**Отзыв официального оппонента**
**на диссертацию**
**Кучко Артёма Владимировича**
«РАЗРАБОТКА МАТЕМАТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ИНТЕРПРЕТАЦИИ ДАННЫХ МАЛОУГЛОВОГО РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЯНИЯ ОТ ПОЛИДИСПЕРСНОЙ СИСТЕМЫ НАНОЧАСТИЦ»,

**представленную на соискание**
**ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.2 - «Приборы и методы экспериментальной физики»**

Диссертация посвящена разработке методов моделирования и валидации основных структурных характеристик полидисперсной системы наночастиц — формы рассеивателей и их распределения по размерам — на основе данных малоуглового рентгеновского рассеяния. В работе предложен оригинальный метод моделирования системы наночастиц, основанный на использовании функции распределения объемных долей частиц по радиусам гирации и адаптирован метод байесовского анализа для решения соответствующей обратной задачи. Диссертантом продемонстрирована эффективность предлагаемого подхода для интерпретации данных малоуглового рентгеновского рассеяния как для разреженных систем, так и для систем с большой долей заполнения объема рассеивающим веществом. Для систем с большой долей заполнения объема рассеивающим веществом предложен и разработан оригинальный метод обработки данных рассеяния, что особенно важно для практического применения. В этом случае из-за заметного вклада межчастичной интерференции связь между функцией распределения и экспериментальной индикатрисой является нелинейной, что существенно усложняет решение обратной задачи и обычно препятствует анализу таких порошков, сплавов и композитов.

**Научная новизна** данной работы состоит в том, что диссертантом разработана методика описания структуры рассеивающей системы на основе функции распределения объемных долей рассеивателей по их радиусам гирации. Описание моделируемой системы с помощью такой функции является универсальным и применимо к любым типам рассеивателей. Кроме

того, использование такой функции распределения позволяет верифицировать решение обратной задачи уже на уровне самих модельных распределений. В работе получено интегральное уравнение, связывающее данную функцию распределения с интенсивностью малоуглового рентгеновского рассеяния. Для решения этого уравнения использован метод байесовского анализа, широко используемый для решения обратных задач. Метод существенно модифицирован с учетом особенностей решаемой задачи.

**Практическая значимость** работы состоит в том, что разработанные методы существенно улучшают и расширяют возможности интерпретации данных малоуглового рентгеновского и нейтронного рассеяния. До настоящего времени трудность изучения полидисперсных систем наночастиц (нанопоршков сложных оксидов, порошков наноалмазов, композитных материалов с нановключениями, материалов с нанопорами и т.п.) сопряжена с неодназначностью выбора решения интегрального уравнения, связывающего индикатрису малоуглового рентгеновского рассеяния со структурой системы. Разработанный итерационный метод интерпретации данных малоуглового рентгеновского рассеяния, позволяющий вычислить функцию распределения объемных долей для плотных систем с высокой долей заполнения пространства рассеивающим веществом, не имеет аналогов. Диссертант показал, что найденные на основе модельных решений обратной задачи значения удельной поверхности и ее неопределенности позволяют сделать правильный выбор адекватной модели единичного рассеивателя. Разработанная диссертантом модификация метода байесовского анализа позволяет с достаточной с практической точки зрения точностью находить гладкие неотрицательные решения некорректных обратных задач.

Эффективность метода решения основного интегрального уравнения, и правильность выбора на основе решения этого уравнения наиболее вероятной функции распределения обьемных долей по радиусам гирации была показана на многочисленных примерах, что подтверждает достоверность основных выводов первой части диссертационной работы.

**Содержание работы**

Общий объем Диссертации 124 страницы. Работа состоит из введения, шести глав, заключения и четырех приложений. По теме диссертации опубликовано три печатных труда в изданиях, входящих в перечень ВАК для защиты диссертаций, и получено два свидетельства о регистрации программных продуктов.

В первой главе проводится обзор методов решения интегрального уравнения для получения на основе данных малоуглового рассеяния функции распределения частиц по размерам.

Во второй главе представлены основные математические соотношения, описывающие постановку задачи и метод её решения при отсутствии межчастичной интерференции. Получено интегральное уравнение, моделирующее экспериментальную интенсивность малоуглового рентгеновского рассеяния полидисперсной системы. Нахождение функции распределения частиц по размерам по экспериментальной интенсивности относится к классу некорректных задач. Разработанная диссертантом модификация метода байесовского анализа позволяет не только найти функцию распределения объемных долей по радиусам гирации, но и оценить её неопределенность. Важной частью этой модификации является разработка метода для произвольной сетки радиусов гирации и формализация предъявляемых к ней требований. Это позволяет сделать правильный выбор варианта расстановки узлов сетки, что способствует правильному выбору значения регуляризатора. В рамках разработанного подхода развит математический аппарат, позволяющий вычислять удельную поверхность и ее неопределенность как функционал распределения по радиусам гирации.

В третьей главе описаны результаты проверки эффективности разработанного метода решения обратной задачи и валидации решения на основе значения удельной поверхности. Для этого автор использовал имитационное моделирование индикатрис рассеяния для широкого набора сильно различающихся полидисперсных систем наночастиц. По этим индикатрисам были вычислены функции распределения, соответствующие удельные поверхности и их неопределенности. На основе сравнения исходных и вычисленных функций распределений было показано, что для всех рассмотренных моделей наблюдается хорошее согласие между ними. Для сравнения использовалась стандартная норма функции и

продемонстрированно, что при 1 % -ном уровне шума в интенсивности рассеяния, расхождение исходной и вычисленной функции распределения не превышает 4% для всех случаев. Обнаружено, что при неверной гипотезе о форме рассеивателя норма разности истинной и вычисленной функции распределения оказывается существенно больше. Показано, что это позволяет проверять гипотезы о форме рассеивателя и существенно повысить точность измерения распределения при наличии дополнительных данных о площади поверхности частиц. Также установлено, что неопределенность правильного решения, вычисленная в разработанной модификации метода байесовского анализа, позволяет верно оценить расхождение между вычисленной и исходной функцией распределения. Этот результат представляет интерес также для исследования аналогичных некорректных задач, т.к. оценка погрешности решения в некорректных задачах, как правило, невозможна.

Четвёртая глава посвящена описанию программного обеспечения, реализующего разработанные алгоритмы вычисления функции распределения для разреженных и плотных полидисперсных систем наночастиц. Выбранный диссертантом подход позволил создать удобный инструмент, интерактивно перестраиваемый под разные требования к модели системы наночастиц и легко расширяемый на разные типы рассеивающих частиц. Описана система критериев выбора оптимального решения, включенная в пакет в процессе его разработки. Программное обеспечение позволяет настраивать параметры регуляризации, что позволяет пользователю в интерактивном режиме подбирать наиболее вероятную функцию распределения объемных долей для заданного типа рассеивателя. Также достоинствами подхода являются независимость от экспериментального оборудования, использование хорошо зарекомендовавших себя библиотек для научных вычислений и открытый исходный код, написанный на широко используемом в научных задачах языке Python. Что делает несложной модификацию пакета для решения похожих некорректных задач, связанных с интегральными уравнениями.

В пятой главе обоснована необходимость учета межчастичной интерференции для систем с высокой долей заполнения объёма рассеивающим веществом (плотных систем). Предложен и разработан итерационный метод, позволяющий для таких систем найти функцию

распределения объемных долей по радиусам гирации. Метод не требует знания о виде искомой функции распределения, достаточно быстро сходится и позволяет оценить отличие результата текущей итерации от искомого решения. Эффективность метода продемонстрирована на имитационных моделях. Метод решает нелинейную задачу, в которой уравнение Фредгольма первого рода усложнено нелинейным внешним множителем, зависящим от искомой функции (структурным фактором). Разработанный итерационный метод может быть распространен для решения нелинейных обратных задач такого типа.

В шестой главе сначала описана разработанная диссертантом процедура предварительной обработки экспериментально полученных кривых рассеяния, которая учитывает отклонение структуры реального образца от теоретической модели однородных рассеивателей. Далее приведен пример успешной интерпретации экспериментальных данных малоуглового рентгеновского рассеяния для порошков сложного оксида разного состава с помощью этой процедуры предварительной обработки и итерационного метода, описанного в главе 5. Для этих реальных образцов автором подтверждена важность учета интерференционных вкладов для вычисления модельной удельной поверхности.

Автореферат адекватно отражает содержание диссертации соискателя и позволяет судить о полученных результатах и его личном вкладе.

Диссертация соответствует паспорту специальности 1.3.2 «Приборы и методы экспериментальной физики» пункту 9 направлений научных исследований “Разработка методов математической обработки экспериментальных результатов”.

**Недостатки работы**

1. В разделе 2.3 на с.27 в методе байесовского анализа в качестве численного метода выбран метод трапеций. Но лучше выбрать метод средних прямоугольников, который является методом наивысшей алгебраической степени точности и обеспечивает погрешность в 2 раза меньше, чем метод трапеций. Для этого достаточно сдвига границы интегрирования на 0.5 интервала, поэтому проведенный автором анализ останется почти без изменений. При этом входные данные останутся те же, а число операций при реализации метода даже несколько уменьшится.

2. На с. 48. указано, что разработанное автором приложение реализовано на языке Python 3. Но это медленный интерпретируемый язык. Не указано, какие характерные длины обрабатываемых массивов, какое характерное время расчетов для такого объема данных, и есть ли связанные с этим ограничения на размеры обрабатываемых данных.

3. На с.50. говорится об оптимальных значениях регуляризатора - но значения 0 и 1.0, указанные для части из них, по-видимому, недостижимы. Но не говорится о допустимых интервалах и необходимости их предварительного задания.

4. На с. 50-56. в разделе 4.5 (и вообще в главе 4) ничего не сказано, как подбираются или выбираются форма рассеивателя и параметры анизометричности. Нет сравнения с результатами стандартных программ для этого порошка в качестве примера преимущества разработанного ПО. Было бы полезно, если бы будущие версии ПО выдавали рекомендации, в какой степени возможно использование стандартных методов.

5. Результаты применения итерационного метода интерпретации данных малоуглового рентгеновского рассеяния приведены только для одной серии образцов.

Работа написана грамотным профессиональным языком, однако в ее оформлении все же встречаются **отдельные недостатки и опечатки**:

1. На с.9. при обосновании практической значимости в словах про программный пакет SAXSEV не сказано, кем разработан, и роль автора в его разработке. Нет ссылок на публикацию [53] и сайт пакета.

2. На с. 49. опечатка “Выбора оптимального регуляризатора сильно зависит от сетки аргументов”.

3. На с. 51. опечатка “порождающие интенсивность, выпадающая из полосы погрешности”.

4. На с. 64. опечатка “сделанod”.

5. На с.105 в цитировании работы [155] 2014 года неверно указано ДАН СССР. Правильно: ДАН. В 2014 году издание ДАН СССР уже не издавалось.

Указанные недостатки не снижают ценность работы. Диссертация А.В. Кучко полностью соответствует требованиям пп. 9-14 Положения о порядке присуждения ученых степеней, утвержденного Постановлением Правительства РФ № 842 от 24.09.2013 г. (в действующей редакции),

предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, а её автор, Артем Владимирович Кучко, достоин присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.2 «Приборы и методы экспериментальной физики».

Официальный оппонент,
кандидат физико-математических наук,
доцент кафедры вычислительной физики
Санкт-Петербургского государственного
университета В.В.Монахов

Контактные данные:
Адрес: Старый Петергоф, Ульяновская ул., д.1, НИИФ
Индекс: 198504
Сайт: https://pureportal.spbu.ru/ru/persons/--(9f75ea87-2cce-4765-b2ad-ea8ed0333f6d)/
ФИО: Монахов Вадим Валериевич
Телефон рабочий: (812) 428-43-43
Телефон мобильный: 8-921-644-2057
E-mail: v.v.monahov@mail.ru , v.v.monahov@spbu.ru

28.12.2025

В.В. Монахов
конец
29.12.2025