

Учреждение образования
БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИНФОРМАТИКИ И РАДИОЭЛЕКТРОНИКИ

УДК 621.373

ИБРАХИМ Ахмед Зоheyр

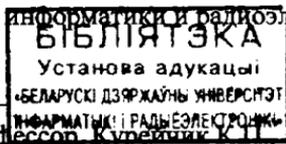
**Методы, алгоритмы и программные средства для обработки
спектрофотометрических данных**

Специальность 05.13.11 «Математическое и программное обеспечение
вычислительных машин, комплексов и компьютерных сетей»

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Минск 2005

Работа выполнена в Учреждении образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники» (БГУИР).



Научный руководитель – доктор технических наук, профессор Курыцкі І. П. (Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, кафедра электронных вычислительных машин)

Официальные оппоненты:

доктор технических наук, профессор Вишняков В.А.,
(Минский институт управления, кафедра менеджмента)

кандидат технических наук, Золотой С.А.

(Научно-инженерное республиканское унитарное предприятие «Геоинформационные системы» НАН Беларуси)

Оппонирующая организация –

Белорусский государственный университет

Защита состоится 01 декабря 2005 года в 14 часов на заседании совета по защите диссертаций Д02.15.04 при Учреждении образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники» по адресу: 220013, г. Минск, ул. П.Бровки, 6, корп.1, ауд. 232, тел.239-89-89.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Учреждения образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники».

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы диссертации. Атомно-абсорбционный спектральный анализ как один из методов атомной спектроскопии широко используется во многих областях науки и техники для контроля состава веществ, материалов и изделий. Особенно широко этот метод применяется в аналитической химии.

Атомно-абсорбционная спектроскопия, несмотря на свой достаточно долгий век и большую теоретическую и практическую базу, все еще далека от совершенства. Основными вопросами, которые до сих пор требуют решения, остаются: повышение точности, надежности и экспрессности измерений, автоматизация управления анализом и обработкой спектрофотометрических данных.

В настоящее время в литературе присутствует большое количество публикаций, посвященных отдельным вопросам обработки спектрофотометрических данных и повышения качества анализа, существует большое количество программного обеспечения, решающего локальные проблемы в данной области. Однако, как показывает практика, оптимальное решение данной проблемы требует применения системного подхода, т.е. всестороннего анализа существующих методов и средств обработки спектрофотометрических данных, разработки на их основе новых математических методов, программного обеспечения и сведения этих методов, средств, программного обеспечения в рамки единого комплекса, решающего задачу автоматизированной обработки данных атомно-абсорбционного анализа.

Таким образом, назрела необходимость разработки единой системы автоматизированной обработки спектрофотометрических данных для решения задач, связанных с вопросами контроля дозирования пробы, определения оптимального режима питания лампы, контроля помех оптического диапазона, управления атомизацией пробы, а также разработки автоматизированных средств обработки результатов анализа в соответствии с современными международными требованиями.

Задачей данной диссертации является разработка математических методов и создание на их основе системы прикладного программного обеспечения автоматизированной обработки спектрофотометрических данных и повышения качества атомно-абсорбционного анализа.

Диссертационная работа направлена на разработку системы автоматизации научного эксперимента, расширяющей функциональные возможности и сферы применения электронно-вычислительных машин. Прикладной аспект работы заключается в разработке прикладного математического и программного обеспечения систем измерений, контроля и управления, повышающих качество функционирования комплекса обработки спектрофотометрических данных. Все вышеперечисленное определяет актуальность данной работы.

Связь работы с крупными научными программами, темами. Диссертационная работа выполнена на кафедре ЭВМ Белорусского государственного университета информатики и радиоэлектроники в 2002 - 2005 гг. Данная работа не связана с какими-либо государственными научными программами и выполнялась по инициативе соискателя.

Цель и задачи исследования. Целью диссертационной работы является разработка комплексной системы автоматизированной обработки спектрофотометрических данных и повышения качества атомно-абсорбционного анализа.

Для достижения указанной цели необходимо решить следующие задачи:

1. Провести анализ существующих систем автоматизированной обработки спектрофотометрических данных, на основании которого разработать математические методы и алгоритмы повышения точности измерения концентрации пробы учета и контроля помех, вызванных засветками на входе фотоприемника, различием интенсивности источников излучения, пространственной неоднородностью источников излучения.
2. Разработать метод и алгоритмы исследования оптических параметров источников излучения с целью определения их оптимальных рабочих параметров по критерию минимума отношения шум/сигнал.
3. Разработать математический метод и алгоритмы управления процессом атомизации проб больших концентраций.
4. На основе разработанных методов и алгоритмов спроектировать архитектуру системы прикладного программного обеспечения автоматизированной обработки данных спектрофотометра.

Объект и предмет исследования. Объектом исследования является атомно-абсорбционная спектрометрия. Предметом исследования являются математические методы, программные и аппаратные средства, используемые при атомно-абсорбционном анализе.

Методология и методы проведенного исследования. Теоретическая часть исследования основывалась на методах математического моделирования и системного анализа. Экспериментальная часть выполнялась с использованием имитационного моделирования на ЭВМ с последующей численной и визуальной оценкой результатов. Программная реализация алгоритмов имитационных моделей выполнялась с использованием языков высокого уровня.

Научная новизна и значимость полученных результатов. Научная новизна работы заключается в следующем:

- Впервые предложено комплексное программное решение проблемы обработки спектрофотометрических данных, которое было реализовано в виде единой системы прикладного программного обеспечения для обработки спектрофотометрических данных.

- Предложен способ и на его основе реализован алгоритм контроля дозирования при помощи обработки изображения пробы, позволивший устранить недостатки аппаратной части механизма дозирования программными методами.
- В рамках работы определена необходимость и выполнено исследование спектральных источников света на предмет выявления их оптимальных параметров функционирования по критерию минимума отношения сигнал/шум.
- Разработана методология обработки спектрофотометрических данных, основанная на использовании специализированного интерпретатора, данные для которого заносятся в особые таблицы

Практическая значимость полученных результатов. Практическая значимость результатов заключается в следующем:

- Разработаны математические методы и программное обеспечение, которое при помощи автоматизированной обработки результатов измерений уменьшает, либо вообще исключает влияние помех в ходе анализа. Применение данных методов позволяет значительно повысить качество анализа без какой-либо аппаратной модификации устройств анализа, что экономически целесообразно.
- На основе разработанного метода анализа спектральных источников света и созданного прикладного программного обеспечения проведено исследование газоразрядных источников света в непрерывном и импульсном режимах питания. Проведенное исследование позволило создать базу данных, содержащую оптимальные рабочие параметры ламп, и готовую для практического использования в лабораториях.
- Создан математический метод и программное обеспечение измерения проб больших концентраций. Применение данного программного обеспечения, реализующего метод управления процессом атомизации, основанный на обработке и анализе данных спектрометра, уменьшает как время, затрачиваемое на анализ каждой пробы, так и количество измерений, необходимых для определения концентрации вещества.
- Разработана методология и прикладное программное обеспечение для автоматизации обработки и интерпретации результатов атомно-абсорбционного анализа. Применение разработанной системы прикладного программного обеспечения позволяет автоматизировать весь процесс обработки спектрофотометрических данных и производить анализ в соответствии с международными стандартами.

Результаты были использованы и внедрены в испытательном центре ГНУ «Институт порошковой металлургии».

Основные положения диссертации, выносимые на защиту.

1. Математические методы и алгоритмы обработки спектрофотометрических данных с учетом, контролем и компенсацией погрешностей, вносимых засветками на входе фотоприемника,

неселективным поглощением, различием интенсивности источников излучения, забором пробы.

2. Математический метод и алгоритмы исследования электрических и световых характеристик газоразрядных источников света.

3. Теоретические принципы и разработанные на их основе алгоритмы управления устройствами атомизации, основанные на обработке данных спектрофотометрии.

4. Математический метод и алгоритмы автоматизации обработки и интерпретации спектрофотометрических данных.

Личный вклад соискателя. Все выносимые на защиту модели, методики и алгоритмы были разработаны и исследованы лично автором. В работах с соавторами создана система прикладного программного обеспечения обработки спектрофотометрических данных и повышения качества анализа. Научный руководитель принимал участие в постановке цели и задач исследования, планировании экспериментов, а также в обсуждении полученных результатов.

Апробация результатов диссертации. Основные положения диссертационной работы докладывались и обсуждались:

- на XXXIX, XL, XLI научно-технических конференциях аспирантов, магистрантов и студентов БГУИР, Республика Беларусь, Минск, 2003, 2004 и 2005г.
- на XXXIX и XL научно-технических конференциях аспирантов и студентов учреждения образования БГУИР «Компьютерные системы и сети», Республика Беларусь, Браславские озера, 2003 и 2004г.
- на III международной конференции «International Conference on Neural Networks and Artificial Intelligence», Республика Беларусь, Минск, 2003г.
- На IV международной научно-технической конференции «Метрология и измерительная техника», Украина, Харьков, 2004г.

Опубликованность результатов. По теме диссертационной работы опубликовано 12 печатных работ, из них 10 статей в научных журналах, 2 доклада в сборниках трудов международных конференций. Суммарный объем публикаций автора составляет 53 страниц.

Структура и объем диссертации. Диссертация изложена на 225 страницах. Она состоит из введения (4 стр.), общей характеристики работы (4 стр.), четырех глав (112 стр.), выводов (2 стр.). Работа содержит (95) иллюстрации и (94) таблицы, список использованных источников, состоящий из 180 наименований (14 стр.), список публикаций автора, содержащих основные научные результаты диссертации, состоящий из 12 наименований (1 стр.), приложение с документами о внедрении результатов диссертационной работы (1 стр.), 6 приложений с исходными кодами программного обеспечения и результатами исследований (83 стр.).

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ

В первой главе приведен краткий обзор метода атомно-абсорбционной спектрофотометрии, описаны основные этапы, задачи данного метода.

Выполнен краткий анализ существующих систем управления спектрофотометрическими данными, на основании которого сформулирована необходимость разработки комплексной системы прикладного программного обеспечения обработки спектрофотометрических данных. Далее приводится структура системы, состоящая из отдельных модулей, которые предназначены для обработки спектрофотометрических данных на различных стадиях проведения анализа. Таковыми модулями являются: модуль определения оптимальных параметров работы спектральных источников света, модуль контроля дозирования пробы, модуль управления процессом атомизации, модуль автоматизации и контроля измерений, модуль автоматизации обработки данных. Программные модули системы базируются на ряде математических методов. Вся оставшаяся часть диссертационной работы посвящена разработке математических методов, алгоритмов и программного обеспечения модулей системы обработки данных.

Для программного решения задачи контроля дозирования пробы в работе предложен математический метод и реализующее его программное обеспечение обработки изображения пробы.

Метод заключается в обработке фотоэкспозиции дозы анализируемого вещества в момент её выхода из дозатора, полученной при помощи фотокамеры. Изображение обрабатывается с помощью программного обеспечения, которое на основании входных данных определяет объём и корректирующие коэффициенты.

Объём тела можно вычислить при помощи интеграла, если возможно определить площади поперечных сечений тел, перпендикулярных к какому-либо фиксированному направлению (рис. 1).

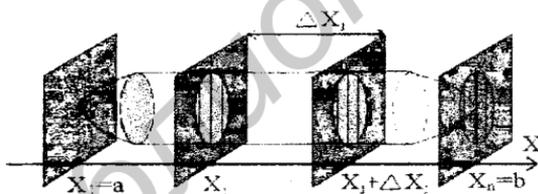


Рис. 1. Представление тела в виде отдельных слоев

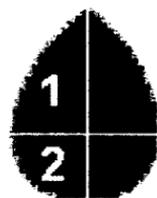


Рис. 2. Изображение капли

Для тела, образованного вращением вокруг оси абсцисс кривой $y=f(x)$, выражение будет иметь вид:

$$V = \pi \int_a^b y^2 dx .$$

Имея изображение, полученное с фотокамеры, можно с помощью обработки изображения определить точки, которые являются границами пробы исследуемого вещества. После этого необходимо установить функцию, которая проходила бы через эти точки, и с ее помощью вычислить

объем методом, описанным выше. Для подбора данной функции в диссертационной работе предложено использовать метод наименьших квадратов.

Было разработано программное обеспечение, которое на основе изображения, полученного с камеры (рис. 2), строит полином и получает значение объема.

Программное обеспечение функционирует следующим образом. Изображение капли раствора пробы разбивается на две секции: верхнюю (рис. 3а) и нижнюю (рис. 3б), и для каждой из секций строится своя исходная диаграмма.

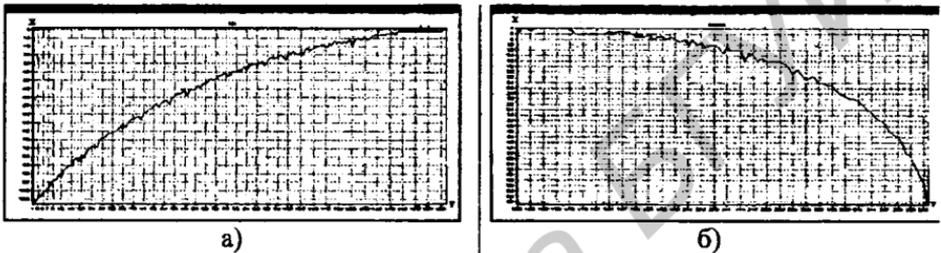


Рис. 3. Исходные диаграммы для верхней (а) и нижней (б) частей капли раствора пробы вещества

Затем каждая из секций обрабатывается, в результате чего по методу наименьших квадратов получается 2 функции-полинома. Используя эти функции, находим объем верхней и нижней части капли раствора пробы, сфотографированной камерой. Их сумма составляет полный объем капли раствора пробы.

На рис. 4 представлены диаграммы для верхней и нижней частей капли со степенями полинома 15 и 20 соответственно.

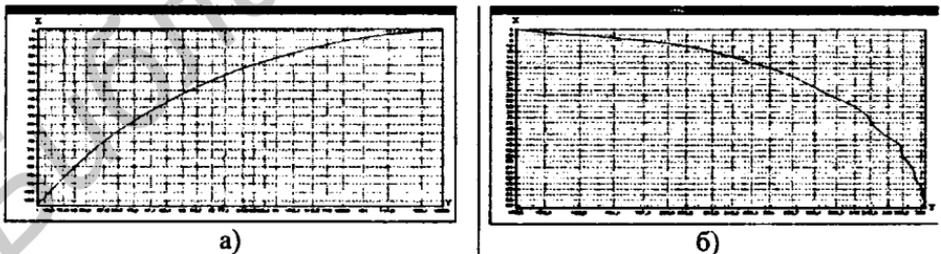


Рис. 4. Вид диаграммы для верхней (а) и нижней части капли (б) после обработки

Основной задачей модуля автоматизации и контроля измерений является реализация на основе разработанных математических методов прикладного программного обеспечения, обеспечивающего уменьшение влияния, либо компенсацию различного рода помех. В рамках

диссертационной работы предложен ряд математических методов, которые основываются на обработке данных, получаемых в ходе эксперимента и позволяют программными средствами контролировать неселективные помехи, вызванные различием интенсивности источников излучения, помехи засветок.

Для компенсации различия интенсивности источников излучения был разработан специальный математический метод обработки сигналов источников излучения, регистрируемых в процессе измерения. Данный метод, в отличие от существующих, дал возможность проводить измерение оптической плотности без использования каких бы то ни было дополнительных устройств регулирования сигналов лампы с дейтериевым корректором (ЛДК) и лампы с полым катодом (ЛПК) и при этом добиться приемлемого отношения шум/сигнал.

Устранение помехи, вызванной различием в интенсивности источников излучения, можно добиться при помощи специальной обработки сигналов ЛДК и ЛПК. Суть метода в следующем.

По аналогии с селективной оптической плотностью D (канал ЛПК) в диссертации вводится понятие неселективной оптической плотности $D_{нс}$ (канал ЛДК):

$$\left\{ \begin{array}{l} D_{нс} = \lg\left(\frac{J_0}{J_0 \cdot e^{-\chi}}\right) \\ D = \lg\left(\frac{J_{0\text{ЛПК}}}{J_{0\text{ЛПК}} \cdot e^{-\chi} \cdot e^{-\mu c}}\right) \end{array} \right. ,$$

где J_0 – интенсивность света ЛДК,

$J_{0\text{ЛПК}}$ – интенсивность света ЛПК,

χ – коэффициент неселективного поглощения,

μc – коэффициент селективного поглощения.

Решив систему относительно числа $e^{-\mu c}$ путем вычитания первого уравнения системы из второго, получим результат:

$$D - D_{нс} = \lg(e^{-\mu c}) \text{ или } D = 0,4343 \cdot \mu c ,$$

который соответствует теоретическим выкладкам. На основе данного математического метода создано программное обеспечение, алгоритм и исходный код которого, приводится в диссертации.

В качестве способа уменьшения влияния неселективных помех был создан математический метод построения калибровочного графика с учетом динамического характера коэффициента селективного поглощения μ .

Для ликвидации помехи неселективного характера в диссертации был произведен анализ погрешности, вносимой данным видом помех, который

показал, что значение коэффициента μ будет изменяться в зависимости от концентрации. На основании анализа был разработан математический метод и соответствующее программное обеспечение для калибровки фотометров с учетом влияния на результат измерения неселективных помех. Суть метода заключается в калибровке фотометров по двум координатам:

$$D=F(C, \mu),$$

где C - концентрация, μ - коэффициент пропорциональности концентрации.

В рассмотренном нами методе калибровки фотометров по двум координатам $D=F(C, \mu)$, в отличие от стандартного метода $D = F(C)$, некомпенсированные неселективные помехи вносят свой вклад лишь на этапе рабочих измерений. Это и дает возможность повысить точность анализа. Алгоритм компенсации помех представлен на рис. 5, а исходный код программного обеспечения, реализующий данный метод, приведен в диссертации.

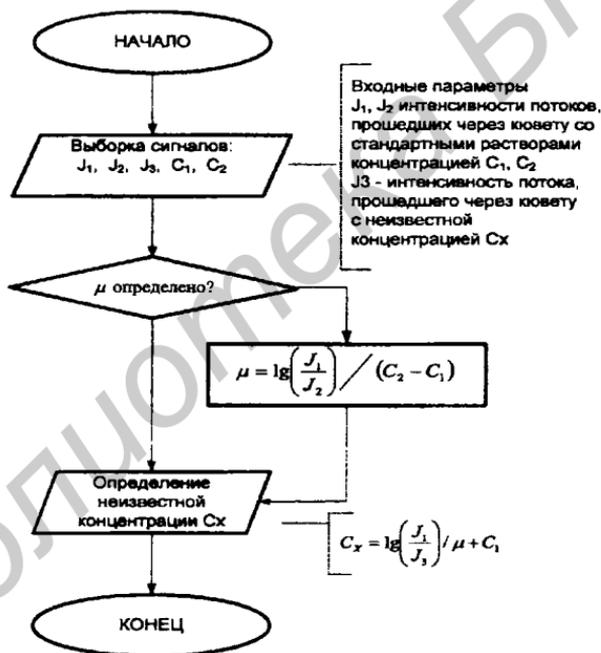


Рис. 5. Алгоритм компенсации неселективных помех в фотометрах с источником сплошного спектра

Кроме описанных выше методов, в данной главе определена необходимость проведения исследования характеристик спектральных источников света с целью использования их оптимальных параметров работы в ходе анализа. В системе прикладного программного обеспечения данную задачу решает специальный модуль определения оптимальных параметров работы спектральных источников света, разработке программных средств

которого посвящена вторая глава. В ней развиты методы исследований ЛПК, работающих в импульсном режиме возбуждения, которые позволили произвести комплексную оценку их электрических и излучательных характеристик и определить оптимальный режим работы в импульсном режиме по критерию максимума отношения сигнал/шум.

В данной главе детально проанализированы условия работы ЛПК и определены параметры импульсного режима для 41 химического элемента. Результаты исследований шумовых характеристик ЛПК ЛТ-2 сведены в таблицы в виде зависимости шум/сигнал, представленных в приложении I диссертации.

Для исследования было разработано специальное программное обеспечение, реализующее как процедуру измерения сигналов и шумов лампы при заданных параметрах питания, так и дальнейшую обработку измеренных сигналов. Измерения проводились в интегральном и точечном режимах измерений. В интегральном режиме сигнал интегрировался в течение всей длительности импульса питания, а в точечном – регистрация проводилась стробоскопическим методом в течение 5 мкс через определенное время задержки.

Обработка измеренных сигналов проводится для определения таких величин, как: нестабильность излучения резонансной линии, отношения сигнал/шум и шум/сигнал, значение низкочастотных шумов.

Полученные результаты позволяют использовать ЛПК в атомно-абсорбционных спектрометрах с импульсным или непрерывным режимами возбуждения. В программном обеспечении заложена возможность автоматического добавления результатов каждого нового анализа в специальную базу данных спектров сигналов и шумов для импульсного и непрерывного режимов питания. Данные из этой базы данных могут быть использованы для выбора оптимальных параметров работы конкретной лампы по критерию минимума отношения шум/сигнал в различных режимах питания.

В результате применения программного обеспечения для исследования ЛПК, была создана база данных, содержащая параметры питания 41 источника света в непрерывном и импульсном режимах питания. Общий анализ результатов исследований показал преимущества импульсного режима по отношению к непрерывному режиму. Пример спектров элемента Co в двух режимах питания лампы представлен на рис. 6.

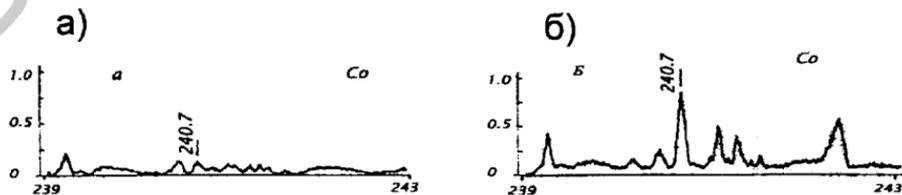


Рис. 6. Спектр Co в непрерывном (а) и импульсном (б) режимах питания

В начале **третьей главы** приводится описание архитектуры системы управления атомизацией пробы, и далее представлены математические методы и программное обеспечение, составляющие основу управления процессом атомизации. Все программное обеспечение реализовано в рамках одного модуля, а его концепция базируется на корректировании программы проведения атомизации за счет обработки спектрофотометрических данных.

Температуру внутри ячейки атомизатора можно контролировать одним из следующих способов:

- количеством света, рассеиваемого свободными атомами;
- средней мощностью, рассеиваемой графитовой кюветой за период синусоиды сети;
- средним значением квадрата напряжения на атомизаторе за период сети;
- непосредственным ее измерением.

При использовании метода контроля по квадрату напряжения, либо мощности, температуру в атомизаторе можно определять по всему заданному диапазону температур. Погрешность измерения в этом случае зависит от температуры. Средняя величина погрешности составляет $\pm 5\%$ в диапазоне $40-1000^{\circ}\text{C}$, $\pm 1\%$ в диапазоне $1000-3070^{\circ}\text{C}$. При этом получаемая на входе измерения характеристика имеет линейную зависимость лишь при низких температурах (до 300°C). Для определения пропорционального текущей температуре значения необходимо откалибровать сигналы от датчиков тока и напряжения, осуществить их перемножение, измерить полученный сигнал, преобразовать его в цифровую форму и подвергнуть нелинейному преобразованию. Для проверки математической концепции, положенной в основу принципа управления, было разработано программное обеспечение, реализующее компьютерное моделирование процесса атомизации с применением разработанного метода. По результатам моделирования можно сделать следующие выводы: спроектированная совокупность средств и методов контроля хода атомизации позволяет повысить качество исследований по сравнению с существующими аналогами.

В рамках программного обеспечения модуля управления атомизацией также реализовано управление атомизацией проб больших концентраций. С этой целью разработан метод автоматической регулировки температуры (АРТ).

При измерении проб больших концентраций (концентрации определяемого элемента > 10 мг/кг), существует ряд нюансов. Чтобы провести такое измерение требуется вначале выполнить измерение, затем на основании полученных данных следует провести разбавление жидких проб (вручную или автоматически) в требуемое число раз. Однако ресурс атомизатора, как и точность измерений, при этом снижаются. Принципиально существует возможность измерения больших концентраций при помощи регулирования температуры атомизации, при этом в качестве

контрольного значения использована величина оптической плотности в текущий момент времени. Алгоритм метода АРТ предоставлен на рис. 7 и основан на импульсном нагреве спирального атомизатора как до температуры атомизации пробы, так и до конца цикла атомизации. Важно отметить, что контролируется не абсолютное значение температуры, а величина оптической плотности в зоне поглощения.

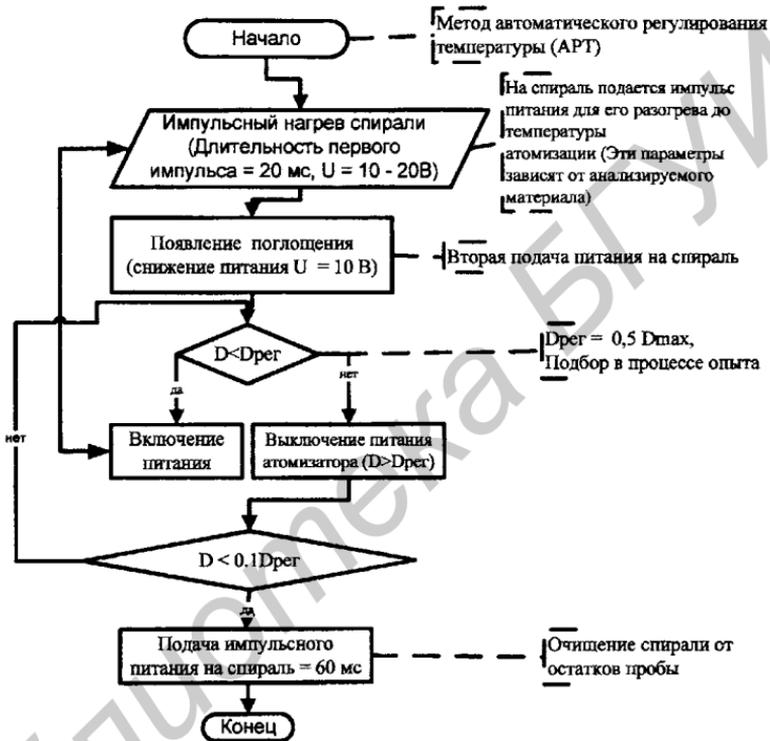


Рис 7. Алгоритм автоматической регулировки температуры

Такой подход дает возможность повысить ресурс атомизатора и сэкономить время анализа, что при большой загруженности работы прибора обеспечит повышение производительности.

В четвертой главе представлен анализ проблемы, связанной с обработкой результатов измерений атомно-абсорбционного анализа. Далее предложена методология обработки данных, основанная на использовании специализированного интерпретатора.

В основу методологии программного обеспечения были положен принцип отдельных ресурсов, операций и методов. В соответствии с этим принципом программное обеспечение разделяется на автономные модули измерений и общий модуль вычислений и отчетов (рис. 8). Каждый модуль

измерений выполняет только лишь одну специализированную задачу измерения, связанную с конкретным прибором. Модуль вычислений и отчетов является более сложным по сравнению с модулем измерений, так как он ориентирован на прием данных от модулей измерений и решение вычислительных задач, задаваемых пользователем, а также на формирование отчетов. Таким образом, данная методология обеспечивает значительную гибкость построения программного обеспечения, уменьшает сложность программного кода и упрощает использование программного обеспечения.

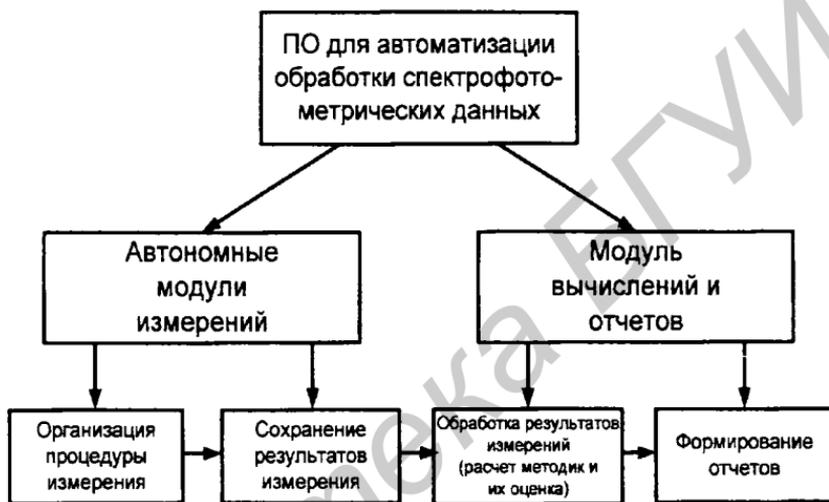


Рис. 8. Структура программного обеспечения автоматизации обработки спектрофотометрических данных

При программной реализации модуля вычислений и отчетов для реализации многострочных математических вычислений (когда формула имеет большую длину – более 150 символов и ее удобно представить в виде аддитивных членов, или когда для расчетов используется несколько формул) был разработан специальный интерпретатор, реализующий авторскую идеологию табличного расчета, которая основывается на следующих положениях:

- Весь расчет заносится в специальную таблицу. Для осуществления информационного ввода и интерпретации результатов в общем случае таблица расчета должна содержать как минимум следующие четыре поля (рис. 9):
 - поле меток строкового типа (не отображается);
 - поле для ввода формул, переменных и комментариев строкового типа;
 - поле результатов вычислений и значений переменных типа double;
 - поле символов, обозначающих результат действия.

Стандартная неопределенность V6 по типу В при поправке на температуру	
$V6 \cdot Kw \cdot 5 / \text{Sqr}(3)$	0.0060621807 uV6t
$\text{Sqr}(\text{Sqr}(uV6^2) + \text{Sqr}(uV6t))$	0.0174189 uV6
Пакетка 10 см3 V7=V8=V6	
uV7	0.0174189
uV8	0.0174189
Расчет суммарной неопределенности	
$\text{Sqr}(UA_{\text{init}}) + \text{Sqr}(uP/P) + \text{Sqr}(um/m) + \text{Sqr}(uV1/V1) + \text{Sqr}(uV2/V2) + \text{Sqr}(uV3/V3)$	0.0001645178 uB1^
$\text{Sqr}(UA_{\text{init}}) + \text{Sqr}(uP/P) + \text{Sqr}(um/m) + \text{Sqr}(uV1/V1) + \text{Sqr}(uV2/V2) + \text{Sqr}(uV4/V4)$	0.0001645178 uB2^
$\text{Sqr}(UA_{\text{init}}) + \text{Sqr}(uP/P) + \text{Sqr}(um/m) + \text{Sqr}(uV1/V1) + \text{Sqr}(uV2/V2) + \text{Sqr}(uV5/V5)$	0.0001645177 uB3^
$\text{Sqr}(UA_{\text{init}}) + \text{Sqr}(uP/P) + \text{Sqr}(um/m) + \text{Sqr}(uV1/V1) + \text{Sqr}(uV2/V2) + \text{Sqr}(uV6/V6)$	0.0001505178 uB4^

Рис. 9. Таблица интерпретатора для реализации потоковых математических вычислений

- Отличие переменных от математических выражений осуществляется на основе того, что в последних содержатся названия математических функций и символы математических операций
- Признаком окончания расчета является рассчитанная неопределенность. Если неопределенность рассчитана и нет изменений, то создается образ данного пакета, который хранится на диске в виде отдельного файла
- Передача данных в MS Word для автоматической генерации отчета осуществляется с использованием COM-технологии
- В качестве имен меток для передачи используются имена переменных с добавлением перед ними нелитерального символа. Переменные эксклюзивны, т.е. они не повторяются более одного раза. Пример формирования меток при расчете неопределенности массы представлен на рис. 10.

Входная величина: m6	Гидроксид натрия Тип неопределенности: <i>B</i> Вид распределения: <i>прямоугольное</i> Значение оценки: $m6 = \#m6$ мг; $dm6 = \#dm6$; Интервал, в котором находится значение входной величины: Стандартная неопределенность: $u(m6) = \frac{\#dm6}{\sqrt{3}} = \#um6$
-------------------------	---

Рис. 10. Пример формирования меток при расчете неопределенности массы

- Дублирование запрещено. Реализован специальный механизм для устранения дублирования после установки меток.

Основным научным результатом работы явилась практическая реализация комплексной системы автоматизированной обработки данных. Общая архитектура разработанного комплекса предложена на рис. 11.

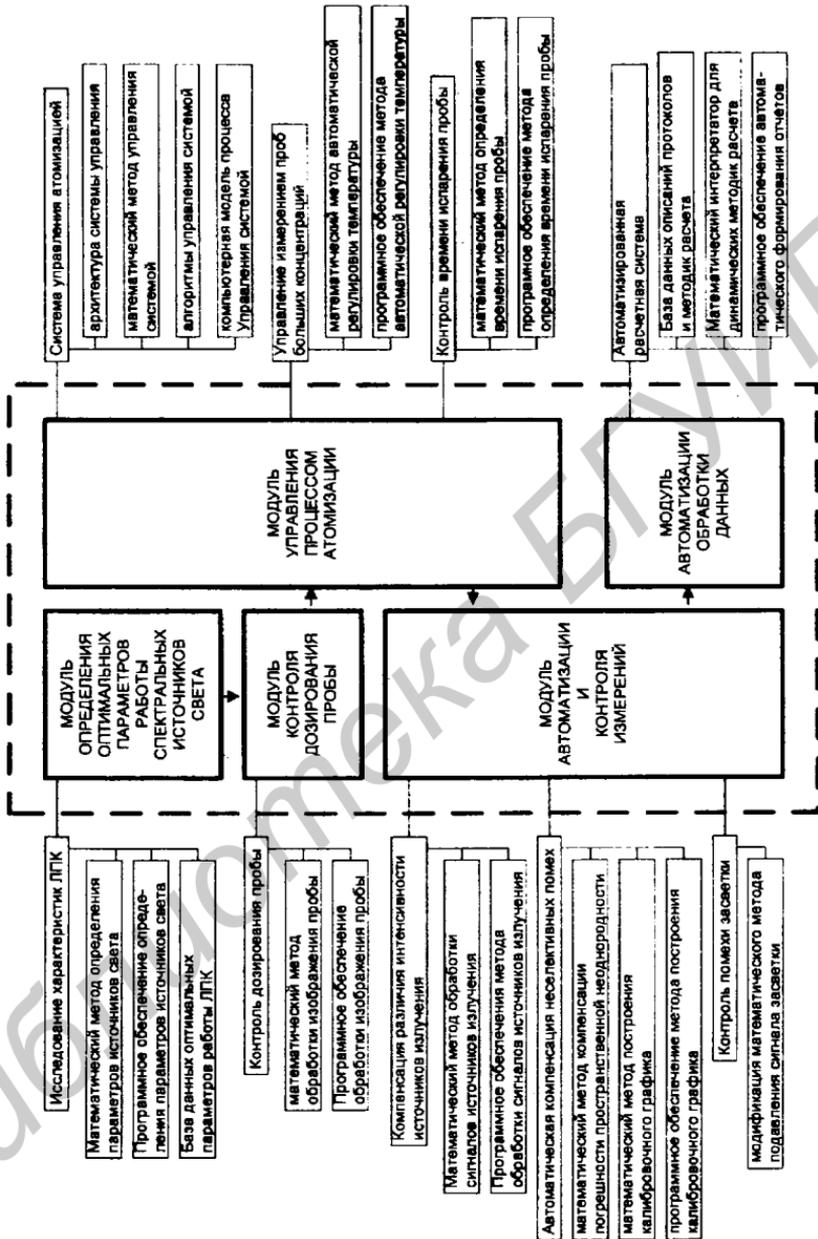


Рис. 11. Архитектура комплекса прикладного программного обеспечения

Применение комплекса прикладного программного обеспечения в ряде лабораторий показало его эффективность, что доказывает правильность выбранного подхода при создании системы автоматизированной обработки данных.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основными научными и практическими результатами диссертационной работы являются:

1. Проведен анализ и обобщен опыт проектирования систем обработки спектрофотометрических данных. Установлено, что в настоящее время существуют системы, решающие частные задачи в области обработки данных спектрофотометра, в то время как для качественного решения данной задачи необходимо разработать комплексное решение [3, 4].
2. Предложен математический метод и на его основе алгоритмы повышения точности измерения концентрации пробы за счет минимизации погрешности отбора пробы. Данный метод позволил устранить программными методами недостатки аппаратной части механизма дозирования [6].
3. Предложены математические методы и алгоритмы учета и контроля помех, вызванных засветками на входе фотоприемника, различием интенсивности источников излучения, пространственной неоднородностью источников излучения, для их минимизации либо компенсации. Применение данных методов позволяет значительно повысить качество анализа без какой-либо аппаратной модификации устройств анализа, что экономически целесообразно [5].
4. Разработан метод и алгоритмы исследования оптических параметров источников излучения, основанные на обработке данных спектрометра, с целью определения оптимальных рабочих параметров ламп по критерию минимума отношения шум/сигнал. С использованием созданного программного обеспечения произведено комплексное исследование ЛПК. Проведенное исследование позволило создать базу данных, содержащую оптимальные рабочие параметры ламп и готовую для практического использования в лабораториях [8, 11].
5. Предложен математический метод и алгоритмы системы управления процессом атомизации проб больших концентраций. Применение данного программного обеспечения, реализующего метод управления процессом атомизации, основанный на обработке и анализе данных спектрометра, уменьшает как время, затрачиваемое на анализ каждой пробы, так и количество необходимых для определения концентрации измерений [9, 10].

6. На основании созданных математических методов и алгоритмов, разработана и практически реализована комплексная система прикладного программного обеспечения автоматизированной обработки данных спектрофотометра [1, 2, 7, 12].

Проведенные исследования позволили получить важные теоретические и практические результаты, совокупность которых позволяет осуществить комплексное решение проблемы обработки спектрофотометрических данных и повышения качества анализа за счет применения в рамках единой системы предложенных в диссертации средств, методов и программного обеспечения.

Применение ряда результатов, полученных в данной диссертационной работе, при практической реализации в испытательном центре ГНУ «Институт порошковой металлургии» подтвердило правильность избранного подхода реализации системы обработки данных и достоверность основных выводов.

Дальнейшие работы по данной проблематике могут быть направлены на совершенствование и дополнение созданной концепции системной обработки спектрофотометрических данных новыми методами и алгоритмами с учетом развития технологий и модификации требований качества проводимого анализа.

Статьи в научных журналах

1. Курейчик К.П., Макаров А.И., Ибрагим А.З. Математическая автоматизированная расчетная система – МАРС // Доклады БГУИР.— 2003.— №4(4).— С. 82—85.
2. Курейчик К.П., Ибрагим А.З., Харланов В.А. Система автоматизированной обработки фотометрических данных “АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ФОТОН” // Известия Белорусской Инженерной Академии.— 2004.— №1(17).— Т. 1.— С. 175—182.
3. Курейчик К.П., Макаров А.И., Ибрагим А.З., Харланов В.А. Автоматизированные средства обработки данных и расчета неопределенностей для исследовательских, промышленных и испытательных лабораторий // Известия Белорусской Инженерной Академии.— 2004.— №1(17).— Т. 2.— С. 201—207.
4. Курейчик К.П., Макаров А.И., Ибрагим А.З., Харланов В.А. Расчет неопределенностей и автоматизация обработки данных в промышленных и испытательных лабораториях // Метрология и измерительная техника.— Харьков.— 2004.— №1(1).— С.91—93.
5. Курейчик К.П., Ибрагим А.З., Мавлютов М.М., Харитончик В.И. Определение среднеквадратичного уровня шумов в оптико-электронном канале атомно-абсорбционного спектрометра // Доклады БГУИР.— 2003.— № 1.— С. 125—129.
6. Курейчик К.П., Шевченко В.В., Ибрагим А.З. Повышение точности измерения концентрации веществ за счет контроля дозирования пробы и времени испарения пробы // Доклады БГУИР.— 2005.— № 1(9).— С. 64—68.
7. Курейчик К.П., Ибрагим А.З., Харланов В.А., Макаров А.И. Расчет неопределенностей и обработка данных в исследовательских лабораториях // Журнал метрологии и приборостроения.— 2004.— №2.— С. 20—26.
8. Курейчик К.П., Мавлютов М.М., Ибрагим А.З., Харитончик В.И. Исследование характеристики газоразрядных источников света для спектральных измерений // Журнал прикладной спектроскопии.— 2004.— №4(70).— С. 549—551.
9. Kurejchik K.P., Pisarev S.L., Kozlovsky N.V., Haritonchik V.I., Ibrahim A.Z. Compact Atomic Absorption Graphite Atomizer Spectrometer // Journal of Applied Spectroscopy.— 2003.— № 5(70).— С. 814—816.
10. Kurejchik K.P., Mavljutov M.M., Ibrahim A.Z., Haritonchik V.I. Comparing the Optical Parameters of Hollow-Cathode Tubes Operating in Pulse-Periodic and Continuous Excitation Modes // Instruments and Experimental Techniques.— 2005.— №1(48).— С. 149—154.

Материалы конференций и семинаров

11. Kurejchik K.P., Mavljutov M.M., Ibrahim A.Z., Haritonchik V.I. Hardware&software control complex of durability tube with hollow cathode // III International Conference on Neural Networks and Artificial Intelligence .—Minsk, Belarus — 2003.— С.245—249.
12. Курейчик К.П., Ибрагим А.З., Харланов В.А. Обработка фотометрических данных с помощью “Аналитической системы ФОТОН” // IV Международная научно-техническая конференция.— Харьков, Украина — 2004.— Т. 2.— С. 66—68.



AHMED
2

Библиотека БГУИР

РЭЗЬЮМЭ

Ібрахім Ахмед Захэйр

Метады, алгарытмы і праграмныя сродкі для апрацоўкі спектрафотаметрычных дадзеных

Ключавыя словы: Метад, алгарытм, праграмныя сродкі, фотаметр, дадзеныя, вымярэнні, апрацоўка, спектр, атамізатар, перашкоды, канцэнтрацыя, інтэрпрэтатар, аўтаматызацыя, неазначальнасць вымярэнняў, фільтрацыя.

Дысертацыйная работа прысвечана даследаванням у вобласці атамна-абсарбцыйнай спектраметрыі. Мэтай даследаванняў з'яўляецца распрацоўка матэматычных метадаў і стварэння на іхняй аснове комплекснай сістэмы прыкладнога праграмнага забеспячэння абрацоўцы спектрафотаметрычных дадзеных і павышэння якасці атамна-абсарбцыйнага аналізу.

У дысертацыі прапанованы матэматычныя метады і алгарытмы павышэння дакладнасці вымярэння канцэнтрацыі рэчываў, даследавання аптычных параметраў лампаў з полым катодам у імпульсна-перыядычным і непрырывным рэжымах сілкавання. Прапанована архітэктара сістэмы кіравання графітавым атамізатарам, матэматычны метад кіравання вымярэннем пробаў вялікіх канцэнтрацыяў і стварэння на яе аснове алгарытмы. Распрацавана метадалогія і прыкладное праграмнае забеспячэнне разліку неазначальнасцей вымярэнняў у спектраметрыі.

Навуковая навізна работы заключаецца ў тым, што ў яе рамках былі разпрацаваны новыя матэматычныя метады памяншэння ўплыву перашкодаў на вынікі вымярэнняў, метады павышэння дакладнасці вымярэнняў канцэтрацыі рэчываў пробы ў атамізатарых, створаны праграмныя сродкі і праведзены даследаванні лампаў з полым катодам у розных рэжымах работы. У рамках работы таксама створана ідэалогія і праграмныя сродкі для разліку неазначальнасцей вымярэнняў у спектраметрыі. Гэта дае магчымасць больш простага прадстаўлення працэдур вылічэння вынікаў і аперыравання данымі вылікаў.

Вынікі тэарытычных даследаванняў рэалізаваны як праграмныя сродкі і эксперыментальныя праграмныя мадэлі. Вынікі выпрабаванняў падцвердзілі працаздольнасць створаных матэматычных метадаў і прыкладных праграмных сродкаў.

РЕЗЮМЕ

Ибрахим Ахмед Зокейр

Методы, алгоритмы и программные средства для обработки спектрофотометрических данных

Ключевые слова: Метод, алгоритм, программное обеспечение, спектрофотометр, данные, измерения, обработка, спектр, атомизатор, помехи, концентрация, интерпретатор, автоматизация, неопределенность измерений, фильтрация.

Диссертационная работа посвящена исследованиям в области атомно-абсорбционной спектрометрии. Целью исследований является разработка математических методов и создания на их основе комплексной системы прикладного программного обеспечения обработки спектрофотометрических данных и повышения качества атомно-абсорбционного анализа.

В диссертации предложены математические методы и алгоритмы повышения точности измерения концентрации веществ, исследования оптических параметров ламп с полым катодом в импульсно-периодическом и непрерывном режимах питания. Предложена архитектура системы управления графитовым атомизатором, математический метод управления измерением проб больших концентраций и созданные на ее основе алгоритмы. Разработана методология и прикладное программное обеспечение расчета неопределенностей измерений в спектрометрии.

Научная новизна работы заключается в том, что в ее рамках были разработаны новые математические методы уменьшения влияния помех на результаты измерений, методы повышения точности измерения концентрации веществ пробы в атомизаторах, предложен метод и проведено исследования ламп с полым катодом в различных режимах работы. В рамках работы также созданы идеология и программное обеспечение для расчета неопределенностей измерений в спектрометрии. Это дает возможность более простого представления процедур вычисления результатов и оперирования данными расчетов. Основным научным результатом является разработка архитектуры и практическая реализация системы прикладного программного обеспечения обработки данных спектрофотометра, в основу которой положены математические методы, предложенные в рамках данной диссертационной работы.

Результаты теоретических исследований реализованы в виде программного обеспечения и экспериментальных программных моделей. Результаты испытаний подтвердили работоспособность созданных математических методов и прикладного программного обеспечения.

SUMMARY

Ibrahim Ahmed Zohair

**Methods, algorithms and software technologies
for spectrophotometer data processing**

Keywords: Method, algorithm, software, spectrophotometer, data, measuring, processing, spectrum, atomizer, noise, concentration, interpreter, automation, measurements uncertainty, filtering.

This thesis is dedicated to atomic absorption spectroscopy branch investigation. The aim of these investigations is developing of mathematical methods and creating of spectrophotometer data processing software system based on these methods.

Mathematical methods and algorithms for higher precision measuring of sample concentration, investigation of optical parameters of hollow cathode tube with impulse-alternating and continuous supply modes are provided in the thesis.

Architecture of graphite atomizer control system, mathematical method of atomizer control in a case of high sample concentration and corresponding algorithms are proposed. Methodology and application software for calculating of measurements uncertainty spectrophotometer data are developed.

Scientific novelty of this work consists in the new mathematical methods of reducing the influence of noise on the results of measurements, the methods of increasing exact results of analysis concentration measurements. The software was created and the investigations of lamps with hollow cathode in different conditions were taken place. The ideology and software for calculations of measurements uncertainty in spectrometer have been created in this work. It gives the possibility for easier interpreting procedures of calculation results and uses these results.

The main scientific result of this work is the development of architecture and creation of application software system for spectrophotometer data processing based on mathematical methods introduced here.

The results of theoretical investigations were realized as software and experimental program models. The results of applied tests confirmed the capacity created mathematical methods and applied software.

ИБРАХИМ Ахмед Зохейр

**МЕТОДЫ, АЛГОРИТМЫ И ПРОГРАММНЫЕ СРЕДСТВА
ДЛЯ ОБРАБОТКИ СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКИХ
ДАННЫХ**

05.13.11 - Математическое и программное обеспечение вычислительных машин, комплексов и компьютерных сетей

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Подписано в печать	21.10.2005.	Формат 60x84 1/16.	Бумага офсетная.
Гарнитура «Таймс».	Печать ризографическая.		Усл. печ. л. 1,63.
Уч.-изд. л. 1,4.	Тираж 70 экз.		Заказ 627.

Издатель и полиграфическое исполнение: Учреждение образования
«Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники»
Лицензия на осуществление издательской деятельности №02330/0056964 от 01.04.2004.
Лицензия на осуществление полиграфической деятельности №02330/0131518 от 30.04.2004.
220013, Минск, П. Бровки, 6.