УДК 389 (075.8)

РАСЧЕТ МАКСИМАЛЬНОЙ ВЕЛИЧИНЫ ПОГРЕШНОСТИ ПРИ ИСПОЛЬЗОВАНИИ ЭКСПРЕСС МЕТОДА pH – МЕТРИИ

Чапаксин Иван Владимирович

Досжанова Сауле Назарбековна

Костанайский высший медицинский колледж

Аннотация: Сегодня, быстрый анализ (экспресс) применяется во многих исследованиях, лабораторного и промышленного масштаба. Но не смотря на их широкое распространение, у таких методов есть ряд недостатков, таких как : временная непригодность из-за старения активных веществ, что может привести к неточным показателям при анализе. Настоящая работа посвящена математической обработке данных визуального контроля экспресс метода pH – метрии. Произведен расчет и выявлено математическим образом расстояние между точками замера и его относительной погрешностью между данными величинами. Вычислен показатель максимальной относительной погрешности (S_r), данное значение указывает на правильность поставленного эксперимента.

Ключевые слова: Сорбент, погрешность, анализ, спектр, цветовая шкала, активная фаза.

CALCULATION OF THE MAXIMUM ERROR VALUE WHEN USING THE EXPRESS PH-METRIC METHOD

Chapaksin Ivan Vladimirovich

Doszhanova Saule Nazarbekovna

Abstract: Today, rapid analysis (express) is used in many research, laboratory and industrial scale. But despite their widespread use, such methods have a number of disadvantages, such as: temporary unsuitability due to aging of active substances, which can lead to inaccurate readings in the analysis. This work is devoted to the mathematical processing of visual control data of the express method of pH-metry. The calculation was made and the distance between the points of

measurement and its relative error between these values was revealed in a mathematical way. The indicator of the maximum relative error (S_r) is calculated, this value indicates the correctness of the experiment.

Key words: Sorbent, error, analysis, spectrum, color scale, active phase.

На сегодняшний день невозможно обойтись без экспресса методов анализа рН среды. Они доказали свою необходимость в анализе проб на месте отбора исследуемого вещества. Данный метод анализа имеет выгодную экономическую характеристику, позволяющую обходиться без дорогостоящего оборудования, сокращает время анализа и в редком случае уменьшает объем работы [1, с.32].

Основной принцип химизма данного анализа это химическое взаимодействие растворенных веществ с сорбентами с последующим изменением окраса универсальной бумаги, рН среда в данных условиях фиксируется по стандартной шкале.

Набравшие широкие обороты использования, как на производстве, так и в лабораториях экспресс методы рН метрии [2, с.15], требуют различного рода усовершенствования в плане добавления новых носителей в состав рН бумаги. Делается данный процесс для увеличения точности и уменьшения погрешности проводимого анализа.

Данная работа носит характер математической обработки визуального анализа с расчетом его величины погрешности.

Основной принцип работы химического экспресс анализа рН метрии, заключается в взаимодействии химических веществ на поверхности сорбента. Такие методы рН метрии могут быть в различных видах (водные – спиртовые растворы, бумажные носители, гранулы, таблетки), обязательным является шкала сравнения.

Шкала сравнения может строиться по разным принципам, это и убывание концентрации, так и возрастания ее от менее насыщенного раствора до более концентрированного [3, с.132]. Поскольку в настоящей работе идет речь об экспресс анализе рН метрии, следовательно, такой вид анализа используется довольно часто. Частое использование экспресс – метода рН метрии может привести к определенной погрешности цветовой шкалы сравнения, это может быть механическая испорченность в виде затёртой шкалы, выгорание пигментации под действием солнечных лучей, намокание –

как следствие образование не четкого визуального пигмента на шкале сравнения.

На значение погрешности при использовании тест – анализа испытуемых проб, могут влиять различные факторы, такие как – неправильное хранение (нарушение эксплуатации), старение сорбента, старение активных веществ на носителе, повышенная влажность при контроле и использовании экспресс метода и т.д[4, с.47].

В процессе визуального оценивания колориметрической шкалы, предел погрешности условно приравнивается к точности минифотометра. Принцип создания цветовой шкалы для экспресс анализа зависит от восприятия человеческого глаза колориметрического набора цветовой гаммы. Построение стандартной шкалы с шагом 2 строят в зависимости геометрической прогрессии [5, с.88]. Согласно формуле, максимальная относительная погрешность рассчитывается:

$$S_r = \frac{\Delta c}{c_x} = \frac{(c_{n+1} - c_n)}{(c_{n+1} + c_n)}$$

Не обходимо учитывать, что формула пригодна для расчета погрешности в пробе с неизвестной концентрацией исследуемого компонента, где значения C_x находятся между величинами n и $n+1$. В таком случае данный процесс соответствует уравнению $C_x = \frac{C_n + C_{n+1}}{2}$, соответственно $\Delta C = \frac{C_{n+1} - C_n}{2}$.

Исходя из заданного значения геометрической прогрессии с шагом $C_{n+1} = 2C_n$, в таком случае величина максимальной относительной погрешности приравнивается к $\pm 33 \%$. Если в геометрической прогрессии шаг равен 3, тогда $C_{n+1} = 3C_n$ – значение приходится на $\pm 50 \%$. В случае минимального значения шага в геометрической прогрессии при построении шкалы, погрешность может достигать значения $\pm 100 \%$ при $C_n = 0$ и $C_{n+1} = C_1$ [6, с.118].

Для вычисления погрешности визуального анализа, при помощи метрологических характеристик светометрии, был выбран физико–химический метод анализа. В качестве основного метода была выбрана УФ – спектроскопия. Математическое описание цвета, представляется в виде трех независимых спектров лучей [7, с.97]. Этими лучами были выбраны зеленый – G (λ 546.1нм), красный – R (λ 700 нм), синий – В (λ 453 нм) (рисунок 1).

Рис. 1. Трехмерное цветовое пространство G (λ 546.1нм), R (λ 700 нм), B (λ 453 нм)

Методика снятия показателей УФ – спектрометрии исследуемых образцов на величину погрешности, выглядит следующим образом. В качестве сравнения (если измеряется бумажный носитель), выступает прозрачная пленка. Если измерение проходит водно – спиртовым раствором, то в качестве объекта сравнения выступает вода. Пленку с бумажным носителем определяемого вещества устанавливается в кюветное отделение, ее параметр замеряется относительно бесцветной пленки, показатели фиксируются (табл.1).

Таблица 1

Длины вол трех линий цвета испытуемого образца

Ордината	X	Y	Z
	Длина волны, нм		
1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13	424,4 435,5 443,9	465,9 489,5 500,4	414,1 422,2 426,3
14 15 16 17 18 19 20 21 22	452,1 461,2 474,0	508,7 515,2 520,6	429,4 432,0 434,3
23 24 25 26 27 28 29 30	521,2 544,3 552,4	525,4 529,8 533,9	436,5 438,6 440,6
	558,7 564,1 568,9	537,7 541,4 544,9	442,5 444,4 446,3
	573,2 577,4 581,3	548,4 551,8 555,1	448,2 450,1 452,1
	585,0 588,7 592,4	558,5 561,9 565,3	454,0 455,9 457,9
	596,0 599,6 603,3	568,9 572,5 576,4	459,9 462,0 464,1
	607,0 610,9 615,0	580,4 584,8 589,6	466,3 468,7 471,4
	619,4 624,2 629,8	594,8 600,8 607,7	474,3 477,7 481,8
	636,6 645,9 663,0	616,1 627,3 647,4	487,2 495,2 511,2

Коэффициент пропускания/отражения фиксируется в следующей таблице (табл.2)

Таблица 2

Значения коэффициента отражения/ пропускания

Ордината	X	Y	Z
	Значения пропускания или отражения		
	1 до 30		
Значения коэффициентов K	0,031542	0,034561	0,040098

Значения, полученные в таблице 1 суммируют и умножают на соответствующий коэффициент по линии соответствующего цвета.

Для испытуемого образца значения координат цвета рассчитывают по соответствующим формулам [8, с.41]:

$$X = K_x \sum T(\lambda_{ix})$$

$$Y = K_y \sum T(\lambda_{iy})$$

$$Z = K_z \sum T(\lambda_{iz}),$$

где, X, Y, Z - координаты цвета;

K_x, K_y, K_z - значения коэффициентов;

$T(\lambda_{ij})$ - значения пропускания (%) при длине волны λ_{ij} .

$$X = 0,031542 * \sum 0,05 * (16\ 949,4) = 26,73089874$$

$$Y = 0,034561 * \sum 0,09 * (16\ 166) = 50,28418134$$

$$Z = 0,040098 * \sum 0,02 * (12\ 727,4) = 10,206865704$$

Расстояние между точками X, Y, Z рассчитывается следующим образом:

$$\Delta E = \sqrt{(\Delta X)^2 + (\Delta Y)^2 + (\Delta Z)^2}$$

$$\Delta E = \sqrt{(6,50084274)^2 + (7,25829134)^2 + (1,926501554)^2} =$$

$$\sqrt{42,2609563 * 52,68279317 * 3,7114082376} = 90,9019961365$$

Получены данные по значению относительной погрешности между точками B:G:R – относится как 3,7:1,8:1. Что свидетельствует о явных погрешностях при неточном визуальном анализе испытуемого вещества.

Для расчета концентрации вещества на поверхности активных фаз твердого носителя, используют следующую формулу:

$$C = \frac{\Delta E}{1000};$$
$$C = \frac{90,9019961365}{1000} = 0,0909019961 \text{ мг/см}^3$$

Исходя из полученных данных по соседним точкам цветовой шкалы, была вычислена концентрация вещества на поверхности сорбируемого компонента на бумажном носителе.

Нахождение концентрации вещества на активных фазах сорбента, необходима для расчета максимальной относительной погрешности (S_r) по формуле [8, с.47]:

$$S_r = \frac{\Delta c}{c_x} = \frac{(c_{n+1} - c_n)}{(c_{n+1} + c_n)}$$
$$S_r = \frac{0,0909019961_{+1} - 0,0909019961}{0,0909019961_{+1} + 0,0909019961} = \frac{1}{1,1818039922} = 0,8461640057\%$$

Таким образом, при расчете максимальной относительной погрешности (S_r), было выявлено значение малого интервала погрешности, что составляет 0,8461640057% в данном анализе [9, с.5]. Это значение не является постоянным, его необходимо рассчитывать для каждого анализа индивидуально, в зависимости от эксперимента и условий правильной эксплуатации экспресс – рН метода.

Выводы

1. Произведен расчет и выявлено математическим образом расстояние между точками замера и его относительной погрешностью между данными величинами.

2. Экспериментальным образом, найдена концентрация вещества на активных фазах сорбента индикатора на основе бумажного носителя.

3. Вычислен показатель максимальной относительной погрешности (S_r), данное значение указывает на правильность поставленного эксперимента.

Список литературы

1. Золотов Ю.А. Химический анализ без лабораторий: тест-методы // Вестник российской академии наук. - 1997. - Т. 67, №6. - С. 508 - 513.

2. Савин С.Б., Дедкова В.П., Швоева О.П. Сорбционно-спектро-скопические и тест-методы определения ионов металлов на твердой фазе ионообменных материалов // Успехи химии. - 2000. - Т.69, №3. - С.203-217.
3. Золотов Ю.А., Иванов В.М., Амелин В.Г. Химические тест-методы анализа. М.: Едиториал УРСС. - 2002. - 304с.
4. Евгеньев М.И. Тест-методы и экология // Соросовский образовательный журнал. - 1999. - №11. - С. 29-34
5. Амелин В.Г., Иванов В. М. // Журнал аналитической химии, 2000, т.55, № 4, с. 411.
6. Островская В.М., Запорожец О.А., Будников Г.К., Чернавская Н.М. Вода. Индикаторные системы. - М.:Винити, Эконикс, 2002. - 226с
7. Дмитренко С. Г., Золотов Ю. А. . Пенополиуретаны в химическом анализе: сорбция различных веществ и её аналитическое применение // Успехи химии. - 2002. - Т.71. №2. - с.180 - 197.
8. Никитина Н. А. Тест-методы химического анализа с визуальной индикацией: метрологическое обеспечение, новые тест-системы. Диссертация на соискание учёной степени кандидата химических наук. Харьков, 2006.
9. ВОПРОСЫ РАЗВИТИЯ СОВРЕМЕННОЙ НАУКИ И ТЕХНИКИ: сборник статей Международной научно-практической конференции. ЧАПАКСИН И.В., ДОСЖАНОВА С.Н. ОЦЕНКА ТОЧНОСТИ ВИЗУАЛЬНОГО АНАЛИЗА ОТ ПРИНЦИПА ПОСТРОЕНИЯ СТАНДАРТ-НОЙ ШКАЛЫ – Мельбурн: МЦНИР «Научный взгляд». – 2020. – 149 с.

© И.В. Чапаксин, С.Н. Досжанова, 2021