

ФЕДЕРАЛЬНАЯ СЛУЖБА
ПО ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОЙ СОБСТВЕННОСТИ

(12) ОПИСАНИЕ ИЗОБРЕТЕНИЯ К ПАТЕНТУ

(52) СПК
G01N 31/16 (2019.08)

(21)(22) Заявка: 2019113565, 29.04.2019

(24) Дата начала отсчета срока действия патента:
29.04.2019Дата регистрации:
12.11.2019

Приоритет(ы):

(22) Дата подачи заявки: 29.04.2019

(45) Опубликовано: 12.11.2019 Бюл. № 32

Адрес для переписки:

193318, Санкт-Петербург, а/я 47, Пантюшиной
Е.Н.

(72) Автор(ы):

Щукин Евгений Владимирович (RU)

(73) Патентообладатель(и):

Щукин Евгений Владимирович (RU)

(56) Список документов, цитированных в отчете
о поиске: RU 2238550 C1, 20.10.2004. RU 126467
U1, 27.03.2013. SU 271095 A1, 12.05.1970. EP
2624957 B1, 01.03.2017. CN 204882491 U,
16.12.2015.

(54) Способ сбора и обработки данных в процессе титрования и устройство, его реализующее

(57) Реферат:

Использование: для объемного титрования. Сущность изобретения заключается в том, что способ сбора и обработки данных в процессе титрования включает сопряжение регистрирующего устройства, выполненного с возможностью измерения физико-химических свойств исследуемого раствора, и устройства сбора и обработки данных, голосовой ввод данных зрительного измерения объема при добавлении каждой порции титранта к раствору для исследования после запуска процесса титрования, снятие текущих показаний регистрирующего устройства, обработку данных объема, полученных голосовым вводом, и данных параметров физико-химического состояния

раствора, полученных от регистрирующего устройства, с последующим построением их графической зависимости друг от друга, анализ построенного графика для определения точек перегиба на кривой титрования и последующее определение по значениям объема в этих точках искомых концентраций определяемых веществ в растворе, обработку полученных данных анализа, составление протокола измерений, его сохранение и его отображение. Технический результат: обеспечение возможности сокращения времени на процесс титрования при одновременном повышении безопасности. 2 н. и 13 з.п. ф-лы, 3 ил.

RU 2 705 931 C1

RU 2 705 931 C1



Фиг. 1



FEDERAL SERVICE
FOR INTELLECTUAL PROPERTY

(12) **ABSTRACT OF INVENTION**

(52) CPC
G01N 31/16 (2019.08)

(21)(22) Application: **2019113565, 29.04.2019**

(24) Effective date for property rights:
29.04.2019

Registration date:
12.11.2019

Priority:

(22) Date of filing: **29.04.2019**

(45) Date of publication: **12.11.2019 Bull. № 32**

Mail address:

**193318, Sankt-Peterburg, a/ya 47, Pantyushinoj
E.N.**

(72) Inventor(s):

Shchukin Evgenij Vladimirovich (RU)

(73) Proprietor(s):

Shchukin Evgenij Vladimirovich (RU)

(54) **METHOD OF COLLECTING AND PROCESSING DATA DURING TITRATION AND A DEVICE THAT IMPLEMENTS IT**

(57) Abstract:

FIELD: chemistry.

SUBSTANCE: use: for volumetric titration.

Summary of invention is that method of collecting and processing data during titration involves interface of recording device, made with possibility of measuring physical and chemical properties of analyzed solution, and data collection and processing device, voice input of visual volume measurement data with addition of each portion of titrant to solution for investigation after starting titration process, reading current readings of recording device, processing of volume data obtained by voice input, and data of parameters of physical and

chemical state of solution obtained from recording device, with subsequent construction of their graphic dependence on each other, analysis of the plotted curve to determine inflection points on the titration curve and subsequent determination of the desired concentrations of the determined substances in the solution from the values of the volume at said points, processing of the obtained analysis data, preparation of the measurement protocol, storage and display thereof.

EFFECT: possibility of reducing time for titration with simultaneous increase in safety.

15 cl, 3 dwg

RU 2 705 931 C1

RU 2 705 931 C1



Фиг. 1

Настоящая группа изобретений относится к физико-химическому анализу, преимущественно к приборам для объемного титрования, и может быть использована при оперативном контроле технологических процессов.

Титрование (титриметрический анализ) - это один из самых распространенных методов в аналитической химии, который заключается в том, что жидкость (титрант) дозируется к исследуемому раствору определенными порциями (V , мл). Одновременно с этим в растворе с помощью датчика, подключенного к регистрирующему устройству (рН-метру, иономеру или спектрофотометру), измеряется рН/рХ, электрохимический потенциал (E , мВ) или оптическая плотность (D) раствора. Строится зависимость $E(V)$ или $D(V)$, производится обработка полученной кривой (после окончания или в процессе титрования) и определяются точки перегиба. По значениям объема в этих точках производятся вычисления искомых концентраций определяемых веществ.

Известны автоматические и ручные титраторы.

В автоматических титраторах весь процесс (дозирование с помощью калиброванных автоматических бюреток, регистрация данных, запись и обработка кривой титрования) осуществляется в полностью автоматическом режиме [Меттлер Толодо (Швейцария). Каталог продукции. Электронный ресурс. Режим доступа к ресурсу: https://www.mt.com/ru/ru/home/products/Laboratory_Analytics_Browse/Product_Family_Browse_titrators_main.html - свободный; Metrohm (Швейцария). Каталог продукции. Электронный ресурс. Режим доступа к ресурсу: <http://www.metrohm.ru/Products/Titration/index.html?yclid=809281578786912952> - свободный]. Основным недостатком автоматических титраторов является высокая себестоимость и ограничения по использованию электронных бюреток (на каждый титрант необходима своя бюретка).

Ручной вариант исполнения титратора обладает преимуществами, заключающимися в низкой себестоимости и отсутствии ограничений по количеству используемых титрантов, поскольку стеклянные бюретки значительно дешевле электронных бюреток автоматических титраторов. Ручной титратор предполагает использование стеклянной калиброванной бюретки и регистрирующего устройства, например, иономера. Производится сбор данных и затем по ним строятся и обсчитываются графики кривых титрования. При этом сбор данных при ручном варианте осуществляется только вручную, т.е. показания считываются в определенный момент с дисплея регистрирующего устройства и записываются вручную. В случае возможности подключения регистрирующего устройства к персональному компьютеру (ПК) показания с прибора в определенный момент передаются на ПК, на котором установлено соответствующее программное обеспечение.

Известно устройство сбора и обработки данных в процессе титрования [НПП «СЕМИКО». Программа для проведения ионометрического и потенциометрического титрования. Электронный ресурс. Режим доступа к ресурсу: <http://multitest.semico.ru/titr.htm> -свободный], включающее электрод, регистрирующее устройство на базе рН-метра или иономера серии МУЛЬТИТЕСТ ИПЛ производства НПП «Семико», персональный компьютер на базе Windows или Linux, кабель для связи ПК и регистрирующего устройства. При этом данное устройство позволяет вручную вводить значения объема титранта, обрабатывать данные, полученные от регистрирующего устройства, строить и обрабатывать кривую титрования, а также отображать результаты измерений и расчетов в виде значений объемов титранта в точке эквивалентности.

К недостаткам известного устройства можно отнести:

- узкий диапазон вариантов возможных к подключению регистрирующих устройств;
- низкая безопасность из-за того, что подключение регистрирующего устройства к

ПК производится с помощью кабеля (интерфейс RS232), а расположение ПК рядом с сосудами с химическими реактивами и штативом с бюреткой небезопасно и загромождает рабочее пространство;

- при необходимости получить данные с другого регистрирующего устройства необходимо подключение другого ПК или переподключение кабелей и перенос того же самого ПК;

- ввод объема каждой порции титранта выполняется с клавиатуры, что усложняет процесс и растягивает его во времени.

Задачей настоящей группы изобретений является разработка динамичного способа сбора и обработки данных в процессе титрования и недорогостоящего малогабаритного устройства для его реализации, которые покрывают основные потребности пользователей/лабораторий, выполняющих анализы титриметрическим методом.

Техническим результатом заявляемой группы изобретений является сокращение времени на процесс титрования при одновременном повышении безопасности.

Поставленная задача в части способа решена за счет того, что способ сбора и обработки данных в процессе титрования включает сопряжение регистрирующего устройства, выполненного с возможностью измерения физико-химических свойств исследуемого раствора, и устройства сбора и обработки данных, голосовой ввод данных зрительного измерения объема при добавлении каждой порции титранта к раствору для исследования после запуска процесса титрования, снятие текущих показаний регистрирующего устройства, обработку данных объема, полученных голосовым вводом, и данных параметров физико-химического состояния раствора, полученных от регистрирующего устройства, с последующим построением их графической зависимости друг от друга, анализ построенного графика для определения точек перегиба на кривой титрования и последующее определение по значениям объема в этих точках искомых концентраций определяемых веществ в растворе, обработку полученных данных анализа, составление протокола измерений, его сохранение и его отображение.

Варианты реализации основного технического решения:

- сопряжение регистрирующего устройства и устройства сбора и обработки данных выполняют с помощью беспроводных технологий, таких как Bluetooth или Wi-Fi;

- перед началом процесса титрования вручную вводят исходные данные;

- перед началом процесса титрования запускают соответствующий шаблон измерений, при этом запуск соответствующего шаблона титрования производят из списка шаблонов,

созданных предварительно или в текущем процессе;

- остановку процесса сбора данных производят автоматически после достижения точки эквивалентности, заданной предварительно в запущенном шаблоне;

- определение точки перегиба на кривой титрования осуществляют с помощью алгоритма сглаживания по методу скользящего среднего, полиномиальной интерполяции и последующей обработки методами численного дифференцирования или методом Грана.

Поставленная задача в части устройства решена за счет того, что устройство для сбора и обработки данных в процессе титрования включает блок ручного ввода и коррекции данных, блок сопряжения с внешними устройствами, блок питания, блок памяти, соединенные с блоком обработки и управления, который соединен с голосовым блоком и с блоком отображения информации, при этом блок сопряжения с внешними устройствами выполнен с возможностью подключения к по меньшей мере одному регистрирующему устройству для измерения физико-химических свойств исследуемого

раствора, голосовой блок выполнен с возможностью голосового ввода данных, распознавания речи и преобразования звуковых данных в цифровые, а блок обработки и управления выполнен с возможностью управления включением и выключением остальных блоков, построения и обработки кривой титрования, вывода на блок

5 отображения информации результатов измерений и/или вычислений.

Варианты реализации основного технического решения:

- блок сопряжения с внешними устройствами выполнен с возможностью проводного подключения к нему по меньшей мере одного регистрирующего устройства для измерения физико-химических свойств исследуемого раствора;

10 - блок сопряжения с внешними устройствами выполнен с возможностью беспроводного подключения к нему по меньшей мере одного регистрирующего устройства для измерения физико-химических свойств исследуемого раствора;

- голосовой блок регистрирует звук с помощью микрофона;

- блок обработки и управления выполнен с возможностью формирования и

15 корректировки по меньшей мере одного шаблона измерения;

- блок обработки и управления выполнен с возможностью формирования отчета по проведенным измерениям;

- блок обработки и управления выполнен с возможностью передачи сформированного отчета по проведенным измерениям с помощью, например, технологии Wi-Fi, Bluetooth

20 или посредством GSM связи на другие устройства;

- все блоки реализованы на базе смартфона или планшета.

Таким образом, благодаря заявленной группе изобретений стало возможным создание полуавтоматического устройства, позволяющего ускорить и обезопасить процесс сбора и обработки данных при проведении процесса титрования при сохранении полностью

25 автоматизированной обработки данных. Голосовой ввод является на сегодняшний день самым быстрым методом ввода данных. Согласно исследованиям, количество символов, введенных с помощью голосового ввода за один и тот же промежуток времени в три-четыре раза превышает количество символов, введенных вручную [см. <http://readmultiplex.com/2017/03/27/stanford-university-voice-first-is-3x-faster-than-typing/>]. Таким

30 образом, при отсутствии лимита на установления равновесия в процессе титрования, скорость выполнения анализа также увеличивается в 3-4 раза. Использование голосового ввода данных освобождает руки лаборанта и позволяет ему не отвлекаться от процесса дозирования, что особенно важно вблизи объемов, соответствующих точкам эквивалентности.

35 Одновременно с этим беспроводное подключение регистрирующего устройства дополнительно позволяет существенно упростить заявляемое устройство и уменьшить требуемое рабочее пространство, поскольку нет необходимости использования проводов и их подключения, а также позволяет работать с несколькими регистрирующими устройствами, поскольку отсутствует ограничение на количество сопрягаемых

40 устройств, что увеличивает функциональность и область применения устройства в целом. Возможность реализации устройства на базе смартфона или компактного переносного планшета позволяет сделать устройство компактнее и с возможностью закрепления непосредственно на штативе с бюреткой, что значительно экономит рабочее место на столе лаборанта.

45 Сущность заявляемой группы изобретений поясняется с помощью фигур и нижеследующего описания.

На Фиг. 1 представлена блок-схема заявляемого устройства.

На Фиг. 2 и 3 представлены графические результаты измерений по Примеру 1.

Устройство для сбора и обработки данных в процессе титрования (Фиг. 1) включает блок 1 ручного ввода и коррекции данных, блок 2 сопряжения с внешними устройствами, блок 3 памяти, блок 4 питания, соединенные с блоком 5 обработки и управления. Блок 5 обработки и управления соединен с голосовым блоком 6 и блоком 7 отображения информации.

Блок 1 ручного ввода и коррекции данных (клавиатура, сенсорный экран и пр.) выполнен с возможностью ручного заполнения предложенных форм данными, например, исходными данными при старте процесса, а также корректировки голосовых значений в процессе титрования.

Под исходными данными понимаются переменные, требующиеся для выполнения окончательных расчетов и составления протоколов, например, массы введенных навесок, единицы измерения, титры растворов, коэффициенты разбавления и др. Однако ввод исходных данных может также осуществляться голосом с помощью голосового блока 6.

Блок 2 сопряжения с внешними устройствами выполнен с возможностью проводного или беспроводного подключения к по меньшей мере одному регистрирующему устройству (на чертеже не показано) для измерения физико-химических свойств исследуемого раствора. В случае беспроводного сопряжения блок 2 содержит модуль 8 беспроводного подключения на базе таких технологий, как Bluetooth или Wi-Fi.

Преимуществами беспроводного сопряжения будет являться освобождение рабочего пространства и повышение безопасности процесса титрования.

Под регистрирующим устройством (на чертеже не показано) понимается первичный преобразователь информационного сигнала, выполненный с возможностью определения отклика титруемого раствора на добавление дозируемого вещества. В качестве регистрирующего устройства (на чертеже не показано) может быть применен рН-метр, иономер, кондуктометр, амперметр, спектрофотометрическая ячейка, полярограф и др.

Голосовой блок 6 включает модуль 9 регистрации звука для обеспечения возможности голосового ввода данных, например, микрофон, модуль 10 распознавания речи, сконфигурированный для выделения человеческой речи из общего потока голосовых данных от микрофона, и модуль 11 преобразования голосовых данных в цифровые (оцифровывание), например, с помощью комбинации метода сопоставления шаблонов и метода комбинации функций.

Блок 5 обработки и управления выполнен с возможностью управления внутренними процессами, первичной обработки поступающих данных от других блоков и обработки результатов анализа, а также обеспечением питания остальных блоков. Блок 5 обработки и управления осуществляет управление остальными блоками с помощью модуля 12 управления; построения и обработки кривой титрования с помощью модуля 13 построения графика $E(V)$ и модуля 14 обработки кривой титрования $E(V)$; вывода на блок 7 отображения информации результатов измерений и/или вычислений с помощью модуля 15 вычислений. Определение концентрации выполняется с использованием формул для вычислений, которые включают символы, соответствующие найденным значениям объемов в точках эквивалентности, а также переменным и постоянным величинам, заданным в шаблонах или при запуске методов [<https://studfiles.net/preview/2180060/page:3/>; <https://studopedia.info/1-57948.html>; А.В. Юрьева АНАЛИТИЧЕСКАЯ ХИМИЯ Учебное пособие Омск - 2006 УДК 543 (075) ББК 24.4 я73 Ю 85]:

$c_1 = m_1/V_1$ - концентрация, выраженная в г/л

$c_2 = m_1/M_1/V_1$ - концентрация, выраженная в моль/л

и т.п.

Блок 5 осуществляет определение точки перегиба на кривой титрования, например, с помощью алгоритма сглаживания по методу скользящего среднего, полиномиальной интерполяцией и последующей обработки методами численного дифференцирования или методом Грана.

5 Блок 5 обработки и управления может быть выполнен с возможностью формирования и корректировки по меньшей мере одного шаблона измерения с помощью модуля 16 шаблонов. Шаблон представляет собой заполняемую форму и может быть выполнен в виде набора алгоритмов для выполнения анализа по той или иной методике титрования с указанием всех необходимых переменных и постоянных для автоматического
10 выполнения расчета, параметров обработки кривой титрования в каждом конкретном случае, единиц измерения, текстов для протоколов и инструкций для оператора. Шаблоны нужны для того, чтобы оператор в зависимости от того, анализ какого образца ему требуется выполнить, мог выбрать соответствующий заранее созданный шаблон со всеми необходимыми параметрами. Это значительно ускоряет рутинное
15 выполнение анализов в лаборатории.

Блок 5 обработки и управления может быть выполнен с возможностью статистической обработки полученных результатов (среднее значение, СКО, повторяемость и т.д.), а также с возможностью формирования отчета по проведенным измерениям с помощью модуля 17 формирования отчета, который позволяет
20 структурировать полученные результаты в соответствии с внутренними требованиями лаборатории, а также требованиями международных стандартов GMP и GLP.

Блок 5 обработки и управления может быть выполнен с возможностью передачи сформированного отчета с помощью модуля 18 передачи отчета по проведенным измерениям с помощью, например, технологии Wi-Fi, Bluetooth или посредством GSM
25 связи на другие устройства, в том числе в ЛИМС (лабораторно-информационная система).

Блок 3 памяти представляет собой хранилище данных (жесткий диск), в котором хранятся все данные устройства.

Блок 4 питания выполнен с возможностью обеспечения работоспособности остальных
30 блоков и может работать как от стационарной сети, так и от аккумуляторных батарей.

Блок 7 отображения информации (экран) выполнен с возможностью визуализации информации как в процессе титрования, так и по его окончанию.

Блоки могут быть реализованы в виде различных программных модулей, каждый из которых воплощается на материальном носителе данных для хранения данных,
35 считываемых компьютером, а также в виде устройства, включающего память и, по меньшей мере, один процессор, который соединен с памятью и выполненный с возможностью выполнения этапов способа. Устройство может быть реализовано на базе компьютера общего назначения, ноутбука, смартфона или планшета. Такая реализация может использовать, например, процессор, запоминающее устройство, и
40 интерфейс ввода /вывода, образованные, например, с помощью дисплея и клавиатуры. Реализация на базе смартфона позволит сэкономить максимум пространства на титровальном столе, при этом обеспечит максимальную скорость и безопасность оператора при вводе и отображении информации.

В качестве оператора может выступать человек, обладающий специальными знаниями
45 в области химии, а именно процессов титрования.

Описанное устройство реализует следующий способ сбора и обработки данных в процессе титрования, который включает:

1) сопряжение регистрирующего устройства (на чертеже не показано), выполненного

с возможностью измерения физико-химических свойств исследуемого раствора, и устройства сбора и обработки данных посредством его блока 2 сопряжения с внешними устройствами;

2) последующий голосовой ввод данных зрительного измерения объема при добавлении каждой порции титранта к раствору для исследования после запуска процесса титрования с использованием голосового блока 6 устройства сбора и обработки данных;

3) снятие текущих показаний регистрирующего устройства с помощью блока 2 сопряжения с внешними устройствами и передача данных в блок 5 обработки и управления устройства сбора и обработки данных;

4) обработку данных объема, полученных голосовым вводом, и данных параметров физико-химического состояния раствора, полученных от регистрирующего устройства, с последующим построением их графической зависимости друг от друга с использованием блока 5 обработки и управления устройства сбора и обработки данных;

5) анализ построенного графика для определения точек перегиба на кривой титрования и последующее определение по значениям объема в этих точках искомых концентраций определяемых веществ в растворе, а также обработку полученных данных анализа и составление протокола измерений, его сохранение и его отображение с использованием блока 5 обработки и управления устройства сбора и обработки данных.

Перед началом процесса титрования могут вручную или с использованием голосового блока 6 вводить исходные данные.

Перед началом процесса титрования могут запустить соответствующий шаблон измерений, например, на основе шаблонов, созданных предварительно или в текущем процессе. При этом остановку процесса сбора данных могут производить автоматически после достижения точки эквивалентности, заданной предварительно в запущенном шаблоне.

В случае отсутствия шаблонов критерием для остановки процесса сбора данных является достижение необходимого количества собранных данных для обеспечения достоверной их обработки. Так, например, для того, чтобы достоверно обчислить перегиб, необходимо, чтобы после его прохождения на кривой было не менее пяти точек. Оператору необходимо визуально определить момент остановки.

Определение точки перегиба на кривой титрования могут осуществлять с помощью алгоритма сглаживания по методу скользящего среднего, полиномиальной интерполяцией и последующей обработки методами численного дифференцирования или методом Грана.

Работа способа и устройства поясняется с помощью примеров.

Пример 1. Определение винной кислоты вине

Используемые материалы и аппаратура: реактив NaOH 1М; бюретка на 10 мл; штатив для бюретки; стакан для титрования на 100 мл; магнитная мешалка; регистрирующее устройство - рН-метр фирмы (например, «Семико» модель ИПЛ-301); Bluetooth адаптер для рН-метров фирмы «Семико»; рН-электрод ЭСК-10603; устройство сбора и обработки данных в процессе титрования.

Бюретку закрепляют на штативе и заполняют ее реактивом NaOH 1М. В стакан для титрования наливают образец вина 50 мл и устанавливают стакан на магнитную мешалку. Подключают электрод и Bluetooth адаптер к рН-метру. Погружают электрод в образец вина в стакане. Запускают перемешивание.

Включают устройство сбора и обработки данных в процессе титрования. Выполняют сопряжение с регистрирующим устройством 6 (рН-метром). Запускают шаблон

«Определение винной кислоты в вине». Заранее в шаблон вводят значение постоянной k_1 (коэффициент поправки к раствору NaOH 1M) 0,988. Все остальные параметры в шаблоне задаются при его создании: название, параметр стабилизации сигнала, метод обработки, расчетная формула « $V_1 \cdot k_1 \cdot 150,09/2/m$ » (150,92 - молярная масса винной кислоты, 2 - эквивалент), единица измерения итогового результата «г/л». После старта устройство предложит ввести переменную « m » (объем образца, мл). Вводят значение 50. Начинают добавление титранта порциями. После сигнала добавляют порцию титранта и произносят голосом значение добавленного объема в таком формате: «Один точка четырнадцать». Когда прозвучит следующий сигнал с устройства (значит, значение pH стабилизировалось), добавляют следующую порцию и снова произносят: «Один точка семьдесят один». И т.д. Устройство записывает в память (с помощью блока 3 памяти) таблицу измеренных значений в следующем формате:

V, мл	pH
0	3,54
1,14	4,16
1,71	4,5
2	4,69
2,2	4,82
2,4	4,97
2,58	5,12
2,74	5,26
2,88	5,41
3	5,55
3,1	5,69
3,19	5,83
3,26	5,97
3,32	6,11
3,37	6,25
3,42	6,39
3,46	6,52
3,5	6,67
3,53	6,8
3,56	6,96
3,65	7,2
3,98	7,6
4,2	7,7

4,59	7,8
------	-----

По ходу процесса на экран выводится кривая титрования (Фиг. 2).

Одновременно производится обработка согласно заложенному методу (поиск экстремума на кривой первой производной). Кривая первой производной может быть наложена на график (Фиг. 3). Далее обнаруживается экстремум и предлагается остановить процесс.

Оператор подтверждает остановку.

По найденному значению объема в точке экстремума (3,54 мл) производится расчет, используя заданную в шаблоне формулу, и результат выводится на экран:

C=5,257 г/л

В блоке 3 памяти сохраняется протокол в виде:

Определение содержания винной кислоты
Дата: 01.01.2019
Оператор: Иванов. И.И.
Размер образца: 50 мл.
C=5,257 г/л

Пример 2. Определение жесткости воды

Используемые материалы и аппаратура: реактив ЭДТА 0, 1М; раствор Эриохром черный 0,1%; бюретка на 5 мл; штатив для бюретки; ячейка для титрования на 100 мл; магнитная мешалка; регистрирующее устройство - спектрофотометр с длиной волны 550 нм; устройство сбора и обработки данных в процессе титрования.

Бюретку закрепляют на штативе и заполняют ее реактивом ЭДТА 0, 1М. В стакан для титрования наливают образец воды 50 мл. Добавляют 1 мл раствора индикатора Эриохром черный 0,1%. Устанавливают стакан в ячейку спектрофотометра. Запускают перемешивание.

Включают устройство сбора и обработки данных в процессе титрования. Выполняют сопряжение с регистрирующим устройством 6 (спектрофотометром). Запускают шаблон «Определение жесткости воды». Начинают добавление титранта порциями. После сигнала добавляют порцию титранта и произносят голосом значение добавленного объема в таком формате: «Один точка четырнадцать». Когда прозвучит следующий сигнал с устройства (значит, значение оптической плотности в мВ стабилизировалось), добавляют следующую порцию и снова произносят: «Один точка семьдесят один». И т.д.

Устройство записывает в память таблицу измеренных значений в следующем формате:

V, мл	E, мВ
0	837,6
1,14	837,3
1,71	836,5

По ходу процесса на экран выводится кривая титрования. Одновременно производится обработка согласно заложенному методу (поиск экстремума на кривой первой производной). Кривая первой производной может быть наложена на график. Обнаруживается один экстремум и останавливается процесс автоматически. По найденному значению объема в точке экстремума (1,2 мл) производится расчет, используя заданную в шаблоне формулу, и выводит на экран результат:

C=214,6 ppm

В памяти сохраняется протокол в виде:

Определение жесткости воды
Дата: 01.01.2019
Оператор: Иванов. И.И.
Размер образца: 50 мл.
C=214,5 ppm

Пример 3. Определение содержания лимонной кислоты в апельсиновом соке

Используемые материалы и аппаратура: реактив NaOH 0,1М; бюретка на 10 мл; штатив для бюретки; стакан для титрования на 100 мл; магнитная мешалка; регистрирующее устройство - pH-метр фирмы (например, «Hanna Instruments») HI5522-01); Bluetooth адаптер для pH-метров фирмы «Hanna Instruments»); pH-электрод HI1048В; устройство сбора и обработки данных в процессе титрования, реализованное на базе персонального компьютера, включающего микрофон.

Бюретку закрепляют на штативе и заполняют ее реактивом NaOH 0,1М. В стакан для титрования наливают образец сока 5 мл, добавляют 50 мл деионизированной воды и устанавливают стакан на магнитную мешалку. Соединяют устройство сбора и обработки данных с pH-метром. Погружают электрод в образец сока в стакане.

Запускают перемешивание.

Включают микрофон.

Добавляют порции титранта и одновременно произносят значение добавленного объема, считанное со шкалы бюретки в микрофон. Наблюдая на дисплее компьютера за ходом кривой титрования, прерывают процесс после добавления не менее 1 мл, следующих за участком перегиба.

V, мл	pH
0	4,05
1,71	4,68
2,57	5,04
...	...

Далее сохраняют в памяти компьютера и затем обрабатывают в подходящей программе математической обработки (Excel, MathCad или иное) с целью определения значения объема в точке перегиба. Получают значение 5,7 мл.

По значению объема в точке перегиба вычисляют содержание лимонной кислоты в соке, выраженное в г/л.

$$C=5,7*0,1*192,13/3/5$$

Получают 7,3 г/л.

(57) Формула изобретения

1. Способ сбора и обработки данных в процессе титрования включает сопряжение регистрирующего устройства, выполненного с возможностью измерения физико-химических свойств исследуемого раствора, и устройства сбора и обработки данных, голосовой ввод данных зрительного измерения объема при добавлении каждой порции титранта к раствору для исследования после запуска процесса титрования, снятие текущих показаний регистрирующего устройства, обработку данных объема, полученных голосовым вводом, и данных параметров физико-химического состояния раствора, полученных от регистрирующего устройства, с последующим построением

их графической зависимости друг от друга, анализ построенного графика для определения точек перегиба на кривой титрования и последующее определение по значениям объема в этих точках искомых концентраций определяемых веществ в растворе, обработку полученных данных анализа, составление протокола измерений, его сохранение и его отображение.

2. Способ сбора и обработки данных в процессе титрования по п. 1, отличающийся тем, что сопряжение регистрирующего устройства и устройства сбора и обработки данных выполняют с помощью беспроводных технологий, таких как Bluetooth или Wi-Fi.

3. Способ сбора и обработки данных в процессе титрования по п. 1, отличающийся тем, что перед началом процесса титрования вручную вводят исходные данные.

4. Способ сбора и обработки данных в процессе титрования по п. 1, отличающийся тем, что перед началом процесса титрования запускают соответствующий шаблон измерений.

5. Способ сбора и обработки данных в процессе титрования по п. 4, отличающийся тем, что запуск соответствующего шаблона титрования производят из списка шаблонов, созданных предварительно или в текущем процессе.

6. Способ сбора и обработки данных в процессе титрования по п. 4, отличающийся тем, что остановку процесса сбора данных производят автоматически после достижения точки эквивалентности, заданной предварительно в запущенном шаблоне.

7. Способ сбора и обработки данных в процессе титрования по п. 1, отличающийся тем, что определение точки перегиба на кривой титрования осуществляют с помощью алгоритма сглаживания по методу скользящего среднего, полиномиальной интерполяции и последующей обработки методами численного дифференцирования или методом

Грана.

8. Устройство для сбора и обработки данных в процессе титрования включает блок ручного ввода и коррекции данных, блок сопряжения с внешними устройствами, блок питания, блок памяти, соединенные с блоком обработки и управления, который соединен с голосовым блоком и с блоком отображения информации, при этом блок сопряжения с внешними устройствами выполнен с возможностью подключения к по меньшей мере одному регистрирующему устройству для измерения физико-химических свойств исследуемого раствора, голосовой блок выполнен с возможностью голосового ввода данных, распознавания речи и преобразования звуковых данных в цифровые, а блок обработки и управления выполнен с возможностью управления включением и выключением остальных блоков, построения и обработки кривой титрования, вывода на блок отображения информации результатов измерений и/или вычислений.

9. Устройство для сбора и обработки данных в процессе титрования по п. 8, отличающееся тем, что блок сопряжения с внешними устройствами выполнен с возможностью проводного подключения к нему по меньшей мере одного регистрирующего устройства для измерения физико-химических свойств исследуемого раствора.

10. Устройство для сбора и обработки данных в процессе титрования по п. 8, отличающееся тем, что блок сопряжения с внешними устройствами выполнен с возможностью беспроводного подключения к нему по меньшей мере одного регистрирующего устройства для измерения физико-химических свойств исследуемого раствора.

11. Устройство для сбора и обработки данных в процессе титрования по п. 8, отличающееся тем, что голосовой блок регистрирует звук с помощью микрофона.

12. Устройство для сбора и обработки данных в процессе титрования по п. 8, отличающееся тем, что блок обработки и управления выполнен с возможностью формирования и корректировки по меньшей мере одного шаблона измерения.

13. Устройство для сбора и обработки данных в процессе титрования по п. 8, отличающееся тем, что блок обработки и управления выполнен с возможностью формирования отчета по проведенным измерениям.

14. Устройство для сбора и обработки данных в процессе титрования по п. 8, отличающееся тем, что блок обработки и управления выполнен с возможностью передачи сформированного отчета по проведенным измерениям с помощью, например, технологии Wi-Fi, Bluetooth или посредством GSM связи на другие устройства.

15. Устройство для сбора и обработки данных в процессе титрования по п. 8, отличающееся тем, что все блоки реализованы на базе смартфона или планшета.

15

20

25

30

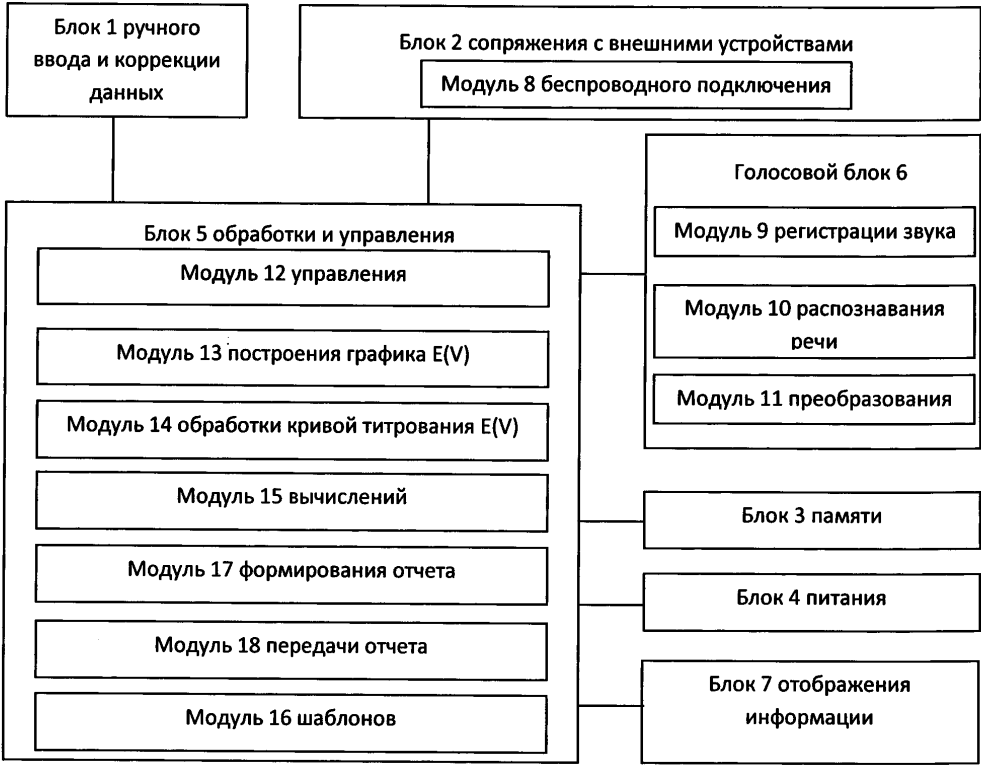
35

40

45

1

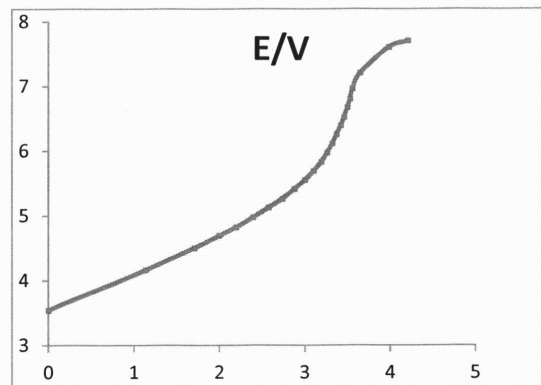
1/2



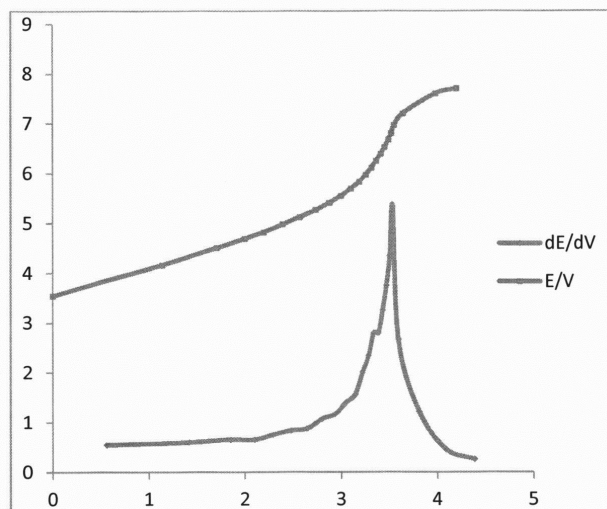
Фиг. 1

2

2/2



Фиг. 2



Фиг. 3