

ОТЗЫВ

На автореферат диссертации **Крюковой Алёны Евгеньевны**
«Комбинированный подход к поиску распределений размеров сферических наночастиц по
данным малоуглового рентгеновского рассеяния»,
представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук
по специальности 1.3.8 – «Физика конденсированного состояния»

Малоугловое рассеяние позволяет определять структурные параметры наносистем, изучая макроскопические количества вещества неразрушающим путем. Тем самым удается эффективно усреднять получаемые параметры по ансамблю наночастиц и характеризовать усредненные особенности изучаемого объекта, в частности средний размер и параметры распределения по размерам для полидисперсных систем. Однако, решение задачи восстановления распределения по размерам по кривой рассеяния является принципиально неоднозначным и модельно-зависимым, чувствительным к качеству исходных экспериментальных данных. Поэтому задачи разработки новых подходов к поиску распределений по размерам и исследования устойчивости получаемых решений в зависимости от используемых алгоритмов и характеристик исходных данных являются актуальными.

В диссертации Крюковой Алёны Евгеньевны проведено систематическое исследование на устойчивость алгоритма минимизации, реализованного в программе Mixture, выявлено влияние на устойчивость уровня шума в экспериментальных данных, показано, что для получения устойчивого решения важно использовать достаточно хорошее стартовое приближение. Для получения приемлемого стартового приближения в диссертации предложен подход, основанный на совместном использовании нескольких различных алгоритмов поиска решений, и предложена схема оптимальной последовательности использования данных алгоритмов. На примере обработки результатов малоуглового рассеяния двухкомпонентного раствора кремнезоля проанализирована устойчивость получаемых параметров полидисперсного распределения в зависимости от алгоритма минимизации расхождения экспериментальных данных с расчетом. Предложен новый комбинированный метод поиска решения, состоящий в последовательном использовании квазиньютоновского градиентного метода и метода моделирования отжига. Показано, что предложенный метод обладает наиболее широкой областью устойчивости решения по сравнению с другими использованными методами минимизации.

Несмотря на высокий уровень представленной работы, к автореферату имеются следующие замечания:

1. Положения на защиту сформулированы не в форме утверждений, что не позволяет их «защитить» или опровергнуть.
2. В автореферате утверждается, что при добавлении к данным пуассоновского шума величиной 25% происходит расширение диапазона сходимости решения, но не приведены какие-либо объяснения данному явлению. В частности, полезно было

бы исследовать, как диапазон сходимости изменяется по мере роста величины шума.

3. Сложно воспринять, насколько велики диапазоны изменений величин на рисунках 5 и 7, поскольку координатные оси приведены в абсолютных единицах. Возможно, удобнее было бы выразить координаты в процентах от истинной величины.

Замечания не носят принципиального характера и не уменьшают высокой оценки работы. Диссертационная работа Крюковой Алёны Евгеньевны «Комбинированный подход к поиску распределений размеров сферических наночастиц по данным малоуглового рентгеновского рассеяния» полностью соответствует критериям раздела II Положения «О порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24 сентября 2013 года, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а ее автор Крюкова А.Е. заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – «Физика конденсированного состояния»

Согласен на обработку моих персональных данных.

дата 21.09.2022 **Велигжанин Алексей Александрович,**

кандидат физ.-мат. наук,
(специальность 01.04.01. – Приборы и методы экспериментальной физики)

Начальник отдела синхротронных экспериментальных станций
Курчатовского комплекса синхротронно-нейтронных исследований

НИЦ «Курчатовский институт»

(Адрес: 123182, г. Москва, пл. ак. И.В. Курчатова, д.1,
тел. 8-499-196-72-63, e-mail: veligzhanin_aa@nrcki.ru)

Подпись Велигжанина А.А. заверяю
Первый заместитель директора Центра по науке



Ю.А. Дьякова