РАЗДЕЛ II. ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ

Суслова С.А., Мамедов Э.И., Калмыкова Е.Н.

Алгоритм автоматизированного расчета степени замещения гидроксильных групп

*Липецкий государственный технический университет
(Россия, Липецк)*

doi: 10.18411/sr-10-12-2019-11

idsp: sciencerussia-10-12-2019-11

Аннотация

В работе приведен алгоритм автоматизированного расчета степени замещения (СЗ) гидроксильных групп в полисахаридах. С помощью программного комплекса Visual Basic for Application показан расчет СЗ ИК-спектров модифицированного образца крахмала. Результаты могут быть полезны для оценки степени замещения с высокой экспрессностью, простотой и информативностью.

Ключевые слова: полисахарид, степень замещения, ИК-спектроскопия, программный комплекс

В последние годы значительное внимание исследователей различных областей естествознания уделяется модифицированным полисахаридам растений [1-3]. Одной из причин столь активного интереса к поиску новых производных биополимеров углеводной природы является возможность их использования в качестве востребованных биоматериалов для осуществления адресной доставки и контролируемого высвобождения лекарственных веществ в процессе метаболизма [4]. Такое свойство полисахаридов открывает широкие перспективы для их практического применения не только в фармацевтической, но и косметической, а также в пищевой промышленности.

При выборе методики модификации полисахаридов важным этапом является оценка степени замещения гидроксильных групп, которую в последнее время осуществляют на основе анализа интенсивности сигналов ИК-спектров.

Целью данной работы является разработка алгоритма автоматизированного расчета степени замещения гидроксильных групп исходного полисахарида при осуществлении процедуры его модификации.

В настоящее время информация о расчете степени замещения (СЗ) гидроксильных групп исходного и модифицированного образцов полисахаридов с помощью ИК-спектроскопии носит ограниченный и противоречивый характер. Так, например, при оценке степени ацетилирования целлюлозы с использованием метода титрования и квадратичного полинома [5], сообщается о таких величинах, которые находятся в диапазоне 1,86–2,94. Рассматриваемые в литературе способы определения СЗ [6] основаны на использовании большого количества трудоемких операций, реагентов и требуют длительных затрат времени.

В то время как оценка степени эффективности этерификации с использованием предлагаемого нами метода, основанного на обработке ИК-спектров, дает значения СЗ в процентах (от 1,4 до 15,6 %).

В связи с этим разработка алгоритма автоматизированного расчета степени замещения гидроксильных групп, обеспечивающая возможность быстрого метода оценки эффективности модификации отличается простотой, позволяет повысить экспрессность определения степени замещения образцов полисахарида и не требует использования дорогостоящих реагентов.

Для реализации данного алгоритма в качестве программного обеспечения будем использовать Visual Basic for Application. Главное меню программного комплекса

«Автоматизированный расчёт степени замещения гидроксильных групп» приведено на рис.1.

Исходные данные ИК–спектров импортируются в программу Microsoft Excel из текстовых файлов: *X.txt* – данные исходного образца, *Y.txt* – данные модифицированного образца.

Рисунок 1 – Главное меню программы

В программе процесс импорта данных осуществляется при нажатии на кнопки «Ввод ИК-спектр исходный» и «Ввод ИК-спектр модифицированный». Модуль программы, реализующий загрузку данных в MS Excel, представлен на рис.2.

Рисунок 2 – Фрагмент модуля импорта данных в Excel на VBA

В результате выполнения модуля программы, отвечающего за импорт данных, в столбце **A** располагаются значения координат **X** – волновое число, а в столбце **B** – координат **Y** – пропускание исходного образца.

Аналогичным образом в столбцы **C** и **D** загружаются значения координат модифицированного образца, рис.3.

	A	B	C	D	I	J	K	L	M	N	O
1	X	Y	X'	Y'	ВВОД ИК-СПЕКТР ИСХОДНЫЙ		ПОСТРОИТЬ ГРАФИК				
2	397,3361	53,567607	397,3361	57,996007							
3	401,1937	51,354423	401,1937	56,273035	ВВОД ИК-СПЕКТР МОДИФИЦИРОВАННЫЙ		РАСЧЁТ СТЕПЕНИ ЗАМЕЩЕНИЯ ГИДРОКСИЛЬНЫХ ГРУПП				
4	405,0514	50,485629	405,0514	55,799244							
5	408,909	49,492121	408,909	54,846016							
6	412,7666	48,981876	412,7666	55,104737							
7	416,6243	48,033428	416,6243	54,476025							
8	420,4819	48,921835	420,4819	54,328506							
9	424,3395	48,446552	424,3395	54,19843							
10	428,1972	48,20023	428,1972	54,147015							
11	432,0548	48,114897	432,0548	53,117327							
12	435,9124	47,417199	435,9124	52,494307							
13	439,77	47,032583	439,77	52,090649							
14	443,6277	47,781506	443,6277	52,745353							
15	447,4853	48,354039	447,4853	53,510641							
16	451,3429	48,035767	451,3429	54,277151							
17	455,2006	48,916872	455,2006	54,168909							
18	459,0582	48,866712	459,0582	54,268537							
19	462,9158	48,359344	462,9158	54,074363							
20	466,7735	47,876088	466,7735	53,70612							

Рисунок 3 – Импорт данных исходного и модифицированного образцов

Модуль, осуществляющий построение графиков исходного и модифицированного образцов, рис. 4, запускается с помощью кнопки «Построить график».

```
Private Sub CommandButton1_Click()
Columns("A:B").Select
ActiveSheet.Shapes.AddChart.Select
ActiveChart.ChartType = xlXYScatterSmoothNoMarkers
ActiveChart.SetSourceData Source:=Range("РАСЧЁТ!$A:$B")
ActiveChart.Axes(xlCategory).Select
ActiveChart.Axes(xlCategory).ReversePlotOrder = True
ActiveChart.Axes(xlCategory).Crosses = xlMaximum
ActiveChart.SeriesCollection(1).Select
ActiveChart.SeriesCollection.NewSeries
ActiveChart.SeriesCollection(2).XValues = "=РАСЧЁТ!$C$1:$C$14"
ActiveChart.SeriesCollection(2).XValues = "=РАСЧЁТ!$C$2:$C$936"
ActiveChart.SeriesCollection(2).Values = "=РАСЧЁТ!$D$2:$D$936"
ActiveChart.SeriesCollection(2).Name = """"МОДИФИЦИРОВАННЫЙ""""
ActiveChart.SetElement (msoElementPrimaryValueAxisTitleRotated)
Selection.Caption = "ПРОПУСКАНИЕ,%"
ActiveChart.Axes(xlCategory).Select
ActiveChart.SetElement (msoElementPrimaryCategoryAxisTitleAdjacentToAxis)
Selection.Caption = "ВОЛНОВОЕ ЧИСЛО"
ActiveChart.ChartArea.Select
End Sub
```

Рисунок 4 – Фрагмент модуля импорта данных в Excel на VBA

График ИК-спектра исходного и модифицированного образцов представлен на рис.5.

Рисунок 5 – График ИК-спектра

После построения спектров для исходного и модифицированного образцов производим расчет степени замещения гидроксильных групп.

Формулы для расчета степени замещения (СЗ, %) гидроксильных групп:

$$X = \frac{B * 100\%}{A},$$

$$CЗ = 100 - X,$$

где A – снижение интенсивности полосы поглощения для исходного образца;
 B – снижение интенсивности полосы поглощения для модифицированного образца;
 $CЗ$ – степень замещения гидроксильных групп. Снижение интенсивности ОН-групп свидетельствует об их замещении.

Модуль расчёта степени замещения запускается по кнопке «РАСЧЕТ СТЕПЕНИ ЗАМЕЩЕНИЯ ГИДРОКСИЛЬНЫХ ГРУПП». Фрагмент модуля представлен на рис.6.

```
Private Sub CommandButton2_Click()

Dim Title As String
Dim x As Single, A As Single, B As Single, CZ As Single

Title = "ВЫЧИСЛЕНИЕ СТЕПЕНИ ЗАМЕЩЕНИЯ" ' Заголовок
A = Val(InputBox("ВВЕДИТЕ СНИЖЕНИЕ ИНТЕНСИВНОСТИ ИСХОДНОГО ОБРАЗЦА,%", Title))
B = Val(InputBox("ВВЕДИТЕ СНИЖЕНИЕ ИНТЕНСИВНОСТИ МОДИФИЦИРОВАННОГО ОБРАЗЦА,%", Title))
x = B * 100 / A
CZ = 100 - x
MsgBox ("СТЕПЕНЬ ЗАМЕЩЕНИЯ =" + Format(CZ, "00000"))
Sheets("РАСЧЁТ").Select
Cells(30, 12) = "СТЕПЕНЬ ЗАМЕЩЕНИЯ"
Cells(31, 12) = CZ
End Sub
```

Рисунок 6 – Фрагмент модуля расчета степени замещения на VBA

Итоговые результаты работы программного комплекса показаны на рис.7.

Рисунок 7 – Результаты работы программного комплекса

Выводы

Предложен алгоритм автоматизированной системы расчета степени замещения гидроксильных групп полисахаридов. Для реализации данного алгоритма был использован программный комплекс Visual Basic for Application.

Предлагаемый способ определения степени замещения крахмала позволяет с высокой степенью точности, экспрессности и информативности проводить оценку степени замещения модифицированных образцов полисахаридов, полученных при различных условиях модификации.

Данный программный комплекс можно применять для обработки неограниченного количества экспериментальных результатов.

1. Источник №1 Мазур, Л.М. Физико-химические процессы гелеобразования пектинов в пищевых технологиях [Текст] / Л.М. Мазур, Н.В. Симурова, Ю.В. Слива // Сахар. – 2014. - № 1. – С. 43-46.
2. Источник №2 Модифицированные крахмалы [Электронный ресурс]. – Электрон. дан. – Режим доступа: <http://www.foodtours.ru/toiks-669-1.html>
3. Источник №3 Пат. 2435787 Российская Федерация, МПК C08B 37/12. Способ модификации агара [Текст] / Подкорытова А.В., Игнатова Т.А., Буй М.Л., Тран Т. В. - № 2010120013/13; заявл. 20.05.2010; опубл. 10.12.2011, Бюл. № 34. – С. 1-6.
4. Источник №4 Ершова, О.В. Способы химической модификации целлюлозы с целью создания новых композиционных материалов [Текст] / О.В. Ершова, Л.В. Чупрова // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. – 2016. – №10. – С. 359-362.
5. Источник №5 Pengfei, F. Quantitative analysis of cellulose acetate with a high degree of substitution by FTIR and its application [Text] / F. Pengfei, L. Liang, C. Bowen, J. Song // The Royal Society of Chemistry. – 2017. – V.9. – P.6194-6201.
6. Источник №6 Калинина, Л.С. Химические методы исследования синтетических смол и пластических масс [Текст] / Л.С. Калинина, Т.Н. Кастерина. – Москва: Госхимиздат, 1963. – 239 с.

Челебаев С. В., Фиалкина Н.А.

Разработка функциональной модели информационной системы учебного центра дополнительного образования

*Рязанский государственный радиотехнический университет им. В.Ф. Уткина
(Россия, Рязань)*

doi: 10.18411/sr-10-12-2019-12

idsp: sciencerrussia-10-12-2019-12

Аннотация

Рассматривается задача разработки и проектирования информационной системы учебного центра дополнительного образования. Целью статьи является разработка функциональной модели, которая позволит автоматизировать процесс регулирования образовательной деятельности с момента подачи заявки и пакета документов от слушателя до выдачи документа об образовании. Используя методологию IDEF, а также инструментальное средство BPwin, построим контекстную диаграмму, диаграмму нижнего уровня и диаграмму потоков данных для данной системы, что позволит провести всесторонний анализ процесса регулирования образовательной деятельности.

Ключевые слова: дополнительное образование; информационная система; функциональная модель.

В связи со сложившейся экономической ситуацией, у граждан появляется высокая потребность в освоении дополнительных профессиональных программ (программ повышения квалификации, программ профессиональной подготовки и