

ОТЗЫВ

НА АВТОРЕФЕРАТ ДИССЕРТАЦИИ ЗАЛОГИ А.Н.

«АВТОМАТИЗАЦИЯ МЕТОДА ПОЛНОПРОФИЛЬНОГО АНАЛИЗА
ПОЛИКРИСТАЛЛОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ГЕНЕТИЧЕСКИХ АЛГОРИТМОВ»

представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.01 – приборы и методы экспериментальной физики.

Диссертационная работа Залоги А.Н. посвящена разработке новых алгоритмических подходов к решению кристаллических структур по дифракционным данным, полученным с поликристаллических образцов. Актуальность проведенного докторантом исследования не вызывает сомнений, поскольку создание новых подходов, позволяющих эффективно использовать большие вычислительные мощности для решения структур, даст возможность совершить качественный скачок в части определения кристаллических структур новых соединений, для многих из которых подготовка пригодных для структурного анализа монокристаллов затруднена.

Даже в объеме автореферата автором отражена сложность и многоплановость проведенной работы. Следует отдельно отметить тот факт, что все ключевые задачи работы (разработка алгоритмических подходов, реализация алгоритмов в программном коде, тестирование, апробация алгоритмов) выполнялись автором самостоятельно. Представленные в автореферате иллюстративные данные убедительно доказывают преимущество МПГА перед прочими реализациями генетических алгоритмов. Особенно важной представляется особенность алгоритма, связанная с минимизацией рисков становления алгоритма в локальных минимумах за счет обмена моделями через управляющее ядро.

Большое количество публикаций, посвященных полученным в рамках работы результатам, и апробация работы на многочисленных конференциях подчеркивает ее высокий уровень и является дополнительным свидетельством высокой актуальности выбранной темы. Передача программы автором в свободное пользование заслуживает отдельного упоминания.

При изучении автореферата возникли следующие вопросы и комментарии:

- 1) Выбранное наименование темы диссертации не вполне отражает особенности работы, т.к. МПГА применяется автором именно для решения кристаллических структур, а не к полнопрофильным методам (к которым относится и метод ЛеБеля) вообще.

- 2) В качестве функции невязки автор в тексте автorefерата указывает профильный R -фактор, что некорректно – в полнопрофильных методах в качестве функции невязки используется взвешенный профильный R -фактор (или функционально связанные с ним величины). Вместе с тем, в таблицах использованы именно величины R_{wp} , что позволяет предположить случайный характер появления некорректного термина.
 - 3) Из текста автorefерата остается неясным, используется ли при предварительной обработке дифрактограмм многофазных образцов классический метод Лебеля или же комбинированный метод (с учетом значений $|F|^2$ для известных фаз, ср. с Jana2006)?
 - 4) Крайне информативным было бы сравнение эффективности метода МПГА с методами обратного пространства, в первую очередь с методом charge-flipping.

Приведенные вопросы и замечания ни в коей мере не влияют на общую высокую оценку работы, которая полностью соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а А.Н.Залога заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.01 – приборы и методы экспериментальной физики.

26 марта 2017 г.

К.х.н., преподаватель Московского Физико-Технического Института
141700, Московская обл., г.Долгопрудный, Институтский пер., 9
Тел. +7(495)408-57-00

 Чижов П.С.

Подпись Чижова П.С. удостоверяю

ПОДПИСЬ РУКИ П. О. Чиркова
ЗАВЕРЯЮ:

