

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-émissionnyi analiz dlya issledovaniya geokhimicheskikh 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-émissionnoi spektrometrii s dugovym argonovym dvukhstruynym 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^{1,2}, О. А. Неклюдов^{2,3}, В. Г. Гаранин^{2,3}

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-

¹ Институт автоматизации и электрометрии СО РАН, г. Новосибирск, Россия.

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

³ Институт вычислительных технологий СО РАН, г. Новосибирск, Россия.

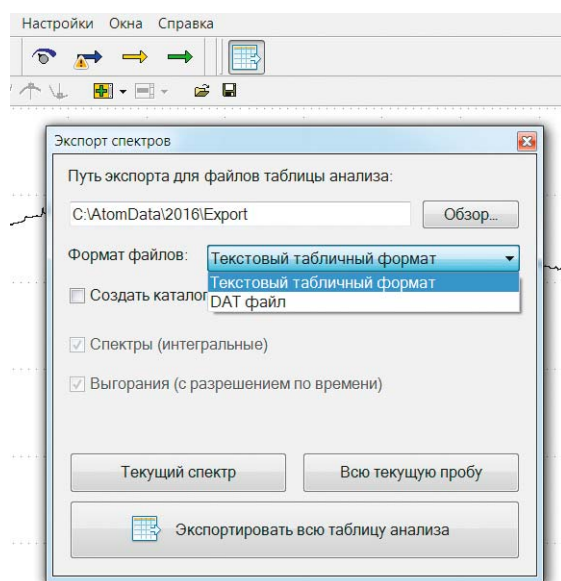


Рис. 1. Модуль пакетного экспорта спектров и выгораний в открытые форматы данных

ются текстовый табличный стандартный формат и расширенный формат с указанием разбиения спектра на кристаллы и отметками о «зашкалах» фотодиодов. Однако в ряде случаев этого недостаточно, поскольку:

- 1) отсутствует возможность автоматического сохранения всех спектров таблицы анализа или выбранной пробы, возможно лишь сохранение вручную каждого спектра отдельно;
- 2) отсутствует экспорт выгораний (последовательности спектров во времени), связанных с экспортируемыми интегральными спектрами;
- 3) поддерживается только текстовый общий (неспециализированный) формат данных.

Эти ограничения не позволяют применить данный способ экспорта спектров для экспорта больших объемов данных и анализа алгоритмов, которые работают с выгораниями, например, сцинтилляционных и абсорбционных алгоритмов обработки сигнала.

Для решения данной задачи был разработан модуль «Экспорт спектров», интерфейс которого представлен на рис. 1. Данный модуль поддерживает экспорт текущего спектра, всех спектров текущей пробы или всех спектров таблицы анализа одновременно.

При экспорте необходимо выбрать формат файлов. На данный момент поддерживается два формата — универсальный табличный текстовый формат (совместимый с текстовыми редакторами Excel, Calc и др.) и специализированный формат DAT. Экспорт происходит в иерархическую структуру каталогов, которая зависит от выбранного формата. При этом экспорт, прогресс которого индицируется пользователю, происходит в дополнительном программном потоке, благодаря чему модуль не теряет отзывчивости и позволяет корректно прервать экспорт большого количества данных в случае необходимости.

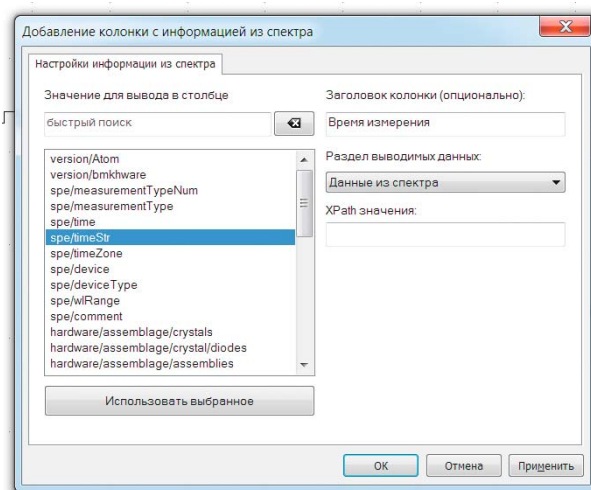


Рис. 2. Настройки модуля-столбца «Информация из спектра» для таблицы анализа

В режиме экспорта в табличный текстовый формат как интегральные спектры, так и выгорания сохраняются в отдельные файлы, причем формат файлов интегральных спектров совпадает с форматом экспорта «расширенный» в ПО «Атом», что обеспечивает совместимость с ручным экспортом.

Столбец «Информация из спектра». При регистрации спектральных данных в ПО «Атом» и последующем занесении их в таблицу анализа к спектрам приписывается различная информация:

- дата и время измерения, версия использованной программы;
- тип прибора и его спектральный диапазон;
- настройки, при которых произведено измерение, такие как длительность экспозиции, обжига, базовой экспозиции;
- характеристики профилирования прибора;
- состояние темного сигнала (накопления, время измерения);
- данные от генератора дуги и др.

Вся данная информация присутствует в сохраняемых SPD-файлах и привязана к зарегистрированным спектрам в таблице анализа. Данная информация хранится в формате расширяемого языка разметки XML, который является стандартизированным открытым форматом и имеет чрезвычайно широкое распространение в современном ПО. Достоинством данного подхода является то, что различные компоненты ПО «Атом», в том числе работающие напрямую с устройствами, могут добавлять свою информацию к основному хранилищу спектра, и она также сохранится в SPD-файле для дальнейшего использования.

В ПО «Атом» данная информация, прикрепленная к спектрам, доступна в окне свойств выбранного спектра в закладке «xml». Однако при работе с достаточно большим количеством спектров таблицы анализа данный способ просмотра не всегда удобен. Часто специалисту нужно контролировать во время измерений

Cu 4										Время измерения						
	Cu 324.7532		Cu 327.3954		Fe 302.1073		Mg 285.2127			Время измерения		Профилирование	Обжиг	Время темного сигнала		
	I/ср	C	I/ср	C	I/ср	C	I/ср	C								
Cu 4		0.160		0.160												
(1)	3.19e-5	0.0945	1.04e-5	0.117	1.76e-7		2.46e-6	0.0435		23/06/15 12:15:00	1 x 2048	0.01		23/06/2015 10:06		
(2)	3.53e-5	0.108	1.09e-5	0.124	3.27e-7		2.06e-5	2.95		23/06/15 12:17:55	1 x 2048	0.01		23/06/2015 10:06		
(3)	3.60e-5	0.110	1.13e-5	0.129	3.71e-7		5.46e-6	0.212		23/06/15 12:21:15	1 x 2048	0.01		23/06/2015 10:06		
оско, %	6.4	8.1	4.4	4.8	35		100	150								
Cu 3		0.800		0.800												
(1)	0.000128	0.554	5.52e-5	0.729	2.56e-7		2.18e-5	3.31		23/06/15 12:26:50	1 x 2048	0.01		23/06/2015 10:06		
(2)	0.000150	0.682	7.67e-5	1.05	4.56e-6		1.16e-6	0.00993		23/06/15 13:36:45	1 x 2048	0.01		23/06/2015 13:33		
(3)	0.000150	0.682	7.72e-5	1.05	3.08e-6		2.89e-7	0.000...		23/06/15 13:41:07	1 x 2048	0.01		23/06/2015 13:33		
(4)	0.000152	0.693	7.79e-5	1.06	4.90e-6		5.18e-6	0.192		23/06/15 13:43:39	1 x 2048	0.01		23/06/2015 13:33		
оско, %	8.0	10	0.79	0.86	66		140	180								
Cu 2		4.00		4.00												
(1)	0.000644	4.38	0.000316	4.92	5.78e-6		7.66e-5	39.8		23/06/15 13:45:20	1 x 2048	0.01		23/06/2015 13:33		
(2)	0.000646	4.40	0.000311	4.83	4.52e-6		1.40e-5	1.38		23/06/15 13:47:09	1 x 2048	0.01		23/06/2015 13:33		
(3)	0.000640	4.35	0.000302	4.68	4.04e-6		7.11e-5	34.4		23/06/15 13:48:43	1 x 2048	0.01		23/06/2015 13:33		
оско, %	0.43	0.55	2.3	2.5	19		64	83								
Cu 1		20.0		20.0												
(1)	0.00258	25.8	0.00123	21.7	6.28e-6		5.62e-5	21.6		23/06/15 13:50:33	1 x 2048	0.01		23/06/2015 13:33		
(2)	0.00255	25.4	0.00123	21.8	5.99e-6		3.17e-5	6.93		23/06/15 13:52:49	1 x 2048	0.01		23/06/2015 13:33		

Рис. 3. Столбцы дополнительной информации из спектра в таблице анализа

какой-то определенный параметр для многих или всех параллельных (спектров). Перебирать все спектры отдельно очень затруднительно и неэффективно. Для решения этой задачи был разработан модуль-столбец (СОМ-объект), который позволяет отобразить в таблице анализа столбец с необходимой информацией из спектра. Окно настроек данного модуля приведено на рис. 2. В рамках табличной парадигмы работы без дополнительных действий специалист видит одно или несколько необходимых полей из данных, прикрепленных к спектру в формате разметки XML. Для просмотра более одного поля информации можно добавить несколько столбцов такого типа (рис. 3) и указать каждому необходимую настройку — какое поле в данном столбце выводить.

Удобство и оперативность работы специалиста являются крайне важными характеристиками любого программного обеспечения, поэтому в ПО «Атом» постоянно добавляются различные инструменты и алгоритмы, а также совершенствуются существующие. В частности, создание модуля-инструмента «Экспорт спектров» позволило решить задачи экспорта спектральных данных, полученных с применением МАЭС, в различные форматы, а создание модуля-столбца «Информация из спектра» — оперативно визуализировать информацию, прикрепленную к хранилищу спектров в ПО «Атом».

Результаты данной работы получили применение в атомно-эмиссионном и абсорбционном спектраль-

ном анализе, в частности, для создания новых алгоритмов обработки спектральных данных с разрешением по времени [3].

ЛИТЕРАТУРА

1. Семенов З. В., Лабусов В. А., Неклюдов О. А., Ващенко П. В. Алгоритм обработки последовательностей спектров для сцинтилляционного атомно-эмиссионного спектрального анализа / Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2015. Т. 81. № 1. Ч. II. С. 135 – 142.
2. Панкратов С. В., Лабусов В. А., Неклюдов О. А., Ващенко П. В. Автоматическая градуировка спектрометров с анализаторами МАЭС по длинам волн (профилирование) / Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2015. Т. 81. № 1. Ч. II. С. 128 – 134.
3. Ващенко П. В., Болдова С. С., Лабусов В. А. Алгоритм обработки последовательностей атомно-абсорбционных спектров с непрерывным источником излучения / Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2015. Т. 81. № 1. Ч. II. С. 153 – 157.

REFERENCES

1. Semenov Z. V., Labusov V. A., Neklyudov O. A., Vashchenko P. V. Algorithm obrabotki posledovatel'nostei spektrov dlya stsintillyatsionnogo atomno-émissionnogo 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].
2. Pankratov S. V., Labusov V. A., Neklyudov O. A., Vashchenko P. V. Avtomaticheskaya graduirovka spektrometrov s analizatorami MAÉS po dlinam voln (profilirovanie) [Automatic wavelength calibration of the spectrometers with MAES analyzers (profiling)] / Zavod. Lab. Diagn. Mater. 2015. Vol. 81. N 1. Part II. P. 128 – 134 [in Russian].
3. Vashchenko P. V., Boldova S. S., Labusov V. A. Algoritim obrabotki posledovatel'nostei atomno-absorbtsionnykh 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].