

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

о диссертации на соискание учёной степени доктора химических наук

Богомолова Андрея Юрьевича

на тему: «РАЗВИТИЕ МУЛЬТИСЕНСОРНОГО ПОДХОДА В
ОПТИЧЕСКОМ СПЕКТРАЛЬНОМ АНАЛИЗЕ»

по специальности 02.00.02 – Аналитическая химия

Последние годы характеризуются стремительным развитием мировой науки. Количество знаний, накопленных в мире, удваивается каждые 18 месяцев. Поэтому не удивительно, что ускоренными темпами развивается и аналитическая химия. Это обусловлено растущей востребованностью химического анализа и появлением таких новых технологических решений, которые значительно расширяют его возможности.

Наблюдается рост сложности и многообразия анализируемых объектов, повышается скорость проведения анализа. Теперь становится возможным проводить измерения без пробоотбора и даже без контакта с образцом – на производственной линии, в природной среде или в организме человека.

Одновременно увеличивается сложность и объем аналитических данных, что требует создания эффективных математических методов их обработки. Эта задача решается на основе хеометрики, которая в последние десятилетия изменила облик аналитической химии. Происходят серьезные методологические изменения, требующие развития новых научных подходов: от общих теоретических положений до разработки конкретных аналитических методик.

Отмеченные закономерности, в частности, характерны и для оптического спектрального анализа – одного из наиболее хорошо разработанных и широко применяемых методов аналитической

спектроскопии. Новым, недавно возникшим и перспективным направлением в этой области является разработка мультисенсорных систем, способных многократно повысить доступность анализа, его скорость и гибкость.

Диссертационная работа А.Ю. Богомолова нацелена на решение комплекса взаимосвязанных теоретических и практических задач развития *оптических мультисенсорных систем* (ОМС) как нового класса анализаторов и является, таким образом, весьма **актуальной**.

Диссертация состоит из пяти глав. Структура глав, разделов и выводов по главам хорошо продумана. Диссертация написана хорошим литературным языком, что облегчает понимание весьма сложных для восприятия разделов. Все иностранные термины снабжены, что важно, адекватным русскоязычным переводом, не всегда устоявшимся, особенно в хемометрике. Общий объем работы (307 страниц) близок к оптимальному с учетом большого объема фактического материала. Текст сопровождается достаточным числом качественных иллюстраций (78 рисунков и многие из них цветные) и обобщающих таблиц (24 таблицы). Заключение и выводы в точности отражают основное содержание работы.

По традиции, первая глава представляет собой литературный обзор. Он включает 301 источник и охватывает важнейшие аспекты разработки и практического применения ОМС, а также анализа данных (хемометрики), что значительно облегчает восприятие дальнейшего материала.

Вторая глава посвящена методологии разработки ОМС. Одним из наиболее важных положений главы 2 является систематическое введение и обоснование ОМС как нового класса *специализированных спектральных анализаторов низкой селективности* и следующая из этого необходимость получения наилучшей (или достаточной с точки зрения решаемой аналитической задачи) конфигурации устройства. Следует отметить, что

проблема *математической оптимизации каналов ОМС* решена в работе весьма изящно. Для этого использован генетический алгоритм, позволяющий вовлечь в разработку ОМС большое число значимых параметров, что дает существенный выигрыш в точности анализа (в ряде случаев она не уступает точности традиционной оптической спектроскопии). Предложена *многоуровневая проверка (валидация) моделей*, обеспечивающая, с учетом целей анализа, статистическую достоверность концентраций определяемых компонентов смеси.

Третья глава содержит результаты теоретического исследования, выполненного диссертантом в области планирования градуировочного эксперимента. Дается общая систематизация требований к многокомпонентному градуировочному эксперименту, на основании чего автор предлагает оригинальную общую схему *диагонального дизайна* для набора обучающих и проверочных образцов. Схема может быть использована при разработке ОМС, и ее эффективность показана на примерах, приведенных в 4-ой и 5-ой главах диссертации. Следует отметить, что вклад А.Ю. Богомоллова в общую теорию планирования эксперимента получил признание мирового аналитического сообщества, о чем свидетельствует его монография «1.15. Designing a Multi-Component Calibration Experiment: Basic Principles and Diagonal Approach», недавно опубликованная в серии «Comprehensive Chemometrics».

Четвертая глава посвящена разработке методологии использования ОМС в аналитическом контроле процессов. Центральным моментом в этой главе является предложенная автором методологическая концепция *траектории процесса* в аналитическом пространстве оптимальных переменных (с точки зрения ОМС – измерительных каналов). Приведенные примеры и обобщения убеждают в ее практической пользе для мониторинга, контроля, оптимизации и изучения (понимания)

разнообразных технологических процессов в аналитическом контроле производств.

Пятая глава содержит большое число практических примеров разработки и применения ОМС на базе методологических концепций, изложенных в диссертации. Предложенные ОМС апробированы в различных прикладных областях: анализе питательных компонентов молока, мониторинге технологических процессов в фарминдустрии и биотехнологии, экологическом мониторинге почв и медицинской диагностике.

Предложенные в работе А.Ю. Богомолова решения, такие как новый подход к разработке ОМС, оптимизация каналов ОМС и централизованное математическое обеспечение, систематизация требований к планированию многокомпонентной градуировки, диагональный дизайн, концепция траектории процесса составляют основу научного подхода к проектированию и созданию ОМС низкой селективности. Эти решения определяют **научную новизну** полученных результатов.

Некоторые положения диссертации (в частности, разработки в области планирования эксперимента) выходят за рамки рассмотрения оптических мультисенсорных систем и найдут применение в других областях исследования.

Практическая значимость работы состоит в создании ряда оптических мультисенсорных систем, обладающих такими свойствами, как встраиваемость, портативность и ценовая доступность. Быстрый алгоритм расчета каналов ОМС позволяет проводить глубокую оптимизацию большого числа параметров, повышая тем самым точность анализа в выбранном аналитическом приложении.

Использование онлайн-подхода для централизованной разработки ОМС и их моделей создает предпосылки для создания распределенных

аналитических систем с общим программным управлением. Эти особенности выгодно отличают ОМС от традиционных лабораторных спектрофотометров и расширяют круг сложных (с точки зрения состава и условий измерения) объектов химического анализа. По результатам исследования предложены усовершенствованные аналитические методики, обеспечивающие высокую пропускную способность анализа, а также заметное снижение погрешностей определения химических компонентов или обобщенных показателей сложных смесей, в том числе несколько методик экспресс-анализа.

Высокая степень **обоснованности** изложенных в работе научных положений, выводов и рекомендаций, а также их **достоверность** не вызывают сомнений. Постановка цели и задач диссертационной работы логически следует из библиографического обзора области исследований. Представленные результаты исследования опираются на обширные экспериментальные и расчетные данные, полученные современными инструментальными методами и компьютерными алгоритмами анализа данных с использованием сертифицированного программного обеспечения. Особое внимание в работе уделено методам валидации хемометрических моделей, получаемых в ходе разработки и использования ОМС.

Результаты работы прошли широкую **апробацию**. Они были доложены диссертантом на более, чем 40 отечественных и международных конференциях. Разработки автора используются в России и за рубежом. Полученные в диссертации результаты отражены в 32 статьях, опубликованных в ведущих международных журналах по аналитической химии и хемометрике, а также в главах книг и патентах на изобретения.

Автореферат достаточно полно отражает содержание диссертации.

По работе имеется ряд замечаний:

1. На мой взгляд, в литературном обзоре слишком много внимания уделено хемометрике. Следовало бы привести больше информации о действующих ОМС и их аналогах, включая результаты работы соответствующих методик, известных в литературе. Это могло бы помочь лучше понять, в чем состоят достижения автора.

2. Описание технических деталей ОМС, которое дается в главе 2, представляется мне слишком кратким, что может затруднить применение методологии, предложенной автором.

3. Автору следовало бы более четко отражать свои результаты в тексте отдельных глав. Например, в главе 2 не всегда понятно, являются ли высказываемые положения авторскими или отражают общепринятую практику.

4. Предложенная в диссертации методология создания ОМС предполагает использование большого числа различных параметров в зависимости от конкретной задачи. Так как учет всех параметров может оказаться затруднительным для специалиста, то мне представляется, что в этой ситуации могла бы помочь экспертная система, опирающаяся на соответствующую базу знаний. Об этом стоит подумать в будущем.

5. Предложенный автором русскоязычный перевод термина *стандартизация нормировкой вариации* (СНВ; англ. standard normal variate, SNV), обозначающего один из популярных методов предобработки данных, выглядит неуклюже. Возможно, более благозвучным был бы такой вариант перевода - *стандартные нормированные значения случайных величин*.

6. В диссертации для обозначения ближней области инфракрасного спектра используется сокращение БИК, а полный инфракрасный спектр

обозначается как ИК. Так как БИК является частью ИК, то использование этих сокращений представляется неудачным с точки зрения логики.

7. В диссертации использовано более 60 сокращений. Хотя в конце диссертации дается их полный список, но обилие сокращений несколько затрудняет чтение работы.

8. На стр. 76 в пункте а) трудно понять, как выставляется число интервалов, так как при редактировании диссертации автор не заметил потери части предложения.

9. На стр. 76 рассматриваются четыре вида возможных ограничений, налагаемых для ускорения расчета. Однако автор не указывает, могут ли они быть наложены одновременно и к чему это приведет.

10. На стр. 232 говорится о модели полносpekтрального «золотого стандарта». Автор пишет: «Достигнутую в этом методе точность прогноза можно считать абсолютной». Непонятно, что автор имеет в виду, говоря об абсолютной точности.

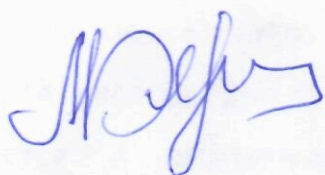
Вместе с тем, указанные замечания не умаляют значимости диссертационного исследования.

Представленная А.Ю. Богомоловым диссертационная работа является объемным, целостным и тщательно проработанным научным трудом, вносящим заметный вклад в развитие российской науки, и полностью соответствует требованиям пп. 2.1-2.5 «Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова», предъявляемым к докторским диссертациям. Работа оформлена, согласно приложениям № 5, 6 «Положения о диссертационном совете Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова». Содержание диссертации соответствует паспорту специальности 02.00.02 – Аналитическая химия.

Таким образом соискатель Богомолов Андрей Юрьевич заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 02.00.02 – Аналитическая химия.

Официальный оппонент:

Доктор химических наук, кандидат физико-математических наук, профессор, ведущий специалист по разработке программного обеспечения, ООО «Эй Си Ди» (ACD/ Labs Ltd.)



Эляшберг Михаил Евхононович

« 13 » ноября 2020 г.

Контактные данные:

тел.: 7(910)4032783, e-mail: mikhail.elyashberg@gmail.com

Специальность, по которой официальным оппонентом защищена диссертация:

Доктор химических наук

02.00.02 – Аналитическая химия

Кандидат физико-математических наук

01.044 – Оптика

Адрес места работы:

117513, г. Москва, ул. Академика Бакулева, д. 6, стр. 1

ООО «Эй Си Ди» (ACD/Labs Ltd.)

Тел.: +7 (495) 438-21-53 ; e-mail: elyas@acd labs.ru

заявитель

Эляшберг Михаил Евхононович 



Российская Федерация

Город Москва

Шестнадцатого ноября две тысячи двадцатого года

Я, Топольцев Антон Владимирович, временно исполняющий обязанности нотариуса города Москвы Топольцевой Наталии Викторовны, свидетельствую подлинность подписи Эляшберг Михаила Евхоновича.

Подпись сделана в моем присутствии.

Личность подписавшего документ установлена.

Зарегистрировано в реестре: № 77/566-н/77-2020-8-222.

Взыскано государственной пошлины (по тарифу): 100 руб. 00 коп.

Уплачено за оказание услуг правового и технического характера: 1000 руб. 00 коп.

А.В.Топольцев



Прошнуровано, пронумеровано и скреплено печатью 8 (восемь) листов.

А.В.Топольцев