

УДК 543.544.5

КЛАССИФИКАЦИЯ ХРОМАТОГРАФИЧЕСКИХ КОЛОНОК С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПЕРВИЧНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ И "НЕОБУЧАЕМЫХ" ХЕМОМЕТРИЧЕСКИХ МЕТОДОВ

© 2011 А. Ю. Мельников, А. П. Бойченко, А. Ю. Куликов, М. Н. Галат

Проведена классификация хроматографических колонок с привитыми октадецильными группами в режиме ОФ-ВЭЖХ и в режиме мицеллярной жидкостной хроматографии с использованием данных по удерживанию ряда тестовых веществ, предложенных в работе (Kulikov A. U. Galat M. N. J Sep Sci 2009, 32 1340-1350). Для классификации применяли «необучаемые» хемометрические методы: анализ главных компонент, кластерный анализ, самоорганизующиеся нейронные сети Кохонена. Установлено удовлетворительное согласие при классификации колонок с использованием кластерного анализа и сетей Кохонена. Результаты сопоставлены с результатами классификации колонок с применением хроматографических параметров, рассчитанных по данным удерживания тестовых веществ.

Ключевые слова: хроматография, мицелла, классификация, кластерный анализ, сети Кохонена, анализ главных компонент.

Введение

Высокоэффективная жидкостная хроматография (ВЭЖХ) является гибким методом химического анализа, так как позволяет оптимизировать разделение смесей веществ, изменяя как свойства стационарной, так и подвижной фазы (элюента). Широкое внедрение ВЭЖХ в практику химического анализа привело к появлению большого числа фирм-производителей ВЭЖХ оборудования и расходных материалов, наиболее важным из которых является хроматографическая колонка, заполненная сорбентом [1, 2, 3]. К сожалению, сорбенты, имеющие близкое химическое строение и физические свойства, например диаметр частиц сорбента, диаметр и объем пор, удельную площадь поверхности, однако предлагаемые различными производителями часто не обеспечивают сопоставимых характеристик разделения веществ. Поиск аналогичных сорбентов, т. е. тех, которые обеспечивают одинаковую селективность разделения смеси веществ и могут быть взаимозаменяемыми в методиках анализа конкретных объектов, представляет интерес для проведения большинства рутинных анализов лекарственных средств, продуктов питания, объектов окружающей среды.

Большинство работ по сопоставлению сорбентов проведено в режиме обращено-фазовой ВЭЖХ (ОФ ВЭЖХ), в которой в качестве подвижной фазы используются водно-органические смеси. Однако в настоящее время существует несколько активно развивающихся вариантов ОФ-ВЭЖХ в которых применяют те же стационарные фазы, что и в ОФ-ВЭЖХ, а свойства подвижной фазы значительно отличаются за счет введения таких реагентов как поверхностно-активные вещества (ПАВ), циклодекстрины и т.д. Кроме того, адсорбция ПАВ на стационарной фазе полностью изменяет её хроматографические свойства.

Недавно А.Ю. Куликов и М.Н. Галат провели ряд работ по сопоставлению сорбентов с привитыми октадецильными радикалами в режиме мицеллярной жидкостной хроматографии (МЖХ) с подвижными фазами на основе анионного додецилсульфата натрия [1, 4]. Авторы предложили набор тестовых веществ для оценки гидрофобности, стерической селективности, гидрофобной селективности, емкости водородных связей, ионообменной емкости, хелатообразующей способности сорбентов и фенольной селективности [1, 4]. Полученные параметры использовали для классификации хроматографических колонок при помощи кластерного анализа [1]. Сопоставление результатов классификации колонок в режиме МЖХ и ОФ ВЭЖХ указывает на большую схожесть колонок при использовании мицеллярных элюентов [4].

В работе [5] М. Рамбла-Алегре и др. использовали кластерный анализ для классификации сорбентов с привитым фенильным, октильным, октадецильным, аминным или цианидным группами в режиме МЖХ. В качестве характеристик сорбентов использовались параметры тес-

та Танаки [6]. Интересно, что колонка Kromasil–C8 была сгруппирована в один кластер с монолитной колонкой с октадецильным привитым радикалом Chromolith–C18.

В этой работе мы предложили использовать первичные экспериментальные данные (факторы удерживания) тестовых веществ для классификации хроматографических колонок с привитыми октадецильными группами в режиме МЖХ. Такой подход с одной стороны не позволяет исследовать отдельные свойства сорбентов, а с другой стороны дает возможность выбирать более разнообразные тестовые вещества. Также нами сопоставлены возможности ряда «необучаемых» хемометрических методов при классификации хроматографических колонок в режиме МЖХ и ОФ ВЭЖХ: (i) кластерного анализа; (ii) самоорганизующихся сетей Кохонена и (iii) анализа главных компонент.

Экспериментальная часть

Хроматографические колонки

В этой работе использовались экспериментальные данные, полученные ранее, поэтому для более подробного описания эксперимента можно обратиться к работам [1, 4]. В таблице 1 приведен список хроматографических колонок, которые классифицировались в работе.

Таблица 1. Хроматографические колонки, исследованные в работе

Название	Аббревиатура	Производитель
Hypersil ODS ^{1,2}	Hyp-1	Shandon HPLC (Рункорн, Великобритания)
Hypersil ODS ¹	Hyp-2	Macherey-Nagel (Дюрен, Германия)
Hypersil BDS C18 ¹	HypBDS	Agilent Technologies (Вальдбронн, Германия)
Nucleosil 100-5 C18 ^{1,2}	Nuc	Macherey-Nagel (Дюрен, Германия)
Kromasil C18 ¹	Krom	Supelco (Сент-Луис, США)
Symmetry C18 ¹	Sym-1	Waters (Милфорд, США)
Symmetry C18 ^{1,2}	Sym-2	Waters (Милфорд, США)
Nova Pak C18 ^{1,2}	Npak	Waters (Милфорд, США)
Supelcosil LC18 ^{1,2}	Sup	Supelco (Сент-Луис, США)
Spherisorb ODS ^{1,2}	Sph	Agilent Technologies (Вальдбронн, Германия)
LiChrospher C18e ¹	LiChr-e	Merck (Дармштадт, Германия)
Ultrasphere ODS ^{1,2}	Ultra	Beckman Instruments (Фуллerton, USA)
Separon SGX C18 ¹	Sep	Tessek (Прага, Чехословакия)
Zorbax Eclipse XDB C18 ^{1,2}	Zorb	Agilent Technologies (Вальдбронн, Германия)
LiChrospher C18 ^{1,2}	LiChr	Merck (Дармштадт, Германия)

¹ протестирована в условиях МЖХ

² протестирована в условиях ОФ ВЭЖХ

Подвижные фазы и тестовые вещества

Для тестирования хроматографических колонок в режиме МЖХ использовали подвижную фазу состава 0.075 моль/л додецилсульфата натрия (SDS), 1.5 % (об.) 1-пентанола; pH 6.9 (МПФ 1) и подвижную фазу состава 0.075 моль/л SDS, 1.5 % (об.) 1-пентанола; pH 2.7 (6.5·10⁻³ моль/л CF₃COOH) (МПФ 2).

Для тестирования хроматографических колонок в режиме ОФ ВЭЖХ использовали подвижную фазу состава: метанол – вода 30:70 % (об./об.) (ПФ1), подвижную фазу состава метанол – 0.02 моль/л фосфатный буферный раствор с pH=2.7 20:80 % (об./об.) (ПФ2), подвижную фазу состава метанол – 0.02 моль/л фосфатный буферный раствор с pH=7.6 20:80 % (об./об.) (ПФ3) и подвижную фазу состава метанол – вода 45:55 % (об./об.) (ПФ4).

Компоненты тестовой смеси

Тестовая смесь включала различные классы веществ с разными механизмами удерживания: кофеин, бензиловый спирт, фенол, анилин, толуол, этилпарабен, этилбензоат, пропилбензоат, этилбензол, нафталин, бифенил, антрацен, сорбиновая кислота, бензойная кислота, 2,3-дигидрокси-нафталин, 2,7-дигидрокси-нафталин.

В отличие от работы [1] нами при классификации колонок в условиях МЖХ не использовались факторы удерживания для этилпарабена, этилбензоата, пропилбензоата из-за их отсутствия для следующих хроматографических колонок: Npak, Sup, Zorb, LiChr.

Программы

Для расчетов в работе использовали программы: R 2.12.1 (<http://www.R-project.org/>); Rattle 2.6.8 (<http://rattle.togaware.com/>); Gnumeric 1.10.13. (<http://projects.gnome.org/gnumeric/>). Рисунки оформлялись с использованием LibreOffice 3.3.3 (<http://www.libreoffice.org/>) и GIMP 2.6.11 (<http://www.gimp.org/>).

Теоретическая часть

К необучаемым методам классификации относят методы, в которых разделение объектов на группы проводится без использования результатов обработки объектов с известными свойствами, а также без использования априорной информации о количестве групп объектов после классификации, т.е. разделение на группы проходит каждый раз *de novo*. Для классификации колонок в работе использовали три «необучаемых» метода: анализ главных компонент, иерархический кластерный анализ и самоорганизующиеся нейронные сети Кохонена. При этом анализ главных компонент применяли для разведочного исследования данных, а кластерный анализ и самоорганизующиеся нейронные сети Кохонена позволили провести объективное выделение групп.

Анализ главных компонент (PCA)

Анализ главных компонент основан на аппроксимации многомерных данных с помощью прямых что позволяет существенно снизить размерность данных. При обработке данных с помощью PCA мы получаем набор главных компонент для каждого объекта, причем значимость каждой последующей компоненты меньше чем предыдущей, таким образом оценить соотношения в исходных данных становится намного проще, более подробно в [7, 8].

Иерархический кластерный анализ

Кластерный анализ позволяет ранжировать объекты на группы, где объекты одной группы характеризуются близкими свойствами, а свойства объектов разных групп должны существенно различаться [9]. В данной работе в качестве меры сходства/меры расстояния использовали евклидово расстояние, для формирования кластеров использовали метод одиночной связи.

Нейронные сети Кохонена

Нейронные сети Кохонена — это специфический вид нейронных сетей состоящих из слоя адаптивных линейных сумматоров, в результате работы которых мы получаем «выигравший» нейрон выходной сигнал которого приравнивается 1, все остальные сигналы приравниваются — 0, единичный цикл прохода данных через нейронную сет называется эпохой, при этом входные данные нормируются на некоторые случайные коэффициенты при каждой эпохе. Таким образом получаем разбиение исходных данных на группы количество которых установлено заранее [8,10-12].

Результаты и обсуждение*Предварительная подготовка данных*

Фактор удерживания (k) связан с термодинамической константой распределения вещества между стационарной и подвижной фазой (K) и отношением объемов стационарной (V_s) и подвижной фазы (V_m), которые зависят от геометрических размеров колонки и ее наполнения сорбентом. Поэтому для расчетов использовались значения констант распределения рассчитанные по следующей формуле:

$$K = k \frac{V_m}{V_s} \quad (3)$$

Значения объема стационарной и подвижной фазы оценивали на основании данных о «мертвом» объеме колонки, пропорционального объему подвижной фазы в колонке, и внутреннего объема колонки.

Для использования кластерного анализа и самоорганизующихся нейронных сетей Кохонена данные предварительно нормализовались. Расчет нормализованных значений (a_{norm}) каждой исходной величины a_{xi} проводили по формуле:

$$a_{norm, xi} = (a_{xi} - \mu_x) / SD \quad (4)$$

где μ_x – среднее значение, SD – стандартное отклонение для каждого параметра x .

Разведочный анализ данных методом главных компонент

При использовании PCA важным является определение количества значимых компонент, которые необходимо принять во внимание при исследовании структуры исследуемых данных. На рис. 1 А и 1 Б приведены зависимости доли объясненной дисперсии от номера компоненты для PCA по данным МЖХ и ОФ ВЭЖХ.

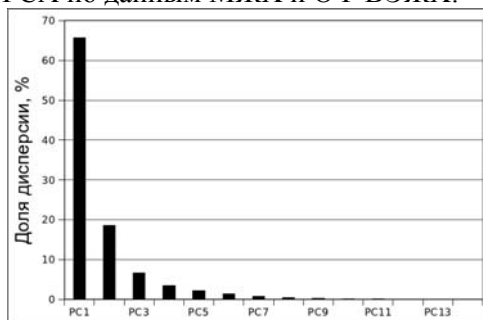


Рис. 1А. Зависимость доли объясненной дисперсии от номера компоненты для PCA по данным МЖХ.

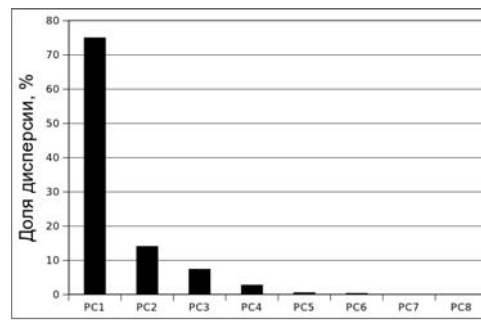


Рис. 1Б. Зависимость доли объясненной дисперсии от номера компоненты для PCA по данным ОФ ВЭЖХ.

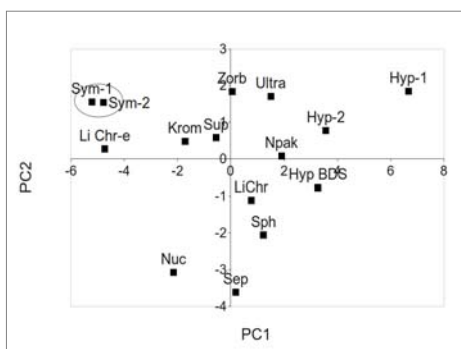


Рис. 2А. Зависимость PC2 от PC1 для классификации в условиях МЖХ.

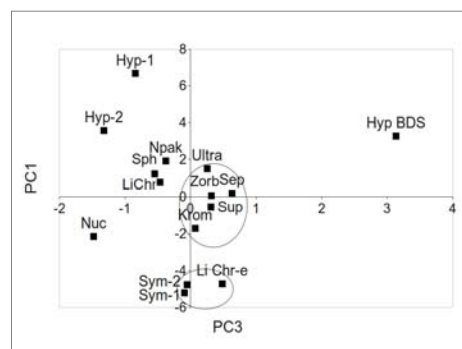


Рис. 2Б. Зависимость PC1 от PC3 для классификации в условиях МЖХ.

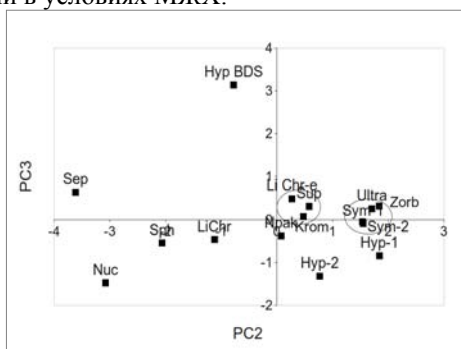


Рис. 2В. Зависимость PC3 от PC2 для классификации в условиях МЖХ.

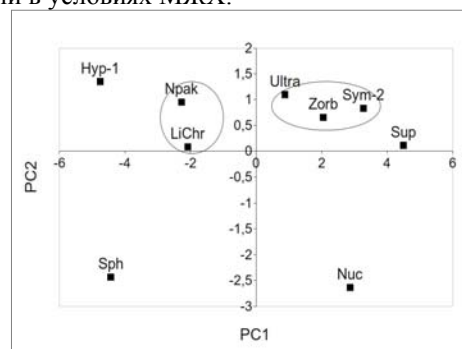


Рис. 2Г. Зависимость PC2 от PC1 для классификации в условиях ОФ ВЭЖХ.

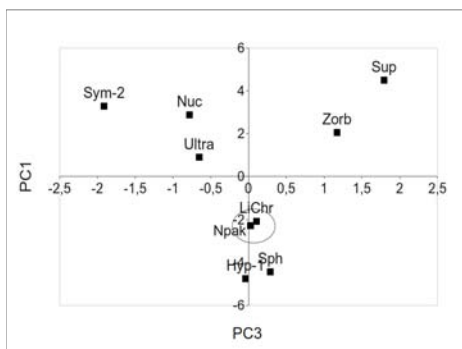


Рис. 2Д. Зависимость PC1 от PC3 для классификации в условиях ОФ ВЭЖХ.

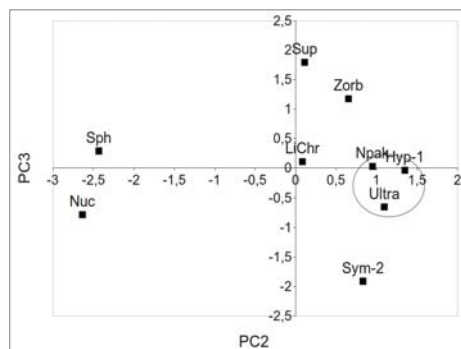


Рис. 2Е. Зависимость PC3 от PC2 для классификации в условиях ОФ ВЭЖХ.

В случае МЖХ и ОФ ВЭЖХ значимыми (более 5% объясненной дисперсии) оказались 3 компоненты (рис 1 А, Б). На рис. 2А-Е представлены зависимости значимых главных компонент (PC) друг от друга. На основании их анализа можно предварительно выделить группы колонок, обладающих близкими свойствами: (i) Sym-1, Sym-2 в режиме МЖХ; (ii) Ultra, Zorb, Krom, Sup в режиме МЖХ; (iii) Ultra, Zorb, Sym-2 в режиме ОФ ВЭЖХ; (iv) LiChr, Nprak в режиме ОФ ВЭЖХ.

Классификация хроматографических колонок с использованием кластерного анализа и сетей Кохонена

Полученные в ходе применения кластерного анализа дендрограммы представлены на рис. 5. На них выделены группы внутри которых находятся колонки с близкими свойствами. Для определения границы деления колонок на группы использовали метод силуэтов [13], а также график зависимости обобщенной внутри кластерной суммы квадратов (WCSS) от количества кластеров (рис. 3, 4).

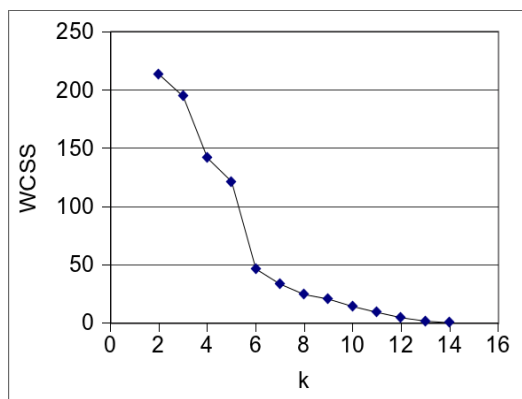


Рис. 3. Зависимость обобщенной внутри кластерной суммы квадратов от количества кластеров при классификации колонок в условиях МЖХ

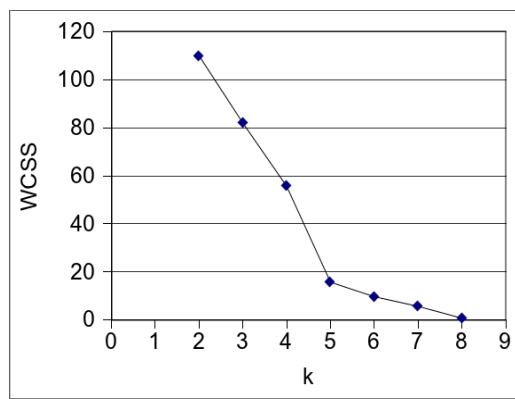


Рис. 4. Зависимость обобщенной внутри кластерной суммы квадратов от количества кластеров при классификации колонок в условиях ОФ ВЭЖХ

Оптимальное количество кластеров находится в точке после скачка обобщенной внутри кластерной суммы квадратов. Таким образом, оптимальное количество групп колонок при классификации в режиме МЖХ – 6, а в режиме ОФ ВЭЖХ – 5.

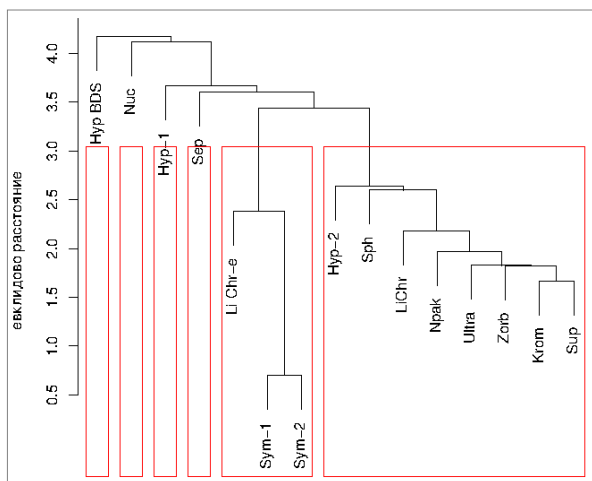


Рис. 5А. Дендрограмма иерархического кластерного анализа с разбиением по группам при классификации в режиме МЖХ.

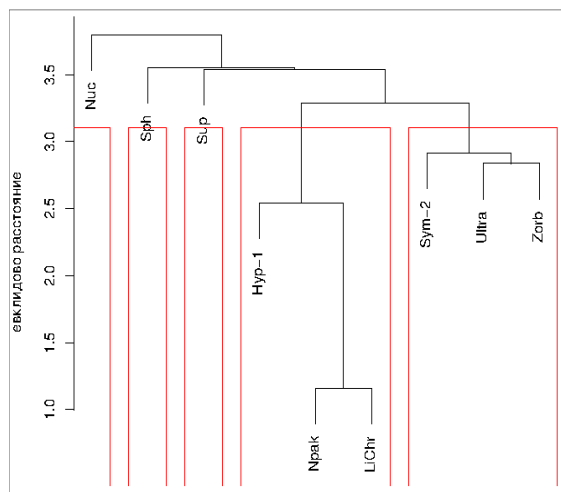


Рис. 5Б. Дендрограмма иерархического кластерного анализа с разбиением по группам при классификации в режиме ОФ ВЭЖХ.

Анализ дендрограмм на рис 5А показывает, что в режиме МЖХ близкие свойства проявляют хроматографические колонки: (i) LiChr-e, Sym-1, Sym-2; (ii) Sup, Hyp-2, Npak, Sph, Krom, Zorb, LiChr, Ultra. В режиме ОФ ВЭЖХ удалось выделить следующие группы (рис. 5Б): (i) Sym-2, Ultra, Zorb; (ii) Hyp-1, Npak, LiChr. Интересно, что в режиме МЖХ значительное количество колонок имеют близкие свойства, в то же время колонка Nuc значительно отличается от других как в режиме МЖХ, так и в режиме ОФ ВЭЖХ.

Для анализа с помощью самоорганизующихся нейронных сетей Кохонена были созданы сети со следующими параметрами: количество эпох при тренировке сети равно 10000, что позволило проследить изменения в процессе тренировки и добиться устойчивости результатов; линейно уменьшающаяся скорость обучения от 0.05 до 0.01; радиус окрестности, начинающийся от 2/3 величины между двумя объектами. Выбор сетей проводился по графикам тренировок, отбирались сети, у которых в конце тренировки амплитуда колебания среднего расстояния до ближайшего объекта была наименьшей. На рис. 6 представлен график тренировки выбранной нейронной сетей при классификации колонок в режим МЖХ, а на рис. 7 двумерная карта, представляющая результат работы этой сети.

Результаты классификации колонок в режиме ОФ ВЭЖХ не представлены, т. к. не удалось получить воспроизводимого деления колонок на группы.

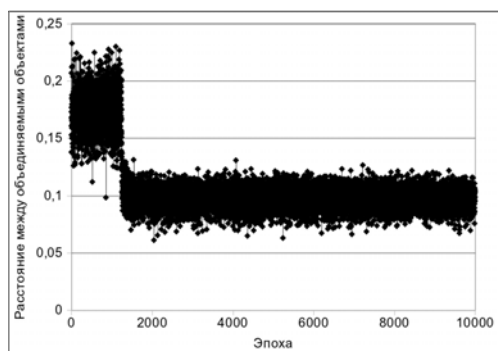


Рис. 6. График изменений среднего расстояния до ближайшего объекта в процессе тренировки сети при классификации в режиме МЖХ.

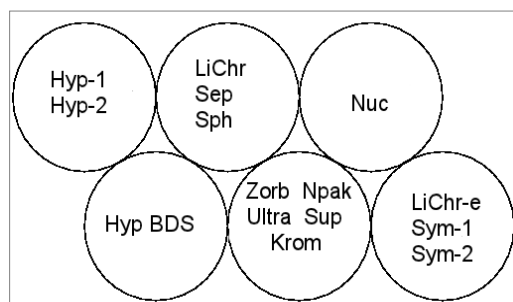


Рис. 7. Карта Кохонена для классификации колонок в режиме МЖХ.

Результаты классификации при помощи нейронных сетей Кохонена позволяют выделить две колонки, значительно отличающиеся от остальных – Nuc и Hyp BDS, аналогичный результат получен и при использовании кластерного анализа. Кроме того общее количество групп, установленное по результатам кластерного анализа и при использовании сетей Кохонена совпадает.

В то же время колонки Нур-1 и Нур-2, отнесенные к различным группам по результатам кластерного анализа, образуют одну группу по результатам применения сетей Кохонена.

Сопоставляя результаты классификации колонок в режиме МЖХ с использованием факторов удерживания, полученные в нашей работе, с результатами классификации, представленными в работе [1], можно сделать вывод, что общая закономерность отделения большой группы колонок с близкими свойствами в режиме МЖХ от нескольких выделяющихся колонок сохраняется. В обоих случаях выделяющейся признана колонка Нур BDS. В тоже время колонка Nuc, которая отделяется в соответствии с результатами, представленными выше в отдельную группу, не выделялась в работе [1]. Анализируя зависимость значений фактора разделения (R_s) для колонок, отнесенных по результатам кластерного анализа к одной группе (Ultra, Krom, Zorb), и колонки Nuc от номера пары разделяемых тестовых веществ, выстроенных в порядке их элюирования на колонке Ultra, можно сделать вывод, что отделение колонки в отдельную группу связано с особенным поведением тестовых веществ с низкими факторами удерживания на этой колонке (рис. 8).

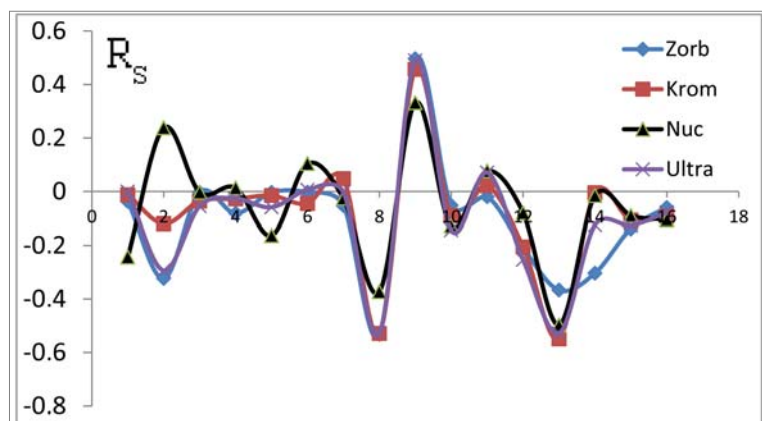


Рис. 8. Зависимость фактора разделения от номера пары тестовых веществ для колонок Ultra, Krom, Zorb и Nuc.

Таким образом, применение сетей Кохонена и кластерного анализа позволяет разделить колонки на группы с близкими свойствами и дает возможность отобрать колонки с близкими свойствами для последующего использования в химическом анализе.

Литература

1. Kulikov A.U. Comparison of C18 silica bonded phases selectivity in micellar liquid chromatography / Kulikov A.U., Galat M. N. // J. Sep. Sci. — 2009 — Vol.32 - 1340 —1350 p.
2. Scott R.P.W. Liquid chromatography column theory / Scott R.P.W. — Chichester, New York, Brisbane, Toronto, Singapore: John Wiley & Sons, — 1991. —144 p.
3. Сакодынский К.И., Бражников В.В. Аналитическая хроматография. М.: Химия, — 1993. — 464 с.
4. Галат М.Н. Аналогичные алкилпривитые стационарные фазы в мицеллярной и обращенно-фазовой жидкостной хроматографии; Диссертация на соискание ученой степени кандидата химических наук / Галат М. Н.—Харьков; На правах рукописи, 2009.— 201 с.
5. Column Classification and Selection for the Determination of Antibiotics by Micellar Liquid Chromatography / M. Rambla-Alegre, S. Carda-Broch, J. Esteve-Romero // Journal of Liquid Chromatography & Related Technologies – 2009 – Vol. 32. – P. 1127-1140.
6. Synthesis and characterization of a polymer-coated C18 stationary phase with high carbon content for liquid chromatography / S.Kobayashi, I. Tanaka, O. Shiota [et al.] // J. Chromatogr. A. – 1998. – Vol. 828. – P. 75–81.
7. Pearson, K. 1901. On lines and planes of closest fit to systems of points in space. Philosophical Magazine 2:559-572.
8. А. Ю. Зиновьев, Визуализация многомерных данных, Красноярск, Изд. КГТУ, 2000.

9. Факторный, дискриминантный и кластерный анализ: Пер. с англ./ Дж.-О. Ким, Ч. У. Мьюллер, У. Р. Клекка и др.; Под ред. И. С. Енюкова. - М.: Финансы и статистика, 1989. - 215 с.
10. Self-organized formation of topologically correct feature maps / Kohonen T. // Biological Cybernetics - 1982- Vol.43 – P. 59-69.
11. Осовский С. Нейронные сети для обработки информации / Пер. с польского И. Д. Рудинского. - М.: Финансы и статистика, 2002 - 344 с.
12. Fausett L. Fundamentals of neural networks / Laurene Fausett - Prentice-Hall, 1994,- pp. 461.
13. Kaufman L. Finding groups in data: An introduction to cluster analysis / Kaufman L.; Rousseeuw, Peter J. - New York; Wiley, 1990 - 342 p.

References

1. Kulikov A.U. Comparison of C18 silica bonded phases selectivity in micellar liquid chromatography / Kulikov A.U., Galat M. N. // J. Sep. Sci. — 2009 — Vol.32 - 1340 —1350 p.
2. Scott R.P.W. Liquid chromatography column theory / Scott R.P.W. — Chichester, New York, Brisbane, Toronto, Singapore: John Wiley & Sons, — 1991. —144 p.
3. Sakody'nskiy K.I., Brajnikov V.V. Analiticheskaya hromatografiya. M.: Himiya, — 1993. — 464 s.
4. Galat M.N. Analogichny'e alkilprivity'e stacionarny'e fazy' v micellyarnoy i obrasch'ennofazovoy jidkostnoy hromatografii; Dissertaciya na soiskanie uchenoy stepeni kandidata himicheskikh nauk / Galat M. N.—Har'kov; Na pravah rukopisi, 2009.— 201 с.
5. Column Classification and Selection for the Determination of Antibiotics by Micellar Liquid Chromatography / M. Rambla-Alegre, S. Carda-Broch, J. Esteve-Romero // Journal of Liquid Chromatography & Related Technologies – 2009 – Vol. 32. – P. 1127-1140.
6. Synthesis and characterization of a polymer-coated C18 stationary phase with high carbon content for liquid chromatography / S. Kobayashi, I. Tanaka, O. Shiota [et al.] // J. Chromatogr. A. – 1998. – Vol. 828. – P. 75–81.
7. Pearson, K. 1901. On lines and planes of closest fit to systems of points in space. Philosophical Magazine 2:559-572.
8. A. U. Zinov'ev, Vizualizaciya mnogomerny'h danny'h, Krasnoyarsk, Izd. KGTU, 2000.
9. Kim D.O., Muller C.U., Klekka Y.R. Factor, discriminant and cluster analyses. Moscow, Finansi and statistica, 1989.
10. Self-organized formation of topologically correct feature maps / Kohonen T. // Biological Cybernetics - 1982- Vol.43 – P. 59-69.
11. Osovskiy S. Neyronny'e seti dlya obrabotki informacii / Per. s pol'skogo I. D. Rudinskogo. - M.:Finansy' i statistika,2002 - 344 s.
12. Fausett L. Fundamentals of neural networks / Laurene Fausett - Prentice-Hall, 1994,- pp. 461.
13. Kaufman L. Finding groups in data: An introduction to cluster analysis / Kaufman L.; Rousseeuw, Peter J. - New York; Wiley, 1990 - 342 p.

Поступила в редакцию 6 июля 2011 г.

А. Ю. Мельников, О. П. Бойченко, А. Ю. Куликов, М. М. Галат. Класифікація хроматографічних колонок з використанням первинних експериментальних даних та хемометричних методів, що не потребують навчання.

Проведено класифікацію хроматографічних колонок з привитими октадецильними групами у режимі ОФ-ВЕРХ та у режимі міцелярної рідинної хроматографії з використанням даних про утримування ряду тестових речовин, запропонованих у роботі (Kulikov A. U. Galat M. N. J Sep Sci 2009, 32 1340-1350). Для класифікації використовували хемометричні методи, що не потребують навчання: аналіз головних компонент, кластерний аналіз, нейронні мережі Кохонена, що самоорганізуються. Встановлено задовільне узгодження при класифікації колонок з використанням кластерного аналізу та мереж Кохонена. Результати зіставленні

з результатами класифікації колонок з використанням хроматографічних параметрів, розрахованих за даним про утримання тестових речовин.

Ключові слова: хроматографія, міцела, класифікація, кластерний аналіз, мережі Кохонена, аналіз головних компонент.

A. U. Melnikov, A. P. Boichenko, A. U. Kulikov, M. N. Galat. Classification of chromatographic columns using the raw experimental data and chemometric methods without teaching.

Chromatographic columns with grafted octadecyl groups have been classified in RP-HPLC mode and in micellar liquid chromatography mode using data on the retention for a number of test substances (suggested in J Sep Sci 2009, 32, 1340-1350). The chemometric methods without teaching, principal component analysis, cluster analysis, self-organized Kohonen neural networks, were used for classification. The classification of columns based on the cluster analysis and the Kohonen neural networks shows the satisfactory agreement. The results were compared with the results of the classification of chromatographic columns obtained with the use of the chromatographic parameters calculated according to the retention of test substances.

Key words: chromatography, micelle, classification, cluster analysis, Kohonen networks, principal components analysis.

Kharkov University Bulletin. 2011. № 976. Chemical Series. Issue 20(43).