

УДК 621.373

**МАТЕМАТИЧЕСКАЯ АВТОМАТИЗИРОВАННАЯ
РАСЧЕТНАЯ СИСТЕМА "МАРС"**

К.П. КУРЕЙЧИК, А.И. МАКАРОВ, А.З. ИБРАГИМ

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники
П. Бровки, 6, Минск, 220013, Беларусь**Поступила в редакцию 16 июля 2003*

Работа посвящена созданию программного пакета "МАРС", который обеспечивает любые математические расчеты, используемые в физико-химических промышленных и исследовательских лабораториях, где используется большое количество разных методик для определения тяжелых металлов в пищевых продуктах, примесей в воздухе рабочей зоны, питьевой воде. Пакет "МАРС" может применяться в учебных целях студентами и школьниками, а также в подавляющем большинстве случаев использоваться как в научно-исследовательских лабораториях, так и на производстве.

Ключевые слова: пакет "МАРС", модуль, автоматизация.

Введение

В физико-химических промышленных и исследовательских лабораториях используется большое количество разных методик для определения тяжелых металлов в пищевых продуктах, примесей в воздухе рабочей зоны, питьевой воде и т.д. Первоначальные данные, получаемые посредством фотоэлектрических спектрофотометров, приходится пересчитывать в соответствии с используемой методикой. Число пересчетов часто измеряется десятками и сотнями. Для обработки таких данных пользователи применяют обычные калькуляторы или пакет Excel, который требует дополнительных временных затрат на подготовку требуемого алгоритма расчета. Специализированных программ для лабораторий весьма немного, да и те работают только с заранее подготовленными формулами и полями для ввода данных. Если требуется обработать данные по другим формулам, то приходится переписывать программный код и повторно компилировать программу. Безусловно, такой подход требует больших временных и финансовых затрат. Пакеты типа MathCAD [1], MathLab [2] или аналогичные им хотя и могут обеспечить пересчет данных по любым формулам, однако весьма неудобны в пользовании и практически не применяются.

Предлагаемый пакет "МАРС" в отличие от указанных программ обеспечивает любые расчеты по любым, применяемым в практике лабораторий формулам без всяких дополнительных затрат на подготовку расчетов и значительно проще систем MathCAD, Math Lab или аналогичных им.

Структура пакета "МАРС"

Пакет "МАРС" написан на Delphi 5, математические библиотеки написаны на Visual C++ 6 и хранятся в DLL.

Пакет содержит базы данных математических формул, описания методик, которые отображаются по технологии OLE контейнеров, пакетных расчетов, когда формула имеет большую длину и ее удобнее представить в виде аддитивных членов, статистических расчетов, графиков, отображающих калибровку различных приборов и результаты расчетов по этим графикам, промежуточных или конечных результатов расчетов и модуль расчета математических формул. При написании пакета "МАРС" использовалась технология объектно-ориентированного программирования, что позволило существенно снизить величину программного кода.

Математические формулы записываются, хранятся и вызываются из базы данных в соответствии с именем раздела и именем формулы. Например, имя раздела — Статистическая обработка результатов, имя формулы — квадратическая погрешность измерения объема мерной колбой, формула — $1.1\sqrt{A \times A + B \times B + C \times C}$, где A, B, C — относительные погрешности соответствующих составляющих. С целью улучшения наглядности пользования, расчет по каждой формуле сопровождается примером, который отображается в главном окне (см. рисунок).

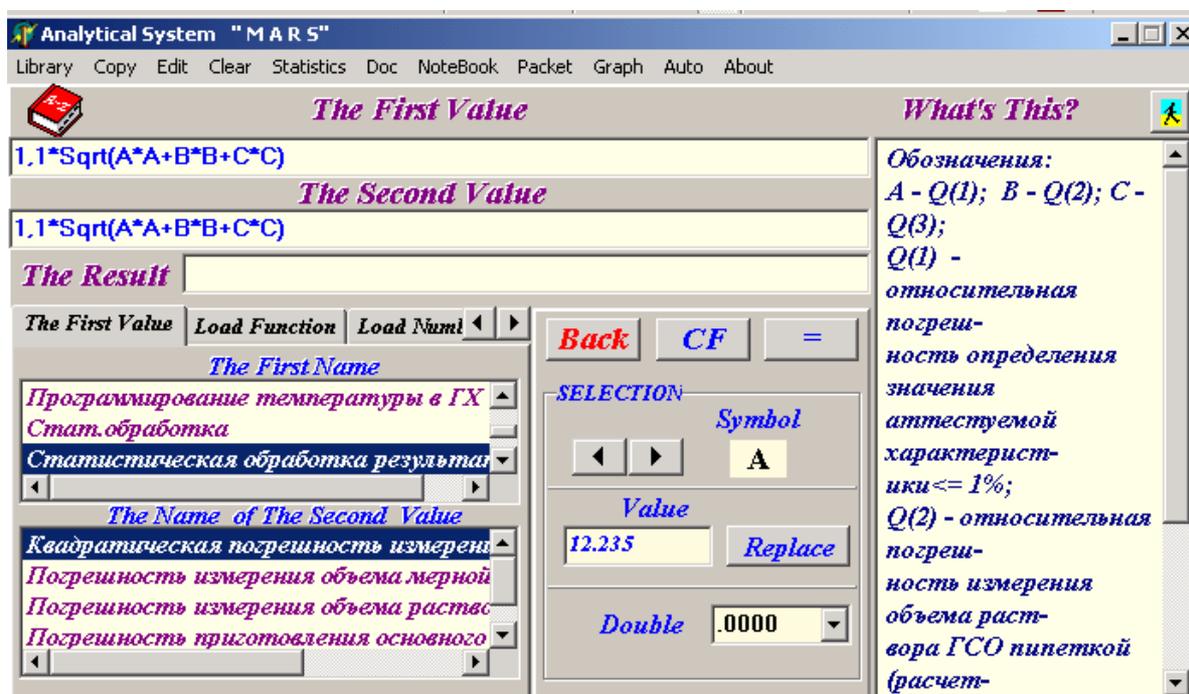


Рис. 1. Главное окно пакета "МАРС"

Полное описание методики хранится в специализированной базе данных и отображается в специализированном окне по технологии OLE контейнера. Подготовка к занесению методики в базу производится следующим образом. Вначале с помощью Word производится подготовка текста методики, при этом каждая страница сохраняется в отдельном файле с расширением .doc1, .doc2 и т.д. Затем посредством специального модуля эти файлы последовательно записываются в базу данных в формате OLE контейнера. Адрес записи совпадает с именем раздела и именем формулы, что дает возможность быстрого поиска и записи файлов методик.

Модуль расчета математических формул представляет собой интерпретатор, использующий для разбора математических выражений так называемую "польскую" запись. Математические выражения могут включать следующие функции: Sin, Cos, tg, Ctg, ASin, ACos, Atg, ACtg, Sinh, Cosh, tgh, Ctgh, ASinh, ACosh, Atgh, ACTgh, x^y , Ln, Log, Exp, Sqrt, CBrt, Mod, Floor, Ceil, Div, Trunc, Int, Frac, Round, Sqr, Sum, где Sqr — среднеквадратичное значение, Sum — сумма. Эти функции, как и цифры от 0 до 9, а также знаки математических операций можно записывать либо с клавиатуры, либо из специального модуля пакета "МАРС" так же, как и в обычном калькуляторе Windows.

При статистических расчетах, можно использовать выражение для сумм: например, чтобы найти среднее значение $x_1; x_2; x_3; x_4; x_5$: $x_{cp} = \text{Sum}([x_1; x_5; x_i])/n$; где $x_1 < x_i < x_5$; $n=5$. При определении дисперсии можно записать: $D = \text{Sum}([x_1; x_5; \text{Sqr}(x_i - x_{cp})]) / (n-1)$; среднеквадратическое отклонение записывается следующим образом: $\text{CKO} = \text{Sqrt}(D)$; или можно записать так: $\text{CKO} = \text{Sqrt}(\text{Sum}([x_1; x_5; \text{Sqr}(x_i - x_{cp})]) / (n-1))$.

При вычислении математических выражений, например, $A+B/C+A \times C$, требуется произвести замену символьных переменных на их числовые значения. Эту процедуру можно выполнить непосредственно с клавиатуры. Однако можно допустить ошибку при замене одинаковых символьных переменных одними и теми же значениями. Такая замена приводит к излишним потерям времени. С целью повышения эффективности использования времени исследователя пакет "МАРС" снабжен специальным модулем ввода данных, который объединен полем Selection. С помощью селектора в поле Symbol последовательно отображаются символьные переменные, которые затем можно заменить их числовым значением из поля Value, используя кнопку Replace. При замене "МАРС" находит и заменяет выбранную символьную переменную на ее числовое значение, анализируя всю формулу. Замена, например, символьной переменной А, будет произведена во всей формуле. Селектор выделяет только символьные переменные, пропуская имена функций, знаки арифметических операций и скобки.

С целью экономии места в поле ввода The Second Value символьные переменные могут иметь длину один или два байта, т.е. можно записать АВ+ВМ или А+В, или А1+В2 и т.д. Не допускается использование символьных переменных, начинающихся с цифры, например, 1С.

Поле Double раздела SELECTION

Поле Double предназначено для задания числа знаков после запятой в результате. Если вводимое число имеет 12 знаков после запятой, то при установке .0 (одного нуля) число знаков после запятой в результате ограничено 7, при .00 число знаков в результате ограничивается 8, при .000 число знаков в результате ограничивается 9 и при .0000 число знаков составляет 0, при .00000 и .000000 число знаков составляет соответственно 11 и 12. Также по умолчанию число знаков при автоматическом вводе составляет 0–6 знаков после запятой. При вводе данных с клавиатуры число знаков после запятой может достигать до 10. Этого вполне достаточно для значительного ряда математических и инженерных вычислений.

Правила записи математических выражений

Правило ввода формулы: $a+b/c$; $a+b/(c \times m+n)+k$; $(a+b) \times c \times c$;
 $a+b/(c \times c)+\text{Ln}(a)+\text{Log}(c)-m/(\text{Ln}(a)-k)+\text{sqrt}(m)$.

Таким образом, знаменатель, содержащий больше одного члена, должен записываться в скобках, что соответствует правилам записи формулы в строку. Удаление последнего введенного символа или всех символов осуществляют кнопки 'Back', 'CF' соответственно.

Модуль автоматического перерасчета данных

Измеренные значения оптических плотностей или концентраций, полученных от фотоэлектрических спектрофотометров, перерасчитываются в соответствии с формулами соответствующих методик автоматически. Для получения такого перерасчета после получения значений оптической плотности или концентрации пакетом "МАРС" следует выбрать требуемый символ из соответствующей формулы, который будет ассоциирован с полученными данными, и выделить его селектором в поле Symbol. Остальные символы (переменные) в формуле должны быть заранее заменены на их числовые значения. После этого "МАРС" переходит в режим автоматического перерасчета полученных данных по выбранной формуле.

Приведенная обработка данных существенно проще по сравнению с использованием любых известных программ и не требует никаких дополнительных действий пользователя (или программиста) при требовании применять новые методики.

Кроме физико-химических лабораторий пакет "МАРС" может применяться в учебных целях студентами и школьниками, а также в подавляющем большинстве случаев использоваться как в научно-исследовательских лабораториях, так и на производстве.

THE MATHEMATICAL AUTOMATED SETTLEMENT SYSTEM MARS

K.P. KUREJCHIK, A.I. MAKAROV, A.Z. IBRAHIM

Abstract

In physical-chemical industrial and research laboratories a plenty of different techniques for definition of heavy metals in foodstuff, impurity in air of a working place, potable water, etc. is used. The Initial data that received by using the photoelectric spectrophotometers recalculate according to a used technique. Tens and hundreds often measures the number of recalculations. For processing such data, users use usual calculators or package Excel. In addition, we have to note that package Excel demands additional time expenses for preparation of required algorithm of calculation. However, these programs, it is not enough specialized programs for laboratories, and those work only with beforehand-prepared formulas and fields for data input. To process the data under other formulas, we have to rebuild the program code and repeatedly to compile the program. Certainly, such approach demands the time and financial expenses. Packages such as MathCAD, Math Lab or similar to them though can provide recalculation of the data under any formulas, however are rather inconvenient in using and practically are not applied.

The offered package "MARS", as against the specified programs, provides any calculations on any, used in practice of laboratories to formulas without any additional expenses for preparation of calculations and it is much easier than systems MathCAD, Math Lab or similar to them.

Литература

1. Дьяконов В.П. Справочник по MathCAD PLUS 7.0 PRO. СПб., 1998.
2. Мартынов Н.Н., Иванов А.П. MATLAB 5х. Вычисления, визуализация. 2000.