

<https://doi.org/10.15407/csc.2024.04.061>

УДК 004.942

І.В. СУРОВЦЕВ, д.т.н., старший наук. співробітник, відділ цифрових систем екологічного моніторингу, Міжнародний науково-навчальний центр інформаційних технологій і систем НАН та МОН України, просп. Академіка Глушкова, 40, Київ, Україна, 03187, ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-1133-6207>, igorsur52@gmail.com

В.С. СТЕПАШКО, д.т.н., професор, відділ інформаційних технологій індуктивного моделювання, Міжнародний науково-навчальний центр інформаційних технологій і систем НАН та МОН України, просп. Академіка Глушкова, 40, Київ, Україна, 03187, ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-7882-3208>, stepashko@irtc.org.ua

Є.А. САВЧЕНКО-СИНЯКОВА, к.т.н., ст. науковий співробітник, пров. науковий співробітник, відділ інформаційних технологій індуктивного моделювання, Міжнародний науково-навчальний центр інформаційних технологій і систем НАН та МОН України, просп. Академіка Глушкова, 40, Київ, Україна, 03187, ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-4851-9664>, savchenko_e@meta.ua

О.Г. МОРОЗ, к.т.н., ст. дослідник, відділ інформаційних технологій індуктивного моделювання, Міжнародний науково-навчальний центр інформаційних технологій і систем НАН та МОН України, просп. Академіка Глушкова, 40, Київ, Україна, 03187, ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-0356-8780>, olhahryhmoroz@gmail.com

В.М. ГАЛІМОВА, к.х.н., доцент, кафедра аналітичної та неорганічної хімії і якості води, Національний університет біоресурсів та природокористування України, вул. Героїв Оборони, 17, Київ, Україна, 03041 ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-9602-1006>, galimova2201@gmail.com

ПОБУДОВА МОДЕЛІ БАЗОВОЇ ЛІНІЇ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ СИГНАЛІВ ВИМІРЮВАННЯ

У статті виконано дослідження задачі побудови моделі базової лінії для багатокомпонентного сигналу інтенсивності інверсійної хронопотенціометрії. Така модель надасть можливість оцінювати концентрацію різних хімічних елементів, розчинених у воді. Для її ідентифікації запропоновано побудову функції апроксимації нижньої огинаючої лінії диференціального сигналу в різних класах базових функцій із використанням МГУА за реальними значеннями концентрації Zn за присутності іонів Cd , Pb та Cu . Побудовано модель оптимальної складності, яка є необхідною для очищення сигналу інтенсивності від фону для отримання спектра інтенсивності вимірюваних хімічних елементів.

Ключові слова: ідентифікація, моделювання, базова крива, нижня огинаюча, диференціальний сигнал, сигнал інтенсивності, концентрація токсичних елементів, моніторинг, метод найменших квадратів, МГУА.

Cite: Суровцев І.В., Степашко В.С., Савченко-Синякова Є.А., Мороз О.Г., Галімова В.М. Побудова моделі базової лінії диференціальних сигналів вимірювання. *Control Systems and Computers*, 2024, 4, 61—68. <https://doi.org/10.15407/csc.2024.04.061>

© Видавець ВД «Академперіодика» НАН України, 2024. Стаття опублікована на умовах відкритого доступу за ліцензією CC BY-NC-ND (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>)

Вступ

Для вирішення питання забруднення питної води важкими металами, треба забезпечити постійний моніторинг якості води, що дозволить визначати концентрацію в ній токсичних елементів.

Для визначення концентрацій іонів різних металів у воді серед інших методів успішно використовуються електрохімічні методи інверсної хронопотенціометрії. У цих методах сигнал про зміну часу потенціалу виділення токсичних іонів у розчин перетворюється на сигнал про зміну інтенсивності виходу іонів залежно від значень потенціалу. Однак це породжує проблему обробки сигналу інтенсивності.

Необхідно виокремити корисну складову сигналу, що містить інформацію про невідомі концентрації вимірюваних елементів, на фоні суміші різних сигналів елементів, присутніх в фоновому розчині. Для цього запропоновано метод побудови базової моделі, за якою можна відокремити диференціальний сигнал інверсії хімічних елементів у воді від фонового сигналу присутніх у воді домішок. Завдяки цьому в чистому вигляді формується спектр багатокomпонентного сигналу інтенсивності, аналіз якого дає змогу досить точно оцінити невідомі концентрації суміші цих розчинених елементів.

Метою дослідження є розробка методу побудови функції апроксимації нижньої огинаючої сигналу інтенсивності фону в різних класах базових функцій з використанням МГУА в задачі визначення концентрацій хімічних елементів у багатокomпонентних сигналах при вимірюванні екологічного стану об'єктів довкілля за допомогою електрохімічних методів інверсійної хронопотенціометрії.

Задача визначення концентрації хімічних елементів

Сучасні системи вимірювання концентрації хімічних елементів мають недостатню чутливість, а це вимагає використання високочутливих електрохімічних методів дослідження. Такими методами можуть бути диференційні методи інверсійної хронопотенціометрії (ІХП)

[1—3]. Їх використання порівняно з іншими методами уможливило значне підвищення чутливості, повторюваності та достовірності вимірювань концентрації хімічних елементів.

Застосування методів математичного моделювання для аналізу результатів вимірювань дає змогу підвищити ефективність обробки слабких аналітичних сигналів з метою визначення мікроконцентрацій токсичних елементів у різноманітних об'єктах навколишнього середовища [4—7].

Основними аналітичними функціями методу ІХП є час інверсії елемента, який за стандартизованих умов концентрації та вимірювання є прямо-пропорційним концентрації іонів у розчині, а також відповідає пікам і діапазону потенціалів інверсії і є якісною характеристикою елемента [8—10].

Принцип дії методів ІХП полягає в електрохімічному концентруванні іонів хімічних елементів із досліджуваного розчину на індикаторному електроді. Аналітичною характеристикою методу є час інверсії елемента, який за стандартизованих умов концентрації та інверсії є прямо-пропорційним концентрації іонів у розчині, якісними також є піковий потенціал та діапазон зміни потенціалів інверсії елемента.

Вимірюваний монотонно зростаючий сигнал $e(t)$ за методом ІХП є інтегральною сумою інверсійних вимірювань окремих хімічних елементів. Процес інверсії кожного елемента виконується послідовно в його діапазоні потенціалів відповідно до збільшення значення стандартного електродного потенціалу в послідовності впливу на активність металу. Найефективнішим підходом до аналізу таких даних є використання диференційного сигналу або сигналу інтенсивності в координатах $(dt/de, e)$, що дає змогу розглядати інтегральний аналітичний сигнал як суму складових, що відповідають інверсіям окремих хімічних елементів.

Проблема формування та аналізу сигналу інтенсивності

На рис. 1 показано вимірюваний сигнал як зміну потенціалу інверсії e в часі t для 4 важких ме-

талів в аналізованому розчині для прикладу вимірювання концентрацій хімічного елемента Zn за присутності іонів Cd , Pb та Cu .

Вимірювані сигнали аналітичної інверсії майже завжди спотворено адитивним випадковим шумом, який має чітко виражений високочастотний характер. Перед визначенням сигналу інтенсивності виконується високочастотна фільтрація вхідних сигналів аналітичної інверсії та зміна системи координат, у якій сигнал $e(t)$ перетворюється на сигнал $t(e)$ з постійним кроком відліку потенціалу $\Delta e = 1$ мВ. Оскільки сигнали аналітичної інверсії завжди зростають монотонно, ми можемо перетворити сигнал $e(t) \rightarrow t(e)$.

Диференціювання відфільтрованого сигналу інверсії дозволяє отримати сигнал інтенсивності $DT(e)$, який розраховується як різниця амплітуд $dt/de = t_i - t_{i-1}$. Результуючий графік інтенсивності $DT(e)$ показаний на рис. 2, де перший лівий пік у сигналах $DT(e)$ відповідає компоненту Zn , наступні піки — компонентам Cd , Pb і Cu . Діапазони зміни потенціалів інверсії стандартні і відомі для кожного хімічного елемента.

Фізично сигнали інверсії є сумою двох хімічних процесів у часі: ємнісного фоновому розряду електродів $G_0(e)$ та інверсії хімічних елементів $G_j(e)$. Диференціально перетворений сигнал інверсії (сигнал інтенсивності на рис. 2) може бути виражений як сума двох сигналів: кривої фоновому розряду електродів (базова лінія або нижня огинаюча сигналу інтенсивності та спектру компонентів інверсії хімічних елементів.

Загальна математична модель сигналу інтенсивності $DT(e)$ дає змогу визначити базовий сигнал $G_0(e)$ та сигнали компонентів інверсії хімічних елементів $G_j(e)$, що уможлиблює точніший розрахунок значення часу інверсії та, відповідно, значення концентрації хімічних елементів.

Задача побудови моделі нижньої огинаючої сигналу інтенсивності

Розглянемо задачу побудови апроксимаційної функції $D_{sub} = f(e)$ (суцільна крива на рис. 2), яка

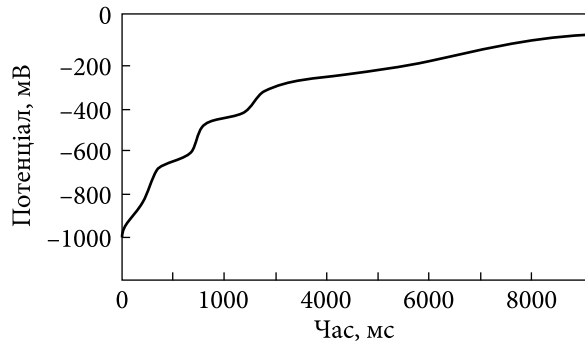


Рис. 1. Виміряний сигнал зміни потенціалів інверсії у часі

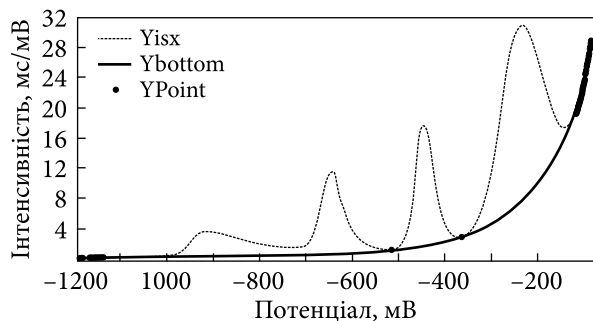


Рис. 2. Сигнал інтенсивності при вимірюванні концентрації Zn

є базовою (фоновною) функцією для сигналу інтенсивності. На цій кривій виділено жирним шрифтом точки, визначені програмно за умови, що значення кривої інтенсивності лежать строго вище цих точок, тобто пунктирна крива є нижньою огинаючою кривою сигналу інтенсивності, або функцією, дотичною до цієї кривої знизу. Ці виділені точки складають вибірку даних $W = (X, Y)$, на основі якої має бути побудована функція $D_{sub} = f(e)$, де $X = (e_1, e_2, \dots, e_n)^T$, $Y = (d_1, d_2, \dots, d_n)^T$, n — кількість виділених точок, e_i та d_i — значення потенціалу e та похідної $DT(e)$ у цих точках, тобто $f(P)$ є невідомою нелінійною функцією одного аргумента.

Візуально функція $D_{sub} = f(e)$ схожа на експоненціальну криву, але може бути довільною нелінійною функцією. Задача полягає в тому, щоб знайти функцію оптимальної складності, яка проходить через усі виділені точки n з мінімальною помилкою (бажано нульовою).

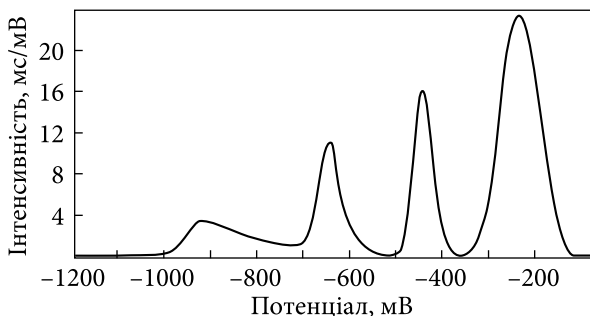


Рис. 3. Спектр сигналу інтенсивності без фону

У [3] пропонується знайти функцію $L_{sub} = \ln D_{sub} = f(P)$, тоді шукана крива на рис. 2 фактично матиме вигляд експоненти $D_{sub} = \exp(L_{sub})$. Отже, можна шукати і безпосередньо функцію $D_{sub} = f(P)$ у невідомому класі функцій, зокрема поліноми, і $L_{sub} = f(P)$ також у невідомому класі, зокрема поліномів.

У [3] ця крива $L_{sub} = f(P)$ апроксимується кусково-лінійною функцією на графіку значень нижньої обвідної $\ln DT(e)$, тобто у вибірці W значення Y змінюються на $Y' = (\ln d_1, \ln d_2, \dots, \ln d_n)^T$, і відповідно крива на рис. 2 виглядатиме як фрагменти експонент виду $D_{sub} = \exp(ax + b)$. Це загалом незручно, тому бажано знайти одну функцію $D_{sub} = f(e)$, яка апроксимує всі вибрані точки.

Після побудови функції $D_{sub} = f(e)$ її значення у всіх точках потенціалів e віднімають від значень вимірюваного сигналу інтенсивності $DT(e)$ та отримують спектр очищеного від фону сигналу інтенсивності (рис. 3), за яким визначається площа під кожним піком на кривій (піки апроксимовані в [3] функцією розподілу Гауса), і кожна з таких площ є пропорційною до концентрації відповідного хімічного елемента, наприклад, важкого металу.

Розглянемо підхід до побудови моделей нижньої огинаючої на основі МГУА, а саме алгоритму COMBI-GA.

Підхід до побудови моделі нижньої огинаючої за допомогою COMBI-GA

За допомогою алгоритму COMBI-GA [11, 12] порівнюємо точність побудови функції апрок-

симації нижньої обвідної $D_{sub} = f(e)$ (рис. 2), або $y = f(x)$, у наступних класах лінійних за параметрами базових функцій:

C1: нелінійний поліном, аргументи $\{1, x, x^2, \dots, x^7\}$;

C2: сума обернених аргументів $\{1, 1/x, 1/x^2, \dots, 1/x^7\}$;

C3: комбінація двох попередніх класів C1 і C2.

У цьому разі слід шукати формулу мінімальної складності (і за кількістю аргументів, і за значеннями прямих і обернених степенів), яка забезпечує опуклу (строго вигнуту донизу) апроксимаційну функцію, і водночас таку, що проходить через усі точки вибірки W з достатньою точністю. Результати супроводжуються графіками проходження апроксимаційної кривої через усі точки (позначені жирним шрифтом на рис. 2) вибірки W без кривих інтенсивності сигналу. Оскільки потенціал e як аргумент x змінюється від -1200 до 0 , ці значення було масштабовано за допомогою ділення на 1000 , щоб значення аргумента у великих степенях не були занадто великими або малими.

Алгоритм COMBI-GA, який використовується тут для побудови найкращого наближення базової лінії, засновано на частковому генетичному пошуку найкращої моделі.

Початкова вибірка даних поділялася на навчальну та перевірку в пропорції 3:2.

Результати моделювання

Оптимальна модель, побудована в класі C1, має вигляд:

$$y(C1) = 1,03x^2 - 0,02x^6; \quad AR = 0,2; \\ MAPE = 11,4\%; \quad R^2 = 0,9992.$$

де AR — значення критерію регулярності, $MAPE$ та R^2 — стандартні характеристики середньої абсолютної відсоткової помилки та коефіцієнта детермінації.

Для класу C2 найкраща модель має таку форму:

$$y(C2) = 0,96x^{-2} + 0,002x^{-4}; \quad AR = 0,03; \\ MAPE = 1,89\%; \quad R^2 = 0,9995.$$

На рис. 4 наведено модельні та реальні значення функції в класі C2, вони демонструють якість апроксимації.

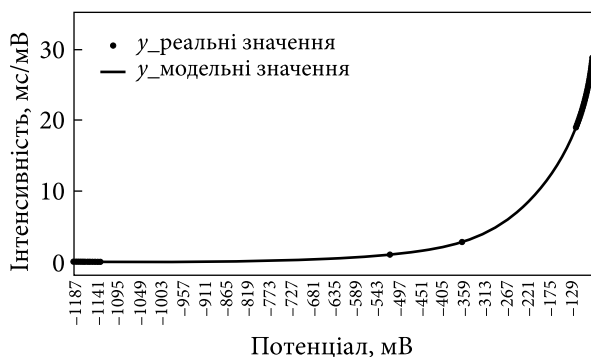


Рис. 4. Функція найкращого наближення в класі C2

У комбінованому класі C3 було обрано таку найкращу модель:

$$y(C3) = 1.0071 x^2 + 0.0913 x^5 - 0,098 x^{-6};$$

$$AR = 0.4; MAPE = 10,7; R^2 = 0,9984.$$

Порівнюючи ці результати, модель, побудовану в класі C2, можна рекомендувати для використання в задачі побудови базової лінії диференціального сигналу, оскільки вона має кращі значення характеристик, зокрема MAPE.

Висновки

У статті застосовано підхід на основі GMDH-GA до розв'язання задачі побудови функції опису

базової лінії диференціального сигналу інверсії для ідентифікації концентрацій хімічних елементів у багатокомпонентних сигналах при моніторингу екологічного стану об'єктів довкілля електрохімічними методами інверсної хронопотенціометрії. Цей підхід базується на порівнянні результатів побудови моделей у трьох різних класах лінійних за параметрами базових функцій та виборі найкращої моделі.

Розроблений підхід використано для побудови найкращої моделі базової лінії диференціального сигналу інверсії на реальному прикладі вимірювання концентрації Zn за присутності іонів Cd, Pb та Cu.

У всіх трьох класах знайдено прийнятну модель. Побудована оптимальна модель являє собою суму аргументів аргументів у обернених степенях, яка необхідна для очищення сигналу інтенсивності від фону для отримання спектру інтенсивності вимірюваних хімічних елементів.

Дослідження виконано за грантової підтримки Національного фонду досліджень України в рамках проекту «Переносний програмно-апаратний комплекс швидкого визначення токсичних речовин у водних об'єктах, забруднених внаслідок воєнних дій» (реєстраційний номер 2023.04/0128), що реалізуються за конкурсом «Наука для зміцнення обороноздатності України».

ЛІТЕРАТУРА

1. Qian W.U., Hong-Mei B.I., Xiao-Jun H.A.N. Research progress of electrochemical detection of heavy metal ions. Chinese Journal of Analytical Chemistry, 2021, 49(3), pp. 330–340. URL: [https://doi.org/10.1016/S1872-2040\(21\)60083-X](https://doi.org/10.1016/S1872-2040(21)60083-X)
2. Pinheiro J.P., Galceran J., Rotureau E., Companys E., Puy J. Full wave analysis of stripping chronopotentiometry at scanned deposition potential (SSCP): Obtaining binding curves in labile heterogeneous macromolecular systems for any metal-to-ligand ratio. J. Electroanal. Chem. 2020, 873, 114436, URL: <https://doi.org/10.1016/j.jelechem.2020.114436>
3. Surovtsev I.V., Sieriebriakov A.K. Method of elements identification in the multicomponent signal. Control Systems and Computers. 2023. №. 2. С. 19–26. URL: <https://doi.org/10.15407/csc.2023.02.019>
4. Hassan M.H., Khan R., Andreescu S. Advances in electrochemical detection methods for measuring contaminants of emerging concerns. Electrochemical Science Advances, 2021, 2 (6), URL: <https://doi.org/10.1002/elsa.202100184e2100184>
5. Pinheiro J.P., Rotureau E. Electroanalytical trace metal cations quantification and speciation in freshwaters: historical overview, critical review of the last five years and road map for developing dynamic speciation field measurements, Molecules, 2023, 28 (6), 2831, URL: <https://doi.org/10.3390/molecules28062831>
6. Hackel L., Rotureau E., Morrin A., Pinheiro J.P. Developing On-Site Trace Level Speciation of Lead, Cadmium and Zinc by Stripping Chronopotentiometry (SCP): Fast Screening and Quantification of Total Metal Concentrations. Molecules, 2021, 26, 5502, URL: <https://doi.org/10.3390/molecules26185502>

7. Rotureau E., Rocha L.S., Goveia D., Alves N.G., Pinheiro J.P. Investigating the Binding Heterogeneity of Trace Metal Cations With SiO₂ Nanoparticles Using FullWave Analysis of Stripping Chronopotentiometry at Scanned Deposition Potential. *Front. Chem.* 2020, 8, 614574, URL: <https://doi.org/10.3389/fchem.2020.614574>
8. Mourya, A., Mazumdar, B., Sinha, S.K., 2019. «Determination and quantification of heavy metal ions by electrochemical method». *J. Environ. Chem. Eng.*, 7 (6), DOI: 10. 016/j.jece.2019.103459.
9. Wu, Q., Bi, H.-M., Han, X.-J., 2021. «Research progress of electrochemical detection of heavy metal ions». *Chinese Journal of Analytical Chemistry*, 49(3), pp. 330–340. DOI: 10.1016/S1872-2040(21)60083-X.
10. Sokolkov, S.V., 2022. «Evolution of the analytical signal in electrochemistry from electrocapillary curve to a digital electrochemical pattern of a multicomponent sample». *Electrochemical Science Advances*, V. 3, no. 3, DOI: 10.1002/elsa.202100212.
11. Moroz O. COMBI-GA sorting-out algorithm with evolutionary complication of models. *The XII IEEE International Conference CSIT-2017 & International Workshop on Inductive Modeling*. Lviv: Publisher “Vezha&Co”, 2017. P. 492–495.
12. Мороз О.Г. Побудова авторегресійних моделей на основі комбінаторно-генетичного алгоритму. Індуктивне моделювання складних систем: 36. наук. пр. К.: МННЦ ІТС НАН та МОН України, 2019. Вип. 11. С. 53–60.

Надійшла 01.10.2024

REFERENCES

1. Qian, W.U., Hong-Mei B.I., Xiao-Jun H.A.N. (2021). «Research progress of electrochemical detection of heavy metal ions». *Chinese Journal of Analytical Chemistry*, 49(3), pp. 330–340. DOI: [https://doi.org/10.1016/S1872-2040\(21\)60083-X](https://doi.org/10.1016/S1872-2040(21)60083-X)
2. Pinheiro, J.P., Galceran, J., Rotureau, E., Companys, E., Puy, J. (2020). «Full wave analysis of stripping chronopotentiometry at scanned deposition potential (SSCP): Obtaining binding curves in labile heterogeneous macromolecular systems for any metal-to-ligand ratio». *J. Electroanal. Chem.*, 873, 114436, URL: <https://doi.org/10.1016/j.jelechem.2020.114436>
3. Surovtsev, I.V., Sieriebriakov, A.K. (2023). «Method of elements identification in the multicomponent signal». *Control Systems and Computers*. no 2, pp. 19–26. DOI: <https://doi.org/10.15407/csc.2023.02.019>
4. Hassan, M.H., Khan, R., Andreescu, S. (2021). «Advances in electrochemical detection methods for measuring contaminants of emerging concerns». *Electrochemical Science Advances*, 2 (6), DOI: <https://doi.org/10.1002/elsa.202100184e2100184>
5. Pinheiro, J.P., Rotureau, E. (2023). «Electroanalytical trace metal cations quantification and speciation in freshwaters: historical overview, critical review of the last five years and road map for developing dynamic speciation field measurements», *Molecules*, 28 (6), 2831, DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules28062831>
6. Hackel, L., Rotureau, E., Morrin, A., Pinheiro, J.P. (2021). «Developing On-Site Trace Level Speciation of Lead, Cadmium and Zinc by Stripping Chronopotentiometry (SCP): Fast Screening and Quantification of Total Metal Concentrations». *Molecules*, 26, 5502, DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules26185502>
7. Rotureau, E., Rocha, L.S., Goveia, D., Alves, N.G., Pinheiro, J.P. (2020). Investigating the Binding Heterogeneity of Trace Metal Cations With SiO₂ Nanoparticles Using FullWave Analysis of Stripping Chronopotentiometry at Scanned Deposition Potential”. *Front. Chem.*, 8, 614574, DOI: <https://doi.org/10.3389/fchem.2020.614574>
8. Mourya, A., Mazumdar, B., Sinha, S.K. (2019P). «Determination and quantification of heavy metal ions by electrochemical method”. *J. Environ. Chem. Eng.*, 7 (6), DOI: 10. 016/j.jece.2019.103459.
9. Wu, Q., Bi, H.-M., Han, X.-J. (2021). «Research progress of electrochemical detection of heavy metal ions». *Chinese Journal of Analytical Chemistry*, 49(3), pp. 330–340. DOI: 10.1016/S1872-2040(21)60083-X
10. Sokolkov, S.V. (2022). «Evolution of the analytical signal in electrochemistry from electrocapillary curve to a digital electrochemical pattern of a multicomponent sample». *Electrochemical Science Advances*, V. 3, no. 3, DOI: 10.1002/elsa.202100212
11. Moroz, O. (2017). «COMBI-GA sorting-out algorithm with evolutionary complication of models». *The XII IEEE International Conference CSIT-2017 & International Workshop on Inductive Modeling*. Lviv: Publisher “Vezha&Co”, pp. 492–495.
12. Moroz, O.G. (2019). «Construction of autoregressive models based on a combinatorial genetic algorithm». *Inductive modeling of complex systems: Collection of scientific works*. Kyiv: MNNC ITS NAS and MES of Ukraine, 2019. Issue 11, pp. 53–60.

Received 01.10.2024

I.V. Surovtsev, DSc (Eng.), Senior Researcher, Department of Ecological Monitoring Digital Systems, , International Research and Training Centre of Information Technologies and Systems of the NAS and MES of Ukraine, Acad. Hlushkov ave., 40, Kiev, 03187, Ukraine, ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-1133-6207>, igorsur52@gmail.com

V.S. Stepashko, DSc (Eng.), Professor, Department for Information Technologies of Inductive Modelling, International Research and Training Center for Information Technologies and Systems of the NAS and MES of Ukraine, Akadimik Hlushkov ave, 40, Kyiv, 03187, Ukraine, ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-7882-3208>, stepashko@irtc.org.ua,

Ye.A. Savchenko-Syniakova, PhD (Eng.), Senior Researcher, International Research and Training Centre of Information Technologies and Systems of the NAS and MES of Ukraine, Acad. Hlushkov ave., 40, Kiev, 03187, Ukraine, ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-4851-9664>, Savchenko_E@meta.ua

O.H. Moroz, PhD (Eng.), Senior Researcher, International Research and Training Centre of Information Technologies and Systems of the NAS and MES of Ukraine, Acad. Hlushkov ave., 40, Kiev, 03187, Ukraine, ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-0356-8780>, olhahryhmoroz@gmail.com,

V.M. Galimova, PhD (Chem.), Associate Professor, Senior Lecturer, the Department of Analytical and Bioinorganic Chemistry and Water Quality, National University of Life and Environmental Sciences of Ukraine, Heroiv Oborony Str.17, building 2, of. 16, 18, Kyiv, 03041, Ukraine, ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-9602-1006>, galimova2201@gmail.com

CONSTRUCTION OF A BASELINE MODEL OF DIFFERENTIAL MEASUREMENT SIGNALS

Introduction. Environmental pollution has a significant impact on people's lives. Drinking water pollution with heavy metals is especially perceptible for humans. To solve this problem, it is necessary to ensure continuous monitoring of water quality, which will allow determining the concentration of toxic elements in it. It is necessary to extract the useful component of the signal containing information on unknown concentrations of the measured elements, against the background of a mixture of various signals of elements present in the background solution. For this purpose, a method for constructing a basic model is proposed, according to which it is possible to separate the differential signal of the inversion of chemical elements in water from the background signal of impurities present in water. Due to this, a spectrum of a multicomponent intensity signal is formed in pure form, the analysis of which allows the accurate estimating the unknown concentrations of a mixture of these dissolved elements.

Purpose. To develop a method for constructing an approximation function for the lower envelope of the background intensity signal in different classes of baseline functions using GMDH in the problem of determining the concentrations of chemical elements in multicomponent signals when measuring the ecological state of environmental objects using electrochemical methods of inversion chronopotentiometry.

Methods. The methods that are used in this article are of inversion chronopotentiometry method and GMDH neural network.

Results. The problem of constructing a baseline for the multicomponent signal of the intensity of inverse chronopotentiometry, the determination of which allows one to estimate the concentration of various chemical elements dissolved in the water quite accurately, is investigated. To solve this problem, an approach to the construction of the approximation function of the lower envelope line of the differential signal in different classes of basic functions with the use of GMDH is proposed. The approach was used for constructing the best model of the differential signal baseline on the real example of measuring the Zn concentration under the presence of ions Cd, Pb, and Cu. The built model of optimal complexity is the sum of arguments with the direct and inverse degrees which is necessary for clearing the intensity signal from the background to obtain the intensity spectrum of the measured chemical elements.

Conclusion. Produced in the C2 class, it can be recommended for use in the task of providing the baseline of a differential signal, since it can practically be the same R2, but also the richly shortening MAPE.

Keywords: identification, modeling, base curve, lower curve, differential signal, intensity signal, concentration of toxic elements, least squares method, GMDH.