

DOI: <https://doi.org/10.60797/IRJ.2024.150.82>**ПРОГРАММНО-АЛГОРИТМИЧЕСКАЯ ПОДДЕРЖКА ПРОЦЕССОВ ОБРАБОТКИ И АНАЛИЗА ИК-СПЕКТРОГРАММ СМАЗОЧНЫХ МАСЕЛ**

Научная статья

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

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

Аннотация

В данной научной статье подробно рассмотрены основные вопросы, касающиеся компьютерной обработки и анализа данных химических экспериментов на примере ик-спектрограмм смазочных масел. Показано отсутствие единого подхода к обработке и анализу данных экспериментов с применением современных программно-алгоритмических решений. Ставится задача разработки модели информационной поддержки процессов обработки и качественного анализа ик-спектрограмм на основе программно-алгоритмического обеспечения процедур оцифровки, обработки и качественного анализа ик-спектрограмм органических веществ. Методологической основой проведенных исследований являются принципы структурного анализа и системного подхода. В процессах обработки и анализа ик-спектрограмм использованы методы компьютерного и математического моделирования. При разработке математического описания для решения задачи аппроксимации ик-спектрограмм состояния органических веществ использован метод наименьших квадратов. Предложен подход к организации процессов обработки и интеллектуального анализа ик-спектрограмм на основе инструментов программно-алгоритмической поддержки. Приведено формализованное описание процессов получения, оцифровки, обработки и анализа ик-спектрограмм. Рассмотрен процесс оцифровки ик-спектров с помощью программного продукта Grafula. Предложены подходы к компьютерной обработке оцифрованных результатов ик-спектроскопических исследований для упрощения процесса анализа данных и идентификации веществ на основе сопоставления полученных данных и стандартных значений пиков для групп веществ с применением инструментов интеллектуального анализа данных с помощью встроенного инструмента Peak Analyzer программного комплекса Origin Pro. Проведены исследования по построению математического обеспечения процесса ик-спектрометрии на основе аппроксимации полученных экспериментальных ик-спектрограмм нелинейными математическими моделями в пакете компьютерной математики Origin Pro. Рассмотренные в статье подходы к созданию программно-алгоритмического обеспечения процессов обработки и анализа ик-спектрограмм смазочных масел представляют собой дополнительные инструменты более качественной интерпретации результатов экспериментальных исследований, способствуют повышению информативности данных. Авторы предлагают использовать данные инструменты для организации, оперативного контроля, визуализации и высокоэффективного управления процессами спектрометрических исследований органических веществ.

Ключевые слова: компьютерная обработка, программное обеспечение, алгоритмическое обеспечение, информационная поддержка, процесс ик-спектроскопии, смазочные масла.

SOFTWARE-ALGORITHMIC SUPPORT OF PROCESSING AND ANALYSIS OF IR SPECTROGRAMS OF LUBRICATING OILS

Research article

Kuznetsov A.S.^{1,*}, Razyapova N.Y.², Razlivinskaya S.V.³¹ORCID : 0000-0003-1569-4765;¹Russian 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 research article, the main questions concerning computer processing and analysis of chemical experiments data on the example of IR spectrograms of lubricating oils are discussed in detail. The lack of a unified approach to processing and analysis of experimental data using modern software and algorithmic solutions is shown. The task is set to develop a model of information support of processing and qualitative analysis of IR spectrograms on the basis of software-algorithmic support of procedures of digitization, processing and qualitative analysis of IR spectrograms of organic substances. The methodological basis of the conducted research is the principles of structural analysis and system approach. The methods of computer and mathematical modelling were used in the processes of processing and analysis of IR spectrograms. When developing the mathematical description for solving the problem of approximation of IR spectrograms of the state of organic substances, the method of least squares was used. An approach to the organization of the processes of processing and intellectual analysis of IR spectrograms on the basis of software-algorithmic support tools is proposed. A formalized description of the processes of acquisition, digitization, processing and analysis of IR spectrograms is given. The process of digitization of IR spectra using the software product Grafula is reviewed. Approaches to computer processing of digitized results of IR spectroscopic studies for simplification of data analysis and identification of substances on the basis of comparison of the obtained data and standard

peak values for groups of substances with the use of intelligent data analysis tools using the built-in Peak Analyzer tool of the Origin Pro software package have been proposed. Research on construction of mathematical support for the process of IR spectrometry on the basis of approximation of the obtained experimental IR spectrograms by non-linear mathematical models in the Origin Pro computer mathematics package has been carried out. The approaches to the creation of software and algorithmic support for processing and analysis of IR spectrograms of lubricating oils considered in the article are additional tools for better interpretation of the results of experimental studies and contribute to the increase of data informativeness. The authors suggest using these tools for the organization, operational control, visualization and highly effective management of the processes of spectrometric studies of organic substances.

Keywords: computer processing, software, algorithmic support, information support, IR spectroscopy process, lubricating oils.

Введение

В настоящее время цифровые компьютерные инструменты обработки и интеллектуального анализа информации на основе программных средств в виде универсальных моделирующих программ (УМП) широко применяются при работе с данными, полученными в ходе проведения химического эксперимента [1]. Компьютерные программные продукты являются мощными инструментами, которые способны, в зависимости от поставленных на производстве задач, строить модели непосредственно самих химических процессов, это системы автоматизированного проектирования оборудования для проведения опытов (Cad-системы типа Aspen Plus, Hysys и т.д.) [2]. Отдельное направление представляют собой пакеты компьютерной математики (ПКМ), называемые также системами компьютерной математики (СКМ) – это специализированные программные продукты, предназначенные для обработки и интеллектуального анализа данных – результатов эксперимента (Table Curve 2d, Table Curve 3d, Mathcad, Matlab, Maple, Wolfram Mathematica и пр.) [3]. Применение подобных компьютерных реализаций в виде пакетов прикладных программ позволяет исследователям решать достаточно широкий круг задач обработки результатов химического эксперимента: это и первичная статистическая обработка данных, вычисление основных статистик, дисперсионный и корреляционный анализ данных, построение и анализ различных эмпирических зависимостей, выбор и ранжирование на основе ряда параметрических критериев математических моделей состояния сложных химических систем и технологических процессов [4].

Целью данной научной работы является разработка модели информационной поддержки процессов подготовки, выработки и принятия управленческих решений на основе системного описания процессов оцифровки, обработки и качественного анализа ик-спектрограмм в виде предложенного программно-алгоритмического обеспечения процедур оцифровки, обработки и качественного анализа ик-спектрограмм органических веществ.

Методы и принципы исследования

Методологической основой проведенных исследований являются принципы системного подхода и структурного системного анализа. С позиции системных исследований были рассмотрены процессы оцифровки, обработки, анализа, моделирования, а также визуализации экспериментальных данных ик-спектрометрических исследований органических веществ. В процессах обработки и анализа ик-спектрограмм использованы методы компьютерного моделирования и статистического интеллектуального анализа экспериментальных данных ик-спектрометрических исследований органических веществ. При разработке математического описания для решения задачи аппроксимации ик-спектрограмм состояния органических веществ использован метод наименьших квадратов.

Основные результаты

3.1. Постановка задачи

Инфракрасная спектроскопия, является важным методом анализа в химии, применяемым для идентификации органических веществ. Она основана на измерении поглощения инфракрасного излучения молекулами, что позволяет определить их химическую структуру [5]. В результате проведения процесса получают ик-спектрограммы – графические характеристики процесса, представляющие из себя зависимость условной интенсивности спектра от волнового числа [6]. Спектрограмма состояния представляет собой набор характерных пиков. Каждое органическое соединение имеет уникальный ИК-спектр, который можно сравнить со спектрами известных веществ для идентификации неизвестного образца [7]. В зависимости от конфигурации оборудования и используемого программного обеспечения спектральные характеристики веществ могут быть получены в графическом или цифровом виде. В случае, если спектрограммы получены в виде графиков, необходимо выполнить процесс их оцифровки – определения и записи значений путем наложения точек на график и установки начала координат и положения координатных осей. Для выполнения процесса оцифровки применяется специальное программное обеспечение: Wolfram Mathematica, Graph Digitizer, G3 Data, Grafula и др. [8]. В данной работе оцифровка полученных ик-спектров выполнялась в программе Grafula v.3.0. Данный программный продукт является одним из наиболее функциональных компьютерных инструментов оптического распознавания изображений и генерации числовых данных на основе анализа зависимостей. Графическое окно программы, отражающее процесс оцифровки данных ик-спектрометрических исследований органических веществ на примере спектра смазочных масел приведено на рисунке 1.

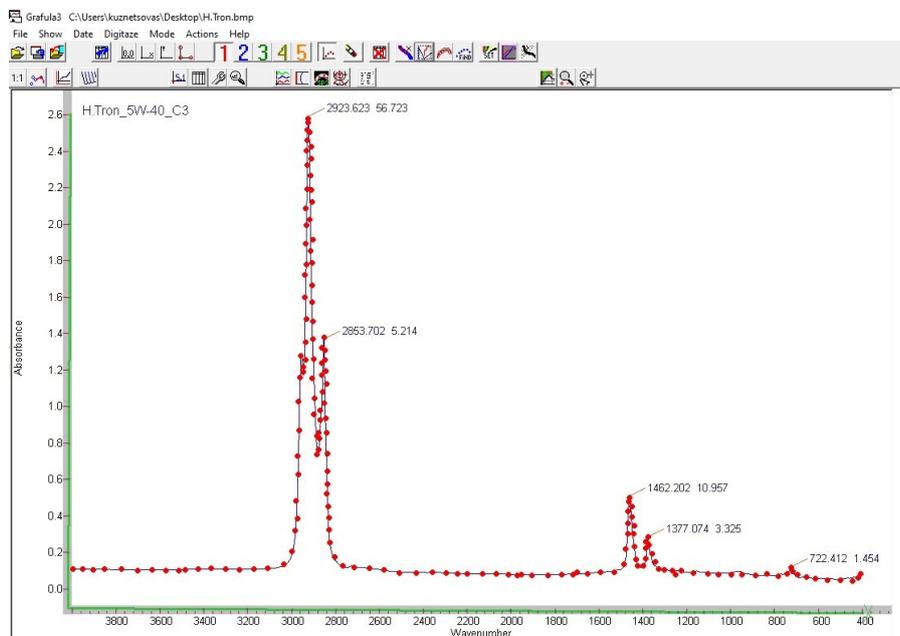


Рисунок 1 - Оцифровка полученных ик-спектрограмм в программе Grafula
DOI: <https://doi.org/10.60797/IRJ.2024.150.82.1>

Примечание: рисунок выполнен авторами статьи

3.2. Результаты исследования. Обработка ик-спектрограмм

Полученные данные в виде таблицы, содержащей числовые значения, могут быть подвергнуты дальнейшей обработке. Программный комплекс Origin Pro имеет набор встроенных инструментов для оптимизации работы по анализу и обработке ик-спектральных характеристик. Программная компьютерная обработка позволяет выполнять очистку данных, автоматически сравнивать полученные пики с известными значениями для идентификации на основе стандартных пиков веществ. Процесс обработки пиков полученных ик-спектрограмм был выполнен с помощью программного средства Peak Analyzer программы Origin Pro [9]. Программный модуль Peak Analyzer представляет собой встроенный анализатор пиков. В программном комплексе Origin Pro предусмотрены различные инструменты для анализа пиков, такие как поиск пиков, подгонка пиков, расчет площади под кривыми пиков и многое другое [10]. С помощью функции «Поиск пиков» можно автоматически обнаруживать пики на кривых данных и определять их параметры, такие как центр пика, ширина и высота. Это удобный способ быстро анализировать данные и выявлять интересные участки.

Функция «Подгонка пиков» позволяет подогнать математические модели к пикам на кривых, что помогает более точно определить их параметры и делать дополнительные выводы об исследуемом процессе. Также в Origin доступны инструменты для расчета площади под кривыми пиков, анализ спектров поглощения и многое другое. Эти функции делают программу мощным инструментом для анализа и визуализации данных с пиковыми структурами. Результаты компьютерной обработки пиков ик-спектрограмм приведены на рисунке 2.

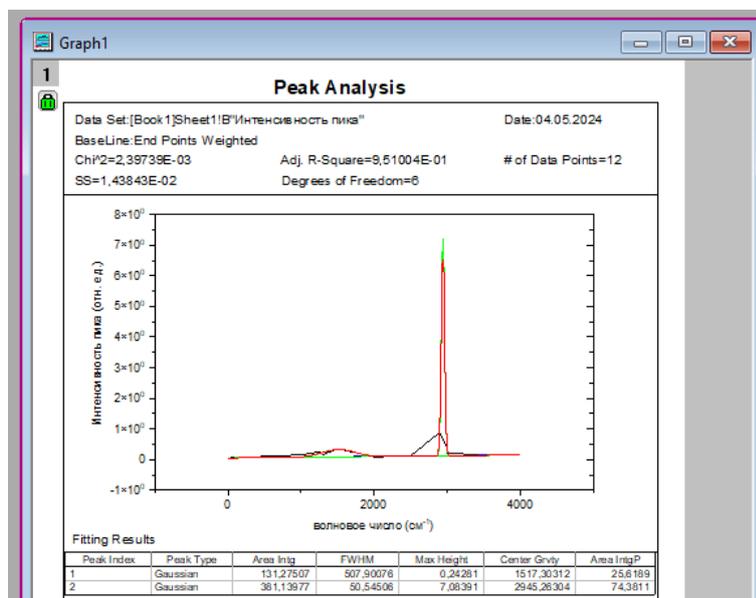


Рисунок 2 - Компьютерная обработка экспериментальных данных ик-спектроскопии смазочных масел в программном комплексе Origin Pro, надстройка Peak Analyzer
DOI: <https://doi.org/10.60797/IRJ.2024.150.82.2>

Примечание: рисунок выполнен авторами статьи

Применение встроенного инструмента анализатора пиков Peak Analyzer программного комплекса Origin Pro позволяет автоматически выявить как минимум два характерных пика спектрограммы (517 и 2945 см^{-1}), имеющих теоретическую интерпретацию с точки зрения физико-химических представлений и подходов.

Теоретическая интерпретация экспериментального ИК спектра смазочного масла представлена в Таблице 1.

Таблица 1 - ИК спектр смазочного масла
DOI: <https://doi.org/10.60797/IRJ.2024.150.82.3>

Волновое число, эксперимент, см^{-1}	Интенсивность экспериментальных полос	Волновое число, теория, см^{-1}	Теоретическая интерпретация
3009	Слабая	3012	Валентные С-Н-колебания ненасыщенных частей цепей
2954	Крыло	2968	Валентные С-Н-колебания СН ₃ -групп
2924	Очень сильная	2952	Валентные С-Н-колебания СН ₂ -групп
2854	Сильная	2897	-
1744	Очень сильная	1767	Валентные колебания С=О-связей
1652	Очень слабая	1674	Валентные колебания С=C-связей
1462	Средняя	1475	Ножничные колебания СН ₂ -групп
1376	Слабая	1400	Маятниковые (плоские) колебания С-Н-связей ненасыщенных фрагментов и веерные колебания СН ₂ -групп
1318	Крыло	1339	Веерные колебания СН ₂ -групп

Волновое число, эксперимент, см ⁻¹	Интенсивность экспериментальных полос	Волновое число, теория, см ⁻¹	Теоретическая интерпретация
1236	Слабая	1255	Веерные и маятниковые колебания СН ₂ -групп
1160	Очень сильная	1151,1181	Валентные колебания С–О глицириновой сшивки
1098	Слабая	1121	Деформационные колебания (угловые) глицириновой сшивки
1034	Крыло	1046	Валентные колебания С–С-связей цепей
966	Очень слабая	994	Валентные колебания С–С-связей цепей
914	Очень слабая	910	Валентные колебания С–С-связей
между ненасыщенными фрагментами цепей			
874	Очень слабая	885	Деформационные колебания цепей
844	Очень слабая	857	Деформационные колебания глицириновой сшивки
722	Сильная	719	Маятниковые (не плоские) колебания С–Н-связей ненасыщенных фрагментов и маятниковые колебания СН ₂

Примечание: по ист. [11]

При выполнении процедуры интерпретации полученных ик-спектрограмм органических веществ принято выделять два аспекта: количественный и качественный анализ полученных результатов. Количественный анализ подразумевает сравнение числовых значений полос поглощения спектров, а качественный – их соотношение с известными значениями, характеризующими классы органических веществ по наличию различного рода химических связей между атомами в молекулах.

Смазочные масла представляют собой смесь углеводородов и гетероатомных соединений различного строения и молекулярной массы. В состав масел входят алканы нормального и изостроения с числом атомов от 15 до 30, полициклические циклоалканы с алкильными радикалами, моно- и полициклические арены с алкильными радикалами и значительное количество углеводородов смешанного строения.

Смазочные масла также имеют полосы поглощения: 1400см⁻¹–СН связи алифатического характера, 1500см⁻¹– связь бензольного кольца, 2900см⁻¹– СН-связь концевая, 3000см⁻¹, 3050см⁻¹– СН-связь ароматического характера. Важно отметить, что на спектре отсутствует полоса поглощения в области 750см⁻¹, можно сказать, что это дифференцирующий признак. Таким образом, применение программных инструментов обработки ик-спектров позволяет автоматически выявлять наиболее характерные полосы поглощения.

3.3. Математическая модель

Одним из этапов компьютерной обработки спектральных графических зависимостей является построение формализованного описания процесса в виде математической модели [12]. Программный комплекс Origin Pro содержит большое число инструментов для решения задач численного моделирования и аппроксимации данных спектрограмм состояниями различными математическими моделями с возможностью визуального отображения полученных моделей и экспериментальных данных [13]. Результат численного моделирования – графическая интерпретация – представлена на рисунке 3.

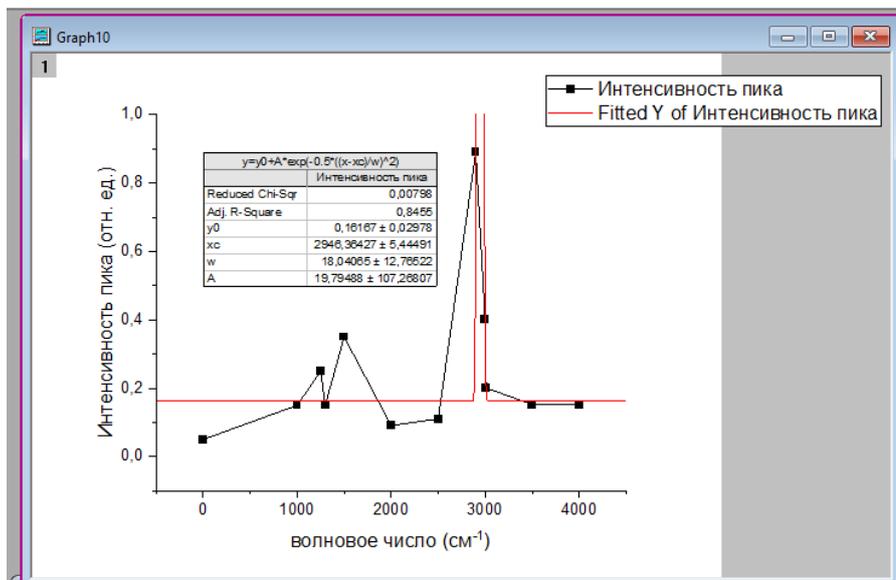


Рисунок 3 - Аппроксимация экспериментальных данных математической моделью в программном комплексе Origin Pro

DOI: <https://doi.org/10.60797/IRJ.2024.150.82.4>

Примечание: рисунок выполнен авторами статьи

Для установления количественного соотношения между интенсивностью пика и волновым числом была выбрана модель вида:

$$y = y_0 + A \times \exp \frac{-(x-x_c)^2}{2w^2} \quad (1)$$

Модель содержится в библиотеке стандартных функций в классе нелинейных моделей в каталоге программного комплекса Origin Pro.

Данная модель является трехпараметрической. Параметры модели вычисляются по методу наименьших квадратов [14]. Далее были вычислены значения критериев качества математической модели: стандартная ошибка, критерий Фишера, критерий детерминации R^2 [15]. Количественные параметрические оценки применимости для модели (1) - критерии качества представлены в таблице 2.

Таблица 2 - Критерии качества модели (1)

DOI: <https://doi.org/10.60797/IRJ.2024.150.82.5>

Стандартная ошибка	Критерий Фишера	Критерий R^2
0,02978	21,06555	0,88764

3.4. Формализация процессов компьютерной обработки ик-спектрограмм

Для формализации процессов компьютерной обработки, анализа и моделирования спектрограмм органических веществ, было построено алгоритмическое обеспечение в виде структурно-функциональной блок-схемы. Схема представляет собой визуализацию набора процедур, последовательно исполняемых заданным алгоритмом, реализующим основные процессы обработки, анализа и моделирования данных ик-спектрометрических исследований органических 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 органических веществ приведена на рисунке 4.

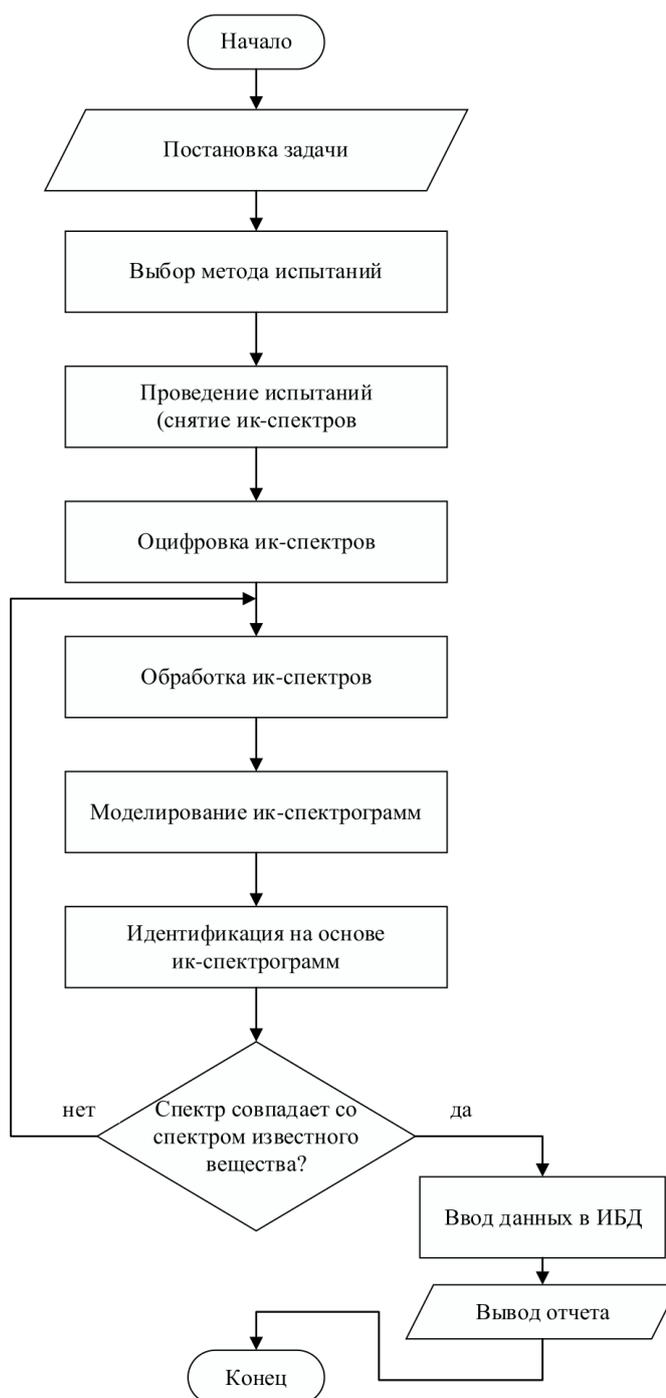


Рисунок 4 - Блок-схема алгоритма компьютерной обработки, анализа и моделирования данных ик-спектров смазочных масел

DOI: <https://doi.org/10.60797/IRJ.2024.150.82.6>

Примечание: рисунок выполнен авторами статьи

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.

Обсуждение

Рассмотренные в статье подходы к созданию программно-алгоритмического обеспечения процессов обработки и анализа ик-спектрограмм смазочных масел представляет собой дополнительные инструменты более качественной интерпретации результатов экспериментальных исследований, способствуют повышению информативности данных.

Авторы предлагают использовать данные инструменты для организации, оперативного контроля, визуализации и высокоэффективного управления процессами спектрометрических исследований органических веществ.

Заключение

На основе системного и структурного подходов разработана модель информационной поддержки процессов оцифровки, обработки, анализа и моделирования ик-спектрограмм состояния органических веществ. Обработка и анализ данных ик-спектрометрических исследований веществ и материалов – важная научная задача, требующая применения системного подхода. Современные компьютерные методы и модели обработки информации с применением пакетов компьютерной математики позволяют на качественно ином уровне решать задачи обработки, анализа, моделирования, интерпретации и визуализации полученных экспериментальных данных. Применение данного подхода позволяет реализовать инструменты программно-алгоритмической поддержки управленческих решений по обработке и анализу результатов ик-спектрометрических исследований органических веществ.

Конфликт интересов

Не указан.

Рецензия

Белашова Е.С., Казанский национальный исследовательский технический университет им. А.Н. Туполева – КАИ, Казань, Российская Федерация
DOI: <https://doi.org/10.60797/IRJ.2024.150.82.7>

Conflict of Interest

None declared.

Review

Belashova E.S., Kazan National Research Technical University named after A.N. Tupolev – KAI, Kazan, Russian Federation
DOI: <https://doi.org/10.60797/IRJ.2024.150.82.7>

Список литературы / References

- Осипенко У.Ю. Использование возможностей современных компьютерных программ для повышения эффективности разработки и применения автоматизированных обучающих систем / У.Ю. Осипенко, В.И. Федоров // Известия Санкт-Петербургского государственного технологического института (технического университета). — 2016. — № 36 (62). — С. 112–117.
- Чистякова Т.Б. Информационные технологии синтеза компьютерных тренажеров для химических производств / Т.Б. Чистякова // Известия Санкт-Петербургского государственного технологического института (технического университета). — 2007. — № 1. — С. 90–95.
- 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. — № 31-8(189). — С. 96–97.
- Чистякова Т.Б. Тренажерные комплексы для обучения ресурсо- и энергосберегающему управлению химико-технологическими процессами / Т.Б. Чистякова, И.В. Новожилова // Вестник Казанского технологического университета. — 2016. — № 19-17. — С. 154–158.
- Хрипач Н. Применение спектроскопии в органической химии / Н. Хрипач, А. Барановский // Наука и инновации. — 2013. — № 3 (121). — С. 6–9.
- Филиппов М.М. Рамановская спектроскопия как метод изучения глубоко углефицированного органического вещества / М.М. Филиппов // Труды Карельского научного центра Российской академии наук. — 2014. — № 1. — Ч. 1. Основные направления использования. — С. 115–134.
- Кузнецов А.С. Компьютерная обработка данных ИК-спектроскопии смазочных масел в программе Table Curve 2d / А.С. Кузнецов, Н.Ю. Разяпова, С.В. Разливинская // Известия Кабардино-Балкарского научного центра РАН. — 2024. — № 26-2. — С. 44–52. — DOI: 10.35330/1991-6639-2024-26-2-44-52.
- Пешков А.О. Автоматизация оцифровки и аппроксимации изображений графиков функций / А.О. Пешков // Форум молодых ученых. — 2017. — № 11 (15). — С. 784–789.
- Сафаров А.Р. Методика статистической обработки нефтезаводских данных / А.Р. Сафаров, А.М. Алиев, И.И. Османова [и др.] // Azerbaijan Chemical Journal. — 2013. — № 2. — С. 44–55.
- Баранова Н.М. Современные образовательные технологии: обработка и визуализация данных с помощью математического пакета OriginPro 8.6 (концепция психолого-познавательных барьеров) / Н.М. Баранова, Л.В. Сорокин // Вестник Российского университета дружбы народов. Серия: Информатизация образования. — 2017. — № 14-3. — С. 324–333.
- Разяпова Н.Ю. Компьютерная обработка данных ик-спектров смазочных масел с применением табличного процессора Ms Excel / Н.Ю. Разяпова, А.С. Кузнецов, С.В. Разливинская // Современные информационные технологии в образовании, науке и промышленности: сборник трудов XXVII Международная конференция; XXV Международный конкурс научных и научно-методических работ. Всероссийский конкурс проектов «Бессмертный полк героев Отечества». — Москва, 2024. — С. 55–60.
- 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).
- 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).

14. Мусатов М.В. Анализ моделей метода наименьших квадратов и методов получения оценок / М.В. Мусатов, А.А. Львов // Вестник Саратовского государственного технического университета. — 2009. — № 4 2 (43). — С. 137–140.

15. Агаянц И.М. Азы статистики в мире химии / И.М. Агаянц. — Москва : Изд-во МИТХТ, 2012. — 441 с.

Список литературы на английском языке / References in English

1. Osipenko U.Ju. Ispol'zovanie vozmozhnostej sovremennyh komp'yuternyh programm dlja povyshenija jeffektivnosti razrabotki i primeneniya avtomatizirovannyh obuchajushhh sistem [Using the capabilities of modern computer programs to increase the efficiency of the development and use of automated training systems] / U.Ju. Osipenko, V.I. Fedorov // Izvestija Sankt-Peterburgskogo gosudarstvennogo tehnologicheskogo instituta (tehničeskogo universiteta) [News of the St. Petersburg State Technological Institute (Technical University)]. — 2016. — № 36 (62). — P. 112–117. [in Russian]

2. Chistjakova T.B. Informacionnye tehnologii sinteza komp'yuternyh trenazherov dlja himičeskikh proizvodstv [Information technologies for the synthesis of computer simulators for chemical production] / T.B. Chistjakova // Izvestija Sankt-Peterburgskogo gosudarstvennogo tehnologicheskogo instituta (tehničeskogo universiteta) [News of the St. Petersburg State Technological Institute (Technical University)]. — 2007. — № 1. — P. 90–95. [in Russian]

3. Zajcev E.V. Obrabotka infrakrasnyh spektrov i spektrov kombinacionnogo rassejanija s pomoshh'ju programmno kompleksa, sozdannogo v srede Wolfram Mathematica [Processing of infrared and Raman spectra using a software package created in the Wolfram Mathematica environment] / E.V. Zajcev // Uspehi v himii i himičeskoi tehnologii [Advances in Chemistry and Chemical Technology]. — 2017. — № 31-8(189). — P. 96–97. [in Russian]

4. Chistjakova T.B. Trenazhernye komplekсы dlja obuchenija resurso- i jenergoberegajushhemu upravleniju himiko-tehnologičeskimi processami [Training complexes for teaching resource- and energy-saving management of chemical technological processes] / T.B. Chistjakova, I.V. Novozhilova // Vestnik Kazanskogo tehnologičeskogo universiteta [Bulletin of Kazan Technological University]. — 2016. — № 19-17. — P. 154–158. [in Russian]

5. Hripach N. Primenenie spektroskopii v organičeskoi himii [Application of spectroscopy in organic chemistry] / N. Hripach, A. Baranovskij // Nauka i innovacii [Science and Innovation]. — 2013. — № 3 (121). — P. 6–9. [in Russian]

6. Filippov M.M. Ramanovskaja spektroskopija kak metod izuchenija gluboko uglefirovannogo organičeskogo veshhestva [Raman spectroscopy as a method for studying deeply carbonized organic matter] / M.M. Filippov // Trudy Karel'skogo nauchnogo centra Rossijskoj akademii nauk [Proceedings of the Karelian Scientific Center of the Russian Academy of Sciences]. — 2014. — № 1. — Pt. 1. Main areas of use. — P. 115–134. [in Russian]

7. Kuznecov A.S. Komp'yuternaja obrabotka dannyh IK-spektroskopii smazochnyh masel v programme Table Curve 2d [Computer processing of IR spectroscopy data of lubricating oils in the Table Curve 2d program] / A.S. Kuznecov, N.Ju. Razjapova, S.V. Razlivinskaja // Izvestija Kabardino-Balkarskogo nauchnogo centra RAN [News of the Kabardino-Balkarian Scientific Center of the Russian Academy of Sciences]. — 2024. — № 26-2. — P. 44–52. — DOI: 10.35330/1991-6639-2024-26-2-44-52. [in Russian]

8. Peshkov A.O. Avtomatizacija ocifrovki i aproksimacii izobrazhenij grafikov funkcij [Automation of digitization and approximation of images of function graphs] / A.O. Peshkov // Forum molodyh uchenyh [Forum of Young Scientists]. — 2017. — № 11 (15). — P. 784–789. [in Russian]

9. Safarov A.R. Metodika statističeskoi obrabotki neftezavodskih dannyh [Methodology for statistical processing of oil refinery data] / A.R. Safarov, A.M. Aliev, I.I. Osmanova [et al.] // Azerbaijan Chemical Journal. — 2013. — № 2. — P. 44–55. [in Russian]

10. Baranova N.M. Sovremennye obrazovatel'nye tehnologii: obrabotka i vizualizacija dannyh s pomoshh'ju matematičeskogo paketa OriginPro 8.6 (konceptija psihologo-poznavatel'nyh bar'erov) [Modern educational technologies: data processing and visualization using the mathematical package OriginPro 8.6 (the concept of psychological and cognitive barriers)] / N.M. Baranova, L.V. Sorokin // Vestnik Rossijskogo universiteta družby narodov. Serija: Informatizacija obrazovanija [Bulletin of the Peoples' Friendship University of Russia. Series: Informatization of education]. — 2017. — № 14-3. — P. 324–333. [in Russian]

11. Razjapova N.Ju. Komp'yuternaja obrabotka dannyh ik-spektrov smazochnyh masel s primeneniem tabličnogo processora Ms Excel [Computer processing of data from IR spectra of lubricating oils using the Ms Excel spreadsheet processor] / N.Ju. Razjapova, A.S. Kuznecov, S.V. Razlivinskaja // Sovremennye informacionnye tehnologii v obrazovanii, nauke i promyšlennosti [Modern Information Technologies In Education, Science And Industry]: Collection of proceedings of the XXVII International Conference; XXV International competition of scientific and scientific-methodological works. All-Russian competition of projects "Immortal Regiment of Heroes of the Fatherland". — Moscow, 2024. — P. 55–60. [in Russian]

12. Madera A.G. Matematičeskoe 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 žurnal menedzhmenta [Russian Journal of Management]. — 2015. — № 4. — URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/matematicheskoe-modelirovanie-i-optimizatsiya-biznes-protsessov-na-osnove-kompleksnogo-kriteriya-shansy-riski> (accessed: 27.03.2024). [in Russian]

13. 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 aerokosmicheskij žurnal [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]

14. Musatov M.V. Analiz modelej metoda naimen'shikh kvadratov i metodov poluchenija ocenok [Analysis of least squares models and methods for obtaining estimates] / M.V. Musatov, A.A. L'vov // Vestnik Saratovskogo gosudarstvennogo tehničeskogo universiteta [Bulletin of Saratov State Technical University]. — 2009. — № 4-2 (43). — P. 137–140. [in Russian]

15. Agajanc I.M. Azy statistiki v mire himii [The basics of statistics in the world of chemistry] / I.M. Agajanc. — Moskva : Publishing house of MITHT, 2012. — 441 p. [in Russian]