

НОВЫЕ КНИГИ

РЕЦЕНЗИЯ НА МОНОГРАФИЮ И. М. ДУБРОВКИНА
“DATA COMPRESSION IN SPECTROSCOPY”,
Cambridge Scholars Publishing, 2022

В. И. Томин,

*доктор физ.-мат. наук, профессор, директор отдела физики Померанского университета
(Pomeranian University in Slupsk), Слупск, Польша*

УДК 655.552

<https://doi.org/10.47612/0514-7506-2022-89-5-749-750>

(Поступила 24 августа 2022)

Бурный прогресс в совершенствовании инструментальной базы спектроскопии, достигнутый в последние десятилетия, позволил значительно увеличить количество информации об исследуемых объектах, получаемой для научных и промышленных целей. В дополнение к классическим одномерным спектрам, измеряемым с помощью стандартной аппаратуры, пришли многомерные большие массивы данных, регистрируемые с помощью более сложных современных измерительных систем.

Исследователям приходится обрабатывать такие массивы, содержащиеся, например, в матрицах, представляющих собой набор спектров с временным разрешением, а также получаемых лазерными сканирующими микроскопами, позволяющими воспроизводить 3D-изображения; в гиперспектральных изображениях, включающих в себя 2D-пространственно-разрешенную информацию, каждая координата которой содержит спектральные данные; в многомодальных (multi-way) массивах, получаемых при комбинировании двух и более аналитических приборов различных типов (например, жидкостная хроматография со спектроскопическим детектированием с диодной матрицей, газовая хроматография с масс-спектрометрическим обнаружением и др.).

Резкий рост скорости накопления данных обуславливает существенно новые требования к передаче, хранению и обработке огромных числовых массивов [1]. Для эффективного решения этой проблемы необходимо сжатие данных, сопровождаемое их минимальными искажениями.

Сжатие данных путем их кодирования или трансформации в компактную форму — одно из важнейших направлений теории информации и обработки сигналов [2]. В аналитической химии и, в частности, спектроскопии революционный переворот был совершен в конце прошлого века благодаря внедрению хемометрики, основанной на использовании наиболее информативных с точки зрения решения данной задачи принципиальных компонент многомерных массивов [3]. Важно подчеркнуть, что сжатие спектроскопических данных для аналитических целей имеет давнюю историю от интуитивного выбора оптимального набора аналитических точек спектров, в дальнейшем оптимизированного благодаря использованию эффективных математических методов [4, 5], до компактного представления гиперспектральных образов [6].

Описанные в многочисленных публикациях теоретические методы и алгоритмы сжатия спектров представляют собой пеструю картину, состоящую из внешне не связанных фрагментов для непрофессионального читателя. Автор рецензируемой монографии поставил перед собой задачу объединить указанные фрагменты в целостную картину в рамках книги относительно небольшого объема.

Книга состоит из четырех частей, первая из которых является кратким введением в тему сигналов и шумов в спектроскопии. Две главы посвящены теоретико-информационным аспектам линейных преобразований спектров и проблеме “больших данных” (big data) [1] в аналитической спектроскопии. Вторая часть знакомит читателя с общими принципами сжатия сигналов. Особое внимание уделено описанию подавления помех в изображениях, включая гиперспектральные, и их компактно-му представлению. Сжатое зондирование (compressed sensing), основанное на оптимизации разре-

женности сигнала при его восстановлении из меньшего количества отсчетов, требуемого теоремой Найквиста–Шеннона, является предметом рассмотрения последней главы. В заключительных двух частях книги автор описывает линейные преобразования численных данных одно- и многомерной аналитической спектроскопии с точки зрения их сжатия для дальнейшего использования.

Общие теоретические положения замены спектров их линейными образами (производными, Фурье, Уолша и др.) в качестве первичной информации для аналитических целей были сформулированы еще в 80-е гг. прошлого века [7]. В рецензируемой работе представлено современное состояние проблемы, дополненное глубоким анализом многомерных данных. В частности, рассмотрены методы обобщенной 2D-корреляционной спектроскопии [8] и сжатое зондирование в спектроскопии [9]. Особый интерес представляет новый метод, комбинирующий сжатие матриц на основе приближения низкого ранга с быстрым Фурье-преобразованием сингулярных векторов [10].

Удачным можно считать расположение материала таким образом, что многие важные моменты, позволяющие лучше его понять, вынесены в Приложения, где рассмотрены базовые математические обоснования основных теоретических положений. Однако в некоторых частях монография несколько перегружена аналитическими процедурами, имеющими главным образом исторический интерес.

К недостаткам книги можно отнести ее ограниченный объем, который не позволил более детально рассмотреть некоторые важные методы многомерной аналитической спектроскопии, поэтому читателю рекомендуется обратиться к оригинальным источникам. Вместе с тем книга может быть полезна и рекомендована для специалистов аналитических лабораторий, студентов и преподавателей курсов аналитической спектроскопии.

Наличие большого количества примеров и легко воспроизводимых компьютерных программ для популярного пакета MATLAB облегчает активное усвоение материала. Новая монография доктора физ.-мат. наук Иосифа Михайловича Дубровкина является важным продолжением его предыдущих работ [11, 12], вызвавших интерес широкой аудитории спектроскопистов-аналитиков.

Монография написана на английском языке, ее чтение поможет освоить научную терминологию и облегчит работу с современной англоязычной литературой.

- [1] **V. Mayer-Schönberger, K. Cukier.** Big Data: A Revolution That Will Transform How We Live, Work, and Think. John Murray (Publishers), Hachette UK Company (2014)
- [2] **D. Salomon.** A Concise Introduction to Data Compression. Springer Science & Business Media (2007)
- [3] **H. Mark, Jr. Workman.** Chemometrics in Spectroscopy, Elsevier (2007)
- [4] **G. Tang, B. Wei, D. Wu, P. Feng, J. Liu, T. Tang, S. Xiong, Z. Zhang.** Журн. прикл. спектр., **85**, № 1 (2018) 119—128 [**G. Tang, B. Wei, D. Wu, P. Feng, J. Liu, Y. Tang, Sh. Xiong, Z. Zhang.** J. Appl. Spectr., **85** (2018) 109—118]
- [5] **D. Ding, K. Liang, B. Li, L. Liu, W. Wu, M. Shen.** Журн. прикл. спектр., **87**, № 2 (2020) 282—288 [**D. Ding, K. Liang, B. Li, L. Liu, W. Wu, M. Shen.** J. Appl. Spectr., **87** (2020) 296—302]
- [6] **Z. Deng, Y. Fu, S. Zhao, Y. Gao, J. Cui, Z. Deng, Y. Fu, S. Zhao, Y. Gao, J. Cui.** Журн. прикл. спектр., **89**, № 3 (2022) 436 [**Z. Deng, Y. Fu, S. Zhao, Y. Gao, J. Cui.** J. Appl. Spectr., **89** (2022) 593—601]
- [7] **И. М. Дубровкин.** Журн. прикл. спектр., **38**, № 2 (1983) 237—240
- [8] **I. Noda, Y. Ozaki.** Two-Dimensional Correlation Spectroscopy: Applications in Vibrational and Optical Spectroscopy, Wiley (2004)
- [9] **G. Gamez.** J. Anal. At. Spectrom., **31** (2016) 2165—2174
- [10] **J. Dubrovkin.** Appl. Spectr., **76**, N 3 (2022) 369—378
- [11] **J. Dubrovkin.** Mathematical Processing of Spectral Data in Analytical Chemistry: a Guide to Error Analysis, Cambridge Scholars Publishing (2018)
- [12] **J. Dubrovkin.** Derivative Spectroscopy, Cambridge Scholars Publishing (2021)