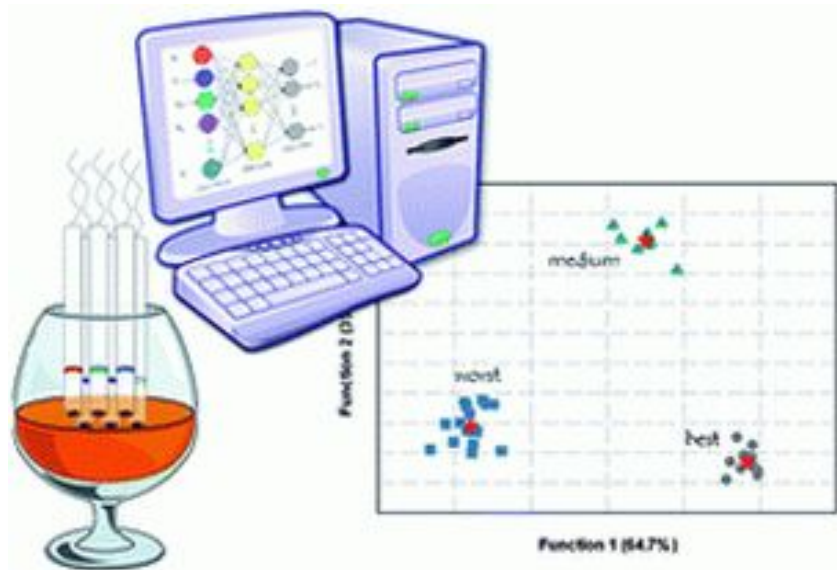


Идентификация минеральных вод с использованием импедансометрического «ЭЛЕКТРОННОГО ЯЗЫКА»



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:

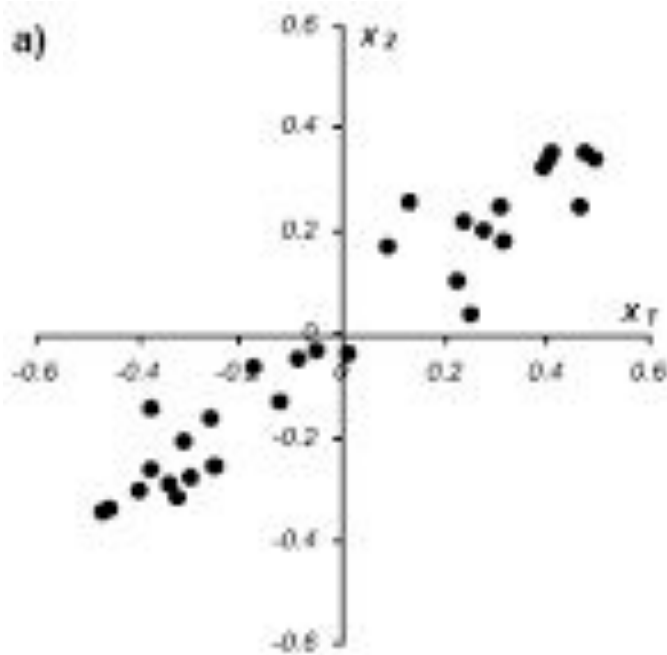
- 1) разработка системы электродов и оптимизация условий регистрации сигналов;
- 2) регистрация спектров импеданса минеральных вод с использованием предложенной системы электродов;
- 3) хемометрическая обработка данных методов главных компонент, установление схожести и отличия между образцами минеральных 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:

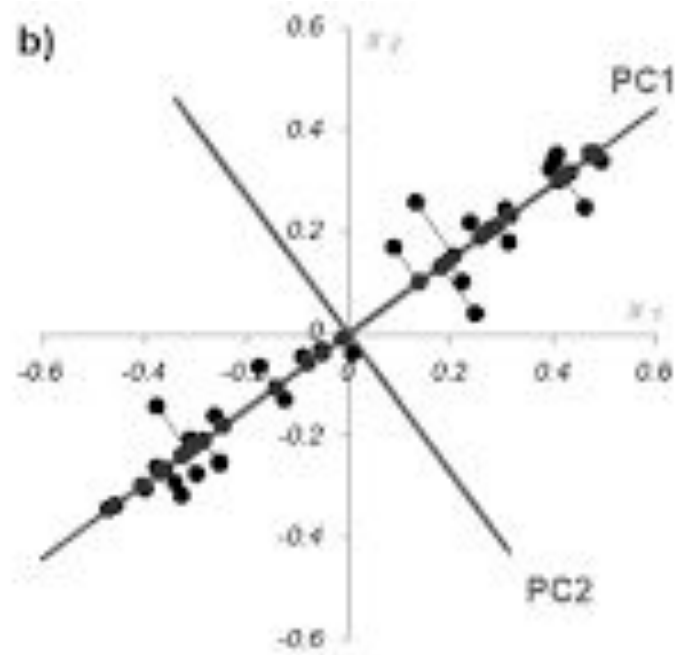
Хемометрика — раздел аналитической химии, ставящий целью получение химических данных с помощью математических методов обработки и добычи данных.



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.



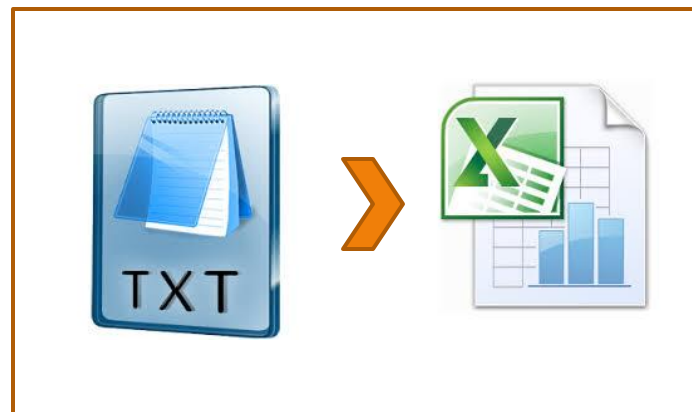
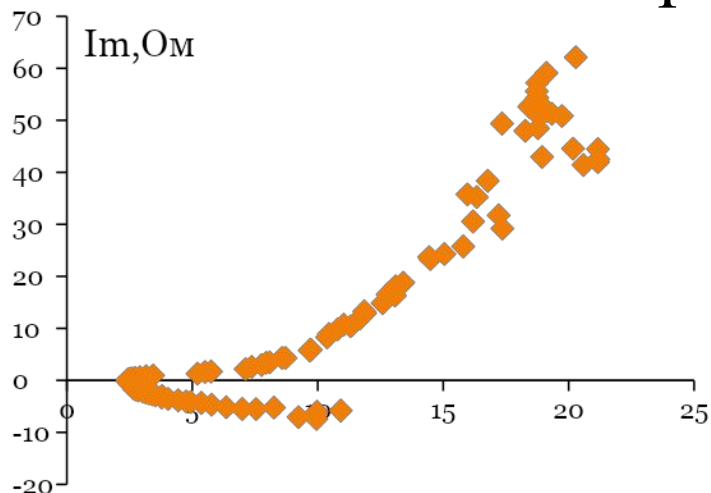
импедансометр

электроды

клапан

Электрохимическая система

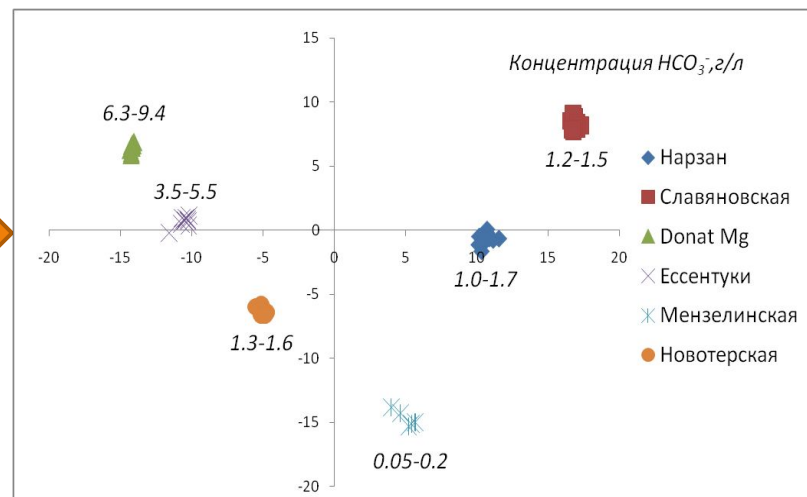
Схема алгоритма проведения анализа.



1) Получение спектра импеданса

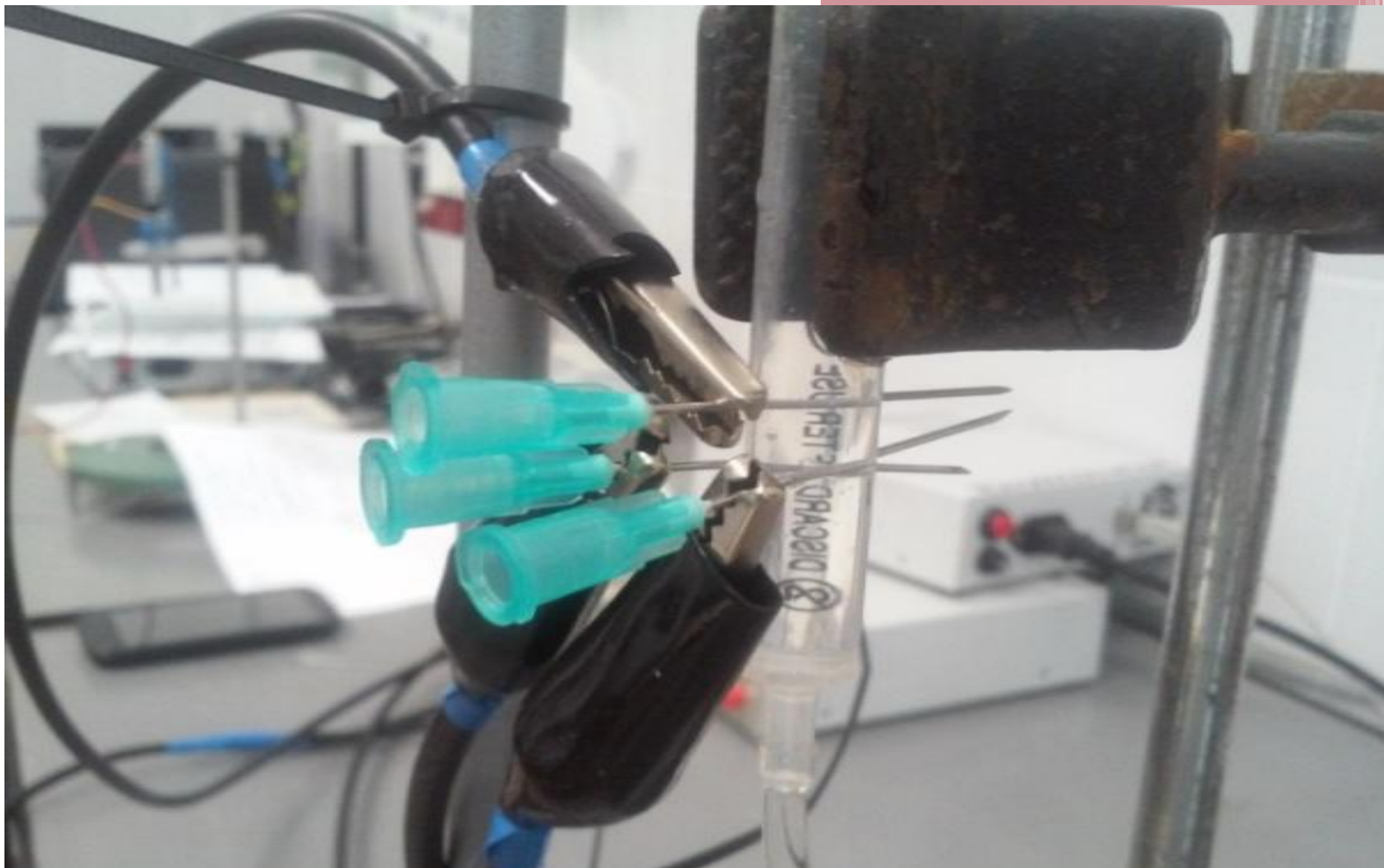
2) Экспортирование первичных данных

	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...						

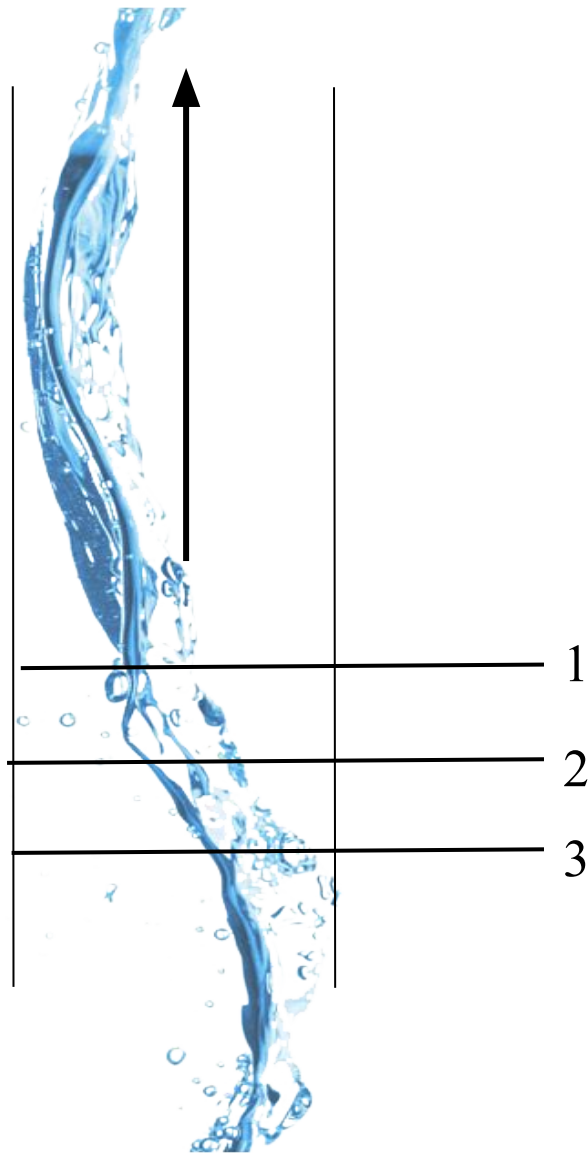


3) Форматирование данных в конечный вид

4) Обработка с помощью методов хемометрики



Электрохимическая система

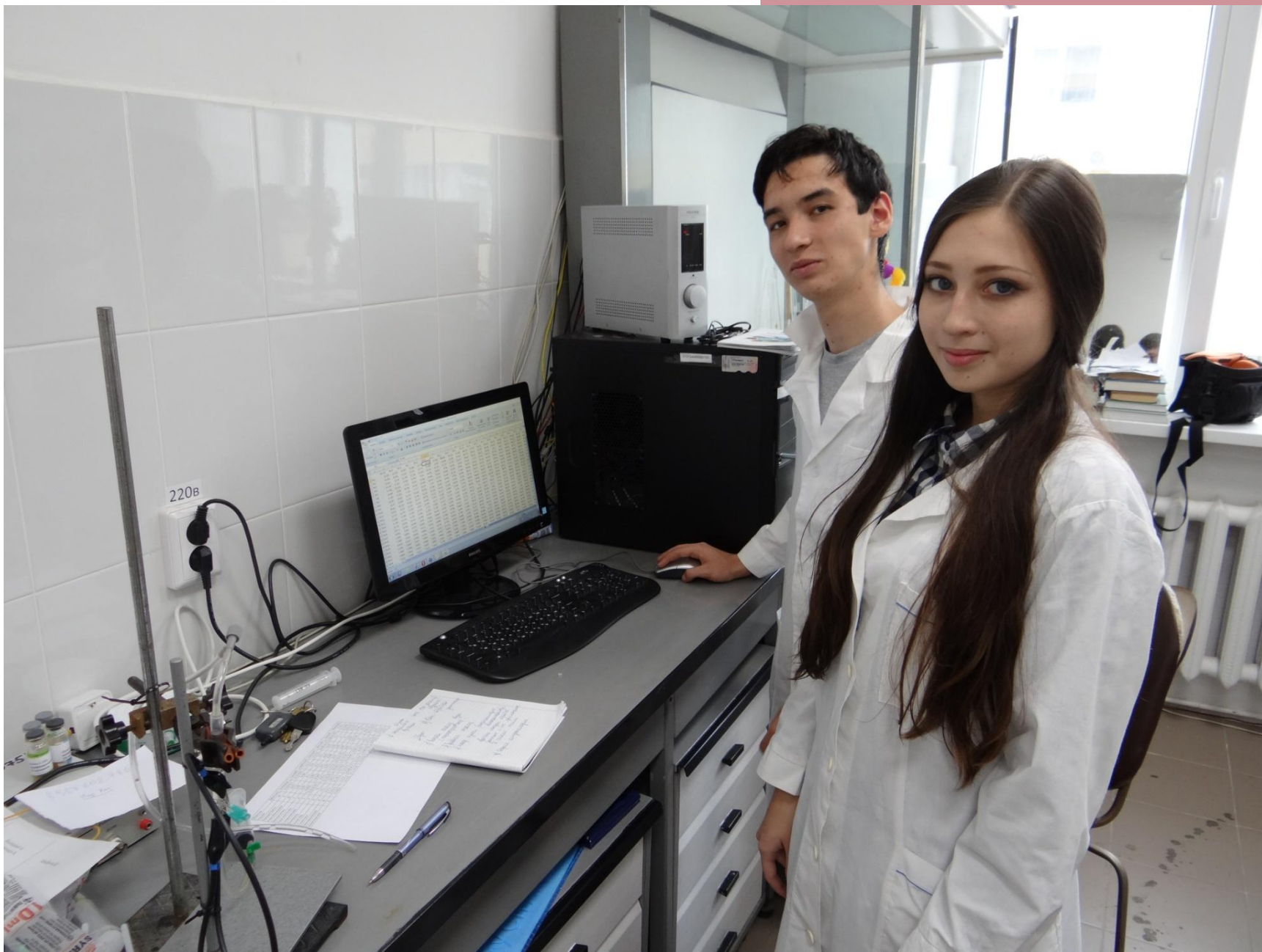


Электрохимическая
система:

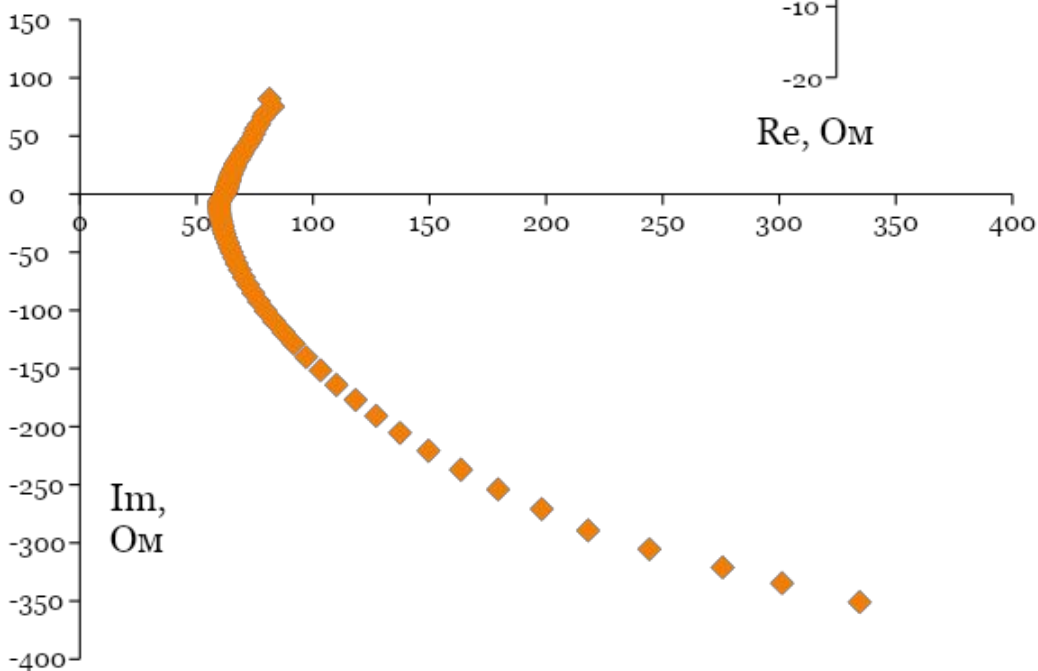
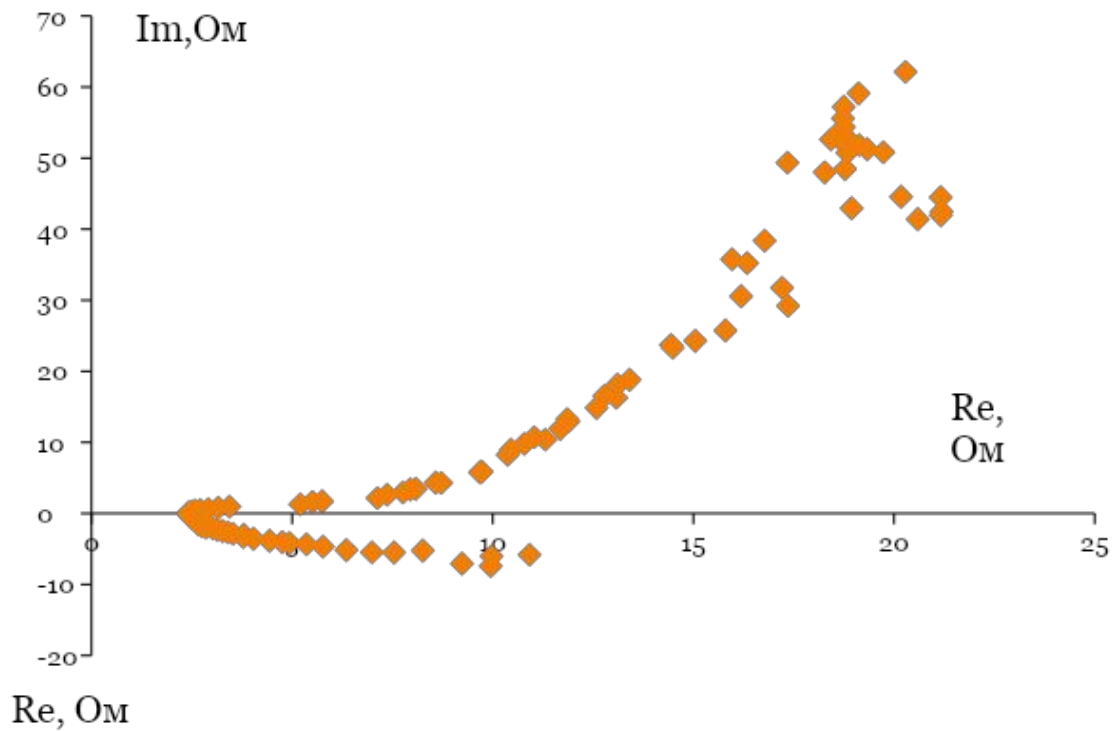
1 – противоэлектрод;

2 – рабочий электрод;

3 – электрод сравнения.



Спектр импеданса минеральной воды Donat Mg.



Спектр импеданса минеральной воды Мензелинка.

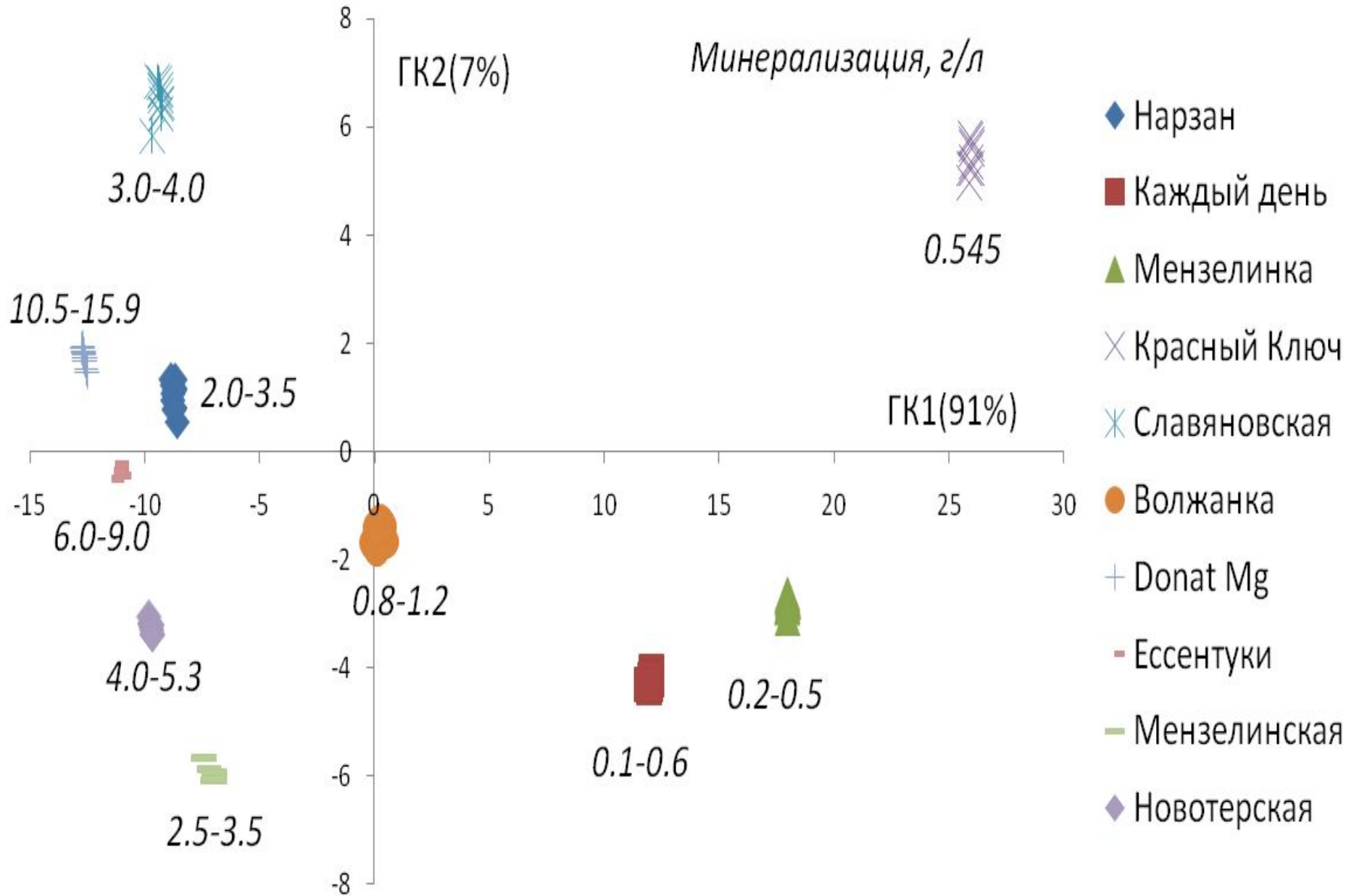
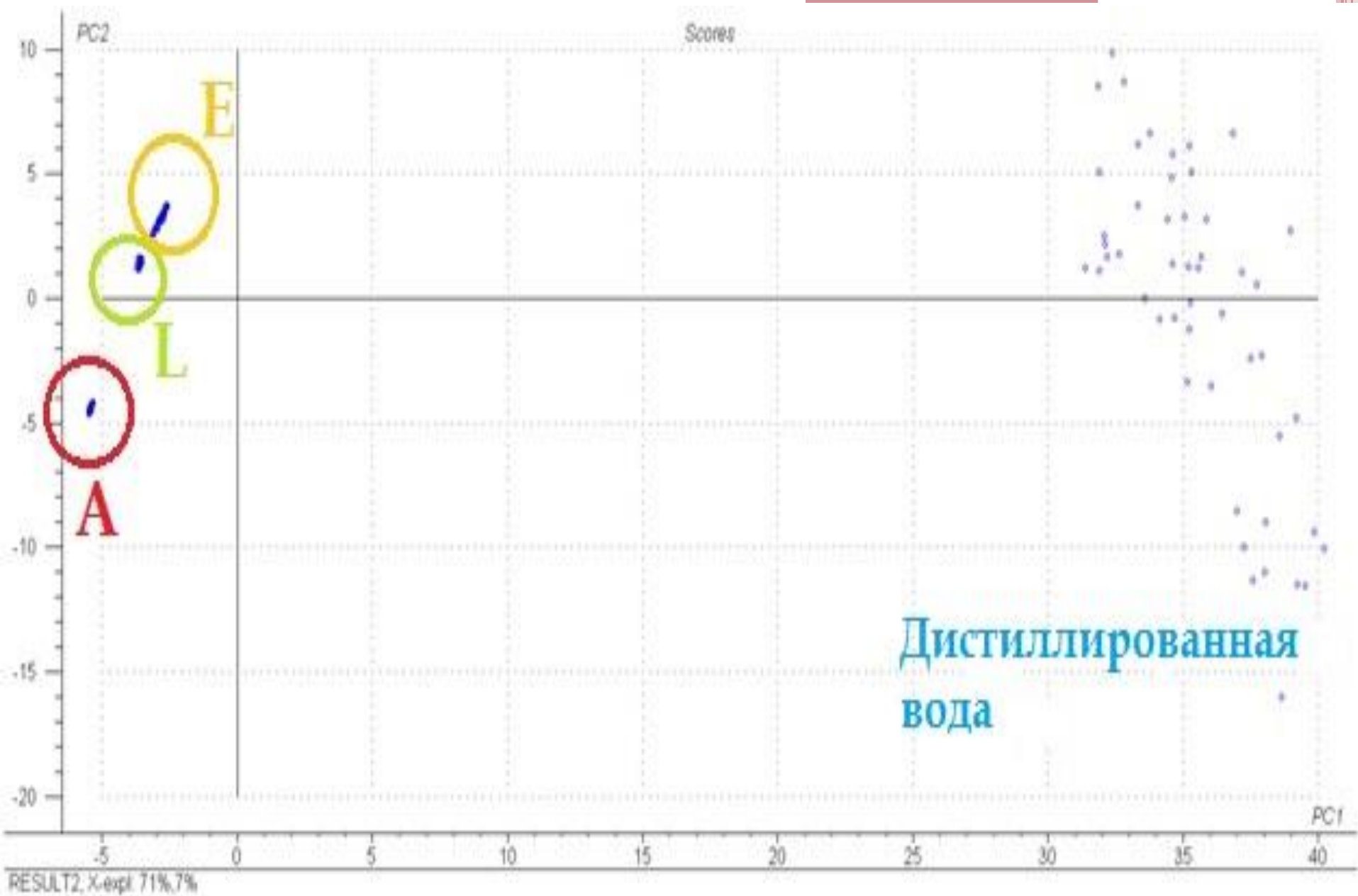


График счетов МГК-моделирования минеральных вод по минерализации.

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!

