Институт информационных технологий

Белорусский государственный университет  
информатики и радиоэлектроники

Пояснительная записка

к дипломной работе по теме:

«Программное средство для расчета химического состава образцов»

выполнил слушатель гр. 60325-2

Захаренков В.В.

Минск 2018

Определения, обозначения и сокращения

В настоящей пояснительной записке применяются следующие термины и определения:

**Интеркалибровка** — контрольные измерения, проводимые в рамках нескольких лабораторий (либо одной лаборатории) с целью выявления источников систематических погрешностей применяемых методик.

**Лабораторный номер** — буквенно-цифровой код однозначно идентифицирующий данный образец; уникален в пределах календарного года.

**Химический анализ** — совокупность методов исследования, употребляемых для определения состава химических соединений или их смесей. В настоящей работе под совокупность методов понимается совокупность количественных и качественных методов.

**RLS (Row Level Security)** Безопасность на уровне строк — технология, позволяющая контролировать доступ к строкам таблиц базы данных, основываясь на характеристиках пользователя, выполняющего запрос (например, членство в группе или же контекст исполнения) (Microsoft corp.). Внедрена в ПС Microsoft SQL Server начиная с версии 2016.

Введение

Валовой химический анализ солевых пород — достаточно распространенный анализ для химико-геологических лабораторий. Количество таких анализов в одной лишь лаборатории может достигать нескольких сотен в год. При этом каждый из анализов дает содержание отдельных ионов независимо от того, в каком виде эти соединения (минералы) входят в состав исследуемых образцов породы, и представляет собой массив данных, состоящий из нескольких десятков параметров. В задачу химика-аналитика входит, помимо прочего, представление количественного минералогического состава пород и определение их количественных отношений.

Одним из путей решения такой задачи (в общем случае достаточно нетривиальной) является расчетный путь. При таком подходе за основу берутся данные валового анализа. Затем проводятся предварительные расчеты с целью определить значения коэффициентов, по которым в дальнейшем и определяется требуемая схема, отражающая стехиометрическое соотношение ионов в минералах. Требуемые пороговые значения этих коэффициентов определены по результатам многолетних исследований (Морачевский Ю.В., Петрова Е.М. (ред.), 1964), позволившим условно разделить все многообразие встречающихся геохимических форм на ограниченное количество условных схем, значительно упростив тем самым расчетную задачу. После определения расчетной схемы производится окончательный расчет с использованием формул, применимых для данной конкретной схемы. Количественным показателем качества самого химического анализа, а также соответствие выбранной расчетной схемы природному составу конкретного образца, является близость сумм ионных минеральных форм к 100 %.

Расчетный путь связан с необходимостью проведения многоступенчатых расчетов, при которых нередки ошибки, напрямую связанные с человеческим фактором, а также потеря точности из-за округления. В этой связи актуальным представляется решение следующих задач:

- автоматизация расчетов валовых химических анализов солевых образцов;

- создание базы данных для хранения исходных данных анализов, результатов расчетов, а также калибровочных данных, различных настроек и пр.;

- автоматизация подготовки сводных отчетов по результатам расчета анализов, выполненных по заданным схемах, в заданный интервал времени;

- облегчение проведения сравнения результатов расчета «параллельных» анализов.

Целью дипломного проекта является повышение оперативности выполнения обработки данных анализов, увеличение надежности и достоверности получаемых результатов и в целом повышение экономической эффективность работы.

Для достижения поставленной цели необходимо создание программного средства, позволяющего автоматизировать выполнение обработки данных и обеспечить решение указанных задач.

Для решения поставленных задач предполагается использовать следующие программные средства:

- Microsoft Visual Studio Community 2017 версия 15.7.5;

- Язык программирования C# целевая платформа .NET Framework версия 4.5.2, WPF Framework;

- Microsoft Entity Framework версия 6.0 в качестве средства обеспечения доступа к базе данных;

- SQL Server 2016 Express LocalDB, наиболее приемлемый вариант, принимая в расчет тот факт, что в геохимических лабораториях, как правило, отсутствует штатный сотрудник, который следил бы за состоянием и работой полноценного MS SQL Server’а, а также особенность данной версии, состоящей в автоматическом создании и запуске требуемой инфраструктуры SQL Server’а, что позволяет приложению использовать базу данных без решения сложных конфигурационных задач, в случае если подключение осуществляется через строку подключения (Microsoft corp.).

Ожидается, что создание программного средства позволит значительно ускорить проведение расчетов, позволит сэкономить время подготовки отчетности за счет ее автоматизации, что безусловно должно повысить экономическую эффективность работы как отдельных сотрудников, так и лаборатории, выполняющей данный вид анализов, в целом.

1 Аналитический обзор и постановка задачи

1.1 Программы для автоматизации расчетов химических анализов солевых образцов

В связи с тем, что затрагиваемая область достаточно узка, удалось обнаружить лишь два варианта решения. Первый вариант предполагает использование шаблонов системы MathCAD и требует наличия предустановленного пакета САПР MathCAD версии не ниже 6.0. Второй вариант реализован в виде файлов электронных таблиц MS Excel версии не ниже 2010.

1.2 Сравнительный анализ существующего ПО

1.2.1 Шаблоны MathCAD

Работать с шаблонами MathCAD достаточно удобно: все операции осуществляются в пределах рабочих листов, на которых уравнения и выражения отображаются графически, любое внесение изменений в данные калибровочной кривой отражается как на ее графике, так и на конечных результатах. Стоит однако отметить, что при всех явных преимуществах данного решения оно, тем не менее, обладает рядом серьезных недостатков, существенно затрудняющих использование в повседневной практике. К таковым можно отнести:

- система состоит из набора шаблонов, каждый из которых предназначен для решения лишь некоторой части задачи, после чего пользователь должен открыть следующий шаблон, вручную внести данные и продолжить при необходимости вычисления;

- отсутствует возможность формирования итогового отчета по проведенным расчетам (т.е. предполагается, что пользователь будет копировать результаты расчета для каждого показателя в требуемую итоговую форму);

- сохранение результатов расчета возможно либо в виде XML-файлов, либо в двоичном проприетарном формате, причем каждый файл соответствует одному этапу расчета одного образца, такой подход очень удобен в случае применения в исследовательской практике, когда требуется многократно возвращаться к данным одного анализа, однако значительно затрудняет проведение расчетов при серийных экспериментах;

- отсутствует возможность проведения интеркалибровки либо сравнения результатов расчета для однотипных образцов;

- отсутствует единое хранилище для исходных данных и результатов расчетов.

1.2.2 Файлы электронных таблиц MS Excel

Значительно больше возможностей имеется в решении, осуществленном в виде электронных таблиц MS Excel. Все расчеты проводятся в одном файле, на нескольких листах, причем четко разделены листы для ввода исходных данных, листы, содержащие итоговые ведомости, а также лист, содержащий данные и графическое представление калибровочной кривой. Пересчет результатов при изменении параметров производится автоматически. Результаты расчетов представлены в виде итоговых ведомостей, сформированных в зависимости от автоматически определяемой расчетной схемы. Однако данное решение, также не лишено недостатков, а именно:

- поскольку все образцы, обрабатываемые в каждом конкретном файле электронных таблиц, используют единую калибровочную кривую, а также единые настройки (концентрации титрующих растворов, их нормальности и пр.), совместить расчет двух и более образцов, использующих разные вышеуказанные параметры, в одном файле оказывается невозможным;

- провести интеркалибровку либо сравнение возможно лишь при совпадении параметров, упомянутых в предыдущем пункте, а также несколько доработав электронные таблицы, что предполагает наличие соответствующих навыков у пользователя;

- количество образцов, обрабатываемых в одном файле (за один раз) ограничено 30;

- отсутствует единое хранилище для исходных данных и результатов расчетов.

Таблица 1 – реализация основных требований пользователя в ПО, применяемом для автоматизации расчетов химических анализов солевых образцов

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | Шаблоны MathCAD | Файлы Excel |
| Система представляет собой единое целое (не набор утилит) | - | + |
| Возможность формирования отчета по результатам | - | + |
| Сохранение результатов расчета во внешние файлы | - | + |
| Возможность проведения сравнения результатов расчета | - | - |
| Возможность одновременной работы с результатами, полученными для разных настроек | - | - |
| Наличие единого хранилища для исходных данных | - | - |
| Визуальное представление калибровочных кривых | + | + |
| Количество одновременно обрабатываемых образцов | 1 | 30 |

1.3 Постановка задачи

На основании анализа существующих программных решений можно заключить, что наиболее близким можно выбрать прототип, использующий файлы электронных таблиц MS Excel.

Технические требования к разработке

Система должна позволять вводить данные для образцов, просматривать дополнительную информацию об образцах, удалять образцы, осуществлять поиск и фильтрацию образцов в единой базе данных. К каждому образцу может быть присоединены данные 0 или более анализов, с указанием даты и времени их выполнения, а также дополнительная информация по каждому образцу.

Система должна осуществлять аутентификацию пользователя на основании введенной пары логин-пароль. Проверка должна выполняться на стороне БД посредством выполнения системной хранимой процедуры setapprole. Выдача для отображения или изменения информации должна осуществляться на уровне базы данных за счет использования технологии RLS.

Система должна давать графическое представление калибровочной прямой, с отображением точек, на основании, которых она построена, а также выводить данные по тангенциальному коэффициенту, ординаты пересечения с осью Y и позволять пользователю оценивать качество аппроксимации через коэффициент корреляции – R2.

Должна быть реализована возможность фильтрации списка образцов по дате отбора (с заданием интервала дат), а также по лабораторному номеру. При отсутствии заданного для фильтрации лабораторного номера, система должна выводить все образцы, даты отбора которых попадают в заданный временной интервал.

Выбор анализов для дальнейшей работы может быть осуществлен только в контексте образца.

Ввод данных для анализа, их изменение либо удаление должно осуществляться в отдельном окне.

Система не должна ограничивать количество анализов, связанных с данным конкретным образцом.

Каждый анализ должен иметь возможность обладать своими собственными начальными установками, включая калибровочную кривую.

Система должна определять оптимальную расчетную схему для анализа, оставляя тем не менее за пользователем право решать, по какой схеме проводить расчет.

Система должна обладать средством для ввода начальных параметров, значения которых присваиваются соответствующих параметрам анализов по умолчанию; такого рода параметры должны сохраняться в настройках программной системы и извлекаться при ее старте.

Система должна предоставлять возможность осуществлять просмотр, корректировку, а также задание новых данных для калибровочных кривых не только из диалогового окна работы с калибровками, но и из диалогового окна работы с анализами для образцов.

Система должна предотвращать изменение калибровочных данных пользователем в случае, если эти данные уже используются расчета результатов другого анализа (т.е. количество ссылок на калибровочную кривую => 1).

Система должна давать предварительную оценку качества проведения химического анализа для выбранной схемы, путем сравнения суммарных величин с параметром, отражающим допустимый толеранс (параметр должен задаваться пользователем с сохранением в настройках системы и автоматической загрузки при старте).

Система должна позволять проводить сравнение результатов расчетов двух анализов между собой, при условии, что для данных анализов выбраны одинаковые расчетные схемы; оценка сходимости результатов должна осуществляться на основании критериев, задаваемых пользователем для каждой схемы в отдельности и сохраняемых в настройках приложения, с автоматической загрузкой при старте.

Результаты расчетов для выбранных анализов выбранных образцов должны представляться в виде итоговых ведомостей установленного образца (см. рисунок???), при этом результаты расчета сводятся для каждой расчетной схемы в отдельную ведомость.

Список использованных источников

**Microsoft corp.** Row-Level Security [В Интернете] // https://docs.microsoft.com. - 29 08 2018 г.. - https://docs.microsoft.com/en-us/sql/relational-databases/security/row-level-security?view=sql-server-2017.

**Microsoft corp.** SQL Server 2016 Express LocalDB [В Интернете] // https://docs.microsoft.com. - 26 Июль 2018 г.. - https://docs.microsoft.com/en-us/sql/database-engine/configure-windows/sql-server-2016-express-localdb?view=sql-server-2017.

**Морачевский Ю.В., Петрова Е.М. (ред.)** Методы анализа рассолов и солей [Книга]. - Москва-Ленинград : Химия, 1964.