

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по научной и инновационной  
деятельности Национального исследовательского  
Томского государственного университета  
доктор технических наук, профессор



Замятин Александр Владимирович

«16» февраля 2026 г.

### ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» на диссертационную работу Фролова Олега Олеговича «Разработка способа анализа спектров комбинационного рассеяния для применения в стоматологии», представленную на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 2.2.12. Приборы, системы и изделия медицинского назначения

#### Актуальность темы диссертации

Актуальность диссертационной работы Фролова О. О. определяется необходимостью совершенствования методов диагностики стоматологических заболеваний, в частности пародонтита, отличающихся высокой распространённостью и значительным влиянием на качество жизни пациентов. Современные клинические и рентгенологические методы диагностики, несмотря на их широкое применение, не обеспечивают достаточной чувствительности к ранним структурно-химическим изменениям твёрдых тканей зубов и костной ткани и в ряде случаев связаны с лучевой нагрузкой и субъективностью интерпретации результатов.

Перспективным направлением является использование спектроскопии комбинационного рассеяния, обладающей высокой молекулярной специфичностью и потенциальной возможностью неинвазивного применения *in vivo*. Вместе с тем практическое внедрение данного метода в стоматологии ограничено сложностью обработки спектров, обусловленной выраженным флюоресцентным фоном и значительным перекрытием спектральных линий. В этой связи разработка специализированного способа анализа спектров комбинационного рассеяния, ориентированного на решение прикладных диагностических задач стоматологии, является актуальной научно-технической задачей.

#### Структура диссертации и ее краткое содержание

Диссертационная работа изложена на 187 страницах машинописного текста, состоит из введения, пяти глав, заключения, списка сокращений и условных обозначений, списка терминов, списка литературы, включающего 149



наименований. Работа включает в себя 76 иллюстраций, 16 таблиц и 2 приложения.

Во **введении** автором сформулирована актуальность диссертационной работы, поставлены цели и задачи исследования, представлены научная новизна и основные положения, выносимые на защиту.

В **первой главе** представлен анализ современного состояния оптических и спектроскопических методов исследования биоматериалов в стоматологии, рассмотрены существующие методы диагностики заболеваний пародонта и оценки состояния твёрдых тканей зубов, выявлены их ограничения и обоснован выбор спектроскопии комбинационного рассеяния.

Во **второй главе** рассмотрены методы обработки спектров комбинационного рассеяния, включая алгоритмы предобработки, коррекции флуоресцентного фона и декомпозиции спектров, а также сформулированы требования к разрабатываемому способу анализа.

В **третьей главе** изложены теоретические основы и практическая реализация итеративного алгоритма декомпозиции спектров комбинационного рассеяния, приведены результаты моделирования и оценки точности восстановления параметров спектральных линий.

В **четвёртой главе** представлены результаты применения разработанного способа анализа для оценки деминерализации дентинных материалов и построения классификационных моделей на основе информативных спектральных признаков.

В **пятой главе** рассмотрено применение разработанного подхода для экспресс-диагностики пародонтита и оценки изменений твёрдых тканей зубов и костной ткани в процессе лечения.

В **заключении** обобщены основные результаты диссертационной работы, сформулированы выводы и приведены рекомендации по практическому использованию полученных результатов.

### **Научная новизна проведённых исследований и полученных результатов**

Научная новизна диссертационного исследования заключается в получении новых научных результатов, часть из которых получена автором **впервые**, а часть – развивает и дополняет ранее известные подходы.

1) Впервые предложен итеративный алгоритм декомпозиции спектров комбинационного рассеяния биоматериалов, реализующий автоматизированный подбор параметров спектральных линий при их взаимном перекрытии до 75 %. Алгоритм обеспечивает точность определения положений центров линий не хуже  $0.1 \text{ см}^{-1}$  и относительную погрешность оценки амплитуд и ширин  $\leq 0.3 \%$  при уровне детерминации модели  $R^2 \geq 0.995$ . Ранее известные методы декомпозиции не обеспечивали сопоставимой точности при столь высоком уровне перекрытия спектральных компонент.

2) Разработан способ оценки степени деминерализации дентинных материалов, основанный на анализе информативных спектральных признаков комбинационного рассеяния в диапазоне  $630\text{--}1450 \text{ см}^{-1}$  с применением логистической регрессии для вероятностной классификации образцов,

обеспечивающий точность ROC AUC 1.0 (0.99–1.0; 95 % ДИ) при определении факта деминерализации. Ранее подобные количественные показатели диагностической точности для данной задачи не были продемонстрированы.

3) Впервые реализован способ экспресс-диагностики пародонтита, основанный на комплексной обработке спектров комбинационного рассеяния эмали и костной ткани с применением логистической регрессии, позволяющий диагностировать признаки заболевания с показателями ROC AUC 0.94 (0.89–0.98; 0.95 ДИ) для эмали и ROC AUC 0.88 (0.78–0.96; 0.95 ДИ) для костной ткани.

### **Степень обоснованности и достоверности научных положений, выводов и заключений, сформулированных в диссертации**

Обоснованность научных положений и выводов, представленных в диссертационной работе, определяется корректной постановкой цели и задач исследования, использованием современных методов экспериментальной спектроскопии комбинационного рассеяния, математического моделирования, цифровой обработки сигналов, статистического анализа и методов машинного обучения.

Основные положения диссертации опубликованы в 7 статьях в журналах, включенных в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук (из них 2 статьи в зарубежном научном журнале, входящем в Scopus / Web of Science; 2 статьи в российском научном журнале, входящем в Scopus / Web of Science); получен 1 патент Российской Федерации.

Достоверность полученных результатов обеспечивается анализом экспериментальных данных, полученных с использованием сертифицированного спектроскопического оборудования, применением формализованных алгоритмов обработки спектров и подтверждена количественными показателями качества моделей, включая коэффициент детерминации  $R^2$ , показатели чувствительности, специфичности и площадь под ROC-кривой (AUC). Статистическая значимость результатов подтверждена анализом доверительных интервалов и использованием методов перекрёстной валидации.

Достоверность выводов подтверждается их воспроизводимостью, согласованностью с результатами, представленными в работах других авторов, а также апробацией основных положений диссертации в виде публикаций в рецензируемых научных изданиях и докладов на конференциях всероссийского и международного уровня.

### **Значимость результатов диссертации для науки и практики**

Предложенный соискателем подход к обработке и анализу спектров комбинационного рассеяния биологических тканей, основанный на физически обоснованной аппроксимации спектральных линий профилем Фойгта, применении методов отбора признаков и алгоритмов машинного обучения, обладает теоретической значимостью для развития количественной рамановской спектроскопии и методов анализа многомерных биомедицинских данных. Работа

расширяет методологические основы параметрической декомпозиции спектров, обеспечивает статистически обоснованную оценку различий между нормальными и патологическими состояниями тканей и вносит вклад в развитие воспроизводимых алгоритмов спектральной диагностики.

Практическая значимость исследования определяется возможностью использования разработанного алгоритмического комплекса для автоматизированной обработки и классификации спектров комбинационного рассеяния при диагностике структурных изменений тканей зубов. Предложенные методы могут быть адаптированы к различным экспериментальным системам при соответствующей калибровке и использованы при создании программных решений для клинической и лабораторной спектроскопии, а также в образовательном процессе подготовки специалистов в области медицинской физики и биомедицинской фотоники.

### **Рекомендации по использованию результатов и выводов диссертации**

Результаты, полученные в диссертационной работе, демонстрируют возможность эффективного применения спектроскопии комбинационного рассеяния в сочетании с методами декомпозиции и машинного обучения не только для решения рассмотренной задачи диагностики деминерализации и воспалительных изменений тканей зубов. Универсальность разработанного алгоритмического подхода и физически обоснованная модель аппроксимации спектров позволяют рекомендовать его использование при анализе других патологических состояний, сопровождающихся структурными и биохимическими изменениями тканей.

Перспективным представляется расширение применения предложенной методики при использовании различных длин волн возбуждения, модернизации спектрального оборудования, а также интеграции более продвинутых алгоритмов обработки и классификации данных. Полученные результаты могут быть использованы при создании программных комплексов автоматизированной диагностики и в дальнейших научных исследованиях, направленных на развитие неинвазивных оптических методов медицинской диагностики.

### **Замечания по диссертационной работе**

1) В работе приведены количественные оценки качества классификации (ROC AUC, чувствительность, специфичность и др.). Указанные значения получены на конкретной экспериментальной выборке. В этой связи представляется целесообразным уточнить, насколько устойчивы приведённые показатели при изменении объема экспериментальной выборки, в частности при варьировании состава данных или использовании независимой тестовой выборки. Было бы полезно дополнительно обсудить возможный диапазон вариации метрик и статистическую устойчивость модели.

2) В диссертации спектральные линии в спектре комбинационного рассеяния аппроксимируются профилем Фойгта. Однако в тексте недостаточно подробно раскрыто физическое обоснование выбора именно данной формы контура. Представляется целесообразным более детально аргументировать,

почему профиль Фойгта является предпочтительным по сравнению, например, с чисто лоренцевым или гауссовым профилями.

3) В диссертации используются экспериментальные данные с неодинаковым объемом выборок по классам. Представляется целесообразным уточнить, применялись ли методы компенсации дисбаланса (undersampling, oversampling, взвешивание классов) и анализировалось ли влияние неодинаковости объема выборок по классам на значения метрик качества. В частности, как изменение доли положительного класса (например, при двукратном превышении числа наблюдений) может повлиять на чувствительность, специфичность и значение ROC AUC?

4) В работе проводится декомпозиция спектров по набору параметризованных функций. Вместе с тем остаётся открытым вопрос о единственности получаемого разложения. Представляется целесообразным уточнить, является ли используемый набор функций универсальным базисом, неизменным для всех спектров, либо параметры и структура модели могут варьироваться. Также требует обсуждения вопрос, возможно ли альтернативное разложение того же спектра с сопоставимым качеством аппроксимации и как обеспечивается физическая интерпретируемость и устойчивость найденных параметров.

5) В тексте диссертации недостаточно подробно описана процедура валидации, использованная при обучении моделей и расчёте метрик качества. Представляется необходимым уточнить:

- применялась ли кросс-валидация (и какого типа – k-fold, stratified и т.п.);
- каким образом разделялись обучающая и тестовая выборки;
- исключалось ли попадание коррелированных измерений одного образца в разные подвыборки.

Подробное описание методологии повысило бы воспроизводимость результатов.

Отмеченные замечания не снижают научной новизны и практической значимости результатов диссертационного исследования.

### **Заключение**

Диссертационная работа Фролова О. О. «Разработка способа анализа спектров комбинационного рассеяния для применения в стоматологии» является самостоятельной завершённой научно-квалификационной работой, выполненной на актуальную тему, обладающей научной новизной и практической значимостью. Результаты работы соискателя и выносимые на защиту положения в полной мере отражены в научных публикациях. Полученные соискателем результаты достоверны, выводы и рекомендации достаточно обоснованы. Автореферат соответствует тексту диссертации и отражает логику проведённого исследования, а также полученные результаты и выводы.

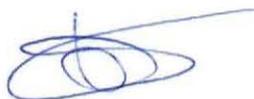
Название и содержание диссертации соответствует пунктам 14, 21 и 22 направлений исследования паспорта специальности 2.2.12. Приборы, системы и изделия медицинского назначения (технические науки).

Диссертационная работа удовлетворяет требованиям к кандидатским диссертациям, изложенным в п. 9–11, 13, 14 действующего «Положения о присуждении ученых степеней», а её автор, Фролов Олег Олегович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата технических наук.

Диссертация обсуждена на расширенном заседании лаборатории лазерного молекулярного имиджинга и машинного обучения Национального исследовательского Томского государственного университета, протокол № 5 от 05 февраля 2026 г.

Отзыв составил:

Заведующий лабораторией лазерного  
молекулярного имиджинга и машинного обучения  
Национального исследовательского  
Томского государственного университета,  
доктор физико-математических наук  
(01.04.05 – Оптика),  
профессор



Кистенев Юрий Владимирович  
Электронная почта: yuk@iao.ru  
Телефон: +7 (913) 828-67-20

16 февраля 2026 г.

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет»

Почтовый адрес: 634050, г. Томск, пр. Ленина, д. 36,

Телефон: (3822) 52-98-52

e-mail: rector@tsu.ru

сайт: www.tsu.ru