



УДК: 519.68:15:54

© 2007 г. **И.Л. Артемьева**, канд. техн. наук,
Н.А. Спивачук

(Институт автоматизации и процессов управления ДВО РАН, Владивосток)

МОДЕЛЬ ОНТОЛОГИИ ПРЕДМЕТНОЙ ОБЛАСТИ «ПОСТРОЕНИЕ ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКОГО РЕНТГЕНОВСКОГО СПЕКТРА»

В работе описана модель онтологии предметной области «Построение характеристического рентгеновского спектра», расширяющая онтологию рентгенофлуоресцентного анализа. Данная модель использована при разработке интеллектуальной программной системы, решающей задачу построения характеристического спектра по известному составу пробы, ее геометрическим свойствам и параметрам спектрометра.

Введение

Построение характеристического рентгеновского спектра по известному составу пробы, ее геометрическим свойствам и параметрам спектрометра представляет собой задачу, обратную рентгенофлуоресцентному анализу.

Сегодня существует множество рентгенофлуоресцентных спектрометров и программ для управления этими приборами и анализа характеристических спектров, полученных с их помощью. Среди этих программ лишь несколько позволяют редактировать знания предметной области. В остальных системах знания предметной области «защиты» в программный код. Все эти программы дают возможность определять состав пробы по полученному спектру, но ни одна из них не позволяет строить спектр по известному составу пробы, ее геометрическим свойствам и параметрам спектрометра.

При разработке интеллектуальных программных систем используется модель онтологии предметной области, которая, с одной стороны, явно определяет совокупность терминов предметной области, а с другой, – структуру знаний предметной области.

Целью данной работы является расширение модели онтологии рентгенофлуоресцентного анализа [1] понятиями, требуемыми для решения задачи построения характеристического рентгеновского спектра по известному составу пробы, ее геометрическим свойствам и параметрам спектро-

метра. При построении модели онтологии использовалась литература [2 – 6].

Согласно [7, 8] модель онтологии предметной области содержит модель системы понятий действительности; модель системы понятий знаний; связь между системой понятий знаний и системой понятий действительности. Модель онтологии построена в классе небогатых систем логических соотношений с параметрами и записана средствами языка прикладной логики [9, 10]. Приведем модули данной модели.

Переходы Костера-Кронига

Определим вспомогательные термины модуля "Переходы Костера-Кронига":

ОВЗ энергии излучения $\equiv \mathbb{R}(0; +\infty)$;

ОВЗ энергии возбуждающего излучения $\equiv \mathbb{R}(0; +\infty)$;

характеристические линии \equiv радиационные переходы.

Опишем основные термины данного модуля.

1. сорт переходы Костера-Кронига: $\{ \}N$

Термин *переходы Костера-Кронига* обозначает множество названий всех переходов.

2. сорт начальное положение электрона при переходе Костера-Кронига (переходы Костера-Кронига \rightarrow энергетические уровни)

Термин *начальное положение электрона при переходе Костера-Кронига* обозначает функцию, которая переходу Костера-Кронига сопоставляет энергетический уровень, на котором находится электрон в начале перехода.

3. сорт конечное положение электрона при переходе Костера-Кронига: (переходы Костера-Кронига \rightarrow энергетические уровни)

Термин *конечное положение электрона при переходе Костера-Кронига* обозначает функцию, которая переходу Костера-Кронига сопоставляет энергетический уровень, на котором находится электрон в конце перехода.

Приведем онтологические соглашения для данного модуля.

1. (v : переходы Костера-Кронига) (главное квантовое число энергетического уровня(конечное положение электрона при переходе Костера-Кронига(v)) – главное квантовое число энергетического уровня(начальное положение электрона при переходе Костера-Кронига(v)) = 0 & орбитальное квантовое число(конечное положение электрона при переходе Костера-Кронига(v)) – орбитальное квантовое число(начальное положение электрона при переходе Костера-Кронига(v)) < 0) \vee (главное квантовое число энергетического уровня(конечное положение электрона при переходе Костера-Кронига(v)) – главное квантовое число энергетического уровня(начальное положение электрона при переходе Костера-Кронига(v)) = 0 & орбитальное квантовое чис-

ло(конечное положение электрона при переходе Костера-Кронига(v)) – орбитальное квантовое число(начальное положение электрона при переходе Костера-Кронига(v)) = 0 & спин-орбитальное связывание(конечное положение электрона при переходе Костера-Кронига(v)) – спин-орбитальное связывание(начальное положение электрона при переходе Костера-Кронига(v)) < 0)

Для каждого перехода Костера-Кронига выполняется одно из условий:

а) главное квантовое число энергетического уровня, на который происходит переход, равно главному квантовому числу энергетического уровня, с которого происходит переход, и при этом орбитальное квантовое число энергетического уровня, на который происходит переход, меньше орбитального квантового числа энергетического уровня, с которого происходит переход,

б) главное квантовое число энергетического уровня, на который происходит переход, равно главному квантовому числу энергетического уровня, с которого происходит переход, и при этом орбитальное квантовое число энергетического уровня, на который происходит переход, равно орбитальному квантовому числу энергетического уровня, с которого происходит переход, и при этом спин-орбитальное связывание энергетического уровня, на который происходит переход, меньше спин-орбитального связывания энергетического уровня, с которого происходит переход.

2. (v_1 : переходы Костера-Кронига) (v_2 : переходы Костера-Кронига \ { v_1 })
 начальное положение электрона при переходе Костера-Кронига(v_1) \neq начальное положение электрона при переходе Костера-Кронига(v_2) \vee
 конечное положение электрона при переходе Костера-Кронига(v_1) \neq конечное положение электрона при переходе Костера-Кронига(v_2)
 У различных переходов Костера-Кронига не могут быть одновременно равны начальные и конечные положения электронов.

Дополнительные свойства химических элементов и изотопов

Определим вспомогательные термины модуля " Дополнительные свойства химических элементов и изотопов":

край поглощения \equiv энергия связи (значение термина *край поглощения* равно значению термина *энергия связи* [1]);

характеристические линии элемента \equiv радиационные переходы элемента (значение термина *характеристические линии элемента* равно значению термина *радиационные переходы элемента* [1]).

Определим основные термины данного модуля.

1. сорт скачок поглощения: ({(v : (Ч химические элементы, энергетические уровни)) $p(2, v) \in$ энергетические уровни элемента($p(1, v)$)} $\rightarrow R(1, +\infty)$)
 Термин *скачок поглощения* обозначает функцию, которая сопоставляет

энергетическому уровню химического элемента значение скачка поглощения.

2. сорт относительный скачок поглощения: ($\{(v: (\text{Ч химические элементы, энергетические уровни})) p(2, v) \in \text{энергетические уровни элемента}(p(1, v))\} \rightarrow R(0, 1)$)

Термин *относительный скачок поглощения* обозначает функцию, которая сопоставляет энергетическому уровню химического элемента значение относительного скачка поглощения.

3. сорт выход флуоресценции: ($\{(v: (\text{Ч химические элементы, энергетические уровни})) p(2, v) \in \text{энергетические уровни элемента}(p(1, v))\} \rightarrow R[0, 1]$)

Термин *выход флуоресценции* обозначает функцию, которая сопоставляет энергетическому уровню химического элемента значение выхода флуоресценции.

4. сорт вероятность излучения: ($\{(v: (\text{Ч химические элементы, характеристические линии})) p(2, v) \in \text{характеристические линии элемента}(p(1, v))\} \rightarrow R(0, 1]$)

Термин *вероятность излучения* обозначает функцию, которая сопоставляет характеристической линии химического элемента значение вероятности излучения.

5. сорт вероятность перехода Костера-Кронига: ($\{(v: (\text{Ч химические элементы, переходы Костера-Кронига})) \text{ начальное положение электрона при переходе Костера-Кронига}(\pi(2, v)) \in \text{энергетические уровни элемента}(\pi(1, v)) \& \text{ конечное положение электрона при переходе Костера-Кронига}(\pi(2, v)) \in \text{энергетические уровни элемента}(\pi(1, v))\} \rightarrow R[0, 1]$)

Термин *вероятность перехода Костера-Кронига* обозначает функцию, которая сопоставляет химическому элементу и переходу Костера-Кронига такому, что энергетический уровень, с которого происходит переход, и энергетический уровень, на который происходит переход, имеются у этого элемента, значение вероятности этого перехода у этого элемента.

6. сорт массовый коэффициент фотоэлектрического поглощения: (химические элементы \rightarrow (овз энергии излучения $\rightarrow R[0, +\infty)$)

Термин *массовый коэффициент фотоэлектрического поглощения* обозначает функцию, которая сопоставляет химическому элементу функцию, аргументом которой является значение энергии излучения, а результатом – значение массового коэффициента фотоэлектрического поглощения этим химическим элементом этого излучения.

7. сорт массовый коэффициент ослабления: (химические элементы \rightarrow (ОВЗ энергии излучения $\rightarrow R(0, +\infty)$)

Термин *массовый коэффициент ослабления* обозначает функцию, которая сопоставляет химическому элементу функцию, аргументом которой является значение энергии излучения, а результатом – массовый коэф-

- фициент ослабления этим химическим элементом этого излучения.
8. сорт сечение возбуждения: ($\{(v: (\text{Ч химические элементы, характеристические линии})) \pi(2, v) \in \text{характеристические линии элемента}(\pi(1, v))\} \rightarrow (\text{ОВЗ энергии возбуждающего излучения} \rightarrow \mathbb{R}[0, +\infty))$)
 Термин *сечение возбуждения* обозначает функцию, которая сопоставляет характеристической линии химического элемента функцию, аргументом которой является значение энергии возбуждающего излучения, а результатом – сечение возбуждения.
9. сорт частичный фотоэлектрический коэффициент поглощения: ($\{(v: (\text{Ч химические элементы, энергетические уровни})) \pi(2, v) \in \text{энергетические уровни элемента}(\pi(1, v))\} \rightarrow (\text{ОВЗ энергии излучения} \rightarrow \mathbb{R}[0, +\infty))$)
 Термин *частичный фотоэлектрический коэффициент поглощения* обозначает функцию, которая сопоставляет энергетическому уровню химического элемента функцию, аргументом которой является значение энергии излучения, а результатом – частичный фотоэлектрический коэффициент поглощения.
10. сорт выход линии: ($\{(v: (\text{Ч радиоактивные изотопы, } \mathbb{R}(0; +\infty))) \pi(2, v) \in \text{энергии линий изотопа}(\pi(1, v))\} \rightarrow \mathbb{R}(0, +\infty)$)
 Термин *выход линии* обозначает функцию, аргументами которой является радиоактивный изотоп и значение энергии линии этого изотопа, а результатом – значение выхода этой линии.

Определим онтологические соглашения данного модуля.

1. (v : химические элементы) (w : энергетические уровни элемента(v)) относительный скачок поглощения(v, w) = (скачок поглощения(v, w) – 1) / скачок поглощения(v, w)
 У каждого энергетического уровня каждого химического элемента относительный скачок поглощения равен отношению разности скачка поглощения и 1 к скачку поглощения.
2. ($e1$: химические элементы) (e : ОВЗ энергии излучения) (массовый коэффициент ослабления($e1$))(e) \geq (массовый коэффициент фотоэлектрического поглощения($e1$))(e)
 Для каждого химического элемента для каждого значения энергии излучения массовый коэффициент ослабления этого излучения этим элементом не меньше массового коэффициента фотоэлектрического поглощения этого излучения этим элементом.

Конфигурация спектрометра

Определим вспомогательные термины модуля "Конфигурация спектрометра".

1. массовый коэффициент ослабления пробой $\equiv (\lambda(e: \text{ОВЗ энергии излучения}) (\sum(e1: \text{элементы пробы}) \text{содержание элемента в пробе}(e1) * (\text{массовый коэффициент ослабления}(e1))(\lambda(e))))$

Вспомогательный термин *массовый коэффициент ослабления пробой* обозначает функцию, которая значению энергии излучения сопоставляет значение массового коэффициента ослабления пробой.

2. совокупный массовый коэффициент ослабления пробой $\equiv (\lambda(e1: \text{ОВЗ энергии возбуждающего излучения}), (e2: \text{ОВЗ энергии излучения}) \text{ массовый коэффициент ослабления пробой}(e1) / \sin(\text{угол падения первичного излучения}) + \text{массовый коэффициент ослабления пробой}(e2) / \sin(\text{угол отбора вторичного излучения}))$

Вспомогательный термин *совокупный массовый коэффициент ослабления пробой* обозначает функцию, аргументами которой являются значения энергии возбуждающего излучения и энергии характеристического излучения, а результатом – значение совокупного массового коэффициента ослабления пробой.

3. фактор поглощения $\equiv (\lambda(e1: \text{элементы пробы}), (h1: \text{характеристические линии элемента}(e1)) (\lambda(e: \text{ОВЗ энергии возбуждающего излучения}) (1 - \text{число } e \uparrow (-\text{совокупный массовый коэффициент ослабления пробой}(e, \text{энергия характеристического излучения}(e1, h1)) * \text{плотность пробы} * \text{толщина пробы}) / \text{совокупный массовый коэффициент ослабления пробой}(e, \text{энергия характеристического излучения}(e1, h1))))$

Вспомогательный термин *фактор поглощения* обозначает функцию, которая характеристической линии элемента пробы сопоставляет функцию, аргументом которой является значение энергии возбуждающего излучения, а результатом – фактор поглощения.

4. $E_1 \equiv (\lambda(x: \mathbb{R}(-\infty; +\infty)) - \text{Постоянная Эйлера} - \ln(|x|) - (\sum(n: \mathbb{I}[1; +\infty)) (-x) \uparrow n / (n * n!))$

Вспомогательный термин E_1 обозначает функцию, которая каждому действительному числу сопоставляет значение, вычисляемое по указанной формуле.

5. $F_1 \equiv (\lambda(e1: \text{ОВЗ энергии излучения}), (e2: \text{ОВЗ энергии излучения}) \ln(1 - \text{массовый коэффициент ослабления пробой}(e1) / (\text{массовый коэффициент ослабления пробой}(e2) * \sin(\text{угол падения первичного излучения}))) + E_1((\text{массовый коэффициент ослабления пробой}(e2) - \text{массовый коэффициент ослабления пробой}(e1) / \sin(\text{угол падения первичного излучения})) * \text{плотность пробы} * \text{толщина пробы}))$

Вспомогательный термин F_1 обозначает функцию, которая паре значений энергии излучения сопоставляет значение, вычисляемое по указанной формуле.

6. $F_2 \equiv (\lambda(e1: \text{ОВЗ энергии излучения}), (e2: \text{ОВЗ энергии излучения}) \ln(1 - \text{массовый коэффициент ослабления пробой}(e1) / (\text{массовый коэффициент ослабления пробой}(e2) * \sin(\text{угол отбора вторичного излучения}))) + E_1((\text{массовый коэффициент ослабления пробой}(e2) - \text{массовый коэффициент ослабления пробой}(e1) / \sin(\text{угол отбора вторичного излучения})) * \text{плотность пробы} * \text{толщина пробы}))$

плотность пробы * толщина пробы))

Вспомогательный термин F_2 обозначает функцию, которая паре значений энергии излучения сопоставляет значение, вычисляемое по указанной формуле.

7. $F_3 \equiv (\lambda(e1: \text{ОВЗ энергии излучения}), (e2: \text{ОВЗ энергии излучения}) \ln(1 + \text{массовый коэффициент ослабления пробой}(e1) / (\text{массовый коэффициент ослабления пробой}(e2) * \sin(\text{угол падения первичного излучения}))) + e_1((\text{массовый коэффициент ослабления пробой}(e2) + \text{массовый коэффициент ослабления пробой}(e1) / \sin(\text{угол падения первичного излучения})) * \text{плотность пробы} * \text{толщина пробы}))$

Вспомогательный термин F_3 обозначает функцию, которая паре значений энергии излучения сопоставляет значение, вычисляемое по указанной формуле.

8. $F_4 \equiv (\lambda(e1: \text{ОВЗ энергии излучения}), (e2: \text{ОВЗ энергии излучения}) \ln(1 + \text{массовый коэффициент ослабления пробой}(e1) / (\text{массовый коэффициент ослабления пробой}(e2) * \sin(\text{угол отбора вторичного излучения}))) + e_1((\text{массовый коэффициент ослабления пробой}(e2) + \text{массовый коэффициент ослабления пробой}(e1) / \sin(\text{угол отбора вторичного излучения})) * \text{плотность пробы} * \text{толщина пробы}))$

Вспомогательный термин F_4 обозначает функцию, которая паре значений энергии излучения сопоставляет значение, вычисляемое по указанной формуле.

9. $F_5 \equiv (\lambda(e1: \text{ОВЗ энергии излучения}), (e2: \text{ОВЗ энергии излучения}), (e3: \text{ОВЗ энергии излучения}) (\text{число } e \uparrow (-\text{массовый коэффициент ослабления пробой}(e1) / \sin(\text{угол падения первичного излучения})) + \text{число } e \uparrow (-\text{массовый коэффициент ослабления пробой}(e3) / \sin(\text{угол отбора вторичного излучения}))) * e_1(\text{массовый коэффициент ослабления пробой}(e2) * \text{плотность пробы} * \text{толщина пробы}))$

Вспомогательный термин F_5 обозначает функцию, которая тройке значений энергии излучения сопоставляет значение, вычисляемое по указанной формуле.

10. $Y \equiv (\lambda(e1: \text{ОВЗ энергии излучения}), (e2: \text{ОВЗ энергии излучения}), (e3: \text{ОВЗ энергии излучения}) \sin(\text{угол падения первичного излучения}) / \text{массовый коэффициент ослабления пробой}(e1) * |\text{число } e \uparrow (-\text{совокупный массовый коэффициент ослабления пробой}(e1, e3) * \text{плотность пробы} * \text{толщина пробы}) * F_1(e1, e2) + F_3(e1, e2) - F_5(e1, e2, e3)| + \sin(\text{угол отбора вторичного излучения}) / \text{массовый коэффициент ослабления пробой}(e3) * |\text{число } e \uparrow (-\text{совокупный массовый коэффициент ослабления пробой}(e1, e3) * \text{плотность пробы} * \text{толщина пробы}) * F_2(e3, e2) + F_4(e3, e2) - F_5(e1, e2, e3)|)$

Вспомогательный термин Y обозначает функцию, которая тройке значений энергии излучения сопоставляет значение, вычисляемое по указан-

ной формуле.

11. фактор вторичного возбуждения $\equiv (\lambda(eI: \text{элементы пробы}), (hI: \text{характеристические линии элемента}(eI)) (\lambda(e: \text{ОВЗ энергии возбуждающего излучения}) (\Sigma(v: \text{элементы пробы}) \text{содержание элемента в пробе}(v) * (\Sigma(w: \text{характеристические линии элемента}(v)) (\text{сечение возбуждения}(eI, hI))(\text{энергия характеристического излучения}(v, w)) * (\text{сечение возбуждения}(v, w)))(e) * Y(e, \text{энергия характеристического излучения}(v, w), \text{энергия характеристического излучения}(eI, hI)))))) / (2 * \text{совокупный массовый коэффициент ослабления пробой}(e, \text{энергия характеристического излучения}(eI, hI))))$

Вспомогательный термин *фактор вторичного возбуждения* обозначает функцию, которая характеристической линии элемента пробы сопоставляет функцию, аргументом которой является значение энергии возбуждающего излучения, а результатом – фактор вторичного возбуждения.

Определим основные термины данного модуля.

1. сорт источник возбуждающего излучения: радиоактивные изотопы
Значением термина *источник возбуждающего излучения* является радиоактивный изотоп, использующийся в качестве источника возбуждающего излучения.
2. сорт активность источника: $R(0; +\infty)$
Термин *активность источника* обозначает значение активности источника возбуждающего излучения(измеряется в беккерелях (Бк)).
3. сорт относительная эффективность регистрации: (ОВЗ энергии излучения $\rightarrow R[0, 1]$)
Термин *относительная эффективность регистрации* обозначает функцию, которая сопоставляет значению энергии излучения относительную эффективность регистрации этого излучения.
4. сорт энергетическое разрешение: (ОВЗ энергии излучения $\rightarrow R(0, +\infty)$)
Термин *энергетическое разрешение* обозначает функцию, которая сопоставляет значению энергии излучения энергетическое разрешение для этой энергии (измеряемое в кэВ).
5. сорт относительное энергетическое разрешение: (ОВЗ энергии излучения $\rightarrow R(0, +\infty)$)
Термин *относительное энергетическое разрешение* обозначает функцию, которая сопоставляет значению энергии излучения относительное энергетическое разрешение для этой энергии (измеряемое в кэВ).
6. сорт угол падения первичного излучения: $R(0; 90]$
Термин *угол падения первичного излучения* обозначает значение угла падения первичного излучения относительно поверхности пробы.
7. сорт угол отбора вторичного излучения: $R(0, 90]$
Термин *угол отбора вторичного излучения* обозначает значение угла

- отбора вторичного излучения относительно поверхности пробы.
8. сорт инструментальная постоянная: $R(0, +\infty)$
Термин *инструментальная постоянная* обозначает значение инструментальной постоянной спектрометра.
 9. сорт количество каналов: $I[1, +\infty)$
Значение термина *количество каналов* задает количество каналов спектрометра.
 10. сорт параметры калибровки: $(\times R(0, +\infty), R[0, +\infty))$
Термин *параметры калибровки* обозначает пару <угловой коэффициент, свободный член>, где второй элемент пары есть значение линейной функции, переводящей номер канала в соответствующую ему энергию.
 11. сорт интенсивность фона в канале: $(I[0, \text{количество каналов спектрометра} - 1] \rightarrow R[0, +\infty))$
Термин *интенсивность фона в канале* обозначает функцию, которая номеру канала сопоставляет интенсивность, обусловленную фоном, в этом канале (в имп/с).
Определим онтологическое соглашение данного модуля.
 1. (e: ОБЗ энергии излучения) относительное энергетическое разрешение(e) = энергетическое разрешение(e) / e
Для каждого значения энергии регистрируемого излучения относительное энергетическое разрешение для этой энергии равно отношению энергетического разрешения для этой энергии к этой энергии.

Характеристики эксперимента

- Определим термины модуля "Характеристики эксперимента".
1. сорт элементы пробы: { } химические элементы
Термин *элементы пробы* обозначает множество химических элементов, из атомов которых состоит проба.
 2. сорт содержание элемента в пробе: (элементы пробы $\rightarrow R(0, 100]$)
Термин *содержание элемента в пробе* обозначает функцию, которая химическому элементу, атомы которого содержатся в пробе, сопоставляет долю (в процентах) атомов этого элемента в пробе.
 3. сорт плотность пробы: $R(0, +\infty)$
Термин *плотность пробы* обозначает плотность пробы в $г/см^3$.
 4. сорт толщина пробы: $R(0, +\infty)$
Термин *толщина пробы* обозначает толщину пробы (в см).
 5. сорт интенсивность характеристической линии: $(\{v: (\times \text{элементы пробы, характеристические линии}) \pi(2, v) \in \text{характеристические линии элемента}(\pi(1, v))\} \rightarrow R[0, +\infty))$
Термин *интенсивность характеристической линии* обозначает функцию, которая характеристической линии элемента пробы сопоставляет ее интенсивность (в имп/с).

6. сорт площадь пика: $(\{(v: \{(w: (\times \text{элементы пробы, характеристические линии})) \pi(2, w) \in \text{характеристические линии элемента}(\pi(1, w))\} \text{ интенсивность характеристической линии}(v) > 0\} \rightarrow R(0, +\infty))$

Термин *площадь пика* обозначает функцию, которая характеристической линии элемента пробы, у которой интенсивность не равна нулю, сопоставляет площадь соответствующего пика (при условии, что ось абсцисс градуирована в номерах каналов, а ось ординат – в имп/с).

7. сорт центр пика: $(\{(v: \{(w: (\times \text{элементы пробы, характеристические линии})) \pi(2, w) \in \text{характеристические линии элемента}(\pi(1, w))\} \text{ интенсивность характеристической линии}(v) > 0\} \rightarrow R(-\infty, +\infty))$

Термин *центр пика* обозначает функцию, которая характеристической линии элемента пробы, у которой интенсивность не равна нулю, сопоставляет положение центра соответствующего пика на непрерывной оси каналов.

8. сорт ПШПВ пика: $(\{(v: \{(w: (\times \text{элементы пробы, характеристические линии})) \pi(2, w) \in \text{характеристические линии элемента}(\pi(1, w))\} \text{ интенсивность характеристической линии}(v) > 0\} \rightarrow R(0, +\infty))$

Термин *ПШПВ пика* обозначает функцию, которая характеристической линии элемента пробы, у которой интенсивность не равна нулю, сопоставляет полную ширину на половине высоты соответствующего пика (в разнице положений на непрерывной оси каналов).

9. сорт высота пика: $(\{(v: \{(w: (\times \text{элементы пробы, характеристические линии})) \pi(2, w) \in \text{характеристические линии элемента}(\pi(1, w))\} \text{ интенсивность характеристической линии}(v) > 0\} \rightarrow R(0, +\infty))$

Термин *высота пика* обозначает функцию, которая характеристической линии элемента пробы, у которой интенсивность не равна нулю, сопоставляет интенсивность в центре соответствующего пика (в имп/с).

10. сорт интенсивность в канале: $(I[0, \text{количество каналов спектрометра} - 1] \rightarrow R[0, +\infty))$

Термин *интенсивность в канале* обозначает функцию, которая сопоставляет номеру канала интенсивность в этом канале (в имп/с).

Определим онтологические соглашения данного модуля.

1. элементы пробы $\neq \emptyset$

Проба состоит из атомов не менее чем одного химического элемента.

2. $(\sum(e1: \text{элементы пробы}) \text{ содержание элемента в пробе}(e1)) = 100$

Сумма процентного содержания всех элементов в пробе равна 100 (процентам).

3. $(e1: \text{элементы пробы}) (hl: \{(v: \text{характеристические линии элемента}(e1)) \text{ интенсивность характеристической линии}(e1, v) > 0\}) \text{ площадь пика}(e1, hl) = \text{интенсивность характеристической линии}(e1, hl)$

Для каждой возбуждаемой характеристической линии каждого элемента пробы площадь соответствующего пика равна интенсивности этой ха-

- рактистической линии этого элемента.
4. (el: элементы пробы) (hl: {(v: характеристические линии элемента(el)) интенсивность характеристической линии(el, v) > 0}) центр пика(el, hl) = (энергия характеристического излучения(el, hl) – $\pi(2, \text{параметры калибровки})$) / $\pi(1, \text{параметры калибровки})$
 Для каждой возбуждаемой характеристической линии каждого элемента пробы центр соответствующего пика находится в точке на непрерывной оси каналов, соответствующей энергии этой характеристической линии этого элемента пробы.
 5. (el: элементы пробы) (hl: {(v: характеристические линии элемента(el)) интенсивность характеристической линии(el, v) > 0}) ПШПВ пика(el, hl) = энергетическое разрешение(энергия характеристического излучения(el, hl)) / $\pi(1, \text{параметры калибровки})$
 Для каждой возбуждаемой характеристической линии каждого элемента пробы полная ширина на половине высоты соответствующего пика равна отношению энергетического разрешения для энергии этой характеристической линии этого элемента пробы к угловому коэффициенту линейной функции, переводящей номер канала в соответствующую ему энергию.
 6. (el: элементы пробы) (hl: {(v: характеристические линии элемента(el)) интенсивность характеристической линии(el, v) > 0}) высота пика(el, hl) = 2 * площадь пика(el, hl) / ПШПВ пика(el, hl) * $(\ln(2) / \text{число пи})^{\uparrow (1/2)}$
 Утверждение задает правило вычисления высоты пика в зависимости от характеристической линии элемента пробы.
 7. (k: [0; количество каналов – 1]) интенсивность в канале(k) = $(\sum(\text{el: элементы пробы}) (\sum(\text{hl: {(v: характеристические линии элемента(el)) интенсивность характеристической линии(el, v) > 0}}) \text{высота пика(el, hl)} * \text{число e}^{\uparrow (-4 * \ln(2) * (k - \text{центр пика(el, hl)})^{\uparrow 2} / \text{ПШПВ пика(el, hl)}^{\uparrow 2})) + \text{интенсивность фона в канале(k)}$
 Для каждого канала интенсивность в этом канале вычисляется по заданной формуле.
 8. (el: элементы пробы) (hl: характеристические линии элемента(el)) интенсивность характеристической линии(el, hl) = содержание элемента в пробе(el) * инструментальная постоянная * относительная эффективность регистрации(энергия характеристического излучения(el, hl)) * активность источника * $(\sum(\text{e: энергии линий изотопа(источник возбуждающего излучения)}) \text{выход линии(источник возбуждающего излучения, e)} * ((\text{сечение возбуждения(el, hl)})(\text{e}) * (\text{фактор поглощения(el, hl)})(\text{e}) + (\text{фактор вторичного возбуждения(el, hl)})(\text{e})))$
 Для каждой характеристической линии каждого элемента пробы ее интенсивность вычисляется по заданной формуле.

Заключение

Вышеописанная модель онтологии позволила расширить функциональность программной системы «Fluorescence» [1]. Новым компонентом является «Построитель», который предназначен для построения характеристического рентгеновского спектра по известным элементному составу пробы и ее геометрическим характеристикам и позволяет выполнять перемещение по спектру (представленному графиком), масштабирование спектра, сохранение его в файле. Входящий в состав системы редактор знаний дает возможность задавать знания предметной области, которые используются как при построении спектра, так и при определении состава пробы по спектру.

Работа выполнена при финансовой поддержке ДВО РАН, проект 06-П-СО-01-003 "Разработка интеллектуальных информационных технологий генерации и анализа знаний для поддержки фундаментальных научных исследований в области естественных наук".

ЛИТЕРАТУРА

1. *Артемяева И.Л., Мирошниченко Н.Л.* Модель онтологии рентгенофлуоресцентного анализа // Информатика и системы управления. – 2005. – № 2. – С.78-88.
2. *Шлоц Р., Улиг С.* Введение в рентгенофлуоресцентный анализ / пер. с нем. Н. Алова – Карслуэ, Германия: Bruker AXS GmbH. – 2000.
3. *He F., Espen P.* General approach for quantitative energy dispersive X-ray fluorescence analysis based on fundamental parameters // Anal. Chem. – 1991. – Vol. 63. – P.2237-2244.
4. *Лосев Н.Ф.* Количественный рентгеноспектральный флуоресцентный анализ. – М.: Наука. – 1969.
5. *Якубович А.Л., Зайцев Е.И., Пржиялговский С.М.* Ядернофизические методы анализа минерального сырья. – 2-е изд., перераб. и доп. – М.: Атомиздат, 1973.
6. *Мамиконян С.В.* Аппаратура и методы флуоресцентного рентгенорадиометрического анализа. – М.: Атомиздат, 1976.
7. *Kleshchev A.S., Artemjeva I.L.* A structure of domain ontologies and their mathematical models // Proc.of the Pacific Asian Conference on Intelligent systems 2001. – Korea Intelligent Information Systems Society, 2001. – P.410-420.
8. *Клещев А.С., Артемяева И.Л.* Математические модели онтологии предметной области. Ч. 2. Компоненты модели // Научно-техническая информация. Сер. 2. – 2001. – № 3. – С.19-28.
9. *Клещев А.С., Артемяева И.Л.* Необогатенные системы логических соотношений. Ч.1. // Научно-техническая информация. Сер. 2. – 2000. – №7. – С.18-28.
10. *Клещев А.С., Артемяева И.Л.* Необогатенные системы логических соотношений. Ч.2. // Научно-техническая информация. Сер. 2. – 2000. – №8. – С.8-18.

Статья представлена к публикации членом редколлегии А.С. Клещевым.