УДК 664

# ГРАНИЦЫ ПРИМЕНИМОСТИ ПРИНЦИПА KISS В ПРАКТИКЕ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СПЕКТРАЛЬНОЙ ДИАГНОСТИКИ ПРИ КВАЛИМЕТРИИ ПИЩЕВЫХ ПРОДУКТОВ И НУТРИЕНТОВ

## Орехов Ф.К.

ИХФ РАН, Москва, e-mail: theorehov@gmail.com

Не представляет новизны утверждение о высокой степени устаревания российского парка оборудования, используемого для анализа качества пищевой продукции на местах и сырья в условиях заготовки. Положение усугубляется устареванием стандартов, которые, в основной массе, были заложены еще в советский период. Как следствие, для множества простых диагностических операций нормируемое оборудование заведомо устарело или, в принципе, не производится. Многие используют бывшие в употреблении метрологические средства с заведомо флуктуирующими в силу физического износа параметрами, несмотря на регулярную, по ранним меркам, тарировку, юстировку и поверку. Известны исследования, говорящие о деградации метрологического качества оборудования многих типов после многих лет консервации (в случае прибора производства СССР этот срок, как правило, составляет, в среднем > 30 лет). В связи с этим возникает проблема получения достоверных и репрезентативных данных с техники подобного рода без нарушения стандартных операций по ГОСТ или других нормативных условий. Аппаратный апгрейд, как правило, не является рациональным, поскольку его стоимость соответствует стоимости современного прибора. Невозможность аппаратного апгрейда такой техники не противоречит, однако, её оцифровке и внедрению прогрессивных алгоритмов обработки данных, нивелирующих её метрологическое несовершенство, а также средств интерпретации данных (т.н. «data mining»), которые позволяют получить качественно новые результаты без привлечения новых приборов и дорогого аппаратного апгрейда вышеуказанных морально устаревших единиц техники. Современная идеология анализа данных дает возможность имплементировать эти принципы на современных приборах и портировать на современные ЭВМ с современными операционными средами, поэтому в дальнейшем реализуем лоукостный переход на спектрохимические и спектрально-картирующие микроминиатюрные лаборатории на чипе с такими же математическими принципами обработки данных.

Ключевые слова: квалиметрия, пищевая продукция, спектроскопия, kiss, анализ больших данных, апгрейд, бутстреп, хемометрика

# SPECTRAL MOLECULAR QUALIMETRY BASED ON KISS PRINCIPLES Orekhov F.K.

ICP RAS, Moscow, e-mail: theorehov@gmail.com

No novelty is the assertion of a high degree of obsolescence of the Russian fleet of equipment used for the analysis of food quality in the field of raw materials and under the workpiece. The situation is exacerbated by the obsolescence of standards which, in the bulk, were laid during the Soviet period. As a consequence, for a variety of simple diagnostic operations normable equipment obviously has expired or, in principle, not made. Many use the previously used metrology tool with a known fluctuating due to physical deterioration parameters, despite regular, early on standards, calibration, adjustment and calibration. There are studies which indicate degradation of the metrological quality of many types of equipment, after years of conservation (in the case of the unit of production of the USSR, this period usually is, on average > 30 years). In this connection there is the problem of obtaining reliable and representative data from this kind of technology without disrupting normal operations in accordance with GOST or other standard conditions. A hardware upgrade, as a rule, is not rational, because the cost corresponds to the cost of the modern instrument. The inability to upgrade hardware such equipment does not contradict, however, its digitization and the introduction of advanced data processing algorithms, leveling its metrological imperfections, as well as means of interpretation of data (so-called «data mining»), which allows to obtain qualitatively new results without the involvement of new devices and expensive hardware upgrades above obsolete units. Modern data analysis ideology makes it possible to implement these principles in modern appliances and modern port on the computer with modern operating environments, thus further implementing the transition to loukostny spectrochemical and spectrally mapped micro-miniature laboratory on a chip with the same mathematical data processing principles.

Keywords: qualimetry, food industry, spectroscopy, kiss, big data, data mining, hardware upgrade, butstrap, chemometrics

### Предлагаемые и реализованные технологии

С целью скомпенсировать переход к ретроинжинирингу и индуцируемый им переход к технологической идеологии KISS («Keep It Short and Simple» = «Делай Короче и Проще»; принципы проектирования, при которых простота системы декларируется

в качестве основной цели \ ценности разработки), среди разработчиков замещающих технологий и их потребителей, в частности, было целесообразно использовать повышение эвристической ценности конкретных измерений за счет комплексирования дескрипторов. Данная идеология исходно была имплементирована нами в формате управления средствами сбора данных спектрального оборудования на базе мультикрейтового стенда КАМАК [1, 2]. В качестве одного из основных аспектов применимости системы была заявлена и апробирована молекулярная диагностика пищевой продукции для определения её безопасности с точки зрения токсикологии и аллергологии [3, 4].

Были собраны программно-аппаратные комплексы для обработки данных молекулярного анализа (спектрофотометрия – SPECORD, включая отдельный прибор для регистрации в ИК-диапазоне [5, 6] и отдельный спектрофлуориметр с функцией сцинтилляционного анализатора [7, 8]), реализующие процедуры и операции сбора и обработки данных с увеличением информативности анализа за счет множественных прогонов статистики (без бустрепа) и математического «коррелирования». После сбора статистических данных на ЭВМ осуществляли прогонки на графах и формирование окончательного квалиметрического файла с результатом анализа в виде древа принятия решений с весовыми значениями.

Полученная система была первично апробирована на молокопродуктах, а точнее - на лактохимических аналитах, пригодных для вышеуказанных типов и принципов анализа. Наиболее современным решением является гибридизация указанных методов обработки с использованием микрофлюидных устройств со спектральной, псевдоспектральной и спектрозональной регистрацией. Введение «лабораторий на чипе» в системы компенсации KISSупрощения молекулярно-аналитических и молекулярно-диагностических процессов не на устаревающем оборудовании, но с современными принципами анализа больших данных дало возможность отграничить области применимости KISS-модернизации, так как внедрение компактной недорогой микросистемы (лаборатории на чипе) обычно обходилось более дешево, чем аппаратный апгрейд старого прибора. Примеры использования микрофлюидных устройств спектральной, псевдоспектральной и спектрозональной регистрации с объективной калибровкой по спектральным данным спектрофотометрическим температурам были продемонстрированы в наших работах по анализу молокопродуктов [9-11], последняя из которых была представлена на стендовую сессию International Dairy Meet (New Orleans, USA, Louisiana) в июне 2016 г., благодаря любезности наших зарубежных коллег.

Возможности использования предлагаемого принципа не ограничиваются оптической спектроскопией и жидкими пищевыми аналитами. В частности - по аналогии с ранее предложенным нашей группой принципом анализа тканей для хирургии [12, 13 (см. также интернациональный обзор по данной теме [14, 15]) - предлагается использовать диссекторы и дезинтеграторы различного типа как носители оптоволоконных, импедансных, электрохимических сенсоров, путём использования которых можно добиться регистрации множества дескрипторов, которые будут использоваться для квалиметрического анализа продукции, как и в случаях габаритных стационарных приборов, рассмотренных ранее, только при работе со слайсами, получаемыми в ходе механизированной переработки.

Единственной проблемой, возникающей при данных модификациях форм контроля, является несоответствие некоторым ГО-СТам, принятым, обычно, не позднее 1990-х гг. Как правило, закладка файлов устаревших опорных данных (по нормативной документации до-компьютерного периода), приводила только к ухудшению кластеризации, осуществляемой методами обучения с учителем, а также с использованием нечеткой логики. К настоящему периоду выявлена и описана потребность в выстраивании релевантностей тех или иных параметров в зависимостях и иерархические цепи для обеспечения данными нового запуска программно-аппаратного проекта DIY-KISSхемометрики (в случае сохранения пользовательской целесообразности подобных задач), так как проект, данные о котором приведены в настоящей итоговой статье, завершен в 2014 году (кроме опубликования результатов, завершенного в 2016 году; за исключением данных коммерциализуемого характера, сохраняемых конфиденциальными до момента их внедрения в агроиндустрии).

#### Выводы

Индуцированная социально-экономическими причинами потребность в технологиях упрощенного типа (KISS) должна реализовываться в квалиметрии пищевых продуктов не путем понижения количества анализов ниже минимума необходимой номенклатуры или уменьшения числа переменных, входящих в in silico модель стандарта качества, а за счет упрощения автоматизированного квалиметрического сведения данных для персонала.

В случае использования одной стадии упрощающего опосредования KISS в виде использования упрощенного, стандартизованного по старым нормативам операционально-архаического или принципиально устаревшего оборудования – необходимо вводить компенсирующую технику множественной регистрации и статистической алгоритмически-номографической обработки данных, которая позволит автоматически выявить ошибки в случае их появления. В противном случае очевидна неизбежность возникновения гетероскедастичных «выбросов», отрицательным образом влияющих на аналитику интерпретируемых данных на оконечной стадии. Создание SCADA-контроля, сопряженного и совместимого с математической, номографической компаративной обработкой, может явиться шагом к трансформации контрольной KISS-метрологии в автоматизированную квалиметрию. Попытки автоматизации квалиметрии процессов терпят крах по причине недостатка критериев релевантности параметрической информации, но разработанные и экспертно-тестированные графические интерфейсы говорят о принципиальном удобстве использования подобной техники операторами, если таковые в этом могут быть заинтересованы при анализе качества пищевой продукции.

#### Список литературы

- 1. Орехов Ф.К., Градов О.В. Гибридизация СОВАС, QSPR/QSAR и SBGN: единство теории и практики в анализе данных и проектировании спектрально-биохимического лабораторно диагностического и биомедицинского оборудования // Биотехносфера. 2014. Т. 33, № 3. С. 29–31.
- 2. Orehov T. C., Gradov O. V. Hybridization of COBAC, QSPR / QSAR and SBGN technologies: The unity of theory and practice for biomedical technique design and biochemical diagnostic information analysis // Journ. Med. Bioeng. 2016. Vol. 5, no. 2. P. 128–132.
- 3. Orehov F.C., Gradov O.V. In situ/real time analysis in frame of COBAC, QSPR, QSAR and SBGN as a novel tool for the biosimilarity studies and physio-chemical prognostics in the biomedicine-assisted screening and experimental toxicology and allergology // Journal of Bioanalysis & Biomedicine. 2015. Vol. 7, no. 5. P. 95.
- 4. Orehov F.C., Gradov O.V. On-line/real time compatibility of COBAC analysis, QSPR, QSAR and SBGN big data mining as a novel tool for physiochemical prognostics in the biomedicine-assisted screening and experimental toxicology and allergology // Journal of data mining in genomics & proteomics.  $-2015.-Vol.\ 6,$  no.  $4.-P.\ 64.$
- 5. Орехов Ф.К. Инфракрасный анализатор молока на базе ИК-спектрофотометра ZEISS для контроля теплофизического, термобиохимического качества молока в процессе глобарной пастеризации: принципиальные основы много-

- факторного ИК-контроля // Теплофизика и теплотехника. 2014. Т. 4, № 1. С. 3–10.
- 6. Орехов Ф.К. Инфракрасный анализатор молока на базе ИК-спектрофотометра ZEISS для контроля теплофизического, термобиохимического качества молока в процессе глобарной пастеризации: инженерно-конструкторская работа над прибором // МНО. − 2014. № 1(41). С. 20–32.
- 7. Панкратов С.К., Закотеев Ю.А., Орехов Ф.К. Жидкостной сцинтилляционный анализатор молока с лазерным спектральным калибровочным позиционированием на базе флуоресцентного спектрофотометра // Молочнохозяйственный вестник. 2013. № 3 (11). С. 34–55.
- 8. Орехов Ф.К. Спектрохимическая лактохимия. Lambert Academic Publishing GmbH & Co. KG Саарбрюккен,  $2014.-C.\ 108.$
- 9. Градов О.В., Орехов Ф.К. О разработке компаративных лабораторий на чипе для анализа молочной продукции с автоматической калибровкой по спектрофотометрической температуре и кортежной хемометрической систематизацией аналитов // Ветеринария, зоотехния и биотехнология. 2014.- N 26.- C. 45-63.
- 10. Градов О.В., Орехов Ф.К. Компаративные лаборатории на чипе для анализа молочной продукции с цифровой калибровкой по спектрофотометрической / колориметрической температуре и хемометрической кластеризацией // Технология и товароведение инновационных пищевых продуктов. -2014. № 5 (28). -C. 21-41.
- 11. Orekhov F.K., Gradov O.V. Comparative labs-on-a-chip for dairy product analysis with automatic calibration using spectrophotometric or colorimetric temperature and tuple chemometric analyte systematization // J Adv Dairy Res. 2016. Vol. 4, no. 2 (Suppl.). P. 24.
- 12. Градов О.В., Яблоков А.Г. К абстрактной феноменологической модели квалиметрирующего микрохирургического инструмента // Биотехносфера. -2014. -T. 33, № 3. -C. 39-41.
- 13. Jablokov A.G., Gradov O.V. Multiparametric qualimetric microsurgical scanning chip-lancet model: theoretical metrological and biomedical considerations // MicroMedicine. 2015. Vol. 3, no. 2. P. 31–35.
- 14. Смит С., Линь В., Берлиз Ж., Панов В., Градов О., Яблоков А. Интраоперационная физико-химическаяи физико-кимическая квалиметрия как принцип многофакторного контроля хирургических манипуляций (международная библиографическая справка с учетом ненглоязычной литературы) Часть І: Общие принципы контроля // Международные Обзоры: Клиническая Практика и Здоровье. 2014. № 1(7). С. 17—30.
- 15. Смит С., Линь В., Берлиз Ж., Панов В., Градов О., Яблоков А. Интраоперационная физико-химическая и физиолого-биохимическая квалиметрия как принцип многофакторного контроля хирургических манипуляций (международная библиографическая справка с учетом неанглоязычной литературы). Часть ІІ: Интраоперационная спектроскопия // Международные Обзоры: Клиническая Практика и Здоровье. 2014. № 2(8). С. 5–20.