

УДК 543.51,681.2–5,664.3.032.9

© Ю. В. Лямина, Ю. А. Титов, А. Г. Кузьмин, А. Ю. Зайцева, 2024

## ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА В АНАЛИЗЕ ДАННЫХ КВАДРУПОЛЬНОГО МАСС-СПЕКТРОМЕТРА

Целью исследования было продемонстрировать возможности классификации и разделения на кластеры данных измерений малогабаритного квадрупольного масс-спектрометра MS7-200 с прямым вводом пробы при атмосферном давлении, разработанного в ИАП РАН. Для кластеризации результатов масс-спектрометрических измерений использовались метод главных компонент (для снижения размерности полученных данных) и метод машинного обучения *k*-средних. В качестве объектов измерений использовались 19 образцов ферментированной кисломолочной продукции двух групп. В первую группу вошли образцы продукции от индивидуальных фермерских хозяйств, во вторую — образцы промышленной продукции. Была поставлена задача автоматически распознать принадлежность измеряемого образца группе. На измеренных масс-спектрометрических данных этих образцов в двумерном пространстве главных компонент были построены разделимые 2 кластера, соответствующие 2 группам образцов.

*Ключевые слова:* масс-спектрометрический анализ, пищевая промышленность, молочная продукция, метод главных компонент

EDN: SQFAJA

### ВВЕДЕНИЕ

С повышением внимания к качеству и безопасности пищевых продуктов становится необходимо разработать эффективные инструменты для анализа сложных образцов. Метод масс-спектрометрии (МС) представляет собой универсальную технологию для анализа состава пищевых продуктов с высокой чувствительностью и селективностью [1–4]. Методы МС все шире применяются в пищевой промышленности благодаря своей простоте, экономичности и высокой производительности [5–6]. Для экспресс-диагностики в режиме реального времени был реализован метод газовой масс-спектрометрии. Получаемая в результате масс-спектрометрического анализа совокупность многомерных данных требует современной математической обработки. С этой целью для обработки данных применяются метод главных компонент и кластерный анализ [7].

Метод *k*-средних (*k*-means) является одним из наиболее популярных алгоритмов кластеризации, который используется для разделения данных на *k* групп (кластеров) на основе их сходства [8]. В контексте интеллектуального контроля качества пищевой продукции метод *k*-средних позволяет классифицировать образцы продукции на основе их химического состава, что упрощает анализ и контроль качества, позволяет повысить точность анализа за счет определения границ между различными классами образцов продукции и визуализировать данные в виде кластеров, что облегчает понимание структуры данных и принятие решений на основе полученных результатов [9].

Целью данного исследования было продемонстрировать возможности разработанного программно-аппаратного комплекса в повышении эффективности контроля качества ферментированной молочной продукции. В ходе работы был проведен масс-спектрометрический анализ состава газовой среды 19 образцов ферментированной молочной продукции от фермерских и промышленных производителей. Анализ проводился в реальном времени на малогабаритном квадрупольном масс-спектрометре MS7-200 с прямым капиллярным вводом пробы при атмосферном давлении, с использованием специально подготовленных медицинских шприцов для взятия проб [10–12].

Материалы и методы исследования

### МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

В работе были исследованы пробы газовой среды воздуха у поверхности образцов ферментированной молочной продукции. Анализ состава проб производился на малогабаритном квадрупольном масс-спектрометре MS7-200 с прямым капиллярным вводом пробы при атмосферном давлении, разработанном в ИАП РАН [13]. Отбор проб воздуха производился с использованием медицинских шприцов объемом 20 мл непосредственно из упаковки образцов продукции. Использование таких шприцов помогает получить точный

масс-спектр, который не искажен фоновыми примесями.

Были проведены исследования двух групп ферментированной молочной продукции. Первая группа была представлена 14 образцами ферментированной молочной продукции от индивидуальных фермерских хозяйств. Во вторую группу вошли 5 образцов промышленной ферментированной молочной продукции. Всего было проанализировано 19 образцов.

Для обработки и визуализации полученных данных был использован метод главных компонент (МГК) — метод машинного обучения без учителя, часто используемый для анализа данных с большим количеством параметров [14]. Данный метод позволяет снизить число признаков, выбрав самые изменчивые из них, для этого происходит переход к новым переменным — главным компонентам (ГК). Алгоритм подбирает веса для главных компонент таким образом, чтобы ГК1 и ГК2 имели наибольшую выборочную дисперсию и при этом не коррелировали друг с другом, что помогает бороться с мультиколлинеарностью в массиве данных. В результате анализа данным методом мы можем визуализировать полученные данные в пространстве главных компонент (ГК1, ГК2) в виде точек, каждая из которых соответствует отдельному молочному продукту.

Далее был применен кластерный анализ методом *k*-средних (*k*-meansclustering) [15]. После применения метода главных компонент мы получили новые признаки, которые являются линейными комбинациями исходных признаков. Таким образом, мы уменьшили размерность данных с наименьшей потерей информации о продукции.

Для группировки образцов молочной продукции на основе их сходства в данном исследовании применялся метод кластеризации *k*-средних, для оценки качества кластеризации используется значение *V*: чем меньше значение *V*, тем лучше разбиение

$$V = \sum_{i=1}^k \sum_{x \in S_i} (x - \mu_i)^2,$$

где *k* — число кластеров, *S<sub>i</sub>* — полученные кластеры, *i* = 1, 2, ..., *k* и  $\mu_i$  — центроиды всех векторов *x* из кластера *S<sub>i</sub>*.

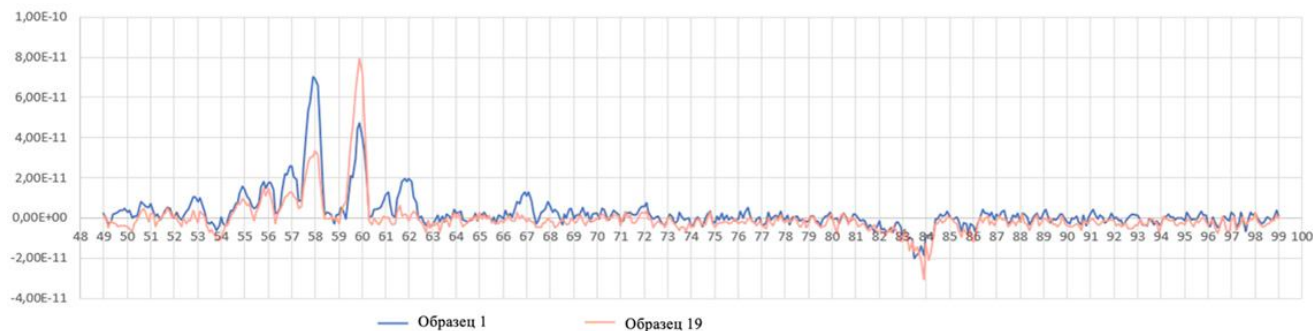
Конечная цель метода *k*-средних — разделить множество объектов на *k* кластеров так, чтобы объекты внутри каждого кластера были максимально близки друг к другу, а объекты из разных кластеров были максимально далеки.

## РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В результате экспериментального исследования были получены масс-спектры газового состава для 19 образцов ферментированной молочной продукции.

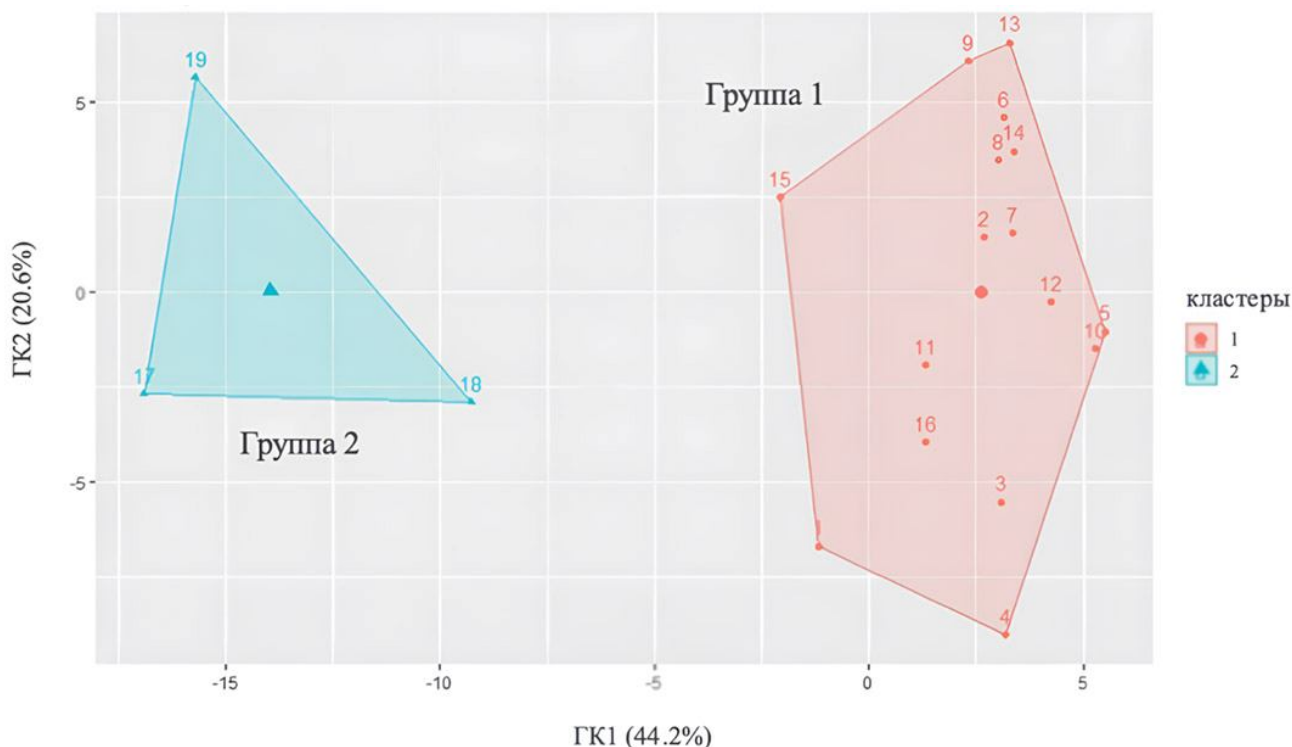
Сравнительные масс-спектры газового состава образца 1 ферментированной молочной продукции от индивидуального фермерского хозяйства и образца 19 промышленной продукции представлены на рис. 1.

Основные пики: 55 масса, 56 масса, 58 масса — ацетон  $C_3H_6O$ ; 60 масса — уксусная кислота  $C_2H_4O_2$ ; 69 масса — сквален  $C_{30}H_{50}$ ; 84 масса — криптон Кг.



**Рис. 1.** Масс-спектры газового состава образца ферментированной молочной продукции от индивидуальных фермерских хозяйств (образец 1) и образца промышленной продукции (образец 19).

## ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ ИСКУССТВЕННОГО ИНТЕЛЛЕКТА



**Рис. 2.** Результат кластеризации 19 образцов ферментированной молочной продукции методом k-средних. Группа 1 — фермерская продукция, группа 2 — промышленная продукция

Самый большой пик ацетона у первого образца, он обладает наименьшей жирностью 1.5% и наименьшим сроком хранения — 5 суток. У образца 6 пик на 69 массе. Продукт имеет самую густую и вязкую консистенцию. Криптона в пробе меньше, чем в атмосфере. Это связано с тем, что при измерениях мы вычитаем атмосферный масс-спектр из масс-спектра пробы и, таким образом, видим результирующий масс-спектр [16].

Далее был проведен кластерный анализ исходного массива данных с помощью метода k-средних. В результате были выделены две группы образцов ферментированной молочной продукции. Первая группа включает 16 образцов от индивидуальных фермерских хозяйств и 2 образца промышленной продукции, а вторая группа — 3 образца промышленной продукции.

Визуальное представление кластеризации исходного массива данных методом k-средних дано на рис. 2.

### ВЫВОДЫ

В ходе развития программно-аппаратного комплекса на основе малогабаритного квадрупольного масс-спектрометра МС7-200 разработки ИАП

РАН была предложена методика для контроля газового состава ферментированной молочной продукции с использованием методов анализа многомерных данных. Проведенные лабораторные испытания ферментированной продукции и полученные результаты свидетельствуют об эффективности методики. С ее помощью может быть решена проблема контроля качества изготовленной ферментированной молочной продукции. Также разработанная система позволяет решить проблему соответствия выпускаемой продукции установленным нормам на производящих предприятиях. Кроме того, данная разработка позволит еще на ранних стадиях изготовления отследить различные нарушения технологии производства.

Таким образом, настоящее исследование показывает перспективность использования масс-спектрометрического программно-аппаратного комплекса в решении не только сугубо научных, но и технико-промышленных задач.

### Благодарности

Исследование выполнено в рамках Государственного задания № 075-00439-24-00.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ермашов А.И.* Микрофлора кисломолочных продуктов разных торговых марок (Электронный ресурс). URL: <https://school-science.ru/3/1/32980> (Дата обращения: 01.04.2022).
2. *Комарова О. Н., Хавкин А.И.* Кисломолочные продукты в питании детей: пищевая и биологическая ценность // Российский вестник перинатологии и педиатрии. 2017. Т. 62, № 5. С. 80–86. DOI: 10.21508/1027-4065-2017-62-5-80-86
3. *Amarowicz R.* Squalene: a natural antioxidant? // European journal of lipid science and technology. 2009. Vol. 111, no. 5. P. 411–412. DOI: 10.1002/ejlt.200900102
4. *Manoilov V.V., Kuzmin A.G., Titov U.A.* Extraction of information attributes from the mass spectrometric signals of air // Journal of Analytical Chemistry. 2016. Vol. 71, iss. 14. P. 1301–1308. DOI: 10.1134/S1061934816140094
5. *Mazing M.S., Zaitceva A.Y., Kislyakov Y.J.* Development of a Method for Assessing of the Oxygen Supply of Tissues Based on a Multi-channel Spectrum Analyzer // International Youth Conference on Electronics, Telecommunications and Information Technologies. Springer, Cham, 2021. P. 233–239. DOI: 10.1007/978-3-030-58868-7\_26
6. *Мильман Б.Л., Конопелько Л.А.* Современная масс-спектрометрия: пропорции развития // Масс-спектрометрия. 2006. Т. 3, № 4. С. 271–276. URL: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=9291899>
7. *Dass C.* Fundamentals of contemporary mass spectrometry. John Wiley & Sons, 2007. DOI: 10.1002/0470118490
8. *Mil'man B.L., Zhurkovich I.K.* Mass spectrometric analysis of medical objects and problems of clinical diagnostics // Journal of Analytical Chemistry. 2015. Vol. 70, no. 10. P. 1179–1191. DOI: 10.1134/S1061934815100135
9. *Муратшин А.М., Шмаков В.С., Тырсин Ю.А.* Определение природы этанола методом хромато-масс-спектрометрии // Пиво и напитки. 2005. № 6. С. 40–43. URL: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=17354203>
10. *Manoilov V.V., Novikov L.V., Zarutskii I.V., Kuz'min A.G., Titov Y.A.* Methods for processing mass spectrometry signals from exhaled gases for medical diagnosis // Biomedical engineering. 2020. Vol. 53, no. 5. P. 355–359. DOI: 10.1007/s10527-020-09942-0
11. *Kuzmin A.G., Tkachenko E.I., Oreshko L.S., Titov Yu.A., Balabanov A.S.* Method of mass spectrometric express diagnostics by the composition of exhaled air // Medical Academic Journal. 2016. Vol. 16, no. 4. P. 106–107. URL: <https://journals.eco-vector.com/MAJ/article/view/9625>
12. *Манойлов В.В., Заруцкий И.В., Кузьмин А.Г., Титов Ю.А., Самсонова Н.С.* Методы обработки и исследование возможностей классификации масс-спектров выдыхаемых газов // Научное приборостроение. 2019. Т. 29, № 1. С. 106–111. URL: <http://iairas.ru/mag/2019/abst1.php#abst16>
13. *Mazing M.S., Zaitceva A.Y., Kislyakov Y.Y., Davydov V.V., Kondakov N.S., Avdyushenko S.A.* Analytical complex for study of the oxygen status of tissues of the human organism // Journal of Physics: Conference Series. IOP Publishing. 2020. Vol. 1695. Id. 012065. DOI: 10.1088/1742-6596/1695/1/012065
14. *Ким Дж.-О.* Факторный, дискриминантный и кластерный анализ / пер. с англ. А.М. Хотинского, С.Б. Королева. М.: Финансы и статистика, 1989. 215 с.
15. *Wishart D.S.* Metabolomics: applications to food science and nutrition research // Trends in Food Science & Technology. 2008. Vol. 19, no. 9. P. 482–493. DOI: 10.1016/j.tifs.2008.03.003
16. *Lu H., Zhang H., Chinglin K., Xiong J. et al.* Ambient mass spectrometry for food science and industry // TrAC Trends in Analytical Chemistry. 2018. Vol. 107. P. 99–115. DOI: 10.1016/j.trac.2018.07.017

**Институт аналитического приборостроения РАН,  
Санкт-Петербург**

Контакты: Зайцева Анна Юрьевна,  
anna@da-24.ru

Материал поступил в редакцию 06.08.2024

# APPLYING ARTIFICIAL INTELLIGENCE TECHNIQUES IN QUADRUPOLE MASS SPECTROMETER DATA ANALYSIS

Y. V. Lyamina, Yu. A. Titov, A. G. Kuzmin, A. Yu. Zaitseva

*Institute for Analytical Instrumentation of RAS, Saint Petersburg, Russia*

The aim of the study was to demonstrate the capabilities of classification and division into clusters of measurement data of the compact quadrupole mass spectrometer MS7-200 with direct sample injection at atmospheric pressure, developed at the IAI RAS. To cluster the results of mass spectrometric measurements, the principal component analysis (to reduce the dimensionality of the obtained data) and the k-means machine training method were used. Nineteen samples of fermented milk products were used as measurement objects, divided into two groups. The first group included samples of products from farms, the second included samples of industrial products. The task was to automatically recognize the belonging of the measured sample to the group. Based on the measured mass spectrometric data of these samples, two separable clusters were constructed in the two-dimensional space of principal components, corresponding to two groups of samples.

**Keywords:** mass spectrometry, food industry, dairy products, principal component analysis

## REFERENCES

1. Ermashov A.I. [Microflora of sour-milk products of different trademarks]. *III Mezhdunarodnyi konkurs nauchno-issledovatel'skikh i tvorcheskikh rabot uchashchikhsya: "Start v nauke"* [III Int. competit. of res. and creative works of students: "Start in Science"]. URL: <https://school-science.ru/3/1/32980> (accessed: 01.04.2022). (In Russ.).
2. Komarova O.N., Havkin A.I. [Cultured milk foods in children's nutrition: nutritional and biological value]. *Rossiyskiy Vestnik Perinatologii i Pediatrii* [Russian Bulletin of Perinatology and Pediatrics], 2017, vol. 62, no. 5, pp. 80–86. DOI: 10.21508/1027-4065-2017-62-5-80-86 (In Russ.).
3. Amarowicz R. Squalene: a natural antioxidant? *European journal of lipid science and technology*, 2009, vol. 111, no. 5, pp. 411–412. DOI: 10.1002/ejlt.200900102
4. Manoilov V.V., Kuzmin A.G., Titov U.A. Extraction of information attributes from the mass spectrometric signals of air. *Journal of Analytical Chemistry*, 2016, vol. 71, no. 14, pp. 1301–1308. DOI: 10.1134/S1061934816140094
5. Mazing M.S., Zaitseva A.Y., Kislyakov Y.J. Development of a Method for Assessing of the Oxygen Supply of Tissues Based on a Multi-channel Spectrum Analyzer. *International Youth Conference on Electronics, Telecommunications and Information Technologies*. Springer, Cham, 2021, pp. 233–239. DOI: 10.1007/978-3-030-58868-7\_26
6. Milman B.L., Konopel'ko L.A. [Modern mass spectrometry: proportions of developments]. *Mass-spektrometriya* [Mass spectrometry], 2006, vol. 3, no. 4, pp. 271–276. URL: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=9291899> (In Russ.).
7. Dass C. *Fundamentals of contemporary mass spectrometry*. John Wiley & Sons, 2007. DOI: 10.1002/0470118490
8. Mil'man B.L., Zhurkovich I.K. Mass spectrometric analysis of medical objects and problems of clinical diagnostics. *Journal of Analytical Chemistry*, 2015, vol. 70, no. 10, pp. 1179–1191. DOI: 10.1134/S1061934815100135
9. Mouratshin A.M., Shmakov V.S., Tyrsin Yu.A. [Determination of nature of ethanol by method of chromatomass-spectral analysis]. *Pivo i napitki* [Beer and beverages], 2005, no. 6, pp. 40–43. URL: <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=17354203> (In Russ.).
10. Manoilov V.V., Novikov L.V., Zarutskii I.V., Kuz'min A.G., Titov Y.A. Methods for processing mass spectrometry signals from exhaled gases for medical diagnosis. *Biomedical engineering*, 2020, vol. 53, no. 5, pp. 355–359. DOI: 10.1007/s10527-020-09942-0
11. Kuzmin A.G., Tkachenko E.I., Oreshko L.S., Titov Yu.A., Balabanov A.S. [Method of mass spectrometric express diagnostics by the composition of exhaled air]. *Meditinskii akademicheskii zhurnal* [Medical Academic Journal], 2016, vol. 16, no. 4, pp. 106–107. URL: <https://journals.eco-vector.com/MAJ/article/view/9625>
12. Manoilov V.V., Kuzmin A.G., Zarutskiy I.V., Titov Yu.A., Samsonova N.S. [Methods of processing and investigation of the possibilities of classification of mass spectra of exhaled gases]. *Nauchnoe Priborostroenie* [Scientific Instrumentation], 2019, vol. 29, no. 1, pp. 106–111. DOI: 10.18358/np-29-1-i106110 (In Russ.).
13. Mazing, M.S., Zaitseva A.Y., Kislyakov Y.Y., Davydov V.V., Kondakov N.S., Avdyushenko S.A. Analytical complex for study of the oxygen status of tissues of the human organism. *Journal of Physics: Conference Series. IOP Publishing*, 2020, vol. 1695, Id. 012065. DOI: 10.1088/1742-6596/1695/1/012065
14. Kim J.-O., Mueller C.W. *Factor analysis: Statistical Methods and Practical Issues*. Eleventh Printing, 1986. (Russ. ed.: Kim Dzh.-O., M'yuller Ch.U. *Faktornyyi, diskriminantnyi i klasternyi analiz*. Translate from eng. A.M. Khotinskii, S.B. Korolev. Moscow: Finansy i statistika Publ., 1989. 215 p.).

15. Wishart D.S. Metabolomics: applications to food science and nutrition research. *Trends in Food Science & Technology*, 2008, vol. 19, no. 9, pp. 482–493. DOI: 10.1016/j.tifs.2008.03.003
16. Lu H., Zhang H., Chingin K., Xiong J. et al. Ambient mass spectrometry for food science and industry. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, 2018, vol. 107, pp. 99–115. DOI: 10.1016/j.trac.2018.07.017

Contacts: Zaitseva Anna Yuryevna,  
anna@da-24.ru

Article received by the editorial office on 06.08.2024

## INTRODUCTION

The growing focus on food safety and quality necessitates the development of efficient instruments for the examination of intricate samples. The mass spectrometry (MS) method is a universal technology for analyzing the composition of foods with high sensitivity and selectivity [1–4]. MS methods are increasingly used in the food industry due to their simplicity, cost-effectiveness, and high productivity. [5–6]. For express diagnostics in real time, the method of gas mass spectrometry was implemented. The set of multidimensional data obtained as a result of mass spectrometric analysis requires modern mathematical processing. For this purpose, the principal component analysis and cluster analysis are used for data processing [7].

The k-means method is one of the most popular clustering algorithms, which is used to divide data into  $k$  groups (clusters) based on their similarity [8]. In the context of intelligent quality control of food products, the k-means method allows you to classify product samples based on their chemical composition, which simplifies the analysis and quality control, which makes it possible to increase the accuracy of analysis by determining the boundaries between different classes of product samples and visualize data in the form of clusters, which facilitates understanding of the data structure and making decisions based on the results obtained [9].

The purpose of this study was to demonstrate the capabilities of the developed software and hardware complex in improving the efficiency of quality control of fermented dairy products. In the course of the work, a mass spectrometric analysis of the composition of the gaseous medium of 19 samples of fermented dairy products from farm and industrial producers was carried out. The analysis was carried out in real time on a small quadrupole MS7-200 mass spectrometer with direct capillary injection at atmospheric pressure, using specially prepared medical syringes for sampling [10–12].

## STUDY MATERIALS AND METHODS

Samples of the gas composition of the air medium at the surface of samples of fermented dairy products were studied. The analysis of the sample composition was carried out on a small-sized quadrupole mass spectrometer MS7-200 with direct capillary injection of a sample at atmospheric pressure, developed at the IAI RAS [13]. Air samples were taken using 20 mL medical syringes directly from the product sample packaging. The use of such syringes helps to obtain an accurate mass spectrum that is not distorted by background impurities.

Two groups of fermented dairy products were tested. The first group was represented by 14 samples of fermented dairy products from individual farms. The second group included 5 samples of industrial fermented dairy products. A total of 19 samples were analyzed.

To process and visualize the obtained data, the principal component analysis (PCA) was used — a method of machine training without a teacher, often used to analyze data with a large number of parameters [14]. This method allows you to reduce the number of features by selecting the most variable of them; for this purpose, there is a transition to new variables — principal components (PC). The algorithm selects weights for the principal components so that PC1 and PC2 have the largest selective variance and are not correlated with each other, this helps to avoid multicollinearity in the data array. As a result of analysis by this method, we can visualize the obtained data in the space of the main components (PC1, PC2) in the form of points, each of which corresponds to a separate dairy product.

Next, cluster analysis was applied using the k-means clustering method [15]. After applying the principal component analysis, we obtained new features that are linear combinations of the original features. Thus, we reduced the dimensionality of the data with the least loss of information about the product.

To group dairy samples based on their similarity, the k-means clustering method was used in this study, the  $V$  value is used to assess the quality of clustering: the smaller the  $V$  value, the better the division

$$V = \sum_{i=1}^k \sum_{x \in S_i} (x - \mu_i)^2,$$

where  $k$  is the number of clusters,  $S_i$  are the resulting clusters,  $i = 1, 2, \dots, k$  and  $\mu_i$  are the centroids of all vectors  $\mathbf{x}$  from the  $S_i$  cluster.

The ultimate goal of the k-means method is to divide the set of objects into  $k$  clusters so that the objects within each cluster are as close to each other as possible, and the objects from different clusters are as far away as possible.

## RESULTS AND DISCUSSION

As a result of the experimental study, mass spectra of the gas composition for 19 samples of fermented dairy products were obtained.

Comparative mass spectra of the gas composition of sample 1 of fermented dairy products from a farm and sample 19 of industrial products are presented in Fig. 1.

**Fig. 1.** Mass spectra of gas composition of a sample of fermented dairy products from farms (sample 1) and a sample of industrial products (sample 19)

Main peaks: 55 mass, 56 mass, 58 mass — acetone  $C_3H_6O$ ; 60 mass — acetic acid  $C_2H_4O_2$ ; 69 mass — squalene  $S_{30}H_{50}$ ; 84 mass — krypton Kr.

The largest peak of acetone is in the first sample, it has the lowest fat content of 1.5% and the shortest shelf life — 5 days. Sample 6 has a peak at 69 mass. The product has the thickest and most viscous consistency. There is less krypton in the sample than in the atmosphere. This is due to the fact that during measurements we subtract the atmospheric mass spectrum from the sample mass spectrum and, thus, see the resulting mass spectrum [16].

Next, a cluster analysis of the original data array was carried out using the k-means method. As a result, two groups of fermented dairy product samples were identified. The first group includes 16 samples from individual farms and 2 samples of industrial products, and the second group — 3 samples of industrial products.

Visual representation of clustering the original k-means dataset is shown in Fig. 2.

**Fig. 2.** Clustering result of 19 samples of fermented dairy products using k-means method.  
Group 1 — farm products, group 2 — industrial products

## CONCLUSIONS

In the course of developing the hardware and software complex based on the small-sized quadrupole mass spectrometer MS7-200 created by the IAI RAS, a method was proposed for monitoring the gas composition of fermented dairy products using multidimensional data analysis methods. The laboratory tests of fermented products and the results obtained indicate the effectiveness of the method. With its help, the problem of quality control of manufactured fermented dairy products can be solved. The developed system also allows solving the problem of compliance of manufactured products with established standards at manufacturing enterprises. In addition, this development will allow tracking various violations of production technology at early stages of production.

Thus, the present study demonstrates the potential of using a mass spectrometric hardware and software complex in solving not only purely scientific, but also technical and industrial problems.