

ИНФОРМАЦИОННО-АЛГОРИТМИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ПРОЦЕССОВ ИК-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Научная статья

Кузнецов А.С.^{1,*}, Разяпова Н.Ю.², Разливинская С.В.³¹ ORCID : 0000-0003-1569-4765;¹ Российский государственный социальный университет, Москва, Российская Федерация^{2,3} МИРЭА - Российский технологический университет, Москва, Российская Федерация

* Корреспондирующий автор (askgoogle[at]internet.ru)

Аннотация

В данной статье подробно рассмотрены основные вопросы, касающиеся разработки информационного и алгоритмического обеспечения процессов организации и проведения ик-спектрометрических исследований органических веществ. На основе процедуры системного подхода были рассмотрены основные этапы организации, проведения и обработки результатов научных исследований в области ик-спектрометрии. Построены вербальная и процессная модели проведения спектрометрических испытаний. Выделены четыре отдельные группы процессов. Для каждой функциональной группы процессов приведены составляющие конкретные подпроцессы. Выполнена формализация процессов испытаний на основе комплекса функциональных моделей – набора структурированных диаграмм, построенных по методологии функционального моделирования SADT/IDEF0 [1]. Построена обобщенная функционально-технологическая схема процесса ик-спектрометрии. Выполнена функциональная декомпозиция обобщенной функционально-технологической схемы ик-спектрометрических испытаний. Проведена детализация процессов испытаний. Рассмотрено создание информационного и алгоритмического обеспечения спектрометрических исследований органических веществ. Приведено формализованное описание процессов организации и проведения ик-спектрометрических исследований веществ в виде функциональной блок-схемы алгоритма управления. Предложенное алгоритмическое и информационное обеспечение может использоваться в качестве модели информационной поддержки процессов выработки, подготовки и принятия управляющих решений при организации и проведении научных исследований по идентификации – качественному анализу веществ.

Ключевые слова: информационное обеспечение, алгоритмическое обеспечение, модель информационной поддержки, формализация процессов ик-спектрометрии органических веществ.

INFORMATION AND ALGORITHMIC SUPPORT OF IR SPECTROMETRIC RESEARCH PROCESSES

Research article

Kuznetsov A.S.^{1,*}, Razyapova N.Y.², Razlivinskaya S.V.³¹ ORCID : 0000-0003-1569-4765;¹ Russian Buggetaty State Social University, Moscow, Russian Federation^{2,3} MIREA - Russian technological university, Moscow, Russian Federation

* Corresponding author (askgoogle[at]internet.ru)

Abstract

In this article, the main issues concerning the development of information and algorithmic support of the processes of organization and carrying out of IR spectrometric studies of organic substances are examined in detail. On the basis of the system approach procedure, the main stages of organization, conducting and processing the results of scientific research in the field of IR spectrometry were reviewed. The verbal and process models of spectrometric testing have been constructed. Four separate groups of processes were singled out. For each functional group of processes, the constituent specific subprocesses are given. Formalization of testing processes on the basis of a set of functional models – a set of structured diagrams built according to the methodology of functional modelling SADT/IDEF0 [1]. A generalized functional-technological scheme of the process of IR spectrometry was built. Functional decomposition of the generalized functional-technological scheme of IR spectrometry tests was performed. The detailing of testing processes is carried out. Creation of information and algorithmic support of spectrometric studies of organic substances is examined. The formalized description of processes of organization and carrying out of IR spectrometric researches of substances in the form of functional block diagram of control algorithm is given. The proposed algorithmic and information support can be used as a model of information support of the processes of development, preparation and making control decisions in the organization and conduct of scientific research on identification – qualitative analysis of substances.

Keywords: information support, algorithmic support, information support model, formalization of processes of IR spectrometry of organic substances.

Введение

На сегодняшний день метод ик-спектрометрии является одним из основных методов изучения строения органических соединений. Ик-спектрограмма состояния, полученная в ходе эксперимента, дает исследователю возможность идентификации различных органических веществ, позволяет изучать фазовые переходы и структуры углеводородов. Данный метод составляет основу процедуры современного экспресс-анализа показателей качества нефти и продуктов нефтехимии [1].

При организации и проведении ик-спектрометрических исследований органических веществ применяется методология системного подхода к описанию процессов и структурного анализа для выполнения детализации составляющих функциональных подпроцессов [2], [3].

Организация планирования и выполнения научных исследований является важнейшей задачей. Четкое планирование объема испытаний, строгое следование методикам проведения эксперимента, грамотная интерпретация полученных результатов – все это – неотъемлемые составляющие успешной и продуктивной научной работы [4]. Выполнение экспериментальных исследований сопряжено с анализом и обработкой большого количества разнородной информации. Это нормативные документы по планированию и организации проведения эксперимента, методики испытаний, технические характеристики приборов и узлов, классификаторы методов научных исследований, рекомендации по обработке результатов проведенных опытов, а также их качественной и количественной интерпретации. В современных реалиях планирование, организация, проведение и обработка результатов экспериментальной работы невозможно без применения компьютерных методов и технологий по управлению информацией. Это объясняет необходимость разработки информационно-алгоритмического обеспечения процессов выполнения всех стадий научного исследования. Целью данной научной работы является разработка формализованного описания процессов ик-спектрометрических исследований органических веществ в виде алгоритмического и информационного обеспечения выполнения исследований и обработки полученных результатов. Данный подход представляет собой инструмент информационной поддержки процессов выработки, подготовки и принятия управляющих решений при организации и проведении научных исследований по идентификации, а также качественному анализу органических веществ.

Основная часть

2.1. Вербальная модель организации и проведения спектрометрических испытаний веществ

Ик-спектроскопия – научный метод проведения исследований, заключающийся в проведении процессов идентификации различных веществ, качественный анализ на основе малой пробы. Данный метод анализа основан на эффекте взаимодействия инфракрасного излучения с веществами. Экспериментальным результатом аналитического метода ИК-спектроскопии является инфракрасный спектр – функция интенсивности пропущенного инфракрасного излучения от его частоты. Обычно инфракрасный спектр содержит ряд полос поглощения, по положению и относительной интенсивности которых делается вывод о строении изучаемого образца. Такой подход стал возможен благодаря большому количеству накопленной экспериментальной информации: существуют специальные таблицы, связывающие частоты поглощения с наличием в образце определённых молекулярных фрагментов. Созданы также базы ИК-спектров некоторых классов соединений, которые позволяют автоматически сравнивать спектр неизвестного анализируемого вещества с уже известными и таким образом идентифицировать это вещество.

Для снятия спектров используется специальный прибор – ик-спектрометр. Для проведения подобных испытаний существует специальный регламент [5]. Он регламентирует методику проведения испытаний: условия проведения, используемое оборудование, число повторных наблюдений в параллельном опыте, обработку и интерпретацию полученных экспериментальных данных процесса [6], [7], [8]. Большой объем данных и параметров исследований диктует необходимость систематизации всей информации посредством построения информационного и алгоритмического обеспечения процессов испытаний как инструмента информационной поддержки процессов принятия решений и управления спектрометрической информацией [9]. Научная новизна и оригинальность статьи заключаются в применении метода структурного системного анализа к описанию процессов организации и проведения ик-спектрометрических исследований органических веществ, а также в создании формализованного описания ик-спектрометрических исследований на основе алгоритма действий (представлен в виде блок-схемы) и комплекса визуальных информационных моделей детализации составляющих подпроцессов.

2.2. Информационное обеспечение процессов спектрометрических испытаний веществ

В общем случае процессная информационная модель содержит в себе детализацию сведений по планированию, контролю и управлению экспериментальными исследованиями. Была построена процессная информационная модель организации и проведения ик-спектрометрических исследований. Построение процессной модели организации, проведения и управления спектрометрическими исследованиями предполагает постановку задачи проведения идентификации веществ, их качественного и количественного определения в исследуемой пробе, а также анализ результатов интерпретации полученных ик-спектров, для этого необходимо выделение групп процессов и их формализованное описание [10], [11].

На рисунке 1 представлена информационная модель процессов идентификации (качественного и количественного анализа веществ) на основе ик-спектрометрических исследований. Выделены четыре конкретных группы процессов. Группа процессов № 1 содержит в себе детализацию информации о приборной базе процессов ик-спектрометрии. Она включает в себя подпроцессы выбора средств инструментального анализа веществ и материалов, а также подпроцесс, описывающий инструкции по применению выбранных средств инструментального анализа.

Вторая группа процессной модели управления экспериментальными исследованиями отвечает за реализацию двух отдельных функций – подпроцессов планирования и контроля проведения экспериментальных работ по снятию ик-спектров.

Третья группа процессов представляет собой блок моделирования – основу создания формализованного строгого описания процессов экспериментальных исследований на основе вербальных, математических и функциональных моделей процессов получения ик-спектрограмм для идентификации веществ. Создание подобного комплекса моделей необходимо для организации функций контроля и управления спектрографической информацией.

Четвертая группа процессов реализует подходы к управлению изменениями – отслеживание изменений и корректировки процессов. Группа включает два подпроцесса: функциональный подпроцесс актуализации сведений и параметров ик-спектрометрических исследований; второй подпроцесс, реализующий функцию управления данными по ик-спектрам веществ и их запись в информационную базу данных спектрометрических испытаний веществ и материалов [10], [11], [12].



Рисунок 1 - Процессная модель управления процессами ик-спектрометрического анализа веществ

После выделения групп процессов и синтеза процессной модели управления спектрометрическими исследованиями веществ и материалов было построено информационное и алгоритмическое обеспечение данных процессов. Информационное обеспечение представлено в виде функциональных моделей, построенных в соответствии с методологическими принципами функционального моделирования [12], [13]. Первоначально была выполнена обобщенная функциональная технологическая схема управления процессами ик-спектрометрического анализа веществ. Данная модель приведена на рисунке 2. В функциональной диаграмме реализовано четыре типа стрелок согласно методологии информационного моделирования: вход, выход, исполнитель (механизм) и управление [13], [14]. На входе данной диаграммы представлена информация об исходной смеси веществ. Задача проведения ик-спектроскопических исследований выполняется отдельным конкретным исполнителем в химической лаборатории (стрелка – механизм, исполнитель процесса). Управление в данной модели происходит на основании нормативных документов, регламентирующих проведение исследований: это технический регламент, паспорт прибора – ик-спектрометра, а также утвержденная методика испытаний. Выходные стрелки представляют собой потоки информации о результатах испытаний: идентификации (качественного определения) вещества, и количественного анализа (содержание в пробе).

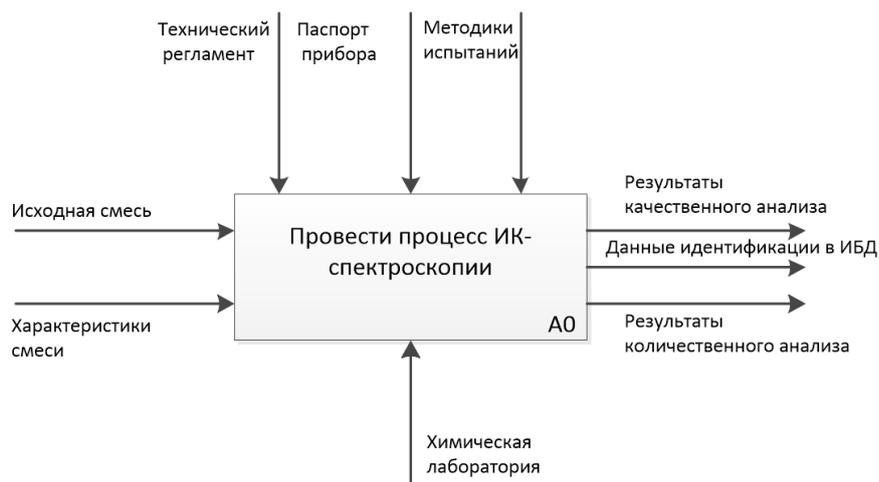


Рисунок 2 - Диаграмма уровня А-0. Обобщенная функционально-технологическая схема управления процессами ик-спектрометрического анализа веществ

Для повышения уровня детализации информации о процессах ик-спектроскопических исследований выполненная на рисунке 2 обобщенная диаграмма была подвергнута дальнейшей функциональной декомпозиции. В ходе проведения процесса декомпозиции выделено шесть отдельных функциональных блоков – характеристик проводимых процессов. Полученная в ходе функциональной декомпозиции обобщенной «родительской» диаграммы дочерняя диаграмма приведена на рисунке 3.

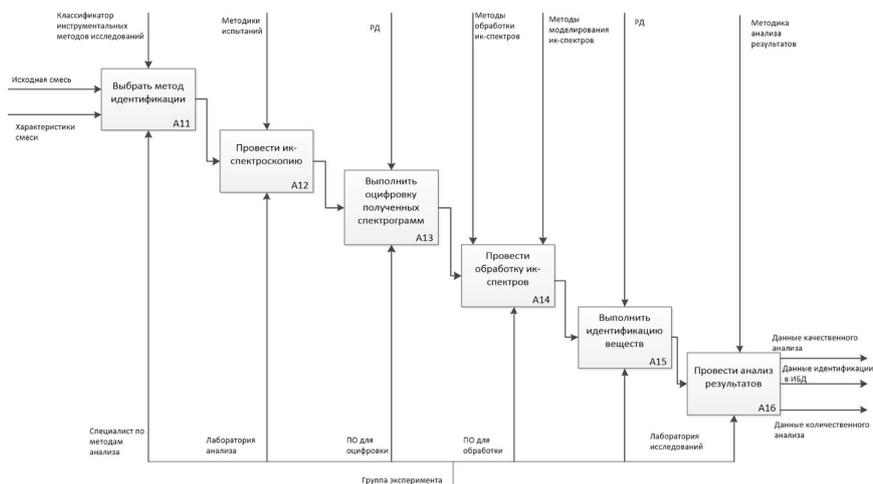


Рисунок 3 - Декомпозиция обобщенной функционально-технологической схемы управления процессами ик-спектрометрического анализа веществ

Рисунок 3 наглядно иллюстрирует детализацию процессов организации и проведения ик-спектрометрических исследований веществ и материалов. На входе имеется некая исходная смесь. Для идентификации вещества следует сначала выбрать метод определения его – аналитический метод, выбранный на основе классификатора физико-химических методов анализа. Процесс выбора реализуется отдельным исполнителем – специалистов по методам физико-химического анализа. Далее необходимо провести процесс снятия ик-спектров по выбранной методике проведения испытаний. Данный процесс реализуется в лаборатории физико-химического анализа. Следующим шагом является оцифровка полученных спектров при помощи специального программного обеспечения. Данный процесс может быть совмещён со снятием спектральных характеристик, или выполнен после получения изображения пиков. После оцифровки полученных результатов производится их обработка – очистка шума и моделирование в комплексах программ. Далее проводится идентификация веществ на основе совпадения пиков спектрограмм.

Заключительный этап – анализ результатов испытаний, также проводится в лаборатории и содержит несколько процедур: анализ данных идентификации: качественный анализ – определение индивидуальных веществ, и количественный анализ – элементный состав и количественное содержание вещества в пробах, все операции выполняются согласно методике испытаний. Также проводится запись полученных данных в информационную базу данных (ИБД).

2.3. Алгоритмическое обеспечение процессов выполнения спектрометрических исследований веществ

На основе анализа и систематизации информации о процессах подготовки, организации, проведения, контроля и управления спектрометрическими испытаниями веществ и материалов, было построено алгоритмическое обеспечение цепочки процессов организации, проведения и управления ик-спектрометрическим анализом веществ. Графическая интерпретация алгоритмического обеспечения процессов организации и проведения ик-спектрометрического анализа приведена на рисунке 4.

Предложенное на рисунке 4 алгоритмическое обеспечение включает в себя основные этапы работ по планированию, организации, контролю и управлению и может быть использовано в качестве модели управления процессами ик-спектрометрических испытаний веществ и материалов.

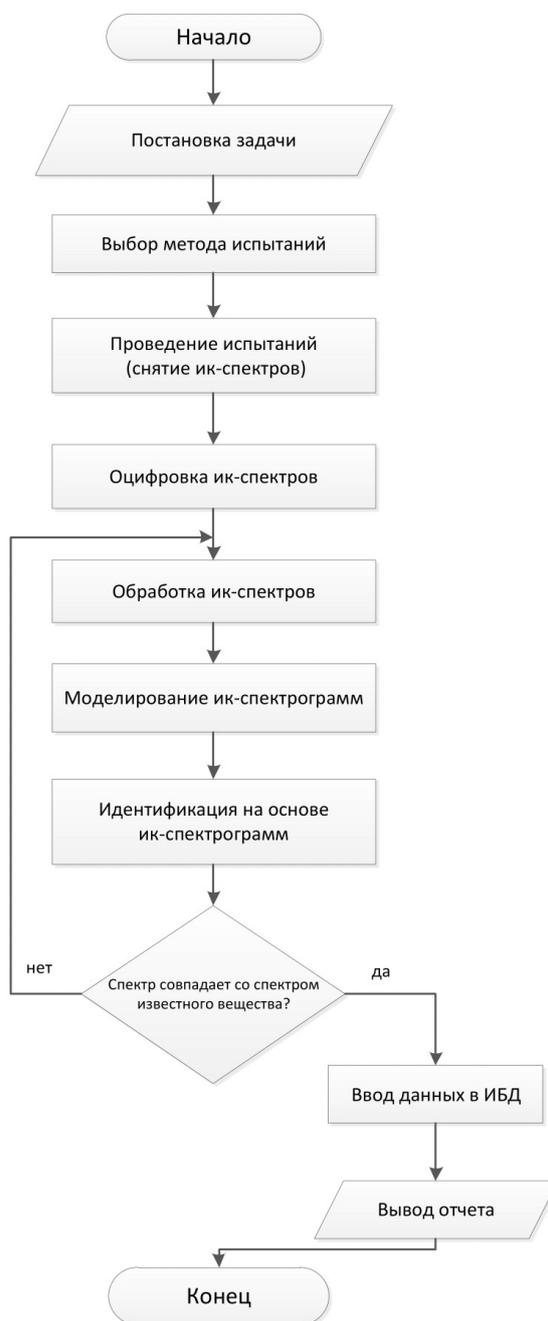


Рисунок 4 - Структурно-функциональная блок-схема организации и проведения процессов ик-спектрометрического анализа веществ

Заключение

В ходе проведения теоретических исследований было создано формализованное описание процессов проведения и обработки результатов ик-спектрометрических исследований органических веществ.

Построение комплекса информационных моделей процессов является эффективным инструментом формализации знаний по проведению экспериментальных исследований в области снятия ик-спектров веществ и материалов. Приведенное формализованное описание процедур спектрометрических испытаний может быть использовано в качестве инструмента интеллектуальной информационной поддержки процесса принятия управленческих решений в химических лабораториях контроля качества, занимающихся проблема идентификации веществ с использованием методов ик-спектроскопии.

Конфликт интересов

Не указан.

Рецензия

Сообщество рецензентов Международного научно-исследовательского журнала

Conflict of Interest

None declared.

Review

International Research Journal Reviewers Community

Список литературы / References

1. Пономарев А.Б. Методология научных исследований / А.Б. Пономарев, Э.А. Пикулева. — Пермь: Изд-во Перм. нац. исслед. политехн. университета, 2014. — 186 с.
2. Меликова А.Я. Ик-спектроскопические методы для определения протеинов / А.Я. Меликова // Вестник Башкирского университета. — 2023. — № 1. — URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/ik-spektroskopicheskie-metody-dlya-opredeleniya-proteinov> (дата обращения: 31.03.2024).
3. Зайцев Е.В. Обработка инфракрасных спектров и спектров комбинационного рассеяния с помощью программного комплекса, созданного в среде Wolfram Mathematica / Е.В. Зайцев // Успехи в химии и химической технологии. — 2017. — № 8(189). — URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/obrabotka-infrakrasnyh-spektrov-i-spektrov-kombinatsionnogo-rasseyaniya-s-pomoschyu-programmnogo-kompleksa-sozdannogo-v-srede-wolfram> (дата обращения: 31.03.2024).
4. Бурляева Е.В. Информационная поддержка систем принятия решений на производственных предприятиях химического профиля / Е.В. Бурляева, К.Ю. Колыбанов, С.А. Панова; под ред. В.Ф. Корнюшко. — Москва: МИТХТ, 2013. — 195 с.
5. Гартман Т.Н. Моделирование химико-технологических процессов Принципы применения пакетов компьютерной математики / Т.Н. Гартман, Д.В. Клущин. — Санкт-Петербург: Лань, 2020. — 404 с. — URL: <https://e.lanbook.com/book/126905> (дата обращения: 05.11.2023).
6. Сутягин И.В. Методы формализации экспертных знаний для наполнения базы знаний / И.В. Сутягин // Молодой ученый. — 2012. — № 1(36). — Т. 1. — С. 151-153. — URL: <https://moluch.ru/archive/36/4074/> (дата обращения: 26.03.2024).
7. Звягин Л.С. Системный анализ в экспериментальных исследованиях / Л.С. Звягин // Молодой ученый. — 2014. — № 4(63). — С. 516-519. — URL: <https://moluch.ru/archive/63/10108/> (дата обращения: 26.03.2024).
8. Федоркина А.П. Научно-исследовательская деятельность: логика и методология / А.П. Федоркина // Вестник НИЦ «Строительство». — 2023. — № 37(2). — С. 159-168. — DOI: 10.37538/2224-9494-2023-2(37)-159-168.
9. Мадера А.Г. Математическое моделирование и оптимизация бизнес-процессов на основе комплексного критерия «шансы – риски» / А.Г. Мадера // Российский журнал менеджмента. — 2015. — № 4. — URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/matematiceskoe-modelirovanie-i-optimizatsiya-biznes-protsessov-na-osnove-kompleksnogo-kriteriya-shansy-riski> (дата обращения: 27.03.2024).
10. Акланов Ф.А. Модельно-алгоритмическое обеспечение поддержки принятия решений в информационных системах управления / Ф.А. Акланов, Д.И. Ковалев, Е.В. Туева [и др.] // Сибирский аэрокосмический журнал. — 2014. — № 3(55). — URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/modelno-algoritmicheskoe-obespechenie-podderzhki-prinyatiya-resheniy-v-informatsionnyh-sistemah-upravleniya> (дата обращения: 31.03.2024).
11. Мешалкин В.П. Введение в инжиниринг энергоресурсосберегающих химико-технологических систем: учебное пособие / В.П. Мешалкин. — М.: РХТУ им Д.И. Менделеева, 2020. — 212 с.

Список литературы на английском языке / References in English

1. Ponomarev A.B. Metodologija nauchnyh issledovanij [Methodology of scientific research] / A.B. Ponomarev, Je.A. Pikuleva. — Perm: Publishing House Perm of national research Polytechnic Univ., 2014. — 186 p. [in Russian]
2. Melikova A.Ja. Ik-spektroskopicheskie metody dlja opredelenija proteinov [IR spectroscopic methods for the determination of proteins] / A.Ja. Melikova // Vestnik Bashkirsk un-ta [Bulletin of Bashkir University]. — 2023. — № 1. — URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/ik-spektroskopicheskie-metody-dlya-opredeleniya-proteinov> (accessed: 31.03.2024). [in Russian]
3. Zajcev E.V. Obrabotka infrakrasnyh spektrov i spektrov kombinacionnogo rassejanija s pomoshh'ju programmnoho kompleksa, sozdannogo v srede Wolfram Mathematica [Processing of infrared spectra and Raman spectra using a software package created in the Wolfram Mathematica environment] / E.V. Zajcev // Uspehi v himii i himicheskoj tehnologii [Advances in chemistry and chemical technology]. — 2017. — № 8(189). — URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/obrabotka-infrakrasnyh-spektrov-i-spektrov-kombinatsionnogo-rasseyaniya-s-pomoschyu-programmnogo-kompleksa-sozdannogo-v-srede-wolfram> (accessed: 31.03.2024). [in Russian]
4. Burljaeva E.V. Informacionnaja podderzhka sistem prinjatija reshenij na proizvodstvennyh predpriyatijah himicheskogo profila [Information support for decision-making systems at industrial chemical enterprises] / E.V. Burljaeva, K.Ju. Kolybanov, S.A. Panova; ed. by V.F. Kornjushko. — Moscow: MITHT, 2013. — 195 p. [in Russian]
5. Gartman T.N. Modelirovanie himiko-tehnologicheskix processov Principy primenenija paketov komp'juternoj matematiki [Modeling of chemical technological processes Principles of using computer mathematics packages] / T.N. Gartman, D.V. Klushin. — Saint Petersburg: Lan', 2020. — 404 p. — URL: <https://e.lanbook.com/book/126905> (accessed: 05.11.2023). [in Russian]
6. Sutjagin I.V. Metody formalizacii jekspertnyh znanij dlja napolnenija bazy znanij [Methods of formalizing expert knowledge to populate the knowledge base] / I.V. Sutjagin // Molodoj uchenyj [Young scientist]. — 2012. — № 1(36). — Vol. 1. — P. 151-153. — URL: <https://moluch.ru/archive/36/4074/> (accessed: 26.03.2024). [in Russian]
7. Zvjagin L.S. Sistemnyj analiz v jeksperimental'nyh issledovanijah [System analysis in experimental research] / L.S. Zvjagin // Molodoj uchenyj [Young scientist]. — 2014. — № 4(63). — P. 516-519. — URL: <https://moluch.ru/archive/63/10108/> (accessed: 26.03.2024). [in Russian]
8. Fedorkina A.P. Nauchno-issledovatel'skaja dejatel'nost': logika i metodologija [Research activities: logic and methodology] / A.P. Fedorkina // Vestnik NIC «Stroitel'stvo» [Bulletin of the Scientific Research Center "Construction"]. — 2023. — № 37(2). — P. 159-168. — DOI: 10.37538/2224-9494-2023-2(37)-159-168. [in Russian]
9. Madera A.G. Matematiceskoe modelirovanie i optimizacija biznes-processov na osnove kompleksnogo kriterija «shansy – riski» [Mathematical modeling and optimization of business processes based on the complex criterion “chances – risks”] / A.G. Madera // Rossijskij zhurnal menedzhmenta [Russian Journal of Management]. — 2015. — № 4. — URL:

<https://cyberleninka.ru/article/n/matematicheskoe-modelirovanie-i-optimizatsiya-biznes-protsesov-na-osnove-kompleksnogo-kriteriya-shansy-riski> (accessed: 27.03.2024). [in Russian]

10. Aklanov F.A. Model'no-algoritmicheskoe obespechenie podderzhki prinjatija reshenij v informacionnyh sistemah upravlenija [Model-algorithmic support for decision-making in information management systems] / F.A. Aklanov, D.I. Kovalev, E.V. Tueva [et al.] // Sibirskij ajerokosmicheskij zhurnal [Siberian Aerospace Journal]. — 2014. — № 3(55). — URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/modelno-algoritmicheskoe-obespechenie-podderzhki-prinyatiya-resheniy-v-informatsionnyh-sistemah-upravleniya> (accessed: 31.03.2024). [in Russian]

11. Meshalkin V.P. Vvedenie v inzhiniring jenergoresursoberegajushhihimiko-tehnologicheskikh sistem [Introduction to engineering of energy-resource-saving chemical-technological systems]: textbook / V.P. Meshalkin. — M.: D.I. Mendeleev Russian Technical University, 2020. — 212 p. [in Russian]