О Т З Ы В

на выпускную квалификационную работу бакалавра

кафедры математической теории моделирования систем управления

Санкт-Петербургского государственного университета

***ЛИТВИНЦЕВА******Игоря Сергеевича***

«**СРАВНЕНИЕ ГЛАДКИХ И НЕГЛАДКИХ МЕТОДОВ**

**РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ О НАХОЖДЕНИИ**

**ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СТРУКТУРЫ МОЛЕКУЛЫ»**

Представленная выпускная квалификационная работа бакалавра Литвинцева И.С. носит ярко выраженный прикладной характер. Она имеет своей целью разработку вычислительной программы, реализующей алгоритм построения «оптимальной» структуры молекулы по заданным расстояниям между атомами.

Игорю Литвинцеву была поставлена задача, восстановить структуру молекулы по данным расстояниям между атомами . Естественно, если матрица расстояний полностью задана, то можно построить «точную» модель молекулы. В реальных же задачах, как правило, это матрица заполнена частично. При решении были рассмотрены следующие критерии «оптимальности» структуры молекулы:

; ; .

Актуальность темы не вызывает сомнений, поскольку решение данной задачи с учетом различных критериев «оптимальности» имеют широкие приложения в химии, биологии, физике.

В работе представлены все основные этапы решения поставленной проблемы. Вначале приводятся элементы негладкого анализа. Далее указаны методы решения данной задачи, а именно метод гиподифференциального спуска и метод наискорейшего спуска. Представлены необходимые выкладки в рамках рассматриваемой модели. В решении исследуемой задачи широко и грамотно применялся аппарат негладкого анализа и недифференцируемой оптимизации.

Несомненной заслугой Литвинцева И.С. является разработка прикладной программы, которая позволяет по заданной матрице расстояний строить модель молекулы оптимальной по одному из трех из выше указанных критериев. В приложениях приведен не только текст основной программы и вспомогательных процедур, но и результаты счета, оформленные в виде таблиц.

В выпускной квалификационной работе Литвинцева И.С. не обнаружены неправомерных заимствований. Считаю, что выпускная квалификационная работа Литвинцева И.С. заслуживает оценки «хорошо».

Научный руководитель,

к.ф.-м.н., доцент Тамасян Г.Ш.

6 мая 2016 г.