

---

DOI: <https://doi.org/10.15407/kvt206.04.017>

УДК: 004.67: 543.062

**СУРОВЦЕВ І.В.**<sup>1</sup>, д-р техн. наук, старш. наук. співроб.,

зав. відд. екологічних цифрових систем

ORCID: 0000-0003-1133-6207,

e-mail: dep115@irtc.org.ua,

**ВЕЛИКИЙ П.Ю.**<sup>1</sup>, аспірант,

відд. екологічних цифрових систем

ORCID: 0000-0002-8118-9348,

e-mail: velykyi305@gmail.com

**ГРИЦАЄНКО М.О.**<sup>2</sup>, аспірант,

Об'єднаний дослідницький підрозділ 7504,

ORCID: 0000-0002-5979-0663,

e-mail: maryna.hrytsaienko@ipcms.unistra.fr, gmari@ukr.net

**ГАЛІМОВА В.М.**<sup>3</sup>, канд. хім. наук,

доцент кафедри аналітичної

і біонеорганічної хімії та якості води

ORCID: 0000-0001-9602-1006,

e-mail: galimova2201@gmail.com

<sup>1</sup> Міжнародний науково-навчальний центр

інформаційних технологій та систем

НАН України та МОН України,

пр. Акад. Глушкова, 40, Київ, 03187, Україна

<sup>2</sup> Страсбурзький інститут фізики і хімії матеріалів,

Національний центр наукових досліджень — Університет Страсбурга,

<sup>4</sup> вул. Блеза Паскаля 4, Страсбург, 67081, Франція

<sup>3</sup> Національний університет біоресурсів

і природокористування України,

вул. Героїв Оборони, 17, корп. № 2, Київ, 03041, Україна

## **АНАЛІТИЧНА СИСТЕМА ДЛЯ МОНІТОРИНГУ ТА ОЦІНЮВАННЯ РИЗИКІВ СПОЖИВАННЯ ПИТНОЇ ВОДИ**

---

***Вступ.** Використання електрохімічної аналітичної системи «Аналізатор ІХП» дає змогу проводити екологічний моніторинг питної води та водних об'єктів, оцінювати та прогнозувати ризики впливу токсикантів на здоров'я людей та навколишнє середовище.*

***Мета статті** — вдосконалення інформаційної технології визначення концентрації хімічних елементів для експресного визначення якості питної води та методів оцінювання ризику їхнього впливу на біосферу.*

© СУРОВЦЕВ І.В., ВЕЛИКИЙ П.Ю., ГРИЦАЄНКО М.О., ГАЛІМОВА В.М., 2021

ISSN 2663-2586 (Online), ISSN 2663-2578 (Print). *Cyb. and Comp. Eng.* 2021. № 4 (206)

17

**Методи.** Нова інформаційна технологія використовує для вимірювання концентрацій імпульсні методи хронопотенціометрії, хроноіонометричний метод прямої потенціометрії та методи оцінювання екологічного ризику впливу хімічних речовин на довкілля.

**Результати.** Розроблено інформаційну технологію з машинним навчанням, хмарними технологіями та використанням інтелектуальних моделей маси добавки хімічного елемента, яка дає змогу за результатами одного вимірювання експресно визначити концентрації елементів у водному об'єкті, використовуючи спосіб порівняння сигналів, та оцінити ризику впливу хімічних речовин на здоров'я людей у разі споживання забрудненої питної води.

**Висновки.** Удосконалена аналітична система «Аналізатор ІХП» забезпечує експресне вимірювання концентрацій 12 хімічних речовин (Pb, Cd, Cu, Zn, Se, I, K, Na, Ca, F, NO<sub>3</sub>, NH<sub>4</sub>) у водних об'єктах на місці та ще восьми токсичних елементів (Hg, As, Sn, Ni, Co, Mn, Cr, Fe) у лабораторії, що дало змогу оперативної та в повному обсязі визначати екологічну якість питної води та об'єктів навколишнього середовища. Застосування іон-селективних та вимірювальних електродів на основі благородних металів підвищує екологічність та швидкість виконання досліджень. Використання методології оцінювання ризику впливу хімічних елементів на людину та довкілля дає змогу прогнозувати виникнення захворювань внаслідок тривалого споживання забрудненої питної води чи визначати придатність водоєм для зрошування та риборозведення.

**Ключові слова:** концентрація хімічних елементів та сполук, екологічний ризик, іон-селективні електроди, інверсійна хронопотенціометрія, питна вода.

## ВСТУП

Інтенсивний розвиток промисловості та зростання сільськогосподарського виробництва ведуть до поступового забруднення біосфери важкими металами і шкідливими хімічними речовинами. Активізація антропогенного впливу великої кількості токсикантів на людину та навколишнє середовище вимагає постійного моніторингу якості питної води та харчових продуктів і визначення екологічного стану водних об'єктів довкілля.

В Україні вода, призначена для споживання людиною, повинна відповідати Державним санітарно-гігієнічним нормам 2.2.4-171-10 [1], в країнах ЄС — Директиві 98/83/ЄС [2], згідно з якими визначені у воді санітарно-гігієнічні (токсикологічні) показники не повинні перевищувати гранично допустимих концентрацій (ГДК). Термін ГДК означає таку концентрацію хімічного елемента чи його сполук, яка за щоденного впливу на організм людини протягом тривалого часу не викликає патологічних змін чи захворювань, встановлюваних сучасними методами досліджень у будь-які періоди життя теперішнього і наступного покоління.

Серед токсикологічних показників дуже небезпечними є важкі метали (свинець, кадмій, ртуть, миш'як та інші), які проявляють найбільший канцерогенний вплив на здоров'я людини, і їх обов'язково контролюють, під час моніторингу та визначення якості питної води [3].

Нагальною потребою є розроблення комп'ютерних систем та приладів екологічного контролю, побудованих з використанням сучасних бездротових технологій, хмарних сервісів та систем мобільного зв'язку [4].

Електрохімічні методи аналізу широко використовують для визначення концентрацій токсичних елементів у питній воді, харчових продуктах та в інших об'єктах навколишнього середовища. Поширеними є вольтамперометричні

лабораторні та мобільні переносні аналізатори, що їх випускають у багатьох країнах, наприклад, прилади VA 694 та 797 VA Computrace фірми METRONM (Швейцарія) [5], аналітична система Model 600C Series Electrochemical Analyzer/Workstation (США), автономний аналізатор PDV6000plus фірми Cogent Environmental (Велика Британія), російські прилади: АКВ-07 МК, АВА-3, СТА-Елемент, ЭКОТЕСТ-ВА, Экспертиза-ВА-3D тощо.

Для моніторингу об'єктів навколишнього середовища перспективним є використання електрохімічних методів інверсійної хронопотенціометрії та прямої потенціометрії. У Міжнародному центрі інформаційних технологій та систем розроблено інформаційну технологію [6], реалізовану в аналітичній системі «Аналізатор ІХП», яка застосовує метод інверсійної хронопотенціометрії (ІХП), нові імпульсні методи інверсійної хронопотенціометрії (ІХП, ДІХП, ОІХП) [7] та метод хроноіонометрії [8, 9] для лабораторного визначення концентрацій 20 хімічних речовин у питній воді, харчових продуктах та об'єктах довкілля.

Якість питної води залежить від екологічного стану джерел водопостачання. Близько 80 % питного водопостачання в Україні здійснюють з поверхневих водних об'єктів, в яких вода помірно забруднена або забруднена. Використання малоефективних технологічних схем водопідготовки не дозволяє забезпечити санітарну і токсичну безпеку питної води, тому необхідно мати можливість періодично оцінювати якість забрудненої питної води та оцінювати ризики захворюваності за її споживання.

У міжнародній практиці базовою методологією є комплексний аналіз екологічних ризиків (ERA — Environmental Risk Assessment), який охоплює структурований поетапний аналіз всіх можливих ситуацій, несприятливих для людини і навколишнього середовища [10]. У ЄС питання оцінювання ризику погіршення здоров'я населення затверджено законодавчо в багатьох директивах та технічних регламентах, які детально розглянуто в українських наукових працях [3, 11]. В Україні випущено методичні рекомендації оцінювання ризику для здоров'я населення від забруднення атмосферного повітря [12], в РФ користуються керівництвом оцінювання ризику для здоров'я населення у разі впливу забруднювальних хімічних речовин [13].

Можливість експресно визначати токсичні параметри та одночасно оцінювати ризики для здоров'я людини у разі споживання забрудненої питної води значно покращать функційні характеристики системи «Аналізатор ІХП».

## **ПОСТАНОВКА ПРОБЛЕМИ**

Проведений аналіз шляхів виконання експресного вимірювання концентрацій хімічних елементів у питній воді із застосуванням електрохімічних методів хронопотенціометрії показав, що необхідно дотримуватись таких принципів:

- мінімальна кількість досліджень хімічних елементів у визначенні токсикологічної якості питної води;
- екологічність проведення дослідження (застосування вимірювальних твердих електродів з благородних металів, які зможуть срібний електрод з амальгамою ртуті, заборонений для використання Директивами ЄС в європейських країнах та використання доступних хімічних реактивів з екологічно допустимою концентрацією);

– використання інтелектуальних математичних моделей інверсії (застосування адаптивних моделей маси добавки хімічного елемента, побудованих шляхом машинного навчання, з урахуванням об'єкта водокористування та умов проведення електрохімічного аналізу);

– мобільність проведення досліджень (можливість виконання аналізу у природних умовах із застосуванням переносних приладів та сучасних технологій зв'язку).

Для впровадження методів експресного визначення якості питної води необхідно збільшити швидкість вимірювання концентрацій хімічних елементів, але не погіршити метрологічні характеристики аналізу. Це можливо здійснити за рахунок застосування нових підходів до оброблення електрохімічної інформації:

1) визначення концентрацій токсичних елементів за способом порівняння сигналів інверсії у природній воді (без підготовки проби) із сигналами інверсії шаблонів бази даних, одержаних за результатами дослідження близького за характеристиками об'єкта, для якого вимірюно концентрації в аналітичній системі за способом добавки;

2) застосування електрохімічного методу іонометрії, оснований на принципах прямої потенціометрії з використанням іон-селективних електродів, для експресного вимірювання у воді концентрацій найрозповсюдженіших хімічних елементів та сполук (калію, натрію, кальцію, фтору, нітратів, аміаку) приладом для хронопотенціометричного аналізу [8, 9, 14–19].

У технічних системах вимірювання інформаційна технологія (ІТ) забезпечує оброблення отриманих сигналів, які характеризують фізичний об'єкт, у вигляді послідовності обчислювальних процедур, формуючи за потреби математичні моделі досліджуваних процесів. Це дає змогу отримати кількісні та якісні оцінки об'єкта — результат вимірювання.

ІТ нерозривно пов'язана з поточним станом пристрою вимірювання, тому будь-яка суттєва зміна технічних характеристик (чутливості, методів дослідження, інтерфейсу передавання даних тощо) спричиняє потребу в удосконаленні або розробленні нової інформаційної технології, яка враховуватиме особливості вхідних сигналів, об'єктів дослідження, фізичних процесів та вимог до результатів вимірювання.

За загальною схемою використання ІТ в технічних системах вимірювання (рис. 1), пристрій отримує інформацію про поточний стан об'єкта дослідження (питної води) і передає інформаційній технології отримані значення (змінні, сигнали, образи тощо), а інформаційна технологія обробляє отримані дані, створює моделі процесів, формує кількісні та якісні оцінки стану об'єкта у вигляді результатів вимірювання.

ІТ визначення екологічного стану об'єктів навколишнього середовища, реалізована в аналітичній системі «Аналізатор ІХП», дає змогу визначити масову концентрацію 14 токсичних елементів (ртуті, арсену, свинцю, кадмію, цинку, міді, олова, нікелю, кобальту, заліза, марганцю, селену, йоду та хрому) за методами інверсійної хронопотенціометрії з чутливістю до  $0,01 \text{ мкг/дм}^3$  [6, 7] та 6 хімічних речовин (калію, натрію, кальцію, фтору, нітратів, аміаку) за методом хроноіонометрії (прямої потенціометрії з іон-селективними електродами) [8, 9].

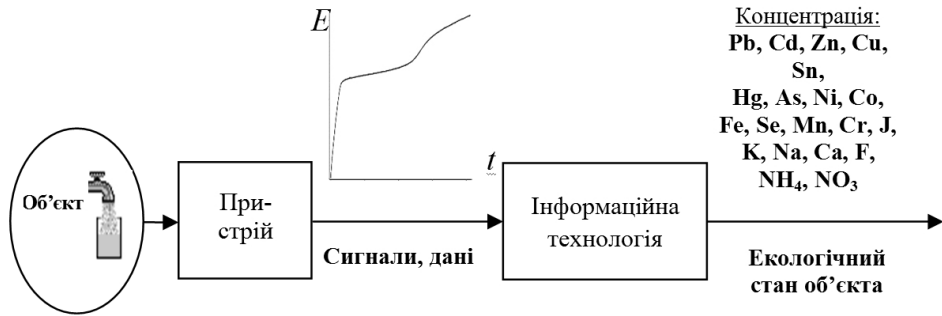


Рис. 1. Схема використання ІТ для визначення екологічного стану об'єкта

**Мета** — вдосконалення ІТ визначення екологічного стану об'єктів доквілля для експресного визначення якості питної води шляхом використання імпульсних методів хронопотенціометричного аналізу та розроблення нового методу експресного вимірювання концентрацій.

### ІНФОРМАЦІЙНА ТЕХНОЛОГІЯ ВИЗНАЧЕННЯ КОНЦЕНТРАЦІЙ ХІМІЧНИХ ЕЛЕМЕНТІВ ТА СПОЛУК

ІТ складається з інформаційної системи (ІС) оброблення аналітичних даних, електрохімічного блоку вимірювання аналітичних сигналів, пристрою візуалізації результатів визначення концентрацій та оцінювання ризиків для здоров'я людини (комп'ютер, планшет, мобільний пристрій). ІС зберігає в розташованій у хмарному сховищі базі даних (БД) таку інформацію, як значення ГДК різних типів об'єктів: харчових продуктів (хліба, молока, зерна, дитячого харчування), продукції рослинництва та тваринництва, води різного природного походження (питної, поверхневої, підземної, очищеної), ґрунтів різних типів, повітря робочої зони тощо. У БД зберігаються параметри оцінювання ризиків для здоров'я людини, шаблони електрохімічних параметрів вимірювання хімічних речовин для різних методів дослідження, оброблені аналітичні сигнали, результати вимірювання концентрацій хімічних елементів та визначені значення ризиків. Можливість використання такої БД спрощує та покращує сервісне обслуговування діяльності хіміка-аналітика.

Концентрацію токсичного елемента визначають за методами інверсійної хронопотенціометрії (ІХП) способом добавки відомої маси стандартного зразка іонів хімічної речовини. Суть методу ІХП полягає в електрохімічному концентруванні на вимірювальному електроді іонів важких металів та їхньому електророзчиненні за вольтамперостатичного режиму (інверсії).

Основними аналітичними функціями методу ІХП є час інверсії елемента, який за стандартизованих умов концентрування та вимірювання є прямо пропорційним його концентрації в розчині, та пік потенціалу інверсії — якісна характеристика елемента.

Процес інверсії накопичених елементів здійснюється в режимі постійного струму та фіксується у вигляді хронопотенціограми  $E(t)$  (значення потенціалів інверсії  $E$  у часі  $t$ ). Час інверсії елемента визначається заданими електрохімічними параметрами вимірювання: потенціалом та часом

регенерації (електрохімічного очищення робочої поверхні електроду), потенціалом та часом концентрування, потенціалом розчинення, потенціалом оброблення (кінцевий потенціал хронопотенціограми) та значенням опору в ланцюзі розчинення, який регулює швидкість процесу інверсії іонів.

Концентрацію токсичних елементів визначають за методом добавки стандартного розчину іонів елемента у такій послідовності:

— аналізують фоновий розчин або холосту пробу та визначають час інверсії фону  $\tau_f$ ;

— аналізують розчин проби та визначають час інверсії проби  $\tau_p$ ;

— у пробу вносять добавку (одну або декілька добавок) стандартного розчину іонів елемента, що аналізують, та визначають час інверсії проби з добавкою  $\tau_d$ ;

— за визначеними значеннями часу інверсії фону  $\tau_f$ , проби  $\tau_p$ , проби з добавкою  $\tau_d$  та відомою масою добавки іонів  $m$  визначають концентрацію  $C$  елемента  $Me$  в аналізованому об'єкті за формулою

$$C_{Me} = \frac{T_p - T_f}{T_d - T_p} \cdot m \cdot k, \quad (1)$$

де  $k$  — коефіцієнт розрахунку масової концентрації елемента у пробі об'єкта за значеннями його концентрації в розчині проби [6].

## ПРОБЛЕМА ЕКОЛОГІЧНОСТІ ЕЛЕКТРОХІМІЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ

У розробленій аналітичній системі «Аналізатор ІХП» концентрації декількох токсичних елементів (свинцю, кадмію, міді, цинку, заліза, марганцю, хрому, селену, йоду) визначають з використанням вимірювального срібного електроду з амальгамою ртуті, що заборонено Директивами ЄС. Тому, одним з важливих завдань для створення технології експресного вимірювання токсикологічної якості питної води є застосування вимірювальних електродів з благородних металів, таких як платина та золото. Для цього необхідно для кожного токсичного елемента підібрати вид електрода, електролітичний розчин та параметри електрохімічного дослідження.

Серед забруднювачів, які потрапляють до питної води, найнебезпечнішим є свинець, який належить до речовин першого класу небезпеки, і тому його вміст у воді, харчових продуктах та атмосферному повітрі строго контролюють. Відомо, що він є одним з важливих видів мінеральної сировини і, водночас, є одним з глобальних і наднебезпечних забруднювачів довкілля, віднесених до класу канцерогенних для людини.

За результатами досліджень встановлено, що найефективнішим для визначення концентрацій свинцю у питній воді є платиновий вимірювальний електрод. Розглянемо приклад вимірювання концентрацій свинцю у питній воді з використанням платинового та срібного електродів з амальгамою ртуті.

Виконаємо вимірювання свинцю у модельному розчині 10 мл 2М HCl з концентрацією  $C_{Pb} = 10 \text{ мкг/дм}^3$  ( $0,01 \text{ мкг/см}^3$ ), що відповідає гранично допустимій концентрації (ГДК) свинцю у питній воді  $0,01 \text{ мг/дм}^3$  [1]. Електрохімічні параметри та похибки вимірювання концентрацій свинцю у модельному розчині  $C_{Pb} = 0,01 \text{ мг/дм}^3$  наведено в табл. 1.

Таблиця 1. Електрохімічні параметри та похибки концентрації свинцю

Електрод	Потенціал концентрування, мВ	Час концентрування, с	Потенціал зчитування, мВ	Час інверсії проби,	Виміряна концентрація, мкг/см <sup>3</sup>	Відносна похибка, %
Срібний з амальгамою ртуті	-900	90	-280	0,52	0,00962	3,8
Платиновий	-600	90	+150	51,9	0,00947	5,3

Результати порівняння свідчать, що електрохімічні умови вимірювання концентрацій на індикаторних електродах відрізняються, час інверсії свинцю для срібного електрода набагато менше ніж для платинового електрода, відносна похибка визначення концентрацій свинцю на обох електродах менше ніж нормована похибка 10 % [2], але платиновий електрод має більшу чутливість.

Застосування платинового та золотого електродів для вимірювання концентрацій токсичних елементів за методами ІХП є можливим, що уможлиблює розроблення інформаційної технології експресного визначення якості питної води та води різного природного походження.

### МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ МАСИ ДОБАВКИ ХІМІЧНОГО ЕЛЕМЕНТА

Однією з невирішених проблем застосування електрохімічних методів ІХП в аналітичних дослідженнях є процес визначення маси добавки стандартного зразку іонів елемента у вимірюванні концентрацій способом добавки для об'єктів довкілля з невідомою концентрацією досліджуваних елементів, коли необхідно шляхом експериментального підбору визначити необхідні електрохімічні параметри дослідження або вибрати шаблон визначення заданої концентрації.

Цей процес потребує багато часу, тому нагальною проблемою є його автоматизація шляхом побудови математичної моделі визначення маси добавки інверсії елемента залежно від значень електрохімічних параметрів дослідження.

Згідно з теоретичними основами інверсійної хронопотенціометрії, основне аналітичне рівняння методу має вигляд:

$$\tau_i = \frac{kRC_{Me}}{\varphi_i} t_{kon}, \quad (2)$$

де  $\tau_i$  — час інверсії,  $k$  — перехідний коефіцієнт,  $R$  — опір у зовнішньому ланцюзі вимірювання,  $C_{Me}$  — концентрація елемента,  $t_{kon}$  — час концентрування,  $\varphi_i$  — потенціал інверсії.

З рівняння (2) випливає, що за незмінності інших параметрів (об'єму, температури тощо) час інверсії є прямо пропорційним концентрації іону елемента в розчині, часу концентрування та опорів у зовнішньому ланцюзі вимірювання.

З іншого боку, згідно з інформаційною технологією [6], концентрація елемента  $C_{Me}$  (маса іонів у розчині проби  $m$ ) у разі використання однієї або декількох добавок визначається за зворотною електродною характеристикою — лінійною залежністю маси  $m$  іонів елемента від часу інверсії  $t_{inv}$ :

$$m = S_0^* + S^* \cdot t_{inv}, \quad (3)$$

де  $m$  — маса добавки стандартного зразка іонів елемента,  $S_0^*$  — параметр достовірності вимірювання концентрацій за способом багатьох добавок, приймають рівним нулю;  $S^* = m / t_{inv}$  — нахил зворотної хроноелектродної характеристики (чим він менше, тим чутливішою та якіснішою є пара електродів за однакових умов вимірювання);  $t_{inv} = \tau_i = t_d - t_p$ ; — різниця між часом інверсії добавки  $t_d$  та часом інверсії проби  $t_p$  (приріст часу інверсії за рахунок добавлення в розчин маси іонів  $m$ ).

Підсумовуючи, зробимо висновок, що процес інверсії у кожному діапазоні концентрацій, за стабільних значень інших змінних, залежить від трьох параметрів:

- 1) маси добавки  $m$  стандартного зразка іонів елемента;
- 2) часу інверсії  $t_{inv}$ ;
- 3) часу концентрування  $t_{kon}$ .

Крім того, згідно з рівнянням (3), залежність маси добавки  $m$  та часу інверсії  $t_{inv}$  від параметру нахилу зворотної хроноелектродної характеристики можна надати у вигляді

$$m = t_{inv} \cdot f(t_{kon}). \quad (4)$$

Розглянемо алгоритм побудови математичної моделі маси добавки елемента на прикладі вимірювання концентрації свинцю на платиновому електроді.

### АЛГОРИТМ ПОБУДОВИ МАТЕМАТИЧНОЇ МОДЕЛІ МАСИ ДОБАВКИ

Алгоритм побудови математичної моделі маси добавки хімічного елемента складається з таких кроків.

Крок 1. Вимірювання концентрацій у стандартних розчинах способом добавки. Виконуємо вимірювання масової концентрації іонів елемента свинцю  $C_{Pb}$  у стандартних фонових розчинах 2М НСІ, об'ємом  $10 \text{ см}^3$ , для значень шаблонів:  $1 \text{ мкг/см}^3$ ;  $0,1 \text{ мкг/см}^3$ ;  $0,01 \text{ мкг/см}^3$ ;  $0,001 \text{ мкг/см}^3$  (рис. 2).

Для кожного сигналу інтенсивності виконуємо моделювання та визначаємо час інверсії фону  $t_f$ , проби  $t_p$  та добавки  $t_d$  за площею відповідних компонентів у спектрах [6]. За значеннями цих параметрів будуємо зворотну хроноелектродну характеристику (рис. 3).

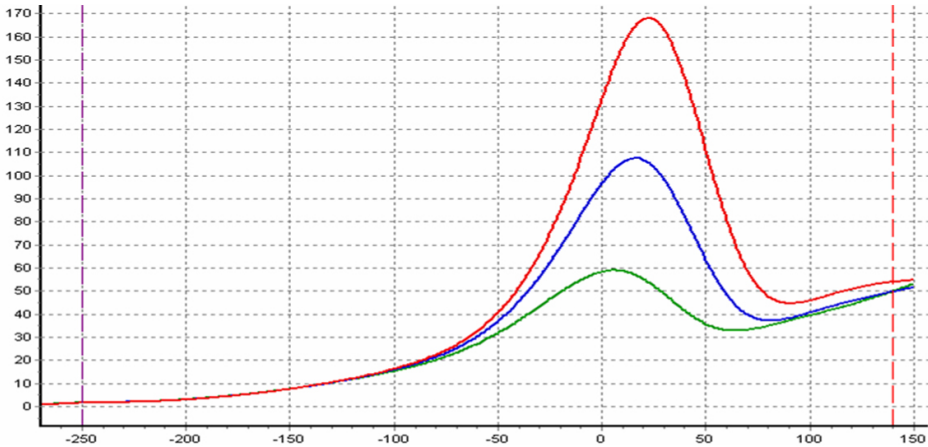
Розраховуємо значення концентрації свинцю  $C_{Pb}$  за формулою (1) для кожного стандартного розчину.

Крок 2. Формування електрохімічних параметрів дослідження. Формуємо та зберігаємо значення електрохімічних параметрів проведених вимірювань концентрацій елемента (табл. 2):

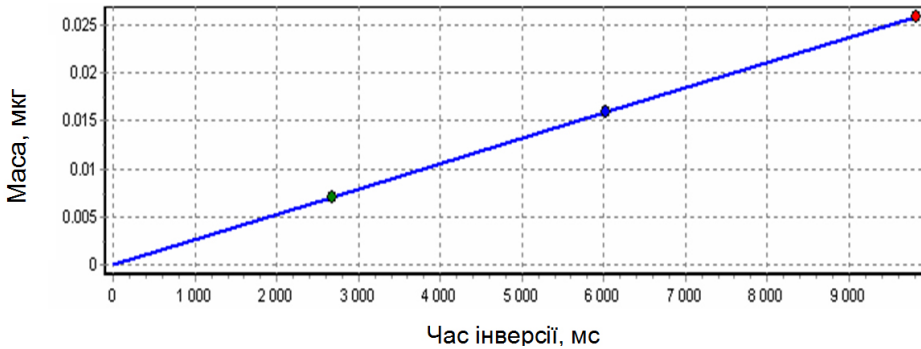
— маса добавки стандартного зразка іонів свинцю  $m$  [мкг], наприклад, для концентрації  $C_{Pb} = 1 \text{ мкг/см}^3$ ,  $m = 10 \text{ см}^3 \cdot 1,0 \text{ мкг/см}^3 = 10 \text{ мкг}$ ;  
 — час інверсії свинцю [с] розраховуємо як різницю між часом інверсії добавки  $t_d$  та часом інверсії проби  $t_p$  після моделювання, за площею компонентів свинцю у спектрах сигналів інтенсивності:

$$t_{inv} = t_d - t_p;$$





**Рис. 2.** Сигнали інтенсивності вимірювання свинцю  $C_{Pb} = 0,001 \text{ мкг/см}^3$  (нижня крива (зеленого кольору) – фоновий розчин, середня крива (синього кольору) – розчин проби, верхня крива (червоного кольору) – розчин проби з добавкою  $m = 0,01 \text{ мкг}$ )



**Рис. 3.** Зворотна хроноелектродна характеристика вимірювання свинцю

**Таблиця 2.** Електрохімічні параметри вимірювання та визначення концентрацій свинцю у різних діапазонах

Концентрація, $C$ , $\text{мкг/см}^3$	Виміряна концентрація $C_{Pb}$ , $\text{мкг/см}^3$	Маса добавки $m$ , $\text{мкг}$	Час інверсії $t_{inv}$ , $\text{с}$	Нахил звор. характеристики, $S^*$ , $\text{мкг/с}$	Час концентрування, $t_{кон}$ , $\text{с}$
1,0	0,986	10	1,163	8,6	60
0,1	0,1001	1,0	1,330	0,752	90
0,01	0,0979	0,1	2,933	0,0341	120
0,001	0,001015	0,01	3,636	0,00275	150

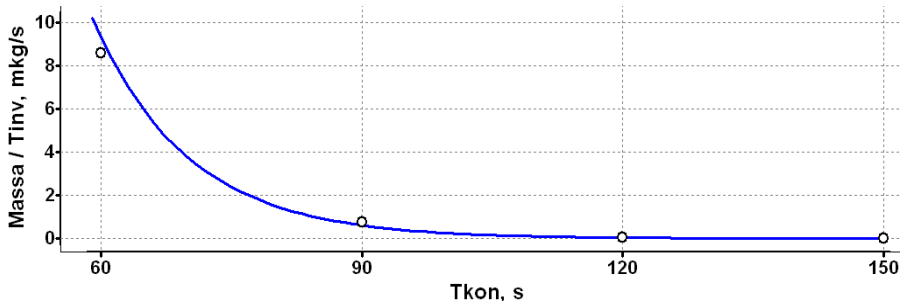


Рис. 4. Експериментальні дані та модельна залежність  $S^* = f(t_{kon})$

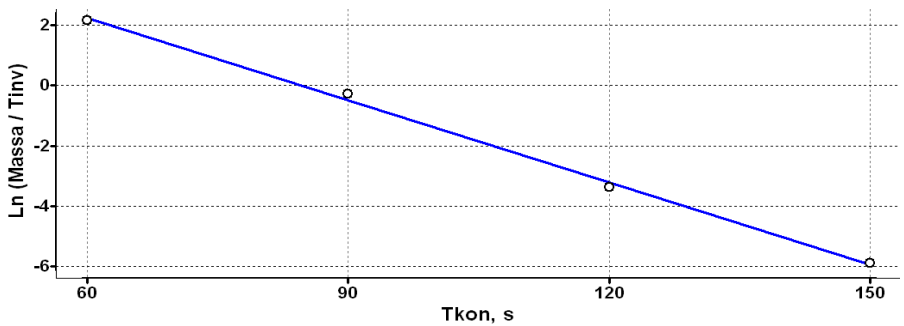


Рис. 5. Лінійна логарифмічна модель залежності  $\ln(S^*) = f(t_{kon})$

Таблиця 3. Статистичні характеристики математичної моделі маси інверсії свинцю

Концентрація, $C, \text{мкг/см}^3$	Маса добавки $m, \text{мкг}$	Час інверсії $t_{inv}, \text{с}$	Час концен- трування $t_{kon}, \text{с}$	Модельна маса добав- ки $m^*, \text{мкг}$	Відносна похибка моделі $\varepsilon, \%$
1,0	10	1,163	60	10,83	8,37
0,1	1,0	1,330	90	0,813	18,7
0,01	0,1	2,933	120	0,118	17,7
0,001	0,01	3,636	150	0,00957	4,3

— нахил або тангенс кута зворотної характеристики розраховуємо для кожної концентрації за залежністю  $S^* = m / t_{inv} [\text{мкг/см}^3]$  (рис. 3).

Крок 3. Побудова експериментального графіку залежності  $S^* = f(t_{kon})$ . Визначаємо точки експериментальних даних залежності нахилу зворотної характеристики  $S^* [\text{мкг/с}]$  від часу концентрування  $t_{kon} [\text{с}]$  (рис. 4).

Крок 4. Розрахунок моделі  $S^* = f(t_{kon})$ . Для лінеаризації даних логарифмуємо ординати  $S^*$  та будуємо графік  $\ln(S^*) = f(t_{kon})$  (рис. 5).

Виконуємо лінійну апроксимацію логарифмічних експериментальних даних за методом найменших квадратів та визначаємо коефіцієнти рівняння  $\ln(S^*) = a + b \cdot t_{kon}$  ( $a = 7,68$ ;  $b = -0,0908$ ).

Тоді, модель  $S^* = f(t_{kon})$  матиме вигляд:

$$S^* = \exp(7,68 - 0,0908 \cdot t_{kon}). \quad (5)$$

Графічно зображуємо експоненціальну модельну залежність (5) на рис. 4.

Крок 5. Математична модель маси добавки токсичного елемента. Згідно із залежністю (5) математична модель маси добавки свинцю  $m^*$  у разі вимірювання концентрацій платиновим електродом за способом добавки матиме вигляд

$$m^* = t_{inv} \cdot \exp(7,68 - 0,0908 \cdot t_{kon}). \quad (6)$$

Визначимо статистичні характеристики (табл. 3.) побудованої моделі за експериментальними даними, де відносна похибка моделі  $\varepsilon = (m - m^*) \cdot 100/m$ .

За даними табл. 3, математична модель маси добавки свинцю адекватно описує експериментальні дані з максимальною відносною похибкою 18,7 %, що не перевищує нормативної відносної похибки 20 %, згідно з методиками вимірювання концентрацій свинцю у воді за методами ІХП.

### МЕТОД ЕКСПРЕСНОГО ВИЗНАЧЕННЯ КОНЦЕНТРАЦІЙ У ПИТНІЙ ВОДІ

Розроблена модель маси добавки дає змогу за результатами одного вимірювання часу інверсії визначити масу іонів у розчині проби та розрахувати концентрацію хімічного елемента в об'єкті.

Особливістю експресного визначення концентрацій елемента у природній питній воді є відсутність підготовки проби, а це з хімічної точки зору не дає змогу повністю визначити наявні рухомі форми іонів, бо частина маси іонів перебуває у зв'язаному стані органічними сполуками. Визначити ступінь зв'язаності іонів теоретичним шляхом неможливо, він залежить від багатьох природних факторів: складу розчинених у воді солей, наявності органічних домішок, лужності тощо.

Для вирішення цієї проблеми введемо поняття такого *коефіцієнта активності іона* токсичного елемента ( $p_{Me}$ ) у водному розчині конкретного об'єкта водопостачання, який вказує, наскільки треба змінити розраховану масу іонів, одержану за моделлю маси інверсії, щоб вона відповідала реальній масі іонів, визначеній аналітичним шляхом способом добавки. За таким саме принципом у паспортних даних на іон-селективні електроди наводяться коефіцієнти активності іонів у пробі, залежно від їхніх концентрацій у фонових розчинах. Фактично, коефіцієнти активності іонів  $p_{Me}$  вказують на зв'язаність рухомих форм іонів токсичного елемента органічними сполуками у типових об'єктах водопостачання. Природно, що коефіцієнти активності іонів будуть різними для токсичних елементів, залежно від вимірювальних електродів та об'єктів водопостачання (підземної артезіанської води, води централізованого водопостачання — з крану, води криниць, поверхневої річкової та озерної води тощо).

Коефіцієнт активності іону  $p_{Me}$  розраховують за співвідношенням

$$p_{Me} = m_0 / m^*, \quad (7)$$

де  $m_0$  — маса іонів елемента у воді, визначена за способом добавки після підготування проби води, згідно з методикою вимірювання;  $m^*$  — модельна маса добавки іонів елемента, визначена у природній воді та розрахована за моделлю маси інверсії, наприклад для вимірювання свинцю на платиновому електроді (6).

Орієнтуючись на формулу визначення концентрацій  $C_{Me}$  (1) за способом добавки, формула для експресного визначення концентрацій  $C$  елемента  $Me$  буде такою:

$$C_{Me} = p_{Me} \cdot m^* \cdot k, \quad (8)$$

де  $k$  — перевідний коефіцієнт для розрахунку масової концентрації елемента у водному об'єкті за значеннями його концентрацій у електрохімічній комірці:

$$k = \frac{V_1}{V_2 H}, \quad (9)$$

де  $V_1$  — об'єм розчину з підготовленою пробєю води,  $\text{см}^3$ ;  $V_2$  — об'єм розчину з підготовленою пробєю води в електрохімічній комірці, взятого для аналізу,  $\text{см}^3$ ;  $H$  — об'єм проби об'єкта водопостачання, взятої для мінералізації та підготовки проби води ( $\text{см}^3$ ).

У випадку експресного вимірювання концентрацій елемента у природній воді  $V_1 = V_2 = H$ , формула для розрахунку перевідного коефіцієнта буде

$$k = \frac{1}{H}. \quad (10)$$

Остаточно, з урахуванням залежності (4) та (10), формула експресного визначення масової концентрації токсичного елемента у воді  $C_{Me}$  [ $\text{мкг}/\text{см}^3$ ] матиме вид

$$C_{Me} = p_{Me} \cdot t_{inv} \cdot S^* / H, \quad (11)$$

де  $p_{Me}$  — коефіцієнт активності іону елемента в натуральній воді,  $t_{inv}$  — час інверсії елемента [с] за результатами моделювання сигналу інтенсивності,  $S^*$  — нахил зворотної електродної характеристики [ $\text{мкг}/\text{с}$ ] залежно від часу концентрування  $S^* = f(t_{kon})$ , (для свинцю  $f_{Pb}(t_{kon}) = \exp(7,68 - 0,0908 \cdot t_{kon})$ ),  $H$  — об'єм води, взятої для аналізу,  $\text{см}^3$ .

Наведемо у табл. 4 розраховані значення нахилу  $S^*$  для свинцю на платиновому електроді залежно від часу концентрування  $t_{kon}$  з кроком 30 с.

Формулу (11) для вимірювання свинцю в питній воді можна спростити для конкретного об'єкта водопостачання. Проведені хімічні дослідження вказують, що в артезіанській воді бюветів міста Києва реальна концентрація свинцю не перевищує значення  $\text{ГДК}_{Pb} = 0,01 \text{ мкг}/\text{см}^3$  [11]. Для визначення концентрацій свинцю на платиновому електроді в артезіанській воді необхідно використати електрохімічні параметри шаблону  $0,001 \text{ мкг}/\text{см}^3$  з  $t_{kon} = 150 \text{ с}$  (табл. 2), взяти пробу натуральної води  $H = 5 \text{ мл}$ , додати 5 мл фоновому розчину соляної кислоти (4М HCl) та виконати дослідження.

Згідно з описаною методикою експресного вимірювання свинцю в артезіанській воді, для  $S^* / H = 0,002632 / 5 = 0,0005264$  формула (11) буде:

$$C_{Pb} = 0,0005264 \cdot p_{Me} \cdot t_{inv}, \quad (12)$$

**Таблиця 4.** Значення нахилу зворотної електродної характеристики для свинцю на платиновому електроді

Час концентрування $t_{кон}, c$	Нахил зворотної характеристики $S^*, мкг/с$
30	142,0
60	9,319
90	0,6114
120	0,04012
150	0,002632
180	0,0001727

Отже, математична модель маси добавки (6) дає змогу експресно визначити концентрацію свинцю в питній артезіанській воді за формулою (12), виконавши тільки одне вимірювання.

### **АЛГОРИТМ ОЦІНЮВАННЯ РИЗИКІВ ПОЯВИ ЗАХВОРЮВАНЬ ЛЮДИНИ У РАЗІ СПОЖИВАННЯ ЗАБРУДНЕНОЇ ПИТНОЇ ВОДИ**

Оцінювання ризиків появи захворювань у разі споживання забрудненої питної води здійснюється послідовним виконанням таких трьох етапів:

етап 1 — вимірювання концентрацій хімічних елементів проб питної води;

етап 2 — оцінювання ризику для здоров'я людини;

етап 3 — аналіз результатів оцінювання ризиків у разі споживання забрудненої питної води.

На першому етапі за допомогою приладу «Аналізатор ІХП» виконуємо вимірювання концентрацій хімічних елементів у питній воді.

На другому етапі, відповідно до методичного підходу та рекомендацій [12, 13], оцінюємо ризик для здоров'я людини окремо для неканцерогенних та канцерогенних ефектів.

Для оцінювання ризику для здоров'я людини, пов'язаного із забрудненням питної води токсичними речовинами, використовуємо безпорогову модель оцінювання потенційного неканцерогенного ризику, що базується на ймовірнісних оцінках розвитку несприятливих ефектів.

Оцінку потенційного неканцерогенного ризику впливу  $i$ -ої хімічної речовини, що міститься у питній воді та має токсичний ефект впливу, визначаємо за рівнянням

$$Risk_i = 1 - \exp \left( \left( \ln(0,84) / (ГДК_i \times K_{ri}) \right) \times C_i \right), \quad (13)$$

де  $Risk_i$  — імовірність розвитку неспецифічних токсичних ефектів за хронічної інтоксикації (від 0 до 1);  $C_i$  — концентрація хімічної  $i$ -ої речовини у питній воді: середня добова концентрація речовини, що потрапляє в організм людини з питною водою впродовж тривалого часу; для оцінювання ефектів від тривалого (хронічного) впливу речовин використовуємо значення їхніх середніх концентрацій (щонайменше за 1 рік);  $ГДК_i$  — норматив гранично допустимої концентрації речовини (табл. 6.5);  $K_{ri}$  — коефіцієнт запасу (табл. 5).

Оцінку сумарного (комбінованого) неканцерогенного ризику  $Risk_n$  від впливу всіх  $m$  забруднювальних речовин визначаємо за допомогою рівняння

$$Risk_n = 1 - (1 - Risk_1) \times (1 - Risk_2) \times \dots \times (1 - Risk_m), \quad (14)$$

де  $Risk_1, Risk_2, \dots, Risk_m$  — неканцерогенний ризик від впливу кожної речовини, або розраховуємо згідно з методологією визначення екологічного ризику комбінованого впливу кількох хімічних речовин для оцінювання здоров'я людей [20].

Основним параметром для оцінювання канцерогенного ризику є чинник канцерогенного потенціалу  $SF_o$ , що відображає верхню, консервативну оцінку канцерогенного ризику за очікуваної (середньої) тривалості життя людини (70 років). Цей чинник характеризує міру додаткового індивідуального канцерогенного ризику або ступінь збільшення ймовірності розвитку раку внаслідок впливу канцерогену.

Оцінку канцерогенного ризику речовини, що має токсичний ефект, визначаємо за використання експоненціальної моделі:

$$Risk_i = 1 - \exp(-SF_o_i \times LADD_i), \quad (15)$$

де  $LADD_i$  — величина середньодобової дози, яку визначаємо таким чином:

$$LADD_i = (C_i \times CR \times ED \times EF) / (BW \times AT \times 365), \quad (16)$$

де  $C_i$  — концентрація речовини у питній воді, мг/л;  $CR$  — швидкість потрапляння (кількість за одиницю часу) питної води в організм людини, л/добу (2 л/добу — дорослі, 1 л/добу — діти);  $ED$  — тривалість впливу, років (30 років — дорослі, 6 років — діти);  $EF$  — частота впливу, днів/рік (350 днів);  $BW$  — маса тіла людини, кг (70 кг — дорослі, 15 кг — діти);  $AT$  — період експозиції, років (70 років); 365 — кількість днів у році.

Якщо отримане значення ризику  $Risk_k$  є вищим за 0,001, тоді сумарний канцерогенний ризик перераховуємо за рівнянням (14).

Загальну оцінку ризиків появи захворювань у разі споживання забрудненої питної води  $Risk$  визначаємо як суму оцінок неканцерогенного та канцерогенного впливу:

$$Risk = Risk_n + Risk_k. \quad (17)$$

На третьому етапі аналізуємо одержані значення оцінок ризиків появи захворювань.

Кожна шкідлива речовина, що потрапила у навколишнє середовище, створює ризик загрози здоров'ю. Цей ризик залежить від дози речовини, що потрапила в організм людини.

Для аналізу величини оцінки хронічного неканцерогенного ризику використовуємо значення  $Risk_n$  та відповідний вплив хронічного неканцерогенного ризику, згідно з табл. 6.

**Таблиця 5.** Параметри оцінювання хронічного неканцерогенного ризику у разі споживання забрудненої питної води

CAS	Речовина	RfD мг/кг	Коефі- цієнт запасу, K <sub>r</sub>	Чинник канцеро- генного ризику SF <sub>0</sub> , [мг/(кг·добу)] <sup>-1</sup>	Вразливі органи та системи
6484-52-2	Амоній	-	10	-	кров
7439-89-6	Залізо	0,3	10	-	слиззова, шкіра, кров, імунна система
7553-56-2	Йод	0,017	-	-	гормони, щитоподібна залоза
7440-43-9	Кадмій	0,0005	100	0,38	нирки, гормони
7681-11-0	Калій	0,017	-	-	
7440-70-2	Кальцій	41,4	-	-	нирки,
7440-48-4	Кобальт	0,02	10	-	кров
7439-96-5	Марганець	0,14	10	-	ЦНС, кров
7440-50-8	Мідь	0,019	10	-	шлунок, нирки, печінка
7440-38-2	Миш'як	0,0003	100	1,75	шкіра, ЦНС, серце, імунітет, гормони, система вуглеводного обміну, шлунок
7440-23-5	Натрій	34,3	-	-	серце
7440-02-0	Нікель	0,02	10	-	печінка, серце, шлунок, кров, система обміну речовин
14797-55-8	Нітрати	1,6	10	-	кров, серце
7440-31-5	Олово	0,6	10	-	печінка, нирки, шлунок
7439-97-6	Ртуть	0,0003	10	-	імунна система, нирки, ЦНС, гормони, репродуктивна система
7439-92-1	Свинець	0,0035	3	0,047	ЦНС, кров, гормони, розвиток, репродукційна система
7782-49-2	Селен	0,005	10	-	шкіра, печінка, волосся, селезінка
7782-41-4	Фтор	0,06	10	-	зуби, кістки
7440-47-3	Хром	0,005	10	0,42	печінка, нирки, шлунок, слизові
7440-66-6	Цинк	0,3	10	-	кров

Примітки: CAS — номер за реєстром хімічних речовин Американського хімічного товариства; RfD — референтна доза, тобто величина, яка характеризує добову дію хімічної речовини протягом всього життя і, ймовірно, не призводить до виникнення неприємного ризику для здоров'я чутливих груп; ЦНС — центральна нервова система.

**Таблиця 6.** Вплив хронічного неканцерогенного ризику на здоров'я людини у разі споживання забрудненої питної води

Діапазон оцінок	Значення впливу хронічного неканцерогенного ризику
< 0,5	прийнятний, відсутні несприятливі медико-екологічні тенденції
0,05 - 0,16	викликає побоювання, виникає тенденція до зростання неспецифічної патології
0,16-0,50	небезпечний, виникає достовірною тенденція до зростання неспецифічної патології у разі появи одиничних випадків
0,50-0,84	надзвичайно небезпечний, виникає достовірне зростання неспецифічної патології у разі появи значної кількості випадків, а також тенденція до збільшення смертності населення
~ 1,0	катастрофічний, забруднення навколишнього середовища перейшло в інший якісний стан (поява випадків хронічного отруєння, зміна структури захворюваності, тенденція до збільшення смертності тощо)

У більшості країн Західної Європи та в Україні індивідуальний загальний *Risk* та канцерогенний ризик  $Risk_k$ , якому піддається людина, вважається дуже малим, якщо його рівень не перевищує величини  $10^{-6}$  за рік. Тобто, від цієї причини може загинути одна людина на мільйон осіб. За цих умов додаткових дій до зниження ризику у разі споживання питної води не потрібно.

За значенням ризику вищим за  $10^{-6}$  до  $10^{-4}$  необхідним є оповіщення всіх зацікавлених осіб, організацій, установ та вирішення питання щодо зниження рівня ризику.

Верхня межа допустимого ризику (максимально допустимий ризик) є різною для населення і для персоналу, який працює у шкідливих умовах. Згідно з нормативами верхня межа допустимого ризику від впливу речовин з канцерогенними властивостями для людини в Україні становить  $10^{-4}$ , що потребує проведення розширених досліджень та здійснення екстрених заходів щодо зниження ризику для здоров'я населення.

Якщо концентрації хімічних елементів є близькими або перевищують значення ГДК, то аналізуємо можливість появи змін здоров'я, складаючи вплив токсичних елементів на вражені органи та системи людини. В результаті аналізу формується висновок щодо токсикологічної якості питної води [21–28].

Отже, інформаційна технологія експресного визначення концентрацій хімічних елементів у питній воді, реалізована в аналітичній системі «Аналізатор ІХП», складається з п'яти блоків: бази даних у хмарному сховищі, блоків експрес-аналізу токсичності питної води за новим методом порівняння сигналів, аналізу екологічної якості об'єктів довкілля з використанням для вимірювання концентрацій нових імпульсних методів хронопотенціометрії, іонметричного аналізу за новим методом хроноіонетрії та блоку оцінювання ризиків появи захворювань людини у разі споживання забрудненої питної води (рис. 6).



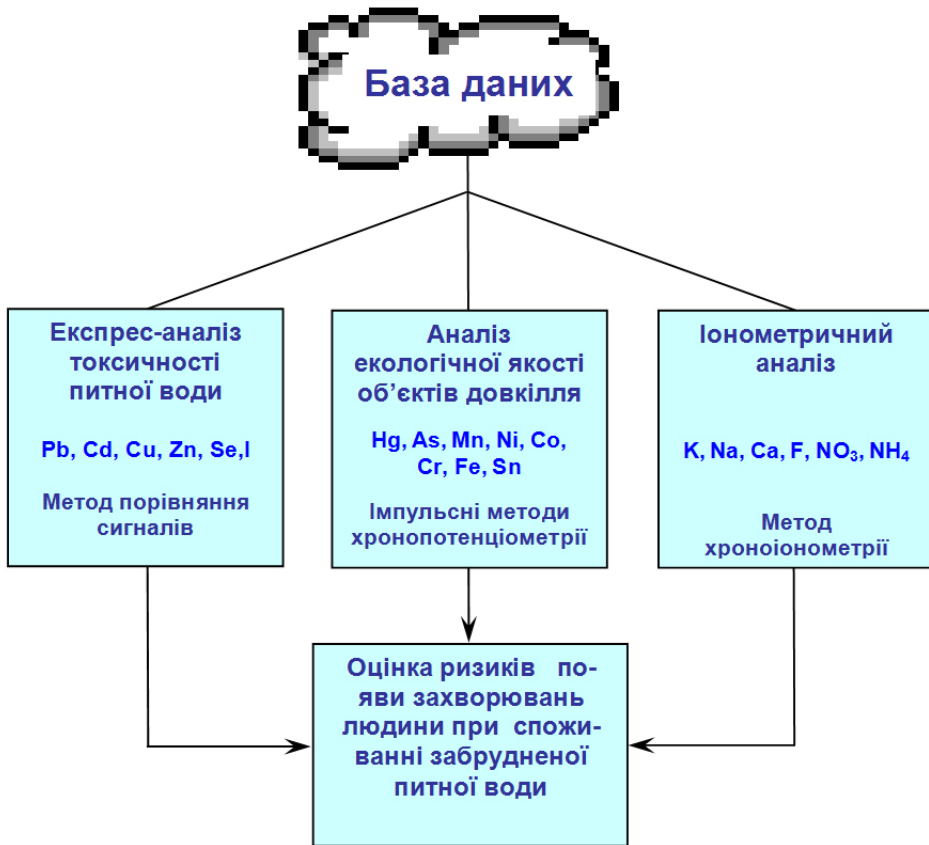


Рис. 6. Схема інформаційної технології експресного визначення концентрацій

Застосування розробленої технології забезпечує запобігання появи захворювань, спричинених вживанням неякісної питної води. Подальші зусилля буде спрямовано на розроблення мобільних застосунків, які використовують хмарні технології для зберігання даних вимірювання концентрацій хімічних елементів, одержаних приладами типу «Аналізатор ІХП».

## ВИСНОВКИ

Удосконалена аналітична система «Аналізатор ІХП» забезпечує експресне вимірювання концентрації 12 хімічних речовин (Pb, Cd, Cu, Zn, Se, I, K, Na, Ca, F, NO<sub>3</sub>, NH<sub>4</sub>) у водних об'єктах на місці та ще вісім токсичних елементів (Hg, As, Sn, Ni, Co, Mn, Cr, Fe) в лабораторії що дає змогу оперативно та в повному обсязі визначати екологічну якість питної води та об'єктів навколишнього середовища.

Застосування іон-селективних та вимірювальних електродів на основі благородних металів підвищує екологічність та швидкість виконання досліджень. Використання методології оцінювання ризику впливу хімічних елементів на людину та довкілля уможливорює прогнозування виникнення захворювань внаслідок тривалого споживання забрудненої питної води або можливості використання водойм для зрошування та риборозведення.

ЛІТЕРАТУРА

1. ДСанПіН 2.2.4-171-10. Державні санітарні норми і правила "Гігієнічні вимоги до води питної, призначеної для споживання людиною." Наказ МОЗ України від 12.05.2010 № 400. Реєстр. 1 липня 2010 р. за N 452/17747.
2. Директива Ради 98/83/ЄС "Про якість води, призначеної для споживання людиною" від 03.11.1998, [http://zakon5.rada.gov.ua/laws/show/994\\_963](http://zakon5.rada.gov.ua/laws/show/994_963)
3. Прокопов В.О. Питна вода України: медико-екологічні та санітарно-гігієнічні аспекти. К. : Медицина, 2016. 400 с.
4. Гриценко В.І., Бабак О.В., Суровцев І.В. Особливості взаємозв'язку мереж 5G, 6G з великими даними, інтернетом речей та штучним інтелектом. *Cyb. and comp. eng.*, 2021. №. 2 (204), 5–18. <https://doi.org/10.15407/kvt204.02.005>
5. Ammonium — fast and robust determination according to current ISO, EPA, and ASTM standards using direct measurement. 2020, URL: <https://www.metrohm.com/en-vn/company/news/news-ammonia-ab-133/>
6. Суровцев І.В., Галімова С.К., Татарінов О.Е. Інформаційна технологія визначення концентрації токсичних елементів в об'єктах навколишнього середовища. *Кибернетика и вычисл. техника.* 2018. № 191. 5–31. DOI: <https://doi.org/10.15407/kvt191.01.005>
7. Пристрій для вимірювання концентрації хімічних елементів методами імпульсної хронопотенціометрії : патент на винахід 123459, Україна : МПК G01N 27/48 (2006.01). / О.В. Бабак, І.В. Суровцев ; заявник та власник Міжн. наук.-навч. центр інформ. техн. і систем ; заявл. 12.03.2019; опубл. 07.04.2021, Бюл. № 14.
8. Surovtsev I.V., Velykyi P.Y., Galimova V.M., Sarkisova M.V. Ionometric method for determination of concentrations of microelements in research of digital medicine. *Cyb. and comp. eng.*, 2020. №. 4 (220), 25–43. DOI: <https://doi.org/10.15407/kvt202.04.025>.
9. Surovtsev I.V., Galimov S.K., Galimova V.M., Sarkisova M.V. Method of chronoionometric determination of concentrations of fluoride, nitrate, ammonium in drinking water. *Cyb. and comp. eng.*, 2021. №. 1 (203), 5–25. DOI: <https://doi.org/10.15407/kvt203.01.005/>
10. Environmental Protection Agency (EPA). Policy for use of probabilistic analysis in risk assessment at the US Environmental Protection Agency // Office of Research and Development, US EPA. Washington, DC, 1997. 701 p.
11. Зоріна О. В. Гігієнічні проблеми питного водопостачання України та шляхи їх вирішення в умовах євроінтеграції : дис. ... доктор біологічних наук : 14.02.01 «Гігієна та професійна патологія» (біологічні науки) : ДУ «Інститут громадського здоров'я ім. О. М.Марзєєва НАМНУ», Київ, 2019, 382 с.
12. Методичні рекомендації МР 2.2.12-142-2007. Оцінка ризику для здоров'я населення від забруднення атмосферного повітря. Затв. Наказом МОЗ України від 13.04.07 № 184. Київ, 2007. 40 с.
13. Р 2.1.10.1920-04. Руководство по оценке риска для здоровья населения при воздействии химических веществ, загрязняющих окружающую среду. М.: Федеральная служба по надзору в сфере защиты прав потребителей и благополучия человека. 2004. 256 с.
14. Eric Bakker and Ernö Pretsch. *Modern Potentiometry* // *Angew Chem Int Ed Engl.* 2007; 46(30): 5660–5668. <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC2515866>
15. Scientific Opinion on Dietary Reference Values for water. EFSA Panel on Dietetic Products, Nutrition, and Allergies (NDA) // *EFSA Journal* 2010; 8(3):1459
16. Huang, Y.; Wang, T.; Xu, Z.; Hughes, E.; Qian, F.; Lee, M.; Fan, Y.; Lei, Y.; Brückner, C.; Li, B. Real-time in situ monitoring of nitrogen dynamics in wastewater treatment processes using wireless, solid-state, and ion-selective membrane sensors. *Environ. Sci. Technol.* 2019, 53, 3140–3148.
17. Gemene Kebede L. Bakker E. Measurement of total calcium by flash chronopotentiometry at polymer membrane ion-selective electrodes. *Analytica Chimica Acta.* 2009. Vol. 648, 240–245.

18. Roy, S.; David-Pur, M.; Hanein, Y. Carbon nanotube-based ion selective sensors for wearable applications. *ACS Appl. Mater. Interfaces* 2017, 9, 35169–35177.
19. Umezawa, Y.; Bühlmann, P.; Umezawa, K.; Tohda, K.; Amemiya, S. Potentiometric selectivity coefficients of ion-selective electrodes. Part I. Inorganic cations (technical report). *Pure Appl. Chem.* 2000, 72, 1851–2082.
20. Guidance on harmonised methodologies for human health, animal health and ecological risk assessment of combined exposure to multiple chemicals // *EFSA Journal* 2019;17(3):5634. doi: 10.2903/j.efsa.2019.5634
21. Baas J, Augustine S, Marques GM and Dorne JL, 2018. Dynamic energy budget models in ecological risk assessment: from principles to applications. *Science of the Total Environment*, 628–629, 249–260
22. Bopp S, Berggren E, Kienzler A, van der Linden S and Worth A, 2015. Scientific methodologies for the assessment of combined effects of chemicals — a survey and literature review. *JRC Technical Reports*, 64.
23. ECETOC (European Centre for Ecotoxicology and Toxicology of Chemicals), 2012. The European Centre for Ecotoxicology and Toxicology of Chemicals (ECETOC) 2012 Annual Report. Available online: [http://www.ecetoc.org/wp-content/uploads/2013/06/ECETOC\\_2012\\_Annual\\_Report.pdf](http://www.ecetoc.org/wp-content/uploads/2013/06/ECETOC_2012_Annual_Report.pdf)
24. EFSA PPR Panel (EFSA Panel on Plant Protection Products and their Residues), 2014. Scientific Opinion on good modelling practice in the context of mechanistic effect models for risk assessment of Plant Protection Products. *EFSA Journal* 2014;12(3):3589, 92 pp. <https://doi.org/10.2903/j.efsa.2014.3589>
25. Meek ME, Boobis AR, Crofton KM, Heinemeyer G, Van Raaij M and Vickers C, 2011. Risk assessment of combined exposure to multiple chemicals: A WHO/IPCS framework. *Regulatory Toxicology and Pharmacology*, 60, S1–S14
26. Solomon KR, Wilks MF, Bachman A, Boobis A, Moretto A, Pastoor TP, Phillips R and Embry MR, 2016. Problem formulation for risk assessment of combined exposures to chemicals and other stressors in humans. *Critical Reviews in Toxicology*, 46, 835–844
27. US EPA (Environmental Protection Agency), 2011. Vocabulary Catalog List Detail-Integrated Risk Information System (IRIS) Glossary
28. Van Gestel CAM, Jonker MJ, Kammenga JE, Laskowski R and Svendsen C, 2011. Mixture Toxicity. Linking Approaches from Ecological and Human Toxicology. SETAC Press, Pensacola, USA, 320 pp. ISBN 9781439830086

Отримано 26.09.2021

## REFERENCES

1. DSanPiN 2.2.4-171-10. "Hygienic requirements for drinking water intended for human consumption". *Order of the Ministry of Health of Ukraine* dated 12.05.2010 No.400. Register. July 1, 2010 for No. 452/17747 (in Ukrainian).
2. COUNCIL DIRECTIVE 98/83/EC of 3 November 1998 on the quality of water intended for human consumption (OJ L 330, 5.12.1998, p. 32), <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/EN/TXT/PDF/?uri=CELEX:01998L0083-20151027&from=EN>
3. Prokopov VO Drinking water of Ukraine: medical-ecological and sanitary-hygienic aspects. *Kyiv, Medytsyna*, 2016, 400 p. (in Ukrainian).
4. Gritsenko V.I., Babak O.V., Surovtsev I.V. Peculiarities of interconnection 5g, 6g networks with big data, internet of things and artificial intelligence. *Cyb. and comp. eng.*, 2021. № 2 (204), 5-18. <https://doi.org/10.15407/kvt204.02.005> (in Ukrainian).
5. Ammonium – fast and robust determination according to current ISO, EPA, and ASTM standards using direct measurement. 2020, URL: <https://www.metrohm.com/en-en/vn/company/news/news-ammonia-ab-133/>
6. Surovtsev I.V., Galimov S.K., Tatarinov O.E. Information technology for determining the concentration of toxic elements in environmental objects. *Kibernetika i vyčislitel'naâ tehnikâ*. 2018, No.1(191), pp. 5–33. DOI: <https://doi.org/10.15407/kvt191.01.005> (in Ukrainian)
7. Device for measuring the concentration of chemical elements by pulse chronopotometry: pat. 123459, Ukraine: IPC. G01N 27/48. № a201902429; claimed 12.03.2019; published 07.04.2021, *Bull.* № 14 (in Ukrainian).

8. Surovtsev I.V., Velykyi P.Y., Galimova V.M., Sarkisova M.V. Ionometric method for determination of concentrations of microelements in research of digital medicine. *Cyb. and comp. eng.*, 2020. №. 4 (220), 25–43. DOI: <https://doi.org/10.15407/kvt202.04.025>.
9. Surovtsev I.V., Galimov S.K., Galimova V.M., Sarkisova M.V. Method of chronoionometric determination of concentrations of fluorine, nitrate, ammonium in drinking water. *Cyb. and comp. eng.*, 2021. №. 1 (203), 5–25. DOI: <https://doi.org/10.15407/kvt203.01.005/>
10. Environmental Protection Agency (EPA). Policy for use of probabilistic analysis in risk assessment at the US Environmental Protection Agency // *Office of Research and Development*, US EPA. Washington, DC, 1997. 701 p.
11. Zorina OV Hygienic problems of drinking water supply of Ukraine and ways to solve them in terms of European integration: dis. ... Doctor of Biological Sciences: 14.02.01 "Hygiene and Occupational Pathology" (biological sciences): *SI "Institute of Public Health. OM Marzeeva NAMNU"*, Kyiv, 2019, 382 p (in Ukrainian).
12. Methodical recommendations of MR 2.2.12-142-2007. Assessment of the risk to public health from air pollution. *Approved Order of the Ministry of Health of Ukraine* dated 13.04.07 № 184. Kyiv, 2007. 40 p. (in Ukrainian)
13. P 2.1.10.1920-04. Guidelines for Assessing Public Health Risks from Exposure to Chemicals Polluting the Environment. *Moscow: Federal Service for Supervision of Consumer Rights Protection and Human Welfare*. 2004. 256 p (in Russian).
14. Eric Bakker and Ernö Pretsch. Modern Potentiometry // *Angew Chem Int Ed Engl*. 2007; 46(30): 5660–5668. <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC2515866>
15. Scientific Opinion on Dietary Reference Values for water. *EFSA Panel on Dietetic Products, Nutrition, and Allergies (NDA)* // *EFSA Journal* 2010; 8(3):1459
16. Huang, Y.; Wang, T.; Xu, Z.; Hughes, E.; Qian, F.; Lee, M.; Fan, Y.; Lei, Y.; Brückner, C.; Li, B. Real-time in situ monitoring of nitrogen dynamics in wastewater treatment processes using wireless, solid-state, and ion-selective membrane sensors. *Environ. Sci. Technol.* 2019, 53, 3140–3148.
17. Gemene Kebede L. Bakker E. Measurement of total calcium by flash chronopotentiometry at polymer membrane ion-selective electrodes. *Analytica Chimica Acta*. 2009. Vol. 648, 240–245.
18. Roy, S.; David-Pur, M.; Hanein, Y. Carbon nanotube-based ion selective sensors for wearable applications. *ACS Appl. Mater. Interfaces* 2017, 9, 35169–35177.
19. Umezawa, Y.; Bühlmann, P.; Umezawa, K.; Tohda, K.; Amemiya, S. Potentiometric selectivity coefficients of ion-selective electrodes. Part I. Inorganic cations (technical report). *Pure Appl. Chem.* 2000, 72, 1851–2082.
20. Guidance on harmonised methodologies for human health, animal health and ecological risk assessment of combined exposure to multiple chemicals // *EFSA Journal* 2019;17(3):5634. doi: 10.2903/j.efsa.2019.5634
21. Baas J, Augustine S, Marques GM and Dorne JL, 2018. Dynamic energy budget models in ecological risk assessment: from principles to applications. *Science of the Total Environment*, 628–629, 249–260
22. Bopp S, Berggren E, Kienzler A, van der Linden S and Worth A, 2015. Scientific methodologies for the assessment of combined effects of chemicals — a survey and literature review. *JRC Technical Reports*, 64.
23. ECETOC (European Centre for Ecotoxicology and Toxicology of Chemicals), 2012. *The European Centre for Ecotoxicology and Toxicology of Chemicals (ECETOC) 2012 Annual Report*. Available online: [http://www.ecetoc.org/wp-content/uploads/2013/06/ECETOC\\_2012\\_Annual\\_Report.pdf](http://www.ecetoc.org/wp-content/uploads/2013/06/ECETOC_2012_Annual_Report.pdf)
24. EFSA PPR Panel (EFSA Panel on Plant Protection Products and their Residues), 2014. Scientific Opinion on good modelling practice in the context of mechanistic effect models for risk assessment of Plant Protection Products. *EFSA Journal* 2014;12(3):3589, 92 pp. <https://doi.org/10.2903/j.efsa.2014.3589>
25. Meek ME, Boobis AR, Crofton KM, Heinemeyer G, Van Raaij M and Vickers C, 2011. Risk assessment of combined exposure to multiple chemicals: A WHO/IPCS framework. *Regulatory Toxicology and Pharmacology*, 60, S1–S14

26. Solomon KR, Wilks MF, Bachman A, Boobis A, Moretto A, Pastoor TP, Phillips R and Embry MR, 2016. Problem formulation for risk assessment of combined exposures to chemicals and other stressors in humans. *Critical Reviews in Toxicology*, 46, 835–844
27. US EPA (Environmental Protection Agency), 2011. *Vocabulary Catalog List Detail-Integrated Risk Information System (IRIS) Glossary*
28. Van Gestel CAM, Jonker MJ, Kammenga JE, Laskowski R and Svendsen C, 2011. Mixture Toxicity. Linking Approaches from Ecological and Human Toxicology. *SETAC Press, Pensacola, USA*, 320 pp. ISBN 9781439830086

Received 26.09.2021

*Surovtsev I.V.*<sup>1</sup>, DSc (Engineering), Senior Researcher,  
Head of the Ecological Digital Systems Department  
ORCID: 0000-0003-1133-6207,

e-mail: dep115@irtc.org.ua

*Velykyi P.Y.*<sup>1</sup>, PhD Student,  
the Ecological Digital Systems Department

ORCID: 0000-0002-8118-9348,

e-mail: velykyi305@gmail.com

*Hrytsaienko M.O.*<sup>2</sup>, PhD Student,

Joint Research Unit 7504,

ORCID: 0000-0002-5979-0663,

e-mail: maryna.hrytsaienko@ipcms.unistra.fr, gmari@ukr.net

*Galimova V.M.*<sup>3</sup>, PhD (Chemistry),

Associate Professor of the Department of Analytical  
and Inorganic Chemistry and Water Quality

ORCID: 0000-0001-9602-1006,

e-mail: galimova2201@gmail.com

<sup>1</sup> International Research and Training Center

for Information Technologies and Systems

of the National Academy of Sciences of Ukraine

and Ministry of Education and Science of Ukraine,

40, Acad. Glushkov av., Kyiv, 03187, Ukraine

<sup>2</sup> Strasbourg Institute of Material Physics and Chemistry,

National Center for Scientific Research – University of Strasbourg,

4 Rue Blaise Pascal, 67081 Strasbourg, France

<sup>3</sup> National University of Life and Environmental Sciences of Ukraine,

17, bldg. № 2, Heroes of Defense str., Kyiv, 03041, Ukraine

## ANALYTICAL SYSTEM FOR MONITORING AND ASSESSING OF RISKS OF DRINKING WATER CONSUMPTION

**Introduction.** The use of the electrochemical analytical system "Analyzer SCP" allows the environmental monitoring the conditions of drinking water and water objects, assessing and predicting the risks of toxicants on human health and the environment.

**The purpose** of the paper is to improve information technology for determining the concentrations of chemical elements for rapid assessment of drinking water quality and methods for assessing the risk of their impact on the biosphere.

**Methods.** Pulse methods of chronopotentiometry, chronoionometric method of direct potentiometry and methods of assessment of ecological risk of influence of chemicals on environment are used for measurement of concentrations.

**Results.** Developed information technology with machine learning, cloud technologies and the use of intelligent models of the mass of chemical element additives, that allows the results of one measurement to quickly determine the elements concentrations in the water objects by comparing signals and assess the impact risks of chemicals to human health when consuming contaminated drinking water.

**Conclusions.** Advanced analytical system "Analyzer SCP" allows you to quickly measure the concentration of 12 chemicals (Pb, Cd, Cu, Zn, Se, I, K, Na, Ca, F, NO<sub>3</sub>, NH<sub>4</sub>) in water bodies on site and eight more toxic elements (Hg, As, Sn, Ni, Co, Mn, Cr, Fe) in the laboratory, which allowed to quickly and fully determine the environmental quality of drinking water and the environment. The use of ion-selective and measuring electrodes based on precious metals increases the environmental friendliness and speed of research. The application of risk assessment methodology for the chemical elements impact on humans and the environment allows to predict the consequences and occurrence of diseases with long-term consumption of contaminated drinking water or the possibility of using water bodies for irrigation and fish farming.

**Keywords:** *concentration, ecological risk, ion-selective electrode, inversion chronopotentiometry, drinking water.*