

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

кандидата технических наук

АХМЕТШИНА ДИНАРА АГЗЯМОВИЧА

на диссертацию Байбаковой Евгении Васильевны

на тему: «Хеометрический подход к региональному нормированию природных вод в урбоэкосистеме», представленную на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.5.15. Экология

1. Актуальность избранной темы.

Современные методы оценки качества природных вод сталкиваются с трудностями из-за множества факторов, влияющих на их состав. Традиционные способы анализа часто оказываются недостаточно эффективными для обработки большого объема данных. Методы хеометрии, напротив, открывают широкие перспективы для извлечения скрытой информации, содержащейся в многомерных данных, полученных в результате измерений. Анализ такого рода данных требует их агрегирования, с сохранением их полной информационной ценности. Особенно это важно при экспертном методе анализа, применяемом автором диссертации. Работа с агрегированными данными значительно упрощает задачи экспертов, так как позволяет сосредоточиться на более компактных и осмысленных наборах данных. Для выполнения задачи агрегирования предложено использовать методы кластеризации, объединяющие схожие объекты в однородные группы. Среди методов кластерного анализа особое место занимают нейросетевые подходы, такие как самоорганизующиеся карты Кохонена (SOM). Этот метод, предложенный финским ученым Т. Кохоненом, позволяет выполнять проекцию многомерного пространства в пространство с более низкой размерностью, чаще всего двумерное. SOM используется для кластеризации, визуализации, моделирования, прогнозирования, а также для выявления закономерностей в больших массивах данных. Классификация водных объектов по значениям гидрохимических показателей с использованием SOM имеет ряд преимуществ для выявления их природно-антропогенных особенностей. Во-первых, метод универсален: в отличие от иерархических подходов, сети Кохонена способны работать с зависимостями любой сложности. Во-вторых, SOM может дообучаться на новых данных, что исключает необходимость полной перестройки модели при обновлении информации. Немаловажным фактором является высокая интерпретируемость результатов. Сеть Кохонена способна представлять

многомерные результаты в виде двумерных карт-сверток, раскрашенных в соответствии с градацией шкалы измерений. Такое представление облегчает экспертам, специалистам предметной области, анализ полученных результатов. Таким образом, использование нейросетевой кластеризации, и в частности SOM, позволяет не только эффективно обрабатывать данные, но и визуализировать их в понятной форме. Это способствует разработке обоснованных региональных нормативов качества природных вод, повышая точность анализа данных и разработке нормативов качества и воздействия. Выбор данного метода является актуальным и оправданным как с научной, так и с практической точки зрения.

2. Новизна исследований и полученных результатов.

В диссертационной работе Е.В. Байбаковой применен инновационный подход к кластерному анализу многомерных данных, основанный на использовании самоорганизующихся карт Кохонена (Self-Organizing Maps, SOM). Среди множества известных методов кластеризации автор выбрала нейросетевой метод, который отличается нетривиальным подходом к выделению однородных групп по принципу «победитель получает все». Это решение демонстрирует оригинальность исследования и высокий научный потенциал. Методы нейросетевой кластеризации в работе использованы для агрегирования и классификации данных о поверхностных водах урбоэкосистемы, что позволило выделить значимые гидрохимические показатели, определить их градации и сформировать региональные нормативы качества. Применение SOM позволило визуализировать сложные многомерные данные, что облегчило интерпретацию результатов экспертами. Такая визуализация на основе двумерных SOM-карт дала возможность не только определить основные закономерности в данных, но и выявить природно-антропогенные особенности формирования химического состава поверхностных вод. На основе предложенного метода разработана программа расчета, которая позволяет относить любую пробу воды поверхностного водного объекта Волжско-Камского бассейна к определенному классу. Это стало возможным благодаря установлению региональных пороговых значений гидрохимических показателей, которые были использованы для модернизации способа расчета удельного комбинаторного индекса загрязненности поверхностных вод. Этот индекс, рассчитанный с учетом региональных особенностей, позволяет точнее оценивать уровень загрязненности водных объектов, минимизируя влияние природных факторов и акцентируя внимание на антропогенных

воздействиях. С применением региональных пороговых концентраций автором диссертации разработана методика расчета нормативов допустимого сброса загрязняющих веществ для сточных вод урбоэкосистемы, позволяющая в целом снижать антропогенное воздействие на водный объект, за счет применения более жестких нормативов допустимого сброса в отношении загрязняющих веществ преимущественно антропогенного происхождения и предъявлять более обоснованные с точки зрения региональных особенностей требования к водопользователям.

3. Степень обоснованности и достоверности научных положений, выводов и заключений.

Основные положения, выводы и заключения, сформулированные диссертантом, научно обоснованы и аргументированы.

Выводы сделаны автором на основе многочисленных экспериментов, с использованием традиционных химических и хеометрических методов исследования. Результаты представлены и обсуждены на научных конференциях различного уровня, что дополнительно свидетельствует об их адекватности.

Обоснованность выводов, сделанных в работе, также подтверждается публикациями в высокорейтинговых журналах, в том числе входящих в международные базы данных и системы цитирования Web of Science и Scopus.

4. Значимость для науки и практики выводов и замечаний диссертанта.

Теоретическая значимость работы заключается в расширении возможностей хеометрики в части разработки подходов к оценке качества и регионального нормирования природных вод в урбоэкосистеме на базе массивов гидрохимических данных, с применением современных расчетных методов и информационных технологий. Практическая значимость работы заключается в том, полученные результаты предназначены для цифровой трансформации управления водопользованием и переданы в Министерство экологии и природных ресурсов Республики Татарстан (Справка о передаче результатов диссертационной работы). Теоретическую и практическую значимость работы подчеркивает то, что научные исследования проведены при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках исполнения обязательств по Соглашениям №075-03-2023-032 от 16.01.2023 г и №075-03-2024-067 от 17.01.2024 г. (номер темы FZSU-2023-0005).

5. Соответствие содержания автореферата основным положениям диссертации.

Оформление автореферата соответствует требованиям ВАК Минобрнауки России, а его содержание в полной мере отражает содержание и основные положения диссертации.

6. Структура и содержание диссертации, ее завершенность, качество оформления.

Диссертация Байбаковой Е.В. изложена на 172 страницах машинописного текста, содержит 31 рисунок и 20 таблиц. Диссертация состоит из введения, 5 глав, заключения, списка цитируемой литературы и 16 приложений.

Во введении обоснованы актуальность темы работы, степень научной проработанности проблемы регионального экологического нормирования вод урбоэкосистемы и соответствие темы паспорту специальности, приводятся цель, задачи исследования, сформулированы научная новизна, практическая значимость работы, положения, выносимые на защиту.

Обзор литературы по теме диссертационного исследования посвящен анализу литературных данных по методам разработки региональных нормативов качества поверхностных вод, показаны их преимущества и недостатки, проанализированы подходы к классификации поверхностных вод для учета природно-антропогенных особенностей гидрохимического состава, дан обзор методов комплексной оценки составов вод урбоэкосистемы, методы обработки результатов измерений, показаны преимущества хемометрических, особенно нейросетевых подходов к анализу экспериментальных данных. Проанализированы отечественные и зарубежные подходы к регулированию антропогенного воздействия на водные объекты, выделены недостатки действующей системы нормирования сбросов загрязняющих веществ в водные объекты, показана необходимость разработки взаимоувязанных региональных нормативов качества и воздействия для управления водопользованием.

В Главе 2. Характеристика объектов и методы исследования традиционно описаны объекты исследований, этапы проведения экспериментов, методы статистической обработки результатов. Глава содержит подробное описание природных и антропогенных условий формирования состава вод исследуемых водных объектов, условий и факторов формирования питьевых вод, приготавливаемых из поверхностных вод. Приведены методы математической обработки результатов, дано описание метода многомерной нейросетевой кластеризации, применяемого для классификации поверхностных водных объектов по гидрохимическим показателям.

В Главе 3. Классификация поверхностных вод и определение региональных пороговых значений гидрохимических показателей обоснован подход к классификации поверхностных вод с определением региональных пороговых значений гидрохимических показателей путем многомерной нейросетевой кластеризации с нечеткими элементами и экспертным оцениванием. Было протестировано два подхода: прямая кластеризация без учета сезонности и последовательная кластеризация с учетом сезонности. При этом, имеющиеся наборы измеренных гидрохимических показателей различных водных объектов, относящихся к тому или иному водному бассейну, кластеризуются с использованием алгоритма на основе нейронных сетей Кохонена с последующей двумерной визуализацией SOM-картами. Первый подход предполагает минимальное количество вычислений с достаточной точностью разделения на классы. Второй вычислительный блок представляет собой дерево последовательных кластеризующих алгоритмов на основе сетей Кохонена, осуществляющих углубленную детализацию группировок. Этот блок включает псевдонечеткое кодирование и проведение поэтапной многоуровневой кластеризации, что увеличивает время и сложность расчетов, но позволяет получить группировки повышенной точности с более тонким разделением на классы. Оценку степени детализации разбиения поверхностных водных объектов на классы дают специалисты-эксперты предметной области. Третий вычислительный блок является вспомогательным и осуществляет кодирование данных типа «дата-время» для адекватного расчета расстояний между кластеризуемыми векторами с учетом сезонности. В результате определяются классы вод с однородными, по мнению экспертов, значениями гидрохимических показателей и с необходимой степенью детализации.

Визуализация SOM-картами и факторный анализ позволяют сделать вывод об основных факторах (минерализация и соли жесткости), характеризующих общую изменчивость гидрохимического состава исследуемых поверхностных вод.

В Главе 4. Развитие способа комплексной оценки поверхностных вод по уровню загрязненности изложен модернизированный подход для расчета УКИЗВ с учетом региональных пороговых концентраций, дано обоснование показателя для комплексной оценки гидрохимического состава питьевых вод,готавливаемых из вод поверхностного водоемисточника.

В Главе 5. Методика расчета нормативов допустимого сброса сточных вод предприятия с учетом региональных особенностей водных объектов обоснован метод расчета нормативов допустимого сброса загрязняющих веществ

с учетом региональных особенностей водных объектов с апробацией для сточных вод предприятия химической отрасли промышленности.

В *заключении* по диссертации, на основании полученных результатов, представлены выводы по разделам работы согласно её цели и задачам. Заключение отражает все этапы выполнения исследования и включает основные выводы.

Приложения к диссертации содержат необходимые дополнительные сведения и документы.

На основании вышеизложенного следует отметить, что представленная диссертация является завершённым трудом, в котором поставлена и достигнута важная научно-прикладная задача.

7. Подтверждение опубликования основных результатов диссертации в научной печати.

Результаты диссертации Байбаковой Е.В. представлены и обсуждены на конференциях Всероссийского и международного уровня и опубликовано 23 научные работы, из них 3 статьи в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных ВАК Минобрнауки России по специальности, в том числе 2 из них размещены в международных базах данных Scopus и WoS, 1 статья в другом рецензируемом научном издании перечня ВАК Минобрнауки России, 1 статья в научном журнале, входящем в международные базы данных и системы цитирования Scopus и Web of Science, 17 публикаций в сборниках материалов и тезисов Международных и Всероссийских научных конференций, 1 авторское свидетельство (№ 2024616050/15.03.2024) на программу многоуровневой нейросетевой классификации гидрохимических данных с нечеткими элементами на основе экспертного оценивания.

8. Достоинства и недостатки диссертационной работы, оценка научной работы соискателя в целом, замечания по работе, вопросы.

В целом, представленная работа свидетельствует о высокой квалификации диссертанта как научного работника в области регионального нормирования с использованием хемометрических подходов. Работа хорошо оформлена, в полной мере снабжена иллюстративным материалом, изложена логически последовательно, грамотно. Хорошо обоснована актуальность темы диссертационного исследования, представлен анализ отечественной и зарубежной научной литературы по данной проблеме. Из актуальности логически вытекает цель исследования, грамотно поставлены задачи для ее достижения.

Однако, наряду с изложенными достоинствами рассматриваемой диссертации, имеют место недостатки и упущения:

1. В работе оценку качества кластеризации поверхностных вод предложено проводить экспертно. Однако существуют строгие математические методы оценки свойств сформированных кластеров, о которых автор вскользь упоминает в разделе 1.8.3 диссертации. Не понятно, почему автор ограничивается только экспертными методами, и никак не развивает идею оценивать однородность кластеров автоматически.

2. В разделе 1.8. «Возможности применения искусственных нейронных сетей в задачах регионального экологического нормирования» приводятся теоретические сведения по нейронным сетям. Однако описывается только простейшая структура типа «многослойный персептрон», тогда как сам автор использует нейронные сети типа самообучающихся сетей Кохонена. В свою очередь, описание работы этих сетей приведено позже, в разделе 2.7. «Методы математического анализа». Следовало бы перенести теоретические сведения по сетям Кохонена в общий раздел с теоретическими сведениями о нейронных сетях.

3. В разделе 3.1. «Описание метода определения региональных пороговых значений гидрохимических показателей в поверхностных природных водах» автор использует специфическую функцию (3.3) для кодирования даты забора поверхностных вод. Не понятно, на чем основан выбор функции именно такого вида. Также хотелось бы видеть в диссертации более развернутое описание приема кодирования данных, его назначение и математическое обоснование.

4. Для лучшего восприятия полученных результатов следовало бы перенести SOM-карты в текст 3 главы.

5. В работе встречаются опечатки.

Несмотря на выявленные недочёты и высказанные замечания существенных недостатков у оппонируемой работы не выявлено, а указанные замечания никак не умаляют значимость проделанной работы и не изменяют ее общую положительную оценку.

Заключение

Диссертационная работа Байбаковой Евгении Васильевны на тему: «Хемометрический подход к региональному нормированию природных вод в урбоэкосистеме» является самостоятельной законченной научно-квалификационной работой, в которой содержится решение актуальной научной задачи, создания системы регионального нормирования для вод урбоэкосистемы,

имеющей значение для развития методов экологии и хеометрии, и полностью соответствующей специальности 1.5.15. Экология.

Таким образом, по теме, содержанию и результатам диссертационная работа Байбаковой Евгении Васильевны полностью удовлетворяет требованиям ВАК Минобрнауки России в соответствии с п.9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года №842 (в действующей редакции), а ее автор Байбакова Евгения Васильевна заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.5.15. Экология.

Официальный оппонент,
Кандидат технических наук
(05.13.18 – Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ),
доцент, И.о. заведующего кафедрой
интеллектуальных систем и управления
информационными ресурсами
ФГБОУ ВО «Казанский национальный
исследовательский технологический
университет»

 Динар Агзямович Ахметшин
«9».12.2024 г.

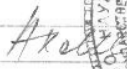
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования «Казанский национальный исследовательский
технологический университет»

420015, Республика Татарстан, г. Казань, ул. Карла Маркса, д. 68.

Тел. +7(843)231-42-02, E-mail: AkhmetshinDA@corp.knrtu.ru

Подпись Ахметшина Динара Агзямовича заверяю

Я, Ахметшин Динар Агзямович, даю согласие на включение моих
персональных данных в документы связанные с работой диссертационного
совета, и их дальнейшую обработку.

Подпись 

удостоверен
Начальник отдела
кадрового делопроизводства
ФГБОУ ВО «КНКТУ»



А.Р. Уренцов
20 12

Вход. № 05-8293
«09» 12 2024 г.
подпись 