

Informatics and Information Technologies

DOI: <https://doi.org/10.15407/kvt218.04.005>

СУРОВЦЕВ І.В.¹, д-р техн. наук, старш. наук. співроб.,
зав. відділу екологічних цифрових систем,
<https://orcid.org/0000-0003-1133-6207>, igorsur52@gmail.com

САВЧЕНКО-СИНЯКОВА Є.А.¹, канд. техн. наук, старш. наук. співроб.,
провід. наук. співроб. відд. інформаційних технологій індуктивного моделювання,
<https://orcid.org/0000-0003-4851-9664>, e-mail: savchenko_e@meta.ua

ГАЛІМОВА В.М.², канд. хім. наук,
доцент, каф. аналітичної та неорганічної хімії і якості води,
<https://orcid.org/0000-0001-9602-1006>, galimova2201@gmail.com

ЛЯХОВ В.С.¹, аспірант,
<https://orcid.org/0009-0004-5332-1104>, vlyahov@gmail.com

ЯКОВЕНКО І.М.¹,
наук. співроб., відділ інтелектуальних автоматичних систем,
<https://orcid.org/0000-0002-4477-3254>, yakvan@ukr.net

¹ Міжнародний науко-навчальний центр інформаційних технологій
та систем НАН України та МОН України,
просп. Академіка Глушкова, 40, Київ, 03187, Україна

² Національний університет біоресурсів та природокористування України,
вул. Героїв Оборони, 17, корпус № 2, 16, 18, Київ, 03041, Україна

ПІДХОДИ ДО РОЗРОБЛЕННЯ ІНФОРМАЦІЙНОЇ ТЕХНОЛОГІЇ ШВИДКОЇ ІДЕНТИФІКАЦІЇ ЕКОЛОГІЧНОГО СТАНУ ОБ'ЄКТІВ НАВКОЛИШНЬОГО СЕРЕДОВИЩА

***Вступ.** Задача експресного вимірювання забруднення водних об'єктів є актуальною задачею сучасності. Розроблення методів, а на їх основі технологій та приладів, зручних у використанні та доступних за ціною дасть змогу визначати концентрацію токсичних речовин у воді з метою оцінки її безпечності та якості. Застосування швидких систем визначення екологічного стану водних об'єктів сприятиме зменшенню ризиків споживання забрудненої води.*

***Метою дослідження** є провести аналіз підходів до експресного вимірювання концентрацій токсичних речовин у воді з метою побудови інформаційної технології швидкого оцінювання якості води.*

***Результати.** Проаналізовано підходи до експресного вимірювання концентрацій токсичних речовин у воді. Зроблено огляд методів визначення концентрацій токсич-*

© ВД «Академперіодика» НАН України, 2024. Стаття опублікована на умовах відкритого доступу за ліцензією CC BY-NC-ND (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>)

них речовин у воді. Досліджено розвиток електрохімічних методів аналізу та застосування різноманітних сенсорів для визначення концентрації окремих елементів, розглянуто підходи до розроблення практичних автоматизованих систем електрохімічних досліджень та особливості застосування інформаційних технологій оброблення аналітичних сигналів.

Висновки. Проведений аналіз показав, що доцільним є вимірювання концентрацій токсичних елементів свинцю, кадмію, міді, цинку та фосфору у воді з використанням імпульсних методів інверсійної хронопотенціометрії та сенсорів з благородних металів.

Ключові слова: інформаційна технологія, програмно-апаратний комплекс, методи аналізу, забруднення води, експресне вимірювання, важкі метали, концентрація токсичних речовин, моделювання, ідентифікація, моніторинг, програмні засоби.

ВСТУП

Чистота навколишнього середовища, а особливо якість питної води сьогодні стає однією з головних проблем сучасності. Інтенсивний розвиток промисловості та зростання сільськогосподарського виробництва ведуть до швидкого забруднення водних ресурсів важкими металами і шкідливими хімічними речовинами. Близько 80 % питного водопостачання в Україні здійснюється з поверхневих водних об'єктів, в яких вода помірно або сильно забруднена. Використання малоефективних технологічних схем підготовки води для споживання не дозволяє забезпечити санітарну і токсичну безпеку питної води. Активізація антропогенного впливу великої кількості токсикантів на людину та навколишнє середовище вимагає постійного контролю якості питної води та екологічного стану водних об'єктів довкілля.

ПОСТАНОВКА ЗАВДАННЯ ДОСЛІДЖЕННЯ

В країнах ЄС якість води, призначеної для споживання людиною, повинна відповідати Директиві 98/83/ЄС [1], а в Україні — Державним санітарно-гігієнічним нормам 2.2.4-171-10 [2], згідно з якими визначені санітарно-гігієнічні (токсикологічні) показники не повинні перевищувати гранично допустимих концентрацій хімічного елемента чи сполуки у воді, тобто таких, які за щоденного впливу на організм людини протягом тривалого часу не викликають патологічних змін чи захворювань, діагностованих сучасними методами досліджень у будь-які періоди життя нашого і наступних поколінь.

Серед токсикологічних показників дуже небезпечними є важкі метали: свинець, кадмій, мідь, цинк та сполуки фосфору, які проявляють найбільший канцерогенний вплив на здоров'я людини [3, 4]. Застосування росією заборонених фосфорних боєприпасів призводить до хімічних отруєнь бійців та мирного населення, тому виникає гостра потреба в розробленні ефективних систем вимірювання концентрацій фосфору, сполук фосфору та важких металів для здійснення екологічного моніторингу, особливо питної води та водних ресурсів довкілля.

Застосування швидких систем визначення екологічного стану водних об'єктів у польових умовах, з використанням нових технічних засобів та інтелектуальної інформаційної технології, сприятиме зменшенню ризиків споживання забрудненої води населенням та військовими формуваннями.

Метою цього дослідження є аналіз підходів експресного вимірювання забруднених водних об'єктів важкими металами. Проведений аналіз дає змогу визначити завдання швидкого оцінювання екологічного стану водних об'єктів шляхом вимірювання концентрацій токсичних елементів свинцю, кадмію, міді, цинку та фосфору у воді та обрати метод інверсійної хронопотенціометрії для її розв'язання.

Завданнями дослідження є аналіз методів та програмних засобів наявної аналітичної системи лабораторного визначення концентрацій хімічних елементів за способом добавки, виділення спільних програмних компонентів та розроблення особливих програмних засобів швидкого визначення концентрацій елементів у польових умовах за способом порівняння аналітичного сигналу з еталонними сигналами, що дасть змогу ефективніше застосовувати створені програмно-апаратні засоби для визначення концентрацій хімічних елементів методами інверсійної хронопотенціометрії у різних умовах.

ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРНИХ ДЖЕРЕЛ

В останні роки велику увагу у світі приділяють застосуванню електрохімічних методів дослідження під час проведення екологічного моніторингу та вимірювання концентрацій токсичних елементів. В наукових працях багатьох вчених наводяться огляди історії, перспективи розвитку електрохімічних методів аналізу та застосування різноманітних сенсорів для визначення концентрацій окремих елементів, розглядаються підходи до розроблення практичних автоматизованих систем електрохімічних досліджень та особливості застосування інформаційних технологій оброблення аналітичних сигналів.

Наведено перспективи розвитку електрохімічних методів виявлення важких металів та загальні підходи до електрохімічного детектування іонів елементів при проведенні екологічних досліджень [5], в історичному огляді відзначається висока чутливість і вибірковість проведення досліджень у водних об'єктах та приводиться дорожня карта розроблення пристроїв швидкого вимірювання концентрацій токсичних елементів у польових умовах [6], розглядається еволюція аналітичного електрохімічного сигналу від електрокапілярної кривої до цифрової електрохімічної картини багатокомпонентного зразка [7].

Підкреслюється важливість застосування портативних електрохімічних сенсорів для визначення важких металів [8, 9], наводяться останні досягнення та перспективи застосування біосенсорів в аналізі безпеки харчових продуктів [10], розглядається ефективна стратегія та можливість екологічного очищення важких металів [11], досліджуються можливості застосування поверхнево-поширеного комбінаційного розсіювання в аналітичній хімії [12], наводяться можливості застосування потенціометричного визначення фосфату з допомогою кобальту [13].

Значну увагу автори досліджень приділяють визначенню концентрацій найбільш токсичних та поширених в природі хімічних елементів свинцю та кадмію, а також міді, цинку та фосфору, які нормуються під час визначення якості питної води, харчових продуктів та екологічного стану об'єктів довкілля. Досліджено адсорбцію свинцю та кадмію мікропластиком та їх десорбцій-

ну поведінку у шлунково-кишковому середовищі [14], розглянуто особливості розроблення іонних датчиків свинцю з використанням волоконних решіток та нанокompозитних матеріалів [15], проаналізовано можливості виявлення іонів свинцю в одній краплі цільної крові людини з допомогою модуляції імпедансу польових транзисторів і портативного вимірювального пристрою [16], наведено особливості проєктування та розроблення портативного резистивного сенсора на основі нанокompозитів для швидкого визначення свинцю у воді [17], розглянуто детектування слідів іонів кадмію за допомогою портативного волоконно-поверхневого плазмового резонансного сенсора [18], автори Галімова В.М. та Суровцев І.В. досліджують електрохімічний контроль мікроконцентрацій кадмію у водних середовищах з використанням методів інверсійної хронопотенціометрії [19], наведено останні досягнення оптичних сенсорів для виявлення іонів міді [20], розглянуто швидку процедуру екстракції точки помутніння для спектрофотометричного визначення фосфатів у пробах води [21], запропоновано селективний колориметричний наносенсорний розчин для визначення фосфат-іонів у зразках питної води [22], проаналізовано можливості багатовимірного додавання кобальтових електрохімічних даних для визначення концентрації фосфатів у гідропонному розчині [23].

Багато наукових робіт присвячено комплексному дослідженню кадмію, свинцю, міді різними сенсорами [24–26]. Відмітимо дослідження, де розглядається вимірювання слідів свинцю, кадмію та цинку з допомогою інверсійної хронопотенціометрії (SCP) [27]. Значної уваги автори досліджень приділяють детектуванню у різних природних об'єктах інших хімічних елементів: ртуті [28–31], хрому [32], миш'яку [33], заліза [34], а також питанням розроблення електрохімічних сенсорів на основі модифікованих наноматеріалів для виявлення іонів важких металів у воді та в рідких пробах [35–48], але більшість робіт носить аналітично-ілюстративний характер, який не дає змоги використати одержані результати безпосередньо у наших наукових дослідженнях.

Особливу увагу дослідники приділяють розробленню практичних систем швидкого та одночасного виявлення токсичних елементів різними хімічними методами дослідження [49–54]. Відзначимо розроблення в Китаї такого портативного аналізатора важких металів HM-3000P [55], який може визначати цілий ряд токсичних елементів у польових та в лабораторних умовах з використанням методу вольтамперометрії з анодною інверсією (ASV) та використовується для визначення якості водопровідної води, стічних вод, харчових продуктів і ліків, а також розроблення в Швейцарії портативного аналізатора хімічних елементів 946 Portable VA Analyzer (SPE) з використанням методу твердофазної екстракції (SPE) [56].

В Україні як і в світі при визначенні важких металів в екологічному моніторингу все частіше застосовують електрохімічні методи хронопотенціометрії, які виявились надійнішими та простішими в практичній реалізації за методи вольтамперометрії. Так, досліджено повний хвильовий хронопотенціометричний аналіз при сканованому потенціалі осадження (SSCP) [57], ще один автор запропонував аналітичну систему для моніторингу та оцінювання ризиків споживання питної води з використанням імпульсних методів інверсійної хронопотенціометрії [58], в іншій роботі

визначено загальні концентрації свинцю, кадмію та цинку на місці з допомогою методу інверсійної хронопотенціометрії (SCP) [27].

Але попри велику увагу до визначення ступеня забруднення води, досі для користувачів України не розроблено зручних і недорогих приладів, які б давали змогу оперативної з достатньою точністю виявляти токсичні елементи у питній воді та водних об'єктах довкілля у польових умовах.

Однією з основних проблем розроблення практичних систем швидкого виявлення токсичності важких металів є створення інформаційної технології, яка дає змогу визначати концентрації елементів за аналітичними електрохімічними сигналами вимірювання. Зазвичай такі технології носять комерційний характер, та лише деякі підходи до оброблення даних друкують в наукових працях. Так, описано застосування математичних моделей і генетичного алгоритму для моделювання характеристик відгуку масиву іон-селективних електродів для повторного калібрування системи [59], застосовано штучні нейрони для включення апріорних хімічних знань, що забезпечує можливість використовувати іон-селективні електроди для вимірювання іонів на екологічно значущих рівнях прямо на місці [60].

Особливістю швидкого вимірювання концентрацій токсичних елементів у воді способом добавки іонів елементів в польових умовах, на відміну від визначення концентрацій в лабораторних умовах, є відсутність підготовки проби, а це з хімічної точки зору унеможливорює визначення усіх наявних рухомих форм іонів, бо частина маси іонів перебуває у зв'язаному стані з органічними сполуками. Визначити ступінь зв'язаності іонів теоретичним шляхом неможливо, оскільки це залежить від багатьох природних факторів: складу розчинених у воді солей, наявності органічних сполук, лужності розчину тощо.

Вирішити проблему створення технології швидкого визначення вмісту забруднювальних речовин у водних об'єктах можна шляхом розроблення нової інформаційної технології вимірювання концентрацій токсичних елементів способом порівняння аналітичного сигналу з еталонними сигналами, яка носить міждисциплінарний характер, об'єднуючи математичні методи цифрового аналізу даних та електрохімічні методи вимірювання, що дасть змогу вперше в Україні розробити переносну програмно-апаратну систему для швидкого визначення токсичних речовин у водних об'єктах довкілля у польових умовах.

НОВИЙ ПІДХІД ДО ЕКСПРЕСНОГО ОЦІНЮВАННЯ ЗАБРУДНЕННЯ ВОДИ

Прикладами завдань екологічного моніторингу (Рис. 1) можуть бути водні ресурси різного природного походження: «Поверхнева вода» — вода підземна, поверхнева, поливна, для меліорації, для риборозведення; «Стічна вода» — стічні води промислових підприємств, ставки очищення стічної води, міські колектори, водовідводи тваринних ферм; «Питна вода» — вода централізованого водопостачання, колодязна, джерельна, артезіанська, бутильована або фасована вода; «Доставлена вода» — питна та технічна вода для забезпечення потреб військових формувань та потерпілого населення, тощо.

Відібрані проби водних об'єктів довіклля досліджують створеними системами електрохімічного аналізу «Дослідження води», якими ідентифікують наявні токсичні елементи, вимірюють їх концентрацію у воді «Концентрація елементів», одержані значення концентрацій елементів порівнюють з нормованими гранично допустимими концентраціями (далі — ГДК) та визначають «Якість води», наприклад, категорією якості води за ступенем чистоти.

Запропоновані авторами нові імпульсні методи на основі методу інверсійної хронопотенціометрії (ІХП), а саме імпульсна інверсійна хронопотенціометрія (ПХП), диференційна імпульсна інверсійна хронопотенціометрія (ДІХП), окислювальна імпульсна інверсійна хронопотенціометрія (ОІХП) вперше впроваджені у світову аналітичну практику вимірювань концентрацій хімічних елементів у воді, харчових продуктах та об'єктах довіклля. Застосування цих методів засвідчило високу надійність, чутливість, повторюваність результатів вимірювань концентрацій хімічних елементів та може бути основою розроблення переносних приладів для оперативного визначення токсичних елементів водних об'єктів у польових умовах.

Здійснення екологічного моніторингу води можна виразити схемою, наведеною на рис. 1.

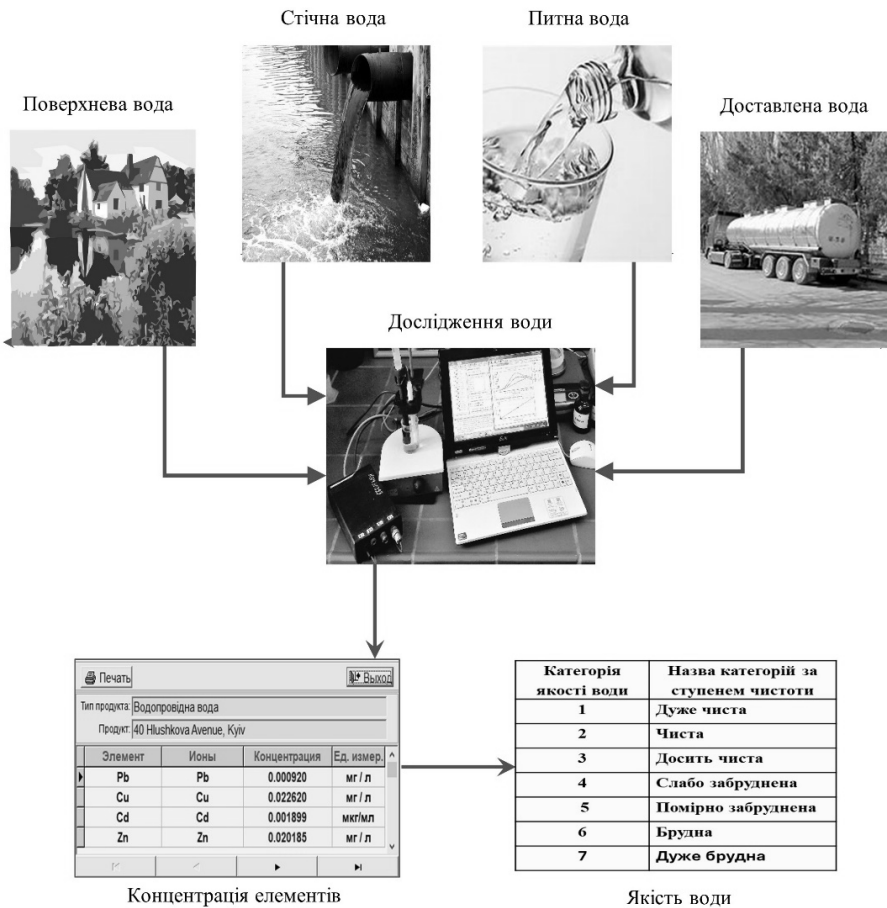


Рис. 1. Схема екологічного моніторингу водних об'єктів довіклля

Методи ІХП дають змогу вимірювати в розробленій аналітичній системі «Аналізатор ІХП» концентрації 14 токсичних хімічних елементів: свинцю, кадмію, цинку, міді, нікелю, кобальту, йоду, марганцю, заліза, хрому, ртуті, миш'яку, селену та олова з чутливістю до $0,05 \text{ мкг/дм}^3$.

Важливим завданням є вимірювання у водних об'єктах довкілля концентрацій фосфору та його сполук, які до цього часу у світі не визначали методами інверсійної хронопотенціометрії, що потребує проведення додаткових електрохімічних досліджень.

В Україні вперше розроблено інформаційну технологію аналітичної системи вимірювання концентрацій важких металів для визначення якості питної води, продуктів харчування та об'єктів довкілля методами ІХП [19, 58, 61-64]. Але сучасні вимоги потребують створення нової технології та системи, зручної у використанні для польового вимірювання концентрацій важких металів у воді, економічно доступної за ціною для українського користувача. Ця робота описує шляхи розроблення інформаційної технології та методів, на основі яких таку технологію буде побудовано.

Методи виконання завдання визначення концентрацій. В основу розробленої інформаційної технології покладено застосування різних методів ІХП [61]. Принципи роботи цих методів полягають в електрохімічному концентруванні на вимірювальному електроді іонів хімічних елементів з розчину проби та подальшому їх електророзчиненні в режимі інверсії. Аналітичною характеристикою методів є час інверсії елемента, який за стандартизованих умов концентрування та інверсії прямо пропорційний концентрації іонів у розчині.

Послідовність етапів інформаційної технології для вимірювання аналітичного сигналу виконується автоматично та є загальною для всіх методів аналітичної та польової систем. Залежно від методу дослідження, хімічного елемента, вимірювального електрода та очікуваної концентрації застосовують електрохімічні параметри вимірювання, які записані в шаблонах та зберігаються у базі даних. Послідовність операцій вимірювання аналітичного сигналу така [61]:

- регенерація вимірювального електрода (електрохімічне очищення) за заданих значень часу та потенціалу регенерації;
- концентрування іонів елементів на вимірювальному електроді за заданих значень часу та потенціалу концентрування;
- вимірювання потенціалів інверсії у часі.

Під час вимірювання концентрацій вхідний аналітичний сигнал $e(t)$ є інтегральною сумою вимірювань потенціалів інверсії e хімічних елементів у часі t . Процес інверсії кожного елемента виконується послідовно у власному діапазоні потенціалів відповідно до збільшення значення стандартного електродного потенціалу в ряду активності металів. Найбільш ефективним підходом до аналізу таких даних є застосування диференціальних координат. Це дає змогу розглядати аналітичний сигнал як суму компонентів одержаного сигналу інтенсивності. Площа компонента відповідно дає часу інверсії окремого хімічного елемента [61].

Фізично сигнал інтенсивності є сумою двох незалежних у часі процесів: емнісного фоновому розряду електродів (базової лінії) та інверсії окремих хімічних елементів як спектра компонентів. Для ідентифікації хімічних елементів будуються математичні моделі базової лінії та окремих компонентів сигналу

інтенсивності, за якими визначається генеративна модель багатокomпонентного сигналу шляхом розв'язання задачі параметричної ідентифікації з використанням методу найменших квадратів.

За цифрового оброблення вхідного аналітичного сигналу вимірювання концентрацій застосовується така послідовність методів [64, 65]:

- фільтрація аналітичного сигналу інверсії,
- зміна координат сигналу інверсії на перетворений сигнал;
- диференціювання перетвореного сигналу на сигнал інтенсивності;
- згладжування сигналу інтенсивності, спотвореного дискретністю цифрових даних та високочастотними завадами;
- моделювання базової лінії ємнісного фонового розряду електродів;
- формування спектра компонентів хімічних елементів як різниці між сигналом інтенсивності та базовою лінією;
- моделювання окремих спектральних компонентів;
- моделювання генеративної моделі сигналу інтенсивності як задачі параметричної ідентифікації;
- часу інверсії компонента сигналу інтенсивності для обчислення концентрацій ідентифікованого хімічного елемента.

Реальні значення потенціалів піку та діапазонів інверсії елемента в аналітичних сигналах, за якими відбувається ідентифікація, залежать від концентрації, хімічного складу фонового розчину та матеріалу вимірювального електрода (срібла з амальгамою ртуті, золота, платини, кобальта) [23, 27]. Цифрове оброблення вхідних аналітичних сигналів є однаковим для всіх методів ІХП аналітичної та польової системи вимірювання концентрацій хімічних елементів.

Послідовність процесу вимірювання концентрацій і оброблення результатів дослідження аналітичною системою та польовою системою абсолютно різні. Ці системи та інформаційна технологія на їх основі детальніше будуть описані в наступних роботах.

ФІНАНСУВАННЯ

Дослідження проведено за грантової підтримки Національного фонду досліджень України в рамках реалізації проекту «Переносний програмно-апаратний комплекс швидкого визначення токсичних речовин у водних об'єктах, забруднених внаслідок воєнних дій» (реєстраційний номер 2023.04/0128) в рамках конкурсу «Наука для зміцнення обороноздатності України».

REFERENCES

1. Council Directive 98/83/EC of 3 November 1998 on the quality of water intended for human consumption OJL 330, 5.12.1998, p. 32. URL: <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/EN/TXT/PDF/?uri=CELEX:01998L0083-20151027&from=EN>.
2. 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).
3. Briffa J., Sinagra E., Blundell R. Heavy metal pollution in the environment and their toxicological effects on humans. 2020, *Heliyon*, 6, No. e04691 <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2020.e04691>

- Liu F., Zhang, Z. Zhang, L. Meng, R.N., Gao J., Jin M., Li M., Wang X.P. Effect of metal ions on Alzheimer's disease. *Brain Behav.* 2022, 12, e2527. <https://doi.org/10.1002/brb3.2527>
- Pinheiro J.P., Rotureau E. (2023). Electroanalytical trace metal cations quantification and speciation in freshwaters: historical overview, critical review of the last five years and road map for developing dynamic speciation field measurements. *Molecules*, 28 (6), 2831. <https://doi.org/10.3390/molecules28062831>
- Sokolkov S.V. Evolution of the analytical signal in electrochemistry from electrocapillary curve to a digital electrochemical pattern of a multicomponent sample. *Electrochemical*. 2023, 3 (3), p. 1–17. <https://doi.org/10.1002/elsa.202100212>
- Qian W.U., Hong-Mei B.I., Xiao-Jun Han. (2021). Research Progress of Electrochemical Detection of Heavy Metal Ions. *Chinese Journal of Analytical Chemistry*. Volume 49, Issue 3, pp. 330–340. [https://doi.org/10.1016/S1872-2040\(21\)60083-X](https://doi.org/10.1016/S1872-2040(21)60083-X)
- Xu F., Wang P., Bian S., Wei Y., Kong D., Wang H.A. (2021). Co-Nanoparticles Modified Electrode for On-Site and Rapid Phosphate Detection in Hydroponic Solutions. *Sensors*. 2021, 21, 299. <https://doi.org/10.3390/s21010299>
- Hu T., Lai Q., Fan W., Zhang Y., Liu Z. Advances in Portable Heavy Metal Ion Sensors. *Sensors*. 2023, 23, 4125. <https://doi.org/10.3390/s23084125>
- Wang Y., Zhai H.G., Yin J.Q., Guo Q., Zhang Y.H., Sun X., Guo, Y.M., Yang Q.Q., Li F.L., Zhang Y.Y. Recent advances and future prospects of aptamer-based biosensors in food safety analysis. *Int. J. Electrochem. Sci.*, 2022, 17, 22019. <https://doi.org/10.20964/2022.01.07>
- Pham V.H.T., Kim J., Chang S., Chung W.. Bacterial biosorbents, an efficient heavy metals green clean-Up strategy: Prospects, challenges, and opportunities. *Microorganisms*. 2022, 10, 610. <https://doi.org/10.3390/microorganisms10030610>
- Fan M.K., Andrade G.F.S., Brolo A.G. A review on recent advances in the applications of surface-enhanced Raman scattering in analytical chemistry. *Anal. Chim. Acta*. 2020, 1097, pp.1-29. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2019.11.049>
- Zeitoun R., Biswas A. Review-Potentiometric Determination of Phosphate Using Cobalt: A Review. *J. Electrochem. Soc.* 2020, 167. <https://doi.org/10.1149/1945-7111/abad6c>
- Li W., Zu B., Yang Q.W., Huang Y.Q., Li J.W. Adsorption of lead and cadmium by microplastics and their desorption behavior as vectors in the gastrointestinal environment. *J. Environ. Chem. Eng.* 2022, 10, 107379. <https://doi.org/10.1016/j.jece.2022.107379>
- Ghosh S., Dissanayake K., Asokan S., Sun T., Rahman B.M.A., Grattan K.T.V. Lead (Pb²⁺) ion sensor development using optical fiber gratings and nanocomposite materials. *Sens. Actuators B-Chem.* 2022, 364, 131818. <https://doi.org/10.1016/j.snb.2022.131818>
- Wang S.-L., Hsieh C.-Y., Sukesan R., Chen J.-C., Wang Y.-L. Highly sensitive lead ion detection in one drop of human whole blood using impedance-modulated field-effect transistors and a portable measurement device. *ECS J. Solid State Sci. Technol.* 2020, 9, 055020. <https://doi.org/10.1149/2162-8777/ab8867>
- Gupta A.K., Khanna M., Roy S., Pankaj Nagabooshanam, S. Kumar, R. Wadhwa S., Mathur, A. Design and development of a portable resistive sensor based on alpha-MnO₂/GQD nanocomposites for trace quantification of Pb(II) in water. *IET Nanobio-technol.* 2021, 15, 505-511. <https://doi.org/10.1049/nbt2.12042>
- Solomonea B.G., Jinga L.I., Antohe V.A., Socol G., Antohe I. Cadmium ions' trace-level detection using a portable fiber optic-surface plasmon resonance sensor. *Biosensors*. 2022, 12, 573 p. <https://doi.org/10.3390/bios12080573>
- Kopilevich V.A., Maksin V.I., Galimova V.M., Surovtsev I.V., Lavrik R.V. (2021). Electrochemical Control of Microconcentrations of Cadmium in Aquatic Environments. *Journal of water chemistry and technology*. 2021, 43 (4), 336–341. <https://doi.org/10.3103/S1063455X21040056>
- Gerdan Z., Saylan Y., Denizli A. Recent advances of optical sensors for copper ion detection. *Micromachines*. 2022, 13, 1298. <https://doi.org/10.3390/mi13081298>

21. Snigur D., Chebotarev A., Bulat K., Duboviy V. Fast room temperature cloud point extraction procedure for spectrophotometric determination of phosphate in water samples. *Anal. Biochem.* 2020, 597, 113671. <https://doi.org/10.1016/j.ab.2020.113671>
22. Salem, J.K., Draz, M.A. Selective colorimetric nano-sensing solution for the determination of phosphate ion in drinking water samples. *Int. J. Environ. Anal. Chem.* 2020, pp. 1–10. <https://doi.org/10.1080/03067319.2019.1702168>
23. Tuan V.N., Dinh T.D., Khattak A.M., Zheng L., Chu X., Gao W., Wang M. Multivariate Standard Addition Cobalt Electrochemistry Data Fusion for Determining Phosphate Concentration in Hydroponic Solution. *IEEE Access.* 2020, 8, 28289–28300. <https://doi.org/10.1109/ACCESS.2020.2971143>
24. Noorhashimah M.N., Siti N.N., Nor D.Z., Khairunisak A.R. Simultaneous Sensing of Cd(II), Pb(II), and Cu(II) Using Gold Nanoparticle-Modified APTES-Functionalized Indium Tin Oxide Electrode: Effect of APTES Concentration. *ACS Omega.* 2023, No 8, 16587–16599. <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acsomega.2c07085> <https://doi.org/10.1021/acsomega.2c07085>
25. Pudza M.Y., Abidin Z.Z., Abdul-Rashid S., Yasin F.M., Noor A.S.M., Abdullah J. Selective and simultaneous detection of cadmium, lead and copper by tapioca-derived carbon dot-modified electrode. *Environ. Sci. Pollut. Res.* 2020, 27, 13315–13324. <https://doi.org/10.1007/s11356-020-07695-7>
26. Lu Z., Zhang J., Dai W., Lin X., Ye J., Ye J. A screen-printed carbon electrode modified with a bismuth film and gold nanoparticles for simultaneous stripping voltammetric determination of Zn(II), Pb(II) and Cu(II). *Microchim. Acta.* 2017, 184, 4731–4740. <https://doi.org/10.1007/s00604-017-2521-8>
27. Hackel L., Rotureau E., Morrin A., Pinheiro J.P. Developing On-Site Trace Level Speciation of Lead, Cadmium and Zinc by Stripping Chronopotentiometry (SCP): Fast Screening and Quantification of Total Metal Concentrations. *Molecules.* 2021, 26, 5502. <https://doi.org/10.3390/molecules26185502>
28. Li D.J., Sun Y., Shen Q.R., Zhang Q., Huang W., Kang Q., Shen D.Z. Smartphone-based three-channel ratiometric fluorescent device and application in filed analysis of Hg²⁺, Fe³⁺ and Cu²⁺ in water samples. *Microchem. J.* 2020, 152, 104423. <https://doi.org/10.1016/j.microc.2019.104423>
29. Zhou Y., Wang H.L., Song D., Li Z.G., Han S.T., Long F., Zhu A.N. Simple, rapid, and sensitive on-site detection of Hg²⁺ in water samples through combining portable evanescent wave optofluidic biosensor and fluorescence resonance energy transfer principle. *Anal. Chim. Acta.* 2021, 1155, 338351. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2021.338351>
30. Zhang H.J., Wang D., Zhang D., Zhang T.T., Yang L.K., Li Z.P. In Situ Microfluidic SERS Chip for Ultrasensitive Hg²⁺ Sensing Based on I-Functionalized Silver Aggregates. *Acs Appl. Mater. Interfaces.* 2022, 14, 2211–2218. <https://doi.org/10.1021/acsaami.1c17832>
31. Rotake D.R., Kumar A., Darji A.D., Singh J. Highly selective sensor for the detection of Hg²⁺ ions using homocysteine functionalised quartz crystal microbalance with cross-linked pyridinedicarboxylic acid. *IET Nanobiotechnol.* 2020, 14, p. 563–573. <https://doi.org/10.1049/iet-nbt.2020.0109>
32. Ferrari A.G.M., Crapnell R.D., Adarakatti P.S., Suma B.P., Banks C.E. Electroanalytical overview: The detection of chromium. *Sens. Actuators Rep.* 2022, 4, 100116. <https://doi.org/10.1016/j.snr.2022.100116>
33. Hu H., Xie B., Lu Y., Zhu J. Advances in electrochemical detection electrodes for As³⁺. *Nanomaterials.* 2022, 12, 781. <https://doi.org/10.3390/nano12050781>
34. Sharma P., Bhogal S., Mohiuddin I., Yusuf M., Malik A.K. Fluorescence "turn-off" sensing of iron (III) ions utilizing pyrazoline based sensor: Experimental and computational study. *J. Fluoresc.* 2022, 32, 2319–2331. <https://doi.org/10.1007/s10895-022-03024-y>
35. Baranwal J., Barse B., Gatto G., Broncova G., Kumar A. Electrochemical sensors and their applications: A review. *Chemosensors.* 2022, 10, 363 p. <https://doi.org/10.3390/chemosensors10090363>

36. Qin M., Li J.S., Song Y.L. Toward high sensitivity: Perspective on colorimetric photonic sensors. *Anal. Chem.*, 94, 9497–9507. <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.2c01804>
37. He Y.Y.; Wang Y.B., Mao G.N., Liang C.Y., Fan M. Ratiometric fluorescent nano-probes based on carbon dots and multicolor CdTe quantum dots for multiplexed determination of heavy metal ions. *Anal. Chim. Acta.* 2022, 1191, 339251. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2021.339251>
38. Chen Z.L., Xie M.J., Zhao F.G., Han S.Y. Application of Nanomaterial Modified Aptamer-Based Electrochemical Sensor in Detection of Heavy Metal Ions. *Foods.* 2022, 11, 1404. <https://doi.org/10.3390/foods11101404>
39. Ali, T.A.; Mohamed, G.G. Development of Chromium(III) Selective Potentiometric Sensors for Its Determination in Petroleum Water Samples Using Synthesized Nano Schiff Base Complex as an Ionophore. *J. Aoac Int.* 2022, 105, 727–738. <https://doi.org/10.1093/jaoacint/qsab166>
40. Tian H.; Li, Z.M.; Wang C.Z.; Xu P.; Xu S.F. Construction and application of molecularly imprinted fluorescence sensor. *Prog. Chem.* 2022, 34, 593–608.
41. Wang B.T.; Niu Y.X.; Yang Y.; Liang T.; Qin X.D.; Ding M. Sapphire Fiber High-Temperature Sensor Based on Colorimetric Method. *IEEE Trans. Instrum. Meas.* 2022, 71, 9508506. <https://doi.org/10.1109/TIM.2022.3189738>
42. He, X.; Zhou, X.; Liu, Y.; Wang, X.L. Ultrasensitive, recyclable and portable microfluidic surface-enhanced raman scattering (SERS) biosensor for uranyl ions detection. *Sens. Actuator B-Chem.* 2020, 311, 127676. <https://doi.org/10.1016/j.snb.2020.127676>
43. Liang Y.; Ma M.; Zhang F.; Liu F.; Lu T.; Liu Z.; Li Y. (2021). Wireless Microfluidic Sensor for Metal Ion Detection in Water. *ACS Omega.* 2021, 6, 9302–9309. <https://doi.org/10.1021/acsomega.1c00941>
44. Nguyen M. B.; Nga D. T. N.; Thu V. T.; Piro B.; Truong T. N. P.; Yen P. T. H.; Le G. H.; Hung L. Q.; Vu T. A.; Ha V. T. T. Novel nanoscale Yb-MOF used as highly efficient electrode for simultaneous detection of heavy metal ions. *J. Mater. Sci.* 2021, 56, 8172–8185. <https://doi.org/10.1007/c10853-021-05815-3>
45. Mohamad Nor N.; Ramli N. H.; Poobalan H.; Qi Tan K.; Abdul Razak K. Recent Advancement in Disposable Electrode Modified with Nanomaterials for Electrochemical Heavy Metal Sensors. *Crit. Rev. Anal. Chem.* 2023, 53, 253. <https://doi.org/10.1080/10408347.2021.1950521>
46. Silah H.; Erkmen C.; Demir E.; Uslu B. Modified indium tin oxide electrodes: Electrochemical applications in pharmaceutical, biological, environmental and food analysis. *TrAC, Trends Anal. Chem.* 2021, 141, No. 116289. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2021.116289>
47. Eswaran M.; Tsai P.-C.; Wu M.-T.; Ponnusamy V. K. Novel nano-engineered environmental sensor based on polymelamine/graphitic-carbon nitride nanohybrid material for sensitive and simultaneous monitoring of toxic heavy metals. *J. Hazard. Mater.* 2021, 418, No. 126267. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2021.126267>
48. Dutta S.; Strack G.; Kurup P. Gold nanostar electrodes for heavy metal detection. *Sens. Actuators.* 2019, B, 281, p.383–391. <https://doi.org/10.1016/j.snb.2018.10.111>
49. Katiyar R.; Usha Rani K.R.; Sindhu T.S.; Sneha Jain H.D.; Vidhyashree; Ashoka S.; Channegowda M. Design and development of electrochemical potentiostat circuit for the sensing of toxic cadmium and lead ions in soil. *Eng. Res. Express.* 2021, 3, 045026. <https://doi.org/10.1088/2631-8695/ac3637>
50. Ngoc Tuan V.; Khattak A.M.; Zhu H.; Gao W.; Wang M. Combination of Multivariate Standard Addition Technique and Deep Kernel Learning Model for Determining Multi-Ion in Hydroponic Nutrient Solution. *Sensors.* 2020, 20, 5314. <https://doi.org/10.3390/s20185314>
51. Mukherjee S.; Bhattacharyya S.; Ghosh K.; Pal S.; Halder A.; Naseri M.; Mohammadniaei M.; Sarkar S.; Ghosh A.; Sun, Y. Sensory development for heavy metal detection: A review on translation from conventional analysis to field-portable sensor. *Trends Food Sci. Technol.* 2021, 109, p. 674–689. <https://doi.org/10.1016/j.tifs.2021.01.062>

52. Wang H.L.; Song D.; Chen Y.Y.; Xu W.J.; Han X.Z.; Zhu A.N.; Long F. Development of portable whole-cell biosensing platform with lyophilized bacteria and its application for rapid on-site detection of heavy metal toxicity without pre-resuscitation. *Anal. Chim. Acta.* 2022, 1228, 340354. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2022.340354>
53. Li B.H.; Wang J.H.; Tu H.H.; Yang Z.J.; Zhao D.F.; Feng H.H.; Yang J. A self-designed versatile and portable sensing device based on smart phone for colorimetric detection. *Anal. Bioanal. Chem.* 2021, 413, p. 533–541. <https://doi.org/10.1007/s00216-020-03024-6>
54. Bernalte E.; Arévalo S.; Pérez-Taborda J.; Wenk J.; Estrela P.; Avila A.; Di Lorenzo M. Rapid and on-site simultaneous electrochemical detection of copper, lead and mercury in the Amazon river. *Sens. Actuators.* 2020, B, 307, No. 127620. <https://doi.org/10.1016/j.snb.2019.127620>
55. Analyzer of heavy metals. Jiangsu Skyray Instrument Co, China. Available at: <https://www.sky-rayinstrument.com/heavy-metal-analyzer/portable-heavy-metal-analyzer.html>
56. 946 Portable VA Analyzer (SPE). URL: <https://www.metrohm.com/en/products/2/9460/29460020.html>
57. Pinheiro J.P., Galceran J., Rotureau E., Companys E., Puy J. Full wave analysis of stripping chronopotentiometry at scanned deposition potential (SSCP): Obtaining binding curves in labile heterogeneous macromolecular systems for any metal-to-ligand ratio. *J. Electroanal. Chem.* 2020, 873, 114436, <https://doi.org/10.1016/j.jelechem.2020.114436>
58. Surovtsev I.V., Velykyi P.Y., Hrytsaienko M., Galimova V.M. Analytical system for environmental monitoring and risk assessing of drinking water consumption. *Cyb. and comp. eng.* 2021. no. 4 (206), 17–38. <https://doi.org/10.15407/kvt206.04.017>
59. Wang L., Yang D., Lamb D., Chen Z., Lesniewski P.J., Megharaj M., Naidu R. Application of mathematical models and genetic algorithm to simulate the response characteristics of an ion selective electrode array for system recalibration. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* 2015, 144, p. 24–30. <https://doi.org/10.1016/j.chemolab.2015.03.007>
60. Mueller A.V., Hemond H.F. Extended artificial neural networks: Incorporation of a priori chemical knowledge enables use of ion selective electrodes for in-situ measurement of ions at environmentally relevant levels. *Talanta.* 2013, 117, p. 112–118. <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2013.08.045>
61. Surovtsev, I.V., Galimov, S.K., Tatarinov, O.E. Information Technology for Determining the Concentration of Toxic Elements in Environmental Objects. *Kibern. vychisl. teh.* 2018, no 191, p. 5–31. DOI: <https://doi.org/10.15407/kvt191.01.005> <https://doi.org/10.15407/kvt191.01.005>
62. Device for measuring the concentration of chemical elements by pulsed chronopotentiometry: patent 123459, Ukraine: IPC G01N 27/48 (2006.01), a201902429; claimed 12.03.2019; published 07.04.2021 (in Ukrainian).
63. Babak O.V., Surovtsev I.V. Data Reduction as a Method of Intellectualization of Information Technologies. *Cyb. and comp. eng.* 2022, no. 1 (207), p. 17–31. <https://doi.org/10.15407/kvt207.01.018>
64. Surovtsev I.V., Sieriebriakov A.K. Method of elements identification in the multicomponent signal. *Control Systems and Computers.* 2023, no. 2, 19–26. DOI: <https://doi.org/10.15407/csc.2023.02.019>
65. Kozak L.M., Kovalenko O.S., Surovtsev I.V. Basic components of the software modules construction for obtaining, storing and exchanging medical and environmental information. *Cybernetics and computer engineering.* 2023, 3 (213), 53–68. <https://doi.org/10.15407/kvt213.03.053>

Received 12.09.2024

Surovtsev I.V. ¹DSc (Engineering), Senior Researcher,
Head of the Department of Digital Systems for Ecological Monitoring
<https://orcid.org/0000-0003-1133-6207>, email: igorsur52@gmail.com

Savchenko-Syniakova Ye.A. ¹ PhD (Engineering),
Senior Researcher of the Department of Information Technologies for
Inductive Modeling
<https://orcid.org/0000-0003-4851-9664>, e-mail: savchenko_e@meta.ua

Galimova V.M. ² PhD (Chem.),
Associate Professor of the Department of Analytical and Bioinorganic
Chemistry and Water Quality
<https://orcid.org/0000-0001-9602-1006>, email: galimova2201@gmail.com

Liakhov V.S. ¹ PhD Student,
<https://orcid.org/0009-0004-5332-1104>, e-mail: vlyahov@gmail.com
Yakovenko I.M. ¹,

Researcher of the Intellectual Automatic Systems Department
<https://orcid.org/0000-0002-4477-3254>, e-mail: yakvan@ukr.net

¹ International Research and Training Center for Information Technologies
and Systems of the National Academy of Sciences of Ukraine
and the Ministry of Education and Science of Ukraine
40, Acad. Glushkov av., Kyiv, 03187, Ukraine

² National University of Life and Environmental Sciences of Ukraine,
19, Horikhuvatskyi shliakh Str., Kyiv, 03041, Ukraine

APPROACHES TO THE DEVELOPMENT OF INFORMATION TECHNOLOGY FOR RAPID IDENTIFICATION OF THE ENVIRONMENTAL OBJECTS ECOLOGICAL STATE

Introduction. *The task of express measurement of water pollution is a pressing issue of the 20th century. Development of methods and, based on them, technologies and devices that are easy to use and affordable will allow determining the concentration of toxic substances in water in order to assess its quality. The use of fast systems for determining the ecological state of water bodies will help reduce the risk of consuming contaminated water.*

The purpose of the research is to analyze approaches to express measurement of the concentration of toxic substances in water to develop approaches to building an information technology for rapid assessment of water quality.

Results. *An analysis of approaches to express measurement of the concentration of toxic substances in water was conducted. A review of methods for determining the concentration of toxic substances in water was conducted. The development of electrochemical methods of analysis and the use of various sensors for determining the concentrations of individual elements were studied, approaches to the development of practical automated systems for electrochemical studies and the features of the use of information technologies for processing analytical signals were considered.*

Conclusions. *The conducted analysis showed that it is advisable to measure the concentrations of toxic elements lead, cadmium, copper, zinc, phosphorus in water using pulse methods of inversion chronopotentiometry and sensors made of noble metals.*

Keywords: *information technology, hardware and software complex, methods of analysis, water pollution, express measurement, heavy metals, concentration of toxic substances/ assessment of quality, modeling, identification, monitoring, automated system.*