

## АЛГОРИТМ І ПРОГРАМА ОБРОБКИ СПЕКТРІВ РЕНТГЕНІВСЬКОЇ ФЛУОРЕСЦЕНЦІЇ ТА КІЛЬКІСНОГО ЕЛЕМЕНТНОГО АНАЛІЗУ

В даній роботі розглядається постановка та розв'язання задачі відділення фону спектрів рентгенівської флуоресценції.

Було розроблено програмний засіб для автоматизації відділення фону спектрів рентгенівської флуоресценції.

Проблема відділення фону спектрів рентгенівської флуоресценції є актуальною, оскільки фон не несе додаткової інформації про спектр досліджуваного зразка й утруднює кількісний елементний аналіз.

Зовнішній вигляд програми показано на рис. 1.

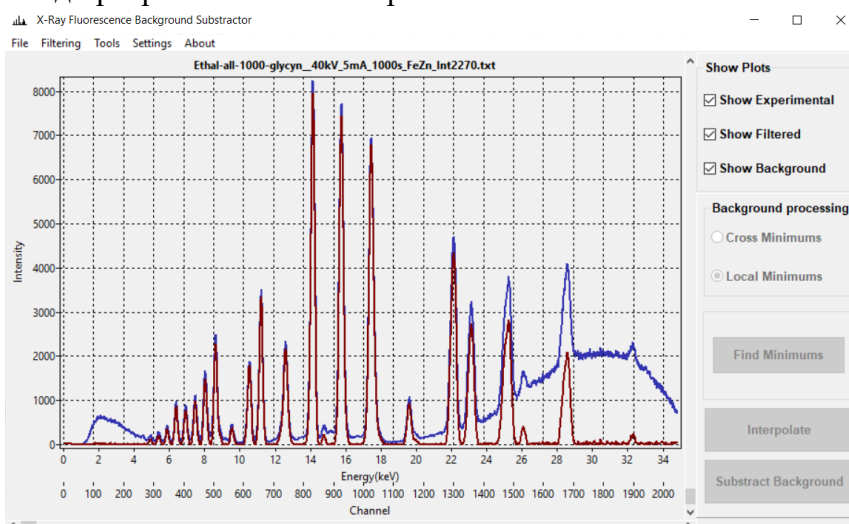


Рис.1. Зовнішній вигляд програми для віднімання фону.

Програмний засіб включає в себе наступні інструменти:

1) Інструмент фільтрації та згладжування, здатний працювати за наступними алгоритмами:

- Фільтрація за мінімальною інтенсивністю спектру;
- Згладжування усередненням різних порядків;
- Згладжування фільтром Савицького - Голея; [1],[2]

2) Інструмент, що дозволяє автоматично описати лінію фону з можливістю ручної підгонки що працює за одним з двох можливих алгоритмів:

- Опис лінії фону за локальними мінімумами спектру;
- Пошук локальних мінімумів спектру у відрізках на які розбивається весь спектр;

3) Інструмент для порівняння спектрів із можливістю детектування ліній спектру;

4) Інструмент для кількісного аналізу вмісту елементів у досліджуваних зразках за даними еталонних спектрів за даними інтенсивності  $K\alpha_1$  –ліній досліджуваних елементів, коефіцієнта озолення та часу накопичення досліджуваного спектру.

Для кількісного аналізу вмісту елементів у зразках програма передбачає використання спеціальних еталонних сумішей.

Дана програма використовує текстові формати файлів, отриманих на спектрометрі ElvaX (<https://elvatech.com>) та використовує спектри експортовані з даної програми, для детектування хімічних елементів було використано таблиці спектральних ліній, які наявні у вільному доступі ([https://www.bruker.com/fileadmin/user\\_upload/8-PDF-Docs/X-rayDiffraction\\_ElementalAnalysis/HH-XRF/Misc/Periodic\\_Table\\_and\\_X-ray\\_Energies.pdf](https://www.bruker.com/fileadmin/user_upload/8-PDF-Docs/X-rayDiffraction_ElementalAnalysis/HH-XRF/Misc/Periodic_Table_and_X-ray_Energies.pdf)).

Програмний продукт підтримує наступні операційні системи: Windows XP, Windows 7, Windows 8/ 8.1, Windows 10 та linux-операційні системи.

Програма створена в рамках виробничої наукової практики у навчально-науковому центрі фізико-хімічних досліджень ЧНУ імені Б. Хмельницького.

#### Література:

1. Никонов А. В. и др. Фильтрация методом Савицкого-Голея спектральных характеристик чувствительности матричных фотоприемных устройств //Успехи прикладной физики.–2016.–Т. – 2016.
2. Dai W. et al. A nonlinear generalization of the Savitzky-Golay filter and the quantitative analysis of saccades //Journal of vision. – 2017. – Т. 17. – №. 9. – С. 10-10.
3. Savitzky A., Golay M. J. E. Smoothing and differentiation of data by simplified least squares procedures //Analytical chemistry. – 1964. – Т. 36. – №. 8. – С. 1627-1639.

**Науковий керівник:** кандидат фізико-математичних наук, доцент Король Я.Д.

*Я. І. Гур'єв, С. О. Абакумов*

*Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького*

### **МОДЕЛЮВАННЯ ВПЛИВУ ЗОВНІШНІХ РЕГУЛЯРНИХ ФАКТОРІВ ТА ШУМУ НА ПОВЕДІНКУ СИСТЕМИ “ХИЖАК-ЖЕРТВА”**

Математична модель системи “хижак-жертва” виникла в ХІХ ст. для пояснення осциляційної поведінки популяцій деяких риб та тварин, однак ця модель давно вже перетворилася на певну методичну вправу, яка виконується після вивчення моделі Мальтуса для експоненційного зростання популяції без обмежень, як ілюстрація конкуренції видів у біології, синергетиці [1-5] та теорії хімічних реакцій. З невідомих авторам причин в стандартних підручниках синергетики не розглядаються очевидні узагальнення даної моделі з урахуванням зовнішніх регулярних та стохастичних чинників. На наше переконання, розгляд таких чинників є значно простішим і повинен проводитись в курсі синергетики раніше, ніж вводяться такі складні поняття і моделі як дивні атрактори та модель Лоренца. Тому актуальність нашої роботи є в першу чергу методичною. Однак, і для багатьох практичних задач, які розв'язуються в наближенні замкнутої системи, корисно та актуально уявляти наслідки її відкриття для зовнішнього світу.

Вихідною моделлю нашого дослідження є давно відома і досліджена синергетична модель Лотки-Вольтерри, яка зазвичай використовується для ілюстрації осциляційної поведінки біологічних популяцій або конкуруючих хімічних реагентів. Відомо, що ця модель, яка математично зводиться до системи двох звичайних лінійних диференціальних рівнянь, має один стаціонарний розв'язок і безліч осциляційних. При цьому, кожен осциляційний розв'язок визначається відстанню положення початкової точки від стаціонарної точки. Ми вперше (наскільки нам відомо) додаємо до системи зовнішні фактори, які можна трактувати як регулярний (скажімо, раз на рік) відстріл або підселення в екосистему або хижаків, або жертв, або їх обох. При цьому, як ми наведемо нижче, фазова траєкторія замість замкнутої лінії, якою вона була, стає спіральною. Ця спіраль або сходиться в точку, що означає повну стабілізацію системи, або розкручується до моменту втрати фізичного сенсу розв'язку. В деяких випадках, які ми умовно називаємо “метастабільними”, траєкторія залишається осциляційною, але не сходиться ні до стаціонарної точки, ні розкручується до нескінченності.

У роботі з'ясовані та досліджені можливі варіанти еволюції моделі Лотки-Вольтерри за умов додавання факторів “спонсор”/мисливець та флуктуацій кінетичних коефіцієнтів:

- 1) система стабілізується при регулярному підселенні як хижаків, так і жертв;
- 2) система розгойдується до повної руйнації при регулярному відстрілі як хижаків, так і жертв;