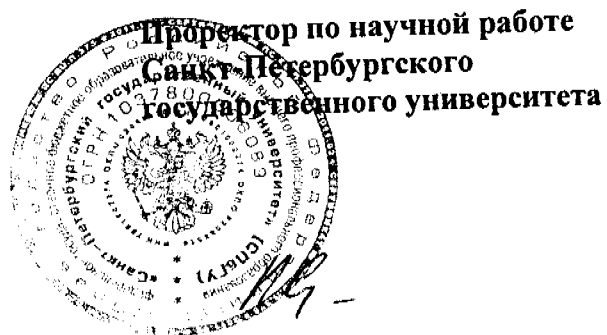


«Утверждаю»



12.12.2017

Скворцов Николай Генрихович

**Отзыв**

ведущей организации «Санкт-Петербургский государственный университет»  
на диссертацию

Захарова Дениса Дмитриевича

«РАЗРАБОТКА МОДЕЛЕЙ И ПРОГРАММНОЙ СРЕДЫ ДЛЯ РЕШЕНИЯ  
КОЛЛИМАЦИОННОЙ ЗАДАЧИ АНИЗОТРОПНОГО МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ»,  
представленную на соискание ученой степени кандидата технических наук по  
специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и  
комплексы программ» в диссертационный совет Д 212.227.06 и выполненную на  
кафедре физики НИУ ИТМО

Работа Захарова Д.Д. посвящена решению обратной коллимационной задачи анизотропного рентгеновского рассеяния. Разработаны методы численного решения интегрального уравнения, к которому сводится указанная задача. Разработана программная среда для настройки полученных методов и автоматического решения задачи.

Решаемая проблема имеет большую практическую значимость. Для исследования надатомной структуры объектов размером порядка 1 – 100 нм применяют малоугловое рентгеновское рассеяние. При этом для повышения световой силы установки используют щелевые источники и детекторы. Однако теория дифракции построена для системы точечный пучок – двухкоординатный детектор, в связи с чем возникает задача численного пересчёта интенсивности рассеяния. Для изотропных объектов в научной литературе было предложено множество удовлетворительных алгоритмов решения задачи, в то время как для анизотропных проблема оставалась нерешённой до настоящей работы.

Научная новизна работы состоит в том, что впервые не только поставлена, но и эффективно решена обратная коллимационная задача для анизотропного малоуглового рентгеновского рассеяния. Диссертант существенно модифицировал два имеющихся метода решения основного интегрального уравнения (метод Фридмана и метод базисных функций), связывающего «точечную» (без коллимационных искажений) и экспериментальную интенсивности рассеяния. Модификации были произведены с учётом особенностей анизотропного рассеяния. В результате, диссертанту удалось разработать эффективный подход и представить алгоритм решения обратной коллимационной задачи, что, несомненно, является актуальным как с научной, так и с практической точки зрения.

Реализована программная среда, позволяющая выполнять необходимые трудоёмкие математические преобразования, а также производить настройку разработанных алгоритмов.

Достоверность основных положений и выводов работы подтверждается использованием двух альтернативных методов численного решения обратной коллимационной задачи и сравнением их точности, а также сравнением результатов численного моделирования с экспериментальными результатами малоуглового рентгеновского рассеяния на плёнке из высокоориентированного полиэтилена.

Диссертационная работа состоит из введения, шести глав, заключения, списка использованной литературы (92 позиции), списка опубликованных работ, приложения с программным кодом. Общий объём диссертации – 105 страниц.

Во введении описывается задача и обосновывается её актуальность.

Первая глава содержит аналитический обзор существующих методов решения обратной коллимационной задачи в случае изотропных рассеивающих объектов. Особенно подробно рассматриваются итерационный метод Фридмана и метод разложения по базисным функциям, которые в дальнейшем модифицируются.

Во второй главе приведена математическая постановка задачи с описанием используемого типа рентгеновской камеры. Приведён вывод интегрального уравнения, связывающего «точечную» и экспериментальную интенсивности рассеяния на анизотропных объектах. Описаны предложенные модификации метода базисных функций и метода Фридмана для решения обратной коллимационной задачи анизотропного рентгеновского рассеяния. Модификация метода базисных функций основывается на учёте физических особенностей задачи и представляет собой добавление специальных штрафных функций в оценочную функцию метода наименьших квадратов. Модификация метода Фридмана позволяет учитывать нелокальную связь между «точечной» и

экспериментальной интенсивностями рассеяния, вводя весовую функцию в уравнение итераций.

Третья, четвёртая и пятая главы посвящены проверке разработанных методов на различных модельных и экспериментальных интенсивностях рассеяния. Рассмотрено несколько различных моделей объектов, дающих принципиально различные интенсивности рассеяния. Продемонстрирована высокая точность восстановления «точечных» интенсивностей по экспериментальным. Для интенсивности рассеяния на образце из высокоориентированного полиэтилена произведён численный пересчёт обоими методами и показана качественная схожесть результатов. Количественно результаты разнятся приблизительно на 20%, что объясняется погрешностью в экспериментальных данных и недостаточным количеством измеренных индикатрис рассеяния.

Шестая глава описывает структуру построенной программной среды, предназначенной для автоматического решения обратной коллимационной задачи. Представлены ключевые проблемы, возникшие в процессе разработки, и использованные способы их решения.

В диссертационной работе впервые предложены методы учета коллимационных искажений для интенсивностей, полученных на анизотропных объектах. Разработанные методы могут быть использованы и для решения других некорректных задач, связанных с решением интегральных уравнений.

Диссертация обсуждена на семинаре кафедры вычислительной физики 25.11.2011 г.

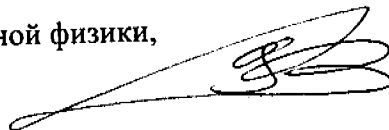
В работе присутствует ряд недостатков.

1. Использование термина "коллимационные поправки" некорректно, так как отличия распределений интенсивностей не являются малыми, и правильнее было бы говорить о решении обратной коллимационной задачи.
2. Для оценки результативности методов используется норма из пространства квадратично интегрируемых функций, однако как минимум для оценки расхождения полученной «точечной» интенсивности следует учитывать, что координаты  $\theta$ ,  $\varphi$  являются полярными.
3. Описанное в пятой главе расхождение в 20% является интегральным и не является показательным. Требуется анализ того, насколько различаются физические характеристики объекта, извлекаемые из полученной интенсивности.
4. Шестая глава описывает инструмент проведения численных вычислений, и её логичней было поместить перед описанием результатов, приведённых в третьей, четвёртой и пятой главах.

Отмеченные недостатки не умаляют ценности проведённой работы. Диссертация Д.Д.Захарова удовлетворяет требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а сам диссертант заслуживает степени кандидата технических наук.

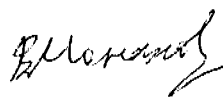
Отзыв составили:

Доктор физико-математических наук,  
заведующий кафедрой вычислительной физики,  
профессор



С.Л.Яковлев

Кандидат физико-математических наук,  
доцент кафедры вычислительной физики



В.В.Монахов