

УТВЕРЖДАЮ

Первый проректор Белорусского
государственного университета

Д.М.Курлович

« 14 » июня 2023 г.



ОТЗЫВ

оппонирующей организации по диссертационной работе
Ходасевича Михаила Александровича

«Развитие оптических спектральных методов диагностики материалов и процессов на основе многопараметрического подхода», представленной на соискание учёной степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.05 – оптика (выписка из протокола от 12 июня 2023 г. №20 заседания объединенного научного семинара кафедры лазерной физики и спектроскопии физического факультета и кафедры физической оптики и прикладной информатики)

1. Соответствие содержания диссертации заявленной специальности и отрасли науки со ссылкой на область исследования паспорта специальности

Диссертационная работа Ходасевича Михаила Александровича посвящена разработке методов многопараметрического анализа спектральной информации и решения с их помощью широкого класса задач, охватывающих как физические проблемы, так и прикладные. Содержание диссертационной работы и приведенные результаты полностью соответствуют пункту 3 (спектроскопия твердого тела, жидкостей и биообъектов, люминесценция) раздела «Области исследований» паспорта специальности 01.04.05 – оптика и отрасли «физико-математические науки».

2. Научный вклад соискателя в разработку научной проблемы с оценкой его значимости

Проведенная в диссертационной работе Ходасевича М.А. разработка методов анализа многопараметрических данных привела к значительному росту результативных применений спектроскопии в решении количественных и качественных задач анализа различных материалов. Хорошей иллюстрацией возможностей методов многопараметрического анализа являются результаты по применению методов для обнаружения фальсифицированной продукции, которая рассматривается в диссертации соискателя на примере вин, виноматериалов, водок, растительных масел и лекарственных средств. Широкая распространенность фальсифицируемых пищевых продуктов является

проблемой, которой в последнее время уделяется огромное внимание. Программы контроля качества пищевой продукции являются обязательными в США, ЕС, России, Беларуси и многих других странах как для защиты потребителей от непреднамеренных ошибок в процессе производства, так и для предотвращения возможности фальсификации. Аналитические методы (жидкостная и газовая хроматография, масс-спектрометрия) постепенно заменяются интеллектуальным анализом данных. Наиболее результативным научным направлением применения многопараметрического анализа данных для определения подлинности продукции является оптическая спектроскопия УФ, видимого и особенно ближнего ИК диапазонов спектра. Диссертационная работа М.А. Ходасевича, в которой органически объединяются экспериментальные измерения и теоретические методы обработки данных, посвящена не только исследованиям в области построения качественных моделей для выявления фальсифицированной продукции, но также и количественных моделей по определению физико-химических характеристик объектов исследований. Для применения в процессе построения количественных моделей соискателем разработан интервальный метод выбора спектральных переменных, приводящий к кратному увеличению точности определения калибруемого параметра. Кроме того, в работе впервые решена физическая задача по определению штарковского расщепления уровней энергии активатора по температурной зависимости спектров флуоресценции и предложен новый метод флуоресцентной термометрии, характеризующийся лучшей точностью по сравнению с широко применяемым ратиометрическим методом. На примере иттербия в кристаллических средах показано достижение точности определения штарковской структуры уровней энергии с помощью применения многопараметрического анализа при умеренно положительных температурах, не уступающей точности данных, получаемых при криогенных температурах.

Таким образом, диссертационная работа М.А.Ходасевича содержит принципиально новые научные результаты, совокупность которых является крупным достижением в разработке новых методов оптической диагностики материалов и процессов, и которые признаны мировым научным сообществом и обеспечивают приоритет Республики Беларусь.

3. Конкретные научные результаты (с указанием их новизны и практической значимости), за которые соискателю может быть присуждена искомая ученая степень

Основные результаты диссертации М.А. Ходасевича, за которые может быть присуждена учёная степень доктора физико-математических наук, и выносимые на защиту положения являются новыми и оригинальными. Наиболее важные из них следующие:

1. 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.

2. 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 фторида кальция в диапазоне длин волн 893–1107 нм разработанный метод выбора спектральных переменных уменьшил среднеквадратичное отклонение калибровки температуры более чем в два раза до 0,45 К.

3. Показано, что многопараметрическая калибровка температуры методом частичных наименьших квадратов по спектральному сдвигу флуоресценции на примере калиевоалюмооборатного 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.

4. Выполнена разработка многопараметрического метода нахождения штарковской структуры энергетических уровней активаторов по спектрам флуоресценции при умеренных положительных температурах, точность которого не уступает точности применяемых при криогенных температурах методов абсорбционной и флуоресцентной спектроскопии; для ионов иттербия во фториде кальция с использованием разработанных методов штарковская структура энергетических уровней найдена с точностью 2 см^{-1} .

5. Многопараметрическая оптимизация четырех мультиплексированных накачек усилителя на основе вынужденного комбинационного рассеяния света с помощью генетического алгоритма показала возможность достижения неравномерности усиления $\pm 1 \text{ дБ}$ в полосе шириной 80 нм при суммарной мощности накачек 900 мВт.

6. Спектральная эффективность передачи информации и пропускная способность уточняют используемые критерии (пиковая величина сечения стимулированного испускания активатора, ширина спектра по полувысоте и время жизни флуоресценции и др.) качества волокон для усилителей в составе коммуникационных систем.

7. Многопараметрический подход к проведению классификации или выявлению фальсифицированной продукции развит на основе применения методов кластерного анализа в маломерном пространстве главных компонент спектров исследуемых объектов и успешно применен на примерах ряда пищевых продуктов, лекарственных средств и крови подопытных мышей. Подделка льняного масла нерафинированным подсолнечным имеет предел обнаружения 1,2 % по видимому и ближнему ИК диапазонам спектров оптической плотности. Применение терагерцовой спектроскопии во временной области и многопараметрических методов обработки спектров позволило

достоверно классифицировать два лекарственных средства и идентифицировать два из трех в трехкомпонентной смеси.

Практическое значение полученных результатов заключается в повышении точности количественного и качественного спектрального анализа за счет применения многопараметрических методов даже при условии использования спектрального оборудования более низкого класса точности, возможности замены затратных эталонных методов исследований на простые и дешевые и привлечения к проведению измерений персонала с более низкой квалификацией.

4. Замечания по работе

При общей положительной оценке диссертационной работы необходимо сделать ряд замечаний:

1. При применении интервальных методов выбора спектральных переменных для понижения среднеквадратичного отклонения калибровки температуры по спектрам флуоресценции активированных сред положение выбранных «окон» лишь частично совпадает с характерными пиками спектров (например, на рисунке 70). Следовало объяснить, чем обусловлено положение остальных выбранных спектральных переменных?
2. Методики измерения спектров пропускания винных дистиллятов, дивинов и вин рассматривают три спектральных диапазона, измерения в которых проводились в кюветах толщиной 1 или 10 мм. В итоге спектры представляют собой зависимости с двумя разрывами, как, например, показано на рисунке 79. В диссертации не приведено объяснение, как наличие этих разрывов влияет на применение многопараметрических методов?
3. В диссертации содержатся методические рекомендации по применению многопараметрических методов в оптическом спектральном анализе. Стоило также привести рекомендации для применения методов формирования обучающей и проверочной выборок в зависимости от характера распределения предикторов (спектров) и откликов (зависимого параметра) по соответствующим диапазонам.
4. В разделе, посвященном выявлению фальсифицированных алкогольных напитков следовало указать, насколько оправдано применение методов кластерного анализа вместо методов классического спектрального анализа.
5. Есть отдельные погрешности в оформлении. Так в диссертации на стр. 162 на рис. 103, где приведены результаты измерений оптической плотности в диапазоне 1000-2200 нм, разное содержание льняного масла изображается линиями разных цветов. На указанном рисунке они однако не различаются. В автореферате на рис 9а отдельные кривые не обозначены, это же относится и к рис. 10, где две различающиеся кривые не обозначены.

Сделанные замечания не сказываются на высоком качестве работы и не влияют на её положительную оценку в целом.

5. Соответствие научной квалификации соискателя учёной степени, на которую он претендует.

Анализ содержания диссертации подтверждает высокую квалификацию М.А. Ходасевича в области многопараметрического спектрального анализа и его применения для целей оптической диагностики. Все экспериментальные и теоретические исследования, определяющие научную и практическую значимость работы, а также их обобщения выполнены автором лично. Результаты диссертационного исследования были представлены на международных научных конференциях и опубликованы в рецензируемых отечественных и зарубежных научных журналах, среди которых «Журнал прикладной спектроскопии», «Весці НАН Беларусі», «Приборы и методы измерений», «Nonlinear Phenomena in Complex Systems», «Оптика и спектроскопия», «Оптический журнал», «Физика и механика материалов», «Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики», «Journal of Luminescence», «Laser Physics Letters», «Journal of Advances in Applied Physics», «Lithuanian Journal of Physics». С учётом высокого научного уровня публикаций можно заключить, что *научная квалификация М.А. Ходасевича соответствует искомой учёной степени доктора физико-математических наук.*

Диссертационная работа Ходасевича Михаила Александровича является завершённым самостоятельным квалификационным исследованием, которое соответствует требованиям ВАК Республики Беларусь, предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени доктора наук (Глава 3 «Положения о присуждении учёных степеней и присвоении учёных званий»), и заслуживает присуждения учёной степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.05 – оптика за:

– разработку многопараметрического метода нахождения штарковской структуры энергетических уровней активаторов по спектрам флуоресценции при умеренных положительных температурах, точность которого не уступает точности применяемых при криогенных температурах методов абсорбционной и флуоресцентной спектроскопии;

– более чем двукратное повышение точности флуоресцентной калибровки температуры методом частичных наименьших квадратов с помощью применения поиска комбинации движущихся окон, содержащих на одну спектральную переменную больше, чем количество латентных переменных в широкополосной калибровке, по сравнению с методом определения отношения интенсивностей флуоресценции при переходах с двух термально связанных уровней энергии активатора;

– установление зависимостей однопараметрической спектральной эффективности передачи информации волоконным усилителем и многопараметрической пропускной способности от материала волоконного усилителя;

– одновременное нахождение длин волн и мощностей мультиплексированных накачек волоконного усилителя на основе вынужденного комбинационного

рассеяния света при учете всего спектра возможных взаимодействий накачек суммарной мощностью около 900 мВт и сигналов в полосе шириной 80 нм, которые позволяют получить неравномерность спектра усиления менее ± 1 дБ;

– разработку метода классификации и обнаружения фальсифицированной продукции, которая рассматривается в диссертации соискателя на примере растительных масел, лекарственных средств, вин, виноматериалов и водочной продукции с унифицированной легализующей добавкой, который обеспечивает высокую точность обнаружения и идентификации, существенно превышающую точность традиционных методов спектрального анализа.

Отзыв обсужден после заслушивания доклада соискателя на заседании объединенного научного семинара кафедры лазерной физики и спектроскопии физического факультета и кафедры физической оптики и прикладной информатики (12 июня 2023 года, протокол № 20), на котором присутствовали заведующий кафедрой лазерной физики и спектроскопии, доктор физико-математических наук, профессор Толстик А.Л. (председатель научного семинара); профессор кафедры лазерной физики и спектроскопии, доктор физико-математических наук, профессор Воропай Е.С. (эксперт); заведующий кафедрой физической оптики и прикладной информатики, доктор физико-математических наук, доцент Новицкий А.В.; профессор кафедры физической оптики и прикладной информатики, доктор физико-математических наук, профессор Могильный В.В.; доцент кафедры физической оптики и прикладной информатики, кандидат физико-математических наук, доцент Пицевич Г.А.; доцент кафедры лазерной физики и спектроскопии, кандидат физико-математических наук, доцент Мельникова Е.А.; доцент кафедры лазерной физики и спектроскопии, кандидат физико-математических наук, доцент Ермалицкая К.Ф.; доцент кафедры лазерной физики и спектроскопии, кандидат физико-математических наук, доцент Ляшенко Л.С.; доцент кафедры лазерной физики и спектроскопии, кандидат физико-математических наук, доцент Сташкевич И.В.; доцент кафедры физической оптики и прикладной информатики, кандидат физико-математических наук, доцент Стельмах Г.Ф.; доцент кафедры лазерной физики и спектроскопии, кандидат физико-математических наук, доцент Горбач Д.В.; доцент кафедры общей физики, кандидат физико-математических наук, доцент Буров Л.И.; старший преподаватель кафедры физической оптики и прикладной информатики Довыденко С.Н. (всего: 4 доктора наук, 8 кандидатов наук).

СЛУШАЛИ:

1. Доклад Ходасевича Михаила Александровича, который изложил краткое содержание, основные положения и выводы представленной диссертации.

2. Проект отзыва оппонировавшей организации, представленный д.ф.-м.н. Воропаем Е.С. – экспертом оппонировавшей организации, назначенным приказом БГУ от 02.06.2023 г. № 340-ОД.

В обсуждении диссертации приняли участие: профессор Толстик А.Л., профессор Воропай Е.С., доцент Новицкий А.В., доцент Ермалицкая К.Ф., доцент Мельникова Е.А., доцент Стельмах Г.Ф.

В голосовании приняли участие 12 членов семинара, имеющие ученые степени. Результаты открытого голосования: «За» – 12, «Против» – нет, «Воздержались» – нет.

ПОСТАНОВИЛИ:

1. Рекомендовать к защите диссертацию Ходасевича Михаила Александровича «Развитие оптических спектральных методов диагностики материалов и процессов на основе многопараметрического подхода», представленной на соискание учёной степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.05 – оптика.

2. Одобрить заключение оппонировавшей организации.

Председатель научного семинара -
доктор физико-математических наук,
профессор, заведующий кафедрой
лазерной физики и спектроскопии
физического факультета БГУ



А.Л. Толстик

Эксперт -
доктор физико-математических наук,
профессор, профессор кафедры лазерной
физики и спектроскопии физического
факультета БГУ



Е.С. Воропай

Ученый секретарь на заседании -
кандидат физико-математических наук,
доцент, доцент кафедры лазерной физики
и спектроскопии физического факультета
БГУ



К.Ф. Ермалицкая