



Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации

Федеральное государственное
бюджетное учреждение науки
**ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ЦЕНТР ХИМИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ**
им. Н.Н. Семенова
Российской академии наук
(ФИЦ ХФ РАН)

119991 г. Москва, ул. Косыгина, д. 4
Телефон: (499) 137-29-51; Факс: (495) 651-21-91
E-mail: icp@chph.ras.ru

УТВЕРЖДАЮ

И.о. директора ФИЦ ХФ РАН

д.ф.-м.н. Иванов В.С.

«03» февраля 2026 года

№ 68-02/72 «03» 02 2026 г.



ОТЗЫВ

ведущей организации - Федерального исследовательского центра
химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук
на диссертационную работу

Саакяна Арама Вагановича

«Развитие методов абсорбционной, флуоресцентной и рамановской
спектроскопии с хемометрической обработкой данных для анализа жидких
сред и аэрозолей»,

представленную к защите на соискание ученой степени кандидата
технических наук по специальности 2.2.4 – Приборы и методы измерения (по
видам измерений)

Актуальность темы

В последнее время возрастают требования к расширению
аналитических возможностей методов оптической спектроскопии при
определении состава и свойств объектов как природного, так и

расширение может быть достигнуто как за счет усложнения аналитических спектральных приборов и методов пробоподготовки, так и за счет применения более совершенных методов обработки спектральных данных, основанных на хемометрике и машинном обучении (МО). К настоящему времени такой подход развит лишь применительно к небольшому числу аналитических задач. Поэтому развитие методов оптической спектроскопии с обработкой данных на основе хемометрики и МО применительно к анализу объектов, представляющих научный и/или практический интерес, является актуальным и востребованным. Среди выбранных диссертантом объектов анализа особый интерес представляют микрочастицы черного углерода в атмосферном воздухе, являющиеся опасными загрязнителями атмосферы, негативно влияющими на климат и здоровье людей.

Новизна исследования и полученные результаты

1. Впервые построена и экспериментально проверена модель МО, позволяющая классифицировать аэрозольные частицы черного углерода по источникам выбросов, используя спектры абсорбции.
2. Впервые предложен и реализован метод градуировки спектрометров комбинационного рассеяния по фотометрической шкале в приборно-независимых единицах путем использования образцов сравнения из вещества, имеющего характерные линии КР.
3. Определены информативные фрагменты спектров флуоресценции и КР и построены модели МО для анализа образцов бренди и коньячной продукции, с дальнейшей обработки методами хемометрики и МО.
4. Разработана прикладная компьютерная программа, реализующая основные методы хемометрики и МО, адаптированная для использования при обработке спектральных данных.

Оценка структуры и содержания работы

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, списка используемой литературы, списка основных сокращений и обозначений. Полный объем диссертации составляет 124 страницы, в том числе:

18 рисунков, 26 таблиц и 1 приложение. Список литературы содержит 100 источников.

Содержание диссертационной работы дает достаточно полное представление о результатах проведенных исследований. Порядок изложения представляется логичным. Литературный обзор, приведенный в первой главе, правильно отражает современное состояние вопросов, связанных с тематикой диссертации. При использовании результатов работ других авторов в диссертации приведены соответствующие ссылки. Автореферат соответствует содержанию диссертации по основным научным положениям и результатам исследований.

По результатам диссертационной работы опубликовано 8 научных работ, в том числе 4 статьи в российских рецензируемых научных журналах, входящих в перечень ВАК, тезисы 4 докладов на научно-технических конференциях, получено свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ.

Значимость для науки и практики результатов диссертации

1. Разработанный и обоснованный в диссертации метод градуировки фотометрической шкалы КР спектрометров в приборно-независимых единицах с помощью образцов сравнения способствует обеспечению единства измерений в рамановской спектроскопии и дает дополнительные возможности для ее использования при количественном анализе, в том числе многокомпонентных смесей.

2. Разработанные методы и алгоритмы могут быть интегрированы в программное обеспечение различных аналитических спектральных приборов, для автоматической классификации и количественного анализа в режиме реального времени.

3. 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 анализаторов черного углерода (аэталометров).

4. Разработанный пакет прикладного программного обеспечения «Интелл-Спектр» может быть полезен для специалистов аналитических лабораторий, предоставляя им удобный инструментарий для обработки спектральных данных, не требующий глубоких знаний в программировании или хемометрике.

Рекомендации по использованию результатов и выводов диссертационной работы

1. Разработать методические рекомендации по градуировке фотометрической шкалы КР спектрометров с помощью образцов сравнения, предварительно оценив показатели точности такой градуировки для разных видов образцов сравнения.

2. Ввести разработанный в диссертации алгоритм классификации частиц черного углерода по источникам выбросов в программное обеспечение разрабатываемого в ФГБУ «ВНИИОФИ» аэталометра и провести апробацию на реальных пробах атмосферного воздуха на различных объектах.

3. Провести апробацию разработанного пакета ПО «Интелл-Спектр» в аналитических лабораториях, использующих методы оптической спектрофотометрии.

Обоснованность и достоверность положений и выводов диссертационной работы

Обоснованность и достоверность результатов и выводов обеспечена корректным 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 проверку на наборах образцов, не использовавшихся для обучения моделей. Обоснованность основных результатов подтверждается также их публикацией в авторитетных рецензируемых научных журналах.

Соответствие диссертации паспорту научной специальности

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.

Замечания

По содержанию диссертации возникли следующие вопросы замечания:

1. При обучении модели классификации частиц черного углерода по источникам выбросов по спектрам для каждого класса (биомасса древесины, керосин, технический углерод) использовались несколько спектров КР, измеренных от разных участков, но на одном стекле. Это недостаточно представительная выборка. Следовало при обучении модели использовать по несколько стекол, содержащих частицы каждого из классов.
2. На измеренных спектрах КР аэрозольных частиц черного углерода интересно было бы сделать соотнесение пиков, высказав предположения о физико-химической природе хотя бы некоторых из них.
3. При анализе спектральных данных с использованием метода главных компонент ограничено представлены сведения о вкладе старших компонент в общую дисперсию данных, а также о нагрузках соответствующих компонент. Более детальное рассмотрение весов главных компонент могло бы повысить наглядность и интерпретируемость полученных результатов.

4. При использовании термина толщина конфокальной области следовало оговорить, что это термин относится только к КР спектрометрам и микроскопам с конфокальной оптической схемой.

5. При построении многомерной градуировки методом PLS по 7 главным компонентам для трехкомпонентной смеси спиртов, следовало использовать большее число градуировочных образцов, примерно также, как это было сделано в той же главе диссертации для четырехкомпонентной смеси сахаров.

Указанные недостатки не критичны в представленной диссертации и не влияют на общую положительную оценку работы.

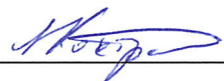
Общее заключение о диссертации

В целом диссертационная работа Саакяна Арама Вагановича «Развитие методов абсорбционной, флуоресцентной и рамановской спектроскопии с хемометрической обработкой данных для анализа жидких сред и аэрозолей» удовлетворяет требованиям, предъявляемым ВАК РФ к диссертациям на соискание ученой степени кандидата технических наук. Содержание автореферата соответствует диссертации. Диссертация работа является законченной научно-квалификационной работой, содержащей новое решение актуальной научной задачи - развития методов оптического спектрального анализа с обработкой данных на основе хемометрики и машинного обучения, а ее автор, Саакян Арам Ваганович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата технических наук по специальности 2.2.4 — Приборы и методы измерения (по видам измерений).

Отзыв на диссертацию и автореферат обсужден и одобрен на заседании семинара отдела динамики химических и биологических процессов Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН) от «27» января 2026 года, протокол № 1.

Секретарь семинара

к. ф.-м. н. Костров А.Н.



Отзыв подготовлен:

д.х.н., проф. Надточенко Виктором Андреевичем,

руководителем отдела динамики химических и биологических процессов

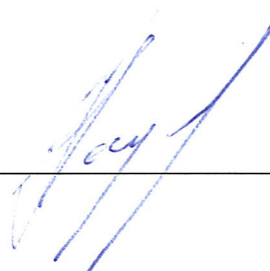
ФГБУН ФИЦ химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН

119991, Москва, ул. Косыгина, 4

Телефон: +7 (499) 137-32-40

E-mail: nadtochenko@chph.ras.ru

д.х.н., проф. Надточенко В.А.



Подпись д.х.н., проф. Надточенко В.А. заверяю:

Ученый секретарь ФИЦ ХФ РАН

к. ф.-м. н. Михалева М.Г.



«03» февраля 2026 года