

А. П. АНИСИМОВ, Г. Н. КУКЛИН

(Москва)

НЕКОТОРЫЕ ПЕРСПЕКТИВЫ СОЗДАНИЯ АВТОМАТИЗИРОВАННЫХ СИСТЕМ СБОРА И ОБРАБОТКИ СПЕКТРАЛЬНОЙ ИНФОРМАЦИИ БИОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ

Физические методы исследования находят широкое применение в биологии. В настоящее время для изучения различных биологических и сложных химических структур активно используются спектральные методы.

Наиболее распространены следующие спектральные методы: радиоспектроскопия магнитного резонанса (ядерный магнитный резонанс, двойной электронно-ядерный резонанс); оптическая спектроскопия (УФ область, видимая область, ИК область); масс-спектрометрия; эффект Мессбауэра и др.

Конечная цель спектральных исследований заключается в выяснении структуры биологического вещества (объекта).

Рассматривая проблему автоматизации спектроскопических исследований, мы сталкиваемся, в первую очередь, с большим разнообразием технических средств, что накладывает определенные трудности в формировании требований к единой системе средств обработки спектральной информации. Кроме того, первичная аппаратура объекта эксперимента инициирует различные по обмену и скорости потоки информации. Так, например, скорость съема данных с современных спектрометров лежит в пределах от 0,1 байт/с до 20 млн байт/с. При этом единственный массив данных может быть от 100 до 32 000 слов.

Специальное программное обеспечение комплекса автоматизации спектральных исследований должно быть направлено (помимо типовых универсальных операций) на решение следующих основных задач:

- получение усредненного спектра по результатам нескольких измерений (режим накопления) с целью улучшения отношения сигнал — шум;
- определение положения максимумов полос поглощения путем интерполяции по эталонному спектру;

- определение истинных параметров контуров полос поглощения (учет влияния аппаратной функции);

- определение относительной интенсивности линий поглощения (относительно максимальной интенсивности);

- вычисление оптической плотности;

- вычисление коэффициента поглощения в пределах одной линии поглощения и в пределах полосы поглощения, задаваемой оператором;

- синтез спектров по задаваемым оператором параметрам контуров составляющих линий;

- разделение сложной полосы поглощения на составные линии (до 10 линий);

- получение суммы (разности) двух произвольных спектров;

- определение вторых моментов полос поглощения;

- нахождение Фурье-образа спектра;

- осуществление операции интегрирования спектра;

- осуществление операции дифференцирования спектра;

- осуществление операции сглаживания спектра;

- получение обратной функции спектра;

- осуществление операции логарифмирования спектра;

- осуществление операции коррекции базовой линии;

- осуществление фазовой коррекции.

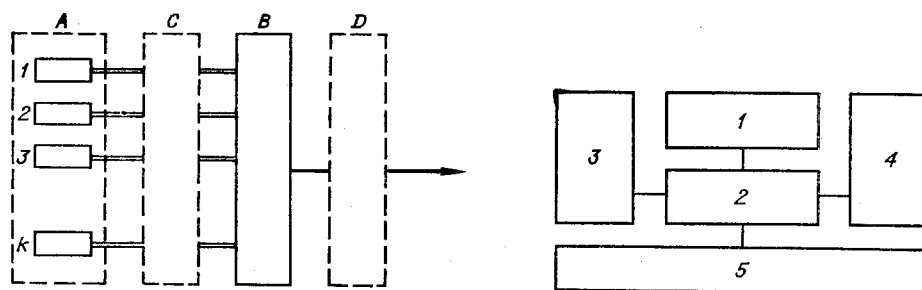


Рис. 1.

Рис. 2.

Кроме перечисленных задач, автоматизированная система должна позволять производить квантово-механические расчеты спектров и осуществлять идентификацию спектров.

Исходя из всех перечисленных выше требований, наиболее удобной, на наш взгляд, будет многоуровневая система сбора и обработки спектральных данных.

Специфика спектроскопических исследований требует осуществления специализации уровней только в рамках лабораторий.

Общая блок-схема такой системы представлена на рис. 1, где A — (1, 2, 3, ..., K) мини-комплексы экспериментальной установки в лаборатории; B — вычислительная машина второго уровня; C — линии и устройства связи мини-комплексов с вычислительной машиной второго уровня; D — линии и устройства связи между машинами второго уровня.

Мини-комплекс экспериментальной установки предназначен для предварительной обработки, накопления данных спектральных приборов, а также оперативного просмотра и отбора получаемой информации от спектрометрических приборов для последующего ввода спектров в общую библиотеку.

Вычислительная машина второго уровня предназначена для проведения сложных расчетов и организации библиотеки спектров.

Исходя из общих основных технических требований, архитектура мини-комплекса должна содержать следующие основные устройства (рис. 2): 1 — экспериментальная установка (спектрометр); 2 — устройство согласования типа САМАС; 3 — графопостроитель; 4 — индикаторный пульт дисплей); 5 — мини-ЭВМ (в базовом комплекте).

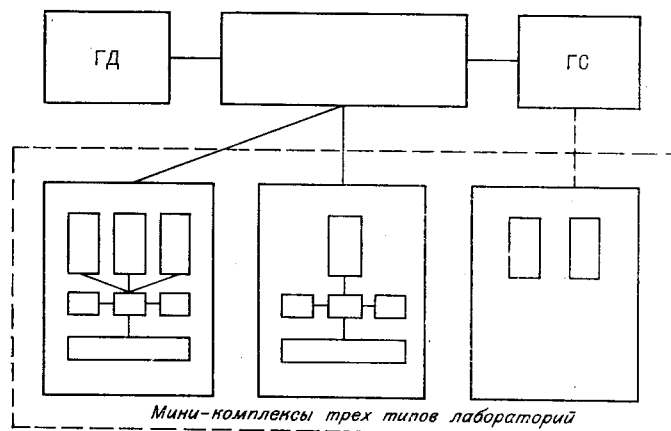


Рис. 3.

Требуемое разрешение спектров и скорость их съема накладывают следующие ограничения на параметры устройств мини-комплекса. Мини-ЭВМ: быстродействие 1—2 мкс; емкость памяти 4К — 32К слов; длина слова 16 двоичных разрядов; устройства ввода — вывода: перфоратор; перфосчитывающее и печатающее устройства.

Индикаторный пульт (дисплей): изображаемые символы — буквы, цифры, графики; количество высвечиваемых символов не менее 1000; разрешение графической части дисплея 1000×1000.

Графопостроитель: размер поля 250×350 мм; разрешение не хуже 0,3 мм.

В ряде случаев целесообразно использование одного мини-комплекса с перечисленными параметрами совместно с несколькими спектрометрами (например, с медленно действующими оптическими). Кроме того, в ближайшее время будет сохраняться ситуация, при которой осуществление связи спектральной аппаратуры со средствами вычислительной техники нецелесообразно или невозможно.

В связи с изложенным общая блок-схема системы автоматизации сбора и обработки спектральной информации может быть представлена на рис. 3, где в систему дополнительно включены: ГД — графический дисплей, ГС — считыватель с графиков.

*Поступила в редакцию
4 февраля 1974 г.*

УДК 551.46.073-52

Л. С. СИТНИКОВ

(Москва)

СОСТОЯНИЕ И ЗАДАЧИ АВТОМАТИЗАЦИИ ЭКСПЕРИМЕНТА В ОКЕАНОЛОГИИ

Введение. Интерес к проблеме изучения и освоения Мирового океана в последнее время настолько возрос, что сейчас указанная проблема по своей значимости ставится в один ряд с космическими исследованиями и работами в области ядерной энергии. Это обусловлено рядом причин: важность Мирового океана как источника биологических и минеральных ресурсов, его определяющая роль в формировании климата и, следовательно, необходимость изучения Мирового океана для повышения точности и заблаговременности прогнозов погоды.

Поскольку современная океанология ставит своей целью изучение не отдельных физических процессов или явлений, а комплексное исследование самых различных полей океана во взаимосвязи и развитии, все шире развиваются новые методики изучения Мирового океана, связанные, как правило, с необходимостью переработки больших объемов информации. Такие методики нереализуемы без автоматизации эксперимента преимущественно на основе применения современной вычислительной техники.

Основные методики и технические средства экспериментального исследования Мирового океана. До недавнего времени даже соленость морской воды определялась в результате анализа взятой пробы на борту судна. По мере развития приборного обеспечения все большая часть информации получается «in situ», однако и сегодня, и в будущем сбор