

**РАЗРАБОТКА ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКОЙ
СИСТЕМЫ ДЛЯ ОБЕСПЕЧЕНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТОВ
В ЭМИССИОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ**

Е. В. Лутковская

Спектральный анализ играет очень важную роль в науке и практической деятельности человека, так как он является одним из наиболее чувствительных и надежных методов определения состава веще-

ства. Он применяется в аналитической химии, металлургической промышленности, медицине и экологии.

Спектральный анализ вещества выполняют специалисты высокой квалификации. Они должны владеть методиками подготовки проб и проведения экспериментов на спектрометре, способами обработки полученных данных и обширной информацией о спектрах различных атомов и их особенностях.

Подготовка таких специалистов требует больших затрат времени и материальных средств, а их работа связана с использованием справочной литературы и обработкой большого объема экспериментальных данных. В силу этого возникает необходимость в создании специальных инструментальных средств, обеспечивающих возможность проведения спектрального анализа при меньших затратах на обучение специалистов и обработку результатов измерений.

Цель настоящей работы заключается в разработке именно такой информационно-аналитической системы (ИАС). Ее задачами являются:

- хранение экспериментальных и методических данных;
- статистическая обработка данных;
- быстрый поиск информации;
- удобный интерфейс.

Работа выполнена на базе атомного эмиссионного спектрометра с индуктивно-связной плазмой (ИСП). Эта система обладает хорошими аналитическими характеристиками. Это опытный образец прибора, созданный в лаборатории института молекулярной и атомной физики НАН РБ. В работе использованы данные, полученные в результате экспериментов по определению предельно малых концентраций веществ в продуктах питания.

Приведем методику атомного эмиссионного эксперимента [1]. Определение неизвестных концентраций элементов в пробах различного состава с помощью ИСП-спектрометра проводится методом сравнения величины интенсивности аналитической спектральной линии ΔI или площади под ее контуром ΔS (рис. 1), полученных при этой концентрации, с калибровочным графиком, полученным по ряду предварительно приготовленных эталонных растворов. Обе величины (ΔI и ΔS) в области малых концентраций имеют линейную зависимость от концентрации.

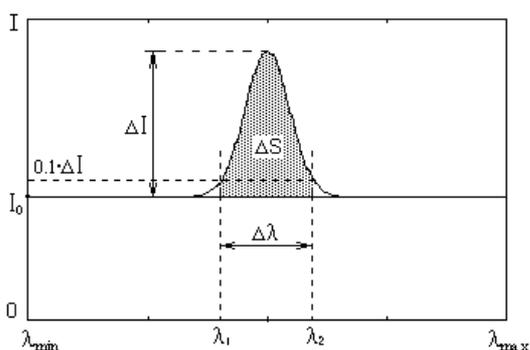


Рис. 1. Параметры скана

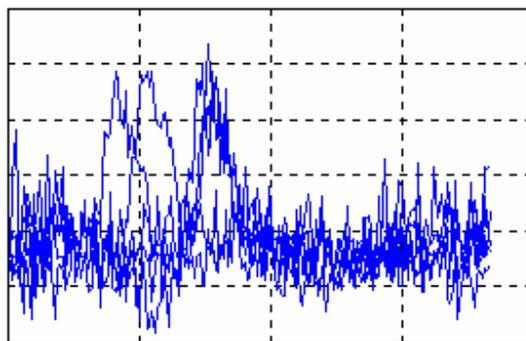


Рис. 2. Искажения экспериментальных данных

На практике получаемые сканы являются зашумленными и сдвинутыми относительно друг друга (рис. 2) [2], поэтому снимают несколько сканов и проводят статистическую обработку полученных данных:

1. Сканы зашумлены в результате неидеальности ФЭУ, шумов в линии передачи и т.д. Для устранения шумов используется низкочастотная цифровая фильтрация.
2. В результате погрешностей монохроматора сканы могут оказаться смещенными по длине волны. Для совмещения контуров линий можно воспользоваться корреляционными функциями между полученным сканом и неким эталонным сканом. Максимум корреляционной функции соответствует отклонению максимума аналитической линии от центра скана.
3. Свечение факела недостаточно стабильно, поэтому возможен дрейф интенсивности фонового излучения. Для совмещения базовых линий различных сканов вычитают из отсчетов сканов их математические ожидания.

Данные, которые необходимо хранить в системе, являются массивами однотипной связанной информации, поэтому работа ИАС построена на основе баз данных (БД).

В качестве модели данных выбрана реляционная модель, когда БД представляется в виде совокупности связанных таблиц [3]. В результате проведенного анализа данных выделены объекты и связи БД и построена схема данных (рис. 3). Схема данных удовлетворяет трем нормальным формам теории нормализации.

Хранящиеся данные относятся к одной из двух областей: эксперимент либо методика. В результате было решено основную БД разбить логически на две подчасти: экспериментальную БД и методическую БД. Физически эти подчасти являются частями одной большой БД.

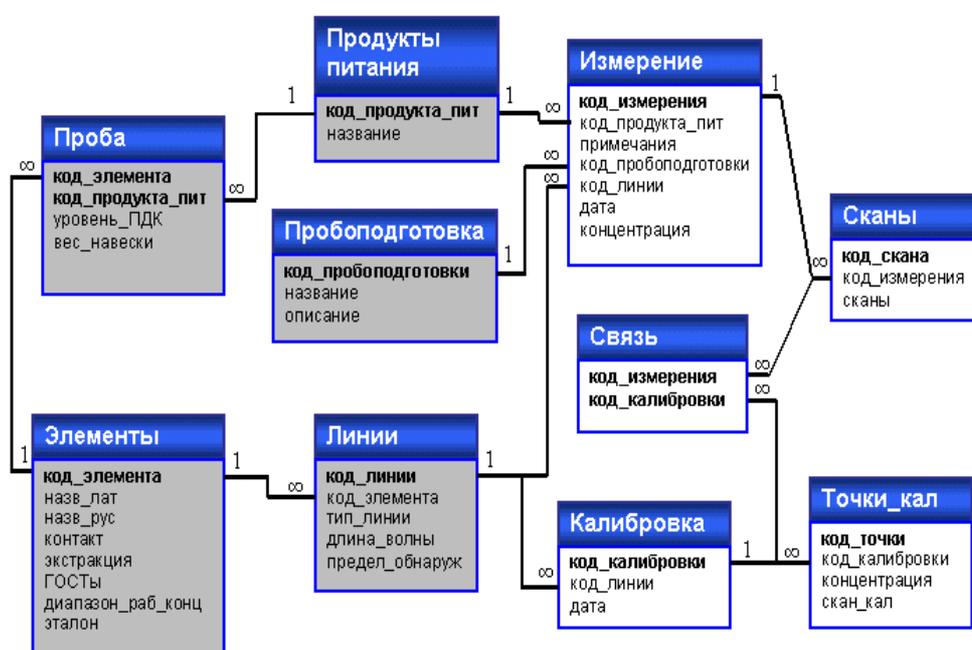


Рис. 3. Схема данных БД: белые таблицы относятся к экспериментальной БД, серые таблицы – к методической БД

Методическая БД. Ее объекты выделены серым цветом. Методическая БД содержит справочную информацию по пробоподготовке и элементам (объекты Элементы, Линии, Пробоподготовка и Продукты питания) и сведения из ГОСТов (объект Проба). Эта БД является основой для помощи.

Экспериментальная БД. Выделена белым цветом. Здесь хранятся результаты экспериментов (объекты Измерения и Сканы) и калибровки (объекты Калибровка и Сканы) и связи калибровки и эксперимента (объект Связь).

На основе этой схемы данных была разработана ИАС в среде *C++Builder*. Она позволяет хранить и обрабатывать данные, осуществлять поиск данных, предоставляет справочную информацию о проведении эксперимента. Главная форма (рис. 4) выводит результаты одного измерения. Отсюда можно произвести импорт и экспорт данных (кнопки *Import* и *Export*), визуализацию выбранного скана (кнопка *Preview*) и статистическую обработку измерения (кнопка *Prepare*). С помощью меню можно осуществить просмотр других таблиц (меню *Table*), организовать поиск данных (меню *Tools/Filter*) и вызов помощи.

Результаты работы использованы в Институте молекулярной и атомной физики Национальной академии наук Беларуси.

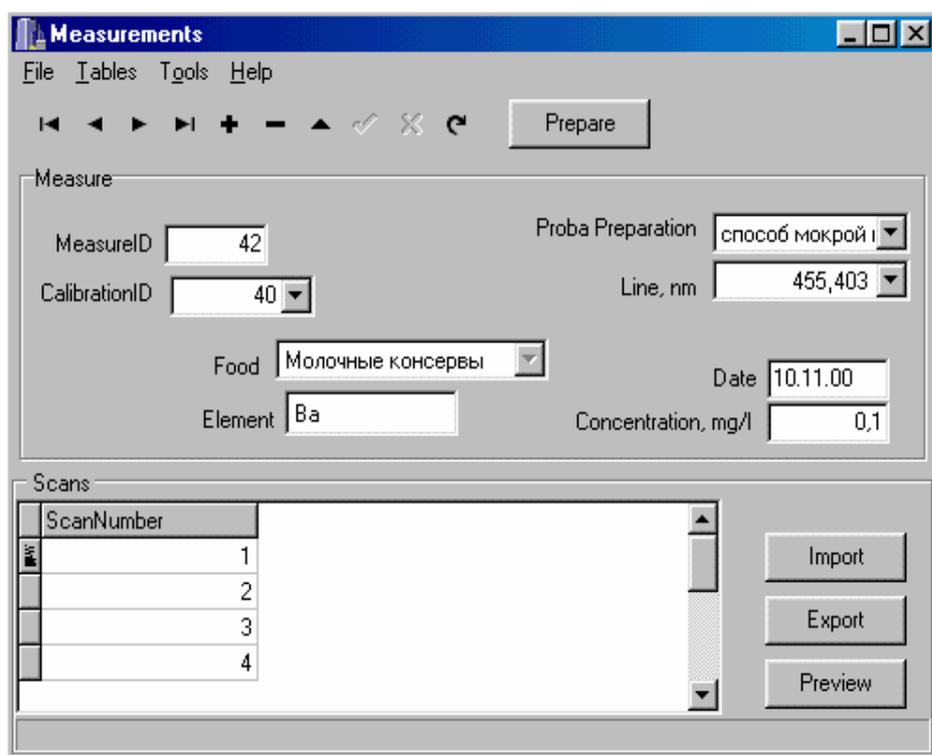


Рис. 4. Главная форма

Литература

1. *Исаевич А. В., Козловский А. С., Мисаков П.Я.* Исследование аналитических и метрологических характеристик атомно-эмиссионного спектрометра на основе индуктивно-связанной плазмы. Препринт № 6 ИМАФ НАН Беларуси. Мн., 1997.
2. Повышение точности определения элементов в атомно-эмиссионном анализе / *А. В. Исаевич, А. С. Козловский, В. М. Лутковский, П. Я. Мисаков, П. В. Назаров* // Вести НАН РБ. 2001. № 2. С.80–85.
3. *Мартин Дж.* Организация баз данных в вычислительных системах. М.: Мир, 1980.