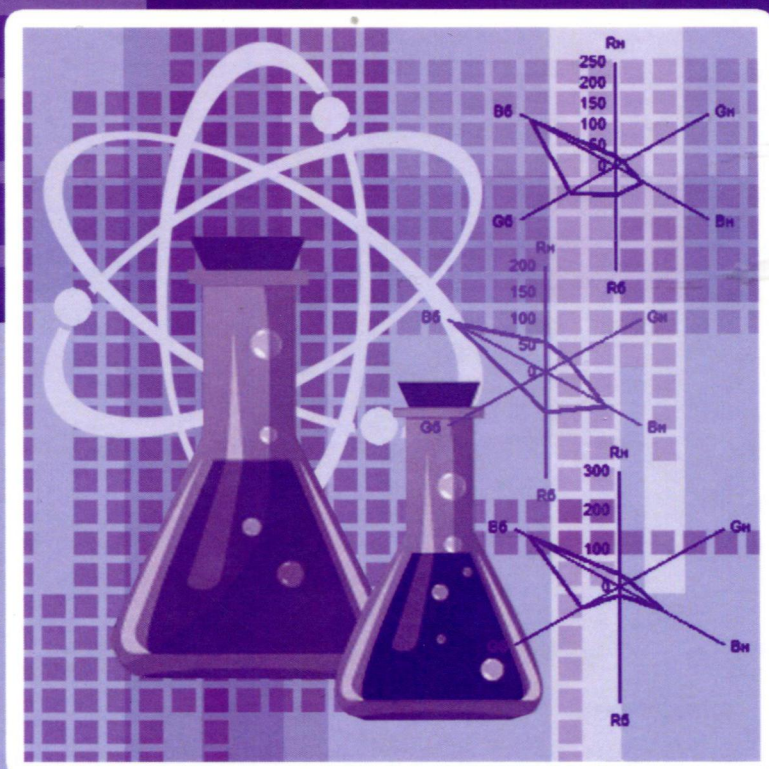


А. В. РУДАКОВА, О. Б. РУДАКОВ

ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В АНАЛИТИЧЕСКОМ КОНТРОЛЕ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ



Л. В. РУДАКОВА,
О. Б. РУДАКОВ

ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В АНАЛИТИЧЕСКОМ КОНТРОЛЕ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ

Монография
Издание второе, исправленное



• САНКТ-ПЕТЕРБУРГ • МОСКВА • КРАСНОДАР •
2018

ББК 24.4
Р 83

Рудакова Л. В., Рудаков О. Б.

Р 83 Информационные технологии в аналитическом контроле биологически активных веществ: Монография. — 2-е изд., испр. — СПб.: Издательство «Лань», 2018. — 364 с.: ил. — (Учебники для вузов. Специальная литература).

ISBN 978-5-8114-1871-8

В монографии рассмотрены возможности применения информационно-аналитических систем, цифровых технологий, унифицированных критериев, интегральных показателей и алгоритмов их использования для усовершенствования инструментальных методик химического анализа растворов биологически активных веществ, показаны примеры решения с помощью информационно-аналитических систем задач идентификации и проверки подлинности многокомпонентной продукции с вариативным составом, описаны способы обработки многопараметрического аналитического сигнала, получаемого от мультисенсорных, хроматографических или спектроскопических систем.

Книга содержит богатый справочный материал и может представлять интерес не только для аспирантов и студентов естественнонаучных, медицинских, инженерных профилей подготовки в качестве учебного пособия, но и для специалистов, работающих в соответствующих областях науки и промышленности.

ББК 24.4

Издается в авторской редакции

Рецензенты:

К. К. ПОЛЯНСКИЙ — доктор технических наук, профессор кафедры коммерции и товароведения Воронежского филиала Российского экономического университета им. Г. В. Плеханова, заслуженный деятель науки РФ;

А. В. КАЛАЧ — доктор химических наук, доцент, зам. начальника Воронежского института государственной противопожарной службы МЧС России.

Обложка
Е. А. ВЛАСОВА

© Издательство «Лань», 2018
© Коллектив авторов, 2018
© Издательство «Лань»,
художественное оформление, 2018

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение.....	3
Глава 1. Принципы создания и функционирования информационно-поисковых и экспертных систем в аналитиче- ской и фармацевтической химии	5
1.1. Классификация информационно-поисковых и экспертных систем.....	5
1.2. Применение информационно-поисковых, информационно- аналитических и экспертных систем в химическом и фармацевтическом анализе	14
1.3. Статистико-математические методы контроля и оптимизации многофакторных процессов и многокомпонентных составов.....	22
1.3.1. Обобщенные показатели качества.....	23
1.3.2. Критерий желательности Харрингтона.....	26
1.3.3. Обобщенный критерий оптимальности.....	29
1.3.4. Обобщенная целевая функция.....	30
1.3.5. Методы математической обработки экспертных оценок.....	30
1.3.6. Методы свертки многопараметрической информации.....	40
1.3.7. Контрольные карты.....	45
1.4. Применение цифровых технологий в аналитическом контроле. Компьютерные методы обработки цифрового сигнала.....	48
1.4.1. Применение цифровой цветометрии в химическом анализе.....	49
1.4.2. Цветовые модели для цифровых изображений.....	53
1.5. Мультисенсорные системы в химическом анализе.....	56
Глава 2. Информационно-аналитическая система СОЛЬВЕНТ-Р подбора растворителей для инструментальных методик анализа.....	59
2.1. Продукционные правила для информационно- аналитической системы СОЛЬВЕНТ-Р	59
2.2. Обобщенные критерии для различных методов детектирования.....	65
2.3. Критерии желательности для индивидуальных растворителей	77
2.4. Целевые функции для бинарных растворителей.....	81

2.4.1. Плотность бинарных растворителей.....	85
2.4.2. Поглощение бинарных растворителей в УФ-спектре.....	95
2.4.3. Показатель преломления бинарных растворителей.....	99
2.4.4. Диэлектрическая проницаемость бинарных растворителей.....	107
2.4.5. Вязкость бинарных растворителей.....	109
2.4.6. Поверхностное натяжение бинарных растворителей.....	113
2.4.7. Коэффициенты проницаемости бинарных растворителей.....	116
2.4.8. Температура кипения бинарных растворителей.....	118
2.4.9. Температура вспышки бинарных растворителей.....	122
2.4.10. Элюирующая сила бинарных растворителей.....	125
2.5. Тестирование бинарных растворителей с помощью обобщенных целевых функций.....	135
2.5.1. Примеры расчета обобщенных целевых функций для бинарных жидких систем для жидкостной экстракции и хроматографии.....	136
2.5.2. Примеры инструментальных способов определения БАВ с оптимизированными составами подвижных фаз.....	141
Глава 3. Информационно-аналитическая система для идентификации и экспертизы качества жиров и растительных масел	154
3.1. Разработка критериев подлинности многокомпонентной смеси с вариативным составом.....	156
3.2. Визуализация хроматографических данных с помощью контрольных карт.....	165
3.2.1. Применение диаграмм с областями в создании контрольных карт.....	166
3.2.2. Лепестковые диаграммы в качестве контрольных карт.....	169
3.2.3. Программа «Система идентификации жиров».....	176
3.3. Алгоритм оптимизации состава жировой фазы спредов.....	180
Глава 4. ИК–спектроскопическое определение содержания белка в водных растворах и слезной жидкости с применением цифровых технологий.....	186
4.1. ИК-спектроскопия лизоцима и белков слезной жидкости.....	189
4.2. Визуализация и редукция ИК-спектроскопических данных с помощью лепестковых диаграмм.....	193

Глава 5. Цветометрические методики определения физиологически активных веществ в сырье, лекарственных средствах и биологических жидкостях.....	200
5.1. Контроль качества продукции по параметрам цветности.....	207
5.1.1. Количественный контроль цветности воды	208
5.1.2. Определение цветности растворов водорастворимых витаминов	212
5.1.3. Определение цветности растительных масел.....	216
5.1.4. Определение цветности водных и водно-этанольных растворов антоциановых пигментов.....	220
5.1.5. Контроль цветности непрозрачных и твердых образцов.....	223
5.2. Применение цветометрии в анализе водных растворов биологически активных соединений с использованием цветных реакций.....	229
5.2.1. Цветометрическое определение лекарственных веществ в водных растворах.....	230
5.2.2. Цветометрическое определение нитритов в моче и нитропроизводных в водных растворах.....	234
5.2.3. Цветометрическое определение аминокислот, пептидов и белков в водных растворах.....	237
5.2.4. Цветометрическое определение фенолов и их производных.....	256
Глава 6. Применение микрофотографического способа регистрации эффектов набухания сорбционно-активных полимерных гранул в анализе растворов биологически активных веществ.....	269
6.1. Свойства полимерных материалов и методики их подготовки для измерения объемных эффектов	271
6.2. Кондиционирование, очистка и получение различных ионных форм ионообменных материалов.....	274
6.3. Методики определения размеров гранул.....	275
6.4. Особенности кинетики набухания ионогенных и неионогенных полимеров в водных и водно-спиртовых растворах	277
6.5. Влияние температуры на характер набухания полимерных гранул в воде и этаноле.....	285

6.6. Применение эффекта набухания ионогенных полимерных гранул в количественном определении аминокислот и лизоцима в водных и водно-солевых (изотонических) растворах.....	289
6.7. Микрофотографическая мультисенсорная система, основанная на эффектах набухания нескольких сорбционно активных полимерных гранул в анализируемых растворах.....	297
6.8. Применение эффекта набухания в определении состава водно-этанольных смесей.....	306
6.9. Применение микрофотографической мультисенсорной системы в контроле содержания лекарственных веществ в водных и водно-спиртовых растворах	309
Литература.....	317
Основные обозначения.....	355