

УДК 004.67

DOI: 10.18799/29495407/2024/3/63

Шифр специальности ВАК: 2.3.1

Модуль обработки данных дифрактограмм для электронного журнала. Нахождение дифракционных максимумов

Р.Д. Герасимов^{1✉}, А.Д. Стариков²

¹ Национальный исследовательский Томский политехнический университет, Россия, г. Томск

² Университет ИТМО, Россия, 197101, г. Санкт-Петербург

✉ rdg2@tpu.ru

Аннотация. *Актуальность* разработанного модуля обработки дифрактограмм заключается в том, что на сегодняшний день обработка данных является неотъемлемым процессом при проведении физического эксперимента, в то же время, как правило, специализированное программное обеспечение поставляется только вместе с дорогостоящим оборудованием и недоступно среднестатистическому исследователю. Специалисты в области материаловедения используют значительное количество различных программ для обработки данных, в частности, генерируемых рентгеновскими дифрактометрами, электронными микроскопами и другими видами приборов. Как правило, разные производители используют различные форматы представления данных, обработкой которых занимаются специалисты, понимающие аппаратные ограничения, физические принципы анализа, а также возможные неточности и погрешности, интерпретация нередко требует формирования гипотез. Как правило, оператор каждого отдельно взятого прибора не является специалистом в узко поставленной предметной области, поэтому сложно сказать, какие именно фрагменты данных важны для пользователя (заказчика). Консолидация данных с различных источников позволяет уменьшить количество времени для анализа экспериментальных результатов; количество необходимого программного обеспечения, используемого для анализа, позволяет повысить качество анализа; нередко возможно нахождение неявных закономерностей. В этой связи видится актуальным создание модуля для сбора и хранения данных об экспериментах и результатах анализа различными методами. Кроме того, в условиях сложности закупочных процедур специализированного программного обеспечения видится актуальным вопрос создания отечественных решений. Рентгенофазовый анализ является распространённым повсеместно, исходя из этого в данной работе демонстрируются результаты создания программного модуля электронного журнала экспериментов, который позволяет оценить положения дифракционных максимумов, т. е. провести экспресс-анализ лабораторных образцов, полученных в ходе экспериментов. *Целью* разработки является централизованное хранение экспериментальных данных, связанных с получением твердых кристаллических материалов, и для первичного анализа. *Объектом* исследования является рентгеновские дифрактограммы. *Предметом* исследования является определение положения рефлекса на дифрактограмме. *Методы:* анализ и оценка уже разработанных решений, а также существующей литературы; апробирование существующих алгоритмов для анализа данных, нахождения дифракционных максимумов на дифрактограмме. *Результаты.* Разработан модуль для первичного профильного анализа дифрактограмм для электронного журнала, который позволяет приблизительно определить интенсивность и положения дифракционных максимумов, по которым можно установить фазовый состав исследуемых порошков, а при известных корундовых числах – количественный состав; проведено сравнение с повсеместно используемым программным обеспечением. Разработанное цифровое решение позволяет: сократить время на анализ экспериментальных данных, уменьшить количество используемого программного обеспечения, упростить процесс определения фазового состава синтезируемых порошков в рамках серии, повысить эффективность проведения экспериментов и исследований. Таким образом, разработанное решение является актуальным и востребованным инструментом для исследователей, занимающихся синтезом твердых кристаллических материалов.

Ключевые слова: анализ данных, рентгеновская дифрактометрия, кристаллография, профильный анализ, консолидация данных

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № FSWW-2022-0018).

Для цитирования: Герасимов Р.Д., Стариков А.Д. Модуль обработки данных дифрактограмм для электронного журнала. Нахождение дифракционных максимумов // Известия Томского политехнического университета. Промышленная кибернетика. – 2024. – Т. 2. – № 3. – С. 20–27. DOI: 10.18799/29495407/2024/3/63

UDC 004.67

DOI: 10.18799/29495407/2024/3/63

Diffractogram data processing module for electronic journal. Finding diffraction maximum

R.D. Gerasimov^{1✉}, A.D. Starikov²

¹ National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russian Federation

² ITMO University, Saint-Petersburg, Russian Federation

✉rdg2@tpu.ru

Abstract. Relevance. Today data processing is an integral process when conducting a physical experiment, at the same time, as a rule, specialized software is supplied only with expensive equipment and it is not available to the average researcher. Specialists in the field of materials science use a significant number of different programs to process data, in particular, generated by X-ray diffractometers, electron microscopes and other types of instruments. As a rule, different manufacturers use different formats of data representation, processing of which is performed by specialists who understand hardware limitations, physical principles of analysis, as well as possible inaccuracies and errors, interpretation often requires the formation of hypotheses. As a rule, the operator of each individual device is not an expert in a narrowly defined subject area, so it is difficult to say, which pieces of data are important for the user (customer). Consolidation of data from various sources allows you to reduce the amount of time for analyzing experimental results; the amount of necessary software used for analysis allows you to improve the quality of the analysis. It is often possible to find implicit patterns. In this regard, it seems relevant to create a module for collecting and storing data on experiments and results of analysis by various methods. In addition, in conditions of complexity of procurement procedures for specialized software, the issue of creating domestic solutions seems relevant. X-ray phase analysis is widespread. In this regard, this work demonstrates the results of creating a software module for an electronic journal of experiments, which allows you to estimate the positions of diffraction maxima, i.e. to carry out rapid analysis of laboratory samples obtained during the experiments. **Aim.** To develop a digital solution for centralized storage of experimental data related to the production of solid crystalline materials and for primary analysis. **Object.** X-ray diffraction patterns. **Subject.** To determine the position of the reflection on the diffraction pattern. **Methods.** Analysis and evaluation of already developed solutions, as well as existing literature; testing of existing algorithms for data analysis, finding diffraction maxima on the diffractogram. **Results.** The authors have developed the module for the primary profile analysis of diffraction patterns for an electronic journal. This module makes it possible to approximately determine the intensity and positions of diffraction maxima, from which the phase composition of the powders under study can be determined, and with known corundum numbers, the quantitative composition can be determined. This module was compared to the commonly used software. The developed digital solution allows reducing the time for analyzing experimental data, the amount of software used, simplifying determination of the phase composition of synthesized powders within a series, and increasing the efficiency of experiments and research. Thus, the developed solution is a relevant and sought-after tool for researchers involved in the synthesis of solid crystalline materials.

Keywords: data analysis, X-ray diffractometry, crystallography, profile analysis, data consolidation

Acknowledgements: The work was supported by the Russian Ministry of Higher Education and Science under Project No. FSWW-2022-0018

For citation: Gerasimov R.D., Starikov A.D. Diffractogram data processing module for electronic journal. Finding diffraction maximum. *Bulletin of the Tomsk Polytechnic University. Industrial Cybernetics*, 2024, vol. 2, no. 3, pp. 20–27. DOI: 10.18799/29495407/2024/3/63

Введение

Разнообразные вещества, существующие в природе, в твердом состоянии обладают определённой кристаллической решеткой. В каждой решетке выделяются плоскости разного типа, в которых располагаются атомы [1]. Плоскости описываются набором чисел (hkl), которые указывают на особый характер их расположения в кристаллической решетке. Любое вещество имеет собственный набор значений межплоскостных расстояний d_{hkl} . Изме-

ряя эти величины экспериментально, затем сравнивая их с табличными значениями, можно определить какому веществу соответствуют такие параметры решетки.

Рентгенофазовый анализ (РФА) является быстрым предварительным анализом фазового состава [2, 3]. Этот метод основан на дифракции рентгеновских лучей на кристаллической решетке исследуемого вещества. В результате дифракции на детекторе регистрируется дифрактограмма – график

зависимости интенсивности рассеянного излучения от угла рассеяния. Дифрактограмма содержит информацию о межплоскостных расстояниях в кристаллической решетке, что позволяет идентифицировать вещество путем сравнения с базой данных известных дифрактограмм.

РФА широко применяется в различных областях науки и техники, таких как материаловедение, химия, геология и фармацевтика [4, 5]. Этот метод позволяет не только идентифицировать вещества, но и определять их структурные характеристики, такие как размер кристаллитов и наличие дефектов [6].

Для автоматизации процесса, а также количества используемого программного обеспечения возможно внедрение облегченной версии программы для анализа РФА в общий журнал экспериментов.

Считывание данных с рентгеновской дифрактограммы. Съемка РФА образцов производилась на рентгеновском дифрактометре Shimadzu XRD 7000s. Для исследования использовали данные, полученные при съемке порошка эталонного кремния и порошка металлической окислы. Исходные данные рентгенофазового анализа представляют собой текстовый файл с расширением .txt. Формат их хранения представлен в табл. 1.

Таблица 1. Формат данных, полученных при проведении рентгенофазового анализа

Table 1. Format of data obtained during X-ray phase analysis

Метаданные Metadata	Информация о сканировании Scan information		Данные Data
Комментарий Comment	X-ray труба X-ray tube	Материал/Material Напряжение/Voltage Сила тока Current strength	
Дата Date	Цель Target	Расхождение Divergence Разброс/Scatter Приемная щель Reception slot	
Время создания Time of creation	Сканирование Scanning	Приводная ось Drive axle Промежуток/Interval Режим/Mode Скорость/Speed Шаг выборки Sampling step Время/Time	

Данные идут построчно, где в каждой строке указаны два числа: значения 2Θ градусов и интенсивности.

Для считывания значения 2Θ градусов и интенсивности используются регулярные выражения [7, 8] – формальный язык для поиска текста по заданному паттерну. Этот подход является гибким и простым в использовании. Он позволяет считать данные при наличии или отсутствии дополнительной инфор-

мации. Платформа .NET предоставляет уже готовые инструменты для работы с регулярными выражениями. Паттерн для поиска нужных значений выглядит следующим образом: « $([\d\.\,]+)s+(\S+)$ ».

Обработка данных рентгеновской дифрактограммы. Нахождение дифракционных максимумов

Разработанный алгоритм состоит из четырех этапов:

- 1) вычитание фона;
- 2) сглаживание шумов;
- 3) поиск границ дифракционных максимумов;
- 4) интерполяция найденных точек для нахождения максимума;

Вычитание фона. На некоторых дифрактограммах присутствует фон (рис. 1, А), который складывается из «истинного» фона и его «аморфной» составляющей. Для профильного анализа важно знать функцию, которая описывает фон, чтобы корректно определять интенсивность дифракционного максимума. Обычно фон уточняют с помощью гладкого полинома n -й степени, но также можно использовать, например, полином Чебышева [9]. Алгоритм применяет полином 10-й степени. Вычет происходит следующим образом: из каждой точки исходных данных вычитается соответствующая точка фоновой кривой, если значение получилось меньше нуля, то оно обнуляется (рис. 1, Б).

Сглаживание шума. Образцы для анализа не всегда однородны по размеру, кроме этого, имеет место погрешность приборов, поэтому при съемке образцов на дифрактограмме возникают шумы. Для сглаживания шума существуют различные фильтры, и каждый из них имеет свои преимущества. Были протестированы три самых популярных способа сглаживания шума: метод простого скользящего среднего [10–12], медианный фильтр [13–15], фильтр Савицкого–Голея [16, 17] (рис. 2).

Методы простого скользящего среднего являются одной из функций семейства скользящих средних, которые применяются, например, для обнаружения систематических ошибок. На рис. 2, Б видно, что данный алгоритм хорошо сглаживает шумы, но массив данных становится меньше, что является существенным недостатком, так как максимум может оказаться в начале массива и быть необработанным, помимо этого искажается картина отношения рефлексов.

Медианный фильтр предназначен для того, чтобы справляться со случайными импульсами, используя его в комбинации с другим фильтром, можно получить максимальный результат. На рис. 2, В видно, что он обрезает часть дифракционного максимума, в результате чего данный метод не может быть использован как самостоятельный метод фильтрации.

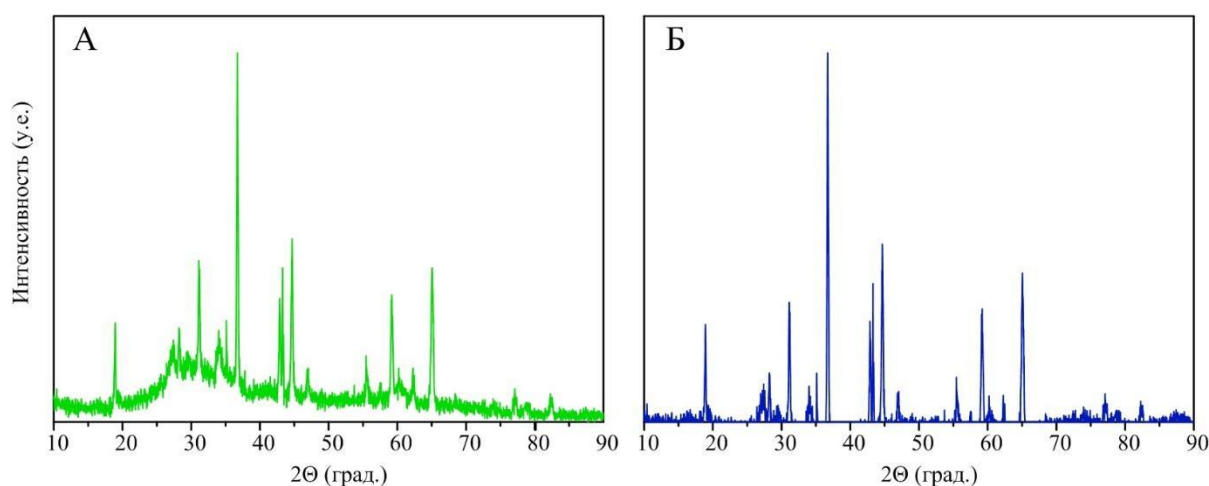


Рис. 1. График рентгенофазового анализа: А) окалины; Б) окалины после вычитания фона

Fig. 1. Graph of X-ray phase analysis of: А) scale; Б) scale after background subtraction

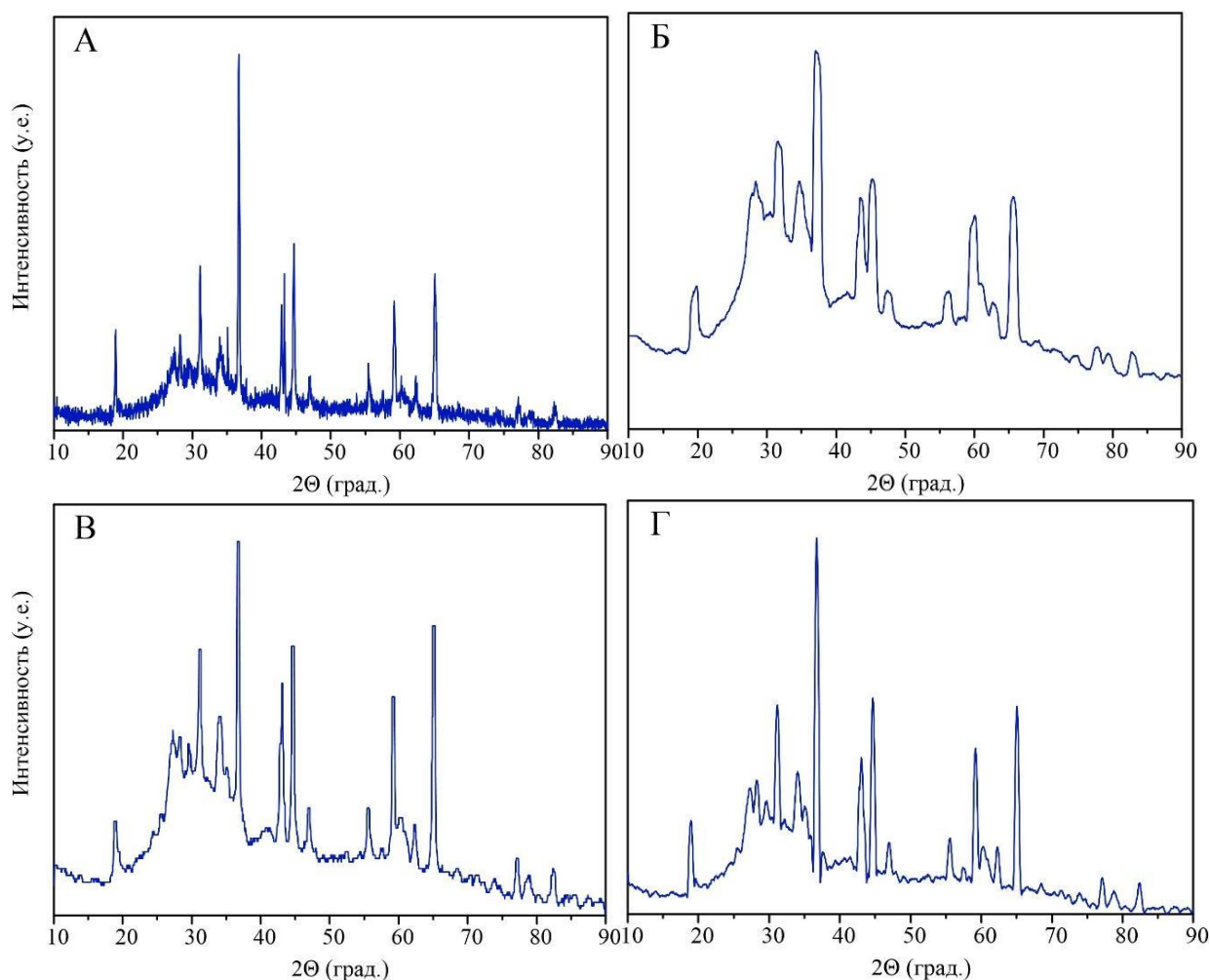


Рис. 2. График рентгенофазового анализа окалины (А); Б) обработанный методом простого скользящего среднего; В) обработанный медианным фильтром; Г) обработанный фильтром Савицкого-Голея

Fig. 2. Graph of X-ray phase analysis of scale (А); Б) processed by the simple moving average method; В) processed by a median filter; Г) processed by a Savitsky-Golay filter

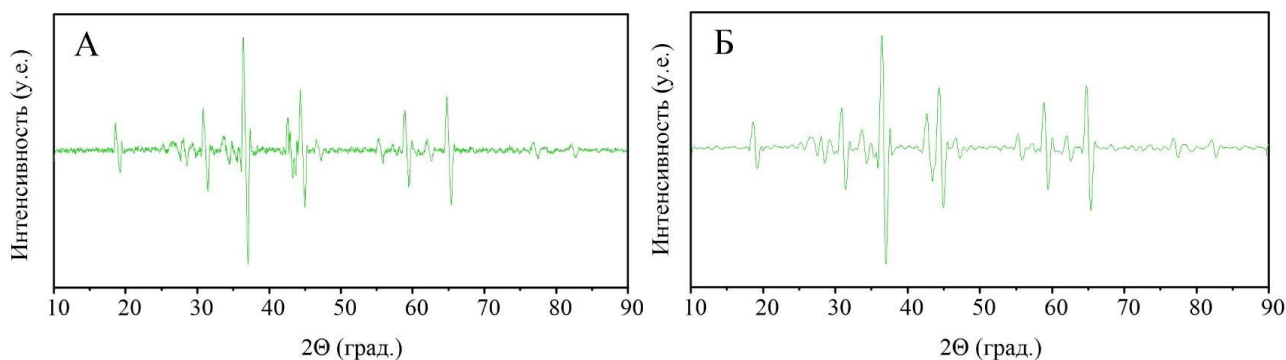


Рис. 3. График массива разности: А) до сглаживания фильтром Савицкого–Голея; Б) после сглаживания фильтром Савицкого–Голея

Fig. 3. Graph of the difference array: А) before smoothing with the Savitsky–Golay filter; Б) after smoothing with the Savitsky–Golay filter

Способ фильтрации шумов Савицкого–Голея осуществляет полиномиальную аппроксимацию отдельных кадров по критерию минимума квадратичной ошибки. При сравнении графиков, обработанных данными алгоритмами, фильтр Савицкого–Голея показал наилучший результат (рис. 2, Г). Стоит отметить, что при определенных коэффициентах рядом стоящие рефлексы сглаживаются в один.

Нахождение рефлексов. После сглаживания шума алгоритм создаёт новый массив (далее массив разностей), в котором хранится разница между i и $i-1$ элементом. На рис. 3, А видно, что на месте рефлексов образуются перепады, благодаря которым можно определять положения рефлексов в исходном массиве. Массив разностей точек рекомендуется сглаживать фильтром Савицкого–Голея для более точного определения перепадов.

Алгоритму определения рефлексов подаётся на вход массив разностей. Программа проходит по всему массиву, пока не найдёт точку, чья ордината превышает минимальную высоту перепада. Следующий шаг алгоритм ищет точки максимума и точки минимума следующим образом: он идет далее по массиву, пока следующий элемент больше

предыдущего. Когда следующий элемент меньше предыдущего, это точка локального максимума. Затем он продолжает движение по массиву вправо, пока следующий элемент меньше предыдущего. В конце получаем точку локального минимума, если он меньше порогового значения глубины перепада, то найденные точки экстремума сохраняются парой в новый массив найденных пиков. Таким образом программа проходит по всему массиву разностей. Найденные пары точек описывают примерные границы рефлексов. Но стоит отметить, что из-за подавления шума образуются небольшие перепады, которые алгоритм принимает за рефлексы, хотя они ими не являются. Благодаря пороговым значениям часть из них игнорируется, но оставшая часть таких перепадов попадает в массив границ рефлексов.

Поиск и слияние перепадов, попавших в массив рефлексов. Проблема определения ложных перепадов заключается в том, что математически они имеют такой же паттерн, как два рядом стоящих рефлекса (рис. 4). При обработке данных участком функцией Гаусса [18] ложный рефлекс сливается с настоящим, а два соседних становятся более различимыми (рис. 5).

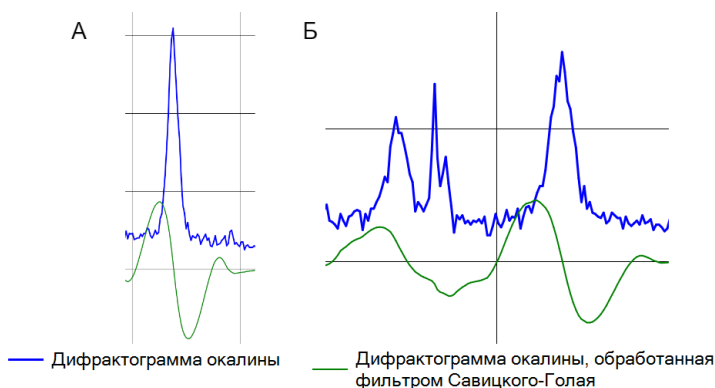


Рис. 4. А) перепады фантомного и настоящего рефлекса; Б) перепады двух настоящих рефлексов

Fig. 4. А) difference between phantom and real reflexes; Б) difference between two real reflexes

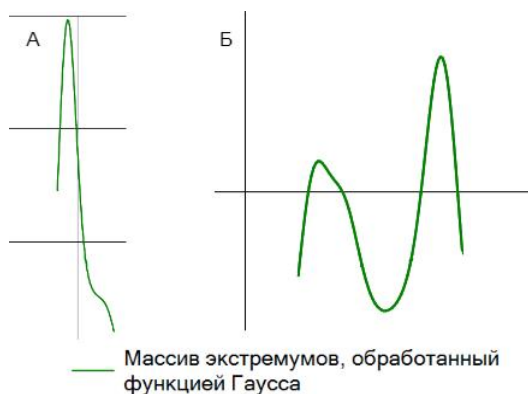


Рис. 5. А) фантомный и настоящий рефлекс, обработанные функцией Гаусса; Б) два рядом стоящих рефлекса, обработанные функцией Гаусса

Fig. 5. А) phantom and real reflexes processed by the Gaussian function; Б) two adjacent reflexes processed by the Gaussian function

Программа перебирает найденные границы рефлексов, полученные на этапе нахождения максимумов, следующим образом: от левой границы текущего дифракционного максимума алгоритм идёт влево в массиве разностей до ближайшего локального максимума. Если найденная точка сравнивается с правой границей рефлекса, идущего перед текущим, то она заменяет левую границу текущего рефлекса. Программа повторяет аналогичные действия с правой границей, тем самым программа сливает перепады фантомного и настоящего рефлексов. Затем создаётся подмассив, состоящий из точек, заключённых между новыми границами рефлекса. Этот подмассив обрабатывается фильтром Гаусса. Далее программа создаёт строку, которая заполняется следующим образом: если текущее значение в массиве больше предыдущего, то в конец строки приписывается символ 'u', в противном случае дописывается символ 'd'. В полученной строке с помощью регулярных выражений по паттерну "uu+dd+" находятся настоящие пики. К индексам начала и конца каждой найденной подстроки прибавляется смещение, и создаётся новый массив границ пиков.

Интерполяция найденных точек для нахождения максимума. Следующим этапом является определение угла 2θ рефлекса в найденных границах. Для этого используется интерполяция функций сплайнами по методу Акимы [19, 20]. Далее алгоритм ищет максимальное значение на интерполяционной прямой линейным перебором с шагом в 0,001.

Сравнение с аналогами. Для сравнения была взята популярная программа для профильного анализа дифрактограмм Crystallographica Search-Match [21], а для представления параметров эталона – программа Powder Cell [22]. Для определения точности обработки дифрактограмм был использован РФА эталонного кремния, который используется

для калибровки оборудования. Результаты обработки, а также сравнение результатов относительно эталона представлены в табл. 2, 3.

Таблица 2. Результаты обработки дифрактограммы эталонного кремния

Table 2. Results of processing the diffraction pattern of reference silicon

Положения рефлексов, найденные Positions of reflex found by			Карточка эталона из базы PDF 4+, 2θ Standard Card from the PDF 4+ database, 2θ
разработанным алгоритмом, 2θ developed algorithm, 2θ	Search Match, 2θ	Shimadzu	
28,428	28,413	28,4562	28,443
47,318	47,315	47,3106	47,303
56,145	56,125	56,1243	56,123
69,155	69,123	69,1278	69,131
76,399	76,365	76,3769	76,377
88,043	88,015	88,0281	88,031

Таблица 3. Сравнение результатов работы разработанной программы и Search-Match

Table 3. Comparison of the results of the developed program and Search-Match

Разница между/Difference between		
разработанным алгоритмом и Shimadzu, 2θ developed algorithm and Shimadzu, 2θ	Search-Match и Shimadzu, 2θ Search-Match and Shimadzu, 2θ	Shimadzu и карточкой эталона, 2θ Shimadzu and reference card, 2θ
0,0282	0,0432	0,0132
0,0074	0,0044	0,0076
0,0207	0,0007	0,0013
0,0272	0,0048	0,0032
0,0221	0,0119	0,0001
0,0149	0,0131	0,0029

Отклонение от эталона положений рефлексов, найденных с использованием разработанного алгоритма, больше, чем у Search-Match, однако стоит учитывать, что шаг съёмки составляет 0,03, следовательно, погрешность находится в границах одного шага, что допустимо для приблизительной оценки фазового состава.

Заключение

Представлен модуль для первичного профильного анализа дифрактограмм для электронного журнала. Данный модуль позволит приблизительно определить фазовый и количественный составы исследуемых порошков, что позволяет иметь более полное представление о каждом опыте в серии экспериментов, а также хранить необходимую информацию об эксперименте в одном месте, что повышает удобство обработки экспериментальных данных. Помимо этого, подобный подход позволяет уменьшить количество ручных операций и исполь-

зуемого программного обеспечения, необходимых для первичной обработки.

При сравнении результатов работы данного алгоритма и Crystallographica Search-Match по эталонному образцу можно заметить, что разработан-

ный программный комплекс показывает схожие результаты, что является хорошим показателем. Разработанный модуль обладает потенциалом для дальнейшего использования в области профильного анализа дифрактограмм.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Винтайкин Б.Е. Физика твердого тела. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2006. – 358 с.
2. Debye P., Scherrer P. Interference of irregularly oriented particles in x-rays // *Physikalische Zeitschrift*. – 1916. – Vol. 17. – P. 277–283.
3. Experimental methods in chemical engineering: X-ray diffraction spectroscopy – XRD / H. Khan, A.S. Yerramilli, A. D'Oliveira, T.L. Alford, D.C. Boffito, G.S. Patience // *The Canadian Journal of Chemical Engineering* – 2020. – Vol. 98. – № 6. – P. 1237–1440. DOI: doi.org/10.1002/cjce.23747.
4. Recent advances in the characterization of amorphous pharmaceuticals by X-ray diffractometry / S. Thakral, M.W. Terban, N.K. Thakral, R. Suryanarayanan // *Advanced Drug Delivery Reviews*. – 2016. – Vol. 100. – P. 183–193. DOI: 10.1016/j.addr.2015.12.013.
5. Rahman M.J.J., Pownceby M.I., Rana Md.S. Distribution and characterization of heavy minerals in Meghna River sand deposits, Bangladesh // *Ore Geology Reviews*. – 2022. – Vol. 143. – P. 104773. DOI: 10.1016/j.oregeorev.2022.104773
6. Structural characterization of polycrystalline thin films by X-ray diffraction techniques / A. Pandey, S. Dalal, S. Dutta, A. Dixit // *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*. – 2021. – Vol. 32. – P. 1341–1368. DOI: 10.1007/s10854-020-04998-w
7. Parolini F., Miné A. Sound static analysis of regular expressions for vulnerabilities to denial of service attacks // *Science of Computer Programming*. – 2023. – № 229. – P. 102960. DOI: 10.1016/j.scico.2023.102960.
8. General parsing with regular expression matching / A. Borsotti, L. Breveglieri, S.C. Reghizzi, A. Morzenti // *Journal of Computer Languages*. – 2023. – Vol. 74. – № 1. – P. 101176. DOI: 10.1016/j.cola.2022.101176.
9. Oddershede J. X-ray characterisation of nanostructured materials. – Kongens Lyngby: Technical University of Denmark, 2008. – 203 p.
10. Moon Y.-S., Kim J. Efficient moving average transform-based subsequence matching algorithms in time-series databases // *Information Sciences*. – 2007. – Vol. 177. – № 23. – P. 5415–5431. DOI: 10.1016/j.ins.2007.05.038.
11. Awgheda M.D., Schwartz H.M. Exponential moving average based multiagent reinforcement learning algorithms // *Artificial Intelligence Review*. – 2016. – Vol. 45. – P. 299–332. DOI: 10.1007/s10462-015-9447-5.
12. Poh D.K.H., Lim C.Y., Tan R.Z., Markus C., Loh T.P. Internal quality control: Moving average algorithms outperform Westgard rules // *Clinical Biochemistry*. – 2021. – Vol. 98. – P. 63–69. DOI: 10.1016/j.clinbiochem.2021.09.007.
13. Chen Y. Deblending using a space-varying median filter // *Exploration Geophysics*. – 2015. – Vol. 46. – P. 332–341. DOI: 10.1071/EG14051
14. Deblending of simultaneous source data using a structure-oriented space-varying median filter / Y. Chen, S. Zu, Y. Wang, X. Chen // *Geophysical Journal International*. – 2020. – Vol. 222. – № 3. – P. 1805–1823. DOI: 10.1093/gji/ggaa189
15. Barner K.E., Aysalc T.C. Polynomial weighted median filtering // *IEEE Transactions on Signal Processing*. – 2006. – Vol. 54. – № 2. – P. 636–650. DOI: 10.1109/TSP.2005.861750
16. Yang H., Cheng Y., Li G. A denoising method for ship radiated noise based on Spearman variational mode decomposition, spatial-dependence recurrence sample entropy, improved wavelet threshold denoising, and Savitzky–Golay filter // *Alexandria Engineering Journal*. – 2021. – Vol. 60. – № 3. – P. 3379–3400. DOI: 10.1016/j.aej.2021.01.055
17. Authentication/discrimination, identification and quantification of cinnamon adulterants using NIR spectroscopy and different chemometric tools: a tutorial to deal with counterfeit samples / R.C. Castro, D.S.M. Ribeiro, J.L.M. Santos, R.N.M.J. Páscoa // *Food Control*. – 2023. – Vol. 14. – P. 109619. DOI: 10.1016/j.foodcont.2023.109619
18. Hassanzadeh-Tabrizi S.A. Precise calculation of crystallite size of nanomaterials: a review // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2023. – Vol. 968. – P. 171914. DOI: 10.1016/j.jallcom.2023.171914
19. Sayyed M.I., Fakhouri H.A., Abughazaleh B. An approximation of mass attenuation coefficients of $\text{Li}_2\text{O}-\text{Fe}_2\text{O}_3-\text{In}_2\text{O}_3-\text{Bi}_2\text{O}_3-\text{P}_2\text{O}_5$ glasses using cubic spline and Akima interpolation // *Optical and Quantum Electronics*. – 2024. – Vol. 56. – Article number 821. DOI:10.1007/s11082-024-06400-z
20. A new approach to empirical mode decomposition based on Akima spline interpolation technique / M. Ali, D.M. Khan, I. Saeed, H.M. Alshanbari // *IEEE Access*. – 2023. – Vol. 11. – P. 67370–67384. DOI: 10.1109/ACCESS.2023.3253279
21. Артемов Н.А., Чижов П.С. Практическое руководство по выполнению рентгенофазового анализа минералов с использованием программных комплексов Crystallographica Search-Match и Siroquant. – М.: МГУ, 2009. – 52 с.
22. Kraus W., Nolze G. POWDER CELL – a program for the representation and manipulation of crystal structures and calculation of the resulting X-ray powder patterns // *Journal of Applied Crystallography*. – 1996. – Vol. 29. – P. 301–303. DOI: 10.1107/S0021889895014920

Информация об авторах

Роман Дмитриевич Герасимов, младший научный сотрудник лаборатории перспективных материалов энергетической отрасли Инженерной школы энергетики Национального исследовательского Томского политехнического университета, Россия, 634050, г. Томск, пр. Ленина, 30. rdg2@tpu.ru. <https://orcid.org/0009-0001-7629-862X>

Арсений Дмитриевич Стариков, студент Университета ИТМО, Россия, 197101, г. Санкт-Петербург, Кронверкский проспект, 49, лит. А. qwekinaft@list.ru

Поступила: 03.07.2024

Принята: 05.09.2024

Опубликована: 30.09.2024

REFERENCES

1. Vintaykin B.E. *Solid state physics*. Moscow, N.E. Bauman MSTU Publ. house, 2006. 358 p. (In Russ.)
2. Debye P., Scherrer P. Interference of irregularly oriented particles in x-rays. *Physikalische Zeitschrift*, 1916, vol. 17, pp. 277–283.
3. Khan H., Yerramilli A.S., D'Oliveira A., Alford T.L., Boffito D.C., Patience G.S. Experimental methods in chemical engineering: X-ray diffraction spectroscopy – XRD. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 2020, vol. 98, no. 6, pp. 1237–1440. DOI: doi.org/10.1002/cjce.23747.
4. Thakral S., Terban M.W., Thakral N.K., Suryanarayanan R. Recent advances in the characterization of amorphous pharmaceuticals by X-ray diffractometry. *Advanced Drug Delivery Reviews*, 2016, vol. 100, pp. 183–193. DOI: 10.1016/j.addr.2015.12.013.
5. Rahman M.J.J., Pownceby M.I., Rana Md.S. Distribution and characterization of heavy minerals in Meghna River sand deposits, Bangladesh. *Ore Geology Reviews*, 2022, vol. 143, pp. 104773. DOI: 10.1016/j.oregeorev.2022.104773
6. Pandey A., Dalal S., Dutta S., Dixit A. Structural characterization of polycrystalline thin films by X-ray diffraction techniques. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 2021, vol. 32, pp. 1341–1368. DOI: 10.1007/s10854-020-04998-w
7. Parolini F., Miné A. Sound static analysis of regular expressions for vulnerabilities to denial of service attacks. *Science of Computer Programming*, 2023, no. 229, pp. 102960. DOI: 10.1016/j.scico.2023.102960.
8. Borsotti A., Breveglieri L., Reghizzi S.C., Morzenti A. General parsing with regular expression matching. *Journal of Computer Languages*, 2023, vol. 74, no. 1, pp. 101176. DOI: 10.1016/j.col.2022.101176.
9. Oddershede J. *X-ray characterisation of nanostructured materials*. Kongens Lyngby, Technical University of Denmark, 2008. 203 p.
10. Moon Y.-S., Kim J. Efficient moving average transform-based subsequence matching algorithms in time-series databases. *Information Sciences*, 2007, vol. 177, no. 23, pp. 5415–5431. DOI: 10.1016/j.ins.2007.05.038.
11. Awheda M.D., Schwartz H.M. Exponential moving average based multiagent reinforcement learning algorithms. *Artificial Intelligence Review*, 2016, vol. 45, pp. 299–332. DOI: 10.1007/s10462-015-9447-5.
12. Poh D.K.H., Lim C.Y., Tan R.Z., Markus C., Loh T.P. Internal quality control: moving average algorithms outperform Westgard rules. *Clinical Biochemistry*, 2021, vol. 98, pp. 63–69. DOI: 10.1016/j.clinbiochem.2021.09.007.
13. Chen Y. Deblending using a space-varying median filter. *Exploration Geophysics*, 2015, vol. 46, pp. 332–341. DOI: 10.1071/EG14051
14. Chen Y., Zu S., Wang Y., Chen X. Deblending of simultaneous source data using a structure-oriented space-varying median filter. *Geophysical Journal International*, 2020, vol. 222, no. 3, pp. 1805–1823. DOI: 10.1093/gji/ggaa189
15. Barner K.E., Aysalc T.C. Polynomial weighted median filtering. *IEEE Transactions on Signal Processing*, 2006, vol. 54, no. 2, pp. 636–650. DOI: 10.1109/TSP.2005.861750
16. Yang H., Cheng Y., Li G. A denoising method for ship radiated noise based on Spearman variational mode decomposition, spatial-dependence recurrence sample entropy, improved wavelet threshold denoising, and Savitzky–Golay filter. *Alexandria Engineering Journal*, 2021, vol. 60, no. 3, pp. 3379–3400. DOI: 10.1016/j.aej.2021.01.055
17. Castro R.C., Ribeiro D.S.M., Santos J.L.M., Pascoa R.N.M.J. Authentication/discrimination, identification and quantification of cinnamon adulterants using NIR spectroscopy and different chemometric tools: a tutorial to deal with counterfeit samples. *Food Control*, 2023, vol. 14, pp. 109619. DOI: 10.1016/j.foodcont.2023.109619
18. Hassanzadeh-Tabrizi S.A. Precise calculation of crystallite size of nanomaterials: a review. *Journal of Alloys and Compounds*, 2023, vol. 968, pp. 171914. DOI: 10.1016/j.jallcom.2023.171914
19. Sayyed M.I., Fakhouri H.A., Abughazaleh B. An approximation of mass attenuation coefficients of $\text{Li}_2\text{O}-\text{Fe}_2\text{O}_3-\text{In}_2\text{O}_3-\text{Bi}_2\text{O}_3-\text{P}_2\text{O}_5$ glasses using cubic spline and Akima interpolation. *Optical and Quantum Electronics*, 2024, vol. 56, article number 821. DOI: 10.1007/s11082-024-06400-z
20. Ali M., Khan D.M., Saeed I., Alshanbari H.M. A new approach to empirical mode decomposition based on Akima spline interpolation technique. *IEEE Access*, 2023, vol. 11, pp. 67370–67384. DOI: 10.1109/ACCESS.2023.3253279
21. Artemov N.A., Chizhov P.S. *Practical guide to performing X-ray phase analysis of minerals using the Crystallographica Search-Match and Siroquant software packages*. Moscow, Moscow State University Publ., 2009. 52 p. (In Russ.)
22. Kraus W., Nolze G. POWDER CELL – a program for the representation and manipulation of crystal structures and calculation of the resulting X-ray powder patterns. *Journal of Applied Crystallography*, 1996, vol. 29, pp. 301–303. DOI: 10.1107/S0021889895014920

Information about the authors

Roman D. Gerasimov, Junior Researcher, National Research Tomsk Polytechnic University, 30, Lenin avenue, Tomsk, 634050, Russian Federation. rdg2@tpu.ru. <https://orcid.org/0009-0001-7629-862X>

Arseny D. Starikov, Student, ITMO University, 49, lit. A, Kronverksky avenue, Saint-Petersburg, 197101, Russian Federation. qwekinaft@list.ru

Received: 03.07.2024

Revised: 05.09.2024

Accepted: 30.09.2024