

Таблица 2

Разрешающая способность КТК при различной освещенности

Освещенность, лк	10^4	10^2	1	10^{-1}	10^{-2}	$5 \cdot 10^{-3}$
Разрешение (центр/край), т.л.	600/550	600/550	600/550	500/450	400/300	350—300/ /250—200

Круглосуточный телевизионный канал имеет сопоставимые технические характеристики по диапазону освещенностей на местности, разрешению и числу воспроизводимых градаций яркости с телевизионными камерами на базе ЭОП. Прожоги мишени при наличии в поле зрения ярких локальных источников света отсутствуют.

Л и т е р а т у р а

1. ГЕО-НТК-4. Технические условия. КНИБ.201219.019 ТУ.
2. Макаров К. В., Шлычков В. И. Автоматическая фокусировка изображений для телевизионных камер//ТСС. Сер. Техника телевидения. 2005. С. 111—115.
3. Журавель И. М. Краткий курс теории обработки изображений. www.matlab.exponenta.ru

Статья поступила в редакцию 11 октября 2006 г.

Round-the-clock TV-channel

V. I. Shlychov, K. V. Makarov

Federal State Unitary Enterprise Production Association "Ural Optical & Mechanical Plant",
Ekaterinburg, Russia

A TV-channel without imaging device for searching and identification of landmarks on conditions of changing of illumination on area from $5 \cdot 10^{-3}$ to 10^5 lx was worked out. The TV-channel consists of the lens with the auto changing aperture, the TV-camera, the unit of auto-focusing and the unit of contrast image rising. Comparative tests of this system with TV camera based on imaging device generation 2+ showed coincident results on basic technical parameters (resolution, number of gradation of brightness).

УДК 543.427.4

Разработка программного обеспечения для математического моделирования спектров в рентгенофлуоресцентном анализе вещества

А. В. Романов

Ивановский государственный энергетический университет им. В. И. Ленина, Иваново, Россия

М. А. Степович

Калужский государственный педагогический университет им. К. Э. Циолковского, Калуга, Россия

М. Н. Филиппов

Институт общей и неорганической химии им. Н. С. Курнакова РАН, Москва, Россия

Рентгенофлуоресцентный анализ (РФА) состава вещества — перспективный метод определения широкого спектра химических элементов. Настоящая работа посвящена изучению возможностей подбора оптимальных параметров для проведения количественного РФА твердых тел методами математического моделирования.

Рентгеновское излучение, возникающее при воздействии на твердое тело потоков электромагнитного излучения, заряженных и атомных частиц, используют для определения качественного и количественного составов вещества [1].

Среди многочисленных вариантов рентгеноспектральных методов анализа вещества особое место занимает РФА. В настоящее время этот метод получил широкое распространение как в научных исследованиях, так и при аналитическом кон-

троле промышленного производства. Широкому его распространению способствовали высокая экспрессность, возможность определения в одном эксперименте до 70 элементов периодической системы, широкий диапазон определяемых содержаний — от 10^{-4} % до 100 мас.% [2]. При разработанной методике определения время анализа составляет 1—5 мин, однако такие параметры реализуются лишь в массовых анализах определенного класса объектов, для которых разработана соответствующая методика и имеются адекватные, т. е. близкие по химическому составу и физикохимическим свойствам, образцы сравнения.

Ситуация резко меняется, когда возникает задача количественного анализа одиночного образца, для которого нет ни методики, ни соответствующих образцов сравнения. Разработка методики такого анализа может занять несколько недель. Основная сложность заключается в выборе условий проведения анализа с учетом реальных характеристик спектрометра и корректном учете матричных эффектов — поглощении первичного и характеристического излучений, учете возможных наложений спектральных линий, выборе режима работы рентгеновской трубки, учете эффектов вторичного возбуждения флюоресценции определяемых элементов флюоресцентным излучением присутствующих в исследуемом образце других элементов и пр.

Следует отметить, что физическая природа отмеченных эффектов исследуется в течение нескольких десятков лет, накоплен огромный материал, однако его использование при разработке конкретной методики связано с большими трудностями прежде всего из-за того, что он не обобщен до конца. Кроме того, количество факторов, которые приходится принимать во внимание, может достигать нескольких десятков и существенно зависит от характера анализируемого объекта и типа используемого спектрометра.

По нашему мнению, существенный прогресс в области оптимизации РФА и прежде всего сокращение времени проведения анализа и улучшение его метрологических характеристик могут быть достигнуты при использовании на этапе разработки специализированных лабораторных информационных систем (ЛИС), содержащих необходимые базы данных по рентгеновским спектрам, модели генерации аналитического сигнала, модели формирования матричных эффектов, характеристики реальных спектрометров.

Учет априорной информации о физических характеристиках объекта анализа, особенностей взаимодействия рентгеновского излучения с веще-

ством и параметров измерительной аппаратуры на этапе разработки методики может решить задачу выбора области спектра, используемой для проведения измерений и, как следствие, существенно повысить эффективность процесса РФА, сократить время проведения эксперимента и увеличив объем получаемой полезной информации. Изучению возможностей подбора оптимальных параметров для проведения количественного РФА твердых тел посвящена настоящая работа.

Постановка задачи

В ходе выполнения работы предполагается решить задачу по автоматизации подготовительного этапа процесса РФА.

Оптимальные для данного состава вещества условия проведения эксперимента предлагается определять методами математического моделирования. При построении модели следует учитывать следующие факторы, влияющие на результат измерений.

1. *Спектральные характеристики конкретной измерительной установки.*

В настоящей работе рассмотрены спектрометры с дисперсией по длине волны (кристалл-дифракционные). Существенные особенности таких установок:

каждый из кристаллов-анализаторов, используемых в установке, позволяет провести анализ только части исследуемого спектра;

кристаллы-анализаторы обладают различными светосилой и спектральным разрешением, причем кристаллы с большим разрешением обычно обладают меньшей светосилой;

в регистрируемых спектрах присутствуют линии высших порядков дифракции.

2. *Учет реальной формы линий экспериментального спектра.*

Исходный спектр рентгенофлюоресцентного излучения вещества представляет собой суперпозицию характеристического излучения атомов и рассеянного (когерентно и некогерентно) первичного излучения возбуждающей рентгеновской трубки. Естественная ширина линий характеристического излучения составляет от десятых долей до единиц электрон-вольта [3]. В экспериментально наблюдаемом спектре в результате действия ряда факторов (конечный объем взаимодействия излучения с кристаллом-анализатором, отступления структуры кристалла от идеальной, погрешности геометрии установки, тепловые колебания атомов) форма линий характеристического спектра получается размытой. В серийных рентгенофлюоресцентных спектрометрах обычно использу-

ют более светосильные схемы (например, с коллиматором Соллера) в ущерб спектральному разрешению. Это связано с тем, что светосила прибора в конечном итоге определяет предел обнаружения в РФА, а этот параметр для большинства практических применений представляется наиболее важным. По этой причине разрешение серийных приборов в области К-линий переходных элементов составляет обычно 10—20 эВ, при этом наблюдаемый контур характеристических линий практически представляет собой аппаратную функцию спектрометра.

Для описания профилей линий характеристического рентгеновского излучения (ХРИ) возможно использовать известные в практике спектроскопии аппроксимирующие функции:

- функцию Гаусса — $I(x) = I_0 \exp(-kx^2)$;
- функцию Лоренца — $I(x) = I_0 / (1 + kx^2)$;
- функцию Войта — свертку функций Лоренца и Гаусса;
- модифицированную функцию Лоренца — $I(x) = I_0 / (1 + kx^2)^2$;
- промежуточную функцию Лоренца — $I(x) = I_0 \exp(-kx)^{1,5}$;
- функцию Пирсона VII — $I(x) = I_0 / (1 + kx^2)^m$.

В зависимости от конкретной модели спектрометра выбирают функцию, наиболее точно описывающую профиль спектральных линий.

3. *Учет поглощения излучения*, поскольку в исследуемом веществе в зависимости от его элементного состава, концентраций элементов и длины волны часть первичного и вторичного излучений поглощается.

Выбранный метод реализации поставленной задачи

На этапе подготовки эксперимента строится математическая модель спектра вещества предполагаемого состава исходя из априорной информации о физико-химической природе вещества, предполагаемого его качественном и количественном составе, в которой учитываются основные факторы, влияющие на результаты измерений, изложенные выше. На основании построенной математической модели определяются области спектра для проведения измерения и кристаллы-анализаторы, используемые в установке.

Оптимальные параметры проведения измерений определяются в соответствии со следующими принципами:

выбранные области спектра содержат линии всех элементов, предположительно входящих в состав образца;

для охвата выбранных областей требуется, по возможности, наименьшее число различных кристаллов-анализаторов;

на выбранных областях при использовании выбранных кристаллов-анализаторов для каждого элемента, предположительно входящего в состав пробы, должно существовать несколько хорошо отделимых линий;

в зависимости от априорной информации о составе образца и требований эксперимента для проведения проверки на обнаружение всех элементов при необходимости определяются дополнительные области спектра.

Для сокращения времени проведения измерений требуется, чтобы размер выбранной области спектра был наименьшим, в то же время сокращение размеров области для измерений приводит к уменьшению точности измерений.

Таким образом, необходимо найти оптимальное соотношение между временем проведения и точностью измерений.

Описание идеи работы программы

Решение задачи выбора оптимальных параметров проведения эксперимента по определению состава вещества методами РФА можно разделить на следующие этапы:

1. Построение действующей модели дифракционного спектра на основе имеющихся данных.

2. Разработка критериев определения оптимальных параметров измерений.

3. Разработка алгоритмов для их реализации.

Выбор оптимальной области спектра для проведения измерений производится в полуавтоматическом режиме, т. е. исследователю предлагаются варианты решения, из которых он может выбрать наиболее подходящий или же, изучив всю предполагаемую дифракционную картину, самостоятельно определить оптимальные условия проведения измерений.

Одну и ту же спектральную область можно исследовать с использованием различных кристаллов-анализаторов, при этом конкретный выбор зависит от размеров области измерений, положения и интенсивности линий ХРИ. Таким образом, процедуры выбора области спектра для измерения и кристалла-анализатора взаимосвязаны и должны решаться параллельно. Для определения оптимального набора кристаллов-анализаторов строятся модели спектров предполагаемого элементного состава вещества для каждого из доступных кристаллов. Результатом анализа построенных моделей является построение списка вариантов параметров проведения измерений, состоящих из областей спектра и кристаллов, используемых для их анализа, из которых исследователь может выбрать наиболее подходящую.

В настоящей работе реализован первый этап решения поставленной задачи: построение модели спектра вторичного рентгеновского излучения на основе априорных данных о качественном и количественном составе вещества и параметров измерительной установки.

Для реализации модели разработана программа для персонального компьютера. Для построения модели спектра вторичного излучения созданы базы даны, содержащие информацию о положении и интенсивности линий ХРИ химических элементов, особенностях различных измерительных установок, параметрах кристаллов-анализаторов, видах аппаратных функций.

Модель спектра излучения строится на основании информации, введенной исследователем. В качестве информации, используемой для построения модели, могут выступать такие данные как список элементов, предположительно входящих в состав пробы; предполагаемое массовое соотношение элементов (концентрация); вид аппаратной функции; наличие фона и его вид; вид кристалла-анализатора или его характеристики. В соответствии с входной информацией и используя информацию баз данных, моделируется результат измерений по всей доступной области спектра.

Интерфейсом программы предусмотрено определение списка элементов, взятых для построения модели и их концентраций (рис. 1). Для построения модели пользователем определяются параметры аппаратуры (рис. 2): кристалл-анализатор, аппаратная функция, которые выбираются из базы данных или их задают вручную.

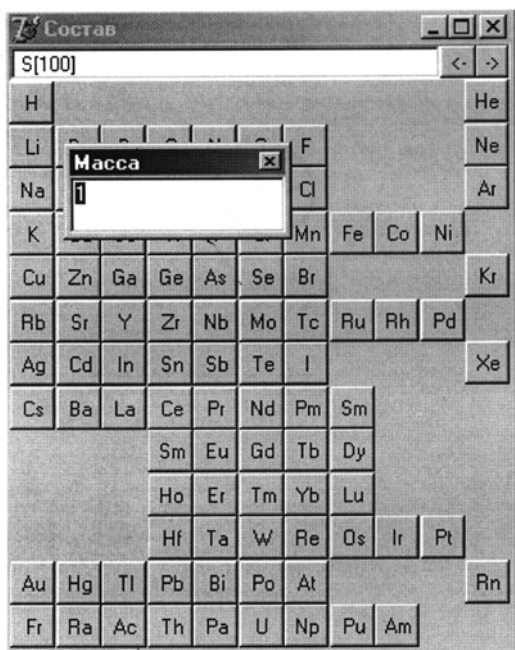


Рис. 1. Интерфейс для задания ожидаемого качественно-количественного вещества

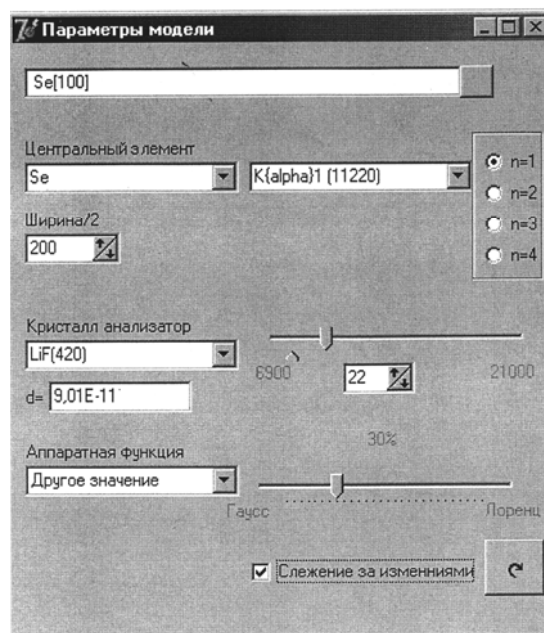


Рис. 2. Часть программного интерфейса для задания параметров модели и выбора наблюдаемой области спектра

В соответствии с введенными параметрами и выбором дополнительных факторов, учитываемых при расчетах, строится модель результирующего спектра. На экране отображается выбранная пользователем часть спектра излучения, высота пиков может быть нормирована по высоте окна по всему спектру или по части отображаемого спектра.

При построении модели дифракционного спектра учитываются следующие факторы:

- положение линий ХРИ;
- профили спектральных линий с учетом разрешения кристалла-анализатора и вида функции, принятой для их описания;
- наложение линий;
- возможное построение дифракционного спектра для нескольких порядков дифракции;
- модель строится для части спектра, соответствующей выбранному кристаллу-анализатору;
- возможно добавление в моделируемый спектр практически измеренного или аналитически заданного фона;
- предусмотрена возможность работы с различными шкалами измерения положения спектральных линий (распределение по энергиям — электронвольты, по длинам волн — ангстремы, по углу между первичным и вторичным рентгеном — градусы).

Разработанная математическая модель спектра реализована поэтапно путем включения в расчет новых влияющих на результат факторов. На каждом этапе проведена проверка достоверности полученной модели путем сравнения результатов расчетов со спектрами, представленными в литературе, и с результатами собственных измерений.

Ниже представлены типичные результаты моделирования на примере части спектра для линий $K_{\alpha 1,2}$ селена (Se) (рис. 3) с добавлением линейного фона.

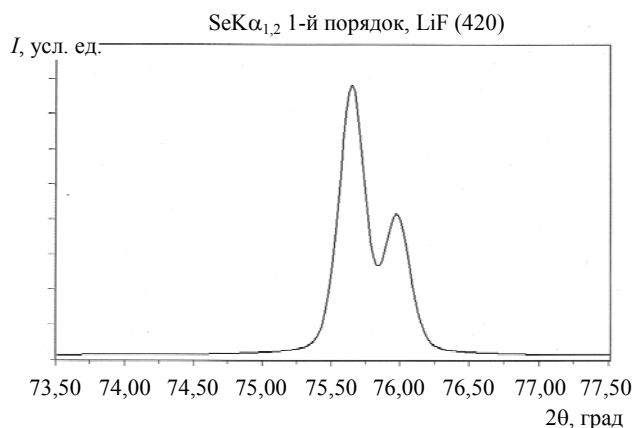


Рис. 3. Смоделированный спектр вторичного рентгеновского излучения селена Se на кристалле LiF (420) с добавлением линейного фона в области линий $K_{\alpha 1}$, $K_{\alpha 2}$

В качестве аппаратной функции использовалась свертка функций Гаусса и Лоренца с отклонением 7:3. На рис. 3 показана зависимость интенсивности характеристического излучения от угла между первичным и вторичным рентгенами.

При сравнении модели спектра с реально измеренным получены следующие результаты:

местоположение дифракционных пиков совпадает с точностью до $2 \cdot 10^{-2}$ град.

после проведения процедуры нормирования интенсивности смоделированного спектра относительно экспериментального среднее отклонение

интенсивности относительно измерений составляет не более 4 %. В выбранном масштабе изображения экспериментального спектра и спектра, полученного в результате моделирования, практически сливаются.

Заключение

Построена действующая математическая модель спектра вторичного рентгеновского излучения. Результаты моделирования хорошо согласуются с экспериментальными данными. Модель реализована в виде программы для ПК и позволяет повысить эффективность этапа планирования эксперимента по РФА вещества.

Исследования выполнены при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и правительства Калужской области (грант № 04-03-97210).

Литература

1. Брандон Д., Каплан У. Микроструктура материалов. Методы исследования и контроля. — М.: Техносфера, 2004. — 384 с.
2. Афонин В. П., Комяк Н. И., Николаев В. П., Плотников Р. И. Рентгенофлуоресцентный анализ. — Новосибирск: Наука. Сиб. отд-ние, 1991. — 173 с.
3. Блохин М. А. Физика рентгеновских лучей. — М.: ГИТТЛ, 1957. — 518 с.
4. Блохин М. А., Швейцер И. Г. Рентгеноспектральный справочник. — М.: Наука. 1982. — 360 с.

Статья поступила в редакцию 22 декабря 2005 г.

Software engineering for mathematical modeling of spectrums in roentgenofluorescent analysis of solids

A. V. Romanov

Lenin Ivanovo State Energy University, Ivanovo, Russia

M. A. Stepovich

Tsiolkovsky Kaluga State Pedagogical University, Kalouga, Russia

M. N. Filippov

Kurnakov Institute of General and Inorganic Chemistry RAS, Moscow, Russia

Roentgenofluorescent analysis of substance composition is the widespread method, permitting to determine a wide spectrum of chemical elements. The present work is devoted to study of opportunities of the optimum parameters selection for realization of the quantitative RFA solid bodies by methods of mathematical modeling.