

УДК 543

А. К. Болвако, ассистент (БГТУ); **Е. В. Радион**, кандидат химических наук, доцент (БГТУ)**КОМПЬЮТЕРНАЯ ОБРАБОТКА РЕЗУЛЬТАТОВ АНАЛИЗА В ЛАБОРАТОРНОМ ПРАКТИКУМЕ ПО ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИМ МЕТОДАМ АНАЛИЗА**

Разработано прикладное программное обеспечение для графической, математической и статистической обработки результатов анализа, которое внедрено в лабораторный практикум по физико-химическим методам анализа. Обсуждены функциональные возможности разработки и различные варианты ее использования для аудиторной самостоятельной работы студентов.

The applied software for graphic, mathematical and statistic processing of analysis results has been elaborated. It has been introduced in laboratory practice on physical-chemical analysis methods. The functional possibilities of the software have been discussed as well as different variants of its using for students laboratory independent work.

Введение. Одним из основных путей повышения качества образования в химико-технологических вузах является развитие интеллектуальных и творческих способностей студентов. Для достижения этой цели учебный процесс должен быть организован на основе неразрывной связи обучения с исследовательской деятельностью, т. е. по обучающе-исследовательскому принципу. Учебный процесс, организованный по данному принципу, призван развивать творческий потенциал личности, формировать у студентов аналитический характер мышления и умение работать в коллективе.

Достичь повышения мотивации студентов при изучении химических дисциплин, осуществить междисциплинарные связи можно с использованием компьютерных технологий в процессе химического образования. В настоящее время это является актуальной задачей, т. к. значительная часть выпускаемого химико-аналитического оборудования компьютеризирована или имеет интерфейсы для обработки получаемых экспериментальных данных с помощью ЭВМ.

Возможны различные подходы к вопросу компьютеризации лабораторных практикумов:

– использование современных компьютеризированных приборов и аппаратно-программных комплексов, максимально приближенных к реальным условиям и задачам химического контроля современного производства;

– использование электронных учебно-методических материалов и документов, позволяющие автоматизировать информационную работу, достичь высокой обеспеченности студентов учебно-методической литературой;

– применение компьютерной графической и математической обработки результатов анализа, что позволяет более рационально организовать учебное время.

Обеспеченность программно-аппаратными комплексами и современным компьютеризированным оборудованием зависит от возможностей материального обеспечения кафедры, в то же вре-

мя применение компьютерной обработки результатов может быть широко использовано при минимальном количестве оборудования. Благодаря компьютеризации химико-аналитических расчетов может быть существенно сокращено время выполнения лабораторных работ за счет исключения рутинных расчетов, а также улучшена теоретическая и практическая подготовка студентов в результате применения унифицированных компьютерных методов работы с аналитической информацией и ознакомления с современными методами статистической обработки данных.

В этой связи целью настоящей работы явилось создание прикладного программного обеспечения (ПО) для графической, математической и статистической обработки результатов анализа, критериальной оптимизации условий его проведения и формирования отчетов о выполненных лабораторных работах (ЛР) в практикуме по физико-химическим методам анализа.

Основная часть. В рамках лабораторного практикума по физико-химическим методам анализа студенты химико-технологических специальностей изучают следующие методы: кондуктометрия, потенциометрия, вольтамперометрия, фотоколориметрия, спектрофотометрия, турбидиметрия, нефелометрия, эмиссионная фотометрия пламени, рефрактометрия, газо-жидкостная хроматография, ионный обмен и экстракция.

К настоящему времени созданы аппаратно-программные комплексы UniChrom для выполнения ЛР по инверсионной вольтамперометрии [1] и газо-жидкостной хроматографии [2]. Расчет результатов анализа в этих работах полностью автоматизирован за счет разработки специальных шаблонов, адаптированных для самостоятельного выполнения ЛР студентами [3].

Для графической, математической и статистической обработки результатов анализа, полученных с использованием остальных изучаемых методов анализа, разработано прикладное ПО, которое позволяет студентам самостоятельно работать с экспериментальными данными

ми и формировать отчеты о проведенных измерениях и полученных результатах анализа. Оно внедрено в учебный процесс кафедры аналитической химии в 2010 г.

Разработанное ПО включает в себя следующие основные возможности:

- определение неизвестной концентрации с использованием различных приемов: методов градуировочного графика, стандартов, добавок, ограничивающих растворов, по линейным и логарифмическим кривым инструментального титрования;
- проведение необходимой статистической обработки результатов анализа: отсеивание грубых промахов, расчет статистических характеристик.

Приложение реализовано с использованием электронных таблиц в виде одного документа, имеет контекстно-зависимую справку и удобный интерфейс, что позволяет студентам быстро его освоить и в дальнейшем использовать самостоятельно.

ПО обладает следующей функциональностью (рис. 1):

- построение одного или нескольких градуировочных графиков методом наименьших квадратов с оценкой достоверности аппроксимации и расчет результатов анализа с использованием градуировочного графика;
- расчет погрешностей градуировочного графика;
- расчет статистических параметров для набора экспериментальных данных: среднее, среднее и стандартное отклонение, дисперсия, доверительный интервал для разного уровня доверительной вероятности и др.;
- отсеивание грубых промахов с помощью Q-теста;
- построение кривых титрования в интегральном и дифференциальном виде;

- оптимизация условий спектрофотометрического анализа бинарных смесей по методу Фирордта.

Оценка погрешностей градуировочного графика включает автоматический расчет для указанного массива экспериментальных данных:

- коэффициентов линейного регрессионного уравнения;
- дисперсии оценки коэффициентов регрессионного уравнения;
- дисперсии;
- среднего квадратичного отклонения погрешности аппроксимации.

Кроме того, осуществляется проверка значимости коэффициентов уравнения с помощью *t*-критерия Стьюдента при различном уровне доверительной вероятности и отображается результирующее значение погрешности градуировочного графика (погрешности аппроксимации), которое может быть использовано как одна из составляющих при определении доверительных границ систематической погрешности.

Для всех типов вычислений предусмотрен вывод отчета для печати. На рис. 2 приведен вид приложения при вводе данных для построения кривой титрования, а на рис. 3 – пример сформированного отчета о выполненной ЛР.

Следует отметить, что выбор задач, решаемых разработанным приложением, обусловлен конкретным наполнением лабораторного практикума по физико-химическим методам анализа и, как правило, не включает возможности, которые не используются при изучении курса. Это позволило получить простой, понятный и удобный интерфейс приложения и в то же время охватить практически все типы численных расчетов, которые осуществляются при проведении анализа в рамках практикума.

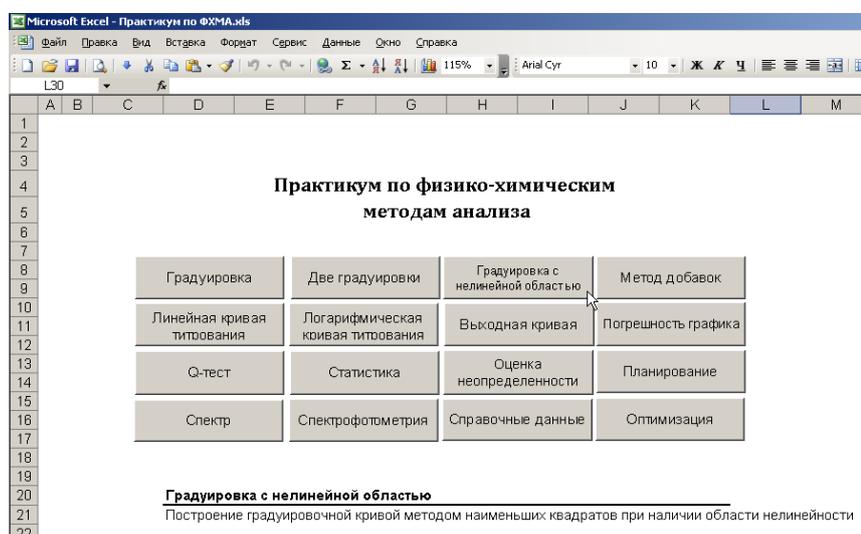


Рис. 1. Вид главного окна приложения

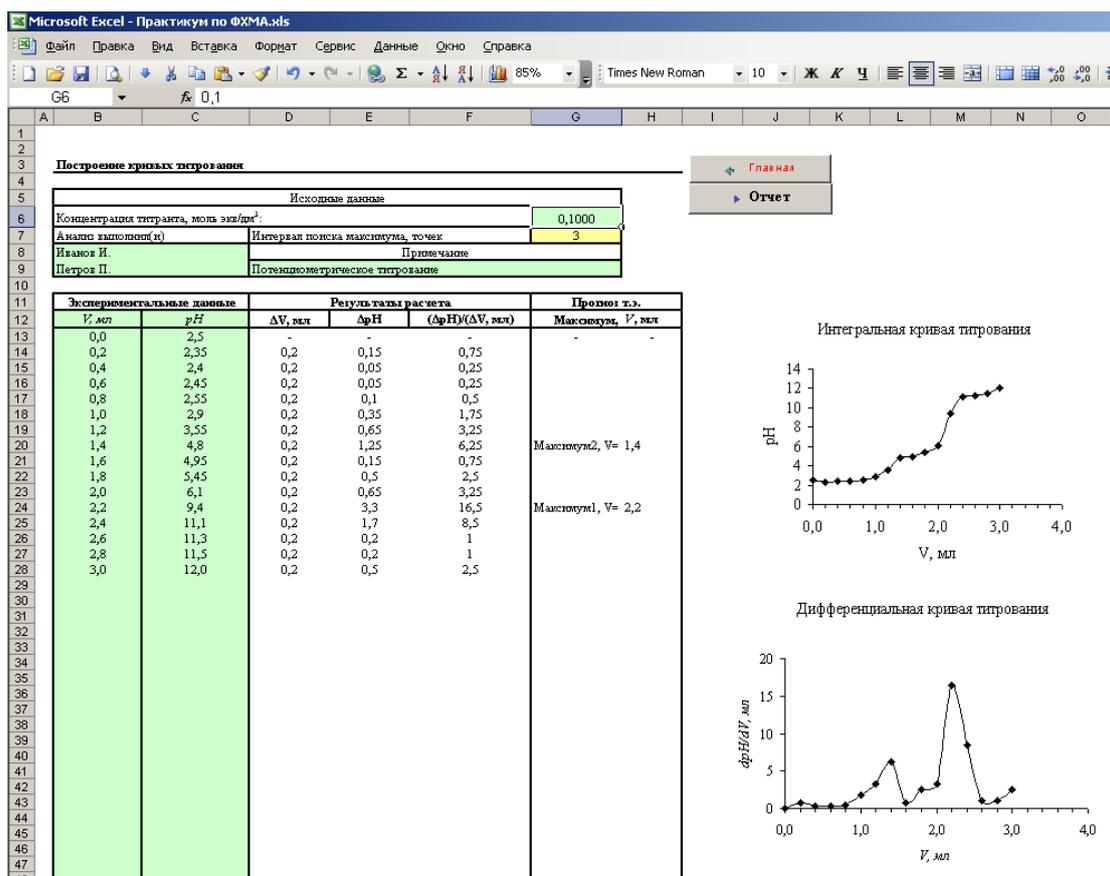


Рис. 2. Вид приложения при вводе данных для построения кривой титрования

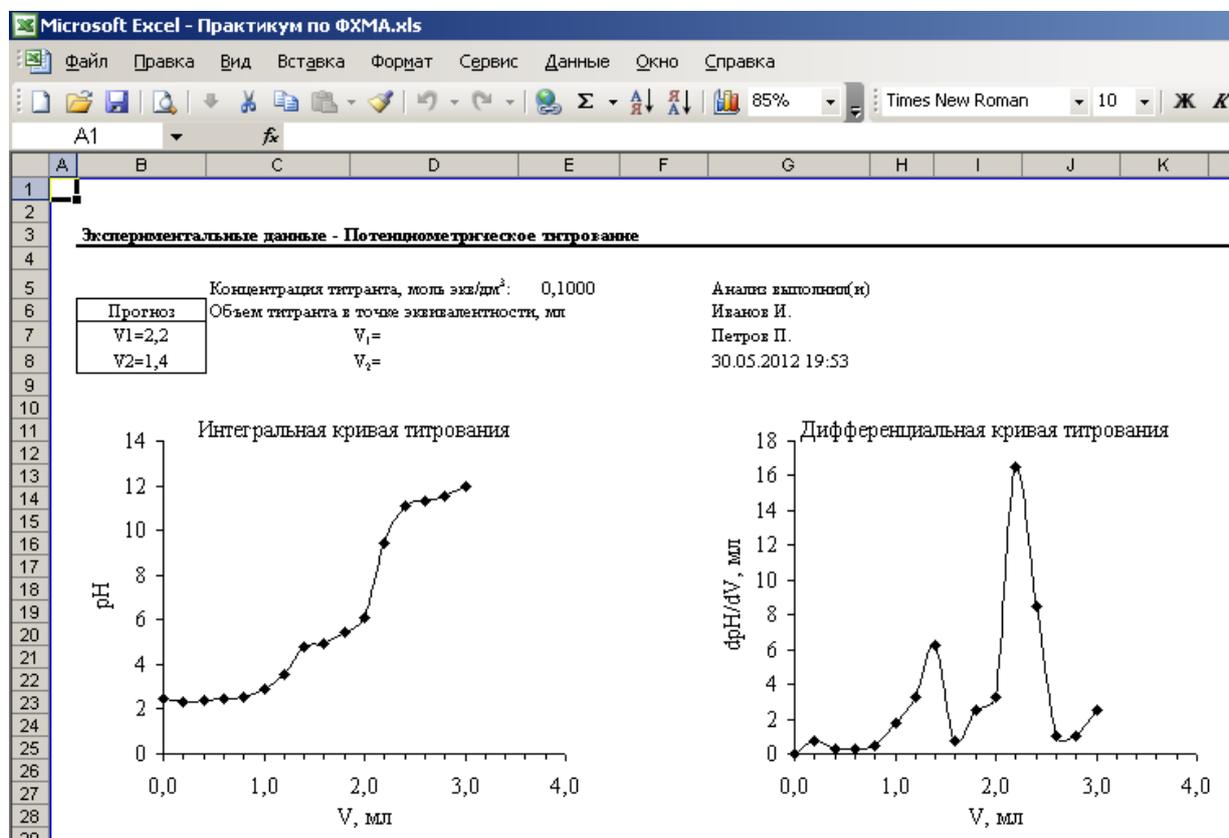


Рис. 3. Пример отчета при построении кривой титрования

Задания по самостоятельной компьютерной обработке результатов лабораторных работ

Раздел	Название работы согласно [3]	Задания по компьютерной обработке результатов ЛР [4]
Кондуктометрическое титрование	Определение содержания H_2SO_4 и $NiSO_4$ в смеси	Построить линейную кривую инструментального титрования
	Определение содержания HCl и H_3BO_3 в смеси с использованием двух методов анализа	Построить линейную и логарифмическую кривые инструментального титрования, дифференциальную кривую титрования
	Анализ аммофоса на содержание основных компонентов	Построить линейную кривую инструментального титрования
Потенциометрическое титрование	Раздельное определение компонентов в бинарных фосфатных смесях	Построить интегральную и дифференциальную кривые инструментального титрования
	Определение содержания йодидов и хлоридов в смеси с использованием двух методов анализа	Построить 2 линейные и 2 логарифмические кривые инструментального титрования, 2 дифференциальные кривые титрования
	Определение солей методом рН-метрического титрования с использованием катионного обмена	Построить интегральную и дифференциальную кривые инструментального титрования
	Определение Co^{2+} и Zn^{2+} в смеси с предварительным разделением на анионите	Построить 2 интегральные и 2 дифференциальные кривые инструментального титрования
Ионометрия	Определение нитратов с использованием нитрат-селективного электрода	Построить градуировочный график, оценить значимость коэффициентов и погрешности градуировочного графика в линейной области
Фотоколориметрия	Определение Fe^{3+} в виде тиоцианатного комплекса	Построить кривую поглощения и градуировочный график
	Фотометрический анализ двухкомпонентных смесей	Построить 2 кривые поглощения и 3 градуировочных графика
	Определение Ca^{2+} и Mg^{2+} с использованием фотометрического индикаторного титрования	Построить 4 кривые поглощения и 2 кривые инструментального титрования
Спектрофотометрия	Определение MnO_4^- и $Cr_2O_7^{2-}$ при совместном присутствии в растворе	Построить 2 спектра поглощения и провести критериальную оптимизацию условий проведения анализа
	Определение нитратов в УФ-области с предварительным ионообменным отделением мешающих катионов	Построить спектр поглощения и градуировочный график
	Определение органических красителей в бинарной смеси	Построить 2 спектра поглощения и провести критериальную оптимизацию условий проведения анализа
Турбидиметрия и нефелометрия	Определение сульфатов в растворе	Построить градуировочный график и 2 линейные кривые инструментального титрования
	Определение хлоридов в электролите никелирования	Построить градуировочный график
Эмиссионная фотометрия пламени	Раздельное определение натрия и калия в смеси	Построить 2 градуировочных графика и 2 графика для нахождения неизвестной концентрации методом добавок
	Определение натрия и калия в почвенных вытяжках	Построить 2 градуировочных графика
Рефрактометрия	Определение водорастворимых органических веществ	Провести исключение промахов с использованием Q-теста и дальнейшую статистическую обработку результатов анализа
Ионный обмен	Определение полной динамической обменной емкости катионита	Построить кривую поглощения, градуировочный график и выходную кривую
Экстракция	Определение количественных характеристик процесса экстракции – константы распределения и степени извлечения	Построить спектр поглощения

В таблице приведены задания по компьютерной обработке экспериментальных результатов, полученных при выполнении всех лабораторных работ практикума по физико-химическим методам анализа.

Выполнение лабораторной работы с использованием компьютерной обработки данных может быть реализовано одним из следующих способов:

– получение экспериментальных данных с использованием химико-аналитического прибора (кондуктометр, иономер, фотоколориметр, рефрактометр, пламенный фотометр) → компьютерная обработка результатов измерений → самостоятельный расчет студентом результатов анализа;

– получение экспериментальных данных с использованием химико-аналитического прибора (фотоколориметр, спектрофотометр) → критериальная компьютерная оптимизация условий проведения анализа → проведение анализа при оптимизированных условиях → компьютерная обработка результатов измерений → самостоятельный расчет студентом результатов анализа.

Таким образом, компьютерная обработка результатов стала неотъемлемой частью выполнения лабораторного практикума и позволила реализовать его на современном уровне.

Разработанное ПО обладает интуитивно понятным интерфейсом и адаптировано для самостоятельной работы студентов. Кроме того, разработаны методические рекомендации по работе с программой [4], которые включают разъяснение терминов, встречающихся при статистической обработке результатов измерений, необходимые справочные величины, а также подробное руководство пользователя по работе с программой. Наличие методических указаний дает возможность осуществлять внеаудиторную самостоятельную работу.

Для закрепления навыков выполнения статистической обработки результатов анализа предложен вариант лабораторной работы «Перманганатометрическое определение содержания железа со статистической обработкой

результатов» по курсу «Аналитическая химия и физико-химические методы анализа», включающей получение, анализ и обработку экспериментальных данных методами математической статистики.

Заключение. Внедрение разработанного ПО в учебный процесс позволило достичь следующих целей: ускорить и унифицировать подходы к обработке типичной экспериментальной информации, получаемой студентами при выполнении ЛР, ускорить и повысить точность ее обработки за счет использования возможностей компьютерной программы. Применение электронных таблиц позволяет студентам при дальнейшем обучении использовать полученные навыки для расчета результатов количественных определений, анализа реальных технологических систем и при изучении специальных дисциплин, а в перспективе – иметь преимущество на рынке труда за счет приобретенных навыков работы с компьютеризированными комплексами.

Литература

1. Организация лабораторного практикума по инверсионной вольтамперометрии с использованием аппаратно-программного комплекса UniChrom / А. Е. Соколовский [и др.] // Аналитика РБ-2010, Минск, 14–15 мая 2010 г.: сб. тез. докл. Респ. науч. конф. по аналитической химии с международным участием. – Минск, 2010. – С. 100.
2. Практикум по газожидкостной хроматографии с использованием аппаратно-программного комплекса UniChrom / А. Е. Соколовский [и др.] // Труды БГТУ. Сер. VIII, Учеб.-метод. работа. – 2009. – Вып. X. – С. 233–236.
3. Физико-химические методы анализа. Лабораторный практикум / Е. В. Радион [и др.]. – Минск: БГТУ, 2010. – 110 с.
4. Компьютерная обработка результатов химического анализа [Электронный ресурс]: / сост. А. К. Болвако, Е. В. Радион. – Минск: БГТУ, 2010. – 49 с.

Поступила 12.04.2012