

ұзын деп есептеуге болады, себебі, ортасында оның шеттік шекаралық шарттарының әсері өте аз бола бастайды. Егер  $L \geq \frac{\pi}{\beta}$  болса, онда шексіз ұзын деп саналады.

(9) шешіміне  $q(x)$  жүктемесінен тәуелді  $y^*(x)$  дербес шешімін қосу керек. Егер  $q(x)$   $x$ -ке тәуелді алгебралық полином болса, дербес шешімді анықталмаған коэффициенттер әдісімен сол дәрежедегі полином түрінде табуға болады. Дербес жағдайда, сызықты  $q(x) = a_1x + a_0$  функциясы үшін (5)–тің дербес шешімі мынадай болады:

$$y^*(x) = \frac{a_1x + a_0}{k_1}. \quad (12)$$

Ұзақ уақыт кешендерді есептеудің әдістері адамзаттың иелігінде болған жоқ. Соған қарамастан, орасан зор сәулет ескерткіштері тұрғызылды. Бұл кешен жұмысын интуитивті сезетін сәулетшілердің талантына байланысты және олар элементтердің нақты өлшемдерін таба білді. Сондай – ақ, құрылыста сәтсіз тұрғызылған кешендердің құлауынан алған тәжірибе жинақтаудың үлкен маңызы зор болды.

Сейсмикалық әсерлерді ескере отырып, құрылыс конструкцияларын және кешендерді есептеу бойынша қызықты қолданбалы есептер ғылыми - зерттеу институттарында және олардың филиалдарында, бірнеше жобалау институттарында шешіле бастады. Республика ғалымдарының жұмыстары халықаралық танымға ие болды, яғни олар механика бойынша өкілетті конференцияларда өз жұмыстарын көрсетті. Осыған байланысты ЭЕМ – лардың пайда болуымен бірге кешендер статикасы мен динамикасында елеулі өзгерістер пайда болды.

Теориялық механика саласынан білім болмай, жоғары оқу орындарындағы бірде – бір техникалық мамандықты меңгеру мүмкін емес. Теориялық механиканың заңдарын білмей техника саласындағы есептерді шешу мүмкін болмайды.

Құрылыс механикасы – инженерді заманауи статикалық және динамикалық есептеу әдістерімен қамтамасыз ететін қолданбалы ғылым. Осы саладағы фундаменталды білімдер құрылыс есептерін және ғимараттар мен кешендерді жобалауды сауатты, тиімді және сапалы шешуге ықпал етеді.

#### Әдебиеттер:

1. Шакирзянов Р.А. Основы динамического расчета сооружений. Уч. пос. – Казань: КИСИ, 1994. – 84 с.
2. Турсунов К.А. Метод конечных элементов в расчетах прямоугольных пластин: Методическое указание. – Караганда: Изд-во КарГУ, 2002. - 80 с.

**Саулбеков Д.М.**, Карагандинский государственный университет имени академика Е.А.Букетова, химический факультет, гр. ХО-23, студент  
(*Научный руководитель — к.х.н., доцент Фомин В.Н.*)

### НАСТРОЙКА ПАРАМЕТРОВ ЛАЗЕРНОГО АТОМНО-ЭМИССИОННОГО СПЕКТРОМЕТРА С ПРИМЕНЕНИЕМ ВДПЭ

Атомно-эмиссионный спектральный анализ (АЭС) является одним из мощнейших современных методов качественного, полуколичественного и количественного анализа во многих областях исследования материалов и процессов, в которых присутствуют химические вещества. Длина волны излучаемого (или поглощаемого) света зависит только от природы вещества, тогда как интенсивность пропорциональна молярной концентрации и существенно зависит от условий регистрации спектра и химического состава пробы. Взаимное гашение или усиление близко расположенных спектральных линий разных элементов, которое заметно зависит от условий регистрации спектра, существенно усложняет интерпретацию спектральных данных. Универсального способа преодоления проблем АЭС в настоящее время не разработано [1]. Для калибровки приборов АЭС применяются, главным образом, классические методики, основанные на методе наименьших квадратов. При поиске оптимальных параметров регистрации спектров часто применяется планирование эксперимента, нейронные сети и метод опорных векторов. Значительное внимание уделяется применению методов оптимизации Тагути. Классические методы характеризуются отсутствием робастности. Методы,

основанные на планировании эксперимента, требуют большого числа опытов и трудно поддаются формализации для автоматизированной обработки. Нейронные сети, метод опорных векторов и другие итерационные методы ресурсоёмки при вычислениях и не всегда достаточно разработаны. Таким образом, хемометрика, используемая в АЭС, нуждается в новых методах обработки данных [2-3], в том числе основанных на планировании экспериментов.

Известный метод вероятностно-детерминированного планирования эксперимента (ВДПЭ) [4] был опробован нами ранее для оптимизации условий регистрации спектров в таблетках с борной кислотой [5]. Несколько позже была предложена модификация метода ВДПЭ, заключающаяся в использовании в качестве одного из факторов состава образца при одновременном варьировании концентраций всех определяемых компонентов [6]. Дальнейшее развитие метод получил в работе [7], где была показана принципиальная возможность его использования для количественного определения железа в смеси оксидов. В предлагаемой работе рассматривается возможность использования метода для калибровки спектрометра на определение двух элементов, с автоматическим детектированием аналитических линий, дающих наибольшую точность калибровочных графиков.

В качестве калибровочных смесей были применены смеси оксидов хрома(III) и железа (III). В качестве разбавителя применена борная кислота, содержащая 1% оксида циркония. Весовые соотношения оксидов металлов приведены в таблице 1.

Таблица 1. Состав калибровочных смесей

	1	2	3	4	5
Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	0,5	1	2	5	10
Cr <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	10	5	2	1	0,5

В отличие от наших ранних исследований, концентрации каждого из элементов меняются более круто (удваиваются от образца к образцу), что позволяет лучше оценить разрабатываемую методику на предмет допустимого диапазона концентраций.

В план эксперимента, наряду с составом образца (фактор 1), были включены также настраиваемые параметры прибора «ЛИАЭС Матрикс Континуум». В число используемых параметров вошли энергия лампы накачки лазера (фактор 2), время задержки первого затвора модулятора добротности (фактор 3), время задержки второго затвора модулятора добротности (фактор 4), время задержки начала экспонирования (фактор 5) и общее время экспонирования ПЗС-матрицы (фактор 6). План эксперимента приведён в таблице 2.

Таблица 2. План эксперимента по оптимизации параметров прибора

№ Exp	C <sub>Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub></sub> , %	E <sub>Lamp</sub> , J	Q-Sw <sub>1</sub> , μs	*Q-Sw <sub>2</sub> , μs	ADC, μs	Expos., ms
1	2	14	100	1	1	1
2	2	15	120	5	3	3
3	2	16	140	10	6	5
4	2	17	160	20	9	10
5	2	18	180	30	15	15
6	1.5	14	120	10	9	15
7	1.5	15	140	20	15	1
8	1.5	16	160	30	1	3
9	1.5	17	180	1	3	5
10	1.5	18	100	5	6	10
11	1	14	140	30	3	10
12	1	15	160	1	6	15
13	1	16	180	5	9	1
14	1	17	100	10	15	3
15	1	18	120	20	1	5
16	0.5	14	160	5	15	5
17	0.5	15	180	10	1	10
18	0.5	16	100	20	3	15
19	0.5	17	120	30	6	1
20	0.5	18	140	1	9	3

21	2.5	14	180	20	6	3
22	2.5	15	100	30	9	5
23	2.5	16	120	1	15	10
24	2.5	17	140	5	1	15
25	2.5	18	160	10	3	1

\* $Q-Sw_2$ , в соответствии с инструкцией по эксплуатации прибора, задаётся как  $Q-Sw_1 + \Delta$ , в плане эксперимента и при математической обработке результатов используется значение  $\Delta$ .

Образцы смесей с суммарным содержанием оксидов 5% гомогенизировались с борной кислотой путем длительного истирания в механической агатовой ступке. Полученный визуально однородный порошок прессовали в таблетки. Таблетированные образцы анализировались на спектрометре по плану эксперимента (таблица 2).

В полученном массиве данных из 25 спектров аналитические линии железа и хрома выявлялись расчетным путем с применением следующего алгоритма:

- 1) Интенсивности аналитических линий, соответствующих одной концентрации элемента, усреднялась и проверялось наличие восходящей зависимости интенсивности от концентрации.
- 2) Если обнаруживалась восходящая зависимость, точки аппроксимировались прямой или степенной функцией методом наименьших квадратов. Вычислялся коэффициент корреляции. По справочным данным проверялась правильность отнесения рассматриваемой линии к данному элементу (железу или хрому).
- 3) Линии, для которых были получены максимальные коэффициенты корреляции, использовались в плане эксперимента для получения обобщенного уравнения Протоdjяконова, описывающего зависимость интенсивности от концентрации и настроек прибора.
- 4) После исследования абсолютных интенсивностей линий проводилось исследование их относительных интенсивностей (нормализованных по аналитическим линиям бора), способом, описанным в пунктах 1-3.

Автоматизированный анализ спектров с помощью специально разработанной программы показал, что ряд аналитических линии хрома сохраняет высокую корреляцию интенсивности с концентрацией не зависимо от настроек прибора, и может быть использован для получения обобщенного уравнения без нормализации. В то же время для линий железа зависимостей с коэффициентом корреляции выше 0.95 без нормализации получить не удалось. Для получения сопоставимых результатов было принято решение использовать нормализацию по линиям бора для обоих исследуемых элементов. В результате нормализации было найдено множество аналитических линий, позволяющих связать интенсивность с концентрацией с коэффициентом корреляции более 0.97. Покажем ход работы на примере аналитической линии  $Fe369.394$ , нормализованной по  $B 349$ . На рисунке 1 показаны частные зависимости нормализованной интенсивности от рассматриваемых факторов.

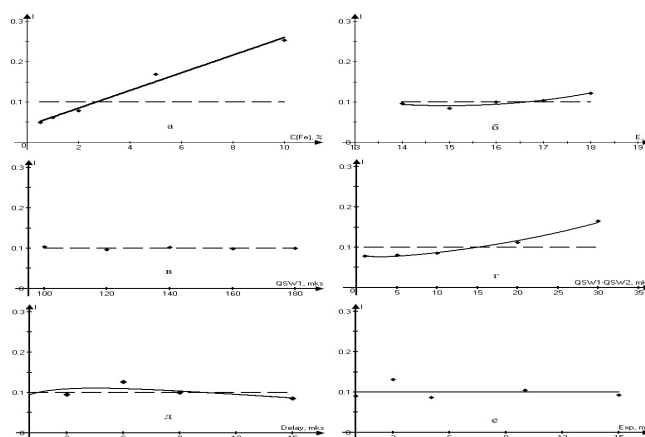


Рисунок 1. Частные зависимости нормализованной интенсивности аналитической линии  $Fe369.394$  от: а) – концентрации железа, б) – энергии лампы, в) и г) – настроек затворов, д) – задержки начала регистрации, е) – времени регистрации.

Обобщенное уравнение, полученное с применением геометрического усреднения, может быть записано в виде:

$$I = (0.04097 + 0.02191 * X_1) * (1.284E11 * \text{Exp}(1.099 * X_2) * X_2^{-16.42}) * \\ * (0.07662 * \text{Exp}(0.03694 * X_4) * X_4^{-0.1065}) * (0.09942 * \text{Exp}(-0.0482 * X_5) * X_5^{0.2151}) / 0.001006$$

где  $R=0.9095$ ,  $t_R=23.5369$ .

Расчёт максимального значения этого уравнения дает для рассматриваемой линии условия достижения максимума при энергии лампы 18 Дж, задержке второго затвора на 30 мкс больше первого, задержке начала регистрации около 6 мкс. Полученное максимальное значение составило 0.5656.

Расчеты для других аналитических линий железа, а также для аналитических линий хрома, показывают возможность получения интенсивности, близкой к максимально достижимой при этих же настройках лазера. Таким образом, полученные параметры настройки можно считать оптимальными.

В целом нормализация уменьшает зависимость интенсивности от энергии лампы накачки и других факторов, увеличивая выраженность зависимости от концентрации, что может быть объяснено одинаковой зависимостью нормализуемой линии и линии внутреннего стандарта от условий регистрации спектра.

Резюмируя изложенное можно заключить, что ВДПЭ может быть применен при автоматизированном поиске настроек приборов атомно-эмиссионного спектрального анализа, а также для поиска лучших аналитических линий, позволяющих строить калибровки для количественного анализа.

#### Литература

1. Кремерс Д., Радзиемски Л. Лазерно-искровая эмиссионная спектроскопия. М.: «Техносфера», 2009 – 360с.
2. Geladi P. Chemometrics in spectroscopy: Part 1. Classical Chemometrics, Spectrochim. Acta, Part B 58 (2003) - P. 767– 782.
3. P. Geladi, Chemometrics in spectroscopy: Part 2. Examples, Spectrochim. Acta, Part B 59 (2004) – P. 1347-1357.
4. Беляев С.В., Малышев В.П. Пути развития вероятностно-детерминированного планирования эксперимента. // В сб. Комплексная переработка минерального сырья Казахстана. Состояние. Проблемы. Решения. - Алматы, 2008. - Т.9 Информационные технологии в минерально-сырьевом комплексе. Глава 8. - С.599-633.
5. Фомин В.Н. и др. Калибровка спектрометра «ЛАЗС Матрикс Континуум» для анализа смеси оксалатов // Наука вчера, сегодня, завтра: сб. XXXIX междунар. науч.-практ. конф. № 10(32). – Новосибирск: СибАК, 2016. – С. 98-105.
6. Фомин В.Н., Ковалева А.А., Алдабергенова С.К. Использование многофакторных переменных в вероятностно-детерминированном планировании эксперимента // Вестник Карагандинского университета. Серия химия. - 2017. - №3(95). - С. 91-100.
7. Fomin V.N., Aldabergenova S.K., Rustembekov K.T., Dik A.V., Kim Yu.Yu., Rozhkovoy I.E. Method for increasing the accuracy of quantitative determination of iron by LIBS // Вестник Карагандинского университета. Серия химия. – 2018. - №3(91). - С.74-83.

**Сейдуалы Х.Б., Жанбирбаева П.А.**, академик Е.А. Бөкетов атындағы Қарағанды мемлекеттік университеті, ФЕК-302, студенті

(*Ғылыми жетекші – PhD доктор, доцент Камбарова Ж.Т.*)

#### ЭЛЕКТРОСТАТИКАЛЫҚ КВАДРУПОЛЬДІК-ЦИЛИНДРЛІК ӨРІС НЕГІЗІНДЕГІ ЭНЕРГИЯ ТАЛДАҒЫШЫН КОМПЬЮТЕРЛІК МОДЕЛЬДЕУ

Жетекші заманауи технологиялар оның ішінде нанотехнологиялар бетте өтетін құбылыстармен анықталады. Беттері маңызы рөлді атқаратын әр түрлі наноматериалдардың, наноөлшемді құрылымдардың қасиеттерін зерттеуге қызығушылық артуда. Қазіргі кезде қатты дене бетін зерттеу – наноөлшемді және молекулалық құрылымдардың физикасы, заманауи материалтану, нано- мен