

Министерство образования Республики Беларусь  
Учреждение образования  
Белорусский государственный университет  
информатики и радиоэлектроники

УДК 004.422.81

Шевцов  
Дмитрий Олегович

Веб-приложение по созданию и управлению планом химических  
экспериментов для роботизированных станций

### **АВТОРЕФЕРАТ**

на соискание степени магистра технических наук  
по специальности 1-40 80 05 "Математическое и программное обеспечение  
вычислительных машин, комплексов и компьютерных сетей"

Научный руководитель  
Куликов Святослав Святославович  
кандидат технических наук, доцент

Минск 2019

## **ВВЕДЕНИЕ**

Актуальной задачей современной аналитической химии является решение проблем автоматизации методов химического анализа. Возрастающая потребность в полной или, по крайней мере, частичной механизации и автоматизации аналитического процесса напрямую связана с постоянно растущей необходимостью выполнения огромного числа рутинных анализов в самых разных сферах деятельности человека – фармацевтике, медицине, службах контроля окружающей среды, криминалистике и др. [1].

Благодаря непрерывному развитию техники появляются все новые специализированные устройства, способные заменить человека на всех стадиях химического анализа. Такие приборы способны проводить отдельные операции – отбирать и распределять жидкие растворы, проводить химические анализы, обрабатывать полученные результаты и др.

Необходимым фактором автоматизации химического эксперимента и последующего его управления является установка связи между всеми стадиями процесса. Подобное взаимодействие осуществляется посредством специализированного программного обеспечения (ПО). Такое ПО позволило бы существенно сократить временные затраты на планирование, подготовку и проведение химического эксперимента, снизить затраты используемых материалов, увеличить точность и воспроизводимость результатов, уменьшить воздействие вредных химических веществ на человека, а также исключить влияние человеческого фактора.

Текущая работа посвящена проблеме интеграции современной автоматизированной техники в химические лаборатории, а именно разработке веб-приложения, ориентированного на связь между химиком и робототехникой. Подобные приложения призваны стать удобной платформой, позволяющей легко конфигурировать и проводить химические эксперименты.

В данном автореферате излагается краткое содержание магистерской диссертации на тему "Веб-приложение по созданию и управлению планом химических экспериментов для роботизированных станций".

## **ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ**

Целью проводимых исследований является разработка веб-приложения по созданию и управлению планом химического эксперимента для роботизированных станций.

Задачи проводимых исследований:

1. Определить спецификации требований, на основе которых будет создано веб-приложение.

2. Разработать веб-приложение на языке программирования Java с использованием Java-фреймворка Google Web Toolkit (GWT).

3. Провести моделирование эксперимента по исследованию редокс-систем в разработанном веб-приложении.

Достижение сформулированных целей и решение соответствующих задач позволило вынести на защиту следующие положения:

1. Временная сложность на проведение эксперимента по отбору оптимальной редокс-системы, смоделированного в разработанном веб-приложении по созданию и управлению планом химических экспериментов для роботизированных станций, снизилась в 12 раз в сравнение с ручным исполнением.

2. Разработанное веб-приложение по созданию и управлению планом химических экспериментов для роботизированных станций позволило решить проблему разделенности этапов автоматизированного химического эксперимента и объединить его разнонаправленные стадии, предоставив возможность проводить полноценный химический эксперимент в автоматизированном режиме.

Личный вклад автора заключается в постановке целей и задач, непосредственной разработке веб-приложения, проведении и моделировании эксперимента по отбору оптимальной редокс-системы. Все результаты, приведенные в диссертации, получены соискателем лично. Автор принимал участие в обсуждении полученных результатов и дальнейших планов исследований, подготовил тезисы и доклады на конференции.

Результаты работы опубликованы в сборнике тезисов 54-й научно-технической конференции аспирантов, магистрантов и студентов БГУИР, в сборнике материалов IX международной научно-методической конференции «Высшее техническое образование: проблемы и пути развития».

## **ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ**

Во **введении** рассмотрена проблема интеграции современной автоматизированной техники в химические лаборатории, решаемая посредством разработки необходимого программного обеспечения. Определены основные направления исследований в области разработки программного обеспечения для роботизированных станций.

В **первой главе** приводится обзор опубликованных материалов, отражающих современное состояние исследований, связанных с темой магистерской диссертации. Автор последовательно рассматривает принципы автоматизации химического анализа и идеи, лежащие в его основе, описывает проблемы автоматизации химических лабораторий, останавливаясь на основных

используемых приборах и методиках, формулирует цели и задачи исследований, показывает актуальность темы диссертационной работы, дает краткую характеристику исследуемых вопросов, обозначает практическую ценность работы.

Во **второй главе** описываются технические средства, использованные при разработке веб-приложения – язык программирования, на котором реализовано приложение, используемые фреймворки и библиотеки, платформы и базы данных. Предоставлены данные о средах разработки.

В **третьей главе** установлен план разработки веб-приложения. Первоначально на основе поставленных задач определены спецификации требований к конечному продукту разработки, а также разработана архитектура приложения. Исходя из поставленных задач реализовано рабочее пространство, в котором существует возможность просматривать информацию о материалах, создавать растворы и заполнять микропланшеты. Создание плана эксперимента осуществляется на пользовательской стороне приложения. Информация о материалах, микропланшетах, операциях и анализах предоставляется базой данных. Клиентская часть приложения создана из взаимосвязанных модулей, каждый из которых представляет из себя отдельный GWTP-виджет. Взаимосвязь между отдельными виджетами реализована путем перемещения объектов между ними, а также посредством встроенного в библиотеку GWT механизма событий. Серверная часть приложения используется для загрузки информации, необходимой для составления плана эксперимента, и сохранения эксперимента в базу данных.

В **четвертой главе** предоставлены результаты разработки программного обеспечения на примере моделирования эксперимента по исследованию редокс-систем. Исследование заключалось в изучении влияния состава окислительно-восстановительной системы на способность продуцировать радикалы  $\text{HO}^\bullet$ . Определены временные затраты на проведение исследований в ручном и автоматизированном режимах.

В **приложении** приведен графический материал для защиты магистерской диссертации в форме распечатанной версии электронной презентации.

## **ЗАКЛЮЧЕНИЕ**

### **Основные научные результаты диссертации**

1. Выполнен обзор современной литературы, посвященной автоматизации химического анализа. Установлена необходимость в разработке программного обеспечения, интегрирующего разнонаправленные лабораторные приборы в единый комплекс, что позволит на высоком уровне автоматизировать

химические эксперименты.

2. Разработано приложение на языке программирования Java, с использованием фреймворка Google Web Toolkit для создания плана химического эксперимента.

3. Проведено моделирование процесса поиска оптимальной тест-системы для изучения антирадикальной активности веществ методом флуоресцентных зондов в приложении.

4. Проведенный сравнительный анализ ручного и автоматизированного исполнения эксперимента по отбору оптимальной редокс-системы показал, что согласно спецификациям используемых приборов, временная сложность с использованием автоматизации процесса на создание всех растворов и добавление их в лунки – 27 минут, а ориентировочное время проведения всего эксперимента с участием 45 образцов – 108 минут, что в 12 раз меньше времени, затраченного на проведение данного эксперимента в ручном режиме.

5. Использование автоматизации исследовательского процесса позволило сократить затраты реагентов в 2 раза, что является крайне важным фактором с точки зрения экономии при анализе большого числа проб.

Таким образом, можно сделать вывод, что перевод химического анализа в автоматический режим с использованием разработанного приложения представляет следующие преимущества:

- уменьшение времязатратности;
- повышение точности в работе с микроколичествами;
- улучшение воспроизводимости результатов.

Обеспечение высокого качества данных с высокой эффективностью всегда является целью для химической промышленности. Автоматизация будет продолжать играть важную роль в достижении этой цели и станет ключом к повышению качества и пропускной способности на новых рубежах развития научной и промышленных областей. В дальнейших исследованиях целесообразно сфокусироваться на расширении функционала веб-приложения: введении поддержки визуального онлайн представления проведения эксперимента, добавлению возможности представления результатов спектральных методов анализа.

### **Рекомендации по практическому использованию результатов**

1. Полученные результаты формируют практическую значимость в сфере автоматизации химического анализа. Они могут быть использованы для интеграции разнонаправленных лабораторных приборов в единый комплекс.

2. Разработанное приложение может применяться в химических лабораториях и исследовательских центрах для проведения автоматизированных

химических анализов в областях фармацевтики, клинической диагностики, криминалистики и др.

3. Результаты разработки могут использоваться для интеграции разрозненных химических лабораторий в единый исследовательский центр.

## **СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ**

1. Шевцов, Д.О., Шевцова, Т.А. Веб-приложение по созданию и управлению планом химических экспериментов для роботизированных станций / Д.О. Шевцов // Материалы 54-й научно-технической конференции студентов, магистрантов и аспирантов БГУИР – Минск, 2018.

2. Шевцов, Д.О. Веб-приложение по созданию плана химического эксперимента как средство научных исследований / Д.О. Шевцов, С.С. Куликов // Высшее техническое образование: проблемы и пути развития: материалы IX Междунар. науч.-метод. конф. БГУИР, Минск, 1-2 нояб. 2018. – Минск, 2018. – С. 511-513.