МОДЕЛЮВАННЯ ЦІЛЬОВИХ ОПЕРАЦІЙ У ТЕХНІЧНИХ

* 1. БІОЛОГІЧНИХ СИСТЕМАХ ТА ОБ’ЄКТАХ

1. частиною комплексу моделей і алгоритмів, що застосовані в інформаційній технології адаптації інтерфейсу системи електронного документообігу до поточних задач і ролі користувача.

**Ключові слова:** документообіг,онтологія,модель,інтерфейс,адаптація.



**MODELS OF ADAPTIVE INTERFACE OF ELECTRONIC DOCUMENT SYSTEMS Skryl A., Fatovenko M.**

Kremenchuk Mykhailo Ostrohradskyi National University

vul. Pershotravneva, 20, Kremenchuk, 39600, Ukraine. E-mail: endlesskwazar@gmail.com

A model of ontology of the subject area "Document flow" and a model of dialogue with the user has been developed. These models are part of a set of models and algorithms that are applied in the information technology of adapting the interface of the electronic document flow system to the current tasks and the role of the user.

**Key words:** workflow, ontology, model, interface, adaptation.

АКТУАЛЬНІСТЬ РОБОТИ. Як показує реальний досвід, однією з ключових проблем, що виникають при впровадженні програм системи електронного документообігу, є надмірність і складність інтерфейсу користува-ча. Як правило, інтерфейс додатків не враховує особливості використання програми конкретним користувачем, виконуючим конкретну роль на певному етапі бізнес-процесу. Всі користувачі програми часто бачать один і той же інтерфейс, перевантажений різними елементами управління, що призводить до небажання з боку персо-налу вивчати нову систему і, відповідно, до низької ефективності впровадження систем електронного докумен-тообігу. Уникнути цих проблем можна шляхом автоматичної адаптації інтерфейсу додатку до конкретних кате-горій і задач користувачів і до ситуацій, що виникають в процесі роботи з документами.

Для досягнення цієї меті необхідно зокрема розробити модель онтології предметної області «Документоо-біг» та модель сценарію діалогу інтерфейсу та користувача. Ця задача вирішується в даній роботі.

МАТЕРІАЛ І РЕЗУЛЬТАТИ ДОСЛІДЖЕНЬ. Загальна модель інтерфейсу з точки зору аналітика складається з наступних компонентів: моделі системи понять користувача (онтологія), моделі сценарію діалогу та моделі подання. Моделі зв’язку з прикладною програмою розробляє програміст.

Онтологія як така описує, що саме користувач може робити з системою і які концепти (сутності) йому необ-хідно при цьому знати і використовувати. Об'єкти онтології – це, насамперед, сутності, тобто ці об'єкти, які входять в концептуальну модель предметної області, наприклад, «Документ» або «Виконавець». Серед сутнос-тей є активні об'єкти – користувачі різних категорій (ролей).

* 1. онтологію входять також керуючі об'єкти, які служать зв'язком між активними та пасивними об'єктами і об'єктами-сутностями. Керуючі об'єкти реалізують логіку програми, тобто використовуються для координації та встановлення послідовності дій згідно сценаріїв. Між об’єктами предметної області існують певні відношен-ня, яки також потрібно відобразити в моделі онтології.

Уявімо онтологію предметної області, з урахуванням сказаного вище, у вигляді:

|  |  |
| --- | --- |
| *O = <PE(AP), AЕ(АA, RА, АS), R1, R2, CO, АR, FЕ >* , | (1) |

де *PЕ* – множина пасивних сутностей, *AP* – множина атрибутів пасивних сутностей, *AE* – множина активних сутностей, *AA* – множина атрибутів активних сутностей, *RА* – ролі активних сутностей, *АS –* множина аспектів

функціонування активних сутностей, *R1ЕЕА* *–* відношення пасивних та активних сутностей, *R2RАRА* – відношення між ролями активних сутностей (відношення *R1* і *R2* вербально визначено у регламенті електрон-

ного документообігу), *CO:ЕЕR* – керуючі об’єкті, що реалізують функції інтерпретації відношень між сутнос-тями, *АRАSАS* – перетин аспектів функціонування окремих ролей, *FЕ* – потоки подій у системі.

Для розробки моделі сценаріїв діалогу необхідно на основі регламенту документообігу сформувати послідо-вності подій, що відбуваються на робочому місці користувача. Ці послідовності залежать від ролі користувача, та робочої ситуації, яка склалася на даний час на даному робочому місці.

Модель діалогу с користувачем можна визначити набором:

*DS = <L, RD, SR, SP >,* (2)

де *L* – мова діалогу, *RD* – правила формування представлення, *SR* – множина стандартних повідомлень, *PМ* – процедура логічної обробки поточної ситуації.

ВИСНОВКИ. Розроблено модель онтології предметної області «Документообіг» та модель діалогу с корис-тувачем. Ці моделі є частиною комплексу моделей і алгоритмів, що застосовані в інформаційній технології ада-птації інтерфейсу системи електронного документообігу до поточних задач і ролі користувача.

**ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ КАТАЛІТИЧНИХ REDOX-ПРОЦЕСІВ ЗА УЧАСТЮ МЕЛАТОНІНУ ТА ГЛУТАТІОНУ.**

**Соловйов В.В., Кузнецова Т.Ю.**

Полтавський національний технічний університет імені Юрія Кондратюка, просп. Першотравневий,24, м. Полтава, 36011, Україна. Е-mail: KZT7@yandex.ru

**Омельчук А.О.**

Інститут загальної та неорганічної хімії ім. В.І. Вернадського НАН України вул. Академіка Палладіна, 32/34, м. Київ, 03142, Україна.

Проведені електрохімічні дослідження, які підтвердили антирадикальні властивості ендооксидантів. На макро-



ХVII Міжнародна науково-технічна конференція «Фізичні процеси та поля технічних і біологічних об’єктів»

205

МОДЕЛЮВАННЯ ЦІЛЬОВИХ ОПЕРАЦІЙ У ТЕХНІЧНИХ

І БІОЛОГІЧНИХ СИСТЕМАХ ТА ОБ’ЄКТАХ



скопічному рівні підтверджена принципова відмінність механізмів інгібуваня гідроксил -радикалів та суперок-сид-аніон-радикалів, молекулами антиоксидантів на фоні превалюючої антирадикальної активності глутатіону в порівнянні з мелатоніном. Встановлена кореляція зміни макроскопічних параметрів процесу електровіднов-лення вільних радикалів кисню в присутності антиоксидантів з отриманими на нанорівні результатами кванто-вохімічних досліджень при взаємодії молекули мелатоніну та глутатіону із вільним радикалами кисню

**VOLTAMPEROMETRIC INVESTIGATION OF CATALYTIC REDOX-PROCESSES INVOLVING MELATONIN AND GLUTATHIONE**

**Soloviev V., Kuznetsova T.**

Poltava National Technical Yuriy Kondratyuka University

prosp. Pershotravnevyi , 24, Poltava, 36011, Ukraine. Е-mail: KZT7@yandex.ru

**Оmel’chuk А.**

V.I. Vernadskii Institute of General & Inorganic Chemistry of the Ukrainian National Academy of Sciences, prosp. Akademika Palladina, 32/34, Kiev, 03142, Ukraine.

Conducted electrochemical studies confirmed the antiradical properties of andioxidants. At the macroscopic level con-firmed the fundamental difference between the mechanisms inhibition hydroxyl-radicals and superoxide-anion-radicals, of molecules antioxidant against the background of prevailing antiradical activity of glutathione compared with melato-nin.The installed correlation of changes in the macroscopic parameters of the process of electroreduction of oxygen free radicals in the presence of antioxidants obtained at the nanoscale results quantum chemical studies in the interac-tion of molecules of melatonin and glutathione against free radicals of oxygen

**Key words:** antioxidants, melatonin, hydroxyl radical, superoxide-anion-radical, glutathione*.*

АКТУАЛЬНІСТЬ РОБОТИ. Для зменшення негативного впливу вільних радикалів на біологічні об’єкти жи-вого організму останнім часом у практичній медицині широко застосовуються ендогенні антиоксиданти у зв’язку з їх участю в системі захисту організму людини від агресивної дії вільних радикалів. Відсутність сис-тематичних досліджень, особливо на молекулярному рівні, антирадикальної активності різних антиоксидантів при їх взаємодії з вільними радикалами в біологічних системах зумовлює не тільки наявність суперечливих оцінок в інтерпретації експериментально одержаних закономірностей, але й створює труднощі у розвитку зага-льних уявлень відносно механізму взаємодії антиоксидантів із вільними радикалами та цілеспрямованого під-ходу до керування цими процесами, які мають практичне застосування у медицині. Це актуалізує вивчення антирадикальної активності різних антиоксидантів.

Взаємодія антиоксидантів із вільними радикалами обумовлена впливом великої кількості різноманітних вза-ємопов'язаних процесів, стабілізація яких навіть в умовах експерименту є досить проблематичною. Разом з тим на сьогодні широко почало застосовуватися моделювання різних фізико-хімічних процесів на молекулярному рівні методами квантової хімії з подальшим аналізом результатів виконаних розрахунків. Тому представляється актуальним вивчення ефективності дії ендогенних антиоксидантів мелатоніну і глутатіону шляхом моделюван-ня механізму їх взаємодії із вільними радикалами (гідроксил-радикалом (•ОН) і супероксид-аніон-радикалом (•ООˉ) електрохімічними методами, що, дає можливість не тільки отримати обґрунтування позитивного ефекту використання антиоксидантів, але й встановити потенційну значущість цих речовин як лікарських засобів.

МАТЕРІАЛИ І РЕЗУЛЬТАТИ ДОСЛІДЖЕНЬ. Електрохімічні дослідження моделювання взаємодії антиок-сидантів із вільними радикалами кисню проводили в [Інституті біоорганічної хімії та нафтохімії](http://www.nbuv.gov.ua/institutions/bpci/index.html) НАН України з використанням диференційної iмпульсної вольтамперометрiї за методикою запропонованою д.х.н., проф., Г.С. Шаповал; для дослідів використовували L-глутатіон фірми SERVA та мелатонін фірми Merck. Сполуки викори-стовувавли без додаткового очищення. Розчини глутатіону та мелатоніну готували безпосередньо перед вимі-рами.

Раніше нами на основі моделювання взаємодії молекули мелатоніну (МLТ ) та глутатіону (GSH) з вільними радикалами •ОН та •ООˉ за результатами неемпіричних квантово-хімічних розрахунків була запропонована схема перерозподілу електронної густини в молекулах антиоксидантів під впливом вільних радикалів кисню, яка дозволила обґрунтовувати мікроскопічний механізм антирадикальної активності молекули мелатоніну [1,2].

Для підтвердження отриманих на нанорівні квантовохімічних результатів були проведені електрохімічні до-слідження взаємодії антиоксидантів з вільними радикалами кисню у водному фізіологічному розчині шляхом електрохімічного генерування вільних радикалів кисню в присутності антиоксиданту [3].

Диференціальні вольтамперні криві відновлення вільних радикалів кисню, які характеризують реакції (1-3), аналогічні тим, що протікають в біосистемах в процесі дихання, обміну речовин, кисневого стресу:



|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| I хвиля (Е = - 0,2 В) | **•**OH +е‾ | ОН‾, | (1) |
| II хвиля (Е = - 0,7В) | О2 + 1е‾ | **•**ОО–, | (2) |
| **•**ОО–+1е‾ + 2Н+ | | Н2О2 , | (2а) |
| III хвиля (Е = - 1,1 В) | Н2О2 +е‾‾ОН + **•**ОН, | | (3) |



знімали на фоні 0,1М розчину NaCI у воді (фізіологічний розчин) з подальшим титруванням фонового елек-троліту добавками GSH та МLТ різної концентрації (рис. 1).

При введенні у фоновий розчин добавок MLT і GSH різної концентрації спостерігали появу трьох хвиль.



ХVII Міжнародна науково-технічна конференція «Фізичні процеси та поля технічних і біологічних об’єктів» 206

МОДЕЛЮВАННЯ ЦІЛЬОВИХ ОПЕРАЦІЙ У ТЕХНІЧНИХ

І БІОЛОГІЧНИХ СИСТЕМАХ ТА ОБ’ЄКТАХ

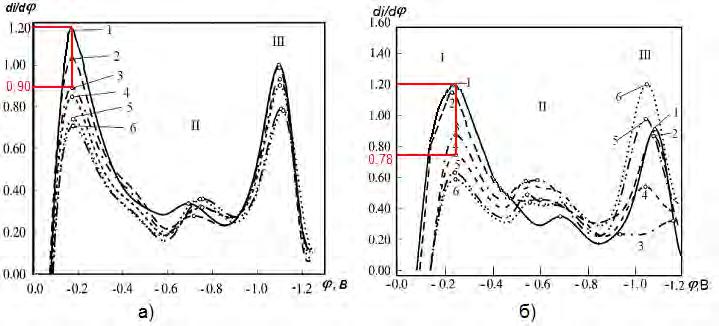


При цьому потенціал відновлення **(**φ) першої хвилі не змінювався, що вказує на відновлення однакових по типу та формі електрохімічно активних частинок (ЕАЧ). Збільшення концентрацій добавок MLT і GSН призводить до істотного зниження граничного струму перших хвиль на вольтамперних кривих за рахунок чисто хімічної

|  |  |
| --- | --- |
| реакції в об’ємній фазі розчину за схемою (4): |  |
| C13H16N2O2 [C10H17N3O6S] + •OH → •C13H15N2O2 [•C10H16N3O6S] + H2O, | (4) |

що вказує на зменшення кількості ЕАЧ типу •OH.

Подальше відновленням •OH, концентрація яких буде зменшуватися внаслідок реакції (4) при введенні добавок MLT[GSH] буде спостерігатися при незмінному потенціалі (0,2 В) на електроді за такою реакцією:



(5)

*Рис. 1 – Диференціальні вольтамперограми відновлення АФК на мідному катоді на фоні 0,1М NaCl у воді в присутності різних концентрацій антиоксидантів: MLT(а): 2 –0,39; 3* ***– 0,74****; 4 – 1,07; 5 – 1,67; 6 – 2,18·10-3 М/дм3; GSH (б): 2 – 0,24; 3 – 0,47; 4 –* ***0,74****; 5 – 0,91; 6 – 1,1·10-3 М/дм3.*

На відміну від першої хвилі спостерігається катодний зсув другої хвилі потенціалу відновлення, встановле-ний як при введенні добавок MLT, так і GSH. Так як результати квантовохімічних досліджень взаємодії •ООˉ з MLT та GSH не вказують на розрив водневих зв’язків в молекулах MLT і GSH, а вказують на вірогідність утво-рення комплексів, то експериментально знайдений катодний зсув потенціалу 2 хвилі відновлення для обох ви-падків, однозначно вказує на процес відновлення електроактивних комплексів, тип, форма і кількість яких ви-значається концентрацією MLT і GSH відносно •ООˉ. Зсув хвилі відновлення •ООˉ в присутності GSH відбува-ється в сторону зменшення значення потенціалу відновлення, а в присутності MLT – в бік збільшення, що пі-дтверджує більш виражені антирадикальні властивості GSH у порівнянні з MLT. Таке обґрунтування зсуву дру-гої хвилі процесу одноелектронного відновлення ЕАЧ корелює із результатами квантовохімічної оцінки зна-чень енергії активації при одноелектронному переносі заряду, які різняться для «ізольованої» молекули •ООˉ та комплексів {MLT•ООˉ} і {GSH•ООˉ}. Незмінність потенціалу відновлення та зменшення граничного струму (1 хвиля) та катодний зсув потенціалу (2 хвиля) зі збільшенням концентрації антиоксидантів при взаємодії із вільними радикалами для обох випадків є прямим підтвердженням на макрорівні результатів квантовохімічних розрахунків.

ВИСНОВОК. На макроскопічному рівні підтверджена принципова відмінність встановлена теоретично механізму інгібуваня молекулами антиоксидантів гідроксил- та супероксид-аніон-радикала на фоні превалюю-чої антирадикальної активності глутатіону в порівнянні з мелатоніном. Встановлена кореляція зміни макроско-пічних параметрів процесу електровідновлення вільних радикалів кисню в присутності антиоксидантів з отри-маними на нанорівні результатами квантовохімічних досліджень при взаємодії молекули мелатоніну та глутаті-ону із вільним радикалами кисню.

ЛІТЕРАТУРА

* 1. Соловйов В.В. Моделювання антиоксидантних властивостей молекули мелатоніна при взаємодії з деяки-ми вільними радикалами / В.В. Соловйов, Т.Ю. Кузнецова // Науковий вісник Чернівецького університету: Зб. наук. праць.: Хімія – 2012.– Вип. 606. – С.92–96.
     1. Kuznetsovа T.Y. Antioxidant activity of melatonin and glutathione interacting with hydroxyl- and superoxide anion radicals /T.Y. Kuznetsovа, N.V. Solovyovа, V.V. Solovyov, V.O.Kostenko // Ukr. Biochem. J. – 2017. – № 12. – P. 146-152.

3 Громовая В.Ф. Электрохимическое моделирование элементарных стадий окислительно-восстановительных реакций в биосистемах /В.Ф. Громовая, Г.С. Шаповал, В.П. Кухарь // Доповіді НАН Украї-ни. − 1995. − № 3. − С.92–94 .

ХVII Міжнародна науково-технічна конференція «Фізичні процеси та поля технічних і іологічних об’єктів»

207