

**СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

P10-87-126

М.К.Вучков, Е.Л.Журавлева, Ж.С.Караманова*

**ПРИМЕНЕНИЕ ПЕРСОНАЛЬНОЙ ЭВМ
ДЛЯ ОБРАБОТКИ РЕНТГЕНОВСКИХ СПЕКТРОВ**

* Институт ядерных исследований и ядерной
энергетики БАН, София

ВВЕДЕНИЕ

Использование вычислительной техники для обработки информации рентгенофлуоресцентных спектрометров, а также для управления процессом измерения и накопления, привело к существенному повышению качества и количества информации о составе вещества, обеспечило качественно новый уровень аналитических определений.

Внедрение ЭВМ в аналитическую практику осуществляется двумя путями: разработкой аналитических информационно-измерительных комплексов, включающих группу анализаторов с централизованной ЭВМ в режиме разделения времени, и путем создания интегрированного рентгенофлуоресцентного спектрометра на базе персональных компьютеров. Системы на основе микроЭВМ обладают большей гибкостью, позволяющей проведение не только контроля электронных блоков и узлов, выявление метрологических отказов, но и управление, регистрацию и отображение информации специализированными алгоритмами. В случае недостаточной вычислительной мощности микрокомпьютера для решения специализированных задач может быть организована иерархическая система, где первичная и, частично, вторичная обработка производится микроЭВМ первого уровня, а дальнейшая обработка по идентификации и анализ вещества на основе применения алгоритмов поисковых систем, распознавания образа и т.п. осуществляются на ЭВМ более высокого уровня.

Процесс получения и передачи экспериментальной информации рентгенофлуоресцентного метода связан со значительными потерями из-за воздействия различных искажающих факторов в виде шумов, дрейфа, несовершенства детектирующего тракта, спектральной и матричной интерференции присутствующих элементов. Поэтому задача обработки информации заключается в извлечении полезной информации из характеристического спектра, введении поправки на изменения параметров установки, коррекции на фон и перекрывание пиков, качественном и количественном анализе вещества.

Предметом настоящей работы было исследование аналитических возможностей рентгенофлуоресцентного метода для решения некоторых задач, связанных с проблемой поиска СТЭ в природе, с применением обработки информации на ЭВМ.

В качестве примера исследованы образцы углей, содержащие тяжелые элементы на уровне нескольких ppm, в том числе и висмута. Интерес к рентгенофлуоресцентному определению именно висмута связан в основном с трудностями его анализа другими методами.

Рентгенофлуоресцентный метод можно использовать для определения содержания висмута до нескольких десятков ppm, однако в большинстве природных образцов содержится значительное количество свинца, L-линии которого не разрешаются с линиями висмута. Для решения задачи анализа висмута необходимо разделение спектральных линий свинца и висмута и четкое вычитание фонового вклада.

Экспериментальные спектры образцов углей были получены на многоканальном анализаторе NOKIA, типа LP-4840 в сочетании с Si(Li)-детектором площадью 30 мм² и толщиной бериллиевого окна 30 мкм. Для возбуждения рентгеновского излучения элементов использовались 5 радиоизотопных источников Cd-109 с общей активностью 10 мкюри, расположенных в кольцевой геометрии [1].

Процесс обработки информации характеристических спектров разделялся на следующие этапы:

1. Предварительная обработка спектров.
2. Качественный анализ и идентификация присутствующих элементов.
3. Моделирование и вычитание фона, расшифровка мультиплетов и вычисление площади пиков.
4. Количественный анализ - вычисление концентрации.

1. ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ОБРАБОТКА СПЕКТРА

Экспериментально полученные рентгеновские спектры содержат отдельные выбросы, связанные со статистическим разбросом числа зарегистрированных квантов и с различными случайно распределенными помехами. Для повышения эффективности алгоритмов обработки спектров целесообразно провести процедуру сглаживания спектра при помощи рекурсивных фильтров. В работе [2] показано, что эффективные сглаживающие фильтры можно получить на основе свертки спектрометрической информации.

В случае дискретного представления сигналов процесс свертки для спектрометрической информации записывается в виде

$$N_i = \sum_{j=-n}^n h_j n_{i+j}, \quad /1/$$

где h_j - весовые коэффициенты фильтра, $\Delta n = 2n+1$ - окно фильтра.

Для реализации свертки спектрометрической информации чаще всего используют полиномиальные модели сигнала, коэффициенты которого можно рассчитать при помощи математического аппарата наименьших квадратов. Авторами работы [3] была составлена программа и рассчитаны значения коэффициентов для $n = 2, 3, \dots, 12$. Так, например, для применения процедуры сглаживания спектра, путем аппроксимации группы из пяти точек полиномом 2-й степени, получено выражение:

$$N_i = (-3n_{i-2} + 12n_{i-1} + 17n_{i+1} + 2n_{i+2} - 3n_{i+3})/35. \quad /2/$$

С целью эффективного применения алгоритмов сглаживания спектров необходимо оптимизировать объем выборки для аппроксимации в соответствии с откликом спектрометрической системы. Если окно фильтра Δn очень велико, интенсивность пиков в сглаженном спектре уменьшается. Наоборот, если Δn слишком мало, некоторые выбросы не сглаживаются.

Для разработки вычислительного алгоритма фильтрации экспериментальных рентгеновских спектров, полученных на анализаторе NOKIA, исследовано влияние объема выборки на оценку параметров пиков и на степень подавления шума. На примере спектра угля, представленном на рис. 1, были применены алгоритмы сглаживания

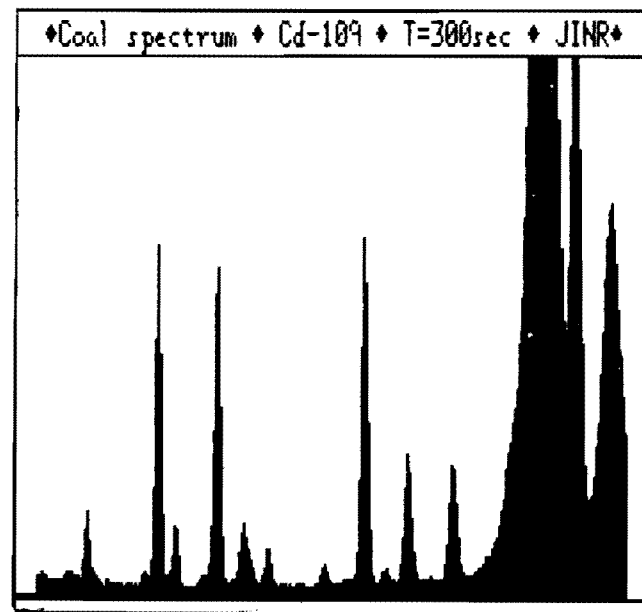


Рис. 1.

по пяти, семи и девяти точкам спектра и рассчитаны площади пиков. В соответствии с разрешением полупроводникового детектора, равном 235 эВ для линии 5,895 кэВ, в качестве оптимального алгоритма был выбран полиномиальный фильтр 2-й степени из пяти точек. Последний близок к согласованному для условий рентгенофлуоресцентной системы и, судя по улучшению отношения сигнал-фон, обеспечивает значительно более эффективное подавление шума, чем искажение формы пиков. При многократной фильтрации искажения возрастали с увеличением числа повторов, хотя и при этом улучшалось подавление шума, что объясняется сужением полосы пропускания фильтра. Поэтому для практического применения алгоритма повторная фильтрация не рекомендуется.

2. КАЧЕСТВЕННЫЙ АНАЛИЗ СПЕКТРА

Полученные с многоканального анализатора спектры характеристического рентгеновского излучения содержат три аддитивные составляющие - собственно полезный сигнал, базисный сигнал или фон и различного рода помехи. На этапе качественного анализа спектра осуществляются визуальное или автоматическое обнаружение полезных компонент и идентификация присутствующих элементов. Энергия пика определяется уточнением его положения и преобразованием этого значения в энергию при помощи энергетической калибровки. Идентификация характеристических линий элементов осуществляется по каталогу ядерно-физических данных.

Для качественного исследования спектров углей была использована программа QUAX, реализованная на микроЭВМ "Правец". Программа организована в интерактивно-визуальном режиме и обладает следующими возможностями: дисплеирование спектра по осям X и Y; проведение и запись на диск энергетической калибровки; идентификация элементов при помощи подвижных курсоров, соответствующих энергиям K- или L-линий элементов с $z = 11$ /натрий/ по $z = 92$ /уран/; проведение калибровки на энергетическое разрешение и запись на диск, вычитание фона на участке спектра, вычисление параметров одиночного пика /положение максимума, ПШПМ - полная ширина на половине максимума, амплитуда и площадь/.

Энергетическую калибровку спектрометра проводили при помощи нескольких /не менее двух/ интенсивных, неперекрывающихся пиков. Для спектра, представленного на рис. 1, использовали K_{α} -линии железа, цинка, стронция и пик когерентного рассеяния источника ^{109}Cd . Точное положение максимума пиков определяется при помощи аппроксимации вершины пиков полиномом 2-й степени.

Энергетическая калибровка спектрометра NOKIA в виде линейной функции

$$P = a + bE$$

/3/

получена программой с коэффициентом корреляции $R = 0,99999967$; для сравнения в табл. 1 приведены результаты калибровки, полученной визуальным уточнением положений пиков - коэффициент корреляции $R = 0,999918$.

Таблица 1

№	Линия	Энергия, кэВ	Положение NOKIA	Положение QUAX
1	Fe - K_{α}	6,400	191	189,82
2	Zn - K_{α}	8,631	267	266,90
3	Sr - K_{α}	14,142	458	457,74
4	Ag - K_{α}	22,160	732	733,23

$$R = 0,999918 \quad R = 0,999999(967)$$

Результаты табл. 1 показывают, что высокая степень аппроксимации энергетической зависимости обеспечивается точностью алгоритма определения положений пиков. В сравнении с другими методами /метод центра тяжести, нелинейной подгонки параметров пиков и т.п./, алгоритм аппроксимации полиномом 2-й степени оптимален с точки зрения точности, скорости и надежности.

Идентификация характеристических линий элементов осуществлялась при помощи подвижного маркера, передвигающегося соответственно энергиям K- или L-серии излучения элементов, считываемым с библиотечной программы XLIB. Энергии K- или L-серий считаются адекватными данным каталога, если их значения различаются на величину, меньшую ширины энергетического окна ΔE . Значение ΔE зависит как от точности проведения энергетической калибровки, так и от точности определения положения неизвестных пиков. Чем меньше ширина энергетического окна, тем меньше вероятность попадания в этот диапазон мешающих пиков. Наоборот, широкое энергетическое окно расширяет гамму возможных линий и часто приводит к расхождению процесса идентификации. В табл. 2 и 3 приведены возможные линии элементов, указанные программой, в заданных энергетических интервалах поиска - $10,84 \pm 0,1$ кэВ / L_{α} - линия висмута/ и $13,02 \pm 0,1$ / L_{β} - линия висмута/.

Таблица 2

Элемент	Линия	Энергия, кэВ
Hf	$L\gamma_2$	10,832
Hf	$L\gamma_3$	10,889
Ta	$L\gamma_1$	10,896
Ir	$L\beta_1$	10,919
Ir	$L\beta_3$	10,865
Pt	$L\beta_4$	10,853
Bi	$L\alpha_1$	10,839
Ac	$L\ell$	10,871

Таблица 3

Элемент	Линия	Энергия, кэВ
Ir	$L\gamma_3$	12,922
Pt	$L\gamma_1$	12,94
Bi	$L\beta_1$	13,023
Bi	$L\beta_2$	12,976
Po	$L\beta_4$	13,082
Th	$L\alpha_1$	12,967
Pa	$L\alpha_1$	13,119
Bk	$L\ell$	12,896

При исследовании неизвестных образцов сложного состава на примере спектров углей идентификация только по значениям энергии характеристических пиков обеспечивает необходимую, но недостаточную информацию о качественном анализе вещества. Для однозначного решения задачи необходимо учитывать и соотношение интенсивностей между линиями данной серии излучения. В программе предусмотрена возможность вывода на экран относительных долей интенсивностей всех линий К-, L- и M-серий для заданного атомного номера элемента. В табл. 4 приведена распечатка интенсивностей для $z = 83$ - висмута.

Относительные доли интенсивностей получены в приближении "тонкого слоя" без учета абсорбционных эффектов. При введении эффективного коэффициента поглощения образца, который определяется априори по известным методам ^{4/}, программа пересчитывает специфичные выходы интенсивностей с учетом абсорбционных свойств образца.

Таблица 4

Линия	Отн. инт.	Энергия, кэВ
$L\alpha_1$	100	10,839
$L\alpha_2$	10	10,73
$L\beta_1$	52	13,023
$L\beta_2$	20	12,976
$L\beta_3$	6	13,207
$L\beta_4$	4	12,689
$L\gamma_1$	9	15,245
$L\gamma_2$	1	15,575
$L\gamma_3$	2	15,706
$L\ell$	3	9,42
L_n	1	11,711

L_1 - край:	16,376 кэВ
L_2 - край:	15,699 кэВ
L_3 - край:	13,881 кэВ

Указанная процедура идентификации устойчива при отсутствии значительного перекрытия пиков. Наличие эффекта перекрытия пиков, всегда имеющего место в сложных рентгеновских спектрах, снижает эффективность алгоритмов идентификации и приводит к неоднозначности. Так, например, из-за наложения линий наличие мышьяка в спектре угля /рис. 1/ нельзя идентифицировать в присутствии свинца и брома, германия - в присутствии цинка и свинца и т.д. Использование полупроводникового детектора с лучшим энергетическим разрешением может сузить круг неидентифицируемых элементов, но не решить проблему полностью. Применение алгоритмов математической обработки спектра, осуществляющей четкое выделение фона, мешающих пиков /пики вылета, пики суммирования, пик внутренней флуоресценции и др./, расшифровку мультиплетов, приводит к полной однозначности решения задачи качественного анализа вещества. Так, например, после обработки спектра угля были идентифицированы К-линии излучения германия /см. рис. 3/, которые в исходном спектре нельзя было выявить.

3. МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОНА И ВЫЧИСЛЕНИЕ ПЛОЩАДИ ПИКОВ

В соответствии с механизмом формирования рентгеновских спектров характеристические линии элементов накладываются на фон непрерывного распределения, определяющийся интенсивностью пер-

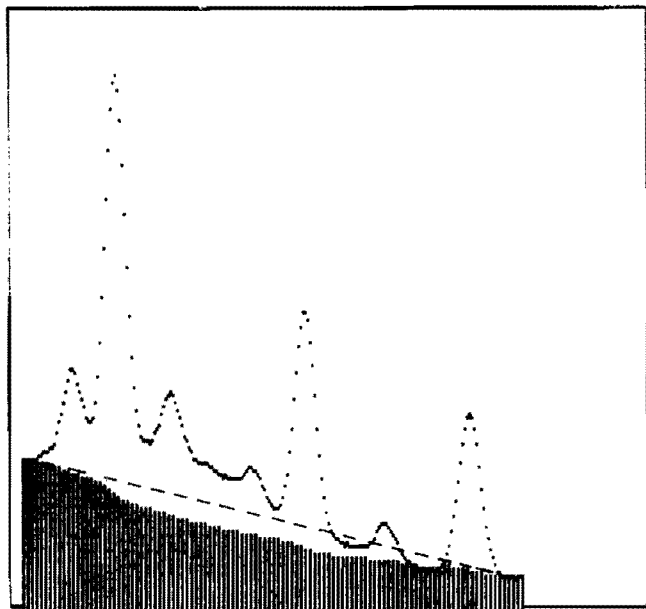


Рис. 2.

вичного излучения матричного состава образца, параметрами Si(Li)-детектора, шумов спектрометра и т.д. Интенсивность пиков рассеяния и фона непрерывного комптоновского распределения обычно составляет более половины интенсивности всего аппаратного спектра, что представляет серьезную проблему по выделению полезной информации.

Существующие классические приемы оценки фона по обе стороны пика, принятые в гамма-спектрометрии, совершенно непригодны для энергодисперсионных рентгеновских спектров из-за усиленного эффекта перекрывания пиков и нелинейности фонового вклада в области малых энергий. В связи с этим для коррекции фона в рентгенофлуоресцентном анализе применяют два альтернативных подхода - метод фильтрации и метод математического моделирования. Для эффективного применения этих методов необходим априорный объем теоретической и экспериментальной информации о механизме формирования фона.

На практике без детального знания структуры спектра на отдельных участках применяют непрерывные, гладко изменяющиеся функции энергии в виде полиномов^{/5/}. Возможность полиномиального моделирования исследована на примере спектров углей. В качестве аппроксимирующих полиномов были использованы ортогональные полиномы второй степени. В случаях, когда модель оказыва-

лась неудовлетворительной, повышали порядок полинома, проверяя значимость добавленных членов по критерию Фишера. Полученные результаты показали, что модельные расчеты связаны с рядом неопределенностей, происходящих в основном из-за отсутствия свободных участков, принадлежащих базисному фоновому распределению. По данным работы^{/6/}, например, спектральные участки рентгеновских спектров, подходящих для установки фона, составляют не более 10% от всего спектра против 70% для сложных гамма-спектров.

Полиномиальные методы аппроксимации носят эмпирический характер, не учитывающий физические процессы формирования рентгеновских спектров. В случае идеальной детектирующей системы характеристические пики полного поглощения подчиняются распределению Лоренца с шириной менее 10 эВ для элементов с атомным номером $z < 50$ ^{/7/}. Из-за наличия скачков поглощения отображенный откликом Si(Li)-детектора профиль пика имеет скачкообразный характер с точкой перегиба в центре пика. Кроме того, действие эффектов неполного собирания заряда в кристалле Si(Li)-детектора, наложения импульсов и других мешающих факторов сказывается на низкоэнергетической стороне фотопика, что приводит к завышению фонового распределения в этой части. Поэтому для аппроксимации фонового распределения была выбрана скачкообразно изменяющаяся функция с перегибом в максимуме пиков, выражающаяся соотношением^{/8/}

$$V_i = b_n + (b_m - b_n) \left(\frac{\sum_{j=n}^i N_j}{\sum_{k=n}^m N_k} \right), \quad /4/$$

где b_n и b_m - вклад фона в низкоэнергетической и высокоэнергетической частях спектра, N_j - число импульсов в канале j , V_i - величина фона, рассчитанного в канале i . Приведенное выражение одинаково применимо как для одиночных пиков, так и при сложных группах мультиплетов. На рис. 2 приведены результаты расчета фонового распределения на участке экспериментального спектра. Для сравнения и оценки ошибки штриховой линией показано распределение фона в случае линейной интерполяции.

Качество выделения фоновой составляющей спектра создает надежную предпосылку для дальнейшей обработки и вычисления площади пиков. В предположении гауссовской модели пика число импульсов Y_i в канале i записывается формулой

$$Y_i = A \exp \left[-0,5 (x_i - P)^2 / \sigma^2 \right], \quad /5/$$

где A - амплитуда пика, P - положение максимума, σ - стандартное отклонение.

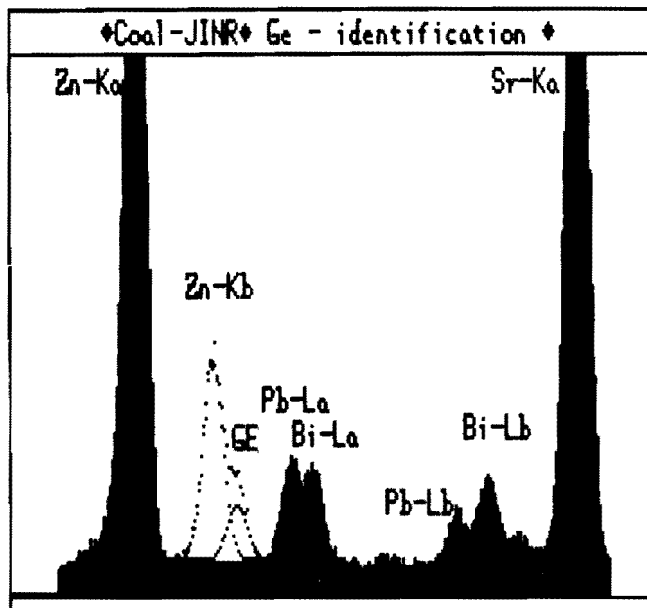


Рис. 3.

Учитывая вклад фона V_i для участка спектра, состоящего из нескольких (J) пиков, можно записать:

$$Y_i = \sum_{j=1}^J A_j G_{ij} + V_i. \quad /6/$$

Здесь

$$G_{ij} = \exp[2,77259(x_i - P_j)^2/\Delta_j^2]; \quad \Delta_j = \text{ПШПМ} \quad /7/$$

Выражение /6/ показывает, что только амплитуды A_j пиков линейно связаны с числом отсчетов Y_i в канале. Остальные параметры пиков - положение P_j и ширины Δ_j - нелинейны по отношению Y_i , что приводит к методу нелинейной подгонки параметров гауссиана. Подобные методы были реализованы во многих вычислительных параметрах, в основном на больших ЭВМ. В зависимости от числа пиков в спектре и от мощности ЭВМ время обработки составляет десятки минут /9/. Нами была реализована программа NELFIT нелинейной подгонки параметров пиков и фонового распределения на базе градиентного алгоритма Марквардта. Время обработки спектра на микроЭВМ "Правец" доходит до часа вместе с

визуализацией промежуточных этапов. В связи с этим для рутинной обработки спектров была разработана специализированная программа LINFIT, реализованная на базе линейного метода наименьших квадратов с итерационным уточнением /10/.

Алгоритм программы состоит в следующем:

1. Сглаживание спектра полиномиальным фильтром 2-й степени из пяти точек.
2. Проведение внутренней энергетической калибровки спектра по нескольким интенсивным пикам в виде

$$P = c_1 + c_2 E, \quad /8/$$

где E - энергия соответствующей линии спектра, P - точное положение максимума.

Коэффициент корреляции уравнения /8/ должен быть больше 0,999. При отсутствии интенсивных пиков число участвующих в калибровке пиков увеличивается.

Преимущество внутренней автокалибровки выявляется сильнее на пиках с низкой статистикой, точное положение которых трудно определить математически из-за статистического разброса спектрального распределения.

3. ПРОВЕДЕНИЕ КАЛИБРОВКИ НА ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЕ РАЗРЕШЕНИЕ

Калибровка энергетического разрешения осуществляется при помощи нелинейной аппроксимации профиля одиночных пиков /не менее трех/ по уравнению вида:

$$\text{ПШПМ}^2 = c_3 + c_4 E. \quad (R > 0,99). \quad /9/$$

На практике не всегда можно обеспечить выполнение условия /9/, поэтому расчет полуширины пиков осуществляется по теоретической зависимости разрешения от энергии с учетом шумов и статистики актов сбора носителей в детекторе, т.е.

$$\text{ПШПМ}^2 = \text{ПШПМ}_{\text{ш}}^2 + \text{ПШПМ}_{\text{д}}^2. \quad /10/$$

При известном разрешении реперного пика /линия 5,895 кэВ источника ^{55}Fe /, выражение /10/ трансформируется в виде:

$$\text{ПШПМ}^2 = \text{ПШПМ}_{M_n}^2 + 2735 (E - 5,895), \quad /11/$$

где ПШПМ и ПШПМ_{M_n} - полные ширины на половине максимума пика с энергией E и реперной линии ($M_n - K_{\alpha}$).

Зависимость /11/ обеспечивает необходимую для обработки спектра точность при соблюдении скорости счета, которая не должна превышать определенного предела. Исследования, проведенные на спектрометрической системе с анализатором NOKIA, показали, что адекватность уравнения /11/ сохраняется при скорости счета менее 3 тыс. импульсов в секунду.

4. Расчет нелинейных параметров пиков по зависимостям /8/ и /11/, аппроксимацией параметров уравнения /6/ путем минимизации квадратичного функционала

$$Q = \sum_i (N_i - Y_i)^2 / (n - m), \quad /12/$$

где N_i - число импульсов в канале i , Y_i - число импульсов, рассчитанное по аппроксимирующей функции:

$$Y_i = B_i + \sum_{j=1}^J A_j \exp[(x_i - P_j)^2 / R_j^2], \quad /13/$$

Здесь

$$P = c_1 + c_2 E$$

$$R_j^2 = [\text{ПШПМ}_{Mn}^2 + 2735 (E - 5,895)] / 5,5452 \cdot 10^6$$

$$B_i = b_n + (b_m - b_n) \left(\frac{\sum_{j=n}^i N_j}{\sum_{k=n}^m N_k} \right),$$

После дифференцирования по A_j системы уравнений /13/ и приравнивания к нулю частных производных получаем систему нормальных уравнений, решение которой дает значения амплитуд пиков A_j , соответствующих минимуму функционала Q .

Площади пиков рассчитываются как интеграл от распределения Гаусса по зависимости:

$$S = 1,06447 \cdot A \cdot \text{ПШПМ}. \quad /14/$$

На рис. 4-6 приведены результаты обработки спектров углей в аналитической области висмута, соответствующие концентрациям висмута 0,1%, 0,01% и 0,0010%. Таким образом, математической обработкой спектра были получены площади аналитической L_{β} -линии висмута, свободные от наложений L_{β} -линий свинца. Из рис.5 видно, что для количественного определения следовых содержаний висмута необходимо учитывать перекрытие не только с L_{β} -линией свинца, но и с K_{α} -линией рубидия, не разрешающихся с линией L_{β} -висмута.

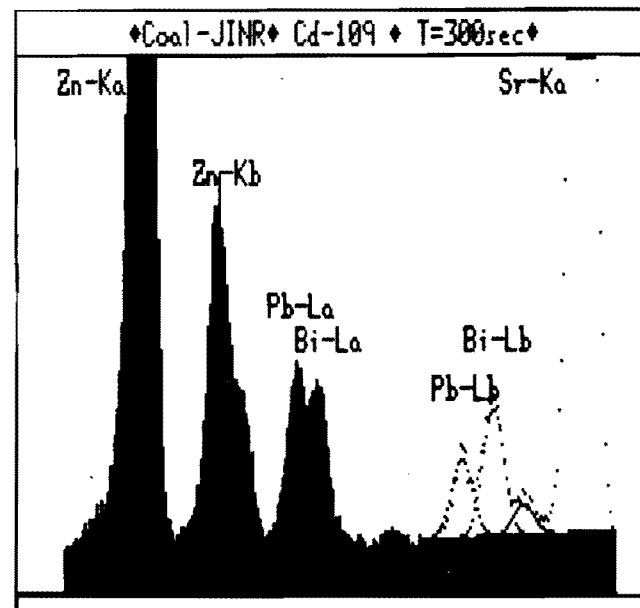


Рис. 4.

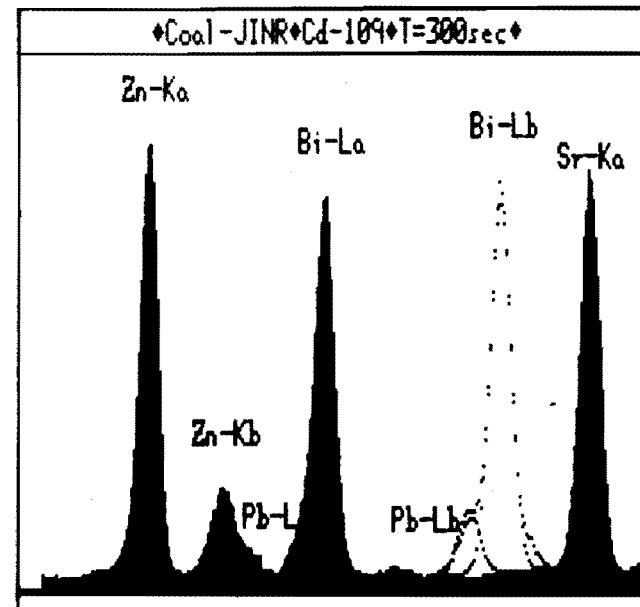


Рис. 5.

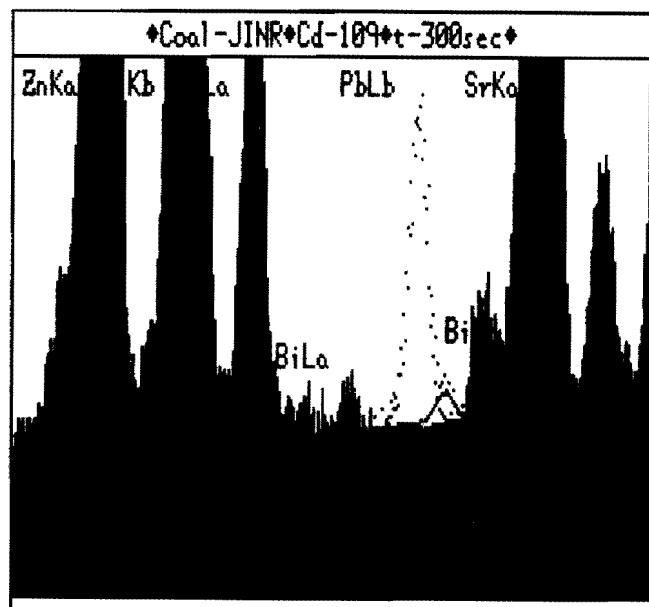


Рис. 6.

№	Диапазон	Вид уравнения	Коэфф. коррел., %
1	30-1000	$C_{Bi} = a_0 + a_1 I_{Bi}$	99,886
2	30-1000	$C_{Bi} = a_0 + a_1 I_{Bi} + a_2 I_{Bi}^2$	99,991
3	30-1000	$C_{Bi} = a_0 + a_1 I_{Bi} + a_2 I_{Bi} I_{Pb}$	99,997
4	30-10000	$C_{Bi} = a_0 + a_1 I_{Bi}$	99,840
5	30-10000	$C_{Bi} = a_0 + a_1 I_{Bi} + a_2 I_{Bi}^2$	99,975
6	30-10000	$C_{Bi} = a_0 + a_1 I_{Bi} + a_2 I_{Bi} I_{Pacc}$	99,982

С учетом среднеквадратичного отклонения рассчитанного по уравнениям 1-6 содержания висмута и рекомендованных значений эталонов в качестве оптимального аналитического уравнения было выбрано:

$$C_{Bi} = 3,109 \cdot 10^{-8} + 1,115 \cdot 10^{-6} I_{Bi} + 2,314 \cdot 10^{-11} I_{Bi}^2 \quad /16/$$

Рассчитанное по этому уравнению содержание висмута в анализируемом образце оказалось равным 8 ± 2 ppm. Полученное уравнение можно использовать для рутинного анализа углей на висмут при его содержании до 1000 ppm. В случае более высокого содержания /до 1%/ расчет осуществлялся по уравнению 6 /табл.5/.

В заключение следует отметить, что математическое обеспечение микроЭВМ "Правец" позволяет определять довольно низкое содержание тяжелых элементов, в частности висмута, в присутствии значительно более высоких концентраций соседних элементов.

Авторы выражают благодарность академику Г.Н.Флерову за постановку задачи и интерес к работе, К.А.Гаврилову - за содействие и обсуждение результатов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Журавлева Е.Л. Сообщение ОИЯИ 14-80-358, Дубна, 1980.
2. Op de Beck J. At. Energy Rev., 1975, 13, p.743.
3. Savitzky A., Golay M.J.E. Anal. Chem., 1964, 36, p.1627.
4. Voutchkov M., Op de Beck J. Bull. Chim. Belg., 1981, Vol.90, No.4.
5. Varnell L., Trischuk J. Nucl. Instr. Meth., 1969, 76, p.109.
6. Nilson K.K. X-Ray Spectrometry, 1978, Vol.7, No.1.
7. Van Espen P., Hulleens H., Adams F. X-Ray Spectrometry, 1982, Vol.9, No.3.

4. КОЛИЧЕСТВЕННЫЙ АНАЛИЗ

Предметом анализа были стандартные образцы углей, содержащих свинец, с введенным висмутом в количествах 30, 60, 100 и 1000 ppm. При помощи математической обработки характеристических спектров и градуировочных зависимостей нужно было выявить возможность определения низкого содержания висмута в присутствии сравнительно высоких концентраций свинца.

Для построения градуировочных зависимостей для висмута были исследованы уравнения связи в виде

$$C_{Bi} = a_0 + a_1 I_{Bi} + a_2 I_{Bi}^2 + a_3 I_{Bi} I_{Pb} + a_4 I_{Bi} I_{Pacc} \quad /15/$$

в диапазонах концентраций висмута $0,003\% \div 0,1\%$, $0,003\% \div 1\%$.

Коэффициенты аналитических уравнений рассчитывали методом наименьших квадратов при помощи вычислительной программы CALIB на микроЭВМ "Правец". Алгоритм программы позволяет получение аналитических уравнений в виде линейной или квадратичной связи, учитывающих как взаимное влияние мешающих элементов, так и матричный эффект по рассеянному излучению. Результаты исследований по выбору оптимального аналитического уравнения на висмут представлены в табл.5.

8. Gunnink R. UCRL-80297, Livermore, CA, 1978.
9. Иванов И.Н., Иванец В.Н., Филиппов В.В. Автоматизация активационного анализа. Энергоатомиздат, 1985, с.114.
10. Райс Дж. Матричные вычисления и математическое обеспечение. Мир, М., 1984.

Вучков М.К., Журавлева Е.Л., Караманова Ж.С. P10-87-126
 Применение персональной ЭВМ для обработки
 рентгеновских спектров

С использованием персональной ЭВМ "Правец" и многоканального анализатора "Nokia" с Si(Li) детектором разработан алгоритм обработки рентгеновских спектров углей, включающий в себя сглаживание спектра, идентификацию элементов, расшифровку мультиплетов, расчет площадей пиков. На основе полученных данных исследованы градуировочные зависимости в виде уравнений связи и получено оптимальное уравнение для количественного анализа висмута. Показано, что математическое обеспечение микроЭВМ "Правец" позволяет получить в несколько раз более высокую чувствительность анализа на тяжелые элементы, даже при значительном содержании соседних элементов.

Работа выполнена в Лаборатории ядерных реакций ОИЯИ.
 Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1987

Перевод О.С.Виноградовой

Vuchkov M.K., Zhuravleva E.L., Karamanova J.S. P10-87-126
 Microcomputer Based Software for x-Ray
 Spectrum Deconvolution

On the basis of microcomputer "Pravetz" and multichannel analyser "Nokia" with Si(Li) detector, software for qualitative and quantitative analysis are developed including smoothing of spectra, element identification, multiplet resolving, net peak areas estimation. The data from the coal spectrum processing are used for calibration curve generation of bismuth. It is shown that the x-ray software developed for microcomputer "Pravetz" assure higher order detection sensitivity for the heavy elements over wider concentration of interfering elements.

The investigation has been performed at the Laboratory of Nuclear Reactions, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1987

Рукопись поступила в издательский отдел
 26 февраля 1987 года.