**Васильева, Ирина Евгеньевна.**

## Система компьютерной интерпретации дуговых атомно-эмиссионных спектров в анализе твердых природных и техногенных образцов : диссертация ... доктора технических наук : 02.00.02. - Иркутск, 2006. - 328 с. : ил.

## Оглавление диссертациидоктор технических наук Васильева, Ирина Евгеньевна

Список обозначений.

Список сокращений.

ВВЕДЕНИЕ.

Глава 1. СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ АВТОМАТИЗАЦИИ И КОМПЬЮТЕРИЗАЦИИ ДУГОВОГО АТОМНО-ЭМИССИОННОГО АНАЛИЗА ТВЕРДЫХ ПРИРОДНЫХ И ТЕХНОГЕННЫХ ОБРАЗЦОВ.

1.1. Роль дугового атомно-эмиссионного анализа твердых геологических образцов и их технологических переделов.

1.2. Схема атомно-эмиссионного анализа твердых образцов с дуговым возбуждением спектра.

1.2.1. Дуговые источники возбуждения спектра и способы введения порошков в разряд.

1.2.2. Спектральные приборы с фотографической и фотоэлектрической регистрацией спектров.

1.2.3. Способы измерения спектральной интенсивности и их погрешности.

1.3. Автоматизация и компьютеризация обработки спектральной информации

1.3.1. Описание аналитического сигнала в АЭА.

1.3.2. Градуировочные зависимости в АЭА и оценка их адекватности.

1.4. Направление исследований, постановка цели и задач.

Глава 2. СТРУКТУРИРОВАНИЕ МНОГОМЕРНОЙ СПЕКТРАЛЬНОЙ ИНФОРМАЦИИ ПРИ ВИЗУАЛЬНОЙ ИНТЕРПРЕТАЦИИ СПЕКТРОВ ПО СПОСОБУ ПОЯВЛЕНИЯ ЛИНИЙ В ПРЯМОМ

АТОМНО-ЭМИССИОННОМ АНАЛИЗЕ.

2.1. Спектральное оборудование, режимы получения и регистрации спектра.

2.2. Визуальная интерпретация спектров по способу появления-усиления группы линий определяемого элемента.

2.2.1. Предел обнаружения элемента и концентрация появления линии.

2.2.2. Формирование группы аналитических линий каждого элемента для расширения диапазона определяемых содержаний и повышения точности результатов за счет учета спектральных помех и влияния основы.

2.2.3. Эффективный потенциал ионизации как характеристика влияния основы.

2.3. Составление группы аналитических линий и наборов градуировочных образцов для обучения и тестирования.

2.4. Оценка достоверности результатов АЭА с визуальной интерпретацией спектров, управление качеством анализа.

Выводы.

Глава 3. РАЗРАБОТКА СИСТЕМЫ КОМПЬЮТЕРНОЙ ИНТЕРПРЕТАЦИИ ДУГОВЫХ АТОМНО-ЭМИССИОННЫХ СПЕКТРОВ

ТВЕРДЫХ ОБРАЗЦОВ.

3.1. Спектральное оборудование для методик АЭА с автоматизированной регистрацией и компьютерной обработкой спектров.

3.2. Вычисление предела обнаружения при многоканальной записи спектра.

3.3. Сходство и принципиальные отличия методик прямого и количественного АЭА.

3.4. Основные классификационные и вычислительные задачи прямого АЭА.

3.5. Обоснование экспертного подхода к разработке системы компьютерной расшифровки спектров.

3.5.1. Экспертные системы: применимость к предметной области АЭА.

3.5.2. Настройка системы для выполнения прямого АЭА с использованием метода обратного распространения ошибки.

3.6. Концептуальная модель системы компьютерной расшифровки спектров в дуговом АЭА твердых образцов.

Выводы.

Глава 4. СТРУКТУРИРОВАНИЕ СПЕКТРАЛЬНОЙ ИНФОРМАЦИИ ДЛЯ КОМПЬЮТЕРНОЙ ОБРАБОТКИ ПРИ АВТОМАТИЗИРОВАННОЙ РЕГИСТРАЦИИ СПЕКТРОВ.

4.1. Обучающая и тестирующая выборки, их моделирование.

4.2. База данных СО: составление наборов градуировочных образцов для обучения и тестирования.

4.3. База данных экспериментально полученных спектров СО и проб.

4.4. База данных нормативов КХА для оценки качества результатов.

4.5. Схема составления группы аналитических линий при автоматизированной регистрации спектра.

4.5.1. Форма табличной записи спектральных данных для п-мерной градуировки по группе линий аналита.

4.5.2. Форма табличной записи спектральных данных для п-мерной градуировки с учетом спектральных помех и влияния основы.

Выводы.

1 лава 5. МОДЕЛИ И АЛГОРИТМЫ КОМПЬЮТЕРНОЙ ОБРАБОТКИ СПЕКТР АЛЫ ЮЙ ИНФОРМАЦИИ, ХЕМОМЕТРИЧЕСКИЕ СПОСОБЫ ВЫБОРА ОПТИМАЛЬНОГО ВАРИАНТА.

5.1. Оптимизация алгоритма поиска и идентификация положения пиков аналитических линий.

5.2. Модель аналитического параметра спектральной линии.

5.2.1. Структура модели аналитического параметра.

5.2.2. Хемометрический способ выбора оптимального аналитического параметра спектральной линии.

5.3. Градуировки в многоэлемегггном атомно-эмиссионном анализе.

5.3.1. Многомерная градуировка по группе линий определяемого элемента для расширения диапазона определяемых содержаний при описании погрешности результатов анализа распределением Вейбулла.

5.3.2. Многомерные градуировки на основе методов МСА и использовании групп линий элементов для расширения диапазона определяемых содержаний, учеш матричных влияний и спектральных наложений.

5.4. Оценивание адекватности градуировочной модели.

5.4.1. Хемометрический способ выбора градуировочной модели.

5.4.2. Экспертная система оценивания соответствия макросоставов пробы и градуировочных образцов.

5.4.3. Способы коррекции влияния макроэлементов на результат анализа.

Выводы.

Глава 6. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ПРОВЕРКА МОДЕЛЕЙ И АЛГОРИТМОВ КОМПЬЮТЕРНОЙ ОБРАБОТКИ СПЕКТРАЛЬНОЙ ИНФОРМАЦИИ И ХЕМОМЕТРИЧЕСКИХ СПОСОБОВ ВЫБОРА ОПТИМАЛЬНЫХ УСЛОВИЙ ВЫПОЛНЕНИЯ АНАЛИЗА ПРИРОДНЫХ ОБРАЗЦОВ.

6.1. Экспериментальная проверка алгоритмов профилирования и поиска пиков аналитических линий.

6.1.1. Обработка спектров, оцифрованных с фотопластинки АМФ АКС.

6.1.2. Обработка спектров, зарегистрированных прибором Пульсар

6.1.3. Оптимизация алгоритмов поиска кантов молекулярных полос при фотоэлектрической pei ис фации спектров прибором Пульсар-7000.

6.1.4. Поиск реперных и аналитических линий при определении рения в трных породах и рудах с использованием прибора Пульсар-7000.

6.1.5. Поиск реперных и аналитических линий в программах обработки спектров, оцифрованных с фотопластинки АМФ ИФО-462.

6.2. Экспериментальная проверка моделей аналитического параметра спектральной линии, типов градуировки и хемометрических способов их выбора.

6.2.1. Определение 20 элеменюв в геологических образцах при обработке спектров, оцифрованных с фотопластинки АМФ АКС.

6.2.2. Mhoi оэлементный прямой АЭА геологических образцов с фотоэлектрической регистрацией спектров прибором Пульсар

6.2.3. Методика атомно-эмиссионного определения фтора по молекулярной полосе CaF в горных породах, осадках и почвах.

6.2.4. Прямой АЭА геологических образцов с фотографической регистрацией и оцифровкой спектров АМФ ИФО-462.

Выводы.

Глава 7. АВТОМАТИЗАЦИЯ И КОМПЬЮТЕРИЗАЦИЯ МЕТОДИКИ ПРЯМОГО АТОМНО-ЭМИССИОННОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПРИМЕСЕЙ В ПРИРОДНЫХ КВАРЦИТАХ, КВАРЦЕ И КРИСТАЛЛИЧЕСКОМ КРЕМНИИ.

7.1. Исследование способов выбора АП и типа градуировочной зависимости по группе линий при фотографической регистрации и оцифровке спектров АМФ ИФО-462.

7.2. Выбор условий обработки спектров, зарегистрированных прибором МАЭС.

7.2.1. Выбор оптимальных аналитических параметров линий аналитов.

7.2.2. Выбор модели градуировки.

7.3. Моделирование структуры данных при использовании многомерной градуировки.

7.3.1. Влияние спектральных помех.

7.3.2. Влияние макросостава образцов.

Выводы.

Глава 8. АВТОМАТИЗАЦИЯ И КОМПЬЮТЕРИЗАЦИЯ МЕТОДИК ОПРЕДЕЛЕНИЯ БЛАГОРОДНЫХ МЕТАЛЛОВ И ИХ СПУТНИКОВ В ГЕОЛОГИЧЕСКИХ ОБРАЗЦАХ.

8.1. Прямое атомно-эмиссионное определение серебра, золота и мышьяка в геологических образцах по способу испарения из канала электрода.

8.1.1. Выбор аналитических параметров спектральных линий и моделей градуировки.

8.1.2. Метрологические характеристики методики.

8.1.3. Методика прямого определения БМ и элементов-спутников в геологических образцах по способу вдувания-просыпки.

8.2. Химико-аюмно-эмиссионное определение золота в горных породах и рудах с использованием сорбента ПСТМ-ЗТ.

8.2.1. Кремнийорганический сорбент ПСТМ-ЗТ.

8.2.2. Получение концентратов и их спектров.

8.2.3. Приготовление градуировочных образцов.

8.2.4. Мегрологические характеристики методики.

8.3. Химико-атомно-эмиссионное определение платины и палладия в горных породах и рудах с использованием сорбента ПСТМ-ЗТ.

8.3.1. Определение Аи и Pt с использованием градуировки по группе спектральных линий при аппроксимации погрешности анализа распределением Вейбулла.

8.3.2. Оценка достоверности результатов анализа Au, Pt и Pd.

8.4. Прямое атомно-эмиссионное определение благородных металлов в нерастворимом углеродистом веществе.

8.4.1. Выделение концентратов НУВ.

8.4.2. Способы получения и регистрации спектров НУВ.

8.4.3. Образцы для градуировки и контроля правильности результатов: обучающая и тестовая выборки.

8.4.4. Выбор аналитических параметров спектральных линий Аи и Pt.

8.4.5. Построение и выбор градуировочных зависимостей для определения Аи и Pt в НУВ, метроло1 ические характеристики методики.

8.4.6. Результаты применения разработанной методики анализа НУВ и оценка их достоверности.

Выводы.