

**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МОДЕЛИРОВАНИЯ И ПЛАНИРОВАНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТА ДЛЯ
СОЗДАНИЯ МЕТОДИК СПЕКТРАЛЬНОГО АНАЛИЗА ГЕОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ**

Д.Е. Бабенков, Ю.Е. Салосина, Ю.А. Повесьма

Научный руководитель: профессор, д.т.н. В.И. Отмахов

Национальный исследовательский Томский государственный университет,

Россия, г.Томск, пр. Ленина, 36, 634050

E-mail: denis_babenkov@list.ru

**THE USE OF MODELING AND EXPERIMENTAL DESIGN TO CREATE SPECTRAL ANALYSIS
TECHNIQUES OF GEOLOGICAL OBJECTS**

D.E. Babenkov, Yu.E. Salosina, Yu.A. Povesma

Scientific Supervisor: Prof., Dr. V.I. Otmakhov

Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050

E-mail: denis_babenkov@list.ru

***Abstract.** Our investigation will be very useful for geologists, because they find themselves in situation when they don't have enough information about the object very often. In these cases they use a lot of geochemical indicators to complete the picture. These indicators are different element and isotopic ratios. Therefore reliable information about concentration of elements is very important. Arc spectral emission analysis has some advantages in this area, because it can analyze solid objects without dissolution. In this reason it is very relevant to create techniques for analysis of geological objects especially for this method. To achieve successful metrological characteristics we have used experimental design, because it allows to obtain optimal indexes of analysis and to calculate relations of these indexes from parameters of analysis. The optimal indexes of analysis parameters were obtained and checked.*

Введение. Анализ геологических объектов актуален, поскольку является ключевым инструментом в поисках полезных ископаемых, а также необходим для получения информации о климатических обстановках, условиях формирования пород и изучения механизмов процессов, проходящих в литосфере. Так, например, использование геохимических индикаторов является наиболее простым способом сопоставления пластов в случае, если они являются «пустыми», т.е. не несут в себе остатков органических веществ.

Горные породы являются наиболее сложными в изучении в связи со сложным минеральным составом, где одно вещество может быть представлено в различных изоморфных и полиморфных модификациях. К тому же данные объекты зачастую содержат множество основных, матричных, и примесных компонентов. Всё это в сумме оказывает существенное влияние на результаты анализа. Данный тип влияния в значительной степени осложняет получение достоверных данных об объекте, поэтому создание методик анализа в этой области является важной задачей. Метод дуговой атомно-эмиссионной спектроскопии (ДАЭС) позволяет работать с твердотельными образцами, что исключает необходимость «мокрой» пробоподготовки. Это весомое преимущество, поскольку растворение таких сложных образцов зачастую носит многостадийный характер, негативно сказывающийся на

достоверности результатов анализа. Также в ходе разложения возможно внесение в пробу примесей из используемых реагентов.

Создание такой методики очень трудоёмко, поскольку связано с множеством факторов, зачастую от аналитика не зависящих. К ним можно отнести особенности метода анализа в целом, особенности работы прибора, тонкости его настроек, индивидуальность анализируемого образца, выбранные режимы съёмки и т.д. Однако фокусировка на ключевых моментах, опора на существенную теоретическую базу и понимание логики принципов метода позволяют разобраться в данной проблеме. Нам удалось выделить основные вариативные параметры анализа, которые влияют на его результат. А чтобы выбрать в большую или меньшую сторону, и в какой степени, их необходимо изменить мы воспользовались планированием эксперимента [1, 2]. Использование данной процедуры позволяет составить определённую план-схему анализа, выделить параметры, которые в большей степени влияют на анализ, и оценить их значимость и влияние на тот или иной метрологический показатель в конкретном случае. Не менее важно, что планирование эксперимента позволяет выявить не только характер зависимости отклика от условий проведения анализа, но и смоделировать полиномиальное уравнение этой зависимости с учётом взаимного влияния параметров друг на друга.

Экспериментальная часть. В нашем эксперименте в качестве объекта анализа был использован стандартный образец гранодиорита GSP-2 (США, Колорадо). В качестве основных параметров для варьирования были выбраны: степень разбавления пробы графитом (X_1), обжиг пробы в процессе съёмки (X_2), концентрация вводимого в пробу носителя NaCl (X_3), сила тока в дуге (X_4) и время экспозиции (X_5). План эксперимента представлен в таблице 1.

Таблица 1

План-схема дробного факторного эксперимента с дробностью реплики 1/2 и пятью варьируемыми параметрами

№ опыта	X_1 Разбавление пробы	X_2 Обжиг в съёмке, с	X_3 Концентрация носителя, %	X_4 Сила тока, А	$X_5(X_2X_3)$ Экспозиция, с
1	10x	2	1	$\overline{15}$	15
2	10x	2	1	$\overline{15}$	15
3	100x	2	1	20	15
4	100x	2	1	20	15
5	10x	0	1	20	30
6	10x	0	1	20	30
7	100x	0	1	$\overline{15}$	30
8	100x	0	1	$\overline{15}$	30
9	10x	2	5	$\overline{15}$	30
10	10x	2	5	$\overline{15}$	30
11	100x	2	5	20	30

Таблица 1 (Продолжение)

12	100x	2	5	20	30
13	10x	0	5	20	15
14	10x	0	5	20	15
15	100x	0	5	<u>15</u>	15
16	100x	0	5	<u>15</u>	15

Таким образом, в ходе дробного факторного эксперимента с дробностью реплики 1/2 и пятью варьируемыми параметрами, откликом в котором послужила относительная погрешность измерений ($P=0,95$, $f=5$) в условиях повторяемости, было показано следующее:

- 1) Оптимальная степень разбавления пробы графитовым порошком – в 20 раз.
- 2) Оптимальное время обжига пробы в процессе анализа – 1с.
- 3) Концентрация носителя – 1,5–2%.
- 4) Сила тока – 17–20 А.
- 5) Время экспозиции – 25–27 с.

Поскольку оптимальное значение относительной случайной погрешности измерений выбиралось одновременно для ряда элементов, то подбор оптимумов осуществлялся эмпирическим путём, опираясь на полученные в ходе эксперимента корреляционные уравнения. Результаты представлены в таблице 2.

Таблица 2

Значения варьируемых параметров для возможных оптимумов анализа

№ п/п	X_1	X_2	X_3	X_4	$X_5(X_2X_3)$
	Разбавление пробы	Обжиг в съёмке, с	Концентрация носителя,	Сила тока, А	Экспозиция, с
1	22,67	1,09	2,04	17,23	24,45
2	17,49	1,09	1,61	16,80	26,92

Исследования проведены с использованием оборудования центра коллективного пользования «Аналитический центр геохимии природных систем» Национального исследовательского Томского государственного университета.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Красовский Г.И., Филаретов Г.Ф. Планирование эксперимента. – Минск: Изд-во БГУ, 1982. – 302 с.
2. Ермаков С. М. Математическая теория планирования эксперимента. – М: Наука, 1983. – 392 с.
3. Отмахов В.И., Петрова Е.В. Оптимизация условий проведения атомно-эмиссионного спектрального анализа порошковых проб сложного состава // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2012. Т. 78. № 1–II. С. 82–85.