчинников С.Г., Шамирзаев Т.С., Латышев А.В., Саранин А.А./ Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2015. Т. 147. № 5. С. 1023-1031.

6. Решение задач компьютерной безопасности при помощи автоматически генерируемых ансамблей нейронных сетей. Семенкина М.Е., Попов Е.А./ Вестник Сибирского государственного аэрокосмического университета им. академика М.Ф. Решетнева. 2014. № 5 (57). С. 115-121.
7. Гибридный эволюционный алгоритм автоматизированного формирования деревьев принятия решения. Липинский Л.В., Кушнарева Т.В., Дябкин Е.В., Попов Е.А./ Вестник Сибирского государственного аэрокосмического университета им. академика М.Ф. Решетнева. 2014. № 5 (57). С. 85-92
8. Эволюционные алгоритмы моделирования и оптимизации. Множественная рекомбинация с селективным давлением. Попов Е.А., Семенкина М.Е./ Saarbruecken: LAP LAMBERT Academic Publishing. - 2013. - 62 с.
9. Бионические алгоритмы комбинаторной оптимизации. Попов Е.А., Семенкина О.Е./ Исследование эффективности муравьиного и генетического алгоритмов при решении задачи коммивояжера / Saarbruecken: LAP LAMBERT Academic Publishing. - 2013. – 68 с.
10. Self-configuring genetic programming algorithm for medical diagnostic problems. Popov E.A., Semenkina M.E./ Вестник Сибирского государственного аэрокосмического университета им. академика М.Ф. Решетнева. 2013. № 4 (50). С. 116-123.
11. Self-configuring evolutionary algorithms for travelling salesman problem. Semenkina O.E., Popov E.A., Semenkina O.E./ Вестник Сибирского государственного аэрокосмического университета им. академика М.Ф. Решетнева. 2013. № 4 (50). С. 134-139.
12. Эволюционный алгоритм для автоматической генерации нейросетевых систем подавления шума. Попов Е.А., Семенкина М.Е., Липинский Л.В./ Вестник Сибирского государственного аэрокосмического университета им. академика М.Ф. Решетнева. 2013. № 4. С. 79.

13. Исследование эффективности самоконфигурируемого генетического алгоритма выбора эффективного варианта системы управления космическими аппаратами. Семенкин Е.С., Семёんкина М.Е., Попов Е.А./ Программные продукты и системы. 2013. № 4. С. 208-213.
14. Об эффективности бионических алгоритмов при решении задачи коммивояжера. Семенкина О.Е., Попов Е.А./ Актуальные проблемы авиации и космонавтики. 2013. Т. 1. № 9. С. 339-340.
18. Evolutionary algorithm for automatic generation of neural network based noise suppression systems. Popov E.A., Semenkina M.E., Lipinskiy L.V./ Вестник Сибирского государственного аэрокосмического университета им. академика М.Ф. Решетнева. 2012. № 4 (44). С. 79-82.
15. Принятие решений коллективом интеллектуальных информационных технологий. Попов Е.А., Семенкина М.Е., Липинский Л.В./ Вестник Сибирского государственного аэрокосмического университета им. академика М.Ф. Решетнева. 2012. № 5 (45). С. 95-99.