

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Панчука Виталия Владимировича на тему «РАЗВИТИЕ ЯДЕРНОЙ ГАММА-РЕЗОНАНСНОЙ И РЕНТГЕНОВСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ НА ОСНОВЕ ХЕМОМЕТРИЧЕСКИХ ПОДХОДОВ», представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.2 – Приборы и методы экспериментальной физики

В диссертационной работе Панчука В.В. исследуются преимущества и ограничения хемометрических методов обработки данных в рентгенофлуоресцентной и ядерной гамма-резонансной спектроскопии. Изучены различные возможности хемометрики для повышения качества получаемой этими методами аналитической информации. Актуальность работы не вызывает сомнений, так как данные методы анализа широко применяются для элементного, фазового и вещественного анализа, а также для изучения структурных и магнитных свойств различных объектов.

Полученные в работе результаты демонстрируют преимущества методов многомерной обработки данных над преобладающими в настоящее время традиционными подходами и обладают бесспорной новизной и научной значимостью. Практическую значимость работы определяют предложенные в работе способы количественного и качественного анализа, такие как, например, серийная обработка мессбауэровских спектров с использованием многомерного разрешения кривых или определение содержания примесных элементов методом ЭД-РФА с последующей обработкой данных методом ПЛС-регрессии. Отдельный интерес вызывают предложенные способы переноса данных между приборами, основанными на различных физических принципах и фильтрации шумов на основе ПЛС моделей, которые найдут применение не только в ядерной гамма-резонансной и рентгеновской спектроскопии, но и в других спектральных методах.

Автореферат диссертации отражает ее суть и свидетельствует об актуальности, новизне, научной и практической значимости работы, которые не вызывают сомнений. Работа прошла апробацию на многих национальных и международных конференциях, результаты опубликованы в 19 статьях в реферируемых журналах.

1. Не вполне согласен с формулировкой, что «методы хемометрики – это методы машинного обучения в контексте химических исследований», как это, например, сказано на стр. 3 автореферата. Эти два направления в анализе данных развивались независимо в различных областях, имеют собственный инструментарий, методологию и объекты анализа. И несмотря на некоторое сближение этих направлений, связанное с появлением «больших данных» в химии, не следует записывать хемометрику в положение принадлежности.

2. Известно, что результатом применения метода многомерного разрешения кривых, описанного в главе 3, является область решений, а не единственное решение (обратная задача). Этот эффект известен как «вращательная неопределенность» (*rotational ambiguity*) и представляет собой одно из главных ограничений метода.

Поскольку в работе производится оценка возможностей метода в отношении анализа данных мессбауэровской спектроскопии, было бы важно оценить область неопределенности (есть такие методы) для данного типа данных и для использованных граничных условий (*constraints*). На стр. 16 автореферата высказано разумное предложение – разработать специальные «мессбауровские» граничные условия, учитывающие особенности данных. Жаль, что это не было сделано – это украсило бы работу, особенно вместе с оценкой снижения неопределенности решения.

Диссертационная работа Панчука В.В. «Развитие ядерной гамма-резонансной и рентгеновской спектроскопии на основе хемометрических подходов» отвечает требованиям пункта 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», а ее автор заслуживает присуждения искомой ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.2 – приборы и методы экспериментальной физики.

И.о. заведующего кафедрой "Аналитическая и физическая химия"  
ФГБОУ ВО "Самарский государственный технический университет"  
доктор химических наук (02.00.02)

Андрей Юрьевич Богомолов

«17» февраля 2021 г.

Почтовый адрес: 443100, г. Самара, ул. Молодогвардейская 244

Телефон: (846) 332-22-51

E-mail: physchem@samgtu.ru

Подпись д.х.н. Богомолова А.Ю. заверяю

