

Отзыв

официального оппонента д.т.н., профессора Казаковцева Льва Александровича на диссертацию Филатова Александра Сергеевича «Обработка и кластеризация спектральных данных жидких сред», представленную на соискание учёной степени кандидата технических наук по научной специальности 2.3.1 Системный анализ, управление и обработка информации, статистика.

Современные спектроскопические методы позволяют получать большие массивы экспериментальных данных, характеризующих свойства жидких сред с высокой точностью и разрешением. Однако рост информативности измерений сопровождается существенным усложнением структуры спектров, что делает традиционные способы их анализа недостаточно эффективными. Задачи выявления различий между объектами, группирования спектров и последующей интерпретации результатов требуют применения специализированных методов многомерного анализа.

Практика показывает, что использование отдельных процедур обработки спектров без учёта их взаимосвязей часто приводит к нестабильным результатам, чувствительным к шумам и условиям эксперимента. Особенно это проявляется при анализе данных, в которых полезная информация распределена по множеству взаимосвязанных спектральных каналов и не может быть выделена простыми статистическими средствами. В таких условиях становится необходимым формирование целостного подхода, ориентированного на последовательную трансформацию данных – от исходных спектров к компактным и информативным представлениям.

В настоящее время методы снижения размерности и кластерного анализа активно применяются при обработке данных, однако при работе со спектральной информацией их использование часто осуществляется фрагментарно, без системного учёта взаимосвязей между этапами предварительной обработки и характеристиками получаемых кластерных решений. Отсутствие системных исследований в этой области ограничивает возможности практического использования подобных методов и снижает достоверность принимаемых на их основе решений.

Диссертационная работа посвящена решению указанной проблемы и направлена на разработку и обоснование комплексного подхода к обработке и кластеризации спектральных данных жидких сред. Предложенный в работе подход обеспечивает согласованное использование процедур предварительной обработки, снижения размерности и кластерного анализа,

что позволяет повысить устойчивость результатов и расширить возможности их практического применения в задачах анализа спектральной информации.

Первая глава диссертационной работы посвящена систематизации и критическому осмыслению существующих подходов к анализу спектральных данных жидких сред. Соискателем проведён обзор современных методов, применяемых в хемометрии и анализе многомерных данных, с акцентом на особенности их использования при обработке реальных спектров. Показано, что высокая размерность спектральных представлений, наличие шумов, перекрытие информативных участков спектра и нелинейные зависимости между признаками существенно усложняют получение устойчивых и интерпретируемых результатов. Отдельно отмечена ключевая роль этапов предварительной обработки, оказывающих определяющее влияние на последующий анализ и зачастую недооцениваемых в существующих исследованиях.

На основе проведённого анализа автором аргументирована необходимость перехода от разрозненного применения отдельных методов к комплексной методике, сочетающей инструменты обработки сигналов, методы уменьшения размерности и алгоритмы кластерного анализа. В первой главе чётко сформулированы цель и задачи исследования, ориентированные на повышение надёжности и воспроизводимости результатов анализа спектральных данных. Показано, что без учёта специфики спектров и согласованного применения методов машинного обучения и хемометрии невозможно обеспечить требуемую устойчивость результатов.

Во второй главе диссертации изложены теоретические и алгоритмические основы предложенного подхода. Автором выполнена формализация задачи преобразования многомерных спектральных данных в компактное представление, удобное для дальнейшего анализа. Рассмотрены и сопоставлены различные методы снижения размерности, включая линейные и нелинейные алгоритмы, проанализированы их свойства, вычислительные характеристики и чувствительность к параметрам. Значительное внимание уделено выбору метрик сходства и методам предварительной обработки, от которых зависит корректность численных процедур и качество выделяемых кластерных структур.

Заключительная часть второй главы посвящена анализу алгоритмов кластеризации и обсуждению условий их применимости к спектральным данным. В целом вторая глава отличается логичной структурой, строгим математическим изложением и формирует целостную методическую основу, необходимую для практической реализации и дальнейшего развития предложенных в диссертации методов анализа спектральной информации.

Третья глава диссертационного исследования носит прикладной характер и посвящена проверке работоспособности и эффективности разработанных методов на реальных спектральных данных жидких сред. В качестве экспериментального материала использованы спектры автомобильных бензинов, что позволило проанализировать практическую применимость предложенного подхода. Автором выполнено последовательное исследование влияния ключевых этапов анализа – предварительного преобразования спектров, выбора меры сходства, методов уменьшения размерности и алгоритмов кластерного анализа – на формирование итоговой структуры данных.

В ходе численных экспериментов показано, что этап предварительной обработки играет определяющую роль в повышении информативности спектральных представлений и существенно влияет на результаты кластеризации. Продемонстрировано, что применение методов нелинейного снижения размерности позволяет более полно выявлять скрытую структуру данных по сравнению с анализом исходных высокоразмерных спектров. Установлено, что определённые сочетания методов уменьшения размерности и метрик расстояния обеспечивают формирование устойчивых и хорошо разделимых групп, что подтверждается значениями используемых критериев качества кластеризации.

Дополнительно проанализирована работа различных алгоритмов кластеризации в условиях изменяющихся параметров и различных вариантов предварительной обработки данных. Результаты показывают, что использование оптимально подобранных комбинаций методов позволяет достичь высокой согласованности полученных кластеров, тогда как применение алгоритмов непосредственно к необработанным спектрам приводит к существенному снижению качества разделения.

Полученные экспериментальные данные подтверждают обоснованность предложенной методики и демонстрируют её эффективность при решении задач анализа и структурирования спектральной информации. Представленные в главе результаты свидетельствуют о возможности использования разработанного подхода в автоматизированных системах анализа и идентификации веществ на основе их спектральных характеристик.

Четвёртая глава диссертационной работы посвящена практической реализации предложенных в исследовании методов и алгоритмов в виде программного решения, предназначенного для обработки и анализа спектральных данных жидких сред. Автором описан процесс создания программного комплекса, обеспечивающего выполнение всех этапов анализа спектров, включая хранение данных, их преобразование, применение алгоритмов снижения размерности и кластеризации, а также представление полученных результатов в наглядной форме. Приведено описание общей

логики построения программной системы, взаимодействия её основных модулей и используемых программных средств.

В главе рассмотрены вопросы реализации вычислительных процедур, организации базы данных и построения пользовательского интерфейса, ориентированного на работу со спектральной информацией. Показано, что разработанное программное решение корректно функционирует при обработке массивов спектральных данных различного объёма и демонстрирует устойчивость вычислительных алгоритмов. Практическая апробация программного комплекса подтверждает возможность его использования в составе автоматизированных систем анализа спектров и расширения функциональных возможностей существующих аналитических решений, применяемых для контроля качества веществ.

В заключительной части диссертации обобщены основные результаты исследования и сформулированы выводы по выполненной работе. В приложениях представлены материалы, подтверждающие практическую значимость полученных результатов, включая документы о регистрации программных продуктов, экономическое обоснование внедрения разработанного комплекса, а также сведения о его использовании в учебной и научно-исследовательской деятельности.

Тема диссертации «Обработка и кластеризация спектральных данных жидких сред» является актуальной, в ней изложены научно обоснованные технические решения, внедрение которых вносит значительный вклад в повышение эффективности анализа и идентификации химических веществ в системах контроля качества продукции химической промышленности.

Корректность и обоснованность сформулированных в диссертации положений, выводов и рекомендаций подтверждаются использованием адекватных методов теоретического анализа и экспериментальных исследований, а также результатами апробации разработанного программно-алгоритмического комплекса. Достоверность полученных результатов подтверждена практическим применением разработанных решений в рамках научных исследований и испытаний, а также соответствующими документами о внедрении и использовании, приведёнными в приложениях к диссертации.

Научная новизна диссертационной работы заключается в создании комплексного подхода к анализу многомерных спектральных данных, основанного на согласованном использовании оригинальных методов предварительной обработки, процедур уменьшения размерности, учитывающих геометрические и структурные свойства спектров, и алгоритмов кластерного анализа в пространстве пониженной размерности. Разработанные методические принципы анализа обеспечивают более

устойчивое выделение кластеров и способствуют повышению интерпретируемости результатов.

К основным результатам диссертационного исследования относится разработка целостного метода обработки и кластеризации спектральных данных, ориентированного на задачи автоматизированной идентификации и контроля качества веществ, включающего оригинальные процедуры трансформации исходных данных, методы снижения размерности и алгоритмы кластеризации, а также созданный программный комплекс, реализующий предложенные вычислительные методы и обеспечивающий воспроизводимость экспериментов и возможность масштабирования при работе с массивами спектральных данных.

Практическая апробация разработанных алгоритмов и программных средств показала, что их применение позволяет повысить устойчивость и информативность результатов кластеризации по сравнению с традиционными методами, что подтверждает целесообразность и эффективность предложенного подхода для решения прикладных задач спектрального анализа.

Содержание диссертации опубликовано в рецензируемых научных изданиях и апробировано на международных, Всероссийских научно-технических конференциях.

Автореферат достоверно отражает основное содержание диссертации.

По диссертации имеется ряд замечаний:

1. В работе недостаточно чётко акцентирована системная новизна предлагаемого подхода: полезно было бы более явно показать, в чём именно заключается отличие разработанной методики от существующих решений с точки зрения системного анализа и архитектуры обработки данных.
2. В работе ограничено отражена связь между результатами вычислительных экспериментов и практическими задачами управления качеством и принятия решений в производственных системах.
3. В диссертационной работе не освещен вопрос анализа и сопоставления альтернативных по отношению к спектрометрии подходов к цифровому представлению свойств и состава веществ.
4. В работе заявлена интеграция разработанных решений в экспертно-нейросетевую систему, однако в автореферате не в полной мере раскрыта роль экспертных знаний и механизмы их формального включения в процесс принятия решений.
5. В разделе, посвящённом программной реализации, недостаточно раскрыты вопросы масштабируемости и интеграции разработанного

программного обеспечения в существующие информационно-управляющие системы.

6. Отдельные термины и обозначения вводятся без предварительного пояснения, что может затруднить восприятие автореферата специалистами смежных направлений.

Тем не менее, приведенные замечания не умаляют научную ценность и практическую значимость диссертации. Она соответствует требованиям пп. 9 – 11, 13, 14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 (ред. от 18.03.2023 г.), предъявляемым к кандидатским диссертациям, а Филатов Александр Сергеевич достоин присуждения ему степени кандидата технических наук по научной специальности 2.3.1. Системный анализ, управление и обработка информации, статистика.

Официальный оппонент

профессор кафедры системного анализа и исследования операций ФГБОУ ВО «Сибирский государственный университет науки и технологий имени академика М.Ф.Решетнева»,
доктор технических наук (05.13.01 – Системный анализ, управление и обработка информации (информатика, вычислительная техника и управление)), профессор

Казakovцев Лев Александрович Л. Казakovцев «28» 01 2026 г.

Адрес: 660037, Российская Федерация, Красноярский край, город Красноярск, проспект им. газеты Красноярский рабочий, 31.

Телефон: +7 (391) 266-03-88; +7 (391) 291-90-56.

E-mail: kazakovtsev@sibsau.ru

