



**Косьянов П.М.**  
 д.ф.-м.н., профессор Тюменский  
 индустриальный университет  
 kospiter2012@yandex.ru

# КОМПЬЮТЕРНАЯ МОДЕЛЬ РЕНТГЕНОФЛУОРЕСЦЕНТНОГО АНАЛИЗА С УЧЁТОМ МАТРИЧНОГО ЭФФЕКТА

*Статья посвящена особенностям проектирования и разработки компьютерной модели рентгенофлуоресцентного анализа с учетом матричного эффекта, позволяющей оптимизировать параметры анализа, автоматизировав расчеты значений параметров, необходимых для проведения анализа: первичного излучения, оптимальной плотности дополнительного поглотителя, минимизирующей погрешности анализа.*

**Ключевые слова:** компьютерная модель, рентгенофлуоресцентный анализ, матричный эффект, дополнительный поглотитель, поверхностная плотность, среднее квадратичное отклонение, базы данных, интерфейс.

Большое количество работ инженерно-технических направлений, включая анализ сырья, промпродуктов, и конечной продукции, связано с разработкой и использованием компьютерных моделей [1-4,6].

Сложные технологические процессы невозможно исследовать без математических и компьютерных моделей.

Цель данной работы – построение компьютерной модели способов учета матричного эффекта в рентгеновском анализе, автоматизация расчета таких параметров, как: оптимальных режимов работы, энергии первичного излучения, поверхностной плотности дополнительного поглотителя, максимально учитывающей матричный эффект, минимальных ошибок измерений.

$$d = \frac{J_i J_p}{K_1 K_2} M_{0a} (1/\sin \varphi + 1/\sin \psi) (E_0/E_i)^3 (1-1/S_k L)/\sin \varphi$$

**Математическая модель**

Полученное автором выражение для расчета точного значения поверхностной плотности дополнительного поглотителя:

Это выражение позволяет рассчитать поверхностные плотности поглотителей для веществ с неизвестными содержаниями анализируемого элемента Ca и наполнителя пробы Sn. Подставляя в (1) выражения для интенсивностей характеристического Ji некогерентно рассеяного Js излучений, получим аналитическое выражение для поверхностной плотности:

$$d=f(Ca, Cm, m0a, m0m) =$$

$$\frac{C_a \mu_{0a} \frac{1}{\sin \varphi} \left( \frac{E_0}{E_i} \right)^3 \left( 1 - \frac{1}{S_x} \right)}{C_a^2 \mu_{0a}^2 \left( \frac{E_0}{S_x} \sin \varphi + \frac{1}{\sin \psi} \right) + C_a C_m \mu_{0a} \mu_{0m} \left( \frac{E_0}{\sin \varphi} \left( 1 + \frac{1}{S_x} \right) + \frac{2}{\sin \psi} \right) + C_m^2 \mu_{0m}^2 \left( \frac{E_0}{\sin \varphi} + \frac{1}{\sin \psi} \right)}$$

Для достижения указанной цели решены следующие основные задачи:

- Создание алгоритма
- Программная реализация
- Проектирование базы данных
- Создание пользовательского интерфейса

**Физические принципы рентгеновского анализа**

Рентгенофлуоресцентные методы анализа, заключаются в возбуждении К или L оболочек атомов вещества, ионизирующим излучением радионуклидов или рентгеновских трубок. Наряду с методами РФА, продолжают получать распространение и радиоизотопные методы анализа, на основе сцинтилляционных детекторов излучения и пропорциональных счётчиков. Для флуоресцентного рентгеноспектрального анализа РСА, характерны те же закономерности, что и для рентгенорадиометрического анализа РРМ. Рентгеноспектральный анализ РСА, основывается на возбуждение характеристического излучения анализируемого вещества, первичным рентгеновским излучением, возбуждение К или L серии рентгеновских спектров атомов, осуществляется тормозным рентгеновским излучением и характеристическим излучением вещества анода рентгеновской трубки.

При использовании методов РФА, существует фундаментальная проблема – зависимость результатов измерений, от вещественного состава анализируемой пробы, названной матричным эффектом.

Эта проблема была успешно решена автором и подробно рассмотрена в [1].

Полученное выражение лежит в основе математической модели учета матричного эффекта в авторском способе с дополнительным поглотителем. Задавая нижнюю и верхнюю границы изменения массового поглощения наполнителя

$$M_{0m} = \sum_{j=1}^k C_j \cdot M_{0j}$$

где k – число элементов в наполнителе пробы;  $C_j \cdot M_{0j}$  – доля содержания j-го элемента и массовый коэффициент j-го элемента наполнителя пробы соответственно), можно построить теоретическую зависимость аналитического n в интервале изменения массового поглощения наполнителя пробы, с постоянным содержанием определяемого элемента. По теоретической зависимости можно определить отклонения аналитического параметра в заданном интервале и систематическую погрешность способа при использовании одного или нескольких поглотителей.

Задачей данной работы является создание компьютерной модели на основе математических моделей рассмотренных выше способов. Здесь под компьютерной моделью понимается визуализация зависимости различных способов учета матричного эффекта от химического состава наполнителя пробы, расчет оптимальных условий проведения анализа и нахождение ошибки (СКО) для каждого из методов.

В результате анализа поставленной задачи решена подзадача – разработка базы данных, хранящей все, необходимые для проведения расчетов, данные и в которую бы заносились результаты вычислений.

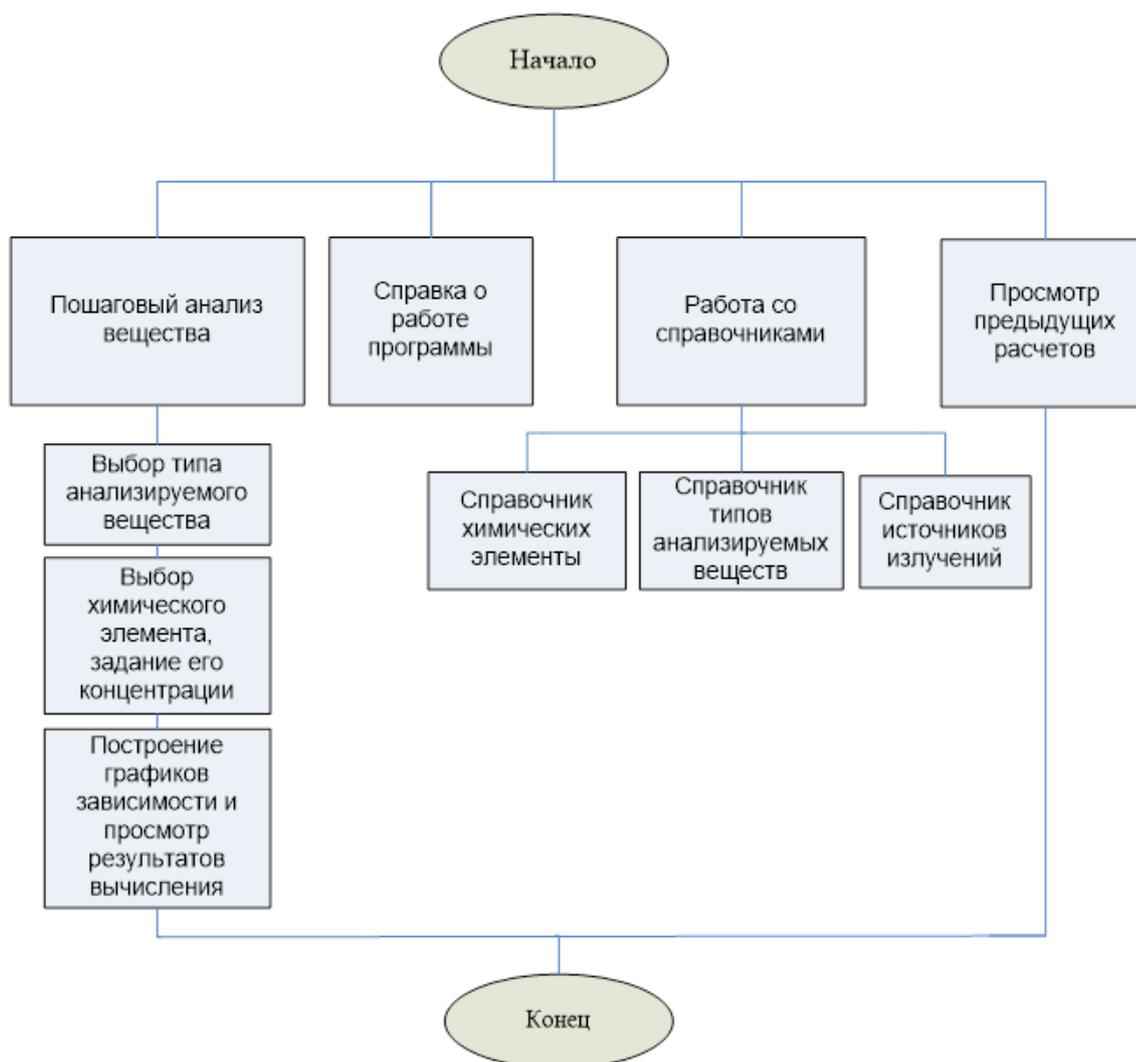


Рис. 1. Общая блок-схема работы программы

### Разработка приложения

Программа реализована в среде визуального программирования Borland C++ Builder 6.0 Enterprise Edition и СУБД Microsoft Access [5,7-10].

Разработка алгоритма и его реализация

#### Входные данные:

$m_{a0}$  – массовый коэффициент поглощения определяемого элемента

$m_{n0}$  – массовый коэффициент поглощения наполнителя

$C_a$  – концентрация определяемого элемента

$S_{kl}$  – K или L скачок поглощения

$E_0$  – первичная энергия источника излучения

$E_i$  – энергия характеристического излучения определяемого элемента

$x_1, x_2$  – границы коэффициента поглощения наполнителя

$\phi, \psi$  – углы отбора характеристического и некогерентно рассеянного излучения

Выходные данные:

$d$  – поверхностная плотность дополнительного поглотителя

СКО – среднееквадратичное отклонение

#### Алгоритм программы:

1. Выбор анализируемого вещества
2. Расчет значений аналитического параметра способом стандарта-фона
3. Расчет значений аналитического параметра способом с дополнительным поглотителем
4. Нахождения значения оптимальной поверхностной плотности дополнительного поглотителя методом наименьших квадратов
5. Графическое представление результатов
6. Вывод результатов анализа

Общая блок-схема работы программы и алгоритм работы программы приведены на рисунках 1 и 2.

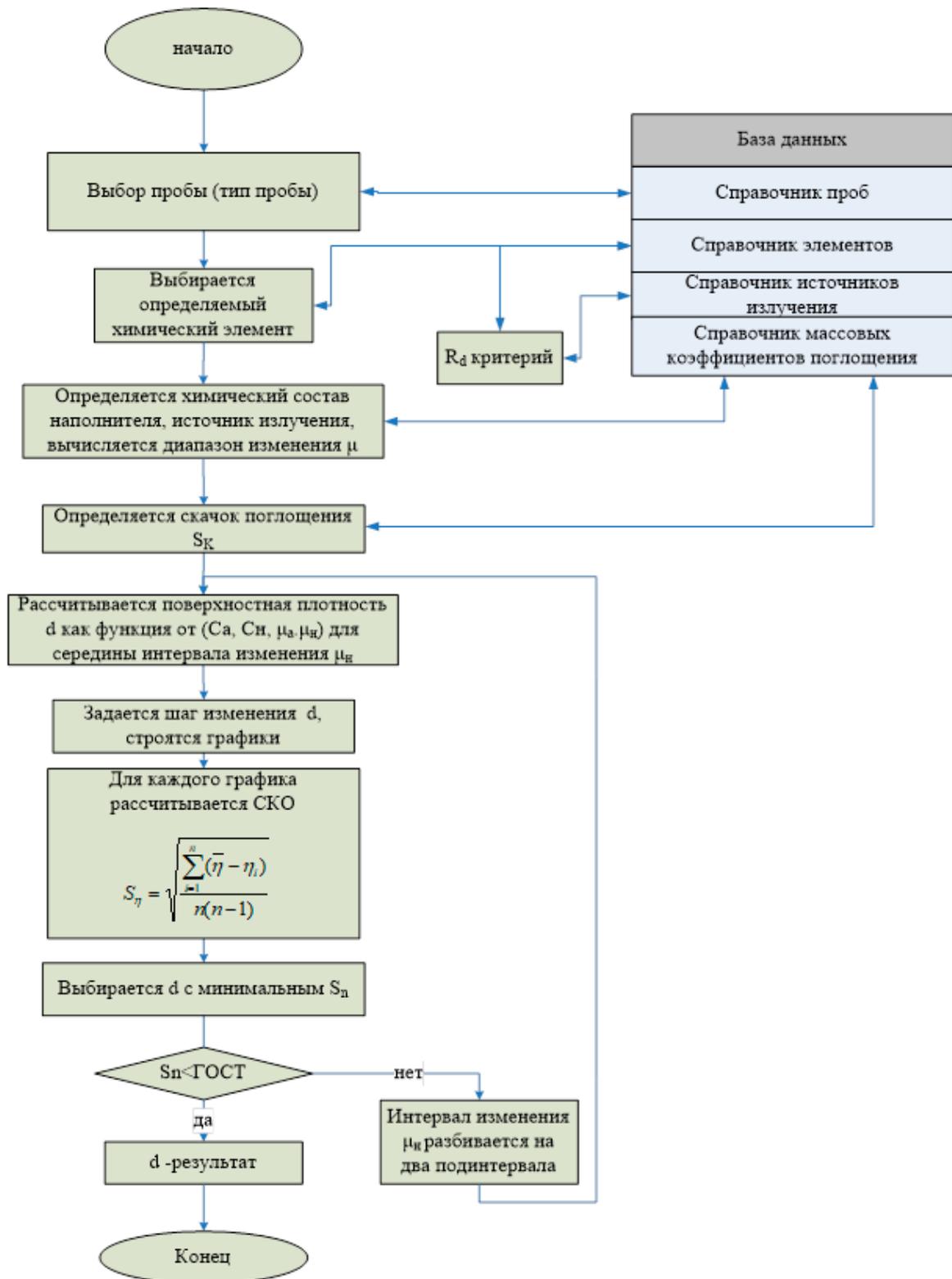


Рис. 2. Алгоритм работы программы

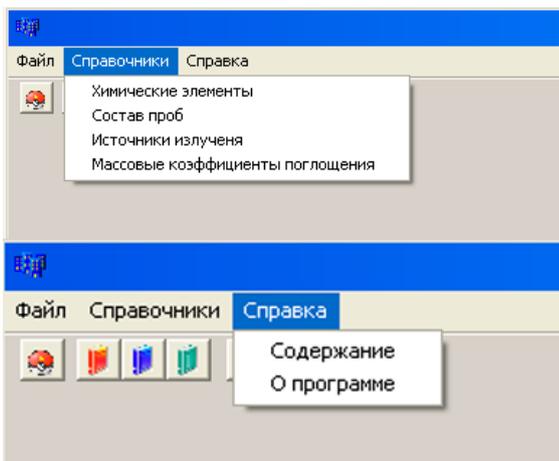


Рис. 3. Главное меню приложения

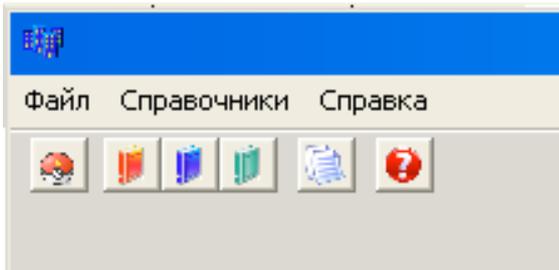


Рис. 4. Инструментальная панель

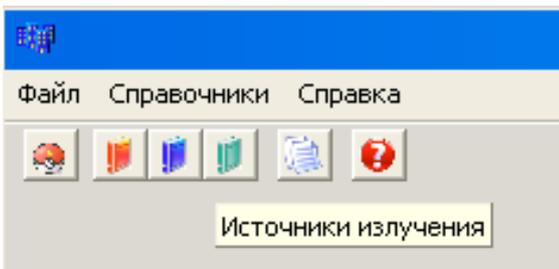


Рис. 5. Использование Hint

### Графический интерфейс

При проектировании интерфейса использовались компоненты:

MainMenu – создание главного меню (рисунк 3)

Инструментальная панель ToolBar 90 (рисунк 4), на которой размещены кнопки с пиктограммами, дублирующие пункты главного меню:

- Анализ вещества
- Справочники химических элементов, типов анализируемых веществ, источников излучения

Порядк. номер	Усл. обозначение	Наименование	энергия излучения E	скачок поглощения Sk
3	Li	литий	54	2
4	Be	бериллий	110	2,5
5	B	бор	185	3
6	C	углерод	277	4,5
7	N	азот	392	6
8	O	кислород	525	8
9	F	фтор	677	2

Рис. 6. Таблица химических элементов.

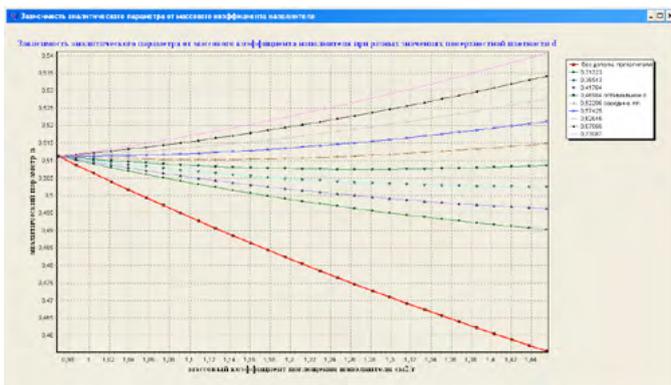


Рис. 7. Зависимость аналитических параметров от поверхностной плотности поглотителя

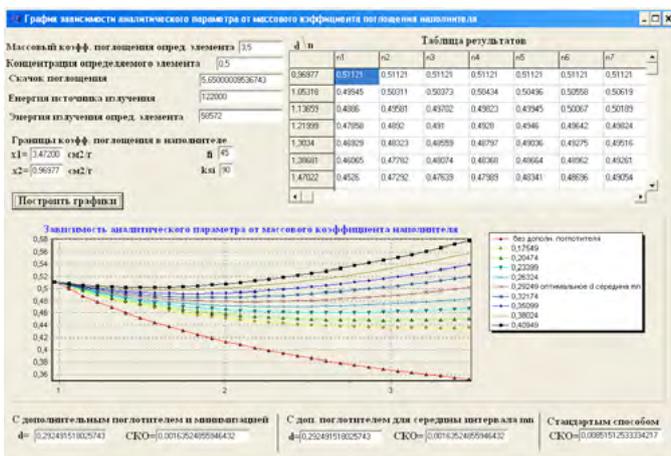


Рис. 8. Основная форма результатов вычислений

- Журнал истории предыдущих расчетов
- Справка

Всплывающие подсказки. Реализуются свойством Hint (рисунк 5).

Взаимодействие с базой данных осуществляется с помощью компонент DBGrid и DBNavigator. На рисунках 6,7 и 8 приведены таблица химических элементов, кривые аналитических параметров и основная форма результатов вычислений.

## Закключение

Созданная компьютерная модель и база данных, позволяют рассчитывать значения поверхностной плотности поглотителя для анализируемой пробы. Реализована возможность расчета пробы произвольного химического состава за счет расширения элементной базы.

Одной из перспектив развития является использование модели в качестве web сервиса. Это возможно благодаря использованию Microsoft Access, имеющим интеграцию с другими продуктами Microsoft, и использованию dll – динамически подключаемых библиотек.

Страницы доступа к данным используют специально разработанные Web компоненты – Office Web Components (OWS), включающие в свой состав сводные таблицы, диаграммы и другие элементы управления. Ценность библиотек DLL состоит в том, что они после загрузки в оперативную память могут совместно использоваться несколькими

прикладными программами. Кроме того, DLL поддерживают «многоязыковые» проекты: в программах, написанных на одном языке, допускается использование DLL, созданных на других языках

### В работе получены следующие результаты:

- Проведен анализ языков программирования и СУБД, по результатам которого был выбран язык программирования Borland C++ Builder 6 и Microsoft Access 2003;
- Проведено изучение предметной области;
- Проведен анализ предметной области;
- Построен алгоритм;
- При использовании реляционного подхода спроектирована база данных;
- Используя технологию визуального программирования, с помощью инструментальной системы Borland C++ Builder 6 создана компьютерная модель способа учета матричного эффекта в рентгеновском анализе;
- Произведено тестирование системы. 

## Литература

1. Косьянов П.М., Рентгенофизический анализ неорганических веществ сложного химического состава. – Библиотечно-издательский комплекс ТИУ, 2016, – 195 с.
2. Косьянов П.М., Манюкова Н.В. Разработка информационной системы лаборатории ФНСИП // Математические структуры моделирование. 2021. № 2 (58). С. 137-148
3. Косьянов П.М., Виртуальный лабораторный комплекс по квантовой, атомной и ядерной физике. Учебное пособие. – Библиотечно-издательский комплекс ТИУ, 2016; 175 с.
4. Косьянов П.М., Манюкова Н.В. Проектирование компьютерной модели эксплуатации нескольких пластов одной нагнетательной скважины // Математические структуры и моделирование. 2021. №4(60), С.94-108
5. Архангельский А.Я. Работа с локальными базами данных в C++Builder 5. – М.: БИНОМ, 2000.
6. Косьянов П.М., Исследование калий-натриевых и кальций-натриевых полевых шпатов рентгеновскими методами // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2019; 85(10): С. 43-46.
7. Гамма Э., Хелм Р., Джонсон Р., Влссидес Дж. Приемы объектно-ориентированного проектирования. Паттерны проектирования. – СПб.: Питер, 2001 г. – 368 с.
8. Страуструп Б. Язык программирования C++, 3-е изд. / Пер. с англ. – СПб.: М.: «Невский диалект» - «Издательство БИНОМ», 1999 г., 991 с.
9. Айра Пол, Объектно-ориентированное программирование на C++, 2-е изд. СПб.: М.: «Невский диалект» – «Издательство БИНОМ», 1999 г. – 462 с.
10. Хомоненко А.Д., Цыганков В.М., Мальцев М.Г. Базы данных: учебник для высших учебных заведений, 4-е изд. - СПб.: «КОРОНА принт», 2004 г. -736 с.

UDC 004.94:543.427

**P.M. Kosyanov**, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Candidate of Technical Sciences, Associate Professor of Tyumen Industrial University, a branch in Nizhnevartovsk, kospiter2012@yandex.ru

## COMPUTER MODEL OF X-RAY FLUORESCENCE ANALYSIS TAKING INTO ACCOUNT THE MATRIX EFFECT

**Abstract:** The article is devoted to the peculiarities of designing and developing a computer model of X-ray fluorescence analysis taking into account the matrix effect, which allows automating calculations of parameters necessary for analysis: primary radiation, optimal density of an additional absorber, minimizing the errors of analysis.

**Keywords:** computer model, X-ray fluorescence analysis, matrix effect, additional absorber, surface density, standard deviation, databases, interface.