

На правах рукописи

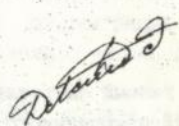
Лагода Дмитрий Павлович

**АППАРАТНО-ПРОГРАММНЫЕ СРЕДСТВА АВТОМАТИЗАЦИИ  
АТОМНО-АБСОРБЦИОННОГО АНАЛИЗА**

- 05.13.07 - автоматизация технологических  
процессов и производств  
05.13.05 - элементы и устройства  
вычислительной техники  
и систем управления

Автореферат диссертации на соискание учёной степени  
кандидата технических наук

Харьков 1992 г.





00815933 (Т)

ислительной техники и програм-  
ого института

- Научные руководители - доктор технических наук, профессор  
КОРСУНОВ Н.И.,  
кандидат технических наук, доцент  
ЖИЛЯКОВ Е.Г.
- Официальные оппоненты - доктор технических наук, профессор  
ЯСТРЕБЕНЕЦКИЙ М.А.,  
кандидат технических наук, доцент  
ИВАШКО А.В.
- Ведущее предприятие - Северодонецкое опытно-конструктор-  
ское бюро автоматики

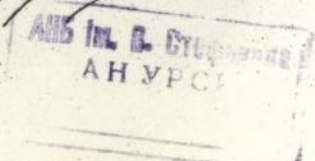
Защита состоится 14 января 1993 г. в 14:30 часов на заседании  
специализированного совета Д 068.39.02 при Харьковском политехни-  
ческом институте им.В.И.Ленина (310002, Харьков, ГСП, ул.Фрунзе,  
21)

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке института.

Автореферат разослан " \_\_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 1992 г.

Учёный секретарь  
специализированного совета

КИЗИЛОВ В.У.



**Актуальность темы.** Важным средством ускорения научно-технического прогресса служит автоматизация основных технологических процессов в различных отраслях промышленности с использованием элементов и устройств вычислительной техники.

Неотъемлемым этапом автоматизированного управления технологическими процессами является измерение значений некоторых их параметров в целях контроля за ходом процессов и принятия решений о выдаче соответствующих управляющих воздействий.

В металлургической, химической и ряде других отраслей промышленности одним из важнейших контролируемых параметров технологических процессов является концентрация различных веществ в разнообразных средах.

Измерение концентрации тех или иных веществ, а также вообще определение их присутствия в пробах является важной задачей контроля состояния окружающей среды, биомедицинских анализов и научных экспериментов, в том числе и фундаментальных физико-химических исследований.

Одним из самых современных и распространенных методов анализа различных проб с целью принятия решений об их составах является атомно-абсорбционная спектрометрия, основанная на способности свободных атомов поглощать оптическое излучение в узком диапазоне длин волн. Для реализации этого метода в настоящее время разработаны и серийно выпускаются промышленностью спектрофотометры, характеристики выходных сигналов которых зависят от степени ослабления светового потока, при прохождении его через атомизированное вещество пробы.

Точность определения концентраций веществ в пробах, а следовательно и качество принимаемых на этой основе решений о ходе технологических процессов в сильной степени зависит от характеристик мешающих и принципиально неустранимых шумов аппаратуры и случайных колебаний составов проб. Учет вероятностных характеристик случайных помех позволяет улучшить качество принимаемых решений о составах исследуемых веществ, в том числе уменьшить величину возникающих погрешностей определения концентраций и решить задачу снижения пределов обнаружения предельно малых содержаний определяемых элементов в пробах.

Распространенность метода атомно-абсорбционного анализа (ААА) в промышленности, медицине и научных исследованиях позволяет гово-

речь об актуальности задачи повышения качества принятия решений о составах анализируемых проб за счёт оптимального учёта вероятностных характеристик случайных помех, обусловленных аппаратурными шумами и другими неконтролируемыми факторами.

**Цель работы:** разработка методов и алгоритмов принятия решений о составах проб при управлении технологическими процессами с использованием метода атомно-абсорбционного анализа.

**Задачи исследований:**

1. Разработка алгоритма построения математической модели порождения экспериментальных данных по текущим значениям выходного сигнала спектрофотометра;

2. Усовершенствование на основе построенной математической модели процедуры принятия решений о значениях измеряемых характеристик сигнала, включая уточнение величины возникающих погрешностей и её уменьшение за счёт использования приёмов оптимизации;

3. Разработка последовательной решающей процедуры обнаружения малых содержаний определяемых элементов в пробах;

4. Разработка технических средств и программного обеспечения для реализации предложенных алгоритмов.

**Методы исследования.** При решении поставленных задач в работе использовались методы теории вероятностей и математической статистики, методы теории вычислительных систем, методы теории оптимизации, компьютерные вычислительные эксперименты с использованием реальных данных, полученных на спектрофотометре "Сатурн-3".

**Научную новизну представляют:**

- вероятностная модель порождения экспериментальных данных атомно-абсорбционного анализа, построенная на основе теоретических выводов и методом вычислительных экспериментов с использованием реальных данных, полученных на спектрофотометре "Сатурн-3" и являющаяся основой методов их обработки;

- результаты теоретических и экспериментальных исследований погрешностей определения максимальных и интегральных значений сигналов поглощения, позволяющие обоснованно выбрать доверительные интервалы для значений концентраций определяемых элементов в пробах;

- оптимальные процедуры обработки выходных данных спектрофотометра, позволяющие повысить точность определения концентраций по интегральному значению сигнала поглощения, а также снизить пределы обнаружения малых содержаний определяемых элементов в пробах;

- схемные решения для технической реализации предложенных методов обработки выходных данных спектрофотометра.

**Практическая ценность работы** состоит в следующем:

- разработана методика статистической обработки выходных данных спектрофотометров при исследовании проб, включающая этап оценивания параметров вероятностной модели помех и вычисления достоверительных интервалов для определяемых характеристик сигналов поглощения;

- оптимизирована процедура оценки интегрального значения сигнала поглощения, что позволяет в 1,3 раза снизить погрешность результатов анализа;

- разработана оптимальная решающая процедура обнаружения слабых сигналов поглощения на фоне помех, что позволяет снизить предел обнаружения элементов в пробе и с минимальной задержкой обнаружить потери определяемого элемента до начала этапа атомизации;

- разработаны технические средства и программное обеспечение для реализации предложенных методов на персональном компьютере, что позволяет автоматизировать процесс принятия решений о составах исследуемых проб.

**Реализация в промышленности.** Основные результаты диссертационной работы внедрены в Северодонецком опытно-конструкторском бюро автоматики при модернизации спектрофотометров "Сатурн-3" и разработке приборов нового поколения "Сатурн-4".

В соответствии с актом о внедрении результатов диссертационной работы экономический эффект от использования предложенных методов на одном приборе составит 1281280 руб. за расчётный период его эксплуатации - 10 лет.

**Апробация работы и публикации.**

Апробация работы. Результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на IX Тамбовской научно-технической конференции по спектроскопии "Применение спектральных методов анализа в народном хозяйстве", на республиканской научно-технической конференции "Функционально ориентированные вычислительные системы", а также на научно-технических конференциях преподавателей и сотруд-

ников кафедры в 1990, 1991 и 1992 годах.

Публикации. По результатам исследований опубликовано 4 работы, в том числе одна монография.

**Основные положения, представляемые к защите:**

- методика обработки экспериментальных данных атомно-абсорбционного анализа при измерении концентраций определяемых элементов в пробах;

- способ снижения погрешности определения интегрального значения сигнала поглощения и структура, реализующего его устройства;

- методика обработки экспериментальных данных, позволяющая снизить предел обнаружения слабых сигналов поглощения.

- технические средства и программное обеспечение для автоматизации процесса принятия решений о составах исследуемых проб на основе результатов ААА.

**Структура и объём работы.** Диссертация состоит из введения, пяти глав и заключения, изложенных на 145 страницах машинописного текста, в который входят 14 рисунков и 25 таблиц; содержит список литературы из 65 наименований и пять приложений на 39 страницах.

**Содержание работы.**

Во введении приведены результаты анализа современного состояния исследуемой проблемы и показана актуальность работы. Дана общая характеристика работы и описана её структура. Сформулирована цель диссертационной работы, её научная новизна и практическая ценность.

В первой главе дано краткое описание метода атомно-абсорбционного анализа и его сравнение с другими методами исследования проб при управлении технологическими процессами и проведении научных исследований. Приведен аналитический обзор монографической и журнальной литературы по методам обработки экспериментальных данных, используемым в атомно-абсорбционной спектрометрии.

На основе рассмотренных особенностей атомно-абсорбционного анализа и применяемых в настоящее время методов обработки экспериментальных данных, с использованием которых принимаются решения о составах исследуемых проб обоснована актуальность темы и дана развёрнутая постановка задачи.

Во второй главе приведены результаты исследования вероятностных характеристик помехи на этапах сушки и озоления атомно-абсорбционного анализа. С этой целью по имеющимся девяти реализациям за-

писи выходного сигнала спектрофотометра, полученным на спектрофотометре "Сатурн-3", были вычислены оценки средних

$$\bar{X}_c = \frac{1}{n_c} \sum_{i=1}^{n_c} X_i \quad ; \quad (1)$$

$$\bar{X}_o = \frac{1}{n_o} \sum_{i=1}^{n_o} X_{i+n_c} \quad ,$$

дисперсий

$$\tilde{\sigma}_c^2 = \frac{1}{n_c - 1} \sum_{i=1}^{n_c} [X_i - \bar{X}_c]^2 \quad ; \quad (2)$$

$$\tilde{\sigma}_o^2 = \frac{1}{n_o - 1} \sum_{i=1}^{n_o} [X_{i+n_c} - \bar{X}_o]^2 \quad ,$$

и нормированных автоковариационных функций (АКФ)

$$\tilde{\rho}_c(\tau) = \frac{1}{(n_c - \tau - 1)} \sum_{i=1}^{n_c - \tau - 1} (X_i - \bar{X}_c)(X_{i+\tau} - \bar{X}_c) / \tilde{\sigma}_c^2 \quad ; \quad (3)$$

$$\tilde{\rho}_o(\tau) = \frac{1}{(n_o - n_c - \tau - 1)} \sum_{i=1}^{n_o - \tau - 1} (X_{i+n_c} - \bar{X}_o)(X_{i+n_c+\tau} - \bar{X}_o) / \tilde{\sigma}_o^2 \quad .$$

В соотношениях (1)–(3) индексами о и с отмечены параметры, относящиеся к этапам сушки и озоления соответственно,  $X_i$  – отсчёт на выходе прибора в моменты времени  $i\Delta t$ ,  $\Delta t$  – интервал дискретизации АЦП.

Для проверки непротиворечивости гипотезы о нормальности распределения вероятностей помехи экспериментальным данным использовалась методика подбора вида функции плотности вероятностей к сгруппированным данным, с помощью критерия  $\chi^2$ . Количество интервалов разбиения было выбрано равным 10, уровень значимости  $\alpha = 0,01$ .

В результате проверки гипотезы о нормальности распределения отсчётов помехи с помощью критерия  $\chi^2$  оказалось, что ни в одном из исследуемых случаев нет оснований её отвергнуть.

Для оценки значимости различия средних значений помехи на

различных этапах одного и того же опыта, а также для различных опытов использовалась случайная величина

$$t = \frac{\bar{X} - m}{\sigma} \sqrt{n}, \quad (4)$$

где  $n$  - количество отсчётов, на основании которых вычислены  $\bar{X}$  и  $\sigma^2$ ;  $m$  - предполагаемое значение математического ожидания.

Случайная величина  $t$  распределена по так называемому закону Стьюдента.

Для сравнения дисперсий по их оценкам вида (2) с использованием различных выборок обычно применяется случайная величина

$$\eta_{i,j}(n_1, n_2) = \frac{\tilde{\sigma}_i^2}{\tilde{\sigma}_j^2}, \quad (5)$$

которая имеет  $F$  распределение с  $n_{i-1}$ ,  $n_{j-1}$  степенями свободы.

Статистический анализ имеющихся экспериментальных данных показывает, что может быть принята гипотеза гауссового распределения вероятностей помех. При этом параметры распределения (математическое ожидание и АКФ) на отдельных этапах одного и того же опыта являются стабильными. Вместе с тем от опыта к опыту могут наблюдаться значительные вариации параметров распределения вероятностей.

В качестве модели порождения экспериментальных данных при атмно-абсорбционном анализе предложено использовать модель авторегрессии -

$$Y_k = m - \sum_{i=1}^p \beta_i [Y_{k-i} - m] + \sigma U_k, \quad (6)$$

где  $m = EY$  - математическое ожидание процесса авторегрессии;  $p$  - порядок модели;  $\beta_i$  - параметры модели авторегрессии;  $\sigma^2$  - дисперсия процесса авторегрессии;  $U_k$  - отсчёты последовательности с независимыми значениями, нулевым математическим ожиданием и единичной дисперсией.

Исследование экспериментальных данных показало, что согласно критерию Акаике оптимальным является использование модели второго порядка. Значения параметров  $\beta_1$  и  $\beta_2$  и невязки

$$S_p^2(\vec{\beta}, m) = \sum_{t=p+1}^N \left[ Y_t - \sum_{k=1}^p \beta_k Y_{t-k} - m \left( 1 - \sum_{k=1}^p \beta_k \right) \right]^2$$

приведены в таблице 1, в которой  $i$  - порядковый номер записи экспериментальных данных.

Таблица 1

$i$	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$\beta_1$	0,207	0,220	0,250	0,456	0,379	0,481	0,397	0,460	0,493
$\beta_2$	0,131	0,170	0,133	0,250	0,192	0,237	0,152	0,271	0,240
$S_z^2$	404,0	439,4	355,0	350,0	405,0	520,0	410,0	996,0	1100

Самый существенный вывод, вытекающий из приведенных во второй главе результатов статистической обработки имеющихся данных ААА, заключается в том, что в течение одного опыта вероятностные свойства помех являются в основном стабильными, тогда как от опыта к опыту наблюдается их существенная вариация. Поэтому оценивать вероятностные характеристики помех следует по их реализациям в каждом опыте. Эти результаты в дальнейшем используются при разработке методов обработки экспериментальных данных.

В третьей главе приведены результаты исследования вопросов точности определения таких характеристик сигнала поглощения, как его максимальное

$$Y^m = \max_{1 \leq k \leq N} \{Y_k\}, \quad (7)$$

и интегральное значение

$$I = \sum_{k=1}^N Y_k, \quad (8)$$

где  $N$  - количество анализируемых отсчетов.

В частности, на основании предположения о независимости отсчетов помехи теоретическим путем были получены выражения для среднего значения и дисперсии оценки максимального значения сигнала поглощения

$$\bar{Y}_m = \frac{\sigma \sqrt{2}}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-z^2) \sum_{i=1}^N (z + q r_i) \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N [0,5 + 0,5 \operatorname{sign}(a) \operatorname{erf}(|a|)] dz, \quad (9)$$

$$\sigma_m^2 = Y_m^2 - (\bar{Y}_m)^2,$$

$$\bar{Y}_m^2 = \frac{\sigma^2}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-z^2) \sum_{i=1}^N (z + q r_i)^2 \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N [0,5 + 0,5 \operatorname{sign}(a) \operatorname{erf}(|a|)] dz. \quad (10)$$

В приведенных выражениях использованы следующие обозначения:

$$a = z + \frac{X_i - X_k}{\sigma \sqrt{2}} = z + q(r_i - r_k),$$

где  $r_k = \frac{X_k}{X_m}$ ,  $X_m$  означает максимальное значение сигнала поглощения;

$$\operatorname{sign}(a) = \begin{cases} 1, & a \geq 0; \\ 0, & a < 0; \end{cases}$$

$$\operatorname{erf}(|a|) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^a \exp(-X^2) dX.$$

Причем известна полиномиальная аппроксимация хорошей точности

$$\operatorname{erf}(|a|) = 1 - (a_1 t + a_2 t^2 + a_3 t^3) \exp(-|a|^2),$$

где  $t = 1 / (1 + p|a|)$ ;  $p = 0,47047$ ;  $a_1 = 0,3480242$ ;

$$a_2 = -0,9588798; \quad a_3 = 0,7478556.$$

С помощью указанных выражений численно были получены зависимости нормированных среднего значения и дисперсии оценки максимума

$$\bar{Y}_m = \frac{\bar{Y}_m}{\sigma_U}, \quad \hat{\sigma}_m^2 = \frac{\sigma_m^2}{\sigma_U^2}$$

от  $q = X_m / \sigma$ , которое в данном случае играет роль отношения сигнал/шум, здесь  $\hat{\sigma}_U^2$  - оценка дисперсии помехи.

При проведении расчетов использовались две различные модели сигнала поглощения

$$X_k = 1 - k + \frac{N-1}{\ln(N)} \ln(K)$$

при  $N=25$  и  $N=51$ , а также

$$X_k = \exp(-\alpha k) - \exp(-\beta k),$$

где  $\alpha = 0,09$ ;  $\beta = 2\alpha = 0,18$ .

Эти модели дают сигналы различной формы, вместе с тем нормированные средние значения и дисперсии оценки максимума отличаются несущественно. Поэтому можно сделать вывод о том, что в широком классе сигналов с единственным глобальным максимумом зависимости  $\hat{Y}_m = \hat{Y}_m(q)$  отличаются несущественно.

Для уточнения выводов, сделанных на основе теоретических расчётов, были проведены вычислительные эксперименты, в которых по имеющимся реальными данными оценивались

$$\hat{Y}_m = \frac{1}{N_m} \sum_{k=1}^{N_m} \frac{Y_k^m}{\sigma_u}; \quad \hat{\sigma}_m^2 = \frac{1}{N_m - 1} \sum_{k=1}^{N_m} \left[ \frac{Y_k^m - \hat{Y}_m}{\sigma_u} \right]^2; \quad (11)$$

Здесь  $N_m = N - 2m - 1$  – максимальное количество возможных оценок интересующих нас параметров.

С помощью аналогичных экспериментов были определены нормированное среднее значение и дисперсия оценки интегрального значения сигнала поглощения.

$$\bar{Y} = \frac{1}{N_m} \sum_{k=1}^{N_m} \frac{Y_k}{\sigma_u}; \quad \sigma_{\bar{Y}}^2 = \frac{1}{N_m - 1} \sum_{k=1}^{N_m} \frac{(Y_k)^2 - (\bar{Y})^2}{\sigma_u^2}. \quad (12)$$

Кроме того в третьей главе предложено использовать обобщённую оценку интегрального значения сигнала поглощения вида

$$\vec{b} = \sum_{k=1}^N \Gamma_k Y_k, \quad (13)$$

где  $\Gamma_k = \frac{X_k}{\sqrt{\sum_{i=1}^N X_i^2}}$ ,  $\vec{X}$  – вектор незашумлённого сигнала поглощения.

Такая оценка будет оптимальной в смысле минимума среднеквадратичной ошибки

$$s^2(b, \vec{Y}) = \sum_{k=1}^N [\vec{Y} - b\vec{\Gamma}]^2 = \min.$$

Методом вычислительных экспериментов были получены нормиро-

ванные средние значения и дисперсии оценки параметра  $\tilde{b}$ ,

$$\tilde{b} = \frac{1}{N_m} \sum_{k=1}^{N_m} \frac{\tilde{b}_k}{\sigma_u} ; \quad \sigma_{\tilde{b}}^2 = \frac{1}{N_m - 1} \sum_{k=1}^{N_m} \frac{(\tilde{b}_k)^2 - \tilde{b}^2}{\sigma_u^2}, \quad (14)$$

при этом установлено, что в качестве вектора  $X$  можно использовать сигнал "треугольной формы"

$$X_k = a(k-1)/m ;$$

$$X_{N-k+1} = X_k, \quad k=1, \dots, m,$$

$$X_{m+1} = 1, \quad N = 2m+1.$$

и это не приводит к существенному увеличению погрешности оценки.

Предложенный квазиоптимальный метод оценки интегрального значения сигнала поглощения может быть реализован аппаратно в виде специализированного процессора, структурная схема которого приведена на рис.1. В состав этого устройства входят: таймер, блок умножения, ключ, интегратор и генератор эталонного сигнала, состоящий из двух ключей, двух апериодических звеньев и сумматора.

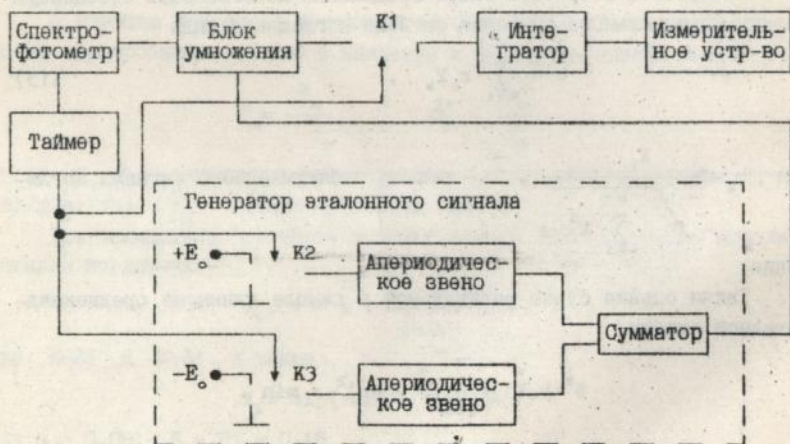


Рис. 1.

На основании результатов проведенных исследований предложена методика обработки экспериментальных данных, позволяющая адаптивно выбрать оптимальный, с точки зрения минимума погрешности, метод оценки параметров сигнала поглощения, которая состоит в следующем:

- перед внесением пробы в атомизатор оценивается среднее значение и дисперсия помех на выходе спектрофотометра;
- после окончания этапа атомизации по максимальному значению пика поглощения приблизительно оценивается полученное соотношение сигнал шум;
- с использованием записи помехи, полученной перед началом эксперимента моделируется смесь сигнала и помехи с соответствующим значением соотношения сигнал/шум, при этом в качестве полезного сигнала используется его аппроксимация "треугольным импульсом", и оцениваются погрешности определения различных параметров сигнала поглощения (выражения (11), (12) и (14));
- на основании полученных оценок выбирается соответствующий метод определения поглотительной способности.

В четвертой главе приведены результаты исследования пределов обнаружения слабых сигналов поглощения при использовании методов оценки параметров сигнала, рассмотренных в третьей главе. При этом использованы результаты вычислительных экспериментов по определению погрешностей оценок параметров сигнала поглощения.

Результаты исследований для уровня вероятностей ложных тревог  $P_{лт} = 0,03$  приведены в таблице 2.

Таблица 2

Предел обнаружения, $q_{min}$			Примечание
по максимальному значению	по интегральному значению	по оценке (13)	
0,28	2,85	2,0	При отсутствии выбросов
11,0	5,0	3,3	При наличии выбросов

Кроме того в четвертой главе разработан метод последовательного обнаружения слабых сигналов, оптимальный в смысле минимальности среднего времени запаздывания в обнаружении сигнала от

момента его действительного появления и заключающийся в вычислении решающей функции вида

$$S_i^* = \max \{0, S_i\}, \quad (15)$$

$$\text{где } S_i = \frac{1}{\sigma_v^2} \sum_{k=i+1}^t \gamma_{k,i} \nu_k; \quad \gamma_{k,i} = \frac{r_{k,i} - \sum_{l=i+1}^p \beta_l r_{k-l,i}}{\sqrt{\sum_{m=i+1}^l \gamma_m^2}},$$

$$k=p+1, \dots, t; \quad \nu_k = U_k - \sum_{l=i+1}^p \beta_l U_{k-l}$$

Здесь  $\beta_i$  - параметры модели авторегрессии, значения которых определяются по отсчётам выходного сигнала спектрофотометра в то время, когда полезный сигнал заведомо отсутствует, например перед внесением пробы в атомизатор.

Значения решающей функции  $S_i^*$  вычисляются последовательно в темпе поступления отсчётов выходного сигнала прибора и сравниваются с порогом

$$b(t) = \frac{1}{\sigma_v} F^{-1}(\alpha),$$

$$\text{где } F^{-1}(\alpha) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^0 \exp\left[-\frac{z^2}{2}\right] dz,$$

$\alpha$  - вероятность ложных тревог.

Выполнение условия  $S_i^* \geq b(t)$  интерпретируется как наличие полезного сигнала на выходе спектрофотометра.

Для проверки эффективности предложенного метода был проведен ряд вычислительных экспериментов, в которых моделировались смеси сигнала и помехи с различными значениями соотношения сигнал/шум. При этом в качестве помехи использовались участки записей выходного сигнала спектрофотометра, на которых отсутствовал сигнал поглощения, а в качестве полезного сигнала - импульс, полученный путём усреднения по девяти реализациям сигналов абсорбции, записанных на этапе атомизации. При обработке полученных смесей с помощью предложенной решающей процедуры оценивалось среднее время

запаздывания в обнаружении слабого сигнала от момента его действительного появления

$$\widehat{\Delta t} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \widehat{\Delta t}_i,$$

где  $\widehat{\Delta t}_i = \inf\{t_i, S_i^* \geq b(t_i)\}$ ,  $M$  - число реализаций смеси сигнала и помехи, на которых оценивалось среднее время обнаружения.

Результаты экспериментов для различных значений отношения сигнал/шум приведенные в таблице 3, свидетельствуют о том, что в среднем обнаружение происходит за время меньшее общей длительности смеси сигнал+помеха, которая составляет 200 мс. Кроме того, отметим, что приведенные числовые значения оценок  $\widehat{\Delta t}$  включают в себя случаи наличия импульсных помех.

Таблица 3

q	1,21	2,42	6
$\widehat{\Delta t}, \text{мс}$	144	108	62

Сравнение значений сигнал/шум, приведенных в таблицах 2 и 3 показывает, что использование предложенной решающей процедуры позволяет снизить предел обнаружения слабых сигналов поглощения.

В пятой главе описано разработанное устройство сопряжения серийного спектрофотометра типа "Сатурн-3" с персональной ЭВМ и система программного обеспечения для реализации предложенных методов обработки экспериментальных данных.

Кроме того в этой главе осуществлена оценка вычислительной сложности разработанных в диссертации методов обработки экспериментальных данных и выработаны рекомендации по выбору подходящей ПЭВМ, исходя из конкретных условий применения.

В приложениях к работе приводятся исходные тексты программ, с помощью которых осуществлялись вычислительные эксперименты, программы реализующей последовательную процедуру обнаружения слабого сигнала на фоне помех, программы оценки быстродействия процессоров персональных ЭВМ и документы, подтверждающие использование результатов работы.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате выполненных исследований в диссертации решена актуальная научно-техническая задача разработки и внедрения аппаратно-программных средств автоматизации атомно-абсорбционного анализа, позволяющих автоматизировать процедуру принятия решений о составах исследуемых проб при управлении технологическими процессами и проведении научных исследований.

Решение этой задачи потребовало проведения теоретических и экспериментальных исследований, итогом которых явились следующие научные и практические результаты.

1. Исследованы вероятностные свойства помех на выходе спектрофотометра при атомно-абсорбционном анализе и предложена методика оценки характеристик помехи.

2. Построена математическая модель порождения экспериментальных данных.

3. Осуществлены теоретические и экспериментальные исследования погрешностей оценки таких параметров сигнала поглощения, как его максимальное и интегральное значение и на основе их результатов разработана методика построения доверительных интервалов для значений концентраций определяемых элементов в пробах по результатам одного эксперимента.

4. Разработан оптимальный в смысле минимума дисперсии способ оценки интегрального значения сигнала поглощения и структура реализующего его устройства.

5. Разработана методика обработки экспериментальных данных, позволяющая выбрать оптимальный в смысле минимума дисперсии способ оценки параметров сигнала поглощения.

6. Разработана последовательная процедура обнаружения слабых сигналов поглощения, оптимальная в смысле минимального среднего времени обнаружения сигнала при фиксированном уровне вероятности ложных тревог, позволяющая снизить пределы обнаружения определяемых элементов в пробах.

7. Разработана методика обработки экспериментальных данных при обнаружении слабых сигналов поглощения.

8. Разработано устройство для сопряжения серийного спектрофотометра типа "Сатурн-3" с персональной ЭВМ.

9. Выполнена оценка вычислительной сложности алгоритмов об-

работки экспериментальных данных атомно-абсорбционного анализа и приведены рекомендации по выбору персональной ЭВМ, в соответствии с конкретными условиями применения.

10. Разработан пакет программ, реализующий предложенные методы на персональной ЭВМ.

Основные результаты диссертационной работы внедрены в Севе-родонецком опытно-конструкторском бюро автоматики при модернизации спектрофотометра "Сатурн-3" и разработке спектрофотометра нового поколения "Сатурн-4".

Экономический эффект от использования предложенных методов на одном приборе в соответствии с актами о внедрении составит 1281280 руб. за расчётный период его эксплуатации - 10 лет, за счёт повышения точности определения концентрации, снижения пределов обнаружения и сокращения затрат времени на обработку экспериментальных данных.

Основное содержание диссертации опубликовано в следующих работах:

1. Жилияков Е.Г., Корсунов Н.И., Лагода Д.П. Методы и алгоритмы обработки экспериментальных данных в атомно-абсорбционной спектрометрии. /Под общей редакцией проф. Корсунова Н.И. Киев: Наук. думка, 1992, 124 с.

2. Жилияков Е.Г., Лагода Д.П. Метод обнаружения слабых полезных сигналов на фоне шумов в атомно-абсорбционной спектрометрии. /Ж. прикл. спектроскопии. -1992, -т.56. -Вып.3, с.467-473.

3. Лагода Д.П., Жилияков Е.Г. Обнаружение аналитического сигнала на фоне помех в атомно-абсорбционном спектральном анализе. -Вестн. Харьк. политехн. ин-та. -1991. - № 282: Автоматика и приборостроение. вып.17 - с.62-65.

4. Н.И.Корсунов, Е.Г.Жилияков, Д.П.Лагода. Обнаружение слабых аналитических сигналов на фоне помех в атомно-абсорбционном спектральном анализе. -Краткие тезисы докладов к IX Тамбовской научно-технической конференции по спектроскопии. "Применение спектральных методов анализа в народном хозяйстве".-Тамбов, -1990, с.15-16.

В работах, выполненных в соавторстве, Д.П.Лагода внёс следующий вклад:

[1] - предложена методика построения вероятностных моделей порождения экспериментальных данных атомно-абсорбционного анализа; проведены теоретические и экспериментальные исследования



вероятностных свойств выходных данных спектрофотометра и предложена методика расчёта доверительных интервалов для результатов измерения концентраций; предложен оптимальный метод обработки экспериментальных данных, позволяющий снизить погрешность определения характеристик сигналов поглощения в атомно-абсорбционной спектрометрии; предложена последовательная решающая процедура обнаружения слабых полезных сигналов на фоне помех; разработана структура технических средств и программного обеспечения для обработки экспериментальных данных (ААА).

работы [2],[3] и [4] содержат в себе отдельные части работы [1].

*Д.А.А.А.*

Ответственный за выпуск к.т.н., доц. Заполовский Н.И.

---

Подп. к печ. *В. Н. Г.* Формат 60x84 1/16 Бумага тип.

Печать офсетная. Усл.печ.л. 1,0 Тираж 100 экз.

Зак. № *4100* Бесплатно.

---

Харьковское межвузовское арендное полиграфическое предприятие.  
310093, Харьков, ул.Свердлова, 115

471053

AB 26.388

**AB 26.388**