

### КОЛОНКА РЕДАКТОРА

Трудно представить себе деятельность современного естествоиспытателя без измерительной аппаратуры. Проводя тонкие измерения с помощью новейших аналитических приборов, исследователь получает необходимую информацию о структуре и составе различных объектов, а также о процессах, протекающих в них, в широком масштабе пространственных и временных характеристик и таким образом познает окружающий мир на всех уровнях организации материи, как живой, так и неживой.

Характеристики измерительного прибора в таком случае имеют первостепенное значение. И даже если его совершенство не вызывает сомнений, на достоверность получаемой информации могут оказывать влияние другие факторы, например точность воспроизведения условий эксперимента. На этапе интерпретации результатов ученому следует помнить об этих факторах и делать свои заключения с учетом возможных погрешностей. К ним в первую очередь относят ошибки измерительного прибора, затем ошибки модели, выбранной для объяснения при обработке полученных данных, и, наконец, ошибки, возникающие при обработке численных результатов (их можно отнести к разряду систематических). Если ошибки первого и второго типа принимаются как принципиально неустранимые для наблюдаемой картины, то величину ошибки, возникающей при обработке численных результатов, можно оценить и учесть в дальнейшем.

Обычно исследователь, понимая, что численные значения изменяются в некотором допустимом интервале, для его оценки использует возможности математической статистики. Если внимательно изучить основные монографии по математической статистике, вышедшие до настоящего времени, то можно отметить следующее: практически все из них написаны математиками и носят чисто теоретический характер. Работая преимущественно с математическими моделями, их авторы не особенно утруждают себя доказательством применимости своих положений к реальным объектам.

С развитием вычислительной техники появились математические пакеты, в которых математическую обработку данных производят программы. Однако рядовому пользователю, то есть непосредственно экспериментатору, крайне редко удается познать детали используемого вычислительной машиной математического алгоритма и уж тем более оценить его недостатки (то есть границы применимости и неустранимые ошибки). Таким образом, получается, что исследователь в своей работе имеет дело с чем-то вроде «черного ящика». Между разработчиками методов математической статистики и естествоиспытателями-практиками возникает стена непонимания, которую подчас весьма трудно преодолеть, особенно тем пользователям программных продуктов, которые не имеют специального математического образования и не соприкасаются в своей профессиональной деятельности с современными методами вычислительной математики. Естественно, в этой ситуации возникает вопрос, можно ли придумать достаточно простые методы, которые были бы доступны для понимания большинства экспериментаторов, работающих с массивами различных данных.

Один из авторов этого материала, физик-теоретик по образованию, задал себе такой вопрос примерно двадцать лет назад. И, судя по публикациям в ведущих евро-

пейских журналах и индексу их цитирования, разработка таких методов оказалась крайне востребованной.

Известно, что совокупность методов подобного рода обозначается аббревиатурой НИМРАД (неинвазивные, то есть не вносящие неконтролируемые ошибки, методы редуцированного анализа данных). Эти методы помогают в большинстве случаев уменьшить влияние случайного фактора, сгладить результаты измерений по критерию минимума относительной ошибки и описать тренды случайных функций многих сложных систем (там, где простые модели их описания отсутствуют) в терминах так называемых самоподобных и почти периодических моделей. В результате исследований было установлено, что функция распределения вероятностей сильно коррелированных систем также описывается универсальной функцией распределения (бета-распределением), это открывает новые возможности для описания остаточных шумов, обладающих к тому же, как оказалось, определенной «памятью». К НИМРАД также можно отнести и статистику дробных моментов, которые работают на всей совокупности моментов и по-новому решают задачу распознавания «свой – чужой» и кластеризации данных по заданному признаку, что, естественно, в деталях требует специального объяснения.

Рассмотренные методы позволяют на новом уровне работать с проблемами, общими для всей метрологической науки. Неудивительно поэтому, что они оказались востребованными и в области нанотехнологий. В частности, с их помощью решается весьма актуальная задача по извлечению информации из квантовых и других шумов, в которых «преживает» исследуемый нанообъект.

Эти подходы могут быть использованы и в аналитической химии, важной задачей которой является обнаружение примесей вещества в сложной по составу матрице. Здесь также шумы физические (от измерительного тракта, например) и шумы химические (от примесей-загрязнителей в сложной матрице, состав которой не всегда известен) определяют границы возможностей метода или измерительной аппаратуры. Логика подсказывает, что на очереди стоит создание нового направления, которое, вероятно, можно будет назвать флуктуационной аналитической химией. Ее задачей станет обнаружение следов искомого компонента по особенностям взаимодействия малых флуктуаций матрицы и присутствующих в ней следов аналита. Причем сам аналит может быть как «мертвым», то есть молекулой, молекулярным образованием и т. д., так и живым, например бактерией, вирусом или новообразованием в биоматрице.

Дальнейшее развитие в описанном направлении, как нам кажется, позволит в недалеком будущем перевести «черный ящик» в разряд «белого», то есть ответить на наиболее сложные вопросы о природе аналитического сигнала.

1. *Нигматуллин Р.Р.* Статистика дробных моментов: новый метод количественного «прочтения» произвольной случайной последовательности // Учен. зап. Казан. ун-та. Сер. Физ.-матем. науки. – 2005. – Т. 147, кн. 2. – С. 129–161.
2. *Нигматуллин Р.Р.* Универсальная функция распределения флуктуаций сильно коррелированных систем // Нелинейный мир. – 2007. – Т. 5, № 9. – С. 572–602.
3. *Будников Г.К.* Определение следовых количеств веществ как проблема современной аналитической химии // Соросов. образов. журн. – 2000. – Т. 6, № 3. – С. 45–51.
4. *Будников Г.К.* Колонка редактора // Учен. зап. Казан. ун-та. Сер. Естеств. науки. – 2009. – Т. 151, кн. 1. – С. 7–8.

*Р.Р. Нигматуллин, Г.К. Будников*