

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы 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.

Информация об атомно-молекулярной структуре материалов – пространственном расположении атомов – является необходимой предпосылкой для понимания фундаментальных связей структуры и свойств различных веществ, и, как следствие, для прогнозирования свойств новых функциональных материалов. В большинстве случаев функциональные материалы существуют в поликристаллическом виде, и для установления их структуры разработаны методы порошковой рентгеновской дифракции. Широко распространен метод полнопрофильного анализа кристаллической структуры по данным порошковой дифракции, заключающийся в сравнении экспериментальной рентгенограммы с расчетной, полученной с использованием заданной структурной модели. Однако поиск стартовой модели для уточнения структуры по полному профилю остается серьезной проблемой. Развитию одного из методов определения структуры поликристаллических материалов посвящена диссертационная работа А.Н.Залоги.

В основу работы положен метод мультипопуляционного параллельного генетического алгоритма (МПГА) как метода глобальной оптимизации. Автором создано программное обеспечение для реализации метода МПГА, включающее распределенные вычисления на многоядерном персональном компьютере и суперкомпьютерном кластере. На промежуточных и конечном этапах производится уточнение найденных структурных моделей по полному профилю с использованием двух программ, имеющихся в свободном доступе. Проведено тестирование программного обеспечения путем определения 11 известных структур по порошковым данным, сравнение разработанного ПО с другими современными программами, показаны преимущества многоядерных вычислений в надежности определения сложных структур. С помощью созданного ПО определены неизвестные структуры двух новых соединений – комплексов платины и палладия. Автором опубликованы 13 статей в рецензируемых журналах, результаты работы доложены на национальных и международных научных конференциях.

В качестве замечания к работе следует отметить, что мультипопуляционный параллельный генетический алгоритм был разработан уже достаточно давно, и правильнее было бы говорить не о разработке МПГА, а о развитии метода и его адаптации для многоядерных ПК и суперкомпьютерных кластеров в сочетании с программным обеспечением для полнопрофильного рентгеноструктурного анализа поликристаллов.

Незначительное замечание носит скорее рекомендательный характер и не меняет общего благоприятного впечатления от работы. Диссертация является завершенным исследованием, выполнена на очень высоком уровне с использованием современных

вычислительных средств. Достоверность полученных результатов и сделанных выводов не вызывает сомнений. Судя по автореферату, диссертация удовлетворяет требованиям п.9 «Положения о присуждении ученых степеней», предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Залога Александр Николаевич, без сомнения заслуживает присуждения искомой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.01 – приборы и методы экспериментальной физики.

Доцент кафедры общей физики  
физического факультета Новосибирского  
государственного университета, д.ф.-м.н.



А.Н.Шмаков

Шмаков Александр Николаевич  
Новосибирский национальный исследовательский государственный университет  
ул. Пирогова, 2,  
630090, Новосибирск  
Тел. (383) 363-44-38, E-mail: shurka@catalysis.ru

