

А.Э. Татарinov, И.В. Суровцев, О.В. Бабак

Моделирование инверсионно-хронопотенциометрического процесса совместного измерения массовой концентрации двух тяжелых металлов

Рассмотрено моделирование процесса совместного измерения концентрации двух тяжелых металлов методом инверсионной хронопотенциометрии. Предложен алгоритм моделирования кривой интенсивности инверсии для двух тяжелых металлов с частично перекрывающимися диапазонами потенциалов инверсии измеряемых металлов.

Some issues of modeling the process of simultaneous measuring the concentrations of two heavy metals by method of inversion chronopotentiometry are considered in the article. The algorithm of modelling the intensity inversion curve of two heavy metals with overlapping partly ranges of inversion potential of the measured metals is proposed.

Розглянуто моделювання процесу спільного вимірювання концентрації важких металів методом інверсійної хронопотенціометрії. Запропоновано алгоритм моделювання кривої інтенсивності інверсії для двох важких металів з діапазонами потенціалів інверсії вимірюваних металів, які частково перекриваються.

Введение. Прогрессирующий процесс загрязнения окружающей среды тяжелыми металлами пагубно влияет на состояние воды, почвы, воздуха и, следовательно, на здоровье людей. Поэтому измерение массовой концентрации тяжелых металлов в объектах окружающей среды – актуальная задача. Одним из перспективных направлений ее решения есть полярографические методы и, в частности метод, связанный с анализом графиков дифференциальных хронопотенциограмм, имеющих вид «колоколообразных» функций [1, 2]. Как показано в [3], наиболее удобная при их моделировании – функция «гауссовой» кривой

$$y = Y \exp(-a^2 x^2), \quad (1)$$

где Y – максимальное (пиковое) значение функции, a – некоторый параметр.

При этом рассматривался наиболее простой случай моделирования инверсионно-хронопотенциометрического процесса измерения массовой концентрации отдельно взятого тяжелого металла. Однако в реальных условиях эта задача часто значительно усложняется тем, что в пробе присутствует не один, а, например, два металла, причем явно выраженной границы между их интенсивностью инверсии может не существовать. Именно такой сложный случай моделирования процесса совместного измерения массовой концентрации двух тяжелых ме-

таллов рассмотрен в статье. На рис. 1 схематически представлена сплошной линией кривая интенсивности инверсии двух тяжелых металлов 1 и 2 – $\frac{dt}{d\varphi} = f_u(\varphi)$ (t – время инверсии, φ – потенциал инверсии), диапазоны потенциалов инверсии которых перекрываются.

Постановка задачи

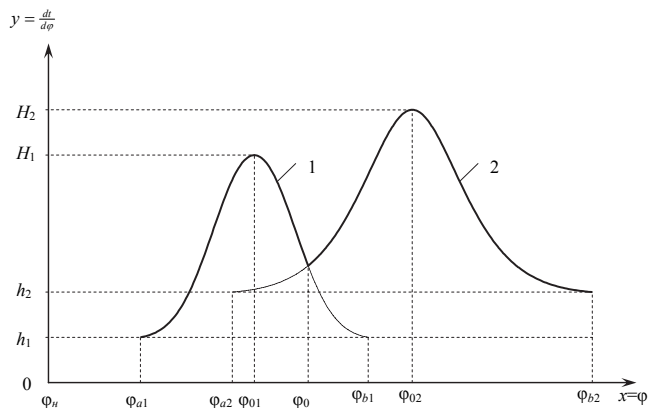
Известна кривая интенсивности инверсии двух тяжелых металлов, содержащихся в пробе, диапазоны потенциалов инверсии которых перекрываются. Требуется разработать алгоритм моделирования кривой интенсивности инверсии с учетом ее скрытых фрагментов, являющихся следствием перекрытия диапазонов потенциалов инверсии рассматриваемых тяжелых металлов.

Решение задачи

Оно может быть получено на основе следующих допущений (см. рисунок).

Допущение 1. Перекрытие диапазонов потенциалов инверсии двух тяжелых металлов не изменяет характер процесса инверсии каждого из них, поскольку эти процессы накладываются друг на друга.

Таким образом, продолжением кривых интенсивности инверсии каждого металла (сплошные линии) будут подобные кривые интенсивности инверсии, обозначенные пунктирными линиями.



Рисунок

Зависимости $\frac{dt}{d\varphi} = f_u(\varphi)$ (кривые 1 и 2, соответственно, кривые интенсивности инверсии тяжелых металлов 1 и 2 в пробе), где φ_a – начальное значение потенциала инверсии; $[\varphi_{a1}, \varphi_{b1}]$ и $[\varphi_{a2}, \varphi_{b2}]$ – соответственно диапазон потенциалов инверсии тяжелых металлов 1 и 2.

Допущение 2. Стороны кривых интенсивности инверсии каждого тяжелого металла несимметричны относительно друг друга, однако смещение двух известных концов каждой кривой относительно оси ординат будет одинаковым.

Таким образом, для видимых и невидимых концов кривых 1 и 2 смещение равно h_1 и h_2 соответственно.

Учитывая приведенные допущения, решение задачи состоит в следующем.

Напомним, что анализ хронопотенциограммы заключается в определении площади под графиком кривых 1 и 2 [2, 3], поскольку последняя, соответствующая времени инверсии t , прямо пропорциональна массовой концентрации исследуемого тяжелого металла. Отметим, что вследствие того, что указанные кривые смещены относительно оси ординат, площади под их графиками, соответствующие смещению, должны вычитаться.

Поскольку кривые 1 и 2 вместе с их скрытыми продолжениями могут быть представлены в табличном виде, площади под ними следует искать, используя приближенные методы интегрирования (например, с помощью формулы трапеций).

В формализованном виде решение задачи поэтапно заключается в следующем.

Примечание. В дальнейшем изложении вместо первый (второй) тяжелый металл будем пользоваться обозначением первый (второй) элемент. При этом под выражением $f_{u1}(\varphi)$ и $f_{u2}(\varphi)$ подразумеваем задание функции кривой интенсивности инверсии первого (второго) элемента в табличном виде.

Для определения времени инверсии, соответствующего левой стороне графика кривой интенсивности инверсии первого элемента t'_1 , используем соотношение

$$t'_1 = \int_{\varphi_{a1}}^{\varphi_{01}} f'_{u1}(\varphi) d\varphi - (h_1 \cdot (\varphi_{01} - \varphi_{a1})).$$

Для того чтобы получить прогнозируемые табличные данные скрытой части правой стороны указанного графика, используем табличные данные ее открытого фрагмента. С помощью выражения (1) находим параметр

$$\bar{a}_1^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{\ln(H_1 - h_1) - \ln y_i}{c_i^2},$$

где $c_i^2 = (x_i - x_{01})$, n – число точек. Затем получаем недостающие прогнозируемые табличные данные. После чего определяем время инверсии соответствующего правой стороне графика кривой интенсивности инверсии первого элемента – t''_1

$$t''_1 = \int_{\varphi_{01}}^{\varphi_{b1}} f''_{u1}(\varphi) d\varphi - (h_1 \cdot (\varphi_{b1} - \varphi_{01})).$$

В результате полное время инверсии первого элемента равно

$$t_1 = t'_1 + t''_1.$$

Для получения прогнозируемых табличных данных скрытой части левой стороны графика кривой интенсивности инверсии второго элемента – t'_2 с помощью выражения (1) находим параметр

$$\bar{a}_2^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{\ln(H_2 - h_2) - \ln y_i}{c_i^2},$$

где $c_i = (x_i - x_{02})$.

После получения недостающих прогнозируемых табличных данных находим время инверсии, соответствующее левой стороне указанного графика (рис. 1)

$$t'_2 = \int_{\varphi_{a2}}^{\varphi_{02}} f'_{u2}(\varphi) d\varphi - (h_2 \cdot (\varphi_{02} - \varphi_{a2})).$$

Для определения времени инверсии, соответствующего правой стороне графика, используем соотношение

$$t''_2 = \int_{\varphi_{02}}^{\varphi_{b2}} f''_{u2}(\varphi) d\varphi - (h_2 \cdot (\varphi_{b2} - \varphi_{02})).$$

Тогда полное время инверсии второго элемента равно $t_2 = t'_2 + t''_2$.

Все сказанное целесообразно обобщить в виде следующего алгоритма построения модели.

Алгоритм. Опуская второстепенные детали, укажем наиболее важные его этапы.

Этап 1. Находим потенциал пика интенсивности инверсии первого элемента φ_{01} , устанавливаем тип элемента и диапазон потенциалов его инверсии $[\varphi_{a1}, \varphi_{b1}]$.

Этап 2. Определяем величину $(H_1 - h_1)$.

Этап 3. Устанавливаем время $1 t'_1$ путем приближенного интегрирования по данным фрагмента кривой интенсивности инверсии первого элемента в пределах $[\varphi_{a1}, \varphi_{01}]$.

Этап 4. По данным для ординат y в пределах $[\varphi_{01}, \varphi_0]$ находим параметр \bar{a}_1^2 фрагмента «гауссовой» кривой.

Этап 5. С помощью функции «гауссовой» кривой с найденным параметром \bar{a}_1^2 осуществляем экстраполирование вперед с целью определения ординат указанной кривой в пределах $[\varphi_{01}, \varphi_{b1}]$.

Этап 6. Устанавливаем время t''_1 путем приближенного интегрирования фрагмента кривой интенсивности инверсии первого элемента в пределах $[\varphi_{01}, \varphi_{b1}]$.

Этап 7. Определяем полное время инверсии первого элемента $t_1 = t'_1 + t''_1$.

Этап 8. Находим потенциал пика интенсивности инверсии второго элемента φ_{02} , устанавливаем

тип элемента и диапазон потенциалов его инверсии $[\varphi_{a2}, \varphi_{b2}]$.

Этап 9. Определяем величину $(H_2 - h_2)$.

Этап 10. По данным для ординат y в пределах $[\varphi_0, \varphi_{02}]$ находим параметр \bar{a}_2^2 фрагмента гауссовой кривой.

Этап 11. С помощью функции гауссовой кривой с найденным параметром \bar{a}_2^2 осуществляем экстраполирование назад с целью определения ординат указанной кривой в пределах $[\varphi_{a2}, \varphi_0]$.

Этап 12. Устанавливаем время t'_2 путем приближенного интегрирования фрагмента кривой интенсивности инверсии второго элемента в пределах $[\varphi_{a2}, \varphi_{02}]$.

Этап 13. Устанавливаем время t''_2 путем приближенного интегрирования по данным фрагмента кривой интенсивности инверсии второго элемента в пределах $[\varphi_{02}, \varphi_{b2}]$.

Этап 14. Находим полное время инверсии второго элемента $t_2 = t'_2 + t''_2$.

Заключение. Таким образом, получен приближенный алгоритм моделирования инверсионно-хронопотенциометрического процесса совместного измерения массовой концентрации двух тяжелых металлов. Рассматривался часто встречающийся случай, когда диапазоны «соседних» элементов частично перекрываются. Вполне естественно, что такая задача может быть решена неточно только при определенных допущениях и по существу можно лишь оценить измеряемое значение массовой концентрации. Очевидно, что предлагаемый подход к построению алгоритма не универсален, так как из-за многообразия случаев возможны другие пути поиска приемлемого решения. Поэтому в статье авторы стремились показать только то, что нужно делать, оставляя фактически в стороне практически важную часть вопроса: как это сделать в каждом конкретном случае.

1. *Інверсійно-хронопотенціометричне визначення важких металів в об'єктах навколишнього середовища /*

- О.І. Карнаухов, О.М. Полумбрик, А.Т. Безніс та ін. // Наук.-методич. розробка. – К.: УГУПТ, 1997. – 88 с.
2. Суровцев И.В., Татаринов А.Э., Галимов С.К. Моделирование дифференциальной хронопотенциограммы суммой нормальных распределений // УСиМ. – 2009. – № 5. – С. 40–45.
3. Суровцев И.В., Бабак О.В., Татаринов А.Э. Моделирование инверсионно-хронопотенциометрического

процесса измерения массовой концентрации отдельно взятого тяжелого металла // Там же. – 2012. – № 5. – С. 88–92.

Поступила 25.03.2012

Тел. для справок: +38 044 526-4187 (Киев)

E-mail: dep175@irtc.org.ua

© А.Э. Татаринов, И.В. Суровцев, О.В. Бабак, 2013

Правила подготовки материалов

К рассмотрению принимаются не опубликованные ранее работы по тематике, приведенной на второй странице обложки журнала. Все статьи рецензируются. Решение редколлегии по содержанию каждого номера журнала утверждается ученым советом МНУЦИТиС. Одобренные к печати материалы редактируются. В случае отклонения рукописи один экземпляр и рецензия возвращаются автору. В одном номере журнала публикуется только одна статья автора, в том числе и в соавторстве.

В редакцию необходимо представить:

1. Рукопись (2 экз.), напечатанную через два интервала, объемом не более 16 страниц, на одной стороне листа формата А4 (кегель 12). Один экземпляр должен быть подписан автором(ами).
2. Аннотацию (2 экз.), напечатанную на отдельной странице (до 5 строк), с указанием фамилии автора(ов) и названия статьи **на русском, украинском и английском языках**; через два интервала.
3. Сопроводительное письмо организации за подписью руководителя.
4. Дискету 3,5" с текстом статьи, аннотацией и иллюстрациями.
5. Сведения об авторе(ах) – фамилия, имя, отчество, ученая степень, место работы, должность, адрес, телефон, факс, e-mail.
6. Копию квитанции о подписке на журнал УСиМ (не менее чем на полгода).

В начале статьи необходимо указать индекс УДК. Используемая литература приводится общим списком в конце статьи в порядке упоминания. Графики, рисунки и таблицы с подписями должны быть распечатаны на отдельных страницах.

Для подготовки текста на дискете необходимо использовать редактор *Microsoft Word* любой версии (шрифт *Times New Roman*; кегель 12, интервал двойной; отступ 1 см.), для набора формул – редактор *Microsoft Equation Editor v. 2.0/3.0* из состава *Microsoft Office*. Иллюстрации могут быть выполнены в любом графическом редакторе.

Материалы можно высылать электронной почтой (по адресу gor15@yandex.ru) с обязательным дублированием на бумаге в двух экземплярах или почтой (простое письмо).

В соответствии с постановлением президиума ВАК Украины от 15.01.2003 г. № 7-05/1 «Про підвищення вимог до фахових видань, внесених до переліків ВАК України» статьи, принимаемые к опубликованию, должны состоять из следующих элементов:

- постановка проблемы и ее связь с научными или практическими заданиями;
- анализ последних исследований и публикаций (где начато разрешение данной проблемы), на которые опирается автор;
- выделение неразрешенной части общей проблемы, чему посвящена предлагаемая статья;
- формулировка цели статьи (постановка задачи);
- изложение основного материала исследований с полным обоснованием полученных научных результатов;
- выводы из данного исследования и перспективы дальнейших разработок в данном направлении.

Редакция обращается с просьбой к авторам, желающим опубликовать статью в нашем журнале на украинском или английском языке, прилагать к направляемым материалам русский аналогичный вариант текста.

Редакція