

Ж-122

11-2016-46

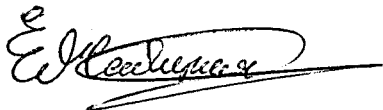
На правах рукописи

ЖАБИЦКАЯ  
Евгения Игоревна

МЕТОД АСИНХРОННОЙ  
ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ ЭВОЛЮЦИИ  
ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО ИССЛЕДОВАНИЯ  
МНОГОПАРАМЕТРИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ  
ФИЗИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Специальность: 05.13.18 — математическое моделирование,  
численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ  
диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук



с 17 и 1

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий  
Объединенного института ядерных исследований

**Научные руководители:** Земляная Елена Валериевна,  
доктор физико-математических наук,  
Лаборатория информационных технологий ОИЯИ,  
ведущий научный сотрудник

Киселев Михаил Алексеевич,  
доктор физико-математических наук,  
Лаборатория нейтронной физики ОИЯИ,  
ведущий научный сотрудник

**Официальные оппоненты:** Щетинин Евгений Юрьевич,  
доктор физико-математических наук,  
профессор, Московский государственный технологиче-  
ский университет «СТАНКИН»,  
профессор кафедры прикладной математики

Гончаров Сергей Антонович,  
доктор физико-математических наук,  
доцент, Научно-исследовательский институт ядерной  
физики имени Д.В. Скобельцына Московского государ-  
ственного университета,  
ведущий научный сотрудник

**Ведущая организация:** НИЦ «Курчатовский институт» ФГБУ  
Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова

Защита состоится «30» сентяб. 2016 г. в 14 часов на заседании  
диссертационного совета Д 720.001.04 в Лаборатории информационных  
технологий Объединенного института ядерных исследований, г. Дубна  
Московской области

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте  
Объединенного института ядерных исследований  
[http://wwwinfo.jinr.ru/announce\\_disser.htm](http://wwwinfo.jinr.ru/announce_disser.htm).

Автореферат разослан «8» авг. 2016 г.

Ученый секретарь диссертационного совета  
доктор физико-математических наук,  
профессор

*Иванченко*

Иванченко Иосиф Моисеевич

## Общая характеристика работы

В диссертации разработаны эффективные модификации метода дифференциальной эволюции<sup>1</sup> (ДЭ) — одного из часто применяемых алгоритмов глобальной минимизации функции действительных переменных. Это метод асинхронной дифференциальной эволюции (АДЭ) [7, 8], метод АДЭ с рестартом и адаптивной корреляционной матрицей (АДЭ-АКМ) [9, 10]. С их помощью проведено численное исследование многопараметрических моделей двух физических систем [1–6, 11–21]. Первая — это модель пион-ядерного рассеяния на основе микроскопического оптического потенциала и релятивистского волнового уравнения. Вторая система — это обобщенная модель разделенных формфакторов, адаптированная для анализа структуры<sup>2</sup> везикулярных систем по данным малоуглового синхротронного рентгеновского рассеяния. Предложенные новые методы минимизации позволили успешно провести исследование задач, рассмотренных в диссертации, они могут также использоваться в других научных исследованиях.

### 1. Актуальность

Актуальность темы диссертации обусловлена как необходимостью повышения эффективности методов глобальной минимизации, так и важностью рассмотренных в работе многопараметрических моделей физических систем. Рассмотренные модели требуют надежного и быстрого определения наборов параметров, обеспечивающих согласие численных результатов с экспериментальными данными.

Актуальность микроскопической модели пион-ядерного рассеяния обусловлена необходимостью построения реалистичного, теоретически обоснованного пион-ядерного потенциала, используемого для моделирования как упругого рассеяния пионов, так и более сложных пион-ядерных взаимодействий.

Большинство известных работ по расчетам пион-ядерных дифференциальных сечений основано на применении тех или иных феноменологических форм потенциала либо на использовании микроскопического потенциала Кислингера<sup>3</sup>, где учитывается вклад в пион-ядерное рассеяние  $s$ -,  $p$ - и  $d$ -волн  $\pi N$ -амплитуды. Все они имеют 6 и более свободных параметров.

<sup>1</sup> Price, K. V., Storn, R. V. // J. of Global Optimization, 1997, v. 11, pp. 341–359; Storn, R., Price, K. // Technical Report TR-95-012, ICSI, March 1995; Das, S., Suganthan, P. N. // IEEE Trans. Evol. Comput., 2011, v. 15, pp. 4–31.

<sup>2</sup>В данной работе под везикулами понимаются близкие к сферическим наносферы с оболочкой, представляющей собой липидную мембрану.

<sup>3</sup>Kisslinger, L. S. // Phys. Rev., 1955, v. 98(3), pp. 761–765; Krell, M., Ericson, T. E. O. // Nucl. Phys., 1969, v. 11(3), pp. 521–550.



В диссертации используется гибридный подход<sup>4</sup>, сочетающий трехпараметрическую модель микроскопического оптического потенциала (МОП) на базе высокоэнергетического приближения и расчет наблюдаемых характеристик на основе численного решения релятивистского волнового уравнения [2, 4, 14]. Как показывают расчёты, качество описания экспериментальных данных в рамках трехпараметрической модели сопоставимо с результатами более сложных моделей с большим числом параметров [4]. При этом параметры микроскопической модели имеют простой смысл и характеризуют динамику изменения амплитуды рассеяния пионов на внутриядерных нуклонах в зависимости от энергии пионов [4]. Это позволяет исследовать эффект влияния ядерной среды на процесс рассеяния.

**Актуальность моделирования структуры везикулярных систем** на основе фосфолипидов обусловлена практическими приложениями в области фармакологии и косметологии, где везикулы (наносферы) используются в качестве переносчиков лекарств и других активных компонент. Кроме того, исследование бислоя оболочки везикул играет важную роль в структурной биологии и биофизике, поскольку позволяет получить новую информацию о структуре и свойствах биологических мембран.

Для анализа структуры полидисперсных везикулярных систем развит и успешно используется метод разделенных формфакторов (РФФ). Ранее этот метод применялся для анализа данных малоуглового рассеяния нейтронов<sup>5</sup>. В диссертации метод разделенных формфакторов адаптирован для моделирования структуры полидисперсной популяции однослойных везикул по данным малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) [3, 5, 11, 19, 20]. Предложенная в работе модификация РФФ-подхода для обработки МУРР-спектров учитывает флуктуации параметров модели бислоя оболочки везикул и использует более сложный, по сравнению с нейтронным рассеянием, профиль распределения плотности длины рассеяния поперек мембраны. Это позволило достичь лучшего соответствия теоретической модели экспериментальным данным.

**Актуальность повышения эффективности методов глобальной минимизации** обусловлена тем, что оптимизационные задачи естественно возникают в различных областях науки, когда необходимо определить вектор параметров  $\vec{\theta}^*$ , минимизирующий<sup>6</sup> целевую функцию  $f(\vec{\theta})$ :

$$f(\vec{\theta}^*) \leq f(\vec{\theta}) \in \mathbb{R}, \quad \forall \vec{\theta} \in \Omega \subset \mathbb{R}^D, \quad \vec{\theta} = \{\theta_j\}_{j=0, \dots, D-1}, \quad (1)$$

$$\text{или } \vec{\theta}^* = \underset{\vec{\theta} \in \Omega \subset \mathbb{R}^D}{\text{Argmin}} f(\vec{\theta}). \quad (2)$$

Здесь  $\mathbb{R}$  — множество всех вещественных чисел;  $\mathbb{R}^D$  — вещественное векторное пространство размерности  $D$ ;  $\Omega$  — вещественное пространство поиска решения размерности  $D$ .

Нахождение глобального минимума<sup>7</sup> многомерной многоэкстремальной и/или негладкой целевой функции требует большого объема вычислений. Это делает актуальным развитие методов, обеспечивающих эффективную параллельную реализацию.

Дифференциальная эволюция (ДЭ) — алгоритм прямого поиска решения задачи (1) — относится к классу эволюционных алгоритмов<sup>8</sup> и подходит для минимизации недифференцируемых, нелинейных, мульти-модальных функций от многих переменных. Инженеры и исследователи успешно применяют ДЭ для решения оптимизационных задач в различных областях науки<sup>9</sup>. В эволюционных алгоритмах итерационный процесс оперирует набором агентов, или векторов в пространстве поиска  $\Omega$ , который принято называть популяцией. Каждому агенту соответствует значение его пригодности в окружающей среде, равное соответствующему значению целевой функции  $f$ . Новые агенты порождаются посредством мутации и рекомбинации (кроссовера). В результате отбора менее пригодные агенты отбрасываются. Таким образом, популяция эволюционирует в соответствии с правилами отбора и целевой функцией, задаваемой окружающей средой.

Большинство эволюционных алгоритмов могут быть разделены на две большие группы: *популяционные* (generational) алгоритмы, которые обновляют всю популяцию на каждой итерации, и *квазистационарные* (steady-state) алгоритмы<sup>10</sup>, которые одновременно обновляют только часть агентов. Традиционно метод ДЭ реализуют в виде популяционного алгоритма. В данной работе впервые операции мутации, рекомбинации (кроссовера) и отбора, характерные для классической ДЭ, задействованы в предельной форме квазистационарного алгоритма. Таким образом, сформули-

<sup>7</sup>Нестеров, Ю. Е. Введение в выпуклую оптимизацию // МЦНМО, 2010, 280 с.

<sup>8</sup>Holland, J. H. // University of Michigan Press, Ann Arbor, 1975; Kennedy, J. and Eberhart, R. C. // Proc. of IEEE Intern. Conference on Neural Networks IV, 1995, pp. 1942–1948; Colnari, A., Dorigo, M. et Maniezzo, V. // Paris, France, Elsevier Publishing, 1991, pp. 134–142.

<sup>9</sup>Последние достижения по развитию и усовершенствованию этого метода представлены в книге Price, K. V., Storn, R. M., Lampinen, J. A. Differential Evolution: A Practical Approach to Global Optimization // Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2005.

<sup>10</sup>В подклассе эволюционных алгоритмов — генетических алгоритмах — альтернативой традиционному поколенческому подходу является использование квазистационарного (steady-state) подхода, в котором популяция обновляется частями, а не вся сразу. Этот подход был развит в работе Whitley, and Kauth, J. // GENITOR: Technical Report CS-88-101, Colorado State University, 1988.

<sup>4</sup>Лукиянов, В.К., Земляная, Е.В., Лукьянов, К.В., Ханна, К.М. // Ядерная физика, 2010, т. 73, с. 1489–1496.

<sup>5</sup>Kiselev, M. A., Zemlyanaya, E. V., Aswal, V. K., Neubert, R. H. H. // European Biophysics Journal, 2006, v. 35, No. 6, pp. 477–493; Zemlyanaya, E. V., Kiselev, M. A., Zbytovska, J., Almasy, L., Aswal, V. K., Strunz, P., Warteveg, S., Neubert, R. H. H. // Crystallography reports, 2006, v. 51, Suppl. 1, pp. S22–S26.

<sup>6</sup>Если искомым оптимум в задаче соответствует нахождению максимума целевой функции  $g(\theta)$ , то оптимизационная задача сводится к минимизации целевой функции  $f(\theta) = -g(\theta)$ .

рованы методы асинхронной дифференциальной эволюции [8], АДЭ с рестартом и адаптивным кроссовером [9, 10].

Предложенные алгоритмы обладают рядом преимуществ по сравнению с другими известными подходами. Они (i) не требуют вычисления производных; (ii) позволяют получить сравнимые со стандартной ДЭ скорость и вероятность сходимости<sup>11</sup> к глобальному минимуму [7, 8] и в ряде случаев улучшить эти показатели [9, 10]; (iii) позволяют легко и эффективно распараллелить вычисления за счет равномерной и полной загрузки доступных вычислительных узлов при расчетах в параллельном режиме [8, 17].

Новые методы актуальны для задач, решенных в диссертации, так же как и для многих других физических задач, исследование которых требует глобальной минимизации. В самом деле, параметры микроскопического оптического потенциала для модели пион-ядерного рассеяния и параметры модели разделенных формфакторов, описывающей дифференциальные сечения малоуглового рентгеновского рассеяния, оцениваются путем минимизации взвешенной квадратичной невязки между предсказаниями теоретической модели и экспериментальными данными. Зависимость этой невязки от вектора искомых параметров задает целевую функцию. Рассчитываемые целевые функции обладают сложным профилем и имеют несколько локальных минимумов. Это приводит к тому, что при использовании методов локального поиска<sup>12</sup> вероятность определения глобального минимума в области допустимых значений параметров систем низкая, в то время как вероятность нахождения оптимального решения методами ДЭ значительно выше [6, 20]. С другой стороны, определение параметров, отвечающих за структуру полидисперсной популяции везикул ДМФХ, по данным малоуглового синхротронного рассеяния в модели разделенных формфакторов требует глобальной минимизации многоэкстремальной функции с 9 частично-коррелированными переменными. Эта задача требует существенных объемов вычислений, и особое значение приобретает развитие алгоритмов, обеспечивающих их эффективную параллельную реализацию на многопроцессорных системах. Реализованный на базе АДЭ-минимизации комплекс программ позволяет эффективно распараллелить вычисления, более чем в 50 раз уменьшив время расчетов.

<sup>11</sup> Под оценкой средней скорости сходимости понимается величина, обратная среднему времени, необходимому для достижения минимума с заданной точностью. Так как расчет целевой функции требует значительно больших затрат компьютерного времени; чем операции самого алгоритма, оценка средней скорости сходимости может быть аппроксимирована величиной, обратной среднему количеству вычислений целевой функции, необходимому для достижения минимума с заданной точностью. Под оценкой вероятности сходимости понимается отношение числа успешных сошедшихся к глобальному минимуму попыток к общему числу попыток минимизации функции при помощи данного алгоритма.

<sup>12</sup> Например, метода симплексов: Nelder, J. A., Mead, R. // *Comput. J.*, 1965, v. 7, pp. 308–313 — или квази-Ньютоновского метода с формулой Давидона-Флетчера-Пауэлла: Davidon, W. C. // *A. E. C. Res. and Develop. Report ANL-5990*. Argonne National Laboratory. Argonne; Illinois, 1959, p. 21.

Таким образом, разработка и программная реализация методов АДЭ актуальны и востребованы как для рассматриваемых в диссертации задач, так и для многих других научных и прикладных исследований.

## 2. Цели и задачи диссертационной работы

Цели диссертации — это разработка, обоснование, компьютерная реализация и тестирование эффективных вычислительных методов глобальной минимизации, создание на этой основе комплексов проблемно-ориентированных программ и численное исследование микроскопической модели пион-ядерного рассеяния и модели разделенных формфакторов, описывающей структуру везикулярной системы.

Задачи диссертации:

Разработать и исследовать новые эффективные алгоритмы глобальной минимизации.

- Разработать на базе метода ДЭ метод асинхронной дифференциальной эволюции (АДЭ), метод асинхронной дифференциальной эволюции с рестартом и кроссовером, определяемым адаптивной корреляционной матрицей (АДЭ-АКМ).
- Аналитическими методами получить ограничения на управляющие параметры алгоритмов ДЭ и АДЭ, необходимые для предупреждения преждевременной сходимости<sup>13</sup> алгоритма.
- Путем методических расчетов для ряда тестовых функций оценить скорость и вероятности сходимости предложенных методов АДЭ; сравнить с классическим вариантом ДЭ и другими методами минимизации.

Провести численное исследование микроскопической модели пион-ядерного упругого рассеяния.

- Разработать комплекс программ, реализующий АДЭ-подгонку параметров микроскопической модели пион-ядерного упругого рассеяния по экспериментальным данным.
- Определить параметры микроскопического оптического потенциала по экспериментальным дифференциальным сечениям упругого рассеяния пионов на ядрах  $^{28}\text{Si}$ ,  $^{40}\text{Ca}$ ,  $^{54}\text{Ni}$  и  $^{208}\text{Pb}$  в диапазоне кинетической энергии налетающих пионов от 130 до 291 МэВ.
- Провести анализ влияния ядерной среды на характеристики пион-нуклонной амплитуды.

Провести численное исследование структуры везикулярных систем.

<sup>13</sup> Преждевременная сходимость — это потеря разнообразия в популяции, которой оперирует эволюционный алгоритм. Эта потеря разнообразия приводит к искусственному ограничению на пространство поиска возможных решений, доступных алгоритму в процессе эволюции.

- Разработать модификацию модели разделенных формфакторов для учета флуктуаций параметров липидного бислоя в везикулярных системах.
- Разработать комплекс программ, реализующий АДЭ-подгонку параметров модели везикулярной системы по данным малоуглового рентгеновского рассеяния в режиме параллельных вычислений.
- Провести численное исследование модели, описывающей структуру полидисперсной популяции везикул ДМФХ<sup>14</sup> в 40% растворе сахарозы.

Оценить эффективность применения разработанных методов минимизации.

- Сравнить на примере задачи о пион-ядерном рассеянии и задачи об исследовании параметров везикулярной системы эффективность новых алгоритмов (вероятность нахождения оптимального решения) по сравнению с другими методами минимизации, используемыми для решения аналогичных задач.
- Оценить ускорение вычислений, достигаемое при решении перечисленных выше задач, при расчетах с использованием различного количества параллельных вычислительных узлов.

### 3. Научная новизна

В работе впервые операции мутации, кроссовера и отбора, характерные для классической ДЭ, задействованы в предельной форме квазистационарного алгоритма. Таким образом, сформулирован метод асинхронной дифференциальной эволюции [8], в котором на каждом шаге обновляется только один из членов популяции.

Впервые на основе проведенного аналитического исследования получены ограничения на управляющие параметры для ряда стратегий АДЭ и ДЭ [7], которые являются необходимым условием предупреждения преждевременной сходимости алгоритмов.

Предложена новая адаптивная схема для операции кроссовера [10], в рамках которой эта операция модифицирована и зависит от парных корреляций между параметрами задачи. Алгоритм асинхронной дифференциальной эволюции с кроссовером, задаваемым адаптивной корреляционной матрицей (АДЭ-АКМ), встроенной адаптивной схемой выбора масштабирующего фактора [10] и процедурой рестарта с автоматическим увеличением размера популяции [9] не требует настройки параметров пользователем и превосходит другие известные в литературе адаптивные варианты ДЭ по скорости и вероятности сходимости.

<sup>14</sup>ДМФХ — димиристоилфосфатидилхолин.

Впервые на основе тестовых расчетов получены оценки для скорости и вероятности сходимости методов АДЭ [7], АДЭ с рестартом [9] и АДЭ-АКМ [10] для тестовых функций из наборов тестовых задач СЕС-2005<sup>15</sup> [6] и ВВОВ-2012<sup>16</sup> [10] при различных значениях управляющих параметров алгоритмов.

Впервые метод АДЭ применен для численного исследования микроскопической модели пион-ядерного рассеяния [2, 12, 13, 18]. Впервые трехпараметрическая модель на основе микроскопического оптического потенциала и релятивистского волнового уравнения Шредингера использована для расчета дифференциальных сечений упругого рассеяния пионов на ядрах <sup>28</sup>Si, <sup>40</sup>Ca, <sup>58</sup>Ni, <sup>208</sup>Pb в диапазоне кинетической энергии налетающих пионов от 130 до 291 МэВ [4, 14]. На этой основе получены и проанализированы характеристики пион-нуклонной амплитуды в ядерной среде, выполнено их сравнение с соответствующими параметрами рассеяния пионов на свободных нуклонах [4].

Впервые метод АДЭ применен для анализа структуры везикулярных систем [11]. Учтены флуктуации параметров модели бислоя, позволившие применить метод разделенных формфакторов для анализа данных МУРР [3, 5, 6, 19, 20]. Впервые на этой основе получены параметры, характеризующие структуру полидисперсной популяции однослойных везикул ДМФХ в 40% растворе сахарозы [5, 19].

### 4. Теоретическая значимость и практическая ценность работы

Показано, что методы АДЭ и АДЭ-АКМ могут быть эффективно использованы для нахождения глобального минимума функции действительных переменных [1–3, 6–10].

Показано, что теоретический подход на основе трехпараметрической микроскопической модели обеспечил согласующиеся с экспериментальными данными дифференциальные сечения упругого пион-ядерного рассеяния и позволил проанализировать характеристики пион-нуклонной амплитуды в ядерной среде [4, 14].

Показано, что модифицированная модель разделенных формфакторов с учетом флуктуаций бислоя применима для исследования структуры полидисперсных везикулярных систем на основе данных МУРР [5, 20].

Созданы проблемно-ориентированные комплексы программ (для оценки параметров модели пион-ядерного рассеяния и параметров везикулярных систем), которые в настоящее время используются для дальнейших численных исследований [2, 3, 6, 14].

<sup>15</sup>Suganthan, P.N. et al. // Tech. Rep., Nanyang Technological University, Singapore, 2005.

<sup>16</sup>Hansen, N., Finck, S., Ros, R. and Auger, A. // In: Technical Report, INRIA, 2012.

На основе проведенного исследования получены численные результаты, которые являются физически значимыми в области моделирования пион-ядерного рассеяния [4, 14] и для исследования везикулярных систем [5, 20]. В частности, значения параметров, полученные в [4], используются для моделирования неупругого пион-ядерного рассеяния<sup>17</sup>. Параметры, определяющие структуру ДМФХ, позволили на основе сравнительного анализа сделать заключение о везикулярной структуре фосфолипидной транспортной наносистемы<sup>18</sup>.

Разработанные методы глобальной минимизации АДЭ и АДЭ-АКМ могут быть использованы в различных областях науки, а также для прикладных исследований.

## 5. Положения, выносимые на защиту

Разработана модификация алгоритма ДЭ — метод асинхронной дифференциальной эволюции (АДЭ) [8].

- Асинхронизация позволила повысить эффективность параллельной реализации и тем самым ускорить поиск глобального минимума пропорционально количеству задействованных узлов при расчетах на параллельных системах, использующих несколько десятков вычислительных узлов [1, 6, 8, 15, 17].
- Получены аналитические ограничения на управляющие параметры алгоритма для набора стратегий АДЭ и ДЭ [7].
- Разработан метод АДЭ с новым типом адаптивного кроссовера учитывающим парные корреляции между аргументами целевой функции [10]. Предложенный новый алгоритм способен идентифицировать коррелированные группы переменных и благодаря этому эффективно решать минимизационные задачи с разделяемыми, неразделяемыми и частично-разделяемыми переменными.
- АДЭ с адаптивным кроссовером, адаптивной схемой выбора масштабирующего фактора [10] и автоматическим увеличением размера популяции посредством рестарта [9] не требует подгонки параметров алгоритма пользователем [10].
- АДЭ с кроссовером, задаваемым адаптивной корреляционной матрицей превосходит другие адаптивные варианты ДЭ по скорости и вероятности сходимости на наборах тестовых задач CEC-2005 и WBOB-2012 [10].

<sup>17</sup>Lukyanov, V. K., Zemlyanaya, E. V., Lukyanov, K. V., Abdul-Magead, I. A. M. // Proc. of XXII Baldin ISHEPP (JINR, Dubna, Russia), PoS SISSA, 2015, p. 124(1-10).

<sup>18</sup>Kiselev, M. A., ... *Zhabitskaya, E. I.* et al. Application of Small-Angle X-ray Scattering to the Characterization and Quantification of the Drug Transport Nanosystem Based on the Soybean Phosphatidylcholine // Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis, 2015, v. 114, pp. 288–291.

С использованием АДЭ разработан проблемно-ориентированный комплекс программ, проведен численный анализ данных по дифференциальным сечениям упругого рассеяния заряженных пионов на ядрах  $^{28}\text{Si}$ ,  $^{40}\text{Ca}$ ,  $^{58}\text{Ni}$ ,  $^{208}\text{Pb}$  при различных кинетических энергиях пионов  $T = 130 \div 290$  МэВ в области энергии возбуждения пион-нуклонного  $\Delta(1232)P_{33}$ -резонанса [2, 14, 18].

- Определены параметры пион-нуклонной амплитуды в трехпараметрическом микроскопическом оптическом потенциале, используемом для расчета дифференциальных сечений пион-ядерного рассеяния [4, 12–14], характеризующие динамику изменения амплитуды рассеяния пионов на внутриядерных нуклонах (нуклонах «ядерной материи») в зависимости от энергии пионов [4].
- Использование АДЭ-минимизации позволило увеличить вероятность определения глобального минимума невязки между предсказаниями теоретической модели и экспериментальными данными по сравнению с методами SIMPLEX и MIGRAD<sup>19</sup>, так как невязка характеризуется наличием нескольких локальных минимумов. Таким образом, большая часть расчетов, где ранее требовались постоянный контроль и перепроверки, была автоматизирована.

С использованием АДЭ разработан комплекс программ и проведено численное исследование модели малоуглового синхротронного рассеяния на полидисперсной популяции везикул ДМФХ в 40% растворе сахарозы.

- Предложена модификация метода разделенных формфакторов, которая учитывает флуктуации параметров, описывающих структуру биослоя оболочек везикул. Модифицированный метод позволил описать экспериментальные данные по рассеянию гамма-квантов в диапазоне векторов рассеяния  $q$  от  $0.06$  до  $4 \text{ nm}^{-1}$  [3, 6].
- Определены параметры везикулярной системы, и на основе их сопоставления с результатами анализа спектров нейтронного рассеяния сделаны выводы о влиянии концентрации сахарозы на структуру везикулярной системы ДМФХ [5, 20].
- Использование АДЭ-минимизации позволило эффективно распараллелить вычисления, требующие глобальной минимизации многоэкстремальной функции с 9 частично коррелированными переменными и значительных затрат компьютерного времени, более чем в 50 раз уменьшив время расчетов, увеличив при этом вероятность определения глобального минимума с 45% (с использованием минимизации на основе квазиньютоновского метода) до 90% [20].

<sup>19</sup>MINUIT-реализация метода симплексов и квазиньютоновского метода, см. сноски 12; James, F., Winkler, M. MINUIT User's Guide // CERN, Geneva: June 16, 2004.

## 6. Достоверность и апробация результатов

Эффективность предложенных алгоритмов глобальной минимизации подтверждена вычислениями на основе тестовых наборов задач СЕС-2005 и ВВОВ-2012, а также сравнительными расчетами с применением других часто используемых методов минимизации. Достоверность и обоснованность аналитических оценок, касающихся ограничений на управляющие параметры АДЭ, подтверждены тестовыми расчетами. Достоверность и обоснованность полученных численных результатов в рамках исследования многопараметрических моделей физических систем подтверждены их согласием с экспериментальными данными и теоретическими оценками. Предсказания разработанных моделей не противоречат опубликованным результатам других авторов.

Результаты представлены автором на научных семинарах:

- Научный семинар РУДН «Математическое моделирование», 18 апреля 2012 г.
- Научный семинар ЛИТ ОИЯИ «Семинар по вычислительной физике», 17 апреля 2014 г.

на российских и международных научных конференциях:

- International Conference on Mathematical Modeling and Computational Physics (MMCP 2011), 2011, Stara Lesna, Slovakia.
- XIX международная конференция «Математика. Компьютер. Образование» (МКО-2012), 2012, ОИЯИ, Дубна, Россия.
- XVI конференция молодых учёных и специалистов ОМУС-2012, 2012, ОИЯИ, Дубна, Россия.
- Fifth Conference on Numerical Analysis and Applications (NAA-2012), 2012, University of Rousse, Lozenetz, Bulgaria.
- Современные проблемы прикладной математики и информатики (MPAMCS-2012), 2012, Дубна, Россия.
- International Conference on Mathematical Modeling and Computational Physics (MMCP 2013), 2013, JINR, Dubna, Russia.
- 39th Meeting of the PAC for Condensed Matter Physics, 2014, Dubna, Russia.
- XXI международная конференция «Математика. Компьютер. Образование» (МКО-2014), 2014, Дубна, Россия.
- Современные проблемы прикладной математики и информатики (MPAMCS-2014), 2014, Дубна, Россия.

## 7. Публикации и личный вклад автора в работу

Основные результаты диссертации опубликованы в 21 научной работе. Из них 6 работ [1–6] опубликованы в российских и 4 работы [7–10] — в иностранных рецензируемых изданиях.

Диссертант в сотрудничестве с коллегами и соавторами из ОИЯИ и других научных центров участвовал в математической постановке рассмотренных в работе задач, в проверке и улучшении соответствующих математических моделей, в разработке методов их численного исследования, в анализе и интерпретации получаемых численных результатов. В разработку представленных в диссертации вычислительных схем и комплексов программ, в получение численных результатов, в анализ их точности и достоверности автором внесен определяющий вклад.

Работы [7, 14, 20] подготовлены лично автором. Результаты работ [1, 8, 9, 15–17, 21] получены с определяющим вкладом автора. В работах [2, 18] все расчеты выполнены автором на основе разработанных им алгоритмов и программ. В работах [4, 12, 13] автором выполнены все расчеты параметров трехпараметрической модели микроскопического оптического потенциала. В работе [3] автором предложена модификация метода разделенных формфакторов для учета флуктуаций внутренних параметров структуры липидного бислоя везикул, систематизированы анализируемые конфигурации, выполнены все расчеты и проведено сравнение конфигураций на предмет наилучшего соответствия экспериментальным данным. В работах [5, 11, 19, 20] для описания экспериментальных данных синхротронного рассеяния использована предложенная автором модифицированная модель разделенных формфакторов, автором выполнены все расчеты, касающиеся анализа данных малоуглового рентгеновского рассеяния. В работах [11, 20] все расчеты выполнены автором.

## 8. Структура и объем работы

Диссертационная работа состоит из введения, трех глав, заключения и трех приложений. Список цитируемой в диссертации литературы представлен 129 наименованиями. Работа изложена на 139 страницах, содержит 45 рисунков и 19 таблиц.

### Краткое содержание работы

**Во введении** обоснована актуальность исследуемых проблем и сформулированы основные цели и задачи диссертационной работы.

В разделе 1 **первой главы** сформулирован метод асинхронной дифференциальной эволюции (АДЭ) [8] (см. рис. 1), предназначенный для решения задачи (1) нахождения глобального минимума. В рамках предложенного метода сформулированы новые асинхронные стратегии с хорошей поисковой способностью и быстрой, по сравнению с традиционно используемыми вариантами алгоритма АДЭ, сходимостью.

```

//Инициализация популяции:
//  $P_{\bar{\theta}} = \{\bar{\theta}_i\}_{i=0, N_p-1}$ ,  $\bar{\theta}_i = \{\theta_{i,j}\}_{j=0, D-1}$ 
do {  $i = \text{ChooseTargetVector}()$ ; // выбор целевого вектора  $\bar{\theta}_i$ 
//Мутация:
 $\bar{v}_i \leftarrow \bar{\theta}_i + F(\bar{\theta}_p - \bar{\theta}_q)$ ; // мутантный вектор;  $r \neq p \neq q$  — случ.
индексы
//Кроссовер (рекомбинация):
for ( $j = 0$ ;  $j < D$ ;  $j = j + 1$ )
 $u_{j,i} \leftarrow \begin{cases} v_{j,i}, & \text{если } \text{rand}(0, 1) \leq C_r, \\ \theta_{j,i}, & \text{иначе} \end{cases}$  // пробный вектор
//Отбор:
 $\bar{\theta}_i \leftarrow \begin{cases} \bar{u}_i & \text{если } (f(\bar{u}_i) < f(\bar{\theta}_i)), \\ \bar{\theta}_i & \text{иначе} \end{cases}$ 
} while (пока не выполнены критерии выхода).

```

Рис. 1. Асинхронный алгоритм дифференциальной эволюции [7, 8].  $N_p$  — размер популяции,  $F$  — масштабирующий фактор,  $C_r$  — уровень кроссовера

Во втором разделе сформулирован математический подход к оценке границ допустимых значений управляющих параметров алгоритма. Впервые получены ограничения, налагаемые на управляющие параметры для стратегий АДЭ и стратегии best/1/bin метода ДЭ. Эти ограничения являются необходимыми условиями предупреждения преждевременной сходимости алгоритмов. Проведено сканирование области сходимости этих стратегий на примере поиска минимума для функций  $f_1, f_6, f_9, f_{11}$  из СЕС-2005. Показано, что аналитические оценки не противоречат эмпирически найденным областям сходимости [7]. Сделаны эмпирические оценки средней скорости и вероятности сходимости метода АДЭ для этих функций, проведено сравнение полученных результатов с результатами для классического варианта ДЭ [7].

Описана реализация метода АДЭ с рестартом, который позволил сбалансировать хорошую скорость сходимости с высокой вероятностью сходимости [1, 9]. Показано, что рестарт улучшает как скорость, так и вероятность сходимости по сравнению с ДЭ и АДЭ без рестарта [9].

Проанализирована зависимость скорости и вероятности сходимости от величины параметров рестарта: критериев рестарта и мультипликатора популяции. Правильный подбор параметров алгоритма [7] и применение методов, позволяющих при необходимости возобновить вычисления [15], снизили вероятность преждевременной сходимости алгоритма и повысили вероятность сходимости к глобальному минимуму.

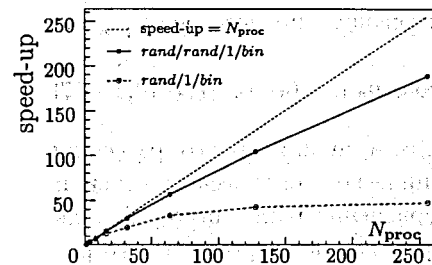


Рис. 2. Ускорение параллельных вычислений для различных стратегий ДЭ (пунктирная) и АДЭ (сплошная) для десятимерной задачи Розенброка ( $f_6$  из СЕС-2005) в зависимости от количества задействованных вычислительных узлов  $N_{\text{proc}}$ . Размер популяции  $N_p = 40$  [8]

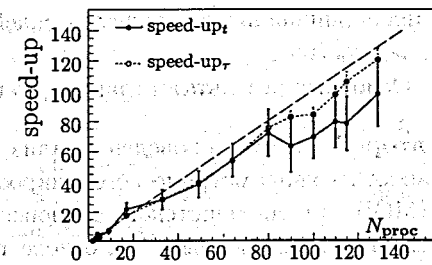


Рис. 3. Ускорение для задачи о структуре полидисперсной популяции везикул. Сплошная — результирующее ускорение. Пунктирная — ускорение в расчете на одно вычисление целевой функции. Метод АДЭ с рестартом. Начальное значение размера популяции  $N_p^{\text{init}} = 16$  [3, 6]

Предложена новая адаптивная схема для операции кроссовера [10] дифференциальной эволюции. Вместо фиксированного уровня кроссовера  $C_r$  операция кроссовера модифицирована и зависит от парных корреляций между параметрами задачи. Адаптивная корреляционная матрица учитывает результаты удачных шагов в процессе эволюции популяции. С ее помощью могут быть идентифицированы группы зависимых переменных и операции кроссовера производятся в соответствующем подпространстве исходной области поиска  $\Omega$ . В алгоритм асинхронной дифференциальной эволюции с кроссовером, задаваемым адаптивной корреляционной матрицей (АДЭ-АКМ), также встроены адаптивная схема выбора масштабирующего фактора [10] и процедура рестарта с автоматическим увеличением популяции [9], учитывающая ограничения, полученные в [7]. Полученный алгоритм не требует настройки параметров пользователем и превосходит другие известные в литературе адаптивные варианты ДЭ по скорости и вероятности сходимости на наборах тестовых задач СЕС-2005 и ВВОВ-2012 [10].

Описаны особенности компьютерной реализации методов и представлены параллельные версии АДЭ. Показано, что асинхронизация ускоряет вычисления при расчетах в параллельном режиме, при этом сохраняются сравнимые с классической ДЭ вероятность и скорость сходимости [8]. Проведены численные оценки ожидаемого ускорения параллельных вычислений (см. рис. 2 [8] и рис. 3 [3, 6]). На примере тестовых задач показано, что методы АДЭ и АДЭ-АКМ заметно превосходят по скорости классическую синхронизированную ДЭ на задачах с частично разделяемыми переменными [1] и обеспечивают при вычислениях в параллельном режиме ускоре-



ние, пропорциональное количеству задействованных процессоров  $N_{\text{proc}}$  при  $N_{\text{proc}} > 2N_p$  (рис. 2).

Основные результаты главы опубликованы в работах [1, 7–10, 15–17].

Во второй главе проведен анализ модели пион-ядерного рассеяния в рамках трехпараметрического микроскопического оптического потенциала (МОП) и релятивистского волнового уравнения Шредингера. Используется МОП, полученный<sup>21</sup> на основе теории высокоэнергетического рассеяния частиц на сложных системах<sup>22</sup> в оптическом пределе.

С учетом изотопической симметрии для ядер с близким числом протонов и нейтронов потенциал принимает следующий вид<sup>21</sup>:

$$U^H(r) = -\frac{k/E}{(2\pi)^2} \sigma (i + \alpha) \int_0^\infty j_0(qr) \rho(q) f(q) q^2 dq, \text{ где } f(q) = \exp(-\frac{\beta q^2}{2}), \quad (3)$$

здесь  $k/E$  — скорость;  $k$  — импульс пиона;  $E$  — энергия пиона;  $\sigma$  — полное сечение;  $\alpha$  — отношение реальной к мнимой части амплитуды рассеяния вперед;  $\beta$  — параметр наклона в формфакторе амплитуды пион-нуклонного рассеяния  $f(q)$ .

В расчетах используется ядерная плотность  $\rho(r)$  в виде симметризованной ферми-функции с параметрами радиуса  $R$  и диффузности  $a$ , которые известны из независимых источников и табулированы. Для такой плотности также известно явное выражение формфактора<sup>23</sup>.

При расчете дифференциальных сечений упругого рассеяния используется подход, аналогичный разработанному<sup>24</sup> для рассеяния  $K$ -мезонов на ядрах. В этом подходе дифференциальное сечение упругого рассеяния пионов ядрами рассчитывается с помощью программы DWUCK4<sup>25</sup> на основе релятивистского волнового уравнения Шредингера<sup>24</sup>:

$$(\Delta + k^2) \psi(\vec{r}) = 2\bar{\mu} [U^H(r) + U_c(r)] \psi(\vec{r}), \quad (4)$$

где  $U_c(r)$  — кулоновский потенциал равномерно заряженной сферы;  $\bar{\mu} = EM_A/(E + M_A)$  — релятивистская приведенная масса пиона в системе центра масс;  $M_A$  — масса ядра.

Расчет сечений пион-ядерного рассеяния через волновые функции уравнения (4) позволяет автоматически учесть как эффекты релятивизации, так и эффекты кулоновского и ядерного искажения во входном и выходном каналах рассеяния.

<sup>21</sup> Лукьянов, В.К., Земляная, Е.В., Лукьянов, К.В. // Ядерная физика, 2006, в. 69, с. 262–275.

<sup>22</sup> Glauber, R. J. Lectures in Theoretical Physics // New York, Interscience, 1959, p. 315; Сятенко, А.Г. // Укр. физ. журн., 1959, т. 4, с. 152; Czyz, W. and Maximon, L.C. // Ann. Phys., 1969, v. 52, p. 59.

<sup>23</sup> Грейпес, М.Е., Кутрулос, Х.Г., Лукьянов, В.К., Шебеко, А.В. // Физика элементарных частиц и атомного ядра, 2001, т. 32, вып. 6, с. 1494–1565.

<sup>24</sup> Лукьянов, В.К., Земляная, Е.В., Лукьянов, К.В., Ханна, К.М. // Ядерная физика, 2010, т. 73, с. 1489–1496.

<sup>25</sup> Kunz, P.D. and Rost, E. // Comp. Nucl. Phys., Springer-Verlag, 1993, v. 2, pp. 88–107.

Подгонка параметров МОП осуществляется минимизацией взвешенного среднеквадратичного отклонения  $\chi^2 = f(\sigma, \alpha, \beta)$  теоретических сечений от соответствующих экспериментальных данных.

В работе дано описание реализованного с использованием АДЭ-минимизации комплекса программ для определения параметров «in-medium» амплитуды рассеяния  $\pi$ -мезонов на внутриядерных нуклонах по экспериментальным дифференциальным сечениям упругого рассеяния пионов на ядрах.

Проведен анализ данных по дифференциальным сечениям упругого рассеяния заряженных пионов на ядрах  $^{28}\text{Si}$ ,  $^{40}\text{Ca}$ ,  $^{54}\text{Ni}$ ,  $^{208}\text{Pb}$  при кинетической энергии налетающих пионов  $T = 130 \div 290$  МэВ, покрывающих область энергии возбуждения  $\Delta(1232)P_{33}$ -резонанса пион-нуклонного рассеяния.

Качество описания экспериментальных данных (рис. 4) в рамках трехпараметрической модели сравнимо с результатами более сложных моделей с большим числом параметров [4]. Приведены результаты расчетов, по которым сделан ряд выводов о характере рассеяния пионов на нуклонах, связанных в ядре.

Представлены результаты многопоточных АДЭ-расчетов на основе технологии *Open Multi-Processing* (OpenMP).

Показано, что в заданной области метод АДЭ находит минимум с большей вероятностью, чем методы SIMPLEX и MIGRAD. Таким образом, подтверждена эффективность применения метода АДЭ для решения поставленной задачи.

Основные результаты главы опубликованы в работах [1, 2, 4, 12–14, 18].

Третья глава посвящена численному исследованию структуры полидисперсной везикулярной системы ДМФХ с применением методов АДЭ. Представлена модель разделенных формфакторов, модифицированная для учета флуктуаций параметров структуры бислоя оболочки везикул. Эта модификация позволила уточнить описание экспериментальных спектров в диапазоне значений вектора рассеяния  $q \in (3; 4) \text{ нм}^{-1}$ .

В подходе, основанном на методе разделенных формфакторов, макроскопическое сечение синхротронного рентгеновского рассеяния на поли-

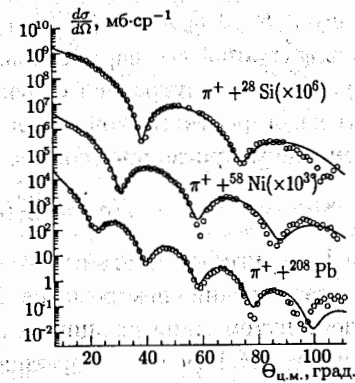


Рис. 4. Дифференциальные сечения рассеяния  $\pi^+$ -пионов на ядрах  $^{28}\text{Si}$ ,  $^{54}\text{Ni}$ ,  $^{208}\text{Pb}$  при  $T^{\text{lab}} = 162$  МэВ [4], рассчитанные с параметрами  $\pi N$ -амплитуды, подогнанными к экспериментальным данным из Geesaman, D. F. et al. // Phys. Rev., 1981, C 23, 6, p. 2635

дисперсной популяции везикул имеет следующий вид [5]:

$$\frac{d\Sigma}{d\Omega}(q) = n I_0 \hat{F}_s \hat{F}_b S(q), \quad (5)$$

где  $I_0$  — интенсивность падающего пучка фотонов;  $n$  — количество везикул в единице объема;  $S(q)$  — структурный фактор<sup>26</sup>. С учетом полидисперсности везикул<sup>27</sup> и флуктуаций параметров внутренней структуры бислоя формфактор полидисперсной популяции сферических везикул  $\hat{F}_s$  и формфактор бислоя  $\hat{F}_b$  имеют следующий вид:

$$\hat{F}_s(q; \langle R \rangle, m) = \frac{\int_{R_{\min}}^{R_{\max}} F_s(q, R) G(R, R) dR}{\int_{R_{\min}}^{R_{\max}} G(R, R) dR}, \quad \hat{F}_b(q; \langle \Theta_b \rangle, k_R) = \frac{\int_{-K}^K F_b(q, \Theta_b(\langle \Theta_b \rangle, k_R, \xi)) f(\xi) d\xi}{\int_{-K}^K f(\xi) d\xi}. \quad (6)$$

Здесь  $F_s(Q, R) = (4\pi R^2 \sin(qR)/qR)^2$  — формфактор сферической поверхности радиуса  $R$ ;  $F_b(q, \Theta_b) = (\int_{-d/2}^{+d/2} \rho_c(x) \cos(qx) dx)^2$  — формфактор бислоя без учета флуктуаций его параметров. Функция контраста  $\rho(\xi; \Theta_b)$  описывается параметрами внутренней структуры бислоя<sup>28</sup>:  $\Theta_b = \{d, D, L, \rho_H\}$ . С учетом некогерентного фона  $I_B$  и разрешения спектрометра регистрируемое значение макроскопического сечения принимает вид

$$I(q) = \frac{d\Sigma}{d\Omega}(q) + \frac{1}{2} \Delta^2 \frac{d^2 \frac{d\Sigma}{d\Omega}(q)}{dq^2} + I_B, \quad (7)$$

где  $I_B$  — интенсивность некогерентного фона;  $\Delta^2$  — второй момент функции разрешения спектрометра. Подгонка экспериментальных данных проведена путем минимизации целевой функции, описывающей взвешенную невязку  $f(\Theta)$  между теоретическими и экспериментальными значениями интенсивности рассеяния. Набор оптимизируемых параметров  $\Theta = \{R, m, \langle l \rangle, \langle s \rangle, \langle h \rangle, k_R, \rho_H, n_x, I_0, I_B, V_\nu/\nu\}$ .

В работе дано описание реализованного на базе АДЭ-минимизации комплекса программ для нахождения параметров полидисперсных везикулярных систем по данным малоуглового синхротронного рассеяния. Проведено численное исследование экспериментальных спектров синхротронного рассеяния на полидисперсной популяции однослойных везикул ДМФХ в 40% растворе сахарозы. Получены оценки для параметров модифицированной и немодифицированной модели разделенных формфакторов. По-

<sup>26</sup>В приближении Дебая  $S(q, R) = 1 - \frac{8V_\nu}{2qR} \left( \frac{\sin(2qR)}{2qR} \right)$ , где  $V_\nu = 4\pi R^3/3$  — объем везикулы;  $\nu = 1/n$  — объем растворителя, приходящийся на одну везикулу — учитывает межвезикулярное взаимодействие.

<sup>27</sup>Описывается асимметричным распределением Шульца  $G(R, R) = \frac{R^m}{m!} \left( \frac{m+1}{R} \right)^{m+1} \exp\left[-\frac{(m+1)R}{R}\right]$ , где  $\langle R \rangle$  — средний радиус везикул;  $m$  — коэффициент полидисперсности.

<sup>28</sup>В расчетах предполагается, что различие в величинах параметров внутренней структуры обусловлено различным расстоянием между липидными слоями (колебаниями толщины мембраны). Тогда компоненты  $\Theta_b$  в интеграле (6) равны:  $d = (d)(1 + k_R \xi)$ ;  $D = (D)(1 + \frac{(d)}{D} k_R \xi)$ ;  $L = (L)(1 - \frac{(d)}{L} k_R \xi)$ ;  $\rho_H \equiv (\rho_H)$ , где  $\langle d \rangle$ ,  $\langle D \rangle$  и  $\langle L \rangle$  — средние значения параметров внутренней структуры бислоя;  $k_R$  — коэффициент флуктуаций;  $f(\xi)$  — функция плотности усеченного нормального распределения.

казано, что учет флуктуаций позволил значительно улучшить согласие между предсказаниями теории и экспериментальными данными по МУРР на популяции везикул.

Проведено сравнение различных конфигураций модели для описания структуры оболочки везикул как с учетом, так и без учета флуктуаций параметров структуры бислоя. Найдены наиболее реалистичные конфигурации. Показано, что полученные оценки параметров ДМФХ не противостоят результатам анализа других экспериментов (рис. 5).

Представлены оценки ускорения параллельных вычислений, проведенных по технологии MPI<sup>29</sup> на многопроцессорном кластере ЦИВК (ЛИТ, ОИЯИ). Проведено сравнение эффективности использования метода АДЭ и методов SIMPLEX и MIGRAD, реализованных в ROOT, для нахождения параметров везикулярных систем. Получено, что вероятность определения оптимального набора параметров системы методом АДЭ значительно превосходит вероятность нахождения тех же параметров с теми же начальными условиями методами SIMPLEX и MIGRAD.

Основные результаты главы опубликованы в работах [3, 5, 6, 11, 19–21].

## Заключение

В диссертации разработаны, обоснованы, реализованы в виде программного комплекса и численно исследованы методы асинхронной дифференциальной эволюции (АДЭ) и АДЭ с кроссовером, задаваемым адаптивной корреляционной матрицей. С использованием перечисленных методов проведено численное исследование двух моделей многопараметрических систем:

1. Разработаны: (i) метод АДЭ [8], (ii) метод АДЭ с рестартом [9, 15] и адаптивной корреляционной матрицей [10], а также проблемно-ориентированные комплексы программ.
2. Реализованный на базе АДЭ комплекс программ для определения параметров пион-нуклонной амплитуды упругого рассеяния заряженных

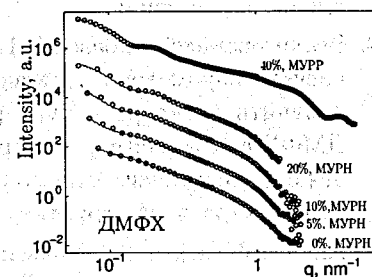


Рис. 5. Экспериментальный (точки) и теоретические (линии) спектры МУРР и МУРН (малоугловое рассеяние нейтронов) для различных концентраций раствора сахарозы [5]

<sup>29</sup>Message Passing Interface (MPI) <http://www.open-mpi.org/>

пионов на нуклонах ядерной среды позволил описать экспериментально измеренные дифференциальные сечения упругого рассеяния пионов на ядрах в рамках трехпараметрической модели микроскопического оптического потенциала и релятивистского волнового уравнения Шредингера. Полученный набор значений параметров «in-medium» амплитуды рассеяния  $\pi$ -мезонов на внутриядерных нуклонах позволил сделать ряд теоретических выводов о характере рассеяния пионов внутри ядра. Данный набор используется для моделирования неупругого пион-ядерного рассеяния.

3. Реализованный на базе MPI-реализации АДЭ комплекс программ для расчета параметров полидисперсных везикулярных систем позволил получить значения структурных параметров везикулярной системы ДМФХ в 40% растворе сахарозы. Полученные параметры в совокупности с данными нейтронного рассеяния позволили сделать вывод о влиянии сахарозы на структуру везикулярной системы.
4. Аналитическое и численное исследование эффективности методов АДЭ и основанных на них комплексов программ выявило основные преимущества методов АДЭ по сравнению с другими методами минимизации. Эти преимущества состоят (i) в увеличении скорости и вероятности сходимости по сравнению с ДЭ; (ii) в улучшении вероятности сходимости по сравнению с другими методами минимизации, особенно для многоэкстремальных задач с частично разделяющимися переменными и (iii) в возможности эффективного применения разработанных методов в режиме параллельных вычислений.

Полученные результаты говорят о перспективности использования методов АДЭ и АДЭ-АКМ для расчетов как в последовательном режиме, так и на параллельных вычислительных системах для решения широкого круга задач, в том числе задач, выходящих за рамки данной работы.

### Работы автора 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  $\pi$ -мезонов на ядрах с применением алгоритма асинхронной дифференциальной эволюции // Компьютерные исследования и моделирование, 2012, т. 4, № 3, с. 585–595.
3. **Жабицкая, Е. И., Земляная, Е. В., Киселев, М. А.** Исследование структуры однослойных везикул ДМФХ с использованием параллельного алгоритма асинхронной дифференциальной эволюции // Вестник

Российского университета дружбы народов. Серия: Математика. Информатика. Физика, 2014, № 2, с. 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, с. 103–112.
5. **Киселев, М. А., Земляная, Е. В., Жабицкая, Е. И., Ахсенов, В. Л.** Исследование однослойных везикул ДМФХ в водных растворах сахарозы методами малоуглового рассеяния нейтронов и рентгеновских лучей // Кристаллография, 2015, т. 60, с. 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, с. 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: Dimov, I., Farag, I., and Vulkov, L. (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 // Proceedings of the 15th Annual Conference on Genetic and Evolutionary Computation, USA, New York, 2013, pp. 455–462.
11. **Zhabitskaya, E., Zemlyanaya, E., Kiselev, M.** Unilamellar Vesicles Structure Analysis Using Parallel Asynchronous Differential Evolution // MMCP-2013: Book of Abstracts of the International Conference (Dubna, July 8–12, 2013), Dubna, JINR, 2013.
12. **Lukyanov, V. K., Zemlyanaya, E. V., Zhabitskaya, E. I., Lukyanov, K. V., Zhabitsky, M. V.** Study of In-medium Effect on the Pion-Nucleon Amplitude from Analysis of Pion-Nucleus Data within the Microscopic Optical Potential // XXI International Baldin Seminar on High Energy Physics Problems, JINR, Dubna, Russia // Proceedings of Science Baldin ISHEPP-XXI, 2013, v. 2013, pp. 23–31.
13. **Zemlyanaya, E. V., Lukyanov, V. K., Lukyanov, K. V., Zhabitskaya, E. I., Zhabitsky, M. V.** Pion-Nucleus Microscopic Optical Potential at Intermediate Energies and In-Medium Effect on the Elementary  $\pi$ N Scattering Amplitude // 31st International Workshop on Nuclear Theory, INRNE BAS, Heron Press Ltd, Sofia, Nuclear Theory, 2012, v. 31, pp. 175–184.
14. **Жабицкая, Е. И.** Применение асинхронной дифференциальной эво-

- люции для моделирования микроскопического оптического потенциала упругого рассеяния пи-мезонов на ядрах // XVI научная конференция молодых ученых и специалистов. 6 – 11 февраля 2012 г. Труды конференции, ОМУС XVI, Дубна, ОИЯИ, 2012, 286 с., с. 46–49.
15. **Жабицкая, Е. И., Жабицкий, М. В.** Алгоритм асинхронной дифференциальной эволюции для решения оптимизационных задач // XVI научная конференция молодых ученых и специалистов. г. Дубна, 6 – 11 февраля 2012 г. Труды конференции ОМУС XVI, ОИЯИ, Дубна, 2012, 286 с., с. 50–53.
  16. **Жабицкая, Е. И., Жабицкий, М. В.** Эффективные стратегии параллельной реализации метода асинхронной дифференциальной эволюции с рестартом // Современные проблемы прикладной математики и информатики (МРАМС'2012, 22-27 августа 2012 г.): тезисы докладов, Дубна, ОИЯИ, 2012, 230 с., с. 110–112.
  17. **Жабицкий, М. В., Жабицкая, Е. И.** Решение оптимизационных задач на распределенных вычислительных системах с помощью алгоритма асинхронной дифференциальной эволюции // Современные проблемы прикладной математики и информатики (МРАМС-2012): Тезисы докладов международной конференции (Дубна, 22-17 августа 2012 г.), Дубна, ОИЯИ, 2012, 230 с., с. 107–109.
  18. **Жабицкая, Е. И., Жабицкий, М. В., Земляная, Е. В., Лукьянов, К. В.** Применение метода асинхронной дифференциальной эволюции для оценки параметров микроскопического оптического потенциала упругого рассеяния  $\pi^+$  на ядрах // Тезисы XIX международной конференции МКО-2012, Дубна, ОИЯИ, 2012, с. 139; Calculation of the Parameters of Microscopic Optical Potential by Asynchronous Differential Evolution Algorithm // там же, с. 131.
  19. **Жабицкая, Е. И., Земляная, Е. В., Киселев, М. А.** Применение метода асинхронной дифференциальной эволюции при исследовании структуры однослойных везикул DMPC // Тезисы XXI международной конференции МКО-2014, Дубна, ОИЯИ, с. 139.
  20. **Жабицкая, Е. И.** Анализ сложных везикулярных систем с использованием метода асинхронной дифференциальной эволюции // Современные проблемы прикладной математики и информатики (МРАМС-2014): Тезисы докладов международной конференции (Дубна, 25–29 августа 2014 г.), Дубна, ОИЯИ, 2014, 173 с., с. 71–74.
  21. **Жабицкая, Е. И., Жабицкий, М. В.** Развитие алгоритма асинхронной дифференциальной эволюции // Научный отчет ЛИТ за 2012–2013 гг. // ОИЯИ, 2014–26, Дубна, 2014, 265 с., с. 144–147.

#### Список используемых сокращений

- АДЭ – (метод) асинхронной дифференциальной эволюции  
 АДЭ-АКМ – (метод) АДЭ с кроссовером, определяемым адаптивной корреляционной матрицей  
 ДМФХ – димиристоилфосфатидилхолин  
 ДЭ – (метод) дифференциальной эволюции  
 МОП – микроскопический оптический потенциал  
 МУРР – малоугловое рентгеновское рассеяние  
 РФФ – (метод) разделенных формфакторов