

Аннотация

Специализированное программное обеспечение предназначено для анализа рентген-флуоресцентных спектров несколькими методами (методом сравнения с эталоном, методом фундаментальных параметров), автоматизированной обработки результатов анализа, хранения и вывода информации в удобном для пользователя виде.

Руководство оператора на специализированное программное обеспечение «XRF_Pro» предназначено для проведения процедур:

- отображения спектров рентгеновского излучения на дисплее персонального компьютера;
- отображения данных спектра и их изменение;
- проведения линейной калибровки спектрометра;
- проведения калибровки по эффективности;
- управление файлами, связанными с настройкой программы;
- настройки списка элементов;
- настройки списка эталонов;
- настройки списка матриц;
- настройки параметров рентгеновского излучателя;
- настройки параметров расчёта и нормировки;
- анализа методом сравнения с эталоном;
- анализа методом фундаментальных параметров;
- создания и хранения протоколов обработки на персональном компьютере.

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

Содержание

1. Назначение программного обеспечения	- 5 -
2. Условия выполнения программного обеспечения	- 5 -
3. Установка и запуск программного обеспечения.....	- 5 -
4. Регистрация программного обеспечения	- 6 -
5. Выполнение программного обеспечения	- 6 -
6. Используемые термины.....	- 10 -
7. Интерфейс программного обеспечения	- 11 -
7.1. Главное окно программы.....	- 11 -
7.2. Главное меню программы	- 15 -
7.2.1. Подменю «Файл»	- 16 -
7.2.2. Подменю «Параметры».....	- 17 -
7.2.3. Подменю «Калибровка».....	- 19 -
7.2.4. Подменю «Действия»	- 20 -
7.2.5. Подменю «Анализ спектра»	- 20 -
7.2.6. Подменю «Помощь»	- 21 -
7.3. Загрузка спектра и параметры измерения	- 22 -
7.4. Проект и параметры	- 22 -
7.4.1. Проект	- 22 -
7.4.2. Окно «Выбор метода анализа».....	- 24 -
7.4.3. Окно «Общие параметры обработки»	- 28 -

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

7.4.4. Окно «Параметры рентгеновского излучателя».....	- 31 -
7.4.5. Окно «Рабочий список элементов»	- 32 -
7.4.6. Окно «Список эталонов»	- 34 -
7.4.7. Окно «Список матриц»	- 37 -
7.4.8. Окно «Тип образца»	- 38 -
7.4.9. Окно «Источник возбуждения»	- 39 -
7.4.10. Окно «Напряжение в трубке»	- 40 -
7.4.11. Настройка меню и панели инструментов	- 41 -
7.4.12. Параметры отчета.....	- 42 -
7.5. Калибровка	- 44 -
7.5.1. Линейная калибровка по двум пикам.....	- 44 -
7.5.2. Калибровка по эффективности	- 45 -
7.6. Анализ спектра.....	- 47 -
7.6.1. Анализ методом сравнения с эталоном	- 49 -
7.6.2. Анализ методом фундаментальных параметров.....	- 49 -
7.6.3. Анализ серии спектров	- 51 -
7.6.4. Сшивка результатов	- 52 -
8. Сообщения об ошибках	- 53 -
9. Форма отчета	- 56 -
10. Требования к файлам спектров.....	- 56 -

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

1. Назначение программного обеспечения

Специализированное программное обеспечение (далее – программа) предназначено для анализа рентген-флуоресцентных спектров несколькими методами (методом сравнения с эталоном, методом фундаментальных параметров), автоматизированной обработки результатов анализа, хранения и вывода информации в удобном для пользователя виде.

Наименование программного обеспечения: «XRF_Pro».

2. Условия выполнения программного обеспечения

Требования к персональному компьютеру:

Для работы программы необходимо наличие:

- IBM PC/AT - совместимого персонального компьютера (далее – ПК);
- графического адаптера не хуже VGA;
- процессора не хуже Intel Pentium II 300 MHz;
- оперативной памяти не менее 32 МБ;
- свободного дискового пространства не менее 10 МБ;
- ручного манипулятора типа «мышь» (далее – «мышь»).

Требования к операционной системе:

Программа работает под управлением операционной системы Microsoft Windows 95/98/Me/NT/2000/XP.

3. Установка и запуск программного обеспечения

Для установки программы на компьютер пользователя необходимо запустить файл **Setup.exe** с установочного диска (дискеты) и далее следовать рекомендациям программы установки.

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

В ходе своей работы программа установки создает в конечном каталоге подкаталог **XRF_Data**, **Spectr** и **Results**.

При необходимости, пользователь имеет возможность поместить ярлык программы на рабочий стол и/или в панель быстрого запуска.

Запуск программы на выполнение осуществляется посредством инициализации исполняемого файла **XRF_Pro.exe**.

4. Регистрация программного обеспечения

После установки программы пользователю необходимо произвести ее регистрацию у разработчика.

Существует два типа регистраций:

- Регистрация с привязкой к плате SBS. В этом случае программа будет работать на любом компьютере, где установлена та плата SBS, с которой проводилась регистрация. Данный тип регистрации требует, чтобы на компьютере была установлена программа набора спектров **ESBS**;
- Регистрация с привязкой к компьютеру. В этом случае программа будет работать только на том компьютере, где проводилась регистрация. Количество перерегистраций (в случае переустановки операционной системы) ограничено (определяется в **лицензионном соглашении**).

Для осуществления регистрации в программе предусмотрены два окна «Выбор типа регистрации» (см. рис.1.1) и «Регистрация» (см. рис.1.2). Данные окна отображаются на экране пользователя при первом запуске программы в работу.

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

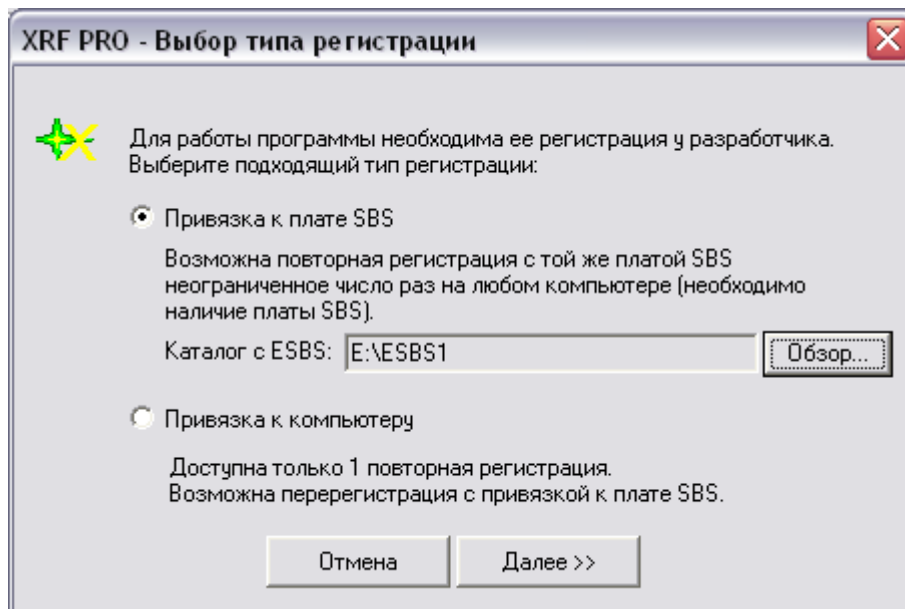


Рис. 1.1

В настоящем окне пользователю необходимо выбрать предпочтительный тип регистрации.

Для привязки программы к плате SBS необходимо указать каталог, в котором установлена программа набора спектров **ESBS**. Для этого предусмотрена кнопка «Обзор». В случае успешного определения установленных плат SBS опция «Привязка к плате SBS» становится доступной для выбора. В случае наличия нескольких плат пользователю предоставляется выбор номера платы, к которой следует «привязать» программу.

После выбора типа регистрации необходимо нажать на кнопку «Далее». При этом на экране появится окно «Регистрация».

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

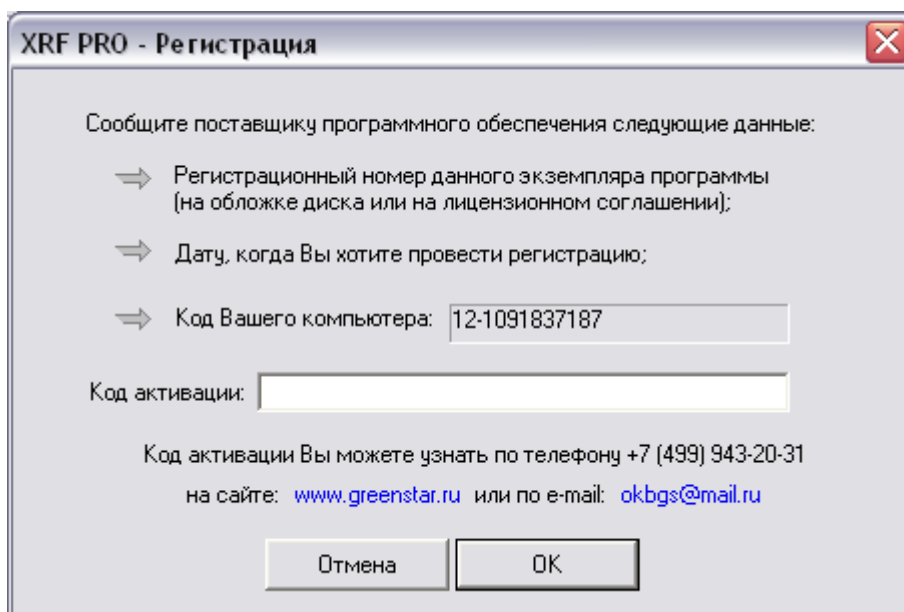


Рис. 1.2

Пользователю необходимо, используя указанные номер телефона или адрес электронной почты, связаться с разработчиками программы, сообщить код компьютера и получить от них свой регистрационный номер (код активации).

Для дальнейшей работы с программой пользователю необходимо ввести полученный регистрационный номер в соответствующую строку окна «Регистрация». Без регистрации программа работать не будет.

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

5. Выполнение программного обеспечения

Алгоритм работы программного обеспечения представлен на рис. 2.

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

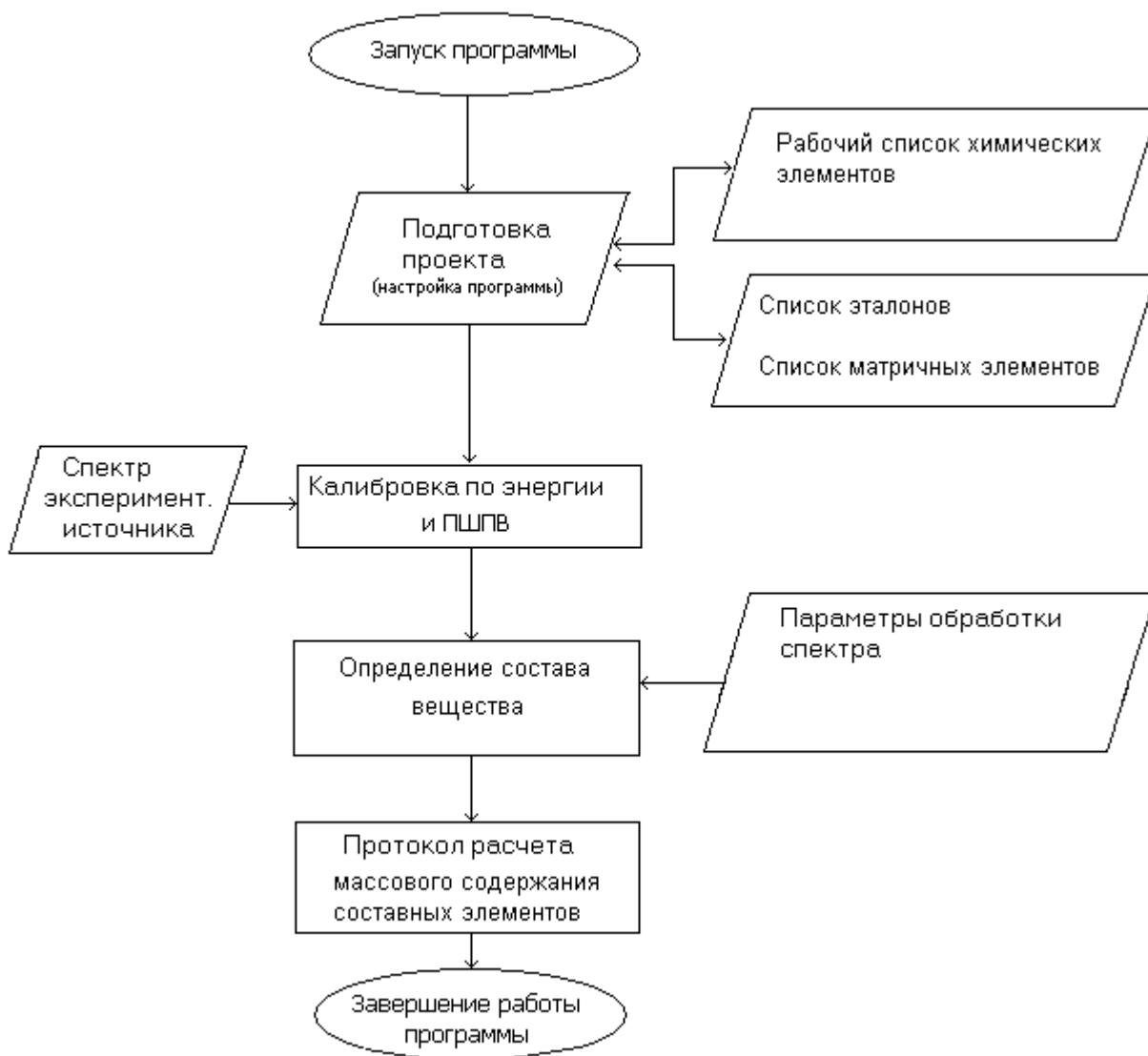


Рис. 2

6. Используемые термины

Здесь и далее в тексте настоящего документа используются следующие термины и понятия:

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

- **Проект** – файл, содержащий параметры обработки спектров, а также ссылки на файлы, в которых хранятся необходимые настройки программы;
- **Спектр образцового источника** (эталонный спектр) – спектр образцового источника;
- **Спектр экспериментального источника** (спектр) – спектр характеристического рентгеновского излучения элементов, содержание которых необходимо определить;
- **Калибровка спектрометра** – процедура определения зависимостей: канал - энергия, интенсивность скорости счета эталонного спектра - активность образцового источника;
- **ROI** («область интереса») – часть спектра, предназначенная для обработки настоящей программой;
- **Рабочий список** – список элементов и их линий, которые используются программой при обработке;
- **Список эталонов** – список обработанных эталонных спектров с указанным содержанием;
- **Список матриц** – списки элементов, не представленные явно на спектре.

7. Интерфейс программного обеспечения

7.1. Главное окно программы

Главное окно программы, показанное на рисунке 3, делится на две части: в нижней выводится график спектра или его фрагмент, заданный как «область интереса» – **ROI** (Region Of Interest).

В верхней части выводится график выделенного участка спектра.

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

Выделение участка производится движением «мыши» при нажатой правой кнопке.

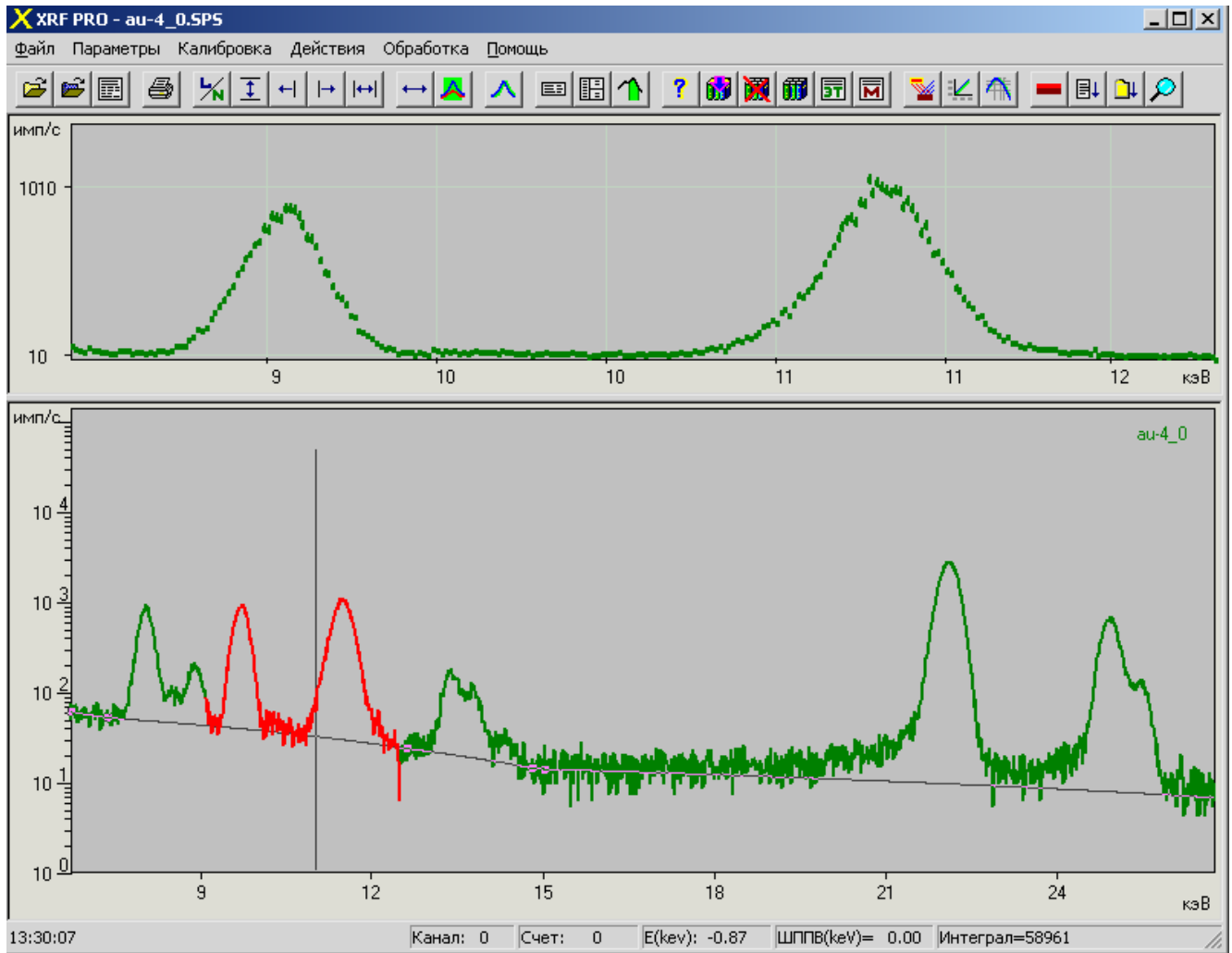














Рис. 3

Над верхним окном находятся кнопки управления (далее - панель инструментов). Функция каждой кнопки выводится при перемещении на нее курсора «мыши». Данные кнопки дублируют основные пункты меню, а также вызывают несколько оригинальных функций:




Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

- кнопка  («Загрузить основной спектр») вызывает функцию считывания основного спектра из файла;
- кнопка  («Загрузить теневой спектр») вызывает функцию считывания теневого (фонового) спектра для сравнения с основным;
- кнопка  («Печать графика») вызывает функцию вывода на принтер графика спектра;
- кнопка  («Log/Norm») вызывает изменение вертикальной шкалы (логарифмическая или линейная) в нижнем окне;
- кнопка  («Увеличить масштаб по вертикали») вызывает функцию увеличения масштаба в нижнем окне;
- кнопки  («Сдвиг маркера влево») и  («Сдвиг маркера вправо») сдвигают маркер на одну позицию вправо или влево соответственно;
- кнопка  («Задайте область интереса») вызывает вывод на экран выделенной части спектра (ROI) в нижнем окне на всю ширину окна с учетом минимальной энергии для анализа. Если область ROI не задана, то спектр с начальной энергией, заданной в окне «Параметры анализа», выводится на всю ширину окна.
- кнопка  («Показать весь спектр») вызывает функцию восстановления полного графика спектра;
- кнопка  («Совмещение на графике теневого и основного спектра») вызывает функцию совмещения (по интегралу в выделенной области) теневого и основного спектра;
- кнопка  («Уточнение параметров линии в выделенной области спектра») вызывает функцию уточнения параметров выделенных пиков;
- кнопка  («Проект») вызывает окно управления файлами, связанными с настройкой программы;

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

- кнопка  («Выбор метода анализа») вызывает окно выбора метода анализа и его параметров;
- кнопка  («Запомнить область нормировки») вызывает окно выбора области нормировки.
- кнопка  («Показать элементы из полного списка») вызывает функцию отображения в главном окне программы названий химических элементов, находящихся в выделенной зоне;
- кнопка  («Добавить элемент в рабочий список») вызывает функцию добавления отображаемого химического элемента в текущий рабочий список;
- кнопка  («Очистить рабочий список») вызывает функцию удаления всех элементов из рабочего списка;
- кнопка  («Рабочий список элементов») вызывает окно настройки списка элементов;
- кнопка  («Список эталонов») вызывает окно настройки списка эталонов;
- кнопка  («Матрицы») вызывает окно «Список матриц»;
- кнопка  («Выбор источника возбуждения») вызывает процедуру выбора источника возбуждения;
- кнопка  («Линейная калибровка») вызывает функцию линейной калибровки открытого спектра;
- кнопка  («Эффективность») вызывает окно «Редактирование кривой эффективности»;
- кнопка  («Толстый или тонкий образец») вызывает окно выбора типа образца;

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

- кнопка  («Анализ методом фундаментальных параметров») вызывает функцию обработки спектра методом фундаментальных параметров;
- кнопка  («Автоматический анализ всех спектров в директории») вызывает функцию обработки группы спектров в указанной папке;
- кнопка  («Параметры выделенной области») вызывает окно «Параметры пика и фона».

Маркер устанавливается нажатием левой кнопки «мыши». Положение маркера, соответствующая энергия (**E**), счет в канале выводятся над спектром в верхней части нижнего окна.

Сумма отсчетов (**S**) в выделенной области выводятся в статусном окне внизу главного окна.

Передвижение маркера и изменение масштаба в нижнем окне возможно также с клавиатуры кнопками «LEFT», «RIGHT», «UP», «DOWN».

7.2. Главное меню программы

Главное меню программы реализовано в виде горизонтального двухуровневого меню. Первый уровень главного меню состоит из следующих пунктов:

- файл;
- параметры;
- калибровка;
- действия;
- обработка;
- помощь.

Каждый пункт первого уровня главного меню реализован в виде вертикального одноуровневого подменю и составляет второй уровень главного меню.

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

Состав и краткое назначение каждого пункта подменю второго уровня описывается ниже.



7.2.1. Подменю «Файл»

Настоящий пункт главного меню программы предназначен для реализации работы с файлами спектров, а также настройки режима печати и вывода результатов измерений на принтер.

При выборе пользователем в первом уровне главного меню пункта «Файл» на экран выводится подменю второго уровня, состоящее из следующих пунктов:

- Загрузить основной спектр;
- Загрузить теневой спектр;
- Вычесть спектр фона;
- Открыть все спектры в папке;
- Открыть последний протокол;
- Выход.

Назначение каждого пункта подменю следующее:

- «Загрузить основной спектр» (соответствует кнопке  на панели инструментов) вызывает считывание основного спектра из файла;
- «Загрузить теневой спектр» (соответствует кнопке  на панели инструментов) вызывает считывание теневого (фонового) спектра для сравнения с основным;
- «Вычесть спектр фона» вызывает функцию вычитания спектра фона из основного спектра;
- «Открыть все спектры в папке» вызывает функцию чтения всех спектров в указанной папке в специальное окно программы;

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

- «Открыть последний протокол» вызывает открытие последнего созданного протокола;
- «Выход» завершает работу программы.


7.2.2. Подменю «Параметры»

Настоящий пункт главного меню программы предназначен для ввода, изменения и сохранения параметров и настроек программы, необходимых для ее работы.



При выборе пользователем в главном меню пункта «Параметры» на экране выводится меню второго уровня, состоящее из следующих пунктов:

- Проект;
- Выбор метода анализа;
- Общие параметры обработки;
- Параметры рентгеновского излучателя;
- Параметры отчета;
- Рабочий список элементов;
- Список эталонов;
- Список матриц;
- Тип образца (толстый/тонкий);
- Источника возбуждения / Напряжение в трубке;
- Настройка цветов;
- Настройка меню и панели инструментов.

Назначение каждого пункта подменю следующее:

- **«Проект»** (соответствует кнопке  на панели инструментов) вызывает окно управления файлами, связанных с настройкой программы;

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

- **«Выбор метода анализа»** (соответствует кнопке  на панели инструментов) вызывает функцию выбора метода анализа, типа и параметров нормировки пиков, а также параметров внутреннего сдвига;
- **«Общие параметры обработки»** вызывают функцию настройки общих параметров обработки спектров;
- **«Параметры рентгеновского излучателя»** вызывает функции изменения параметров для расчета спектра излучения рентгеновского излучателя (трубки), используемые для спектрометров с прямым возбуждением;
- **«Параметры отчета»** вызывает окно параметров, необходимых для создания формы отчета (см.п.7.4.12);
- **«Рабочий список элементов»** (соответствует кнопке  на панели инструментов), вызывает окно настройки списка элементов, которые должны учитываться при обработке;
- **«Список эталонов»** вызывает окно настройки изменения данных эталона, которые будут использоваться при регрессии по эталонам или методе альфа – коррекции;
- **«Список матриц»** вызывает функции изменения данных списка матричных элементов, которые будут использоваться при анализе методом фундаментальных параметров;
- **«Тип образца (толстый/тонкий)»** вызывает функцию выбора типа образца;
- **«Источник возбуждения / Напряжение в трубке»** вызывает функцию выбора источника возбуждения (см.п.7.4.9), если в качестве способа возбуждения указан источник (см.п.7.4.3), или функция определения напряжения в трубке (см.п.7.4.10), если в качестве способа возбуждения указано прямое излучение;
- **«Настройка цветов»** вызывает окно настройки графики программы;

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

- **«Настройка меню и панели инструментов»** вызывает окно настройки вида панели инструментов (см.п.7.4.11);





7.2.3. Подменю «Калибровка»

Настоящий пункт главного меню программы предназначен для калибровки загруженного спектра и для настройки программы, связанной с обработкой спектров.

При выборе пользователем в главном меню пункта «Калибровка» на экране выводится меню второго уровня, состоящее из следующих пунктов:

- Линейная калибровка;
- График эффективности;
- Уточнение параметров линии в выделенной области.

Назначение каждого пункта подменю следующее:

- **«Линейная калибровка»** (соответствует кнопке  на панели инструментов) вызывает функцию калибровки спектрометра по энергии и ширине пиков;
- **«График эффективности»** (соответствует кнопке  на панели инструментов) вызывает окно калибровки спектрометра по эффективности регистрации;
- **«Уточнение параметров линии в выделенной области»** (соответствует кнопке  на панели инструментов) вызывает функцию уточнения формы линии выделенной области. Перед инициализацией данной функции необходимо выделить интересующую область и нажать на кнопку  (на панели инструментов), при этом область растянется на весь экран.

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

7.2.4. Подменю «Действия»

Настоящий пункт главного меню программы предназначен для выполнения операций по дополнительной настройке некоторых параметров проекта на основе загруженного спектра.

При выборе пользователем в главном меню пункта «Действия» на экране выводится меню второго уровня, состоящее из следующих пунктов:

- Показать элемент из полного списка;
- Добавить элемент в рабочий список;
- Очистить рабочий список;
- Запомнить область нормировки;

Назначение каждого пункта подменю следующее:

- **«Показать элемент из полного списка»** отображает в нижней части главного окна химический элемент, соответствующий положению маркера на спектре;
- **«Добавить элемент в рабочий список»** вызывает функцию добавления в рабочий список элемента, показанного с помощью предыдущего пункта;
- **«Очистить рабочий список»** вызывает функцию удаления рабочего списка элементов;
- **«Запомнить область нормировки»** задает в качестве области нормировки выделенную зону ROI.

7.2.5. Подменю «Анализ спектра»

Настоящий пункт главного меню программы предназначен для запуска процедур обработки загруженного спектра.

При выборе пользователем в главном меню пункта «Анализ спектра» на экране выводится меню второго уровня, состоящее из следующих пунктов:

- Анализ выбранным методом;
- Анализ серии спектров;
- Сшивка результатов.

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

Назначение каждого пункта подменю следующее:

- **«Анализ выбранным методом»** вызывает функцию анализа выбранным методом – методом фундаментальных параметров или методом эталонов. *Метод эталонов* основан на эмпирическом определении и последующем моделировании системой уравнений, зависимости концентрации от интенсивности линий. Такая модель должна быть построена при наличии набора эталонов и будет работать для проб близких по составу к этой группе эталонов.
Метод фундаментальных параметров основан на том, что все влияния должны рассчитываться аналитически, на основе известных параметров спектрометрической установки и физических констант.
- **«Анализ серии спектров»** вызывает функцию анализа группы спектров в указанном каталоге;
- **«Сшивка результатов»** вызывает функцию объединения двух протоколов, полученных при обработке спектров с источниками возбуждения в низкоэнергетических («мягких») и высокоэнергетических («жестких») областях.

7.2.6. Подменю «Помощь»

Настоящий пункт главного меню программы предназначен для вызова справочной системы и вывода на экран номера версии программы.

При выборе пользователем в главном меню пункта «Помощь» на экране выводится меню второго уровня, состоящее из следующих пунктов:

- Вызов справки;
- О программе.


Назначение каждого пункта подменю следующее:

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

- **«Вызов справки»** запускает и отображает на экране справочную систему программы.
- **«О программе»** отображает на экране окна с номером версии программы.

7.3. Загрузка спектра и параметры измерения

Программа производит анализ спектров характеристического рентгеновского излучения, записанных в файле, формат которого приведен в разделе 10 настоящего руководства.


Загрузка спектра производится при выборе пользователем пункта «Загрузить основной спектр» подменю «Файл» главного меню, что соответствует кнопке  на панели инструментов.

7.4. Проект и параметры

Настройка и работа программы реализована по проекту (файлу, содержащему все параметры настройки и имена всех файлов используемых программой).

7.4.1. Проект

Файл проекта содержит все параметры и имена всех файлов, образующих настройку программы. При загрузке нового файла проекта меняется вся настройка на записанную в загружаемом файле.

При инициализации пользователем в меню второго уровня пункта «Проект» или кнопки  на экране отображается окно «Проект», отображенное на рисунке 4. Настоящее окно предназначено для просмотра, изменения, редактирования и сохранения параметров и файлов, входящих в проект.

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

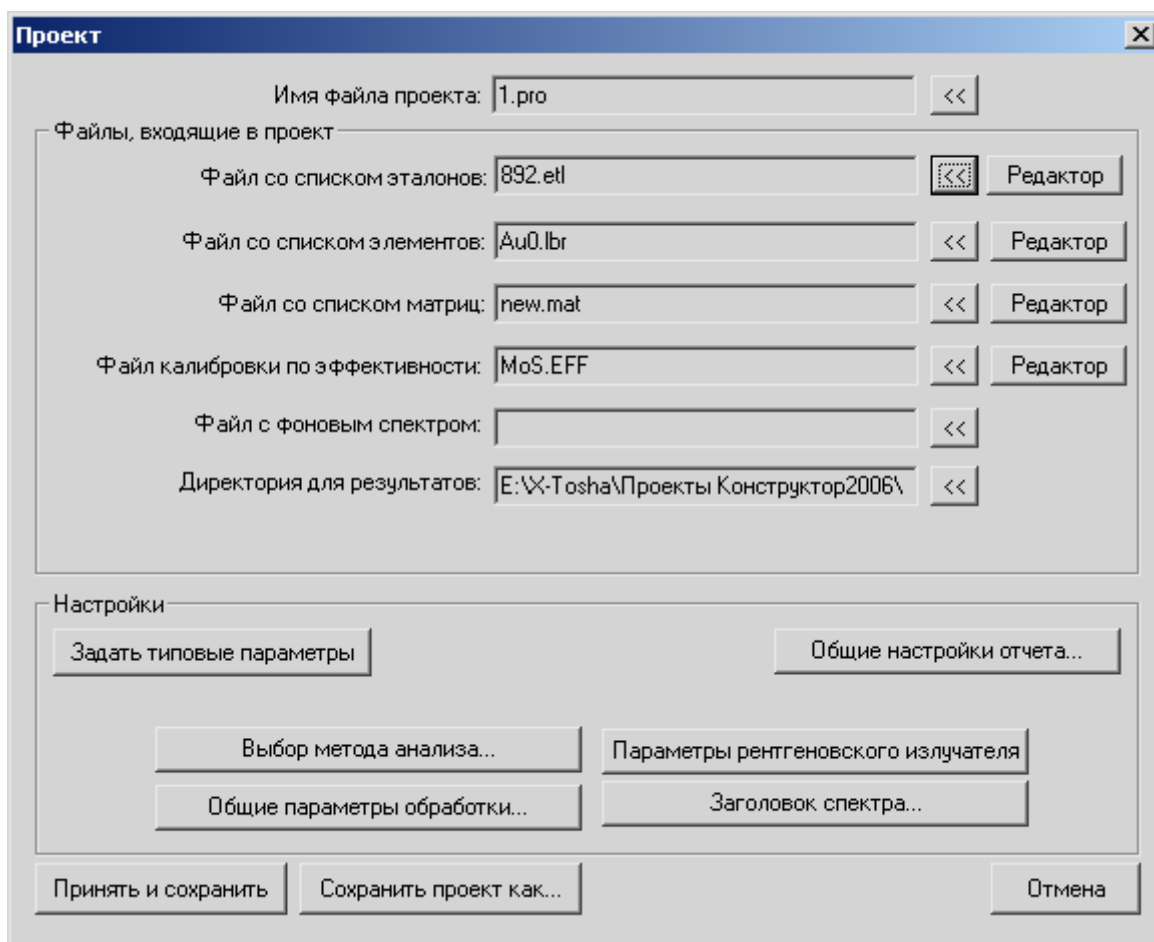


Рис. 4

Кнопки "<<" вызывают функцию явного выбора файла. При этом ввод имени несуществующего файла вызовет его создание.

Кнопка «Редактор» вызывает редактирование содержимого файла.

При нажатии на кнопку «Редактор» в строке «Файл со списком эталонов» вызывается окно настройки списка эталонов.

При нажатии на кнопку «Редактор» в строке «Файл со списком элементов» вызывается окно настройки списка элементов.

При нажатии на кнопку «Редактор» в строке «Файл со списком матриц» вызывается окно настройки списка матриц.

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

При нажатии на кнопку «Редактор» в строках «Калибровка по эффективности» вызываются окна калибровки спектрометра по эффективности.

«Файл с фоновым спектром» задает спектр фона. При установке флажка «Вычитать фон» включается функция автоматического вычитания результатов обработки фона из результатов обработки основного спектра.

«Директория для результатов» определяет каталог, в который будут записываться результаты анализов (файлы с расширением «htm»).

Функции программы, выполняемые при нажатии на кнопки «Общие параметры обработки», «Выбор метода анализа», «Параметры рентгеновского излучателя» и «Заголовок спектра» описаны далее.

Для создания нового файла настройки достаточно нажать на кнопку "<<" правее имени файла проекта и ввести имя для нового файла (расширение «**pro**»), после чего можно изменить настройку, т.е. данные для калибровки, параметры калибровки, рабочий список нуклидов.

Сохранение проекта производится при нажатии на кнопку «Принять и сохранить», а также «Сохранить как». Сохранение проекта автоматически осуществляется при выходе из программы.

Для выхода из окна без сохранения параметров необходимо нажать на кнопку «Отмена». Все файлы, образующие настройку программы, должны записываться в подкаталог **XRF_Data**.

Файлы спектров записываются в подкаталог **Spectr**.

7.4.2. Окно «Выбор метода анализа»

Настоящее окно выводится на экран при инициализации пользователем пункта «Выбор метода анализа» подменю «Параметры» главного меню или при нажатии на соответствующую кнопку на панели инструментов.

В настоящем окне (рис. 5) реализованы функции изменения метода анализа, типа и параметров нормирования пиков, а также способа возбуждения образца.

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

Методы анализа

Выбор метода анализа

Метод фундаментальных параметров:

100% нормировка

альфа-коррекция по эталону

по внутреннему стандарту

нормировка по пику

Обработка по эталонам:

с регрессией по эталону

Параметры анализа

Учет матричных элементов

Нормировка суммы элементов

Сумма: 0 в единицах: ppm

Способ возбуждения

Мишень / источник Прямое излучение

Тип нормировки

Время набора спектра, с: 0 x 0

Интеграл области нормировки, имп: 0 x 0.01

Площадь нормировочного пика, имп: 0 x 0.01

Т норм.= 1

Область нормировки (кэВ): 18.76 24.50

Краткое описание метода:

Определение концентраций методом регрессии по подготовленному эталону.

Эталон может быть подготовлен в окне "Список эталонов".

Рис. 5

В программе предусмотрены несколько методов анализа, сгруппированных в две категории: «метод фундаментальных параметров» и «метод эталонов».

Метод фундаментальных параметров:

- **100% нормировка** - все обнаруженные элементы нормируются на 100%. Дает результат, если все элементы пробы возбуждаются и видны на спектре.

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

При установке флажка «альфа-коррекция по эталону» включается режим уточнения результатов анализа по эталону, который должен быть предварительно подготовлен;

- **по внутреннему стандарту** - нормировка по элементу-пробнику известной концентрации, внесенному или присутствующему в пробе. Задав этот режим в поле "Параметры внутреннего стандарта" необходимо ввести химическое обозначение "Элемента эталонной концентрации" и значение его концентрации, а также "Единицу измерения" этой концентрации. При следующих обработках концентрация эталонного элемента будет приводиться к заданной, и пропорционально изменятся все остальные.
- **Нормировка по пику** - нормировка по пику рассеянного излучения и одному из элементов присутствующих в пробе. Задав этот режим и область нормировки (обычно область пика когерентного рассеяния возбуждающего излучения), в поле "Параметры нормировки по пику" введите химическое обозначение "Элемента Эталонной Концентрации" и значение его концентрации в спектре эталонной пробы и "Единицу Измерения" этой концентрации в соответствующих окнах.

Для определения коэффициента нормировки необходимо установить переключатель «Нормировка по пику», закрыть данное окно (нажав на кнопку «Принять»), загрузить и обработать эталонный спектр. После чего снова открыть данное окно (например, через главное меню) и нажать на кнопку «Расчет». Программа выведет новое значение этого коэффициента и будет в дальнейшем использовать его для нормировки концентраций, но только если в спектрах будет присутствовать эталонный элемент. Этот метод работает для проб сходного, но неизвестного состава, если есть хотя бы одна проба с известной концентрацией какого-либо общего для всех проб элемента.

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

Метод эталонов:

- **С регрессией по эталону** – определение концентраций по эталону, который должен быть предварительно подготовлен.

При выборе метода из группы «метод эталонов» в настоящем окне появляется поле «Тип нормировки». Данное поле содержит следующие параметры:

- **«Время набора спектра»** - включает нормировку по времени набора спектра, которое можно изменить в соответствующем текстовом поле;
- **«Интеграл области нормировки»** - включает нормировку по площади заданной области нормировки. Данная опция является рекомендуемой, т.к. наилучшим образом учитывает изменения токов в рентгеновском излучателе;
- **«Площадь пика в области нормировки»** - включает нормировку по площади пика в указанной области нормировки.

Область нормировки отображается в ниспадающем списке **«Область нормировки»** и содержит граничные значения энергий.

В программе предусмотрена возможность добавления области нормировки. Для этого необходимо в главном окне программы выделить на исследуемом спектре область пика когерентного рассеяния вторичного излучателя и выбрать пункт «Запомнить область нормировки» и подменю «Действия» главного меню.

В поле «Параметры анализа» расположены следующие флажки:

- **Учет матричных элементов** – флаг, задающий режим, при котором программа будет учитывать элементы, присутствующие в рабочем списке, имеющие известное содержание в пробе, но невидимые в спектре (например, С, N, O, Al, Si). Список этих элементов задается в окне «Матрицы», вызываемом через пункт «Список матриц» подменю «Параметры» главного меню.

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

ВНИМАНИЕ! При выборе пунктов нормировки «по внутреннему стандарту» или «нормировка по пику» содержание матричных элементов считается менее существенным, чем основное условие нормировки (например, содержание элемента эталонной концентрации при нормировке **по внутреннему стандарту**) и определяется по остаточному принципу.

- **Нормировка суммы элементов** - флаг позволяет задать суммарное содержание и единицу измерения содержаний определяемых элементов. Используется, например, при **регрессии по эталонам**, которая может давать сумму и больше 100%.

7.4.3. Окно «Общие параметры обработки»

Настоящее окно выводится на экран при инициализации пользователем пункта «Общие параметры обработки» подменю «Параметры» главного меню или при нажатии на кнопку «Общие параметры обработки» в окне «Проект».

В настоящем окне (рис. 6) оператор имеет возможность задать общие параметры обработки спектров.

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

Рис. 6

Настоящее окно содержит несколько групп параметров.

Группа «Анализ»:

- **«Автоматический Анализ»** – флаг, задающий режим автоматической идентификации присутствующих элементов по всему рабочему списку;
- **«Подгонка калибровки»** – флаг, задающий режим подгонки спектров по разрешению и энергии;
- **«Вычитать спектр фона»** – флаг, задающий режим автоматического вычитания при анализе спектра заданного как "Спектр Фона".

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

Группа «Тип образца»:

- **«Тонкий»** - пленочные пробы и бумажные фильтры;
- **«Толстый»** - все остальные пробы.

Выбор типа образца имеет важное влияние на вычисления в методе фундаментальных параметров. Если образец «тонкий», программа игнорирует эффекты самопоглощения и подвозбуждения линий в образце.

Группа «Параметры пика вылета»:

- **«Сдвиг по энергии»** – энергия, на которую пик вылета смещен относительно родительского;
- **«Относительная интенсивность»** - относительная по отношению к родительскому пику интенсивность пика вылета.

Эти данные определяются экспериментально для конкретного детектора по спектру образца (например, Си или Fe).

Группа «Углы»:

- **«Трубки»** - угол между плоскостью образца (точнее, позиции измерения) и направлением на источник возбуждающего излучения;
- **«Детектора»** - угол между плоскостью образца и направлением на детектор.

Все углы задаются в градусах.

Группа «Способ возбуждения»:

- **«Мишень/источник»** - задает в качестве способа возбуждения пробы источник;
- **«Прямое излучение»** - задает в качестве способа возбуждения пробы прямое излучение.

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

«Расстояние от источника до детектора» определяет расстояние между источником излучения обрабатываемого спектра и детектором.

7.4.4. Окно «Параметры рентгеновского излучателя»

Настоящее окно выводится на экран при инициализации пользователем пункта «Параметры рентгеновского излучателя» подменю «Параметры» главного меню или при нажатии на соответствующую кнопку в окне «Проект».

В настоящем окне реализованы функции изменения параметров для расчета спектра излучения рентгеновского излучателя (трубки), используемые для спектрометров с прямым возбуждением.

В этом окне задаются параметры для расчета спектра излучения трубки, используемые для спектрометров с прямым возбуждением. Если спектрометр работает с радиоактивным источником или вторичными излучателями, следует установить режим «Мишень/источник».

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

Рис. 7

7.4.5. Окно «Рабочий список элементов»

Настоящее окно выводится на экран при инициализации пользователем пункта «Рабочий список элементов» подменю «Параметры» главного меню или при нажатии на соответствующую кнопку на панели инструментов.

В настоящем окне (рис.8) реализована функция изменения списка элементов, которые присутствуют в пробах.

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

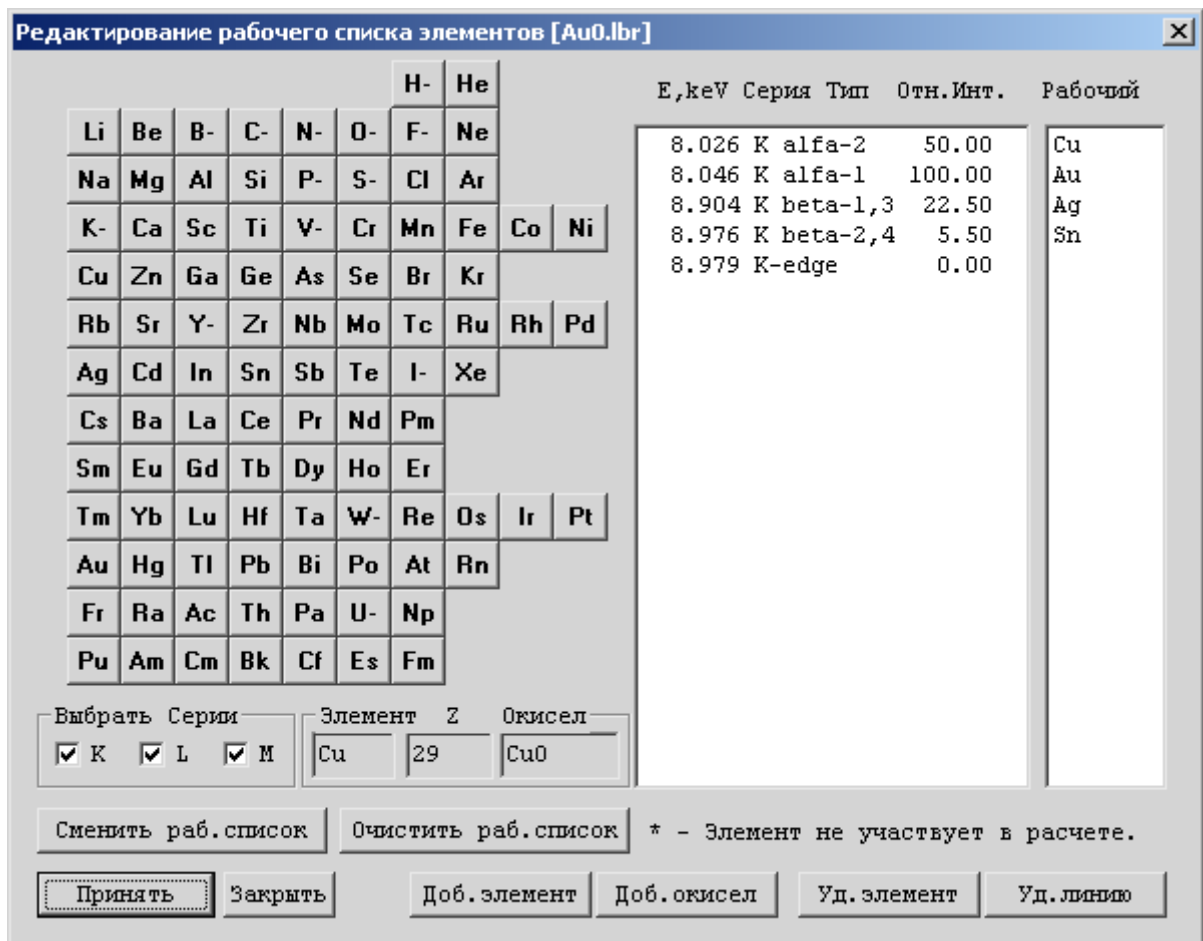


Рис. 8

Нажатием левой кнопки “мыши” необходимо выбрать на элемент в таблице Менделеева, список линий характеристического излучения появится в правой части экрана. Для включения выделенного элемента в рабочий список необходимо нажать на кнопку «Доб. элемент».

Для добавления окислов необходимо нажать на кнопку «Доб. окисел».

Если в рабочий список попадают два одинаковых элемента, первый автоматически удаляется.

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

Для сохранения сформированного рабочего списка необходимо нажать на кнопку «Принять». Для отмены сделанных изменений необходимо нажать на кнопку «Закрыть».

ВНИМАНИЕ!!! Данный список должен включать элемент вторичной мишени, а также матричные элементы, если они используются в расчете.

7.4.6. Окно «Список эталонов»

Настоящее окно выводится на экран при инициализации пользователем пункта «Список эталонов» подменю «Параметры» главного меню или при нажатии на соответствующую кнопку на панели инструментов.

В настоящем окне реализованы функции изменения данных эталона, которые будут использоваться при регрессии по эталонам или методе альфа - коррекции. Выбор метода анализа осуществляется в окне «Выбор метода анализа» (см.п.7.4.2).

Диалог содержит заданные в табличной форме (имя спектра, список элементов с содержаниями, эталонными содержаниями и интенсивностями) данные эталона, которые используются при регрессии по эталонам или методе альфа – коррекции (см. рис. 9). Выбор указанных методов осуществляется в окне «Выбор метода анализа».

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

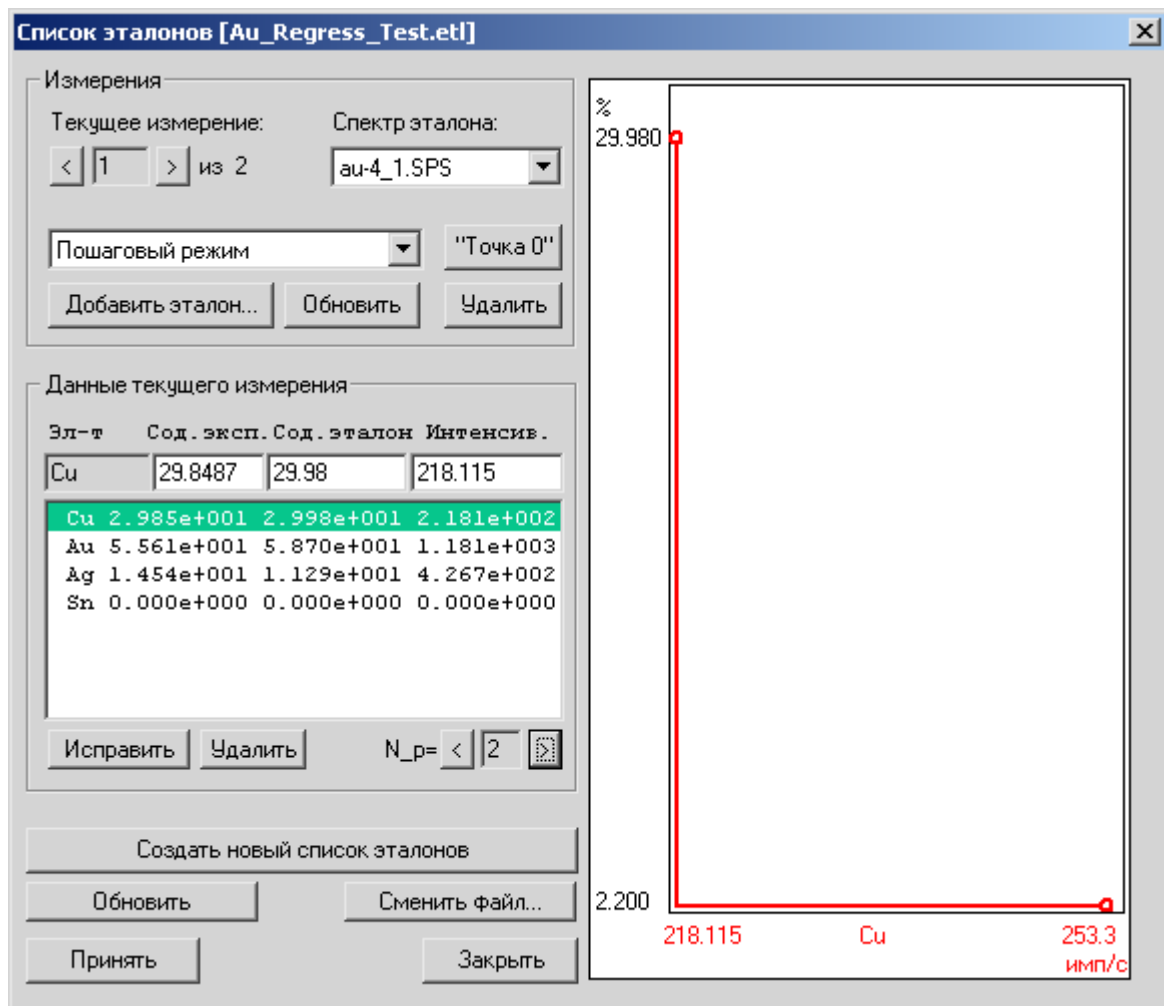


Рис.9

Для создания нового списка эталонов необходимо выполнить следующие действия:

- Нажать на кнопку «Создать новый список эталонов». В появившемся окне задайте имя файла, после чего нажмите «Открыть».
- В области «Измерения» выбрать в выпадающем списке способ добавления нового эталона («пошаговый режим» или «быстрое добавление»). Далее нажать на кнопку «Добавить эталон» в области «Измерения». При этом на экране появится окно выбора спектра добавляемого эталона. Укажите спектр

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

и нажмите на кнопку «Открыть». В зависимости от текущих настроек, программа выполнит обработку в пошаговом режиме (включающем подтверждения выбора элементов из рабочего списка и отображение окна результатов обработки спектра) или в быстром режиме (указанные окна не появляются на экране). При этом в области «Измерения» увеличится счетчик количества измерений. Кроме того, в области «Данные текущего измерения» отобразится данные элементов (определенное программой содержание, паспортное содержание и интенсивность).

Для редактирования данных в области «Данные текущего измерения» необходимо щелкнуть левой кнопкой «мыши» на интересующей строчке таблицы, при этом данных отобразятся в текстовых полях над таблицей. После редактирования для внесения исправлений в таблицу необходимо нажатием на кнопку «Исправить» или на клавишу «ENTER». Для каждого нового измерения нужно отредактировать колонку паспортного содержания – «Сод. эталон».

Всего каждый эталон может иметь до 20 точек (измерений), отличающихся содержанием общих элементов. В случае всего одного эталона, вторую точку можно добавить, нажав на кнопку «Точка 0».

Кнопка «Обновить» в области «Измерения» вызывает процедуру пересчета коэффициентов регрессии (или альфа-коррекции) для одного измерения. При этом используется режим, выбранный для добавления эталонов («пошаговый режим» или «быстрое добавление»). Аналогичная кнопка в левом нижнем углу вызывает процедуру обновления коэффициентов по всему набору измерений. При этом программа считывает из директории, где находятся спектры, файлы с именами, записанными для каждого измерения, обрабатывает их, заносит результаты анализа в таблицу и пересчитывает коэффициенты, одновременно определяя оптимальное число членов регрессии.

Содержания в исследуемом образце рассчитываются по коэффициентам полученных регрессионных уравнений, качество которых можно оценить по графикам.

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

Указав мышью на элемент в списке, можно увидеть в правой части экрана график зависимости «интенсивность – содержание» (для регрессии по эталонам) или «отклонение содержания – содержание» (для альфа-коррекции). Меняя число членов регрессии «N_p», можно несколько оптимизировать эталон.

Для сохранения всех данных настоящего окна необходимо нажать на кнопку «Принять».

Для отмены сделанных измерений необходимо нажать на кнопку «Заккрыть».

7.4.7. Окно «Список матриц»

Настоящее окно выводится на экран при инициализации пользователем пункта «Настройка списка матриц» подменю «Параметры» главного меню или при нажатии на соответствующую кнопку на панели инструментов.

В настоящем окне реализованы функции изменения данных списка матричных элементов, которые будут использоваться при анализе методом фундаментальных параметров.

Окно содержит заданные в табличной форме (имя, набор элементов с концентрациями) списки, которые используются как списки матричных элементов при анализе методом фундаментальных параметров (см. рис. 10).

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

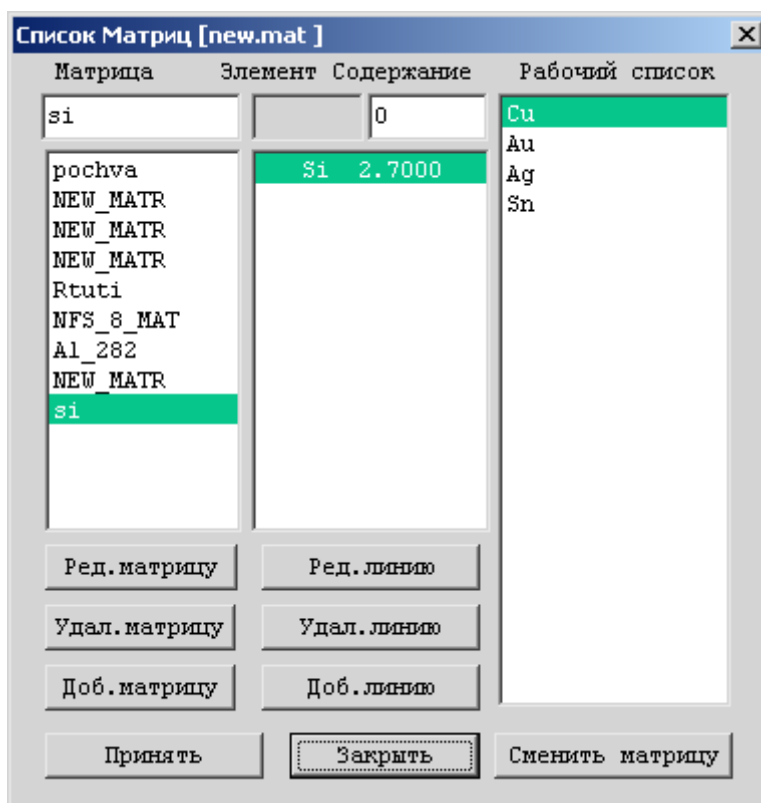



Рис.10

Процедура добавления линий следующая - выберите матрицу и нужный элемент из рабочего списка, затем нажмите на кнопку «Доб.линию». Вызвав элемент из списка в окно редактирования, можно скорректировать его содержание в пробах. Внесение исправлений - кнопкой «Ред. Линию». Необходимо подчеркнуть, что в методе фундаментальных параметров суммарная концентрация матричных и определяемых элементов всегда равна 100%, и поэтому суммарная концентрация матричных элементов существенно влияет на результат.

7.4.8. Окно «Тип образца»

Настоящее окно выводится на экран при инициализации пользователем пункта «Тип образца» подменю «Параметры» главного меню или при нажатии на кнопку  на панели инструментов.

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

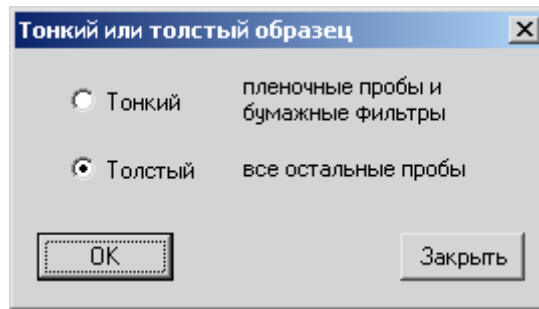



Рис. 11

Для принятия изменений необходимо нажать на кнопку «ОК». Для отмены – «Закреть».

7.4.9. Окно «Источник возбуждения»

Настоящее окно (см. рис. 12) выводится на экран при инициализации пользователем пункта «Источник возбуждения / Напряжение в трубке» подменю «Параметры» главного меню или при нажатии на кнопку  на панели инструментов в случае, если в общих параметрах анализа (см.п.7.4.3) в качестве способа возбуждения задан источник.

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

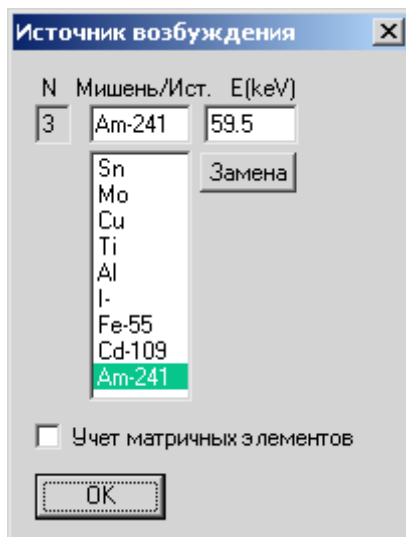



Рис. 12

Элемент мишени / Источник - химическое обозначение элемента вторичной мишени. В тех случаях, когда в приборе используется естественный источник возбуждающего излучения (например, Am-241 с линией 59.4 кэВ), имя источника указывается в последних трех строках списка, а энергия возбуждающей линии в окне “E(keV)”.

7.4.10. Окно «Напряжение в трубке»

Настоящее окно (см. рис. 13) выводится на экран при инициализации пользователем пункта «Источник возбуждения / Напряжение в трубке» подменю «Параметры» главного меню или при нажатии на кнопку  на панели инструментов в случае, если в общих параметрах анализа (см.п.7.4.3) в качестве способа возбуждения задано прямое излучение.

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата



Рис. 13

7.4.11. Настройка меню и панели инструментов

Над верхним окном главного окна программы находятся кнопки управления (далее - панель инструментов).

Для выбора оптимального набора кнопок управления вызывают окно настройки вида панели инструментов **«Настройка меню и кнопок»** в подменю **«Параметры»**.

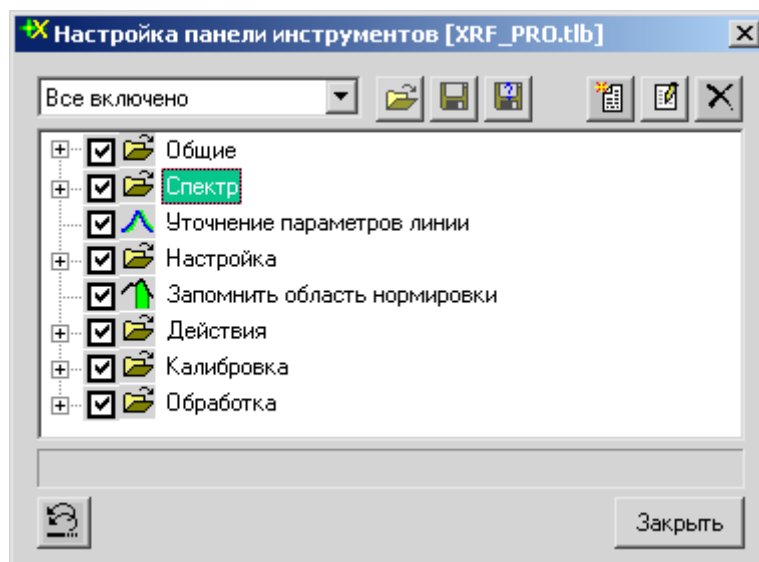



Рис. 14

По умолчанию в окне настройки включены все кнопки управления (установлены все флажки напротив всех пунктов подменю программы ).

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

Для удаления ненужной кнопки управления, находящейся над верхним окном программы, необходимо снять соответствующий флажок в окне настройки панели инструментов.

При необходимости можно удалить, создать новую, сохранить, открыть или переименовать конфигурацию файла схем настройки кнопок управления.

Выбранный набор кнопок управления отобразится над верхним окном главного окна программы.

7.4.12. Параметры отчета

Данное окно содержит параметры, позволяющие сформировать желаемый вид файла результатов анализа (см. рис. 15).

Поля «Верхняя шапка» и «Нижняя шапка» предусмотрены для включения в отчет необходимой пользователю служебной информации. Для ввода текста в указанные поля необходимо щелкнуть левой кнопкой «мыши» на требуемой строчке и ввести текст.

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

Рис. 15

Блок **«Вывод»** включает следующие параметры:

- При установке чек-бокса **«Экран»** после создания отчета вызывается программа просмотра, определенная в системе по умолчанию. Если данный чек-бокс не установлен, отчет не выводится на экран;
- При установке чек-бокса **«Файл»** отчет сохраняется в каталоге для отчетов под именем: *имя_спектра.htm*. Если файл с таким именем существует, программа выдаст предупреждение «Файл отчета имя_спектра.htm уже существует. Перезаписать?». Оператор выбирает: «Да», «Нет» или «Отмена» (перезаписать существующий файл, сохранить отчет во временный файл (**report.htm**) и отменить сохранение).

Если данный чек-бокс не установлен, отчет записывается только во временный файл (**report.htm**).

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

- При установке чек-бокса **«Замена файла без предупреждения»** существующий файл перезаписывается без предупреждения;
- При установке чек-бокса **«Открыть в Word»** программа откроет созданный файл отчета программой Microsoft Word, если программа Microsoft Word версии не ниже 9.0 (2000) установлена на компьютере. Открытие файла отчета в указанной программе позволяет оператору напрямую редактировать отчет, а также отформатировать страницы отчета для печати.

Блок «Опции» включает следующие параметры:

- **«Добавить сводную таблицу»** - включает в протокол анализа сводную таблицу по обработанным в серии спектрам.

Все параметры обработки спектра при выходе из программы запоминаются в файле проекта.

Для сохранения изменений необходимо нажать на кнопку «Принять и закрыть». Для закрытия настоящего окна без сохранения изменений необходимо нажать на кнопку «Отмена».

7.5. Калибровка

7.5.1. Линейная калибровка по двум пикам

Настоящее окно выводится на экран при инициализации пользователем пункта «линейная калибровка» подменю «Калибровка» главного меню или при нажатии на соответствующую кнопку на панели инструментов.

В настоящем окне реализованы функции линейной калибровки по двум пикам.

После вызова окна (см. рис. 16) на экране появится панель с кнопками представляющими главные линии элементов из рабочего списка.

Для проведения настоящей калибровки необходимо выделить первый интересующий пик (аналогично выделению зоны ROI, правой кнопкой «мыши»), щелкнуть по названию элемента. Далее необходимо выделить второй пик и щелкнуть

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

на название соответствующего элемента. При этом программа автоматически проведет аппроксимацию пиков и выведет результат в верхнее окно.

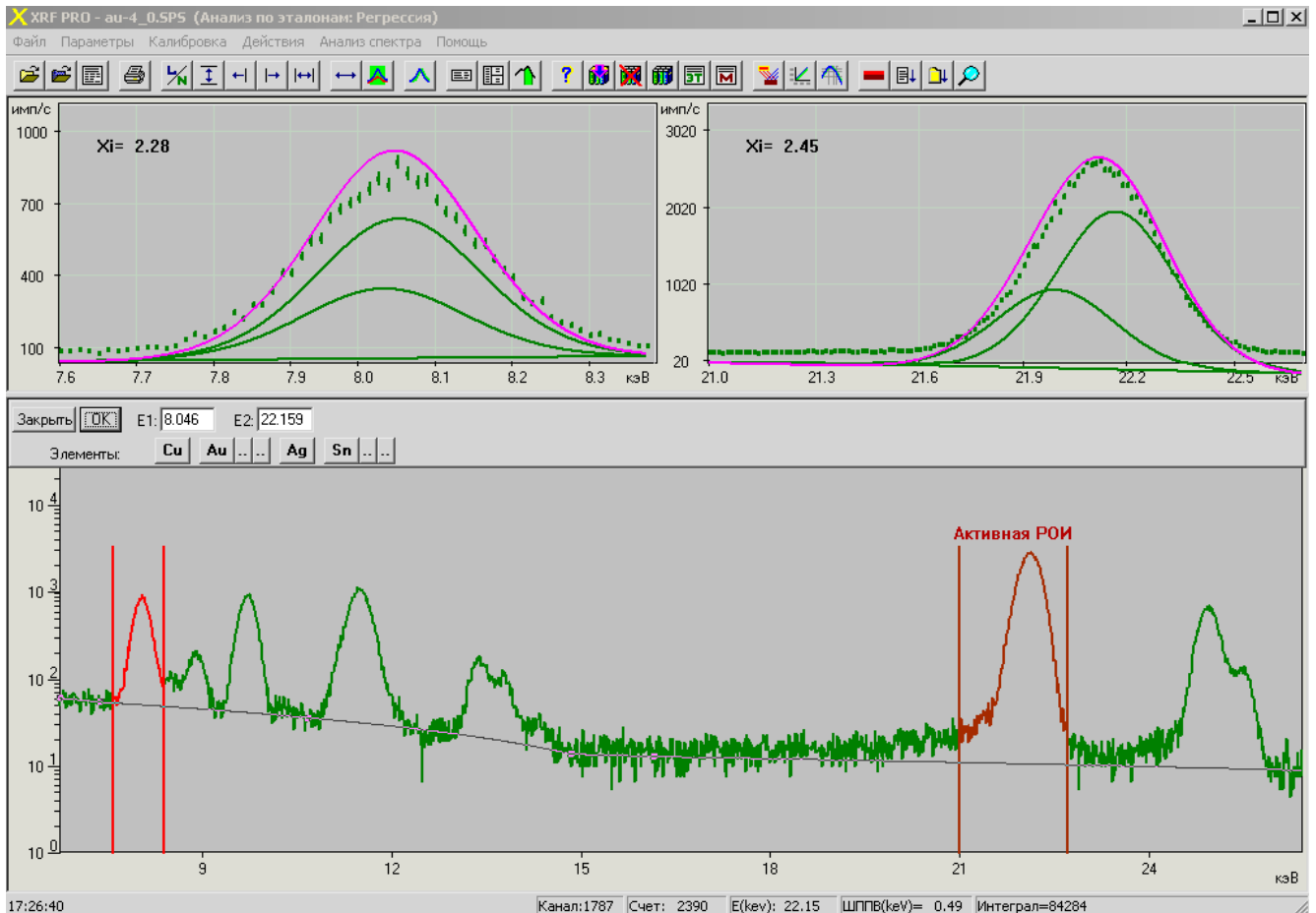


Рис. 16

7.5.2. Калибровка по эффективности

Настоящее окно выводится на экран при инициализации пользователем пункта «График эффективности» подменю «Калибровка» главного меню или при нажатии на соответствующую кнопку на панели инструментов.

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

В настоящем окне (см. рис.17) реализованы функции линейной калибровки по эффективности.

Окно содержит заданную в табличной форме кривую "энергия-эффективность регистрации" для Вашего детектора (до 25 точек). Корректировать кривую эффективности, можно двигая мышью (при нажатой правой кнопке) точки на графике, или в окне редактирования над списком. Эффективность определяется один раз по эталонным образцам для вакуума и нормального давления воздуха.

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

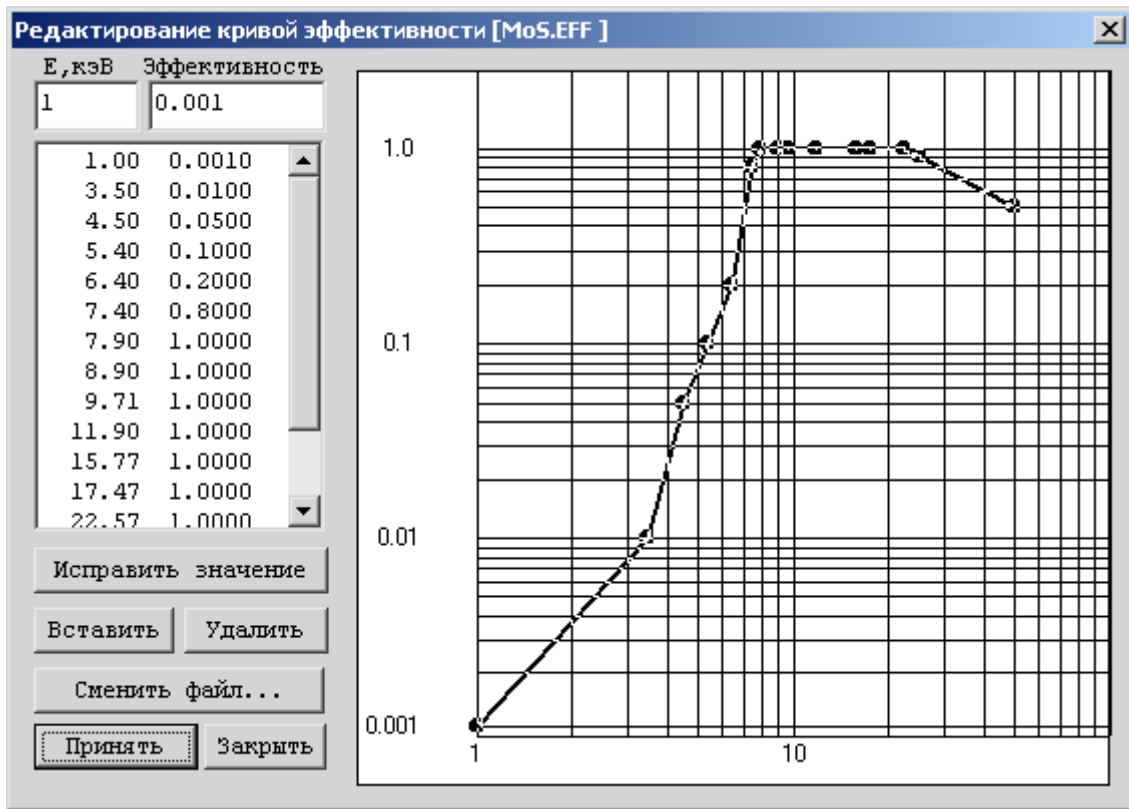



Рис. 17

7.6. Анализ спектра

Анализ спектра, независимо от метода, вызывается при инициализации пользователем пункта «Анализ выбранным методом» в подменю «Анализ спектра» главного меню или при нажатии на кнопку  на панели инструментов.

Результатом анализа является окно, представленное на рисунке 18.

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

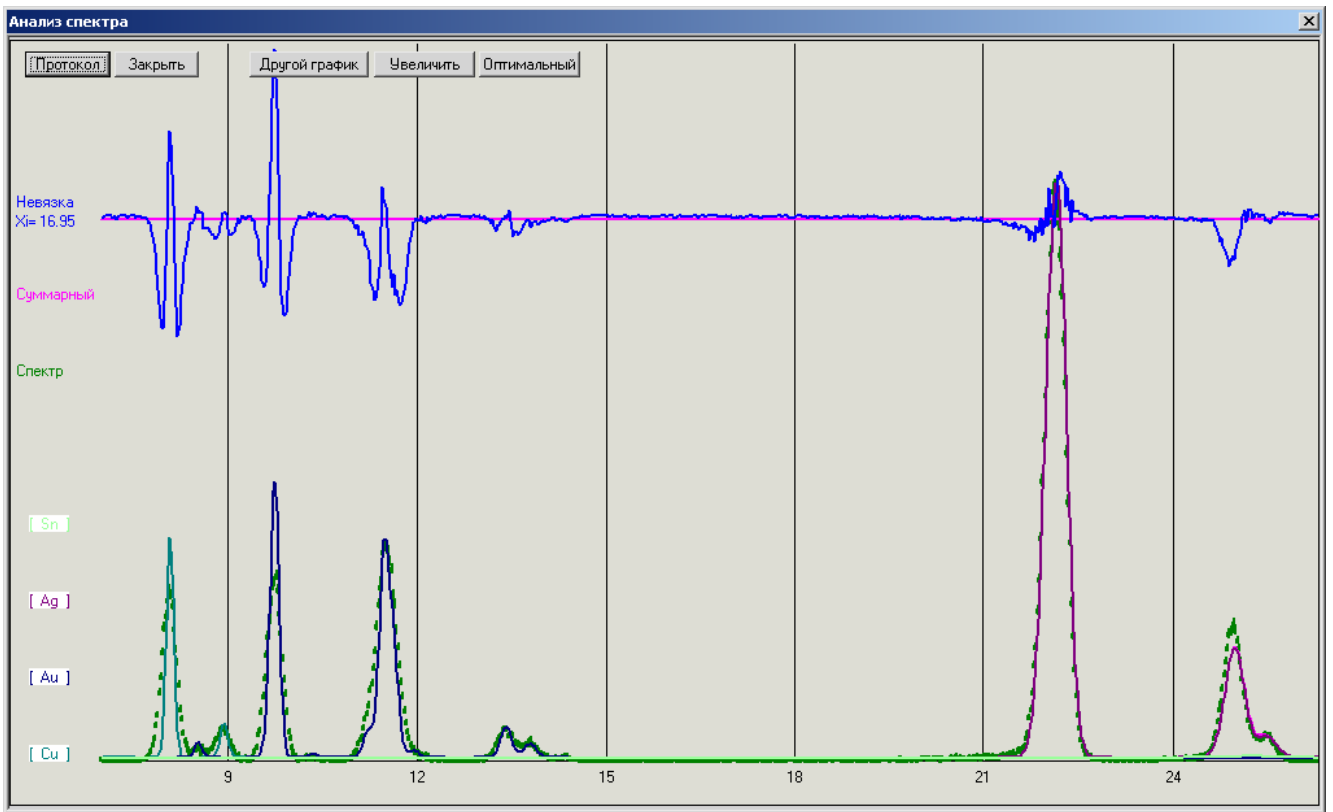


Рис. 18

В настоящем окне отображаются составляющие модели спектра, график невязки и управляющие кнопки.

При нажатии на кнопку «Протокол» данное окно закрывается и вызывается созданный протокол обработки спектра (в соответствии с параметрами отчета, см.п.7.4.12).

При нажатии на кнопку «Закреть» данное окно исчезнет с экрана.

Кнопка «Другой график» переключает режим просмотра графиков, «Увеличить» - осуществляет увеличение вертикального масштаба графиков, «Оптимальный» - восстанавливает их первоначальное состояние.

Далее описываются сами методы анализа.

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

7.6.1. Анализ методом сравнения с эталоном

Анализ методом сравнения с эталоном основан на эмпирическом определении и последующем моделировании системой уравнений, зависимости концентрации от интенсивности линий. Такая модель построена при наличии набора эталонов и будет работать для проб близких по составу к этой группе эталонов.

Первый этап - задав нормировку по эталону, введите и обработайте спектр эталонного образца.

Второй этап - войдя в окно «Список эталонов», добавьте новый эталон в список. При наличии нескольких эталонов с возрастающими содержаниями анализируемых элементов, первый этап можно повторять, включая в данные по элементам в эталоне новые точки.

Третий этап - выбрав в окне «Список эталонов» нужный эталон, загружайте спектры и обрабатывайте. Содержания в исследуемом образце рассчитываются автоматически.

7.6.2. Анализ методом фундаментальных параметров

В методе фундаментальных параметров все влияния рассчитываются аналитически, на основе известных параметров спектрометрической установки и физических констант.

Основным достоинством метода является простота работы аналитика и возможность анализа проб неизвестного состава (с некоторыми ограничениями, о которых будет сказано дальше).

Основным недостатком является сравнительно меньшая точность и необходимость указывать программе концентрации тех элементов в пробе, линии которых, по тем или иным причинам не видны в спектре.

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

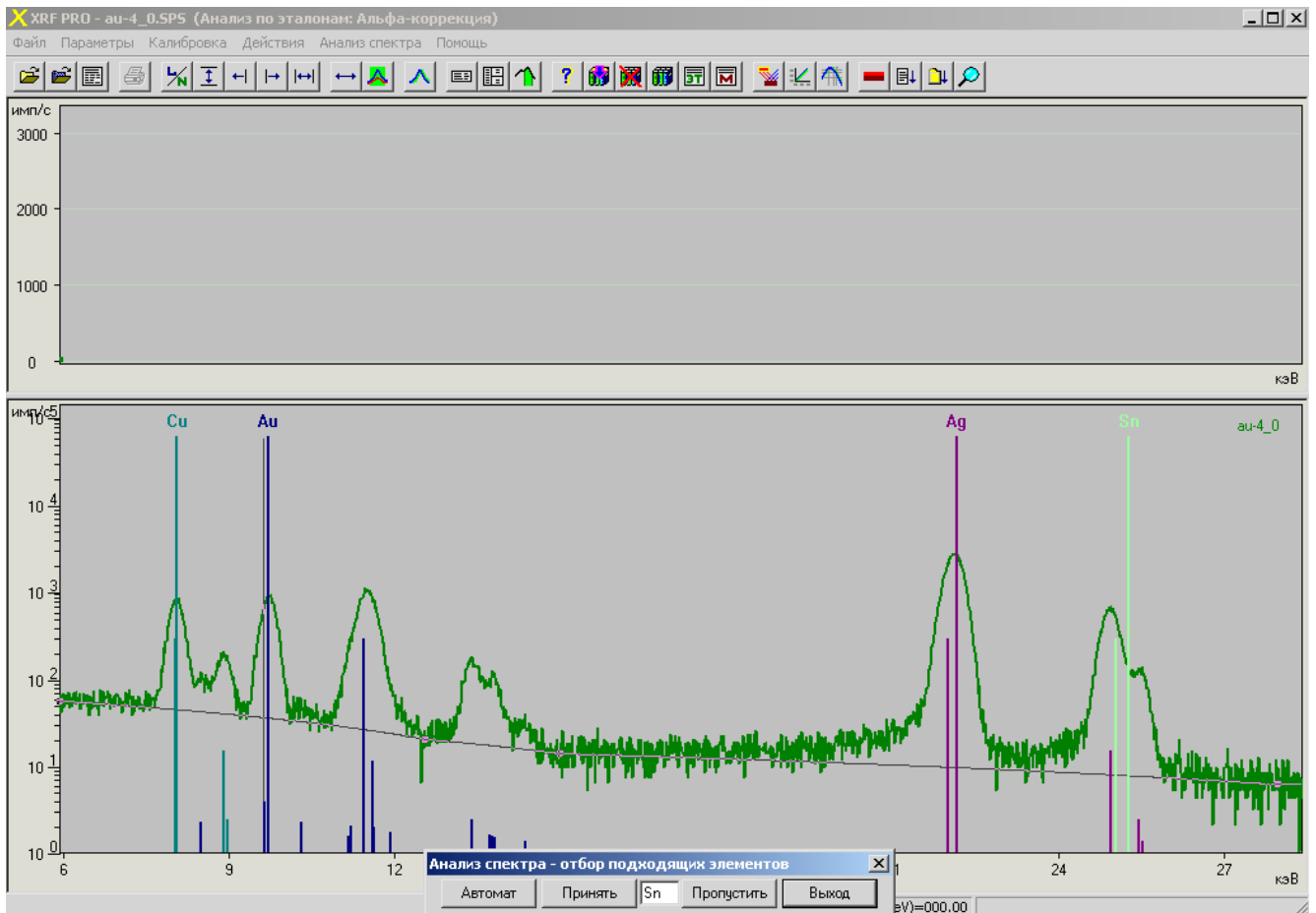


Рис. 19


При запуске анализа, в случае выключенного режима «Автоматический поиск» (см. «Общие параметры обработки»), инициализируется процедура отбора химических элементов, включенных в рабочий список. На спектре отображаются линии элементов, и для каждого элемента на экран выводится окно «Анализ спектра – отбор подходящих элементов» (см. рис. 19). Пользователь имеет возможность включить данный элемент в обработку (кнопка «Принять»), исключить из обработки (кнопка «Пропустить»), включить все элементы без подтверждения (кнопка «Автомат») и отменить обработку (кнопка «Выход»).

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

После завершения отбора на экране появятся смоделированные спектры включённых элементов, экспериментальный спектр (без фона) и результат его аппроксимации методом инкрементальной деконволюции. Расчет концентраций производится автоматически после нажатия клавиши "Принять".

Для компенсации возможных дрейфов калибровки можно задать подгонки спектров по разрешению и энергии (см. "Параметры"). Учет остальных эффектов осуществляется заданием параметров обработки.

7.6.3. Анализ серии спектров

Данная функция запускается при инициализации пользователем пункта «Анализ серии спектров» в подменю «Анализ спектров» главного меню или при нажатии кнопки  на панели инструментов.

При вызове настоящей функции на экране появляется окно, отображенное на рис. 20.

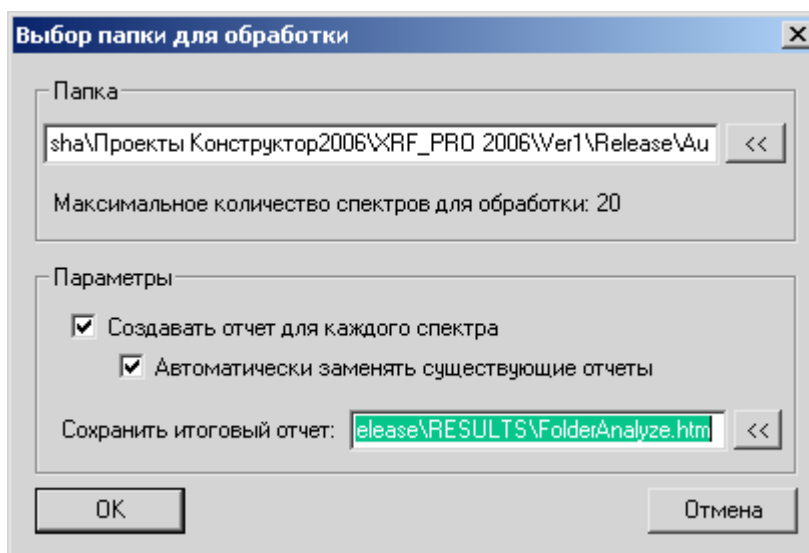


Рис. 20

В данном окне необходимо

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

- указать папку, в которой будут обрабатываться спектры;
- установить или сбросить флаг «создавать отчет для каждого спектра» в этой папке;
- указать папку, в которую необходимо сохранить итоговый отчет.

Для сохранения параметров и запуска анализа серии спектров необходимо нажать «ОК». При этом процедура анализа каждого спектра, имеющегося в указанном каталоге, идентична процедуре анализа одиночного спектра (см.п.7.6.1).

Для отмены запуска анализа необходимо нажать на кнопку «Отмена».

7.6.4. Сшивка результатов

Сшивка по элементу - процедура позволяющая сопоставить и объединить в один файл результаты обработки спектров одного образца, снятых с использованием двух разных мишеней.

Для сшивки введите (используя кнопки “Выбрать”) файл с результатом обработки спектра снятого с более “мягкой” мишенью в окно «1-й результат», а файл с результатом обработки спектра снятого с более “жесткой” мишенью в окно «2-й результат». Выберите в первом окне строку с хорошо определенным элементом - в правом окне подсветится строка с соответствующим элементом во втором списке.

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

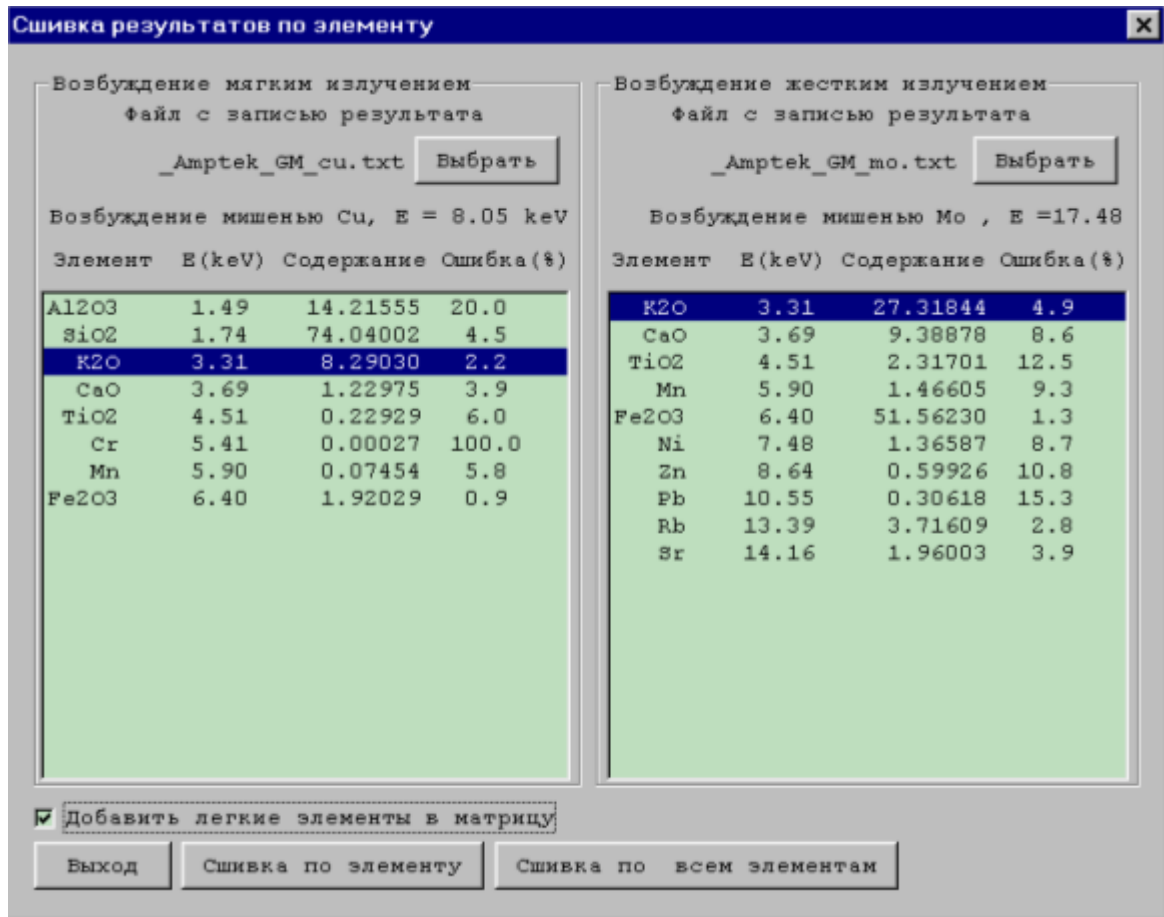


Рис. 21

Нажав клавишу “Сшивка по элементу” вы получите суммарный результат нормированный на 100%. По умолчанию он будет записан в файл “summ.htm”, который в свою очередь можно сшивать дальше.

8. Сообщения об ошибках

Сообщения оператору об ошибках, а также их описание и варианты действий оператора в случае их появления описаны в таблице 1.

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

Таблица 1. Сообщения оператору об ошибках и варианты действий оператора.

Сообщение	Описание ошибки	Варианты действий оператора
«Неправильный регистрационный номер»	При регистрации программы (см. раздел 4) оператором был введен неправильный регистрационный номер.	1.Внимательно ввести регистрационный номер еще раз. 2.Связаться с разработчиком и уточнить регистрационный номер. Затем см.предыдущий пункт.
«Ошибка! Проверьте рабочий список!»	При чтении рабочего списка произошла ошибка, либо он пустой.	Убедитесь, что в проекте используется требуемый рабочий список, содержащий необходимые элементы.
«Недопустимый тип спектра»	Загружаемый спектр имеет неизвестный формат.	Загрузить другой файл спектра.
«Невозможно загрузить файл проекта Возможно, файл поврежден.»	Программе не удалось загрузить указанный файл проекта. Возможно, файл не существует или поврежден.	Убедитесь в существовании файла и повторите загрузку.
«Папка с результатами ... не найдена. В качестве папки с результатами используется Results.»	Путь к папке, содержащей результаты анализа спектров, записанный в проекте, не существует. Автоматически в каталоге с	Сохранить проект и продолжить работу.

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

Сообщение	Описание ошибки	Варианты действий оператора
	программой создается папка «Results», которая устанавливается в качестве папки с результатами.	

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

9. Форма отчета

Файл отчета сохраняется в формате HTML и открывается для просмотра в браузере по умолчанию.

Он также может быть открыт любой программой, поддерживающей HTML, например Microsoft Word, Excel (начиная с Office 2000). Рекомендуется использовать Word для редактирования и форматирования страниц отчета для печати.

10. Требования к файлам спектров.

Набор спектров может проводиться в любой программе набора спектров. При этом запись спектров должна быть реализована в формате, приведенном в таблице 2. Наименование файла спектра не должно превышать 80 символов.

В настоящей программе реализована поддержка спектров до 16384 каналов включительно.

Таблица 2. Заголовок файла спектра (размер 1024 байт).

Адрес	Размер	Данные
0	2	Количество каналов в спектре (INT2)
2	65	1-ая строка описания пробы*
67	65	2-ая строка описания пробы*
132	65	3-я строка описания пробы*
197	65	4-ая строка описания пробы
262	12	дата отбора пробы: год, месяц, день, час, минута, секунда (INT2)
274	12	дата начала набора: год, месяц, день, час, минута, секунда (INT2)
286	4	вес пробы (FLOAT4)
290	4	объем пробы (FLOAT4)
294	4	площадь отбора пробы (FLOAT4)
298	1	единица измерения веса (INT1): 1-мг, 2-г, 3-кг
299	1	единица измерения объема (INT1): 1-мм ³ , 2-см ³ , 3-дм ³ , 4-м ³
300	1	единица измерения площади (INT1):

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

		1-мм ² , 2-см ² , 3-дм ² , 4-м ²
301	4	живое время в секундах (INT4)
305	4	реальное время в секундах (INT4)
309	4	живое время в тиках системного таймера (INT4)
313	4	реальное время в тиках системного таймера (INT4)
317	4	коэффициент геометрической эффективности (FLOAT4)
321	4	коэффициент концентрации (FLOAT4)
325	4	длительность отбора пробы (FLOAT4)
329	1	единица измерения длительности отбора пробы (INT1)
330	4	погрешность пробоподготовки %(FLOAT4)
334	4	число секунд скорректированного времени (INT4)
338	4	число тиков таймера IBM PC (INT4)
342	4	расстояние от пробы до края детектора [см] (FLOAT4)
346	2	номер мишени (INT2)
348	4	напряжение трубки, кВ (FLOAT4)
352	4	ток трубки, мА (FLOAT4)
356	4	коэффициент А энергетической калибровки (FLOAT4) энергия =An+B
360	4	коэффициент В энергетической калибровки (FLOAT4) энергия =An+B
364	22	зарезервировано
386	1	тип детектора (INT1): 1-полупроводниковый, 2-сцинтилляционный
387	1	тип излучения (INT1): 1-альфа, 2-бета, 3-гамма, 4-рентген
388	51	строка описания детектора*
439	1	количество плоскостей (INT1):0 и 1 - одна плоскость
440	4	коэффициент А энергетической калибровки (FLOAT4) энергия =An+B для второй плоскости
444	4	коэффициент В энергетической калибровки (FLOAT4) энергия =An+B для второй плоскости

ДАННЫЕ КАНАЛОВ: по 4-е байта (INT4) на канал. Стартовый адрес:1024.

*) формат строки (Паскалевского типа): первый байт - количество символов в строке, а затем - сами символы строки

Условные обозначения чисел:

- INT1 - однобайтовое целое;
- INT2 - двухбайтовое целое;
- INT4 - четырехбайтовое целое;
- FLOAT4 - четырехбайтовое вещественное.

Изм.	Лист	№ докум	Фамилия	Дата
Инв. № подлинника	Фамилия и дата	Взамен инв. №	Инв. № дубликата	Фамилия и дата

