

Ю.М.Лихачев, Д.Н.Тогобицкая

**ПРОГРАММНЫЙ СЕРВИС МНОГОМЕРНОГО АНАЛИЗА
ЗАВИСИМОСТЕЙ В СРЕДЕ ИНФОРМАЦИОННО–АНАЛИТИЧЕСКОЙ
СИСТЕМЫ БАНКА ДАННЫХ «МЕТАЛЛУРГИЯ»**

Представлен программный комплекс работы с зашумленными экспериментальными и технологическими данными. Комплекс позволяет выбирать необходимый набор данных из баз, выгружать его в Excel, выполнять анализ многомерных данных, находить оптимальную связь между параметрами физико–химических процессов.

программный комплекс, базы данных, Excel, анализ многомерных данных, параметры физико–химических процессов.

Состояние вопроса. Прогнозирование свойств физико–химических систем базируется на экспериментальных и технологических данных, полученных в различные периоды и при разных исходных условиях. С целью упорядочения таких данных, они объединяются в базы, что позволяет делать выборки для необходимых срезов информации. Экспериментальная информация часто сопровождается обширным текстовым описанием, что является органической составляющей частью самой информации. В отличие от экспериментальной информации, технологическая информация содержит большой объем числовых данных, и часто не имеет текстового описания. Такое различие в структурах данных заставляет использовать различные способы хранения в вычислительных системах.

Постановка задачи. Охватить большие объемы экспериментальной и технологической информации Пользователю зачастую не представляется возможным. Привлечение технических и программных средств для обработки данных и на их основе получение требуемых результатов и зависимостей позволяет Пользователю не только сократить рутинную часть работы, но и найти новые зависимости в описание исследуемых процессов.

Изложение основных материалов исследования. В Институте черной металлургии создан и успешно функционирует банк данных «Металлургия» [1], включающий базы фундаментальных данных о физико–химических свойствах расплавов, а также технологические данные о реальных процессах. Характер используемой информации в банке предопределил использование документально–фактографического принципа хранения. Сложность структуры хранимой документально–фактографической информации не позволяет выполнять автоматическую выборку (из прикладных программ), поэтому для получения требуемой информации используется информационно–поисковая система (ИПС) для выборки необходимых данных и выгрузки их в традиционные источники (Excel) и последующей обработкой прикладными программами (рис.1).



Рис.1. Получение информации из банка данных «Металлургия».

Информация технологического характера, имеющая табличную структуру, позволяет использовать стандартные средства ее накопления, хранения и выборки, что предопределяет хранение ее в реляционных базах.

Постобработка полученной экспериментальной

и технологической информации зависит от Пользователя и определяется поставленными целями. Однако в большинстве случаев исследователь пытается сделать выводы на основе исходной информации. В большинстве случаев характер зависимости свойств от соответствующего состава редко имеет простую структуру, что заставляет Пользователя находить вид связи в интерактивном режиме с использованием ИПС [2].

Для создания соответствующего инструмента Пользователя, разработана программа, позволяющая исследовать оптимальный вид связи состав–свойство из выделенного множества функций (например, полином 1–5 степени) для многокомпонентного состава (рис.2).



Рис.2. Схема функционирование программы исследования связи.

Выбор параметров для расчета представлен на рис.3. Варьируя параметрами аргумента и функции можно исследовать связи для любых видов составов и свойств.

На рис.4 представлено трехмерное изображение вязкости при

1500 град для сечения SiO₂–CaO. Анализ распределения сечения состава на плоскости и значение величин вязкости в пространстве не позволяет

напрямую сделать вывод о характере связи. Применение аппроксимации линейной (рис.5, коэффициенте корреляции 0.58) и поверхностью второго порядка (рис.6. коэффициенте корреляции 0.64) позволяет с некоторым приближением оценить рассматриваемую связь.

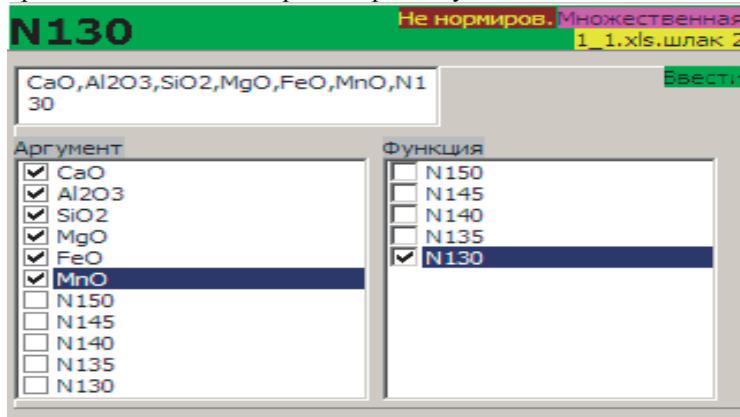


Рис.3. Видеокадр выбора параметров для анализа

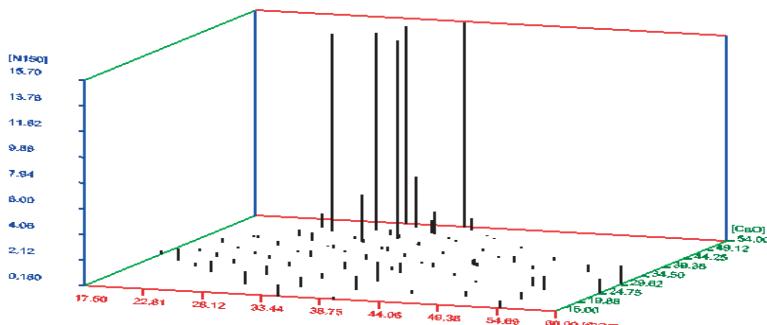


Рис.4. Трехмерное изображение вязкости при 1300 град для сечения SiO₂–CaO

Вариация количества элементов состава позволяет детализировать влияние каждого из них на качество изучаемой связи. На рис.7 представлены картограммы поверхностей вязкости для различных составов. Представленные функции отображения (рис.7) для двухмерных (CaO–SiO₂) и трехмерных (CaO–SiO₂–Al₂O₃) сечений состава позволяет сделать вывод об изменении значения свойства для соответствующей области с увеличением количества переменных состава. Более существенное изменение поверхности отклика получается с увеличением количества независимых переменных (рис.8). Увеличение количества переменных состава изменяет процент покрытия свойства в сторону уменьшения для больших вязкостей. Так уменьшение покрытия вязкости > 3.6 паз для сечения CaO–

$\text{SiO}_2 \rightarrow \text{CaO}-\text{SiO}_2-\text{Al}_2\text{O}_3 \rightarrow \text{CaO}-\text{SiO}_2-\text{Al}_2\text{O}_3-\text{MnO}-\text{MgO}-\text{FeO}-\text{TiO}_2$
весьма существенно.

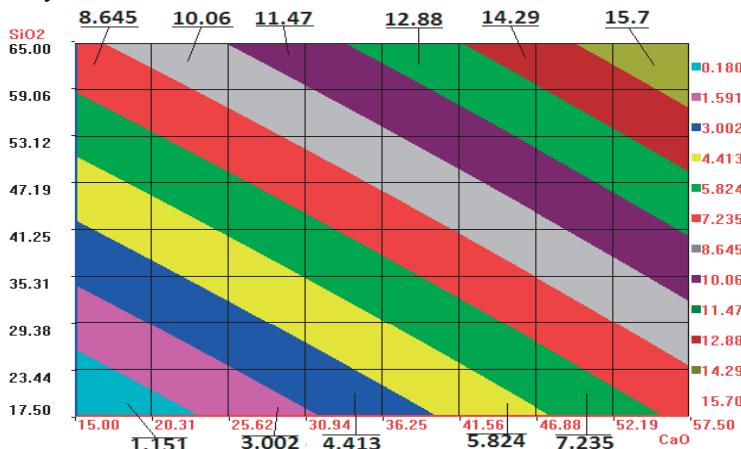


Рис.5. Картограмма поверхности вязкости при 1300 град для сечения SiO_2-CaO (степень полинома $m=1$)

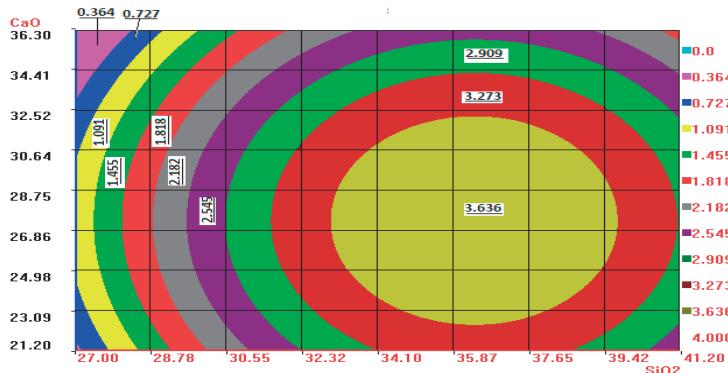


Рис.6. Картограмма поверхности вязкости при 1300 град для сечения SiO_2-CaO (степень полинома $m=2$)

Использование тройных диаграмм состояния позволяет получить дополнительную детализацию свойств в тех областях, где картограммы учитывают только парные сечения (рис.9–10). Как и в случае картограмм, увеличение количества используемых элементов состава приводит к повышению адекватности апробации связи (рис.10).

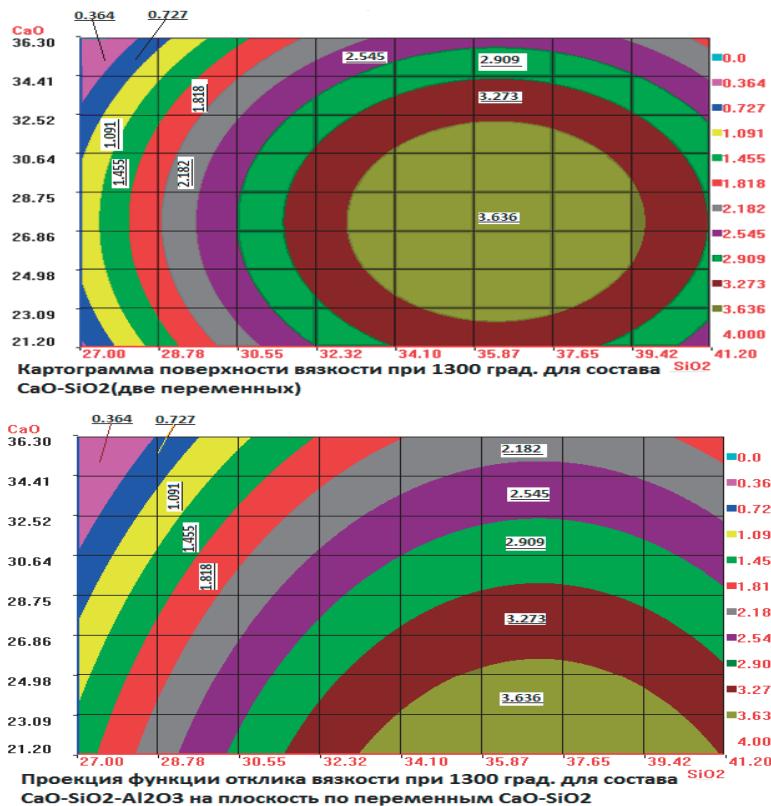


Рис.7. Картограммы поверхностей вязкости при 1300 град. для сечения CaO–SiO₂ и CaO–SiO₂–Al₂O₃ (степень полинома m=2)

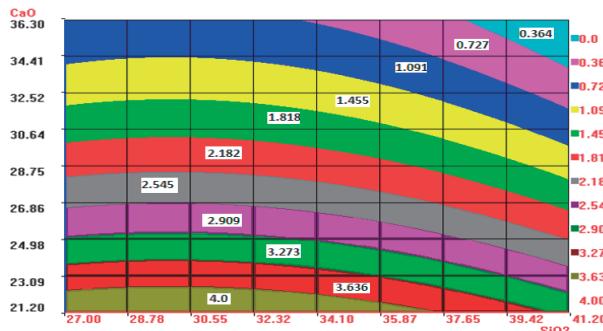


Рис.8. Проекции поверхности аппроксимации вязкости при 1300 град для состава CaO–SiO₂–Al₂O₃–MnO–MgO–FeO–TiO₂ (полином m=2)

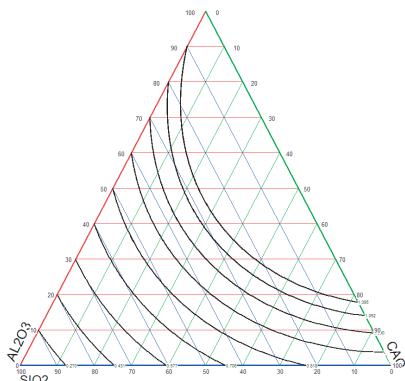


Рис.9. Тройная диаграмма состояния Si–(CaO–SiO₂–Al₂O₃) для полинома m=2

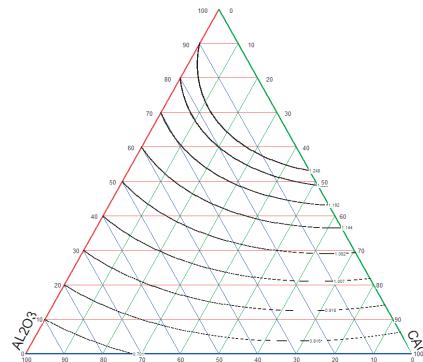


Рис.10. Тройная диаграмма состояния Si–(CaO–SiO₂–Al₂O₃–MnO–MgO) для полинома m=2 (MnO=0.4,MgO=5).

Выводы. Таким образом, использование анализа связи состав–свойство средствами сервиса построения двойных картограмм и тройных диаграмм, позволяет исследователю визуализировать картину многомерной связи, применять его когнитивные знания для последовательного улучшения прогноза и на основе полученных решений в процессе исследования повышать знания о рассматриваемых процессах.

1. Тогобицкая Д.Н., Лихачев Ю.М. Системное математическое обеспечение документально–фактографических баз физико–химических данных //Материалы 4–го семинара «Компьютерное моделирование расплавов и стекол». –Курган. –1998. –С.46–47.
2. Лихачев Ю.М., Ходотова Н.Е. Графический метод определения состава доменных шлаков, обеспечивающий требуемые физико–химические свойства. // Міждержавна науково–методична конференція «Проблеми математичного моделювання». (тез. доп. 25–27 травня 2011р.). –Дніпродзержинськ. –2011. – С.139–141.

Статья рекомендована к печати докт.техн.наук И.Г.Муравьевой

Ю.М.Лихачев, Д.М.Тогобицька

Програмний сервіс багатовимірного аналізу залежностей в середовищі інформаційно–аналітичної системи банку даних «Металургія»

Представлено програмний комплекс роботи з зашумленими експериментальними і технологічними даними. Комплекс дозволяє вибирати необхідний набір даних з баз, вивантажувати його в Excel, виконувати аналіз багатовимірних даних, знаходить оптимальний зв'язок між параметрами фізико–хімічних процесів.