

УДК 004.94

DOI: 10.35330/1991-6639-2024-26-2-44-52

EDN: UVBTVR

Научная статья

Компьютерная обработка данных ИК-спектроскопии смазочных масел в программе Table Curve 2d

А. С. Кузнецов¹, Н. Ю. Разяпова², С. В. Разливинская²

¹Российский государственный социальный университет
129226, Россия, Москва, ул. Вильгельма Пика, 4, стр. 1

²МИРЭА – Российский технологический университет
119571, Россия, Москва, проспект Вернадского, 78

Аннотация. В данной научной статье подробно исследованы вопросы, касающиеся компьютерной обработки и интерпретации результатов инфракрасной спектроскопии (ИК-спектроскопии) смазочных масел. Полученные экспериментальные данные в ходе снятия спектральных графических характеристик смазочных масел были подвергнуты дальнейшей оцифровке и компьютерной обработке для уменьшения уровня зашумленности сигналов и создания математического описания. Создано формализованное описание экспериментальных данных ИК-спектроскопии на основе нелинейных относительно параметров математических моделей, на основе процессов их структурной и параметрической идентификации и последовательного синтеза количественных соотношений между интенсивностью и волновым числом. С помощью современного программного комплекса Table Curve 2d проведены компьютерная обработка экспериментальных данных и их визуализация. Вычислены основные количественные критерии качества математических моделей: стандартная ошибка, критерий Фишера, коэффициент детерминации R^2 . Вычисленные критерии качества сведены в таблицы. Далее было осуществлено ранжирование моделей по вычисленным значениям критериев качества. В качестве основного количественного показателя ранжирования был использован коэффициент детерминации R^2 . Выполнена визуализация экспериментальных данных и моделей их формализации. Приведены результаты расчета основных статистических показателей, включая значения доверительных интервалов. Рассмотрены основные количественные показатели интерпретации данных ИК-спектров. Проведены «синтез» и компьютерная визуализация дифференциальной кривой, характеризующей скорость протекания процесса. Данный показатель может рассматриваться как дополнительный аспект количественной интерпретации ИК-спектрограмм смазочных масел. Методика научного исследования строится на анализе научных данных, сравнительном анализе, синтезе данных, графической интерпретации. Результатом данного исследования является создание формализованного описания ИК-спектроскопии смазочных масел на основе нелинейных по параметрам математических моделей, полученных на основе применения компьютерных методов обработки ИК-спектров и современных программных продуктов. В работе также определены перспективы развития и рассмотрены исследования в данной области.

Ключевые слова: компьютерная обработка, ИК-спектр, смазочные масла, программный продукт, математическая модель, математическое описание

Поступила 05.03.2024, одобрена после рецензирования 18.03.2024, принята к публикации 20.03.2024

Для цитирования. Кузнецов А. С., Разяпова Н. Ю., Разливинская С. В. Компьютерная обработка данных ИК-спектроскопии смазочных масел в программе Table Curve 2d // Известия Кабардино-Балкарского научного центра РАН. 2024. Т. 26. № 2. С. 44–52. DOI: 10.35330/1991-6639-2024-26-2-44-52

Computer processing of IR spectroscopy data of lubricant oils in the Table Curve 2d program

A.S. Kuznetsov¹, N.Yu. Razyapova², S.V. Razlivinskaya²

¹Russian State Social University
129226, Russia, Moscow, 4 Wilhelm Pieck street, 1 building

²MIREA – Russian Technological University
119571, Russia, Moscow, 78 Vernadsky avenue

Abstract. This scientific article examines in detail issues related to computer processing and interpretation of the results of IR spectroscopy of lubricating oils. The experimental data obtained during the recording of spectral graphic characteristics of lubricating oils were subjected to further digitization and computer processing to reduce the noise level of the signals and create a mathematical description. A formalized description of the experimental data of IR spectroscopy has been created based on mathematical models that are nonlinear with respect to the parameters, based on the processes of their structural and parametric identification and the consistent synthesis of quantitative relationships between intensity and wave number. Using the modern software package Table Curve 2d, computer processing of experimental data and their visualization was carried out. The main quantitative criteria for the quality of mathematical models are calculated: standard error, Fisher criterion, coefficient of determination R^2 . The calculated quality criteria are summarized in tables. Next, the models were ranked according to the calculated values of the quality criteria. The coefficient of determination R^2 was used as the main quantitative ranking indicator. Visualization of experimental data and models of their formalization was performed. The results of calculation of the main statistical indicators, including the values of confidence intervals, are presented. The main quantitative indicators of interpretation of IR spectral data are considered. A “synthesis” and computer visualization of a differential curve characterizing the rate of the process was carried out. This indicator can be considered as an additional aspect of the quantitative interpretation of IR spectrograms of lubricating oils. The scientific research methodology is based on the analysis of scientific data, comparative analysis, data synthesis, and graphic interpretation. The result of this research is the creation of a formalized description of IR spectroscopy of lubricating oils based on nonlinear mathematical models obtained through the use of computer methods for processing IR spectra and modern software products. The work also identifies development prospects and reviews research in this area.

Keywords: computer processing, IR spectrum, lubricat oils, software product, mathematical model, mathematical description

Submitted 05.03.2024,

approved after reviewing 18.03.2024,

accepted for publication 20.03.2024

For citation. Kuznetsov A.S., Razyapova N.Yu., Razlivinskaya S.V. Computer processing of IR spectroscopy data of lubricant oils in the Table Curve 2d program. *News of the Kabardino-Balkarian Scientific Center of RAS*. 2024. Vol. 26. No. 2. Pp. 44–52. DOI: 10.35330/1991-6639-2024-26-2-44-52

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время компьютерные методы и инструменты обработки информации на основе специальных комплексов универсальных моделирующих программ (УМП) широко применяются для решения прикладных задач обработки и анализа данных, полученных в ходе проведения химических экспериментов [1, 2]. Данное программное обеспечение

принято подразделять на компьютерные программы, моделирующие непосредственно сами процессы проведения химических экспериментов или системы автоматизированного проектирования оборудования для проведения опытов (Aspen Plus, Hysys и т. д.). Отдельно выделяют среди данных программных решений так называемые пакеты компьютерной математики (ПКМ), называемые также системами компьютерной математики (СКМ) – это программные комплексы, предназначенные для обработки результатов эксперимента (Mathcad, Matlab, Maple, Wolfram Mathematica и пр.). Применение пакетов компьютерной математики позволяет исследователям решать достаточно широкий круг задач: это и первичная статистическая обработка опытных данных, вычисление основных статистик, дисперсионный и корреляционный анализ, построение эмпирических зависимостей, выбор и ранжирование математических моделей состояния сложных систем и производственных процессов. Целью данной работы является создание математического описания обработки результатов ИК-спектроскопии смазочных масел с использованием методов и инструментов компьютерного моделирования и современного программного пакета Table Curve 2d (SYSTAT SOFTWARE)¹ [3].

ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ

На сегодняшний день метод инфракрасной спектроскопии широко применяется как стандартный метод идентификации веществ.

Метод ИК-спектроскопии позволяет обойтись микрообъемами исследуемого вещества, а также не требует больших временных затрат при проведении. Его можно использовать в качестве метода экспресс-анализа и идентификации различных смазочных масел.

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 [4, 5].

Результаты ИК-спектроскопии представляют собой спектрограммы с наборами характерных пиков. Полученные спектрограммы далее используют для количественной интерпретации, проводя сравнение полученных спектров со спектрами известных веществ [6]. ИК-спектрограмма представляет собой зависимость относительной интенсивности пика от волнового числа. Для детального анализа полученных спектрограмм важное значение имеют аспекты дополнительной количественной интерпретации с применением современных компьютерных программ.

Пакет программ Table Curve 2d предназначен для реализации задачи численной аппроксимации – выбора и ранжирования математических моделей на основе статистической обработки экспериментальных данных. Программный продукт поддерживает методы ручного ввода с помощью Table curve 2d editor (рис. 1), а также импорт в программу через редактор кода ASCII editor. Введенные данные сохраняются в каталоге программы с расширением .prn

¹Table curve 2d <https://systatsoftware.com/product/tablecurve-2d-5-0/> (дата обращения – 05.03.2024 г.)

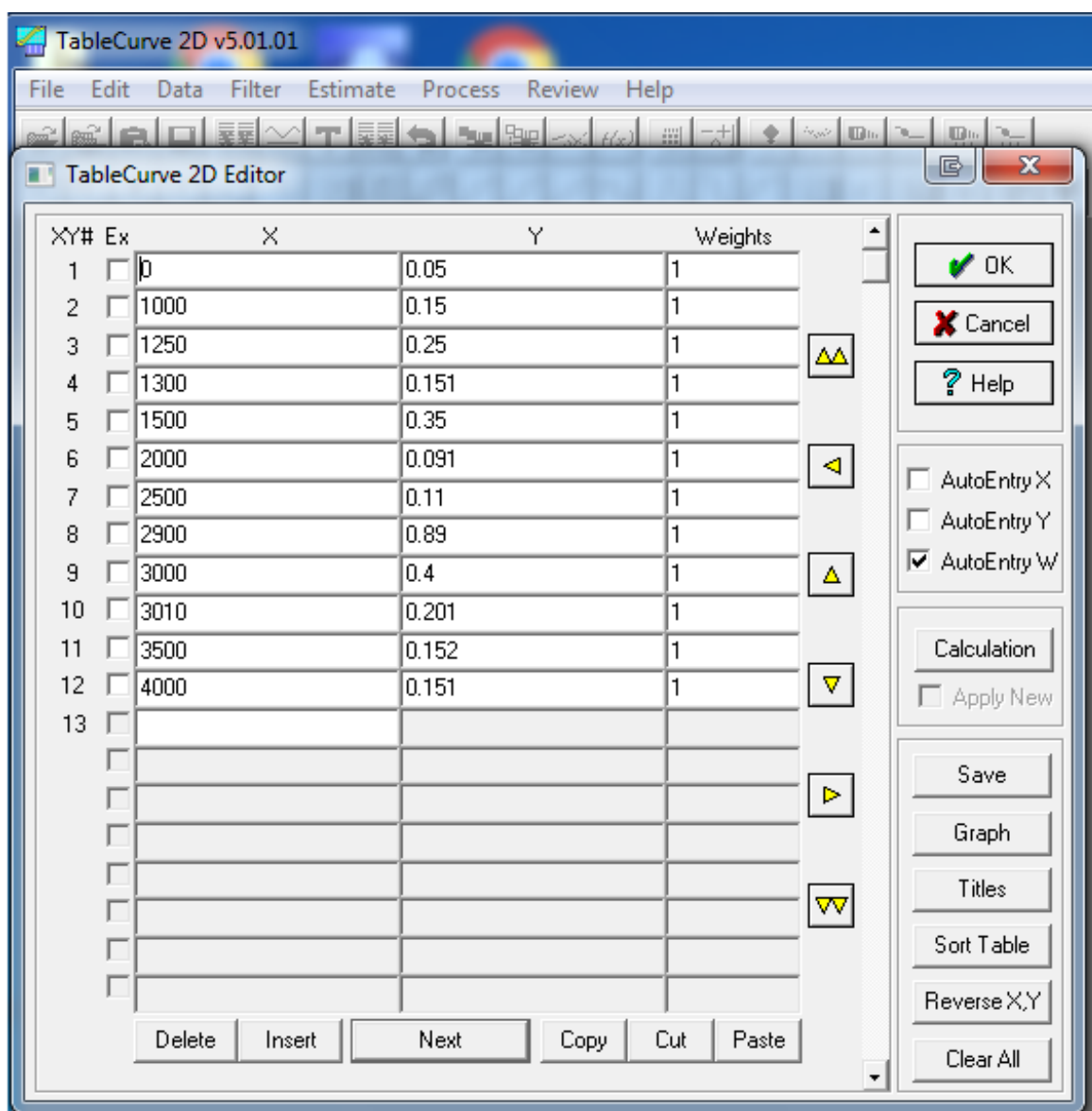


Рис. 1. Ввод исходных данных

Fig. 1. Entering initial data

После ввода исходных данных программа запускает процесс поиска математических моделей. Последовательно рассчитываются критерии их качества, строятся доверительные интервалы. Полученные математические модели возможно ранжировать по критериям качества, это величина коэффициента детерминации R^2 , стандартной ошибки или критерия Фишера F [7, 8].

В ходе исследования спектрограмм смазочных масел для количественного описания была выбрана модель 8003 по внутреннему каталогу программы Table Curve 2d. Данная зависимость имеет следующий вид:

$$y = a + b * \exp\left(-0.5 * \left(\frac{x-c}{d}\right)^2\right). \quad (1)$$

Визуализация полученной модели приведена на рис. 2.

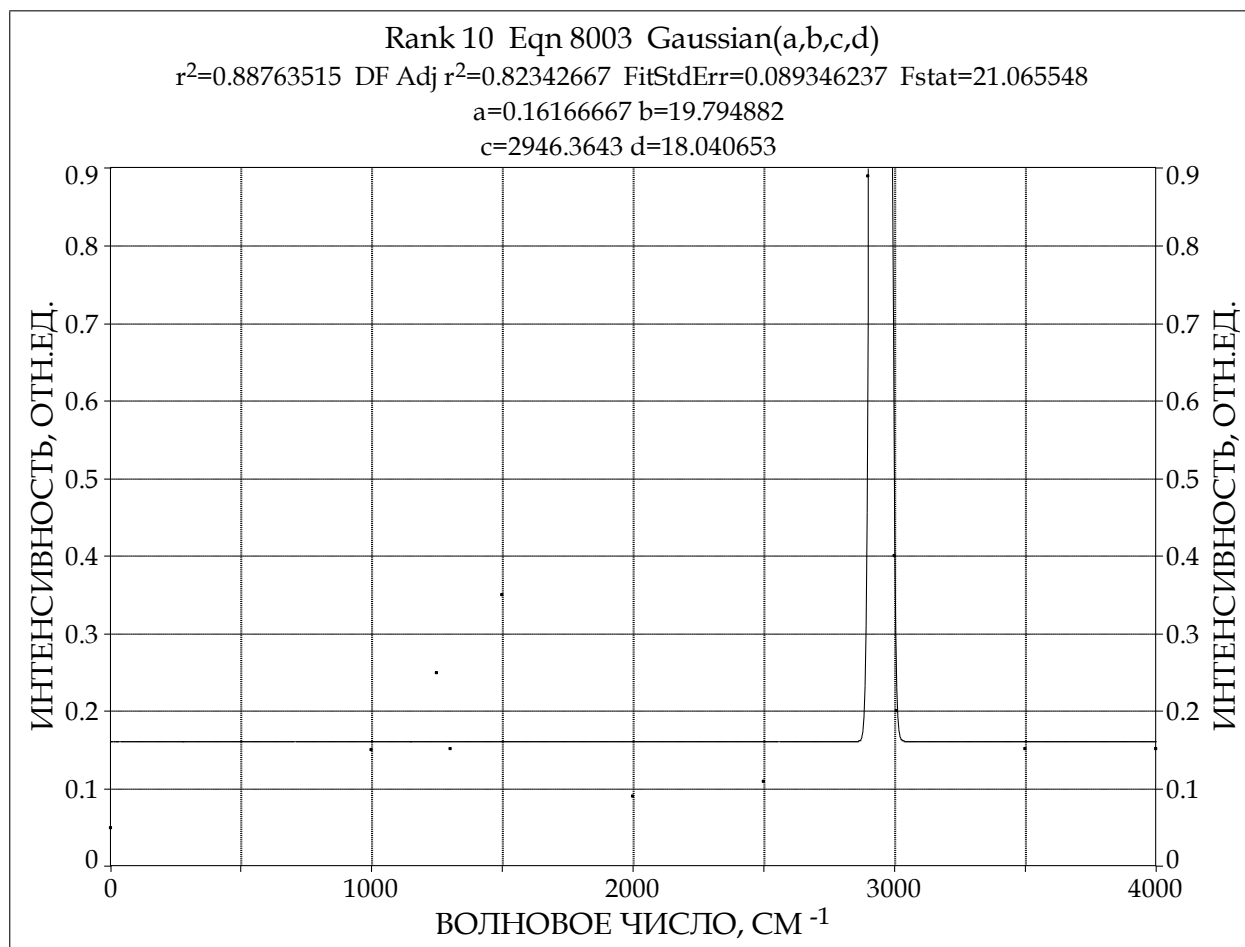


Рис. 2. Аппроксимация данных ИК-спектроскопии моделью 8003 в программе Table Curve 2d

Fig. 2. Model 8003 approximation of IR data in the Table Curve 2d program

В таблице приведены критерии качества данной модели [9].

Таблица. Критерии качества модели 8003

Table. Model 8003 Quality Criteria

Коэффициент детерминации	Стандартная ошибка		Критерий Фишера	
0,8876351512	0,0893462366		21,065547587	
Параметры модели				
параметр	ошибка	t-критерий	Доверительные пределы	
A = 0,161666667	0,029782079	5,428320412	0,092989070	0,230344264
B = 19,79488160	107,2680750	0,184536560	-227,565743	267,1555057
C = 2946,364266	5,444911184	541,1225576	2933,808278	2958,920254
D = 18,04065276	12,76521685	1,413266454	-11,3959900	47,47729556
Дисперсионный анализ				
Источник изменчивости	Сумма квадратов	Число степеней свободы	Средний квадрат	Критерий Фишера
Фактор	SSR=0,504483	3	0,168161	21,0655
Ошибка	SSE=0,063862	8	0,00798275	-
Сумма	SSM=0,568345	11	-	-

На основе проведенных исследований наилучшей аппроксимирующей зависимостью оказалась модель (1) по каталогу программы. На основе данной модели был выполнен «синтез» дифференциальной кривой скорости процесса – дериватограммы. Графическая интерпретация дериватограммы представлена на рис. 3 (приведено совмещенное изображение для экспериментальных данных, модели (1) и дифференциальной кривой процесса).

Дифференциальная кривая скорости процесса описывает новый количественный показатель процесса ИК-спектроскопии, а именно скорость изменения величины интенсивности пика в зависимости от изменения волнового числа. Полученные в ходе подобного «синтеза» дериватограммы могут быть использованы как дополнительные инструменты для идентификации известных органических соединений, входящих в состав смазочных масел или представляющих собой примеси различного композиционного состава и строения. При этом данные кривые скорости обладают повышенной чувствительностью по сравнению с простыми ИК-спектрограммами, обычно используемыми для процессов идентификации, а также качественного и количественного анализа различных химических соединений.

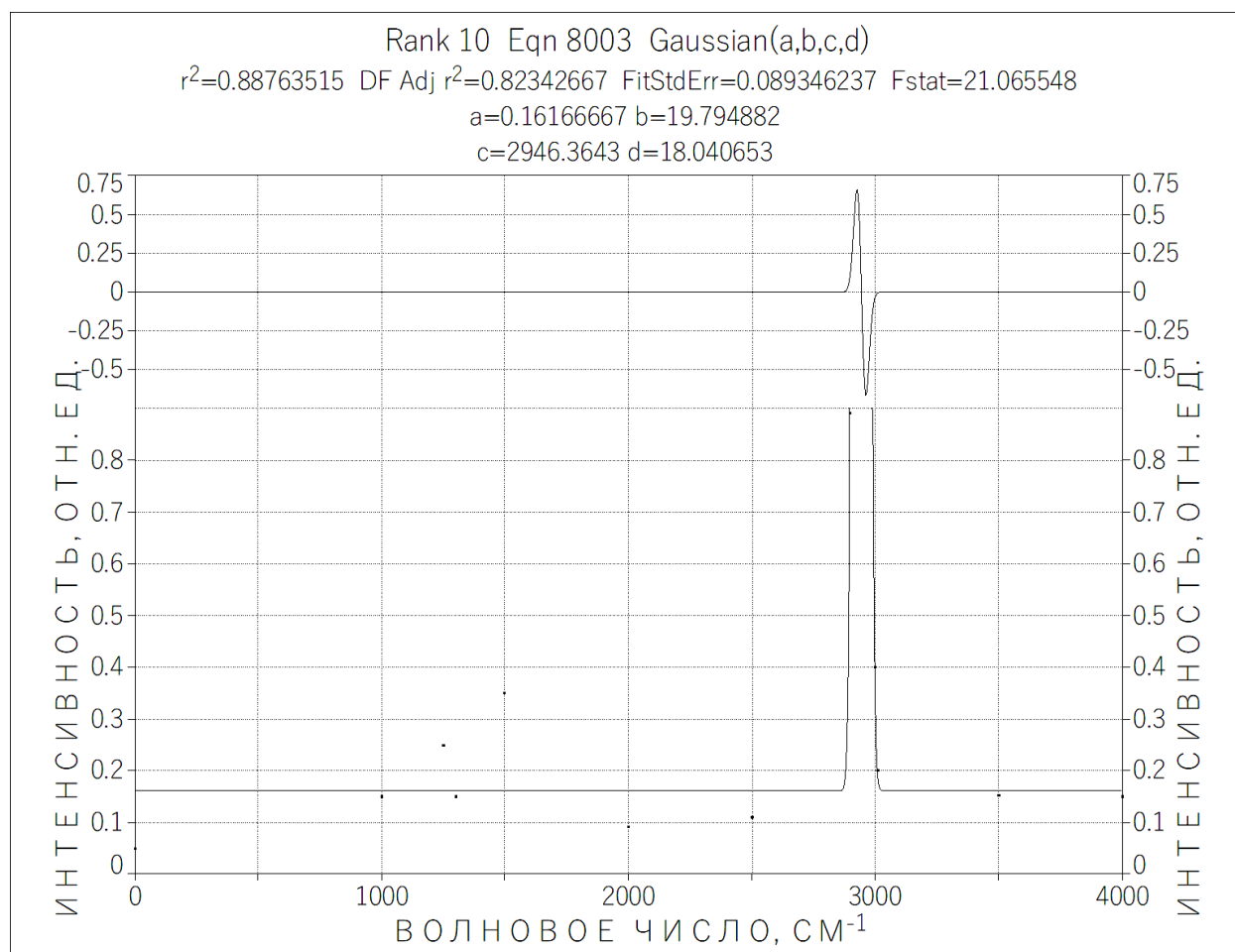


Рис. 3. «Синтез» дифференциальной кривой – показателя скорости процесса (верхний график – скорость процесса)

Fig. 3. “Synthesis” of the differential curve – an indicator of the process speed (top graph – process speed)

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Компьютерное и математическое моделирование являются неотъемлемыми цифровыми инструментами количественной интерпретации экспериментальных данных ИК-спектрографии смазочных масел. Приведенное формализованное описание процесса обработки данных ИК-спектроскопии позволяет установить однозначные количественные соотношения между основными характеристиками процесса, выполнять визуализацию экспериментальных данных на основе параметров используемых моделей, а также хранить данные эксперимента в цифровой форме. Дополнительные возможности детальной качественной и количественной интерпретации результатов спектрографических исследований химических соединений дает построение новых количественных характеристик, в частности, дифференциальных кривых скорости процесса.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гартман Т. Н., Клушин Д. В. Моделирование химико-технологических процессов. Принципы применения пакетов компьютерной математики: учеб. пособие. СПб: Лань, 2020. 404 с. ISBN: 978-5-8114-3900-3
2. Гартман Т. Н., Клушин Д. В. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов: учеб. пособие. М.: Академкнига, 2008. 416 с. ISBN: 5-94628-268-9
3. Агаянц И. М. Азы статистики в мире химии: обработка экспериментальных данных. СПб.: НОТ, 2015. 618 с. ISBN: 978-5-91703-044-9
4. Спиркин В. Г. Химмотология в нефтегазовом деле. Химия смазочных масел (состав, получение и применение): учеб. пособие. Часть 2. М., 2014. 141 с.
5. Выхованец Е. П., Мосталыгина Л. В., Русаков Ю. С. Исследование эксплуатационных жидкостей автомобиля методом ИК-спектрометрии // Вестник Курганского государственного университета. Серия: технические науки. 2013. № 29. С. 65–68.
6. Березин К. В., Дворецкий К. Н., Чернавина М. Л. и др. Применение ИК-спектроскопии и метода теории функционала плотности для оценки относительного содержания триглицеридов олеиновой и линолевой кислот в смеси оливкового масла и масла семян подсолнечника // Оптика и спектроскопия. 2019. Т. 127. № 12. С. 883–889. DOI: 10.21883/OS.2019.12.48680.127-19
7. Кузнецов А. С. Компьютерное моделирование кинетики термоокисления эластомерного композита в программах TABLE CURVE 2d/3d // Международный научно-исследовательский журнал. 2018. № 3(69). С. 42–45. DOI: 10.23670/IRJ.2018.69.027
8. Мадера А. Г. Математические модели и принятие решений в управлении: руководство для топ-менеджеров. М.: URSS, 2022. 688 с. ISBN: 978-5-9710-9125-7
9. Korniyushko V.F., Kuznetsov A.S., Kolybanov K.Yu., Burliaeva E.V. Optimization of control of chemical and technological processes of mixing and structuring multi-component elastomeric composites based on mathematical modeling methods // IOP Conference Series: Earth and Environmental Science. Conference proceedings. Krasnoyarsk Science and Technology City Hall of the Russian Union of Scientific and Engineering Associations. 2020. P. 72016.

REFERENCES

1. Gartman T.N., Klushin D.V. *Modelirovaniye khimiko-tekhnologicheskikh protsessov. Printsipy primeneniya paketov komp'yuternoy matematiki*. [Modeling of chemical technological

processes. Principles of using computer mathematics packages]. SpB: Lan', 2020. 404 p. ISBN: 978-5-8114-3900-3. (In Russian)

2. Gartman T.N., Klushin D.V. *Osnovy komp'yuternogo modelirovaniya khimiko-tekhnologicheskikh protsessov: Ucheb. posobiye dlya vuzov* [Fundamentals of computer modeling of chemical technological processes: Textbook. manual for universities]. Moscow: Akademkniga, 2008. 416 p. ISBN: 5-94628-268-9. (In Russian)

3. Agayants I.M. *Azy statistiki v mire khimii: Obrabotka eksperimental'nykh dannykh*. [The basics of statistics in the world of chemistry: Processing experimental data]. SPb.: NOT, 2015. 618 p. ISBN: 978-5-91703-044-9. (In Russian)

4. Spirkin V.G. *Himmotologiya v neftegazovom dele. Himiya smazochnyh masel (sostav, poluchenie i primeneniye)* [Chemmotology in the oil and gas industry. Chemistry of lubricate oils (composition, preparation and application)]: study guide. Part 2. Moscow, 2014. 141 p. (In Russian)

5. Vykhoanets E.P., Mostalygina L.V., Rusakov Yu.S. Study fluids car IR-spectroscopy. *Vestnik Kurganskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya: tekhnicheskie nauki* [Bulletin of Kurgan State University. Series: technical sciences]. 2013. No. 29. Pp. 65–68. (In Russian)

6. Berezin K.V., Dvoretzky K.N., Chernavina M.L. et al. The use of IR spectroscopy and density functional theory for estimating the relative concentration of triglycerides of oleic and linoleic acids in a mixture of olive and sunflower seed oils. *Optics and spectroscopy*. 2019. Vol. 127. No. 12. Pp. 883–889. DOI: 10.21883/OS.2019.12.48680.127-19. (In Russian)

7. Kuznetsov A.S. Computer modeling of the kinetics of thermal oxidation of an elastomeric composite in the programs table curve 2d/3d. *International research journal*. 2018. No. 3(69). DOI: 10.23670/IRJ.2018.69.027. (In Russian)

8. Madera A.G. *Matematicheskiye modeli i prinyatiye resheniy v upravlenii: rukovodstvo dlya top-menedzherov* [Mathematical models and decision making in management: a guide for top managers]. Moscow: URSS, 2022. 688 p. ISBN 978-5-9710-9125-7. (In Russian)

9. Korniyushko V.F., Kuznetsov A.S., Kolybanov K.Yu., Burliaeva E.V. Optimization of control of chemical and technological processes of mixing and structuring multi-component elastomeric composites based on mathematical modeling methods. *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*. Conference proceedings. Krasnoyarsk Science and Technology City Hall of the Russian Union of Scientific and Engineering Associations. 2020. P. 72016.

Информация об авторах

Кузнецов Андрей Сергеевич, канд. тех. наук, доцент кафедры информационных технологий, искусственного интеллекта и общественно-социальных технологий цифрового общества, Российский государственный социальный университет;

129226, Россия, Москва, ул. Вильгельма Пика, 4, стр. 1;

askgoogle@internet.ru, ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-1569-4765>, SPIN-код: 8442-7210

Разяпова Неля Юлаевна, канд. тех. наук, доцент кафедры информационных систем в химической технологии, МИРЭА – Российский технологический университет;

119571, Россия, Москва, проспект Вернадского, 78;

gazyarova@mirea.ru, ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-6413-4460>

Разливинская Светлана Владимировна, канд. тех. наук, доцент кафедры информационных систем в химической технологии, МИРЭА – Российский технологический университет;

119571, Россия, Москва, проспект Вернадского, 78;

razlivinskaya@mirea.ru, ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-7719-0530>, SPIN-код: 6402-7221

Information about the author

Andrey S. Kuznetsov, Candidate of Technical Sciences, Associate Professor of the Department of Information Technologies, Artificial Intelligence and Social Technologies of Digital Society, Russian State Social University;

129226, Russia, Moscow, 4 Wilhelm Pieck street, 1 building;

askgoogle@internet.ru, ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-1569-4765>, SPIN-code: 8442-7210

Nelya Yu. Razyapova, Candidate of Technical Sciences, Associate Professor of the Department of Information Systems in Chemical Technology, MIREA – Russian Technological University;

119571, Russia, Moscow, 78 Vernadsky avenue;

razyapova@mirea.ru, ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-6413-4460>

Svetlana V. Razlivinskaya, Candidate of Technical Sciences, Associate Professor of the Department of Information Systems in Chemical Technology, MIREA – Russian Technological University;

119571, Russia, Moscow, 78 Vernadsky avenue;

razlivinskaya@mirea.ru, ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-7719-0530>, SPIN-code: 6402-7221