

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Саакяна Арама Вагановича
«Развитие методов абсорбционной, флуоресцентной и рамановской спектроскопии с хемометрической обработкой данных для анализа жидких сред и аэрозолей»,
представленной на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 2.2.4 — Приборы и методы измерения (по видам измерений)

Актуальность темы.

Рецензируемая работа посвящена актуальному научно-техническому направлению — совершенствованию методов оптических измерений путем интеграции современных спектральных технологий и алгоритмов машинного обучения. В условиях перехода к цифровому контролю экологических и промышленных объектов, разработка экспресс-методов анализа таких сложных систем, как атмосферные аэрозоли и многокомпонентные жидкие среды, имеет высокую значимость.

Предложенный автором подход позволяет проводить идентификацию и количественный анализ без трудоемкой пробоподготовки, что критически важно для развития современных аналитических измерительных комплексов и систем оперативного мониторинга.

Научная новизна и содержание работы.

Автор демонстрирует системный подход, объединяя физические принципы спектроскопии с алгоритмами экстремального градиентного бустинга (ЭГБ).

1. **В области измерения аэрозолей:** Разработан метод классификации микрочастиц черного углерода по источникам выбросов на основе 7-волновой абсорбционной спектроскопии с достоверностью более 96,4 %.

2. **В области анализа жидких сред:** На примере коньячной продукции предложен мультимодальный подход, позволивший достичь высокой достоверности идентификации географического происхождения и возраста выдержки органических смесей.

3. **В области метрологического обеспечения:** Реализован способ градуировки КР-спектрометров в приборно-независимых единицах. Применение в работе меры волновых чисел рамановских сдвигов и стандартного образца характеристик спектра комбинационного рассеяния циклогексана (ГСО 12886-2025) позволило автору разработать алгоритм нормирования интенсивности спектральных линий. Особо следует подчеркнуть техническую значимость данного решения: предложенный подход позволяет сопоставлять результаты измерений, полученные на приборах различных моделей и производителей. Подтвержденная возможность межприборного переноса данных с погрешностью 0,51–7,14 % эффективно решает техническую задачу стандартизации спектральных измерений.

Практическая значимость. Особого внимания заслуживает разработка оригинального прикладного ПО «ИнтелСпектр» (свидетельство № 2024680485). Разработанная программа позволяет проводить сложнейшую обработку данных в режиме реального времени.

Созданный автором методический задел представляется крайне актуальным для нефтегазового комплекса. В перспективе, на базе предложенных в диссертации подходов, возможна разработка систем оперативного входного контроля подлинности нефтепромысловых реагентов (ингибиторов, деэмульгаторов), что способно заменить трудоемкий традиционный входной контроль реагентов. Это минимизирует риски использования некондиционной химии, способной привести к аварийным ситуациям и износу оборудования нефтедобывающих предприятий. Также видится перспективным исследование корреляции между информативными фрагментами спектров и показателями эффективности реагентов, а также оценка их термостабильности при хранении. Выражаем надежду, что в дальнейшем автор расширит область применения своих разработок на

задачи нефтепромышленной химии, что позволит производителям и потребителям использовать спектральный анализ как инструмент для повышения и оперативного подтверждения качества продукции.

Замечания и пожелания:

1. В качестве пожелания к дальнейшему развитию работы следует отметить необходимость разработки модуля программного обеспечения по расчету неопределенности измерений, полученных с применением хемометрических моделей. Это обеспечит соответствие современным метрологическим требованиям, а также позволит разрабатывать и аттестовывать методики количественного анализа в соответствии с требованиями государственных стандартов.

2. Поскольку предложенный способ градуировки основан на расчете отношения интенсивностей линий образца и меры, каким образом в разработанном алгоритме учитывается влияние флуоресцентного фона? При анализе реальных технических смесей (например, нефтепромышленных реагентов) высокий уровень фона может существенно поднимать базовую линию, что без корректной процедуры коррекции базовой линии и математического разделения наложенных контуров приведет к искажению расчетных значений нормированной интенсивности.

Заключение. Автореферат полно отражает содержание работы. Диссертация является законченным научным исследованием, выполненным на высоком методическом уровне. Её автор, Саахан Арам Ваганович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата технических наук по специальности 2.2.4 — Приборы и методы измерения (по видам измерений).

Отзыв составил:



Салихов Шамиль Мубаракович

«04» февраля 2026г.

кандидат химических наук (02.00.03 – Органическая химия), заведующий лабораторией физико-химических методов анализа Уфимского института химии Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук (УФИХ УФИЦ РАН)
E-mail: salikhov@anrb.ru, Рабочий телефон: +7 347 2356119

Сведения об организации:

Уфимский Институт химии – обособленное структурное подразделение Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук (УФИХ УФИЦ РАН)

Адрес: 450054, г. Уфа, проспект Октября, 69.

Телефон: +7 (347) 235-60-66, E-mail: chemorg@anrb.ru

Подпись Салихова Шамиля Мубараковича заверяю,

Ученый секретарь УФИХ УФИЦ РАН



Выдрина Валентина Афанасиевна

«04» февраля 2026г.