

**Отзыв на автореферат диссертации Рукосуевой Елизаветы Алексеевны
«Классификация объектов анализа по данным флуориметрии с
использованием добавок флуорофоров («флуоресцентный глаз»)), представленной
на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.02 –
аналитическая химия.**

Направления аналитической химии, посвященные разработке простых методов экспресс-анализа различных объектов без детализации их химического состава, в последние годы развиваются очень активно. Это связано как с бурным развитием математических методов машинного обучения, которые сделали возможным быструю обработку сложных неразрешенных аналитических сигналов, так и с быстрой эволюцией различных устройств микроэлектроники, которые теперь позволяют проводить достаточно точные аналитические операции (например, регистрацию окраски образца) с помощью бытовых устройств – например, мобильных телефонов со встроенными фотокамерами. Исследования, посвященные различным вариантам реализации таких подходов, особенно популярны в силу широкого круга возможных приложений, предельной простоты разрабатываемых методов и целого ряда других преимуществ. В этом плане актуальность работы Е.А. Рукосуевой, посвященной развитию таких подходов в области флуориметрии, сомнений не вызывает.

Научная новизна разработанных автором подходов заключается в предложенных к использованию более доступных флуорофорах, включая квантовые точки и некоторые впервые полученные автором работы соединения; в установлении эффекта усиления эмиссии флуорофоров при их мобилизации на наночастицах; в предложенной концепции «виртуального смешивания» флуорофоров для избегания эффекта взаимного тушения эмиссии при смешивании нескольких флуорофоров одновременно. Также хочется отметить переход от регистрации спектров флуоресценции к цифровой фотографии – такой подход существенным образом увеличивает доступность анализа.

В работе обоснована возможность применения разработанных подходов для классификации некоторых напитков и пищевых продуктов, что обуславливает практическую значимость диссертационного исследования.

После ознакомления с авторефератом диссертации возникли следующие вопросы и замечания:

1. На мой взгляд, четвертая цель исследования, сформулированная автором (предложить удобный способ оценки качества дискриминации образцов при их неполном разделении на графиках счетов) несколько надуманна, такие метрики уже давно внедрены и используются в повседневной хемометрической практике. На основе МГК в 70-е годы 20-го века предложен метод классификации SIMCA, в котором можно точно оценить качество распознавания классов.
2. Способность к дискриминации образцов принято оценивать на независимой тестовой выборке, доверительные эллипсы, которым автор работы уделяет столь много внимания,

оценивают лишь точность моделирования, но не дают информации о том, как система будет себя вести с новыми образцами. Использование повторных измерений в одном и том же образце в качестве независимых образцов при моделировании не дает возможности адекватно описать моделируемый класс, а лишь предоставляет информацию и воспроизводимости метода.

3. Из автореферата непонятна мотивация для выбора модельных лекарственных препаратов. Существует ли на практике аналитическая задача их совместного определения?

4. При обработке результатов измерений автор работы уделяет много внимания графикам счетов МГК, но никак не упоминает графики нагрузок, которые являются неотъемлемой частью каждой модели и способны дать важную информацию о вкладе в модель отдельных переменных, что может послужить для дальнейшего развития метода.

Эти замечания не влияют на общее положительное впечатление от автореферата.

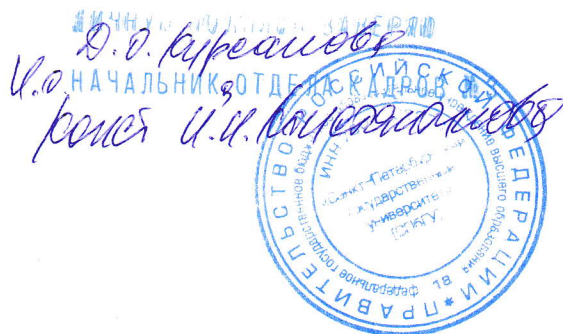
По актуальности, научной, теоретической и практической значимости, новизне и объему полученных результатов представленная диссертационная работа полностью соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, установленным в пунктах 2.1-2.5 «Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова», а Рукосуева Елизавета Алексеевна заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.02 – аналитическая химия.

Кирсанов Дмитрий Олегович
доктор химических наук (специальность 02.00.02)
профессор кафедры аналитической химии

Института химии ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет»
198504, Санкт-Петербург, Петергоф, Университетский проспект, дом 26. Институт химии
СПбГУ, ком. 3142.

тел. +7 921 333 12 46

e-mail: d.kirsanov@gmail.com



Данный документ размещен
в открытом доступе
на сайте СПбГУ по адресу
<http://www.spbu.ru/science/expert.htm>

ДОКУМЕНТ
ПОДГОТОВЛЕН
ПО ЛИЧНОЙ
ИНИЦИАТИВЕ