

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Крюковой А. Е. «КОМБИНИРОВАННЫЙ ПОДХОД К ПОИСКУ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ РАЗМЕРОВ СФЕРИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ ПО ДАННЫМ МАЛОУГЛОВОГО РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЙНИЯ», представленной к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. – физика конденсированного состояния

Развитие методик для изучения объектов методом малоуглового рассеяния (МУР) является важной и актуальной задачей, так как метод МУР является одним из самых универсальных и информативных методов, позволяющих исследовать монодисперсные, полидисперсные и произвольные конденсированные системы в широком диапазоне частиц от 1 до 200 нм, при этом не требуя специальной подготовки образца. В работе показаны преимущества нового предложенного автором подхода для поиска распределений частиц по размерам перед ранее разработанными методами, которые используются при обработке данных МУР. Кроме того, в работе впервые проведены систематические исследования на устойчивость восстановления решений.

К основным результатам можно отнести следующее:

1. Впервые проведено систематическое исследование устойчивости решений задачи поиска размерных распределений наночастиц как на примере модельных систем, так и на примере реальных экспериментальных данных. Определены диапазоны устойчивости при изменении одного из стартовых параметров, а также двумерные карты сходимости к правильному решению в зависимости от стартовых значений, позволяющие наглядно проанализировать эффективность оптимизационных методов. При этом важно отметить, чтобы параметры системы были известны заранее, что позволило понять попадает ли решение в глобальный минимум.
2. В результате исследований предложен метод поиска распределений частиц по размерам с повышенной областью устойчивости. Такой подход включает в себя анализ методами регуляризации, прямого поиска гистограммы и в виде суперпозиции гладких аналитических функций, а также сочетание двух минимизационных методов – квазиньютоновского метода в варианте Бройдена-Флетчера-Голдфарба-Шанно и метода моделирования отжига.
3. Эффективность подхода по поиску распределений частиц по размерам с расширенной областью устойчивости продемонстрирована на данных малоуглового рентгеновского рассеяния от растворов кремнезоля и системы наночастиц оксида цинка.
4. Установлена зависимость поиска решения от вида шума в данных малоуглового рассеяния. Сделан вывод, что добавление пуассоновского шума к данным малоуглового рассеяния увеличивает диапазоны сходимости к правильному решению, в то время как наличие гауссовского шума, наоборот, диапазон сходимости сужает.

По содержанию автореферата есть замечание: в главах 2 и 4 проведены систематические исследования на устойчивость, при которых значений только двух

стартовых параметров варьировались в некотором диапазоне, а остальные фиксировались. Но остается неясным, сохранится ли устойчивость при варьировании всех возможных параметров. Кроме того, на мой взгляд, в автореферате приведены слишком мелкие подписи к некоторым рисункам, затрудняющие восприятие материала, а также присутствует небольшое количество опечаток. Однако, указанные замечания не снижают общее положительное впечатление от работы.

Диссертационная работа А.Е. Крюковой представляет собой законченную научную исследовательскую работу, соответствующую всем критериям и требованиям по актуальности, научной новизне и практической значимости раздела 2 положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года №842, а ее автор, Крюкова Алёна Евгеньевна, заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния.

Отзыв составил:

Заместитель директора Института физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН по научной работе (119071, Москва, Ленинский проспект, 31, корп. 4),
д.ф.-м.н, доцент, БАТИЦЕВ ОЛЕГ ВЯЧЕСЛАВОВИЧ

тел: +7-916-636-05-38, email: olegbati@mail.ru

Дата: 04.10.2022

Согласен на обработку персональных данных

