

Кузнецов Андрей Сергеевич

кандидат технических наук, доцент, доцент кафедры информационных технологий, искусственного интеллекта и общественно-социальных технологий цифрового общества, заместитель руководителя факультета политических и социальных технологий по научной деятельности, Российский государственный социальный университет, Москва. ORCID: 0000-0003-1569-4765.

Электронный адрес: askgoogle@internet.ru

Andrei S. Kuznetsov

Ph.D. in Engineering Sciences, Docent, Associate Professor at the Department of Information Technology, Artificial Intelligence, and Socio-Social Technologies of the Digital Society, Deputy Head of the Faculty of Political and Social Technologies for Research Activities, Russian State Social University, Moscow. ORCID: 0000-0003-1569-4765.

E-mail address: askgoogle@internet.ru

Разливинская Светлана Владимировна

кандидат технических наук, доцент кафедры информационных систем в химической технологии Института тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова, МИРЭА – Российский технологический университет, Москва. ORCID: 0000-0002-7719-0530.

Электронный адрес: askgoogle@internet.ru

Svetlana V. Razlivinskaya

Ph.D. in Engineering Sciences, Associate Professor at the Department of Information Systems in Chemical Engineering at the M.V. Lomonosov Institute of Fine Chemical Technology, RTU MIREA – Russian Technological University, Moscow. ORCID: 0000-0002-7719-0530.

E-mail address: askgoogle@internet.ru

Разяпова Неля Юлаевна

кандидат технических наук, доцент кафедры информационных систем в химической технологии Института тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова, МИРЭА – Российский технологический университет, Москва. ORCID: 0000-0001-6413-4460.

Электронный адрес: askgoogle@internet.ru

Nelya Yu. Razyapova

Ph.D. in Engineering Sciences, Associate Professor at the Department of Information Systems in Chemical Engineering at the M.V. Lomonosov Institute of Fine Chemical Technology, RTU MIREA – Russian Technological University, Moscow. ORCID: 0000-0001-6413-4460.

E-mail address: askgoogle@internet.ru

=====

ПРОГРАММНО-АЛГОРИТМИЧЕСКАЯ ПОДДЕРЖКА
ИНФОРМАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ ОБРАБОТКИ И АНАЛИЗА
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ ПО ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКЕ

=====

Аннотация. В данной научной статье подробно рассмотрены и обсуждаются основные вопросы, непосредственно касающиеся разработки инструментов программно-алгоритмической поддержки

Программно-алгоритмическая поддержка информационных процессов обработки и анализа экспериментальных данных по химической кинетике

информационных процессов обработки и анализа экспериментальных данных в предметной области химической кинетики. Применен системный подход к задаче обработки экспериментальных данных по химической кинетике с применением современных программных комплексов – табличного процессора Ms Excel и пакета компьютерной математики – свободного программного комплекса Scilab. Выполнено построение графических зависимостей константы скорости химической реакции как функции температуры $K_v = f(T)$, а также показана целесообразность модификации координатных осей для построения зависимости в спрямляющих координатах $\ln K_v = f(1/T)$. Описаны процедуры импорта и нормализации исходных данных, приведена блок-схема алгоритма обработки экспериментальных данных для предметной области химической кинетики. Представлены программные листинги, реализующие алгоритмы обработки и анализа экспериментальных данных по химической кинетике. Предложены линеаризованные графические зависимости, реализованные в среде электронных таблиц Ms Excel и Scilab. Выполнено математическое моделирование линеаризованной зависимости. Показаны примеры расчета значений относительно величин энергии активации с применением линеаризации экспериментальных данных и формульных зависимостей.

Ключевые слова: программно-алгоритмическая поддержка, информационные процессы, обработка и анализ данных, экспериментальные данные, химическая кинетика, современное программное обеспечение.

Для цитирования: Кузнецов А.С., Разливинская С.В., Разяпова Н.Ю. Программно-алгоритмическая поддержка информационных процессов обработки и анализа экспериментальных данных по химической кинетике // Вестник Российского нового университета. Серия: Сложные системы: модели, анализ и управление. 2026. № 3. С. 164–173. DOI: 10.18137/RNUV9187.26.03.P.164

SOFTWARE AND ALGORITHMIC SUPPORT FOR INFORMATION PROCESSES FOR PROCESSING AND ANALYZING EXPERIMENTAL DATA IN CHEMICAL KINETICS

Abstract. This scientific article thoroughly examines and discusses the main issues directly related to the development of software and algorithmic support tools for information processes of processing and analyzing experimental data in the subject area of chemical kinetics. A systematic approach to the problem of processing experimental data on chemical kinetics is applied using modern software packages – the MS Excel spreadsheet processor and the computer mathematics package – the free software package Scilab. Graphical dependencies of the chemical reaction rate constant as a function of temperature $K_v = f(T)$, are constructed, and the feasibility of modifying the coordinate axes for plotting the dependence in rectifying coordinates $\ln K_v = f(1/T)$ is demonstrated. The procedures for importing and normalizing the initial data are described. A block diagram of the algorithm for processing experimental data for the subject area of chemical kinetics is given. Software listings implementing algorithms for processing and analyzing experimental data on chemical kinetics are presented. Linearized graphical dependencies, implemented in the spreadsheet environment of MS Excel and Scilab, are proposed. Mathematical modeling of the linearized dependence is performed. Examples of calculating values relative to activation energies using linearization of experimental data and formulaic dependences are shown.

Keywords: software and algorithmic support, information processes, data processing and analysis, experimental data, chemical kinetics, modern software.

For citation: Kuznetsov A.S., Razlivinskaya S.V., Razyapova N.Yu. (2026) Software and algorithmic support for information processes of processing and analysis of experimental data on chemical kinetics. *Vestnik of the Russian New University. The series: Complex systems: models, analysis and management*. No. 3. Pp. 164–173. DOI: 10.18137/RNU.V9I87.26.03.P.164 (In Russian)

Введение

Обработка и анализ данных химического эксперимента – один из важнейших этапов в научной профессиональной деятельности. Культура проведения экспериментальных работ требует от исследователя навыков количественной и качественной интерпретации полученных результатов. В данном вопросе на первое место выходит применение современных программных продуктов. Это офисное программное обеспечение, направленное на работу с табличными данными, реализующее функции их обработки, хранения и визуализации. Данный функционал реализован в среде электронных таблиц Ms Excel и различных аналогов [1].

Для решения задач обработки, анализа и моделирования экспериментальных данных широко применяется также специализированное прикладное программное обеспечение, представленное пакетами компьютерной математики [2]. Выбор конкретного программного решения зависит от специфики конкретной задачи предметной области.

Целью данного исследования является разработка инструментов программно-алгоритмической поддержки информационных процессов обработки и анализа экспериментальных данных в предметной области химической кинетики.

Формализация и постановка задачи

Одним из основных уравнений, применяемых в химической кинетике, является уравнение Аррениуса, записанное в дифференциальной форме [3]:

$$\frac{d \ln k_v}{dT} = \frac{E_a}{RT^2}. \quad (1)$$

Путем интегрирования левой и правой частей дифференциального уравнения Аррениуса получаем интегральную форму зависимости константы скорости химической реакции от температуры:

$$\ln K_v = \ln K_o - \frac{E_a}{RT}; \quad (2)$$

$$K_v = K_o \cdot \exp^{-E_a/RT}. \quad (3)$$

Данные формульные зависимости применяются при решении следующих задач химической кинетики:

- температурная зависимость константы скорости для химической реакции;
- расчет значений констант скорости реакции при различных температурах;
- расчет численных значений величин энергий активации для химических реакций по экспериментальным данным.

Программно-алгоритмическая поддержка информационных процессов
обработки и анализа экспериментальных данных по химической кинетике

Как видим, зависимость константы скорости химической реакции $K_v = f(T)$, описываемая уравнением Аррениуса, является существенно нелинейной, что, в общем, усложняет расчеты в нелинеаризованном виде [4].

Математическая модель вида (3) относится к внутренне линейному типу нелинейных зависимостей и может быть сведена к линейной модели путем выполнения преобразований. Данные преобразования сводятся к простой замене переменных и модификации координатных осей: преобразование к линейному виду возможно при смене системы координат вида (4) с применением уравнения (2) [5]:

$$\ln K_v = f\left(\frac{1}{T}\right). \quad (4)$$

Линеаризация зависимости константы скорости химической реакции от температуры позволяет выполнить ее аппроксимацию простой моделью линейной регрессии вида

$$Y_{\text{exp}} = a_0 + a_1 x. \quad (4)$$

Параметры a_0 и a_1 модели (4) достаточно просто вычисляются с помощью метода наименьших квадратов путем минимизации остаточной дисперсии. Для математической модели (4) также вычисляются критерии ее качества: стандартная ошибка, критерий Фишера, коэффициент детерминации – величина уровня достоверности аппроксимации, описываемая критерием R^2 [6].

Расчет энергии активации для химической реакции можно выполнить с помощью модели (4), (5) или с использованием эмпирических формул (6), (7):

$$A_1 = \frac{-E_a}{R};$$

$$E_a = -a_1 R. \quad (5)$$

$$E_a = \frac{RT_1 T_2}{T_2 - T_1} \cdot \ln \frac{K_2}{K_1}; \quad (6)$$

$$E_a = \frac{RT_1 T_2}{T_1 - T_2} \cdot 2,33 \cdot \ln \frac{K_1}{K_2}. \quad (7)$$

Данные уравнения позволяют вычислить величину энергии активации для химической реакции в кДж/моль. Температура здесь является термодинамической, значения представляются в кельвинах.

***Разработка инструментов программно-алгоритмической поддержки процессов
обработки и анализа экспериментальных данных по химической кинетике***

В процессе разработки инструментов программно-алгоритмической поддержки процессов обработки и анализа экспериментальных данных по химической кинетике предложено информационное обеспечение, включающее алгоритм обработки, анализа и визуализации экспериментальных данных по химической кинетике, представленный на Рисунке 1. Процедуры обработки, анализа, моделирования и визуализации эксперименталь-

ных данных программно были реализованы в среде электронных таблиц Ms Excel и с использованием пакета компьютерной математики Scilab.

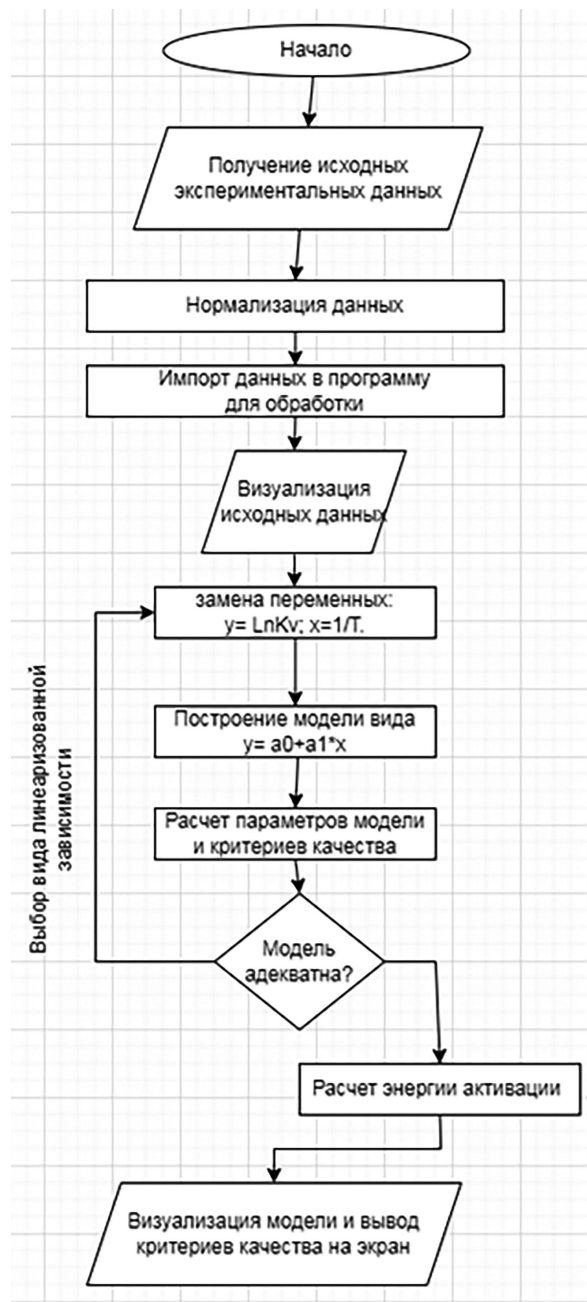


Рисунок 1. Алгоритм обработки, анализа и визуализации экспериментальных данных по химической кинетике

Программно-алгоритмическая поддержка информационных процессов обработки и анализа экспериментальных данных по химической кинетике

На начальном этапе реализуется импорт экспериментальных данных в виде наборов данных: константа скорости химической реакции – температура. Данные получают из файла или осуществляют ввод с клавиатуры. Далее выполняется этап нормализации данных с учетом представления числовых значений в программном продукте обработки и анализа. Исходные данные визуализируются, и зависимость преобразуется к линейному виду. Далее выполняется аппроксимация линеаризованных данных математической моделью, последовательно рассчитываются ее коэффициенты и критерии качества. Расчет параметров модели производится в соответствии с методом наименьших квадратов. Полученная математическая модель проверяется на адекватность по критерию Фишера. Адекватность модели означает возможность ее применения для расчета и прогнозирования значений констант скорости при различных температурах, а также для последующего вычисления величины энергии активации химической реакции по модели и эмпирическим формулам [7]. В конце работы алгоритма выводятся линеаризованные данные и рассчитанные значения критериев качества, параметров модели и энергии активации в кДж/моль. Фрагмент расчетной таблицы в программе Ms Excel приведен на Рисунке 2.

Диаграмма 1															
	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O
1	Расчет энергии активации								R=	8,314313					
2	T	k	X=1/T	Y=LN(k)	Урас.	k рас.			a0=	24,019					
3	300	2,6940E+10	0,003333	24,01689	24,01653	26930608344			a1=	-0,7412					
4	310	2,6942E+10	0,003226	24,01697	24,01661	26932754770			Ea=	6,162569 кДж/моль	Ea=	6,162569 кДж/моль			
5	320	2,6946E+10	0,003125	24,01711	24,01668	26934767200									

Рисунок 2. Обработка данных в среде электронных таблиц Ms Excel

Визуализация экспериментальных данных и полученной линейной относительно параметров математической модели с использованием инструментария программной среды электронных таблиц Ms Excel представлена на Рисунке 3.

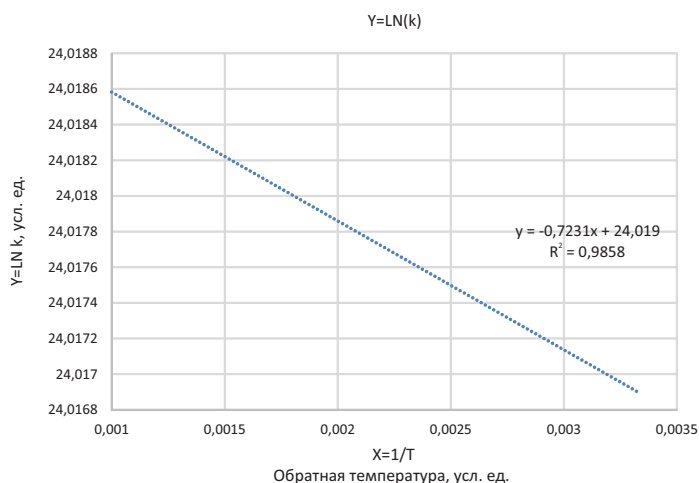
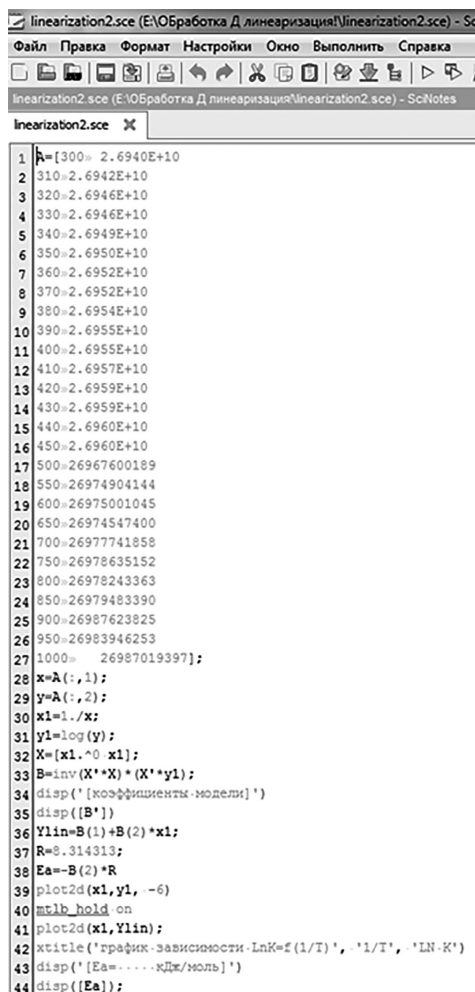


Рисунок 3. Визуализация модели и линеаризованных данных с помощью программной среды электронных таблиц Ms Excel

Для практической реализации задачи обработки и анализа данных по химической кинетике в комплексе программ Scilab необходимо создание программного листинга, выполняющего все этапы. Изначально осуществляется этап импорта исходных данных после нормализации, так как в программе Scilab разделителем целой и дробной части числа, в отличие от Ms Excel, является запятая. Процесс импорта данных может быть осуществлен путем чтения из csv-файла с автоматической заменой разделителей. Далее из числового массива формируются столбцы значений констант скорости и температур, осуществляется их линейзация с формированием новых переменных [8]. Следующий этап – построение линейной математической модели и расчет ее параметров [9]. Далее выполняется одновременно расчет величины энергии активации химической реакции и визуализация экспериментальных данных и созданной модели [10]. Фрагмент кода программы, реализованный в пакете компьютерной математики Scilab, представлен на Рисунке 4.



```

1 k=[300= 2.6940E+10
2 310=2.6942E+10
3 320=2.6946E+10
4 330=2.6946E+10
5 340=2.6949E+10
6 350=2.6950E+10
7 360=2.6952E+10
8 370=2.6952E+10
9 380=2.6954E+10
10 390=2.6955E+10
11 400=2.6955E+10
12 410=2.6957E+10
13 420=2.6959E+10
14 430=2.6959E+10
15 440=2.6960E+10
16 450=2.6960E+10
17 500=26967600189
18 550=26974904144
19 600=26975001045
20 650=26974547400
21 700=26977741858
22 750=26978635152
23 800=26978243363
24 850=26979483390
25 900=26987623825
26 950=26983946253
27 1000= 26987019397];
28 x=A(:,1);
29 y=A(:,2);
30 x1=1./x;
31 y1=log(y);
32 X=[x1.^0 x1];
33 B=inv(X'*X)*(X'*y1);
34 disp(' [коэффициенты-модели] ')
35 disp([B'])
36 Ylin=B(1)+B(2)*x1;
37 R=8.314313;
38 Ea=-B(2)*R
39 plot2d(x1,y1, -6)
40 mtlb_hold on
41 plot2d(x1,Ylin);
42 xtitle('график-зависимости- lnK=f(1/T)', '1/T', 'ln-K')
43 disp(' [Ea=...кДж/моль] ')
44 disp([Ea]);

```

Рисунок 4. Программный листинг обработки данных и расчет энергии активации в программном комплексе Scilab

Программно-алгоритмическая поддержка информационных процессов обработки и анализа экспериментальных данных по химической кинетике

Результат исполнения программного листинга представлен на Рисунке 5.

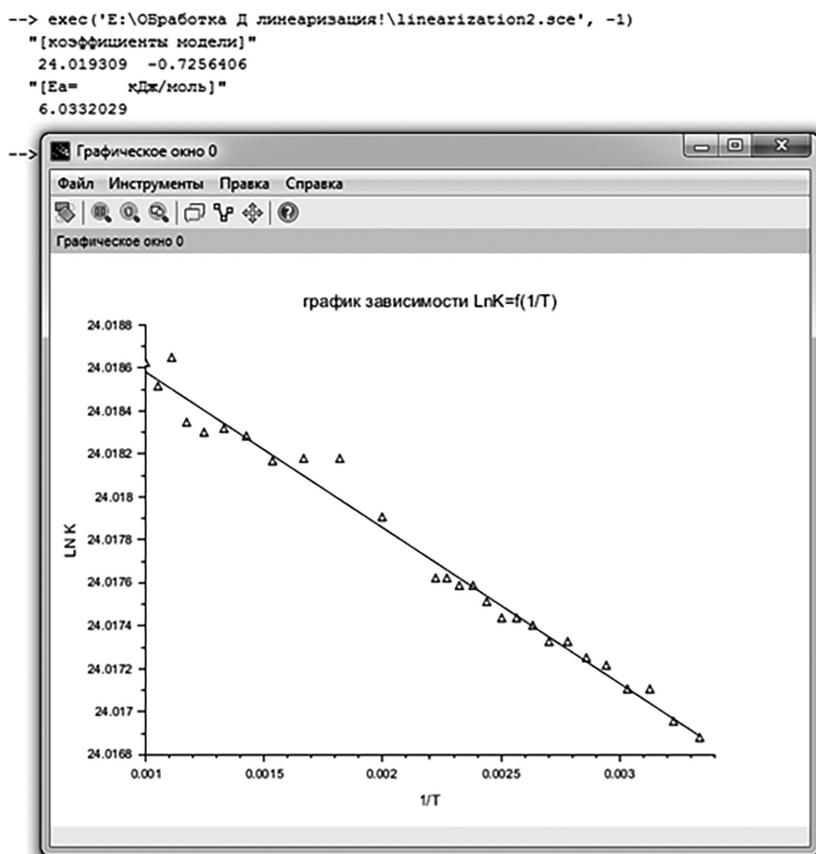


Рисунок 5. Визуализация модели и линейризованных данных с помощью программного комплекса Scilab

В Таблице представлены результаты расчета параметрических критериев качества для выбранной линейной модели – величины стандартной ошибки, критерия Фишера и коэффициента детерминации R^2 [7; 10].

Таблица

Критерии качества для модели (4)

Стандартная ошибка	Критерий Фишера	Критерий R^2
0,0000653	1729,645	0,985752103

Заключение

В статье поставлена и последовательно решена проблема разработки инструментов программно-алгоритмической поддержки информационных процессов обработки и ана-

лиза экспериментальных данных в предметной области химической кинетики. Решены практические задачи их моделирования и визуализации. Применение современных программных продуктов значительно облегчает решение практических задач по обработке, анализу и визуализации экспериментальных данных, а также значительно расширяет возможности для их рациональной интерпретации на количественном и качественном уровнях. Предложенная математическая модель может быть использована для расчета и прогнозирования значений констант скорости химической реакции при различных температурах.

Предложенное программно-алгоритмическое обеспечение процессов обработки и анализа экспериментальных данных по химической кинетике может быть использовано в качестве модели информационной поддержки принятия решений в данной предметной области знаний.

Литература

1. Каримов М.Ф. Основные функциональные возможности системы электронных таблиц Excel для обработки данных химического эксперимента // Башкирский химический журнал. 2006. № 4 [Электронный ресурс]. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/osnovnye-funktsionalnye-vozmozhnosti-sistemy-elektronnyh-tablits-excel-dlya-obrabotki-dannyh-himicheskogo-eksperimenta> (дата обращения: 28.04.2026).
2. Гартман Т.Н., Клушин Д.В. Моделирование химико-технологических процессов. Принципы применения пакетов компьютерной математики: учебное пособие. СПб.: Лань, 2020. 404 с.
3. Литвишиков Ю.Н. О физическом смысле параметров уравнения Аррениуса // Kimya Problemleri. 2019. № 3 [Электронный ресурс]. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/o-fizicheskom-smysle-parametrov-uravneniya-arreniusa> (дата обращения: 28.04.2026).
4. Добротин Р.Б., Соловьев Ю.И. Вант-Гофф. М.: Наука, 1977. 271 с.
5. Бураева Е.В., Колыбанов К.Ю. Применение информационных технологий для анализа химических систем: учебно-методическое пособие. М.: РТУ МИРЭА, 2018.
6. Кузнецов А.С. Информационные технологии и обработка экспериментальных данных: учебное пособие. СПб.: Сциентиа, 2025. 98 с. EDN ZQNOSE.
7. Кузнецов А.С., Бураева Е.В. Программный комплекс SciLab искусственных нейронных сетей для обработки результатов химического эксперимента // Нейрокомпьютеры: разработка, применение. 2024. Т. 26, № 3. С. 68–74. EDN BPTBGX.
8. Сорокин А.С., Моисеев Н.А., Митрофанов В.И. Планирование и статистическая обработка данных экспериментов в пакете R // Интеллект. Инновации. Инвестиции. 2017. № 1 [Электронный ресурс]. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/planirovanie-i-statisticheskaya-obrabotka-dannyh-eksperimentov-v-pakete-r> (дата обращения: 28.04.2026).
9. Тихонова М.В., Губайдуллин И.М. Компьютерная обработка химических экспериментов при решении обратных кинетических задач на основе параллельных вычислений // Вестник ОмГУ. 2012. № 2 (64) [Электронный ресурс]. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/kompyuternaya-obrabotka-himicheskikh-eksperimentov-pri-reshenii-obratnyh-kineticheskikh-zadach-na-osnove-parallelnykh-vychisleniy> (дата обращения: 28.04.2026).
10. Биллиг В.А., Звягинцев Н.В. Информационная система обработки и хранения данных о кинетике химических реакций // Программные продукты и системы. 2018. № 4 [Электронный ресурс]. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/informatsionnaya-sistema-obrabotki-i-hraneniya-dannyh-o-kinetike-himicheskikh-reaktsiy> (дата обращения: 28.04.2026).

References

1. Karimov M.F. (2006) Main functionality of the Excel spreadsheet system for processing chemical experiment data. *Bashkir Chemical Journal*. No. 4 [Electronic resource]. Available at: <https://cyberleninka.ru/article/n/osnovnye-funktsionalnye-vozmozhnosti-sistemy-elektronnyh-tablits-excel-dlya-obrabotki-dannyh-himicheskogo-eksperimenta> (accessed: 28.01.2020). (In Russian).
2. Gartman T.N., Klushin D.V. (2020). *Modelirovanie khimiko-tehnologicheskikh protsessov. Printsipy primeneniya paketov komp'yuternoy matematiki* [Modeling of Chemical-Technological Processes. Principles of Using Computer Mathematics Packages]. Saint Petersburg: Lan' Publishing, 404 p. (In Russian).
3. Litvishkov Yu.N. (2019). On the physical meaning of the parameters of the Arrhenius equation. *Kimya Problemleri*. No. 3 [Electronic resource]. Available at: <https://cyberleninka.ru/article/n/o-fizicheskomy-smysle-parametrov-uravneniya-arreniusa> (accessed: 28.01.2020). (In Russian).
4. Dobrotin R.B., Soloviev Yu.I. (1977). *Vant-Goff* [Van't Hoff]. Moscow: Nauka Publishing, 71 p. (In Russian).
5. Burlyaeva E.V., Kolybanov K.Yu. (2018). *Primenenie informatsionnykh tekhnologiy dlya analiza khimicheskikh sistem* [Application of Information Technologies for the Analysis of Chemical Systems]. Moscow: RTU MIREA Publishing House. (In Russian).
6. Kuznetsov O.V. (2025). *Informatsionnye tekhnologii i obrabotka eksperimental'nykh dannykh* [Information Technologies and Experimental Data Processing]. Saint Petersburg: Scientia Publishing, 98 p. (In Russian).
7. Kuznetsov O.V., Burlyaeva E.V. (2024). SciLab Software Package of Artificial Neural Networks for Processing the Results of a Chemical Experiment. *Neurocomputers: design, application*. Vol. 26. No. 3. Pp. 68–74. (In Russian).
8. Sorokin A.S., Moiseev N.A., Mitrofanov V.I. (2017). Planning and statistical processing of experimental data in the R package. *Intellect. Innovations. Investments*. No. 1 [Electronic resource]. Available at: <https://cyberleninka.ru/article/n/planirovanie-i-statisticheskaya-obrabotka-dannyh-eksperimentov-v-pakete-r> (accessed: 28.01.2020). (In Russian).
9. Tikhonova M.V., Gubaidullin I.M. (2012). Computer processing of chemical experiments in solving inverse kinetic problems based on parallel computing. *Vestnik OmGU*. No. 2 [Electronic resource]. Available at: <https://cyberleninka.ru/article/n/kompyuternaya-obrabotka-himicheskikh-eksperimentov-pri-reshenii-obratnyh-kineticheskikh-zadach-na-osnove-parallelnykh-vychisleniy> (accessed: 28.01.2020). (In Russian).
10. Billig V.A., Zvyagintsev N.V. (2018) Information system for processing and storing data on the kinetics of chemical reactions. *Software & Systems*. No. 4 [Electronic resource]. Available at: <https://cyberleninka.ru/article/n/informatsionnaya-sistema-obrabotki-i-hraneniya-dannyh-o-kinetike-himicheskikh-reaktsiy> (accessed: 28.01.2020). (In Russian).

Поступила в редакцию: 27.03.2026

Received: 27.03.2026

Поступила после рецензирования: 05.05.2026

Revised: 05.05.2026

Принята к публикации: 19.05.2026

Accepted: 19.05.2026