

# Многомерный физико-химический анализ

Водные растворы аминокислот

# Авторы



«Если бы не было статистики, мы бы даже не подозревали о том, как хорошо мы работаем»

*Закадровый голос Новосельцева из к/ф «Служебный роман»*

# Содержание доклада

---

- Многомерный физико-химический анализ
- Факторный анализ свойств водного раствора глицина
- Вещественный анализ смешанного раствора глицина и лизина

«Ну, начнем ..... Надеюсь в  
конце мы будем знать  
больше, чем сейчас»

*Г.Х. Андерсен, «Снежная  
королева»*



# Физико-химический анализ

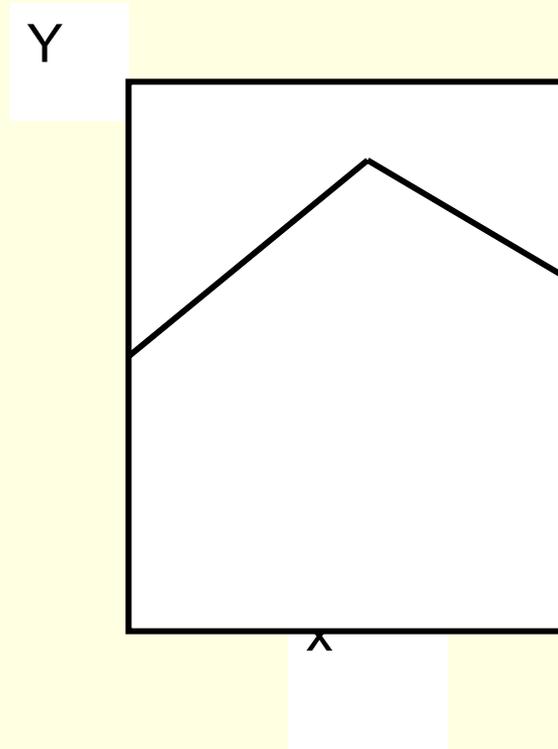
---

является количественным измерением равновесных систем, которое дает возможность построить диаграмму состав-свойство и на основании последней делать выводы о взаимодействии между компонентами.

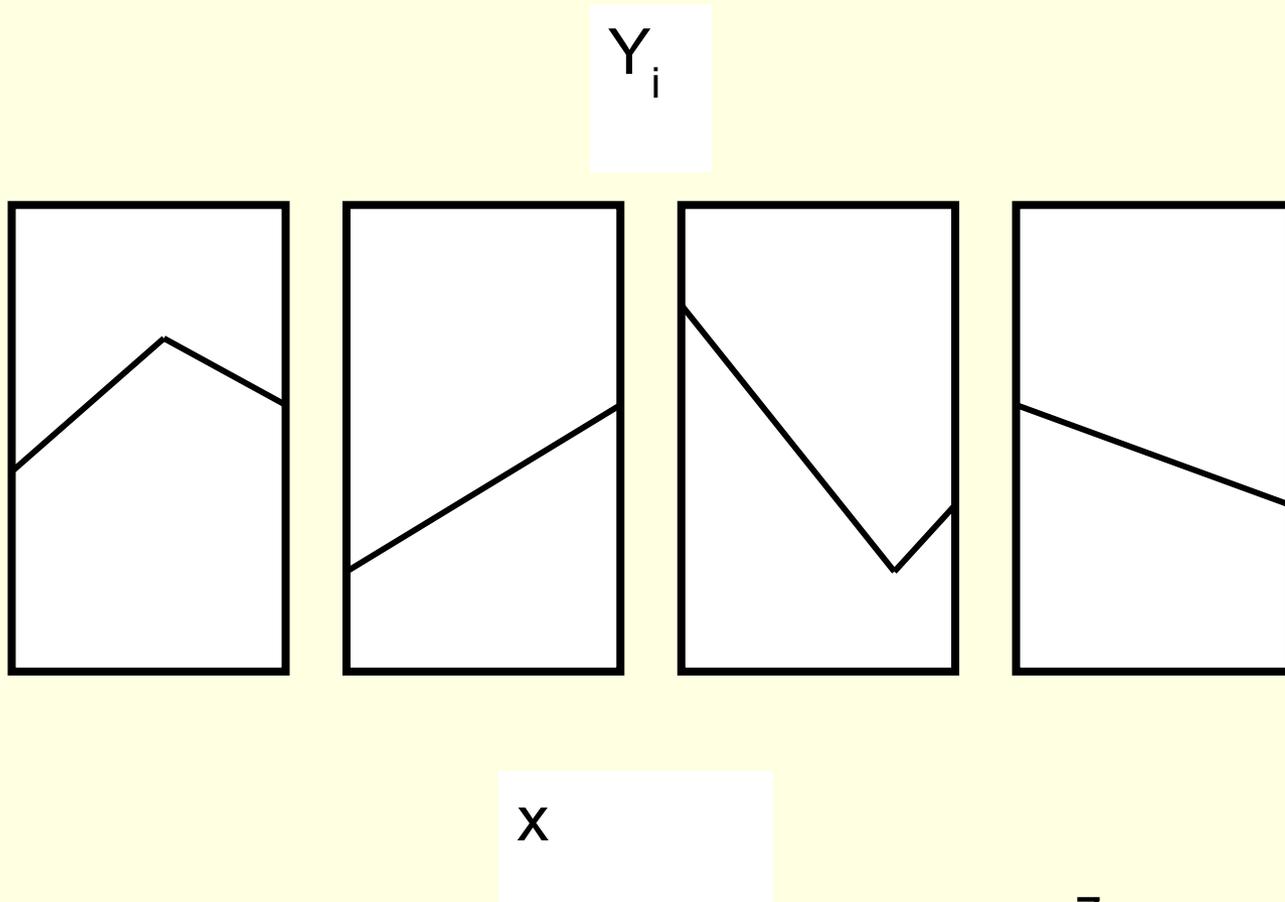
Н.С. Курнаков

# Одномерный физико-химический анализ

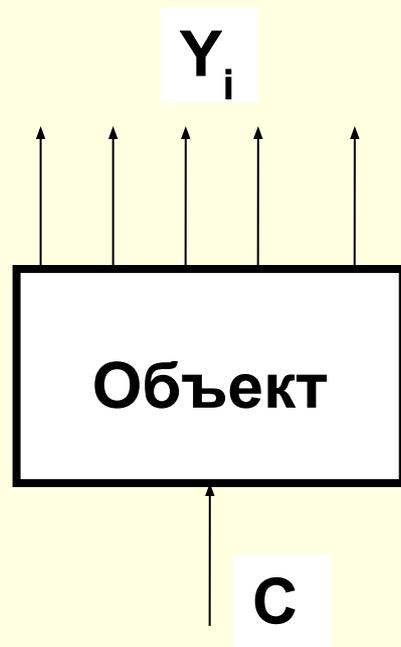
---



# Многомерный физико-химический анализ



# Модель многомерного физико-химического анализа



**C** – матрица концентраций

**Y** – матрица средних значений параметров

**$\Sigma$**  – матрица дисперсий-ковариаций параметров

**Предмет** многомерного физико-химического анализа – исследование взаимосвязей концентрационной матрицы, матрицы средних значений параметров и матрицы дисперсий-ковариаций параметров.

# Инструментарий МФХА

- Множественная регрессия
- MANOVA
- PLSR
- PCR
- Факторный анализ и метод главных компонент
- Дискриминантный анализ
- Кластерный анализ
- Канонический корреляционный анализ



# Факторный анализ свойств раствора ГЛИЦИНА

Correlations (Gly) Casewise deletion of MD N=17								
Variable	$\kappa$	pH	$\varepsilon$	$\varepsilon'$	$\varepsilon''$	$\varepsilon_0$	$\tau$	$\Delta F$
$\kappa$	1,00	-0,68	1,00	-0,98	1,00	0,96	0,99	0,98
pH	-0,68	1,00	-0,70	0,71	-0,70	-0,85	-0,73	-0,79
$\varepsilon$	1,00	-0,70	1,00	-0,98	1,00	0,96	1,00	0,99
$\varepsilon'$	-0,98	0,71	-0,98	1,00	-0,98	-0,95	-0,99	-0,98
$\varepsilon''$	1,00	-0,70	1,00	-0,98	1,00	0,96	1,00	0,99
$\varepsilon_0$	0,96	-0,85	0,96	-0,95	0,96	1,00	0,97	0,99
$\tau$	0,99	-0,73	1,00	-0,99	1,00	0,97	1,00	0,99
$\Delta F$	0,98	-0,79	0,99	-0,98	0,99	0,99	0,99	1,00
$\rho$	1,00	-0,69						
V	0,17	-0,07						
$\eta$	0,95	-0,87						

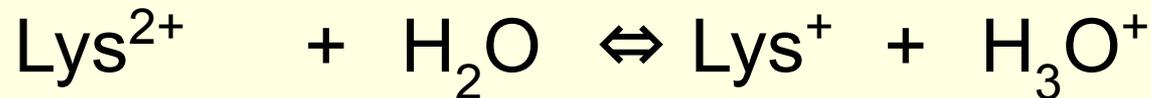
Eigenvalues (Gly) Extraction: Principal components			
Value	Eigenvalue	% Total variance	Cumulative Eigenvalue
1	9,431555	94,31555	9,431555
2	0,509105	5,09105	9,940660

# Факторный анализ свойств раствора глицина

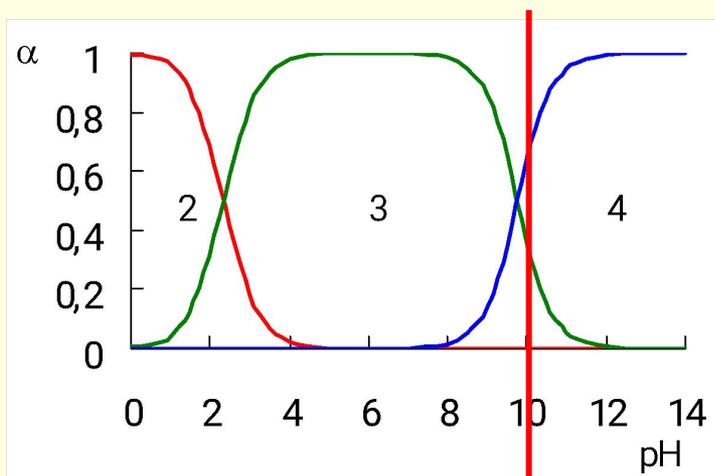
Variable	Factor Loadings (Varimax) Extraction: Principal components (Marked loadings are > 0.5)	
	Factor 1	Factor 2
$\kappa$	0,925199	0,376029
pH	-0,354814	-0,934454
$\varepsilon$	0,913006	0,403267
$\varepsilon'$	-0,891164	-0,424926
$\varepsilon''$	0,911010	0,408228
$\varepsilon_0$	0,781862	0,616687
$\tau$	0,897354	0,439620
$\Delta F$	0,851538	0,521381
$\rho$	0,915388	0,395754
$\eta$	0,764388	0,640877
Expl.Var	7,003470	2,937190
Prp.Totl	0,700347	0,293719



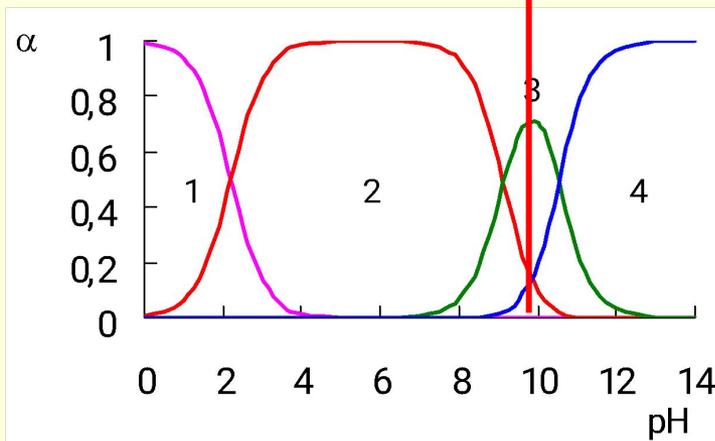
# Химические реакции в растворе Gly-Lys



# Диаграммы ионных форм – любимый инструмент кафедры



Gly



Lys

Что же происходит с  
электронейтральностью?

# Еще одна реакция?

---



# Эксперимент

---

Водный раствор глицина (Gly) и лизина (Lys).  
Диапазон концентраций – 0.01 – 1.0 М (пять уровней).

## Измерения:

- электропроводность;
- pH;
- коэффициент преломления

# Дисперсионный анализ

Таблица 1. Зависимая переменная

электропроводность

Эффект	MS	f	F-критерий
[Gly]	21.04	4	561.6*
[Lys]	80.43	4	2261.3*
[Gly]x[Lys]	3.38	16	95.1*
Ошибка	0.04	25	

# Дисперсионный анализ

Таблица 2. Зависимая переменная - рН

Эффект	MS	f	F-критерий
[Gly]	1.44	4	24.8*
[Lys]	22.24	4	381.8*
[Gly]x[Lys]	0.24	16	4.2*
Ошибка	0.04	25	

# Дисперсионный анализ

Таблица 3. Зависимая переменная – коэффициент преломления

Эффект	MS	f	F-критерий
[Gly]	0.000319	4	163.1*
[Lys]	0.001261	4	643.9*
[Gly]x[Lys]	0.000002	16	1.1
Ошибка	0.000002	25	

# Трёхмерная диаграмма электропроводности раствора Gly-Lys

---

# Регрессионный анализ

Зависимая переменная - электропроводность

$$\kappa \cdot 10^3 = 4.0 [\text{Gly}] + 10.7 [\text{Lys}] + 6.2 [\text{Gly}] [\text{Lys}] - 3.0 [\text{Gly}]^2 - 6.8 [\text{Lys}]^2$$

$$R^2 = 0.97; F = 288; p < 0.00001$$

$$\lambda_{\text{Gly}}^{\text{eff}} = \frac{\partial \kappa}{\partial [\text{Gly}]} = 4.0 + 6.2 [\text{Lys}] - 3.0 [\text{Gly}]$$

$$\lambda_{\text{Lys}}^{\text{eff}} = \frac{\partial \kappa}{\partial [\text{Lys}]} = 10.7 + 6.2 [\text{Gly}] - 6.8 [\text{Lys}]$$

# SEPATH моделирование латентной структуры

# Модель ковариационной структуры

---

$$\Sigma = \Sigma(\lambda_{\text{Gly}}, \lambda_{\text{Lys}}, \alpha)$$

## Классификация переменных:

*Наблюдаемые:*

Общая концентрация Gly

Общая концентрация Lys

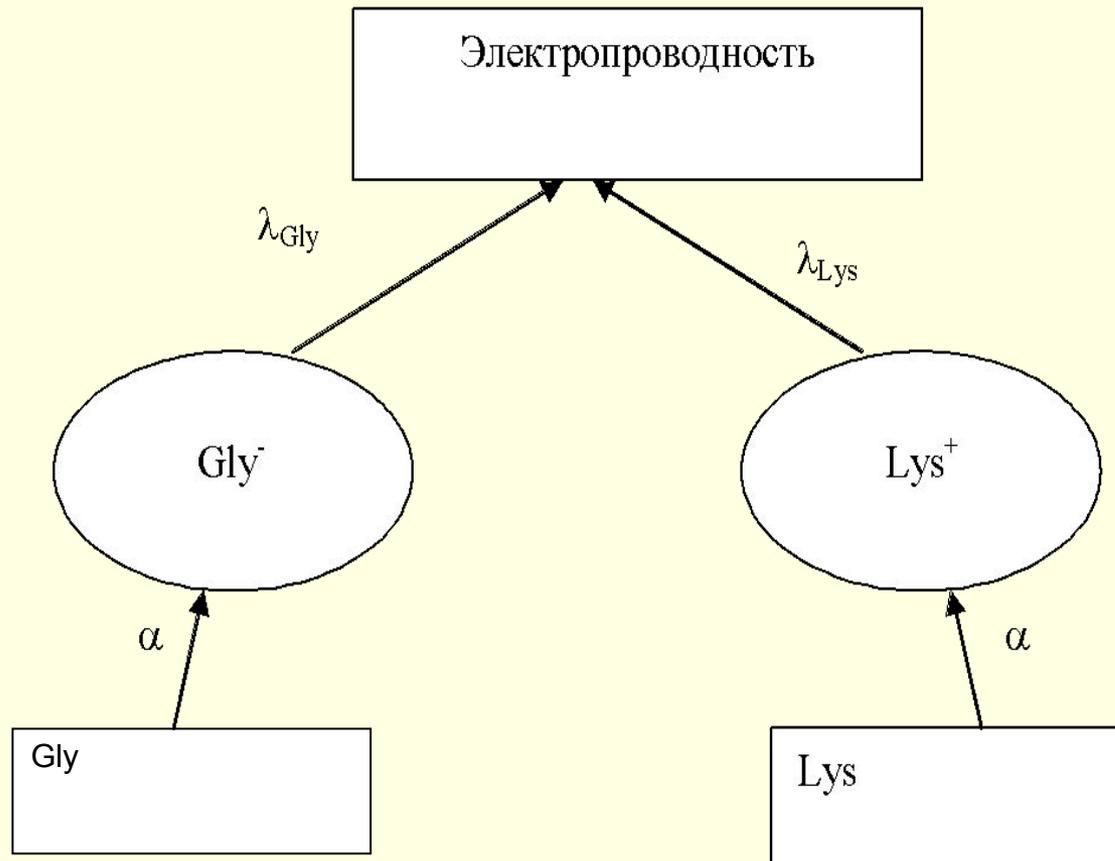
Электропроводность

*Латентные:*

Ионная концентрация Gly<sup>-</sup>

Ионная концентрация Lys<sup>+</sup>

# Диаграмма путей



# Результаты моделирования

Диапазон концентраций 0.01 – 0.5 М

Ионная форма	Подвижность $\lambda$ , Ом <sup>-1</sup> см <sup>2</sup> моль <sup>-1</sup>	Степень ионизации $\alpha$
Lys <sup>+</sup>	35.9	0.35
Gly <sup>-</sup>	23.8	0.35

Диапазон концентраций 0.5 – 1.0 М

Ионная форма	Подвижность $\lambda$ , Ом <sup>-1</sup> см <sup>2</sup> моль <sup>-1</sup>	Степень ионизации $\alpha$
Lys <sup>+</sup>	17.2	0.35
Gly <sup>-</sup>	17.3	0.35

# Возможности применения методологии МФХА

---

- Многомерный экологический мониторинг
- Мультисенсорные методы анализа («электронный нос», «электронный язык»)
- Контроль качества химических веществ (соответствие НТД)
- Контроль качества фармацевтических препаратов (соответствие ФС)
- Изучение транспорта в области межфазных границ мембрана/раствор