

Заключение диссертационного совета МГУ.02.05
по диссертации на соискание ученой степени доктора химических наук

Решение диссертационного совета от «02» декабря 2020 г. №7

О присуждении **Богомолу Андрею Юрьевичу**, гражданину Российской Федерации, ученой степени доктора химических наук.

Диссертация «**Развитие мультисенсорного подхода в оптическом спектральном анализе**» по специальности **02.00.02 – Аналитическая химия** принята к защите диссертационным советом 16 сентября 2020 года, протокол № 2.

Соискатель **Богомолв Андрей Юрьевич** 1965 года рождения, в 1988 году окончил Химический факультет ВГБОУ ВО «Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова» (МГУ). В 1993 г. Богомолв А.Ю. защитил на химическом факультете МГУ кандидатскую диссертацию по специальности 02.00.15 – Кинетика и катализ (хим. науки) в совете К-053.05.58 при Химическом факультете МГУ.

В период с 2011 по 2014 г. Богомолв А.Ю. обучался в докторантуре ФГБОУ ВО «Самарский государственный технический университет» (СамГТУ). С 2014 г. зачислен на должность старшего научного сотрудника лаборатории «Многомерный анализ и глобальное моделирование» СамГТУ, где и работает по настоящее время.

Диссертация выполнена в ФГБОУ ВО «Самарский государственный технический университет».

Научный консультант:

Кирсанов Дмитрий Олегович – доктор химических наук, ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет», профессор кафедры аналитической химии.

Официальные оппоненты:

Эляшберг Михаил Евхонович – доктор химических наук, кандидат физико-математических наук, профессор, ведущий специалист по разработке программного обеспечения, ООО «Эй Си Ди» (ACD/ Labs);

Кучменко Татьяна Анатольевна – доктор химических наук, профессор, ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет инженерных технологий», заведующий кафедрой физической и аналитической химии;

Беклемишев Михаил Константинович – доктор химических наук, в.н.с. химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова.

дали **положительные отзывы** на диссертацию.

Соискатель имеет 42 опубликованных работы по теме диссертации, из них 32 статьи в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности:

1. Surkova A., **Bogomolov A.**, Legin A., Kirsanov D. Calibration transfer for LED-based optical multisensor systems. // ACS Sensors. 2020. V. 5. P. 2587–2595. (Импакт-фактор 2019 7.372)
2. Galyanin V., Belikova V., Belikov V., **Bogomolov A.** Emission band width approximation of light-emitting diodes in the region 350–2100 nm. // Sensors and Actuators B: Chemical. 2017. V. 252. P. 773–776. (Импакт-фактор 2019 7.290)
3. **Bogomolov A.**, Heßling M., Wenzel U., Princz S., Hellmuth T., Barraza Bernal M.J., Sakharova T., Usenov I., Artyushenko V., Meyer H. Development and testing of mid-infrared sensors for in-line process monitoring in biotechnology. // Sensors and Actuators B: Chemical. 2015. V. 221. P. 1601–1610. (Импакт-фактор 2019 7.290)
4. Galyanin V., Melenteva A., **Bogomolov A.** Selecting optimal wavelength intervals for an optical sensor: A case study of milk fat and total protein analysis in the region 400–1100 nm. // Sensors and Actuators B: Chemical. 2015. V. 218. P.97–104. (Импакт-фактор 2019 7.290)
5. Melenteva A., Galyanin V., Savenkova E., **Bogomolov A.** Building global models for fat and total protein content in raw milk based on historical spectroscopic data in the visible and short-wave near infrared range. // Food Chemistry. 2016. V. 203. P. 190–198. (Импакт-фактор 2019 6.810)
6. **Bogomolov A.**, Dietrich S., Boldrini B., Kessler R.W. Quantitative determination of fat and total protein in milk based on visible light scatter. // Food Chemistry. 2012. V. 134. P. 412–418. (Импакт-фактор 2019 6.810)
7. Ermakov V.V., **Bogomolov A.**, Bykov D.E. Oil sludge depository assessment using multivariate data analysis. // Journal of Environmental Management. 2012. V. 105. P. 144–151. (Импакт-фактор 2019 6.243)
8. **Bogomolov A.** Diagonal designs for a multi-component calibration experiment. // Analytica Chimica Acta. 2017. V. 951. P. 46–57. (Импакт-фактор 2019 6.237)
9. Bogomolov A., McBrien M. Mutual peak matching in a series of HPLC/DAD mixture analyses. // Analytica Chimica Acta. 2003. V. 490. P. 41–58. (Импакт-фактор 2019 6.237)
10. **Bogomolov A.**, Belikova V., Galyanin V., Melenteva A., Meyer H. Reference-free spectroscopic determination of fat and protein in milk in the visible and near infrared region below 1000 nm using spatially resolved diffuse reflectance fiber probe. // Talanta. 2017. V. 167. P. 563–572. (Импакт-фактор 2019 5.597)
11. Kucheryavskiy S.V., Melenteva A., **Bogomolov A.** Determination of fat and total protein content in milk using conventional digital imaging. // Talanta. 2014. V. 121. P. 144–152. (Импакт-

фактор 2019 5.597)

12. Karpushkin E., **Bogomolov A.** Morphology assessment of poly(2-hydroxyethyl methacrylate) hydrogels using multivariate analysis of viscoelastic and swelling properties. // *Polymer*. 2015. V. 58. P. 222–229. (Импакт-фактор 2019 4.382)
13. Pomerantsev A.L., Rodionova O.Ye., Melichar M., Wigmore A.J., **Bogomolov A.** In-line prediction of drug release profiles for pH-sensitive coated pellets. // *The Analyst*. 2011. V. 136. P. 4830–4838. (Импакт-фактор 2019 4.079)
14. **Bogomolov A.**, Zabarylo U., Kirsanov D., Belikova V., Ageev V., Usenov I., Galyanin V., Minet O., Sakharova T., Danielyan G., Feliksberger E., Artyushenko V. Development and testing of an LED-based near-infrared sensor for human kidney tumor diagnostics. // *Sensors*. 2017. V. 17 (8). art. no. 1914. (Импакт-фактор 2019 4.019)
15. **Bogomolov A.**, Belikova V., Zabarylo U. J., Bibikova O., Usenov I., Sakharova T., Krause H., Minet O., Feliksberger E., Artyushenko V. Synergy effect of combining fluorescence and mid infrared fiber spectroscopy for kidney tumor diagnostics. // *Sensors*. 2017. V. 17 (11). art. no. 2548. (Импакт-фактор 2019 4.019)
16. Surkova A., Belikova V., Kirsanov D., Legin A., **Bogomolov A.** Towards an optical multisensor system for dairy: Global calibration for fat analysis in homogenized milk. // *Microchemical Journal*. 2019. V. 149. art. no. 104012. (Импакт-фактор 2019 3.801)
17. **Bogomolov A.**, Mannhardt J., Heinzerling O. Accuracy improvement of in-line near-infrared spectroscopic moisture monitoring in a fluidized bed drying process. // *Frontiers in Chemistry*. 2018. V. 6. art. no. 388. (Импакт-фактор 2019 3.532)
18. **Bogomolov A.**, Melenteva A. Scatter-based quantitative spectroscopic analysis of milk fat and total protein in the region 400-1100 nm in the presence of fat globule size variability. // *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*. 2013. V. 126. P. 129–139. (Импакт-фактор 2019 3.374)
19. **Bogomolov A.** Multivariate process trajectories: capture, resolution and analysis. // *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*. 2011. V. 108. P. 49–63. (Импакт-фактор 2019 3.374)
20. Karpushkin E., **Bogomolov A.**, Boruta M. New system for computer-aided infrared and Raman spectrum interpretation. // *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*. 2007. V. 88. P. 107–117. (Импакт-фактор 2019 3.374)
21. **Bogomolov A.**, Hachey M.R.J. Application of SIMPLISMA purity function for variable selection in multivariate regression analysis: a case study of protein secondary structure determination from infrared spectra. // *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*. 2007. V. 88. P. 132–142. (Импакт-фактор 2019 3.374)

22. Ehlen L., Zabarylo U.J., Speichinger F., **Bogomolov A.**, Belikova V., Bibikova O., Artyushenko V., Minet O., Beyer K., Kreis M.E., Kamphues C. Synergy of fluorescence and near-infrared spectroscopy in detection of colorectal cancer. // Journal of Surgical Research. 2019. V. 242. P. 349–356. (Импакт-фактор 2019 1.955)
23. **Bogomolov A.**, Melenteva A. Tenth Winter Symposium on Chemometrics (WSC10). // Journal of Chemometrics. 2017. V. 31 (8). art. no. e2906. (Импакт-фактор 2019 1.656)
24. Guryanova A., Ermakov V., Galyanin V., Artyushenko V., Sakharova T., Usenov I., Bykov D.E., **Bogomolov A.** Quantitative analysis of total hydrocarbons and water in oil-contaminated soils with attenuated total reflection infrared spectroscopy. // Journal of Chemometrics. 2017. V. 31. art. no. e2826. (Импакт-фактор 2019 1.656)
25. **Bogomolov A.**, Grasser T., Hessling M. In-line monitoring of *Saccharomices cerevisiae* fermentation with a fluorescence probe – new approaches to data collection and analysis. // Journal of Chemometrics. 2011. V. 25. P. 389–399. (Импакт-фактор 2019 1.656)
26. Kucheryavski S., Esbensen K.H., **Bogomolov A.** Monitoring of pellet coating process with image analysis – a feasibility study. // Journal of Chemometrics. 2010. V. 24. P. 472–480. (Импакт-фактор 2019 1.656)
27. **Bogomolov A.**, Engler M., Melichar M., Wigmore A. In-line analysis of a fluid bed pellet coating process using a combination of near infrared and Raman spectroscopy. // Journal of Chemometrics. 2010. V. 24. P. 544–557. (Импакт-фактор 2019 1.656)
28. **Bogomolov A.**, Melenteva A., Dahm D.J. Fat globule size effect on visible and short-wave near infrared spectra of milk. // Journal of Near Infrared Spectroscopy. 2013. V. 21. P. 435–440. (Импакт-фактор 2019 1.365)
29. Engler M., **Bogomolov A.**, Mannhardt J. Die Lighthouse-Probe, eine neuartige Sonde für die Prozessanalytik. // Chemie-Ingenieur-Technik. 2009. V. 81, № 8. P. 1114–1115. (Импакт-фактор 2019 1.224)
30. **Bogomolov A.**, Ageev V., Zabarylo U., Usenov I., Schulte F., Kirsanov D., Belikova V., Minet O., Feliksberger E., Meshkovsky I., Artyushenko V. LED-based near infrared sensor for cancer diagnostics. // Progress in Biomedical Optics and Imaging – Proceedings of SPIE. 2016. V. 9715. (Импакт-фактор 2019 0.633)
31. Artyushenko V., Schulte F., Zabarylo U., Berlien H.-P., Usenov I., Saeb Gilani T., Eichler H., Pieszczyk Ł., **Bogomolov A.**, Krause H., Minet O. Spectral fiber sensors for cancer diagnostics in vitro. // Clinical and Biomedical Spectroscopy and Imaging IV – Proceedings of SPIE. 2015. V. 9537. art. no. 953720. (Импакт-фактор 2019 0.633)
32. Гурьянова А.О., Ермаков В.В., Максина Е.В., Раменская Е.В., Сахарова Т.В., Быков Д.Е., Артюшенко В.Г., **Богомолов А.Ю.** Определение массовой доли нефтепродуктов в

почвогрунте по спектрам нарушенного полного внутреннего отражения. // Экология и промышленность России. 2013. Т. 12. С. 24–28. (Импакт-фактор 2019 0.509)

На диссертацию и автореферат поступило 12 дополнительных отзывов, все положительные.

Выбор официальных оппонентов обосновывался их высокой компетентностью в области аналитической химии, в том числе в оптическом спектральном анализе, разработке оптических мультисенсорных систем (ОМС), аналитическом контроле технологических процессов (АКТП), анализе сложных экспериментальных данных и наличием публикаций по теме диссертации соискателя.

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертация на соискание ученой степени доктора химических наук является научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований содержится решение задач, имеющих значение для развития аналитической химии:

Формализован подход к созданию ОМС как специализированных анализаторов низкой селективности, **сформулированы** основные этапы разработки и решаемые задачи, **предложены** отдельные решения, облегчающие разработку и повышающие точность анализа. Как альтернатива общепринятому экспертному подходу к конфигурации ОМС **предложена** математическая оптимизация каналов системы для конкретного практического приложения на предварительно полученных полноспектральных данных спланированного эксперимента. **Разработан** ускоренный оптимизационный алгоритм, позволяющий повысить точность результирующего анализатора путём включения в расчёт большего числа параметров и имеющий независимую ценность как обобщённый интервальный отбор переменных в хемометрике. Разработан метод многоуровневой валидации для более достоверного сравнения анализаторов и их прогностических моделей с использованием небольшого числа тестовых образцов.

Разработан централизованный подход к математическому обеспечению полного цикла создания ОМС – от оптимизации каналов до построения рабочих моделей и их практического использования. Подход **реализован** «в облаке» в комплексе программ «TPT cloud» для хранения и анализа многомерных данных и хемометрических моделей с возможностью их глобального использования распределёнными ОМС, а также перманентного обучения на новых данных, поставляемых работающими анализаторами.

Систематизированы базовые требования к набору образцов для построения с минимальными затратами точных градуировочных моделей для определения нескольких концентраций (или обобщённых показателей состава) из одного аналитического измерения,

спектрального или ОМС. С учётом сформулированных требований **разработано** новое семейство схем, получившее название диагонального дизайна, имеющего преимущества перед известными в теории планирования эксперимента подходами, такие как наличие встроенных проверочных образцов, простота и интерпретируемость результатов. Эффективность диагонального дизайна **доказана** на примерах разработки ОМС для определения питательной ценности молока, для мониторинга процесса ферментации, а также ИК-ОМС и методики определения общих углеводов нефти в почвах с различной влажностью.

Предложена и систематически разработана концепция траектории в пространстве аналитических переменных – методологический инструмент, упрощающий решение задач аналитического контроля и оптимизации технологических процессов. **Сформулированы** основные свойства траектории процесса и даны практические рекомендации по её использованию в АКТП для непрерывного сбора спектральных данных, их анализа, а также для разработки онлайн-методов определения индивидуальных компонентов и обобщённых показателей качества производимой продукции, в том числе с использованием мультисенсорного подхода.

Разработан ряд оптических мультисенсорных систем с улучшенными, по сравнению с известными аналогами, метрологическими характеристиками для количественного и качественного полевого, экспресс- и онлайн-анализа, в том числе при определении различных обобщённых показателей химического состава. **Разработана** ОМС для экспресс-анализа молока на содержание жира и общего белка, обеспечивающая сравнимую с существующими полноспектральными ИК- и БИК-методами точность. **Разработаны** подходы к созданию и отдельные прототипы ИК-ОМС для мониторинга состава среды (глюкоза, фруктоза, этанол) в процессах ферментации в биотехнологическом производстве, а также определения суммарного содержания углеводов нефти и нефтепродуктов в целях экомониторинга почв. **Разработаны** прототипы для смежных с химическим анализом сфер биомедицинской диагностики (спектрального распознавания границы опухоли при оперативном лечении рака почки) и онлайн-контроля качества материалов (спектральный анализ процессов производства твёрдых фармацевтических форм для мониторинга содержания воды, толщины защитного покрытия и кинетики высвобождения лекарства).

Диссертация представляет собой самостоятельное законченное исследование, обладающее внутренним единством. Положения, выносимые на защиту, содержат новые научные результаты и свидетельствуют о личном вкладе автора в науку:

1. Методология создания специализированных ОМС для химического анализа различных объектов сложного состава, в особенности при полевого, экспресс- и онлайн-анализе, позволяет проводить специализацию оптических каналов мультисенсорной системы

(определение их необходимого числа и свойств) под конкретное практическое приложение на полных спектрах спланированного набора образцов при помощи улучшенного оптимизационного алгоритма.

2. Новый централизованный подход, реализованный «в облаке» в разработанном комплексе программ, предоставляет математическое обеспечение полного цикла создания и использования ОМС, включая оптимизацию каналов разрабатываемых систем, а также построение и использование прогностических моделей.
3. Диагональный дизайн представляет собой новый подход к планированию многокомпонентного градуировочного эксперимента, учитывающий особенности данных спектральных методов и ОМС, применимый к определению питательной ценности молока, определению основных компонентов ферментационной среды и к экологическому мониторингу почв.
4. Концепция траектории процесса в АКТП систематизирует подход к онлайн-анализу технологических процессов производств, а именно сбору спектральных и ОМС-данных, построению прогностических моделей и использованию результатов моделирования для принятия управляющих решений в ходе процесса.
5. Разработанные рекомендации по созданию методик на основе ОМС обеспечивают улучшенные аналитические характеристики при решении ряда практических задач: анализа молока на содержание жира и белка, онлайн-мониторинга процесса ферментации дрожжей, онлайн-мониторинга различных процессов производства твёрдых фармацевтических форм, выявления границ злокачественной опухоли и определения нефтепродуктов в почвах.

На заседании **2 декабря 2020 года** диссертационный совет принял решение присудить **Богомолу А.Ю.** ученую степень доктора химических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 15 человек, из них 14 докторов наук по специальности 02.00.02, участвовавших в заседании, из 18 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за - 15, против - 0, недействительных бюллетеней - 0.

Председатель заседания

д.х.н., профессор

Ученый секретарь

диссертационного совета

к.х.н.

03.12. 2020 года

Цизин Г.И.



Ананьева И.А.