

УДК 539.26, 519.237.7

DOI: 10.32362/2500-316X-2019-7-1-102-112

РАЗДЕЛЕНИЕ ДИФРАКЦИОННЫХ СПЕКТРОВ МЕТОДОМ ГЛАВНЫХ КОМПОНЕНТ НА ПРИМЕРЕ ЛЕКАРСТВЕННОГО СРЕДСТВА АРИФОН

**Р.В. Чехова^{1,@},
В.М. Пышный¹,
Л.А. Пьянкова²,
В.А. Елохин²**

¹МИРЭА – Российский технологический университет, Москва 119454, Россия

²АО «Научные приборы», Санкт-Петербург 190103, Россия

@Автор для переписки, e-mail: chekhova.r@gmail.com

В статье рассматриваются результаты экспериментальных исследований по статистической обработке дифракционных спектров твердых лекарственных средств (ЛС) с целью их разделения и возможностью идентификации. Для исследования были использованы дифрактограммы оригинального и фальсифицированного ЛС Арифон, полученные на настольном дифрактометре Дифрей-401 производства АО «Научные приборы» (Санкт-Петербург, Россия). Исследования проводились в распространяемой по свободной лицензии среде Scilab. Отснятые дифракционные спектры обработаны с помощью процедуры сглаживания, которая позволила устранить влияние случайной составляющей в исходных данных. Анализ результатов сглаживания методом скользящего среднего показал, что алгоритм сглаживания с окном 41 точка наиболее предпочтителен. Приведены результаты статистической обработки дифрактограмм исследуемых ЛС методом главных компонент (МГК) в графической и числовой форме, которые показали хорошую сходимость и работоспособность данного метода при разделении дифракционных спектров. Проведенные исследования дают возможность создания методики, позволяющей идентифицировать твердые лекарственные препараты методом рентгеновской дифракции.

Ключевые слова: дифракционный спектр, лекарственное средство, метод главных компонент, собственное число, собственный вектор.

SEPARATION OF DIFFRACTION SPECTRA BY PRINCIPAL COMPONENT METHOD BY THE EXAMPLE OF ARIFON DRUG

**R.V. Chekhova^{1,@},
V.M. Pyshniy¹,
L.A. Pyankova²,
V.A. Elokhin²**

¹MIREA – Russian Technological University, Moscow 119454, Russia

²Scientific Instruments Inc., St. Petersburg 190103, Russia

@Corresponding author e-mail: chekhova.r@gmail.com

The article deals with the results of experimental studies on statistical processing of diffraction spectra of solid drugs for the purpose of their separation and identification. Diffractograms of the original and falsified drugs Arifon were used for the study. They were obtained on a desktop diffractometer Difray 401 produced by Scientific Instruments Inc. (Saint Petersburg, Russia). The research was conducted in the Scilab environment distributed under a free license. The captured diffraction spectra were processed using a smoothing procedure that eliminated the influence of a random component in the original data. Analysis of the results of smoothing by the moving average method showed that the smoothing algorithm with the window 41 point is most preferable. The results of statistical processing of diffractograms of the drugs investigated by the principal component analysis (PCA) in graphical and numerical form, which showed good convergence and efficiency of this method in the separation of diffraction spectra, are presented. The conducted studies make it possible to create a technique that allows identifying solid drugs by X-ray diffraction.

Keywords: diffraction spectrum, drug, principal component analysis, eigenvalue, eigenvector.

Предотвращение обращения на территории Российской Федерации недоброкачественных и фальсифицированных препаратов является одной из приоритетных задач государства¹. В соответствии со Стратегией национальной безопасности Российской Федерации 2010–2020 г., утвержденной в 2009 г., стратегическими целями национальной безопасности в сфере здравоохранения являются совершенствование стандартов медицинской помощи и контроль качества, эффективности и безопасности лекарственных средств (ЛС).

В настоящее время мировое фармацевтическое сообщество проявляет повышенный интерес к рентгеновской дифрактометрии как мощному инструменту для фармацевтического анализа [1]. Метод дифракции рентгеновских лучей на порошковом образце вследствие простоты и информативности имеет хорошую практическую возможность для исследования поликристаллических субстанций лекарственных веществ, полиморфизма, сольватоморфизма, изучения переходов состояний «кристаллическое – аморфное» и оценки степени кристалличности твердых лекарственных форм [2].

Распознавание (идентификацию) непосредственно лекарственного средства возможно осуществлением сопоставлением дифрактограмм исследуемого образца ЛС и его референтного образца с использованием методов хемометрики [3–5]. Наиболее широко хемометрический подход разделения спектров отработан и используется для анализа лекарственных форм в методе БИК-спектрометрии в сочетании со статистической обработкой результатов при исследовании многофакторных зависимостей, при этом обработка спектров производится методом главных компонент (МГК) [6, 7]. На практике МГК для БИК-спектрометрии реализован в программном обеспечении спектрометров фирмы «Bruker Optik GmbH»² (Германия). Необходимо отметить, что если для БИК-спектрометрии метод МГК хорошо отработан, то в рентгеновской дифрактометрии этому методу только начинают уделять внимание, публикаций по хемометрической обработке дифракционных спектров немного [8].

¹Федеральный закон Российской Федерации № 61-ФЗ от 12.04.2010 г. «Об обращении лекарственных средств» (с изменениями, внесенными в соответствии с Федеральным законом № 425-ФЗ от 28.12.2017 г.).

²<http://www.brukeroptics.com/mpa.html>

Для моделирования процедуры распознавания образцов ЛС были использованы дифрактограммы оригинального и фальсифицированного ЛС Арифон, предоставленные АО «Научные приборы» (Санкт-Петербург, Россия). Дифрактограммы Арифона получены на настольном дифрактометре «Дифрей-401» производства АО «Научные приборы». Набор данных составлял 4 и 8 спектров оригинального и фальсифицированного ЛС, соответственно. Для исследования были предоставлены данные, которые в процессе измерения не подвергались статистической обработке, в том числе процедуре сглаживания, поэтому каждый отснятый дифракционный спектр был обработан с помощью процедуры сглаживания, которая позволила устранить влияние случайной составляющей в регистрации рентгеновских квантов, убрать шумы в дифракционной картине.

Исследование проводилось в лицензионной среде Scilab³, поскольку результаты работы предполагалось использовать в учебном процессе. Однако первоначально все результаты с использованием стандартных функций были получены в среде Matlab, которая по сравнению с Scilab обладает гораздо большими функциональными возможностями. Применение Scilab дало практически полностью аналогичные результаты (расхождения лишь после четвертого знака после запятой). Одним из наиболее часто используемых алгоритмов сглаживания является алгоритм арифметического скользящего среднего. Однако в Scilab нет подходящих функций для сглаживания данных, поэтому был разработан собственный программный код, реализующий алгоритм скользящего среднего, который дает результаты, сопоставимые с данными, полученными с помощью функции Smooth в Matlab.

Метод арифметического скользящего среднего заключается в замене фактических значений членов ряда средним арифметическим значений нескольких ближайших к нему членов. Набор усредняемых значений образует так называемое окно сглаживания. Сглаживание осуществляется по следующей формуле⁴:

$$\bar{x}(k) = \frac{1}{n} \sum_{t=k}^{n+k} X(t), \quad (1)$$

где $X(t)$ – исходные данные,

$\bar{x}(k)$ – сглаженные значения,

n – размер окна (период сглаживания),

k – номер члена ряда, значение которого заменяется средним.

Для определения размера окна n , позволяющего эффективно сглаживать данные, произведен сравнительный анализ сглаживания с окнами 21, 41 и 61 точка.

Чтобы дать количественную оценку эффективности сглаживания с различными окнами, было определено среднее квадратичное отклонение (S_i) между каждой точкой исходных и сглаженных данных. Эти значения составили:

$$S_1 = 0.154, \text{ для } n = 21;$$

$$S_2 = 0.181, \text{ для } n = 41;$$

$$S_3 = 0.238, \text{ для } n = 61.$$

Разность между $n = 21$, $n = 41$ и $n = 41$, $n = 61$ точка составила:

$$\Delta_{12} = 0.027; \Delta_{23} = 0.057.$$

³<http://www.scilab.org>

⁴<http://www.poznayka.org>

Наблюдается меньшее отклонение Δ_{12} , чем Δ_{23} , что свидетельствует о меньшем различии в степени сглаживания для $n = 21$ и $n = 41$, а также большей степени сглаживания данных для окна 61 точка. При сглаживании методом скользящего среднего с окном 21 точка наблюдается неполное сглаживание шумов, а при окне 61 точка происходит более сильное сглаживание, которое может привести к некоторой потере информации, содержащейся в исходных данных. Поэтому для дальнейшего анализа были использованы данные, сглаженные с окном 41 точка.

На рис. 1 представлены исходный (синий) и сглаженный (красный) дифракционные спектры ЛС Арифон. Из рис. 1 видно, что наблюдается достаточно сильное подавление шумовой составляющей исходных данных.

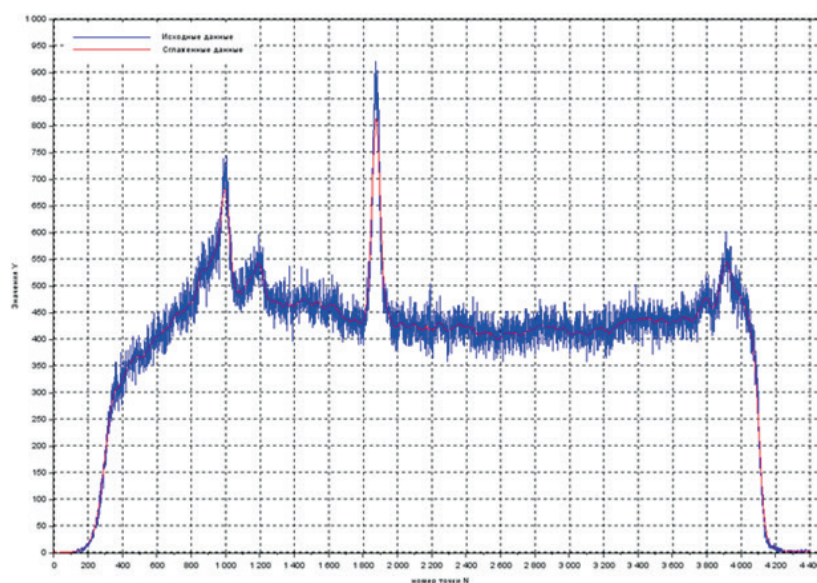


Рис. 1. Исходные и сглаженные дифракционные спектры ЛС Арифон.

После проведения процедуры сглаживания каждого набора данных проводилось слияние и усреднение серии обработанных спектров для каждого из окон по формуле:

$$Y = \frac{\sum_{i=1}^N X[i]}{N}, \quad (2)$$

где Y – канал результирующего спектра,

X – канал составляющего спектра,

N – количество спектров, участвующих в усреднении.

В качестве референтного образца (эталона) был принят усредненный по формуле (2) спектр, образованный слиянием четырех сглаженных дифракционных спектров оригинального ЛС Арифон (обозначение на рисунках «Арифон оригинал»).

За анализируемые образцы приняты сглаженный первый дифракционный спектр оригинального ЛС Арифон (обозначение на рисунках «Арифон 1 оригинал»), а также усредненный по формуле (2) спектр, образованный слиянием восьми сглаженных дифракционных спектров фальсифицированного ЛС Арифон (обозначение на рисунках «Арифон фальсификат»).

В настоящей работе для статистической обработки дифракционных спектров с целью их разделения и распознавания выбран метод главных компонент, поскольку он лежит в основе целого класса проекционных методов, используемых для сжатия исходных данных и эффективен в задачах разделения [9]. МГК (в англоязычной литературе – *principal component analysis*, PCA) – один из наиболее распространенных методов факторного анализа, позволяющий выделить ведущие факторы вариации исследуемых случайных величин. Метод основан на нахождении собственных чисел и собственных векторов ковариационной матрицы с последующим взвешиванием компонентов собственных векторов. Эти компоненты после соответствующего взвешивания дают значения коэффициентов корреляции с независимыми факторами, представленными через линейную комбинацию значений исследуемых случайных величин. Комбинации находятся таким образом, что представляют собой оси ортогональной системы координат и являются независимыми друг от друга. Метод имеет большие перспективы в минералогии, геохимии, палеонтологии и т. п. во всех случаях, когда можно предполагать, что значения случайной величины флуктуируют под воздействием ограниченного числа причин, и эти причины могут быть выражены через исследуемые случайные величины⁵.

Метод применяется к данным, записанным в виде прямоугольной матрицы X размером i строк и j столбцов. В нашем случае каждый столбец матрицы содержит дифракционные спектры различных образцов.

С математической точки зрения МГК – это представление исходной матрицы X в следующем виде [10]:

$$X = T \cdot P^T + E, \quad (3)$$

где T – матрица счетов (*scores*),

P – матрица нагрузок (*loadings*),

E – матрица остатков.

В основе анализа главных компонент лежит математический метод нахождения собственных значений и собственных векторов ковариационной матрицы исходных данных X , являющихся дифракционными спектрами. При этом нагрузки P являются матрицей собственных векторов, содержащей координаты главных компонент (ГК).

МГК реализован в среде Scilab с помощью стандартной функции:

$$[P, T, L] = \text{princomp}(X); \quad (4)$$

где X – исходная матрица данных,

P – матрица нагрузок,

T – матрица счетов,

L – собственные значения ковариационной матрицы X .

Следует учитывать, что собственные значения являются дисперсиями ГК, и первая компонента всегда объясняет как можно больше общей дисперсии и имеет максимальное собственное число. Основная доля информации содержится именно в ней [10].

⁵https://dic.academic.ru/dic.nsf/enc_geolog/

На рис. 2 представлены сглаженные дифракционные спектры референтного (синий) и исследуемого (красный) образцов оригинального ЛС Арифон. Из рис. 2 видно, что эти спектры практически идентичны.

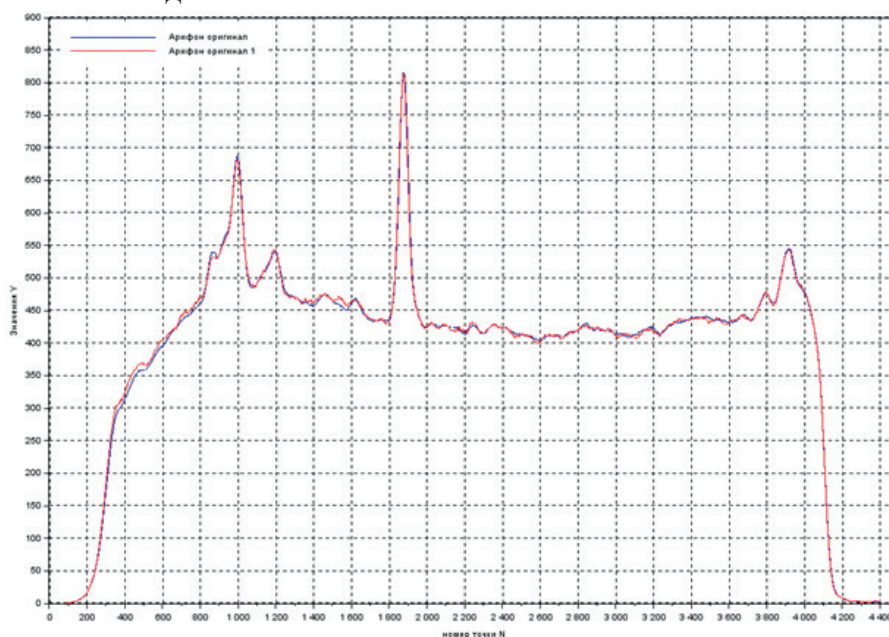


Рис. 2. Сглаженные дифракционные спектры референтного (синий) и исследуемого (красный) образцов оригинального ЛС Арифон.

На рис. 3 представлена матрица исходных данных сглаженных дифракционных спектров референтного (синий) и исследуемого (красный) образцов оригинального ЛС Арифон в координатах $X_{j,2}, X_{j,1}$ и $X_{j,1}, X_{j,2}$, где по оси абсцисс откладываются данные первого столбца матрицы X , а по оси ординат – второго, затем наоборот. На рис. 3 также изображена ГК Р2. ГК Р1 располагается строго перпендикулярно ГК Р2, но ее значение по оси ординат отрицательно, и она на рисунке не отображена.

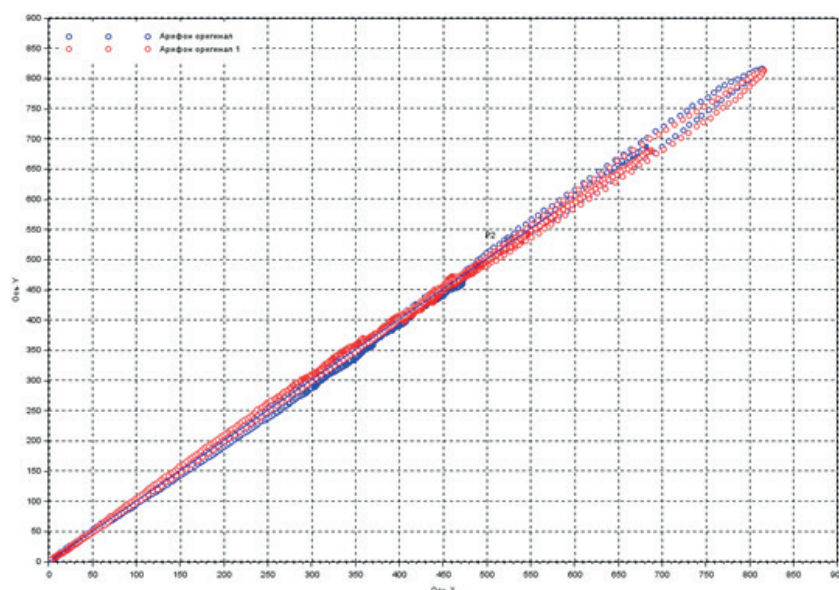


Рис. 3. Матрица исходных данных сглаженных дифракционных спектров референтного (синий) и исследуемого (красный) образцов оригинального ЛС Арифон в координатах $X_{j,2}, X_{j,1}$ и $X_{j,1}, X_{j,2}$ с изображением ГК Р2.

На рис. 4 представлена матрица счетов T с изображением ГК P1 и P2. Построение матрицы T выполнено аналогично рис. 3.

Для анализа эффективности применения МГК выполнен анализ фальсифицированного ЛС Арифон по алгоритму, описанному выше для оригинального ЛС Арифон.

На рис. 5 представлены сглаженные дифракционные спектры референтного (синий) и фальсифицированного (красный) ЛС Арифон. Из дифракционных картин видно сильное расхождение образцов.

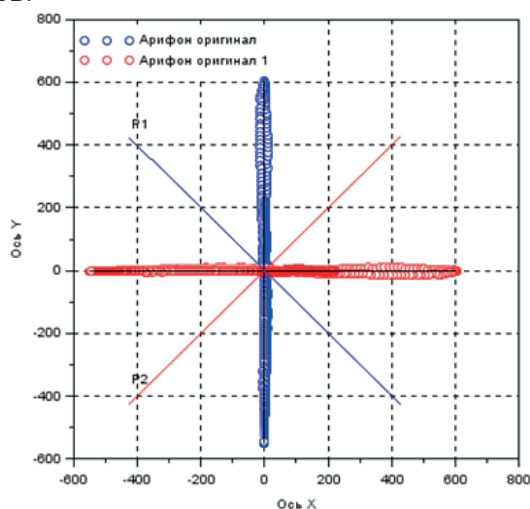


Рис. 4. Матрица счетов T с изображением ГК P1 и P2.

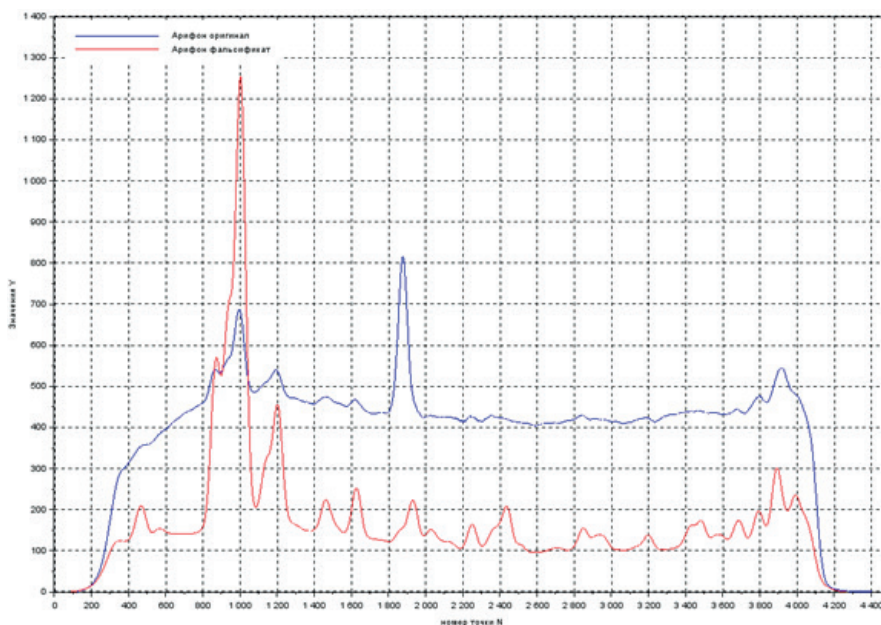


Рис. 5. Сглаженные дифракционные спектры референтного (синий) и фальсифицированного (красный) ЛС Арифон.

На рис. 6 представлена матрица исходных данных сглаженных дифракционных спектров референтного (синий) и фальсифицированного (красный) ЛС Арифон в координатах $X_{j,2}$, $X_{j,1}$ и $X_{j,1}$, $X_{j,2}$, также на рисунке изображена ГК P1. Вторая ГК P2 должна располагаться строго перпендикулярно первой, но ее значение по оси ординат отрицательно, и она на рисунке не отображена, что закономерно проявляется из исходных данных.

На рис. 7 приведена матрица счетов T с изображением ГК P1 и P2.

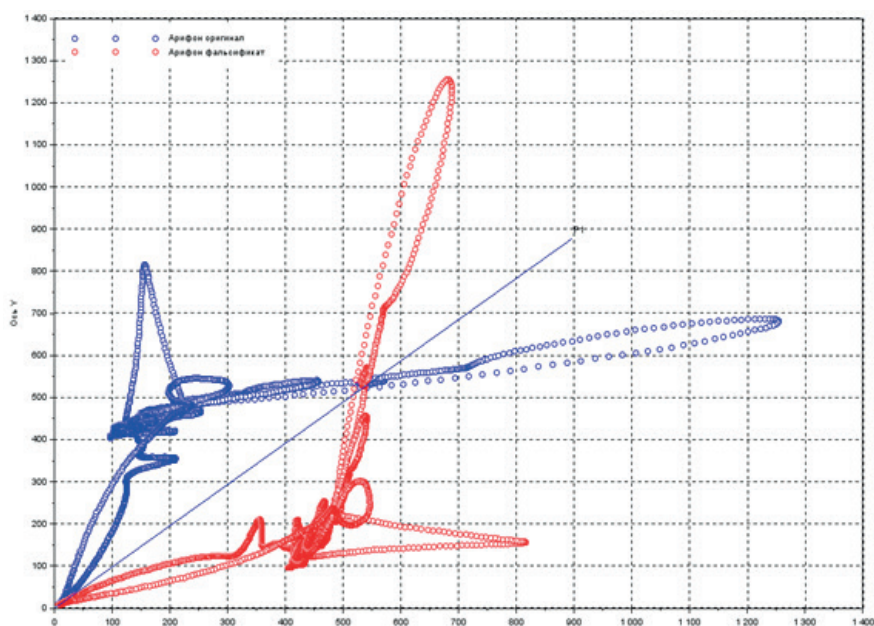


Рис. 6. Матрица исходных данных сглаженных дифракционных спектров референтного (синий) и фальсифицированного (красный) ЛС Арифон в координатах $X_{j,2}, X_{j,1}$ и $X_{j,1}, X_{j,2}$ с изображением ГК P1.

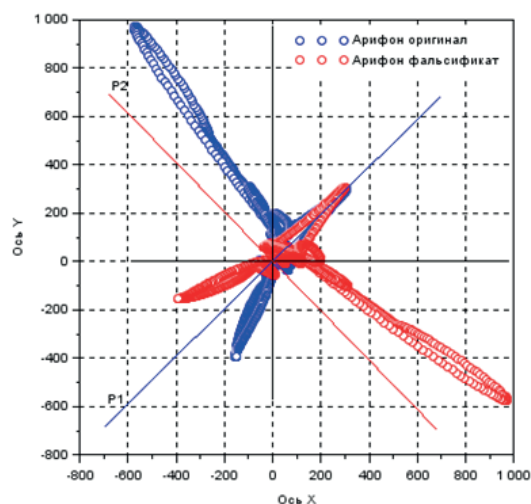


Рис. 7. Матрица счетов T с изображением ГК P1 и P2.

Результаты анализа образцов оригинального и фальсифицированного ЛС Арифон, преобразованные с помощью функции (4), сведены в таблицу, дополнительно в ней указано соотношение собственных чисел в процентах, то есть процент от общей дисперсии для каждого компонента⁶:

$$\begin{aligned} d_1 &= \lambda_1 \cdot 100 / (\lambda_1 + \lambda_2) \\ d_2 &= \lambda_2 \cdot 100 / (\lambda_1 + \lambda_2), \end{aligned} \quad (5)$$

где λ_1, λ_2 – собственные числа ковариационной матрицы исходных данных;
 d_1, d_2 – процент от общей дисперсии для каждого компонента.

⁶[http:// www.statsoft.ru/home/textbook/modules/stfacan.html](http://www.statsoft.ru/home/textbook/modules/stfacan.html)

Результаты исследований оригинального и фальсифицированного ЛС Арифон

ЛС	Матрица нагрузок, P		Вектор собственных значений, L		Соотношение вектора L , в %	
	ГК P1, X, Y	ГК P2, X, Y	λ_1	λ_2	d_1 , %	d_2 , %
Арифон оригинал	0.7084, -0.7058	0.7058, 0.7084	50379.53	9.4503	99.98	0.02
Арифон фальсификат	0.7146, -0.6996	-0.6996, -0.7146	39450.24	10509.27	78.96	21.04

Из таблицы видно, что в первом случае (оригинальный препарат) собственное число λ_1 более, чем в 5000 раз превышает λ_2 и объясняет 99.98 % общей дисперсии, при этом различие обоих данных составляет 0.02%. Это указывает на то, что отличие образцов незначительно, то есть исследуемое ЛС Арифон является оригинальным.

В случае фальсифицированного препарата собственные числа λ_1 и λ_2 отличаются всего лишь в 4 раза, и различие обоих образцов составляет 21.04%. Это указывает на то, что исследуемый образец не является оригинальным ЛС Арифон.

При обработке спектральных данных методом главных компонент нужно иметь некий образцовый набор данных (образец), наиболее точно отражающий спектр исследуемого вещества. Применение МГК сводится к сравнению исследуемого вещества с образцом, и в зависимости от полученных данных принимается решение о его соответствии образцу. В распоряжении авторов помимо дифрактограмм оригинального ЛС Арифон были дифрактограммы оригинальных ЛС Левомецетина, Метронидазола и Парацетамола, а также дифрактограммы фальсифицированного ЛС Арифона, поэтому сравнительному исследованию подвергался исключительно ЛС Арифон. Для дополнительной проверки работоспособности метода МГК было предложено провести сравнительный анализ заведомо разных ЛС – Арифона и Парацетамола, который показал, что различие образцов составляет порядка 30%. Такой результат (70% схожести) объясняется тем, что в состав этих ЛС входят одинаковые наполнители, а активные вещества разные.

Проведенные экспериментальные исследования показали работоспособность алгоритма МГК (с предварительным сглаживанием дифракционных спектров методом скользящего среднего) в разделении дифрактограмм для имеющейся выборки: 4 спектра оригинальных ЛС и 8 спектров фальсифицированных ЛС. Проведенная модельная процедура распознавания дифракционных спектров показала явную принадлежность оригинального ЛС Арифон к оригиналу, а фальсифицированного ЛС – к фальсификату. Данная методика может быть использована в учебных процессах по направлениям «Криминалистика» и «Промышленная фармацевтика». Для создания методики, позволяющей идентифицировать твердые лекарственные препараты методом рентгеновской дифракции, необходимо провести исследования на большом количестве выборок и проверку на различных лекарственных средствах.

Литература:

1. Елохин В.А., Архипов С.Н., Пьянкова Л.А., Петров А.В., Чехова Р.В., Пышный В.М. Рентгеновская дифрактометрия в фармацевтическом анализе: практика применения настольных дифрактометров «Дифрей» // Научное приборостроение. 2018. Т. 28. № 1. С. 61–68.

2. Государственная фармакопея РФ. Общая фармакопейная статья. Рентгеновская порошковая дифрактометрия. ОФС. URL: <http://pharmacopoeia.ru/ofs-1-2-1-1-0011-15-rentgenovskaya-poroshkovaya-difraktometriya/>
3. Болл С.В., Елохин В.А., Соколов В.Н. Фальсифицированные лекарственные средства и роль государства в борьбе с ними. М.: Инновационный фонд "РОСИСПЫТАНИЯ", 2009. 96 с.
4. Архипов С.Н., Болл С.В., Елохин В.А., Николаев В.И., Протопопов С.В., Пьянкова Л.А., Соколов В.Н. Рентгенодифракционный способ идентификации партий фармацевтической продукции: пат. 2452939 Рос. Федерация. № 2011102329/28; заявл. 18.01.2011; опубл. 10.06.2012. Бюл. № 16.
5. Родионова О.Е., Померанцев А.Л. Хемометрика в аналитической химии: обзор. М.: ИХФ им. Н.Н. Семенова РАН, 2016. 60 с. URL: http://www.chemometrics.ru/materials/articles/chemometrics_review.pdf
6. Соболева О.В., Елизарова Т.Е., Арик Ю.А., Колдина А.М., Морозова М.А. Ретроспективный обзор методологических основ новой ОФС «Спектрометрия в ближней инфракрасной области» // Ведомости Научного центра экспертизы средств медицинского применения. 2016. № 2. С. 58–64.
7. Safwan M. Obeidat, Ban Al-Tayyem. Spectroscopic and chemometric analysis of illegally manufactured formulations of selected medicines // Oriental Journal of Chemistry. 2012. V. 28. № 2. P. 795–801.
8. Caliendo R. Static and dynamical structural investigations of metal-oxide nanocrystals by powder X-ray diffraction: Colloidal tungsten oxide as a case of study // Chemistry Department / Brookhaven National Laboratory USA. March 2016. 30 p. URL: <https://www.bnl.gov/isd/documents/93116.pdf>
9. Родионова О.Е. Интервальный метод обработки результатов многоканальных экспериментов: дис. ... д-ра физ.-мат. наук. Москва, 2009. 272 с.
10. Эсбенсен К. Анализ многомерных данных / Сокр. пер. с англ. под ред. О. Родионовой. Черноголовка: ИПХФ РАН, 2005. 160 с.

References:

1. Elokhin V.A., Arkhipov S.N., Pyankova L.A., Petrov A.V., Chekhova R.V., Pyshniy V.M. X-ray diffractometry in pharmaceutical analysis: practices of using «Difray» benchtop diffractometers. *Nauchnoe priborostroenie* (Scientific Instrument Engineering). 2018; 28(1): 61-68. (in Russ.)
2. State Pharmacopoeia of the Russian Federation. General Pharmacopoeia Article. X-ray powder diffractometry. GPhA 1.2.1.1.0011.15. (in Russ.). URL: <http://pharmacopoeia.ru/ofs-1-2-1-1-0011-15-rentgenovskaya-poroshkovaya-difraktometriya/>
3. Boll S.V., Elokhin V., Sokolov V.N. Counterfeit medicines and the role of the state in combating them. Moscow: Innovation Fund "ROSISPYTANIYA", 2009. 96 p. (in Russ.)
4. Arkhipov S.N., Ball S.V., Elokhin V.A., Nikolaev V.I., Protopopov S.V., Pyankova L.A., Sokolov V.N. X-ray diffraction method for identifying batches of pharmaceutical products: Pat. 2452939 RU. No. 2011102329/28; filled 01/18/2011; publ. 06/10/2012. (in Russ.)
5. Rodionova O.E., Pomerantsev A.L. Chemometrics in analytical chemistry: Review. Moscow: N.N. Semenov Institute of Chemical Physics of the Russian Academy of Sciences, 2016. 60 p. (in Russ.). URL: http://www.chemometrics.ru/materials/articles/chemometrics_review.pdf

6. Soboleva O.V., Elizarova T.E., Arik Yu.A., Goldin A.M., Morozova M.A. A retrospective review of the methodological foundations of the new GPhA "Spectrometry in the near infrared region". *The Bulletin of the Scientific Centre for Expert Evaluation of Medicinal Products*. 2016; (2): 58-64.

7. Safwan M. Obeidat, Ban Al-Tayyem. Spectroscopic and chemometric analysis of illegally manufactured formulations of selected medicines. *Oriental Journal of Chemistry*. 2012; 28(2): 795-801.

8. Caliandro R. Static and dynamical structural investigations of metal-oxide nanocrystals by powder X-ray diffraction: Colloidal tungsten oxide as a case of study. Chemistry Department; Brookhaven National Laboratory USA. March 2016. 30 p. URL: <https://www.bnl.gov/isd/documents/93116.pdf>

9. Rodionova O.E. Interval method of processing the results of multichannel experiments: dissertation ... D.Sc. (Physics and Mathematics). Moscow, 2009. 272 p. (in Russ.)

10. Esbensen K.H. Multivariate Data Analysis – In Practice. 5-th ed. CAMO, 2004. 587 p.

Об авторах:

Чехова Регина Владимировна, кандидат химических наук, доцент кафедры «Приборы и информационно-измерительные системы» Института комплексной безопасности и специального приборостроения ФГБОУ ВО «МИРЭА – Российский технологический университет» (119454, Россия, Москва, пр-т Вернадского, д. 78).

Пышный Вячеслав Михайлович, кандидат технических наук, доцент кафедры «Приборы и информационно-измерительные системы» Института комплексной безопасности и специального приборостроения ФГБОУ ВО «МИРЭА – Российский технологический университет» (107996, Россия, Москва, ул. Стромынка, д. 20).

Пьянкова Любовь Алексеевна, кандидат геолого-минералогических наук, ведущий специалист КТО РТ АО «Научные приборы» (190103, Санкт-Петербург, Рижский пр., д. 26).

Елохин Владимир Александрович, кандидат физико-математических наук, генеральный директор АО «Научные приборы» (190103, Санкт-Петербург, Рижский пр., д. 26).

About the authors:

Regina V. Chekhova, Ph.D. (Chemistry), Associate Professor of the Chair “Devices and Information Measuring Systems”, Institute of Complex Security and Special Instrument Engineering, MIREA – Russian Technological University (78, Vernadskogo Pr., Moscow 119454, Russia).

Vyacheslav M. Pyshniy, Ph.D. (Engineering), Associate Professor of the Chair “Devices and Information Measuring Systems”, Institute of Complex Security and Special Instrument Engineering, MIREA – Russian Technological University (20, Stromynka st., Moscow 107996, Russia).

Lyubov A. Pyankova, Ph.D. (Geology and Mineralogy), Leading Specialist of Design and Technology Department, Scientific Instruments Inc. (26, Rzhskiy pr., St. Petersburg, 190103, Russia).

Vladimir A. Elokhin, Ph.D. (Physics and Mathematics), General Director of Scientific Instruments Inc. (26, Rzhskiy pr., St. Petersburg, 190103, Russia).

Для цитирования: Чехова Р.В., Пышный В.М., Пьянкова Л.А., Елохин В.А. Разделение дифракционных спектров методом главных компонент на примере лекарственного средства Арифон // Российский технологический журнал. 2019. Т. 7. № 1. С. 102–112. DOI: 10.32362/2500-316X-2019-7-1-102-112

For citation: Chekhova R.V., Pyshniy V.M., Pyankova L.A., Elokhin V.A. Separation of diffraction spectra by principal component method by the example of Arifon drug. *Rossiyskiy tekhnologicheskii zhurnal* (Russian Technological Journal). 2019; 7(1): 102-112. (in Russ.). DOI: 10.32362/2500-316X-2019-7-1-102-112

Свидетельство о регистрации СМИ Эл № ФС 77-74578 от 14 декабря 2018 г.

Дата опубликования 31 января 2019 г.

МИРЭА - Российский технологический университет

119454, Москва, пр. Вернадского, 78

<http://rtj.mirea.ru>