

А. Г. ЛЕРМАН, А. А. ПОЛЯКОВА, М. С. ХОЦ

(Москва)

ИНФОРМАЦИОННО-ПОИСКОВАЯ СИСТЕМА
ДЛЯ МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ

Масс-спектрометрия низкого разрешения в настоящее время является одним из основных методов анализа органических соединений. Для анализа используются масс-спектры индивидуальных соединений, что обуславливает необходимость создания каталогов. Работа с имеющимися каталогами масс-спектров трудоемка. Подбор нужных масс-спектров осуществляется вручную и связан со значительными затратами времени. Таким образом, вопрос о применении ЭВМ для поиска и обработки масс-спектральной информации является чрезвычайно важным.

В опубликованных работах [1—3] по машинным каталогам масс-спектров не приведены подробные алгоритмы формирования и обслуживания этих каталогов. Кроме того, масс-спектры записаны на внешних запоминающих устройствах ЭВМ иностранных марок.

Нами разработана система кодирования масс-спектров и хранения их на магнитной ленте (МЛ) ЭВМ «Минск-22».

Как указывалось в [4], описание соединения состоит из 5 разделов.

В первом разделе кодируется русское название соединения и его

полуструктурная формула. Если в каталог включаются не индивидуальные соединения, а какие-то другие объекты, то в первый раздел заносится условное название, например «Смесь 1—А—Б».

Во втором разделе кодируются выбранные признаки соединения. Число вводимых признаков не должно превышать 69. Пример признаков, вводимых в каталог, приведен на рис. 1.

В третьем разделе записывается молекулярный вес соединения, чувствительность максимального пика и чувствительность максимального пика эталонного соединения, например н-бутана.

В четвертом разделе записывается «шапка» масс-спектра, содержащая информацию о массовых числах, которым соответствуют ненулевые интенсивности. Каждая 36-разрядная ячейка «шапки» включает в себе информацию о 36 последовательных массовых числах. В каждый разряд заносится 1, если соответствующая интенсивность ненулевая, и 0 — в противном случае.

В пятом разделе кодируются ненулевые интенсивности.

Машинный каталог состоит из магнитной ленты, на которой записана стандартная программа обслуживания каталога (СПОК), МЛ «Оглавление» и не более 62 МЛ с закодированными на них масс-спектрами.

Число атомов	Число функциональных групп
C	
H	
O	
N	
S	
SI	
F	
CL	
BR	
J	
	-OH
	>C=O
	-CO-OH
	-OR
	-CO-OR
	=C=C=O
0=C(AR)	C=O
	-NH ₂
	-NH-
	>N-
	-NO ₂
	-NO
	-CN
	-NHNH ₂
	-CONHNH ₂
	-CONH ₂
	-SH
	-S-
	-S-S
	>S=O
	>SO ₂
	-C≡C-
	-C=C-
	CH ₂ =C-
	-C ₆ H ₄ OH
	-SN
	-O-O-
	-SO ₂ -OH
	(AR)
	>C<
	-CH ₂ -
	-CH ₂ ⁺
	CH ₃ ⁺

Рис. 1.

На МЛ «Оглавление» каждому описанию соединения отводится 4 ячейки. В них записывается информация о длине составных частей описания и его адресе на соответствующей ленте. Таким образом, каждый том каталога может содержать до 30 000 масс-спектров.

Авторы включили в систему 5 программ (СПОКД, СПОК1, СПОК2, СПОК3, СПОК4), которые позволяют решить задачу хранения и поиска.

Программа СПОКД «Диспетчер» является центральной программой системы. Она хранит в своем теле всю информацию о состоянии каталога. Эта информация представлена: 1) списком программ; 2) списком выбранных признаков и другими сведениями.

С помощью СПОК1 осуществляется ввод информации с перфоленты, контроль и запись на МЛ. При обнаружении ошибок информация о соединении выводится на АЦПУ.

Программа СПОК2 предназначена для поиска масс-спектров необходимых соединений. Блок-схема СПОК2 приведена на рис. 2. В программе предусмотрено два режима поиска масс-спектров. В первом режиме поиск ведется по названию соединения. Во втором режиме масс-спектры разыскиваются по произвольной логической комбинации признаков (логическая комбинация должна быть представлена в совершенной дизъюнктивной форме). Например: найти масс-спектры соединений, у которых $(\text{число атомов C} \geq 12 \wedge \text{мол. вес.} \leq 300) \vee (\text{число атомов O} \geq 2 \wedge \text{мол. вес.} \geq 200)$.

В блоках 9 и 9^а находятся ячейки нестандартного выхода из СПОК2 для обработки масс-спектра, не предусмотренной системой СПОК.

В результате работы СПОК2 для отобранных масс-спектров оформляется своя МЛ «Оглавление», которая позволяет работать только с этими масс-спектрами.

Блок-схема программы СПОК3 приведена на рис. 3. СПОК3 предназначена для сортировки масс-спектров, записанных в каталог. В результате работы СПОК3 получается каталог, в котором масс-спектры лексикографически упорядочены*.

По значениям выбранных признаков строится информационная таблица масс-спектра, а масс-спектр записывается на рабочую ленту. Информационная таблица представляет собой 17₈ ячеек памяти, в кото-

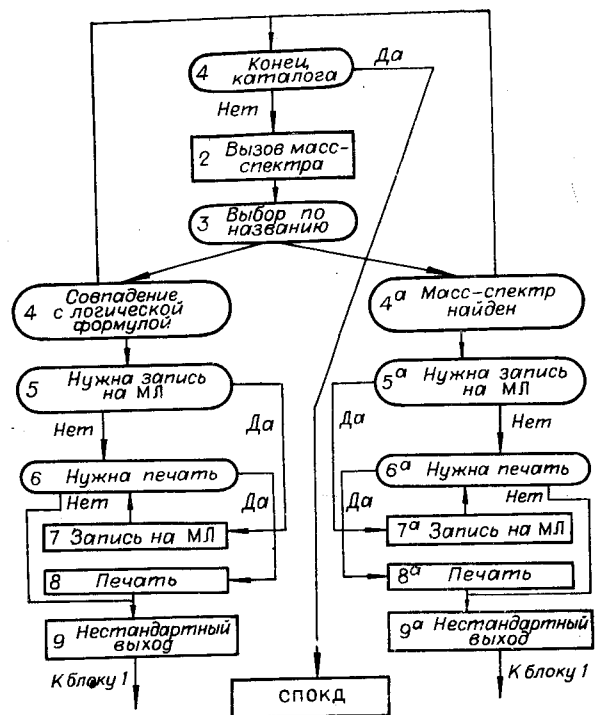


Рис. 2.

* Лексикографической упорядоченностью называется расположение материала по признакам, в множестве которых введена упорядоченность.

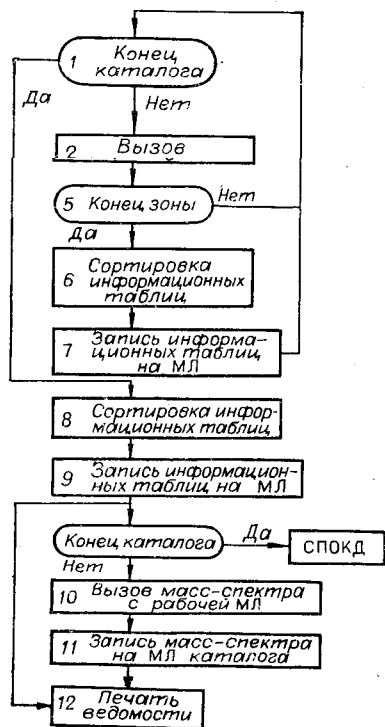


Рис. 3.

рые записываются 4 ячейки из МЛ «Оглавление» и значения признаков данного масс-спектра. Информационные таблицы сортируются по признакам, указанным в задании, и записываются на МЛ, после чего происходит выбор масс-спектра по масс-спектрометре.

2. Осуществляется сортировка информационных таблиц, а не самих масс-спектров, чем достигается значительный выигрыш во времени. Завершает систему программа СПОК4, предназначенная для удаления из каталога масс-спектра, не удовлетворяющего исследователя. Программа отыскивает масс-спектр по названию соединения и затирает информацию о нем на Магнитной Ленте «Оглавление».

Построенные по таким принципам каталог масс-спектров и система СПОК позволяют значительно облегчить поиск масс-спектров. Применение «машинного» каталога составляет важный шаг в области применения Электронной Вычислительной Машины для обработки масс-спектров и развития «машинных» методов масс-спектрометрии.

ЛИТЕРАТУРА

1. S. Abrahamson, S. Stenhagen, E. Stenhagen. Mass-Spectrometry in Organic Structure Determination. A Problem of Storage and Identification.— The Biochemie J., 1964, v. 2p. p. 92.
2. B. Petersson, R. Ryhage. Mass-Spectral Data Processing. Computer Used for Identification of Organic Compounds.— Arkiv Kemö, 1967, v. 26, p. 293.
3. D. Henneberg, K. Casper, L. Ziegler, B. Wiemann. Massen-Spektrometrische Analyse Organische-Chemische Verbindung mit Hilfe eines Computer System.— Angew Chemie, 1972, v. 84, № 9.
4. А. Г. Лерман, М. С. Хоц, А. А. Полякова. Принципы построения машинного каталога масс-спектров.— Автоматизация и контрольно-измерительные приборы, 1973, № 9.

Поступила в редакцию 25 марта 1974 г.;
окончательный вариант — 12 июня 1974 г.