Отзыв

на автореферат диссертации Кучко Артёма Владимировича
«Разработка математических методов интерпретации данных малоуглового рентгеновского рассеяния от полидисперсной системы наночастиц», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук
по специальности 1.3.2 – «Приборы и методы экспериментальной физики»

В диссертационной работе формализована и решена задача вычисления функции распределения объемных долей наночастиц по их радиусам гирации на основе данных малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР). Ранее методы вычисления функции распределения наночастиц по размерам в полидисперсной системе разрабатывались независимо для каждой предполагаемой формы частиц, что существенно усложняло интерпретацию данных МУРР. Разработанный А.В. Кучко подход позволяет рассматривать в одном ключе разные предположения о форме частиц-рассеивателей, тем самым существенно расширяя возможности выбора наиболее адекватной модели. В работе получено интегральное уравнение, связывающее интенсивность МУРР с универсальной для разных форм единичных рассеивателей функцией распределения объемных долей, и разработан метод численного решения полученного уравнения относительно искомой функции. Важную часть работы составляет разработка оригинального итерационного метода учета межчастичной интерференции для случая, так называемых, плотных систем. В связи с тем, что малоугловое рентгеновское рассеяния активно используется для изучения наноструктур, работа несомненно является актуальной и имеет научную новизну.

Задача решения основного интегрального уравнения относится к классу некорректных задач. Для её решения А.В. Кучко обоснованно использовал модификацию метода байесовского анализа и показал высокую эффективность разработанного метода на примере большого набора модельных систем наночастиц. В рамках данного подхода диссертант разработал метод оценки неопределенности модельного распределения, формализм для вычисления значения удельной поверхности системы наночастиц и неопределенности последней. Необходимо отметить полученный диссертантом результат о возможности с помощью разработанного метода уверенно идентифицировать форму частиц, опираясь на независимую информацию о значении удельной поверхности.

Замечу, что разработанные программные продукты, на которые получены свидетельства о регистрации, могут использоваться не только для имплементации решения обратной задачи методом байесовского анализа, но и для корректировки сетки аргумента и выбора значения регуляризатора с учетом поведение системы развитых критериев качества решения. Преимуществом программной реализации является открытый исходный код, написанный на языке Python3, и применение хорошо зарекомендовавших себя

библиотек для научных вычислений позволяют расширять по мере необходимости набор используемых моделей единичных рассеивателей, реализовывать дополнительные функции по анализу получаемых моделей полидисперсных систем, а также перенастраивать пакет для решения других некорректных задач.

Значительным является результат влияния доли заполнения объема рассеивающим веществом на качество восстановления функции распределения наночастиц по размерам. Предложенный метод одновременного поиска функции распределения и структурного фактора является оригинальным. А. В. Кучко разработал и доказал его эффективность на имитационных и натурных индикатрисах МУРР.

В работе имеется некоторые недостатки.

1. При обосновании полученных результатов автор недостаточно информативно провел сравнение результатов разработанных им методов вычисления функции распределения из данных МУРР с данными из других натурных экспериментов.

2. В автореферате не отражено, насколько выбранные для интерпретации данных МУРР модели единичных рассеивателей соответствуют реальным физическим системам.

Считаю, что отмеченные недостатки не являются существенными, и что диссертант А.В.Кучко заслуживает присвоения степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.2 - «Приборы и методы экспериментальной физики».

Автореферат соответствует требованиям Положения о присуждении ученых степеней, предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук.

Доктор технических наук, профессор

Физико-технического факультета

Национального Исследовательского Университета ИТМО

Стафеев Сергей Константинович

Подпись Стафеева С.К. удостоверяю
Менеджер [illegible] А.Н.
Дозор[illegible]