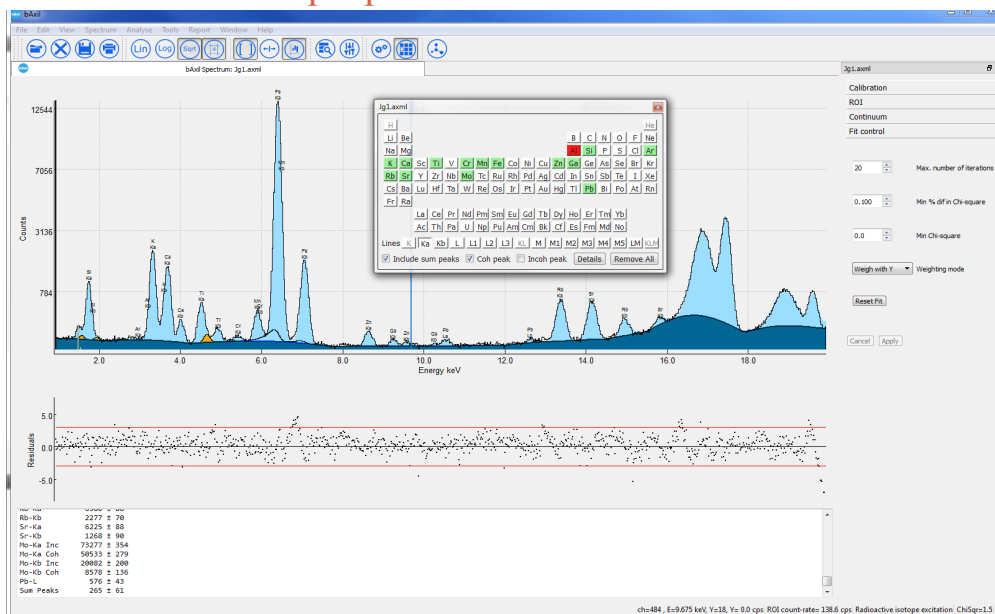


ТЕХНИЧЕСКАЯ СПЕЦИФИКАЦИЯ

Пакет программного обеспечения bAxil



bAxil

КЛЮЧЕВЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ

- Реализация двух типов форм пиков: Гауссиан и профиль Фойгта
- Добавление дополнительных составляющих формы пика, таких как «Уширение» и «Ступенька»
- Возможность подгонки пиков, возникающих при когерентном и некогерентном рассеянии возбуждающего излучения
- Возможность подгонки пиков нефлуоресцентной природы (например, полного поглощения гамма-излучения, дифракционных и т.д.)
- Визуальная идентификация и маркировка пиков суммирования и вылета на изображении спектра
- Оптимизированный графический пользовательский интерфейс, который можно настраивать в соответствии с предпочтениями пользователя
- Высокая прослеживаемость данных с сохранением всей информации в файлы формата XML (*.axml)
- Индивидуально настраиваемые отчеты
- Количественный анализ различными методами:
 - Метод линейной регрессии с использованием калибровочных стандартов
 - Метод фундаментальных параметров с использованием стандартных образцов
 - Метод фундаментальных параметров без использования стандартных образцов
- Дополнительный модуль для анализа сохранённых спектров в пакетном режиме без вмешательства оператора
- Специальная опция макроанализа спектров «пиксельного» РФА со сверхбыстрым «комбинированным» алгоритмом подгонки и сжатием данных
- Дополнительные программный инструмент для сжатия множества спектров, получаемых при «пиксельном» РФА
- Мультиплатформенное программное обеспечение, бесперебойно функционирующее под управлением операционных системах MS Windows™, MAC OS™ или Linux®

ВВЕДЕНИЕ

Обработка спектров рентгеновской флуоресценции по-прежнему является очень важным этапом рентгено-флуоресцентного анализа (РФА) из-за сложности, вызванной значительной интерференцией между линиями характеристического излучения элементов, наличием пиков суммирования и вылета, пиков, возникающих при когерентном и некогерентном рассеянии возбуждающего излучения, сложным непрерывным распределением и многими другими факторами. Кроме того, совершенствование современных технологий измерения и детектирования ставит новые задачи по обработке спектров при рентгено-флуоресцентном анализе.

Пакет bAxil представляет собой новое программное обеспечение для РФА. Хотя в основе этого программного обеспечения лежат широко известные во всем мире алгоритмы анализа AXIL, оно использует последние разработки и исследования в области анализа спектров и разделения пиков. При разработке пакета программ bAxil был учтен колоссальный опыт работы и многочисленные отзывы пользователей более ранних версий программного обеспечения на базе алгоритмов AXIL (например, Axil-PC, QXAS и т.д.) для оптимизации этапов обработки спектров и используемых методов анализа.

Пакет программ bAxil был создан с применением новейших средств разработки и программирования. Программное обеспечение использует преимущества высоких компьютерных мощностей (поддержка 64-разрядных процессоров), современных операционных систем (bAxil – мультиплатформенное программное обеспечение) и новых структур данных (файлы на базе XML).

В состав bAxil входит специальный модуль, реализующий новые алгоритмы для быстрого анализа спектров «пиксельного» РФА и сжатия данных. При «пиксельном» РФА исследуется не одна точка поверхности образца, а матрица размером до 256 x 256 точек.

Помимо этого, семейство программных продуктов bAxil включает в себя «Библиотеки программирования bAxil», которые (как отдельный продукт) позволяют пользователю на практике применять преимущества эффективных алгоритмов анализа спектров рентгеновской флуоресценции и внедрять их в свои собственные разработки.

КОМПОНЕНТЫ

Пакет программного обеспечения bAxil включает следующие компоненты:

- Программа обработки спектров, в состав которой входят также:
 - Модуль управления многоканальным анализатором (МКА) Toraz-X, обеспечивающий функции настройки МКА и набор данных
 - Модуль макроанализа спектров «пиксельного» РФА, содержащий «комбинированный» алгоритм анализа спектров
- Программы количественного анализа, в которых реализованы различные расчётные методы:
 - Метод использования калибровок, получаемых путём линейной регрессии результатов измерения стандартных образцов
 - Метод фундаментальных параметров без использования стандартных образцов
 - Метод фундаментальных параметров с использованием стандартных образцов
- Модуль для обработки большого количества сохранённых спектров РФА в пакетном режиме без вмешательства оператора.
- Программный инструмент для сжатия множества спектров, получаемых при «пиксельном» РФА

АНАЛИЗ СПЕКТРОВ

Отличительной особенностью пакета программного обеспечения bAxil являются эффективные механизмы анализа спектров. Они применимы для анализа любых спектров, получаемых при РФА, независимо от их сложности, числа линий, типа возбуждения и/или системы детектирования.

Отличительной особенностью пакета программного обеспечения bAxil являются эффективные механизмы анализа спектров

дель может также включать условия (источник возбуждения флуоресценции, тип детектора, схема измерения), в которых был набран спектр. После этого параметры модели оптимизируются нелинейным методом наименьших квадратов с использованием модифицированного алгоритма Марквардта для минимизации суммы различий (χ^2) между экспериментальными данными и созданной математической моделью.

Новым в программе анализа спектров bAxil является возможность выбора между двумя моделями форм пиков:

- Гауссиан
- Профиль Фойгта

Последняя лучше описывает форму пиков характеристического излучения элементов с большим атомным номером.

В модель пика могут быть добавлены дополнительные составляющие:

- «Ступенька» и/или
- «Уширение»

Эти составляющие обеспечивают минимизацию отклонений реальной формы пика от выбранной модели. Алгоритм подгонки пиков, учитывающий такие отклонения, определяет параметры отдельных пиков с более высокой точностью и обеспечивает более достоверное вычисление их чистых площадей, учёт влияния этих пиков на соседние в мультиплете и/или учёт вкладов от соседних сильных пиков.

Более того, каждый параметр описания пика может быть задан индивидуально, что позволяет добиться лучшей подгонки линий с искаженной формой (вследствие таких эффектов, как рассеяние и дифракция). При анализе различные модели пиков могут быть применены как ко всем пикам в спектре, так и к отдельным.

Кроме того, программа bAxil может включать в модель подгонки пики нефлуоресцентной природы, такие как пики полного поглощения гамма-излучения или дифракционные пики. Учёт таких пиков может предоставить важную дополнительную информацию при анализе образца и/или дополнить результаты оценки спектра.

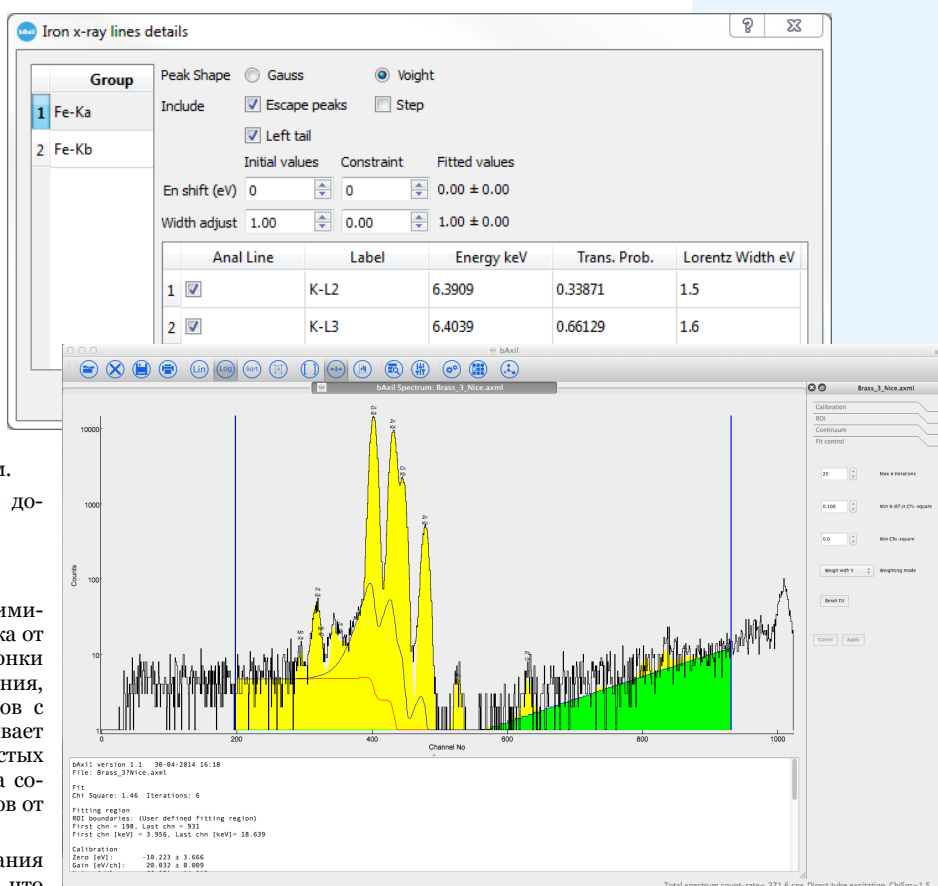
Программный пакет bAxil поддерживает до шести разных математических моделей для описания непрерывного распределения спектра (подложки), которые соответствуют наиболее распространенным режимам возбуждения рентгеновской флуоресценции и позволяют программному обеспечению проводить анализ любого спектра при РФА независимо от используемого режима возбуждения.

Новые методы анализа спектров отличаются возможностью подгонки более широких пиков, таких как пики, получающиеся вследствие множественного рассеяния в образце или детекторе - пиков когерентного и некогерентного рассеяния возбуждающего излучения. Результаты такого анализа могут использоваться в более детальных расчетах для определения матрицы образца.

В основе обработки спектра лежит математическая модель, с помощью которой аналитик может описывать полученный спектр. Для этого ему требуется указать исследуемую область (область интересов) в спектре, выбрать метод компенсации непрерывного распределения (подложки), идентифицировать и пометить пики рентгеновского излучения, которые должны быть включены в модель вместе с их индивидуальными параметрами, и установить корректные значения параметров энергетической калибровки спектрометра. Мо-

АНАЛИЗ СПЕКТРОВ

- Выбор из двух типов функций, описывающих форму пика – Гауссиан и профиль Фойгта
- Дополнительные составляющие формы пика: «Уширение» и «Ступенька»
- Подгонка пиков, вызванных когерентным и некогерентным рассеянием
- Анализ пиков нефлуоресцентной природы (например, полного поглощения гамма-излучения, дифракционных и т.д.)



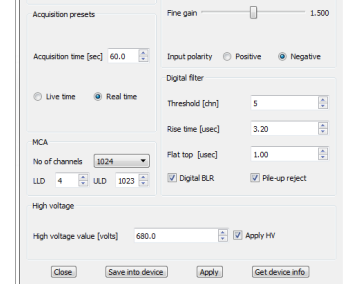
ГРАФИЧЕСКИЙ ИНТЕРФЕЙС ПОЛЬЗОВАТЕЛЯ

Хотя графический интерфейс пользователя bAxil прост в использовании, легкодоступен и интуитивно понятен, он тем не менее является эффективным средством визуализации спектров при рентгенофлуоресцентном анализе и результатов их обработки, а также управления процессом анализа. Пользовательский интерфейс является многодокументным и может отображать несколько спектров в общем главном окне программы. Кроме того, в нем используются виджеты (например, для модели), которые обеспечивают удобный и быстрый доступ к основным параметрам модели и командам, и за счет этого – быстрые изменения и мгновенную обратную связь с результатами анализа для выбранных условий.

Программный пакет bAxil обеспечивает различные функции и инструменты, помогающие при обработке спектров, такие как «Калибровка по энергии» и «Поиск пика». Для их применения предусмотрены очень простые, интуитивно понятные способы.

Графическая «Таблица элементов» вместе с маркерами линий K-, L- и M- серий рентгеновского излучения элементов обеспечивает визуальную помощь в идентификации рентгеновских линий в спектре, а также в определении индивидуальных составляющих формы их пиков.

Новый пользовательский интерфейс bAxil позволяет легко увеличить любую область спектра. Составляющие анализируемых пиков (базовая модель формы, подложка, дополнительные составляющие модели «Ступенька» и «Уширение») можно отображать по отдельности, обеспечивая оптимальную визуальную обратную связь при обработке. Вывод остатков после подгонки в графическом виде помогает пользователю мгновенно обнаружить недостающие или неверно подогнанные области. Щелчком мыши можно быстро изменять масштаб отображения графика (логарифмический, линейный или пропорциональный квадратному корню), а также задавать различные единицы измерения величин, откладываемые на осях (например, кэВ, имп./сек).



Отчеты настраиваются пользователем на основе шаблонов. В шаблонах отчетов используется язык описания сценариев, совместимый с HTML, а также команды с блочной структурой для создания отчетов. Кроме того, предусмотрен набор готовых к использованию шаблонов отчетов (например, шаблоны отчетов «Краткий» и «Подробный»).

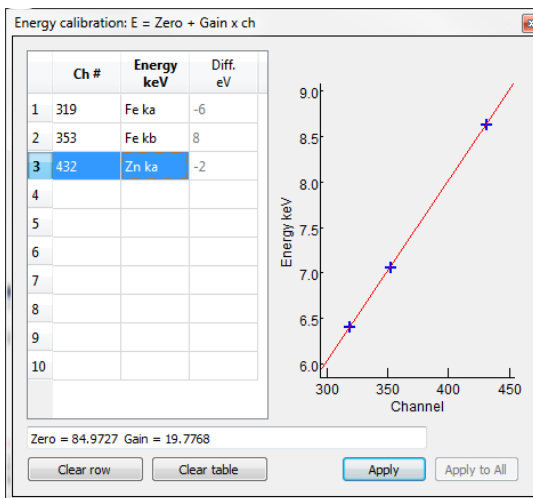
ФАЙЛЫ И ПРОЧЕЕ

Программа bAxil может импортировать спектры, сохранённые в файлах разных форматов, таких как *.sre (QXAS), двоичный формат *.wax (WinAxil) и многие другие.

В настоящее время bAxil использует файлы в формате XML (*.axml), в которых можно сохранять практически любую информацию о спектрах, условиях измерения и результатах анализа. Такой способ хранения данных позволяет добиться высочайшей прослеживаемости анализа и оптимизировать контроль качества результатов. Кроме того, результаты анализа спектров можно легко экспортировать в файлы ASCII (простые текстовые файлы или файлы с разделителями-запятыми *.csv).

СОЗДАНИЕ ДАННЫХ «ПИКСЕЛЬНОГО» РФА

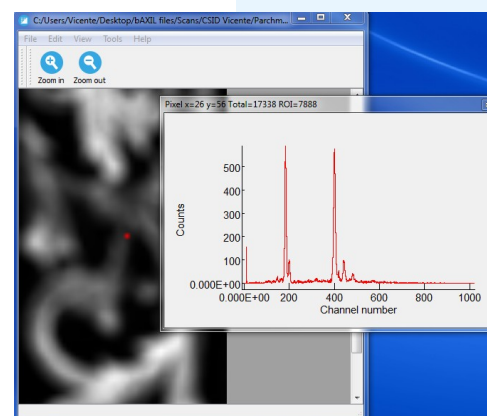
Пакет программного обеспечения bAxil включает в себя модуль создания сжатых данных, получаемых при «пиксельном» РФА. В этом модуле используется рациональный алгоритм сжатия в один файл всех относящихся к набору измерений данных и энергетических спектров, полученных в результате измерения объекта пиксельным методом. Эта программа гарантирует десятикратное сжатие данных и намного более быстрый доступ к спектрам каждой точки (пикселя) объекта. Получающийся файл сжатых данных (*.csid) является источником входной информации для модуля анализа «пиксельного» РФА, встроенного в программу анализа bAxil.



ПАКЕТ ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ

- bAxil: программный пакет анализа спектров, включающая в себя следующие программы:
 - Анализ данных "пиксельного" РФА
 - Набор данных и управление MKA BrightSpec
- bAxilBatch: Пакетный анализ файлов
- bAxilConvertSID: Программный инструмент создания файлов сжатых данных "пиксельного" РФА
- bAxilLR: Программа количественного анализа методом использования калибровок
- bAxilFP: Программа количественного анализа методом фундаментальных параметров

Графический интерфейс пользователя bAxil прост в использовании и интуитивно понятен, но тем не менее является эффективным средством анализа спектров



АНАЛИЗ ДАННЫХ «ПИКСЕЛЬНОГО» РФА

В программный пакет bAxil встроен новый ключевой алгоритм: анализ данных "пиксельного" РФА. С помощью этого модуля пользователь может открыть файл данных, содержащий несколько спектров, относящихся к отдельным точкам измерения объекта, и провести интерактивный анализ этих спектров. Новый графический интерфейс создает поэлементное изображение на основе результатов анализа отдельных спектров каждой измеренной точки (пикселя) исследуемого объекта. Помимо создания такого изображения обеспечивается интерактивный просмотр результатов для каждого пикселя.

Наиболее важным является то, что в программном пакете bAxil используется «комбинированный» алгоритм обработки спектров отдельных пикселей. При этом программа совмещает стандартно используемый нелинейный метод наименьших квадратов и метод линейной подгонки и оптимизации параметров. Результатом является возможность анализа большого числа спектров за очень короткое время; например, миллион спектров может быть проанализирован меньше чем за несколько минут.

КОЛИЧЕСТВЕННЫЙ АНАЛИЗ

Программа bAxil рассчитывает концентрации элементов в образце с использованием нескольких методов. Пользователь может выбрать метод количественного анализа по своему усмотрению, а также быстро и просто переключаться между ними для получения наилучших результатов.

Используются следующие методы количественного анализа:

1. Метод использования калибровок, получаемых путём линейной регрессии результатов измерения стандартных образцов
2. Метод фундаментальных параметров без использования стандартных образцов
3. Метод фундаментальных параметров с использованием стандартных образцов

Кроме того, при количественном анализе есть возможность внесения «приборных» или «фоновых» поправок значений концентраций.

ТРЕБОВАНИЯ

Пакет bAxil представляет собой мультиплатформенное программное обеспечение и работает в следующих операционных системах:

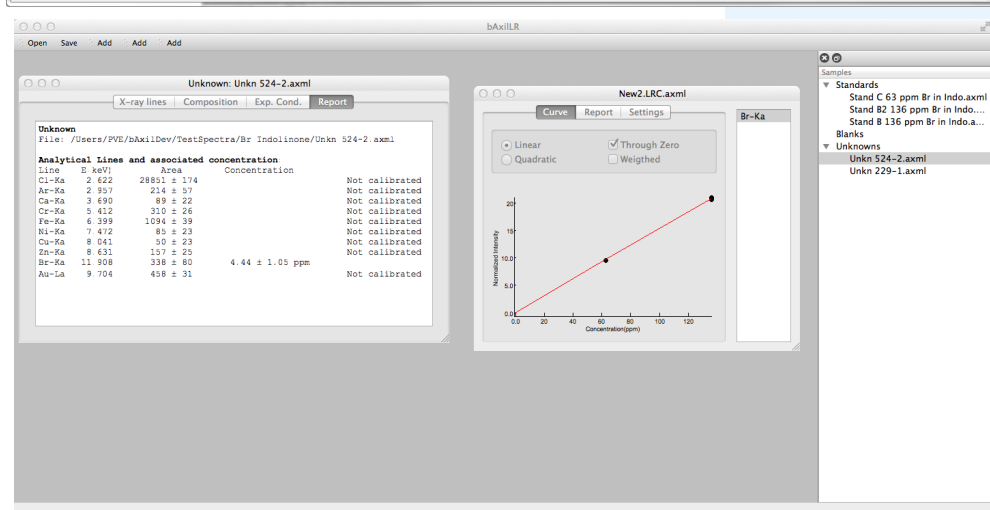
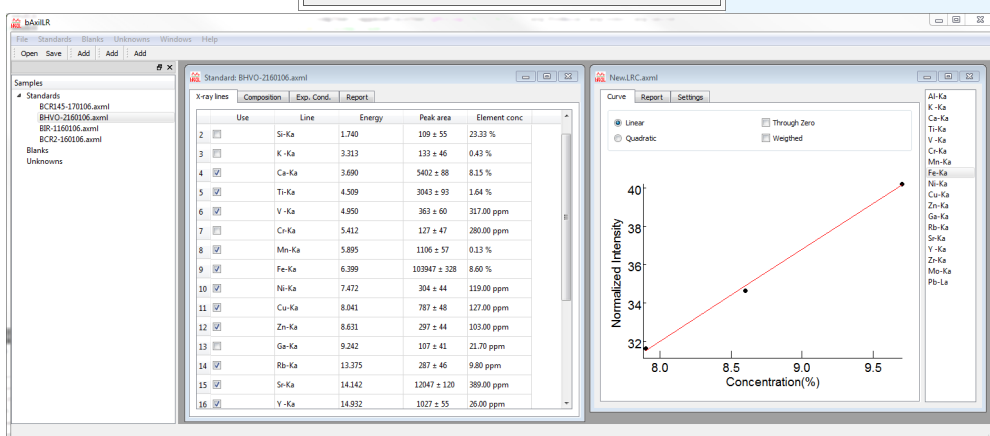
- Microsoft Windows XP™, Windows 7™ и Windows 8™ (32- или 64-разрядные варианты)
- MAC OS®™
- Linux® OS

ИНФОРМАЦИЯ ДЛЯ ЗАКАЗА

1. Программное обеспечение bAxil. Однопользовательская лицензия
2. Программное обеспечение bAxil. Сетевая лицензия
 - Единый сетевой ключ для активации запрашиваемого количества лицензий
3. Любая из выше описанных конфигураций, но с печатным руководством пользователя
4. Пакетное решение bAxil: содержит полное программное обеспечение bAxil (однопользовательская лицензия) + многоканальный анализатор Torax-X

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ИНФОРМАЦИЯ

В линейку продуктов bAxil входит «Библиотека программирования bAxil», которая предлагается как отдельный продукт. Дополнительная информация об использовании «Библиотеки программирования bAxil» и о возможных типах лицензий предоставляется по запросу.



КОНТАКТЫ

Разработчик и производитель:
Компания BrightSpec NV/SA
Waterfront Researchpark
Galileilaan 18
B-2845, Niel
BELGIUM
Тел./Факс: +32 (0) 3 844 95 86
www.brightspec.be
sales@brightspec.be
support@brightspec.be

Эксклюзивный дистрибьютор
на территории РФ:
ЗАО «МТС»
117977, г. Москва, ул. Миклухо-
Маклая, д. 16/10
Тел.: +7 (495) 225 98 93
mtsmed@ntl.ru
www.mtsmed.ru

Microsoft и Windows – зарегистрированные торговые знаки компании «Microsoft Corporation» в Соединенных Штатах и/или в других странах
MAC OS – зарегистрированный торговый знак компании «Apple Inc.»
Linux используется по открытому лицензионному соглашению GNU License

