

# פיתוח ושכלול שיטות אופטיות לגילוי רעלים ומזהמים במים

דו"ח סיכום שנה ב

## חוקרים בפרויקט:

פרופ' אברהם פרולה- אב"ג (כימיה)  
ד"ר יהושע קליסקי- קמ"ג (כימיה)  
נונה פפיאשוילי-אב"ג (סטודנטית למסטר בכימיה)  
ד"ר ארקדי גרשאניק-אב"ג (פיסיקה)  
ד"ר נטליה סטארשניקוב אב"ג (כימיה פיסיקלית)

### קבלני משנה

ד"ר מארק שלמה-מכללת סמי שמעון (הנדסת תוכנה)  
דניאל חנקין- מכללת סמי שמעון (הנדסת תוכנה)  
גיא שילון- מכללת סמי שמעון (הנדסת תוכנה)  
אורנה קרייף- מכללת סמי שמעון (הנדסת תוכנה) שמעון (הנדסת תוכנה)

## תקציר:

מטרות הפרויקט כפי שהוגדרו בהצעת המחקר לנציבות המים הן:

- גילוי וזיהוי איכותי וכמותי של מזהמים אורגנים, שיירי תרופות וסמים במאגרים ובמקורות מים בזמן אמת, ברגישות ובדיוק מרביים
- פיתוח תכנה ייעודית להפעלת מכשור אנליטי לשם זיהוי, גילוי ואפיון רציף של רעלים ומזהמים במקורות מים
- פיתוח מכשור ידידותי למשתמש, קומפקטי, אמין ונייד-מותאם לעבודת שדה
- אפשרות לתגובת משתמש אינטראקטיבית מהירה

לצורך הגשמת היעדים בצענו מס' פעילויות מדעיות, הנדסיות וטכנולוגיות אשר - כך אנו סבורים - יאפשרו לנו לעמוד ביעדים במסגרת התקציב והלו"ז שנקבעו ע"י הוועדה המקצועית מטעם נציבות המים.

בנוסף להישגים אשר פורטו בדו"ח הקודם בחצי השנה האחרונה הוספנו לספריית נתונים 8 חומרים רעילים העשויים להיות מזהמים במים (ניספח 1,2). כעת קטלוג הנתונים שבנינו מורכב מ- 35 חומרים כימיים רעילים. הקטלוג נבנה ע"י אפיון ספקטראלי של חומרים אלו, מדידת ספקטרום בליעה ופליטה אופטית כדי לאפיין את החומרים ובניית גרפי כיוול מתאימים. כל חומר כימי מאופיין על-ידי ספקטרום עירור/ פליטה דו או תלת מימדי הנותן "טביעת אצבעות" חד-חד ערכית של החומר הנבדק.

התחלנו לבדוק את ההשפעה של מקורות מים שונים על זיהוי ואפיון החומרים הנמצאים בספריית נתונים. לשם כך מדדנו ספקטרה של מים ממקורות שונים: מים מזוקקים מתחנת דלק, מים מזוקקים ממחליף יונים מעבדתי, מי ברז מעבדתי, מים מזוקקים ממחליף יונים בקמ"ג ומים ממתקן ביתי (אוסמוזה הפוכה) (ניספח 3).

פעילותנו העיקרית בחצי השנה, בנוסף להרחבת ספריית נתונים, היא שדרוג המערכת הניסיונית הקיימת- מערכת Fluo Imager 50C. כפועל יוצא של הגדרת המשימה היה צורך בשדרוג, ולמעשה כתיבה מחדש של תכנת הפעלת המכשיר ותכנת זיהוי החומרים הכימיים הספציפיים שעשויים לשמש כרעלים במים. המטרה שהוגדרה בשלב זה היא לשדרג את מערכת החומרה כך שנוכל לשלוט בכל רכיבי החומרה, ובכך גם לאפשר שדרוג כל אחד מהרכיבים, שלא התאפשר בגרסה המסחרית המובנת במכשיר. לשם כך נכתבה תוכנה חדשה השולטת על פעולת המכשיר. התוכנה נכתבה בשפת C כך שכיום קיימת אפשרות לטפל בכל אחד מרכיבי התוכנה.

כמו כן במהלך התקופה נמצא כי יש לבצע שדרוג rfactoring לתוכנה (שדרוג התכונות הלא פונקציונאליות של המערכת במטרה לשפר יעילות). לשם כך נכתבה גרסה חדשה מבוססת שפת JAVA. שדרוג זה מאפשר התאמת המערכת למערכת הפעלה LINUX, מערכת הפעלה מהירה ויעילה יותר. ואכן בבדיקות המערכת נמצא כי שדרוג זה קיצץ את זמן הבדיקה למעלה מפי 2 דהיינו כיום זמן הבדיקה כעשרות שיניות בעוד שבגרסה הקודמת מבוססת windows זמן החישוב עמד על כמעט 3 דקות. כיום אנחנו בשלב ההוכחה ובדיקת (Testing & Verification) האמינות לגרסה שנייה זו. התהליך התאפשר בזכות העובדה שבמהלך פרויקט זה הוקפד על תהליך ייצור זריז AGILE המבוסס על פיתוח מקצן XP - זהו למעשה תהליך ייצור גמיש 'וקל משקל' Lightweight המתאים עצמו לסביבה באופן מבוקר. הגישה הזריזה איננה מתודולוגיה אחת אלא אוסף של עקרונות כללים המאפשר מתן דגש לתגובה מהירה, יעילה ואיכותית, תוך הקפדה על מעגלי פיתוח קצרים, ופתוחים לשינויים מהירים.

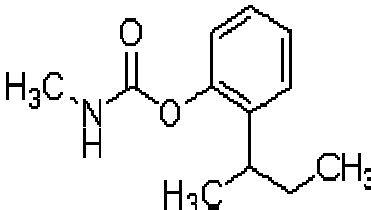
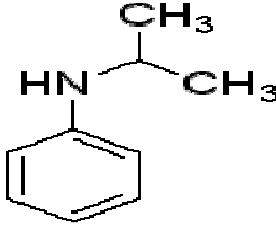
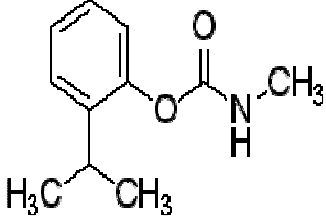
## לצורך כך הוגדרו מספר אבני דרך:

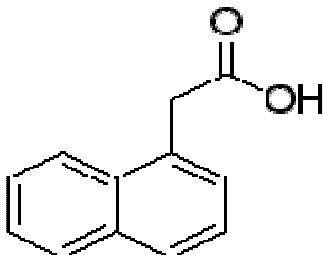
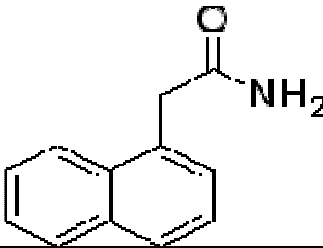
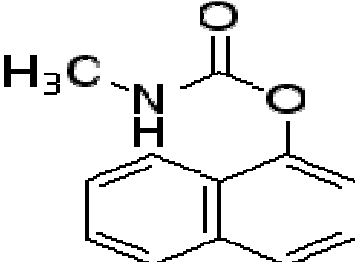
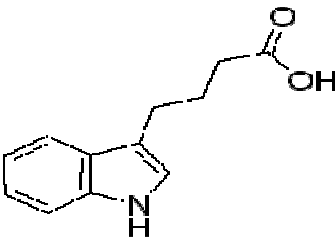
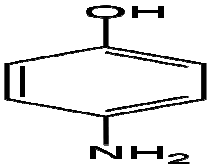
אבן הדרך	הטיפול	הערות/המלצות
שדרוג ובדיקת יציאת התקן Serial COM	המערכת נבדקה נמצאו מספר תקלות. כולם טופלו.	במערכת אב הטיפוס יש לעבור ליציאת USB - בסדר עדיפות משני
זיהוי כל הפונקציות המשובצות (חומרה תוכנה)	כל הפונקציות זוהו נבדקו ותוקנו. הוקפד על כתיבה מודולרית כך שכיום אין תלות ואגריגציה בין פונקציות	נעשתה בדיקה (ע"פ STD מוגדר מראש) של המערכת לאחר הטיפול – כל המבחנים עברו בהצלחה וכיום האב טיפוס עובד ע"פ התוכנה החדשה
שיפור זמן המדידה והרישום	נכתבה תוכנה חדשה מבוססת שפת JAVA למערכת הפעלה LINUX המקצרת משמעותית בלמעלה מ- 2 דקות) את זמן העברה וקבלת הנתונים	נעשתה בדיקה (ע"פ STD מוגדר מראש) של המערכת המלאה כולל בדיקות גרסיה למערכת הפונקציות המשובצות – רוב המבחנים עברו בהצלחה
קידוד ועדכון קבצים בתהליך המדידה	נבחן תהליך הרישום וקידוד המדידות	נכתב מודול עצמאי לאיסוף תוצאות ונתונים לתוך בסיס נתונים ייעודי (IDA Database) המאפשר שמירת נתונים במרחב הזיכרון של התוכנית בזמן ריצתה. – המודול נבדק ונמצא תקין טרם בוצעה בדיקת אינטגרציה. בוצע "ניקוי" המערכת מהתהליך הלא תקין שבוצע. כמו כן נכתב מסמך STD מפורט לתהליך ובוצע תהליך בדיקה ואימות מוסדר

## היעדים לשנת העבודה הבאה הם:

- הרחבת בסיס הנתונים לחומרי רעל נוספים, בעיקר כאלה המשמשים בחקלאות ובתעשיות פרמצבטיות.
- הרחבת בסיס הנתונים של כל החומרים שנבחנו במי ברז למקורות מים נוספים ברמות זיהום וערכי pH שונים.
- בחינת הרעלים לגבי פרמטרים ספקטרוסקופיים נוספים כגון זמני חיים, ותלות בטמפ'.
- המשך שיפור תכמת ההפעלה והזיהוי.
- הגדרת מפרט מערכת ושדרוג לאב טיפוס מערכתי משופר.
- התאמת מכשיר המדידה למדידות זרימה.

**ניספח I:**  
**רשימת החומרים החדשים המופיעים**  
**בספריית נתונים**

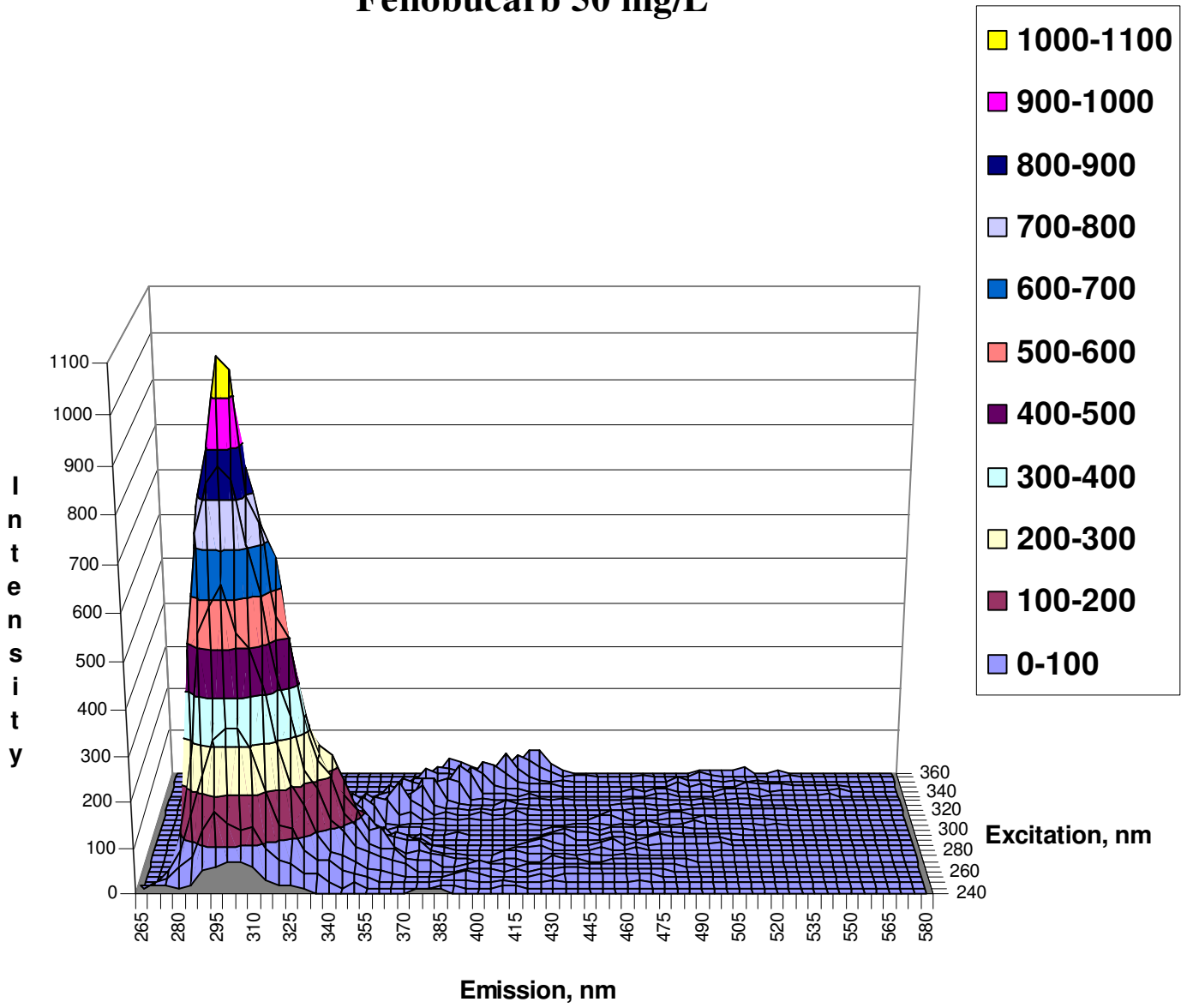
N	Name	Molecular Formula	Molecular Structure	Molar mass g/mol	Absorption/Excitation Wavelength $\pm 5$ (nm)
1	<b>Fenobucarb</b>	$C_{12}H_{17}NO_2$		207.27	265/300
2	<b>N-Isopropylaniline</b>	$C_6H_5NHCH(CH_3)_2$		135.21	290/370
3	<b>Isoprocarb</b>	$C_{11}H_{15}NO_2$		193.24	270/310

4	<b>1-Naphthaleneacetic acid</b>	$C_{12}H_{10}O_2$		186.21	285/345
5	<b>1-Naphthylacetamide</b>	$C_{12}H_{11}NO$		185.22	285/340
6	<b>Carbaryl</b>	$C_{10}H_7OCONHCH_3$		201.22	305/475
7	<b>Indole-3-butyric acid</b>	$C_{12}H_{13}NO_2$		203.24	285/380
8	<b>4-Aminophenol</b>	$C_6H_7NO$		109.13	305/395

## ניספח II:

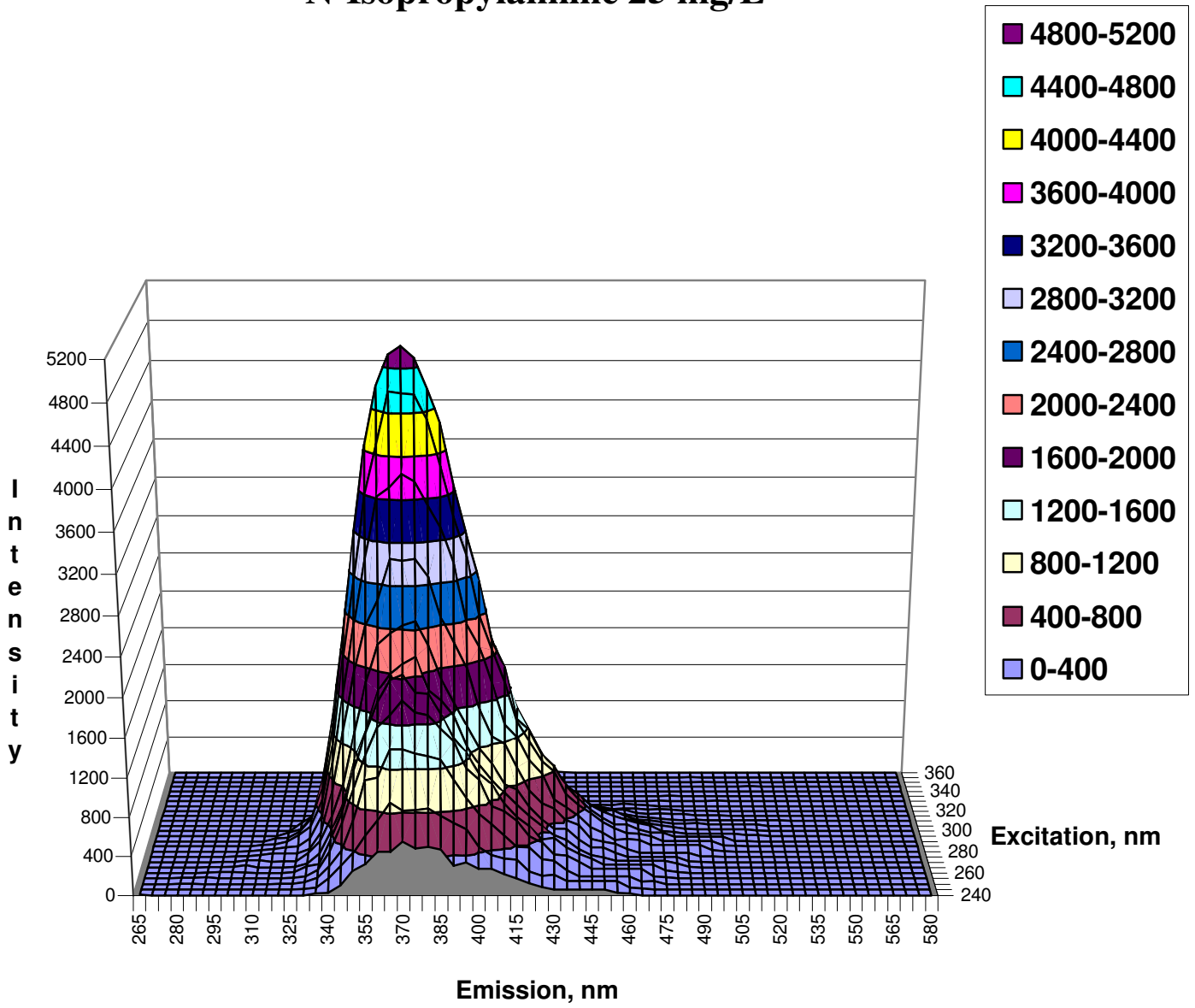
ספקטרה 3D של החומרים המופעים בנספח 1  
אשר התקבלו על ידנו בעזרת מכשיר  
Fluo Imager 50C

# Fenobucarb 50 mg/L

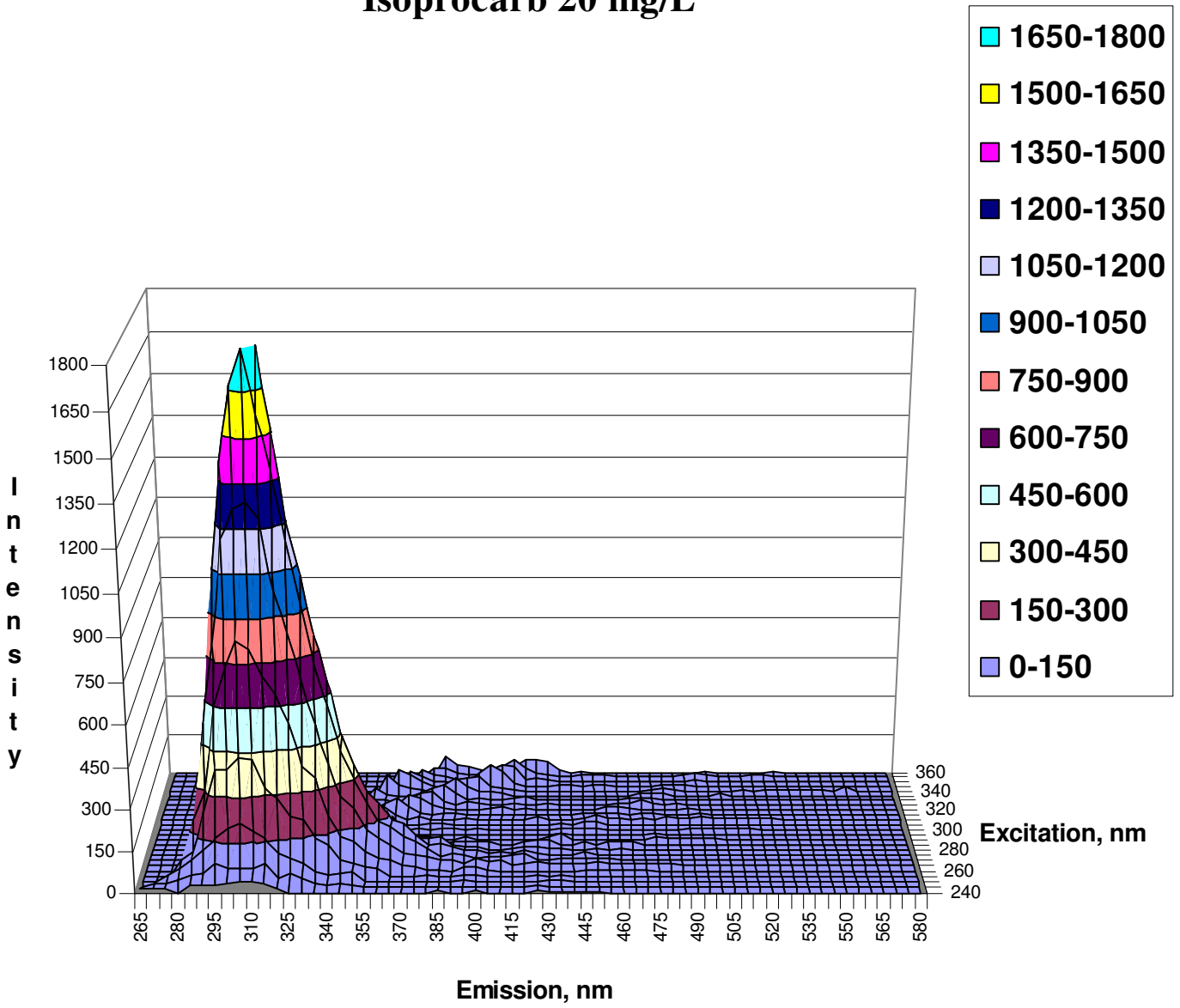




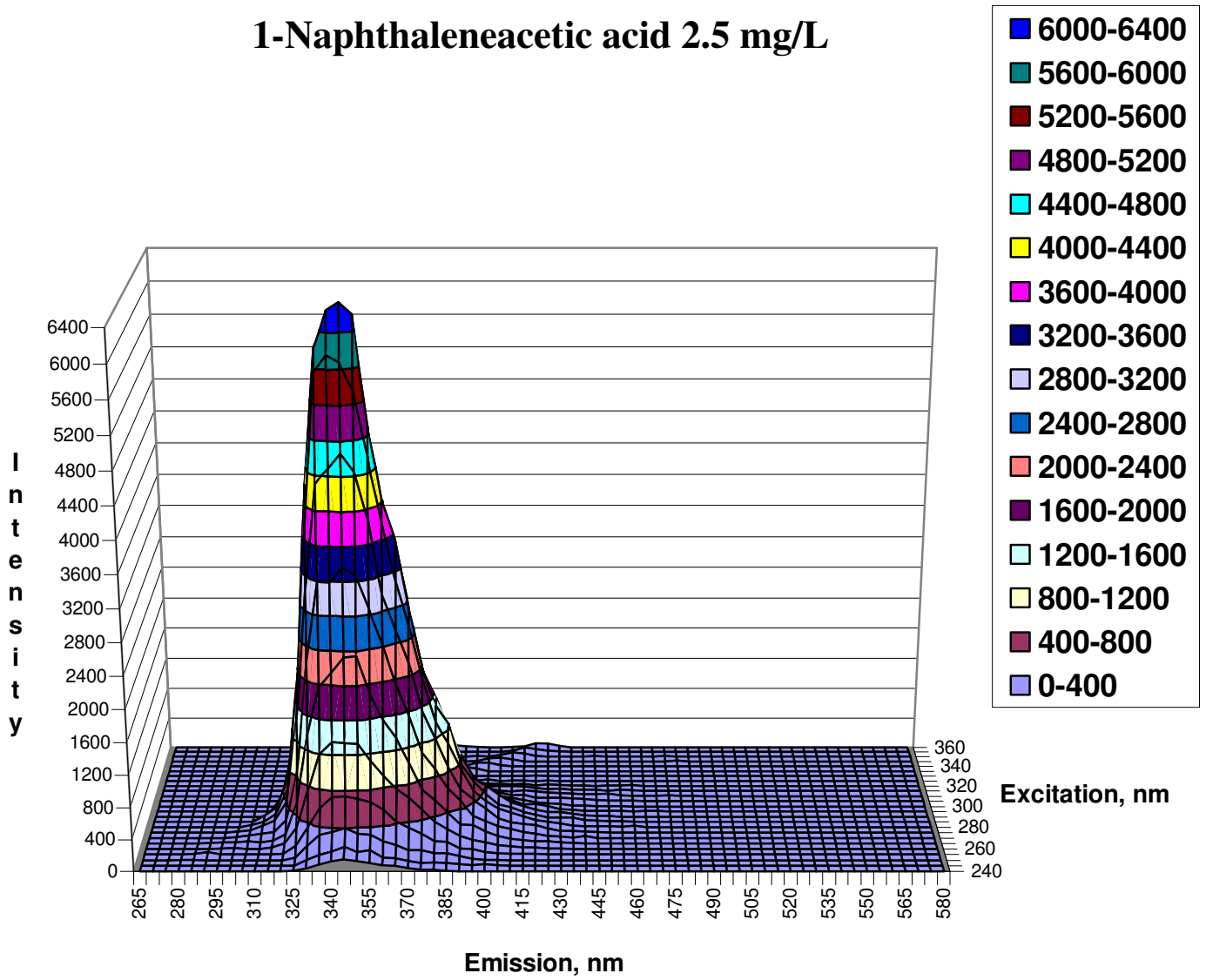
# N-Isopropylaniline 25 mg/L



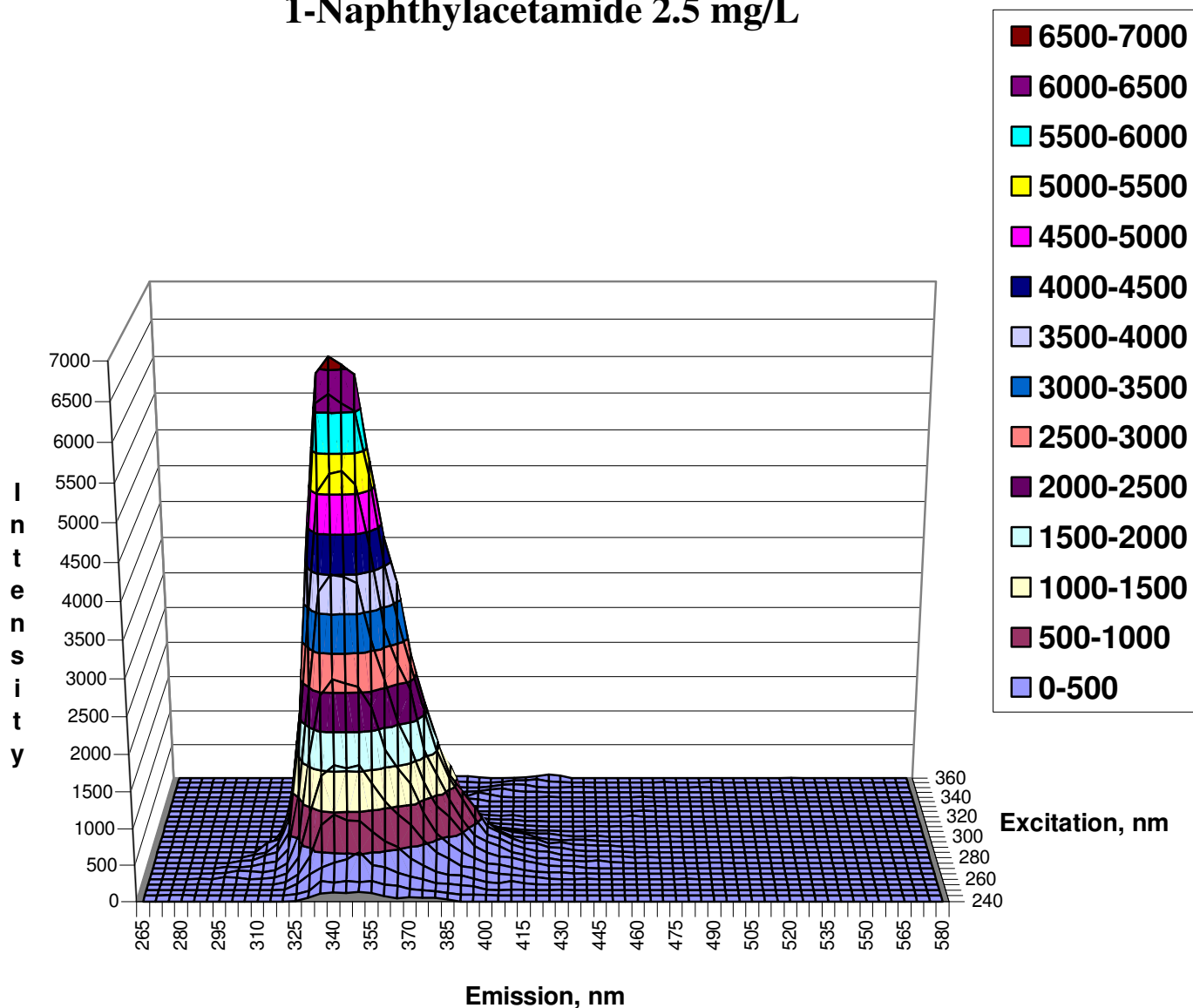
# Isoprocarb 20 mg/L



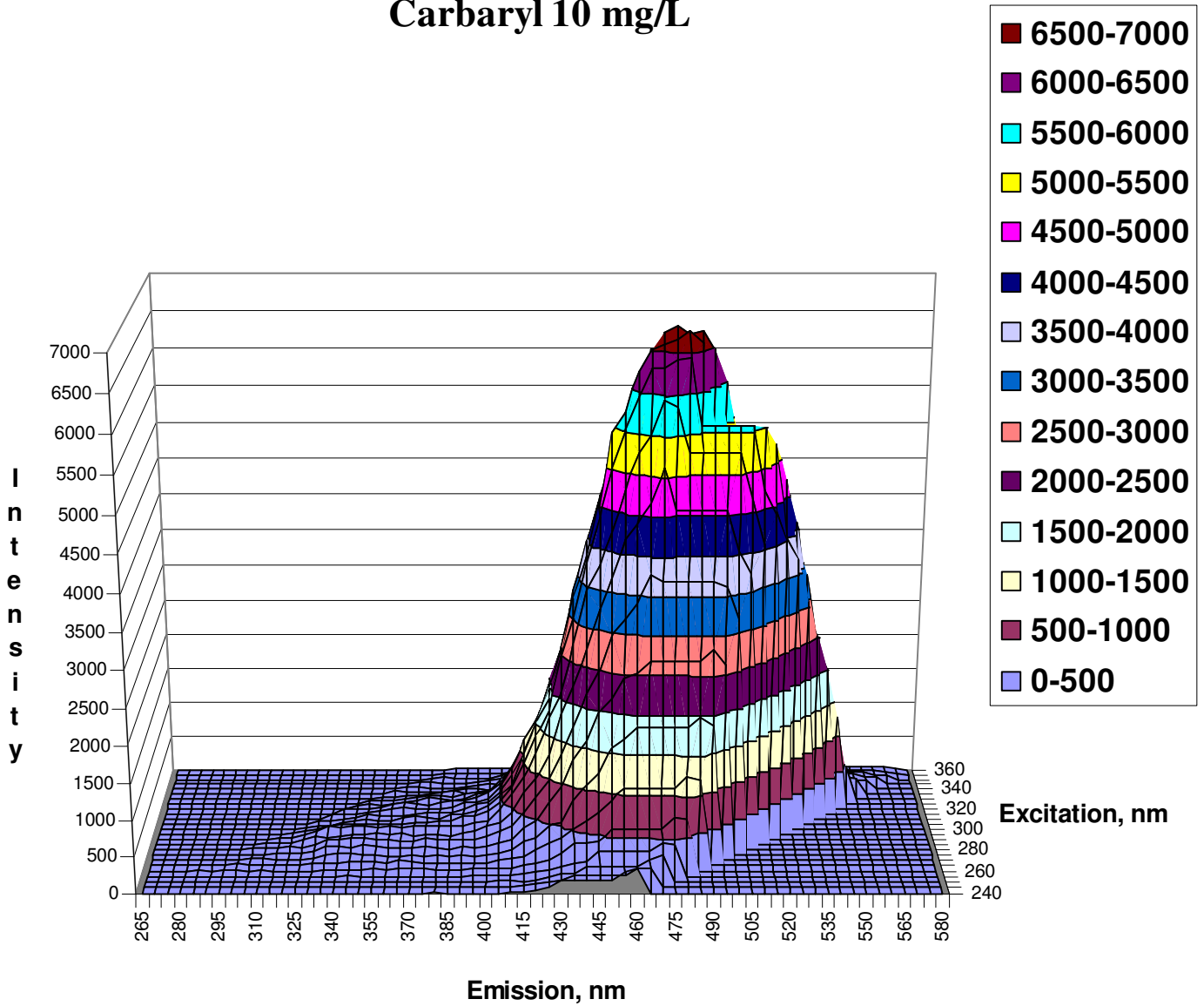
# 1-Naphthaleneacetic acid 2.5 mg/L



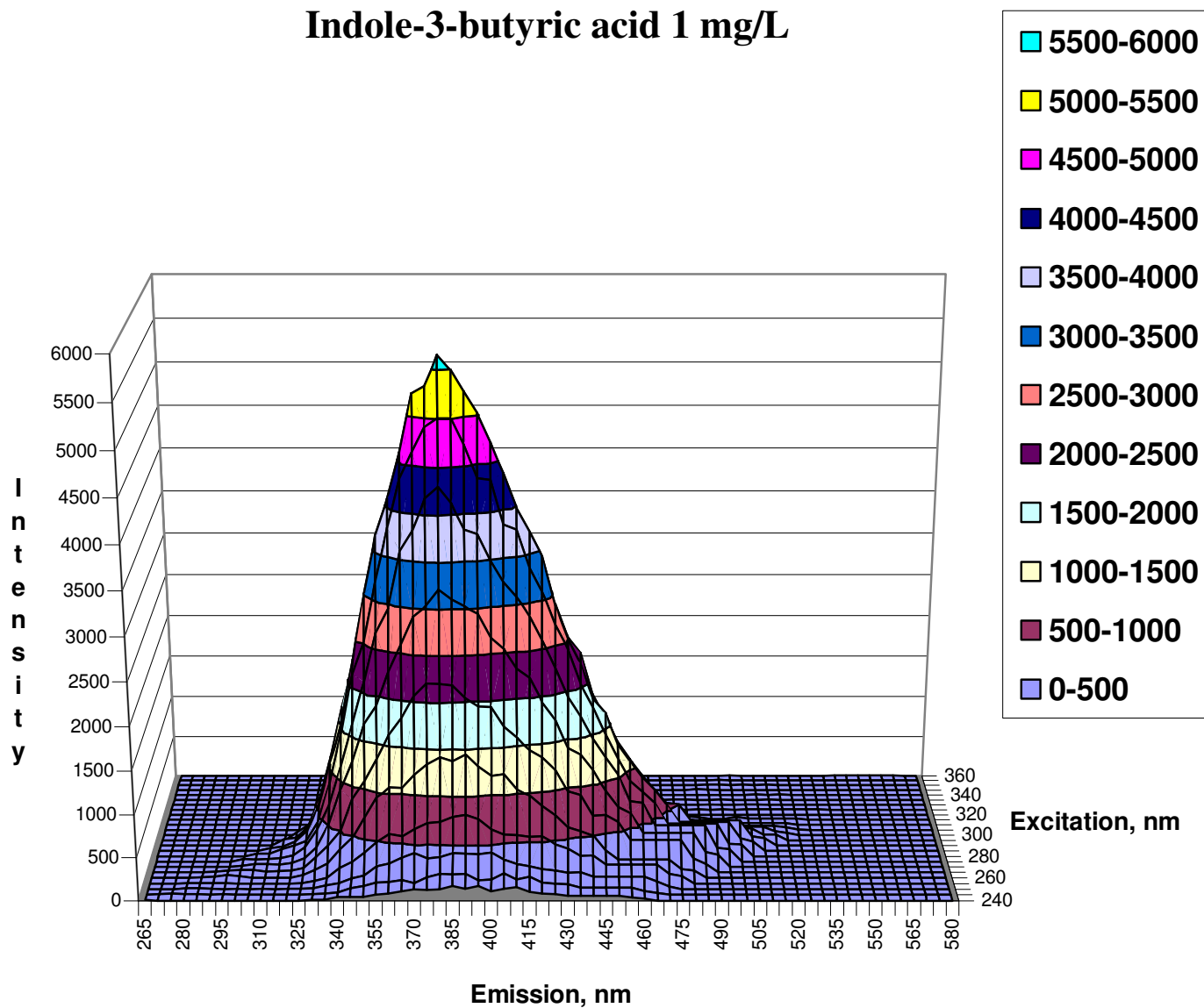
# 1-Naphthylacetamide 2.5 mg/L



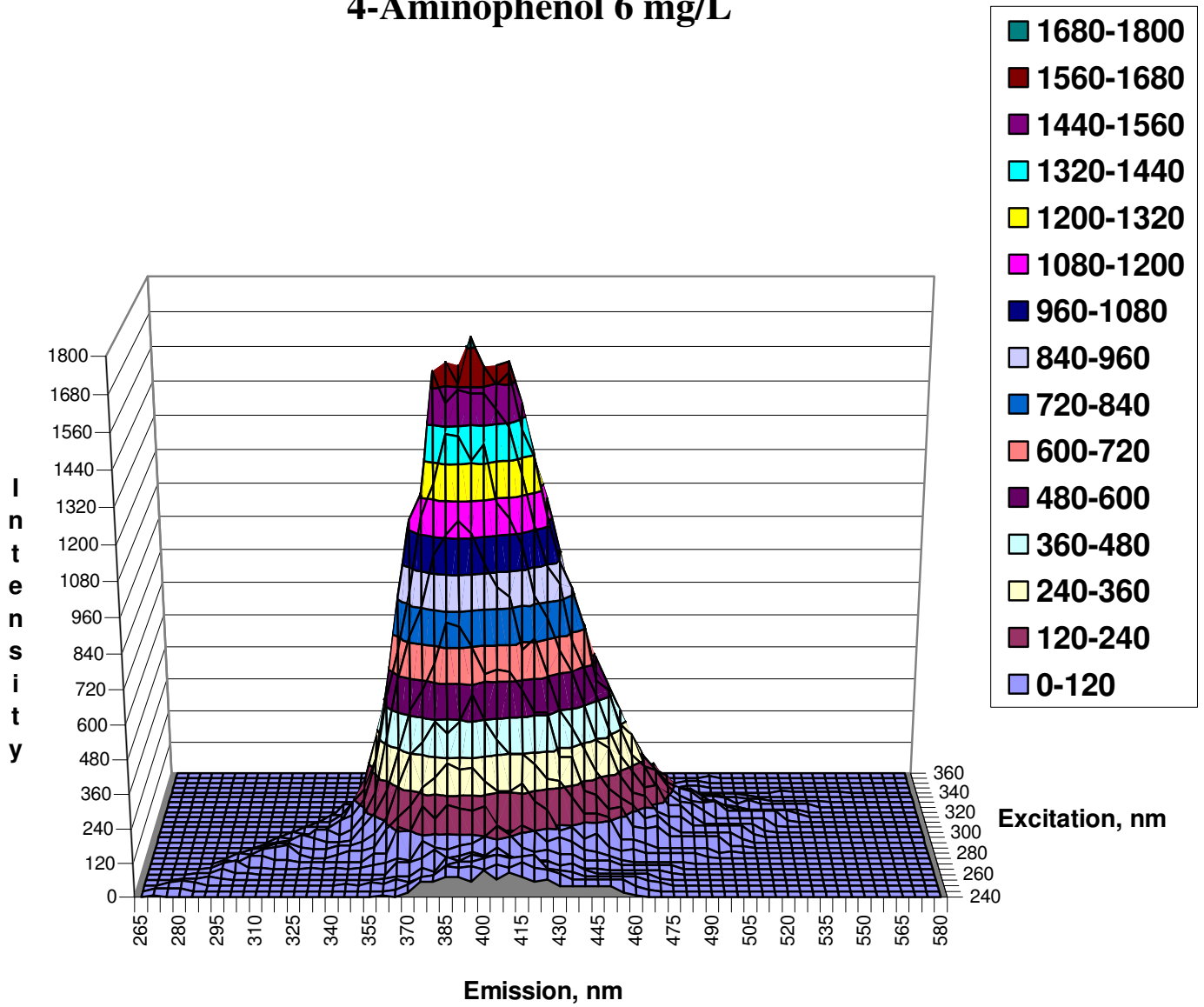
# Carbaryl 10 mg/L



# Indole-3-butyric acid 1 mg/L

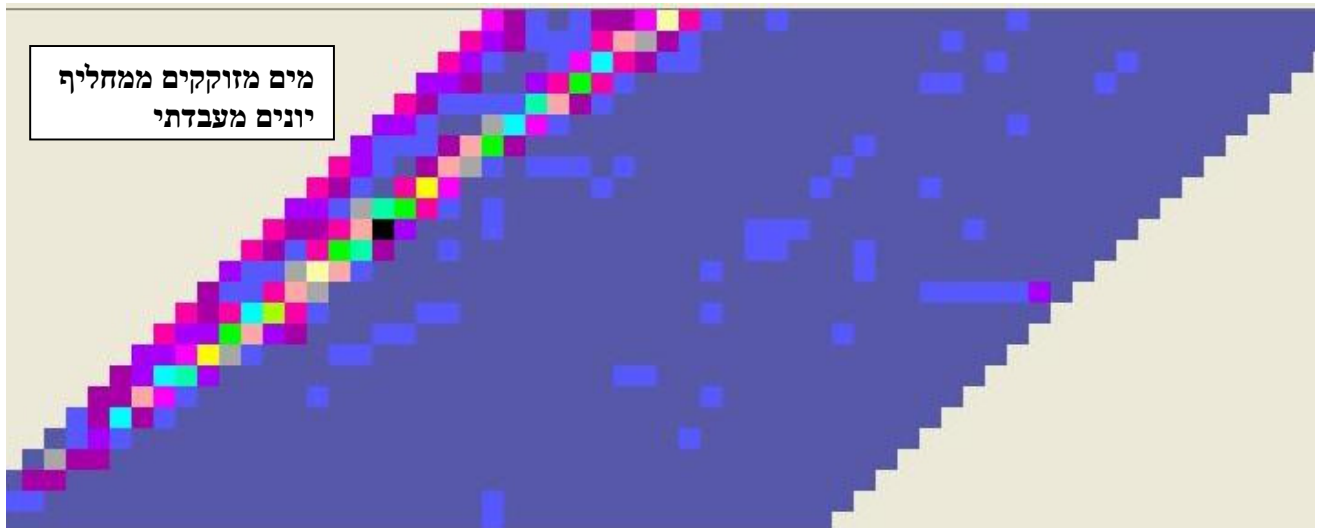
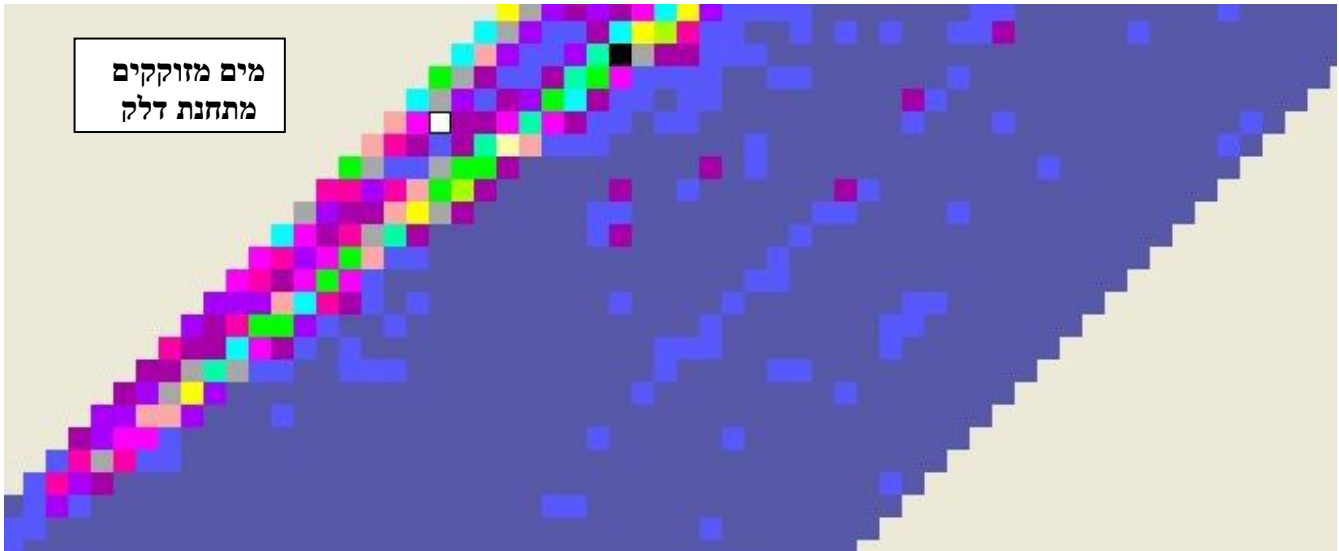


# 4-Aminophenol 6 mg/L



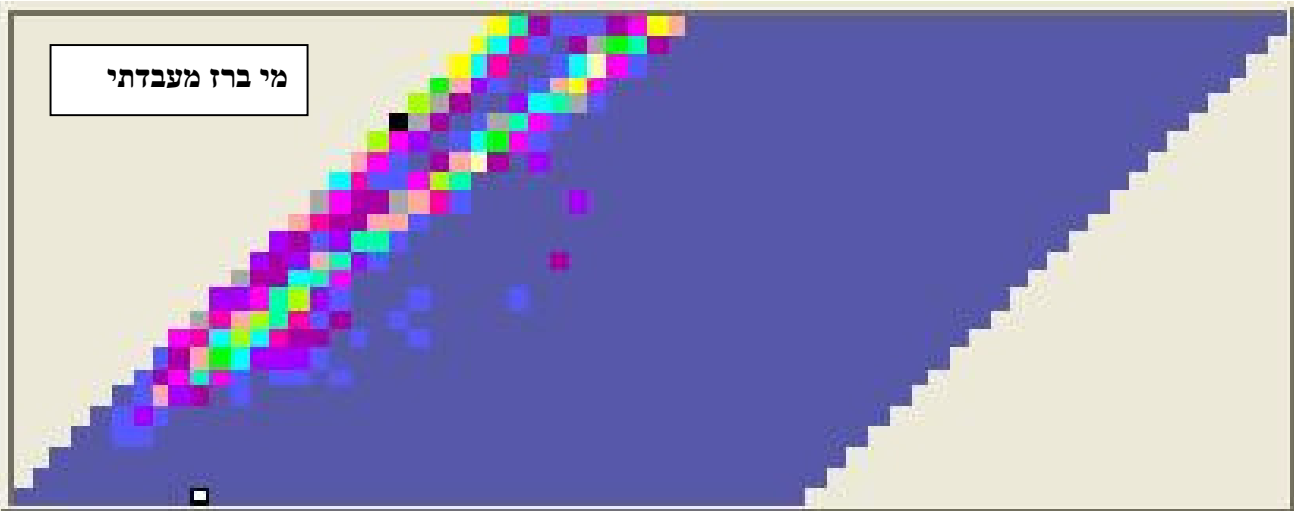
### ניספח III:

## ספקטרה של מים ממקורות שונים

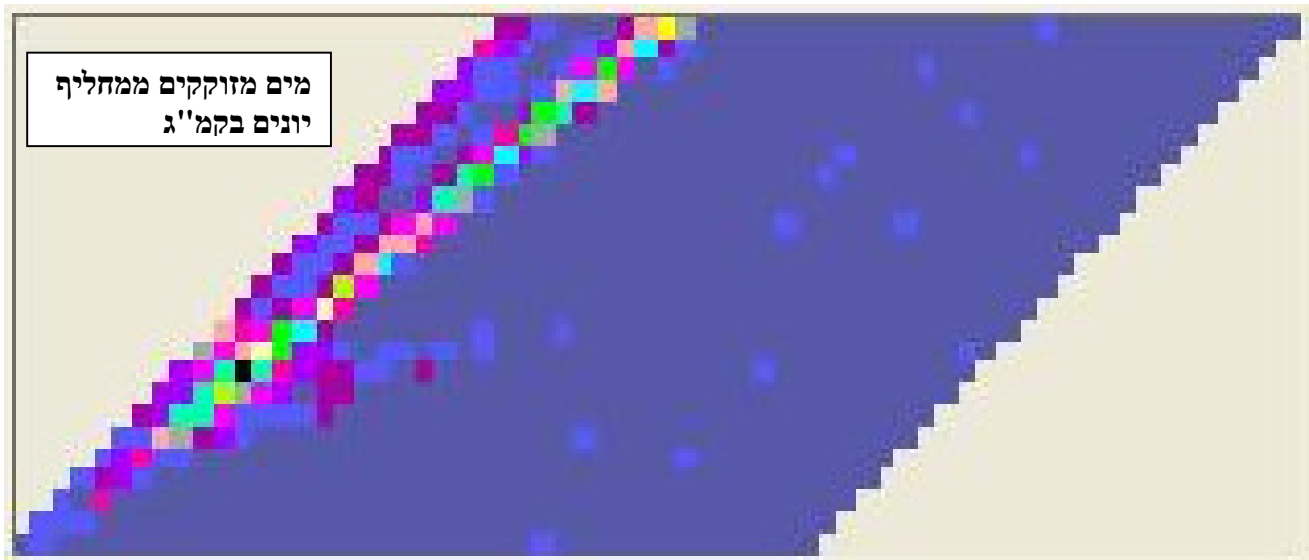




מי ברז מעבדתי



מים מזוקקים ממחליף  
יונים בקמ"ג



מים ממתקן ביתי  
(אוסמוזה הפוכה)

