

**МНОГОМЕРНАЯ ОБРАБОТКА АНАЛИТИЧЕСКИХ СИГНАЛОВ –
ПОЛЬЗА ИЛИ ЛИШНИЕ ХЛОПОТЫ?**Шабанова Е.В., Васильева И.Е.ФБГУН Институт геохимии им. А.П. Виноградова СО РАН, Иркутск, Россия
shev@igc.irk.ru**DOI: 10.26902/ASFE-11_26**

Современное разнообразие аналитических методов поражает, однако до сих пор ни один из них не способен одновременно решать все три основные задачи аналитической химии – определение состава, структуры и свойств изучаемых веществ, хотя последние достижения в области инструментальной аналитической химии связаны с разработкой приборов, регистрирующих множество аналитических сигналов и использующих разнообразные способы обработки информации.

Развитие приборов для некоторых спектральных методов анализ приблизило нас к одновременному определению элементного и вещественного состава образцов (например, варианты сканционная атомно-эмиссионной спектроскопии), что, в свою очередь, привело к необходимости использования прогрессивных математических приёмов для проектирования экспериментов и анализа большого объёма получаемых данных. Всё чаще аналитики используют в своей практике многомерные математические приёмы как для выбора спектральных линий, выделения полезных аналитических сигналов и оптимизации градуировочной процедуры, так и для контроля качества результатов анализа [1]. При этом остаются открытыми вопросы о необходимости применения таких математических приёмов, и определении круга аналитических задач, для которых они наиболее эффективны.

Наибольший интерес многомерные подходы представляют для наук о Земле и жизни, т.к. большинство исследований основано на измерении химического состава сложных природных органоминеральных веществ и характеристики их составов, от которых напрямую зависят потребительские свойства. Природные объекты по своей природе многомерны, поэтому для их изучения и аналитического контроля требуется привлекать несколько методов анализа и одномерные приёмы обработки не всегда обеспечивают оптимальные решения [2, 3] при значительных финансовых затратах. Специальные математические приёмы обработки аналитических сигналов объективно снижают затраты при улучшении точности и увеличении объёма полезной информации. Однако при выборе математических методов и условий их применения необходимо учитывать "подводные камни" (специфику) каждого метода химического анализа.

В докладе на примере метода атомно-эмиссионной спектроскопии, традиционно используемого в экологических и геологических исследованиях для одновременного определения элементного и вещественного составов [4], показана эффективность применения многомерных математических методов обработки данных, полученных в дуговом разряде, лазере, пламени и индуктивно-связанной плазме при разных способах пробоподготовки, для учёта спектральных и матричных влияний.

Список литературы

1. Oliveira A.F., Gonzalez M.H., Nogueira A.R.A. Use of multiple lines for improving accuracy, minimizing systematic errors from spectral interferences, and reducing matrix effects in MIP OES measurements // J. Microchem. 2018 Dec. V. 143. P. 326.
2. Налимов В.В. Теория эксперимента. М.: Наука, 1971. 270 с.
3. Hopke P.K. The evolution of chemometrics // Analyt. Chimica Acta. 2003. V. 500. №. 1–2. P. 365.
4. Vasil'eva I.E., Shabanova E.V., Goryacheva, E.M., Sotskaya, O.T., Labusov, V.A., Nekludov, O.A., Dzyuba, A.A. Noble metals in black shales of the Sukhoi Log gold deposit (East Siberia): evidence from scintillation arc atomic-emission spectrometry // Russian Geology and Geophysics. 2018. V. 59. №.8. P. 997.