

Государственное научное учреждение  
«ИНСТИТУТ ФИЗИКИ имени Б. И. СТЕПАНОВА  
НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК БЕЛАРУСИ»

Объект авторского права

УДК 535.372; 536.55; 535.243:663.2; 535-14; 535-15;  
53.043; 53.047; 543.42; 536.758:530.145; 621.391.63

**ХОДАСЕВИЧ**  
**Михаил Александрович**

**РАЗВИТИЕ ОПТИЧЕСКИХ СПЕКТРАЛЬНЫХ МЕТОДОВ  
ДИАГНОСТИКИ МАТЕРИАЛОВ И ПРОЦЕССОВ  
НА ОСНОВЕ МНОГОПАРАМЕТРИЧЕСКОГО ПОДХОДА**

Автореферат  
диссертации на соискание ученой степени  
доктора физико-математических наук  
по специальности 01.04.05 – оптика

Минск, 2023

Научная работа выполнена в Государственном научном учреждении  
«ИНСТИТУТ ФИЗИКИ имени Б. И. СТЕПАНОВА  
НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК БЕЛАРУСИ»

Официальные оппоненты: **Джагаров Борис Михайлович**,  
доктор физико-математических наук, профессор,  
главный научный сотрудник центра «Фотоника и  
фотохимия молекул» ИНСТИТУТА ФИЗИКИ  
НАН Беларуси  
**Кисель Виктор Эдвардович**,  
доктор физико-математических наук, профессор,  
заведующий Научно-исследовательским центром  
оптических материалов и технологий филиала  
Белорусского национального технического  
университета «Научно-исследовательский  
политехнический институт»  
**Семченко Игорь Валентинович**,  
доктор физико-математических наук, профессор,  
член-корреспондент НАН Беларуси,  
заместитель генерального директора по научной  
деятельности ГНПО «Оптика, оптоэлектроника и  
лазерная техника»

Оппонирующая организация: Белорусский государственный университет

Защита состоится 23 июня 2023 г. в 14<sup>30</sup> на заседании Совета по защите диссертаций Д 01.05.01 при ИНСТИТУТЕ ФИЗИКИ НАН Беларуси по адресу: 220072 пр-т. Независимости 68-2, г. Минск, Республика Беларусь; тел. ученого секретаря: +375 17 270-87-98; e-mail: m.parkhots@ifanbel.bas-net.by.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Государственного научного учреждения «ИНСТИТУТ ФИЗИКИ имени Б.И.СТЕПАНОВА НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК БЕЛАРУСИ».

Автореферат разослан 22 мая 2023 г.

Ученый секретарь  
совета по защите диссертаций  
кандидат физ.-мат. наук

М. В. Пархоц

## ВВЕДЕНИЕ

Оптический спектральный анализ является универсальным, экспрессным, неразрушающим и реализуемым в режиме реального времени научным методом исследований. Любой вид оптического спектра содержит в себе многопараметрические данные – информацию об объекте исследования, измеренную на большом количестве разных частот или длин волн. Поэтому для повышения качества результатов спектрального анализа и оптической диагностики материалов и процессов в настоящее время применяются многочисленные методы анализа многопараметрических данных MVA (multivariate data analysis) или многопараметрические методы. Иногда методы MVA ошибочно ассоциируют только с хемометрикой. Это обусловлено тем, что в химии многопараметрический анализ находит наиболее заметные применения. В определении хемометрики, сформулированном в 1988 году Д.Л. Массартом, наиболее четко выявлены цели применения методов MVA: «... дисциплина, применяющая математические, статистические и другие методы, основанные на формальной логике, для построения или отбора оптимальных методов измерения и планов эксперимента, а также для извлечения наиболее важной информации при анализе экспериментальных данных». Анализ больших объемов данных и выявление скрытых и неочевидных закономерностей являются особенностями многопараметрического подхода, которые проявляются лучше всего при его сравнении с классическим подходом, направленным на понимание сущности наблюдаемых эффектов, разделение незначительных и доминирующих факторов и определение по последним из них характеристик или закономерностей функционирования исследуемых систем. Многопараметрический подход не имеет целью понимание эффектов и концентрируется на прогнозировании, распознавании образов, классификации и решении других формальных задач. Классический подход как правило маломерен по зависимости от переменных, эффекты по возможности рассматриваются отдельно и их взаимное влияние редуцируется выбором подходящих модельных условий. В многопараметрическом подходе все переменные рассматриваются одновременно и модели соответствуют имеющимся экспериментальным данным. Это существенно отличает его от классического подхода, в котором экспериментальные результаты подтверждают или опровергают достоверность теоретической модели. Классический подход находит причинно-следственные отношения и обнаруживает новые естественные законы, а многопараметрический – обычно находит формальные отношения, которые могут являться причинно-следственными, а могут и не являться ими. При этом формальные многопараметрические модели часто более успешны при решении задач прогнозирования и классификации, чем со-

держательные. Классический и многопараметрический подходы по сути являются взаимодополняющими.

Постепенное внедрение методов MVA в спектроскопию началось в шестидесятых годах прошлого века с перехода от использования измерений на единственной длине волны для количественного определения искомого вещества к двухволновой модели. Еще в начале восьмидесятых годов основывающаяся на применении многопараметрических методов спектроскопия ближнего инфракрасного диапазона по мнению специалистов в области аналитической химии считалась априори неточной или даже ошибочной. Но к концу века ситуация изменилась: инфракрасная спектроскопия превратилась в одну из наиболее быстро растущих технологий. В последнее время спектроскопия широко внедрилась в различные отрасли промышленности не только из-за развитости аппаратных средств, простоты и экспрессного характера их использования, но и из-за повышения качества получаемых результатов вследствие применения методов MVA. С помощью методов MVA спектроскопия ближнего инфракрасного диапазона, ранее мало востребованная вследствие зашумленности спектров из-за интенсивного поглощения воды и влияния рассеяния света, стала наравне конкурировать со спектроскопией среднего инфракрасного диапазона для определения физических и химических характеристик исследуемых объектов.

Поиск новых закономерностей, установленных с помощью многопараметрических методов, представляется актуальной задачей с точки зрения расширения понимания содержащейся в спектрах информации. В диссертационной работе показано, что многопараметрический подход является не только дополняющим по отношению к классическому физическому подходу уникальным инструментом научных исследований, но и находит широкое применение при решении фундаментальных и прикладных задач.

## **ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ**

**Связь работы с крупными научными программами (проектами), темами**

Тема диссертации соответствует утвержденному научному плану работ ИНСТИТУТА ФИЗИКИ НАН Беларуси и приоритетным направлениям фундаментальных и прикладных научных исследований: пункт 1.3 из перечня на 2002–2005 годы (постановление Совета Министров Республики Беларусь от 29.01.2002 г. № 111), пункт 7.1 из перечня на 2006–2010 годы (постановление Совета Министров Республики Беларусь от 17.05.2005 г. № 512), пункты 6.2 и 6.3 из перечня на 2011–2015 годы (постановление Совета Министров Республики Беларусь от 19.04.2010 г. № 585), раздел 6 (Электроника и фотоника) из перечня на 2016–2020 годы (постановление Совета Министров Респуб-

лики Беларусь от 12.03.2015 г. № 190) и раздел 4 (Машиностроение, машиностроительные технологии, приборостроение и инновационные материалы) из перечня на 2021–2025 годы (Указ Президента Республики Беларусь от 7 мая 2020 г. № 156).

Исследования по диссертационной работе проводились в рамках выполнения следующих заданий государственных программ научных исследований и договоров:

1. ГКПНИ «Электроника», задание 1.30 «Исследование взаимодействия оптических сигналов с волоконными усилителями, нелинейными и бистабильными структурами на основе перспективных полупроводников, полимеров, допированных стекол и наноматриц и разработка эмиттеров-детекторов терагерцовых электромагнитных импульсов и полностью оптических функциональных узлов для оптоволоконных линий связи и сетей», рег. № 20063527, 2006–2010 гг.;

2. ГКПНИ «Фотоника», задание 01.2.15 «Разработка лазеров на кристаллах с центрами окраски с повышенной эффективностью и нелинейно-оптических методов анализа микроструктуры световых полей», рег. № 20063819, 2006–2010 гг.;

3. Договор с БРФФИ № Ф06-142 «Спектральная эффективность и узкополосная селекция света в оптических коммуникационных системах», рег. № 20063689, 2006–2008 гг.;

4. Договор с БРФФИ № Ф08Р-169 «Спектрально-люминесцентные и информационные характеристики новых прозрачных наностеклокерамик, активированных ионами эрбия и хрома», рег. № 20081806, 2008 – 2010 гг.;

5. Договор с БРФФИ № Ф10Р-157 «Активированная наностеклокерамика для люминесцентных датчиков температуры», рег. № 20102252, 2010–2012 гг.;

6. Договор с ООО «БИОСАН-Алкос» (г. Москва, Россия) «Исследование возможности идентификации водно-спиртовых растворов биологически активных добавок по оптическим характеристикам», рег. № 20110477, 2010–2011 гг.;

7. ГПНИ «Электроника и фотоника», задание 2.1.19 «Разработка эффективных методов генерации излучения и отражательной спектроскопии скрытых объектов терагерцового диапазона частот, а также хемометрических методов обработки данных для применений в науке, промышленности и медицине», рег. № 20141281, 2011–2015 гг.;

8. ГПНИ «Конвергенция», задание 3.1.01 «Температурные волоконно-оптические сенсоры и контрольно-измерительные системы на их основе с использованием статистических и нейросетевых методов обработки сигналов

для широкого применения, в том числе, в биологии и медицине», рег. № 20110590, 2011–2015 гг.;

9. Договор с ООО «БИОСАН-Алкос» (г. Москва, Россия) «Исследование особенностей оптических характеристик водно-спиртовых растворов биологически активных добавок», рег. № 20115550, 2011–2012 гг.;

10. Договор с БРФФИ № Ф13МЛД-011 «Классификация и идентификация винных дистиллятов методами многопараметрического анализа их спектральных характеристик», рег. № 20131813, 2013–2015 гг.;

11. Договор с БРФФИ № Ф15МЛД-008 «Классификация белых и красных вин по их географическому происхождению с помощью базирующегося на применении нечеткой логики многопараметрического анализа их спектральных характеристик», рег. № 20151476, 2015–2017 гг.;

12. ГПНИ «Фотоника, опто- и микроэлектроника», задание 1.1.05 «Разработка методов и аппаратных средств формирования, регистрации и многопараметрической обработки изображений, спектральных, поляризационных характеристик двух- и трехмерных объектов и метаматериалов в терагерцовой области частот», рег. № 20160048, 2016–2020 гг.;

13. Договор с БРФФИ № Ф18Р-238 «Активные среды для оптических люминесцентных приборов на основе германатных стекол и стеклокерамик, активированных ионами эрбия и иттербия», рег. № 20181451, 2018–2020 гг.;

14. Договор с БРФФИ № Ф19-060 «Интервальные линейные и нелинейные многопараметрические методы в спектральном анализе», рег. № 20192026, 2019–2021 гг.;

15. ГПНИ «Фотоника и электроника для инноваций», задание 1.1 «Разработка методов и устройств диагностики различных материалов и процессов с целью применения для оптической связи в свободном пространстве, адаптивной оптики, оптической микроскопии, терагерцовой и фотоакустической спектроскопии», рег. № 20210300, 2021–2025 гг.

### **Цель, задачи, объект и предмет исследования**

*Целью* работы является разработка новых и модификация традиционных многопараметрических методов с точки зрения их применения в спектральном анализе объектов, которые характеризуются типичностью свойств, для получения информации, позволяющей классифицировать такие объекты и проводить регрессионный анализ их характеристик.

*Объектами исследования* в диссертационной работе являются активированные редкоземельными ионами (эрбий, иттербий) кристаллы, стекла и стеклокерамики; стекла с медьсодержащими молекулярными кластерами; эрбиевые и тулиевые волоконные усилители и усилители на основе вынужденного комбинационного рассеяния света; молдавские дивины

(бренди), выдержанные винные дистилляты и вина; водки; растительные масла; кровь лабораторных мышей; лекарственные препараты.

*Предметами исследований* являются температурные зависимости интенсивности флуоресценции активированных сред; равномерность спектров усиления, шумовые характеристики, спектральная эффективность передачи информации и пропускная способность волоконных усилителей; физико-химические характеристики дистиллятов, вин, водок, масел, образцов крови и лекарственных препаратов.

Для достижения целей работы необходимо было решить следующие задачи в области развития многопараметрических методов и их применения.

1. Разработка многопараметрического метода разрешения штарковской структуры энергетических уровней активатора, основанного на определении физических явлений, которые описываются первыми главными компонентами температурной зависимости спектров флуоресценции и ответственны за изменение населенностей энергетических уровней активатора с изменением температуры.

2. Осуществление многопараметрической калибровки температуры с помощью анализа спектров флуоресценции и сравнение полученных результатов с результатами определения отношения интенсивностей флуоресценции с двух термально связанных уровней энергии активатора и однопараметрической калибровки температуры по времени затухания и по спектральному сдвигу флуоресценции.

3. Разработка не зависящего от нестабильности мощности возбуждающего излучения многопараметрического метода частичных наименьших квадратов по комбинации движущихся спектральных окон и дивизимного генетического алгоритма, применяемых совместно с методом главных компонент и иерархическим кластерным анализом, для уменьшения отклонения калибровки температуры.

4. Проведение классификации винных дистиллятов, дивинов и вин по производителю с помощью многопараметрического анализа спектров пропускания в UV, Vis и NIR диапазонах, уменьшение отклонения многопараметрической калибровки физико-химических характеристик вин путем применения интервальных методов выбора спектральных переменных, выявление фальсификации дивинов и вин защищенного географического указания с помощью многопараметрических методов спектрального анализа.

5. Обнаружение многопараметрическими методами поддельных водок по их спектральным характеристикам при использовании унифицированной добавки в концентрации, не превышающей величины допустимого уровня потребления, и отсутствии априорной информации о сорте продукции.

6. Развитие новых методов оптической диагностики растительных масел; образцов крови заражённых карциномой мышей, которые подверглись облучению лазерным излучением и воздействию противоопухолевого препарата; лекарственных средств на основе многопараметрического анализа их спектральных характеристик.

7. Многопараметрическая оптимизация комбинированной накачки волоконных усилителей, активированных эрбием или тулием, и усилителей на основе вынужденного комбинационного рассеяния света для достижения максимального и равномерного усиления и низких значений шум-фактора.

8. Разработка новых одно- и многопараметрических информационных критериев качества материалов для волоконных усилителей и их сопоставление с традиционно применяемыми.

Первые три задачи решались с помощью флуоресцентной Vis и NIR спектроскопии, следующие три – с помощью абсорбционной спектроскопии UV, Vis и NIR диапазонов, в шестой задаче была привлечена также спектроскопия ТГц диапазона частот. Для решения задач были применены следующие многопараметрические методы: метод главных компонент, метод частичных наименьших квадратов, интервальные методы выбора спектральных переменных, иерархический кластерный анализ, генетический алгоритм, искусственные нейронные сети, дискриминантный анализ, метод построения деревьев классификации, метод опорных векторов, методы k- и с-средних, алгоритм последовательного проецирования, метод ранжирования спектральных переменных, метод независимых компонент.

### **Научная новизна**

1. На основе анализа температурной зависимости флуоресценции активированных ионами эрбия сред впервые установлена связь между тремя первыми главными компонентами спектров и наблюдаемыми физическими явлениями: перераспределением населенностей энергетических уровней  $^2H_{11/2}$  и  $^4S_{3/2}$ ; температурным тушением флуоресценции и перераспределением населенностей штарковских подуровней уровня  $^4S_{3/2}$ .

2. Разработан новый метод разрешения штарковской структуры энергетических уровней активатора, основанный на применении метода главных компонент к температурной зависимости спектров флуоресценции при умеренных положительных температурах.

3. Предложен метод калибровки температуры по нормированным спектрам флуоресценции сред, активированных ионами редкоземельных элементов, с помощью одновременного использования метода главных компонент, иерархического кластерного анализа и интервального метода частичных наименьших квадратов по комбинации движущихся окон, содержащих на одну

спектральную переменную больше, чем используемое количество латентных переменных. Отклонение предложенной калибровки меньше отклонения в методе определения отношения интенсивностей флуоресценции с двух термально связанных уровней энергии активатора и в других однопараметрических методах и не зависит от нестабильности мощности возбуждающего излучения.

4. Показано, что представление спектров пропускания винных дистиллятов в диапазоне длин волн излучения 190–2600 нм в двумерном пространстве главных компонент позволяет идентифицировать производителя дистиллятов, а длины волн 370 и 520 нм следует использовать для определения цветовых характеристик вин и винных дистиллятов вместо традиционно используемых длин волн 420 и 520 нм.

5. Разработана модификация поиска комбинации движущихся окон в интервальном методе частичных наименьших квадратов для калибровки физико-химических показателей вин по их широкополосным спектрам пропускания, позволившая количественно калибровать содержание в них магния, бутиленгликоля, золы и фенольных соединений для белых и красных вин, калия, кальция, щавелевой, яблочной и янтарной кислот для красных вин и винной, лимонной, молочной кислот и растворимых солей для белых вин.

6. Впервые осуществлена достоверная классификация поддельной водочной продукции априори неизвестных производителя и состава путем применения методов кластерного анализа в пространстве главных компонент спектров пропускания UV и Vis диапазонов при введении унифицированной добавки в концентрации, не превышающей величины допустимого уровня потребления.

7. Создана многопараметрическая классификационная модель образцов высушенной крови заражённых карциномой Эрлиха лабораторных мышей, подвергшихся облучению лазерным излучением и лечению противоопухолевым препаратом, на основе метода построения деревьев классификации в пространстве главных компонент спектров оптической плотности крови в диапазоне 360–2500 нм, нормированных на длине волны максимума полосы поглощения оксигемоглобина 576 нм.

8. С помощью генетического алгоритма впервые реализован метод одновременного поиска длин волн и мощностей комбинированной накачки волоконного усилителя на основе вынужденного комбинационного рассеяния света для оптических сигналов со спектральным уплотнением с целью достижения минимальной неравномерности спектра усиления и осуществлена оптимизация схем накачки тулиевого волоконного усилителя в полностью пространственно и спектрально разрешенной модели.

9. Вместо традиционных спектральных критериев сравнения материалов для волоконных усилителей впервые введены информационные критерии – однопараметрическая спектральная эффективность передачи информации и многопараметрическая пропускная способность, на основе которых показано, что в коммуникационных системах с отдельными спектральными полосами лучшим материалом для стандартной полосы (1520–1570 нм) является алюмо-фосфат-силикатное волокно, а для длинноволновой полосы (1570–1610 нм) — цинк-натрий-германо-теллуридное волокно.

### **Положения, выносимые на защиту**

1. Штарковская структура энергетических уровней иттербия определяется с точностью  $2 \text{ см}^{-1}$  с использованием метода главных компонент для температурной зависимости спектров флуоресценции с разрешением 0,2 нм при температурах от комнатной до 423 К.

2. Многопараметрическая калибровка температуры, основанная на применении метода частичных наименьших квадратов для нормированных на максимум спектров флуоресценции активатора, а также поиска комбинации движущихся окон, содержащих на одну спектральную переменную больше, чем количество латентных переменных в широкополосной калибровке. Предложенная калибровка характеризуется точностью, более чем в два раза превышающей точность метода калибровки температуры, основанного на определении отношения интенсивностей флуоресценции при переходах с двух термально связанных уровней энергии активатора.

3. Методика применения информационных критериев качества, таких как спектральная эффективность передачи информации (однопараметрический критерий) и пропускная способность (многопараметрический критерий), для выбора материала волоконного усилителя в составе оптических линий связи.

4. Применение генетического алгоритма для одновременного поиска длин волн и мощностей четырех мультиплексированных встречных накачек волоконного усилителя на основе вынужденного комбинационного рассеяния света в рамках модели, которая учитывает взаимодействие накачек и 50 спектрально-уплотненных сигналов и релеевское рассеяние, обеспечивает допустимую в волоконно-оптических линиях связи неравномерность спектра усиления менее  $\pm 1 \text{ дБ}$  в диапазоне шириной 80 нм при суммарной мощности накачек около 900 мВт.

5. Методика количественной калибровки девяти физико-химических показателей красных вин и восьми – белых по оптическим спектрам пропускания (диапазон длин волн от 220 для белых вин и 290 для красных до

2500 нм) на основе поиска комбинации движущихся спектральных окон в методе частичных наименьших квадратов.

6. Метод достоверной классификации поддельной водочной продукции на основе применения кластерного анализа в двумерном пространстве главных компонент оптических спектров пропускания, измеренных в диапазоне длин волн 200–850 нм, при использовании унифицированной добавки в концентрации, которая не превышает величины допустимого уровня потребления, в качестве легализующего компонента водки.

7. Выявление подделки льняного масла нерафинированным подсолнечным с пределом обнаружения 1,2 % с помощью калибровки его содержания в бинарной смеси по спектрам оптической плотности в объединенных диапазонах длин волн 350–690, 1130–1698 и 1766–2200 нм методом частичных наименьших квадратов с выбором спектральных переменных методом поиска комбинации движущихся окон.

8. Метод достоверной классификации образцов высушенной крови здоровых мышей и заражённых карциномой Эрлиха мышей, подвергшихся облучению низкоинтенсивным лазерным излучением с длиной волны 1960 нм и лечению противоопухолевым препаратом, основанный на построении дерева классификации в четырехмерном пространстве главных компонент спектров оптической плотности, измеренных в диапазоне 360–2500 нм и нормированных на длине волны максимума полосы поглощения оксигемоглобина 576 нм.

### **Личный вклад соискателя ученой степени в результаты диссертации**

Основные представленные в диссертации результаты, определяющие научную и практическую значимость работы, получены соискателем самостоятельно. Личный вклад соискателя заключается в определении цели исследования, постановке задач, создании и модернизации экспериментальных установок, разработке методик экспериментальных измерений и их реализации, выполнении измерений, обработке полученных данных, разработке новых и модификации традиционных методов многопараметрического анализа данных и интерпретации полученных результатов.

При проведении исследований температурных зависимостей спектров флуоресценции Акиншев К.А., канд. физ.-мат. наук Бабкина А.Н., Клементьева А.В., канд. физ.-мат. наук Клинков В.А., доктор хим. наук Колобкова Е.В., Кузьменко Н.К., доктор физ.-мат. наук Малашкевич Г.Е., Федоров Ю.К., Цимерман Е.А. и канд. физ.-мат. наук Ширшнев П.С. проводили работы по созданию образцов и их подготовке к проведению исследований. Борисевич Д.А., канд. физ.-мат. наук Варакса Ю.А., канд. физ.-мат. наук Саскевич Н.А., канд. физ.-мат. наук Демеш М.П. и канд. физ.-мат. наук Ясюкевич А.С. участвовали в выполнении измерений температурных зависимостей спектров флуорес-

ценции. Канд. физ.-мат. наук Сеницын Г.В., канд. физ.-мат. наук Асеев В.А. и доктор физ.-мат. наук Никоноров Н.В. участвовали в обсуждении полученных результатов.

При исследовании винных дистиллятов и вин защищенного географического указания канд. техн. наук Дегтярь Н.Ф., Камбур (Незальзова) Е.И. и канд. техн. наук Обадэ Л.И. проводили работу по подбору исследуемых образцов и измерениям их физико-химических характеристик; Роговая М.В., Трофимова Д.В., Минко И.С. участвовали в измерении спектров пропускания образцов; канд. физ.-мат. наук Сеницын Г.В., академик АН Молдовы Гаина Б.С. и докт. тех. наук Скорбанова Е.А. принимали участие в обсуждении полученных результатов.

При проведении работ по определению фальсифицированных алкогольных напитков Роговая М.В. и Казберук А.В. участвовали в измерении спектров пропускания образцов; Доля В.М. проводил работу по подбору образцов; канд. физ.-мат. наук Сеницын Г.В., Гресько М.А. и Доля В.М. участвовали в составлении технического задания на выполнение НИОКР и обсуждении результатов.

В исследовании возможностей идентификации и калибровки содержания льняного масла в бинарных смесях принимала участие Борисевич Д.А.

При осуществлении классификации проявлений биологических действий лазерного излучения и лекарственного противоопухолевого препарата Манина Е.Ю., канд. биол. наук Кузнецова Т.Е. и Горбунова Н.Б. вели работы по отбору проб и их подготовке, канд. физ.-мат. наук Батай Л.Е., канд. физ.-мат. наук Ходасевич И.А. и Фесько С.В. принимали участие в решении задач, не вошедших в диссертационную работу.

При проведении анализа фармацевтической продукции на основе ТГц спектроскопии Ляхнович А.В. проводил измерения спектров и вместе с академиком Гончаренко А.М., канд. физ.-мат. наук Сеницыным Г.В. и Борисевич Д.А. принимал участие в обсуждении полученных результатов.

В работах по применению многопараметрических методов спектрального анализа для определения характеристик волоконно-оптических усилителей канд. физ.-мат. наук Варакса Ю.А. и Коваль С.А. участвовали в проведении численного моделирования, канд. физ.-мат. наук Сеницын Г.В., канд. физ.-мат. наук Ясюкевич А.С., канд. физ.-мат. наук Асеев В.А., доктор хим. наук Колобкова Е.В. и доктор физ.-мат. наук Никоноров Н.В. участвовали в обсуждении результатов.

## **Апробация диссертации и информация об использовании ее результатов**

Основные результаты работы были представлены на XII и XVI международных научных конференциях «Оптика лазеров» (С.-Петербург, 2006 / 2014); на международных конференциях по лазерам, применениям и технологиям LAT2007 (Минск, 2007) и по когерентной и нелинейной оптике и лазерам, применениям и технологиям ICONO/LAT2010 (Казань, 2010); на 5-ой и 8-ой международных научно-технических конференциях «Приборостроение» (Минск, 2012 / 2015); на международном семинаре по фотонике и применениям IWPA (Nha Trang / 2008); на 17-ом Международном симпозиуме «Nanostructures: Physics and Technology» (Minsk / 2009); на III-ей международной научной конференции «Проблемы взаимодействия излучения с веществом» (Гомель / 2011); на VII-ой и IX-ой Международных конференциях «Лазерная физика и оптические технологии» (Минск / 2008, Гродно / 2012); на V-ом и VI-ом Конгрессах физиков Беларуси (Минск, 2015 / 2017); на 9-ой, 11-ой и 12-ой международных научно-технических конференциях «Квантовая электроника» (Минск / 2013, 2017 и 2019); на международном симпозиуме «Перспективные материалы и технологии» (Витебск / 2013); на IV-ой международной научной конференции «Наноструктурные материалы-2014: Беларусь – Россия – Украина» (Минск / 2014); на XI-ом съезде Белорусского общественного объединения фотобиологов и биофизиков (Минск / 2014); на VIII-ой, XI-ой и XII-ой международных конференциях «Фундаментальные проблемы оптики» (Санкт-Петербург / 2014, 2019 и 2020); на 11-ой международной конференции «Взаимодействие излучений с твердым телом» (Минск / 2015); на международной научной конференции «Optics of Crystals» (Мозырь / 2014); на VI-ой, VIII-ой и IX-ой международных конференциях по фотонике и применениям ICRA (Da Nang city / 2010 и 2014 и Ninh Binh city / 2016); на международной научной конференции «Modern Technologies in the Food Industry» (Кишинев / 2018); на международной научной конференции «Оптика неоднородных структур 2019» (Могилев / 2019).

По результатам, полученным при выполнении совместного проекта БРФФИ и Академии наук Молдовы № Ф13МЛД-011 «Классификация и идентификация винных дистиллятов методами многопараметрического анализа их спектральных характеристик» (2013–2015 гг.), 17 декабря 2014 г. на Ученом совете Научно-практического института садоводства, виноградарства и пищевых технологий Академии наук Молдовы была утверждена приведенная в приложении Б к диссертации методика «Классификация и идентификация винных дистиллятов методами многопараметрического анализа их спектральных характеристик». По результатам выполнения договоров с ООО «БИОСАН-Алкос» (г. Москва, Россия) была утверждена «Методика

проведения испытаний комплекса «ALKONTROL» (приложение Ж к диссертации) и 30 января 2015 г. была проведена проверка продукции завода «Традиции качества» группы компаний «Синергия» в г. Краснознаменск Московской области, протокол которой приведен в приложении И к диссертации.

Результаты диссертации были использованы при выполнении проекта БРФФИ-РФФИ № Ф20Р–342 «Флуоресцентные нанозонды на основе активированных неодимом кристаллов  $(Y_{1-x}Gd_x)_2O_3$  и  $(Y_{1-x}Gd_x)_3Al_5O_{12}$  для биомедицинских температурных измерений» (2020–2022 гг.), в рамках которого было показано преимущество разработанной многопараметрической калибровки температуры, позволяющей использовать синтезированные материалы и многопараметрические методы для локализации областей с повышенной температурой в биологических и медицинских целях со среднеквадратичным отклонением калибровки до 0,8 К.

Оригинальные методы многопараметрического подхода в оптической диагностике материалов используются при выполнении следующих договоров, результаты которых не вошли в настоящую работу: задания 1.18 «Разработать и изготовить аппаратно-программный комплекс для отработки методик калибровки и измерений элементного состава низколегированных сталей и сплавов» подпрограммы «Оборудование для перспективных научных исследований» ГНТП «Национальные эталоны и высокотехнологичное исследовательское оборудование» (2021–2022 гг.), проекта «Альтернативные методы качества и аутентичности для сахарной и кондитерской промышленности» европейской программы «Горизонты-2020» (№ 101008228, 2021–2022 гг.) и проекта БРФФИ № Ф22-031 «Классификация отходов из полимеров с помощью применения многопараметрических методов и нечеткой логики в ИК и ТГц спектроскопии» (2022–2024 гг.)

При выполнении задания ГНТП «Национальные эталоны и высокотехнологичное исследовательское оборудование» разработаны многопараметрические количественные модели для калибровки концентраций шести химических элементов (для С среднеквадратичное отклонение 0,04 % в диапазоне концентрации 0,03–0,64 %, для Mn 0,02 % и 0,11–1,81 %, для Si 0,01 % и 0,04–0,79 %, для Cr 0,01 % и 0,04–0,94 %, для Ni 0,007 % и 0,04–0,60 % и для Cu 0,006 % и 0,01–0,46 %) в эталонных образцах низколегированных сталей. Результаты получены на основе лазерно-искровой эмиссионной спектроскопии низкого разрешения (спектральный диапазон 172–507 нм с разрешением 0,4 нм и шагом 0,1 нм), на сегодняшний день считающейся полуколичественной с недостаточной для широкого практического применения точностью.

Белорусской стороной проекта программы «Горизонты-2020» была достигнута достоверная классификация образцов тростникового и свекловичного сахаров из 9 стран-производителей с помощью линейного дискрими-

нантного анализа в двумерном пространстве первых двух главных компонент спектров оптической плотности 25 % водных растворов сахаров в диапазоне длин волн 200–600 нм и проведена калибровка содержания свекловичного сахара в смеси с тростниковым интервальным методом частичных наименьших квадратов, которые показали перспективность использования UV-Vis спектроскопии и многопараметрических методов для идентификации растительного источника сахарозы вместо метода релаксометрии ядерного магнитного резонанса, принятого в качестве стандартного в странах Евросоюза.

### **Опубликованность результатов диссертации**

Основные результаты диссертационных исследований представлены в 73 публикациях, в том числе: в 29 статьях в научных реферируемых журналах, соответствующих пункту 19 Положения о присуждении ученых степеней и присвоении ученых званий, общим объемом 15,4 авт. л., и в 44 статьях в сборниках трудов научных конференций.

### **Структура и объем диссертации**

Диссертационная работа состоит из введения, общей характеристики работы, обзорной главы 1, глав 2–7 с результатами оригинальных исследований, заключения и восьми приложений. Она изложена на 287 страницах, включая 153 иллюстрации на 124 страницах и 24 таблицы на 28 страницах. Список использованных источников включает 300 наименований.

## **ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ**

**В первой главе** диссертации в обзоре литературы рассматриваются основы методов многопараметрического анализа, таких как метод главных компонент, метод частичных наименьших квадратов, дискриминантный анализ, построение классификационных деревьев, кластерный анализ, метод независимых компонент, метод опорных векторов, построение искусственных нейронных сетей, генетический алгоритм, методы выбора спектральных переменных. На примерах научных и практических применений многопараметрических методов в спектроскопии показаны их главные задачи: структурное упрощение данных, классификация и идентификация исследуемых объектов, калибровка или регрессионное определение параметра, прямое измерение которого затруднено или нецелесообразно. Возможность решения этих задач и огромный потенциал применения многопараметрических методов в спектральном анализе с целью упрощения количественных и качественных испытаний объектов определяют актуальность исследований, которые не только рассматривают математические и статистические основы многопараметрических методов, но также могут быть успешно применены и для реше-

ния фундаментальных задач. В первой главе сформулированы также цели и основные задачи диссертационной работы.

**Во второй главе** диссертации приведено описание применения многопараметрических методов для решения задачи определения штарковской структуры уровней энергии редкоземельных ионов по температурной зависимости спектров флуоресценции при умеренных положительных температурах.

В диапазоне температур от 317 до 423 К с шагом 2 К с помощью многопараметрического метода главных компонент была исследована температурная зависимость спектров флуоресценции эрбия в свинцово-фторидной наностеклокерамике в трех диапазонах длин волн: 403,8–414,3 нм, который соответствует переходу с уровня энергии  $^2H_{9/2}$  на основной уровень  $^4I_{15/2}$ , 517,1–555,2 нм – с уровней  $^2H_{11/2}$  и  $^4S_{3/2}$  и 645,0–670,7 нм – с уровня  $^4F_{9/2}$ . Было показано, что с первыми тремя главными компонентами можно связать физические явления, ответственные за изменения спектров. Так, первая главная компонента, которая описывает 99,5 % суммарной дисперсии спектров, обусловлена перераспределением населенностей энергетических уровней  $^2H_{11/2}$  и  $^4S_{3/2}$ , вторая (4,3 % дисперсии) – температурным тушением флуоресценции, а третья (0,1 %) – перераспределением населенностей штарковских подуровней энергетического уровня  $^4S_{3/2}$ . Было высказано предположение о соответствии длин волн пиков нагрузок в главные компоненты и длин волн переходов между штарковскими подуровнями эрбия. Для его проверки был выбран ион иттербия в матрицах  $Y_3Al_5O_{12}$  и  $CaF_2$ , энергетическая структура которого состоит всего из двух уровней. При измерении спектров флуоресценции температура изменялась от комнатной до 423 К с шагом 2 К. Анализ спектров флуоресценции иттербия проводился в пространстве двух главных компонент, которые объясняют более 99 % суммарной дисперсии для обеих сред. На рисунке 1а представлены переходы, которые используются в традиционных методах абсорбционной и флуоресцентной спектроскопии с временным разрешением при низких температурах. Анализ двумерного графика нагрузок спектров флуоресценции  $Yb^{3+}$  (рисунок 1в) показывает, что через пять пиков нагрузок в первую главную компоненту на длинах волн 1048,0, 1030,2, 989,0, 980,7 и 917,6 нм можно провести прямую линию. Нахождение точек, соответствующих первым четырем приведенным длинам волн с одной и той же стороны этой прямой от начала координат указывает на то, что зависимости интенсивности флуоресценции на этих длинах волн от температуры одинаковы. Следовательно, начальный подуровень соответствующих переходов совпадает. Учитывая условия теплового равновесия населенностей подуровней мультиплета  $^2F_{5/2}$ , переходы, ответственные за флуоресценцию ионов иттербия на приведенных длинах волн, можно идентифицировать как переходы  $5 \rightarrow 1$ ,  $5 \rightarrow 2$ ,  $5 \rightarrow 3$  и  $5 \rightarrow 4$  (рисунок 1б). Точка, соответ-

ствующая длине волны 917,6 нм на рисунке 1в, находится на указанной прямой линии по другую сторону от начала координат. Такое расположение означает противоположную температурную зависимость интенсивности флуоресценции по сравнению с переходами с подуровня 5. А самая короткая длина волны этого пика флуоресценции среди всех шести рассматриваемых определяет этот переход как  $7 \rightarrow 1$ . Оставшаяся из отмеченных квадратом на рисунке 1в точка (1013,3 нм) определена как соответствующая переходу  $6 \rightarrow 3$ . Полученные результаты демонстрируют хорошее согласие с литературными данными, а отклонение определения энергии верхнего мультиплета для исследованного случая составляет около  $2 \text{ см}^{-1}$ .

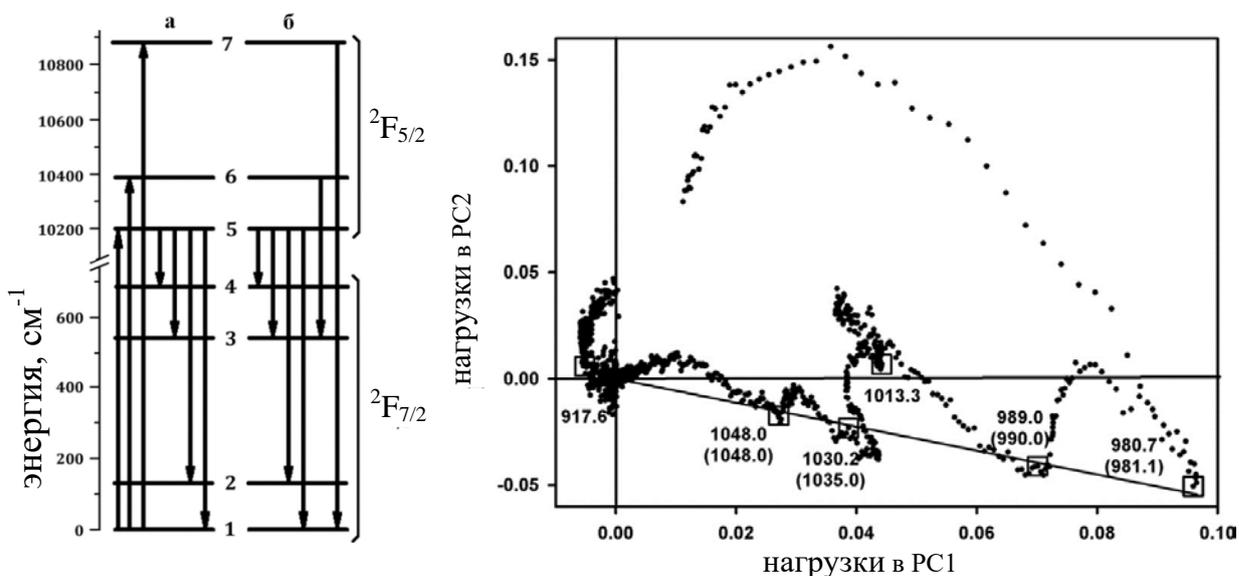


Рисунок 1 – Схема энергетических уровней  $\text{Yb}^{3+}$  в  $\text{CaF}_2$  (а и б) и двумерный график нагрузок для спектров флуоресценции (в)

**В третьей главе** многопараметрические методы применены для калибровки температуры по спектрам флуоресценции сред, активированных ионами редкоземельных элементов, и проведено сравнение точности построенных многопараметрических моделей и используемых на сегодняшний день методов. В качестве традиционных методов калибровки температуры рассмотрены ратиометрический метод нахождения отношения интенсивностей флуоресценции при переходах с двух термально связанных уровней энергии активатора, калибровка температуры по спектральному сдвигу и по времени затухания флуоресценции. Также проанализированы построение искусственной нейронной сети по спектральным переменным спектров флуоресценции и по их главным компонентам.

Для калибровки температуры по широкополосным спектрам флуоресценции впервые был применен многопараметрический метод частичных наименьших квадратов. Аппробация предложенного метода в диапазоне от 317 до 423 К на спектрах флуоресценции эрбия в свинцово-фторидной стеклоке-

рамыке показала для четырех латентных переменных коэффициент корреляции калибровочной прямой, равный 1,00 для обучающей выборки и 0,99 для проверочной и относительное отклонение оценки температуры не более 0,15 % при температурах выше 340 К, что приблизительно вдвое меньше отклонения калибровки методом отношения интенсивностей флуоресценции.

Повышение точности многопараметрической калибровки температуры возможно с помощью выбора спектральных переменных и формирования обучающей выборки с помощью метода главных компонент и иерархического кластерного анализа. Предложенная модификация метода поиска комбинации движущихся окон, содержащих на одну спектральную переменную больше, чем используемое количество латентных переменных в широкополосном методе частичных наименьших квадратов, повышает точность калибровки температуры по спектрам флуоресценции активированного иттербием  $\text{CaF}_2$  в диапазоне длин волн 893–1107 нм при температуре от 339 до 423 К более чем в 2 раза до 0,45 К.

Показано, что применение дополнительного вида предобработки данных в виде нормировки каждого спектра на его максимальное значение позволяет нивелировать преимущество ратиометрического метода калибровки температуры по отношению интенсивностей флуоресценции, не зависящего от нестабильности мощности возбуждающего излучения. Результаты многопараметрического моделирования методом частичных наименьших квадратов с поиском комбинации движущихся окон по спектрам зеленой флуоресценции ионов эрбия в соактивированных эрбием и иттербием германатных стеклах и стеклокерамиках показали, что керамика  $\text{GeO}_2\text{--Na}_2\text{O--Yb}_2\text{O}_3\text{--MgO--La}_2\text{O}_3\text{--Er}_2\text{O}_3$  характеризуется тремя лучшими показателями среди рассмотренных образцов: среднеквадратичным отклонением калибровки температуры 0,37 К, остаточным отклонением 103 и относительным отклонением 0,2 % (рисунок 2б).

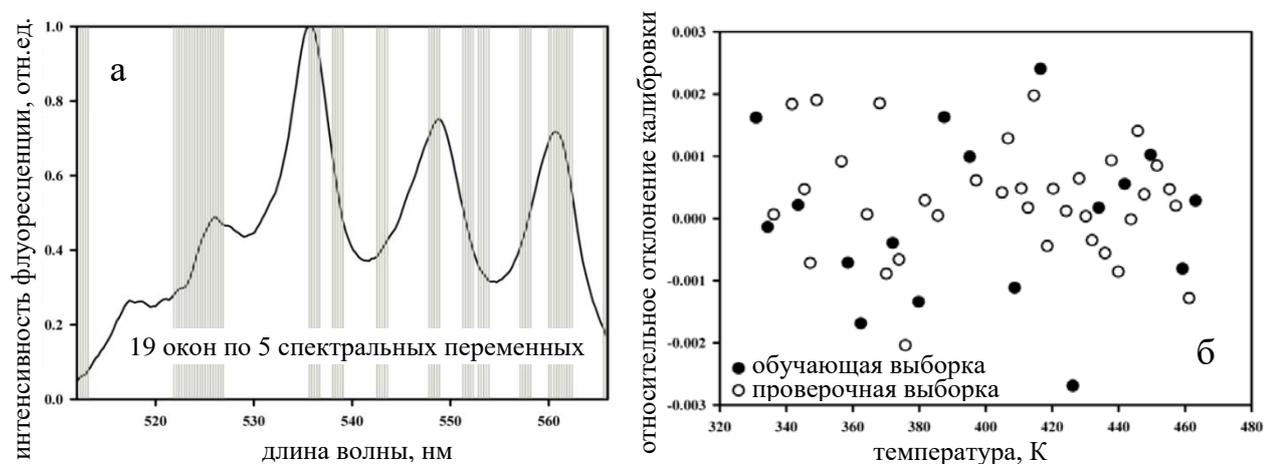


Рисунок 2 – 95 спектральных переменных (а) в нормированных спектрах флуоресценции ионов эрбия в германатной керамике с добавлением оксида магния, калибровка температуры по которым характеризуется минимальным среднеквадратичным отклонением, и относительное отклонение калибровки (б)

На примере калиевоалюмооборотного стекла с молекулярными кластерами меди было проведено сравнение калибровки температуры линейной аппроксимацией длины волны максимума спектра флуоресценции и многопараметрическим методом частичных наименьших квадратов по спектрам, измеренным в диапазоне длин волн 450–1000 нм при температурах 295–624 К с шагом около 8 К. Было показано, что 4 % относительное отклонение калибровки температуры по положению максимума спектра может быть уменьшено до величины 1,2 % с помощью применения многопараметрического метода (рисунок 3).

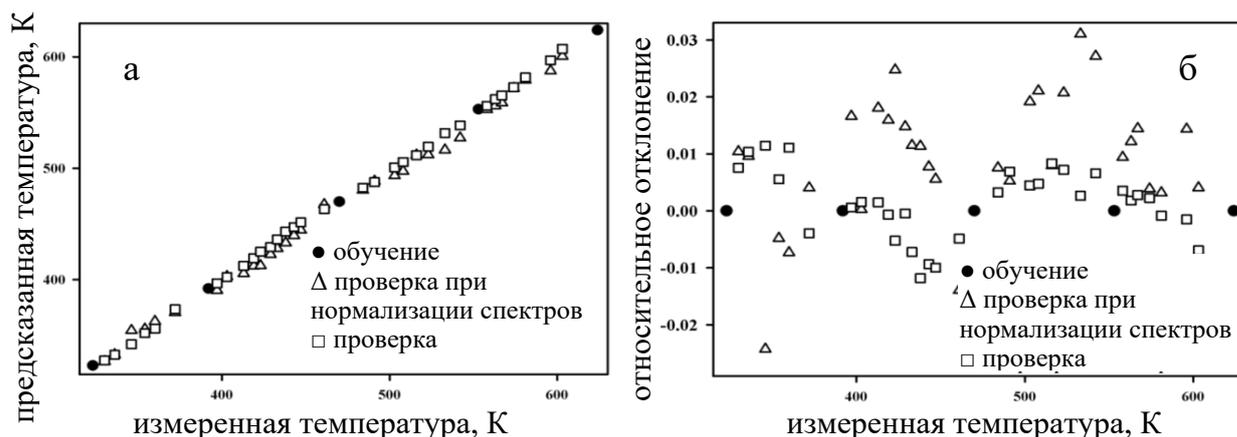


Рисунок 3 – Соотношение между температурой, предсказанной с помощью многопараметрического метода частичных наименьших квадратов по спектрам флуоресценции калиевоалюмооборотного стекла с медьсодержащими молекулярными кластерами, и измеренной температурой (а) и относительное отклонение калибровки (б)

**В четвертой главе** описаны результаты применения многопараметрических методов анализа спектральной информации для проведения идентификации, классификации и калибровки характеристик алкогольных напитков.

Спектры пропускания 44 винных дистиллятов шести производителей и 24 дивинов двух производителей были измерены в диапазоне 190–2600 нм. Применение дискриминантного анализа в двумерном пространстве главных компонент измеренных спектров позволяет правильно классифицировать 12 пар производителей дистиллятов. Построенное в пространстве трех главных компонент дерево классификации (рисунок 4а) достоверно классифицирует дистилляты пяти производителей из рассмотренных шести.

Для исследуемых образцов дивинов методом частичных наименьших квадратов была проведена калибровка концентраций этилацетата (рисунок 4б) (относительное отклонение не выше 6 %), галловой кислоты (20 %), сиреневого альдегида (3 %) и ванилина (16 %). Также были осуществлены многопараметрические калибровки физико-химических показателей 38 образцов (21 красное и 17 белых) вин региона «Valul lui Traian» по их спектрам пропускания (для красных вин измеренный диапазон длин волн 290–2500 нм,

для белых — 220–2500 нм). Достигнутая точность (относительное отклонение от 3 % для винной кислоты в красных винах до 21 % для глицерина в белых) является приемлемой для регрессионного определения параметров вин нехимическими методами.

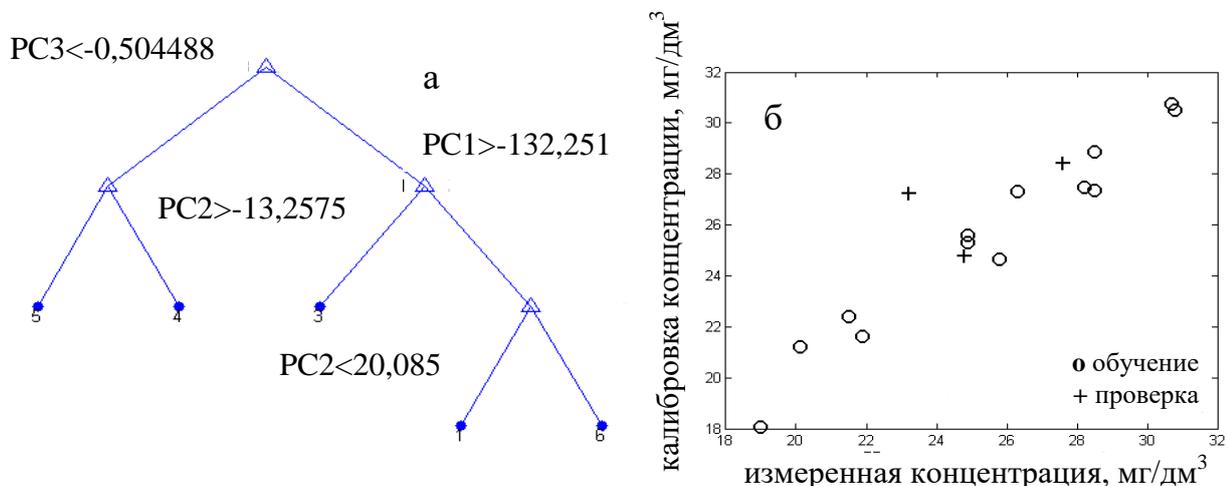


Рисунок 4 – Дерево классификации молдавских винных дистиллятов по производителям по трем главным компонентам их спектров пропускания (а) и калибровка концентрации этилацетата в образцах дивинов многопараметрическим методом частичных наименьших квадратов по спектрам пропускания (б)

Проведенный анализ кластеризации образцов вин в пространстве главных компонент спектров пропускания показал, что использование метода «спектрального отпечатка» позволяет определить выбросы по классификационному признаку принадлежности вин к региону «Valul lui Traian», а для образцов дивинов – определять фальсифицированную продукцию. Для проверки общности характеристик вин категории защищенного географического указания региона «Valul lui Traian» было проведено исследовательское сравнение с винами соседнего региона «Stefan-Voda». На примере вин сорта Cabernet Sauvignon была показана успешная дискриминация вин многопараметрическими методами линейного и квадратичного дискриминантного анализа и опорных векторов (рисунок 5).

Логичным продолжением работ по выявлению поддельной продукции явились исследования возможности решения задачи защиты легальных водок от фальсификации. Было предложено использовать удовлетворяющую требованиям нормативных документов унифицированную добавку с концентрацией, минимально допустимой для обнаружения с помощью измерения спектров пропускания. Два разработанных адаптивных алгоритма идентификации водок с универсальной добавкой, использующих не более четырех спектральных переменных, были апробированы на примере 153 водок 110 различных сортов. В первом алгоритме, характеризующемся наглядностью и надежностью в условиях стабильности оптических характеристик выпускае-

мых водок, анализируемым показателем являлась разность между референсным и измеряемым спектрами пропускания проверяемой водки. При разработке второго алгоритма, для которого нестабильность характеристик водок является менее критичной по сравнению с первым алгоритмом, был использован метод анализа попадания производной разностного спектра пропускания в пределы, характерные для исследуемой марки водки на выбранных длинах волн.

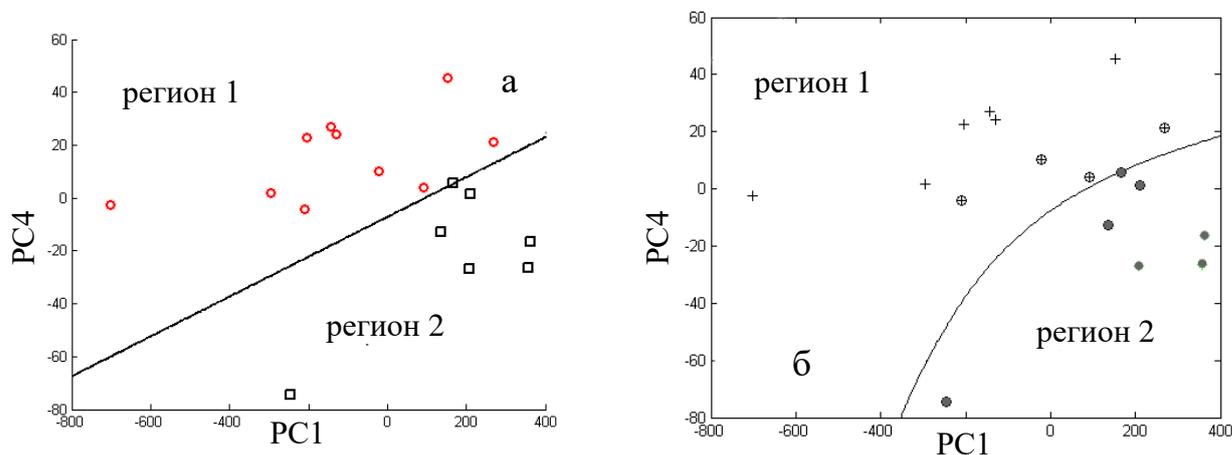


Рисунок 5 – Дискриминация вин сорта Cabernet Sauvignon по принадлежности географическим регионам с помощью метода линейного дискриминантного анализа (а) и метода опорных векторов (б) в пространстве первой и четвертой главных компонент спектров пропускания

Приборная реализация второго алгоритма в макете комплекса «ALKONTROL» на базе спектрометра Ocean Optics USB650-UV-VIS, управляемого оригинальным программным обеспечением, была успешно апробирована 30 января 2015 г. на заводе «Традиции качества» (г. Краснознаменск Московской обл.). Недостаток примененного метода, заключающийся в необходимости априорного знания референсного спектра идентифицируемой водки, может быть преодолен путем применения многопараметрического анализа спектров с целью разделения исследуемых образцов на два класса. Применение многопараметрических методов кластерного анализа (иерархический кластерный анализ или метод с-средних) в двумерном пространстве главных компонент, описывающих более 92 % дисперсии спектров пропускания 153 пар (легальная водка / подделка) образцов, позволило правильно классифицировать все поддельные водки (рисунок б).

**Пятая глава** начинается с изложения результатов исследования возможности выявления подделок пищевых продуктов с помощью оптической диагностики с применением анализа многопараметрических данных. Среди поддельной пищевой продукции около 11 % составляют масла. Из растительных масел наиболее часто подделке подвержено оливковое. Но самым полезным для здоровья человека является льняное масло. Для решения задачи ко-

личественного определения подделки льняного масла по UV-Vis-NIR спектрам оптической плотности и Vis спектрам диффузного отражения был применен многопараметрический спектральный анализ для построения регрессионных моделей, основанных на методе главных компонент, иерархическом кластерном анализе и методе частичных наименьших квадратов. Спектры оптической плотности (длины волн 350-690 нм, 1130-1698 нм и 1766–2200 нм) 24 бинарных смесей льняного и нерафинированного подсолнечного масел с различным процентным содержанием, один из которых представлен на рисунке 7а, были разделены на обучающую и проверочную выборки с помощью иерархического кластерного анализа счетов в первую главную компоненту.

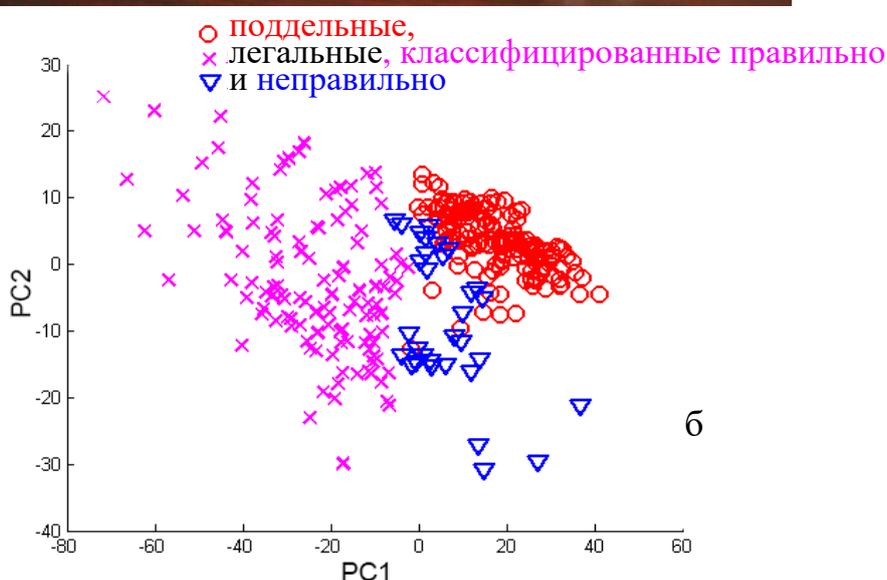


Рисунок 6 – Лабораторный макет комплекса «ALKONTROL» (а) и классификация водок с помощью многопараметрического кластерного анализа (б)

Калибровка содержания льняного масла в смеси с подсолнечным с помощью регрессии на 2 главные компоненты и метода частичных наименьших квадратов с 6 латентными переменными характеризуются приблизительно одинаковыми показателями качества (среднеквадратичное отклонение по проверочной выборке 0,64 % и 0,62 %, остаточное отклонение предсказания 48,5

и 50,3, максимальное относительное отклонение калибровки 5,9 % и 5,8 %, соответственно). Выбор спектральных переменных с помощью алгоритма последовательного проецирования, ранжирования спектральных переменных и поиска комбинации сдвигающихся окон (рисунок 7а) позволяет понизить среднеквадратичное отклонение калибровки до 0,46 %, 0,50 % и 0,03 %, соответственно. Утроенное отношение отклонения счета в первую главную компоненту при концентрации льняного масла 100 % от соответствующего значения указанной на рисунке 7б линейной аппроксимации и коэффициента наклона аппроксимации определяет величину предела обнаружения подделки 1,2 %.

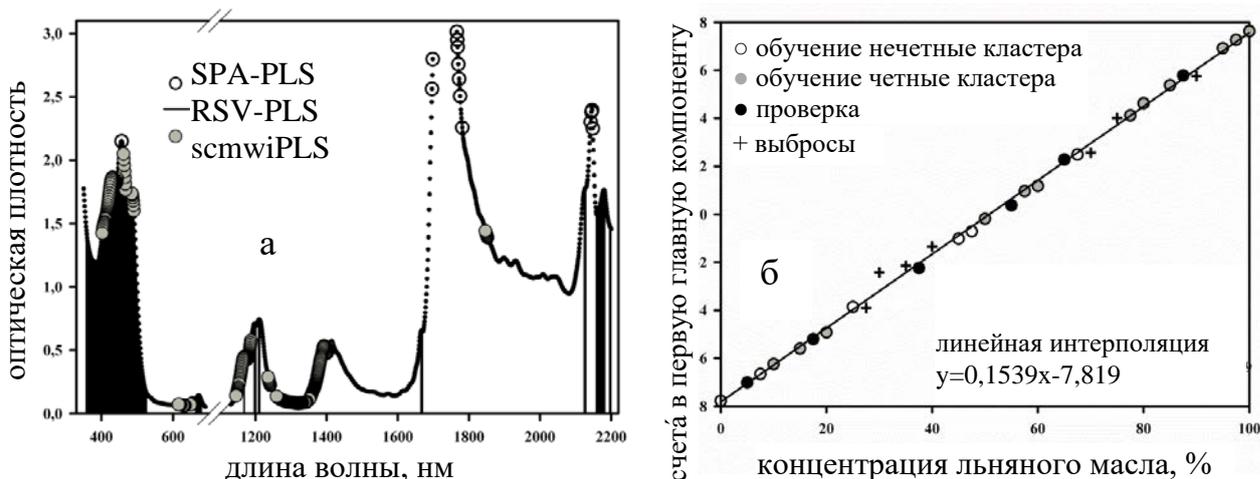


Рисунок 7 – Выбор спектральных переменных с помощью алгоритма последовательного проецирования (SPA), ранжирования спектральных переменных (RSV) и поиска комбинации сдвигающихся окон (scmwiPLS) и спектр оптической плотности смеси подсолнечного (12,5 %) и льняного (87,5 %) масел (а); обнаружение выбросов в спектрах смесей льняного и подсолнечного масел, формирование обучающей и проверочной выборок и линейная аппроксимация для нахождения предела обнаружения содержания подсолнечного масла

Необходимость проведения оптической диагностики актуальна не только в пищевой промышленности, но и в медицине, фармакологии и других отраслях. Целью следующего исследования было изучение возможности обнаружения проявления биологического действия низкоинтенсивного лазерного излучения в сочетании с противоопухолевым лекарственным препаратом в спектрах оптической плотности крови мышей с помощью многопараметрических методов спектрального анализа. Пять экспериментальных групп включали в себя от 10 до 12 животных. Первая контрольная группа состояла из интактных мышей. Остальные животные были привиты карциномой Эрлиха. Мышам третьей группы вводили противоопухолевый лекарственный препарат, четвертой – проводили курс лазерного облучения тулиевым лазером с максимумом спектра излучения на длине волны 1960 нм при ширине спектра  $\sim 10$  нм и плотности мощности  $\sim 20$  мВт/см<sup>2</sup>, на животных пя-

той группы одновременно воздействовали лазерным излучением и лекарственным препаратом. Объектом изучения являлась высушенная кровь, оптическая плотность которой регистрировалась в диапазоне от 360 до 2500 нм с шагом 1 нм. В четырехмерном пространстве главных компонент, описывающих 99,3 % суммарной дисперсии данных, построение четырехуровневого дерева принятия решений с условиями на счета в первую, вторую и четвертую главные компоненты позволило однозначно классифицировать образцы.

Кроме UV-Vis-NIR спектроскопии большим потенциалом для применения многопараметрических методов характеризуется и спектроскопия ТГц частотного диапазона, обладающая уникальной способностью получения информации об объектах, находящихся в бумажной или пластиковой упаковке. Для демонстрации возможностей применения многопараметрических методов в ТГц спектроскопии объектами исследования были выбраны готовые обезболивающие фармацевтические препараты в таблетированной форме (парацетамол и ацетилсалициловая кислота), спектры пропускания которых были измерены с помощью импульсного спектрометра в диапазоне частот от 0,4 до 1,37 ТГц. В пространстве первых двух главных компонент, описывающих более 93,5 % дисперсии данных, была определена линейная дискриминирующая функция, сопоставляющая одной полуплоскости множество таблеток парацетамола, а второй – ацетилсалициловой кислоты. Вторым объектом применения многопараметрического анализа к ТГц спектрам являлась модельная смесь из трех лекарственных средств (к рассмотренным препаратам был добавлен дротаверин), состав которой нужно было определить с помощью метода независимых компонент, предназначенного для решения проблемы слепого разделения источников. Успешная реализация метода независимых компонент требует выполнения двух условий: статистической независимости спектров лекарственных препаратов и негауссовости амплитудных гистограмм этих спектров. Результаты поиска разложения спектров тройных смесей лекарственных средств на независимые спектры, характеризующиеся максимальным отличием амплитудных гистограмм от гауссовой формы, представлены на рисунке 8а для парацетамола, для которого видна хорошая точность восстановления, и рисунке 8б для дротаверина, для которого восстановлен характерный пик. Спектр ацетилсалициловой кислоты восстановить не удалось вследствие того, что гистограмма спектра этого препарата имеет форму, сходную с крылом гауссова распределения (рисунок 8в).

Применение многопараметрических методов позволяет достичь значимых результатов не только в решении задач классификации и калибровки характеристик исследуемых объектов. **В шестой главе** описаны результаты применения многопараметрического генетического алгоритма для оптимизации характеристик волоконных усилителей на примерах эрбиевого и ту-

лиевых усилителей и усилителя на основе комбинационного рассеяния света.

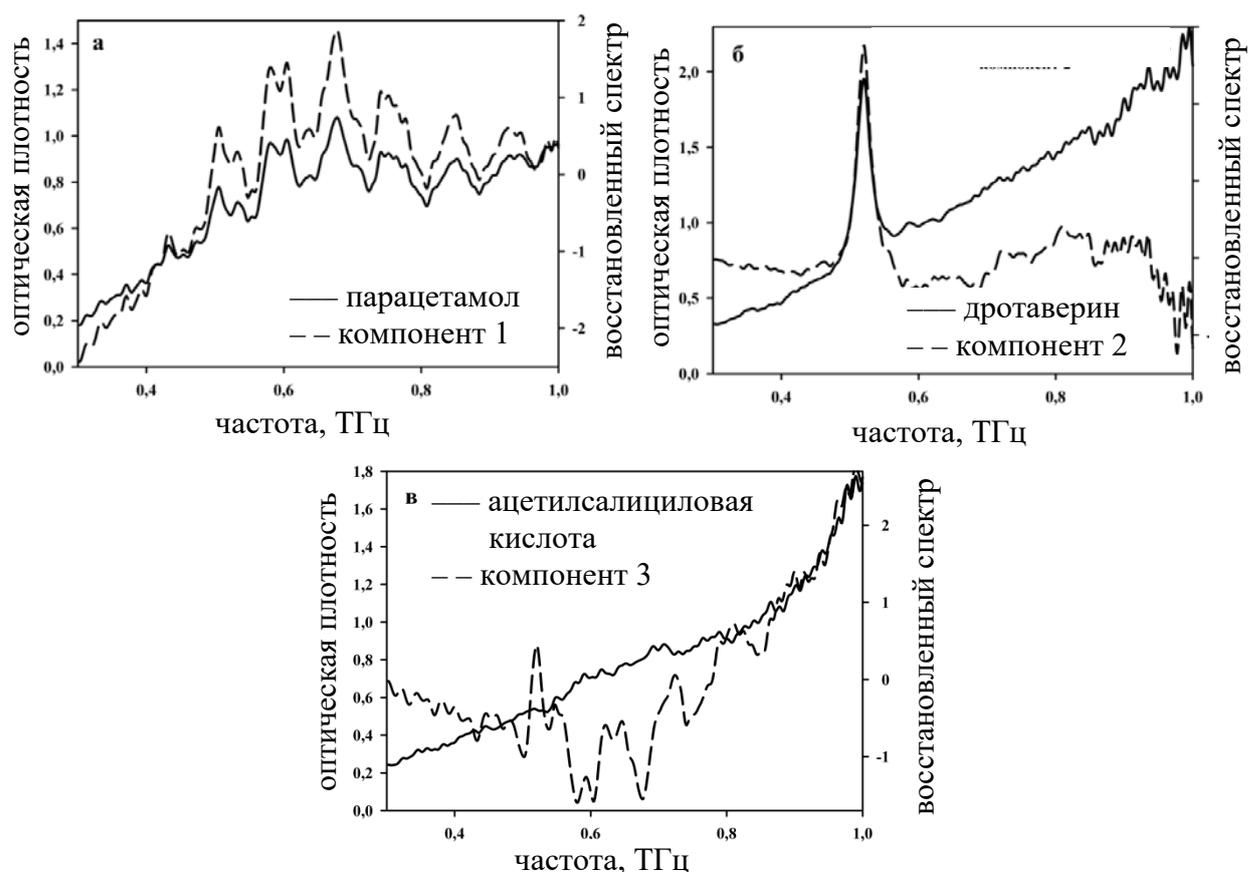


Рисунок 8 – Сравнение спектров пропускания парацетамола (а), дротаверина (б) и ацетилсалициловой кислоты (в) и спектров компонент тройной смеси, найденных методом независимых компонент

Существенной проблемой в разработке современных волоконно-оптических линий связи является необходимость достижения компромисса между требуемыми низкими значениями шум-фактора волоконного усилителя и высокой равномерностью спектра усиления. С помощью системы скоростных уравнений и многопараметрического генетического алгоритма был промоделирован эрбиевый волоконный усилитель в режиме ненасыщенного усиления с мультиплексированной по длинам волн двунаправленной накачкой (попутная по трехуровневой схеме и встречная по квазитрехуровневой). Поиск максимума целевой функции, представляющей собой обратную величину неравномерности усиления в полосе длин волн 1540-1560 нм, показал, что одновременное управление мощностями попутной и встречной накачек позволяет добиться почти независимой от суммарной мощности накачек неравномерности спектра усиления, не превышающей 0,5 дБ (рисунок 9).

Моделирование показало эффективность выравнивания спектра эрбиевого волоконного усилителя с помощью применения комбинированной схемы двунаправленной квазитрехуровневой накачки при среднем усилении, не превышающем 16 дБ. При больших величинах усиления предложенный ме-

тод приводит к существенному росту усиления на длинноволновом краю используемой спектральной полосы при практически неизменном на коротковолновом. Такое поведение характеристик эрбиевого усилителя вызвано ограничением на усиление в пике вблизи длины волны 1530 нм для того, чтобы режим ненасыщенного усиления соблюдался во всем рассматриваемом спектральном интервале.

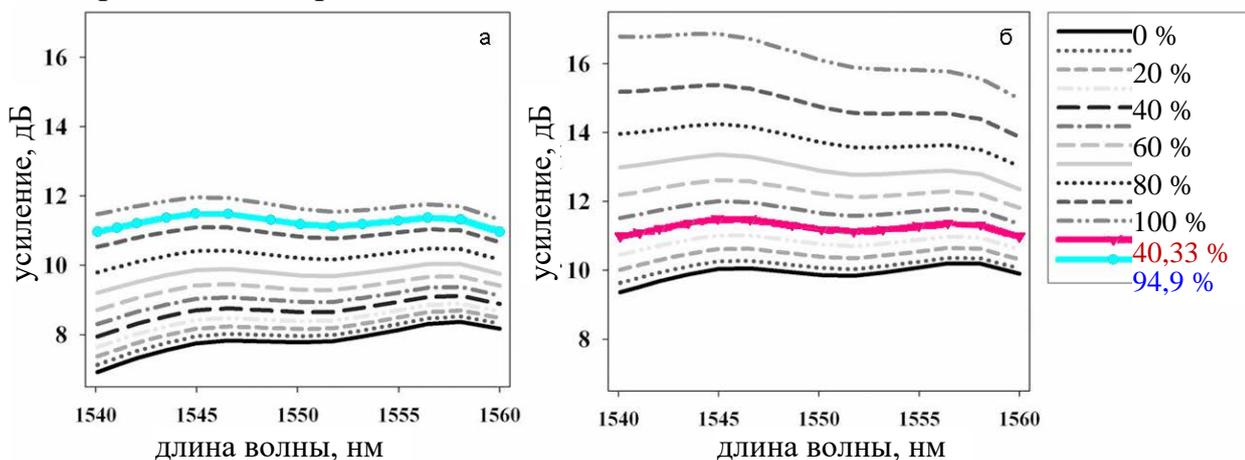


Рисунок 9 – Спектры усиления эрбиевого волоконного усилителя в режиме ненасыщенного усиления с попутной накачкой по трехуровневой схеме и встречной – по квазитрехуровневой схеме при полной мощности накачки 3 мВт (а) и 50 мВт (б) (в легенде указан процент мощности накачки по трехуровневой схеме)

Генетический алгоритм как эвристический метод поиска экстремума целевой функции был применен для одновременной оптимизации мощностей и длин волн мультиплексированных накачек для волоконного усилителя на основе вынужденного комбинационного рассеяния. На момент постановки задачи для оптимизации накачек такого усилителя применялась двухступенчатая схема. На первом этапе с помощью генетического алгоритма определялись только длины волн накачек. При этом не учитывалось взаимное влияние как излучения источников накачек, так и спектрально мультиплексированных сигналов. На втором этапе производился поиск мощностей накачек с найденными длинами волн, обеспечивающих спектр усиления, лишь максимально приближенный к определенному на первом этапе. Полученные результаты показали, что учет взаимодействия накачек друг с другом при моделировании волоконного усилителя на основе вынужденного комбинационного рассеяния света позволяет корректно описать продольные изменения мощностей мультиплексированных накачек. Учет взаимодействия спектрально уплотненных сигналов позволяет корректно определить спектр усиления, а дополнительный учет рэлеевского рассеяния существенен для нахождения шумовых характеристик усилителей. Модель, учитывающая вынужденное и спонтанное комбинационное рассеяние света, рэлеевское рассеяние, взаимодействия между всеми волнами в волокне (взаимодействия накачка-сигнал,

накачка-накачка и сигнал-сигнал), ослабление сигналов и накачки в волокне, использовалась для оптимизации длин волн и мощностей четырех встречных накачек для 50 мультиплексированных сигналов в спектральной полосе шириной 80 нм. Целевыми функциями для генетического алгоритма являлись обратная величина суммы квадратов коэффициентов усиления сигналов или обратная величина максимального отклонения усиления от нуля. Для обеих функций были найдены параметры источников накачек при суммарной мощности около 900 мВт, обеспечивающие неравномерность спектра усиления менее  $\pm 1$  дБ (рисунок 10).

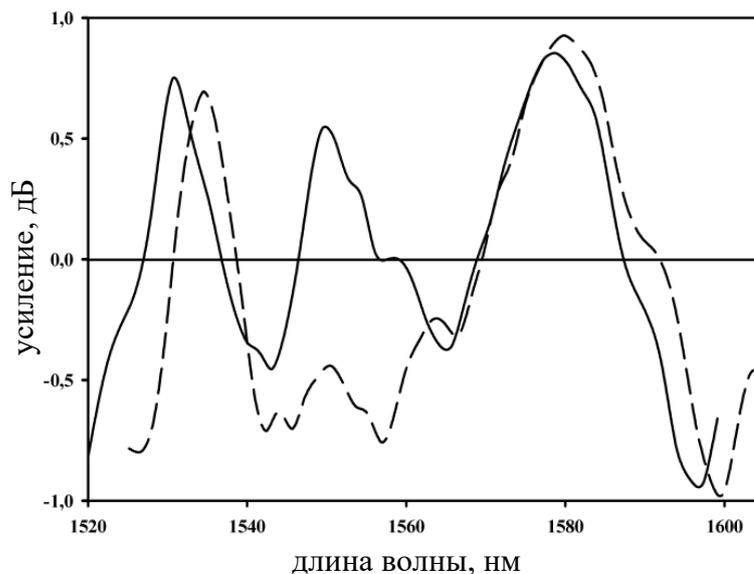


Рисунок 10 – Спектры усиления волоконного усилителя на основе вынужденного комбинационного рассеяния света после оптимизации длин волн и мощностей четырех встречных накачек с помощью генетического алгоритма

Возрастающие потребности в пропускной способности коммуникационных систем стимулируют исследования по расширению используемой полосы пропускания. Для коротковолновой коммуникационной полосы (длины волн 1480–1520 нм) одними из наиболее многообещающих по своим характеристикам являются тулиевые волоконные усилители, для которых затруднено получение аналитических зависимостей спектров усиления и шум-фактора. Разработанная пространственно разрешенная модель тулиевого усилителя основывается на скоростных уравнениях населенностей для уровней  ${}^3\text{H}_6$ ,  ${}^3\text{F}_4$ ,  ${}^3\text{H}_4$  и  ${}^1\text{G}_4$  (населенности уровней  ${}^3\text{H}_5$ ,  ${}^3\text{F}_2$  и  ${}^3\text{F}_3$  полагаются равными нулю, так как скорости безызлучательной релаксации с них на нижележащие уровни высоки –  $\gg 10^5 \text{ c}^{-1}$ ) и уравнениях распространения, учитывающих модовую структуру излучения в волокне. Модель использовалась для определения оптимальной схемы накачки из четырех рассмотренных для получения максимального усиления или минимальной неравномерности спектра усиления.

Поиск мощностей и длин волн источников накачки тулиевого волоконного усилителя с помощью генетического алгоритма показал, что и максимальное усиление в диапазоне длин волн 1450–1500 нм при суммарной мощности накачек 1 Вт, и минимальная неравномерность достигаются для трехступенчатой схемы ап-конверсионной накачки, длина волны которой 1028 нм попадает в пересечение полос поглощения, обусловленных переходами  ${}^3\text{H}_6 \rightarrow {}^3\text{H}_5$ ,  ${}^3\text{F}_4 \rightarrow {}^3\text{F}_{2,3}$  и  ${}^3\text{H}_4 \rightarrow {}^1\text{G}_4$  ионов тулия. Дополнительная накачка на длине волны 1560 нм только ухудшает характеристики усилителя.

Широкое применение технологии спектрального уплотнения сигналов в условиях постоянного роста информационного трафика стимулирует поиск и исследования новых материалов для активированных волокон, позволяющих получать более широкие и гладкие спектры усиления по сравнению с уже используемыми материалами. Существующие критерии сравнения материалов (полуширина спектра флуоресценции, пиковая величина сечения стимулированного испускания, время жизни в возбужденном состоянии, произведение пиковой величины сечения испускания активатора на полуширину спектра флуоресценции) не характеризуют волоконный усилитель как часть коммуникационной системы. **В седьмой главе** описаны результаты применения спектральной эффективности передачи информации и пропускной способности усилителя в режиме ненасыщенного усиления как критериев качества материалов для волоконных усилителей.

Спектральная эффективность передачи информации эрбиевыми волоконными усилителями в режиме ненасыщенного усиления при квазитрехуровневой накачке была проанализирована на длине волны сигнала 1550 нм, приходящейся на плато спектра усиления. Результаты позволили выделить две группы материалов с точки зрения максимально достижимой величины спектральной эффективности передачи информации. При накачке мощностью 10 мВт усилители на силикатных и фосфатных стеклах характеризуются величинами эффективности 6,6–6,7 бит/с/Гц. Мощность накачки, при которой усиление на длине волны 1550 нм равно 0 дБ, для этих материалов приблизительно равна 2 мВт. При накачке мощностью 10 мВт спектральная эффективность для теллуридных и боратных стекол не превышает величины 6,5 бит/с/Гц, а мощность накачки для достижения нулевого усиления на длине волны 1550 нм составляет от 3 до 8 мВт.

Спектральная эффективность передачи информации как однопараметрический (на одной длине волны) критерий сравнения материалов волокон может быть дополнена многопараметрическим (интегральным по участку спектра) – пропускной способностью, являющейся максимальной скоростью безошибочной передачи информации коммуникационным устройством. При рассмотрении эрбиевых волоконных усилителей в составе имеющихся на сегодня

нышний день систем передачи информации интервалами интегрирования можно задавать коммуникационные полосы: коротковолновую (1480–1520 нм), стандартную (1520–1570 нм) и длинноволновую (1570–1610 нм). На рисунке 11а представлены результаты численного моделирования пропускной способности по диапазону длин волн 1480–1600 нм в связи с отсутствием для некоторых рассматриваемых материалов волокон данных по сечениям поглощения и стимулированного испускания ионов эрбия в области 1600–1610 нм.

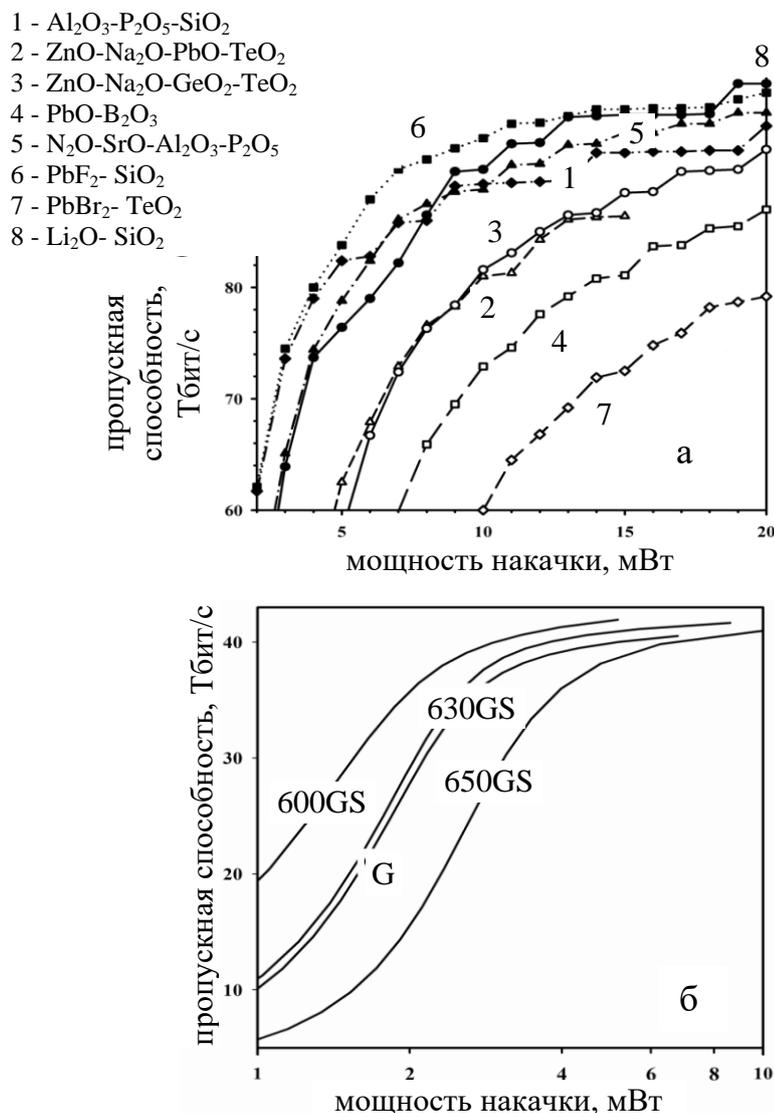


Рисунок 11 – Интегральная пропускная способность эрбиевых волоконных усилителей в коротковолновой, стандартной и длинноволновой коммуникационных полосах (а) и пропускная способность усилителей на основе кальциево-фторидного стекла (G) и стеклокерамик (600GS, 630GS и 650GS, где число соответствует температуре вторичной термообработки)

Лучшие показатели по этому критерию у усилителей на основе силикатных и фосфатного волокон. Для мощности излучения накачки 10 мВт пропускная способность усилителей из этих волокон составляет 89–92 Тбит/с. Рассмотрение вклада в интегральную по всем трем коммуникационным полосам пропускную способность величин по отдельным спектральным поло-

сам показало, что именно в стандартной коммуникационной полосе усилители на этих средах предпочтительнее. Показано, что в длинноволновой полосе лучшей пропускной способностью из рассмотренных устройств обладают усилители на основе  $\text{ZnO-Na}_2\text{O-GeO}_2\text{-TeO}_2$  и  $\text{Li}_2\text{O-SiO}_2$ , а в коротковолновой полосе – на основе  $\text{PbF}_2\text{-SiO}_2$  и  $\text{Na}_2\text{O-SnO-Al}_2\text{O}_3\text{-P}_2\text{O}_5$ .

При применении информационных критериев качества к волоконным усилителям из материалов с промежуточными свойствами между стеклами и кристаллами – стеклокерамик – были исследованы усилители из свинцово-фторидных и фторокисных стекол и стеклокерамик. В рассмотренных стеклокерамиках кристаллической фазой являются кристаллы  $\text{CaF}_2$  и наблюдается рост времени жизни метастабильного уровня при увеличении температуры отжига. Лучшей многопараметрической информационной характеристикой (рисунок 11б), существенно превосходящей пропускную способность усилителя из исходного стекла, обладает устройство из фторокисной стеклокерамики с температурой вторичного отжига  $600\text{ }^\circ\text{C}$ . Целенаправленный выбор параметров стеклокерамик позволяет повысить информационные характеристики волоконных усилителей по сравнению с аналогами из исходных стекол.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

### Основные научные результаты диссертации

В процессе выполнения диссертационной работы были решены все поставленные задачи. Основные полученные результаты приведены ниже.

1. Показано, что перераспределение населенностей энергетических уровней  $^2\text{H}_{11/2}$  и  $^4\text{S}_{3/2}$  иона эрбия, температурное тушение флуоресценции и перераспределение населенностей штарковских подуровней энергетического уровня  $^4\text{S}_{3/2}$  определяют первые три главные компоненты температурной зависимости спектров флуоресценции активированной эрбием и иттербием прозрачной свинцово-фторидной наностеклокерамики  $30\text{SiO}_2\text{-}18\text{PbF}_2\text{-}15\text{Al}_2\text{O}_3\text{-}29\text{CdF}_2\text{-}5\text{ZnF}_2\text{-}2,5\text{YbF}_3\text{-}0,5\text{ErF}_3$  мол. % в диапазонах длин волн  $403,8\text{--}414,3$ ,  $517,1\text{--}555,2$  и  $645,0\text{--}670,7$  нм при изменении температуры от  $317$  до  $423$  К с шагом  $2$  К. На основе анализа температурной зависимости спектров флуоресценции эрбия разработан метод разрешения штарковской структуры энергетических уровней активатора, базирующийся на применении метода главных компонент. Разработанный метод апробирован при умеренных положительных температурах на примере спектров флуоресценции  $\text{Yb}^{3+}:\text{CaF}_2$  и  $\text{Yb}^{3+}:\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ , для которых отклонение определения энергии верхнего мультиплета иона иттербия составляет около  $2\text{ см}^{-1}$  и сопоставимо с точностью традиционных методов абсорбционной и флуоресцентной спектроскопии с временным разрешением при низких температурах [13, 14, 18].

2. Разработана методика многопараметрической калибровки температуры с помощью применения метода частичных наименьших квадратов к спектрам флуоресценции. Такая калибровка характеризуется меньшим относительным отклонением по сравнению с методом определения отношения интенсивностей флуоресценции с двух термально связанных уровней энергии активатора [9]. Для спектров флуоресценции активированной эрбием свинцово-фторидной наностеклокерамики  $30\text{SiO}_2\text{-}18\text{PbF}_2\text{-}15\text{Al}_2\text{O}_3\text{-}29\text{CdF}_2\text{-}5\text{ZnF}_2\text{-}2,5\text{YbF}_3\text{-}0,5\text{ErF}_3$  мол. %, измеренных в полосах длин волн 403,8–414,3; 517,1–555,2 и 645,0–670,7 нм при температурах от 317 до 423 К с шагом 2 К, достигается уменьшение относительного отклонения калибровки в 2 раза (с 0,3 % до 0,15 %) [13, 14].

3. Установлено, что применение интервального метода выбора спектральных переменных с помощью поиска комбинации движущихся окон, содержащих на одну спектральную переменную больше, чем используемое количество латентных переменных в методе частичных наименьших квадратов, повышает точность многопараметрической калибровки температуры по сравнению с широкополосным методом частичных наименьших квадратов. На примере спектров флуоресценции активированного иттербием  $\text{CaF}_2$  в диапазоне длин волн 893–1107 нм при температурах от 339 до 423 К разработанный метод выбора спектральных переменных уменьшил среднеквадратичное отклонение калибровки температуры более чем в два раза до 0,45 К [21, 22, 26].

4. Показано, что отклонение калибровки температуры (0,20 К) по спектрам флуоресценции (диапазон длин волн 500–560 нм, температура от 299 до 423 К с шагом 2 К) свинцово-фторидного стекла методом частичных наименьших квадратов с выбором спектральных переменных путем поиска комбинации движущихся окон меньше отклонений калибровки с помощью применения искусственной нейронной сети, входными переменными которой являются спектральные переменные (0,33 К) или главные компоненты спектров (0,28 К), и с помощью регрессии на главные компоненты (0,66 К) [23].

5. Разработана методика многопараметрической калибровки температуры по нормированным на максимум спектрам флуоресценции, позволяющая использовать нестабилизированный по мощности источник возбуждающего излучения. На примере спектров зеленой ап-конверсионной флуоресценции активированных эрбием и иттербием германатных стекол и стеклокерамик найдено, что для стеклокерамики состава  $\text{GeO}_2\text{-Na}_2\text{O-Yb}_2\text{O}_3\text{-MgO-La}_2\text{O}_3\text{-Er}_2\text{O}_3$  калибровка характеризуется среднеквадратичным отклонением 0,37 К, остаточным отклонением более 100 и относительным отклонением не более 0,2 % при температурах от 330 до 473 К [27].

6. Относительная чувствительность калибровки температуры по времени затухания флуоресценции на длине волны 552 нм фтор-фосфатного стекла, активированного ионами эрбия, на порядок величины меньше чувствительности калибровки температуры по отношению интенсивностей флуоресценции при переходах с двух термально связанных уровней энергии эрбия (0,04–0,05 и 0,4–1,2 %K<sup>-1</sup>, соответственно) [12].

7. Показано, что многопараметрическая калибровка температуры методом частичных наименьших квадратов по спектральному сдвигу флуоресценции на примере калиевоалюмооборотного стекла с медьсодержащими молекулярными кластерами позволяет уменьшить относительное отклонение калибровки более чем в 3 раза до 1,2 % по сравнению с однопараметрическим методом калибровки по температурной зависимости длины волны максимума флуоресценции [19].

8. На основе измерения спектров пропускания винных дистиллятов в ультрафиолетовом, видимом и ближнем инфракрасном диапазонах разработан метод идентификации производителя в двумерном пространстве главных компонент и калибровка концентраций 5 химических соединений методом частичных наименьших квадратов в маломерном пространстве латентных переменных [10, 11, 16].

9. Разработаны количественные модели калибровки физико-химических показателей вин интервальным методом частичных наименьших квадратов по спектрам пропускания в ультрафиолетовом, видимом и ближнем инфракрасном диапазонах для концентрации магния, 2-3-бутиленгликоля, золы, фенольных соединений, калия, кальция, щавелевой, яблочной и янтарной кислот для красных вин и магния, 2-3-бутиленгликоля, золы, фенольных соединений, винной, лимонной и молочной кислот, растворимых солей для белых вин. Обнаружена фальсификация вин квалификационной категории защищенного географического указания с помощью применения метода главных компонент и кластерного анализа измеренных спектров пропускания [15, 24].

10. Достигнута достоверная классификация поддельной водочной продукции при отсутствии априорной информации о ее составе и применении унифицированной легализующей добавки в концентрации, не превышающей величины допустимого уровня потребления, с помощью использования методов кластерного анализа в двумерном пространстве главных компонент спектров пропускания водок в диапазоне длин волн 200–850 нм [20].

11. Показано, что калибровка содержания нерафинированного подсолнечного масла в смеси с льняным по спектрам оптической плотности в диапазонах длин волн 350–690, 1130–1698 и 1766–2200 нм методом частичных наименьших квадратов характеризуется величинами среднеквадратичного отклонения 0,50 % при выборе спектральных переменных методом их ран-

жирования по корреляции с калибруемым параметром, 0,46 % – алгоритмом последовательного проецирования и 0,03 % – с помощью метода поиска комбинации движущихся окон, для которого предел обнаружения подделки льняного масла составляет 1,2 % [25, 28].

12. Разработан метод классификации образцов крови здоровых мышей и заражённых карциномой Эрлиха мышей, подвергшихся облучению лазерным излучением и лечению противоопухолевым препаратом, основанный на построении дерева классификации в четырехмерном пространстве главных компонент спектров оптической плотности в диапазоне 360–2500 нм, нормированных на длине волны максимума полосы поглощения оксигемоглобина 576 нм [17].

13. Два вида анальгетических лекарственных препаратов успешно классифицированы методом линейного дискриминантного анализа в пространстве двух главных компонент спектров пропускания в диапазоне частот от 0,4 до 1,37 ТГц [29].

14. На основе применения метода независимых компонент к спектрам пропускания смеси трех лекарственных средств в диапазоне частот от 0,3 до 1,0 ТГц показана возможность восстановления спектра одного из двух анальгетических препаратов и обнаружения характерной особенности спектра спазмолитического препарата [29].

15. С помощью применения генетического алгоритма оптимизированы комбинированная (трехуровневая попутная и квазитрехуровневая встречная) схема накачки эрбиевого волоконного усилителя и ап-конверсионные комбинированные схемы накачки тулиевого волоконного усилителя с целью получения минимальной неравномерности спектра усиления (2,6 дБ в полосе длин волн 1540–1560 нм для эрбиевого усилителя и 5,8 дБ в полосе 1450–1500 нм для тулиевого усилителя). Найдены оптимизированные одновременно величины мощностей и длин волн четырех встречных мультиплексированных накачек волоконного усилителя на основе вынужденного комбинационного рассеяния света. При этом в спектральном диапазоне шириной 80 нм, содержащем 50 спектрально-мультиплексированных сигналов, достигнута приемлемая для практического применения неравномерность спектра усиления  $\pm 1$  дБ [5, 7, 8].

16. Показано преимущество использования информационных критериев (однопараметрическая спектральная эффективность передачи информации и многопараметрическая пропускная способность) сравнения материалов волоконных усилителей над традиционно используемыми критериями (ширина спектра флуоресценции по полувысоте, пиковая величина сечения стимулированного испускания ионов активатора, время жизни ионов активатора в возбужденном состоянии, произведение пиковой величины сечения испуска-

ния активатора на ширину по полувысоте спектра флуоресценции) [1–3]. Эрбиевые волоконные усилители на силикатных стеклах характеризуются минимальными величинами сечений стимулированного испускания, но максимальной спектральной эффективностью передачи информации на длине волны 1550 нм [4, 6].

### **Рекомендации по практическому использованию результатов**

В рамках взаимодействия с высшими учебными заведениями была создана ознакомительная лекция «Хемометрика и ее применения в спектроскопии» для студентов 3-4 курсов БГУ и БНТУ и лекция «Introduction to NIR Spectroscopy» для иностранных участников проекта программы «Горизонты-2020», используемая также для обучения студентов БГУ, выполняющих курсовые работы в Институте физики НАН Беларуси. В план издания научной, научно-технической и научно-методической литературы в НАН Беларуси на 2023 год включено предложение о выпуске монографии Ходасевича М.А. «Многопараметрический подход в методах оптической диагностики: основы и применения».

Непосредственное практическое применение полученных в диссертационной работе результатов может быть реализовано в разработке компактной портативной системы контроля состояния масла в процессе эксплуатации комбайна и научно-обоснованных норм физико-химических показателей, позволяющих определять срок замены масла, сформулированной по инициативе ОАО «Гомсельмаш» в запросах организаций Министерства промышленности по созданию новых технологий и решению проблемных вопросов в 2022 году.

По запросу турецких производителей сахара, участвующих в проекте «Альтернативные методы качества и аутентичности для сахарной и кондитерской промышленности», были проведены пилотные работы по применению многопараметрического спектрального анализа для калибровки содержания белков в ботве сахарной свеклы, используемой в качестве корма для сельскохозяйственных животных. Эти работы могут быть продолжены для замены классических методов «мокрой химии».

В дальнейшем методы анализа многопараметрических спектральных данных также могут быть применены для решения иных задач оптической диагностики материалов и процессов в пищевой, нефтехимической, лакокрасочной, строительной промышленности, фармацевтике, сельском хозяйстве без необходимости построения содержательных физико-химических моделей, что существенно упростит квалификационные требования к обслуживающему спектральное оборудование персоналу.

## СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ СОИСКАТЕЛЯ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ

### Статьи в рецензируемых научных журналах

1. Khodasevich M.A., Sinitsyn G.V., Varaksa Yu.A., Yasukevich A.S. Ultimate spectral efficiency of information transmission of fibre amplifiers in WDM systems // *Lithuanian Journal of Physics*. – 2005. – Vol. 45, № 1. – P. 33–36.
2. Варакса Ю.А. Сеницын Г.В., Ходасевич М.А. Спектральная эффективность передачи информации эрбиевыми волоконными усилителями в режиме ненасыщенного усиления // *Оптика и спектроскопия*. – 2006. – Т. 100, № 6. – С. 1024–1028.
3. Ходасевич М.А., Сеницын Г.В., Варакса Ю.А. Стекла для эрбиевых волоконных усилителей. Сравнение на основе предельной спектральной эффективности передачи информации // *Оптика и спектроскопия*. – 2006. – Т. 101, № 5. – С. 805–809.
4. Варакса Ю.А., Сеницын Г.В., Ходасевич М.А. Пропускная способность эрбиевых волоконных усилителей как критерий сравнения качества легированных ионами эрбия оптических волокон // *Оптика и спектроскопия*. – 2008. – Т. 104, № 1. – С. 140–144.
5. Ходасевич М.А., Коваль С.А., Сеницын Г.В. Моделирование предельных характеристик тулиевых волоконных усилителей // *Оптика и спектроскопия*. – 2009. – Т. 107, № 3. – С. 414–419.
6. Асеев В.А., Варакса Ю.А., Клементьева А.В., Колобкова Е.В., Никоноров Н.В., Сеницын Г.В., Ходасевич М.А. Спектрально-люминесцентные и информационные характеристики прозрачных свинцово-фторидных наностеклокерамик, активированных ионами эрбия // *Оптика и спектроскопия*. – 2010. – Т. 108, № 5. – С. 763–770.
7. Khodasevich M.A., Koval S.A., Sinitsyn G.V. Numerical analysis of signal gain and noise figure of S-band Tm-doped W-type fiber amplifier with different pumping configurations // *Lithuanian Journal of Physics*. – 2010. – Vol. 50, № 1. – P. 63–68.
8. Ходасевич М.А., Сеницын Г.В., Варакса Ю.А. Оптимизация передаточных характеристик эрбиевых волоконных усилителей по генетическому алгоритму // *Оптический журнал* – 2011. – Т. 78, № 10. – С. 46–49.
9. Khodasevich M.A., Sinitsyn G.V., Varaksa Yu.A. Fiber-Optics Fluorescence Temperature Sensors // *Nonlinear Phenomena in Complex Systems*. – 2011. – Vol. 14, № 4. – P. 405–410.
10. Роговая М.В., Сеницын Г.В., Ходасевич М.А. Анализ спектров пропускания молдавских винных дистиллятов методом главных компонент // *Оптика и спектроскопия*. – 2014. – Т. 117, № 5. – С. 865–869.

11. Дегтярь Н.Ф., Незальзова Е.И., Роговая М.В., Сеницын Г.В., Скорбанова Е.А., Ходасевич М.А. Использование методов спектроскопии УФ-, видимого и ближнего ИК-диапазонов для определения оригинальности выдержанных винных дистиллятов // Весці НАН Беларусі, сер. фіз.-мат. навук. – 2014. – № 3. – С. 113–117.
12. Варакса Ю.А., Сеницын Г.В., Ходасевич М.А., Асеев В.А., Колобкова Е.В., Ясюкевич А.С. Температурная зависимость отношения интенсивностей полос апконверсионной флуоресценции активированных ионами эрбия кристаллов  $YVO_4$  и  $YGdVO_4$  и свинцово-фторидных наностеклокерамик // Оптика и спектроскопия. – 2015. – Т. 118, № 1. – С. 146–150.
13. Асеев В.А., Варакса Ю.А., Колобкова Е.В., Сеницын Г.В., Ходасевич М.А., Ясюкевич А.С. Сравнение двух методов измерения температуры по спектрам апконверсионной флуоресценции активированной ионами эрбия свинцово-фторидной наностеклокерамики // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. – 2015. – Т.15, № 3. – С. 457–462.
14. Ходасевич М.А., Асеев В.А., Варакса Ю.А., Колобкова Е.В., Сеницын Г.В. Активированная ионами эрбия свинцово-фторидная наностеклокерамика: применение метода главных компонент для измерения температуры по спектрам апконверсионной флуоресценции // Физика и механика материалов. – 2015. – Т.24, № 1. – С.18–23.
15. Ходасевич М.А., Скорбанова Е.А., Обадэ Л.И., Дегтярь Н.Ф., Камбур Е.И., Роговая М.В. Применение многопараметрического анализа широкополосных спектров пропускания для идентификации вин с географическим наименованием происхождения // Приборы и методы измерений. – 2016. – Т. 7, № 1. – С. 104–113.
16. Сеницын Г.В., Ходасевич М.А., Скорбанова Е.А., Роговая М.В., Камбур Е.И., Асеев В.А. Определение химических характеристик и производителя дивинов по их широкополосным спектрам пропускания // Оптика и спектроскопия. – 2016. – Т. 120, № 6. – С. 1046–1051.
17. Батай Л.Е., Ходасевич И.А., Ходасевич М.А., Горбунова Н.Б., Манина Е.Ю. Проявление биологического действия низкоинтенсивного лазерного излучения 2 мкм в спектрах комбинационного рассеяния и поглощения крови // Журнал прикладной спектроскопии. – 2016. – Т. 83, № 4. – С. 598–605.
18. Khodasevich M., Varaksa Y., Sinitsyn G., Aseev V., Demesh M., Yasukevich A. Determining the Stark structure of  $Yb^{3+}$  energy levels in  $Y_3Al_5O_{12}$  and  $CaF_2$  using principal component analysis of temperature dependences of fluorescence spectra // Journal of Luminescence. – 2017. – V. 187. – P. 295–297.

19. Бабкина А.Н., Ходасевич М.А., Ширшнев П.С. Измерение температуры с помощью проекции на латентные структуры спектров флуоресценции калиевоалюмооборатных стекол с медьсодержащими молекулярными кластерами // *Оптика и спектроскопия*. – 2017 – Т. 122, № 2. – С. 71–75.
20. Ходасевич М.А., Синицын Г.В., Гресько М.А., Доля В.М., Роговая М.В., Казберук А.В. Определение контрафактных алкогольных напитков с помощью кластерного анализа в пространстве главных компонент оптических спектров пропускания // *Журнал прикладной спектроскопии*. – 2017. – Т. 84, № 3. – С. 504–507.
21. Ходасевич М.А., Асеев В.А. Выбор спектральных переменных и повышение точности калибровки температуры методом проекции на латентные структуры по спектрам флуоресценции  $\text{Yb}^{3+}:\text{CaF}_2$  // *Оптика и спектроскопия*. – 2018 – Т. 124, № 5. – С. 713–717.
22. Ходасевич М.А., Саскевич Н.А. Методы построения обучающего набора для калибровки с помощью флуоресцентной спектроскопии небольших выборок // *Весці НАН Беларусі, сер. фіз.-мат. навук*. – 2018. – № 1. – С. 77–83.
23. Ходасевич М.А., Асеев В.А., Варакса Ю.А., Борисевич Д.А. Калибровка температуры по спектрам флуоресценции допированного эрбием свинцово-фторидного стекла // *Оптика и спектроскопия*. – 2019. – Т. 126, № 3. – С. 295–298.
24. Ходасевич М.А., Скорбанова Е.А., Роговая М.В. Применение многопараметрического анализа широкополосных спектров пропускания для калибровки физико-химических показателей вин // *Приборы и методы измерений* – 2019. – Т. 10, № 2. – С. 198–206.
25. Ходасевич М.А., Борисевич Д.А. Идентификация льняного масла линейными многопараметрическими методами спектрального анализа // *Журнал прикладной спектроскопии*. – 2019. – Т. 86, № 6. – С. 880–884.
26. Khodasevich M., Aseev V., Klinkov V., Tsimerman E., Borisevich D. Reducing Temperature Calibration Error in Multivariate Analysis of Fluorescence Spectra // *Journal of Advances in Applied Physics*. – 2020. – Vol. 2, № 1. – P. 9–14.
27. Асеев В.А., Борисевич Д.А., Ходасевич М.А., Кузьменко Н.К., Федоров Ю.К. Калибровка температуры по нормированным спектрам апконверсионной флуоресценции германатных стекол и стеклокерамик, активированных ионами эрбия и иттербия // *Оптика и спектроскопия*. – 2021. – Т. 129, вып. 3. – С. 350–356.
28. Khodasevich M.A., Borisevich D.A. Variables Selection in the Ultraviolet, Visible and Near Infrared Range for Calibration of a Mixture of Vegetable Oils by Absorbance Spectra // *Devices and Methods of Measurements*. – 2021. – Vol. 12, № 1. – P. 298–304.

29. Борисевич Д.А., Гончаренко А.М., Ляхнович А.В., Сеницын Г.В., Ходасевич М.А. Многопараметрический анализ состава фармацевтической продукции на основе терагерцовой спектроскопии во временной области // Журнал прикладной спектроскопии. – 2021. – Т. 88, № 1. – С. 144–149.

#### **Статьи в сборниках материалов научных конференций**

30. Khodasevich, M.A., Varaksa Yu.A. Ultimate spectral efficiency of information transmission as the figure of merit of host materials of EDFA // *Laser Phys. Lett.* – 2005. – Vol. 2, № 11. – P. 532–534.

31. Варакса Ю.А., Сеницын Г.В., Ходасевич М.А. Оптимизация соотношения мощностей двунаправленной накачки на двух длинах волн для эрбиевых волоконных усилителей // *Оптика и спектроскопия.* – 2007. – Т. 102, № 4. – С. 637–640.

32. Khodasevich M.A., Sinitsyn G.V., Varaksa Yu.A. Bidirectional dual wavelength pumped EDFA: optimization of pump conditions // *Laser Optics 2006: Diode Lasers and Telecommunication Systems: Proceedings of SPIE* / ed.: N.N. Rosanov; St. Petersburg, Russia, June 26-30. – 2007. – Vol. 6612. – P. 661205-1–4.

33. Khodasevich M.A., Varaksa Yu.A. Information capacity as new figure of merit for Er-doped fiber amplifiers // *International Conference on Laser, Applications, and Technologies 2007: Advanced Lasers and Systems: Proceedings of SPIE* / ed.: V.A. Orlovich, V. Panchenko, I.A. Scherbakov; May-June 2007. — 2007. – Vol. 6731. – P. 67311H-1–6.

34. Khodasevich M.A., Varaksa Yu.A. Simulation of Broadband fiber Raman amplifiers in WDM-systems // *International Conference on Laser, Applications, and Technologies 2007: Advanced Lasers and Systems: Proceedings of SPIE* / ed.: V.A. Orlovich, V. Panchenko, I.A. Scherbakov; May-June 2007. — 2007. – Vol. 6731. – P. 67311I-1–5.

35. Khodasevich M.A., Varaksa Yu.A. Optimization of dual wavelength bidirectional quasi-two-level pumping of Er-doped fiber amplifiers // *International Conference on Laser, Applications, and Technologies 2007: Advanced Lasers and Systems: Proceedings of SPIE* / ed.: V.A. Orlovich, V. Panchenko, I.A. Scherbakov; May-June 2007. — 2007. – Vol. 6731. – P. 67311T-1–6.

36. Khodasevich M.A., Varaksa Yu.A. Searching for optimal conditions of combined pumping of erbium-doped fiber amplifiers by means of genetic algorithm // *International Conference on Laser, Applications, and Technologies 2007: Advanced Lasers and Systems: Proceedings of SPIE* / ed.: V.A. Orlovich, V. Panchenko, I.A. Scherbakov; May-June 2007. — 2007. – Vol. 6731. – P. 67312I-1–5.

37. Khodasevich M.A., Koval S.A., Sinitsyn G.V. Optimization of pumping parameters for thulium-doped fiber amplifiers // 5th National Conference on Optics and Spectroscopy, International Workshop on Photonics and Applications. Advances in Optics, Photonics, Spectroscopy and Applications-2008: Proceedings, Nha Trang, Vietnam, September 10-14 / ed.: P. Brechignac, K. Hakuta, H. Lim, N. Van Hieu, N. Dai Hung, V. Orlovich. – Nha Trang, 2009. – P. 202–207.

38. Khodasevich M.A., Varaksa Yu.A. Oxyfluoride glass-ceramics as host material for erbium-doped fiber amplifiers: ultimate information characteristics / M.A. Khodasevich, // 5th National Conference on Optics and Spectroscopy, International Workshop on Photonics and Applications. Advances in Optics, Photonics, Spectroscopy and Applications-2008: Proceedings, Nha Trang, Vietnam, September 10-14 / ed.: P. Brechignac, K. Hakuta, H. Lim, N. Van Hieu, N. Dai Hung, V. Orlovich. – Nha Trang, 2009. – P. 213–216.

39. Ходасевич М., Варакса Ю. Одновременная оптимизация длин волн и мощностей излучения источников мультиплексированных накачек Рамановского волоконного усилителя с помощью генетического алгоритма // VII Международная научная конференция «Лазерная физика и оптические технологии»: Сб. науч. тр. конф. в 3 томах / под ред. Н.С Казака, П.А.Апанасевича, В.В.Кабанова, С.Н.Курилкиной, В.Ю.Плавского, С.Г.Русова. – Минск, 2008. – Т. 3. – С. 189–192.

40. Варакса Ю., Ходасевич М. Оптимизация параметров эрбиевого волоконного усилителя на основе силикатного волокна с помощью генетического алгоритма // VII Международная научная конференция «Лазерная физика и оптические технологии»: Сб. науч. тр. конф. в 3 томах / под ред. Н.С Казака, П.А.Апанасевича, В.В.Кабанова, С.Н.Курилкиной, В.Ю.Плавского, С.Г.Русова. – Минск, 2008. – Т. 3. – С. 193–196.

41. Aseev V., Khodasevich M., Klementeva A., Kolobkova E., Nikonov N., Sinitsyn G., Varaksa Y. Erbium-doped nano-glass-ceramics: spectral and informational characteristics // 17th International Symposium “Nanostructures: Physics and Technology”: Proceedings / ed.: Zh. Alferov, L. Esaki. – Minsk, 2009. – P. 29–30.

42. Khodasevich M.A., Trofimova D.V. Discrimination of alcoholic beverages using Principal Component Analysis // 6th International conference on photonics & application: Proceedings – Hanoi, Vietnam, 2010. – P. 202–206.

43. Khodasevich M.A., Trofimova D.V., Nezalzova E.I. Principal Component Analysis of UV-VIS-NIR Transmission Spectra of Moldavian Matured Wine Distillates // International Conference on Laser, Applications, and Technologies 2010: Proceedings of SPIE / ed.: V. Panchenko, G. Mourou, A.M. Zheltikov. – Kazan, Russia, 2010. – Vol. 7994. – P. 79941F-1–5.

44. Ходасевич М.А., Сеницын Г.В., Варакса Ю.А. Точность измерения температуры оптическими датчиками на основе отношения интенсивностей перекрывающихся полос флуоресценции // III Международная научная конференция "Проблемы взаимодействия излучения с веществом: Материалы в 2ч. / редкол.: А.В. Рогачев и др. – Гомель: ГГУ им. Ф. Скорины, 2011. – Ч. 2. – С. 142–147.

45. Варакса Ю.А., Сеницын Г.В., Ходасевич М.А. Волоконно-оптические датчики, измеряющие температуру по отношению интенсивности флуоресценции ионов эрбия, для применения в лазерной хирургии // 5 Международная научно-техническая конференция «Приборостроение-2012»: Материалы/ редкол.: О.К.Гусев и др. – Минск: БНТУ, 2012. – С. 27–29.

46. Сеницын Г.В., Варакса Ю.А., Ходасевич М.А., Асеев В.А., Абдршин А.Н. Эффективность измерения температуры флуоресцентными датчиками на основе стеклокерамик, активированных ионами эрбия, хрома и неодима // Лазерная физика и оптические технологии: IX международная научная конференция: Материалы в 2 ч. / редкол.: С.А. Маскевич, С.С. Ануфрик и др. – Гродно: ГрГУ, 2012. – Ч. 2. – С. 41–43.

47. Варакса Ю.А., Сеницын Г.В., Ходасевич М.А. Прозрачные эрбиевые стеклокерамики для волоконно-оптических усилителей // Международный симпозиум «Перспективные материалы и технологии»: Сборник статей. – Витебск: УО «ВГТУ», 2013. – С. 113–116.

48. Ходасевич М.А., Сеницын Г.В., Варакса Ю.А. Исходные материалы для эрбиевых волоконных усилителей на основе активированных стекол – сравнение на основании информационных критериев // Квантовая электроника: IX Международная научно-техническая конференция: Материалы – Минск: Изд. центр БГУ, 2013. – С. 84–85.

49. Варакса Ю.А., Сеницын Г.В., Ходасевич М.А., Шерешовец Н.Н. Флуоресцентный датчик температуры на основе Er,Yb:Y<sub>2</sub>GdVO<sub>4</sub> // Квантовая электроника: IX Международная научно-техническая конференция: Материалы – Минск: Изд. центр БГУ, 2013. – С. 224–225.

50. Батай Л.Е., Ходасевич И.А., Ходасевич М.А., Манина Е.Ю., Кузнецова Т.Е., Горбунова Н.Б., Фесько С.В. Исследование спектров комбинационного рассеяния и оптической плотности крови при воздействии на опухолевый процесс циклоцитидина и лазерного облучения // Международная научная конференция "Молекулярные, мембранные и клеточные основы функционирования биосистем", XI съезд Белорусского общественного объединения фотобиологов и биофизиков: Сборник статей в 2 ч. — Минск, 2014. – Ч.1. – С. 242–245.

51. Khodasevich M., Varaksa Y., Sinitsyn G., Shereshovets N., Aseev V. Temperature dependence of up-conversion fluorescence intensity ratio of

Er,Yb:YVO<sub>4</sub> and Er,Yb:YGdVO<sub>4</sub> crystals // 16th International Conference “Laser Optics-2014”: Proceedings –Saint Petersburg, Russia, 2014. – P. 6886242.

52. Варакса Ю.А., Синицын Г.В., Ходасевич М.А., Асеев В.А., Колобкова Е.В., Ясюкевич А.С. Регрессия на латентные структуры: применение для определения температуры по широкополосным спектрам люминесценции активированной ионами эрбия свинцово-фторидной наностеклокерамики // Международная конференция «Фундаментальные проблемы оптики – 2014»: Сборник трудов / под ред. В.Г. Беспалова, С.А. Козлова.– СПб: Университет ИТМО, 2014. – С. 297–298.

53. Khodasevich M.A., Sinitsyn G.V., Varaksa Y.A. Upconversion fluorescence in Er,Yb:YGdVO<sub>4</sub> and Er,Yb:YVO<sub>4</sub> crystals for temperature measurement // International Scientific Conference «Optics of Crystals»: Proceedings. – Mozyr: Mozyr State Pedagogical University, 2014. – P. 90–91.

54. Varaksa Y., Sinitsyn G., Khodasevich M., Aseev V., Kolobkova E., Yasukevich A. Application of wide-band luminescence in Er-doped nano-glass-ceramics for temperature measurement // IV Международная научная конференция «Наноструктурные материалы-2014: Беларусь – Россия – Украина (НАНО-2014)»: материалы/ редкол.: П.А.Витязь и др. – Минск: Беларуская навука, 2014. – С. 182.

55. Асеев В.А., Варакса Ю.А., Колобкова Е.В., Синицын Г.В., Ходасевич М.А. Применение регрессии на латентные структуры для определения температуры активированной ионами эрбия свинцово-фторидной наностеклокерамики по спектрам апконверсионной флуоресценции // Оптика и спектроскопия. – 2015. – Т. 118, № 5. – С. 760–762.

56. Ходасевич М.А., Синицын Г.В., Варакса Ю.А., Ясюкевич А.С., Демеш М.П., Асеев В.А. Температурная зависимость времени затухания апконверсионной флуоресценции фтор-фосфатных стекол, активированных ионами эрбия // V Конгресс физиков Беларуси: Сборник научных трудов / редкол.: С.Я.Килин и др. – Минск: Ковчег, 2015. – С. 209–210.

57. Rogovaya M.V., Sinitsyn G.V., Skorbanova E.A., Khodasevich M.A., Degtyar N.F., Nezalzoza E.I. Identification of matured wine distillates by means of PCA, LDA/QDA, classification trees and PLS1 applied to UV-VIS-NIR transmission spectra // Advances in Optics Photonics Spectroscopy & Applications VIII: Proceedings / ed.: K. Hakuta, Y.Lee, N. Van Hieu, N. Dai Hung, V. Orlovich, N. Sarukura. – Da Nang. – 2015. – P. 483–486.

58. Aseev V.A., Khodasevich M.A., Sinitsyn G.V., Varaksa Yu.A. Sensitivity of fluorescence intensity ratio temperature measurement in Er-doped crystals and nano-glass-ceramics // Advances in Optics Photonics Spectroscopy & Applications VIII: Proceedings / ed.: K. Hakuta, Y.Lee, N. Van Hieu, N. Dai Hung, V. Orlovich, N. Sarukura. – Da Nang. – 2015. – P. 499–501.

59. Batay L.E., Khodasevich I.A., Khodasevich M.A., Manina E.Yu., Kuznetsova T.E., Gorbunova N.B. Investigation of Raman Spectra and Optical Density of Blood at Cyclocitidine and Laser Irradiation Influence on Tumor Process // *Advances in Optics Photonics Spectroscopy & Applications VIII: Proceedings* / ed.: K. Hakuta, Y. Lee, N. Van Hieu, N. Dai Hung, V. Orlovich, N. Sarukura. – Da Nang. – 2015. – P. 542–547.

60. Varaksa Y., Sinitsyn G., Khodasevich M., Yasukevich A., Demesh M., Aseev V. Temperature dependence of green upconversion fluorescence of fluorophosphate and tellurite-barium glasses for application in temperature sensors // 11-ая Международная конференция «Взаимодействие излучений с твердым телом»: материалы / редкол.: В.М. Анищик и др. – Минск: Изд. центр БГУ, 2015. – С. 23–24.

61. Ходасевич М.А., Сеницын Г.В., Роговая М.В., Скорбанова Е.А., Камбур Е.И., Дегтярь Н.Ф., Гаина Б.С. Применение многопараметрического спектрометрического анализа для идентификации молдавских дивинов // *Научные труды Северо-Кавказского федерального научного центра садоводства, виноградарства, виноделия.* – 2015. – Т. 8. – С. 258–262.

62. Ходасевич М.А., Скорбанова Е.А., Роговая М.В., Минко И.С., Камбур Е.И. Определение географического происхождения винодельческой продукции из винограда с помощью многопараметрического анализа спектров пропускания // 8 Международная научно-техническая конференция «Приборостроение-2015»: Материалы / редкол.: О.К. Гусев и др. – Минск: БНТУ, 2015. – Т. 1. – С. 180–182.

63. Batay L., Khodasevich I., Khodasevich M., Gorbunova N., Manina E. Identification of Ehrlich carcinoma by multivariate analysis of Raman spectra of blood samples // *Advances in Optics Photonics Spectroscopy & Applications IX: Proceedings* / ed.: P. Brechignac, K. Hakuta, N. Van Hieu, N. Dai Hung, V. Orlovich, N. Sarukura. – Da Nang, Vietnam. – 2017. – P. 303–306.

64. Khodasevich M., Sinitsyn G., Varaksa Yu., Yasukevich A., Demesh M., Aseev V. Sensitivity of fluorescence intensity ratio temperature measurement in Er-doped fluorophosphate glass ceramics // *Advances in Optics Photonics Spectroscopy & Applications IX: Proceedings* / ed.: P. Brechignac, K. Hakuta, N. Van Hieu, N. Dai Hung, V. Orlovich, N. Sarukura. – Da Nang, Vietnam. – 2017. – P. 295–297.

65. Khodasevich M., Scorbanov E., Obade L., Degtyar N., Cambur E., Rogovaya M. Identification of wines with protected geographical indication (IGP) by UV-Vis-NIR spectroscopy combined with multivariate analysis // *Advances in Optics Photonics Spectroscopy & Applications IX: Proceedings* / ed.: P. Brechignac, K. Hakuta, N. Van Hieu, N. Dai Hung, V. Orlovich, N. Sarukura. – Da Nang, Vietnam. – 2017. – P. 298–302.

66. Варакса Ю.А., Сеницын Г.В., Ходасевич М.А. Определение штарковского расщепления уровней энергии редкоземельных ионов с помощью многопараметрического анализа температурной зависимости спектров люминесценции в пределах набора аддитивных движущихся спектральных окон // XI Международная научно-техническая конференция «Квантовая электроника»: Материалы / редкол.: М.М.Кугейко и др. – Минск: РИВШ, 2017. – С. 175–176.

67. Варакса Ю.А., Сеницын Г.В., Ходасевич М.А., Асеев В.А. Определение штарковского расщепления лазерных уровней энергии редкоземельных ионов с помощью анализа температурной зависимости спектров люминесценции методом главных компонент // VI Конгресс физиков Беларуси: Сборник научных трудов / редкол.: С.Я.Килин и др. – Минск: Институт физики НАН Беларуси, 2017. – С. 103–104.

68. Scorbanov E., Cambur E., Gaina B., Degtyar N., Khodasevich M. Multivariate spectroscopy analysis for classification of Moldavian matured wine distillates // International conference «Modern Technologies in the Food Industry – 2018»: Proceedings / ed.: V. Viorel et al. – Chisinau: Bons Offices, 2018. – P. 151–155.

69. Борисевич Д.А., Ходасевич М.А. Интервальные линейные многопараметрические методы спектрального анализа для идентификации фальсифицированного льняного масла // V Международная научная конференция «Оптика неоднородных структур – 2019»: Материалы / ред.кол.: А.Б.Сотский и др. – Могилев: МГУ, 2019. – С. 229–235.

70. Асеев В.А., Ходасевич М.А. Калибровка температуры методом интервальной проекции на латентные структуры нормированных спектров ап-конверсионной флуоресценции иттербий-эрбиевых германатных стекол // V Международная научная конференция «Оптика неоднородных структур – 2019»: Материалы / ред.кол.: А.Б.Сотский и др. – Могилев: МГУ, 2019. – С. 164–170.

71. Асеев В.А., Борисевич Д.А., Ходасевич М.А. Допированные эрбием и иттербием германатные стекла для многопараметрической калибровки температуры по спектрам апконверсионной флуоресценции // XII Международная научно-техническая конференция «Квантовая электроника»: Материалы / редкол.: М.М.Кугейко и др. – Минск: РИВШ, 2019. – С. 77–79.

72. Ходасевич М.А., Асеев В.А. Калибровка температуры многопараметрическими методами обработки нормированных спектров флуоресценции // XI Международная конференция «Фундаментальные проблемы оптики-2019»: Сборник трудов / под ред. С.А. Козлова. – СПб: Университет ИТМО, 2019. – С. 55–58.

73. Асеев В.А. Борисевич Д.А., Ходасевич М.А. Многопараметрическая калибровка температуры по спектрам зеленой ап-конверсионной флуоресценции активированных эрбием и иттербием германатных стекол и стеклокерамик // XII Международная конференция «Фундаментальные проблемы оптики-2020»: Сборник трудов / под ред. С.А. Козлова. – СПб: Университет ИТМО, 2020. – С. 23–25.

## РЭЗІЮМЭ

Хадасевіч Міхаіл Аляксандравіч

### РАЗВІЦЦЁ АПТЫЧНЫХ СПЕКТРАЛЬНЫХ МЕТАДАЎ ДЫЯГНОСТЫКІ МАТЭРЫЯЛАЎ І ПРАЦЭСАЎ НА АСНОВЕ МНОГАПАРАМЕТРЫЧНАГА ПАДЫХОДУ

**Ключавыя словы:** аптычная дыягностыка, спектральны аналіз, метады галоўных кампанентаў, метады частковых найменшых квадратаў, кластарны аналіз, выбар спектральных пераменных, генетычны алгарытм

**Мэта даследавання:** распрацоўка новых і мадыфікацыя традыцыйных многапараметрычных метадаў з пункту гледжання іх прымянення ў спектральным аналізе аб'ектаў, якія характарызуюцца тыповасцю уласцівасцяў, для атрымання інфармацыі, якая дазваляе класіфікаваць такія аб'екты і праводзіць рэгрэсіўны аналіз іх характарыстык.

**Метады даследавання:** эксперыментальныя вымярэнні з дапамогай метадаў флуарэсцэнтнай і абсарбцыйнай спектраскапіі UV, Vis і NIR дыяпазонаў, спектраскапіі ТГц дыяпазону частот, матэматычнае мадэляванне з дапамогай прымянення метадаў аналізу многапараметрычных дадзеных.

**Атрыманыя вынікі і іх навізна.** Распрацаваны новы метады разрашэння штаркаўскай структуры энергетычных узроўняў актыватара, заснаваны на прымяненні метадаў галоўных кампанентаў да тэмпературнай залежнасці спектраў флуарэсцэнцыі пры ўмераных плюсовых тэмпературах. Прапанаваны метады каліброўкі характарыстык аб'екта даследавання з дапамогай выкарыстання метадаў галоўных кампанентаў, кластарнага аналізу і інтэрвальнага метадаў частковых найменшых квадратаў па камбінацыі вокнаў, якія рухаюцца і маюць на адну спектральную пераменную больш, чым колькасць латэнтных пераменных. Упершыню ажыццёўлена дакладная класіфікацыя падрабленай гарэлачнай прадукцыі апрыёры невядомых вытворцаў і складу з прымяненнем метадаў кластарнага аналізу ў прасторы галоўных кампанентаў спектраў прапускання пры ўвядзенні ўніфікаванай дабаўкі ў канцэнтрацыі, якая не перавышае велічыні дапушчальнага ўзроўню спажывання. Замест традыцыйных спектральных крытэрыяў параўнання матэрыялаў для валаконных узмацняльнікаў ўпершыню ўведзены аднапараметрычны і многапараметрычны інфармацыйныя крытэрыі.

**Рэкамендацыі па выкарыстанні.** Распрацаваныя метады могуць быць выкарыстаны пры правядзенні класіфікацыі і каліброўкі якасных і колькасных характарыстык аб'ектаў пры правядзенні спектральнага аналізу іх уласцівасцяў.

**Вобласць ужывання:** спектраскапія, галіны прамысловасці і сельскай гаспадаркі, якія не патрабуюць пабудовы змястоўных фізіка-хімічных мадэляў.

## РЕЗЮМЕ

Ходасевич Михаил Александрович

### РАЗВИТИЕ ОПТИЧЕСКИХ СПЕКТРАЛЬНЫХ МЕТОДОВ ДИАГНОСТИКИ МАТЕРИАЛОВ И ПРОЦЕССОВ НА ОСНОВЕ МНОГОПАРАМЕТРИЧЕСКОГО ПОДХОДА

**Ключевые слова:** оптическая диагностика, спектральный анализ, метод главных компонент, метод частичных наименьших квадратов, кластерный анализ, выбор спектральных переменных, генетический алгоритм

**Цель исследования:** разработка новых и модификация традиционных многопараметрических методов с точки зрения их применения в спектральном анализе объектов, которые характеризуются типичностью свойств, для получения информации, позволяющей классифицировать такие объекты и проводить регрессионный анализ их характеристик.

**Методы исследования:** экспериментальные измерения с помощью методов флуоресцентной и абсорбционной спектроскопии UV, Vis и NIR диапазонов, спектроскопии ТГц диапазона частот, математическое моделирование с помощью применения методов анализа многопараметрических данных.

**Полученные результаты и их новизна.** Разработан новый метод разрешения штарковской структуры энергетических уровней активатора, основанный на применении метода главных компонент к температурной зависимости спектров флуоресценции при умеренных положительных температурах. Предложен метод калибровки характеристик объекта исследования с помощью использования метода главных компонент, кластерного анализа и интервального метода частичных наименьших квадратов по комбинации движущихся окон, содержащих на одну спектральную переменную больше, чем количество латентных переменных. Впервые осуществлена достоверная классификация поддельной водочной продукции априори неизвестных производителя и состава путем применения методов кластерного анализа в пространстве главных компонент спектров пропускания при введении унифицированной добавки в концентрации, не превышающей величины допустимого уровня потребления. Вместо традиционных спектральных критериев сравнения материалов для волоконных усилителей впервые введены однопараметрический и многопараметрический информационные критерии.

**Рекомендации по использованию.** Разработанные методы могут использоваться при проведении классификации и калибровки качественных и количественных характеристик объектов при проведении спектрального анализа их свойств.

**Область применения:** спектроскопия, отрасли промышленности и сельского хозяйства, не требующие построения содержательных физико-химических моделей.

## SUMMARY

Khodasevich Mikhail Alexandrovich

### DEVELOPMENT OF OPTICAL SPECTRAL METHODS FOR DIAGNOSTICS OF MATERIALS AND PROCESSES BASED ON A MULTIVARIATE APPROACH

**Keywords:** optical diagnostics, spectral analysis, principal component analysis, partial least squares, cluster analysis, spectral variables selection, genetic algorithm

**Objective:** development of new and modification of traditional multivariate methods for the application in the spectral analysis of objects that are characterized by typical properties, to obtain an information for classification of these objects and regression analysis of their characteristics.

**Research methods:** experimental measurements using methods of fluorescence and absorption spectroscopy of UV, Vis and NIR ranges, THz spectroscopy, mathematical modeling using methods of multivariate data analysis.

**The results obtained and their novelty.** A new method is developed for determining the Stark structure of activator energy levels based on the application of principal component analysis to the temperature dependence of fluorescence spectra at moderate positive temperatures. A method is proposed for calibrating the characteristics of the objects using principal component analysis, cluster analysis and the searching combination moving windows interval partial least squares with windows containing one spectral variable more than the number of latent variables. For the first time, a reliable classification of counterfeit vodkas with a priori unknown origin and composition was carried out by applying cluster analysis in the principal component space of the transmission spectra. Legal vodkas are modeled by the introduction of a unified additive in a concentration not exceeding the permissible level of consumption. Instead of the traditional spectral criteria for comparing materials for fiber amplifiers, single-variate and multivariate information criteria were introduced for the first time.

**Recommendations for use.** The developed methods can be used in the classification and calibration of qualitative and quantitative characteristics of objects with the spectral analysis of their properties.

**Application area:** spectroscopy, industries and agriculture that do not require the creation of meaningful physical and chemical models.

ХОДАСЕВИЧ Михаил Александрович

РАЗВИТИЕ ОПТИЧЕСКИХ СПЕКТРАЛЬНЫХ МЕТОДОВ  
ДИАГНОСТИКИ МАТЕРИАЛОВ И ПРОЦЕССОВ  
НА ОСНОВЕ МНОГОПАРАМЕТРИЧЕСКОГО ПОДХОДА



Автореферат  
диссертации на соискание ученой степени  
доктора физико-математических наук  
по специальности 01.04.05 – оптика

Подписано в печать 19.05.2023. Формат 60x90/16.

Тип бумаги – офисная. Гарнитура – «Times». Печать – ризография.

Объем: 3.0 усл.печ.л.; 2.4 уч.изд.л.

Тираж 60 экз. Заказ №

---

Государственное научное учреждение  
«ИНСТИТУТ ФИЗИКИ имени Б. И. СТЕПАНОВА  
НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК БЕЛАРУСИ»

220072, г. Минск, пр. Независимости, 68-2.

Отпечатано на ризографе ИНСТИТУТА ФИЗИКИ НАН Беларуси