**Богомолов, Андрей Юрьевич.**
Развитие мультисенсорного подхода в оптическом спектральном анализе : диссертация ... доктора химических наук : 02.00.02 / Богомолов Андрей Юрьевич; [Место защиты: ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»]. - Самара, 2020. - 307 с. : ил.

## Оглавление диссертациидоктор наук Богомолов Андрей Юрьевич

ВВЕДЕНИЕ

1. ОПТИЧЕСКИЕ МУЛЬТИСЕНСОРНЫЕ СИСТЕМЫ В АНАЛИТИЧЕСКОЙ СПЕКТРОСКОПИИ (ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ)

1.1 Современные направления в развитии оптической спектроскопии

1.1.1 Лабораторная спектроскопия

1.1.2 Спектроскопия в анализе технологических процессов

1.1.3 Материалы, технические решения и методы исследования

1.1.4 Анализ спектральных данных

1.1.5 Децентрализация и персонализация анализа

1.2 Оптические мультисенсорные системы

1.2.1 Определение ОМС

1.2.2 Отличительные особенности

1.2.3 ОМС и одноканальные сенсоры

1.2.4 Архитектура и принцип работы ОМС

1.2.5 Конструкционные элементы ОМС

1.2.6 Классификация ОМС

1.3 Анализ спектральных данных и данных ОМС

1.3.1 Хемометрика как метод анализа спектральных данных

1.3.2 Предварительная обработка данных

1.3.3 Отбор переменных и объектов

1.3.4 Разведочный факторный анализ данных

1.3.5 Регрессионный анализ данных и многомерная градуировка

1.3.6 Дискриминантный анализ данных

1.3.7 Проверка градуировочной модели

1.3.8 Стратегии моделирования

1.3.9 Планирование градуировочного эксперимента

1.3.10 Хемометрика процессов

ЗАКЛЮЧЕНИЕ К ГЛАВЕ

2. МЕТОДОЛОГИЯ РАЗРАБОТКИ ОМС

2.1 Цикл разработки ОМС

2.1.1 Подход к разработке

2.1.2 Основные этапы и задачи разработки

2.2 Моделирование информационных каналов ОМС

2.2.1 Выбор метода и полноспектральные измерения

2.2.2 Конфигурация оптических каналов

2.2.3 Алгоритм оптимизации

2.2.4 Интервальный метод отбора переменных при одновременной оптимизации предобработки данных

2.2.5 Техника измерения

2.3 Сбор и низкоуровневая обработка данных ОМС

2.3.1 Сбор данных и их свойства

2.3.2 Нормирование мультисенсорных данных

2.3.3 Обеспечение прецизионности измерения

2.3.4 Выбор эталонного образца

2.3.5 Безэталонный количественный анализ

2.4 Построение и валидация моделей в процессе разработки ОМС

2.4.1 Предобработка мультисенсорных данных

2.4.2 Особенности построения градуировочных моделей для ОМС

2.4.3 Многоуровневая валидация модели

2.4.4 «TPT cloud» - комплекс программ для анализа многомерных данных и разработки ОМС «в облаке»

ЗАКЛЮЧЕНИЕ К ГЛАВЕ

3. ПЛАНИРОВАНИЕ ГРАДУИРОВОЧНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

3.1 Введение в планирование многокомпонентного градуировочного эксперимента

3.1.1 Понятия и определения

3.1.2 ПЭ как оптимизационная проблема

3.1.3 Оценка результата ПЭ

3.2 Требования к набору градуировочных образцов

3.2.1 Некоррелированность факторов

3.2.2 Равномерность заполнения

3.2.3 Покрытие экспериментального пространства

3.2.4 Встроенная проверка

3.2.5 Интерпретируемость

3.2.6 Дополнительные характеристики

3.3 Диагональный дизайн многокомпонентного градуировочного эксперимента

3.3.1 Основные допущения и правила конструирования

3.3.2 Диагональный дизайн градуировки для двух компонентов

3.3.3 Обобщение ДД для градуировки трёх и более компонентов

3.3.4 Расширенные схемы ДД

3.4 Примеры специальных дизайнов градуировочного эксперимента для различных приложений

3.4.1 Планирование градуировочного эксперимента для определения жира и белка в молоке

3.4.2 Дизайн градуировочного эксперимента в АКТП

ЗАКЛЮЧЕНИЕ К ГЛАВЕ

4. ОМС В АНАЛИТИЧЕСКОМ КОНТРОЛЕ ПРОЦЕССОВ

4.1 Аналитическое пространство и траектория процесса

4.1.1 Основные понятия и определения

4.1.2 Дискретизация сбора данных

4.1.3 Визуализация траекторий

4.1.4 Проблема избыточности аналитического пространства

4.2 Разрешение и анализ траекторий

4.2.1 Методология анализа процессов

4.2.2 Качество траектории

4.3 Применение траекторий процесса

4.3.1 Анализ процесса в реальном времени

4.3.2 Мониторинг процессов

4.3.3 Контроль процесса

4.3.4 Понимание процесса

4.3.5 Оптимизация процесса

ЗАКЛЮЧЕНИЕ К ГЛАВЕ

5. ПРИМЕРЫ РАЗРАБОТКИ И ПРИМЕНЕНИЯ ОМС

5.1 Определение жира и общего белка в молоке

5.1.1 Оптический анализ молока на содержание жира и белка

5.1.2 Обоснование спектрального метода определения молочного жира и белка в области 400-1100 нм

5.1.3 Построение рабочих моделей

5.1.4 Перенос модели методом коррекции наклона и отсечения

5.1.5 Разработка светодиодного анализатора

5.1.6 Пространственно-разрешённая спектроскопия и безэталонный метод измерения в анализе молока

5.2 Контроль качества фармацевтических продуктов

5.2.1 Анализ процессов фармацевтических производств

5.2.2 Построение точной градуировочной модели для онлайн-мониторинга содержания воды в грануляте

5.2.3 Онлайн-мониторинг массовой доли воды и толщины покрытия в процессах изготовления пеллет

5.2.4 Онлайн-прогноз профилей растворения АФИ из БИК-спектров пеллет в процессе их изготовления

5.3 Онлайн-мониторинг ферментации Засскатотусеъ cerevisiae

5.3.1 Мониторинг биотехнологических процессов

5.3.2 Разработка мультисенсорной системы в ИК-области

5.3.3 Мониторинг процесса ферментации посредством ИК- и БИК-спектроскопии

5.3.4 Флуориметрический мониторинг процесса ферментации

5.3.5 Разрешение траектории процесса ферментации из данных 2D-флуориметрии

5.4 Оптические методы диагностики рака почки

5.4.1 Методы, проблемы и задачи онкологической диагностики

5.4.2 Образцы

5.4.3 Разработка и тестирование светодиодного сенсора для диагностики рака почки

5.4.4 Эффект комбинации флуоресцентной и ИК-спектроскопии

5.5 Экологический мониторинг почв

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ГЛАВЕ

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

ВЫВОДЫ

СПИСОК СОКРАЩЕНИЙ И УСЛОВНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

ПРИЛОЖЕНИЕ А. ГЕРЕРАТОР СХЕМ ДИАГОНАЛЬНОГО ДИЗАЙНА НА ЯЗЫКЕ «MATLAB» С ПРИМЕРАМИ

ПРИЛОЖЕНИЕ Б. СТАНДАРТНЫЕ ОБРАЗЦЫ

ПРИЛОЖЕНИЕ В. ПРАКТИЧЕСКИЕ РАЗРАБОТКИ АНАЛИТИЧЕСКИХ УСТРОЙСТВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МУЛЬТИСЕНСОРНОГО ПОДХОДА