

ЛИТЕРАТУРА

1. Петровский В. И., Седельников Ю. Е. Электромагнитная совместимость радиоэлектронных средств. М.: Радио и связь, 1986. 216 с.
2. Маренко В. Ф., Богданов А. В., Лузан Ю. С. Обеспечение электромагнитной совместимости при выборе и размещении КВ антенн приемопередающего центра на ограниченной площади // Техника радиосвязи / Омский НИИ приборостроения. 2002. Вып. 7. С. 58–66.
3. Орлов А. И. Статистические методы оценивания и проверки гипотез / Межвузовский сборник научных трудов. Пермь: Изд-во Пермского государственного университета, 1991. С. 77–86.
4. Ногин В. Д., Протодяконов И. О., Евлампиев И. И. Основы теории оптимизации. М.: Высш. школа, 1986. 384 с.

Евгений Александрович ОЛЕННИКОВ —

старший преподаватель
кафедры информационной безопасности
факультета математики и компьютерных наук,
кандидат технических наук

Александр Анатольевич ЗАХАРОВ —

заведующий кафедрой информационной безопасности
факультета математики и компьютерных наук,
доктор технических наук

Юрий Константинович ШЛЫК —

заведующий кафедрой биомедицинской техники
Института нефти и газа Тюменского государственного
нефтегазового университета, доктор технических наук

Петр Олегович АНДРЕЕВ —

аспирант кафедры биомедицинской техники
Института нефти и газа

Тюменского государственного нефтегазового университета

Программно-аппаратный комплекс регистрации и обработки экспериментальных данных в термическом анализе

УДК 536.62

АННОТАЦИЯ. Разработан программно-аппаратный комплекс «Thermogram Analyser», позволяющий проводить регистрацию и обработку экспериментальных данных в термическом анализе. Создан метод поиска пиков слабых тепловых эффектов на термической кривой. Математически описаны пики тепловых эффектов в дифференциально-термическом анализе.

The hardware and software complex «Thermogram Analyser» is developed. The complex allows to carry out filing and data interpretation in a thermal analysis. The method of searching of peaks of weak heat effects on the thermal curve is generated by its derivation. Peaks of heat effects in a differential — thermal analysis are mathematically circumscribed.

Термические методы исследования позволяют получать данные о процессах происходящих в пробе при ее нагреве. Методы используют в металловедении, материаловедении, минералогии, физико-химическом анализе [1, 2]. В методах основным

источником информации является сигнал от термопар, создаваемый в экспериментальных установках в процессе термической обработки пробы. С помощью аналоговых преобразователей сигнал цифруется и поступает в компьютер. В доступном компьютерном пространстве не обнаружены специализированные компьютерные программы для обработки данных термических исследований. Для записи экспериментальных данных и их обработки применяют стандартные программы, например «Oring». Программы, позволяют выводить получаемые экспериментальные данные в виде принятых зависимостей, рассчитывать площади пиков, выполнять ряд других вычислений. Вместе с тем отсутствуют возможности специфических определений, которые значимы в термическом анализе. Не находятся характерные точки пика, каждая из которых имеет физический смысл. Отсутствуют методы автоматического поиска пиков на термограммах, нахождения пиков слабых тепловых эффектов, математического моделирования пика теплового эффекта. Необходимость проведения перечисленных и других специальных вычислений определяет актуальность создания специализированной компьютерной программы.

В статье приведено описание разработанного программного комплекса «Thermogram Analyser».

Комплекс состоит из аппаратной и программной части. В основу реализации программной части комплекса «Thermogram Analyser» положена трехзвенная архитектура [3]. Использование данной технологии позволяет создать систему, где все ресурсоемкие вычисления производятся на одном достаточно мощном компьютере вычислительной сети (сервере), на нем же размещается централизованная база данных, где аккумулируются первичные экспериментальные данные и результаты их обработки. Для управления экспериментальными установками, регистрации первичных экспериментальных данных используются недорогие бездисковые системы (устаревшие маломощные компьютеры). Кроме того, выбор данной технологии обеспечивает:

- 1) централизованный доступ к первичным экспериментальным данным;
- 2) возможность организации доступа к экспериментальной установке не только с локального компьютера, но и с любого компьютера локальной сети или компьютера подключенного к сети Интернет (при наличии клиентского программного обеспечения и прав доступа);
- 3) простоту обновления программного обеспечения и модификации структуры базы данных.

В упрощенном виде программная часть комплекса состоит из трех основных частей: сервер баз данных, сервер приложений и клиентская программа (тонкий клиент) (Рис. 1).

Клиентская программа устанавливается на компьютеры, подключенные к экспериментальным установкам, и используется для управления ими, регистрации экспериментальных данных, передачи данных на сервер.

Сервер приложений служит для обработки полученных экспериментальных данных (экспериментальных термограмм).

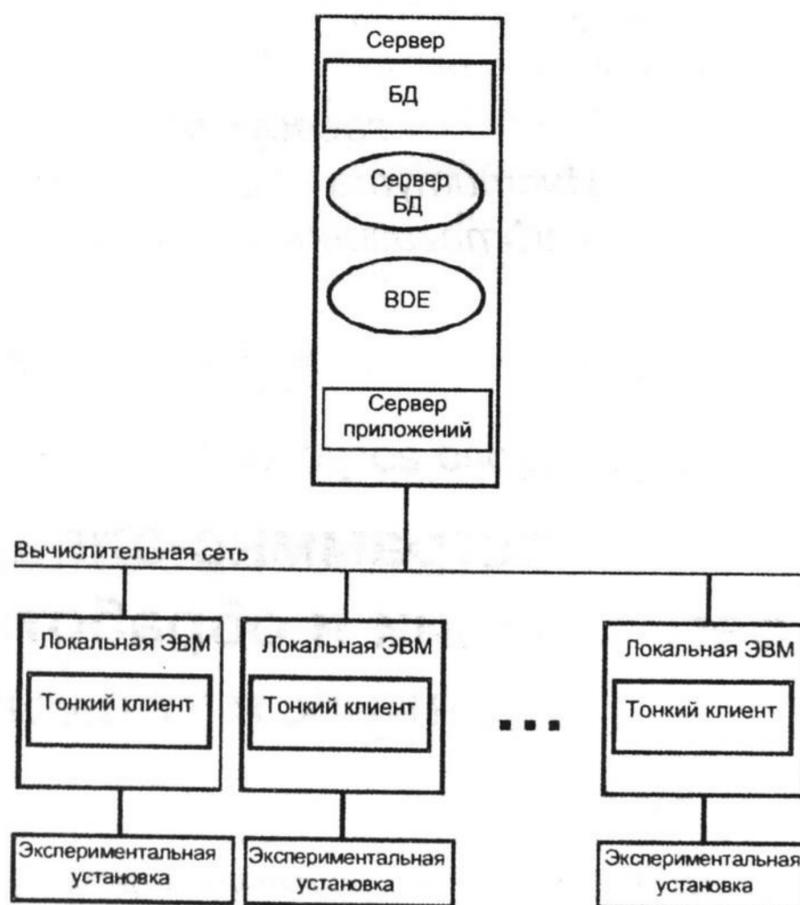


Рис. 1. Основные составляющие программного комплекса

Комплекс регистрирует экспериментальные данные в виде табличных функций: время, температура образца, разность температур пробы и эталона. В памяти ЭВМ накапливаются данные, достаточные для последующего графического изображения на дисплее экспериментальных данных в необходимых координатах и масштабах. Хранение экспериментальных данных в электронном виде позволяет получать расчетным путем новые типы графиков, построение которых на обычном регистрационном оборудовании достаточно сложно.

Вывод графиков может осуществляться в координатах:

— температура образца — разность температур образца и эталона (рис. 2.1),

— температура образца — время (рис. 2.2),

— время — температура образца (рис. 2.3),

— время — разность температур образца и эталона (рис. 2.4),

— время — скорость нагрева (охлаждения) (рис. 2.5).

Для первичной обработки экспериментальных данных в комплексе предусмотрен ряд фильтров. В частности для снижения шума на экспериментальных кривых применяется метод скользящего среднего. Весьма полезным может оказаться фильтр, в основу которого положен метод огрубления данных. Идея метода заключается в том, что полученные данные сначала сильно огрубляются и анализируются те особенности, которые еще сохранились, уточняется их положение и характеристики.

Обработка дифференциально-термических кривых включает: выделение пиков, расчет площади пиков, определение характерных точек термических кривых. Выделение пиков может происходить в автоматическом режиме (реализовано три метода поиска пиков), предусмотрен также режим ручного выделения пиков и режим ручной корректировки границ пика. При расчете площади пика исследователю предоставляется возможность выбора одного из общепринятых способов ограничения площади пика.

Обработка температурных кривых включает определение границ тепловых эффектов превращений в исследуемой пробе. Одна из нерешенных задач в обработке данных прямого термического анализа связана с поиском пиков слабых тепловых эффектов. На температурной кривой в силу ее относительно низкой разрешающей способности термические превращения, протекающие с малыми тепловыми эффектами, часто могут оставаться незаметными. В разработанном комплексе предложен следующий подход для решения данной задачи. На первом этапе температурная кривая сглаживается кубическими сплайнами [4, 5], затем полученный

кубический сплайн $S(\tau)$ дифференцируется по времени $\frac{\partial S(\tau)}{\partial \tau}$.

В итоге получаем кривую зависимости скорости изменения температуры от времени, где наличие теплового эффекта выражается в виде зигзагообразной траектории кривой. На рисунке 3 представлены графики температурной кривой и

кривой $\frac{\partial S(\tau)}{\partial \tau}$, синхронизированные по времени.

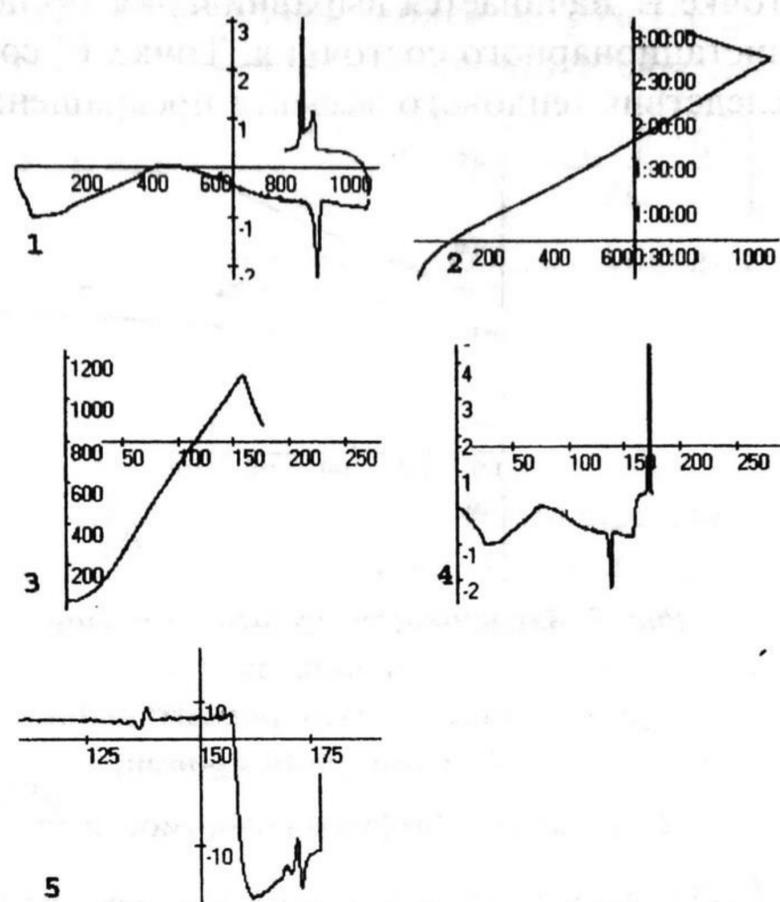


Рис. 2. Отображение экспериментальных термических кривых в различных координатах

В момент времени В' (рис. 4) происходит зарождение превращения в некоторой отдельной точке поверхности вещества и к моменту времени С' превращение замыкается по всему периметру образца. В точке D' превращения заканчиваются во всем объеме образца. Начинается резкое изменение температуры образца. В точке E' начинается выравнивания температурного поля образца до нового квазистационарного состояния. Точка F' соответствует моменту времени, когда последствия теплового эффекта превращения перестали быть заметными.

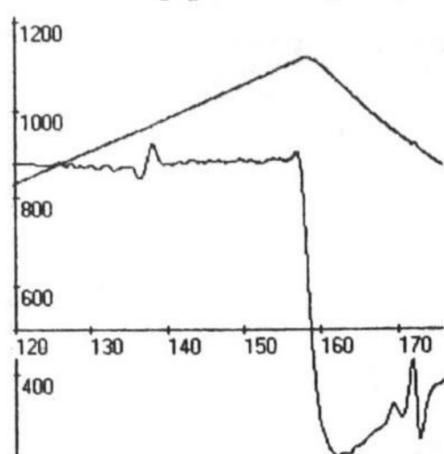


Рис. 3. Зависимости прямого термического анализа:

- 1 — участок экспериментальной температурной кривой;
2 — участок графика зависимости $\frac{\partial S(\tau)}{\partial \tau}$.

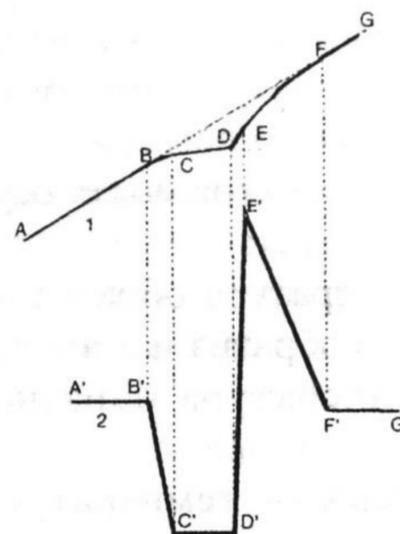


Рис. 4. Характерные точки термических кривых

Для определения границ тепловых эффектов используется критерий кумулятивных сумм, который позволяет обнаруживать скачки среднего, мониторируемой величины.

При построении фазовых диаграмм целью дифференциально-термического анализа является фиксирование теплового эффекта и определение его физико-химической природы.

Математическое описание пика для различных физико-химических процессов позволяет в дальнейшем моделировать термограммы для стандартных типов фазовых диаграмм.

Предложено для математического описания участка дифференциально-термической кривой, соответствующей пику, используется уравнение вида $\Delta T = \Delta T_1 + bT + F(t)$, где ΔT_1 — отклонение кривой от нулевого положения, в начальной точке рассматриваемого отрезка кривой, угловой коэффициент базовой линии, $F(t)$ — функция, описывающая пик, асимптотой которого является ось абсцисс.

Для создания аппроксимирующей модели несимметричного пика в данной работе используется метод комбинирования двух простых функций, в частности аддитивная $F(t) = F_1(t) + F_2(t)$ и мультипликативная $F(t) = F_1(t) \cdot F_2(t)$ комбинации, где функция $F_1(t)$ описывает начальную ветвь пика, а функция $F_2(t)$ — конечную.

Анализ большого числа экспериментально экспериментальных термограмм (больше тысячи) показал, что в качестве таких простых функций хорошо подходят:

1. $f(t) = He^{\frac{t-t_m}{D}}$ — экспоненциальная функция, 2. $f(t) = He^{-\frac{(t-t_m)^2}{2D^2}}$ — функция Гаусса,
3. $f(t) = \frac{H}{1 + 4\frac{(t-t_m)^2}{D^2}}$ — функция Коши, 4. $f(t) = \frac{2H}{e^{\frac{t-t_m}{D}} + e^{-\frac{t-t_m}{D}}}$ — видоизмененная функция гиперболического косинуса.

Для удобства дальнейшего изложения запишем функции (1–4) в общем

виде: $f(t) = Hf\left(\frac{t-t_m}{D}\right)$, где: t_m — время, соответствующее максимальному отклонению дифференциально-термической кривой; H — модуль данного параметра определя-

ет высоту пика, а знак определяется характером процесса $H < 0$ эндотермический процесс, $H > 0$ экзотермический; D — параметр влияющий на ширину пика (за исключением экспоненциальной функции).

В случаях, когда ход дифференциальной записи после термического эффекта представляет собой продолжение хода дифференциальной записи на участке до термического эффекта, то для математического описания пиков используется мультипликативная комбинация

$$F(t) = F_1(t) \cdot F_2(t) = Hf_1\left(\frac{t-t_m - |t-t_m|}{D_1}\right) \cdot f_2\left(\frac{t-t_m + |t-t_m|}{D_2}\right).$$

Введение выражения $|t - t_m|$ позволяет добиться выполнения следующего условия:

$$F(t) = \begin{cases} HF_1(t), & t < t_m \\ H, & t = t_m \\ HF_2(t), & t > t_m \end{cases}$$

Для математического описания пиков вызванных инвариантными процессами наиболее хорошо подходит комбинация одной из функций 2–4 для описания начальной ветви пика с функцией 1 для описания конечной ветви пика.

В случае поливариантных процессов, когда вершина пика достаточно размыта, для описания как начальной, так и конечной ветви пика используются функции 2–4.

В тех случаях, когда совпадения уровней дифференциальной записи до и после превращения не наблюдается, для математического описания пиков используется

$$\text{аддитивная комбинация } F(t) = F_1(t) + F_2(t) = H_1 f_1\left(\frac{t-t_m - |t-t_m|}{D_1}\right) + H_2 f_2\left(\frac{t-t_m + |t-t_m|}{D_2}\right).$$

Введение выражения $|t - t_m|$ позволяет добиться выполнения следующего условия:

$$F(t) = \begin{cases} H_1 F_1(t) + H_2, & t < t_m \\ H_1 + H_2, & t = t_m \\ H_2 F_2(t) + H_1, & t > t_m \end{cases}$$

Таким образом, если $H_1 < H_2$, H_1 определяет высоту начальной ветви пика, H_2 определяет положение асимптоты для начальной ветви пика относительно оси ординат, а высота конечной ветви пика определяется суммой $H_1 + H_2$. И наоборот, если $H_1 > H_2$, H_2 определяет высоту конечной ветви пика, H_1 определяет положение асимптоты для конечной ветви пика относительно оси ординат, а высота начальной ветви пика определяется суммой. В случае $H_1 = H_2$ обе ветви пика имеют общую асимптоту, а их высоты определяются суммой $H_1 + H_2$.

Задача поиска параметров аппроксимационной модели в разработанном программном комплексе решается как задача минимизации функционала

$\sum_{k=1}^n (\Delta t_k - F(t_k))^2 \rightarrow \min$, где n — количество экспериментальных точек, Δt_k — разность температур в момент времени t_k . Для решения данной задачи в программе используется симплексный метод Нелдера-Мида.

Анализ большого числа экспериментальных термограмм (более 1000) показал, что для математического описания пиков тепловых эффектов наиболее эффективно использовать комбинацию функций элементарных пиков, где каждая ветвь пика описывается отдельной функцией. Пики тепловых эффектов, отражающих процессы плавления химического элемента, конгруэнтного плавления химического соединения, полиморфного перехода химических соединений, плавления эвтектики эвтектоидной реакции достаточно точно описываются мультипликативной комбинацией функций

$$f(t) = He^{-\frac{(t-t_m)^2}{2D^2}} \text{ (начальная ветвь) и } f(t) = \frac{2H}{e^{\frac{t-t_m}{D}} + e^{-\frac{t-t_m}{D}}} \text{ (конечная ветвь).}$$

Таким образом, разработан универсальный программный комплекс «Thermogram Analyser» регистрации и обработки экспериментальных данных различных видов термического анализа.

Создан метод идентификации пиков слабых тепловых эффектов на термических кривых в простом термическом анализе.

Путем анализа большого количества экспериментальных термограмм удалось подобрать функции для математического описания пиков тепловых эффектов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Аносов В. Я., Погодин С. А. Основные начала физико-химического анализа. М., 1947. С. 863.
2. Егунов В. П. Введение в термический анализ. Самара, 1996. С. 270.
3. Шумаков П. В., Фаронов В. В. Delphi 4. Руководство разработчика баз данных. М., 1999. С. 560.
4. Альберг Дж., Альберг Дж., Нилсон Э., Уолш Дж. Теория сплайнов и их приложения. М., 1972. С. 123.
5. Стечкин С. Б., Субботин Ю. Н. Сплайны в вычислительной математике. М., 1976. С. 56.

Владимир Васильевич ПЛЕЩЕВ —

доцент кафедры «Информационные системы в экономике»
экономического факультета Уральского государственного
экономического университета,
кандидат технических наук, доцент

Дифференцированное и интегрированное преподавание программирования и баз данных: предмет изучения, принципы формирования методического обеспечения

УДК 378.016/004

АННОТАЦИЯ. Перечисляются характерные особенности адаптивного образования в области программирования. Предлагаются результаты сравнительного анализа современных средств программирования (языки программирования, СУБД, CASE-средства). Приводится экспертная оценка возможностей этих средств и быстроты их освоения. Формулируются принципы создания соответствующего методического обеспечения: системность, дифференцирование по специализации программных средств и уровням их изучения, самостоятельность (кейс-обеспечение), развитие, модульность.

The author enumerates characteristic features of adaptive training in the field of programming, offers the results of the comparative analysis of modern means of programming (programming languages, SCDB, CASE — means). The expert estimation of opportunities of these means and speed of their development is given. Principles of creation of corresponding methodical provision are formulated: integration, differentiation according to specialization of software and levels of their studying, self-sufficiency (a case-provision), development, modality.