**Темпоральный подход к исследованию вольтамперометрического поведения многокомпонентных смесей и их распознаванию по методу главных компонент**

***Шарипова Л.Д.1, Гареев И.А.1, Максютова Э.И.2***

*Аспирант, 2 год обучения*

*1Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

*2АО УАП «Гидравлика»*

*E-mail: liliyadamirovna98@mail.ru*

Современные подходы к конструированию мультисенсорных систем (МСС) с целью распознаванию многокомпонентных смесей позволяют анализировать различные по природе жидкости как органической, так и неорганической природы в широком диапазоне концентрации химических компонентов.

Развитие методов многокомпонентного анализа с использованием МСС направлено:

– на создание датчиков контроля микрокомпонентов в составе сложных жидкостей,

– распознавание непараметрических свойств объектов (вкуса, запаха) не только пищевых продуктов, но и лекарственных препаратов;

- экспресс-оценку степени загрязненности/чистоты многокомпонентных растворов, в том числе органических растворителей и др.

Не полностью решенными проблемами при этом остаются: недостаточная чувствительность и специфичность распознавания объектов, отличающихся между собой на наноуровне как по химическому строению (например, распознавание энантиомеров), так и по концентрации (например, распознавание суперэкотоксикантов, вирусов, следов веществ в составе макрообъектов). Важно подчеркнуть, что востребованность в МСС возникла в результате спроса на экспрессные датчики, позволяющие заменить сложные дорогостоящие аналитические приборы с целью on-line анализа и/или исследования в полевых условиях, а также в быту [1].

На наш взгляд, мультисенсорный подход для решения указанных проблем имеет большие шансы на успех в сочетании с авторским – темпоральным подходом к извлечению полезной химической информации из массива вольтамперометрических данных. Вольтамперометрия представляет широкий интерес исследователя ввиду возможности использования меньшего количества сенсоров и миниатюризации приборной базы. Объем экспериментальных данных при этом увеличивается за счет включения всей области потенциалов, при которых токи регистрируются в темпоральном режиме (сотни и тысячи циклов окисления/восстановления). Это позволяет накопить во времени в базе данных малые по значению сигналы, ответственные за содержание микрокомпонентов исследуемых объектов и повысить точность их определения.

В работе на примере исследования вольтамперотрического поведения различных сортов яблок показаны преимущества темпорального способа регистрации и обработки массива амперометрических данных для целей факторного анализа схожести и различия между сортами яблок и для распознавания их по методу главных компонент (МГК) [2]. Суть метода темпорального структурирования заключается в расчете МГК-модели отдельно для каждого сорта яблока по данным транспонированной матрицы: столбцы – вольтамперограммы, строки – временные ряды токов. В результате МГК-моделирования каждая главная компонента вычисляется последовательно в направлении максимальной дисперсии точек для макротоков, затем для микро- и нанотоков. Показано, что темпоральное структурирование позволяет разделить исходную вольтамперограмму на парциальные вольтамперограммы по процессам, в которых с той или иной долей дисперсии токов участвуют макрокомпоненты, микрокомпоненты или следы веществ.

**Литература**

1. Winquist, F. An electronic tongue based on voltammetry / F. Winquist, P. Wide, L. Lundstrom // Anal. Chim. Acta. 1997. V. 357. P. 21-26.

2. Эсбенсен, К. Анализ многомерных данных. Избранные главы / Пер. с англ. С. В. Кучерявского / под ред. О. Е. Родионовой. – Казань: Изд-во КазГАСУ. 2008. 158 с.