

Министерство образования Республики Беларусь
Учреждение образования
Белорусский государственный университет
информатики и радиоэлектроники

УДК 004.67

Солодкий
Дмитрий Михайлович

SaaS для композиционного анализа твердых тел
по данным ионной спектроскопии

АВТОРЕФЕРАТ

на соискание степени магистра информатики и вычислительной техники

по специальности 1-40 81 01 «Информатика и технологии
разработки программного обеспечения»

Научный руководитель
Ташлыкова-Бушкевич И.И.
к.ф.-м.н., доцент

Минск 2017

КРАТКОЕ ВВЕДЕНИЕ

Современный анализ материалов с помощью ионной спектроскопии основан на измерении характеристики частиц и излучений, испускаемых твердым телом, которое бомбардируется фотонами, электронами или тяжелыми частицами.

Идентификация элементов осуществляется по энергии детектируемого излучения, а атомная концентрация определяется по его интенсивности. Зависимость состава от глубины определяется с помощью распыления образца тяжелыми ионами в сочетании с поверхностно-чувствительными методами анализа (электронная спектроскопия и масс-спектрометрия вторичных ионов). Также профили концентрации по глубине формируются путем измерения потерь энергии легких ионов (ядерный экспресс-анализ и резерфордовское обратное рассеяние).

Задачей исследователей является как проведение экспериментов по взаимодействию ионов с твердыми телами, так и обработка полученных данных в виде энергетических спектров. Обработка спектров выполняется вручную либо специализированным программным обеспечением.

Программное обеспечение упрощает и оптимизирует труд исследователей, позволяя фокусироваться на творческой и исследовательской составляющей, выступая гарантом корректности расчетов и снижая человеческую ошибку при рутинных операциях. Однако внедрение нового ПО требует также смену методик и переобучение персонала.

В области анализа спектров ионного рассеяния автором не было обнаружено современного решения для проведения расчетов по модели SaaS. Все программные комплексы предназначены только для операционной системы Windows, ограничивая исследователей выбором инструментария и устройств: нет возможности выполнять расчеты на портативных компьютерах, имеются трудности с предоставлением общего доступа к промежуточным результатам исследования.

Диссертационная работа призвана актуализировать сведения по имеющемуся программному обеспечению, продемонстрировать оптимальный вариант вычислений и рассказать о концепции модели обслуживания SaaS в разрезе научных исследований, основанных на ионной спектроскопии.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Цели и задачи исследования

Целью данной работы является создание программного комплекса, позволяющего выполнять исследования структуры и элементарного состава твердых тел путем обработки и анализа результатов атомной спектроскопии.

Для достижения поставленной цели в ходе работы необходимо решить следующие *задачи*:

1. Ознакомиться с предметной областью и основными законами.
2. Изучить рынок существующих программных решений, их возможности и недостатки, сформировать модель будущего продукта.
3. Разработать математический аппарат для проведения исследований.
4. Спроектировать и реализовать программный комплекс.
5. Продемонстрировать использование комплекса для решения исследовательских задач.

Объектом исследования являются экспериментальные данные ионной спектроскопии в виде энергетических спектров резерфордовского обратного рассеяния.

Предметом исследования является программный комплекс обработки экспериментальных данных ионной спектроскопии для композиционного анализа твердых тел.

Связь работы с приоритетными направлениями научных исследований и запросами реального сектора экономики

Работа выполнялась на базе кафедры физики БГУИР, соответствует направлению исследований кафедр физики БГУИР и БГПУ, а также тематике практических разработок, проводимых на кафедре информатики университета.

Личный вклад соискателя

Результаты, приведённые в диссертации, получены соискателем лично. Вклад научного руководителя И. И. Ташлыковой-Бушкевич заключается в предоставлении экспериментальных данных и руководстве ходом работы.

Апробация результатов диссертации

Основные положения диссертационной работы докладывались и обсуждались на профильном семинаре МАГАТЭ по высокочувствительной 2D & 3D

характеризации и визуализации с помощью ионных пучков (Международный центр теоретической физики им. Нобелевского лауреата Абдус Салама, Триест, Италия, сентябрь 2016), а также на XXIV международной научно-практической конференции аспирантов, магистрантов и студентов «Физика конденсированного состояния» (Гродно, ГрГУ, апрель 2016).

Технические аспекты полученного программного комплекса доложены на 52-ой научной конференции аспирантов, магистрантов и студентов (Минск, БГУИР, май 2016). Практические результаты обработки спектров AlCr с помощью комплекса представлены в докладе на 46-ой международной Тулиновской конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами (Москва, май 2016).

Разработанное программное обеспечение применяется на кафедре физики в рамках лабораторной работы «Метод Резерфордского обратного рассеяния при анализе состава твердых тел» для студентов кафедр ПОИТ и ВМСиС факультета компьютерных систем и сетей БГУИР.

Опубликованность результатов диссертации

По теме диссертации суммарно опубликовано одиннадцать печатных работ в сборниках трудов и материалов конференций, включая научную работу, представленную на XIX Республиканском конкурсе научных работ студентов и отмеченную дипломом II категории.

Структура и объём диссертации

Диссертация состоит из общей характеристики работы, введения, пяти глав, заключения, списка использованных источников, списка публикаций автора и двух приложений.

Общий объём работы составляет 47 страниц, из которых основного текста – 33 страницы, 21 рисунок на 17 страницах, список использованных источников из 31 наименования на 2 страницах и 2 приложения на 3 страницах.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

В первой главе выполняется теоретический анализ предметной области. Дается определение ионной спектроскопии, рассматриваются наиболее распространенные методы, их сфера применения. Приводятся физические сведения о методах спектроскопии, объясняется связь спектров с композиционным составом. Приведены оригинальные примеры использования результатов спектроскопии. Обосновывается выбор метода Резерфордского обратного рассеяния в качестве основного для получения практических результатов разрабатываемого в рамках диссертации программного продукта.

Обзор существующего рынка программного обеспечения по проблематике произведен во второй главе. Дается характеристика каждому программному комплексу, определяются ключевые ситуации использования (use cases) в рамках исследования спектров рассеяния, приводится иллюстрация пользовательского интерфейса и технические требования.

Третья глава освещает алгоритм элементного анализа по данным спектроскопии Резерфордского обратного рассеяния. Приводится авторский алгоритм быстрого вычисления концентрации элементов и композиционного анализа по глубине. Реализация алгоритма выполнена на языке программирования JavaScript.

Четвертая глава диссертации аргументирует выбор модели SaaS для реализации программного комплекса. Рассматриваются основные модели предоставления программного обеспечения, актуальный инструментарий для создания серверных приложений. Представлены детали основных компонентов, используемых в сервисе. Определены преимущества сервиса по сравнению с конкурентными продуктами.

Практическое применение полученного программного комплекса описывается в пятой главе. Представлены результаты анализа спектров для быстрозатвердевших сплавов алюминия с хромом. Рассказано о внедрении сервиса в лабораторную практику студентов специальностей ФКСиС БГУИР.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основные научные результаты диссертации

1. Проведен обзор современных методов анализа элементного состава веществ. Детально раскрыто применение ионной спектроскопии для исследования твердых тел [1].
2. Выполнен анализ рынка научного программного обеспечения, используемого для исследований в изучаемой области [2].
3. Выявлены требования к современному научному программному обеспечению, рассмотрены возможные модели предоставления услуг [3, 4].
4. Проведена апробация полученного программного продукта как в лабораторном практикуме [5, 6], так и в экспериментальных исследованиях [7, 8].
5. Определена концентрация и глубина залегания легирующего элемента в быстрозатвердевших фольгах Al-Cr с применением разработанного программного продукта. Установлена зависимость между концентрацией поверхностного состава и смачиваемостью материала [7, 9, 10].

Рекомендации по практическому использованию результатов

1. Результаты теоретического обоснования пригодны к применению в лекционном и лабораторном практикуме по физике для студентов инженерных специальностей; в качестве основы для изучения узкоспециализированных тем по исследованию состава веществ.
2. Установленные архитектурные положения могут быть использованы для проектирования научных сервисов по модели SaaS, ориентированных на унификацию вычислений среди различных платформ и предоставление общего доступа к результатам.
3. Разработанные алгоритмы готовы к использованию при расчетах композиционного состава и глубины залегания для твердых тел с двумя основными элементами. Расчеты основываются на данных ионной спектроскопии резерфордовского обратного рассеяния.
4. Полученный результат в виде программного комплекса применим для решения задач, связанных с обработкой спектров резерфордовского обратного рассеяния в частности и ионной спектроскопии в общем.
5. Программная платформа в виде веб-сервиса также может выступать в качестве хранилища результатов исследований и быть интегрирована в процесс обработки и анализа данных спектроскопии ионов высоких энергий.

СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ

1. Момотова, Ю.О. Метод резерфордовского обратного рассеяния как способ изучения структуры вещества: основы и технологии / Ю.О. Момотова, А.С. Оверченко, Д.М. Солодкий // 52-я научно-техническая конференция аспирантов, магистрантов и студентов БГУИР: сборник докладов. – Минск: БГУИР, 2016. – с. 95-96.

2. Солодкий, Д.М. Композиционный анализ состава твердых тел методом резерфордовского обратного рассеяния: программные комплексы / Д.М. Солодкий // Сборник научных трудов по материалам международной научно-практической конференции «Молодежный форум: технические и математические науки». – Воронеж: ВГЛУ, 2015. – с. 275-278.

3. Солодкий, Д.М. Композиционный анализ сплавов алюминия по данным ионной спектроскопии в сервисе iRV.Space / Д.М. Солодкий // Сборник материалов Международной научно-практической конференции аспирантов, магистрантов и студентов «Физика конденсированного состояния XXIV». – Гродно: ГрГУ, 2016 – с. 137-138.

4. Солодкий, Д.М. Архитектурные особенности SaaS для исследований в области ядерной физики / Д.М. Солодкий, М.Ю. Чистяков, И.Ю. Супринович // 52-я научно-техническая конференция аспирантов, магистрантов и студентов БГУИР: сборник докладов. – Минск: БГУИР, 2016. – с. 33-35.

5. Садовская, А.О. Изучение элементного состава твердых тел с использованием компьютерного моделирования Plotmath в лабораторном практикуме по физике / А.О. Садовская, Д.М. Солодкий, А.С. Булойчик, А.С. Морозов // 49-я научно-техническая конференция аспирантов, магистрантов и студентов БГУИР: сборник докладов. – Минск: БГУИР, 2013. – С. 90.

6. Булойчик, А.С. Адаптация метода POP для анализа поверхности твердых тел в лабораторном практикуме / А.С. Булойчик, А.С. Морозов, А.О. Садовская, Д.М. Солодкий // Сборник докладов научно-технической конференции «Информатика, математика, автоматика IMA-2013». – Сумы, 2013. – с. 13-14.

7. Ташлыкова-Бушкевич, И.И. Влияние композиционного состава поверхности на смачиваемость быстрозатвердевших фольг алюминия / И.И. Ташлыкова-Бушкевич, В.С. Куликаускас, С.М. Барайшук, Ю.С. Яковенко, Д.М. Солодкий // Тезисы докладов XLII международной Тулиновской конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. – М., 2012. – С. 167.

8. Ташлыкова-Бушкевич, И.И. Влияние отжига на пространственное распределение хрома в быстрозатвердевших сплавах Al-Cr / И.И. Ташлыкова-Бушкевич, Д.М. Солодкий, В.Г. Шепелевич // Тезисы докладов XLVI международной Тулиновской конференции по физике взаимодействия заряженных частиц с кристаллами. – М., 2016. – С. 148.

9. Солодкий, Д.М. Влияние композиционного состава поверхности на смачиваемость быстрозатвердевших фольг алюминия / Д.М. Солодкий, Ю.С. Яковенко // 48-я научно-техническая конференция аспирантов, магистрантов и студентов БГУИР: сборник докладов. – Минск: БГУИР, 2012. – с. 70-71.

10. Яковенко, Ю.С. Исследование смачиваемости алюминия и его сплавов, получаемых методом высокоскоростной кристаллизации / Ю.С. Яковенко, Д.М. Солодкий // Сборник материалов международной научно-практической конференции аспирантов, магистрантов и студентов «Физика конденсированного состояния XX». – Гродно: ГрГУ, 2012. – с 335-337.

11. Солодкий, Д.М. Композитный анализ быстрозатвердевших сплавов Al-Cr с применением компьютерного моделирования программой Plotmath / Д.М. Солодкий // XIX Республиканский конкурс научных работ студентов. – Минск, 2012. – 26 с.