

Информатика и информационные технологии

DOI: <https://doi.org/10.15407/kvt190.04.005>

УДК 004.67: 004.023

І.В. СУРОВЦЕВ, д-р техн. наук, старш. наук. співроб.

відд. екологічних цифрових систем

e-mail: dep175@irtc.org.ua , igorsur52@gmail.com

С.К. ГАЛІМОВ, аспірант

відд. екологічних цифрових систем

e-mail: dep175@irtc.org.ua

О.Е. ТАТАРІНОВ, наук. співроб.

відд. екологічних цифрових систем

e-mail: dep175@irtc.org.ua

Міжнародний науково-навчальний центр

інформаційних технологій та систем НАН України та МОН України,

пр. Акад. Глушкова, 40, 03187, м. Київ, Україна

ІНФОРМАЦІЙНА ТЕХНОЛОГІЯ ВИЗНАЧЕННЯ КОНЦЕНТРАЦІЇ ТОКСИЧНИХ ЕЛЕМЕНТІВ В ОБ'ЄКТАХ НАВКОЛИШНЬОГО СЕРЕДОВИЩА

Розглянуто нову інформаційну технологію, яка дозволяє збільшити чутливість та достовірність визначення концентрації токсичних елементів методами імпульсної інверсійної хронопотенціометрії. Для класу монотонно зростаючих сигналів, які є інтегральною сумою процесів багатокomпонентного вимірювання, запропоновано перетворення системи координат, що дає змогу аналізувати сигнал як суму компонентів та суттєво скоротити вхідні дані без втрати корисної інформації. Розроблено цифрові методи відновлення корисного сигналу та генеративна модель багатокomпонентного сигналу, що підвищує ефективність оброблення даних.

Створено високочутливу аналітичну систему «Аналізатор ІХП», яка визначає масову концентрацію 14-ти токсичних елементів (ртуть, арсен, свинець, кадмій, цинк, мідь, олово, нікель, кобальт, залізо, марганець, селен, йод, хром) з чутливістю до $0,05 \text{ мкг/дм}^3$, шість хімічних елементів та сполук (калій, натрій, кальцій, фтор, амоній, нітрати) з концентрацією до $6 \cdot 10^7 \text{ мкг/дм}^3$. Розроблені інструментальні засоби дали можливість створити нові ефективні інформаційні технології оброблення сигналів іншої фізичної природи, що монотонно зростають або зменшуються.

Ключові слова: перетворення структури даних, імпульсна хронопотенціометрія, моделювання, цифрове оброблення, інформаційна технологія.

© І.В. СУРОВЦЕВ, С.К. ГАЛІМОВ, О.Е. ТАТАРІНОВ, 2018

ISSN 2519-2205 (Online), ISSN 0454-9910 (Print). Киб. и выч. техн. 2018. № 1 (191)

5

ВСТУП

Інтенсивний розвиток промисловості, зростання сільськогосподарського виробництва та відсутність екологічно чистих технологій призводять до поступового забруднення біосфери важкими металами та токсичними хімічними елементами. Активізація антропогенного впливу на людину та навколишнє середовище токсикантів потребує виконання постійного контролю якості питної води, харчових продуктів, оцінювання екологічного стану рослин, ґрунту та інших об'єктів. Одним із факторів екологічної безпеки є визначення в цих об'єктах концентрацій токсичних елементів (ртуті, арсену, свинцю, кадмію тощо), які законодавчо нормуються для кожного об'єкту у вигляді гранично допустимих концентрацій.

Низька чутливість наявних систем вимірювання концентрацій спонукає до створення нових високочутливих методів дослідження та ефективних інформаційних технологій (ІТ). Однією з актуальних залишається проблема удосконалення цифрових методів аналізу даних, що зумовлено необхідністю оброблення слабких аналітичних сигналів під час вимірювання слідових концентрацій токсичних елементів.

Концентрацію елементів визначають різними фізико-хімічними методами дослідження. Найчутливішими є вольтамперометричні та хронопотенціометричні електрохімічні методи аналізу, які дозволяють вимірювати слідові концентрації токсичних елементів. Порівняно з вольтамперометричним аналізом [1, 2], використання методів інверсійної хронопотенціометрії (ІХП) дозволяє значно спростити технічну реалізацію приладів, збільшити чутливість, повторюваність та надійність вимірювання. У теоретичному обґрунтуванні методу ІХП брали участь такі вчені, як Скобець С.М., Гриневич В.В., Захаров М.С., Баканов В.І., Пньов В.В. [3, 4]. Значний вклад у поширення хронопотенціометричного методу внесли дослідники Карнаухов О.І., Йосипчук Б.В., Галімова В.М., Манк В.В., Копілевич В.А. та інші [5–14].

Прилади, які серійно випускаються в Україні, ґрунтуються на методи ІХП і можуть визначати масову концентрацію п'яти важких металів (свинець, кадмій, цинк, мідь, олово) з чутливістю 1 мкг/дм³. Але на практиці, згідно з нормованими вимогами до показників токсичності питної води та харчових продуктів, необхідно визначати масову концентрацію на межі визначення до 0,1–0,05 мкг/дм³ та мати можливість вимірювати інші хімічні елементи та сполуки (ртуть, арсен, селен, йод, натрій, калій, нітрати).

Одним зі шляхів усунення протиріччя між потребами та вказаними недоліками є створення нової ІТ для визначення концентрацій хімічних елементів в об'єктах навколишнього середовища на базі застосування нових імпульсних та іонометричних методів хронопотенціометрії. Така ІТ має складатися з інформаційного та технічного забезпечення, методів цифрового оброблення, моделювання слабких сигналів складної форми, методик вимірювання концентрацій хімічних елементів у різних об'єктах, що дозволить підвищити чутливість та розширити функціональні можливості приладу.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

Принцип роботи методу інверсійної хронопотенціометрії полягає в електрохімічному концентруванні на індикаторному електроді іонів хімічних елементів з розчину проби та наступному вимірюванні їх потенціалів електролітичного розчинення (e_i) у часі (τ_i). Аналітичною характеристикою методу є час інверсії елемента, який за стандартизованих умов концентрування та інверсії прямо пропорційний концентрації іонів у розчині. Якісна характеристика — потенціал піку і діапазон зміни потенціалів інверсії елемента.

Традиційні підходи до оброблення аналітичних сигналів $e(\tau)$ в хронопотенціометрії, запропоновані Захаровим М.С. [4], Плэмбеком Дж.А. [15], Sparks Donald L. [16], Britz D. [17] та іншими, передбачають аналіз даних у координатах (τ, e) або ($\tau, de/d\tau$), що не дозволяє підвищити чутливість до необхідного рівня та вирішити проблему ідентифікації елемента у багатокомпонентному сигналі, коли компоненти інверсії взаємно перекриваються. Це довгий час було основною причиною, що стримувало практичне застосування методу ІХП.

Дослідження показали, що сигнал інверсії $e(\tau)$ перед виконанням цифрового аналізу необхідно попередньо подати у іншому вигляді. Для цього треба виконати редукцію структури даних [18–19], тобто таке перетворення системи координат, яке дозволить розглядати інтегральний сигнал у вигляді суми окремих компонентів вимірювання. Найбільш дієвим є аналіз сигналів інверсії $e(\tau)$ у координатах ($e, dt/de$), в яких одержані дані нагадують значення відомих хімічних методів (інверсійної вольтамперометрії, хроматографії та мас-спектрального аналізу) [5, 8].

Під час цифрового оброблення аналітичних сигналів $e_{\text{вх}}(\tau)$ вважають, що корисний сигнал $e(\tau)$ спотворено адитивною випадковою завадою ξ , яка має яскраво виражений високочастотний характер: $e_{\text{вх}}(\tau) = e(\tau) + \xi$. Сигнал інверсії $e(\tau)$, який монотонно зростає, є інтегральною сумою вимірювань окремих хімічних елементів. Процес інверсії кожного елемента виконується послідовно, у власному діапазоні потенціалів, відповідно до зростання значення стандартного електродного потенціалу в ряді активності металів. Реальні значення потенціалів піку та діапазонів інверсії елемента залежать від концентрації іонів, хімічного складу електролітичного фоновому розчину, матеріалу, з якого виготовлено індикаторний електрод, та умов перекриття компонентів у багатокомпонентному сигналі.

Для відновлення корисного сигналу за умов дії високочастотних завад традиційні методи фільтрації та згладжування [20] не завжди підходять для аналізу даних вимірювання, бо спотворюють монотонно зростаючий сигнал та порушують його інтегральні характеристики, що призводить до «розмивання» форми, значних похибок визначення часу інверсії та концентрацій елемента.

На сьогодні доволі складною та не вирішеною проблемою є побудова загальної моделі багатокомпонентного сигналу за моделями окремих компонентів з багатьма невідомими параметрами [21–24].

Тому потрібно провести дослідження, спрямовані на розв'язання завдань підвищення ефективності методів відновлення корисного сигналу.

Мета роботи — створення ІТ вимірювання концентрацій методами хронопотенціометрії, яка дозволить суттєво збільшити чутливість та надійність визначення концентрацій хімічних елементів у рідких пробах різних об'єктів біосфери.

ПЕРЕТВОРЕННЯ СТРУКТУРИ ДАНИХ АНАЛІТИЧНОГО СИГНАЛУ ІНВЕРСІЇ

Для спрощення аналізу багатокomпонентного сигналу інверсії запропоновано перетворення системи координат [25], яке дає змогу розглянути інтегральний сигнал $e(\tau)$ у вигляді суми окремих компонентів вимірювання хімічних елементів:

$$(\tau, e) \rightarrow (f, T) \rightarrow (f, dT/df), \quad (1)$$

де $e(\tau)$ — аналітичний сигнал інверсії з постійним кроком $\Delta\tau_{\text{АЦП}}$ за часом τ ; $T(f)$ — перетворений сигнал ($f \in e, T \in \tau$) з постійним кроком Δf за потенціалом f ; $t(f) = dT/df$ — сигнал інтенсивності.

Перетворення виконується у такій послідовності:

1. Відновлення корисного монотонно зростаючого сигналу $e(\tau_k)$ з аналітичного сигналу інверсії $e_{\text{вх}}(\tau)$, спотвореного високочастотним шумом:

$$e(\tau_k) \leq e(\tau_{k+1}), \tau_k = k \cdot \Delta\tau_{\text{АЦП}}, k = 1, \dots, N_E, \quad (2)$$

де N_E — довжина сигналу $e_{\text{вх}}(\tau)$; $\Delta\tau_{\text{АЦП}}$ — дискретність квантування аналітичного сигналу у часі.

2. Формування перетвореного сигналу інверсії $T(f)$ (зміна системи координат):

$$e(\tau_{k-1}) \leq f_j < e(\tau_k), f_j = j \cdot \Delta f, j = 1, \dots, N_T, \quad (3)$$

де N_T — довжина сигналу $T(f_j)$; Δf — дискретність потенціалу f_j сигналу $T(f_j)$, A — лінійний оператор перетворення.

У разі виконання лінійної інтерполяції в інтервалі (τ_{k-1}, τ_k) оператор A має такий вигляд:

$$T_j = A(f_j, \tau_{k-1}, e_{k-1}, \tau_k, e_k) = \frac{\tau_k - \tau_{k-1}}{e_k - e_{k-1}} (f_j - e_{k-1}) + \tau_{k-1}. \quad (4)$$

У прикладних ІТ інтерполяція виконується кубічними сплайнами.

3. Диференціювання перетвореного сигналу інверсії $T(f)$ у сигнал інтенсивності $t(f) = dT(f)/df$:

$$t(f_i) = (T_i - T_{i-1}) / \Delta f; \quad i = 1, \dots, N, \quad N = N_T - 1, \quad (5)$$

де N — довжина сигналу $t(f_i)$.

Перетворення систем координат є взаємно однозначним, що дає змогу повністю відновити корисний сигнал інверсії $e(\tau)$ через зворотне перетворення $t(f)$:

$$T_j = T_{j-1} + t(f_j) \cdot \Delta f; \quad e_k = A(\tau_k) = A(\tau_k, f_{j-1}, T_{j-1}, f_j, T_j). \quad (6)$$

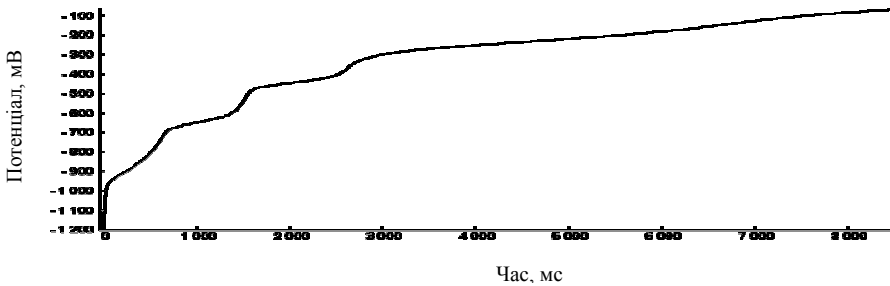
Довжина вибірки N сигналу інтенсивності $t(f)$ не залежить від реальної довжини N_E аналітичного сигналу $e(\tau)$, величина коефіцієнту стиснення даних $K = N_E / N$ може сягати значення більше 500-от, що дає змогу зберігати у базі даних усі сигнали вимірювання без втрати корисної інформації.

Загальна послідовність виконання перетворення системи координат та цифрового оброблення сигналу має вигляд:

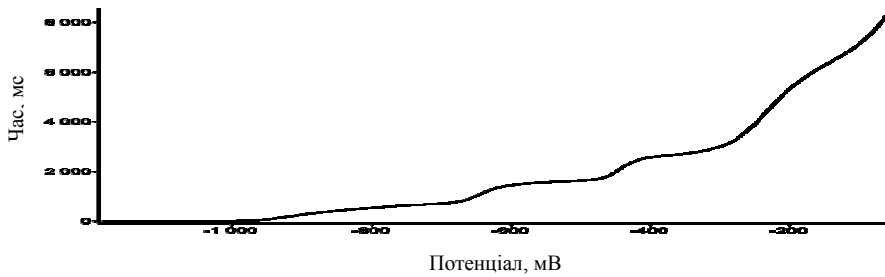
Сигнал інверсії → *Цифрова фільтрація* → *Формування перетвореного сигналу* → *Диференціювання* → *Згладжування* → *Сигнал інтенсивності*.

Розглянемо приклад застосування перетворення системи координат для сигналу багатоконпонентної інверсії вимірювання елементів (цинк, кадмій, свинець, мідь), який зображено на рис. 1.

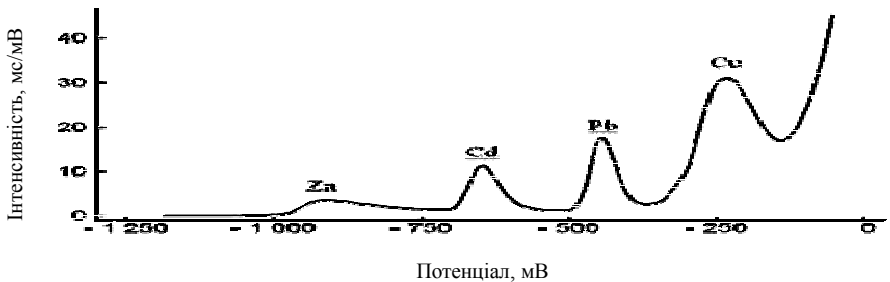
У даному випадку інтегральна сума вимірювань багатоконпонентного процесу інверсії $e(\tau)$ перетворилась у суму компонентів сигналу інтенсивності $t(f)$, в якій кожний хімічний елемент ідентифікується окремим компонентом із потенціалом піку (точка максимуму) та діапазоном вимірювання (дві точки мінімуму).



а) корисний сигнал інверсії $e(\tau)$



б) перетворений сигнал $T(f)$



в) сигнал інтенсивності $t(f)$

Рис. 1. Перетворення структури даних сигналу інверсії

Перейдемо до відновлення корисного сигналу $e(\tau)$ методами цифрового оброблення даних.

Цифрова фільтрація. Аналіз характерних видів аналітичних сигналів інверсії показав [26], що неможливо вибрати якийсь один наявний метод цифрової фільтрації для попереднього оброблення всіх видів сигналів. Процес відновлення корисних даних слід проводити шляхом послідовного застосування нових інструментальних засобів, які мають ітераційний характер та виконуються в залежності від виду сигналу.

Запропоновано новий **метод гістограмної фільтрації** даних монотонно зростаючого сигналу [28] для видалення адитивних високочастотних завад у режимі реального часу [27]. Суть методу полягає у тому, що під час зчитування аналітичного сигналу квантують потенціали за рівнем та підраховують кількість спостережень у кожному заданому інтервалі, формуючи гістограму розподілу потенціалів (рис. 2а). Після повного зчитування сигналу визначають тривалість дії потенціалу (кількість $\cdot \Delta t_{\text{АЦП}}$), координати часу та середні амплітуди інтервалу (рис. 2б). Фільтрований сигнал розраховують способом інтерполяції середніх координат інтервалів для всіх N_E точок корисного сигналу (рис. 2в).

Одержана гістограма (рис. 2а) після визначення тривалості дії потенціалів фактично є дискретним сигналом інтенсивності $t(f)$, тобто, в процесі квантування автоматично виконується перетворення структури даних.

Перевагою методу є можливість роботи у реальному масштабі часу, відсутність операцій з плаваючою точкою та фіксований обсяг необхідної оперативної пам'яті, який не залежить від тривалості сигналу. В ІТ цей метод є допоміжним інструментальним засобом у способі усунення випадкових імпульсних завад та викидів.

Традиційні методи виявлення імпульсних завад та викидів (наприклад, медіанний метод) не завжди визначають тривалі у часі викиди, пов'язані з роботою імпульсних джерел напруги. Для вирішення цієї проблеми запропоновано новий **спосіб усунення випадкових імпульсних завад та викидів**, який використовує статистичні характеристики порівняння аналітичного $e(\tau)$ та фільтрованого сигналів $e_{\phi}(\tau)$.

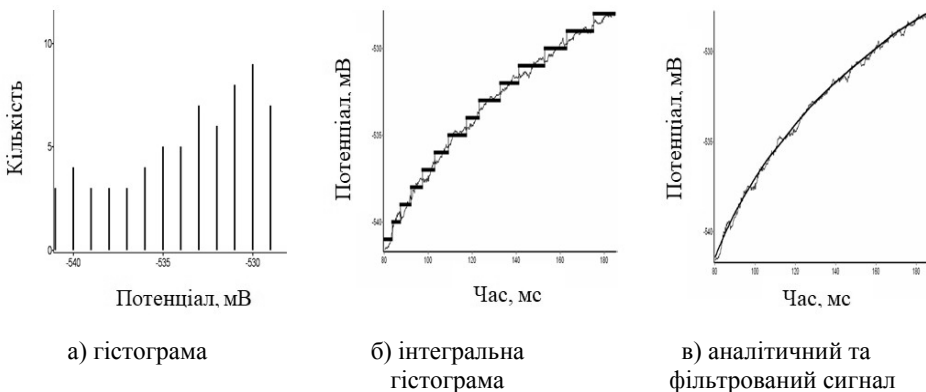


Рис. 2. Метод гістограмної фільтрації

Корекцію аналітичного сигналу в ітераційному режимі здійснюють за алгоритмом:

1. Виконуємо метод гістограмної фільтрації.
2. Ділимо сигнал на r рівних інтервалів, в яких підраховуємо величини середньоквадратичних відхилень S_{er} між аналітичним та фільтрованим сигналом.
3. За значеннями S_{er} в інтервалах визначаємо лінійну залежність:

$$S_e(\tau) = a + b \cdot \tau.$$

4. В аналітичному сигналі $e(\tau_k)$ замінюємо амплітуди на значення $e_\phi(\tau_k)$ доти, доки у точці k виконується умова:

$$|e(\tau_k) - e_\phi(\tau_k)| > 3 \cdot S_e(\tau_k). \quad (7)$$

Наведений приклад (рис. 3) підтверджує ефективність запропонованого способу.

Після очищення даних від імпульсних завад та викидів виконуємо відновлення корисного сигналу, спотвореного високочастотним шумом вимірювання.

Дослідження показали, що для монотонно зростаючих слабких сигналів інверсії застосування класичних методів та гістограмної цифрової фільтрації не завжди ефективно, бо призводить до порушення форми та інтегральних характеристик у місцях різкої зміни кривизни сигналу, що впливає на точність визначення часу інверсії та концентрації. Описаний метод гістограмної фільтрації використовують переважно в автономних аналізаторах та в інших технічних приладах для відновлення коротких за часом сигналів. У випадку фільтрації довготривалих сигналів та в аналітичних вимірюваннях застосовують метод частотно-часової фільтрації, який розглянемо більш детально.

Для відновлення корисного сигналу $e(\tau)$, спотвореного високочастотними завадами, скористаємося внутрішніми математичними характеристиками: точками екстремуму $e'(\tau) = 0$, перегину $e''(\tau) = 0$ та інтервалами часу між ними, які достатньо повно відображають характер слабких змін у сигналі. Згідно способу визначення спектру аналогового сигналу [29], застосування точок екстремуму дозволяє виконати швидкий спектральний аналіз та вирішити інші технічні проблеми [30, 31].

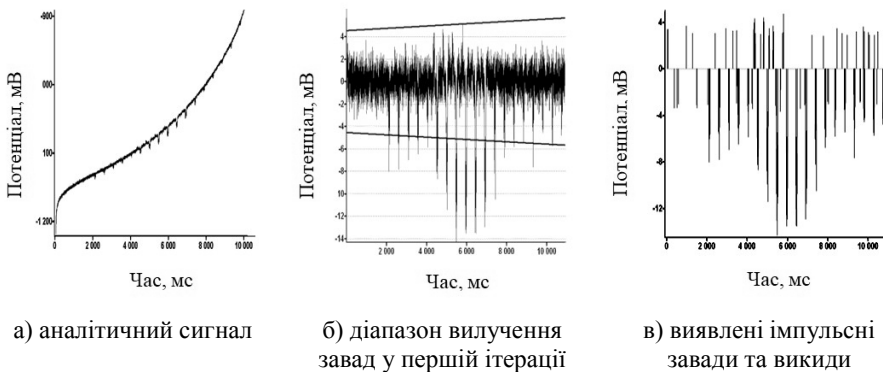


Рис. 3. Виявлення випадкових імпульсних завад та викидів

Такий підхід до цифрового оброблення сигналів став основою створення нового **методу частотно-часової фільтрації** [26], який відзначається швидкістю та ефективністю відновлення корисного сигналу інверсії та виконується за таким алгоритмом.

Знаходимо точки екстремумів високочастотних завад в аналітичному сигналі, які відповідають умові

$$(e_i - e_{i-1}) \cdot (e_{i+1} - e_i) < 0; (\tau_k, e_k) = (\tau_i, e_i); i = 2, \dots, N_E - 1, \quad (8)$$

де e_i — поточна амплітуда i точки сигналу $e(\tau_i)$ після усунення випадкових імпульсних завад та викидів в аналітичному сигналі $e_{\text{вх}}(\tau)$; (τ_k, e_k) — координати точки екстремуму; N_E — довжина аналітичного сигналу $e_{\text{вх}}(\tau)$.

Інтервал часу $\Delta\tau_k \leq \Delta\tau_\phi$ між сусідніми k та $k + 1$ екстремумами вказує на наявність у сигналі півхвилі коливання завади з амплітудою Δe_k та частотою f_k , яка менше заданої частоти фільтру f_ϕ з інтервалом $\Delta\tau_\phi$:

$$f_k = \frac{1}{2\Delta\tau_k}, \quad \Delta e_k = \frac{|e_{k+1} - e_k|}{2}, \quad \Delta\tau_k = \tau_{k+1} - \tau_k, \quad \Delta\tau_\phi = \frac{1}{2f_\phi}. \quad (9)$$

Координати точки перегину в аналітичному сигналі (τ_p, e_p) визначаємо наступним чином:

$$\tau_p = (\tau_k + \tau_{k+1}) / 2, \quad e_p = (e_k + e_{k+1}) / 2. \quad (10)$$

Метод частотно-часової фільтрації засновано на принципі: якщо вилучити значення аналітичного сигналу між точками перегину (τ_p, e_p) та (τ_{p+1}, e_{p+1}) , то корисний відновлений сигнал за точками перегину дає змогу усунути виявлену заваду.

З іншого боку, якщо знайти у сигналі однакові інтервали часу $\Delta\tau_k$, підсумувати та визначити середні значення Δe_k , то, згідно зі способом [29], одержимо оцінку спектральної характеристики сигналу у високочастотному діапазоні спектру.

Відновлення корисного сигналу в ітераційному режимі методом частотно-часової фільтрації здійснюємо в два етапи таким чином:

1. Аналізуємо завади з інтервалами часу $\Delta\tau_k \leq 5\Delta\tau_{\text{АЦП}}$ із застосуванням лінійної інтерполяції між точками перегину (рис. 4).

2. Фільтруємо гармонічні та випадкові завади з інтервалами, що менше частоти фільтру f_ϕ , із застосуванням інтерполяції кубічними сплайнами (рис. 5).

Експерименти на модельних та реальних даних показують, що запропонований метод частотно-часової фільтрації дає змогу ефективно приглушити високочастотні завади.

Згладжування. Під час виконання перетворення системи координат після процедури диференціювання одержаний сигнал інтенсивності може мати обмежені за рівнем випадкові завади (рис. 6а), пов'язані з дискретністю цифрових методів фільтрації сигналу, що потребує їх виявлення перед виконанням моделювання.

Відомі цифрові методи згладжування не завжди дають змогу коректно обробляти диференційні сигнали, оскільки з'являється проблема спотворення форми корисного сигналу у місцях різкої зміни кривизни (виділено колом, рис. 6а), особливо його інтегральних характеристик після відновлення, що неможливо відкоригувати за значеннями інтегрального сигналу $T(f)$. На рисунках 6б та 6в показано у збільшеному масштабі види спотворення форми сигналу.

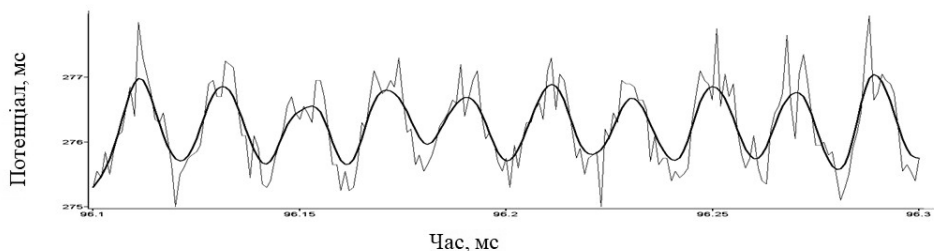


Рис. 4. Аналітичний та фільтрований сигнал після першого етапу

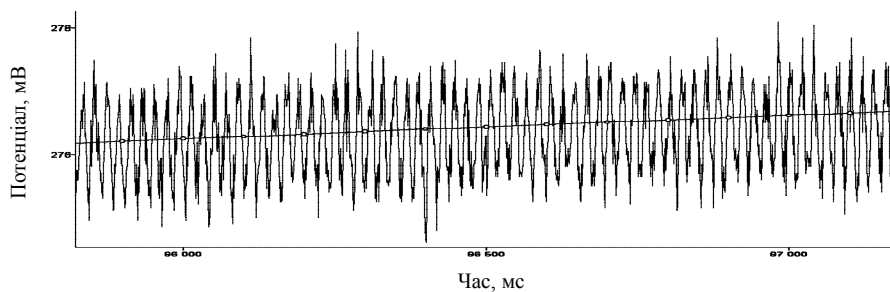


Рис. 5. Сигнал інверсії після частотно-часової фільтрації

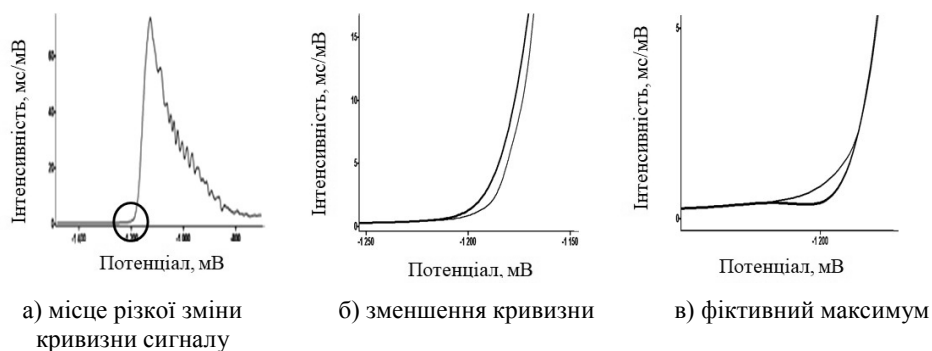


Рис. 6. Спотворення форми сигналу інтенсивності відомими методами згладжування

Застосування методів згладжування (змінного середнього, експоненціального, поліномів або сплайнів) призводить до зменшення кривизни та відповідного збільшення часу інверсії (рис. 6б), а використання рекурсивних фільтрів — до появи фіктивних точок максимуму (рис. 6в).

Для недопущення спотворення форми під час відновлення корисного сигналу інтенсивності розроблено новий **метод адаптивного згладжування даних** [32], що застосовує та розширює принцип описаного методу частотно-часової фільтрації, а саме, якщо виконати згладжування точок інтегрального сигналу $T(f)$ за точками перегину, які відповідають точкам екстремумів сигналу інтенсивності, то після зворотного диференціювання сигнал інтенсивності $t(f) = T'(f)$ буде гладким, але водночас не порушиться його форма та інтегральні характеристики.

Схема методу адаптивного згладжування, що демонструє відповідність точок екстремумів сигналу інтенсивності точкам перегину інтегрального сигналу, показана на рис. 7.

Згідно схеми, абсциси точок екстремумів сигналу інтенсивності $t'(f) = 0$ (а, б, в) відповідають абсцисам точок перегину інтегрального сигналу $T''(f) = 0$ (А, Б, В), а інтервали між ними співпадають. Якщо у сигналі інтенсивності 2 знайдено інтервал між точками екстремумів Δf , який менше граничного інтервалу фільтру Δf_{ϕ} , то під час згладжування інтегрального сигналу 1 по точках (А, Б, В) будуть усунені завади (а, б, в) у корисному сигналі.

Аналіз результатів проведених експериментів адаптивного згладжування еталонних моделей (пилоподібного сигналу, складного меандру та інших, які були попередньо зашумлені високочастотною завадою) показав, що цей метод відновлення корисного сигналу є ефективним і його можна застосувати для згладжування сигналів інтенсивності. Приклад використання методу для відновлення сигналу інтенсивності наведено на рис. 8–10.

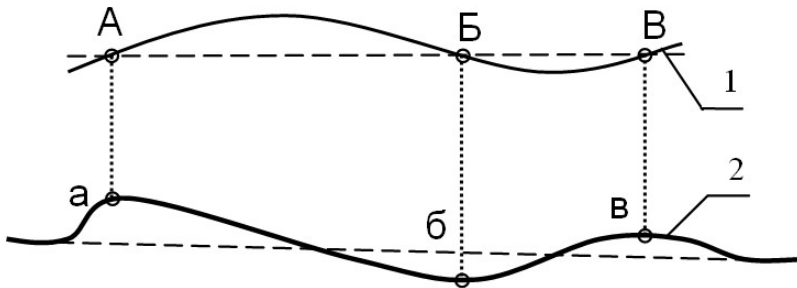


Рис. 7. Схема методу адаптивного згладжування: 1 — інтегральний сигнал $T(f)$; 2 — сигнал інтенсивності $t(f)$; а, б, в — точки екстремумів сигналу інтенсивності $t'(f) = 0$; А, Б, В — точки перегину інтегрального сигналу $T''(f) = 0$.

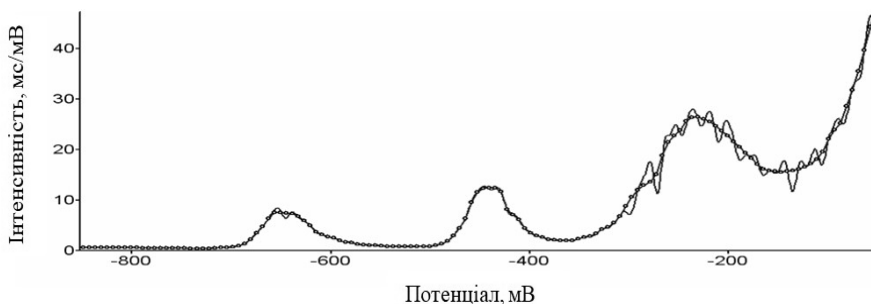


Рис. 8. Вхідний та згладжений сигнал інтенсивності після першої ітерації

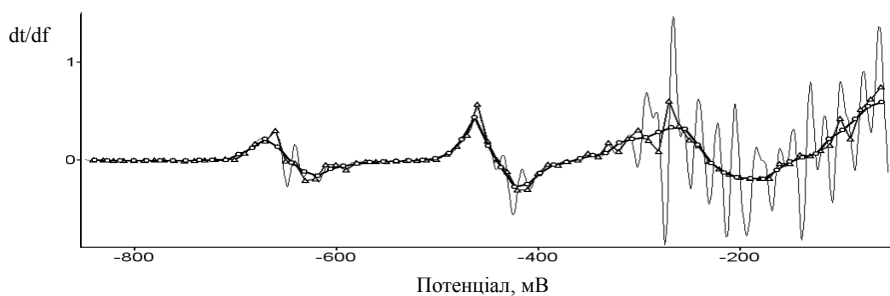


Рис. 9. Перша похідна сигналу інтенсивності після згладжування

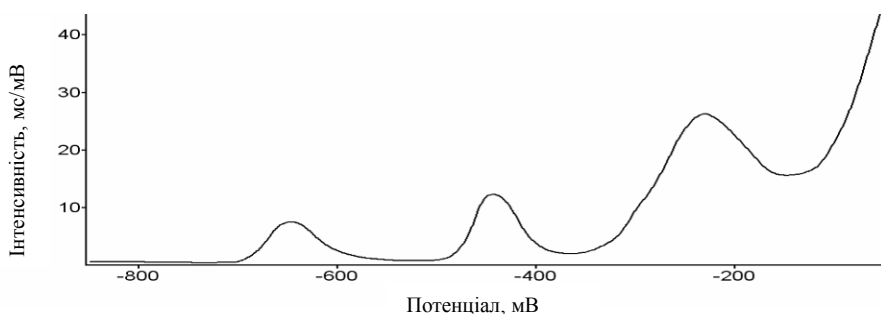


Рис. 10. Згладжений сигнал інтенсивності

Результати експериментів на модельних та реальних даних підтверджують якість виконання адаптивного згладжування. Одержаний сигнал інтенсивності (рис. 10) може бути використано для моделювання та визначення характеристик компонентів.

МОДЕЛЮВАННЯ КОМПОНЕНТІВ ТА ВИЗНАЧЕННЯ ЧАСУ ІНВЕРСІЇ

Аналіз можливих шляхів моделювання багатокomпонентних сигналів інверсії показав, що під час оброблення реальних аналітичних сигналів бажано подавати структуру моделей у вигляді простих, попередньо означених залежностей, в яких визначення параметрів моделей зводиться до задач параметричної ідентифікації. Особливо це відноситься до задач визначення концентрацій елементів за способом багаторазових добавок. У роботах Захарова М.С. [4], Плэмбека Дж.А. [15], Britz D. [17] та інших зауважується, що для виконання аналізу фону, проби та проби з добавками під час вимірювання концентрації повинні використовуватися ідентичні методи оброблення даних, які не допускають зміни структури опису компонентів у цих сигналах.

На основі теоретичних засад методу ІХП можна стверджувати, що аналітичний сигнал та, відповідно, сигнал інтенсивності $t(f)$ є сумою двох незалежних у часі процесів: ємнісного фоновому розряду електродів (базова лінія або нижня обвідна сигналу інтенсивності) та інверсії окремих хімічних елементів (спектр компонентів, за яким визначають концентрації елементів). Такий самий підхід застосовують під час оброблення сигналів

методами вольтамперометрії, рідинної хроматографії та мас-спектрального аналізу: спочатку виявляють сигнал фонового вимірювання (базову лінію), а потім одержаний спектр компонентів застосовують для визначення концентрацій елементів [16, 17, 33].

Безпосередня побудова загальної математичної моделі сигналу інтенсивності за моделями окремих компонентів та базової лінії з багатьма невідомими параметрами є доволі складною проблемою, тому побудуємо **генеративну модель багатоконцентного сигналу**, що дозволить спростити цей процес.

Моделювання компонентів. Припустимо, що базову лінію та кожну незалежну модель j компонента можна подати у вигляді добутку параметра висоти H_j та нормованої моделі $g_j(f_i)$ з визначеними за сигналом інтенсивності $t(f_i)$ незмінними іншими параметрами [33].

За таких припущень загальна модель сигналу інтенсивності для m компонентів спектра з невеликим взаємним накладенням має вигляд:

$$t(f_i) = \sum_{j=0}^m H_j g_j(f_i). \quad (11)$$

Модель компонента $g_0(f_i)$, що описує базову лінію сигналу інтенсивності $t(f)$, згідно теоретичних міркувань доцільно подати в експоненціальній залежності:

$$g_0(f_i) = \exp\left(\sum_{p=0}^4 b_p \cdot f_i^p\right). \quad (12)$$

Невідомі коефіцієнти вектору B визначають методом найменших квадратів за множиною вибраних точок, що характеризують побудову кусково-лінійної нижньої обвідної у логарифмічних координатах.

Під час визначення концентрації елемента виконують один або декілька паралельних вимірювань розчинів: фону, проби та добавки. Для кожного отриманого сигналу інтенсивності визначають модель нижньої обвідної $g_0(f_i)$ та одержують спектр компонентів $\Psi(f_i) = t(f_i) - g_0(f_i)$. Приклад визначення спектру компонентів для сигналів інтенсивності приведено на рис. 11.

Численні експерименти [34–37] показують, що правомірно моделювати компоненти у вигляді несиметричних функцій нормального розподілу аналогічно підходам до моделювання у хроматографії та мас-спектрометрії:

$$H \cdot \text{ERF}(f, f_0, \sigma) = H \cdot \exp\left[-\frac{(f - f_0)^2}{2\sigma^2}\right]. \quad (13)$$

Модель окремого компонента $H_j \cdot g_j(f_i)$ з дисперсіями σ_1, σ_2 та потенціалом піку f_0 має вигляд:

$$H_j \cdot g_m(f) = \begin{cases} H_j \cdot \text{ERF}(f, f_0, \sigma_1), & f \leq f_0 \\ H_j \cdot \text{ERF}(f, f_0, \sigma_2), & f > f_0 \end{cases} \quad (14)$$

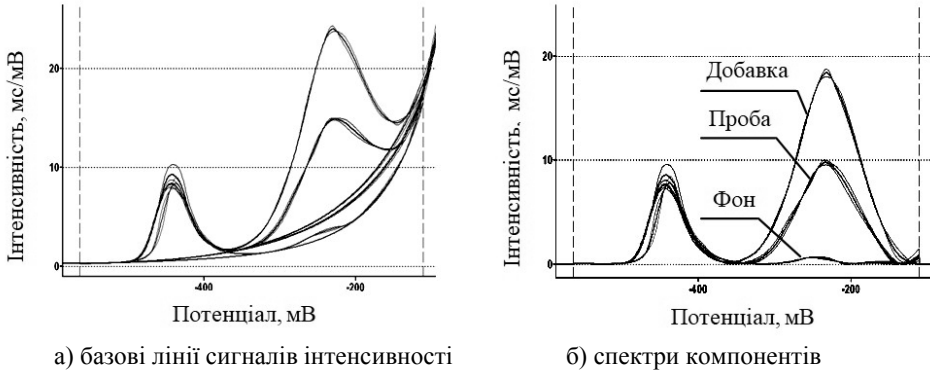


Рис. 11. Побудова спектру компонентів сигналів інтенсивності

Параметри j моделі H_j та f_{0j} визначаємо в такій послідовності:

1. Знаходимо номер дискретної точки максимуму (i_{max}) j -го компонента у діапазоні його вимірювання $[f_{1j}, f_{2j}]$ за (8).
2. Вибираємо множину точок $S_j(f) \subset t(f)$ компонента з номерами точок $[i_{max} - 6, i_{max} + 6]$.
3. Розраховуємо значення похідної $t'(f)$ для точок $S_j(f)$ у діапазоні $[i_{max} - 3, i_{max} + 3]$ з використанням залежності, заснованої на диференціюванні інтерполяційного поліному Лагранжа, яка для числа вузлів $n = 7$ та для одиничного кроку сітки дискретного сигналу має вигляд [20]:

$$t'_i = (t_{i+3} - 9t_{i+2} + 45t_{i+1} - 45t_{i-1} + 9t_{i-2} - t_{i-3}) / 60, \quad (15)$$

водночас точність оцінки (15) характеризується похибкою $R = 1/140 \cdot t^{(7)}$.

4. Шляхом використання зворотної інтерполяції за вибраними точками $t'(f)$ визначаємо дійсне значення координати f_0 за умови $t'(f_i) = 0$, що відповідає точці максимуму.

5. Розраховуємо точне значення H інтегруванням $t'(f)$ від точки з номером i_{max} до координати f_0 .

Для визначення параметрів моделі σ_1, σ_2 вибираємо множину точок сигналу спектра $s_j(f_i) \subset t(f_i)$ у діапазоні $[f_{1j}, f_{2j}]$, яка достатня для побудови моделі (окремо для лівої та правої частини несиметричного розподілу). Логарифмуємо гаусову функцію (13) та аналізуємо її як поліном другого ступеня:

$$\ln(s_j(f_i)) = \left[\ln(H) - \frac{f_0^2}{2\sigma^2} \right] + \left[\frac{f_0}{\sigma^2} \right] \cdot f_i + \left[-\frac{1}{2\sigma^2} \right] \cdot f_i^2 = A + B \cdot f_i + C \cdot f_i^2 \quad (16)$$

Застосовуючи координати сигналу $s_j(f_i)$, визначаємо за допомоги методу найменших квадратів коефіцієнти параболи A, B, C та оптимальні значення параметрів σ_1 та σ_2 :

$$\sigma^2 = \frac{1}{2 \cdot |C|}. \quad (17)$$

Загальну модель сигналу інтенсивності формуємо таким чином:

1. Розраховуємо модель нижньої обвідної $g_0(f_i)$ та визначаємо спектр компонентів $\Psi(f_i)$.

2. У спектрі $\psi_i = \Psi(f_i)$ знаходимо компонент j з найбільшою ординацією H_j та виконуємо для нього моделювання $H_j \cdot g_j(f_i)$.

3. Вилучаємо зі спектра $\Psi(f_i)$ координати моделі компонента, які обмежені інтервалом $[f_{0j} - 5\sigma_{1j}, f_{0j} + 5\sigma_{2j}]$.

4. Повторюємо визначення інших компонентів (п. 2 та п. 3).

5. Виявляємо залишковий лівий сигнал $g_L(f_q)$ та залишковий правий сигнал $g_R(f_p)$ спектра, поява яких пояснюється тим, що зчитані значення аналітичного сигналу інверсії $e(\tau)$ є лише частиною повного процесу електрохімічної інверсії. Для цих можливих компонентів спектра процес моделювання не виконується, а у загальній моделі застосовують лише числові значення множини точок $\{f_q, \psi_q\}$ та $\{f_p, \psi_p\}$.

Загальна модель сигналу інтенсивності після визначення усіх компонентів має вигляд:

$$t_H(f_i) = \sum_{j=1}^m H_j g_j(f_i) + H_L g_L(f_i) + H_R g_R(f_i) + H_0 g_0(f_i). \quad (18)$$

Запропонована модель відноситься до класу одномірних регресійних моделей та визначається шляхом вирішення задачі параметричної ідентифікації, в якій структура залежностей $g_j(f_i)$ відома, а необхідно лише оцінити вектор параметрів H . Оптимальні значення H_{opt} вектору параметрів $H_1, \dots, H_m, H_L, H_R, H_0$ знаходимо за методом найменших квадратів, враховуючи початкові значення: $H_L = H_R = H_0 = 1$.

Численні експерименти [33] дозволяють стверджувати, що застосування методу моделювання сигналу інтенсивності за рахунок єдиного підходу до цифрового оброблення сигналів вимірювання дозволяє збільшити точність, повторюваність та достовірність визначення концентрацій хімічних елементів. Крім того, метод моделювання не потребує втручання хіміка-аналітика для вибору діапазону зміни потенціалів компонента, що дає можливість повністю автоматизувати процес вимірювання концентрацій.

Визначення часу інверсії. Під час вимірювання концентрацій j хімічний елемент однозначно ідентифікується компонентом спектра за діапазоном потенціалів $[f_{1j}, f_{2j}]$ та величиною потенціалу піку (параметр f_{0j}). Час інверсії t_j хімічного елемента визначається за сигналом інтенсивності як площа компонента $S_j(f) \subset t(f)$:

$$t_j = \int_{f_{1j}}^{f_{2j}} t(f) df = \sum_{i=f_{1j}}^{f_{2j}} S_j(f_i). \quad (19)$$

Досвід застосування **базового методу ІХІІ** для визначення концентрацій свідчить, що подальше підвищення чутливості вимірювання та збільшення часу інверсії за цим методом досягнути практично неможливо, тому для вирішення цього завдання запропоновано застосувати відомі принципи імпульсних електрохімічних методів аналізу. Імпульсні методи широко використовуються у вольтамперометрії, теоретичні основи такого підходу описані в роботах Захарова М.С. [4], Плэмбека Дж.А. [15], Каплана Б.Я. [38] та ін.

Основна ідея застосування імпульсних методів у хронопотенціометрії — збільшення часу інверсії за рахунок активного втручання у процес електролітичного окислення [39, 40]. Під час імпульсу відбувається «підзарядка» вимірювального електроду, тобто електрод короткочасно переходить в режим концентрування, що призводить до зменшення електрорушійної сили окислення, сповільнення процесу інверсії та збільшення чутливості вимірювання концентрацій.

Для використання імпульсних процесів інверсії у хронопотенціометрії запропоновано нові електрохімічні методи дослідження, які дозволили суттєво збільшити чутливість вимірювання концентрацій токсичних елементів:

- імпульсна інверсійна хронопотенціометрія (ІХП);
- диференційна імпульсна хронопотенціометрія (ДІХП);
- окислювальна імпульсна хронопотенціометрія (ОІХП).

Загальну схему застосування імпульсного режиму інверсії за постійних значень параметрів імпульсу та періодичності надано на рис. 12.

Принцип *методу імпульсної інверсійної хронопотенціометрії* полягає у тому, що після електрохімічного концентрування під час виконання інверсії на поточний сигнал накладаються прямокутні імпульси з одностороннім приростом амплітуди. Метод дає змогу збільшити чутливість визначення концентрацій елементів до $0,05 \text{ мкг/дм}^3$. Найбільший ефект від застосування методу — визначення слідових значень концентрацій токсичних елементів: ртуті, свинцю, кадмію, марганцю [41].

Принцип *методу диференційної імпульсної хронопотенціометрії* відрізняється тим, що під час виконання інверсії на поточний сигнал накладаються прямокутні імпульси з двостороннім приростом амплітуди. Це дає змогу збільшити чутливість до $0,1 \text{ мкг/дм}^3$ та застосовувати для визначення концентрації елементів із слабкими електрохімічними властивостями: йоду, бромю, селену, заліза [42].

Принцип *методу окислювальної імпульсної хронопотенціометрії* полягає в тому, що під час виконання інверсії виконується циклічна «підзарядка» вимірювального електроду за рахунок зміни потенціалів підставки. Метод дає змогу збільшити чутливість визначення концентрацій до $0,3 \text{ мкг/дм}^3$ та застосовується переважним чином з вимірювальним електродом на золотій основі для аналізу елементів: нікелю, кобальту, арсену [43].

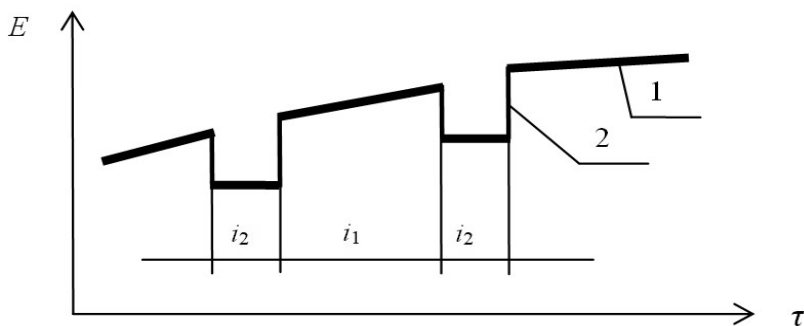


Рис. 12. Загальна схема застосування імпульсного режиму інверсії: 1 — сигнал інверсії, 2 — імпульс, i_1 — тривалість між імпульсами, i_2 — тривалість імпульсу

Розроблено новий **метод хроноіонометрії** (ХІ) для розширення діапазону вимірювання концентрацій хімічних елементів в сторону великих значень із застосуванням іонселективних електродів шляхом використання режиму прямої полярографії на хронопотенціометричному приладі. Цим методом визначають такі хімічні елементи та сполуки як калій, натрій, кальцій, фтор, амоній, нітрати з концентраціями до $6 \cdot 10^7$ мкг/дм³ [44]. Суть методу полягає у вимірюванні активності (концентрацій) іонів за допомоги іонселективного електроду та нового хлорсрібного електроду з подвійним електролітичним ключем. Під час роботи іонселективний електрод реагує на певний тип іону, а його потенціал залежить від вмісту іонів у розчині. Лінійна залежність різниці потенціалів електродної системи від активності іонів елементу описується рівнянням Нернста [1, 2, 15]. Значення концентрацій визначають за градуовальним графіком або за удосконаленим способом багаторазових добавок (до п'яти) стандартного розчину іонів елемента [45].

ВИЗНАЧЕННЯ КОНЦЕНТРАЦІЙ ХІМІЧНИХ ЕЛЕМЕНТІВ В ОБ'ЄКТІ

Загальна послідовність дій під час вимірювання концентрацій хімічних елементів у різних об'єктах навколишнього середовища електрохімічними методами така:

- виконують відбір проби об'єкта навколишнього середовища, фіксуючи масу навіски (тверда проба) або об'єм проби (рідка проба, проба повітря);
- проводять пробопідготовку відібраних зразків у відповідності до нормативних документів;
- послідовно виконують вимірювання концентрацій елементів, використовуючи відповідний фоновий розчин та одержаний розчин проби зразку.

Концентрацію хімічного елемента C_{Me} визначають за способом добавки відомої маси m каліброваного стандартного зразку іонів елемента, що аналізується, виконуючи визначення часу інверсії послідовно у трьох видах розчину: фоновому розчині t_{Φ} (для урахування забруднення електродів попередніми вимірюваннями), розчині проби t_{Π} та розчині проби з добавкою $t_{Д}$, за формулою:

$$C_{Me} = \frac{t_{\Pi} - t_{\Phi}}{t_{Д} - t_{\Pi}} \cdot m \cdot k, \quad (20)$$

де k — перевідний коефіцієнт для розрахунку масової концентрації елемента в пробі об'єкта за значеннями його концентрації у розчині проби.

Під час виконання паралельних вимірювань визначають середні значення часу інверсії у кожному розчині, які застосовують у розрахунку концентрації для однієї добавки за залежністю (20).

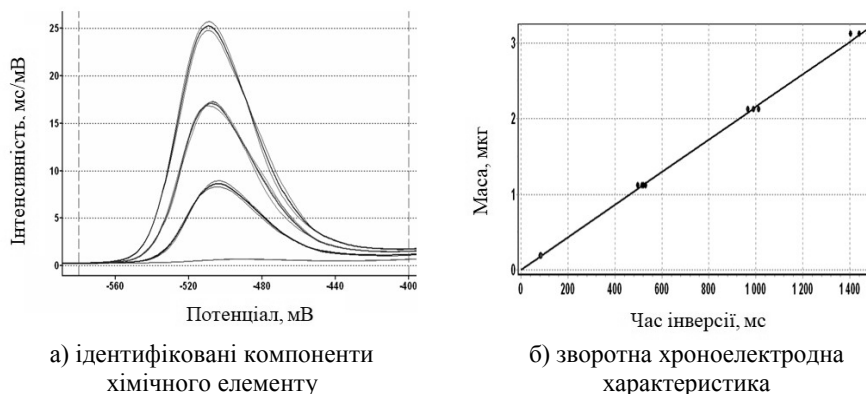


Рис. 13. Визначення концентрації хімічного елементу

В ІТ оцінювання концентрацій токсичних елементів може здійснюватися за значеннями декількох добавок (до п'яти), що підвищує точність та достовірність визначення. У цьому випадку для визначення невідомої маси іонів у пробі використовують лінійну зворотну хроноелектродну характеристику — залежність маси добавки від часу інверсії. Коефіцієнти лінійного рівняння характеристики визначають за методом найменших квадратів. На рис. 13 наведено приклад використання характеристики для вимірювання концентрації з двома добавками, в якому час інверсії відповідає площі ідентифікованої моделі компонента спектра, а характеристика будеться за часом інверсії за відомими значеннями маси добавки в режимах вимірювання: фону, проби, 1 добавки, 2 добавок.

Аналізуючи точки графіку зворотної хроноелектродної характеристики, хімік-аналітик має можливість упевнитися в якості проведених досліджень, може додати або вилучити з розрахунку одержані значення паралельних вимірювань, підвищуючи точність визначення концентрацій хімічного елемента.

ІНФОРМАЦІЙНА ТЕХНОЛОГІЯ ВИМІРЮВАННЯ КОНЦЕНТРАЦІЙ

Створення ІТ вимірювання концентрацій методами хронопотенціометрії базується на використанні описаних методів цифрового оброблення даних та застосуванні нових електрохімічних методів дослідження:

цифрові методи

- перетворення системи координат;
- метод гістограмної фільтрації;
- спосіб усунення випадкових імпульсних завад та викидів;
- метод частотно-часової фільтрації;
- метод адаптивного згладжування даних;
- генеративна модель багатокomпонентного сигналу;

електрохімічні методи

- базовий метод інверсійної хронопотенціометрії;
- метод імпульсної інверсійної хронопотенціометрії;
- метод диференційної імпульсної хронопотенціометрії;

- метод окислювальної імпульсної хронопотенціометрії;
- метод хроноіонометрії.

Запропонована ІТ має три основні етапи.

I. Перетворення структури даних.

II. Моделювання компонентів та визначення часу інверсії.

III. Визначення концентрацій хімічних елементів.

Встановлено, що для класу монотонно зростаючих сигналів, які є інтегральною сумою процесів багатокомпонентного вимірювання, можна застосувати перетворення системи координат, що складається з фільтрації, формування та диференціювання перетвореного корисного сигналу, водночас суттєво скорочуються дані без втрати корисної інформації. Одержаний сигнал аналізується як сума окремих компонентів.

Розроблені в рамках ІТ інструментальні засоби відновлення корисного сигналу за умов дії високочастотних завад можуть бути використані для вирішення завдань цифрового оброблення даних різної фізичної природи, що відповідають даному класу сигналів.

Застосування ІТ в приладах для вимірювання концентрацій. Для реалізації створеної ІТ у Міжнародному науково-навчальному центрі інформаційних технологій та систем НАН України та МОН України розроблено високочутливу аналітичну систему «Аналізатор ІХП», в якій застосовано інструментальні засоби та нові електрохімічні методи дослідження для вимірювання концентрацій 20-ти токсичних елементів в об'єктах навколишнього середовища [46, 47]. Для визначення концентрацій у комп'ютерній системі вимірювання використовують п'ять методів хронопотенціометричного аналізу.

«Аналізатор ІХП» дозволяє визначити масову концентрацію 14-ти токсичних елементів (ртуть, арсен, свинець, кадмій, цинк, мідь, олово, нікель, кобальт, залізо, марганець, селен, йод та хром) з чутливістю до $0,05 \text{ мкг/дм}^3$ (50 ppt), шість хімічних елементів та сполук (калій, натрій, кальцій, фтор, амоній та нітрати) у діапазоні від 10^3 мкг/дм^3 до $6 \cdot 10^7 \text{ мкг/дм}^3$.

Нові методи електрохімічного аналізу та унікальні способи вимірювання концентрацій хімічних елементів (селену, марганцю, йоду, заліза, хрому, кальцію, натрію, калію) захищено 12-ма патентами України на винахід [41–44, 48–55].

Комп'ютерна система аналізатора складається з двох незалежних підсистем оброблення даних, окремо для методів інверсійної хронопотенціометрії та методу хроноіонометрії, які об'єднано загальною інформаційною системою та вимірювальним пристроєм.

ІТ зберігає у базі даних довідкові дані гранично допустимих концентрацій різних типів об'єктів, що мають спільні нормативні значення: харчові продукти (хліб, молоко, зерно, дитяче харчування, продукція рослинництва та тваринництва), вода різного природного походження (питна, поверхнева, підземна, очищена), ґрунти різних типів, повітря робочої зони та ін., які регламентовані МОЗ України.

ІТ дає змогу формувати шаблони електрохімічних параметрів вимірювання елементів для різних методів дослідження та форми протоколів результатів вимірювання за допомоги інтелектуального інтерфейсу користувача, зберігати сигнали інтенсивності та результати вимірювання концентрацій елементів у архіві, що спрощує та покращує сервісне обслуговування праці хіміка-аналітика.

Розроблено шість методик вимірювання концентрацій 19-ти хімічних елементів у воді та ґрунтах новими методами дослідження, що підтверджує працездатність створених методів електрохімічного аналізу [56–61]. Методики можуть застосовуватися у сферах поширення Державного метрологічного контролю та нагляду, в санітарно-епідеміологічних станціях, науково-дослідних установах МОЗ України та НАН України, ветеринарних, агрохімічних, контрольних-токсикологічних лабораторіях агропромислового комплексу та інших галузей, які займаються визначенням слідових кількостей хімічних та токсичних елементів в об'єктах навколишнього природного середовища. «Пристрій для вимірювання концентрації важких металів» [41] став переможцем Всеукраїнського конкурсу «Винахід-2011» за ефективне рішення в хіміко-технологічній галузі; комплекс винаходів «Способи та пристрій для визначення концентрації мікроелементів у водних розчинах» [44, 48–55] став переможцем Всеукраїнського конкурсу «Винахід-2016» у номінації «Екологія».

Рівень розробки аналітичної системи «Аналізатор ІХП» відповідає сучасним європейським та світовим вимогам, за чутливістю вимірювання не поступається кращим світовим аналогам («РС-ЕТР» Чехія, аналізатор «797 VA Computrace» Швейцарія, «Model 600C» США).

ВИСНОВКИ

Результати, які одержано у процесі розроблення ІТ, свідчать про перспективність застосування нових підходів та принципів цифрового оброблення слабких за рівнем сигналів складної форми, що монотонно змінюються, на основі розв'язання наступних задач:

- 1) перетворення структури даних вимірювання багатокomпонентних процесів;
- 2) застосування внутрішніх математичних характеристик (точок екстремумів та перегинів) для виконання фільтрації та згладжування даних без суттєвих спотворень форми та інтегральних характеристик сигналу;
- 3) моделювання компонентів для підвищення повторюваності та точності визначення концентрацій.

Ефективність високочутливої аналітичної системи «Аналізатор ІХП» підтверджено проведенням практичних досліджень визначення концентрацій хімічних елементів, затвердженням патентів України на винахід та широким впровадженням у лабораторіях для контролю якості питної води, харчових продуктів та виконання агрохімічних досліджень.

Під час розроблення технічних систем було виявлено, що до класу монотонно зростаючих сигналів, які є інтегральною сумою вимірювань багатокomпонентних процесів, можна віднести дані, що мають зовсім іншу фізичну природу, а саме: сигнали динамічного зважування для визначення навантаження на осі автомобіля, системи дозування продуктів, підготовки бетонних сумішей, комбікормів тощо. Розроблені інструментальні засоби дали можливість побудувати нові ефективні прикладні інформаційні технології для цифрового оброблення таких сигналів та процесів.

ЛІТЕРАТУРА

1. Гейровский Я., Кута Я. Основы полярографии. Москва: Мир, 1968. 558 с.
2. Brainina Kh. Z. Stripping Voltammetry in Chemical Analysis. New York, Toronto: Halsted Press, 1974. 222 p.
3. Карнаухов О.І., Гриневич В.В., Скобець Є.М. Диференціальний варіант інверсійної хронопотенціометрії із заданим опором в окислювальному ланцюгу. *Український хімічний журнал*. 1973. № 39. С. 710–714.
4. Захаров М.С., Баканов В.И., Пнев В.В. Хронопотенциометрия. Москва: Химия, 1978. 199 с.
5. Карнаухов О.І., Галімова В.М., Галімов К.Р. Теорія інверсійної хронопотенціометрії із заданим опором ланцюга. *Науковий вісн. НАУ*. 2000. № 32. С. 204–209.
6. Josipčuk B.V., Karnaukhov A.I., Surovtsev I.V., Povchan M.F. Inverznopotenenciomerický analizátor ťažkých kovov. *Agrochemia. Slovakia*. 1993. 33, № 8. P. 19–21.
7. Galimova V.M., Surovtseva T.V. The assessment of the state of pollution of the waters of the transcarpathian rivers with heavy metals. *J. of water chem. and texnology*. 2011. Vol. 33, №2. P. 111–116.
8. Surovtsev I.V., Galimova V.M., Mank V.V., Kopilevich V.A. Determination of heavy metals in aqueous ecosystems by the method of inversion chronopotentiometry. *J. of water chem. and texnology*. 2009. Vol. 31, № 6. P. 389–395.
9. Galimova V.M., Surovtsev I.V., Kopilevich V.A. Determination of Arsenic in the Water Using the Method of Inversion Chronopotentiometry. *J. of water chem. and texnology*. 2012. Vol. 34, № 6. P. 284–287.
10. Galimova V.M., Surovtsev I.V., Kopilevich V.A. Inversion-chronopotentiometric analysis of mercury in water. *J. of water chem. and texnology*. 2013. Vol. 35, № 5. P. 210–214.
11. Kopilevich V.A., Surovtsev I.V., Galimova V.M. Inversion-chronopotentiometry analysis of micro quantities of nickel and cobalt in the water. *J. of water chem. and texnology*. 2015. Vol.37, № 5. P. 248–252.
12. Kopilevich V.A., Surovtsev I.V., Galimova V.M., Maksin V.I., Mank V.V. Determination of trace amounts of iodide-ions in water using pulse inverse chronopotentiometry. *J. of water chem. and texnology*. 2017. Vol. 39, No. 5. P. 1–5.
13. Гомеля М.Д., Шаблій Т.О., Копілевич В.А., Галімова В.М., Лаврик Р.В., Суровцев І.В. Екологічна безпека водних систем і моніторинг якості води: навч. посіб. Київ.: Нац. ун-т біотехн. і природокористування, 2013. 143 с.
14. Hong G., Hongfang Z., Yuanzhen Z. Progress in oscillographic chronopotentiometry. *Science in China Series B: Chemistry*. 2005. Vol. 48. P. 1–8.
15. Плэмбек Дж.А. Электрохимические методы анализа. Основы теории и применение. Москва: Мир, 1985. 504 с.
16. Sparks Donald L. Environmental Soil Chemistry. New York: Acad. Press, 1995. 467 p.
17. Britz D. Digital Simulation in Electrochemistry. Springer, Berlin Heidelberg, 2005. 338 p.
18. Васильев В.И., Суровцев И.В. Индуктивные методы обнаружения закономерностей, основанные на теории редукции. *УСuM*. 1998. № 5. С. 3–14.
19. Васильев В.И., Суровцев И.В. Практические аспекты теории редукции в задачах обнаружения и моделирования закономерностей. *УСuM*. 2001. № 1. С. 6–15.
20. Файнзильберг Л.С. Информационные технологии обработки сигналов сложной формы. Теория и практика. Киев.: Наукова думка, 2008. 333 с.
21. Ивахненко А.Г., Степашко В.С. Помехоустойчивое моделирование. Киев: Наукова думка. 1985. 300 с.
22. Доленко С.А. Нейросетевые методы решения обратных задач. Нейроинформатика-2013. XV Всероссийская научно-техн. конф. Лекции по нейроинформатике. Москва, 2013. С. 214–269.
23. Пристрій для моделювання нелінійних моделей фізичних об'єктів: пат. 98987 Україна: МПК (2006) G05B 17/00, G06G 7/48. № a201008508; заявл. 07.07.10; опубл. 10.07.12, Бюл. № 13. 3 с.

24. Бабак О.В., Суровцев И.В., Татаринов А.Э. О целенаправленности перебора вариантов моделей при моделировании физических процессов. *УСиМ*. 2012. № 1. С. 3–7.
25. Суровцев И. В. Преобразование структуры данных при определении концентрации методом инверсионной хронопотенциометрии. *КиВТ*. 2015. № 180. С. 4–14.
26. Суровцев И.В. Метод цифровой фильтрации электрохимических сигналов в хронопотенциометрии. *КиВТ*. 2015. № 182. С. 4–14.
27. Спосіб гістограмної цифрової фільтрації хронопотенціометричних даних: пат. 96367 Україна: МПК (2006) G01N 27/48. № a201005608; заявл. 11.05.10; опубл. 25.10.11, Бюл. № 20. 8 с.
28. Суровцев И.В. Гістограмний метод фільтрації електрохімічних сигналів. *Науково-технічна інформація*. 2016. № 1. С. 49–54.
29. А. с. 845600 СССР Способ определения спектра аналогового сигнала / В.И. Скурихин, И.Д. Пономарева, П.М. Сиверский, Г.В. Цепков. СССР; опубл. 07.07.1981.
30. Пономарева И.Д., Цепков Г.В. Сверхбыстрый спектральный анализ. *Проблемы управления и информатики*. 1998. № 1. С. 107–114.
31. И.Д. Пономарева, Суровцев И.В., Математическое моделирование инерционного процесса, который испытывает периодическое возмущающее воздействие. *Пробл. бионики*. 1987. Вып. 42. С. 111–114.
32. Суровцев И.В. Метод адаптивного сглаживания электрохимических сигналов в хронопотенциометрии. *УСиМ*. 2015. № 5. С. 79–83.
33. Суровцев И. В., Татаринов А.Э., Галимов С.К. Моделирование дифференциальных хронопотенциограмм суммой нормальных распределений. *УСиМ*. 2009. № 5. С. 40–45.
34. Бабак О.В., Суровцев И.В., Татаринов А.Э. Моделирование инверсионно-хронопотенциометрического процесса измерения массовой концентрации отдельно взятого тяжелого металла. *УСиМ*. 2012. № 5. С. 88–92.
35. Татаринов А.Э., Суровцев И.В., Бабак О.В. Моделирование инверсионно-хронопотенциометрического процесса совместного измерения массовой концентрации двух тяжелых металлов. *УСиМ*. 2013. № 5. С. 84–87.
36. Татаринов А.Э., Галимов С.К., Суровцев И.В., Бабак О.В. Оценка качества моделирования скрытого фрагмента дифференциального графика хронопотенциограммы инверсии тяжелых металлов в жидкой пробе полярографа. *УСиМ*. 2014. № 2. С. 10–13.
37. Суровцев И.В. Моделирование многокомпонентных сигналов в хронопотенциометрии *КиВТ*. 2016. № 185. С. 5–21.
38. Каплан Б.Я. Импульсная полярография. Москва.: Химия, 1978. 239 с.
39. Суровцев И.В., Татаринов А.Э. Информационная технология измерения концентрации химических элементов методом импульсной хронопотенциометрии. *Автоматика-2005*. Харьков: ХПИ, 2005. Т.1. С.42–45.
40. Татаринов А.Э., Суровцев И.В. Использование методов импульсной хронопотенциометрии при измерении концентрации тяжелых металлов. *Вестн. ВПИ*. 2006. № 6 (69). С. 101–105.
41. Пристрій для вимірювання концентрації важких металів: пат. 96375 Україна: МПК (2006) G01N 27/48. № a201006798; заявл. 02.06.10; опубл. 25.10.11, Бюл. № 20. 6 с.
42. Пристрій для вимірювання концентрації токсичних елементів: пат. 107412 Україна: МПК (2006) G01N 27/48. № a201306295; заявл. 21.05.13; опубл. 25.12.14, Бюл. № 24. 2 с.
43. Аналого-цифровий електрохімічний пристрій для вимірювання параметрів розчинів: пат. 104062 Україна: МПК (2006) G01N 27/48. № a201206459; заявл. 28.05.12; опубл. 25.12.13, Бюл. № 24. 5с.
44. Пристрій для вимірювання параметрів водних розчинів: пат. 111689 Україна: МПК (2006) G01N 27/48. № a201505019; заявл. 22.05.15; опубл. 25.05.16, Бюл. № 10. 6 с.
45. Суровцев И.В., Галимов С.К. Алгоритм обработки данных измерения концентрации методом хроноонометрии. *УСиМ*. 2016. № 2. С. 85–91.
46. Суровцев И.В., Бабак О.В., Татаринов О.Е., Суровцева Т.В. Апаратно-програмний комплекс «Аналізатор ІХП» для вимірювання масової концентрації токсичних елементів. *Наука та іннов.* 2011. Т.7, № 3. С. 45–46.

47. Суровцев І.В., Бабак О.В., Волков Ю.М., Галімов С.К. Прилад інверсійної хронопотенціометрії для визначення концентрації важких металів та токсичних елементів у воді. *Безпека життєдіяльності*. 2013. № 12. С. 37–40.
48. Спосіб визначення заліза у водних розчинах: пат. 110752 Україна: МПК (2006) G01N 27/48, G01N 33/18, G01N 33/20, G01N 49/00. № a201413328; заявл. 12.12.14; опубл. 10.02.16, Бюл. № 3. 3 с.
49. Спосіб визначення хрому у водних розчинах: пат. 110893 Україна: МПК (2006) G01N 27/48, G01N 33/18, G01N 33/20, C01G 37/00. № a201412936; заявл. 03.12.14; опубл. 25.02.16, Бюл. № 4. 4 с.
50. Спосіб визначення йоду у водних розчинах: пат. 111040 Україна: МПК (2006) G01N 27/48, G01N 33/18, G01N 33/20, C01B 7/14. № a201501610; заявл. 24.02.15; опубл. 10.03.16, Бюл. № 5. 4 с.
51. Хронопотенціометричний спосіб визначення селену у водних розчинах: пат. 110744 Україна: МПК (2006) G01N 27/48, G01N 33/18, G01N 33/20, C01B 19/00. № a201408492; заявл. 25.07.14; опубл. 10.02.16, Бюл. № 3. 4 с.
52. Хронопотенціометричний спосіб визначення марганцю у водних розчинах: пат. 111000 Україна: МПК (2006) G01N 27/48, G01N 33/18, G01N 33/20, C01G 45/00. № a201406570; заявл. 12.06.14; опубл. 10.03.16, Бюл. № 5. 4 с.
53. Спосіб визначення кальцію у водних розчинах: пат. 113126 Україна: МПК (2006) G01N 27/48, G01N 27/49, G01N 33/18, G01N 33/20, C01F 11/00. № a201511155; заявл. 13.11.15; опубл. 12.12.16, Бюл. № 23. 4 с.
54. Спосіб визначення натрію у водних розчинах : пат. 113248 Україна: МПК (2006) G01N 27/48, G01N 27/49, G01N 33/18, G01N 33/20, C01D 13/00. № a201511153; заявл. 13.11.15; опубл. 26.12.16, Бюл. № 24. 3 с.
55. Спосіб визначення калію у водних розчинах : пат. 113356 Україна: МПК (2006) G01N 27/48, G01N 27/49, G01N 33/18, G01N 33/20, C01D 13/00. № a201511152; заявл. 13.11.15; опубл. 10.01.17, Бюл. № 1. 4 с.
56. Методика виконання вимірювання масової концентрації ртуті, миш'яку, нікелю та кобальту у воді методом інверсійної хронопотенціометрії : МВВ 081/36-0762-11 / уклад. В.А. Копілевич, І.В. Суровцев, В.М. Галімова, К.Г. Козак. К.: Нац. ун-т біотехн. і природокористування, 2011. 23 с.
57. Методика виконання вимірювання масової концентрації свинцю, міді, цинку, кадмію у воді методом інверсійної хронопотенціометрії : МВВ 081/36-0790-11 / уклад. В.А. Копілевич, І.В. Суровцев, В.М. Галімова, К.Г. Козак. К.: Нац. ун-т біотехн. і природокористування, 2011. 21 с.
58. Методика виконання вимірювання масової концентрації рухомих форм важких металів та токсичних елементів (Pb, Cu, Zn, Cd, Hg, As, Ni, Co) у ґрунтах методом інверсійної хронопотенціометрії : МВВ 081/36-0833-12 / уклад. В.А. Копілевич, І.В. Суровцев, В.М. Галімова, К.Г. Козак. К.: Нац. ун-т біотехн. і природокористування, 2012. 26 с.
59. Методика виконання вимірювання масової концентрації токсичних елементів (Se, Mn, Cr, I, Fe) у воді методом інверсійної хронопотенціометрії : МВВ 081/36-0935-14 / уклад. В.А. Копілевич, І.В. Суровцев, В.М. Галімова, К.Г. Козак. К.: Нац. ун-т біотехн. і природокористування, 2014. 25 с.
60. Методика виконання вимірювання масової концентрації калію, натрію та кальцію у воді методом хронопотенціометричної іонометрії : МВВ 081/36-1012-2015 / уклад. В.А. Копілевич, І.В. Суровцев, В.М. Галімова. К.: Нац. ун-т біотехн. і природокористування, 2015. 16 с.
61. Методика вимірювання масової концентрації фтору, амонію та нітратів у воді методом хронопотенціометричної іонометрії : МВ 081/12-1023-2016 / уклад. В.А. Копілевич, І.В. Суровцев, В.М. Галімова. К.: Нац. ун-т біотехн. і природокористування, 2016. 30 с.

Отримано 12.12.2017

REFERENCES

1. Geyrovskiy Ya., Kuta Ya. Fundamentals of Polarography. Moscow: Mir, 1968. 558 p. (in Russian).
2. Brainina Kh. Z. Stripping Voltammetry in Chemical Analysis. New York, Toronto: Halsted Press, 1974. 222 p.
3. Karnaukhov A.I., Grynevich V.V., Skobeets' Ye.M. Differential variant of inversion chronopotentiometry with a given resistance in the oxidation chain. *Ukrayins'kyy khimichnyy zhurnal*. 1973. no. 39. pp. 710–714 (in Ukrainian).
4. Zakharov M.S., Bakanov V.I., Pnev V.V. Chronopotentiometry. Moscow: Khimiya. 1978. 199 p. (in Russian).
5. Karnaukhov A.I., Galimova V.M., Galimov K.R. The theory of inversion chronopotentiometry with a given resistance of circuit. *Naukovyy visnyk NAU*. 2000. no. 32. pp. 204–209 (in Ukrainian).
6. Josipčuk B.V., Karnaukhov A.I., Surovtsev I.V., Povchan M.F. Inverznó-chronopotenciometrický analýzátór ťažkých kovov. *Agrochemia. Slovakia*. 1993. 33, № 8. P. 19–21.
7. Galimova V.M., Surovtseva T.V. The assessment of the state of pollution of the waters of the transcarpathian rivers with heavy metals. *J. of water chem. and texnology*. 2011. Vol. 33, № 2. P. 111–116.
8. Surovtsev I.V., Galimova V.M., Mank V.V., Kopilevich V.A. Determination of heavy metals in aqueous ecosystems by the method of inversion chronopotentiometry. *J. of water chem. and texnology*. 2009. Vol. 31, № 6. P. 389–395.
9. Galimova V.M., Surovtsev I.V., Kopilevich V.A. Determination of Arsenic in the Water Using the Method of Inversion Chronopotentiometry. *J. of water chem. and texnology*. 2012. Vol. 34, № 6. P. 284–287.
10. Galimova V.M., Surovtsev I.V., Kopilevich V.A. Inversion-chronopotentiometric analysis of mercury in water. *J. of water chem. and texnology*. 2013. Vol. 35, № 5. P. 210–214.
11. Kopilevich V.A., Surovtsev I.V., Galimova V.M. Inversion-chronopotentiometry analysis of micro quantities of nickel and cobalt in the water. *J. of water chem. and texnology*. 2015. Vol.37, № 5. P. 248–252.
12. Kopilevich V.A., Surovtsev I.V., Galimova V.M., Maksin V.I., Mank V.V. Determination of trace amounts of iodide-ions in water using pulse inverse chronopotentiometry. *J. of water chem. and texnology*. 2017. Vol. 39, No. 5. P. 1–5.
13. Gomelya M.D., Shablyi T.O., Kopilevych V.A. Environmental safety of water systems and monitoring of water quality: teaching. manual. Kyiv: Nats. un-t biotekhn. i pryrodokorystuvannya, 2013. 143 p. (in Ukrainian).
14. Hong G., Hongfang Z., Yuanzhen Z. Progress in oscillographic chronopotentiometry. *Science in China Series B: Chemistry*. 2005. Vol. 48. P. 1–8.
15. Plembek J.A. Electrochemical methods of analysis. Fundamentals of the theory and application. Moscow: Mir, 1985. 504 p. (in Russian).
16. Sparks Donald L. Environmental Soil Chemistry. New York: Acad. Press, 1995. 467 p.
17. Britz D. Digital Simulation in Electrochemistry. Springer, Berlin Heidelberg, 2005. 338 p.
18. Vasil'yev V.I., Surovtsev I.V. Inductive methods for detecting regularities, based on the theory of reduction. *USiM*. 1998. No. 5. P. 3–14 (in Russian).
19. Vasil'yev V.I., Surovtsev I.V. Practical aspects of the theory of reduction in problems of detection and modelling of regularities. *USiM*. 2001. No. 1. P. 6–15 (in Russian).
20. Finezilberg L.S. Information technologies for processing complex-shaped signals. Theory and practice. Kiev: Naukova dumka, 2008. 333 p. (in Russian).
21. Ivakhnenko A.G., Stepashko V.S. Noise immunity modelling. Kiev: Naukova dumka, 1985. 300 p. (in Russian).
22. Dolenko S.A. Neural network methods for solving inverse problems. Neuroinformatics-2013. XV All-Russian nuhno-tehn. Conf. Lectures on neuroinformatics. Moscow, 2013. P. 214–269 (in Russian).
23. Device for simulation of nonlinear models of physical objects: pat. 98987, Ukraine: IPC (2006) G05B 17/00, G06G 7/48. № a201008508; claimed 07.07.10; published 10.07.12, Bull. № 13. 3 p. (in Ukrainian).

24. Babak O.V., Surovtsev I.V., A.E. Tatarinov On the purposefulness of the search of variants models in the modelling of physical processes. *USiM*. 2012. No. 1. P. 3–7.
25. Surovtsev I.V. Transformation of data structure in determining the concentration by methods of inversion chronopotentiometry. *KiVT*. 2015. No. 180. P. 4–14 (in Russian).
26. Surovtsev I.V. Method of digital filtration of electrochemical signals in chronopotentiometry. *KiVT*. 2015. No. 182. P. 4–14 (in Russian).
27. Method for histogram digital filtration of chrono-potentiometric data: pat. 96367, Ukraine: IPC (2006) G01N 27/48. № a201005608; claimed 11.05.10; published 25.10.11, Bull. № 20. 8 p. (in Ukrainian).
28. Surovtsev I.V. Histogram method for electrochemical signal filtration. *Naukovo-tekhnichna informatsiya*. 2016. No. 1. P. 49–54 (in Ukrainian).
29. Inventor's certificate 845600 USSR. Method for determining the spectrum of an analog signal / Skurikhin V.I., Ponomareva I.D., Siversky P.M., Tsepkov G.V.; published 07.07.1981 (in Russian).
30. Ponomareva I.D., Tsepkov G.V. Ultrafast Spectral Analysis. *Probl. upravleniya i informatiki*. 1998. No. 1. P. 107–114 (in Russian).
31. Ponomareva I.D., Surovtsev I.V. Mathematical modelling of the inertial process, which experiences a periodic perturbing effect. *Probl. Bionics*. 1987. Iss. 42. P. 111–114 (in Russian).
32. Surovtsev I.V. The method of adaptive smoothing of electrochemical signals in chronopotentiometry. *USiM*. 2015. No. 5. P. 79–83 (in Russian).
33. Surovtsev I.V., Tatarinov A.E., Galimov S.K. The modelling of the Differential Chronopotentiograms by the Sum of Normal Distributions. *USiM*. 2009. No. 5. P. 40–45 (in Russian).
34. Babak O.V., Surovtsev I.V., Tatarinov A.E. Modelling of the inversion-chronopotentiometric process of measuring the mass concentration of a single heavy metal. *USiM*. 2012. No. 5. P. 88–92 (in Russian).
35. Tatarinov A.E., Surovtsev I.V., Babak O.V. Modelling of the inversion-chronopotentiometric process of joint measurement of the mass concentration of two heavy metals. *USiM*. 2013. No. 5. P. 84–87 (in Russian).
36. Tatarinov A.E., Galimov S.K., Surovtsev I.V., Babak O.V. Estimation of the quality of the modelling of the latent fragment of the differential graph of the chronopotentiogram of the inversion of heavy metals in the liquid sample of the polarograph. *USiM*. 2014. No. 2. P. 10–13 (in Russian).
37. Surovtsev I.V. Modelling of multicomponent signals in chronopotentiometry. *KiVT*. 2016. No. 185. P. 5–21 (in Russian).
38. Kaplan B.Ya. Impulse Polarography. Moscow: Khimiya, 1978. 239 p. (in Russian).
39. Surovtsev I.V., Tatarinov A.E. Information technology for measuring the concentration of chemical elements by the method of impulse chronopotentiometry. *Automatics-2005*. Khar'kov: KhPI, 2005. Vol. 1. P. 42–45 (in Russian).
40. Tatarinov A.E., Surovtsev I.V. Using the methods of impulse chronopotentiometry in measuring the concentration of heavy metals. *Vesnik VPI*. 2006. No. 6 (69). P. 101–105 (in Russian).
41. Device for measurement of concentration of heavy metals: pat. 96375, Ukraine: IPC (2006) G01N 27/48. № a201006798; claimed 02.06.10; published 25.10.11, Bull. № 20. 6 p. (in Ukrainian).
42. Device for measuring the concentration of toxic elements: pat. 107412, Ukraine: IPC (2006) G01N 27/48. № a201306295; claimed 21.05.13; published 25.12.14, Bull. № 24. 4 p. (in Ukrainian).
43. Analog-digital electro-chemical device for measurement of parameters of solutions: pat. 104062, Ukraine: IPC (2006) G01N 27/48. № a201206459; claimed 28.05.12; published 25.12.13, Bull. № 24. 5 p. (in Ukrainian).
44. Device for measuring parameters of aqueous solutions: pat. 111689, Ukraine: IPC (2006) G01N 27/48. № a201505019; claimed 22.05.15; published 25.05.16, Bull. № 10. 6 p. (in Ukrainian).

45. Surovtsev I.V., Galimov S.K. The algorithm for processing the data of concentration measurement using the chrono-ionometry method. *USiM*. 2016. No. 2. P. 85–91 (in Russian).
46. Surovtsev I.V., Babak O.V., Tatarinov O.E., Surovtseva T.V. Hardware and software complex "Analyzer ICP" for measuring the mass concentration of toxic elements. *Nauka ta innovatsiyi*, 2011. Vol. 7. No. 3. P. 45–46 (in Ukrainian).
47. Surovtsev I.V., Tatarinov O.E., Galimov S.K. Device of Inversion Chronopotentiometry for Determining the Concentration of Heavy Metals and Toxic Elements in Water. *Bezpeka zhyttyedyial'nosti*. 2013. No. 12. P. 37–40 (in Ukrainian).
48. Method for determining iron in aqueous solutions: pat. 110752, Ukraine: IPC (2006) G01N 27/48, G01N 33/18, G01N 33/20, G01N 49/00. № a201413328; claimed 12.12.14; published 10.02.16, Bull. № 3. 3 p. (in Ukrainian).
49. Method for the determination of chrome in aqueous solutions: pat. 110893, Ukraine: IPC (2006) G01N 27/48, G01N 33/18, G01N 33/20, C01G 37/00. № a201412936; claimed 03.12.14; published 25.02.16, Bull. № 4. 4 p. (in Ukrainian).
50. Method for iodine determination in aqueous solutions: pat. 111040, Ukraine: IPC (2006) G01N 27/48, G01N 33/18, G01N 33/20, C01B 7/14. № a201501610; claimed 24.02.15; published 10.03.16, Bull. № 5. 4 p. (in Ukrainian).
51. Chronopotentiometric method for determining selenium in water solutions: patent 110744, Ukraine: IPC (2006) G01N 27/48, G01N 33/18, G01N 33/20, C01B 19/00. № № a201408492; claimed 25.07.14; published 10.02.16, Bull. № 3. 4 p. (in Ukrainian).
52. Chronopotentiometric method for the determination manganese in aqueous solutions: pat. 111000, Ukraine: IPC (2006) G01N 27/48, G01N 33/18, G01N 33/20, C01G 45/00. № a201406570; claimed 12.06.14; published 10.03.16, Bull. № 5. 4 p. (in Ukrainian).
53. Method of determination of calcium in aqueous solutions: pat. 113126, Ukraine: IPC (2006) G01N 27/48, G01N 27/49, G01N 33/18, G01N 33/20, C01F 11/00. № a201511155; claimed 13.11.15; published 12.12.16, Bull. № 23. 4 p. (in Ukrainian).
54. Method of determination of sodium in aqueous solutions: pat. 113248, Ukraine: IPC. (2006) G01N 27/48, G01N 27/49, G01N 33/18, G01N 33/20, C01D 13/00. № a201511153; claimed 13.11.15; published 26.12.16, Bull. № 24. 3 p. (in Ukrainian).
55. Method of determining potassium in aqueous solutions: pat. 113356, Ukraine: IPC. (2006) G01N 27/48, G01N 27/49, G01N 33/18, G01N 33/20, C01D 13/00. № a201511153; claimed 13.11.15; published 10.01.17, Bull. № 1. 4 p. (in Ukrainian).
56. Kopilevich V.A., Surovtsev I.V., Galimova V.M., Cossack K.G. Measurement procedure of the mass concentration of mercury, arsenic, nickel and cobalt in water by the inverse chronopotentiometry method: MVV 081/36-0762-11. Kyiv: Nats. un-t biotekhn. i pryrodokorystuvannya, 2011. 23 p. (in Ukrainian).
57. Kopilevich V.A., Surovtsev I.V., Galimova V.M., Cossack K.G. Measurement procedure of the mass concentration of lead, copper, zinc, and cadmium in water by the method of inversion chronopotentiometry: MVV 081/36-0790-11. Kyiv: Nats. un-t biotekhn. i pryrodokorystuvannya, 2011. 21 p. (in Ukrainian).
58. Kopilevich V.A., Surovtsev I.V., Galimova V.M., Cossack K.G. Measurement procedure of the mass concentration of moving forms of heavy metals and toxic elements (Pb, Cu, Zn, Cd, Hg, As, Ni, Co) in soils by the inverse chronopotentiometry method: MVV 081/36-0833-12. Kyiv: Nats. un-t biotekhn. i pryrodokorystuvannya, 2012. 26 p. (in Ukrainian).
59. Kopilevich V.A., Surovtsev I.V., Galimova V.M., Cossack K.G. Measurement procedure of the mass concentration of toxic elements (Se, Mn, Cr, I, Fe) in water by the method of inversion chronopotentiometry: MVV 081/36-0935-14. Kyiv: Nats. un-t biotekhn. i pryrodokorystuvannya, 2014. 25p. (in Ukrainian).
60. Kopilevich V.A., Surovtsev I.V., Galimova V.M. Measurement procedure of the mass concentration of potassium, sodium and calcium in water by chronopotentiometric ionometry method: MVB 081/36-1012-2015. Kyiv: Nats. un-t biotekhn. i pryrodokorystuvannya, 2015. 16 p. (in Ukrainian).

61. Kopilevich V.A., Surovtsev I.V., Galimova V.M. Measurement procedure of the mass concentration of fluorine, ammonia and nitrates in water by chronopotentiometric ionometry method: MB 081/12-1023-2016. Kyiv: Nats. un-t biotekhn. i pryrodokorystuvannya, 2016. 30 p. (in Ukrainian).

Received 12.12.2017

І.В. Суровцев, д-р техн. наук, старш. науч. сотр.

отд. экологических цифровых систем

e-mail: dep175@irtc.org.ua , igorsur52@gmail.com

С.К. Галимов, аспирант

отд. экологических цифровых систем

e-mail: dep175@irtc.org.ua

А.Э. Татарінов, науч. сотр.

отд. экологических цифровых систем

e-mail: dep175@irtc.org.ua

Международный научно-учебный центр информационных

технологий и систем НАН Украины и МОН Украины,

пр. Акад. Глушкова, 40, 03187, г. Киев, Украина

ИНФОРМАЦИОННАЯ ТЕХНОЛОГИЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ КОНЦЕНТРАЦИИ ТОКСИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ В ОБЪЕКТАХ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

Рассмотрена новая информационная технология, которая позволяет увеличить чувствительность и достоверность определения концентрации токсичных элементов методами импульсной инверсионной хронопотенциометрии. Для класса монотонно возрастающих сигналов, которые представляют собой интегральную сумму процессов многокомпонентного измерения, предложено преобразование системы координат, что позволяет анализировать сигнал как сумму компонентов, при этом существенно сокращаются исходные данные без потери полезной информации. Разработаны цифровые методы восстановления полезного сигнала и генеративная модель многокомпонентного сигнала, что увеличивает эффективность обработки данных.

Создана высокочувствительная аналитическая система «Анализатор ИХП», которая определяет массовую концентрацию 14-ти токсичных элементов (ртуть, мышьяк, свинец, кадмий, цинк, медь, олово, никель, кобальт, железо, марганец, селен, йод, хром) с чувствительностью до $0,05 \text{ мкг/дм}^3$, шесть химических элементов и соединений (калий, натрий, кальций, фтор, аммиак, нитраты) с концентрацией до $6 \cdot 10^7 \text{ мкг/дм}^3$. Разработанные инструментальные средства позволили создать новые эффективные информационные технологии обработки сигналов иной физической природы, которые монотонно возрастают либо уменьшаются.

Ключевые слова: преобразование структуры данных, импульсная хронопотенциометрия, моделирование, цифровая обработка, информационная технология.

I.V. Surovtsev, Dr (Engineering), Senior Researcher

Department of ecological digital systems

e-mail: dep175@irtc.org.ua , igorsur52@gmail.com

S.K. Galimov, Postgraduate Student

Department of ecological digital systems

e-mail: dep175@irtc.org.ua

O.E. Tatarinov, Researcher

Department of ecological digital systems

e-mail: dep175@irtc.org.ua

International Research and Training Center for Information Technologies

and Systems of the National Academy of Sciences of Ukraine

and Ministry of Education and Science of Ukraine,

Acad. Glushkov av., 40, Kiev, 03187, Ukraine

INFORMATION TECHNOLOGY FOR DETERMINING THE CONCENTRATION OF TOXIC ELEMENTS IN ENVIRONMENTAL OBJECTS

Introduction. *Insufficient sensitivity of the existing systems of measuring low concentrations of chemical elements during the implementation of quality control of drinking water, food products and other natural objects, as well as the lack of necessary means for digital processing of weak signals of complex form, leads to the task of developing an effective information technology for determining the concentration of toxic elements.*

The purpose of the article is to develop tools for information technology for determining the concentration of toxic elements. *New methods of impulse inversion chronopotentiometry and ionometry to increase the sensitivity, reliability and functionality of the concentration measurement are used.*

Methods. *Transformation of data structure of the multi-component processes and new methods of a filtration and smoothing which are based on use of points of extremum and inflexion are applied at performance of digital processing of measurement signals. The transformation allows us to consider monotonically increasing signals of inversion as a linear sum of components, which are described by non symmetric functions of normal distribution. The received signal is simulated by solving the parametric identification problem in the class of one-dimensional regression models.*

Results. *The developed highly sensitive analytical system "Analyzer ICP" implements the created information technology. The system determines the mass concentration of 14 toxic elements (mercury, arsenic, lead, cadmium, zinc, copper, tin, nickel, cobalt, iron, manganese, selenium, iodine and chromium) with a sensitivity of up to $0.05 \mu\text{g}/\text{dm}^3$ (50 ppt) and six chemical elements (potassium, sodium, calcium, fluorine, ammonium and nitrates) in the range of $10^3 \mu\text{g}/\text{dm}^3$ to $6 \cdot 10^7 \mu\text{g}/\text{dm}^3$ using ion-selective electrodes.*

Conclusion. *Information technology has an universal character, created tools can be used to analyze signals of various physical natures, in which the values are monotonically increasing or decreasing.*

Keywords: *transformation of the data structure, impulse chronopotentiometry, modelling, digital processing, information technology.*