



Гуда Сергей Александрович

Должность: к.ф.-м.н., доцент

Email: gudasergey@sfedu.ru

Дата рождения: 08.07.1982 г., Россия

Образование и ученые степени:

2005 г.: магистратура института математики, механики и компьютерных наук им.

И.И.Воровича ЮФУ;

2007 г.: к.ф.-м.н., ЮФУ.

Направления исследований (ключевые слова):

Машинное обучение, количественный анализ спектров, параллельное программирование.

Исследовательская активность:

Международный исследовательский институт интеллектуальных материалов и институт математики, механики и компьютерных наук им. И.И.Воровича ЮФУ. Scopus: h-индекс 13, 53 статьи, 578 цитирований

Область научных интересов:

- Исследование локальной атомной геометрии и электронной структуры в различных типах конденсированных сред, включая: наноструктуры, свободные и поддерживаемые атомные кластеры, углеродные нанотрубки, наносплавы и квантовые точки, катализаторы.
- Разработка алгоритмов адаптивного семплинга для дизайна экспериментов
- Разработка и программная реализация алгоритмов анализа спектров, в том числе и в виде веб-интерфейса. Разработка баз данных спектров и методов статистического анализа.
- Распараллеливание программных комплексов для запуска на современных ускорителях параллельных вычислений и многопроцессорных системах. Подключение оптимизированных библиотек быстрых вычислений.

Методы:

- Алгоритмы машинного обучения: нейронные сети, Extra Trees, RidgeCV, радиальные базисные функции. Кроссвалидация, поиск аномалий, методы восстановления пропущенных значений. Improved Hypercube Sampling, байесовская оптимизация.

- Углубленный теоретический анализ структуры поглощения рентгеновского излучения вблизи краев (XANES) и рентгеноэмиссионной спектроскопии
- CUDA, MPI, Intel MKL, OpenMP, LAPACK, BLAS, MUMPS, UMFPACK.

Научные публикации в реферируемых журналах:

Опубликовано 5 учебных изданий, 53 статьи в реферируемых журналах (в Scopus).

10 наиболее цитируемых публикаций:

1. S. A. Guda, A. A. Guda, M. A. Soldatov, K. A. Lomachenko, A. L. Bugaev, C. Lamberti, W. Gawelda, C. Bressler, G. Smolentsev, A. V. Soldatov, Y. Joly "Optimized finite difference method for the full-potential XANES simulations: application to molecular adsorption geometries in MOFs and metal-ligand intersystem crossing transients", *J. Chem. Theory Comput.*, 2015, 11 (9), pp 4512–4521. DOI: 10.1021/acs.jctc.5b00327
2. A A Guda, S A Guda, M A Soldatov, K A Lomachenko, A L Bugaev, C Lamberti, W Gawelda, C Bressler, G Smolentsev, A V Soldatov, Y Joly "Finite difference method accelerated with sparse solvers for structural analysis of the metal-organic complexes" *Journal of Physics: Conference Series* Vol.712. N1. 2016. doi:10.1088/1742-6596/712/1/012004
3. Y. Joly, C. Cavallari, S. A. Guda, C. J. Sahle "Full potential simulation of x-ray Raman scattering spectroscopy" *J. Chem. Theory Comput.*, 2017, 13 (5), pp 2172–2177 DOI: 10.1021/acs.jctc.7b00203
4. D. Moonshiram, A. Guda, L. Kohler, A. Picon, S. Guda, C. S. Lehmann, X. Zhang, S. H. Southworth, K. L. Mulfort "Mechanistic Evaluation of a Nickel Proton Reduction Catalyst Using Time-Resolved X-ray Absorption Spectroscopy" // *J.Phys.Chem.* 2016 pp.200049-20057. DOI: 10.1021/acs.jpcc.6b06883
5. Штейнберг Б.Я., Абрамов А.А., Алымова Е.В., Баглий А.П., Гуда С.А., Дубров Д.В., Е.Н. Кравченко, Р.И. Морылев, Нис З.Я., Петренко В.В., Полуян С.В., Скиба И.С., Шаповалов В.Н., Штейнберг О.Б., Штейнберг Р.Б., Юрушкин М.В. Диалоговый высокоуровневый оптимизирующий распараллеливатель (ДВОР) // Научный сервис в сети Интернет: суперкомпьютерные центры и задачи: Труды Международной суперкомпьютерной конференции (20-25 сентября 2010 г., г. Новороссийск). М.: Изд-во МГУ, 2010. - (с. 71-75)
6. Y. Joly, A. Abisset, A. Bailly, M. Santis, F. Fettar, S. Grenier, D. Mannix, A. Y. Ramos, M. Saint-Lager, Y. Soldo-Olivier, J. Tonnerre, S.A. Guda, Y. Gründer. Simulation of Surface Resonant X-ray Diffraction / *Journal of Chemical Theory and Computation* 2018 14 (2), 973-980 DOI: 10.1021/acs.jctc.7b01032
7. A. A. Guda, I. A. Pankin, A. L. Bugaev, K. A. Lomachenko, S. A. Guda, V. P. Dmitriev, A. V. Soldatov "X-ray absorption spectroscopy determination of the products of manganese borohydride decomposition upon heating" *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*, 2015, V.79, No 1, pp. 139-143.
8. Iliya A. Pankin, Alexander A. Guda, Nikolay A. Tumanov, Yaroslav Filinchuk, Kirill A. Lomachenko, Aram L. Bugaev, Sergey A. Guda, Victor V. Shapovalov, Carlo Lamberti, Alexander V. Soldatov, Experimental and theoretical study of hydrogen desorption process from Mn(BH₄)₂, In *Journal of Alloys and Compounds*, Volume 735, 2018, Pages 277-284, ISSN 0925-8388,

<https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2017.11.062>.

(<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925838817338082>)

9. Гуда С.А., Юдович В.И. "Совместная задача о вращении твердого тела в вязкой жидкости под действием упругой силы", Сиб. матем. ж. т.48 (2007г.) №3. С. 556-576.
10. С.А. Гуда "Операции над представлениями кусочно-квазиаффинных функций в виде деревьев", Информатика и ее применения. 2013г. Т.7, №1. С.58-69.

Международные гранты:

Всего 5 грантов различных международных источников финансирования.

Российские гранты:

Всего 20 грантов от различных российских источников финансирования.