

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ХАРКІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
імені В. Н. КАРАЗІНА

Ю. В. Холін
Я. М. Пушкарьова
А. В. Пантелеймонов
А. Н. Некос

**ХЕМОМЕТРИЧНІ МЕТОДИ В РОЗВ'ЯЗАННІ ЗАДАЧ
ЯКІСНОГО ХІМІЧНОГО АНАЛІЗУ
ТА КЛАСИФІКАЦІЇ ФІЗИКО-ХІМІЧНИХ ДАНИХ**

Монографія

Харків – 2016

УДК 543.061+543.08

ББК 24.4

X 71

Рецензенти:

В. В. Іванов – доктор хімічних наук, професор, професор кафедри хімічного матеріалознавства, Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна;

С. А. Неділько – доктор хімічних наук, професор, професор кафедри неорганічної хімії, Київський національний університет імені Тараса Шевченка.

*Затверджено до друку рішенням Вченої ради
Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна
(протокол № 10 від 30 серпня 2016 р.)*

Холін Ю. В.

X 71 Хемометричні методи в розв'язанні задач якісного хімічного аналізу та класифікації фізико-хімічних даних : монографія / Ю. В. Холін, Я. М. Пушкарьова, А. В. Пантелеймонов, А. Н. Некос. – Х. : ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2016. – 184 с.

ISBN 978-966-285-411-4

В монографії обговорено зміст та актуальні завдання сучасного якісного хімічного аналізу та хемометричні методи, що найчастіше використовують для обробки хіміко-аналітичних і фізико-хімічних даних. Особливу увагу приділено засобам контролю автентичності продуктів харчування і напоїв, сільсько-господарської сировини, лікарських засобів, ідентифікації об'єктів довкілля. Розглянуто застосування апарату штучних нейронних мереж та нечітких множин для розв'язання задач якісного хімічного аналізу (ідентифікації аналітів та кластеризації багатопараметричних масивів даних).

Для фахівців у царинах хемометрії, якісного хімічного аналізу, фізичної хімії.

Іл. 36, табл. 68, бібліогр. 333 назв.

УДК 543.061+543.08

ББК 24.4

ISBN 978-966-285-411-4

© Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна, 2016

© Холін Ю. В., Пушкарьова Я. М., Пантелеймонов А. В., Некос А. Н., 2016

© Рижова Ю. М., макет обкладинки, 2016

Зміст

ВСТУП.....	5
ГЛАВА 1. АКТУАЛЬНІ ЗАДАЧІ СУЧАСНОГО ЯКІСНОГО ХІМІЧНОГО АНАЛІЗУ ТА ПІДХОДИ ДО ЇХ РОЗВ’ЯЗАННЯ.....	7
1.1. Основні завдання та зміст сучасного якісного хімічного аналізу	7
1.2. Метрологічні проблеми якісного аналізу	10
1.3. Хемометричні засоби контролю автентичності продуктів харчування і напоїв, сільськогосподарської сировини, лікарських засобів, ідентифікації об’єктів довкілля.....	12
1.3.1. Проблема контролю автентичності.....	12
1.3.2. Експериментальні методи	13
1.3.3. Хемометричні методи	14
Література до глави 1	43
ГЛАВА 2. РОБАСТНІ АЛГОРИТМИ КЛАСИФІКАЦІЇ БАГАТОВИМІРНИХ ХІМІЧНИХ ДАНИХ ЗА ДОПОМОГОЮ ШТУЧНИХ НЕЙРОННИХ МЕРЕЖ.....	57
2.1. Основні характеристики та архітектура нейронних мереж	57
2.2. Значення штучних нейронних мереж для хімії.....	61
2.3. Алгоритми деяких нейронних мереж	63
2.4. Оцінка надійності і стійкості алгоритмів нейронних мереж	70
2.5. Апробація алгоритмів нейронних мереж «без навчання» та «з навчанням» на модельних і тестових наборах даних	71
2.6. Оптимізація параметрів штучних нейронних мереж і стійкість класифікації з навчанням до варіювання вихідних даних (класифікація розчинників за їх сольватохромними характеристиками).....	81
Література до глави 2	90

ГЛАВА 3. ІДЕНТИФІКАЦІЯ ГЕОГРАФІЧНОГО ПОХОДЖЕННЯ З ВИКОРИСТАННЯМ ШТУЧНИХ НЕЙРОННИХ МЕРЕЖ.....	96
3.1. Ідентифікація зразків річкових і джерельних вод	96
3.2. Ідентифікація географічного походження овочів і фруктів.....	104
Література до глави 3	118
ГЛАВА 4. КЛАСТЕРИЗАЦІЯ ОБ'ЄКТІВ БЕЗ АПРІОРНОЇ ІНФОРМАЦІЇ ПРО КІЛЬКІСТЬ КЛАСІВ.....	121
4.1. Процедура кластеризації об'єктів без апріорної інформації про кількість класів	122
4.2. Класифікація розчинників за фізико-хімічними характеристиками.....	124
4.3. Кластеризація зразків річкових і джерельних вод.....	138
4.4. Кластеризація зразків харчової сировини	141
Література до глави 4	148
ГЛАВА 5. ІДЕНТИФІКАЦІЯ ОБ'ЄКТІВ В ЯКІСНОМУ ХІМІЧНОМУ АНАЛІЗІ. ПІДХІД НА ОСНОВІ ТЕОРІЇ НЕЧІТКИХ МНОЖИН	151
5.1. Нечіткі критерії подібності.....	154
5.2. Розрахунок параметрів функцій приналежності.....	156
5.3. Випробування алгоритму ідентифікації	158
Література до глави 5	161
Додатки	165