

| | |
|---|------------|
| Предисловие | 3 |
| Глава 1. Картотеки и базы справочных рентгенодифракционных и спектральных данных | 6 |
| 1.1. Понятие о кранилицах справочных данных | — |
| 1.2. Картотеки и базы рентгенодифракционных порошковых и кристаллоструктурных данных | 15 |
| 1.3. Картотеки и базы спектральных данных | 28 |
| 1.4. Базы данных с комплексным составом | 36 |
| 1.5. Требования к справочным стандартам | 40 |
| Глава 2. Предварительная обработка спектральных данных | 44 |
| 2.1. Структура процесса экспериментальных измерений и обработки данных | — |
| 2.2. Формы представления и моделирования спектральных данных | 51 |
| 2.3. Методы предварительной обработки спектральных данных | 56 |
| Глава 3. Методические основы качественного рентгенофазового анализа | 68 |
| 3.1. Физические принципы рентгенофазового анализа | — |
| 3.2. Обобщение задачи качественного анализа | 71 |
| 3.3. Методика качественного рентгенофазового анализа с использованием определителей и картотек | 75 |
| Глава 4. Автоматический качественный рентгенофазовый анализ | 89 |
| 4.1. Стратегии автоматического качественного РФА | — |
| 4.2. Этапы развития систем автоматической идентификации РДС | 95 |
| 4.3. Поисковые файлы | 109 |
| 4.4. Предварительный этап идентификации | 117 |
| 4.5. Уточняющий этап идентификации | 123 |
| 4.6. Иерархические базы данных | 132 |
| 4.7. Заключительный этап идентификации | 137 |
| 4.8. Обслуживание баз данных и информационный поиск | 141 |
| 4.9. Направление развития систем идентификации | 145 |
| Глава 5. Теоретические основы машинной идентификации спектральных данных | 149 |
| 5.1. Распределение поисковых признаков | — |
| 5.2. Информативность поисковых признаков | 159 |
| 5.3. Уточнение векторной модели | 171 |
| 5.4. Распознаваемость стандартных спектров в базе данных | 181 |
| 5.5. Редукция размерности пространства спектральных признаков | 190 |
| 5.6. Меры близости и их свойства | 201 |
| 5.7. Стратегии использования химической информации | 213 |
| 5.8. Обобщение результатов | 233 |
| Глава 6. Практические аспекты исследования и применения базы порошковых рентгенодифракционных данных и систем автоматической идентификации | 236 |

| | |
|--|------------|
| 6.1. Аprobация и тестирование систем автоматической идентификации | 236 |
| 6.2. Практические результаты идентификации состава материалов | 241 |
| 6.3. Исследование кластерной структуры базы данных | 258 |
| 6.4. Исследование информационных особенностей базы данных | 269 |
| 6.5. Связь проблем качественного анализа и индцирования | 277 |
| Глава 7. Использование спектральных данных для автоматического анализа состава материалов | 290 |
| 7.1. Связь проблем идентификации спектральных данных различной физической природы | — |
| 7.2. Системы идентификации в области масс-спектрометрии и ИК-спектроскопии | 294 |
| 7.3. Системы идентификации с использованием квазилинейных спектров люминесценции | 302 |
| 7.4. Системы идентификации с использованием спектров оже- и рентгеновских спектров флуоресценции | 306 |
| Глава 8. Комплексный подход к проблеме качественного анализа | 316 |
| 8.1. Стратегия идентификации с использованием полной совокупности поисковых признаков и спектральных каналов | — |
| 8.2. Обзор систем автоматической идентификации минералов | 320 |
| 8.3. Автоматическая информационно-диагностическая система АИДС | 322 |
| Приложение. Малоинформативные рентгенодифракционные спектры | 339 |
| Список литературы | 356 |