

ОТЗЫВ

**официального оппонента
на диссертационную работу Бочкарева Андрея Владимировича на тему:**

"РАЗРАБОТКА МЕТОДОВ ОБРАБОТКИ СИГНАЛОВ В ИНФОРМАЦИОННО-ИЗМЕРИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМАХ ХРОМАТОГРАФИЧЕСКОГО АНАЛИЗА",

представленную на соискание учёной степени кандидата технических наук по специальности 2.2.11. Информационно-измерительные и управляющие системы.

Актуальность диссертационной работы

Возрастающие требования к качеству исходных материалов и готовой продукции, модернизация и разработка новых технологических процессов и связанные с этим задачи управления этими процессами, ужесточение требований к охране окружающей среды вызывают необходимость повышения качества аналитических измерений, и как следствие, неизбежно вызывает потребность в постоянном совершенствовании высокоэффективных методов, средств и систем аналитического контроля. При анализе природных и техногенных объектов используется множество разнообразных методов исследования, однако наиболее распространённым является хроматография, поскольку имеет преимущество перед существующими на сегодняшний день методами в эффективности, селективности, универсальности и в широте применений.

Из всех имеющихся хроматографических методов лидером является газохроматографический метод, позволяющий использовать однотипную аппаратуру для анализа различных веществ и проведения физико-химических исследований. В то же время на современном этапе развития для успешного решения разнообразных научных и практических задач, связанных с применением газовой хроматографии использование разработанных ранее методик и предлагаемых для их реализации способов и устройств является недостаточным. Наличие помех, наложенных на хроматографический сигнал, дрейфующей базовой линии, совмещённых хроматографических пиков вызывает появление существенных погрешностей определения основных информационных характеристик хроматографического анализа. Для расширения возможностей газовой хроматографии, повышения точности определения параметров анализа все шире используются различные методы обработки сигнала, формируемого хроматографическим детектором. В связи с этим тема диссертации Бочкарева А.В., посвящённая разработке новых методов обработки хроматографической информации, а также реализуемой ею системы, является актуальной.

Общая характеристика работы

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения общим объемом 159 страниц печатного текста и 5 приложений на 25 страницах. Список литературы насчитывает

147 наименований.

Во введении кратко изложена актуальность темы проводимых исследований, сформулированы цели и задачи исследований.

В первой главе проведен обзор основных режимов работы хроматографического анализатора, выполнен анализ существующих методов обработки хроматографического сигнала, определены основные факторы, вызывающие появление погрешностей определения информационных характеристик хроматографического анализа, описаны способы снижения таких погрешностей.

Предложено использовать предварительную обработку хроматографического сигнала с использованием аппроксимационных методов с целью определения информационных параметров хроматографического анализа в условиях аддитивных помех, наличия дрейфующей базовой линии, плохого разделения хроматографических пиков. При наличии таких ситуаций использование традиционных методов обработки сигнала приводит к появлению существенных погрешностей определения информационных параметров – времен выхода хроматографических пиков и концентраций компонентов в анализируемых смесях.

Для решения данной задачи предложено использовать методы двух групп: - методы, преобразующие сигнал к виду, в котором ослаблены или устранены воздействия аппаратной функции, повышено разрешение хроматограммы; - методы, определяющие информационных параметров с учетом искажений от аппаратной функции.

К первой группе относятся деконволюция в частотной и временной области, а также применение нейросетевых технологий; ко второй – метод моментов, аппроксимацию хроматографических пика, вейвлет-аппроксимацию.

Во второй главе анализируется возможность использования аппроксимационного подхода для обработки хроматографических сигналов на основе базисных функций.

На основании анализа различных аппроксимационных методов, используемых при обработке хроматографического сигнала, выбран метод аппроксимации в базисе функций Чебышева-Эрмита.

Показано, что с целью преодоления трудностей при аппроксимации сигналов большой длительности, что является характерным для хроматографического сигнала, целесообразно формировать новый базис таких функций с использованием масштабирования и сдвига, с последующим восстановлением нормировки базиса.

Предложенный автором метод позволяет снизить погрешность аппроксимации сложных хроматографических сигналов, представляющих собой ряд несимметричных совмещенных пиков.

Для повышения точности аппроксимации сигналов, содержащих большое число хроматографических пиков, автором разработан эвристический алгоритм деления сигнала на фрагменты.

Для определения границ фрагментов предложено проводить анализ экстремумов сглаженной первой и второй производной сигнала, которая вычисляется численно с применением его цифровой фильтрации.

Описанная задача также решается с использованием аппроксимации производных в базисе функций Чебышева-Эрмита, что позволило значительно снизить влияние аддитивных помех, наложенных на хроматографический сигнал.

Предложенный в работе метод восстановления сглаженного вейвлет-преобразования сигналов, аппроксимированных в базисе функций Чебышева-Эрмита при использовании вейвлет Гаусса, позволяет аппроксимировать вейвлет-преобразование сигналов без необходимости предварительного подавления в нем помехи, что повышает оперативность обработки сигналов, формируемых хроматографическим анализатором.

В третьей главе исследуются новые разработанные методы коррекции базовой линии хроматографического сигнала, а также метод разделения совмещенных хроматографических пиков. Метод коррекции базируется на логическом выборе точек, принадлежащих базовой линии, путем анализа экстремумов производных сигнала с использованием предварительного цифрового фильтра скользящего среднего, что позволило наиболее эффективно аппроксимировать базовую линию с последующим устранением соответствующей погрешности.

Метод разделения пиков основан на предварительном определении математической модели хроматографического пика. Анализ различных существующих моделей пика позволил автору предложить оригинальную модель комбинированной Гауссианы, а также модель Грамма-Шарлье, наиболее точно аппроксимирующей реальные хроматографические пики. Для решения задачи разделения была выбрана вейвлет - аппроксимация, представляющая вычисление множественного вейвлет-преобразования сигнала и дальнейшее итерационное уточнение параметров хроматографического пика. Такая аппроксимация позволяет избежать необходимости регуляризации, а также повышения погрешности из-за неточного совпадения модельной и реальной аппаратной функции.

На основании анализа различных микропроцессорных вычислительных средств, а также аналого-цифровых средств преобразования сигнала, автор разработал новую микропроцессорную структуру, реализующую предложенные в работе методы предварительной обработки хроматографического сигнала, а также управляющую работой отдельных блоков хроматографа.

Такая структура позволяет повысить скорость и снизить погрешность определения информационных характеристик хроматографического анализа по сравнению с классическими структурами обработки хроматографической информации.

В четвертой главе производится анализ методических и инструментальных погрешностей разработанной системы, приводятся результаты ее метрологического анализа и экспериментального исследования, описывается методика ее поверки.

Поскольку основной информационный параметр анализа - площадь хроматографического пика вычисляется по разработанному алгоритму через параметры математических моделей пиков, для любого результата определения площади можно сопоставить методическую относительную погрешность косвенных измерений. При использовании разработанного метода сигнал предварительно сглаживается, после чего определяется его вейвлет-преобразование, затем применяется метод восстановления хроматографического пика по одной из двух моделей. Оценена относительная погрешность каждой из упомянутых операций.

Проведено сравнение теоретических погрешностей используемого метода аппроксимации сглаженного сигнала по коэффициентам базиса функций Чебышева-Эрмита с сигналом, сглаженным по наиболее широко распространенному методу скользящего среднего.

Такое же сравнение выполнено по отношению определения первой и второй производной хроматографического сигнала, экстремумы которых используются при определении границ хроматографических пиков. Сравнение показало преимущества используемых методов.

В этом же разделе выполнено экспериментальное исследование погрешностей разработанного метода разделения совмещенных пиков на базе их вейвлет-аппроксимации. Определена область применения разработанного метода при различных конфигурациях пиков. Показано, что для большинства практически наблюдаемых конфигураций пиков погрешность определения их площадей не превышает 0,4%, что значительно ниже, чем при применении классических методов обработки хроматографических сигналов.

Заключение по диссертации достаточно полно отражает основные результаты работы.

Диссертация написана в форме, позволяющей получить полное и достаточно подробное представление о материалах исследований, проведенных автором. Оформление работы в целом соответствует установленным требованиям. При использовании результатов других авторов в диссертации даются необходимые ссылки. Корректность изложения научного материала, наглядная иллюстрация полученных результатов в виде рисунков, таблиц и графиков позволяют объективно оценивать содержание, выводы и значимость проведенных научных исследований.

Основные результаты работы и научная новизна

В диссертации и автореферате заявлено четыре пункта научной новизны. Первые два характеризуют новизну разработанных автором аппроксимационных методов обработки хроматографического сигнала, и предложенных математических моделей хроматографических пиков на базе их вейвлет - аппроксимации, что приводит к снижению погрешности определения площади отдельных и совмещенных асимметричных хроматографических пиков.

Третий пункт относится к разработке нового метода разделения наложенных асимметричных хроматографических пиков, отличающийся использованием моделей Грамма-

Шарлье и комбинированной Гауссианы, что приводит к снижению погрешности определения площадей наложенных асимметричных пиков.

Четвертый пункт относится к структурной и функциональной схем информационно-измерительной системы хроматографических исследований, представляющую собой мультипроцессорную систему, отличающуюся выбором микропроцессорных средств в соответствии с разработанным алгоритмическим и программным обеспечением, позволяющую автоматизировать процесс определения информативных параметров хроматографических сигналов и характеризуемую высокими метрологическими характеристиками.

В совокупности разработанные методы, алгоритмы и структуры формируют единый подход к синтезу и анализу аппроксимационных информационно-измерительных систем хроматографических исследований.

Практическая значимость диссертационной работы

Полученные в ходе теоретических исследований результаты позволили использовать разработанные методы и аппаратно-программные средства для построения автоматизированной информационно-измерительной системы хроматографических исследований.

Практически значимыми являются разработанные методики и полученные аналитические выражения для создания автоматизированной хроматографической системы с высокими метрологическими характеристиками. Использование предложенных методов позволяет оптимизировать параметры обработки хроматографического сигнала в зависимости от вида хроматографических пиков, степени их совмещения, наличия базовой линии и помех, требуемых точности и времени обработки сигнала.

Разработанная программа метрологического анализа позволяет оценить погрешности определения информационных характеристик хроматографического анализа.

Практическая значимость результатов работы подтверждается наличием актов о внедрении и использовании результатов диссертационной работы в ООО «АКСЕС автоматик», в испытательной лаборатории ФГБУ «Самарский ЦСМ», а также в учебном процессе Самарского государственного технического университета.

Достоверность и обоснованность основных положений работы

Достоверность полученных в работе экспериментальных результатов подтверждается использованием современных методов математического анализа, статистических исследований, методов цифровой обработки сигналов, методов аналитического и имитационного моделирования, с использованием современных компьютерных математических редакторов, надежностью используемых математических методов и воспроизводимостью моделей, а также хорошим согласием теоретических результатов экспериментальным данным.

Достоверность научных положений, выводов и практических рекомендаций, полученных в диссертационной работе, обеспечивается корректным использованием математиче-

ских методов и подтверждается результатами экспериментальных исследований. Полученные данные не противоречат известным положениям в данной области исследований.

Основные замечания по работе

1. В первой главе работы содержится достаточно подробный анализ существующих методов обработки хроматографического сигнала, но в выводах к этой главе отсутствует достаточно конкретные выводы и постановка задачи исследований в работе.
2. Не очень удачно скомпонованы материалы работы. В частности, разделы 2.1 и 2.2 фактически относятся к обзорной части раздела 1.
3. В главе 2 недостаточно обоснован выбор базис функций Чебышева - Эрмита для аппроксимации хроматографического сигнала.
4. В разделе 2.3 работы описано использование аппроксимации хроматографического сигнала по методу трапеций, но непонятна цель аппроксимации - используется этот метод для сглаживания сигнала, или для определения площади хроматографического пика.
5. Сомнительно утверждение (с. 13), что длина хроматографической колонки может достигать несколько тысяч метров.
6. Разработанный в диссертационной работе метод разделения наложенных хроматографических пиков сравнивался лишь с одной вариацией нейросетевого метода, применимого для решения рассматриваемой задачи.
7. Коррекция базовой линии хроматографических сигналов осуществлена в работе существующим методом, основанным на сочетании второй производной исходного сигнала с его аппроксимацией методом наименьших квадратов.
8. При разработке структуры ИИС хроматографического анализа не уделено внимание выбору компонентов для аналитической части ИИС.
9. В работе не рассмотрена возможность использования разработанных методов первичной обработки хроматографических сигналов в качестве алгоритмического обеспечения для обработки сигналов промышленно выпускаемых ИИС хроматографического анализа, без использования представленной в работе структуры ИИС.

Указанные замечания не носят принципиального характера и не снижают ценности выполненной работы.

Заключение

Диссертация Бочкарева А.В. является завершенной научно-квалификационной работой, отвечающей требованиям "Положения о порядке присуждения ученых степеней" ВАК России. В диссертации разработаны новые аппроксимационные методы определения информационных характеристик хроматографического анализа, на основе которых создана автоматизированная информационно-измерительная система обработки сигналов в процессе хро-

матографических исследований, проведен ее метрологический анализ, что является решением важной проблемы.

Диссертация соответствует паспорту специальностей научных работников 2.2.11. Информационно-измерительные и управляющие системы.

Автореферат и опубликованные работы отражают все основные положения диссертации.

Считаю, что автор диссертационной работы, Бочкарев Андрей Владимирович, заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата технических наук по специальности 2.2.11. Информационно-измерительные и управляющие системы.

Официальный оппонент,

Доктор технических наук, доцент
Заведующий кафедрой «Информационный
и электронный сервис»
ФГБОУ ВО «Поволжский государственный
университет сервиса», г. Тольятти

Владимир Иванович Воловач

Докторская диссертация защищена по специальности 05.12.04 – Радиотехника, в том числе системы и устройства телевидения. Адрес места основной работы: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Поволжский государственный университет сервиса». Почтовый адрес: 445017, г. Тольятти, ул. Гагарина, 4. Рабочий телефон: +7 (8482) 48-65-70 Email: kaf_iies@tolgas.ru

Подпись Воловача В.И. заверяю:

