

ОТЗЫВ

официального оппонента

доктора технических наук, заместителя начальника НИО-6 по научной работе – учёного – хранителя государственного эталона Федерального государственного унитарного предприятия «Всероссийский научно-исследовательский институт физико-технических и радиотехнических измерений»

Прокунина Сергея Викторовича

на диссертацию 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 измерения (по видам измерений)

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 применительно к анализу аэрозольных частиц черного углерода, алкогольной продукции и многокомпонентных жидких смесей. Указанные объекты анализа представляют значительный научный и практический интерес и востребованы в ряде областей, включая климатический и экологический мониторинг, систему контроля качества алкогольной продукции, а также при решении задач обеспечения сопоставимости результатов измерений в молекулярной оптической спектроскопии.

Черный углерод является важным климатически активным аэрозолем, влияющим на качество атмосферного воздуха, а его классификация по источникам выбросов и количественная оценка являются актуальными задачами современной климатологии и экологии.

Анализ и классификация алкогольной продукции по географическому происхождению и возрасту выдержки актуальны в связи с необходимостью контроля подлинности продукции и защиты рынка от фальсифицированных товаров, что является значимой экономической и технологической задачей.

Исследование многокомпонентных жидких смесей по спектрам комбинационного рассеяния (КР, рамановского) света представляет собой перспективное направление аналитической химии, позволяющее осуществлять количественный анализ без применения разрушающих методик пробоподготовки.

Современное развитие спектральных методов анализа данных связано с широким распространением высокочувствительных приборов, регистрацией больших массивов спектральной информации и потребностью в автоматизированной обработке данных. В этих условиях возрастает роль хемометрических алгоритмов и методов машинного обучения, обеспечивающих выделение информативных спектральных признаков, построение моделей классификации и количественного анализа, а также сопоставимость результатов, полученных на различных приборах и в различных лабораториях. Особую актуальность приобретают вопросы метрологического сопровождения и обеспечения единства измерений в молекулярной спектроскопии, в том числе при использовании спектров КР-спектров.

С учетом изложенного, тематика диссертационной работы является актуальной, соответствует современным направлениям развития аналитической химии, спектроскопии и метрологического обеспечения измерений, востребована на практике и обладает значительным потенциалом к дальнейшему развитию.

Структура и содержание диссертационной работы

Диссертация полно раскрывает полученные автором результаты. Изложение последовательное и логически выстроенное, терминология

корректна. Обзор литературы и работ по теме обеспечивает должный уровень анализа. Ссылки на источники приведены корректно. Автореферат отражает содержание диссертации и соответствует основным положениям теоретической и экспериментальной части.

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.

Во введении обоснована актуальность применения методов оптической спектроскопии совместно с алгоритмами хемометрики и машинного обучения для анализа жидких сред и аэрозолей. Сформулированы цель и задачи диссертационной работы, приведены положения, выносимые на защиту, отражены научная новизна и практическая значимость результатов. Показано, что сочетание спектральных методов с математическими алгоритмами обработки данных позволяет расширить аналитические возможности измерений, обеспечивая решение задач классификации и количественного анализа для сложных многокомпонентных объектов.

В первой главе представлен аналитический обзор литературы по физико-химическим основам флуоресцентной и рамановской спектроскопии, современным методам регистрации и факторам, влияющим на спектры. Рассмотрены методы хемометрики и машинного обучения для обработки спектральных данных, включая предварительную обработку (нормализацию, фильтрацию, коррекцию базовой линии), снижение размерности, классификацию и регрессионный анализ. Показано, что спектральные методы в сочетании с современными алгоритмами анализа данных находят широкое применение в задачах контроля пищевой продукции, фармацевтического анализа, клинической диагностики и экологического мониторинга. Выводы главы подтверждают актуальность разработки комплексного подхода к обработке оптических спектров с использованием хемометрических методов.

Во второй главе выполнен выбор и научное обоснование алгоритмов для обработки спектральных данных. Приведены подходы к формированию наборов данных, методы предварительной обработки и отбора информативных диапазонов, а также подходы к обучению и валидации моделей. Разработан программный пакет «ИнтелСпектр», реализующий полный цикл хемометрической обработки оптических спектров — от формирования массива данных до обучения и тестирования моделей машинного обучения. Показано, что использование процедур валидации модели на образцах, не использованных для ее обучения, обеспечивает объективное подтверждение корректности получаемых результатов.

В третьей главе представлены результаты применения методов машинного обучения для классификации аэрозольных частиц черного углерода по источникам выбросов на основе спектров оптического поглощения и комбинированного рассеяния. Выполнено формирование наборов экспериментальных спектров, обучение моделей на основе алгоритма экстремального градиентного бустинга и их валидация на независимых наборах. Показано, что разработанная модель обеспечивает достоверность классификации порядка 89 % для тестовых образцов. Указано, что разработанное программное обеспечение использовано в рамках НИОКР ФГБУ «ВНИИОФИ» по созданию анализаторов черного углерода, что подтверждено актами внедрения.

В четвертой главе приведены результаты проделанных диссертантом работ по классификации алкогольной продукции (бренди и коньяков) по географическому происхождению и возрасту выдержки на основе спектров флуоресценции и рамановского рассеяния с последующей обработкой методами машинного обучения. Использование информативных спектральных фрагментов позволило осуществлять классификацию образцов с доверительными вероятностями не менее 86 %. Отмечено, что предложенный подход может применяться для контроля подлинности и экспресс-анализа алкогольной продукции.

В пятой главе исследована возможность количественного анализа многокомпонентных жидких смесей по спектрам комбинированного рассеяния. Предложены методы градуировки фотометрической шкалы КР-спектрометров в приборно-независимых единицах с использованием образцов сравнения. Показано, что это обеспечивает перенос градуировочных зависимостей между различными приборами и режимами измерения и расширяет возможности метрологического обеспечения количественного анализа по тем линиям КР, интенсивность которых используется в качестве аналитического сигнала.

В заключении сформулированы основные научные результаты диссертационной работы, подтверждающие достижение поставленной цели и решение поставленных задач.

Степень обоснованности научных положений, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертационной работе, их достоверность и новизна

Обоснованность и достоверность Обоснованность и достоверность полученных результатов и выводов подтверждаются корректной постановкой задачи исследования, использованием современных методов регистрации оптических спектров, адекватных процедур предварительной обработки данных и статистических методов построения и валидации моделей. В работе применялись как внутренняя, так и внешняя валидация моделей, что обеспечивает объективную оценку их прогностических характеристик и исключает случайность результатов. Дополнительным подтверждением служат положительные результаты апробации разработанных методик на реальных объектах анализа.

Научной новизной обладают следующие результаты диссертационной работы:

- впервые разработана и применена методика, позволяющая классифицировать аэрозольные частицы черного углерода по источникам

выбросов по спектрам оптического поглощения. Достоверность классификации на тестовом наборе данных данной методикой, составляет порядка 89 %;

- впервые предложен и обоснован метод градуировки фотометрической шкалы КР-спектрометров в приборно-независимых единицах с использованием образцов сравнения, обеспечивающий перенос градуировочных зависимостей между различными приборами и используемыми режимами измерений. Показана принципиальная возможность применения данного подхода для количественного анализа по КР-спектрам, в том числе для многокомпонентных жидких смесей с обработкой данных методами хемометрики и машинного обучения;

- впервые определены информативные фрагменты флуоресцентных и КР-спектров образцов бренди и коньячной продукции и показана их достаточность для построения модели машинного обучения, обеспечивающей классификацию образцов по географическому происхождению и возрасту выдержки;

Теоретическая ценность научных результатов и практическая значимость

В диссертационной работе Саакяна А.В. решена значимая научная задача, связанная с развитием методов оптической спектроскопии для анализа сложных многокомпонентных объектов с применением хемометрических алгоритмов и машинного обучения. Предложен метод метрологически корректной градуировки фотометрической шкалы КР-спектрометров в приборно-независимых единицах с использованием образцов сравнения, обеспечивающий сопоставимость результатов измерений, полученных на различных приборах и в различных лабораториях. Показана возможность применения данного подхода для количественного анализа многокомпонентных жидких смесей по КР-спектрам с использованием методов хемометрики. Полученные результаты способствуют развитию

научных представлений о методах обработки спектральных данных и расширяют возможности аналитической химии и спектроскопии в части классификации и количественной оценки состава.

Практическая значимость выполненных исследований обусловлена возможностью применения разработанных методов и программного обеспечения для решения прикладных задач. Разработаны и реализованы модели классификации частиц черного углерода по спектрам оптического поглощения для идентификации вероятных источников их выбросов; факт внедрения подтвержден актом ФГБУ «ИГКЭ». Предложены методики анализа алкогольной продукции на основе флуоресцентной и КР-спектроскопии, обеспечивающие экспресс-скрининг при контроле подлинности, географического происхождения и возраста выдержки, что представляет интерес для производителей и контрольных органов. Создано программное обеспечение «ИнтелСпектр», использованное при обработке данных в рамках НИОКР; факт внедрения подтвержден актом ФГБУ «ВНИИОФИ». Предложенные методы и модели обладают потенциалом для интеграции в программное обеспечение аналитических приборов с целью автоматизации классификации и количественного анализа в режиме реального времени.

Полнота опубликования основных результатов работы в научной печати и соответствие автореферата диссертации

Основные результаты выполненных теоретических и экспериментальных исследований отражены в публикациях автора. По теме диссертации опубликовано 8 научных работ, в том числе 4 статьи в российских рецензируемых журналах, входящих в перечень изданий, рекомендованных ВАК, и 4 тезиса докладов на научно-технических конференциях. Получено свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ, реализующей разработанные алгоритмы обработки спектральных данных и построения моделей машинного обучения.

Автореферат соответствует содержанию диссертации и отражает основные научные положения, задачи, результаты и выводы работы, включая сведения об опубликованных автором исследованиях. Содержание диссертационной работы даёт полное представление о выполненных исследованиях. Материал изложен последовательно и логично, используемая терминология соответствует принятой в научной литературе. Обзор публикаций по рассматриваемой тематике обеспечивает достаточную глубину анализа состояния вопроса. При использовании результатов работ других авторов в диссертации приведены соответствующие ссылки.

Замечания по содержанию диссертационной работы

По содержанию диссертации возникли следующие вопросы/замечания:

1. Все модели классификации, описанные в работе, были построены на основе алгоритма экстремального градиентного бустинга (ЭГБ). Было бы интересно сравнить, хотя бы на одном из использованных наборов спектров, полученные данные с результатами по другому алгоритму классификации, например, линейного дискриминантного анализа.
2. Для градуировки фотометрической шкале КР спектрометров в приборно-независимых единицах предложено два вида образцов сравнения на основе пленки из смеси полистирола и серы и стандартного образца на основе циклогексана. Однако возможности такого подхода для сопоставления результатов измерений, полученных на разных приборах, показаны только для стандартного образца на основе циклогексана.
3. К сожалению в главе 3 диссертационной работы не приведена схема экспериментальной установки, что затрудняет восприятие методики проведения экспериментов.
4. В таблицах 5 и 6 приведены большое количество экспериментальных данных без указания точностных характеристик (погрешности, неопределенности). Удобно было бы воспринимать представленные данные в виде графиков.

5. В главе 4, начиная со страницы 76, в качестве пожелания, стоит отметить, что необходимо провести серию экспериментальных исследований, для верификации результатов измерений, возможно с применением метода изотопного анализа, который является малодоступным но более точным.

6. Как в любой научной работе, в тексте диссертации присутствуют опечатки и стилистические ошибки.

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

Общее заключение по диссертационной работе

Основные результаты диссертационной работы Саакяна Арама Вагановича в достаточной степени отражены в отечественных научных изданиях и успешно апробированы на всероссийских научно-технических конференциях. Полученные результаты прошли апробацию также в рамках прикладных исследований и НИОКР, что подтверждается актами внедрения программного обеспечения и методик, разработанных автором.

Диссертация Саакяна Арама Вагановича является законченной научно-квалификационной работой. В диссертации решена актуальная научно-техническая задача, связанная с обеспечением сопоставимости результатов измерений по спектрам оптических методов и расширением возможностей количественного анализа сложных объектов.

Считаю, что диссертационная работа «Развитие методов абсорбционной, флуоресцентной и рамановской спектроскопии с хемометрической обработкой данных для анализа жидких сред и аэрозолей» полностью отвечает требованиям пунктов 9–11, 13 и 14 «Положения о присуждении ученых степеней», предъявляемым к кандидатским диссертациям, а также соответствует паспорту научной специальности 2.2.4 – «Приборы и методы измерения (по видам измерений)». Автор диссертационной работы Саакян Арам Ваганович заслуживает присуждения

ученой степени кандидата технических наук по специальности 2.2.4 —
«Приборы и методы измерения (по видам измерений)»

Официальный оппонент,
доктор технических наук,
заместитель начальника НИО-6 по научной работе – учёный – хранитель
государственного эталона Федерального государственного унитарного
предприятия «Всероссийский научно-исследовательский институт физико-
технических и радиотехнических измерений»



Прокунин Сергей Викторович

« 25 » января 2026 года

Почтовый адрес: 141570, Московская область, г. Солнечногорск,
пгт. Менделеево (промзона ВНИИФТРИ)
телефон: +7(495)526-63-21, электронная почта: prokunin@vniiftri.ru

Подпись Прокунина Сергея Викторовича удостоверяю.

Специалист по персоналу отдела кадров



И.А. Фролова

