



О.І. Панасенко, В.П. Буряк, І.О. Юрченко, А.А. Сафонов, А.С. Гоцуля, Ю.В. Тимошик, О.О. Галюлько, Н.М. Кочура

ПЕРСОНАЛЬНІ КОМП'ЮТЕРИ В АВТОМАТИЗОВАНИХ СИСТЕМАХ ХІМІКО-ТОКСИКОЛОГІЧНОГО АНАЛІЗУ

Запорізький державний медичний університет

Ключові слова: персональний комп'ютер, автоматизовані системи, хіміко-токсикологічний аналіз.

Ключевые слова: персональный компьютер, автоматизированные системы, химико-токсикологический анализ.

Key words: personal computer, automated systems, chemical and toxicological analysis.

Вивчено можливість створення інформаційної пошукової системи на підставі розробленого алгоритму для ПК і можливість її застосування в судово-хімічному аналізі.

Изучена возможность создания информационной поисковой системы на основе разработанного алгоритма для ПК и возможность ее применения в судебно-химическом анализе.

The possibility of creating of information searching system which is based on the algorithm for PC was studied as well as its application in chemical toxicological analysis.

Удосконалення хіміко-токсикологічного аналізу (ХТА) та підвищення ступеня впливу його результатів на перебіг процесів екстракції отрут з біологічного матеріалу, методів і методик ідентифікації і кількісного визначення досліджуваних сполук мають сьогодні особливе значення, адже на перший план виступає поліпшення якості результатів аналізу із застосуванням аналітичної токсикології. Вирішення цієї задачі можна досягти тільки оснащенням відділів судово-медичної токсикології обласних бюро судово-медичної експертизи МОЗ України сучасним аналітичним обладнанням, а отже є потреба комплексного, системного підходу до проблеми удосконалення ХТА загалом, починаючи від визначення переліку досліджуваних сполук, періодичності контролю, вимог до правдивості його результатів, створення та оснащення аналітичних лабораторій приладами пробозабезпечення (апаратура вибору, доставка та підготовка до аналізу біологічних проб) і закінчуючи обробкою та видачею виробничому персоналу або передачею до системи управління технологічним процесом усієї необхідної аналітичної інформації для створення автоматизованої системи аналітичного контролю (АСАК).

МЕТА РОБОТИ

Створення математичного апарату алгоритму ХТА, придатного для розробки інформаційної пошукової системи, що може бути реалізована за допомогою ПК і сучасного фізико-хімічного обладнання для аналізу токсичних речовин.

МАТЕРІАЛИ І МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

АСАК є сукупністю технічних засобів (аналітична апаратура, обладнання пробозабезпечення, засоби обчислювальної техніки) та методичного, метрологічного, організаційного і математичного забезпечення. Слід зазначити, що ПК і відповідне математичне забезпечення є обов'язковими складовими частинами АСАК, без яких нормальне функціонування системи неможливе [1,4].

Впроваджені в аналітичну токсикологію АСАК ПК мають виконувати наступні основні функції: 1) управління робо-

тою усіх технічних засобів системи; 2) розрахунок вмісту аналізованих компонентів у реальному часі; 3) обробку, накопичення та передачу користувачам усієї аналітичної інформації; 4) управління якістю проведення аналізів, оцінку їх правдивості, внесення необхідних корективів і виключення недостовірних результатів; 5) діагностику стану технічних засобів; 6) планування та управління градуальним експериментом, включаючи оптимальний вибір стандартних зразків можливих токсичних речовин.

У якості прикладу АСАК, у якій механізовано й автоматизовано усі операції аналітичного контролю (від вибору проби до розрахунку результатів аналізу) і реалізовані всі зазначені функції ПК, можна навести автоматизовану систему аналізу індивідуальних токсичних речовин і їх комбінацій [3].

Опрацьована система оснащена всім необхідним обладнанням для відбору, транспортування і підготовки до аналізу зразків біологічних проб спектральними методами:

1) атомо-абсорбційний спектрометр ZEEnit 700 Р являє собою комбінацію полум'яної та Зеємановської корекції фону. Спектрометр призначений як для повсякденних аналізів, так і для вирішення складніших завдань;

2) мультиелементний аналізатор multi EA 5000 призначений для визначення вуглецю (загальний вуглець ТС, загальний неорганічний вуглець ТІС, адсорбуючий органічний вуглець АОС, залишковий вуглець РС) сульфур (загальний сульфур TS), хлору (загальні галогеніди ТХ, адсорбовані органічні галогеніди АОХ, екстраговані органічні галогеніди ЕОХ) у рідинних, твердих, пастоподібних, газоподібних зразках і зразках скрапленого газу;

3) мікрохвильова система пробопідготовки TOPW аве-компактна, повністю автоматизована система мікрохвильової пробопідготовки;

4) атомо-абсорбційний спектрометр pov400, призначений для рутинних аналізів у режимі як поглинання, так і емісії. Він являє собою комбінацію полум'яної та електротермічної



технік атомізації з дейтерієвою корекцією фону;

5) прилад PHOTOSHEM призначений для визначення загальних антиоксидантних властивостей різних виробів харчової, парфумерної та нафтопереробної промисловості, а також антиоксидантів у біологічних зразках;

6) високопродуктивний діодно-матричний спектрофотометр SPECORD S600 – високоточна поліхроматична система зі стабільною юстировкою та фіксацією оптичних компонентів з наявністю системи самоконтролю SCS;

7) високопродуктивний двопроміневий спектрофотометр.

SPECORD 250 являє собою інноваційну технологію з двома охолоджувальними елементами Пельтьє, що забезпечує роботу у двопроміневому режимі.

Сучасний рівень розвитку методів і засобів обчислювальної техніки необхідний для створення АСАК, бо сприяє удосконаленню, розширенню функціональних можливостей і поліпшенню експлуатаційних і метрологічних характеристик. Одним із напрямків такого удосконалення є АСАК, що адаптується до умов контролю і здатний до змін.

Необхідність в адаптаційному контролі виникає за різних умов і стосується різних етапів процесу контролю. При періодичному контролі параметрів судово-хімічних досліджень необхідність в адаптивному виборі часових інтервалів між вимірами виникає через зміни нестационарності контрольованих процесів [7].

Розроблено адаптивний алгоритм вибору часового інтервалу між вимірами залежно від фактичної реалізації процесу, що контролюється. Часовий інтервал τ_{n+1} на $(n+1)$ -му кроці контролю:

$$\tau_{n+1} = \tau_n + \frac{\Delta}{2} [h(e - |y_n - y_{n-1}|) + h(2e - |y_n - y_{n-1}|)]$$

(1)

де τ_n – тимчасовий інтервал на n -му кроці контролю, Δ – фіксована величина, на яку може змінюватись часовий інтервал на кожному кроці контролю, h – функція, що визначається наступним виразом:

$$\eta(x) = \begin{cases} 1, & \text{при } x > 0 \\ -1, & \text{при } x \leq 0 \end{cases}$$

y_{n-1}, y_n – результат вимірювання на $(n-1)$ -му та n -му кроках контролю, Σ – припустиме відхилення сусідніх значень y , $\varepsilon > 0$.

Для доказу оптимальності цього алгоритму за критерієм мінімуму вірогідності виходу процесу за встановлені межі використано Δ -алгоритм [5,6], а також введено ще два алгоритми вибору часового інтервалу між вимірюваннями, названих відповідно $1/k$ та $1/\delta$ алгоритмом.

Відповідно $1/k$ - алгоритму, часовий інтервал між вимірюваннями на n -му кроці контролю τ_{n+1} обирається за наступним правилом:

$$\tau_{n+1} = \frac{\alpha \tau_n}{|y_n - y_{n-1}|} = \frac{\alpha}{k}, \quad (2)$$

де $k = \frac{|y_n - y_{n-1}|}{\tau_n}$ має значення похідної, а α – налагод-

жувальний коефіцієнт ($\alpha > 0$), значення якого обирається за умовами:

$$\frac{\alpha_1}{|y_n - y_{n-1}|} > 1 \text{ при } 0 \leq k < k_1$$

$$\frac{\alpha_2}{|y_n - y_{n-1}|} = 1 \text{ при } k_1 \leq k < k_2$$

$$\frac{\alpha_3}{|y_n - y_{n-1}|} < 1 \text{ при } k \geq k_2, \quad (3)$$

В окремому випадку $\alpha_1 = \alpha_2$.

Значення k_1, k_2 , $0 < k_1 < k_2$, встановлюють межі допущених значень k .

Деякою модифікацією алгоритмів та $1/k$ може бути $1/\delta$ -алгоритм. Згідно до цього алгоритму, часовий інтервал між вимірюваннями на n -му кроці контролю обирається за наступним правилом:

$$\tau_{n+1} = \tau_n - (m_1 - 2)\Delta \text{ при } \frac{|y_n - y_{n-1}|}{\delta} \geq 2$$

$$\tau_{n+1} = \tau_n - \frac{\Delta}{m_2} \text{ при } \frac{|y_n - y_{n-1}|}{\delta} < 1, \quad (4)$$

де m_1 , визначається як $|y_n - y_{n-1}|/\delta$, округлене до найближчого більшого цілого числа; m_2 визначається як $|y_n - y_{n-1}|/\delta$, округлене до найближчого меншого числа, зворотного натуральному.

Збіжність цих алгоритмів доведено у роботі [6]. Слід зазначити, що ці алгоритми характеризуються нівелюючими властивостями. Усі зазначені адаптивні алгоритми передбачають обмеження на часовий інтервал τ , виду $\Delta \leq \tau, \tau \leq \tau_{max}$,

де τ_{max} – максимально допустимий інтервал.

Однак у деяких складних випадках не вдається побудувати модель, що забезпечує необхідність контролю у всьому діапазоні вимірювань факторів. У цьому випадку можна отримати цілком придатні результати без побудови математичної моделі, користуючись підходами, прийнятими у теорії розпізнавання зразків [6]. Сутність цього підходу полягає у визначенні компонентного складу проби або контрольованого середовища шляхом поєднання принципів розпізнавання і методів інтерполяції. Процедура визначення вмісту компонентів складається з двох етапів: на першому етапі знаходять два найближчі до аналізованої проби зразка, на другому шляхом розрахунку визначають вміст компонентів. Дані про склад кожного зразка заносять у пам'ять ПК. При цьому перевіряють, чи виконується припущене «віддалення» зразків один від одного. Ця умова для кожного зразка має вигляд:

$\rho(\omega_x, \omega_i) \leq \rho_{доп}$
 $\rho(\omega_q, \omega_g) \leq \rho_{доп}, \quad (5)$ де ω_q та ω_g точки, що відповідають зразкам у просторі аналітичних сигналів, δ приймає два значення. У якості відстані P обирають одне з прийнятих у



теорії розпізнавань. Дані про значення аналітичних сигналів аналізованої проби ω_x порівнюється з даними про аналітичні сигнали зразків, занесених у пам'ять ПК. Для аналізованої проби ω_x перевіряють виконання умов:

$$\rho(\omega_x, \omega_i) \leq \rho_{\text{доп}}$$

$$\rho(\omega_x, \omega_j) \leq \rho_{\text{доп}} \quad (6)$$

де $\rho_{\text{доп}}$ – допущене відхилення до найближчих зразків, необхідне для проведення інтерполяційних розрахунків.

Слід зазначити, що використання алгоритмів такого типу потребує значного обсягу пам'яті ПК порівняно з використанням регресійних рівнянь. Зазначене підтверджується тим, що ця модифікація алгоритму була з успіхом перевірена в процесі тривалої експлуатації [2].

На нашу думку, на подібних алгоритмах будуть створені АСАК зі змінюваною структурою та функціями відповідно до змін в об'єктах контролю та системах управління.

ВИСНОВКИ

З метою автоматизації процесу розроблено алгоритм, який може бути використаний для створення інформаційно-пошукової системи для судово-хімічного аналізу.

Використання алгоритмів для реалізації потребує

ПК зі значним обсягом пам'яті для вирішення завдань аналітичної токсикології.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. *Ван-дер Варден Б.Л.* Математическая статистика / *Ван дер Варден Б.Л.* – М.: Мир, 1990. – 434 с.
2. *Васильев А.Ф.* Методы вычисления коэффициентов расчетных нелинейных управлений в адсорбционном спектральном анализе / *Васильев А.Ф.* // Заводск. лаборатория. – 1996. – Т. 62, №12. – С. 1462–1467.
3. *Верховский Б.И.* Автоматический спектральный анализ смеси наркотических и одурманивающих средств / *Верховский Б.И., Зацменовая В.Д., Плоиков Р.И.* – М.: Инст. Судебно-медицинский токсикологии, 1998. – 44 с.
4. *Крамер Т.* Математические методы статистики / *Крамер Т.* – М: Мир, 1995. – 548 с
5. *Овчаренко Е.Я.* Программное обеспечение для автоматической обработки результатов измерений в спектроскопии / *Овчаренко Е.Я., Любимов И.Л., Скитин А.Б.* // Оптика и спектроскопия. – 2012. – №4. – С. 550–553.
6. *Chan C.C.* Analytical method validation and instrument performance Verification / *Chan C.C., Ebrary I.* – N.Y.: John Wiley and Sons, 2004. – 303 p.
7. *Wand I.* Analytical spectroscopy / *I. Wand* – N.Y., 2000. – 222 p.

Відомості про авторів:

Панасенко О.І., д. фарм. н., професор, зав. каф. токсикологічної та неорганічної хімії ЗДМУ.

Буряк В.П., д. фарм. н., професор каф. токсикологічної та неорганічної хімії ЗДМУ.

Юрченко О.І., магістр фармації, аспірант каф. токсикологічної та неорганічної хімії ЗДМУ.

Сафонов А.А., асистент каф. токсикологічної та неорганічної хімії ЗДМУ.

Гоцуля А.С., к. фарм. н., асистент каф. токсикологічної та неорганічної хімії ЗДМУ.

Тимошик Ю.В., к. фарм. н., асистент каф. аналітичної хімії ЗДМУ.

Галюлько О.О., студент 3 курсу фарм. факультету ЗДМУ.

Кочура Н. М., студентка 5 курсу фарм. факультету ЗДМУ.