

УТВЕРЖДАЮ



Проректор
по научной работе, к.ф.-м.н.

Баган Виталий
Анатолевич

2025 г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

федерального государственного автономного образовательного
учреждения высшего образования
«Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)»
(МФТИ, Физтех)

Диссертация «Развитие методов абсорбционной, флуоресцентной и рамановской спектроскопии с хемометрической обработкой данных для анализа жидких сред и аэрозолей» выполнена на кафедре нанометрологии и наноматериалов федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

В период подготовки диссертации с 2023 г. по настоящее время соискатель **Саакян Арам Ваганович** работает в ФГБУ «ВНИИОФИ» в должности инженера-программиста.

В 2021 г. Саакян А.В. окончил Ереванский государственный университет по направлению подготовки «Физика»: Ядерная физика и атомная энергетика. С 2021 г. по настоящее время обучается в очной аспирантуре МФТИ по направлению подготовки 12.06.01 Фотоника, приборостроение, оптические и биотехнические системы и технологии.

Кандидатский экзамен по «Истории и философии науки» сдан 16 мая 2024 года, кандидатский экзамен по «Иностранному языку» (английский) сдан 24 мая 2024 года, кандидатский экзамен по специальности 2.2.4: «Приборы и методы измерения (по видам измерений)» сдан 05 июня 2024 года. Справка о сдаче кандидатских экзаменов выдана в 2025 г. федеральным государственным автономным образовательным учреждением высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)».

Научный руководитель – доктор технических наук Левин Александр Давидович, профессор кафедры нанометрологии и наноматериалов федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)».

По итогам обсуждения диссертации «Развитие методов абсорбционной, флуоресцентной и рамановской спектроскопии с хемометрической обработкой данных для анализа жидких сред и аэрозолей» на заседании кафедры нанометрологии и наноматериалов МФТИ ***принято следующее заключение.***

Тема диссертации является актуальной для развития молекулярной оптической спектроскопии, поскольку использование для обработки спектральных данных методов хемометрики и машинного обучения позволяет существенно расширить аналитические возможности метода без усложнения измерительной аппаратуры и пробоподготовки. На момент начала работы над диссертацией такой подход был развит лишь для ограниченного числа объектов анализа.

Цели и задачи диссертации:

Цель - разработка и апробация методов оптического спектрального анализа жидких сред и аэрозолей с применением хемометрики и машинного обучения для решения задач качественного и количественного анализа на примере конкретных объектов.

Основные задачи:

- разработка методов классификации аэрозольных частиц черного углерода по источникам их выбросов с помощью спектров поглощения и комбинационного рассеяния с обработкой данных на основе алгоритмов машинного обучения.
- разработка метода количественного анализа смесей по спектрам комбинационного рассеяния, основанного на градуировке фотометрической шкалы КР спектрометров в приборно-независимых единицах с помощью образцов сравнения.
- разработка методов классификации образцов алкогольной продукции по географическому происхождению и длительностью выдержки по спектрам флуоресценции и КР с последующей обработкой данных методами машинного обучения и хеометрики.
- создание пакета прикладного программного обеспечения для обработки спектральных данных при качественном и количественном анализе веществ, реализующего основные алгоритмы хеометрики и машинного обучения.

Основные результаты диссертации:

1. Методы и алгоритмы классификации по спектрам абсорбции, флуоресценции и КР на примере реальных объектов (аэрозольных частиц черного углерода и алкогольной продукции).
2. Метод анализа многокомпонентных смесей по КР спектрам, включающий градуировку фотометрической шкалы КР спектрометра с помощью образцов сравнения.
3. Прикладной пакет программного обеспечения, поддерживающий основные алгоритмы машинного обучения и хеометрики применительно к задачам обработки оптических спектров.

Все основные результаты диссертации получены соискателем Саакяном А.В. лично при научном руководстве доктора технических наук Левина А.Д.

Научная новизна работы заключается в том, что

1. Впервые построена модель машинного обучения, позволяющая классифицировать аэрозольные частицы черного углерода по источникам выбросов, используя спектры абсорбции.
2. Впервые предложен и реализован метод градуировки КР спектрометров по фотометрической шкале в приборно-независимых единицах путем использования образца сравнения из вещества имеющий характерный линии КР.
3. Определены информативные фрагменты спектров флуоресценции и комбинационного рассеяния и алгоритм машинного обучения, позволяющие классифицировать образцы коньяков и коньячной продукции по географическому происхождению и возрасту выдержки.

Практическая ценность результатов диссертации заключается в том, что разработанные методы и алгоритмы могут быть интегрированы в программное обеспечение различных аналитических приборов, включая аэталометры и спектрометры, для автоматической классификации и количественного анализа в режиме реального времени. Это повышает оперативность и достоверность получаемых результатов, делая их более доступными для широкого круга пользователей. В частности, разработанный в диссертации метод классификации аэрозольных частиц черного углерода по источникам выбросов с помощью спектров абсорбции и алгоритма машинного обучения может быть введен в состав программного обеспечения анализатора черного углерода (аэталометра), разрабатываемого в настоящее время ФГБУ «Всероссийский научно-исследовательский институт оптико-физических измерений». Результаты, полученные в диссертации, были использованы в работах ФГБУ «ВНИИОФИ» и Института глобального климата и экологии.

Разработанный пакет прикладного программного обеспечения может быть полезным для специалистов аналитических лабораторий, предоставляя им удобный инструментарий для обработки спектральных данных, не требующий глубоких знаний в программировании или хемометрике.

Обоснованность и достоверность результатов и выводов обеспечена грамотной постановкой экспериментов, применением надежных спектральных приборов и доказавших свою эффективность методов обработки спектральных данных. Все модели машинного обучения, построенные и использованные в работе успешно прошли как перекрестную валидацию на образцах обучающего набора, так и тестовую валидацию на наборах образцов, не использовавшихся для обучения моделей.

Материалы диссертации опубликованы соискателем достаточно полно в следующих работах:

1. А. В. Саакян, А. Д. Левин Программное обеспечение для обработки спектральных данных методами хемометрики и машинного обучения. «Аналитика». 2024; 14(2):154-160. <https://doi.org/10.22184/2227-572X.2024.14.2.154.160>;
2. Юшина А.А., Аленичев М.К., Саакян А.В., Левин А.Д. Мера волновых чисел рамановских сдвигов и возможности ее применения для количественного анализа. Эталон. Стандартные образцы. 2025;21(1):22-37. <https://doi.org/10.20915/2077-1177-2025-21-1-22-37>;
3. Саакян А.В., Аленичев М.К., Левин А.Д. Характеризация коньяков и виноградных бренди по спектрам флуоресценции, обработанным с помощью методов машинного обучения. Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2023;89(10):25-33. <https://doi.org/10.26896/1028-6861-2023-89-10-25-33>;
4. Саакян А.В., Юшина А.А., Левин А.Д. Классификация бренди и коньячной продукции по географическому происхождению и сроку выдержки с использованием спектроскопии комбинационного рассеяния и машинного обучения. Измерительная техника. 2023 (3):33-38. <https://doi.org/10.32446/0368-1025it.2023-3-33-38>.

Личный вклад соискателя в работах с соавторами состоит в выполнении основного объема экспериментальных исследований, выборе информативных фрагментов оптических спектров, формировании наборов спектральных

данных, построении моделей машинного обучения и их валидации, оформлении результатов в виде публикаций. Соискатель самостоятельно разработал пакет программного обеспечения для обработки спектральных данных методами хемометрики и машинного обучения.

Основные результаты работы докладывались на следующих научных конференциях и семинарах:

1. Международная научная конференция «Стандартные образцы в измерениях и технологиях» (Россия, г. Екатеринбург, 13-16 сентября 2022 г.)
2. VI Международная научно-техническая конференция «Метрология физико-химических измерений» (Россия, Менделеево, 05–08 сентября 2023 г.)
3. Всероссийская научно-техническая конференция «Метрологическое обеспечение фотоники-2023» (Россия, г. Москва, 15-16 ноября 2023 г.)
4. VI международная научная конференция «Стандартные образцы в измерениях и технологиях» (Россия, г. Екатеринбург, 3-6 сентября 2024 г.)
5. Всероссийская научно-техническая конференция «Метрологическое обеспечение фотоники» (Россия, г. Москва, 01-04 апреля 2025 г.)

Содержание диссертации соответствует паспорту научной специальности 2.2.4. Приборы и методы измерения (по отраслям измерений), в частности, пунктам:

- п. 1 – Создание новых научных, технических и нормативно-технических решений, обеспечивающих повышение качества продукции, связанных с измерениями механических величин, времени и частоты, тепловых величин, электрических и магнитных величин, аналитических и структурно-аналитических величин (состава, свойств и структуры веществ и материалов).

- п. 5 – Разработка или совершенствование существующих методов и способов обеспечения единства измерений в области измерений, относящихся к п. 1.

Диссертация «Развитие методов абсорбционной, флуоресцентной и рамановской спектроскопии с хемометрической обработкой данных для анализа жидких сред и аэрозолей» **Саакяна Арама Вагановича** рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности **2.2.4. Приборы и методы измерения (по видам измерений)**.

Заключение принято на заседании кафедры нанометрологии и наноматериалов МФТИ, Физтех. Присутствовало на заседании 8 человек. Результаты голосования: «за» – 8 чел., «против» – нет, «воздержались» – нет, протокол № 2 от 23 июня 2025 года .



Батурин Андрей Сергеевич,
кандидат физ.-мат. наук, доцент,
заведующий кафедрой
нанометрологии и наноматериалов МФТИ