

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«НОВОСИБИРСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Физический факультет

Актуальные направления исследований
с использованием синхротронного излучения

РЕФЕРАТ

**ОБЗОР ПРИМЕНЕНИЯ
МЕТОДОВ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА
НА ИСТОЧНИКАХ СИНХРОТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ**

Выполнил:

студент ФФ НГУ гр. 24373

Вячеслав Васильевич Федоров

Проверил:

доцент, д.ф.-м.н.

Ян Витаутасович Зубавичус

Оценка: _____

Новосибирск 2026

Оглавление

ВВЕДЕНИЕ	2
1 НАСТРОЙКА УСКОРИТЕЛЯ: ОТ КЛАССИЧЕСКИХ МЕТОДОВ К МЕТОДАМ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ	5
2 РОЛЬ ИИ В ЭКСПЕРИМЕНТАХ НА ИСТОЧНИКАХ СИ	8
3 ДИФРАКЦИЯ: КЛАССИФИКАЦИЯ И АВТОМАТИЗАЦИЯ	10
4 СПЕКТРОСКОПИЯ: АДАПТИВНЫЙ СБОР ДАННЫХ И ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ	13
5 ТОМОГРАФИЯ: БЫСТРАЯ РЕКОНСТРУКЦИЯ И РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ В РЕАЛЬНОМ ВРЕМЕНИ	17
6 ИНТЕГРАЦИЯ ИИ В ЦИКЛ ЭКСПЕРИМЕНТА НА ИСТОЧНИКАХ СИ	20
ЗАКЛЮЧЕНИЕ И ПЕРСПЕКТИВЫ ДЛЯ СКИФ	21
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ	23

ВВЕДЕНИЕ

Синхротронное, или магнитотормозное, излучение (СИ) — излучение электромагнитных волн релятивистскими заряженными частицами, движущимися по криволинейной траектории. СИ применяется в ряде физических экспериментах за счет своих специфичных свойств: широкий спектральный диапазон (от инфракрасной до рентгеновской области), узкоколлимированность, обеспечивающая высокую яркость источника СИ, большая мощность и поляризация.

Наиболее ярким источником синхротронного излучения является накопительное кольцо (СКИФ, NSLS-II, MAX IV, ESRF-EBD и др.), способное удерживать пучок заряженных частиц в квазикруговой орбите в течение многих часов (см. рис. 1). Мощность излучения заряженной частицы обратно пропорциональна четвертой степени её массы, поэтому относительно тяжёлые частицы (протоны, ионы и др.) излучают ничтожно мало синхротронного излучения по сравнению с электронами. Таким образом, все практически значимые источники синхротронного излучения работают в основном на электронах, либо на позитронах.

Также особый вклад в увеличение яркости внесли вигглеры и ондуляторы — системы магнитных полюсов. Создающие знакопеременное поле на пути движения электронного пучка. Так вместо излучения от одного магнита, в вигглерах излучение суммируется по полюсам, в ондуляторах же суммируется поле излучения по полюсам, то есть излучение одного электрона в ондуляторах когерентно.

Рентгеновские фотоны используются в качестве инструмента диагностической визуализации с тех пор, как Вильгельм Конрад Рентген сделал знаменитый снимок руки своей жены в 1895 году. С того времени произошло значительное развитие технологий в области детекторов рентгеновского излучения, контрастного усиления, позиционирования пациента и новых методов обработки данных для создания трехмерных изображений.

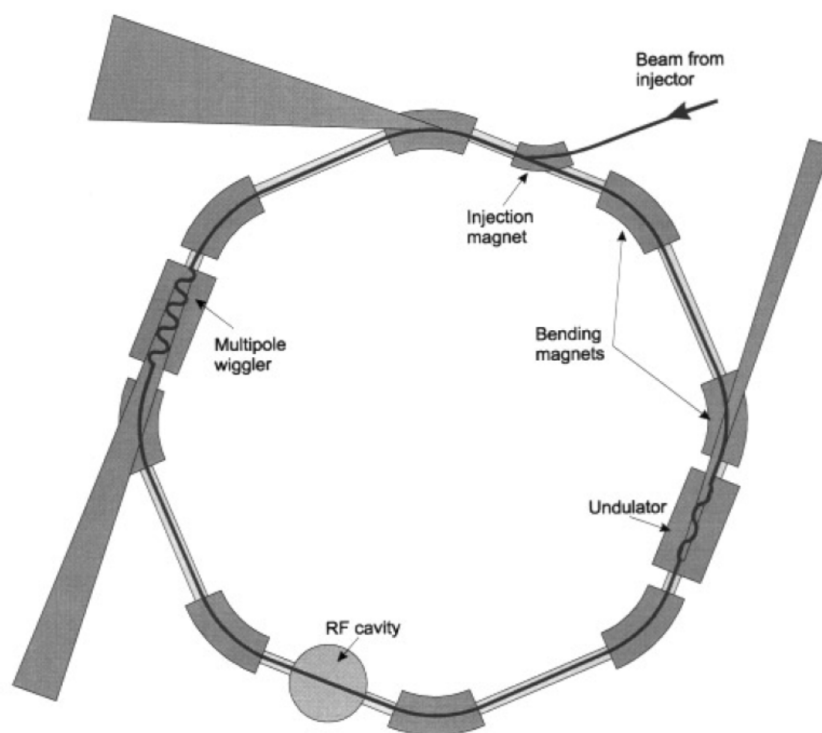


Рис. 1: Общая схема источника СИ

Современные источники синхротронного излучения четвертого поколения, такие как СКИФ (Сибирский кольцевой источник фотонов), могут генерировать эксабайтные объемы экспериментальных данных. Традиционные методы обработки и управления экспериментами не масштабируются к такой нагрузке, создавая «бутылочное горлышко» между сбором данных и получением научного результата.

Цель реферата — рассмотреть применение методов машинного обучения (ML), глубокого обучения (DL) и больших языковых моделей (LLM) в задачах синхротронных и ускорительных комплексов с акцентом на возможные практические сценарии для ЦКП "СКИФ" и инфраструктуры ИЯФ СО РАН. Обзор опирается на публикации и доклады 2018–2026 гг. (arXiv, Google Scholar, профильные журналы и материалы ускорительных семинаров). В работе рассматриваются следующие ключевые направления:

- Настройка и оптимизация параметров ускорителя (орбита, оптика, устойчивость пучка, сложная многопараметрическая оптимизация);
- Анализ дифракционных паттернов и автоматизация экспериментов;
- Спектроскопия с адаптивным сбором данных;

- Томография с быстрой реконструкцией;
- Интеграция LLM-ассистентов и агентных контуров в рабочий цикл эксперимента.

Актуальность темы определяется не только ростом объема данных, но и усложнением управления ускорителями: возрастают требования к стабильности орбиты и эмиттанса, а традиционные подходы (ручная настройка, линейные методы коррекции) все чаще упираются в ограничения по скорости и устойчивости при нелинейной динамике.

Глава 1

НАСТРОЙКА УСКОРИТЕЛЯ: ОТ КЛАССИЧЕСКИХ МЕТОДОВ К МЕТОДАМ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Для современных ускорительных комплексов ключевой инженерной задачей остается поддержание стабильного пучка в условиях дрейфов оборудования, нелинейных эффектов и высокой размерности пространства управляющих параметров. На установках класса 4-го поколения это означает работу с тысячами магнитных элементов и необходимость регулярной перенастройки в ограниченное время.

Классические методы коррекции орбиты (SVD/MICADO и родственные линейные схемы) по-прежнему необходимы как надежный базовый метод. Однако в сложных режимах они часто уступают методам оптимизации на базе ИИ, особенно при выраженной нелинейности и неполной наблюдаемости состояния ускорителя.

Практические результаты последних лет показывают эффективность обучения с подкреплением (RL) для онлайн-коррекции орбиты. Для установки САFe II показано, что TD3-агент обеспечивает коррекцию до RMS-уровня менее 1 мм за десятки секунд, а также сохраняет работоспособность при существенных вариациях параметров магнитной системы [3]. Отдельно важен эффект transfer learning: модель, обученная в одной конфигурации, может переноситься на близкие режимы с минимальной донастройкой (см. рис. 1.1).

Для задач многокритериальной настройки инжектора и линака (эмиттанс, энергетический разброс, эксплуатационные ограничения) хорошо себя показывает Multiobjective Bayesian Optimization (МОВО). В ряде экспериментов МОВО достигал сопоставимого качества решения при существенно

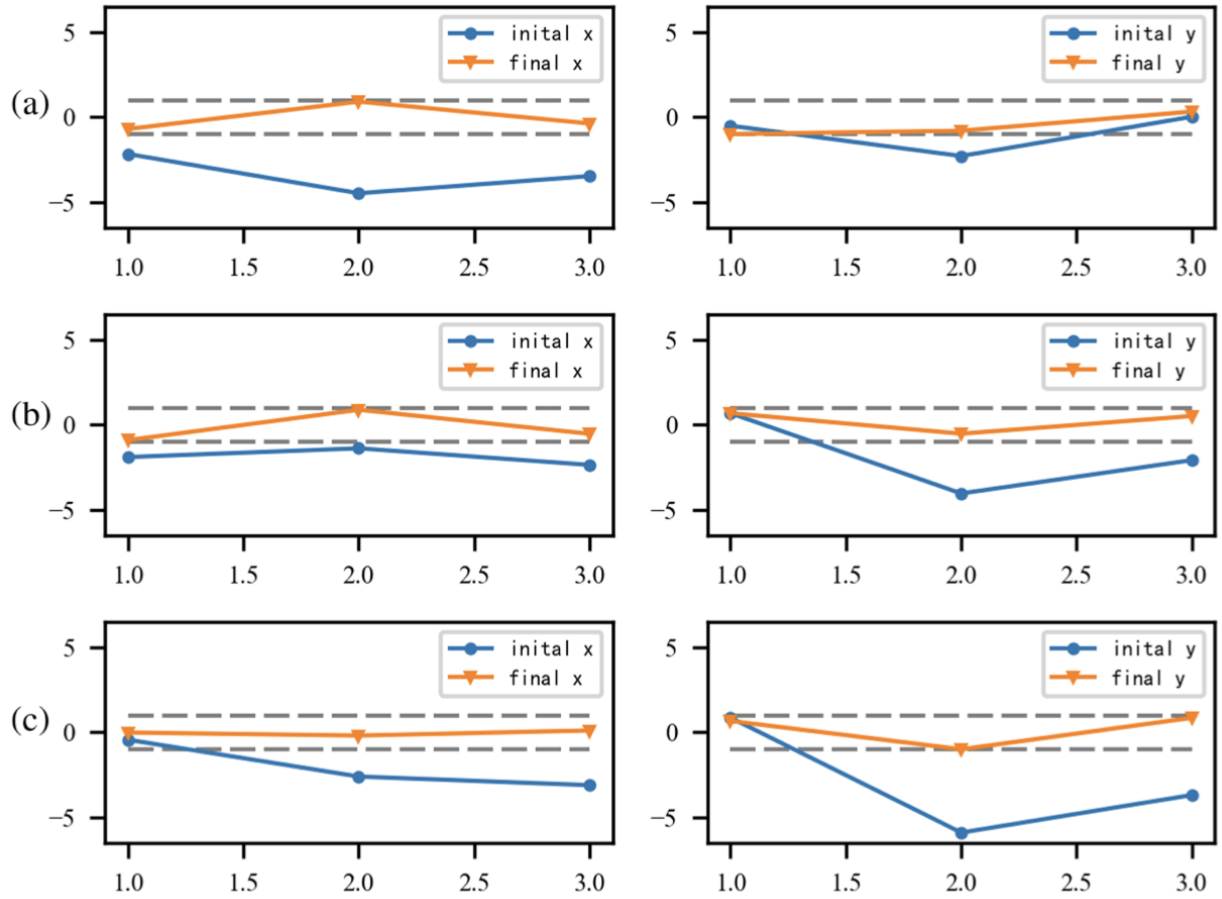


Рис. 1.1: Результаты работы агента TD3 на разных пучках. (а) Обучение с использованием $^{40}\text{Ca}^{13+}$ в симуляторе и применение к $^{40}\text{Ca}^{13+}$ на САFe II. (б) Обучение с использованием $^{55}\text{Mn}^{18+}$ в симуляторе и применение к $^{40}\text{Ca}^{13+}$ на САFe II. (с) Обучение с использованием $^{55}\text{Mn}^{18+}$ в симуляторе и применение к протону на САFe II. Серая пунктирная линия обозначает, что показания BPM равны 1 или 1 мм.

меньшем числе измерений по сравнению с эволюционными алгоритмами, что критично для дорогих онлайн-экспериментов [4].

Методы DL используются как быстрые суррогатные модели: прогноз дрейфов параметров во времени и поддержка предиктивной коррекции. Для SSRF показана работоспособность нейросетевого closed-orbit feedback как дополнения к классическим алгоритмам, а не их полной замены [5].

Отдельное направление — интеграция LLM в контур операторской поддержки. На текущем этапе это прежде всего интеллектуальный помощник: формулировка гипотез, генерация сценариев настройки, анализ логов и подготовка отчетов. В работах по концепции ИИ ученого и в прикладных обсуждениях для СКИФ подчеркивается, что внедрение таких систем возможно только вместе с защитными механизмами: формальными ограничениями, валидацией действий и разделением сред исполнения [21, 22].

Критическим условием внедрения ML/DL/LLM остается инфраструктура: цифровой двойник для безопасного обучения, единый программный контракт (API) к симулятору и оборудованию, а также связка с промышленными системами управления (например, EPICS/TANGO). Для СКИФ это означает приоритет программных платформ наподобие программных фреймворков SCAUT [24] и BlueSky [23], позволяющих сократить sim-to-real разрыв и обеспечить воспроизводимую интеграцию новых алгоритмов в сложных экспериментах.

Глава 2

РОЛЬ ИИ В ЭКСПЕРИМЕНТАХ НА ИСТОЧНИКАХ СИ

Современные синхротронные источники, включая ESRF, APS и SPring-8, дают высокоинтенсивные пучки и, как следствие, большие потоки экспериментальных данных. Ручная обработка таких массивов становится узким местом данных установок. Поэтому ИИ, включая методы классического машинного и глубокого обучения, используется как практический инструмент для ускорения анализа данных, предсказаний, и поддержки принятия решений в эксперименте, вплоть до полной автоматизации всего процесса эксперимента.

Например, при μ -XRD образец сканируется по сетке из десятков тысяч точек, и в каждой точке формируется двумерный дифракционный паттерн [1]. Ручной анализ такого объема данных происходит очень долго и практически невозможен. Convolutional Neural Network ИИ модели (CNN) позволяют автоматизировать классификацию паттернов и ускорить построение карт фазового состава [2].

Вторая важная область — работа со слабыми сигналами. При исследованиях чувствительных образцов полезный сигнал нередко сопоставим с шумом, и любая классическая фильтрация может исказить данные. Для денойзинга SAXS/WAXS-изображений применяют архитектуры U-Net ¹ [9, 12]; это позволяет сокращать время экспозиции и при этом сохранять информативность данных [9]. Аналогичные подходы используют для XRF-карт [15] и спектров XANES.

Третье направление — ускорение реконструкции. Для методов вроде CDI

¹U-Net — нейросеть кодер-декодер архитектуры представленный в 2015 году для сегментации медицинских снимков. Благодаря своей высокой точности и способности работать с малыми датасетами, U-Net стал одной из самых популярных нейросетей для семантической сегментации

и птихографии стандартные итерационные алгоритмы вычислительно затратны. Нейросетевые аппроксимации позволяют получать реконструкции заметно быстрее, вплоть до режимов, близких к реальному времени. Наиболее выраженный эффект достигается при вычислениях непосредственно на станции (edge-подход [7]).

ИИ также используется для автоматизации эксперимента: выбора параметров измерения, навигации по образцу и приоритизации наиболее информативных областей. Для XANES показана эффективность адаптивного выбора точек по энергии, что снижает риск недо- и пересэмплирования [8]. В сочетании с роботизированной подачей образцов это повышает пропускную способность станций, а анализ данных на лету делает эксперимент более управляемым [7].

Таблица 2.1: Проблемы и методы их решения с помощью ИИ

Проблема	Пример метода	Применение ИИ
Обработка больших объемов данных	μ -XRD, SAXS/WAXS, томография	Классификация паттернов, автоматическая навигация, картографирование [1]
Разрешение проблемы слабого сигнала	XANES, XRF, SAXS/WAXS	Подавление шума (denoising) с помощью CNN (U-Net), улучшение отношения сигнал/шум [9, 15]
Быстрая реконструкции	Ptychography, CDI	Замена итеративных алгоритмов более быстрыми нейросетевыми моделями (edge-подход) [7]
Автоматизация и оптимизация	XANES, высокопроизводительный скрининг	Адаптивный сбор данных, автономная навигация, обратная связь [8], ИИ-ученый [21, 22]

Перечисленные задачи и подходы задают общий контекст для рассмотрения конкретных применений ИИ в задачах СИ.

Глава 3

ДИФРАКЦИЯ: КЛАССИФИКАЦИЯ И АВТОМАТИЗАЦИЯ

Дифракционные методы (XRD, SAXS, WAXS) широко используются на синхротронных станциях для анализа структуры материалов. Применение ИИ в этой области охватывает классификацию паттернов, подавление шума и автоматизацию экспериментальных процедур.

Основная проблема в μ -XRD — обработка карт интенсивности, содержащих десятки тысяч паттернов. Ручной анализ в этом случае трудоемок и плохо масштабируется [1]. Модели машинного обучения позволяют автоматически классифицировать паттерны и строить карты фазового состава (см. рис. 3.1). Также обсуждаются подходы, где трансформерные архитектуры используются для предсказания структуры по дифракционным данным [2].

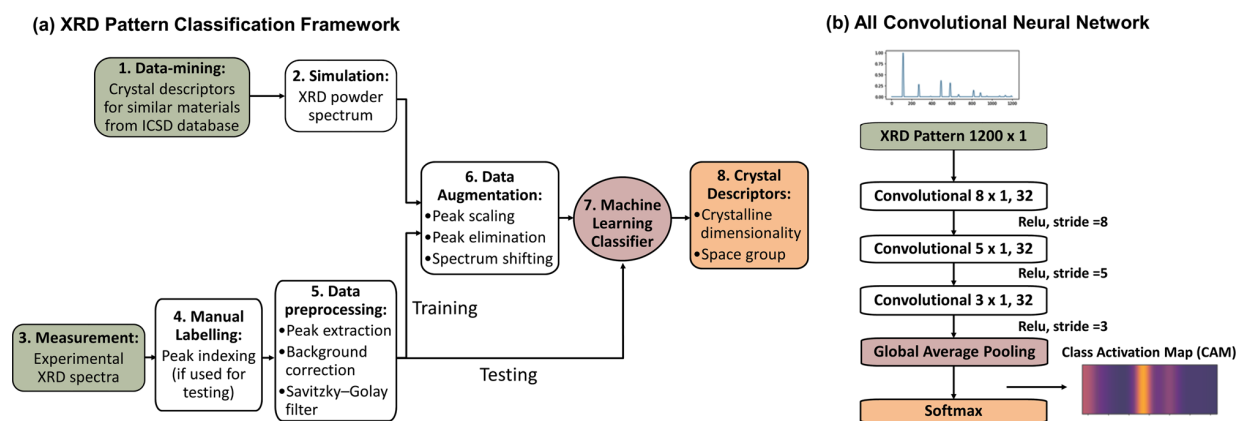


Рис. 3.1: Общая структура и архитектура CNN. а Схема системы классификации данных рентгеновской дифракции. б Схема наиболее эффективного алгоритма — полностью сверточной нейронной сети

В SAXS/WAXS ИИ применяют прежде всего для автоматической классификации двумерных паттернов рассеяния и ускоренного скрининга об-

разцов [11]. Дополнительно рассматриваются генеративные модели для синтетических данных, полезных при тестировании и сравнении алгоритмов обработки [10].

Отдельное направление — повышение качества данных. Для денойзинга SAXS/WAXS-изображений применяются сверточные сети, в том числе U-Net (см. рис. 3.2) [9, 12]. Это позволяет снижать дозу или сокращать время съемки при сопоставимом качестве результата. Также используются self-supervised схемы обучения, уменьшающие зависимость от идеально размеченных пар данных [19].

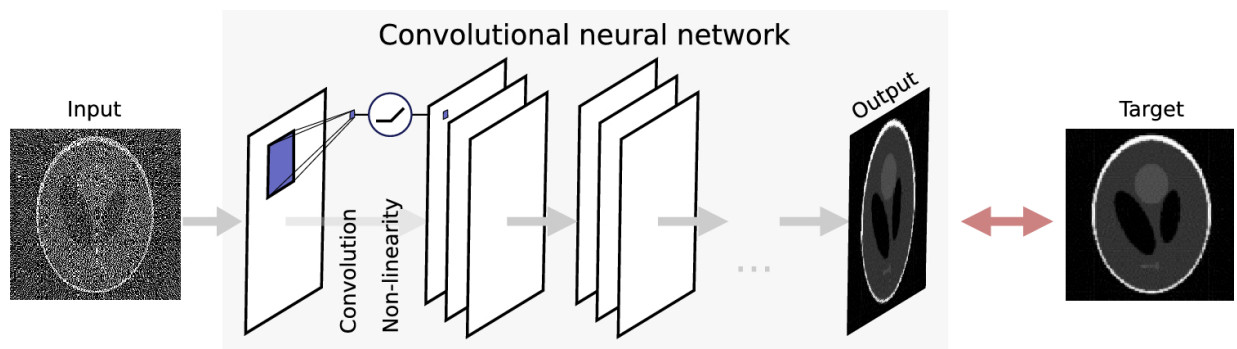


Рис. 3.2: Прототип свёрточной нейронной сети (СНС) с контролируемым обучением для шумоподавления. СНС состоит из нескольких слоёв. Для вычисления изображения на следующем слое изображения на предыдущем слое сверяются с помощью небольшого фильтра (показан синим), после чего применяется нелинейная функция. Чтобы обучить СНС шумоподавлению, выходное изображение сравнивается с целевым изображением, после чего сверточные фильтры соответствующим образом корректируются.

ИИ также используется для автоматизации экспериментальных процедур: навигации по образцу, выбора областей интереса и оперативной корректировки стратегии сканирования (см. рис. 3.3) [7]. В сочетании с роботизированной подготовкой и сменой образцов это повышает пропускную способность экспериментов.

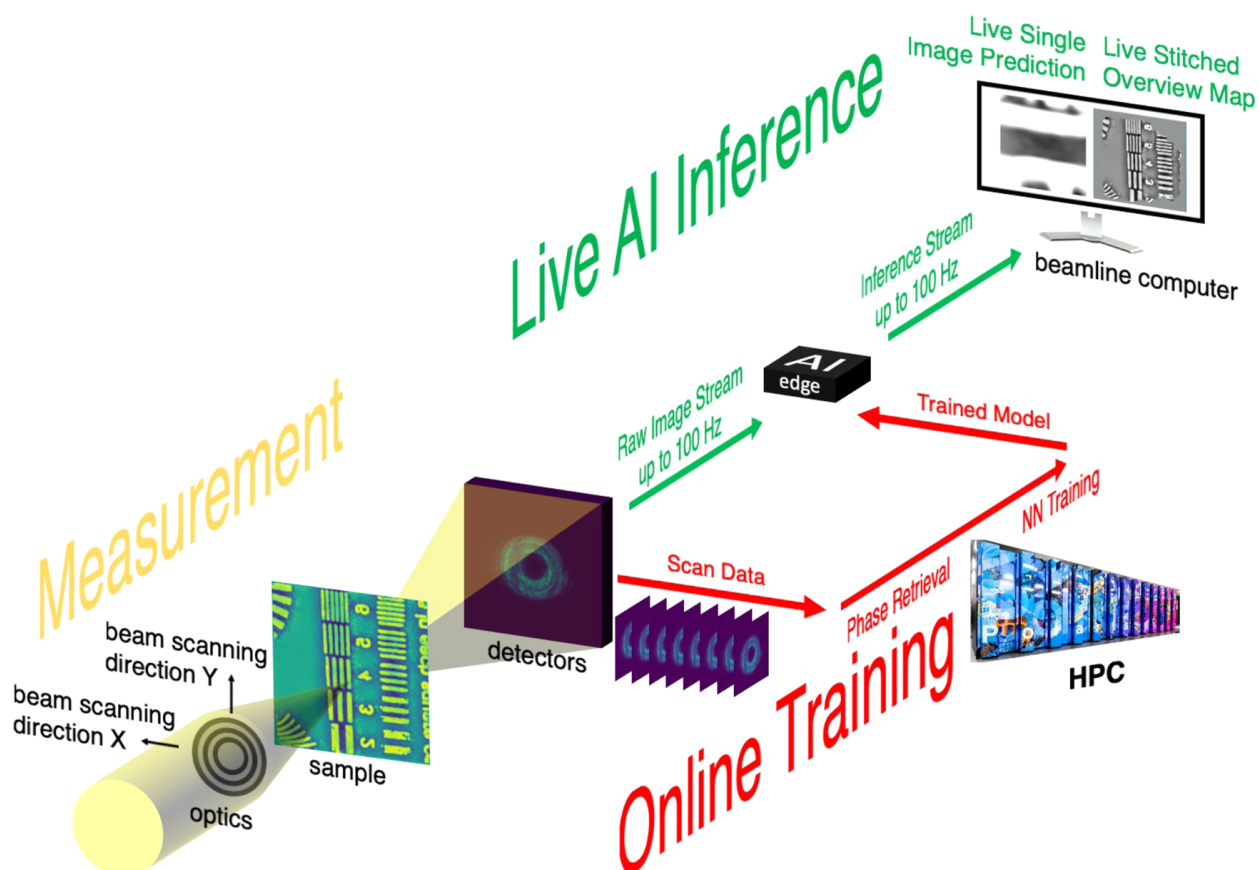


Рис. 3.3: Иллюстрация рабочего процесса с использованием искусственного интеллекта для потоковой визуализации птихографии в режиме реального времени.

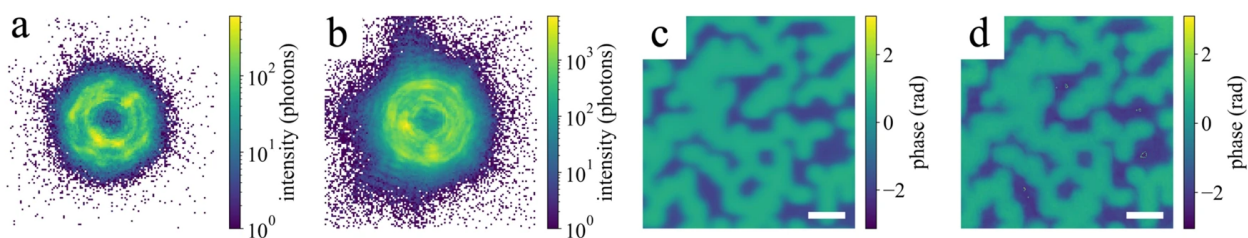


Рис. 3.4: а. Пример дифракционной картины при птихографическом сканировании с временем экспозиции 0,5 мс. б. Пример дифракционной картины на обучающих данных с временем экспозиции 5 мс. в. Сшитая фаза, полученная с помощью ИИ, на наборе данных с низким количеством фотонов, показанном на (а), после увеличения экспериментальной интенсивности в 10 раз. г. Итеративно восстановленная фаза на наборе данных с низким количеством фотонов, показанном на (а). Масштаб — 500 нм.

Глава 4

СПЕКТРОСКОПИЯ: АДАПТИВНЫЙ СБОР ДАННЫХ И ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ

Методы XANES/EXAFS/XRF применяются для исследования валентного состояния и элементного состава материалов. В этих задачах ИИ прежде всего повышает эффективность сбора данных и ускоряет интерпретацию спектров.

Рентгеновская абсорбционная спектроскопия (X-ray Absorption Spectroscopy или просто XAS) охватывает два взаимодополняющих метода: XANES (X-ray Absorption Near Edge Structure) для анализа электронной структуры и EXAFS (Extended X-ray Absorption Fine Structure) для определения локальной атомной структуры. EXAFS основывается на интерференции фотоэлектронных волн и предоставляет количественную информацию о межатомных расстояниях, числе соседей и их типе. Это делает её особенно ценным инструментом, например, для исследования биметаллических нанокатализаторов [20] и др.

Наиболее практичное применение ИИ в спектроскопии — адаптивный сбор данных. В XANES вместо равномерной сетки по энергии можно динамически выбирать точки с наибольшей ожидаемой информативностью (см. рис. 4.1) [8]. Это сокращает время эксперимента и дозу без существенной потери качества спектра.

Вторая важная задача — интерпретация спектров. Модели машинного обучения позволяют ускорить классификацию и регрессионную оценку параметров, связанных с химическим состоянием материала. Перспективным направлением выглядит мультимодальный анализ, объединяющий XANES с дополнительными источниками информации [16].

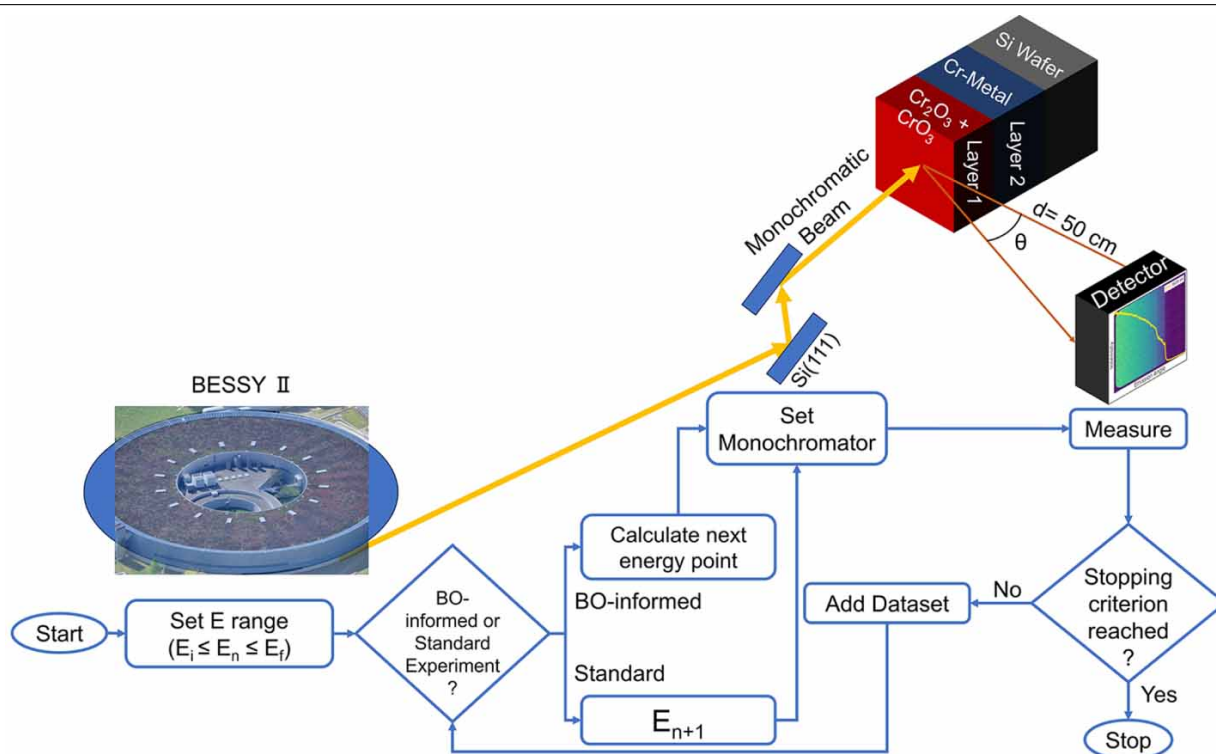


Рис. 4.1: Иллюстрация рабочего процесса с использованием искусственного интеллекта для потоковой визуализации птихографии в режиме реального времени.

В XRF (X-ray Fluorescence) ИИ используется для коррекции спектральных сдвигов и повышения стабильности количественного анализа [17]. Кроме того, методы ML применяются для разложения многокомпонентных карт и выделения локальных особенностей элементного состава (см. рис. 4.2) [14]. Для практической реализации таких задач используются GPU-ориентированные инструменты, включая программный фреймворк nDТomo (см. рис. 4.3) [13].

На рис. 4.2 показано, что при попиксельном подходе к рентгеноструктурному анализу (синяя линия с ромбами) картирование участков размером в миллиметр заняло бы несколько лет, что явно нецелесообразно. В отличие от него, подход с использованием машинного обучения позволяет значительно сократить время (зеленая линия с треугольниками). При этом время, необходимое для сбора и анализа данных, первоначального обучения нейронной сети и минералогического картирования образцов, вполне приемлемо для широкого спектра областей. Таким образом, общее время, необходимое для применения уже обученной нейросети (линия с красным кружком), можно просто рассчитать. Например, время, необходимое для

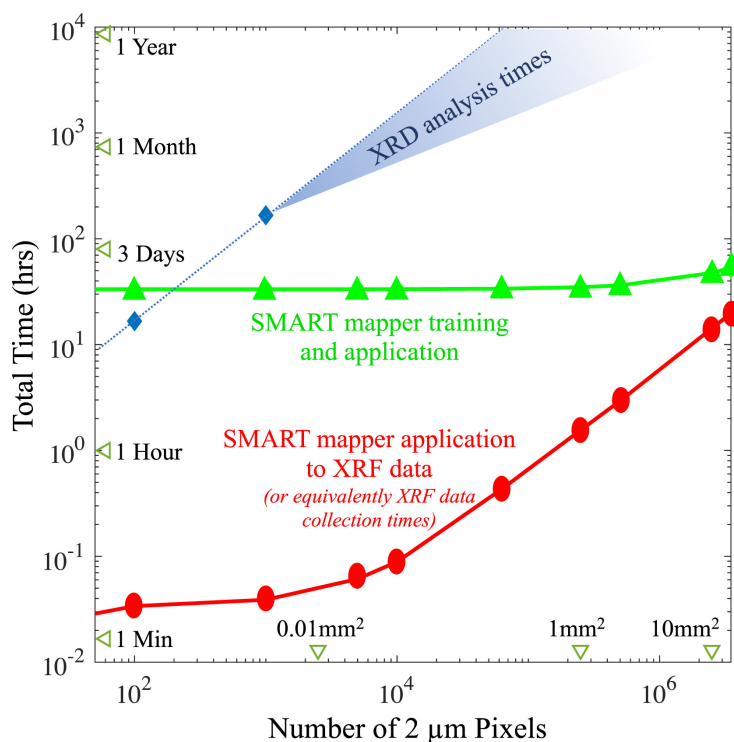


Рис. 4.2: График зависимости времени от количества пикселей (или площади) для приложения ИИ с обучением (зеленые треугольники), прямого применения ИИ к данным рентгенофлуоресцентного анализа (красные круги) и гипотетического попиксельного подхода (синие ромбы).

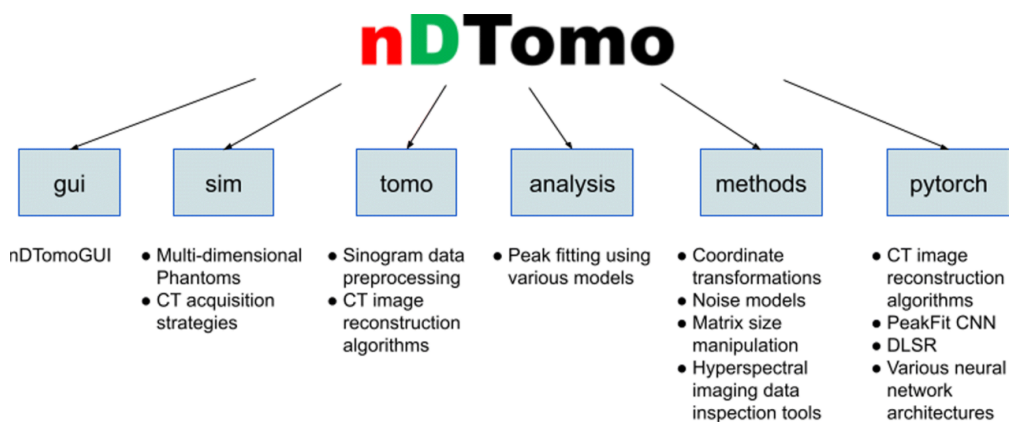


Рис. 4.3: Обзор структуры и содержимого модуля nDTomo.

обучения и применения ИИ для составления минералогической карты площадью 10 мм^2 с разрешением 2 мкм ($2\,500\,000$ пикселей), составляет приблизительно 52 часа, что составляет 2 часа, необходимых для сбора данных $\mu\text{-XRF}$ $\mu\text{-XRD}$ с небольшой площади, и 33 часа для последующего анализа данных (т.е. сопоставление рентгеновских пиков и извлечение рентгенофлуоресцентных данных) и 17 часов для сбора рентгенофлуоресцентных данных с площади 10 мм^2 . В случае масштабирования или непосредственного применения обученного картографа не нужно заново учитывать 33 часа на анализ данных, и общее время сокращается до 17 часов на сбор данных для картографирования новой области размером 10 мм^2 .

В целом ИИ в спектроскопии постепенно переносится из этапа постобработки в онлайн-контур эксперимента: от предварительной обработки до автоматизированной калибровки и оперативного анализа. Для установок класса СКИФ это особенно важно из-за высокой скорости накопления данных.

Важным направлением развития синхротронной спектроскопии (в частности, EXAFS) является переход от традиционных статических измерений к *in situ* (в рабочих условиях) и *operando* (с одновременным измерением каталитической активности) подходам. Это позволяет наблюдать в реальном времени структурные превращения активных центров, устанавливать прямые корреляции между пространственными параметрами наночастиц и их активностью, а также исследовать механизмы дезактивации.

Глава 5

ТОМОГРАФИЯ: БЫСТРАЯ РЕКОНСТРУКЦИЯ И РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ В РЕАЛЬНОМ ВРЕМЕНИ

Синхротронная томография, включая птихографию, дает высокое пространственное разрешение, но требует значительных вычислительных ресурсов и часто связана с дозовыми ограничениями. Поэтому ИИ здесь используется прежде всего для ускорения реконструкции и повышения качества изображений при неполных данных.

Одно из ключевых применений ИИ в томографии — уменьшение числа проекций. Нейросетевые методы позволяют восстанавливать приемлемое изображение по неполному набору углов, что сокращает время сканирования и снижает дозу. Примером такого подхода является Attentional Ptycho-Tomograph (АРТ) (см. рис. 5.1) [6].

Для низкодозовых режимов разрабатываются модели, устойчивые к сильному шуму и пропускам. В частности, подходы семейства PtyINR показывают хорошие результаты на симулированных и экспериментальных данных [18]. Дополнительно применяются методы денойзинга на базе U-Net (см. рис. 5.2) [19].

Для птихографии особенно важно сокращение задержки реконструкции. Подход *deep learning at the edge*, когда инференс выполняется на вычислителях станции, дает обратную связь, близкую к реальному времени [7]. Это позволяет оперативно корректировать параметры сканирования прямо во время эксперимента.

Перспективное направление — физически-информированные модели, в которых ограничения задачи задаются явно через известные физические соотношения. Такие подходы могут повысить устойчивость реконструкции

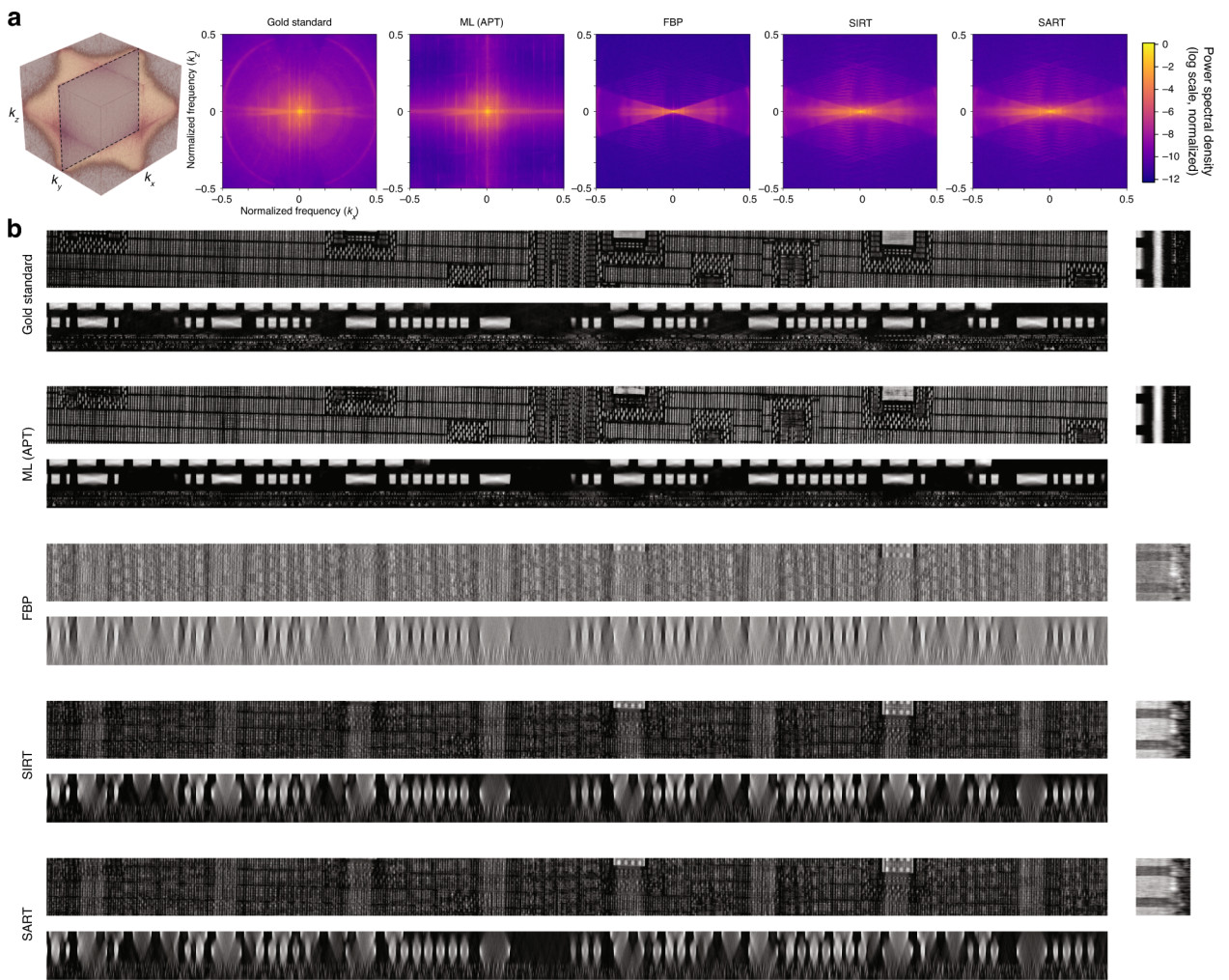


Рис. 5.1: (а) На рисунке качественно сравниваются трехмерные спектральные плотности мощностей реконструкций, полученных с помощью эталонного и базового методов реконструкции. В обоих методах — АРТ и базовом методе реконструкции (FBP, SIRT, SART). Только метод АРТ эффективно заполнил недостающие клинья. (б) Показаны и сопоставлены реконструкции, полученные с помощью эталонного и базового методов, в плоскостях xy , xz и yz

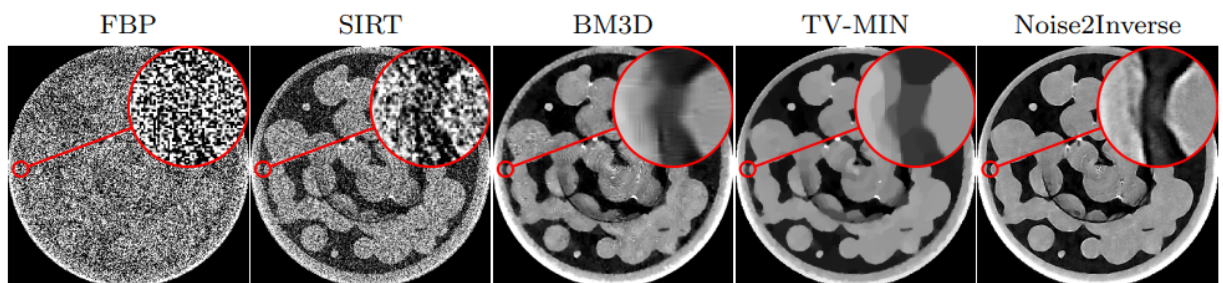


Рис. 5.2: Реконструкция цилиндра, содержащего стеклянные шарики, с использованием методов FBP, SIRT, BM3D, TV-MIN и предложенного метода Noise2Inverse. Красные вставки показывают увеличенное изображение результатов работы алгоритма.

и улучшить переносимость на новые данные. В эту же логику вписываются непрерывные представления изображения, используемые в PtyINR-подобных методах (см. рис. 5.3) [18].

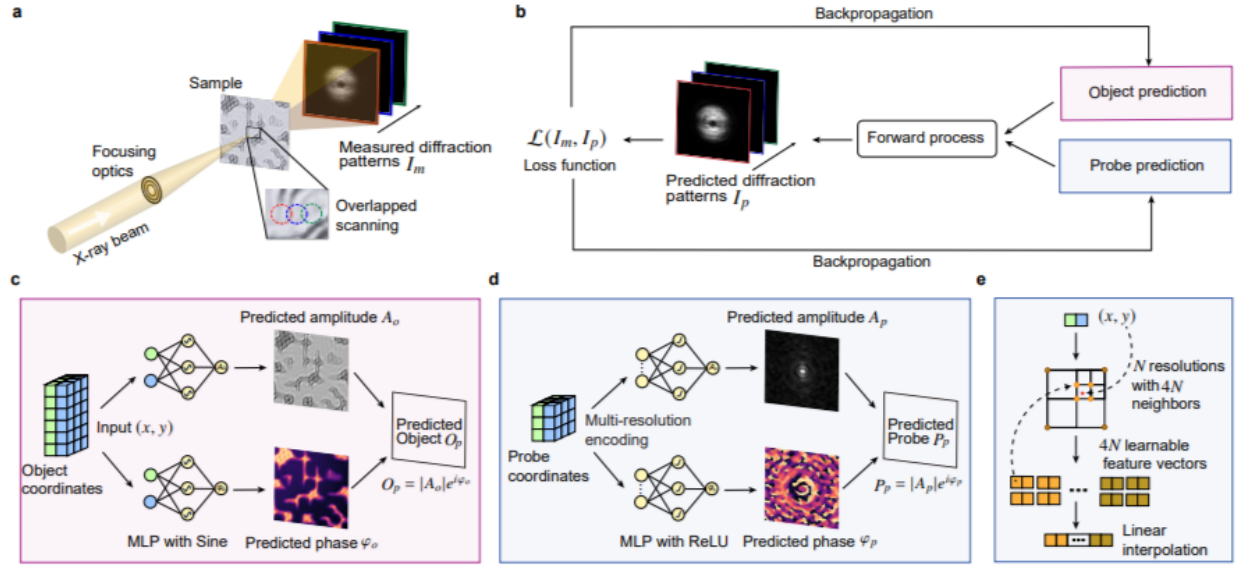


Рис. 5.3: Обзор фреймворка PtyINR для совместной реконструкции объекта и зонда в рентгеновской птихографии. (а) Схема установки для рентгеновской птихографии, в которой когерентные рентгеновские лучи фокусируются на образце с помощью зонной пластины или многослойной линзы Лауэ. Образец сканируется с перекрытием, и в каждой точке измеряются дифракционные картины I_m . (б) Конвейер, который совместно моделирует объект и зонд, минимизируя разницу между измеренными и спрогнозированными дифракционными картинами (I_m и I_p) с помощью обратного распространения ошибки. (с) Архитектура нейронной сети для прогнозирования объекта. Пространственные координаты объекта подаются на вход двух отдельных многослойных перцептронов (MLP) с функцией активации «синус» для прогнозирования амплитуды A_o и фазы φ_o , которые затем объединяются в прогнозируемый объект O_p . (д) Архитектура нейронной сети для прогнозирования зонда с использованием кодирования с несколькими разрешениями (е) и многослойных перцептронов с функцией активации ReLU для прогнозирования амплитуды A_p и фазы φ_p зонда P_p .

Глава 6

ИНТЕГРАЦИЯ ИИ В ЦИКЛ ЭКСПЕРИМЕНТА НА ИСТОЧНИКАХ СИ

ИИ постепенно интегрируется во весь цикл эксперимента: от планирования измерений до анализа данных в ходе съемки. На практике это приводит к появлению полуавтономных и даже полностью автономных рабочих контуров, где вычислительный модуль и оборудование станции работают в единой обратной связи.

Механизм этой интеграции — замкнутый контур: сбор данных, быстрый анализ, обновление параметров и повторный сбор. В ряде задач, например, X-ray reflectometry ¹ (XRR) контроль тонких пленок, такие контуры используются для оперативной корректировки параметров процесса на основе моделей машинного обучения.

Для будущих установок обсуждается развитие операндо-экспериментов с элементами цифрового двойника. В таком режиме модель не только интерпретирует данные, но и подсказывает изменение управляющих параметров (температуры, тока, экспозиции) в ходе эксперимента.

Одновременно большие языковые модели (LLM) и мультиагентные системы демонстрируют способность к автономному проведению исследований в специализированных областях, как показано в работах [21, 22] для области компьютерных наук и бизнеса. Однако их применение к задачам управления ускорителями и интерпретации рентгеновских данных остается фрагментарным.

¹Метод XRR базируется на эффекте полного внешнего отражения рентгеновских лучей на границе раздела двух сред. При угле падения лучей на границу раздела меньше критического — угла полного внешнего отражения, рентгеновские лучи зеркально отражаются, проникая при этом на 1–2 нм вглубь вещества. Для углов больших критического основной вклад в рефлектометрическую кривую даёт рассеяние на электронной плотности. Значение критического угла определяет величину электронной плотности конкретного образца.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ И ПЕРСПЕКТИВЫ ДЛЯ СКИФ

В реферате рассмотрены основные направления применения ИИ на современных синхротронных источниках: обработка больших массивов данных, денойзинг, ускоренная реконструкция и элементы автоматизации эксперимента.

Основные выводы работы:

1. В задачах настройки ускорителя ML/DL-подходы уже демонстрируют прикладную эффективность: RL и Bayesian optimization ускоряют выход в рабочий режим в сценариях, где классические линейные методы ограничены нелинейностью и размерностью пространства параметров.
2. В диагностических методах СИ (дифракция, спектроскопия, томография) ИИ стал практическим инструментом: автоматизация анализа, адаптивный сбор и ускоренная реконструкция повышают пропускную способность станций и снижают время до результата.
3. LLM и агентные схемы (AI Scientist) находятся на стадии proof-of-concept для ускорительной физики: их наибольшая ценность сегодня — поддержка оператора и научной работы, а не автономное управление критическими контурами.
4. Ключевое ограничение внедрения — инфраструктура. Для СКИФ приоритетны цифровые двойники, edge-вычисления, единые форматы данных и безопасная интеграция с EPICS/TANGO через воспроизводимые программные пайплайны.

В целом ИИ уже является рабочим инструментом как для экспериментальных станций, так и для задач ускорительной настройки. Для СКИФ целесообразно закладывать ИИ-инфраструктуру на этапе проектирования

рабочих процессов, а не добавлять ее постфактум. Это особенно важно для контуров с высокой ценой ошибки, где требуется сочетание скорости оптимизации и гарантированной физической корректности.

Для быстрого и точного проведения сканирования параметров при проведении экспериментов на СКИФ нужна связка роботизации и алгоритмов навигации по образцу, что приведет к сокращению доли «слепого» сканирования и приоритизация наиболее информативных областей.

Для операндо-исследований и ускорительной эксплуатации важно внедрять замкнутые контуры управления: онлайн-анализ и корректировка параметров установки в реальном времени. Для этого потребуются интеграция вычислительных узлов с системой управления станцией и единый протокол обмена данными между диагностикой, оптимизатором и управляющим ПО.

Для задач с жесткими требованиями по задержке (например, птихография) необходим edge-контур вычислений на самих станциях: GPU, локальный инференс и быстрый канал передачи результатов.

Стратегия работы с данными должна включать быструю классификацию, стандартизованные метаданные, первичную фильтрацию и сжатие. Это уменьшит нагрузку на хранилище и упростит последующий поиск и повторный анализ данных. Параллельно необходимо развивать гибридные контуры принятия решений (классические алгоритмы + ML + оператор), где роль LLM ограничена безопасной средой исполнения.

Литература

- [1] Zhao, Xiaodong, et al. Machine learning automated analysis of enormous synchrotron x-ray diffraction datasets // The Journal of Physical Chemistry C. — 2023. — Vol. 127, No. 31. — P. 15043-15053. — DOI: 10.1021/acs.jpcc.3c03572.
<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.jpcc.3c03572>
- [2] Oviedo, Felipe, et al. Fast and interpretable classification of small X-ray diffraction patterns using a convolutional neural network // npj Computational Materials. — 2019. — Vol. 5, No. 1. — Article 53. — DOI: 10.1038/s41524-019-0196-x.
<https://www.nature.com/articles/s41524-019-0196-x>
- [3] Chen, X., Jia, Y., Qi, X., et al. Orbit correction based on improved reinforcement learning algorithm // Physical Review Accelerators and Beams. — 2023. — Vol. 26. — 044601. — DOI: 10.1103/PhysRevAccelBeams.26.044601.
<https://journals.aps.org/prab/pdf/10.1103/PhysRevAccelBeams.26.044601>
- [4] Roussel, R., Hanuka, A., Edelen, A. Multiobjective Bayesian optimization for online accelerator tuning // Physical Review Accelerators and Beams. — 2021. — Vol. 24. — 062801. — DOI: 10.1103/PhysRevAccelBeams.24.062801.
<https://journals.aps.org/prab/pdf/10.1103/PhysRevAccelBeams.24.062801>
- [5] Li, R., Zhang, Q., Jiang, B., et al. Machine learning-based closed orbit feedback at SSRF // arXiv preprint arXiv:2212.01010. — 2021.
<https://arxiv.org/pdf/2212.01010>

- [6] Kang, H., Wu, Y. Attentional Ptycho-Tomography (APT) for three-dimensional nanoscale X-ray imaging with minimal data acquisition and computation time // *Light: Science & Applications*. — 2023. — Vol. 12, No. 1. — Article 132. — DOI: 10.1038/s41377-023-01181-8.
<https://www.nature.com/articles/s41377-023-01181-8>
- [7] Babu, Anakha V., et al. Deep learning at the edge enables real-time streaming ptychographic imaging // *Nature Communications*. — 2023. — Vol. 14, No. 1. — Article 7025. — DOI: 10.1038/s41467-023-41496-z.
<https://www.nature.com/articles/s41467-023-41496-z>
- [8] Cakir, B., et al. Machine learning for efficient grazing-exit x-ray absorption near edge structure spectroscopy analysis: Bayesian optimization approach // *Machine Learning: Science and Technology*. — 2024. — Vol. 5, No. 2. — Article 025037. — DOI: 10.1088/2632-2153/ad4253.
<https://iopscience.iop.org/article/10.1088/2632-2153/ad4253>
- [9] Zhou, Zhongzheng, et al. A machine learning model for textured X-ray scattering and diffraction image denoising. // *npj Computational Materials*. — 2023. — Vol. 9, No. 1. — Article 67. — DOI: 10.1038/s41524-023-01011-w.
<https://www.nature.com/articles/s41524-023-01011-w>
- [10] Piotr Tomaszewski, Shun Yu, Markus Borg, Jerk Rönnols. Machine Learning-Assisted Analysis of Small Angle X-ray Scattering // *arXiv preprint arXiv:2111.08645*. — 2021.
<https://arxiv.org/abs/2111.08645>
- [11] He H, Liu C, Liu H. Model Reconstruction from Small-Angle X-Ray Scattering Data Using Deep Learning Methods // *iScience*. — 2020. — Vol. 23, No. 12. — Article 101823. — DOI: 10.1016/j.isci.2020.101823.
[https://www.cell.com/iscience/fulltext/S2589-0042\(20\)30090-0](https://www.cell.com/iscience/fulltext/S2589-0042(20)30090-0)
- [12] Hendriksen, A., et al. Deep denoising for multi-dimensional synchrotron X-ray tomography without high-quality reference data // *Scientific Reports*. — 2021. — Vol. 11, No. 1. — Article 11847. — DOI: 10.1038/s41598-

021-91084-8.

<https://www.nature.com/articles/s41598-021-91084-8>

- [13] Vamvakeros, A., et al. nDTomo: a modular Python toolkit for X-ray chemical imaging and tomography // Digital Discovery. — 2025. — Vol. 4, No. 7. — P. 1234-1248. — DOI: 10.1039/D5DD00252D.
<https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2025/dd/d5dd00252d>
- [14] Kim, Julie J., et al. SMART mineral mapping: Synchrotron-based machine learning approach for 2D characterization with coupled micro XRF-XRD // Computers & Geosciences. — 2021. — Vol. 156. — Article 104890. — DOI: 10.1016/j.cageo.2021.104890.
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0098300421001904>
- [15] Shishkov, R., et al. Self-Supervised Deep-Learning Denoising for X-ray Fluorescence Microscopy with Multi-Element Detectors // Analytical Chemistry. — 2026. — Vol. 99, No. 11. — P. 8070-8080. — DOI: 10.1021/acs.analchem.5c05552.
<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.analchem.5c05552>
- [16] Tanaporn Na Narong., et al. Multimodal ML for XANES and functional group analysis // arXiv preprint arXiv: 2410.17467v1
<https://arxiv.org/html/2410.17467v1>
- [17] Kourousias, G., Billè, F., and Gianoncelli, A. (2017) Automated nonlinear alignment of XRF spectra.
<https://www.sci-hub.ru/10.1002/xrs.2725>
- [18] Tingyou Li., et al. Learning neural representations for X-ray ptychography reconstruction with unknown probes // arXiv preprint arXiv: 2509.04402
<https://arxiv.org/pdf/2509.04402>
- [19] Hendriksen, A., et al. Self-supervised denoising for synchrotron tomography using Noise2Inverse // arXiv preprint arXiv: 2001.11801
<https://arxiv.org/pdf/2001.11801>

- [20] Frenkel A. I. Applications of extended X-ray absorption fine-structure spectroscopy to studies of bimetallic nanoparticle catalysts / A. I. Frenkel // Chemical Society Reviews - 2012 - Vol. 41, iss. 24 - P. 8163-8188
<https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/22833100/>
- [21] Lu C. et al. The AI Scientist: Towards Fully Automated Open-Ended Scientific Discovery. // arXiv:2408.06292, 2024.
- [22] Fedorov, V., et al. Adapting the AI scientist for enterprise: solving real business problems with autonomous TEXT-to-SQL research. // Doklady Mathematics. Vol. 112. No. 2. Moscow: Pleiades Publishing, 2025
- [23] Smith W. et al. Status of Bluesky Deployment at BESSY II //Proc. ICALEPCS'21. – 2022. – С. 1064-1068.
<https://epaper.kek.jp/icalepcs2021/papers/frbr03.pdf>
- [24] Федоров, В. В. Создание программного комплекса для оркестрации ускорительных экспериментов / В. В. Федоров // Физика : Материалы 63-й Международной научной студенческой конференции, Новосибирск, 16–22 апреля 2025 года. – Новосибирск: Новосибирский национальный исследовательский государственный университет, 2025. – С. 225. – EDN SEDBUG.