

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

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-техно-логических 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. Сиркин 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-спектроскопии // 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.

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;

razyarova@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