

**Глухова Н.В.**

Національний технічний університет «Дніпровська політехніка»

## КОМП'ЮТЕРНО-ІНТЕГРОВАНА ТЕХНОЛОГІЯ ДОСЛІДЖЕННЯ ПРОЦЕСІВ ЕМІСІЇ НОСІЇВ ЗАРЯДУ З ПОВЕРХНІ РІДИННОФАЗНОГО ОБ'ЄКТУ

*У статті виконаний огляд сучасних моделей молекулярної структури води, зокрема останні наукові досягнення, які спрямовані на вивчення біологічних властивостей води, що мають безпосередній вплив на її біодоступність та здатність забезпечувати процеси метаболізму у живих клітинах.*

*З метою удосконалення експериментальних методів дослідження біологічних властивостей води запропоновано комп'ютерно-інтегровану технологію аналізу і параметризації зображень газорозрядного випромінювання зразків води. Фізичний ефект, на основі якого забезпечується отримання та реєстрація зображень газорозрядного випромінювання навколо зразка досліджуваної рідини, полягає у формуванні газових розрядів за рахунок вивільнення носіїв заряду з поверхні зразка унаслідок впливу зовнішнього імпульсного електромагнітного поля. Геометричні та фотометричні параметри зареєстрованих на сенсорній поверхні газових розрядів дозволяють зробити оцінку здатності рідини до емісії вільних носіїв заряду для забезпечення нормального протікання кислотно-відновлювальних реакцій у клітинах живих організмів.*

*Перевагою запропонованої комп'ютерно-інтегрованої технології оцінки біологічних властивостей води є забезпечення кількісного оцінювання параметрів зображень газорозрядного випромінювання, які корелюють з геометричними та фотометричними ознаками зображень газорозрядного випромінювання і слугують для дослідження зареєстрованих в ході активного вимірювального експерименту особливостей емісії з поверхні зразка рідини вільних носіїв заряду.*

*У якості параметрів, які описують характерні ознаки зображень газорозрядного випромінювання рідини, запропоновано використання усередненого значення амплітуд спектру потужності та суми коефіцієнтів спектру потужності для складових профілю яскравості на високих частотах зміни яскравості зображення.*

*Отримані експериментальні результати, які ґрунтуються на дослідженні зразків води з різними біологічними властивостями, підтверджують достовірність запропонованої комп'ютерно-інтегрованої технології оцінки біологічних властивостей води.*

**Ключові слова:** обробка зображень, комп'ютерно-інтегрована технологія, газорозрядне випромінювання, спектральний аналіз зображень.

**Постановка проблеми.** Проблема якості води існує у багатьох регіонах світу [1–3]. Для дослідження якості води застосовується велике різноманіття показників, для оцінки яких впроваджуються у практику різні методи та засоби досліджень. Можна виділити три основні групи параметрів, за якими виконується оцінка якості води: фізичні, хімічні, біологічні. При виконанні досліджень показників якості з певної групи використовуються різні моделі води.

**Аналіз останніх досліджень і публікацій.** На сьогоднішній день розроблено велику кількість моделей води [4–5]. З точки зору встановлення біологічних властивостей води необхідно фокус уваги зосереджувати на будові її молекулярної структури, оскільки однією з найважливіших властивостей води для існування живих клітин

є здатність води забезпечувати належне протікання процесів метаболізму, кислотно-відновлювальних реакцій [6].

Для дослідження молекулярної структури, у тому числі молекулярної динаміки води, на сьогоднішній день запропоновані відповідні теоретичні моделі та експериментальні методи досліджень [7–9]. Для дослідження біологічних властивостей води перспективними виявляються методи активного експерименту, які дозволяють досліджувати явища емісії вільних носіїв заряду зі зразків досліджуваної рідини [6, 9]. Реалізація активного вимірювального експерименту шляхом впливу на досліджуваний зразок води зовнішнього електромагнітного поля забезпечує можливість спостереження та реєстрації газових розрядів, які утворюються за рахунок емісії

вільних носіїв заряду. Можливість емісії вільних носіїв заряду з рідини обумовлена особливостями її молекулярної будови та безпосередньо впливає на біологічні властивості води.

**Постановка завдання.** На підставі аналізу актуальних наукових досягнень в галузі існуючих моделей молекулярної структури води та запропонованих на сьогоднішній день експериментальних методів досліджень біологічних властивостей води зроблений висновок щодо позитивної обґрунтованості подальшого розвитку та удосконалення методів активного вимірювального експерименту з можливістю автоматизованої обробки їх результатів. Завдання досліджень полягає в розробці комп'ютерно-інтегрованої технології оцінки біологічних властивостей води на базі спектрального аналізу зображень газорозрядного випромінювання зразків води, які отримані в ході активного вимірювального експерименту.

**Виклад основного матеріалу дослідження.** Біологічні властивості води, зокрема її біодоступність, яка проявляється у здатності забезпечувати процеси метаболізму у живих клітинах, безпосередньо пов'язані з особливостями її молекулярної будови. Однією з останніх запропонованих моделей молекулярної будови води, яка у тому числі описує динамічні процеси емісії вільних носіїв заряду, є модель, розроблена в галузі квантової електродинаміки. Складна динаміка міжмолекулярних зв'язків рідкої фази води пояснюється в рамках запропонованого підходу на базі використання уявлень про формування когерентних доменів [10–12]. Наявність цілого спектру різних моделей молекулярної будови води обумовлена її так званими «аномальними» властивостями, які у певній мірі описуються на базі застосування тієї або іншої моделі [12]. Аналіз існуючих наукових досягнень в галузі досліджень води вказує на обмеженість моделей, які ґрунтуються на представленні молекулярної структури води у вигляді окремих ізольованих молекул. З точки зору дослідження біологічних властивостей води необхідно використання моделей, які описують складні динамічні процеси перетворення міжмолекулярних зв'язків.

В моделі води, розробленої в рамках квантової електродинаміки, складні динамічні процеси міжмолекулярної взаємодії в структурі води враховують наявність так званих когерентних доменів [10, 11]. Когерентні домени виступають джерелами вільних носіїв заряду, які необхідні для нормального протікання процесів метаболізму у клітинах організмів.

Для експериментального дослідження явищ емісії вільних носіїв заряду з поверхні зразків води використаний метод, який являє собою активний вимірювальний експеримент і полягає у впливі зовнішнього електромагнітного поля на досліджуваний зразок [6]. Результат реєстрації просторової картини розповсюдження газового розряду являє собою зображення в аналоговій або цифровій формі у залежності від принципу дії реєструючого пристрою. Якщо зображення зареєстроване в аналоговій формі на фотоносії, то для подальшого комп'ютерного аналізу воно підлягає процедурі аналого-цифрового перетворення. Комп'ютерна обробка зображення газорозрядного випромінювання забезпечує виділення характерних геометричних та фотометричних ознак. У роботах [6, 13, 14] запропоновані підходи комп'ютерної обробки зображень, які забезпечують виділення характерних ознак з гістограм зображень та подальшу класифікацію зображень на певні класи, які виділяються на підставі експертних оцінок або на базі нечіткого кластерного аналізу.

Подальший розвиток досліджень біологічних властивостей води полягає у розробці комп'ютерно-інтегрованої технології, яка реалізує виділення кількісних ознак зображень, що характеризують параметри газорозрядного випромінювання, які корелюють з біологічними властивостями води, а саме з ефектом емісії вільних носіїв заряду з поверхні досліджуваного зразка рідини.

На рис. 1–3 представлено графіки кривих профілів яскравості для зображень, отриманих в результаті реєстрації газових розрядів на межі рідинно-газового об'єкту та газового середовища для різних зразків води (дистильованої, забрудненої домішками нафтопродуктів, природної бутильованої).

Як видно з візуального аналізу профілів яскравості, усі вони мають певні загальні особливості: початкова та кінцева ділянки графіків відповідають зоні фону фотоносія (рентгенівської плівки).

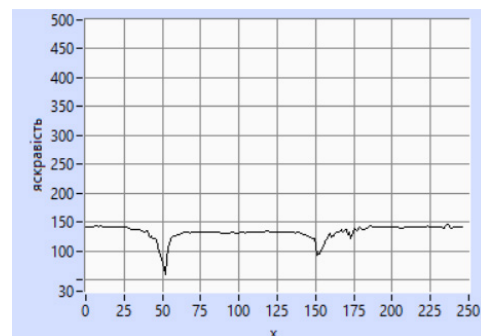
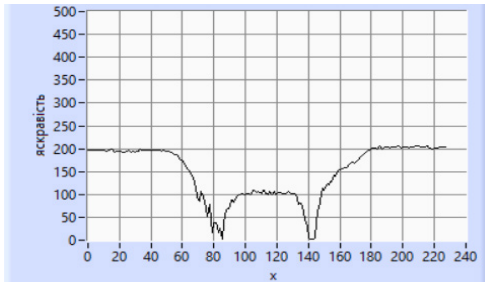


Рис. 1. Профіль яскравості зображення формування газових розрядів навколо зразка дистильованої води



**Рис. 2.** Профіль яркості зображення формування газових розрядів навколо зразка води з домішками нафтопродуктів



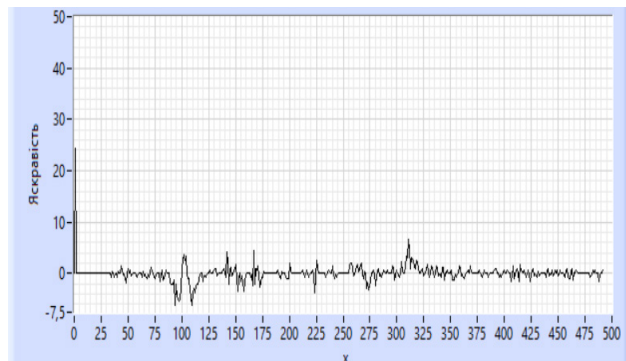
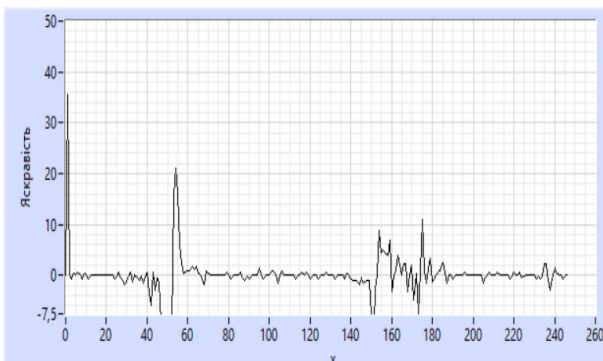
**Рис. 3.** Профіль яркості зображення формування газових розрядів навколо зразка природної бутильованої води

Поруч з зонами фону спостерігається зниження яркості пікселів, ці ділянки з мінімальною

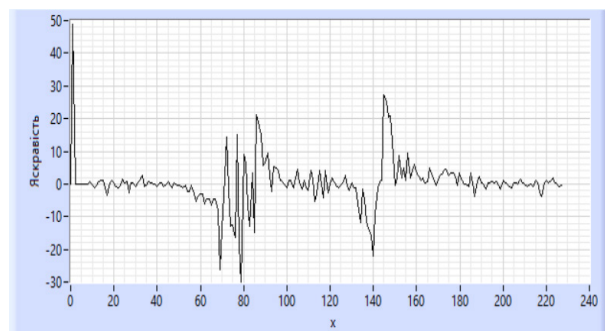
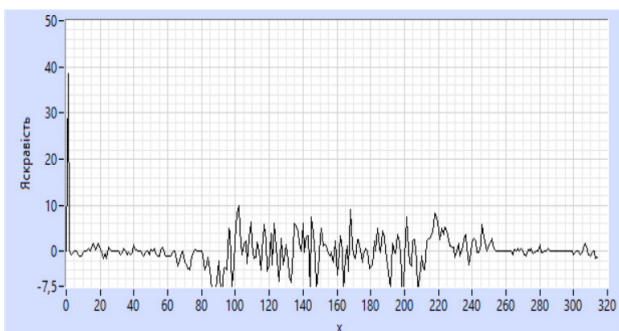
яскравістю відповідають зоні розповсюдження газових розрядів (на рентгенівський плівці реєструється негативне зображення) навколо досліджуваного зразка; центральна частина графіку профілю яркості відповідає внутрішньому колу зображення – площині, на якій досліджуваний зразок води контактує з фотоносієм.

З точки зору дослідження ефекту емісії вільних носіїв заряду з поверхні рідини необхідно забезпечити деталізацію формування картини газових розрядів на поверхні фотоносія, при цьому бажано усунути з розгляду однакові складові профілю зображення, які є загальними для усіх зображень – фон, форма досліджуваного зразка. Для цього в розробленій комп'ютерно-інтегрованої технології для дослідження біологічних властивостей води застосовується програмний фільтр високих частот. На базі застосування програмної фільтрації отримані графіки високочастотних складових профілю яркості. На рис. 5–6 представлено графіки високочастотних складових відповідно для профілів зображень газорозрядного випромінювання.

З метою кількісної оцінки характерних ознак високочастотних складових профілів яркості для зображень газорозрядного випромінювання



**Рис. 5.** Графіки високочастотної складової профілю яркості для зразків дистильованої води (а) та води з домішками нафтопродуктів (б)



**Рис. 7.** Графіки високочастотної складової профілю яркості для зразків водопровідної (а) та природної води (б)

в комп'ютерно-інтегрованій технології оцінюється усереднене значення амплітуд спектру потужності та сума коефіцієнтів спектру потужності для складових профілю яскравості на високих частотах після застосування цифрової фільтрації. Результати розрахунку зазначених параметрів для різних зразків води представлені в табл. 1.

Таблиця 1

**Значення параметрів зображень випромінювання зразків в електромагнітному полі**

Тип зразка	Усереднене значення амплітуд спектру потужності	Сума коеф. спектру потужності для складових профілю яскравості на високих частотах
дистильована	0,12	5,48
з вмістом нафтопродуктів	0,01	2,74
водопровідна з території мегаполісу	0,26	14,23
природна бутильована	0,47	53,68

Як видно з табл. 1, найменші величини усередненого значення амплітуд спектру потужності та суми коефіцієнтів спектру потужності для складових профілю яскравості на високих частотах визначені для зразків води з вмістом нафтопродуктів та для дистильованої. Проаналізуємо отриманий результат кількісної оцінки параметрів для складових профілю яскравості на високих частотах для зображення газорозрядного випромінювання з точки зору фізичних ефектів, які відбуваються під час впливу на досліджуваний зразок зовнішнього електромагнітного поля.

Зразок досліджуваної рідини, розташований в електромагнітному полі високої напруженості, виступає частиною електричного кола. Властивості рідини впливають на особливості формування газового розряду. Таким чином, можна опосередковано встановити характеристики рідини на підставі аналізу геометричних та фотометричних ознак зображення газорозрядного випромінювання.

За рахунок впливу електромагнітного поля забезпечується емісія заряджених частинок з поверхні зразка рідини, що необхідно для старту початкової фази газового розряду. Під час експериментальних досліджень реєструється двови-

мірне зображення за рахунок впливу на сенсорний елемент (в аналоговому варіанті – на рентгенівську плівку, в цифровому варіанті реалізації пристрою реєстрації – на ПЗЗ-матрицю) заряджених частинок та фотонів. Таким чином, ступінь здатності досліджуваного зразка рідини вивільняти з поверхні носії заряду безпосередньо впливає на картину формування газових розрядів.

Як впливає з аналізу табл. 1, мінімальні кількісні значення параметрів для складових профілю яскравості на високих частотах спостерігаються для зразка води з домішками нафтопродуктів, що вказує на найгірші біологічні властивості даного зразка. Невеликі числові параметри для усередненого значення амплітуд спектру потужності та суми коефіцієнтів спектру потужності для складових профілю яскравості на високих частотах також для зразка дистильованої води.

Суттєво більшими показниками усередненого значення амплітуд спектру потужності та суми коефіцієнтів спектру потужності для складових профілю яскравості на високих частотах характеризується зразок природної бутильованої води, що дозволяє зробити висновок про її найкращі біологічні властивості у порівнянні з іншими зразками.

**Висновки.** В роботі представлено результати розробки комп'ютерно-інтегрованої технології оцінки біологічних властивостей води на базі спектрального аналізу зображень. Зображення формуються на базі впливу на зразок досліджуваної рідини зовнішнім електромагнітним полем, в результаті чого реєструється двовимірне зображення формування газових розрядів навколо зразка. Фізичні процеси, які виникають під час протікання розрядного струму, пов'язані з емісією носіїв заряду з поверхні досліджуваного зразка. Наявність вільних носіїв заряду у зразку рідини та можливість їх вивільнення зі структури води пов'язані з її біологічними властивостями, які проявляються в ході кислотно-відновлювальних реакцій на клітинному рівні і забезпечують нормальне протікання процесів метаболізму живих істот. В комп'ютерно-інтегрованій технології оцінки біологічних властивостей води запропоновано методу кількісної оцінки ознак зображень газорозрядного випромінювання, які характеризують процеси утворення газових розрядів за рахунок вивільнення носіїв заряду з поверхні зразка рідини. Проведені експериментальні дослідження для зразків води з різними біологічними властивостями вказують на достовірність отриманих результатів.

Список літератури:

1. Bacha L., da Silva Bandeira M., Lima V.S., Ventura R., de Rezende C.E., Ottoni A.B., Tschoeke D., Cosenza C., Thompson C., Thompson F. Current Status of Drinking Water Quality in a Latin American Megalopolis. *Water*. 2023. N.15(1):165. <https://doi.org/10.3390/w15010165>.
2. Sarah Acquah, Maura Allaire. Disparities in drinking water quality: evidence from California. *Water Policy*. 2023. N.25(2). P.69–86. <https://doi.org/10.2166/wp.2023.068>.
3. Kelsey Ng, Nikiforos Alygizakis, Maria-Christina Nika, Aikaterini Galani, Peter Oswald, Martina Oswaldova, Ľuboš Čirka, Uwe Kunkel, André Macherius, Manfred Sengl, Giulio Mariani, Simona Tavazzi, Helle Skejo, Bernd M. Gawlik, Nikolaos S. Thomaidis, Jaroslav Slobodnik. Wide-scope target screening characterization of legacy and emerging contaminants in the Danube River Basin by liquid and gas chromatography coupled with high-resolution mass spectrometry. *Water Research*. 2023. Vol. 230. P. 119539. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2022.119539>.
4. David Van der Spoel, Paul J. van Maaren, Herman J C Berendsen. A systematic study of water models for molecular simulation: Derivation of water models optimized for use with a reaction field. *The Journal of chemical physics*. 1998. N.108(24). P.10220-10230. Doi: 10.1063/1.476482.
5. C. Vega, E. de Miguel. Surface tension of the most popular models of water by using the test-area simulation method. *J. Chem. Phys.* 2007. N.126. 154707. <https://doi.org/10.1063/1.2715577>.
6. Глухова Н.В. Інформаційна технологія для дослідження когерентного стану рідини. *Вчені записки Таврійського національного університету імені В.І. Вернадського. Серія: Технічні науки*. 2021. Том 32 (71). № 4. С.60-65. DOI <https://doi.org/10.32838/2663-5941/2021.4/09>.
7. Reich V., Majumdar A., Müller M., Busch S.. Comparison of molecular dynamics simulations of water with neutron and X-ray scattering experiments. *EPJ Web of Conferences*. 2022. Vol.272. 01015. <https://doi.org/10.1051/epjconf/202227201015>.
8. Sachini P. Kadaoluwa Pathirannahalage, Nastaran Meftahi, Aaron Elbourne, Alessia C. G. Weiss, Chris F. McConville, Agilio Padua, David A. Winkler, Margarida Costa Gomes, Tamar L. Greaves, Tu C. Le, Quinn A. Besford, Andrew J. Christofferson. Systematic Comparison of the Structural and Dynamic Properties of Commonly Used Water Models for Molecular Dynamics Simulations. *J. Chem. Inf. Model.* 2021, N. 61, 9, P.4521–4536. <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.1c00794>
9. Ignatov I., Antonov A. Neshev N., Niggli H., Stoyanov Ch., Drossinakis Ch. Color Coronal Spectral Analysis of Bioelectrical Effects of Humans and Water. *Contemporary Engineering Sciences*, 2021. Vol. 14, No. 1., PP. 61-72. doi: 10.12988/ces.2021.91781.
10. Messori C. The Super-Coherent State of Biological Water. *OALib Journal*. 2019. № 6(2). Pp. 1-5. DOI:10.4236/oalib.1105236.
11. Bono I., Del Giudice E., Gamberale L., Henry M. Emergence of the Coherent Structure of Liquid Water. *Water*. 2012. N. 4(3), PP. 510-532. <https://doi.org/10.3390/w4030510>.
12. Georgios M. Kontogeorgis, Holster A., Kottaki N., Tsochantaris E., Topsøe F., Poulsen J., Bache M., Liang X., Blom N. S., Kronholm J. Water structure, properties and some applications – A review. *Chemical Thermodynamics and Thermal Analysis*. 2022. Vol. 6. 100053. <https://doi.org/10.1016/j.ctta.2022.100053>.
13. Глухова Н.В. Розробка методу експрес-оцінки біологічних властивостей води. *Східно-європейський журнал передових технологій*. 2014. № 6/5(72). С.18-25.
14. Глухова Н.В., Пісоцька Л.А., Кучук Н.Г. Розробка системи експрес-класифікації води на основі бази даних зображень газорозрядного випромінювання. *Збірник наукових праць Харківського університету повітряних сил ім. І. Кожедуба*. 2015. Вип. 3(44). С. 112-118.

**Glukhova N.V. COMPUTER-INTEGRATED TECHNOLOGY OF RESEARCH OF CHARGE CARRIER EMISSION PROCESSES FROM THE SURFACE OF A LIQUID-PHASE OBJECT**

*The article reviews modern models of the molecular structure of water, in particular, the latest scientific achievements aimed at studying the biological properties of water, which have a direct impact on its bioavailability and ability to support metabolic processes in living cells.*

*In order to improve the experimental methods of researching the biological properties of water, a computer-integrated technology of analysis and parameterization of images of gas-discharge radiation of water samples is proposed. The physical effect, on the basis of which the acquisition and registration of images of gas-discharge radiation around the sample of the investigated liquid is ensured, consists in the formation of gas discharges due to the release of charge carriers from the surface of the sample as a result of the influence of an external pulsed electromagnetic field. The geometric and photometric parameters of the gas discharges registered on the sensor surface make it possible to estimate the ability of the liquid to emit free charge carriers to ensure the normal flow of acid-reduction reactions in the cells of living organisms.*

*The advantage of the proposed computer-integrated technology for assessing the biological properties of water is to provide a quantitative assessment of the parameters of the gas-discharge radiation images, which correlate with the geometric and photometric features of the gas-discharge radiation images and serve to study the features of the emission from the surface of a liquid sample of free charge carriers registered during an active measurement experiment.*

*The use of the averaged value of the power spectrum amplitudes and the sum of the power spectrum coefficients for the components of the brightness profile at high frequencies of image brightness change is proposed as parameters that describe the characteristic features of images of gas-discharge liquid radiation.*

*The obtained experimental results, which are based on the study of water samples with different biological properties, confirm the reliability of the proposed computer-integrated technology for assessing the biological properties of water.*

**Key words:** *image processing, computer-integrated technology, gas discharge radiation, spectral image analysis.*