

ным источником излучения / Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2015. Т. 81. № 1. Ч. II. С. 153 – 157.

## REFERENCES

1. Boldova S. S., Put'makov A. N., Labusov V. A., et al. O sozdanii pribora dlya odnovremennogo mnogoelementnogo atomno-absorbtsionnogo spektral'nogo analiza na osnove spektrometra vysokoi dispersii i istochnika nepreryvnogo spektra [On the development of a device for simultaneous multi-element atomic absorption spectral analysis based on a high-dispersion spectrometer and a continuous spectrum source] / *Zavod. Lab. Diagn. Mater.* 2015. Vol. 81. N 1. Part II. P. 148 – 153 [in Russian].
2. Garanin V. G., Neklyudov O. A., Petrochenko D. V., et al. Programmnoe obespechenie atomno-émissiionnogo spektral'nogo analiza (programma «Atom») [Software for Atomic-Emission Spectral Analysis («Atom»)] / *Zavod. Lab. Diagn. Mater.* 2012. Vol. 78. N 1. Part II. P. 69 – 74 [in Russian].
3. Semenov Z. V., Labusov V. A., Neklyudov O. A., Vashchenko P. V. Algoritm obrabotki posledovatel'nostei spektrov dlya stsintillyatsionnogo atomno-émissiionnogo spektral'nogo analiza [Algorithm for Processing Sequences of Spectra for Scintillation Atomic Emission Spectral Analysis] / *Zavod. Lab. Diagn. Mater.* 2015. Vol. 81. N 1. Part II. P. 135 – 142 [in Russian].
4. Savitzky A., Golay M. J. E. Soothing and differentiation of data by simplified least squares procedures / *Anal. Chem.* 1964. Vol. 36. P. 1627 – 1639.
5. Vashchenko P. V., Boldova S. S., Labusov V. A. Algoritm obrabotki posledovatel'nostei atomno-absorbtsiionnykh spektrov s nepreryvnym istochnikom izlucheniya [Algorithm for processing sequences of atomic absorption spectra with a continuous radiation source] / *Zavod. Lab. Diagn. Mater.* 2015. Vol. 81. N 1. Part II. P. 153 – 157 [in Russian].

УДК 543.423:543.08

## ОЦЕНКА СОДЕРЖАНИЯ ЭЛЕМЕНТОВ ПРИ АВТОМАТИЧЕСКОМ КАЧЕСТВЕННОМ АНАЛИЗЕ ВЕЩЕСТВА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ФУНКЦИИ КРОСС-КОРРЕЛЯЦИИ

© С. В. Панкратов<sup>1</sup>, В. А. Лабусов<sup>1,2</sup>

*Статья поступила 21 октября 2016 г.*

В статье описаны метод и инструментарий автоматической оценки содержания элементов по одному спектру пробы. Наличие элементов в пробе определяется методом кросс-корреляционного качественного анализа, имеющим низкую вероятность ложного срабатывания и высокое быстродействие. Содержание найденных элементов рассчитывается с помощью метода появления и усиления спектральных линий, модифицированного для использования в автоматическом режиме в современных спектральных комплексах. Инструментарий требует настройки на конкретный комплекс по ранее полученным с его использованием результатам количественного спектрального анализа. Эффективность работы инструмента продемонстрирована на примере оценки содержания элементов основы геологических порошковых проб (Si, Ti, Al, Mg, Fe, Ca, Mn) по спектрам, полученным с помощью двух разных спектральных комплексов.

**Ключевые слова:** функция кросс-корреляции; качественный анализ; оценка содержания; атомно-эмиссионные спектры; многоэлементные твердотельные детекторы.

Качественный элементный атомно-эмиссионный спектральный анализ обычно выполняют с помощью сопоставления спектральных линий, обнаруженных в зарегистрированном эмиссионном спектре (далее в тексте — в спектре) пробы, с известными линиями элементов из таблиц спектральных линий [1] или баз данных, например, базы данных спектральных линий программы «Атом» [2]. Идентификация линий является трудоемкой задачей, и здесь важную помощь оказывают специальные программные инструменты. Например, в программе «Атом» есть инструмент автоматического качественного анализа, основанный на построении кросс-корреляционной функции для ли-

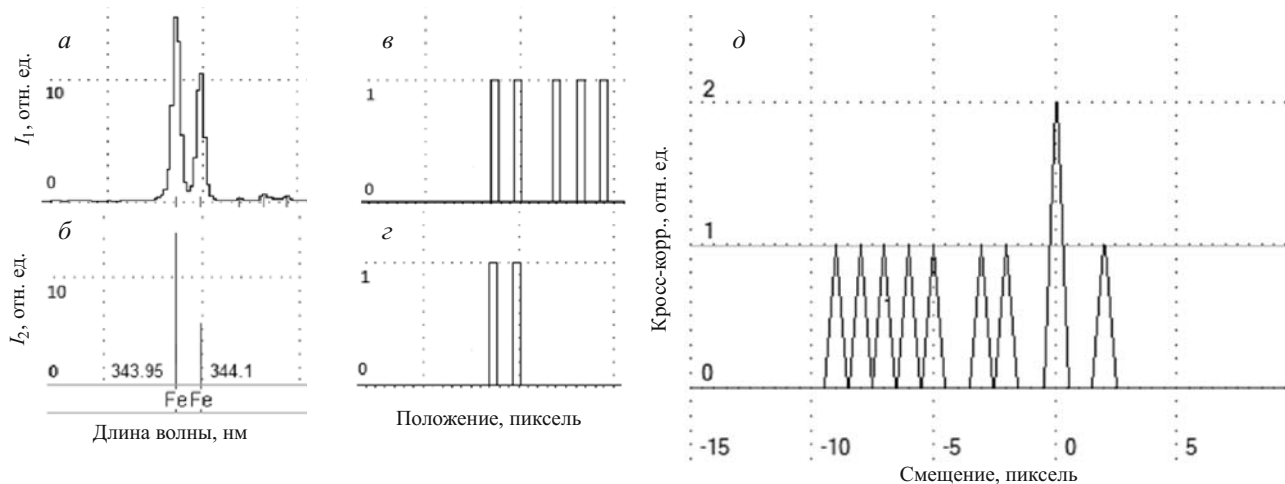
ний зарегистрированного спектра пробы и линий искомого элемента из базы данных [3]. Данный инструмент с высокой вероятностью определяет наличие элементов в пробе с количеством их линий в спектре более десяти, но не дает количественных результатов.

Практическое применение инструмента автоматического качественного анализа требует приблизительной оценки содержания найденных элементов. Такая оценка позволит определить основу пробы, семейство сплавов или геологических пород и выбрать набор градуировочных графиков для последующего количественного анализа.

Цель настоящей работы — разработка метода и соответствующего программного инструмента автоматической оценки содержания элементов, найденных с помощью кросс-корреляционного качественного анализа в геологических пробах, по одному зарегистрированному спектру.

<sup>1</sup> Институт автоматики и электрометрии СО РАН, ООО «ВМК-Оптоэлектроника», г. Новосибирск, Россия; e-mail: Steve6305@gmail.com

<sup>2</sup> Новосибирский государственный технический университет, г. Новосибирск, Россия.



**Рис. 1.** Замена пиков зарегистрированного спектра (а) и спектральных линий из базы данных (б) на набор меандров (в, г) и функция кросс-корреляции для этих данных (д)

### Качественный кросс-корреляционный анализ

Инструмент программы «Атом» для качественного кросс-корреляционного анализа пробы по одному ее атомно-эмиссионному спектру работает следующим образом [3]:

1) в спектре распознаются пики интенсивности (рис. 1, а) и заменяются на одинаковые фигуры — меандры, имеющие аналогичную длину волны, но не несущие информации о форме, фоне и интенсивности пика (см. рис. 1, в);

2) считываются линии искомого элемента из базы данных программы «Атом» (см. рис. 1, б) и заменяются на аналогичные меандры (см. рис. 1, г);

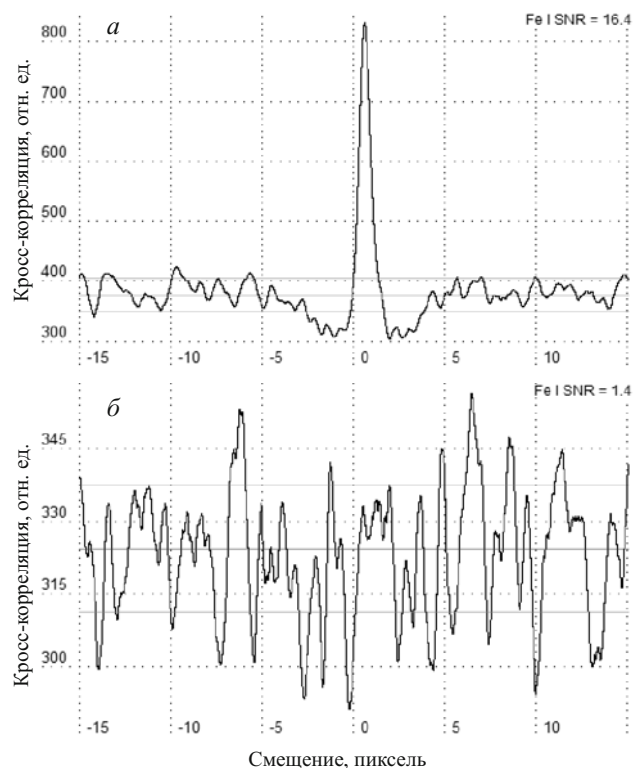
3) вычисляется кросс-корреляционная функция для полученных данных (см. рис. 1, д);

4) в кросс-корреляционной функции выполняется поиск максимума и расчет отношения сигнал/шум (ОСШ, SNR) для него;

5) если ОСШ превышает эмпирически подобранный порог, считается, что максимум корреляционной функции является статистически значимым и элемент присутствует в пробе (рис. 2, а);

6) если ОСШ не превышает порог, инструмент не способен обнаружить данный элемент (см. рис. 2, б).

С целью повышения чувствительности в инструменте применяется метод подбора оптимального количества используемых линий из базы данных, которые сортируются в порядке убывания интенсивности. В их последовательности устанавливается граница интенсивности, которая делит последовательность на сильные и слабые линии. При расчете кросс-корреляционной функции используются только сильные линии. Далее выполняется поиск оптимального значения границы интенсивности, которое достигается при максимальном значении ОСШ корреляционной функции. При смещении границы от оптимальной в сторону большей интенсивности ОСШ падает из-за уменьшения количества используемых линий из базы дан-



**Рис. 2.** Функции кросс-корреляции всех линий железа из базы данных спектральных линий со спектрами чистого железа (а) и чистого свинца (б)

ных, которые присутствуют в спектре, что приводит к снижению амплитуды корреляционного пика. При смещении границы в сторону меньшей интенсивности ОСШ падает из-за увеличения числа используемых линий, отсутствующих в спектре, что дает увеличение шума в окрестности корреляционного пика. В качестве примера на рис. 3 показано влияние на кросс-корреляционную функцию значения границы интенсивности. При значении границы, равном 0 % от максимального значения (используются все линии из базы данных), ОСШ = 12,8, при повышении этого значения

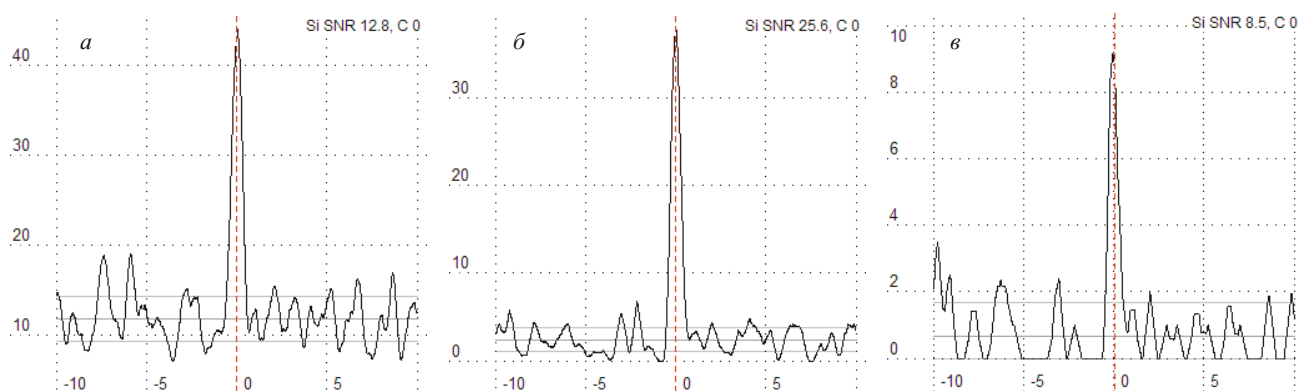


Рис. 3. Кросс-корреляционный график для кремния в стандартном образце СГД-2 при использовании всех линий из базы данных (а), только линий с интенсивностью больше 7 % (б) и больше 20 % (в) от максимальной интенсивности

Fe	248.3271	I	AK	10
	259.9396	II	AKG	3
	259.9567	I	K	3
	302.0639	I	AKG	3
	248.3271	I	AK	10
	259.8369	II	KG	10
	301.8983	I	K	100
	291.2157	I	K	300
	301.6182	I	K	1000
	290.191	I	K	3000
	290.4086	I	KG	10000

Рис. 4. Качественные линии железа в ПО «Атом»

до 7 % ОСШ возрастает до 25,6, а при дальнейшем повышении порога значение ОСШ снижается, достигая 8,5 при значении границы в 20 %.

При настройках по умолчанию (порог ОСШ = 7,5) инструмент имеет малое число ложных определений элемента (в среднем 0,1 % от числа найденных элементов, присутствие которых подтверждено другими методами) и высокое быстродействие (менее 1 с на спектр). Инструмент показал свою практическую значимость, и основным его недостатком является отсутствие оценки содержания найденных элементов.

### Метод появления и усиления линий

В настоящее время для ручного качественного анализа пробы по ее атомно-эмиссионному спектру наиболее часто применяется метод появления и усиления линий [1]. Суть данного метода состоит в визуальной идентификации известных «качественных» спектральных линий, которые различимы в спектре при содержании элемента выше определенного значения. По идентификации более чувствительных линий и отсутствию менее чувствительных делается вывод о приблизительном содержании элемента. Такой метод требует воспроизведения условий возбуждения пробы

и регистрации спектра, поэтому набор и свойства «качественных» линий различаются от одного спектрального комплекса к другому.

Разработка автоматического метода оценки содержания на основе метода появления и усиления линий имеет следующие *преимущества*:

широкое применение и хорошая изученность;

возможность быстрой реализации метода благодаря наличию в программе «Атом» информации о «качественных» линиях из таблиц Н. В. Арнаутова [1].

К *недостаткам* следует отнести:

применимость таблиц лишь для определенных приборов и условий эксперимента;

высокую погрешность метода и вероятность прочих ошибок, связанных с малым количеством качественных линий (ошибка в оценке содержания может составлять порядок величины и более).

Указанные недостатки можно преодолеть, модифицировав метод.

### Модифицированный метод появления и усиления линий

В базе данных спектральных линий программы «Атом» содержится информация об относительной интенсивности, длине волны и прочих параметрах спектральных линий. База также содержит линии для проведения полуколичественного анализа методом появления и усиления линий из таблиц Н. В. Арнаутова, составленных для дифракционных спектральных приборов ДФС-13 и ДФС-8 [1]. На рис. 4 для примера приведены линии железа в программе «Атом», а в табл. 1 — данные для железа из таблиц [1]. Видно, что концентрации различаются минимум в 3 раза, что хорошо подходит для визуальной идентификации и экономит время специалиста, однако ограничивает точность метода при автоматической работе с цифровыми данными.

Градуировочные графики (в логарифмических координатах) для определения элементов по большинству качественных линий вблизи порога обнаружения и в отсутствие мешающих линий имеют угол наклона

около 45°, поэтому для грубой оценки допустимо считать, что содержание элемента линейно зависит от интенсивности этой линии. Если  $C_{\text{threshold}}$  — содержание, при котором интенсивность  $I$  данной качественной линии достигает порогового значения  $I_{\text{threshold}}$ , то вблизи пороговой концентрации

$$C = C_{\text{threshold}} I / I_{\text{threshold}} \quad (1)$$

При использовании формулы (1) снижается зависимость оценки содержания от используемого порога интенсивности спектральных линий. Для каждого элемента рассчитывается несколько оценок содержания по нескольким линиям, что дает возможность уточнения (например, усреднения или выбора медианы).

Использование описанного в разделе «Качественный кросс-корреляционный анализ» метода подбора оптимального количества используемых линий из базы данных существенно сокращает вероятность ложной идентификации. При выборе медианы содержания по нескольким оценкам, не чувствительной к резким выбросам, ожидается стабильная работа метода с разнообразными данными.

*Настройка таблиц качественных линий* на конкретный спектральный комплекс проводится по результатам количественного спектрального анализа, проводимого с использованием этого комплекса. Для каждой «качественной» линии элемента определяется содержание, при котором интенсивность линии достигает условного порога обнаружения (интегральная интенсивность — 0,5 % от максимума), и соответствующее значение заносится в базу данных ПО «Атом» (по умолчанию база данных находится в файле «atom.mnd»). В ходе настройки из набора «качественных» линий элемента исключаются те, для которых угол наклона градуировочного графика по какому-либо причинам существенно отличается от 45°.

*Инструмент оценки содержания. Настройка и тестирование.* Модифицированный метод появления и усиления линий был реализован в ПО «Атом». В существующий инструмент качественного кросс-корреляционного анализа был добавлен столбец концентрации с отображением двух значащих цифр оценки. Внешний вид модифицированного инструмента пока-

зан на рис. 5. Инструмент был настроен и проверен на двух спектральных комплексах.

*Спектральный комплекс 1* — спектрограф ДФС-458С с анализатором МАЭС и дуговым генератором «Везувий-2» со штативом для анализа порошков методом испарения из канала графитового электрода [4]. Спектры были зарегистрированы при следующих параметрах: базовая экспозиция — 0,25 с; число накоплений — 420; режим генератора — ступенчатый: 35 с — 10 А; 35 с — 12 А; 35 с — 15 А. Использовали государственные стандартные образцы (ГСО) состава геологических объектов: СГД-2, СГ-2, ГБПг-1, СИ-1, СИ-3, ЗУА-1, СГ-1А, СГХМ-3, СЗР-4, ГСО 8634 – 2004.

Настройка таблиц качественных линий на данный спектральный комплекс проводилась для элементов, наиболее часто составляющих основу геологических проб и обнаружимых с помощью инструмента кросс-корреляционного анализа: Si, Ti, Al, Mg, Fe, Ca, Mn. Для настройки были использованы зарегистрированные в 2012 г. спектры 60 проб стандартных образцов.

Тестирование инструмента проводили по полученным в 2013 г. спектрам стандартных образцов. Для примера на рис. 5 приведены результаты оценки содержания в ГСО СГД-2. Содержания Si, Ti, Al, Mg, Fe, Ca, Mn рассчитаны по уточненным «качественным»

**Таблица 1.** Качественные линии железа для проведения количественного анализа [1]

Железо			
Спектрографы ДФС-8, ДФС-13			
Длина волны, Å	Чувствительность определения, %		Линии мешающих элементов, Å
	Испарение на электроде	Просыпка-дутье	
3020,640 I	0,0003	<0,001	Cr 3020,67
2599,565 II	<0,001	<0,001	
2599,395 I	<0,01	<0,001	
2598,369 II	0,001	0,001	
3018,983 I	0,01	0,03	Cr 3018,82
2912,16	0,03	≤0,1	Ni 3019,14
3016,185 I	0,1	0,3	Ti 2912,082
2901,910	0,3	1,0	
2904,163	1,0	2,0	

**Таблица 2.** Отношения найденного содержания к аттестованному значению, полученные без настройки базы данных

Элемент	Стандартный образец										Min	Max
	СГД-2	СГ-2	ГБПг-1	СИ-1	СИ-3	ЗУА-1	СГ-1А/1	СГХМ-3	СЗР-4	ГСО 8634–2004		
Si	0,32	0,24	0,30	0,06	0,43	0,01	0,23	0,43	0,35	*	0,01	0,43
Ti	0,29	0,21	0,21	0,20	0,29	0,17	0,23	0,37	0,20	2,36	0,17	2,36
Al	0,63	0,94	1,07	0,22	1,36	0,63	1,09	1,13	0,79	0,84	0,22	1,36
Mg	0,15	0,24	0,26	0,04	0,10	0,34	0,33	0,10	0,23	0,29	0,04	0,34
Fe	0,25	0,31	0,47	0,12	0,36	0,26	0,38	0,40	0,28	0,44	0,12	0,47
Ca	0,12	*	0,25	0,09	0,26	0,20	*	0,24	0,13	*	0,09	0,26
Mn	0,23	0,43	0,37	0,25	0,27	0,22	0,26	0,27	0,15	0,18	0,15	0,43

\* Кросс-корреляционный анализ не нашел элемента.

Элемент	Концентрация (оценка)
Si (Кремний)	20 %
Fe (Железо)	7 %
Ca (Кальций)	6.1 %
Al (Алюминий)	6 %
Mg (Магний)	3.8 %
Ti (Титан)	0.96 %
Mn (Марганец)	0.1 %
V (Ванадий)	0.016 %
Zr (Цирконий)	0.0062 %
Cr (Хром)	0.0017 %
Ni (Никель)	0.00051 %

**Fe (Железо)**  
Отношение сигнал/шум 92.9

Рис. 5. Внешний вид инструмента качественного кросс-корреляционного анализа с оценкой содержания

линиям, а содержания Ni, Cr, Zr, V — по имеющимся в базе данных линиям из таблиц [1]. В табл. 2 приведены результаты оценки содержания с использованием «качественных» линий из базы данных «Атом», содержащей данные из таблиц [1] без настройки на используемый спектральный комплекс. Для наглядности отношения найденного содержания к аттестованному значению приведены на рис. 6, а. Видно, что оценка лежит в пределах от в 100 раз заниженной до в 2,5 раза завышенной.

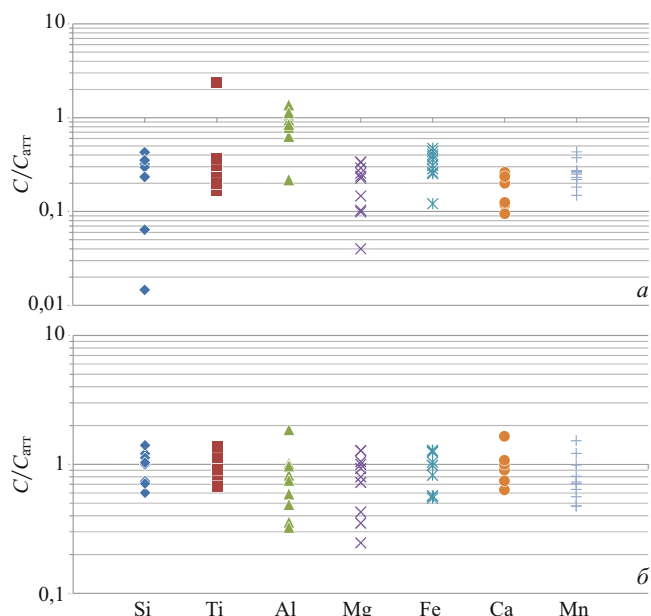


Рис. 6. Отношения найденного содержания к аттестованному значению, полученные без настройки базы данных (а) и с настройкой (б)

В табл. 3 приведены результаты оценки содержания по спектрам 2013 г. с использованием тех же «качественных» линий, но с настройкой на спектральный комплекс (эти результаты в графическом виде — на рис. 6, б). Видно, что оценка лежит в пределах от четырехкратно заниженной до в 1,9 раза завышенной,

Таблица 3. Отношения найденного содержания к аттестованному значению, полученные с настройкой базы данных

Элемент	Стандартный образец										Min	Max
	СГД-2	СГ-2	ГБПг-1	СИ-1	СИ-3	ЗУА-1	СГ-1А/1	СГХМ-3	СЗР-4	ГСО 8634–2004		
Si	1,21	0,60	0,71	1,41	0,99	1,00	1,12	1,03	0,74	0,71	0,60	1,41
Ti	1,03	0,71	0,86	1,22	0,91	1,18	1,38	1,08	0,92	0,68	0,68	1,38
Al	1,01	0,36	0,32	1,85	0,82	0,97	*	0,75	0,59	0,49	0,32	1,85
Mg	0,93	0,35	0,25	1,05	1,28	1,00	1,28	0,43	0,80	0,72	0,25	1,28
Fe	0,98	0,57	0,55	1,29	0,82	0,98	1,04	1,24	1,26	0,56	0,55	1,29
Ca	0,90	*	*	1,65	1,03	1,00	1,08	0,63	0,75	*	0,63	1,65
Mn	0,73	0,47	0,56	1,53	0,99	0,81	1,22	0,71	0,64	0,48	0,47	1,53

\* Кросс-корреляционный анализ не нашел элемента.

Таблица 4. Отношения найденного содержания к аттестованному значению, полученные без настройки базы данных

Элемент	Стандартный образец															Min	Max	
	СДПС-1	СЧТ-1	ССК-1	СКР-1	СП-1	СП-2	СГ-1А	СГД-1А	GM	СГ-3	BM	ТВ	СТ-2	СГД-2	ССВ-1			СБР-1
Si	1,16	0,78	1,06	0,97	0,77	0,90	1,22	1,15	0,85	1,09	1,17	0,92	1,07	1,15	1,37	1,03	0,77	1,37
Ti	0,81	1,00	1,18	0,94	0,93	1,23	1,23	0,77	1,10	1,31	0,99	1,02	0,99	1,08	1,72	0,96	0,77	1,72
Al	0,99	0,88	0,97	0,96	0,69	0,85	0,89	1,00	0,63	1,15	0,98	1,10	0,98	1,24	1,36	1,71	0,63	1,71
Mg	0,96	0,79	1,28	0,97	0,75	1,15	*	1,33	1,03	1,50	1,33	1,21	1,26	1,39	1,99	1,52	0,75	1,99
Fe	1,16	0,86	1,06	0,85	0,79	1,10	1,28	1,19	1,07	1,14	1,33	0,97	1,18	1,26	1,67	*	0,79	1,67
Ca	*	1,40	1,34	*	0,84	*	*	0,79	0,95	*	1,19	*	0,70	0,96	1,41	*	0,70	1,41
Mn	1,29	0,97	1,13	0,85	1,00	1,19	1,23	1,08	1,30	0,71	1,27	0,51	1,46	1,42	1,30	1,03	0,51	1,46

\* Кросс-корреляционный анализ не нашел элемента, либо его содержание не аттестовано.



Таблица 5. Отношения найденного содержания к аттестованному значению, полученные с настройкой базы данных

Элемент	Стандартный образец															Min	Max	
	СДПС-1	СЧТ-1	ССК-1	СКР-1	СП-1	СП-2	СГ-1А	СГД-1А	GM	СГ-3	BM	ТВ	СТ-2	СГД-2	ССВ-1			СБР-1
Si	4,28	0,19	0,27	0,24	0,19	0,23	0,32	0,27	0,27	0,29	0,35	0,17	0,25	0,26	0,41	0,34	0,17	4,28
Ti	14,17	0,17	0,07	0,09	0,05	0,12	0,18	0,18	0,14	0,18	0,06	0,06	0,06	0,07	0,11	0,14	0,05	14,17
Al	8,90	0,09	0,10	0,10	0,07	0,08	0,09	0,10	0,07	0,12	0,09	0,12	0,10	0,12	0,11	0,19	0,07	8,90
Mg	26,13	0,03	0,05	0,04	0,03	0,05	*	1,82	0,04	0,06	1,84	0,05	0,05	0,05	0,11	0,07	0,03	26,13
Fe	0,06	0,07	0,03	0,03	0,02	0,03	0,04	*	0,03	0,04	0,03	0,03	0,04	0,04	0,05	*	0,02	0,07
Ca	*	0,12	0,10	*	0,10	*	*	0,08	0,11	*	0,12	*	0,08	0,10	0,15	*	0,08	0,15
Mn	0,46	0,38	0,30	0,30	0,27	0,31	0,24	0,05	0,45	0,17	0,31	0,14	0,36	0,34	0,29	0,19	0,05	0,46

\* Кросс-корреляционный анализ не нашел элемента, либо его содержание не аттестовано.

что показывает эффективность использования настройки базы данных на используемый комплекс.

Спектральный комплекс 2 — спектрограф PGS-2 с анализатором МАЭС (спектральный диапазон — 200–350 нм) и дуговым аргоновым двухструйным плазмотроном [5]. Спектры были зарегистрированы при следующих параметрах: базовая экспозиция — 0,25 с; число накоплений — 160. Использовали следующие ГСО состава геологических объектов: СДПС-1, СЧТ-1, ССК-1, СКР-1, СП-1, СП-2, СГ-1А, СГД-1А, GM, СГ-3, BM, ТВ, СТ-2, СГД-2, ССВ-1, СБР-1.

Результаты тестирования инструмента до настройки на этот спектральный комплекс приведены в табл. 4 и на рис. 7, а. Видно, что до настройки оценка лежала в диапазоне от в 50 раз заниженной до в 26 раз завышенной. Результаты тестирования после настройки приведены в табл. 5 и на рис. 7, б. После настройки оценка лежит в диапазоне от заниженной в 2 раза до завышенной в 2 раза.

Таким образом, разработан метод автоматической оценки содержания химических элементов в пробе по одному ее атомно-эмиссионному спектру, основанный на модифицированном методе появления и усиления спектральных линий. Метод интегрирован в инструмент «Кросс-корреляционный качественный анализ» программы «Атом». Инструмент протестирован на спектрах 10 и 16 стандартных образцов геологических порошковых проб соответственно при настройке базы данных на два конкретных спектральных комплекса для оценки содержания Si, Ti, Al, Mg, Fe, Ca, Mn. Для полученных при использовании комплекса на основе спектрографа ДФС-458С 176 оценок максимальная ошибка составила 4 раза, а для 103 оценок, полученных при использовании комплекса на основе спектрографа PGS-2 — 2 раза. Результаты тестирования показали перспективность разработанного метода для решения практических задач.

Авторы выражают благодарность И. Е. Васильевой (Институт геохимии им. Виноградова СО РАН) и А. С. Черевко (Институт почвоведения и агрохимии СО РАН) за предоставленные результаты анализа

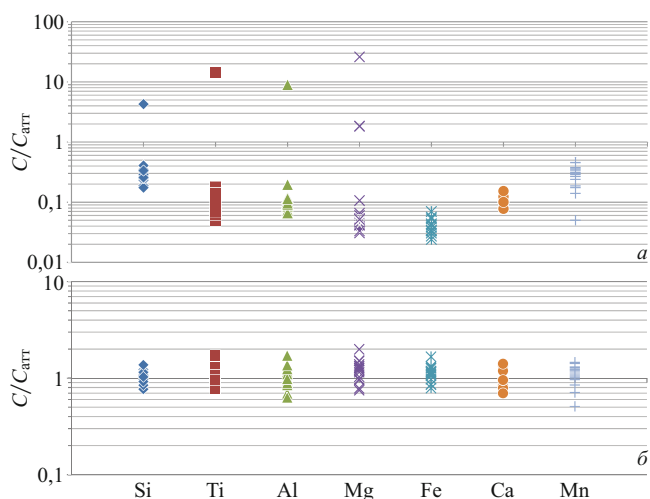


Рис. 7. Отношения найденного содержания к аттестованному без настройки базы данных (а) и с настройкой (б) для комплекса PGS-2

ГСО состава геологических объектов для тестирования разработанного инструмента.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Арнаутков Н. В., Глухова Н. М., Яковлева Н. А. Приближенный количественный спектральный анализ природных объектов. Таблицы появления и усиления спектральных линий. — Новосибирск: Наука, 1987. — 103 с.
2. Гаранин В. Г., Неклюдов О. А., Петроченко Д. В. и др. Программное обеспечение атомно-эмиссионного спектрального анализа. Программа «Атом» / Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2015. Т. 81. № 1. Ч. II. С. 121–127.
3. Панкратов С. В., Лабусов В. А., Неклюдов О. А. Качественный элементный анализ вещества с использованием функции кросс-корреляции / Аналитика и контроль. 2013. Т. 17. № 1. С. 33–40.
4. Васильева И. Е., Шабанова Е. В. Дуговой атомно-эмиссионный анализ для исследования геохимических объектов / Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2012. Т. 78. № 1. Ч. II. С. 14–24.
5. Черевко А. С., Морозова А. А. Исследование матричных помех в атомно-эмиссионной спектрометрии с дуговым аргоновым двухструйным плазмотроном / Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2017. Т. 83. № 1. Ч. II. С. 90–97.

## REFERENCES

1. Arnautov N. V., Glukhova N. M., Yakovleva N. A. Priblizhennyyi kolichestvennyy spektral'nyy analiz prirodnykh ob'ektov. Tablitsy povayleniya i usileniya spektral'nykh linii [An approximate quantitative spectral analysis of natural objects. Tables of emergence and strengthening of spectral lines]. — Novosibirsk: Nauka, 1987. — 103 p. [in Russian].

2. **Garanin V. G., Neklyudov O. A., Petrochenko D. V., et al.** Sovremennoe programmnoe obespechenie dlya provedeniya AES analiza. Programma «Atom» [Software for atomic emission spectral analysis. "Atom" software] / *Zavod. Lab. Diagn. Mater.* 2015. Vol. 81. N 1. Part II. P. 121 – 127 [in Russian].
3. **Pankratov S. V., Labusov V. A., Neklyudov O. A.** Kachestvennyi élementnyi analiz veshchestva s ispol'zovaniem funktsii kross-korrelyatsii [Qualitative elemental analysis using a cross-correlation function] / *Analit. Kontrol'.* 2013. Vol. 17. N 1. P. 33 – 40 [in Russian].
4. **Vasil'eva I. E., Shabanova E. V.** Dugovoi atomno-émissiionnyi analiz dlya issledovaniya geokhimiicheskikh ob"ektov [Arc atomic-emission analysis in geochemical research] / *Zavod. Lab. Diagn. Mater.* 2012. Vol. 78. N 1. Part II. P. 14 – 24 [in Russian].
5. **Cherevko A. S., Morozova A. A.** Issledovanie matrichnykh pomekh v atomno-émissiionnoi spektrometrii s dugovym argonovym dvukhstruinyim plazmotronom [Investigation of matrix interference in atomic emission spectrometry with a two-jet arc argon plasmatron] / *Zavod. Labor. Diagn. Mater.* 2017. Vol. 83. N 1. Part II. P. 90 – 97 [in Russian].

УДК 543.423:543.421:543.08

## НОВЫЕ МОДУЛИ «ЭКСПОРТ СПЕКТРОВ» И «ИНФОРМАЦИЯ ИЗ СПЕКТРА» ПРОГРАММЫ «АТОМ»

© **З. В. Семенов<sup>1,2</sup>, О. А. Неклюдов<sup>2,3</sup>, В. Г. Гаранин<sup>2,3</sup>**

*Статья поступила 18 октября 2016 г.*

Представлены новые программные модули для ПО «Атом» — модуль экспорта спектральных данных в файлы различных форматов и модуль оперативного получения информации, прикрепленной к спектрам таблицы анализа. Модуль экспорта позволяет экспортировать интегральные спектры и спектры с разрешением во времени во внешние файлы. Это дает возможность обрабатывать полученные с применением анализатора МАЭС спектральные данные во внешнем программном обеспечении, таком как табличные редакторы, программы численного расчета, моделирования, математической обработки. В частности, это требуется для разработки новых алгоритмов обработки спектрального сигнала. Модуль визуализации информации из спектра позволяет специалисту выводить информацию, прикрепленную к хранилищу спектров, в виде дополнительных столбцов в таблице анализа, повышая тем самым оперативность и удобство работы в ПО «Атом».

**Ключевые слова:** атомно-эмиссионный спектральный анализ; абсорбционный спектральный анализ; экспорт данных; хранение спектральной информации.

В программном обеспечении (ПО) «Атом 3.3» представлено множество инструментов для обработки интегральных и сцинтилляционных спектров, спектральных данных по атомной эмиссии [1] и абсорбции, построения градуировочных графиков по образцам сравнения, ручного и автоматического профилирования [2], математических операций со спектрами и множество других алгоритмов и инструментов для обработки спектральных данных, полученных с использованием спектрального комплекса, оснащенного анализатором МАЭС.

В ряде случаев возникает необходимость обработки полученных с применением анализатора МАЭС спектральных данных в другом ПО, например, в табличных редакторах Microsoft Excel, LibreOffice Calc или в ПО математической обработки Matlab/Octave/Mathematica. Для этого необходимо

осуществить экспорт спектральных данных из ПО «Атом» с преобразованием в стандартные или специализированные форматы.

Кроме этого, при работе специалиста с таблицей анализа в ПО «Атом» часто необходимо оперативно просматривать различные данные, прикрепленные к зарегистрированным спектрам. В качестве удобного и привычного решения данной задачи было предложено создать настраиваемый модуль-столбец для таблицы анализа, который бы позволил извлекать и выводить такие данные специалисту.

Цель работы — ознакомить специалистов с новым программным модулем программы «Атом», позволяющим экспортировать спектральные данные, включая последовательности спектров во времени, в другое программное обеспечение, а также модулем для получения оперативной и удобной визуальной информации, прикрепленной к спектрам таблицы анализа в виде дополнительных столбцов.

*Модуль экспорта спектров.* Возможность экспорта спектральных данных с преобразованием во внешние форматы предусмотрена в ПО «Атом» в окне сохранения текущего спектра, в том числе поддержива-

<sup>1</sup> Институт автоматизации и электрометрии СО РАН, г. Новосибирск, Россия.

<sup>2</sup> ООО «ВМК-Оптоэлектроника», г. Новосибирск, Россия; e-mail: info@vmk.ru

<sup>3</sup> Институт вычислительных технологий СО РАН, г. Новосибирск, Россия.