

ОТЗЫВ

официального оппонента кандидата технических наук Мигаль Павла Вячеславовича на диссертационную работу Саакяна Арама Вагановича «Развитие методов абсорбционной, флуоресцентной и рамановской спектроскопии с хемометрической обработкой данных для анализа жидких сред и аэрозолей», представленную на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 2.2.4 — Приборы и методы измерений (по видам измерений)

На отзыв представлена диссертационная работа Саакяна Арама Вагановича на тему «Развитие методов абсорбционной, флуоресцентной и рамановской спектроскопии с хемометрической обработкой данных для анализа жидких сред и аэрозолей», объемом 124 страниц машинописного текста.

Диссертация состоит из введения, пяти глав, выводов к каждой главе, заключения, списка литературы в количестве 100 наименований, содержит одно приложение, 19 формул, 26 таблиц, 18 рисунков и автореферат — 39 страниц.

Актуальность темы диссертационной работы

Диссертационная работа Саакяна Арама Вагановича посвящена развитию методов анализа на основе оптической спектроскопии с последующей обработкой данных алгоритмами хемометрики и машинного обучения (МО) применительно к анализу следующих объектов: аэрозольных частиц черного углерода в атмосферном воздухе, алкогольных напитков и многокомпонентных жидких смесей. Вышеперечисленные объекты анализа, несомненно, представляют научный и практический интерес. Они востребованными в сферах климатического контроля, распознаванию подделок алкогольной продукции, в обеспечение единства измерений в молекулярной оптической спектроскопии и количественного анализа методами комбинационного рассеяния света (КР).

В настоящее время проблема полуколичественных измерений и определения качественных характеристик не имеет отражения в области законодательной метрологии в России. Вместе с этим очевидны потребности общества в получении достоверных сведений о качестве продукции (например, органолептические свойства питьевой воды, видовой состав мясной продукции, подлинность алкогольных напитков и т.д.). Создание метрологического обеспечения в этой области является актуальной и в тоже время сложной и многогранной задачей. Саакян А.В. в своей диссертации отразил ряд подходов, которые могут быть использованы при решении этой задачи.

Оценка структуры и содержания

Содержание диссертационной работы дает достаточно полное представление о результатах проведенных исследований. Порядок изложения материала представляется логичным, применяемая терминология соответствует общепринятой. Объем рассмотренных работ по исследуемой проблеме обеспечивает необходимую глубину анализа состояния вопроса. При использовании результатов работ других авторов в тексте диссертации приведены соответствующие ссылки. Автореферат диссертации соответствует ее содержанию по основным научным положениям, результатам теоретических исследований и проведенных экспериментов.

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

Степень обоснованности и достоверности научных результатов

Обоснованность и достоверность полученных результатов обеспечена тщательным планированием и грамотной постановкой экспериментальных исследований, обработкой их результатов с использованием проверенных

современных математических алгоритмов, сопоставлением экспериментальных результатов с теоретическими оценками.

Новизна научных положений, выводов и рекомендаций

Основные научные результаты, полученные автором.

1. Впервые построена модель МО на основе алгоритма экстремального градиентного бустинга при помощи, которой возможно осуществлять классификацию аэрозольных частиц черного углерода по источникам выбросов, используя наборы значений оптической плотности на 7 длинах волн в диапазоне от 370 до 950 нм, измеренных для частиц черного углерода, собранных путем прокачки воздушной пробы через стекловолоконную мембрану.

2. Впервые предложен и использован подход, основанный на использовании образцов сравнения из вещества, имеющего характерные линии КР для градуировки фотометрической шкалы КР-спектрометров в приборно-независимых единицах. Также показана возможность использования данного подхода для количественного анализа по КР спектрам, в том числе многокомпонентных смесей.

3. Определены информативные фрагменты флуоресцентных и КР-спектров образцов бренди и коньячной продукции, что позволило построить модель машинного обучения на основе алгоритма экстремального градиентного бустинга для классификации этих образцов по географическому происхождению и возрасту выдержки.

Значимость результатов для науки

В диссертационной работе Саакяна Арама Вагановича решена важная научная задача — создана основа для обеспечения единства измерений в КР-спектроскопии на основе градуировки фотометрической шкалы КР-спектрометров в приборно-независимых единицах с помощью образцов сравнения, что позволяет сопоставлять результаты измерений, полученные на

разных средствах измерений и в разных лабораториях. Показана возможность количественного анализа состава многокомпонентных смесей по КР-спектрам с использованием данного подхода и методов хемометрики.

Практическое значение результатов работы

По итогу выполненной диссертационной работы были получены результаты, имеющие следующую практическую ценность.

1. Модели классификации частиц черного углерода по КР-спектрам с использованием алгоритма экстремального градиентного бустинга, позволяющие определять источники выбросов этих частиц; подтверждается актом внедрения от ФГБУ «ИГКЭ».

2. Методики анализа алкогольной продукции на основе оптической спектроскопии, обеспечивающие быстрый и надежный скрининг образцов при проверке их подлинности, географического происхождения и возраста выдержки, которые могут быть использованы как производителями, так и контролирующими органами.

3. Метод градуировки фотометрической шкалы КР-спектрометров, позволяющий определять интенсивности линий КР в приборно-независимых единицах, открывает новые возможности для обеспечения единства измерений в КР-спектроскопии.

4. Программное обеспечение (ПО) «ИнтелСпектр», предназначено для специалистов аналитических лабораторий. Указанное ПО было использовано при обработке спектров оптического поглощения микрочастиц черного углерода в рамках НИОКР по теме «Создание анализаторов для измерения концентрации микрочастиц черного углерода в атмосферном воздухе». ПО было использовано для построения моделей хемометрики и МО, представленных в диссертации. Данное ПО использовано также при разработке анализатора частиц черного углерода в атмосфере, что подтверждается актом внедрения от ФГБУ «ВНИИОФИ».

Предложенные методы и модели обладают потенциалом для интеграции в программное обеспечение аналитических приборов (аэталометров, спектрометров и др.) с целью автоматизации классификации и количественного анализа в режиме реального времени, что расширяет возможности метрологического обеспечения и повышает оперативность обработки данных.

Соответствие содержания диссертации паспорту специальности

Полученные результаты диссертационной работы Саакяна Арама Вагановича соответствуют направлениям исследований, предусмотренных в паспорте специальности 2.2.4 — Приборы и методы измерений (по видам измерений).

1. Создание новых научных, технических и нормативно-технических решений, обеспечивающих повышение качества продукции, связанных с измерениями аналитических и структурно-аналитических величин (состава, свойств и структуры веществ и материалов).

2. Совершенствование научно-технических и технико-экономических видов метрологического обеспечения измерений для повышения эффективности производства современных изделий, качество которых зависит от воспроизводимости измерений аналитических и структурно-аналитических величин.

3. Разработка или совершенствование существующих методов и способов обеспечения единства измерений в области измерений аналитических и структурно-аналитических величин.

Рекомендации по использованию результатов и выводов диссертационного исследования

1. Совершенствование программного обеспечения для расширения функционала, например: отображение спектров и параллельную работу (математические операции, фильтрацию, конвертацию данных в разные форматы), дополнить количество фильтров, дополнить количество

алгоритмов и учесть параллельное совмещение нескольких алгоритмов одновременно и в целом доработать визуальные элементы.

2. На основании накопленной информации по бренди и коньячной продукции, доработать и аттестовать методики измерений и методические рекомендации для определения качественных свойств, которые были бы полезны для идентификации этой продукции и при производственном контроле.

3. Разработать методические рекомендации для градуировки фотометрической шкалы КР-спектрометров, а также для количественных измерений при анализе многокомпонентных жидкостей на основе КР-спектров.

Общие замечания и рекомендации

К диссертационной работе Саакяна Арама Вагановича имеются следующие замечания.

1. В тексте диссертации и автореферата приведены достоверные вероятности в качестве показателя эффективности определения качественных свойств (для классификации образцов частиц черного углерода и идентификации происхождения бренди) при этом не указано каким образом получены значения этих вероятностей. Как были установлены пороговые значения достоверной вероятности?

2. В третьей и четвертой главах рассмотрены методы МО на обучающих выборках из ряда образцов. Однако не приведена информация о репрезентативности этих выборок и о минимальном количестве обучающих образцов. Каким образом можно понять сколько образцов нужно для обучения?

3. В диссертации и автореферате соответственно рисунок 4 (диссертация) и рисунок 2 (автореферат), сложно разглядеть текст на рисунке, так как рисунок сделан на темном фоне с белой заливкой текста и маленьким

размером шрифта. Следовало сделать те же рисунки на белом фоне с черной заливкой текста и более крупным шрифтом.

4. Встречаются грамматические ошибки, которых можно было избежать при более внимательном редактировании.

5. В диссертации имеется ошибочная ссылка 97, в автореферате все ссылки правильные, предполагаю, что в место 97 ссылки на собственную работу, опубликованную в рецензируемом журнале ВАК, должна была быть ссылка на работу «Юшина А. А., Аленичев М. К., Саакян А. В., Левин А. Д. Мера волновых чисел рамановских сдвигов и возможности ее применения для количественного анализа. VI Тезисы докладов. Международная научная конференция «Стандартные образцы в измерениях и технологиях» г. Екатеринбург, 2024, с 194-195.»

Однако указанные недостатки не следует считать критическими. Недостатки 1-2 скорее указывают на интерес к продолжению работ по тематике диссертации, недостатки 3-4 – редакционного характера. Замечания не снижают общей положительной оценки диссертации.

Заключение

Диссертация Саакяна Арама Вагановича является законченной научно-квалификационной работой и соответствует паспорту научной специальности 2.2.4 — Приборы и методы измерений (по видам измерений). Диссертационная работа выполнена на высоком научном уровне и позволяет решить актуальные научно-технические задачи по обеспечению единства измерений для КР-спектрометров, а также задачи количественного анализа на основе КР-спектров.

Считаю, что диссертационная работа «Развитие методов абсорбционной, флуоресцентной и рамановской спектроскопии с хемометрической обработкой данных для анализа жидких сред и аэрозолей», представленная к защите на соискание ученой степени кандидата технических наук, полностью отвечает требованиям пунктов 9-11, 13 и 14 «Положения о

присуждении ученых степеней», предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор Саакян Арам Ваганович заслуживает присуждения ученой степени кандидата технических наук по специальности 2.2.4 — Приборы и методы измерений (по видам измерений).

Официальный оппонент

кандидат технических наук,

заместитель директора по науке УНИИМ –

филиал ФГУП «ВНИИМ им. Д.И.Менделеева»

П.В. Мигаль

21.01.2026 г.

Подпись руки Мигаль П.В. заверяю

доктор технических наук, директор УНИИМ –

филиал ФГУП «ВНИИМ им. Д.И.Менделеева»



П. Собина