

Информация о книге Joseph Dubrovkin «Data Compression in Spectroscopy», Cambridge Scholars Publishing. 2022, 355 pp. ISBN (10): 1-5275-8620-0 ISBN (13): 978-1-5275-8620-8

***Е.Ю. Мощенская, А.Ю. Богомолов**

*ФГБОУ ВПО «Самарский государственный технический университет»,
Российская Федерация, 443100, г. Самара, ул. Молодогвардейская, 244*

**Адрес для переписки: Елена Юрьевна Мощенская, E-mail: lmos@rambler.ru*

Поступила в редакцию 10 января 2024 г., после доработки 04 февраля 2024 г.

Широкое применение инструментальных методов анализа, в частности, аналитической спектроскопии, в последние годы привело к увеличению объема информации об изучаемых объектах. Полученные результаты эксперимента сохраняются на компьютере в виде многомерных массивов цифровых данных, которые нужно специальным образом обрабатывать, например, убирать лишний шум, визуализировать, анализировать, сжимать для эффективного хранения. Для этих целей существуют теоретические методы и алгоритмы сжатия данных. При этом, алгоритмы сжатия (распаковки) должны обеспечивать минимальное искажение исходных сигналов обработки гиперспектральных данных. Большой объем данных подразумевает комплексный анализ информации. При работе с многомерными массивами важно использование специальных методов и технологий для обработки, анализа и интерпретации гиперспектральных данных. В настоящей статье представлена информация о монографии Joseph Dubrovkin «Data Compression in Spectroscopy». Книга опубликована издательством Cambridge Scholars Publishing. Представленная монография написана специалистом с огромным опытом работы в области анализа многомерных данных, хемометрики. Книга состоит из предисловия, информации о структуре книги, списка сокращений и символов, введения для каждой из 4 глав, 8 приложений, списка литературы и предметного указателя. Большое количество примеров и упражнений иллюстрируются программами на MATLAB, а библиографические таблицы наглядно демонстрируют применение методов сжатия в промышленных и исследовательских лабораториях. Материал книги в настоящей работе обсуждается по главам. Современная монография по сжатию данных в спектроскопии будет полезна в качестве учебного пособия для студентов и преподавателей, а также, специалистам аналитических лабораторий.

Ключевые слова: аналитическая спектроскопия, алгоритмы сжатия данных, анализ многомерных данных, информация о книге.

For citation: Analitika i kontrol' [Analytics and Control], 2024, vol. 28, no. 1, pp. 57-62

DOI: 10.15826/analitika.2024.28.1.007

Information about the book by Joseph Dubrovkin “Data Compression IN Spectroscopy”, Cambridge Scholars Publishing. 2022, 355 PP. ISBN (10): 1-5275-8620-0 ISBN (13): 978-1-5275-8620-8

***E.Y. Moshchenskaya, A.Yu. Bogomolov**

*Samara State Technical University,
244 Molodogvardeyskaya Str., Samara, 443100, Russian Federation*

**Corresponding author: Elena Y. Moshchenskaya, E-mail: lmos@rambler.ru*

Submitted 10 January 2024, received in revised form 04 February 2024

Widespread use of instrumental methods of analysis, in particular analytical spectroscopy, in recent years has led to increasing volume of information about the objects being studied. Experimental results are stored

on a computer in the form of multidimensional digital data arrays that need to be processed in a special way, for example, to remove noise, visualize, analyze, and compress for efficient storage. For these purposes, there are theoretical methods and algorithms of data compression. At the same time compression (decompression) algorithms must ensure minimum distortion of the original signals for processing hyperspectral data. Large volume of data implies a comprehensive analysis of information. When working with multidimensional arrays, it is important to use special methods and technologies for processing, analyzing and interpreting hyperspectral data. This article provides information about the monograph “Data Compression in Spectroscopy” by Joseph Dubrovkin. The book was published by Cambridge Scholars Publishing. The book was written by an expert with extensive experience in the field of multivariate data analysis and chemometrics. The book consists of a preface, information about the structure of the book, a list of abbreviations and symbols, an introduction for each of 4 chapters, 8 appendices, a list of references and a subject index. A large number of examples and exercises are illustrated with MATLAB programs, and bibliographic tables clearly demonstrate the use of compression methods in industrial and research laboratories. The material of the book is discussed chapter by chapter. This modern monograph on data compression in spectroscopy will be useful as a teaching aid for students and teaching staff, as well as for specialists in analytical laboratories.

Keywords: analytical spectroscopy, data compression algorithms, multivariate data analysis, book review.

ВВЕДЕНИЕ

Книга «Data Compression in Spectroscopy» написана Иосифом Михайловичем Дубровкиным (в англоязычном написании - Joseph Dubrovkin), выдающимся специалистом в области аналитической спектроскопии, признанным экспертом в области математических методов обработки и анализа данных.

В современном мире высоких технологий инструментальные методы аналитической химии получают стремительное развитие. Сбор, хранение и обработка результатов анализа требует больших информационных ресурсов, эффективных алгоритмов и специальных программных продуктов. Исследователям приходится обрабатывать многомерные массивы данных, регистрируемые с помощью сложных современных измерительных систем. Экспериментальные данные часто представлены матрицами и более

сложными массивами, которые позволяют удобно организовывать и анализировать большие объемы информации [1]. Одним из примеров использования матриц и массивов в научных исследованиях является применение метода флуоресцентной микроскопии высокого разрешения (Super Resolution Fluorescence Microscopy) [2]. Этот метод позволяет получить изображения образцов с очень высоким пространственным разрешением. Фотоакустическое 3D-картирование, комбинационное рассеяние, с усилением на зонде (Tip-Enhanced Raman Scattering), поглощение одиночных молекул при комнатной температуре (Room-Temperature Detection of a Single Molecule's Absorption) [3-9] – это современные методы, основанные на использовании матриц и массивов, которые находят широкое применение в научных исследованиях. Эффективные алгоритмы сжатия/распаковки должны обеспечивать минимальное искажение исходных сигналов. В теории информации и обработке сигналов данные сжимаются путем кодирования и/или преобразования в компактное представление [10].

Одним из важных инструментов в хемометрике является спектральное разложение матриц. Этот метод позволяет извлечь наиболее полезную химическую информацию из многомерных данных спектроскопических измерений. [11]. Сжатие спектроскопических данных является важным этапом в аналитической науке. Оно позволяет уменьшить объем данных, сохраняя при этом информацию, необходимую для проведения анализа. Процесс сжатия данных в спектроскопии прошел долгий путь развития, начиная от выбора оптимальных спектральных переменных до использования современных сенсоров [12]. Существует множество методов моделирования, алгоритмов обработки и интерпретации данных, гиперспектральных изображений [13].

Для решения конкретных задач приходится изучать множество публикаций, чтобы найти оптимальные методы и алгоритмы. В рецензируемой монографии представлены наиболее эффективные

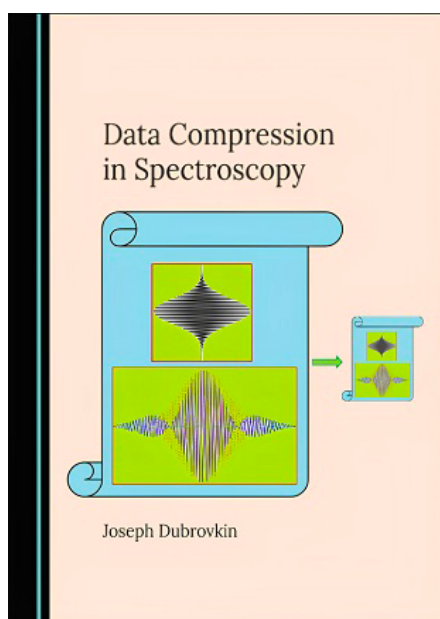


Рис. 1. Обложка монографии “Data Compression in Spectroscopy”

Fig. 1. Cover of the “Data Compression In Spectroscopy” monograph

теоретические методы и алгоритмы сжатия спектров в рамках единого учебника, отражающие 42 публикации с участием автора за период с 1978 по 2022 г. Для практического освоения материала читателю предлагается выполнить упражнения, используя программы, реализованные в среде MATLAB.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ

Книга состоит из четырех частей. Во ввводной **первой части** обсуждаются свойства типичных спектроскопических данных, получаемых аналитических сигналов, а также, элементы теории обработки сигналов. Первая часть называется «Сигналы и шум в спектроскопии» (Signals And Noise In Spectroscopy).

Введение первой части посвящено современным спектральным приборам, которые позволяют получить результаты измерений в виде одномерных или многомерных наборов данных. Для эффективного сжатия таких данных требуется знание их внутренней структуры. Глава первая посвящена формам пиков в спектроскопии, а также, в хроматографии, описаны общепринятая модель аналитического сигнала, принципы и методы аппроксимации пиков с учетом инструментальных искажений. Формы спектральных пиков, измеряемых на практике, из-за совместного воздействия факторов инструментальных искажений изменяются, поэтому спектр представляет собой свертку неискаженного («истинного») спектра с аппаратной функцией. Во второй главе указаны возможные источники систематических и случайных погрешностей в спектроскопии. Случайный шум, возникающий в различных частях спектрометра, главным образом в детекторе излучения, а также, независимый от детектора шум, механические вибрации оптических приборов и различные виды нестабильностей, вносят случайную погрешность в результаты измерений. Математический анализ таких источников погрешностей может быть выполнен лишь в частных случаях с использованием соответствующих допущений, упрощающих решение задачи. В третьей главе изложены информационно-теоретические аспекты линейно-преобразованных спектров, рассмотрены вопросы об информативности спектров и их производных второго порядка с математической точки зрения, а также о потерях информации при линейном преобразовании параметров спектров. В заключение читателю предлагается с помощью программ на MATLAB, приведенных в Приложении Н, воспроизвести численные данные, полученные в этой главе. Четвертая глава посвящена большим данным в аналитической химии. В этой главе разобраны основные принципы использования подхода к большим данным (Big Data Approach – BDA) в аналитической химии. Рассмотрены алгоритмические и инструментальные аспекты компьютеризированных аналитических систем и возможные приложения BDA, перспективы аналитического контроля в промышленности на основе стратегии прогнозной аналитики. В конце главы приведены

краткие табличные описания полезных новых статей, посвященных проблеме больших данных.

Вторая часть книги называется «Введение в сжатие данных» (Introduction To Data Compression). Во введении второй части сообщается о том, что цель этой части – облегчить понимание многочисленных методов сжатия спектроскопической информации, описанных в последующих главах. В первой главе описаны цепи Маркова для моделирования источников информации, в которых вероятность каждого события зависит только от состояния, достигнутого в предыдущем событии, а также, алгоритм Хаффмана (оптимального префиксного кодирования алфавита с минимальной избыточностью). Приведены несколько упражнений для самостоятельного решения. Вторая глава – о способах подавления различного шума в изображениях. Шум в изображениях присутствует на всех этапах обработки изображения (получение, сжатие, передача и анализ), описаны методы шумоподавления для изображений, рассмотрены их достоинства и недостатки. Третья глава посвящена алгоритмам сжатия изображений, которые пояснены на примерах, рисунках, блок-схемах. В четвертой главе «Спектральное изображение» (Spectral Imaging) автор приводит краткое описание инструментов визуализации гиперспектральных данных. Он указывает, что алгоритмическая база этих методов может быть сложной и требует глубоких знаний в области математики и обработки сигналов. Для тех, кто желает более глубоко изучить эту тему, автор предлагает ссылки на статьи и книги. В пятой главе «Сжатое зондирование» (Compressed Sensing) кратко изложены несколько свойств сенсорных матриц, определяющих их способность к сжатию данных.

Третья часть книги посвящена теме «Одномерная аналитическая спектрометрия на основе линейных преобразований» (Linear Transforms-Based One Dimensional Analytical Spectrometry). Во введении обозначены темы, которым уделялось особое внимание, в частности, производной спектрометрии, методам алгебраической коррекции фона, дискретным преобразованиям Фурье и Уолша-Адамара, методу статистических моментов. В первой главе «Общие понятия аналитической спектрометрии на основе линейных преобразований» (General Concepts Of The Linear Transforms-Based Analytical Spectrometry) рассмотрен метод статистических моментов, который является важным инструментом в спектроскопии для анализа и восстановления формы спектральных составляющих. Обосновывается, что метод не пригоден для целей сжатия в широком смысле, так как линейное преобразование обычных спектральных данных в набор их моментов необратимо. Глава вторая носит название «Методы спектроскопии на основе интерферограмм» (Interferogram-Based Methods In Spectroscopy). Интерферограмма (Фурье-преобразованный спектр) восстанавливается с помощью обратного преобразования Фурье в координатах интенсивность-волновое число. Приведенная

во второй главе Таблица 3.2-1 включает краткое описание некоторых аналитических применений методов, основанных на интерферограммах. В третьей главе «Методы Фурье-преобразования в спектроскопии» (Fourier Transform-Based Methods In Spectroscopy) подробно рассмотрено дискретное преобразование Фурье (Discrete Fourier Transform – DFT) для подавления полиномиального фона. Графически в приложении MATLAB и упражнениях для читателя, указаны достоинства и недостатки метода. Некоторые аналитические приложения методов DFT приведены в таблице со ссылками на литературу.

В главе четвертой «Методы вейвлет-преобразования в спектроскопии» (Wavelet Transform-Based Methods In Spectroscopy) автором совершен небольшой исторический экскурс. С 1989 года вейвлет-преобразования (Wavelet Transform – WT) широко применяются в аналитической химии для различных целей, включая шумоподавление и сжатие данных при анализе хроматографических данных, в том числе, высокоэффективной жидкостной хроматографии, а также, УФ-, видимой, ИК-, и ЯМР-спектроскопии, масс-спектрометрии, вольтамперометрии. Показано, что определение параметров моделей на основе методов многомасштабного эмпирического моделирования позволяет выбрать наиболее релевантные признаки, обеспечивающие более точные и физически интерпретируемые модели. Таблица 3.4-1 «Некоторые приложения методов вейвлет-преобразования в спектроскопическом анализе» (Some Applications Of WT Methods In Spectroscopic Analysis) является полезным инструментом для обращения к первоисточникам, ссылки на которые приведены в ней. Глава пятая носит название «Ортогональные полиномы в аналитической спектроскопии» (Orthogonal Polynomials In Analytical Spectrometry). Ортогональные полиномиальные методы подавления мешающего сигнала (фона) широко применяли в фармацевтическом спектрофотометрическом анализе как пример аналитического линейного преобразования. Поскольку количество исходных аналитических точек было небольшим, сжатие данных также было незначительным. Приложение А3 описывает теорию ортогональных многочленов в рамках обобщенного ряда Фурье. В начале этой главы приведены аналитические методы на основе ортогональных многочленов с использованием численных экспериментов, поставляемых с программами на MATLAB. А далее можно ознакомиться с библиографическим обзором по этой теме: приведены таблицы со ссылками на работы, использующие ортогональные полиномы в фармацевтическом спектрофотометрическом анализе и в спектрометрическом анализе. В шестой главе «Методы, основанные на преобразовании Уолша-Адамара» (Walsh-Hadamard Transform-Based Methods In Spectroscopy) обосновывается идея замены преобразования Фурье интерферограммы в спектрометрах Фурье на преобразование Уолша-

Адамара. Глава седьмая – «Линейные преобразования многомерных градуировочных моделей» (Linear Transformations Of Multivariate Calibration Models). Чтобы уменьшить время обработки данных, которое сильно зависит от размера модели, необходимо сжатие данных. Наиболее распространенный метод – сжатие с помощью кодирования, при условии, что сжатые данные должны быть восстановлены с минимальными искажениями ценной информации. Применение хемометрических методов в анализе многомерных данных позволило существенно устранить недостатки классических методик градуировки. Одним из методов, используемых в аналитической спектроскопии, является метод регрессии на основе многомерных вейвлетов. В таблице 3.7-3 представлены некоторые приложения этого метода в аналитической спектроскопии. Глава восьмая называется «Представление спектров сплайнами» (Representation Of Spectra By Splines). Суть функционального метода состоит в том, что непрерывная сглаженная кривая спектра «сшивается» из полиномиальных отрезков (сплайнов), полученных полиномиальной аппроксимацией на неравномерной сетке узлов.

Часть четвертая – «Многомерная аналитическая спектрометрия на основе линейных преобразований» (Linear Transforms-Based Multidimensional Analytical Spectrometry). Во введении кратко изложено содержание данной части – сжатие многомерных массивов спектроскопических данных (с размерностью более двух), полученных корреляционными методами, визуализирующими методами, включая измерения с временным и пространственным разрешением и гибридными аналитическими методами (Hyphenated Analytical Devices). В первой главе «Корреляционная спектроскопия» (Correlation Spectroscopy) приведена упрощенная схема корреляционной флуоресцентной спектроскопии. Автор утверждает, что обобщенная двумерная корреляционная спектроскопия (2D Correlation Spectroscopy – 2DCOS) проще, чем ее одномерный аналог, состоящий из множества перекрывающихся пиков, а также приведены ссылки на несколько статей, посвященных 2DCOS [14, 15]. Автором также описан имитационный эксперимент, в котором моделировалась матрица ИК-спектров белков как сумма пяти Лоренцевых полос с зависящей от времени интенсивностью. Читателю предлагается воспроизвести другой имитационный эксперимент и убедиться в малоэффективности метода низкоранговой аппроксимации матриц (The Low Rank Approximation (LRA) of matrices) для шумоподавления с помощью программы testSimNoda.m.

Глава вторая называется «Сжатое зондирование в спектроскопии» (Compressed Sensing in Spectroscopy). Метод сжатого зондирования (Compressed Sensing – CS) позволяет осуществлять измерения с использованием спектрального прибора и получать информацию о спектральных характеристиках сигнала. Сигнал можно восстановить с высокой точностью

даже при использовании неполной информации, исходя из ограниченного количества измерений, что достигается с помощью разреживающих преобразований или алгоритмов. Однако, следует отметить, что выбор сенсорной матрицы играет критическую роль в данном методе, поскольку для достижения высокой точности восстановления необходимо правильно подбирать сенсорную матрицу [16]. В таблице 4.2-1 представлены примеры приложений, основанных на методе сжатого зондирования в спектроскопии. В третьей главе «Сжатие многомерных данных» (Compression of Multidimensional Data) показано, что метод PARAFAC (обобщение метода главных компонент для массивов более высокого порядка [17]) как способ уменьшения размерности, примененный к сжатию изображений, имеет значительные преимущества перед другими алгоритмами, такими как метод главных компонент (Principal Component Analysis – PCA). Рассмотрен метод низкорангового приближения LRA для сжатия данных. В главе четвертой «Матричное сжатие на основе низкорангового приближения в сочетании с Быстрым преобразованием Фурье сингулярных векторов» (Matrix Compression Based On The Low Rank Approximation Combined With The FFT Of The Singular Vectors) автор приводит новую разработку улучшенного алгоритма сжатия матрицы спектральных двумерных данных, основанного на низкоранговой аппроксимации и быстром преобразовании Фурье сингулярных векторов (Fast Fourier Transform Of The Singular Vectors) [18].

Практически все алгоритмы оценены с помощью численного эксперимента, математически обоснованы их основные теоретические положения, указаны достоинства и недостатки. Представленные в книге упражнения на языке MATLAB помогают читателю быстрее и глубже усваивать сложный материал. Такой подход является для автора уже некоторой традицией [19, 20].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, автор подготовил современную научную монографию высокого качества, представляющую интерес, как для начинающих, так и для квалифицированных специалистов. Автором был проработан обширный материал, собрано огромное количество современных статей по алгоритмам сжатия, теории анализа больших данных, обработке сигналов, практическому применению методов. Для желающих углубить знания, приведены ссылки, по которым можно найти более подробную информацию по методам и алгоритмам. Чёткое изложение материала позволяет рекомендовать книгу в качестве учебного пособия для студентов, магистрантов и аспирантов. По мнению авторов книга будет востребована в университетах, научно-исследовательских институтах, а также в лабораториях промышленных предприятий.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема №FSSE-2023-0003) в рамках государственного задания Самарского государственного технического университета.

ACKNOWLEDGEMENTS

The work was carried out with the support of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (topic No. FSSE-2023-0003) as a part of the state assignment of the Samara State Technical University.

ЛИТЕРАТУРА

- Smilde A., Bro R., Geladi P. Multi-way Analysis: Applications in the Chemical Sciences. Chichester: John Wiley & Sons Ltd, 2004. 396 p.
- Huang B., Bates M., Zhuang X. Super resolution fluorescence microscopy // *Annu Rev Biochem.* 2009; Vol. 78. P. 993–1016.
- Гужов В.И., Марченко И.О., Трубилина Е.Е. Повышение пространственного разрешения сигналов в оптических системах // *Компьютерная оптика.* 2022. Т. 46, № 1. С. 65–70.
- Wang L. (Ed.). Photoacoustic Imaging and Spectroscopy. Boca Raton: CRC Press, 2017, 536 p.
- Tip-enhanced Raman spectroscopy: tip-related issues / Huang T.X. [et al.] // *Anal Bioanal Chem.* 2015. V.407, № 27. P. 8177–8195.
- Tip-Enhanced Raman Spectromicroscopy of Co(II)-Tetraphenylporphyrin on Au(111): Toward the Chemists' Microscope / Lee J. [et al.] // *Acs Nano.* 2017. V. 11, № 11. P. 11466–11474.
- Micro-Refractometry and Local-Field Mapping with Single Molecules / Naumov A.V. [et al.] // *Nano Lett.* 2018. V. 18, №10. P. 6129–6134.
- Hu S., Maslov K., Wang L.V. Three-dimensional Optical-resolution Photoacoustic Microscopy // *J. Vis. Exp.* 2011. № 51.
- Room-Temperature Detection of a Single Molecule's Absorption by Photothermal Contrast / Gaiduk A. [et al.] // *SCI-ENCE.* 2010. V. 330. № 6002. P. 353–356.
- Sayood K. Introduction to Data Compression. Fifth Edition. Waltham: Elsevier. 2018. 703 p.
- Mark H., Workman Jr. Chemometrics in Spectroscopy. 2nd Edition. London: Elsevier. 2018. 1090 p.
- Богомолов А.Ю. Оптические мультисенсорные системы в аналитической спектроскопии. // *Ж. аналит. химии.* 2022. Т. 77, № 3. С. 227–247.
- Manolakis D.G., Lockwood R.B., Cooley T.W. Hyperspectral Imaging Remote Sensing: Physics, Sensors, and Algorithms. 1st Edition. Cambridge: Cambridge University Press. 2016. 706 p.
- Dubrovkin J. Effectiveness of spectral coordinate transformation method in evaluating the unknown spectral parameters // *J. Appl. Spectrosc.* 1983. V. 38. P. 191–194.
- Noda I., Ozaki Y. Two-Dimensional Correlation Spectroscopy: Applications in Vibrational and Optical Spectroscopy. Chichester: John Wiley & Sons Ltd. 2004. 312 p.
- Gamez G. Compressed sensing in spectroscopy for chemical analysis // *J. Anal. At. Spectrom.* 2016. V. 31, № 11. P. 2165–2174.

17. Bro R. PARAFAC. Tutorial and applications // *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*. 1997. V. 38, № 2. P. 149-171.
18. Dubrovkin J. A Novel Compression Method of Spectral Data Matrix Based on the Low-Rank Approximation and the Fast Fourier Transform of the Singular Vectors // *Appl. Spectrosc.* 2022. V. 76, № 3. P. 369-378.
19. Dubrovkin J. *Mathematical Processing of Spectral Data in Analytical Chemistry: A Guide to Error Analysis*. Cambridge: Cambridge Scholars Publishing. 2018. 380 p.
20. Dubrovkin J. *Derivative Spectroscopy*. Cambridge: publ. ambridge Scholars Publishing. 2021. 456 p.

REFERENCES

1. Smilde A., Bro R., Geladi P. *Multi-way Analysis: Applications in the Chemical Sciences*. Chichester: John Wiley & Sons Ltd, 2004. 396 p.
2. Huang B., Bates M., Zhuang X. Super resolution fluorescence microscopy. *Annu Rev Biochem.*, 2009, vol. 78, pp. 993–1016. doi: 10.1146/annurev.biochem.77.061906.092014.
3. Guzhov V.I., Marchenko I. O., Trubilina E. E. [Increasing the spatial resolution of signals in optical systems]. *Komp'yuternaja optika [Computer Optics]*, 2022, vol. 46, no. 1, pp. 65-70. doi: 10.18287/2412-6179-CO-924. (in Russian).
4. Wang L. (Ed.). *Photoacoustic Imaging and Spectroscopy*. Boca Raton: CRC Press, 2017. 536 p.
5. Huang T.X., Huang S.C., Li M.H., Zeng Z.C., Wang X., Ren B. Tip-enhanced Raman spectroscopy: tip-related issues. *Anal Bioanal Chem.*, 2015, vol. 407, no. 27, pp. 8177-8195. doi: 10.1007/s00216-015-8968-8.
6. Lee J, Tallarida N, Chen X, Liu P, Jensen L, Apkarian V.A. Tip-Enhanced Raman Spectromicroscopy of Co(II)-Tetraphenylporphyrin on Au(111): Toward the Chemists' Microscope. *Acs Nano*, 2017, vol. 11, no. 11, pp. 11466-11474. doi: 10.1021/Acsnano.7B06183.
7. Naumov A.V., Gorshelev A.A., Gladush M.G., Anikushina T.A., Golovanova A.V., Köhler J., Kador L. Micro-Refractometry and Local-Field Mapping with Single Molecules. *Nano Lett.*, 2018, vol. 18, no. 10, pp. 6129-6134. doi: 10.1021/acs.nanolett.8b01753.

8. Hu S., Maslov K., Wang L.V. Three-dimensional Optical-resolution Photoacoustic Microscopy. *J. Vis. Exp.*, 2011, no. 51. doi: 10.3791/2729.
9. Gaiduk A., Yorulmaz M., Ruijgrok P.V., Orrit M. Room-Temperature Detection of a Single Molecule's Absorption by Photothermal Contrast. *SCIENCE*, 2010, vol. 330, no. 6002, pp. 353-356. doi: 10.1126/science.1195475.
10. Sayood K. *Introduction to Data Compression. Fifth Edition*. Waltham: Elsevier, 2018. 703 p.
11. Mark H., Workman Jr. *Chemometrics in Spectroscopy*. 2nd Edition. Elsevier, 2018. 1090 p.
12. Bogomolov A.Yu. [Optical Multisensor Systems in Analytical Spectroscopy]. *Zh. analit. khimii [J. Anal. Chem.]*, 2022, vol. 77, no. 3, pp. 277-294. (in Russian).
13. Manolakis D.G., Lockwood R.B., Cooley T.W. *Hyperspectral Imaging Remote Sensing: Physics, Sensors, and Algorithms. 1st Edition*. Cambridge: Cambridge University Press, 2016. 706 p.
14. Dubrovkin J. Effectiveness of spectral coordinate transformation method in evaluating the unknown spectral parameters. *J. Appl. Spectrosc.*, 1983, vol. 38, pp. 191–194.
15. Noda I., Ozaki Y. *Two-Dimensional Correlation Spectroscopy: Applications in Vibrational and Optical Spectroscopy*. Chichester: John Wiley & Sons Ltd, 2004. 312 p.
16. Gamez G. Compressed sensing in spectroscopy for chemical analysis. *J. Anal. At. Spectrom.* 2016, vol. 31, no. 11, pp. 2165-2174.
17. Bro R. PARAFAC. Tutorial and applications. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*. 1997, vol. 38, no. 2, pp. 149-171. doi: [https://doi.org/10.1016/S0169-7439\(97\)00032-4](https://doi.org/10.1016/S0169-7439(97)00032-4).
18. Dubrovkin J. A Novel Compression Method of Spectral Data Matrix Based on the Low-Rank Approximation and the Fast Fourier Transform of the Singular Vectors. *Appl. Spectrosc.*, 2022, vol. 76, no. 3, pp. 369-378.
19. Dubrovkin J. *Mathematical Processing of Spectral Data in Analytical Chemistry: A Guide to Error Analysis*. Cambridge: Cambridge Scholars Publishing, 2018. 380 p.
20. Dubrovkin J. *Derivative Spectroscopy*. Cambridge: Cambridge Scholars Publishing, 2021. 456 p.