

УДК 004.9+543.08+543.422.7

## АГРЕГИРОВАНИЕ ПРЕДПОЧТЕНИЙ ПРИ ВЫБОРЕ ЦВЕТОВОЙ МОДЕЛИ ДЛЯ ЦИФРОВОГО ЦВЕТОМЕТРИЧЕСКОГО АНАЛИЗА СОСТАВА ВЕЩЕСТВ

Муравьев Сергей Васильевич<sup>1</sup>,  
muravyov@tpu.ru

Спиридонова Анна Сергеевна<sup>1</sup>,  
spiridonova@tpu.ru

Емельянова Екатерина Юрьевна<sup>1</sup>,  
zeta@tpu.ru

<sup>1</sup> Национальный исследовательский Томский политехнический университет,  
Россия, 634050, г. Томск, пр. Ленина, 30.

**Актуальность** исследования обусловлена тем, что при количественном определении состава веществ все большую популярность приобретает цифровой цветометрический анализ. Это оптический аналитический метод, в котором первичным измерительным преобразователем является оптод, полученный из реагентов, иммобилизованных в твердотельную матрицу. При взаимодействии с определяемым компонентом в пробе оптод изменяет цвет; интенсивность окраски оптода пропорциональна количеству определяемого компонента. Полученный таким образом аналитический сигнал необходимо оцифровать и представить в одном из существующих цветовых пространств для формирования значения измеряемой величины. В научно-технической литературе не существует обоснованных рекомендаций, которые позволяли бы на систематической основе выбирать наиболее подходящее для конкретных требований цветовой модели для организации цифрового цветометрического анализа, которая для заданного набора аналитов обеспечивает наилучшие значения характеристик построенных для них градуировочных зависимостей аналитических сигналов.

**Цель:** способствовать решению проблемы выбора такой цветовой модели для организации цифрового цветометрического анализа, которая для заданного набора аналитов обеспечивает наилучшие значения характеристик построенных для них градуировочных зависимостей аналитических сигналов.

**Объекты:** используемые при цифровом описании цвета стандартные цветовые модели RGB, HSL, XYZ и  $L^*a^*b^*$ . В качестве определяемых веществ были использованы тяжелые металлы: серебро, медь, железо, кобальт, хром, никель и сумма тяжелых металлов.

**Методы.** Предложен и экспериментально обоснован с помощью агрегирования предпочтений метод выбора стандартной системы (модели) представления цвета, обеспечивающей проведение цифрового цветометрического анализа с наилучшими возможными значениями набора характеристик градуировочных зависимостей получаемых аналитических сигналов.

**Результаты.** Метод позволяет выбирать стандартную цветовую модель, наилучшим образом подходящую для проведения цифрового цветометрического анализа, что, в свою очередь, способствует повышению достоверности цифрового цветометрического анализа.

### Ключевые слова:

Цифровой цветометрический анализ, агрегирование предпочтений, стандартная цветовая модель, градуировочная зависимость, цветометрическая шкала.

### Введение

Цифровой цветометрический анализ (ЦЦА) – это оптический аналитический метод, в котором первичным измерительным преобразователем является оптод, полученный из реагентов, иммобилизованных в твердотельную матрицу [1, 2]. При взаимодействии с определяемым компонентом в пробе оптод изменяет цвет; интенсивность окраски оптода пропорциональна количеству определяемого компонента. Полученный таким образом аналитический сигнал необходимо оцифровать и представить в одном из существующих цветовых пространств для дальнейшей обработки и формирования значения измеряемой величины [2].

ЦЦА на основе различного типа колориметрических сенсоров широко и успешно применяется при экспресс-определении ионов тяжелых металлов и других неорганических и органических веществ в полевых или производственных условиях [3–14]. При изготовлении твердотельной матрицы для колориметрических сенсоров используются: целлюлоза

(в частности, бумага), ионообменные волокна, силикагели, пенополиуретаны и другие полимерные материалы. В последнее десятилетие все чаще применяются массивы колориметрических сенсоров, позволяющих проводить экспресс-анализ одновременно нескольких определяемых веществ [12]. Популярность ЦЦА растет, т. к. изменение цвета может быть оценено с помощью легко доступных средств, таких как смартфон, сканер, цифровая видео- или фотокамера. Многочисленные реализации вариантов ЦЦА (например, [3–7]) показывают, что характеристики их точности и прецизионности сопоставимы с характеристиками традиционных спектрофотометрических методов при явном превосходстве по показателям стоимости, быстроты действия и весогабаритов.

При цифровом описании цвета используют различные стандартные цветовые модели, отличающиеся физическими способами воспроизведения цвета: RGB, HSL, XYZ,  $L^*a^*b^*$  и др. [15]. Цветовая модель задает соответствие между воспринимаемыми человеком цветами и цветами, формируемыми на устройствах вывода изображений. Она позволяет математически

описать определенные области видимого спектра посредством смешивания нескольких основных цветов, число которых обычно выбирается равным трем. Основные цвета разбиваются на оттенки по яркости (от темного к светлому), и каждой градации яркости присваивается цифровое значение (например, самой темной – 0, самой светлой – 255). Таким образом, любой цвет можно разложить на оттенки основных цветов и обозначить его набором цифр – цветовых координат. При этом можно задавать трехмерное (по числу основных цветов) цветовое координатное пространство, в котором каждый конкретный цвет представляется точкой.

Разные авторы используют разные стандартные системы представления цвета при решении своих задач цветометрических измерений, например, [16, 17]. Однако в научно-технической литературе не существует обоснованных рекомендаций, которые позволяли бы на систематической основе выбирать наиболее подходящую для конкретных требований цветовую модель. Цель данной статьи – способствовать решению этой проблемы путем выбора такой цветовой модели для организации ЦЦА, которая для заданного набора анализов обеспечивает наилучшие значения характеристик построенных для них градуировочных зависимостей аналитических сигналов.

#### Агрегирование предпочтений

Поставленную цель можно достичь, решая задачу многокритериального выбора методом агрегирования предпочтений [18]. Введем необходимые термины и обозначения.

Пусть задано множество  $m$  ранжирований  $\Lambda(m, n) = \{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m\}$   $n$  объектов (альтернатив) из множества  $A = \{a_1, a_2, \dots, a_n\}$ . Множество ранжирований  $\Lambda(m, n)$  будем называть *профилем предпочтения*, где каждое *ранжирование* имеет вид цепочки

$$\lambda_k = (a_1 \succ a_2 \succ \dots \sim a_s \sim a_t \succ \dots \sim a_n), k=1, \dots, m$$

и задает отношение предпочтения на множестве  $A$ . Ранжирование  $\lambda_k$  задается указанием некоторого признака  $q_k$  из списка  $Q = \{q_1, q_2, \dots, q_m\}$ , по которому каждая пара элементов из  $A$  находится друг с другом в отношении *строгого предпочтения*  $\rho$ , т. е.  $a_i \succ_{q_k} a_j$ , или в отношении *толерантности*  $\tau$ , т. е.  $a_i \sim_{q_k} a_j$ .

Агрегировать  $m$  предпочтений, заданных на множестве  $n$  альтернатив, означает определить единственное отношение предпочтения  $\beta$ , называемое ранжированием консенсуса, которое обеспечивает между ранжированиями исходного профиля наилучший компромисс. В качестве ранжирования консенсуса будем использовать ранжирование Кемени [19], представляющее собой такой линейный порядок  $\beta$  альтернатив, что расстояние  $D(\beta, \Lambda)$  (определенное в терминах числа парных несоответствий между ранжированиями) от  $\beta$  до ранжирований исходного профиля  $\Lambda$  минимально для всех возможных строгих порядков (перестановок) альтернатив.

Ранжирование Кемени может быть *неединственным* ранжированием консенсуса. Для преодоления этого недостатка и приведения множества ранжирований консенсуса  $V = \{\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_N\}$  к единственному итоговому ранжированию консенсуса  $\beta_{\text{fin}}$  будем использовать следующее правило свертки [20]. Пусть ранг  $r_i^k$  – это позиция альтернативы  $a_i$  в ранжировании консенсуса  $\beta_k \in V, k=1, \dots, N$ . Пусть также полный ранг  $r_i$  альтернативы  $a_i$  определяется как  $r_i = \sum_{k=1}^N r_i^k$ . Тогда для всех  $i < j, i, j=1, \dots, n$ , выполняются импликации

$$(r_i < r_j \Rightarrow a_i \succ a_j) \wedge (r_i = r_j \Rightarrow a_i \sim a_j), \quad (1)$$

где отношения строгого предпочтения  $\succ$  и толерантности  $\sim$  принадлежат единственному итоговому ранжированию консенсуса  $\beta_{\text{fin}}$ .

Для нахождения ранжирования консенсуса будем использовать рекурсивный алгоритм собственной разработки RECURSALL, реализующий рекурсивный метод ветвей и границ, позволяющий находить все возможные ранжирования консенсуса для заданного исходного профиля предпочтений [19].

#### Модели представления цвета

Дадим краткую характеристику наиболее часто используемым при обработке цветометрических данных цветовых моделей. Подробное их описание можно найти в [15, 21].

*Модель RGB.* В ее основе лежит воспроизведение любого цвета путем сложения трех основных цветов: красного (Red), зеленого (Green) и синего (Blue). Эту модель относят к классу аддитивных моделей. В модели RGB каждый основной цвет характеризуется интенсивностью (яркостью), которая может принимать 256 значений – от 0 до 255. Цвета можно смешивать в различных пропорциях, изменяя яркость каждой составляющей.

Особенностью модели является зависимость воспроизведения цвета от характеристик устройств вывода изображений. По этой причине цвета одного и того же изображения могут различаться на разных компьютерных мониторах. Данная модель применяется для описания цвета в проходящем или излучаемом свете.

*Модель XYZ.* В 1931 г. Международной комиссией по освещению (МКО, International Commission on Illumination, CIE) была разработана стандартная цветовая система XYZ на основе зрительных возможностей наблюдателя, которые были изучены и зафиксированы в ходе проведения длительных исследований человеческого зрения. В модели XYZ реальные цвета были заменены тремя не воспроизводимыми цветами, условно названными X, Y и Z, которые были стандартизированы по длине волны. Основной ее недостаток заключается в том, что расстояние между двумя точками этого цветового пространства не соответствует зрительному восприятию различия цветов.

*Модель L\*a\*b\*.* была разработана для устранения нелинейности пространства XYZ с точки зрения че-

ловеческого восприятия. Координата  $L$  означает светлоту (в диапазоне от 0 до 100 %), координата  $a$  обозначает позицию между зеленым и красным, координата  $b$  – между синим и желтым цветами. Яркость в этой модели не связана с цветом, поэтому с ее помощью удобно регулировать контраст, резкость и другие параметры изображения независимо от цвета. Ее используют в основном в обработке изображений и для их конвертации из одной цветовой модели в другую без потерь. Является аппаратно-независимой и определяет цвета без учета индивидуальных особенностей устройства (принтера, монитора и т. п.).

Модель *HSL* опирается на интуитивные понятия тона, насыщенности и светлоты. Цветовой тон (Hue) позволяет различать основные цвета, такие как красный, зеленый, синий, и изменяется от  $0^\circ$  до  $360^\circ$  (каждое значение соответствует одному цвету). Насыщенность (Saturation) цвета показывает, насколько данный цвет отличается от монохроматического («чистого») излучения того же светового тона, характеризует степень ослабления (разбавления) данного цвета белым и изменяется от 0 до 100 %. Светлота (Lightness) – различимость участков, сильнее или слабее отражающих свет – изменяется от 0 до 100 % (от черного к белому). Получила распространение в областях, связанных с созданием цветных покрытий (лакокрасочная, полиграфическая и др. отрасли).

#### Обоснование выбора модели представления цвета

Целью выбора является наиболее предпочтительная цветовая модель  $a$  из множества цветковых моделей  $A = \{a_1, a_2, \dots, a_n\}$ , которая для заданного набора аналитов (определяемых веществ)  $\{Me_1, Me_2, \dots, Me_p\}$  обеспечивает наилучшие значения характеристик  $\{q_1, q_2, \dots, q_m\}$  построенных для них градуировочных зависимостей (ГЗ) аналитических сигналов  $Y = dE = f(C)$ , где  $dE$  – цветовое различие,  $C$  – концентрация аналита.

Применим метод агрегирования предпочтений (раздел «Агрегирование предпочтений»), который применительно к задаче выбора цветовой модели будет состоять из следующих шагов.

*Шаг 1.* Для каждого аналита  $Me_l, l=1, \dots, p$ , выполняем шаги 2–4 (рис. 1).

*Шаг 2.* Построение профиля предпочтения  $\Lambda_l$ , т. е. ранжирований элементов множества  $A$  по каждой из характеристик  $q_k, k=1, \dots, m$ , по следующему правилу: пара моделей  $a_i$  и  $a_j$  будет находиться в бинарном отношении  $a_i > a_j$  или  $a_i < a_j$ , или  $a_i \sim a_j$  по характеристике  $q_k$ , если соответствующие пары значений  $v_i$  и  $v_j$  характеристики  $q_k$  состоят в бинарном отношении  $v_i < v_j$  или  $v_i > v_j$ , или  $v_i = v_j$ , т. е.:

$$v_i \underset{q_k}{\geq} v_j \Leftrightarrow a_i \underset{q_k}{\geq} a_j, \quad (2)$$

*Шаг 3.* Нахождение для профиля  $\Lambda_l$  ранжирований консенсуса  $V_l = \{\beta_1, \dots, \beta_N\}$  по правилу Кемени с помощью алгоритма RECURSALL.

*Шаг 4.* Определение с помощью правила свертки (1) итогового ранжирования консенсуса  $\beta_{finl}$ .

*Шаг 5.* Формирование профиля предпочтений  $\Lambda^* = \{\beta_{fin1}, \beta_{fin2}, \dots, \beta_{finp}\}$ , состоящего из итоговых ранжирований консенсуса, полученных для  $p$  аналитов.

*Шаг 6.* Нахождение для профиля  $\Lambda^*$  ранжирований консенсуса  $V^*$  по правилу Кемени.

*Шаг 7.* Определение с помощью правила свертки (1) итогового ранжирования консенсуса  $\beta^*_{fin}$ . Крайняя левая альтернатива  $a$  в  $\beta^*_{fin}$  является наилучшей цветовой моделью.

В дальнейшем изложении в качестве аналитов будем рассматривать следующие семь металлов:  $Me_1$  – серебро Ag (I),  $Me_2$  – медь Cu (II),  $Me_3$  – железо Fe (II),  $Me_4$  – кобальт Co (II),  $Me_5$  – хром Cr (VI),  $Me_6$  – никель Ni (II) и  $Me_7$  – сумма тяжелых металлов  $\Sigma_{Me}$ .

Множество  $A$  цветковых моделей представлено следующим образом:  $a_1$  – RGB,  $a_2$  –  $L^*a^*b^*$ ,  $a_3$  – XYZ и  $a_4$  – HSL.

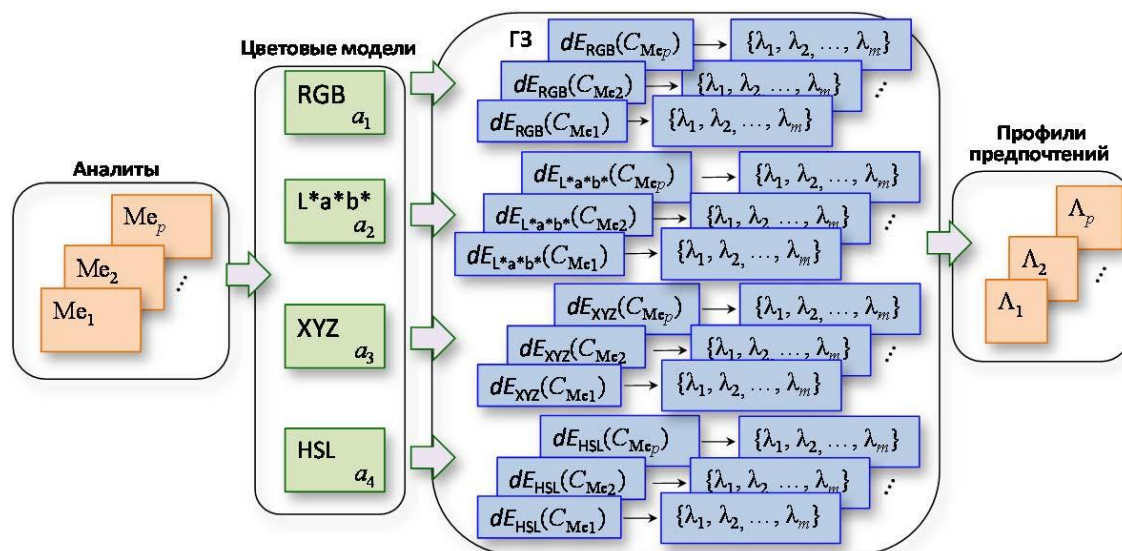


Рис. 1. Получение профилей предпочтений  $\Lambda_l$  для соответствующих аналитов  $Me_l$   
 Fig. 1. Obtaining preference profiles  $\Lambda_l$  for appropriate analytes  $Me_l$

### Характеристики градуировочных зависимостей аналитических сигналов

Ниже дано краткое описание шести типичных характеристик  $q_1, q_2, \dots, q_6$  градуировочных зависимостей аналитических сигналов, которые будем использовать при выборе цветовой модели.

**Коэффициент детерминации  $R^2$**  (характеристика  $q_1$ ) показывает, на сколько процентов изменение аналитического сигнала учтено в модели и обусловлено влиянием на него концентрации определяемого металла; рассчитывается по формуле:

$$R^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (\hat{Y}_i - \bar{Y})^2}{\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2},$$

где  $\hat{Y}_i$  – рассчитанные по уравнению градуировочной зависимости значения аналитического сигнала;  $\bar{Y}$  – среднее значение измеренного аналитического сигнала;  $n$  – число измерений.

Коэффициент детерминации принимает значения от 0 до 1. Чем ближе его значение к 1, тем сильнее зависимость аналитического сигнала  $Y$  от концентрации  $C$  определяемого компонента. Если  $R^2 \geq 50\%$ , то градуировочная зависимость считается приемлемой. При сравнении двух градуировочных зависимостей коэффициент  $R^2$  не может применяться, если у одной из зависимостей коэффициент линейной аппроксимации  $b=0$  (уравнение (3)). Другие рассматриваемые ниже характеристики свободны от этого недостатка.

**Коэффициент корреляции  $r$**  (характеристика  $q_2$ ) показывает близость наблюдений к градуировочной зависимости и определяется по формуле:

$$r = \frac{\sum_{i=1}^n (C_i - \bar{C}) \cdot (Y_i - \bar{Y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (C_i - \bar{C})^2} \cdot \sqrt{\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2}},$$

где  $C_i$  – концентрация компонента;  $\bar{C}$  – среднее значение концентрации компонента;  $Y_i$  – измеренные значения аналитического сигнала.

**Остаточное стандартное отклонение** (характеристика  $q_3$ ) рассчитывается по формуле:

$$S_{oc} = \sqrt{\sum_{i=1}^n (\hat{Y}_i - Y_i) / (n - k)},$$

где  $k$  – число параметров модели аппроксимации (для линейной зависимости  $k=2$ ).

Чем меньше остаточное СКО, тем точнее полученная модель.

**Средняя относительная погрешность аппроксимации** (характеристика  $q_4$ ):

$$\bar{\delta} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |(Y_i - \hat{Y}_i) / Y_i| \cdot 100.$$

Если  $(6-7)\% \leq \bar{\delta} \leq (12-15)\%$ , то качество ГЗ считается приемлемым.

**Диапазон линейности** (характеристика  $q_5$ ) показывает наличие прямой пропорциональной зависимости аналитического сигнала от концентрации определяемого компонента.

**Предел обнаружения** (характеристика  $q_6$ ) показывает минимальное содержание определяемого вещества в пробе; рассчитывается по формуле:

$$C_{min} = 3s_0 / a,$$

где  $a$  – коэффициент линейной аппроксимации градуировочной зависимости (тангенс угла наклона градуировочной зависимости);  $s_0$  – стандартное отклонение фонового сигнала (при  $C=0$  мг/л).

### Экспериментальные исследования

Для проведения исследований подготовили пластины размером  $6,0 \times 8,0$  мм из полиметакрилатной матрицы (ПММ), полученной по методике [1]. Для получения полиметакрилатного оптода в статическом режиме проводили иммобилизацию аналитических реагентов (табл. 1) в полиметакрилатную матрицу. Для этого ПММ выдерживали в водных, водно-органических или органических растворах реагентов в течение 5–15 минут. После иммобилизации реагента матрица остается неокрашенной и прозрачной. Подробное описание иммобилизации реагентов приведено в [1, 2].

Для определения содержания исследуемого компонента необходимо иметь цветометрическую шкалу, состоящую из нескольких опорных оптодов, цвета которых соответствует известным значениям концентрации определяемого компонента. Известные значения формировались приготовлением растворов с использованием государственных стандартных образцов (ГСО), произведенных ООО «Экоаналитика» (Ag (I) – 8204-025, Cu (II) – 7763-2000, Fe (II) – 7766-2000, Co (II) – 7784-2000, Cr (VI) – 7781-2000, Ni (II) – 7785-2000) с заданными концентрациями исследуемых металлов, в которые помещались оптоды.

**Таблица 1.** Цветометрические реагенты для определения аналитов

**Table 1.** Colorimetric reagents for analyte determination

Определяемое вещество Determined substance	Иммобилизуемый аналитический реагент Immobilized analytical reagent	Цвет оптода Optode color
Ni (II)	1-(2-пиридилазо)-2-нафтол (ПАН) 1-(2-pyridylazo)-2-naphthol (PAN)	малиновый crimson
Co (II, III)		зеленый green
ΣMe		красно-малиновый red-crimson
Cu (II)	диэтилдитиокарбаминат свинца lead diethyldithiocarbamate	желто-коричневый yellow-brown
Fe (II, III)	2,2'-дипиридил 2,2'-dipyridyl	красный red
	1,10-фенантролин 1,10-phenanthroline	оранжевый orange
Cr (VI)	1,5-дифенилкарбазида (ДФК) 1,5-diphenylcarbazine (DPC)	красно-фиолетовый red-violet
Ag (I)	дитизон dithizon	красно-фиолетовый red-violet

В результате контакта оптоды приобретали окраску в зависимости от концентрации определяемого компонента. Полученные цветометрические шкалы приведены в табл. 2.

Цветометрической шкале соответствует градуировочная зависимость  $Y=f(C)$ , которая обычно имеет линейный вид:

$$Y = aC + b, \quad (3)$$

где  $C$  – концентрация аналита;  $a$  и  $b$  – коэффициенты линейной аппроксимации;  $Y$  – измеренный аналитический сигнал.

Аналитический сигнал вычислялся как цветовое различие  $Y=dE$ , имеющее смысл функции расстояния между цветами исследуемого оптода и опорного оптода цветометрической шкалы. Для получения координат цвета использовали: для цветовой системы RGB – программное обеспечение цифрового цветометрического анализатора собственной разработки [2], для цветových систем  $L^*a^*b^*$ , XYZ, HSL – многофункциональный графический редактор Adobe Photoshop.

Цветовое различие  $dE$  в зависимости от выбранной системы представления цвета рассчитывали по формулам:

- для цветовой системы RGB:

$$dE_{RGB} = \sqrt{dR^2 + dG^2 + dB^2},$$

где  $dR=R-R_0$ ,  $dG=G-G_0$ ,  $dB=B-B_0$  – изменения координат цвета в системе RGB;  $R$ ,  $G$ ,  $B$  – координаты цвета оптода после контакта с раствором, содержащим определяемый компонент;  $R_0$ ,  $G_0$ ,  $B_0$  – координаты

цвета оптода после его контакта с раствором сравнения;

- для цветовой системы  $L^*a^*b^*$ :

$$dE_{L^*a^*b^*} = \sqrt{dL^{*2} + da^{*2} + db^{*2}},$$

где  $dL^*=L^*-L_0^*$ ,  $da^*=a^*-a_0^*$ ,  $db^*=b^*-b_0^*$  – изменения координат цвета в системе  $L^*a^*b^*$ ;  $L^*$ ,  $a^*$ ,  $b^*$  – координаты цвета оптода после его контакта с раствором, содержащим определяемый компонент;  $L_0^*$ ,  $a_0^*$ ,  $b_0^*$  – координаты цвета оптода после его контакта с раствором сравнения;

- для цветовой системы XYZ:

$$dE_{XYZ} = \sqrt{dX^2 + dY^2 + dZ^2},$$

где  $dX=X-X_0$ ,  $dY=Y-Y_0$ ,  $dZ=Z-Z_0$  – изменения координат цвета в системе XYZ;  $X$ ,  $Y$ ,  $Z$  – координаты цвета оптода после контакта с раствором, содержащим определяемый компонент;  $X_0$ ,  $Y_0$ ,  $Z_0$  – координаты цвета оптода после его контакта с раствором сравнения;

- для цветовой системы HSL:

$$dE_{HSL} = \sqrt{dH^2 + dS^2 + dL^2},$$

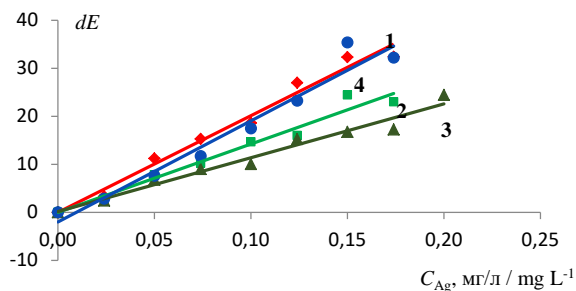
где  $dH=H-H_0$ ,  $dS=S-S_0$ ,  $dL=L-L_0$  – изменения координат цвета в системе HSL;  $H$ ,  $S$ ,  $L$  – координаты цвета оптода после контакта с раствором, содержащим определяемый компонент;  $H_0$ ,  $S_0$ ,  $L_0$  – координаты цвета оптода после его контакта с раствором сравнения.

По полученным данным построили ГЗ цветового различия от концентрации определяемого металла для исследуемых цветových моделей (рис. 2–8).

**Таблица 2.** Цветометрические шкалы для определения аналитов

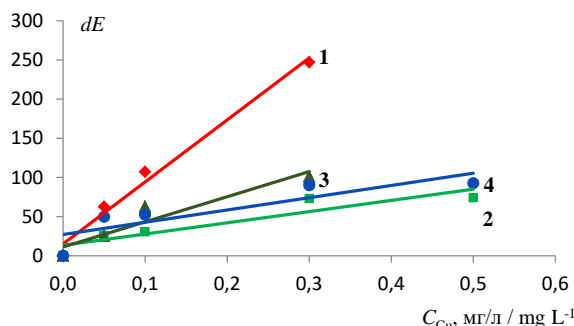
**Table 2.** Colorimetric scales for analyte determination

Аналит Me; Analyte Me,	Цветометрическая шкала Colorimetric scale									
Ag (I)	Опорные оптоды Reference optodes									
	$C, \text{ мг/л/mg L}^{-1}$	0,000	0,024	0,050	0,074	0,100	0,124	0,150	0,174	0,200
Cu (II)	Опорные оптоды Reference optodes								–	–
	$C, \text{ мг/л/mg L}^{-1}$	0,00	0,05	0,10	0,30	0,50	0,70	1,00	–	–
Fe (II)	Опорные оптоды Reference optodes									–
	$C, \text{ мг/л/mg L}^{-1}$	0,0	0,1	0,3	0,7	1,0	2,0	3,0	5,0	–
Co (II)	Опорные оптоды Reference optodes						–	–	–	–
	$C, \text{ мг/л/mg L}^{-1}$	0,00	0,05	0,10	0,25	0,50	–	–	–	–
Cr (VI)	Опорные оптоды Reference optodes								–	–
	$C, \text{ мг/л/mg L}^{-1}$	0,00	0,05	0,10	0,25	0,50	0,75	1,00	–	–
Ni (II)	Опорные оптоды Reference optodes							–	–	–
	$C, \text{ мг/л/mg L}^{-1}$	0,00	0,05	0,10	0,30	0,50	1,00	–	–	–
$\Sigma \text{Me}$	Опорные оптоды Reference optodes							–	–	–
	$C, \text{ мг/л/mg L}^{-1}$	0,00	0,01	0,05	0,10	0,500	0,70	–	–	–



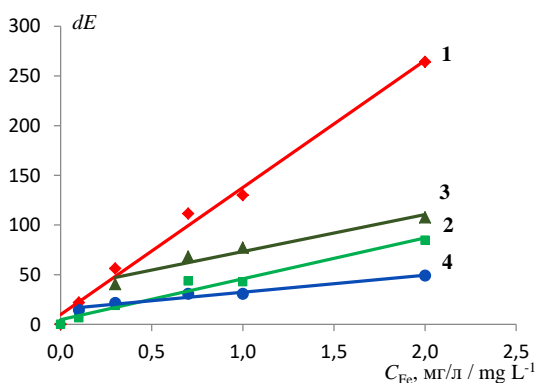
**Рис. 2.** Градуировочные зависимости цветового различия от концентрации Ag (I) для исследуемого набора цветковых моделей: 1 –  $dE_{RGB} = -0,02 + 202 \cdot C$ ; 2 –  $dE_{L^*a^*b^*} = -0,013 + 143 \cdot C$ ; 3 –  $dE_{XYZ} = 0,15 + 112 \cdot C$ ; 4 –  $dE_{HSL} = -2 + 211 \cdot C$

**Fig. 2.** Calibration dependences of color difference on Ag (I) concentration for the studied set of color models: 1 –  $dE_{RGB} = -0,02 + 202 \cdot C$ ; 2 –  $dE_{L^*a^*b^*} = -0,013 + 143 \cdot C$ ; 3 –  $dE_{XYZ} = 0,15 + 112 \cdot C$ ; 4 –  $dE_{HSL} = -2 + 211 \cdot C$



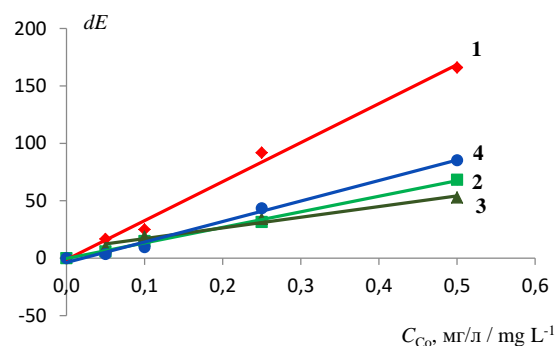
**Рис. 3.** Градуировочные зависимости цветового различия от концентрации Cu (II) для исследуемого набора цветковых моделей: 1 –  $dE_{RGB} = 15 + 792 \cdot C$ ; 2 –  $dE_{L^*a^*b^*} = 13 + 143 \cdot C$ ; 3 –  $dE_{XYZ} = 11 + 320 \cdot C$ ; 4 –  $dE_{HSL} = 27 + 156 \cdot C$

**Fig. 3.** Calibration dependences of color difference on Cu (II) concentration for the studied set of color models: 1 –  $dE_{RGB} = 15 + 792 \cdot C$ ; 2 –  $dE_{L^*a^*b^*} = 13 + 143 \cdot C$ ; 3 –  $dE_{XYZ} = 11 + 320 \cdot C$ ; 4 –  $dE_{HSL} = 27 + 156 \cdot C$



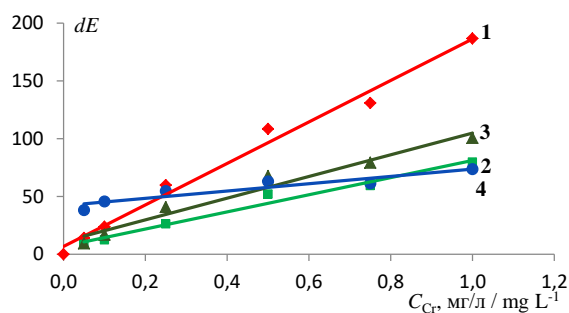
**Рис. 4.** Градуировочные зависимости цветового различия от концентрации Fe (II) для исследуемого набора цветковых моделей: 1 –  $dE_{RGB} = 10 + 128 \cdot C$ ; 2 –  $dE_{L^*a^*b^*} = 5 + 41 \cdot C$ ; 3 –  $dE_{XYZ} = 36 + 37 \cdot C$ ; 4 –  $dE_{HSL} = 15 + 17 \cdot C$

**Fig. 4.** Calibration dependences of color difference on Fe (II) concentration for the studied set of color models: 1 –  $dE_{RGB} = 10 + 128 \cdot C$ ; 2 –  $dE_{L^*a^*b^*} = 5 + 41 \cdot C$ ; 3 –  $dE_{XYZ} = 36 + 37 \cdot C$ ; 4 –  $dE_{HSL} = 15 + 17 \cdot C$



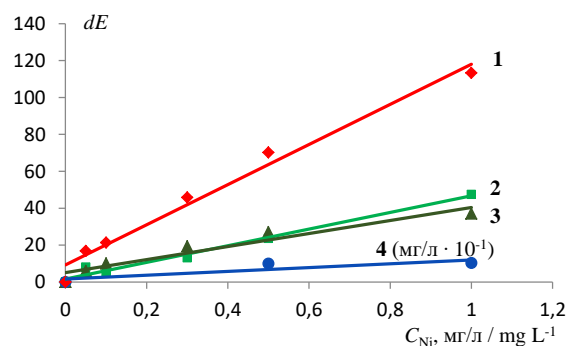
**Рис. 5.** Градуировочные зависимости цветового различия от концентрации Co (II) для исследуемого набора цветковых моделей: 1 –  $dE_{RGB} = -1,3 + 340 \cdot C$ ; 2 –  $dE_{L^*a^*b^*} = -0,3 + 136 \cdot C$ ; 3 –  $dE_{XYZ} = 8 + 93 \cdot C$ ; 4 –  $dE_{HSL} = -4 + 178 \cdot C$

**Fig. 5.** Calibration dependences of color difference on Co (II) concentration for the studied set of color models: 1 –  $dE_{RGB} = -1,3 + 340 \cdot C$ ; 2 –  $dE_{L^*a^*b^*} = -0,3 + 136 \cdot C$ ; 3 –  $dE_{XYZ} = 8 + 93 \cdot C$ ; 4 –  $dE_{HSL} = -4 + 178 \cdot C$



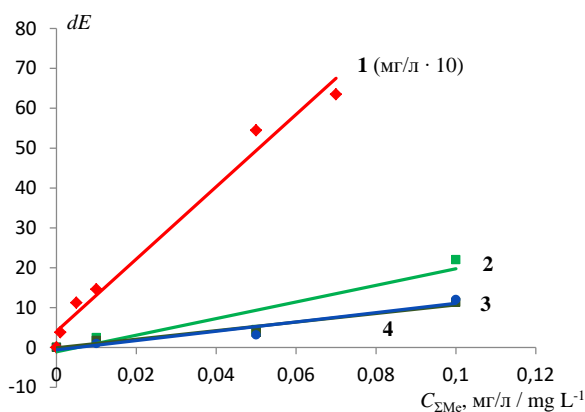
**Рис. 6.** Градуировочные зависимости цветового различия от концентрации для исследуемого набора цветковых моделей: 1 –  $dE_{RGB} = 7 + 179 \cdot C$ ; 2 –  $dE_{L^*a^*b^*} = 7 + 74 \cdot C$ ; 3 –  $dE_{XYZ} = 11 + 94 \cdot C$ ; 4 –  $dE_{HSL} = 42 + 32 \cdot C$

**Fig. 6.** Calibration dependences of color difference on Cr (VI) concentration for the studied set of color models: 1 –  $dE_{RGB} = 7 + 179 \cdot C$ ; 2 –  $dE_{L^*a^*b^*} = 7 + 74 \cdot C$ ; 3 –  $dE_{XYZ} = 11 + 94 \cdot C$ ; 4 –  $dE_{HSL} = 42 + 32 \cdot C$



**Рис. 7.** Градуировочные зависимости цветового различия от концентрации Ni (II) для исследуемого набора цветковых моделей: 1 –  $dE_{RGB} = 9 + 109 \cdot C$ ; 2 –  $dE_{L^*a^*b^*} = 2 + 45 \cdot C$ ; 3 –  $dE_{XYZ} = 7 + 32 \cdot C$ ; 4 ( $\text{мг/л} \cdot 10^{-1}$ ) –  $dE_{HSL} = 3 + 71 \cdot C$

**Fig. 7.** Calibration dependences of color difference on Ni (II) concentration for the studied set of color models: 1 –  $dE_{RGB} = 9 + 109 \cdot C$ ; 2 –  $dE_{L^*a^*b^*} = 2 + 45 \cdot C$ ; 3 –  $dE_{XYZ} = 7 + 32 \cdot C$ ; 4 ( $\text{мг/л} \cdot 10^{-1}$ ) –  $dE_{HSL} = 3 + 71 \cdot C$



**Рис. 8.** Градуировочные зависимости цветового различия от концентрации  $\Sigma_{Me}$  для исследуемого набора цветковых моделей: 1 (мг/л·10) –  $dE_{RGB}=4+91\cdot C$ ; 2 –  $dE_{L^*a^*b^*}=-1,1+208\cdot C$ ; 3 –  $dE_{XYZ}=-0,1+108\cdot C$ ; 4 –  $dE_{HSL}=-0,6+117\cdot C$

**Fig. 8.** Calibration dependences of color difference on  $\Sigma_{Me}$  concentration for the studied set of color models: 1 (mg/l·10) –  $dE_{RGB}=4+91\cdot C$ ; 2 –  $dE_{L^*a^*b^*}=-1,1+208\cdot C$ ; 3 –  $dE_{XYZ}=-0,1+108\cdot C$ ; 4 –  $dE_{HSL}=-0,6+117\cdot C$

Для каждой цветометрической шкалы были рассчитаны значения характеристик полученных градуировочных зависимостей  $q_1, q_2, \dots, q_6$  при применении

цветовых моделей  $a_1, a_2, a_3$  и  $a_4$  для всех аналитов  $Me_1, Me_2, \dots, Me_7$ . Полученные данные сведены в табл. 3.

В табл. 4 приведены исходные профили предпочтений  $\Lambda$ , сформированные для семи аналитов по данным табл. 3 по формуле (2).

В табл. 5 представлены результаты вычислений ранжирований консенсуса для каждого исходного профиля алгоритмом RECURSALL и применения правила свертки (1) в случаях, когда число оптимальных решений превышало единицу (аналиты Ag (I) и Co (II)).

Из итоговых ранжирований консенсуса, взятых из крайнего правого столбца табл. 5, формируем профиль предпочтений  $\Lambda^*=\{\beta_{fin1}, \beta_{fin2}, \dots, \beta_{fin7}\}$ . После применения к профилю  $\Lambda^*$  правила Кемени получаем множество  $B^*$ , состоящее из двух ранжирований консенсуса  $a_1>a_2>a_3>a_4$  и  $a_1>a_2>a_4>a_3$ . После свертки получаем окончательное ранжирование консенсуса  $\beta_{fin}^*=\{a_1>a_2>a_3\sim a_4\}$ , откуда следует, что для ЦЦА наиболее приемлемой системой представления цвета является цветовая модель RGB, которая обеспечивает наилучшие значения характеристик градуировочных зависимостей аналитических сигналов для рассмотренного набора из семи аналитов.

**Таблица 3.** Значения характеристик градуировочных зависимостей

**Table 3.** Values of characteristics of calibration dependencies

Аналит Analyte	Цветовая модель Color model	$q_1$	$q_2$	$q_3$	$q_4$	$q_5$	$q_6$
Ag (I)	$a_1$	0,9800	0,9899	1,9	4,90	0,000–0,174	0,006
	$a_2$	0,9700	0,9849	1,6	2,34	0,000–0,174	0,012
	$a_3$	0,9712	0,9855	1,4	1,11	0,000–0,200	0,012
	$a_4$	0,9577	0,9786	2,9	5,65	0,000–0,174	0,005
Cu (II)	$a_1$	0,9895	0,9947	5,3	0,80	0,0–0,3	0,002
	$a_2$	0,8519	0,9230	9,3	7,80	0,0–0,5	0,016
	$a_3$	0,9071	0,9524	12,0	5,61	0,0–0,3	0,006
	$a_4$	0,7424	0,8616	18,0	12,90	0,0–0,5	0,006
Fe (II)	$a_1$	0,9920	0,9959	6,6	2,91	0,0–2,0	0,002
	$a_2$	0,9699	0,9848	6,1	1,90	0,0–2,0	0,030
	$a_3$	0,9540	0,9767	7,3	1,48	0,3–2,0	0,040
	$a_4$	0,9664	0,9831	2,8	1,44	0,1–2,0	0,070
Co (II)	$a_1$	0,9928	0,9964	6,7	4,53	0,0–0,5	0,005
	$a_2$	0,9972	0,9986	1,7	1,30	0,0–0,5	0,008
	$a_3$	0,9780	0,9889	3,5	4,70	0,05–0,50	0,005
	$a_4$	0,9916	0,9958	3,8	21,30	0,0–0,5	0,010
Cr (VI)	$a_1$	0,9873	0,9936	8,6	0,08	0,0–1,0	0,013
	$a_2$	0,9791	0,9895	4,6	4,80	0,05–1,00	0,010
	$a_3$	0,9678	0,9838	7,2	10,70	0,05–1,00	0,012
	$a_4$	0,8802	0,9382	4,9	0,74	0,05–1,00	0,011
Ni (II)	$a_1$	0,9801	0,9900	6,6	6,50	0,0–1,0	0,005
	$a_2$	0,9829	0,9914	2,5	4,60	0,0–1,0	0,009
	$a_3$	0,9464	0,9728	3,4	7,60	0,05–1,00	0,006
	$a_4$	0,9264	0,9625	3,2	11,20	0,0–0,3	0,010
$\Sigma_{Me}$	$a_1$	0,9815	0,9907	4,1	1,30	0,0–0,7	0,009
	$a_2$	0,8937	0,9453	4,0	12,70	0,0–0,1	0,008
	$a_3$	0,9543	0,9690	1,3	2,76	0,0–0,1	0,006
	$a_4$	0,9674	0,9360	1,7	3,86	0,0–0,1	0,007

**Таблица 4.** Исходные профили предпочтений  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_7$

**Table 4.** Initial preference profiles  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_7$

Ag (I)		Cu (II)		Fe (II)		Cr (VI)	
$\lambda_1$	$a_1 > a_3 > a_2 > a_4$	$\lambda_1$	$a_1 > a_3 > a_2 > a_4$	$\lambda_1$	$a_1 > a_2 > a_4 > a_3$	$\lambda_1$	$a_1 > a_2 > a_3 > a_4$
$\lambda_2$	$a_1 > a_3 > a_2 > a_4$	$\lambda_2$	$a_1 > a_3 > a_2 > a_4$	$\lambda_2$	$a_1 > a_2 > a_4 > a_3$	$\lambda_2$	$a_1 > a_2 > a_3 > a_4$
$\lambda_3$	$a_3 > a_2 > a_1 > a_4$	$\lambda_3$	$a_1 > a_2 > a_3 > a_4$	$\lambda_3$	$a_4 > a_2 > a_1 > a_3$	$\lambda_3$	$a_2 > a_4 > a_3 > a_1$
$\lambda_4$	$a_3 > a_2 > a_1 > a_4$	$\lambda_4$	$a_1 > a_3 > a_2 > a_4$	$\lambda_4$	$a_4 > a_3 > a_2 > a_1$	$\lambda_4$	$a_1 > a_4 > a_2 > a_3$
$\lambda_5$	$a_3 > a_1 \sim a_2 \sim a_4$	$\lambda_5$	$a_2 \sim a_4 > a_1 \sim a_3$	$\lambda_5$	$a_1 \sim a_2 > a_4 > a_3$	$\lambda_5$	$a_1 > a_2 \sim a_3 \sim a_4$
$\lambda_6$	$a_4 > a_1 > a_2 \sim a_3$	$\lambda_6$	$a_1 > a_3 \sim a_4 > a_2$	$\lambda_6$	$a_1 > a_2 > a_3 > a_4$	$\lambda_6$	$a_2 > a_4 > a_3 > a_1$
Co(II)		Ni(II)		$\Sigma_{Me}$			
$\lambda_1$	$a_2 > a_1 > a_4 > a_3$	$\lambda_1$	$a_2 > a_1 > a_3 > a_4$	$\lambda_1$	$a_1 > a_4 > a_3 > a_2$		
$\lambda_2$	$a_2 > a_1 > a_4 > a_3$	$\lambda_2$	$a_2 > a_1 > a_3 > a_4$	$\lambda_2$	$a_1 > a_4 > a_3 > a_2$		
$\lambda_3$	$a_2 > a_3 > a_4 > a_1$	$\lambda_3$	$a_2 > a_4 > a_3 > a_1$	$\lambda_3$	$a_3 > a_4 > a_2 > a_1$		
$\lambda_4$	$a_2 > a_3 > a_1 > a_4$	$\lambda_4$	$a_2 > a_1 > a_3 > a_4$	$\lambda_4$	$a_1 > a_3 > a_4 > a_2$		
$\lambda_5$	$a_1 \sim a_2 \sim a_4 > a_3$	$\lambda_5$	$a_1 \sim a_2 > a_3 > a_4$	$\lambda_5$	$a_1 > a_2 \sim a_3 \sim a_4$		
$\lambda_6$	$a_1 \sim a_3 > a_2 > a_4$	$\lambda_6$	$a_1 > a_3 > a_2 > a_4$	$\lambda_6$	$a_3 > a_4 > a_2 > a_1$		

**Таблица 5.** Результаты вычислений ранжирований консенсуса

**Table 5.** Computing results of consensus rankings

Аналит Analyte	Множество В ранжирований консенсуса Set B of consensus rankings	Итоговое ранжирование консенсуса $\beta_{fin}$ Final consensus ranking $\beta_{fin}$
Ag (I)	$a_1 > a_3 > a_2 > a_4$ $a_3 > a_1 > a_2 > a_4$	$\beta_{fin1}: a_1 \sim a_3 > a_2 > a_4$
Cu (II)	$a_1 > a_3 > a_2 > a_4$	$\beta_{fin2}: a_1 > a_3 > a_2 > a_4$
Fe (II)	$a_1 > a_2 > a_4 > a_3$	$\beta_{fin3}: a_1 > a_2 > a_4 > a_3$
Co (II)	$a_2 > a_1 > a_3 > a_4$ $a_2 > a_1 > a_4 > a_3$	$\beta_{fin4}: a_2 > a_1 > a_3 \sim a_4$
Cr (VI)	$a_1 > a_2 > a_4 > a_3$	$\beta_{fin5}: a_1 > a_2 > a_4 > a_3$
Ni (II)	$a_2 > a_1 > a_3 > a_4$	$\beta_{fin6}: a_2 > a_1 > a_3 > a_4$
$\Sigma_{Me}$	$a_1 > a_3 > a_4 > a_2$	$\beta_{fin7}: a_1 > a_3 > a_4 > a_2$

### Заключение

Предложенный метод выбора стандартной системы представления цвета на основе агрегирования предпочтений позволил рекомендовать для проведения цифрового цветометрического анализа на основе полиметакрилатных оптодов цветовую модель RGB, обеспечивающую наилучшие возможные значения характеристик градуировочных зависимостей получаемых аналитических сигналов для заданного набора аналитов.

По современной классификации методов искусственного интеллекта агрегирование предпочтений относится к машинному обучению без учителя.

Предложенный подход наглядно демонстрирует положительный эффект от применения методов искусственного интеллекта и может быть рекомендован для использования во всех видах цветометрического анализа состава веществ с применением химических сенсоров произвольного типа, а также в цветометрических технологиях различного назначения, таких как, например, распознавание человеческих лиц, дефектов объектов, болезней растений и т. п.

*Работа поддержана Российским научным фондом, проект № 18-19-00203.*

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Colorimetric determination of food colourants using solid phase extraction into polymethacrylate matrix / A.A. Dudkina, T.N. Volgina, N.V. Saranchina, N.A. Gavrilenko, M.A. Gavrilenko // Talanta. – 2019. – V. 202. – P. 186–189.
2. Polymethacrylate sensors for rapid digital colorimetric analysis of toxicants in natural and anthropogenic objects / S.V. Muravyov, N.A. Gavrilenko, N.V. Saranchina, P.F. Baranov // IEEE Sensors Journal. – 2019. – V. 19. – P. 4765–4772.
3. Colorimetric sensor arrays for the detection and identification of chemical weapons and explosives / M.J. Kangas, R.M. Burks, J. Atwater, R.M. Lukowicz, P. Williams, A.E. Holmes // Critical reviews in analytical chemistry. – 2017. – V. 47. – P. 138–153.
4. Feasibility of digital image colorimetry-application for water calcium hardness determination / A. Lopez-Moliner, V.T. Cubero, R.D. Irigoyen, D.S. Piazuolo // Talanta. – 2013. – V. 103. – P. 236–244.
5. Wongniramaikul W., Limsakul W., Choodum A. A biodegradable colorimetric film for rapid low-cost field determination of formaldehyde contamination by digital image colorimetry // Food Chemistry. – 2018. – V. 249. – P. 154–161.
6. Colorimetric array freshness indicator and digital color processing for monitoring the freshness of packaged chicken breast / K. Lee, H. Park, S. Baek, S. Han, J. Seo // Food Packaging and Shelf Life. – 2019. – V. 22. – P. 100408.
7. Dual fluorometric and colorimetric sensor based on quenching effect of copper (II) sulfate on the copper nanocluster for



- determination of sulfide ion in water samples / Z. Shojaeifard, B. Hemmateenejad, M. Shamsipur, R. Ahmadi // *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*. – 2019. – V. 384. – P. 112030.
8. Progress and challenges in the detection of residual pesticides using nanotechnology based colorimetric techniques / R. Singh, N. Kumar, R. Mehra, H. Kumar, V.P. Singh // *Trends in Environmental Analytical Chemistry*. – 2020. – V. 2. – P. e00086.
  9. Dispersive liquid-liquid microextraction coupled with digital image colorimetric analysis for detection of total iron in water and food samples / B. Peng, G. Chen, K. Li, M. Zhou, S. Zhao // *Food Chemistry*. – 2017. – V. 230. – P. 667–672.
  10. Monogarova O.V., Chaplenko A.A., Oskolok K.V. Multisensory digital colorimetry to identify and determination of active substances in drugs // *Sensors and Actuators B: Chemical Volume*. – 2019. – V. 299. – P. 126909.
  11. Determination of ascorbic acid in natural fruit juices using digital image colorimetry / I.S.A. Porto, J.H. Santos Neto, L.O. dos Santos, A.A. Gomes, S.L.C. Ferreira // *Microchemical Journal*. – 2019. – V. 14. – P. 104031.
  12. A digital image-based flow-batch analyzer for determining Al(III) and Cr(VI) in water / S.I.E. Andrade, M.B. Lima, I.S. Barreto, W.S. Lyra, L.F. Almeida, M.C.U. Araujo, E.C. Silva // *Microchemical Journal*. – 2013. – V. 109. – P. 106–111.
  13. Portable device for the detection of colorimetric assays / G.S. Luka, E. Nowak, J. Kawchuk, M. Hoorfar, H. Najjaran // *Royal Society Open Science*. – 2017. – V. 4. – P. 171025.
  14. Bioactive microfluidic paper device for pesticide determination in waters / M.D. Fernández-Ramos, A.L. Ogunneye, N.A.A. Babarinde, M.M. Erenas, L.F. Capitán-Vallvey // *Talanta*. – 2020. – V. 218. – P. 121108.
  15. Sharma G. *Digital Color Imaging Handbook*. – Boca Raton, CRC Press, 2003. – 764 p.
  16. Acquiring multiple signals along with the reaction time: improving recognition capability of a multidimensional colorimetric sensor array for sensitive protein detection / J. Yang, L. He, Y. Lu, X. Gao, F. Wang, W. Jing, Y. Liu // *Analyst*. – 2017. – V. 142 (14). – P. 2663–2669.
  17. Lee Y.K., Powers J.M. Comparison of the metrics between the CIELAB and the DIN99 uniform color spaces using dental resin composite material values // *COLOR research and application*. – 2006. – V. 31. – P. 168–173.
  18. Муравьев С.В., Борисова М.А. Агрегирование предпочтений в интерпретации данных энергетических обследований // *Известия Томского политехнического университета. Инжиниринг георесурсов*. – 2018. – Т. 329. – № 12. – С. 155–163.
  19. Muravyov S.V. Ordinal measurement, preference aggregation and interlaboratory comparisons // *Measurement*. – 2013. – V. 46. – P. 2927–2935.
  20. Muravyov S.V., Baranov P.F., Emelyanova E.Y. How to transform all multiple solutions of the Kemeny Ranking Problem into a single solution // *Journal of Physics: Conference Series*. – 2019. – V. 1379 (1). – P. 012053.
  21. Pascal D. *A Review of RGB color spaces*. – Montreal: The Babel Color Company, 2003. – 35 p.

Поступила 16.06.2020 г.

#### Информация об авторах

**Муравьев С.В.**, доктор технических наук, профессор отделения автоматизации и робототехники Инженерной школы информационных технологий и робототехники Национального исследовательского Томского политехнического университета.

**Спиридонова А.С.**, кандидат технических наук, старший преподаватель отделения автоматизации и робототехники Инженерной школы информационных технологий и робототехники Национального исследовательского Томского политехнического университета.

**Емельянова Е.Ю.**, старший преподаватель отделения автоматизации и робототехники Инженерной школы информационных технологий и робототехники Национального исследовательского Томского политехнического университета.

UDC 004.9+543.08+543.422.7

## PREFERENCE AGGREGATION WHEN CHOOSING A COLOR SPACE FOR DIGITAL COLORIMETRIC ANALYSIS OF SUBSTANCES COMPOSITION

Sergey V. Muravyov<sup>1</sup>,  
muravyov@tpu.ru

Anna S. Spiridonova<sup>1</sup>,  
spiridonova@tpu.ru

Ekaterina Yu. Emelyanova<sup>1</sup>,  
zeta@tpu.ru

<sup>1</sup> National Research Tomsk Polytechnic University,  
30, Lenin avenue, Tomsk, 634050, Russia.

**The relevance** of the research is caused by the fact that when quantifying the composition of substances, digital colorimetric analysis is becoming increasingly popular. This is an optical analytical method in which the primary measuring transducer is an optode obtained from reagents immobilized into a solid-state matrix. When interacting with determined component in the sample, the optode changes its color; the optode's color intensity is proportional to the determined component amount. The analytical signal obtained in this way must be digitized and presented in one of the existing color spaces to form the value of the measured value. In the available literature there are no reasonable recommendations that would allow a systematic selection of the most suitable color space (model) for specific requirements.

**The main aim** of the research is to contribute to solving the problem of choosing such a color model for organizing the digital colorimetric analysis, which for a given set of analytes provides the best values of the characteristics of the calibration dependences of analytical signals constructed for them.

**Objects** of the research are the standard color models RGB, HSL, XYZ and L\*a\*b\* commonly used in the digital description of color. Heavy metals were used as determinants: silver, copper, iron, cobalt, chromium, nickel and the sum of heavy metals.

**Methods.** The preference aggregation method is proposed and experimentally justified for choosing a standard space (model) of color representation that provides carrying out the digital colorimetric analysis with the best values of the characteristics set of the calibration dependencies for the obtained analytical signals.

**Results.** The proposed method allows choosing a standard color model that is best suited for conducting the digital colorimetric analysis of substances composition. This, in its turn, enhances the reliability of the digital colorimetric analysis.

### Key words:

Digital color analysis, preference aggregation, standard color model, calibration dependency, colorimetric scale.

The research was supported by the Russian Science Foundation, project no. 18-19-00203.

### REFERENCES

- Dudkina A.A., Volgina T.N., Saranchina N.V., Gavrilenko N.A., Gavrilenko M.A. Colorimetric determination of food colourants using solid phase extraction into polymethacrylate matrix. *Talanta*, 2019, vol. 202, pp. 186–189.
- Muravyov S.V., Gavrilenko N.A., Saranchina N.V., Baranov P.F. Polymethacrylate sensors for rapid digital colorimetric analysis of toxicants in natural and anthropogenic objects. *IEEE Sensors Journal*, 2019, vol. 19, pp. 4765–4772.
- Kangas M.J., Burks R.M., Atwater J., Lukowicz R.M., Williams P., Holmes A.E. Colorimetric sensor arrays for the detection and identification of chemical weapons and explosives. *Critical reviews in analytical chemistry*, 2017, vol. 47, pp. 138–153.
- Lopez-Molinero A., Cubero V.T., Irigoyen R.D., Piazzuelo D.S. Feasibility of digital image colorimetry-application for water calcium hardness determination. *Talanta*, 2013, vol. 103, pp. 236–244.
- Wongniramaikul W., Limsakul W., Choodum A. A biodegradable colorimetric film for rapid low-cost field determination of formaldehyde contamination by digital image colorimetry. *Food Chemistry*, 2018, vol. 249, pp. 154–161.
- Lee K., Park H., Baek S., Han S., Seo J. Colorimetric array freshness indicator and digital color processing for monitoring the freshness of packaged chicken breast. *Food Packaging and Shelf Life*, 2019, vol. 22, 100408.
- Shojaeifard Z., Hemmateenejad B., Shamsipur M., Ahmadi R. Dual fluorometric and colorimetric sensor based on quenching effect of copper (II) sulfate on the copper nanocluster for determination of sulfide ion in water samples. *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, 2019, vol. 384, 112030.
- Singh R., Kumar N., Mehra R., Kumar H., Singh V.P. Progress and challenges in the detection of residual pesticides using nanotechnology based colorimetric techniques. *Trends in Environmental Analytical Chemistry*, 2020, vol. 2, e00086.
- Peng B., Chen G., Li K., Zhou M., Zhao S. Dispersive liquid-liquid microextraction coupled with digital image colorimetric analysis for detection of total iron in water and food samples. *Food Chemistry*, 2017, vol. 230, pp. 667–672.
- Monogarova O.V., Chaplenko A.A., Oskolok K.V. Multisensory digital colorimetry to identify and determination of active substances in drugs. *Sensors and Actuators B: Chemical Volume*, 2019, vol. 299, 126909.
- Porto I.S.A., Santos Neto J.H., dos Santos L.O., Gomes A.A., Ferreira S.L.C. Determination of ascorbic acid in natural fruit juices using digital image colorimetry. *Microchemical Journal*, 2019, vol. 14, 104031.
- Andrade S.I.E., Lima M.B., Barreto I.S., Lyra W.S., Almeida L.F., Araujo M.C.U., Silva E.C. A digital image-based flow-batch analyzer for determining Al(III) and Cr(VI) in water. *Microchemical Journal*, 2013, vol. 109, pp. 106–111.
- Luka G.S., Nowak E., Kawchuk J., Hoorfar M., Najjaran H. Portable device for the detection of colorimetric assays. *Royal Society Open Science*, 2017, vol. 4, 171025.
- Fernández-Ramos M.D., Ogunneye A.L., Babarinde N.A.A., Erenas M.M., Capitán-Vallvey L.F. Bioactive microfluidic paper device for pesticide determination in waters. *Talanta*, 2020, vol. 218, 121108.

15. Sharma G. *Digital Color Imaging Handbook*. Boca Raton, CRC Press, 2003. 764 p.
16. Yang J., He L., Lu Y., Gao X., Wang F., Jing W., Liu Y. Acquiring multiple signals along with the reaction time: improving recognition capability of a multidimensional colorimetric sensor array for sensitive protein detection. *Analyst*, 2017, vol. 142, no. 14, pp. 2663–2669.
17. Lee Y.K., Powers J.M. Comparison of the metrics between the CIELAB and the DIN99 uniform color spaces using dental resin composite material values. *COLOR research and application*, 2006, vol. 31, pp. 168–173.
18. Muravyov S.V., Borisova M.A. Preference aggregation in interpretation of energy survey data. *Bulletin of the Tomsk Polytechnic University. Geo Assets Engineering*, 2018, vol. 329, no. 12, pp. 155–163. In Rus.
19. Muravyov S.V. Ordinal measurement, preference aggregation and interlaboratory comparisons. *Measurement*, 2013, vol. 46, pp. 2927–2935.
20. Muravyov S.V., Baranov P.F., Emelyanova E.Y. How to transform all multiple solutions of the Kemeny Ranking Problem into a single solution. *Journal of Physics: Conference Series*, 2019, vol. 1379, no. 1, 012053.
21. Pascal D. *A Review of RGB Color Spaces*. Montreal, The Babel Color Company, 2003. 35 p.

Received: 16 June 2020.

#### Information about the authors

**Sergey V. Muravyov**, Dr. Sc., professor, National Research Tomsk Polytechnic University.  
**Anna S. Spiridonova**, Cand. Sc., senior lecturer, National Research Tomsk Polytechnic University.  
**Ekaterina Y. Emelyanova**, senior lecturer, National Research Tomsk Polytechnic University.