ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию

Кучко Артема 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**»

Методы малоуглового рентгеновского и нейтронного рассеяния (МУР) получили в последние два десятилетия широкое развитие, как в плане лабораторной аппаратуры, так и на синхротронных источниках. Это связано с необходимостью оперативного изучения строения образцов разрабатываемых метаматериалов в нативном состоянии. Развитие методов интерпретации данных малоуглового рентгеновского рассеяния от полидисперсных систем остается **актуальной** областью деятельности многих исследователей. Это связано не только с огромным разнообразием реальных объектов, но и со сложностью решения обратных задач в этой области, так как информативность малоугловых данных существенно меньше, чем, например, данных дифракции от монокристаллов или электронной микроскопии. Это приводит к тому, что любой новый подход к интерпретации данных МУР оказывается чрезвычайно полезным, особенно в комплексе с другими методами. Автор справедливо отмечает, что коммерческое программное обеспечение, поставляемое с оборудованием для МУР, имеет закрытый код и ограниченный функционал, что затрудняет его адаптацию к новым задачам. Таким образом, разработка открытого и гибкого метода анализа данных является актуальной научно-практической задачей.

Общая оценка работы. Диссертационная работа Кучко А.В. посвящена актуальной научно-практической задаче – совершенствованию методов интерпретации данных МУР для полидисперсных систем наночастиц. Работа выполнена на высоком научном уровне, демонстрирует глубокое понимание автором как физических основ метода МУР, так и сложного математического аппарата, связанного с решением обратных задач. Предложенные методы и

разработанное программное обеспечение представляют существенный вклад в развитие аналитического инструментария для исследования наноматериалов.

Научная новизна. Автором предложен новый подход к интерпретации данных МУР, основанный на введении универсальной функции распределения объемных долей по радиусам инерции (VFDF). Это позволяет сравнивать результаты, полученные при различных гипотезах о форме частиц, что было серьезной проблемой в существующих методах. Предложена модификация метода байесовского анализа для решения обратной задачи восстановления VFDF на произвольной сетке радиусов инерции с развитой системой критериев выбора регуляризатора и оценками достоверности решения. Разработан итерационный метод восстановления VFDF для систем шарообразных частиц с учетом межчастичной интерференции в приближении Перкуса-Йевика для потенциала твердых сфер, что позволяет анализировать плотные системы с объемной долей наноразмерных неоднородностей до 40%. Метод открыт и для использования других потенциалов (Юкавы, мягкие сферы) для описания взаимодействия заряженных частиц в коллоидах или частиц с адсорбционными слоями.

Практическая значимость. Все теоретические разработки реализованы в виде кроссплатформенного программного пакета SAXSEV с открытым исходным кодом. Пакет прошел успешную апробацию на реальных объектах (нанопорошки оксидов циркония, углеродные материалы, композиты и т.д.), что подтверждается актами внедрения и публикациями в рецензируемых журналах. Создано сопутствующее веб-приложение для систематизации данных. Реализация пакета позволяет проводить анализ данных МУР независимо от конкретного оборудования.

Достоверность и **обоснованность** основных положений и выводов работы подтверждается как математической строгостью на всех этапах постановки и решения поставленной задачи, так и качеством решений достаточно представительного набора модельных задач.

Диссертация состоит из введения, шести глав, заключения, списка литературы и четырех приложений. Структура логична, изложение последовательное и четкое.

Во введении автором рассмотрена постановка задачи, обоснована ее актуальность и рассмотрены основные этапы ее решения.

Глава 1 содержит подробный аналитический обзор существующих методов анализа данных МУРР, репрезентативно охватывающий литературу по данной области, что демонстрирует глубокое понимание автором предметной области. Список литературы включает 182 источника, в том числе современные публикации в авторитетных журналах

Глава 2 посвящена выводу основных уравнений, связывающих интенсивность МУР с функцией VFDF для частиц различной формы (эллипсоид, цилиндр, параллелепипед), и адаптации метода Байесовского анализа для решения соответствующей некорректной обратной задачи. Представлено основное интегральное уравнение, связывающее функцию распределения объемных долей по радиусам инерции и интенсивность МУР для трех различных типов геометрических форм рассеивателей. Рассмотрена модификация метода статистической регуляризации для поиска модельной функции распределения с учетом требований, налагаемых на искомое решение (гладкость и неотрицательность). Предложены формулы для вычисления с помощью найденного решения интегральной характеристики модели полидисперсной системы - удельной поверхности. Следует особо отметить, что предложенный вариант метода решения обратной задачи позволяет не только найти модельное распределение, но и оценить его неопределенность.

Глава 3 содержит результаты тестирования разработанного метода на модельных данных. Результаты убедительно доказывают работоспособность метода: погрешность восстановления VFDF не превышает 4% при правильном задании формы, а расчет удельной площади поверхности оказывается устойчивым к ошибкам в оценке анизометричности.

Глава 4 описывает архитектуру и функциональность программного пакета для поиска возможных моделей распределений полидисперсной системы по данным рассеяния и вычисления соответствующей модели удельной поверхности SAXSEV, а также систему критериев для выбора оптимального регуляризатора. Описан сценарий работы с программным пакетом, который является, по сути, методическим руководством. Разработанный пакет интересен тем, что сопровождает найденные решения оценками их качества, что позволяет исследователю находить модели, наиболее адекватные как по форме распределений, так и по типу формфактора.

Глава 5 представляет разработанный итерационный метод учета

интерференционных вкладов и демонстрирует его эффективность на модельных данных.

Глава 6 посвящена применению метода к реальным экспериментальным данным, полученным для порошков сложных оксидов циркония и иттрия. Описан метод предварительной обработки кривых МУРР, учитывающий вклады от фона атомного рассеяния и агломератов частиц в реальном образце.

Все главы и сама диссертация завершаются четким резюмированием полученных результатов.

Из сильных сторон работы можно отметить следующее.

– Фундаментальность подхода: автор не ограничивается частными решениями, а предлагает общий метод, основанный на строгом математическом аппарате (теорема Байеса, регуляризация Тихонова). Математический аппарат изложен строго и подробно. Вывод основных уравнений, связывающих интенсивность рассеяния с VFDF для трех модельных форм (эллипсоид, цилиндр, параллелепипед), достаточен для понимания теории. Особого внимания заслуживает введение оригинального критерия IMPMIN, позволяющего контролировать физическую адекватность решения.

– Универсальность: использование радиуса инерции в качестве аргумента VFDF позволяет применять метод к частицам различной формы, несмотря на то, что автор ограничился тремя формами.

– Предложенный метод расчета удельной поверхности и ее погрешности на основе восстановленной VFDF представляет большую практическую ценность, так как позволяет использовать независимые данные (например, адсорбционные) для валидации модели.

– Учет интерференционных эффектов: предложенный итерационный метод устраняет принципиальное ограничение большинства существующих методов, делая возможным анализ плотных систем. Автор честно указывает на возникающие при высоких концентрациях частиц осцилляции решения и предлагает практический способ их подавления через усреднение.

– Практическая ориентированность: разработанный программный комплекс SAXSEV является готовым инструментом для исследователей, что подтверждается актами внедрения.

Следует отметить ряд **недостатков** работы:

1. В главе 3, сравнение истинной и предполагаемой модели происходит на

основе интегральной относительной погрешности функции распределения объемных долей. Однако на практике важны также оценки точности и стабильности восстановления таких характерных особенностей функций распределения, как положения и полуширины пиков. В работе такой анализ отсутствует.

2. Алгоритм выбора значений весовых коэффициентов при отдельных критериях в формуле (4.9) обобщающего критерия TOTAL описан недостаточно четко.
3. Не приведены результаты сравнения с известной программой GNOM из свободно распространяемого пакета ATSAS, которая позволяет находить объемные распределения для ряда формфакторов рассеивателей методом регуляризации на метрике первой производной по решению. Можно было бы несколько расширить сравнение с современными зарубежными программными пакетами (например, IRENA, SASfit) для более четкого позиционирования новизны SAXSEV.
4. В работе итерационный метод опробован для интерпретации данных МУРР от плотной полидисперсной системы сферических частиц с потенциалом взаимодействия твердых сфер. Нет апробации для систем с другими формами частиц.

Отмеченные недостатки никоим образом **не снижают** теоретической и практической значимости работы А.В. Кучко, выполненной на высоком научном уровне. Основные положения диссертации **своевременно и полно опубликованы** в научных изданиях (в том числе в трёх журналах из Перечня ВАК), докладывались и обсуждались на научных конференциях. Разработанные диссертантом программный пакет SAXSEV и Web- приложение SAXDB прошли государственную регистрацию и, с разрешения Университета ИТМО, можно получить доступ к их полному исходному коду, что обеспечивает возможность практического использования результатов автора в других научных лабораториях. **Автореферат правильно и полно** отражает содержание диссертации.

Диссертация Артема Владимировича Кучко является завершенной научно-квалификационной работой, в которой получены новые научно обоснованные результаты, которые в совокупности представляют метод решения некорректных задач с заведомо неотрицательными решениями,

описываемых интегральными уравнениями. Содержание диссертационного исследования и основные его результаты полностью соответствуют паспорту специальности 1.3.2. 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 наук по специальности 1.3.2 «Приборы и методы экспериментальной физики», а её автор, Артем Владимирович Кучко, достоин присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук.

Официальный оппонент:
главный научный сотрудник Федерального государственного бюджетного учреждения "Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", Курчатовский комплекс кристаллографии и фотоники, Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова, лаборатория рефлектометрии и малоуглового рассеяния,
доктор химических наук по специальности 01.04.18 (1.3.20) – Кристаллография, физика кристаллов,
Волков Владимир Владимирович

Дата: 18 декабря 2025 г.

Согласен на обработку персональных данных.
Адрес: 119333, г. Москва, Ленинский проспект, 59
Телефон: +7 (499) 135-54-50, +7 (926)963-38-06
e-mail: vvo@ns.crys.ras.ru, volkicras@mail.ru

Подпись Волкова В.В. заверяю
Заместитель директора – главный ученый секретарь
НИЦ «Курчатовский институт»
доктор физико-математических наук / О.А. Алексеева /