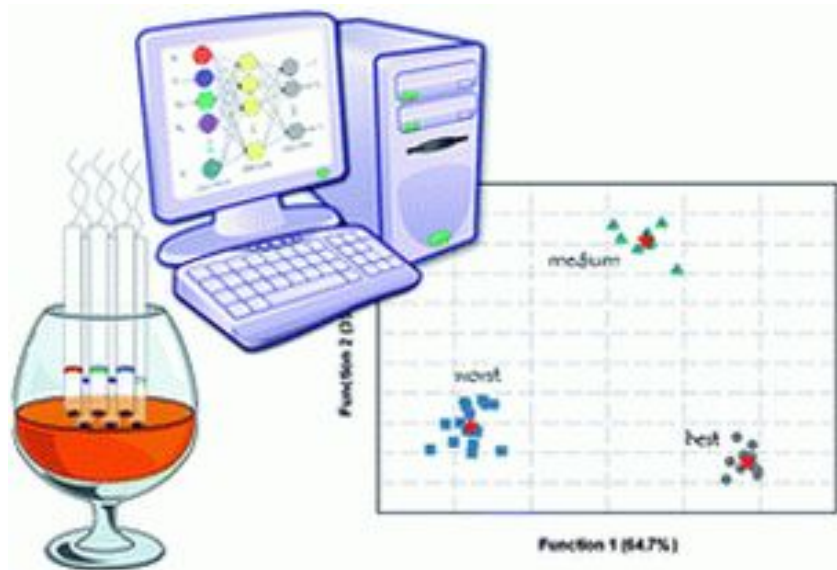


Идентификация минеральных вод с использованием импедансометрического «ЭЛЕКТРОННОГО ЯЗЫКА»



Выполнили:

Назыров Марат, Левина Алиса,
обучающиеся 10 класса, лицея
№94.



Исследуемые образцы.

Цель работы: разработка мультисенсорной системы типа «электронный язык» на основе импедансометрической регистрации сигналов для идентификации минеральных вод.

Задачи:

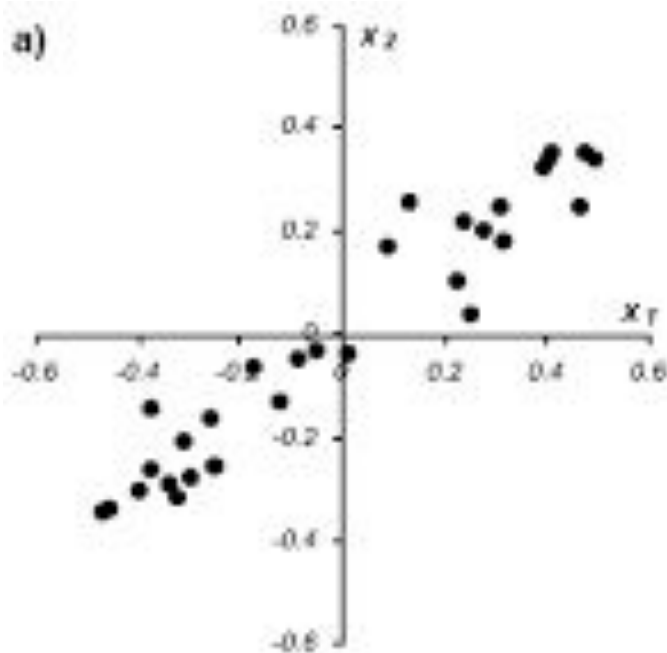
- 1) разработка системы электродов и оптимизация условий регистрации сигналов;
- 2) регистрация спектров импеданса минеральных вод с использованием предложенной системы электродов;
- 3) хемометрическая обработка данных методами главных компонент, установление схожести и отличия между образцами минеральных вод и закономерности расположения их образов методом главных компонент;
- 4) регрессионный анализ данных для ПЛС-дискриминационного анализа минеральных вод на создание базы данных «отпечатков пальцев» различных вод.

НЕМНОГО ТЕОРИИ:

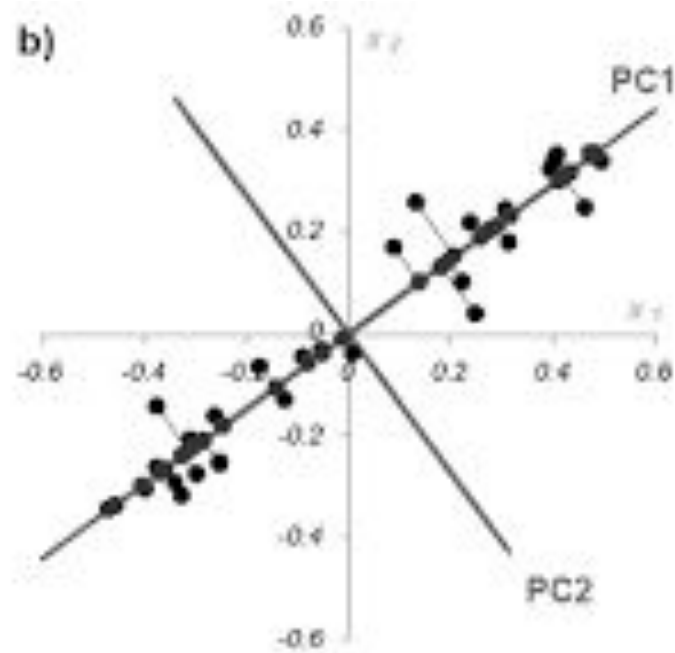
Хемометрика — раздел аналитической химии, ставящий целью получение химических данных с помощью математических методов обработки и добычи данных.



Метод Главных Компонент — один из основных способов уменьшить размерность данных, потеряв наименьшее количество информации.



Данные в исходных координатах



Данные в координатах главных компонент

Пример работы Метода Главных Компонент.

| Образцы | Концентрация ионов, г/л | | | | | | | Минер. |
|---------------|-------------------------|-----------------|-------------------------------|-------------------------------|------------------|------------------|-----------------|---------------|
| | Обоз. | Cl ⁻ | SO ₄ ²⁻ | HCO ₃ ⁻ | Ca ²⁺ | Mg ²⁺ | Na ⁺ | |
| Нарзан | M | 0.05-0.2 | 0.25-0.5 | 1-1.7 | 0.2-0.5 | 0.05-0.1 5 | 0.05-0.2 5 | 2-3.5 |
| Каждый День | K | 0.07 | 0.04 | 0.4 | 0.1 | 0.03 | 0.2 | 0.1-0.6 |
| Аква Минерале | N | 0.05 | 0.1 | 0.2 | 0.03 | 0.02 | 0 | 0.05-0.5 |
| Мензелинка | E | 0.05 | 0.05 | 0.4 | 0.08 | 0.05 | 0 | 0.2-0.5 |
| Красный Ключ | R | 0.035 | 0.045 | 0.29 | 0.07 | 0.04 | 0.02 | 0.54 |
| Славяновская | S | 0.25-0.3 5 | 0.8-1 | 1.2-1.5 | 0.25-0.3 5 | 0.05 | 0.6-0.8 | 3-4 |
| Волжанка | V | 0 | 0.1-0.25 | 0.5-0.7 | 0.1-0.25 | 0.1 | 0 | 0.8-1.2 |
| Donat Mg | D | 0.1 | 1.8-2.7 | 6.3-9.4 | 0.3-0.48 | 0.85-1.2 | 1.2-2 | 10.5-15. 9 |
| Ессентуки | A | 0.5-1 | 0.1-0.3 | 3.5-5.5 | 0.1 | 0.075 | 1.7-2.7 | 6-9 |
| Мензелинская | W | 0.2-0.5 | 1.3-2 | 0.05-0.2 | 0.1-0.4 | 0.06-0.2 | 0.5-0.9 | 2.5-3.5 |
| Новотерская | G | 0.3-0.5 | 1.2-1.6 | 1.3-1.6 | 0.3-0.4 | 0.1 | 0.8-1.1 | 4-5.3 |



Спектры импеданса регистрировали на импедансометре Элинс Z500P в диапазоне частот переменного тока от 50Гц до 500кГц с амплитудой 100 мВ при нулевом потенциале индикаторного электрода.



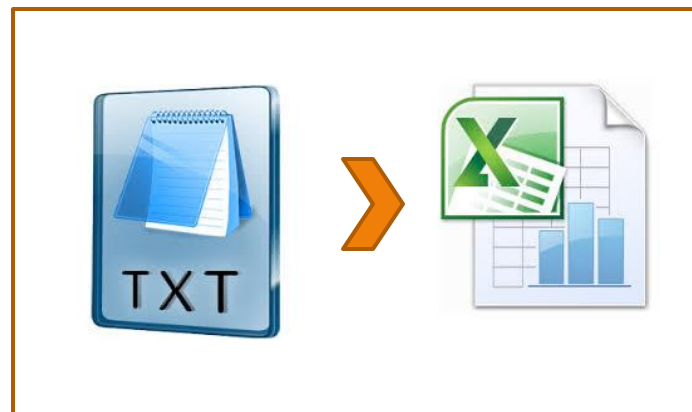
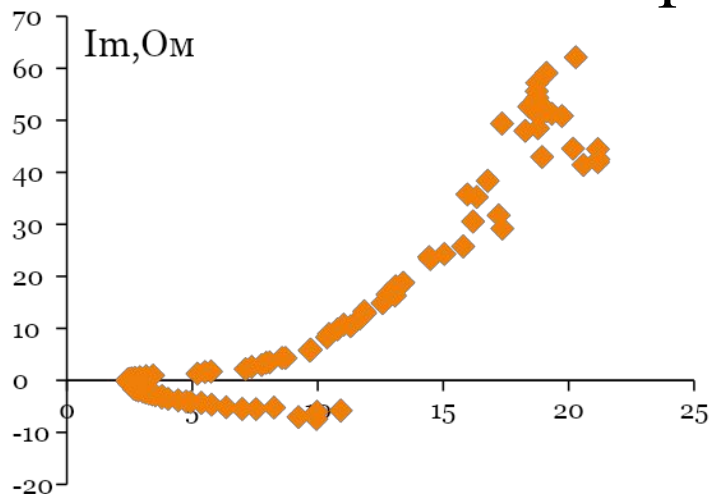
импедансометр

электроды

клапан

Электрохимическая система

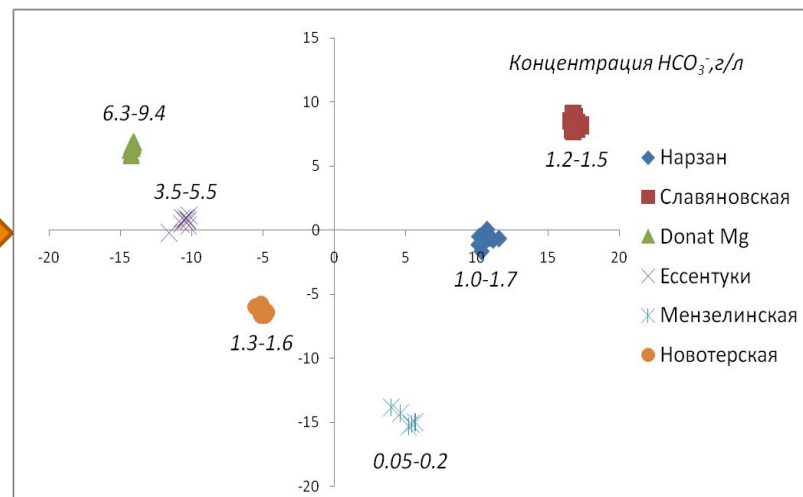
Схема алгоритма проведения анализа.



1) Получение спектра импеданса

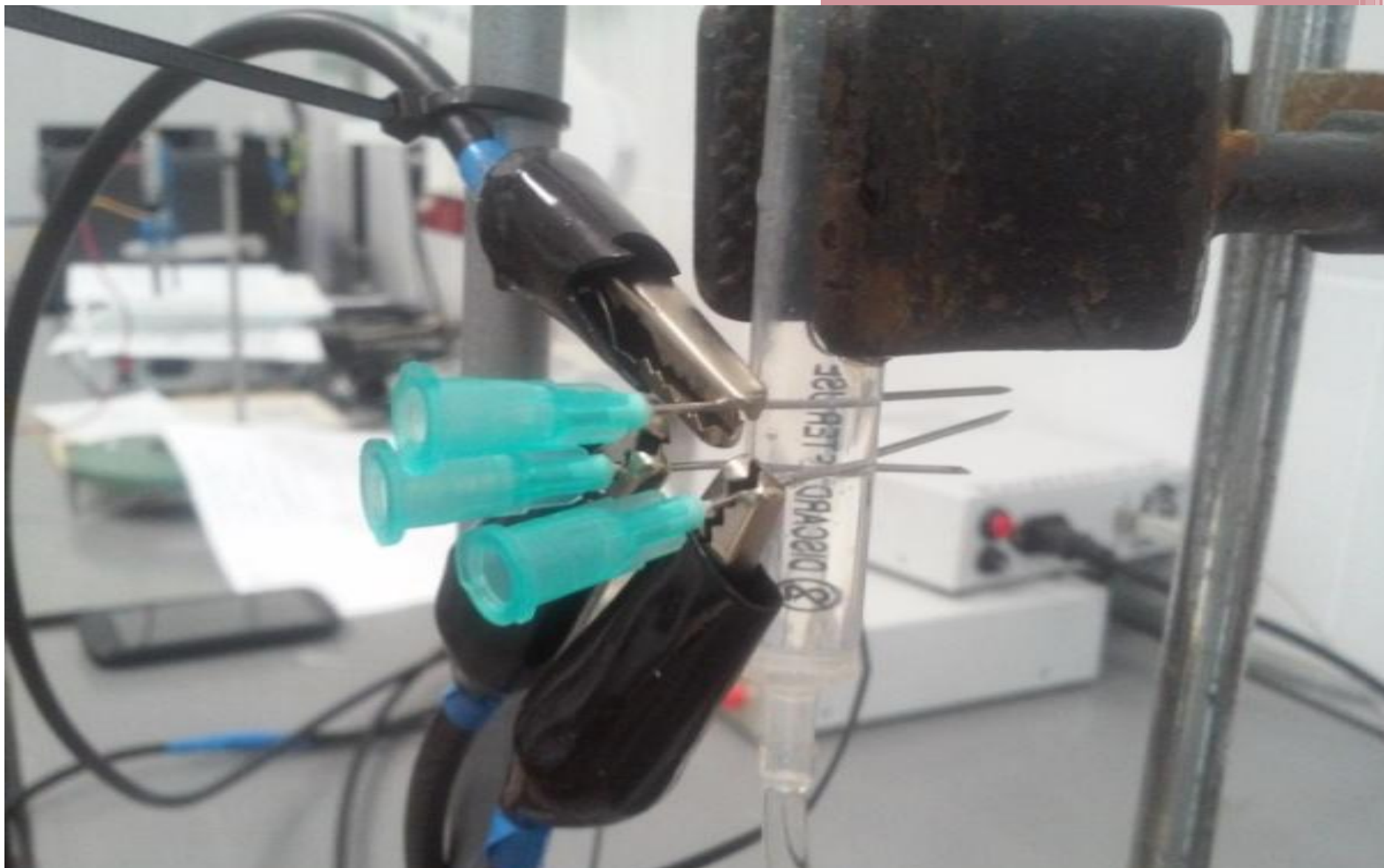
2) Экспортирование первичных данных

| | Спектры образцов | | | | | |
|-------|------------------|--------|--------|--------|--------|--------|
| Re1 | 9.9492 | 10.464 | 10.732 | 10.172 | 11.25 | 10.588 |
| Re2 | 9.2328 | 9.2699 | 8.9479 | 9.9661 | 9.1636 | 9.7157 |
| Re3 | 10.917 | 11.145 | 9.3801 | 9.4768 | 8.8688 | 9.1946 |
| Re4 | 9.9689 | 8.3826 | 9.5249 | 7.5174 | 8.1367 | 8.2339 |
| Re5 | 8.2563 | 8.257 | 8.261 | 8.315 | 8.3667 | 7.4122 |
| Re... | | | | | | |
| Im1 | 6.9897 | 6.8282 | 6.7564 | 6.9417 | 6.6192 | 6.8234 |
| Im2 | 6.3523 | 6.2015 | 6.2095 | 6.0819 | 6.3041 | 6.0455 |
| Im3 | 5.7676 | 5.8334 | 5.6709 | 5.7478 | 5.6725 | 5.4709 |
| Im4 | 5.3587 | 5.291 | 5.2795 | 5.4432 | 5.2579 | 5.4156 |
| Im5 | 4.9339 | 5.0318 | 5.1984 | 4.9115 | 5.0361 | 5.1704 |
| Im... | | | | | | |

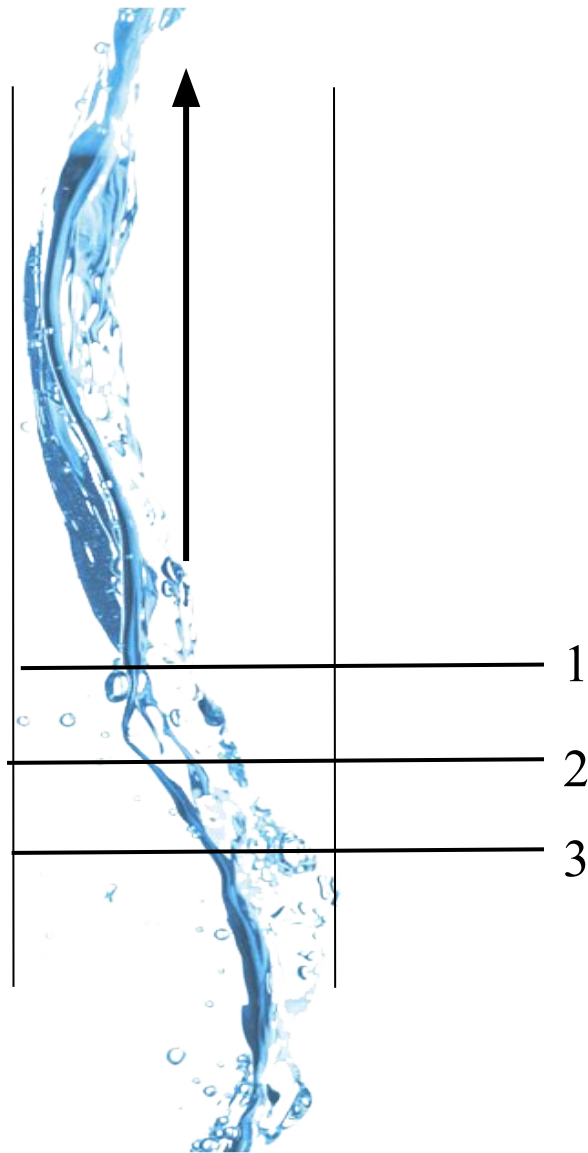


3) Форматирование данных в конечный вид

4) Обработка с помощью методов хемометрики

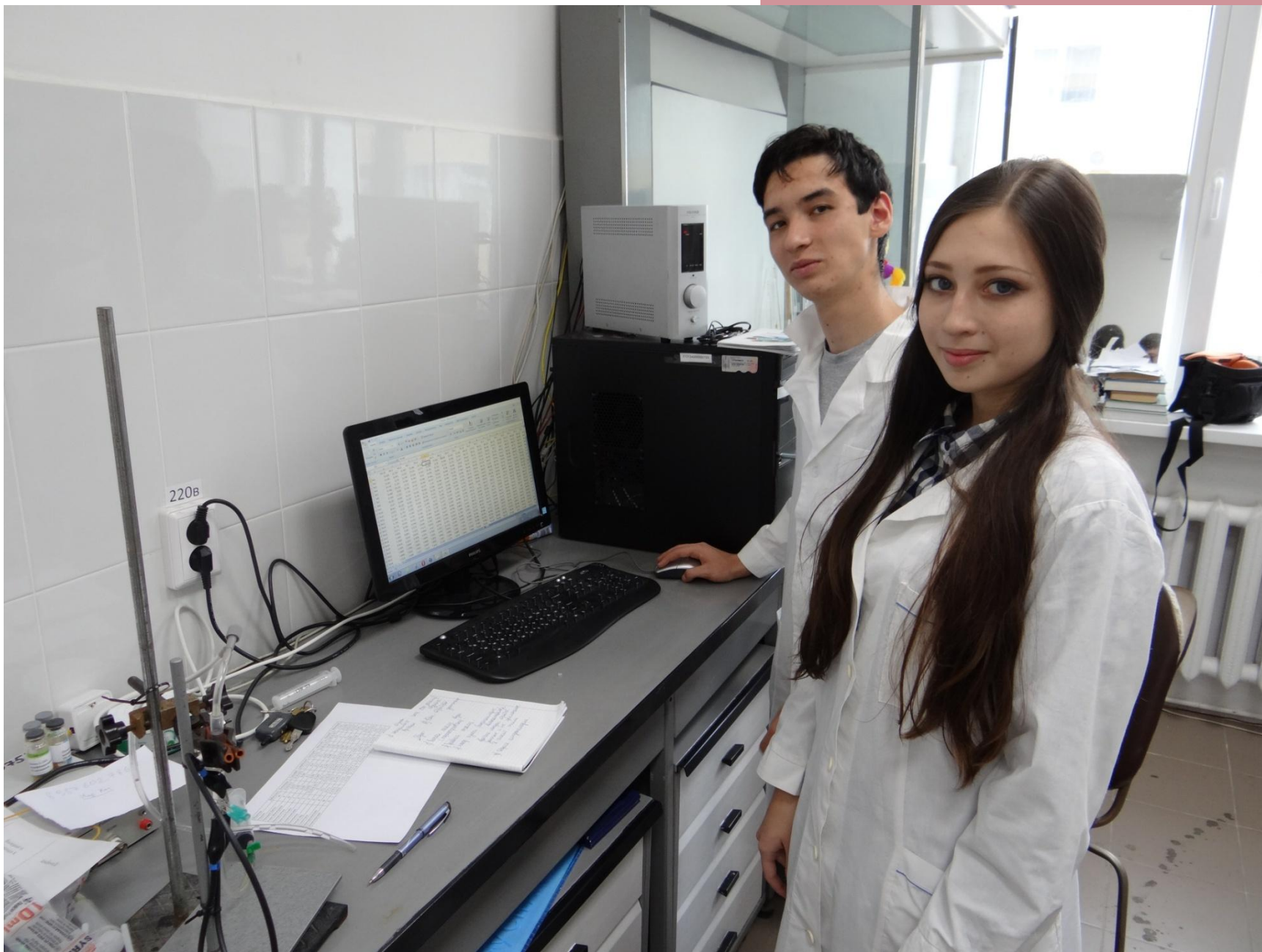


Электрохимическая система

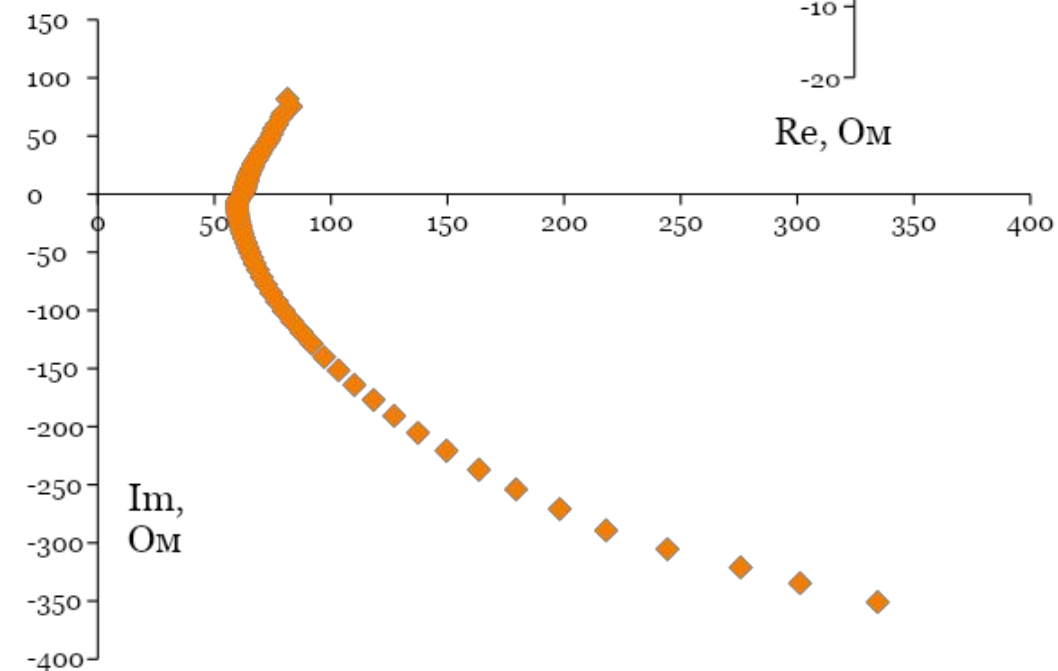
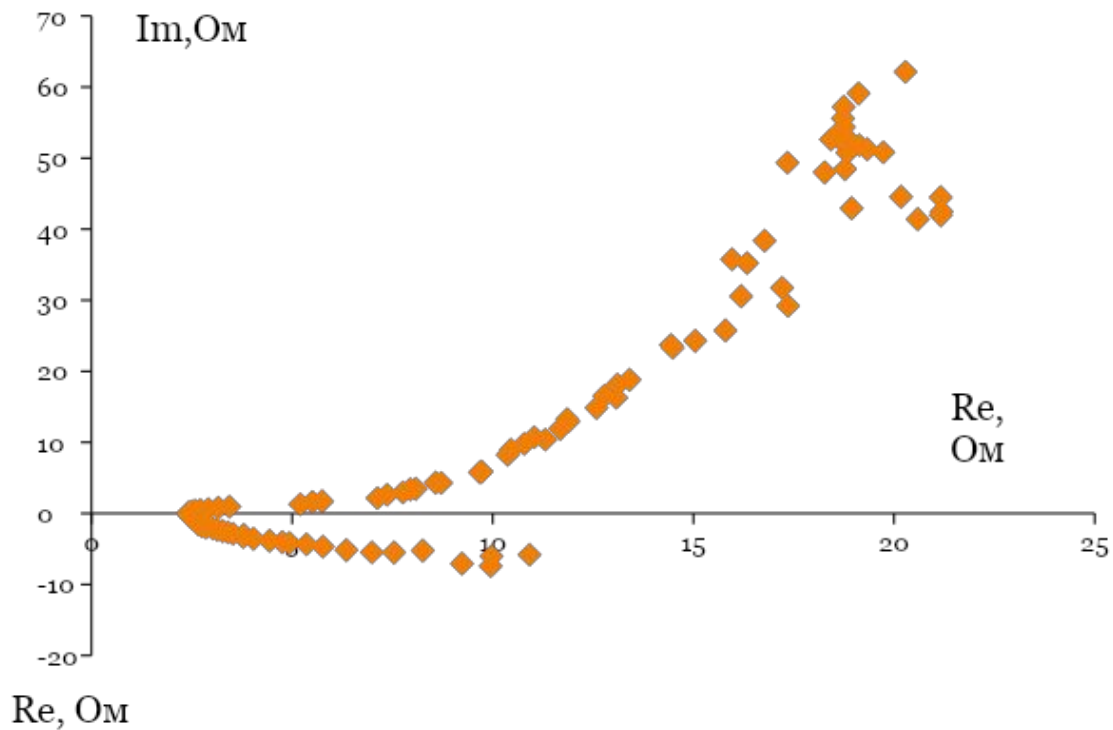


Электрохимическая
система:

- 1 – противоэлектрод;
- 2 – рабочий электрод;
- 3 – электрод сравнения.



Спектр импеданса минеральной воды Donat Mg.



Спектр импеданса минеральной воды Мензелинка.

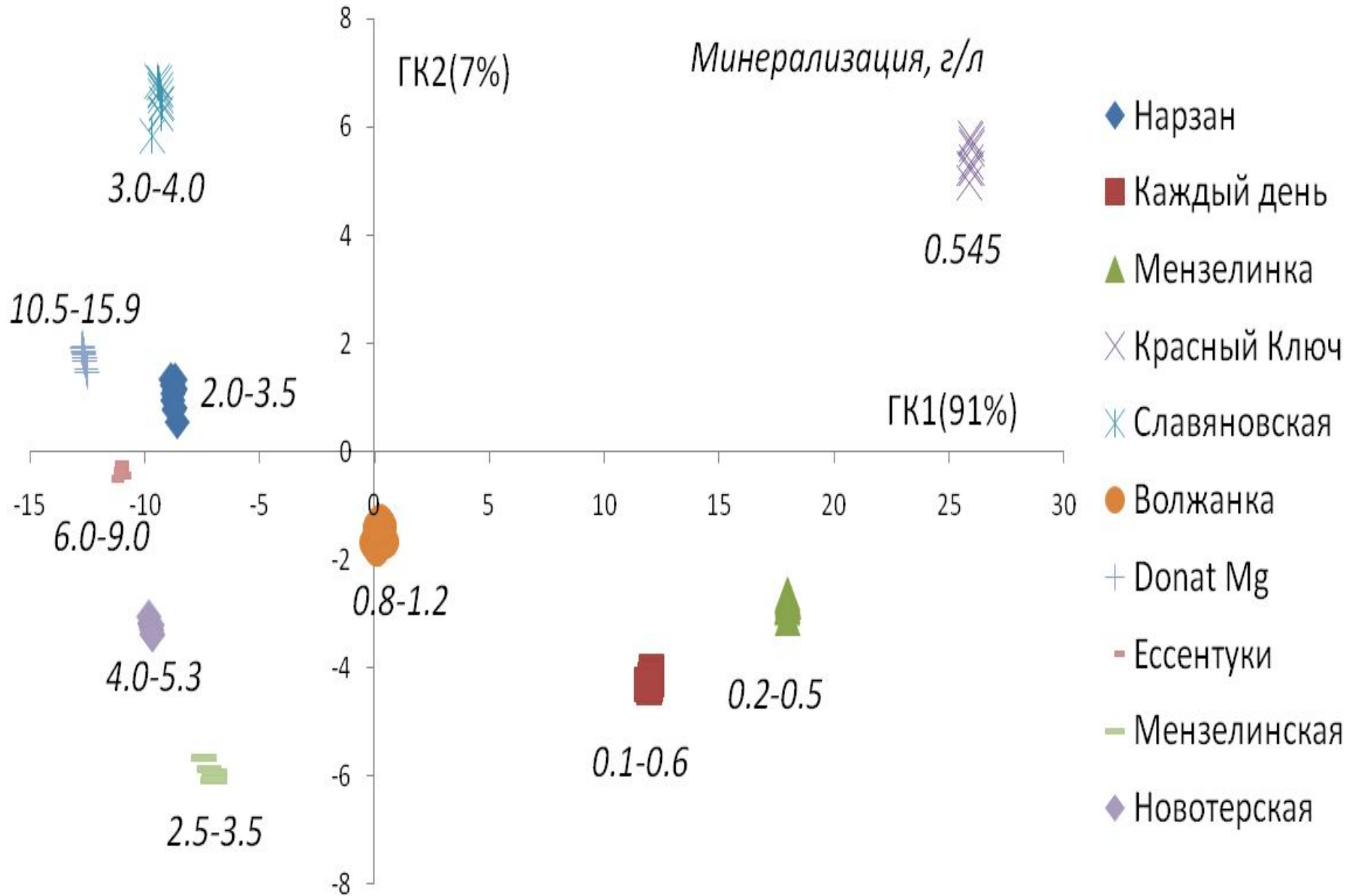
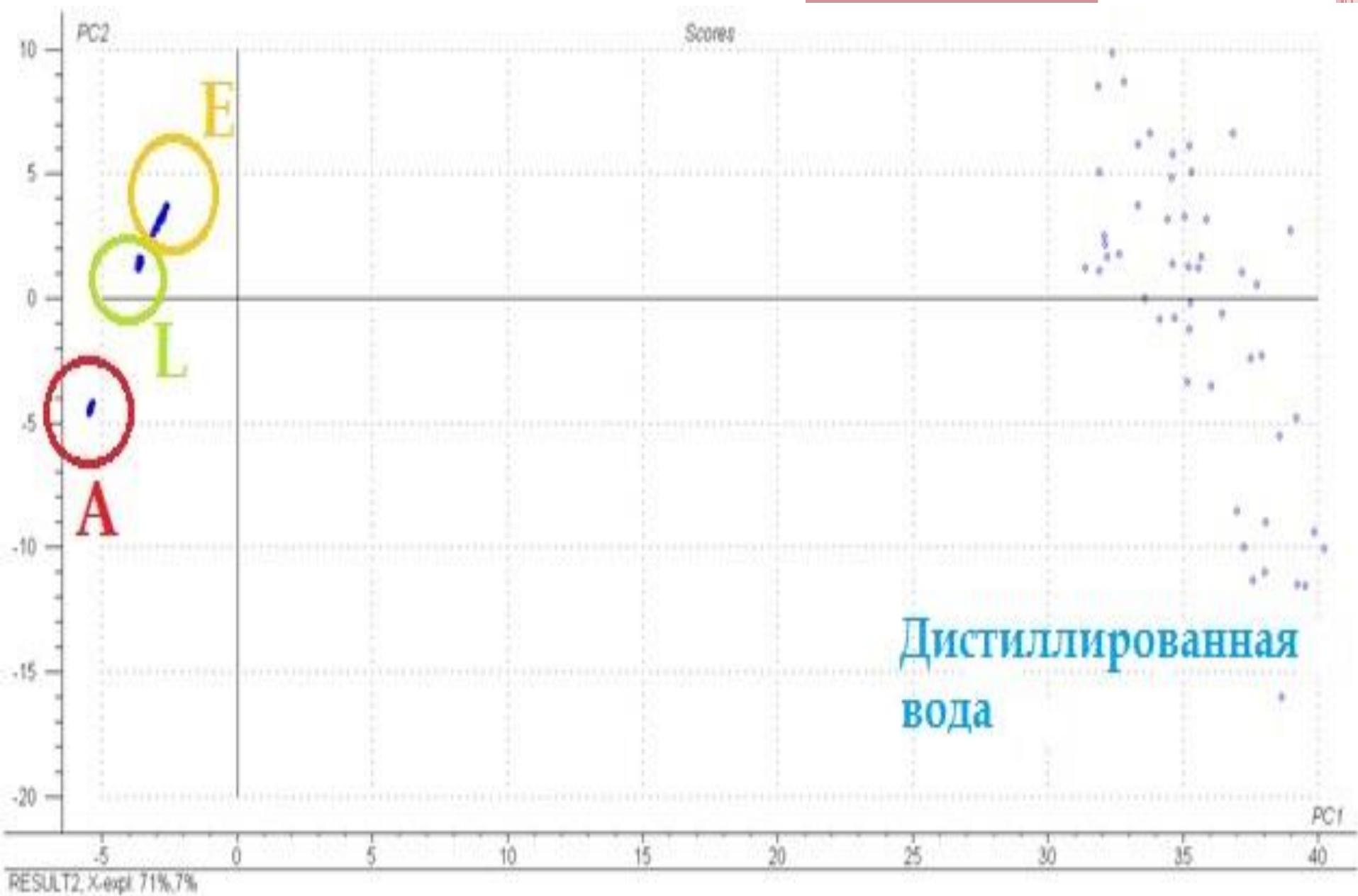


График счетов МГК-моделирования минеральных вод по минерализации.

PLS-DA

| Образцы | Дискриминационные отклики | | | | | | | | |
|--------------|---------------------------|----|----|----|----|----|----|----|----|
| | M | K | E | R | S | V | D | W | G |
| Нарзан | 71 | 5 | 2 | 5 | 13 | 13 | 4 | 27 | 10 |
| Каждый День | 4 | 58 | 44 | 7 | 12 | 5 | 9 | 15 | 11 |
| Мензелинка | 2 | 35 | 60 | 10 | 9 | 1 | 18 | 12 | 9 |
| Красный Ключ | 1 | 6 | 8 | 96 | 1 | 1 | 8 | 2 | 2 |
| Славяновская | 8 | 11 | 3 | 1 | 93 | 4 | 6 | 6 | 5 |
| Волжанка | 0 | 3 | 7 | 1 | 4 | 96 | 3 | 6 | 7 |
| Donat Mg | 7 | 11 | 10 | 6 | 3 | 3 | 70 | 16 | 3 |
| Мензелинская | 24 | 24 | 9 | 3 | 3 | 7 | 19 | 75 | 6 |
| Новотерская | 4 | 11 | 4 | 5 | 3 | 4 | 12 | 13 | 70 |

| Название | Обозначения | Дата изготовления | Скважина | Источник |
|----------------|-------------|-------------------|----------------------------|----------|
| Липецкий Бювет | L1 | 18.12.15 | 15/02, 45/02, 65/07, 68/07 | Ашан |
| Липецкий Бювет | L2 | 29.12.15 | 15/02, 45/02, 65/07, 68/07 | Байрам |
| Липецкий Бювет | L3 | 16.08.15 | 15/02, 45/02, 65/07, 68/07 | Аптека |
| Архыз | A1 | 22.09.15 | 131-К | Аптека |
| Архыз | A2 | 22.09.15 | 131-К | Байрам |
| Архыз | A3 | 29.11.15 | 131-К | Ашан |
| Ессентуки | E1 | 11.06.15 | 49-Э | Байрам |
| Ессентуки | E2 | 22.09.15 | 49-Э | Ашан |
| Ессентуки | E3 | 17.04.15 | 71 | Аптека |





Выводы:

- разработана электрохимическая ячейка для импедансометрической идентификации минеральных вод;
- показано, что все минеральные воды с дискриминационными откликами от 60 до 100 с вероятностью 95% могут быть правильно распознаны.



Спасибо за внимание!

