**Многомерные методы для определения глинозема в криолитах методом ЛИЭС**

***Чиликин Б.С.***

*Студент, 3 курс специалитета*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,*

*химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail:* [qeqe92@yandex.ru](mailto:qeqe92@yandex.ru)

Проблема экспрессного контроля содержания оксида алюминия (Al2O3) в электролизере при различном криолитовом отношении является актуальной задачей, необходимой для процесса промышленного получения алюминия. Методы определения общего содержания кислорода, основанные на сжигании, не являются экспрессными. Нередко наблюдаются существенные систематические погрешности при определении глинозема в пробах экспрессными методами. Для решения подобных задач в последние годы появились портативные приборы для лазерно-искровой эмиссионной спектрометрии (ЛИЭС), в которой мощное лазерное излучение используется для отбора пробы, а образующаяся плазма является как источником возбуждения, так и источником аналитического сигнала для определения элементов от водорода до урана. Недавно была продемонстрирована возможность количественного ЛИЭС-определения кислорода в расплавленном электролите в атмосфере аргона непосредственно в электролизере. Этот метод является экспрессным и дистанционным. С другой стороны, технологически проще проводить определение глинозема без инертного газа. В этом случае, серьезной проблемой эмиссионного атомного анализа и, в частности, ЛИЭС является наличие спектральных помех мешающих элементов, влияние кислорода воздуха на результаты анализа, а также влияние фазового состава, что не позволяет достичь необходимой правильности анализа. Обычно для решения проблемы влияния многих факторов (в том числе неизвестных) на результаты спектрального анализа, применяют многомерные методы обработки спектральных данных (например, МГК), в том числе и в ЛИЭС. Поэтому цель работы - оценка возможности экспресс определения глинозема в образцах криолитов с использованием многомерной регрессии на латентные структуры (PLS) для количественного анализа с помощью ЛИЭС.

Для увеличения избирательности определения глинозёма и увеличения чувствительности предложено использовать молекулярную эмиссию двухатомных молекул AlO в плазме, а для уменьшения влияния спектральных помех – математические алгоритмы для разделения перекрывающихся сигналов. Наиболее ценным представляется, что предложенные подходы не требуют каких-либо модификаций измерительной системы и позволяют проводить измерения на воздухе. Для построения многомерных градуировок предложено использовать интервал (около 10 нм) длин волн вблизи 488 нм, в котором располагается полоса 0-0 зеленой системы AlO. Два набора образцов криолитов отличались методикой синтеза и составом внесенных добавок, например калия. Обучение производилось на большем и наиболее вариабельном из них, второй, соответственно был принят тестовым. При регрессии на латентных структурах важным фактором является выбор количества компонент регрессии. Решение принимается на основе объясненной дисперсии (explained variance) и корня среднеквадратичного отклонения калибровочных данных (RMSEC).

Для проверки правильности многомерной модели использовали метод leave one out кросс-валидации. Проведено сравнение результатов PLS регрессии с результатами одномерной классической регрессии (определение по градуировочному графику) и регрессии методом случайного леса. Показано, что использование молекулярной эмиссии в сочетании с PLS позволяет определять содержание глинозёма. Оценка правильности модели и правильности предсказания производилась по соответствующим корням среднеквадратичных отклонений, RMSEC, RMSECV, RMSEP. Значения этих величин варьируются в пределах единиц-десятых долей % содержания Al­2O3.