Зайцев Виктор Николаевич, 11 класс

Научный руководитель: Дединский Илья Рудольфович

Секция: Computer Science, подсекция «Компьютерные технологии».

Название проекта: Разработка программы АТП-ЭКСПЕРТ для полу-автоматического электрохимического анализа жидкостей.

Текст тезисов на русском языке

Программа АТП-ЭКСПЕРТ-2006 предназначена для приема, математической обработки и графического представления в одной из заданных форм (по выбору оператора) экспериментальных данных, получаемых потенциометрическим анализатором жидкости Эксперт-001, работающим в режиме непрерывного контроля состава жидкости или в режиме потенциометрического титрования жидкости.

Анализатор жидкости Эксперт-001 представляет собой специализированный вольтметр, позволяющий измерять значения потенциала со специальных химических датчиков – ионоселективных электродов и преобразовывать эти значения в величины pX (одна из принятых шкал концентраций) или в значения концентрации данного компонента (например, нитратов или солей аммония). Прибор может непрерывно измерять значения концентраций и передавать в компьютер через COM-порт или, через переходник, через USB-порт. Прибор может также выполнять ряд других функций, в частности, осуществлять потенциометрическое титрование, то есть управлять подачей жидкости из специального устройства – бюретки в исследуемый образец и при этом фиксировать одновременно значения pX и объем поданной жидкости. Полученные зависимости, так называемые кривые титрования, применяются для количественного определения состава жидкости по ряду важных компонентов – показателю кислотности pH, концентрации сульфатов, жесткости воды и т.д., в зависимости от используемых датчиков анализатора и состава добавляемого раствора (титрующего раствора или титранта). Определяемые показатели имеют практическое значения, включая вопросы промышленной безопасности. в том числе процесс титрования широко применяется в учебных курсах общей и аналитической химии, что позволяет применить данный анализатор и программу АТП-ЭКСПЕРТ-2006 в учебных курсах аналитической и общей химии и промышленной экологии.

Программа осуществляет управление COM-портом и обеспечивает считывание, распознавание и сортировку данных, поступающих с анализатора Эксперт-001 в различных режимах работы: непосредственно при измерении, в процессе титрования, а также при считывании результатов ранее сделанных измерений из памяти анализатора.. подключенного через COM-порт. Данные, представляющие собой значения потенциала или pX, и соответствующие им значения объема в процессе титрования вносятся в таблицу и могут быть

прочитаны оператором и использованы для математической обработки и графического представления данных.

Математическая обработка данных включает интерполяцию экспериментальных точечных функций различными методами: с помощью кривых Безье с использованием разработанной нами процедуры сопряжения отдельных кривых, с помощью кубических сплайнов, с помощью приближения параболами. В соответствии с требованиями к обработке кривых титрования программа включает устойчивые к экспериментальным шумам процедуры построения гладкой первой и второй производной из точечных функций, а также так называемых координат Грана, представляющих собою обратную величину первой производной значения pX по объему. Доступный в программе АТП-ЭКСПЕРТ-2006 набор способов представления данных позволяет с достаточной точностью определять особые точки кривых титрования, точки эквивалентности.

Графическое представление данных организовано с дружественным пользователем меню, позволяющим выбирать метод обработки экспериментальных данных, параметры графика, включая количество окон, толщину и цвет линий, масштабы по осям и т.д.

Программа АТП-ЭКСПЕРТ-2006 является необходимой составляющей приборно-программного комплекса для титрования на базе анализатора жидкости Эксперт-001 и полностью внедрена в производство. Программа была успешно использована при подготовке студенческой дипломной работы в Российском государственном университете нефти и газа им. И.М.Губкина. Ранняя версия программы была использована при проведении студенческого практикума по физико-химическим методам анализа (ФХМА) в том же университете, где ей воспользовались 7 групп (более 200 студентов).

Название работы и краткое описание на английском языке:

The “ATP-EXPERT” program for semi-automatic electrochemical analysis of liquids.

The program is developed for semi-automatic analysis of liquids using electrochemical approach. It receives and computes the data measured by automatic electrochemical pX analyzer connected through COM-port.

The program allow to control the measuring device connected, perform automatic potentiometric titration of liquids, plot measured data in different coordinates used in electrochemical analysis, and more. It uses .NET v.2 platform, has user-friendly interface and easy for use in laboratory research and courses for students.

Mathematical processing involves data interpolation using several methods (Bezier curves, cubic splines, parabolic approximation) and can effectively filter the noise and determine special points of titration pX function and equivalence points which are important to electrochemical analysis. ATP-EXPERT program already used for students’ graduation works and practical courses (more than 200 students) on physical-chemical analysis in State University of oil and gas.

Список литературы, использованной при написании научной работы

1. Шилдт Г. Самоучитель C++: Пер. с англ. – 3-е изд. – СПб.: БХВ-Петербург, 2005. – 688 с.
2. Страуструп Б. Язык программирования C++. Бином, 2001.
3. Плоджер П., Степанов А., Ли М., Массер Д. STL, стандартная библиотека шаблонов C++. СПб, БХВ-Петербург, 2004.
4. Э. Троелсен. C# и платформа .NET. СПб, Питер, 2003.
5. Рихтер Д. Создание эффективных Win32 приложений с учетом специфики 64-битной версии Windows. СПб, Питер, 2001.

November 13, 2008 11:40 PM -- 2

Публикация работы:

1. Сборник тезисов Пятой ежегодной открытой конференции проектных и исследовательских работ лицея – Москва, 2006.

Патент на изобретение: отсутствует.

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС «АНАЛИТИК-ЭКСПЕРТ» ДЛЯ ДЛЯ ЭКОЛОГИЧЕСКОГО МОНИТОРИНГА И МЕДИЦИНСКОЙ ДИАГНОСТИКИ

Введение
- **Потенциометрический метод**
- **Применения**
- **Актуальность**
- **Общность применяемых методов**

Архитектура
- **Общая программная платформа**
  - **Обеспечение унификации загрузки и взаимодействия плагинов**
  - **Единый механизм хранения данных (XML)**
  - **Единая презентационная платформа**
  - **Обеспечение надежности и целостности**
  - **Обеспечение масштабируемости**
  - **Обеспечение распределенности**
- **Подключаемые модули (плагины)**
  - **Аппаратные (драйвера приборов) - порт, специфика прибора, форматы сообщения, управление**
  - **Плагины обработки данных**
  - **Презентационные и интерфейсные плагины**
  - **Плагины экспорта данных (XTML)**
  - **Коммуникационные (сеть)**
  - **Поддержка веб-видео**
  - **Плагины базы данных (геомэппинг)**

Применение
- **Ранняя диагностика рака**
- **Индикация загрязнений токсическими отходами**
- **Обнаружение горючих и взрывоопасных газов в атмосфере (в т.ч. терроризм)**
- **Автоматическая нейтрализация токсических утечек на производстве**
- **Автоматические выключение приборов в аварийных ситуациях**
- **Мобильный дистанционный экологический мониторинг окружающей среды**
- **Автоматический лабораторный электрохимический анализ жидкостей**
- **Возможность дистанционных измерений**

Русская версия

Потенциометрический метод – широко применяемый метод химического анализа водных сред. В основе метода лежит использование ионоселективных электродов, т.е сенсоров, преобразующих концентрацию определяемых ионов в характерное напряжение на своем выходе.

«АНАЛИТИК-ЭКСПЕРТ» является масштабируемой программной платформой, обеспечивающей работу с потенциометрическим измерительным оборудованием. Для того, чтобы можно было создавать программное обеспечение для различных приборов на базе единого программного ядра, использована технология плагинов – динамически загружаемых модулей - расширений. Модуль ядра содержит загрузчик расширений, который обеспечивает корректную загрузку всех плагинов. Каждый плагин имеет манифест, содержащий информацию о версии, назначении и разработчике. Загрузчик расширений обеспечивает унификацию системных плагинов. В зависимости от применения, плагины бываю разных типов.

Так как при работе с различными приборами используются различные каналы связи, форматы входных / выходных данных и команды управления, реализована возможность создавать расширения – драйвера устройств, обеспечивающие поддержку специфики конкретного прибора. Драйвер устройства также обеспечивает целостность данных, полученных от прибора, низкоуровневый контроль ошибок.

Отдельный класс плагинов отвечает за математическую обработку получаемых прибором данных. В зависимости от поставленной задачи, могут требоваться различные алгоритмы обработки (очистка от шумов, поиск экстремальных значений, вычисление каких – либо функций в зависимости от получаемых данных…).

Интерфейсные плагины предоставляют возможность представлять полученные данные в требуемом в зависимости от поставленной задачи виде. Это может быть как численный вывод, вывод заключения, генерация отчета или построение и исследование графиков по полученным данным.

Программа поддерживает такие стандарты вывода и хранения данных, как html и xml, обеспечивает экспорт в Excel. Открыта возможность для добавления новых плагинов экспорта, сохранения и загрузки.

Плагины, отвечающие за работу с сетью обеспечивают возможность совершать измерения дистанционно, а модуль работы с вебкамерой позволяет наблюдать процесс удаленного измерения в режиме реального времени.

В зависимости от специфики измерительного оборудования возможно добавление плагинов с экстра – функциями, таких как плагины управления периферийным оборудованием и плагины баз данных. Это позволяет выполнять команды в зависимости от получаемых с прибора данных, накапливать получаемые данные.

Программа совместима с новой быстродействующей (5-6 минут на человека) потенциометрической системой ранней диагностики рака молочной железы. Программа выдает экспертное заключение об измерении, интерпретируя его для оператора, генерирует отчет с сохранением протоколов диагностики, который может быть отправлен по интернету.

Другое важное применение данной программы – дистанционное считывание данных с приборов экологического мониторинга для состава газов и жидкостей, а также для приборов технической и бытовой безопасности. При этом программа может снабжаться экспертными критериями опасности и генерировать сигнал тревоги, связанный, например, с утечкой горючих или токсичных газов или достижением опасного уровня концентрации заданного компонента в жидкости или атмосфере. Комплекс программы с детектором горючих газов может быть использован для обеспечения безопасности в связи с угрозой мирового терроризма.

Модуль управления периферийным оборудованием позволяет совершать аварийное выключение различной техники в случае утечки опасных веществ.

Программа позволяет эффективно проанализировать изменения состава газов и жидкостей по данным с приборов. Возможно управление дискретным сигналом для подачи жидкости. Эта функция позволяет управлять процессом химического титрования, а также нейтрализацией токсичного отхода подходящим реагентом с непрерывным контролем состава жидкости для достижения заданного оптимального состава.

В сочетании с кондуктометрическим оборудованием программа решает такие задачи, как измерение суммарных показателей водных сред (Ph, суммарное количество растворенных солей, Eh и содержание некоторых индивидуальных ионов).

Английская версия

"ANALYTIC-EXPERT" HARDWARE AND SOFTWARE FRAMEWORK FOR ECOLOGICAL MONITORING AND MEDICAL DIAGNOSTICS

The principal goal of the project is development of software and hardware toolkit for using chemistry-based electrometric monitoring methods in medicine and ecology. These methods are based on measurement of ions concentration in different media or biological potentials as output voltage on the sensor, digitizing this voltage by the computer interface and mathematical data processing. “Analytic-Expert” provides a ready-to-use platform for this workflow that can be applied in medicine, ecology, analytical chemistry, fire alarm systems etc.

Scalability was the principal requirement to the project, in order to provide universal mechanisms of different data measurement and processing, and output devices control. To achieve this, the technology of dynamically loaded extension modules (plug-ins) is used. The core module loads the plug-ins needed, and provides mechanisms for their correct initialization and integration. It also controls stability of the application. The plug-ins search and loading are performed using .NET Reflection technology.

There are several plug-in types. Input modules are used to communicate with measurement devices, to receive the data, and to provide data verification and error recovery. Output plug-ins are used for external device control, which may affect measurement process, or switch off dangerous units in emergency situations.

Data transformation modules perform mathematical processing of the collected data. They include noise filtering, extreme values monitoring, derivatives calculation, functions calculation etc.

Interface plug-ins facilitate data presentation in suitable format — tables, plots, annotated geographic and industrial maps, indicators, expert decision outputs, etc. Output plug-ins provide data storage in XML format. Stored data may be exported to viewable HTML and Microsoft Excel formats, as well as in Web.

Network plug-ins are responsible for remote control of the equipment. Measurement process may be monitored in real time using web cameras.

To integrate the above set of modules, control plug-ins are used. They describe measurement and control methods. For example, it can be simple chemical titration, or industrial neutralization of a toxic waste with a equivalent quantity of suitable reagent. Such plug-ins may be simple scripts processed by the core script engine, or fully-functional plug-ins written on any .NET language.

Now, this framework is used in a range of applications. It is compatible with a new fast (10-12 persons per hour) potentiometric system for early diagnostics of mammal cancer. The software automates the diagnostic process and reports the conclusion to operator. This diagnostics can be performed remotely and may involve remote experts consulting.

Another important application is monitoring and geographical mapping of data received from remote chemical composition sensors. It is aimed at industrial ecology, fire security control, and prevention of terrorism. The module detects leakage of toxic or explosive substances and generates alarm signals. Once the threshold concentration of the dangerous substance is exceeded, another module offers the possibility to react on the situation by switching various devices on/off.

There are several types of stable plug-in sets (builds) for different applications.

1) Semi-automatic electrochemical titration of liquids and ecological monitoring

Chemical titration widely used in chemical and biochemical analyses, when a reactant is gradually added to the sample and the value measured is the volume of the added reactant. This addition produces some critical event, which is normally detected by sensor or color change of chemical indicator (acid-base or pH-titration, etc). The software provides the possibility to receive the pH and volume data dynamically and to process them in real time. It allows to plot the data measured and cubic-splined, the first and the second derivatives both in normal and Gran coordinates of the experimental pH value versus volume added. These plots can be saved as graphic files. Whole measurement together with custom labels and comments may be saved in XML.

The program has also a distributed version, which consists of the measuring server and remote operators modules. This makes possible to perform the measurements on one computer and obtain them simultaneously on another computer. The same program module allows to receive the data continuously from a wide range of instruments, which measure the electric conductivity, ionic composition and the concentration of oxygen in natural water.

2) Early mammal cancer diagnostics

The essence of the method is the measurement of the electric potentials of four acupunctural points of the patient's body. The distribution of the potentials for a sick person differs from the one for a healthy one, which allows to select the person's risk group with the precision up to 100%. For the risk group, 87% of the persons selected have cancer or pre-canceral state. The program allows to receive the data from the instrument online, plot relationships wanted, generate the conclusion "healthy–suspected" based on the measured data, and send the report by e-mail.

3) Detecting of explosive and toxic gases

The program for the gas detector performs online monitoring of combustible or explosive substances in the air. It reads the data from the instrument in the selected intervals of time and processes them. If the selected level of the concentration is exceeded, an alarm signal is generated.

In order to provide the gas security a geomapping module is developed. It performs online monitoring of the danger levels on the loaded geographical or technical map. The detector's image on this map depends on the pollution level. The geomapping module saves the information about the state of the region in XML format, which provides the possibility of the further export of the data obtained.

E][PERT 2.1

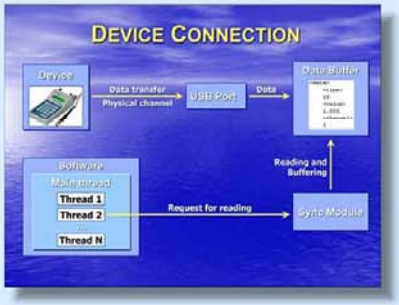
THE HARDWARE AND SOFTWARE FRAMEWORK FOR ECOLOGICAL MONITORING AND MEDICAL DIAGNOSTICS

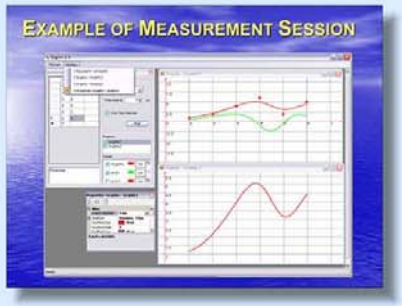
Abstract

E][PERT 2.1

THE FRAMEWORK FOR ECOLOGICAL MONITORING AND MEDICAL DIAGNOSTICS

The principal goal of the project is development of software and hardware toolkit for using **chemistry-based electrometric monitoring methods in medicine and ecology.** These methods are based on measurement of ions concentration in different media or biological potentials as output voltage on the sensor, digitizing this voltage by the computer interface and mathematical data processing. "Analytic-Expert" provides a ready-to-use platform for this workflow that **can be applied in medicine, ecology, analytical chemistry, fire alarm systems etc.**





Scalability was the principal requirement to the project, in order to provide universal mechanisms of different data measurement and processing, and output devices control. To achieve this, the **technology of dynamically loaded extension modules** (plug-ins) is used. The core module loads the plug-ins needed, and provides mechanisms for their correct initialization and integration. It also controls stability of the application. The plug-ins search and loading are performed using **.NET Reflection technology.**

There are several plug-in types. **Input modules** are used to communicate with measurement devices, to receive the data, and to provide data verification and error recovery. **Output plug-ins** are used for external device control, which may affect measurement process, or switch off dangerous units in emergency situations.

Data transformation modules perform mathematical processing of the collected data. They include noise filtering, extreme values monitoring, derivatives calculation, functions calculation etc.

Interface plug-ins facilitate data presentation in suitable format – tables, plots, annotated geographic and industrial maps, indicators, expert decision outputs, etc. **Output plug-ins** provide data storage in XML format. Stored data may be exported to viewable HTML and Microsoft Excel formats, as well as in Web.

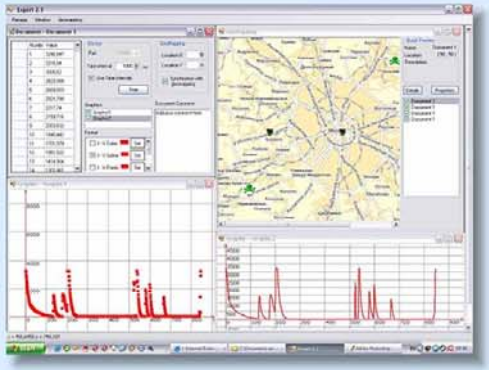
Network plug-ins are responsible for remote control of the equipment. Measurement process

tion of the dangerous substance is exceeded, another module offers the possibility to react on the situation by **switching various devices on/off.**

There are several types of stable plug-in sets (builds) for different applications.

- **SEMI-AUTOMATIC ELECTROCHEMICAL TITRATION OF LIQUIDS AND ECOLOGICAL MONITORING**

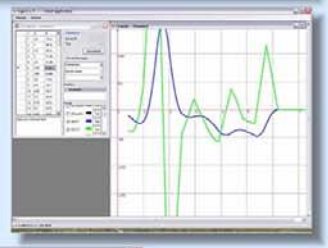
Chemical titration widely used in chemical and biochemical analyses, when a reactant is gradually added to the sample and the value measured is the volume of the added reactant. This addition produces some critical event, which is normally **detected by sensor** or color change of chemical indicator (acid-base or pH-titration, etc). The software provides the possibility to **receive the pH and volume data dynamically** and to **process them in real time.** It allows to plot the data measured and cubic-splined, the first and the second derivatives both in normal and Gran coordinates of the experimental pH value versus volume added. These plots can be saved as graphic files. Whole measurement together with custom labels and comments may be **saved in XML.**



The program has also a **distributed version,** which consists of the measuring **server** and remote operators modules. This makes possible to perform the measurements on one computer and obtain them simultaneously on another computer. The same program module allows to receive the data continuously from a **wide range of instruments,** which measure the electric conductivity, ionic composition and the concentration of oxygen in natural water.

- **EARLY MAMMAL CANCER DIAGNOSTICS**

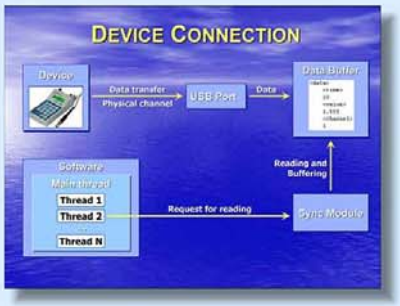
The essence of the method is the measurement of the **electric potentials of the acupunctural points** of the patient's body. The distribution of the potentials for a sick person differs from the one for a healthy one, which allows to select the person's risk group with the precision **up to 100%.** For the risk group, 87% of the persons selected have cancer or pre-canceral state. The program allows to receive the data from the instrument online, plot relationships wanted, **generate the conclusion "healthy–suspected"** based on the measured data, and send the report by **e-mail.**



- **TOXIC AND EXPLOSIVE**

November 13, 2008 11:40 PM -- 11

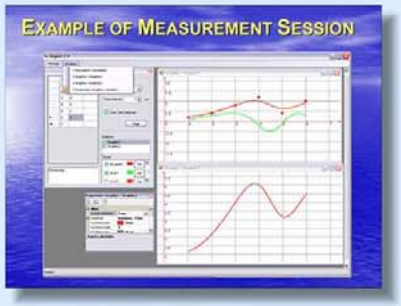
The principal goal of the project is development of software and hardware toolkit for using **chemistry-based electrometric monitoring methods in medicine and ecology.** These methods are based on measurement of ions concentration in different media or biological potentials as output voltage on the sensor, digitizing this voltage by the computer interface and mathematical data processing. "Analytic-Expert" provides a ready-to-use platform for this workflow that **can be applied in medicine, ecology, analytical chemistry, fire alarm systems etc.**



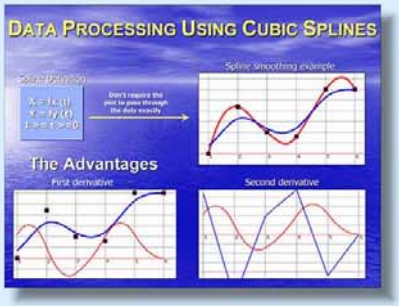
Scalability was the principal requirement to the project, in order to provide universal mechanisms of different data measurement and processing, and output devices control. To achieve this, the **technology of dynamically loaded extension modules** (plug-ins) is used. The core module loads the plug-ins needed, and provides mechanisms for their correct initialization and integration. It also controls stability of the application. The plug-ins search and loading are performed using **.NET Reflection technology.**

There are several plug-in types. **Input modules** are used to communicate with measurement devices, to receive the data, and to provide data verification and error recovery. **Output plug-ins** are used for external device control, which may affect measurement process, or switch off dangerous units in emergency situations.

Data transformation modules perform mathematical processing of the collected data. They include noise filtering, extreme values monitoring, derivatives calculation, functions calculation etc.

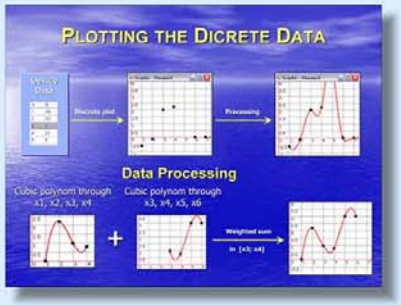


Interface plug-ins facilitate data presentation in suitable format – tables, plots, annotated geographic and industrial maps, indicators, expert decision outputs, etc. **Output plug-ins** provide data storage in XML format. Stored data may be exported to viewable HTML and Microsoft Excel formats, as well as in Web.



Network plug-ins are responsible for remote control of the equipment. Measurement process may be monitored in real time using web cameras.

To integrate the above set of modules, **control plug-ins** are used. They describe measurement and control methods. For example, it can be simple chemical titration, or industrial neutralization of a toxic waste with a equivalent quantity of suitable reagent. Such plug-ins may be simple **scripts** processed by the core script engine, or fully-functional plug-ins written on **any .NET language.**

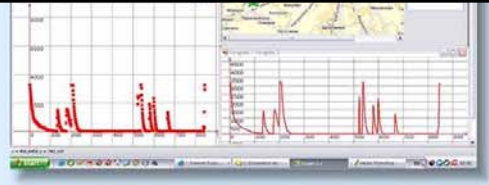


Now, this framework is used in a range of applications. It is compatible with a new fast (10-12 persons per hour) potentiometric system for **early diagnostics of mammal cancer.** The software automates the diagnostic process and reports the conclusion to operator. This diagnostics **can be performed remotely** and may involve remote experts consulting.

Another important application is monitoring and **geographical mapping** of data received from remote **chemical composition** sensors. It is aimed at **industrial ecology, fire security control, and prevention of terrorism.** The module detects **leakage of toxic or explosive substances** and generates **alarm signals.** Once the threshold concentra-

● TITRATION OF LIQUIDS AND ECOLOGICAL MONITORING

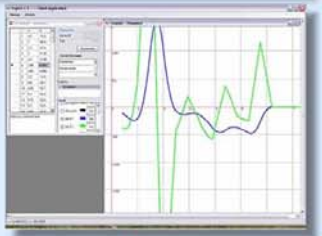
Chemical titration widely used in chemical and biochemical analyses, when a reactant is gradually added to the sample and the value measured is the volume of the added reactant. This addition produces some critical event, which is normally **detected by sensor** or color change of chemical indicator (acid-base or pH-titration, etc). The software provides the possibility to **receive the pH and volume data dynamically** and to **process them in real time.** It allows to plot the data measured and cubic-splined, the first and the second derivatives both in normal and Gran coordinates of the experimental pH value versus volume added. These plots can be saved as graphic files. Whole measurement together with custom labels and comments may be **saved in XML.**



The program has also a **distributed version,** which consists of the measuring **server** and remote operators modules. This makes possible to perform the measurements on one computer and obtain them simultaneously on another computer. The same program module allows to receive the data continuously from a **wide range of instruments,** which measure the electric conductivity, ionic composition and the concentration of oxygen in natural water.

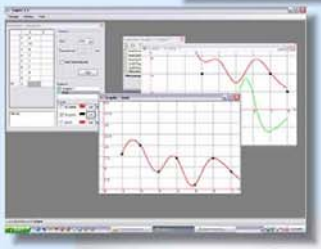
● EARLY MAMMAL CANCER DIAGNOSTICS

The essence of the method is the measurement of the **electric potentials of the acupunctural points** of the patient's body. The distribution of the potentials for a sick person differs from the one for a healthy one, which allows to select the person's risk group with the precision **up to 100%.** For the risk group, 87% of the persons selected have cancer or pre-canceral state. The program allows to receive the data from the instrument online, plot relationships wanted, **generate the conclusion "healthy–suspected"** based on the measured data, and send the report by **e-mail.**



● TOXIC AND EXPLOSIVE GASES DETECTION

The program for the gas detector performs **online monitoring of combustible or explosive substances** on the air. It reads the data from the instrument in the selected intervals of time and processes them. If the selected level of the concentration is exceeded, an **alarm signal** is generated.



In order to provide the gas security a **geomapping module** is developed. It performs online **monitoring of the danger levels** on the loaded geographical or technical map. The detector's image on this map depends on the pollution level. The geomapping module saves the information about the state of the region in **XML format,** which provides the possibility of the further export of the data obtained.

November 13, 2008 11:40 PM -- 12

FRAMEWORK ARCHITECTURE

Data Presentation Level

- Output Conclusions
- Plotting Graphics
- .NET Interface
- Generating Alert Signals
- Mapping Regions
- Web Interface

Data Processing Level

- Saving Statistics
- Online Watching Dependences
- Remote Data Access
- Values Estimation
- Data Integrity Check

Device Drivers Level

- Input Message Format
- Connection Channel
- Callback Possibility
- Device Errors Check
- Remote Devices

Module Loading

Dynamic Library

- **Plug-In**
  - Active Types
    - *Class Factories*
    - *Shared Objects*
    - *Remote Objects*
  - ...
- **Plug-In**
  - Active Types
  - ...

Types Reflection

Saving to plug-ins cache

Modules Loader Engine

- Activation
- Registration
- Sharing
- Remote channels registration

The Core

Objects	*Class Factories*
Object1	***Factory 1***
GUID = {8AD2E6D0...} Name = "Document1" Remote = False	GUID = {7AB2E6A8...} Type = "DocumentForm"
...	...
Object N	***Factory N***

Device drivers

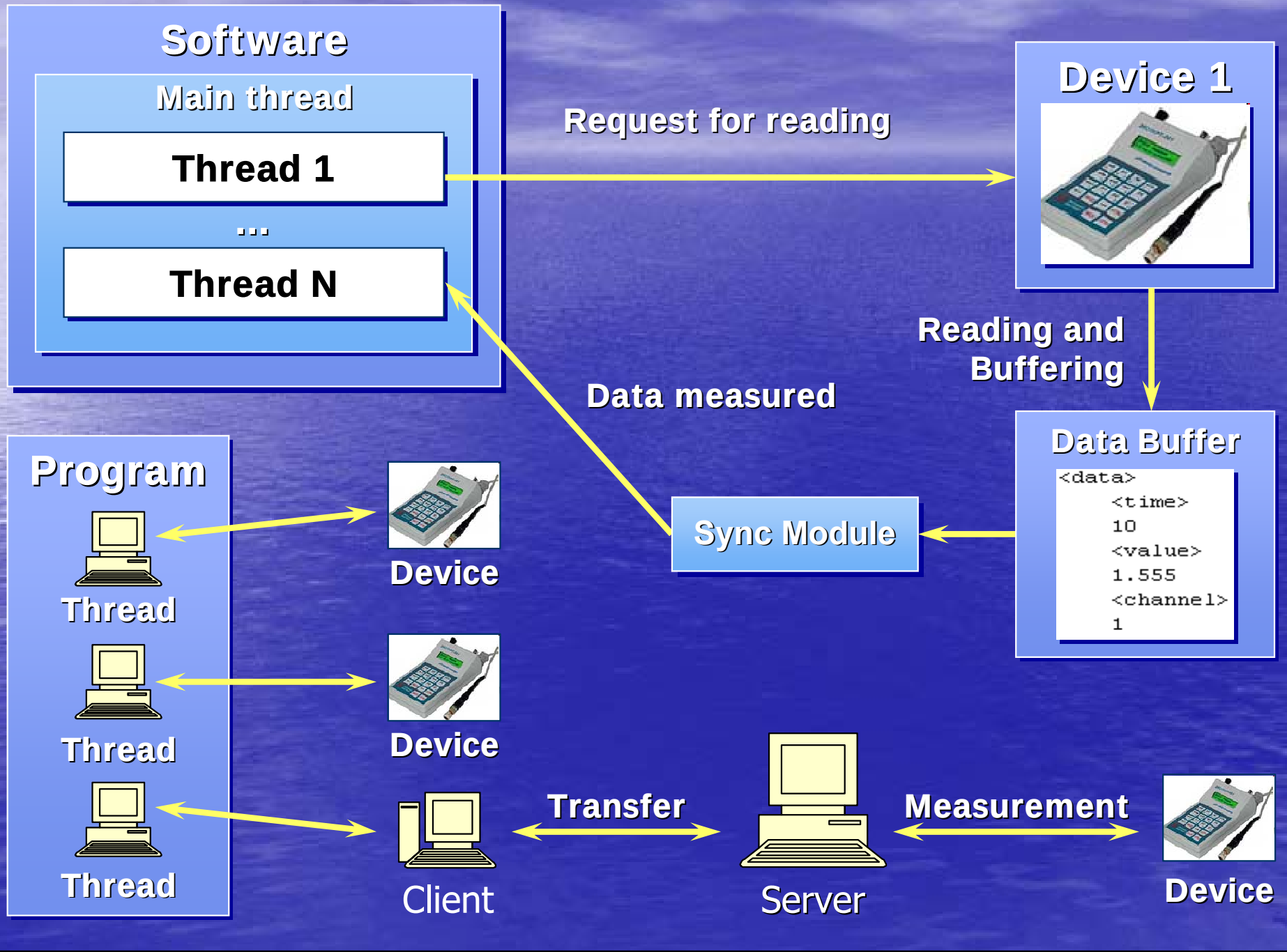
Remoting Channels

Application

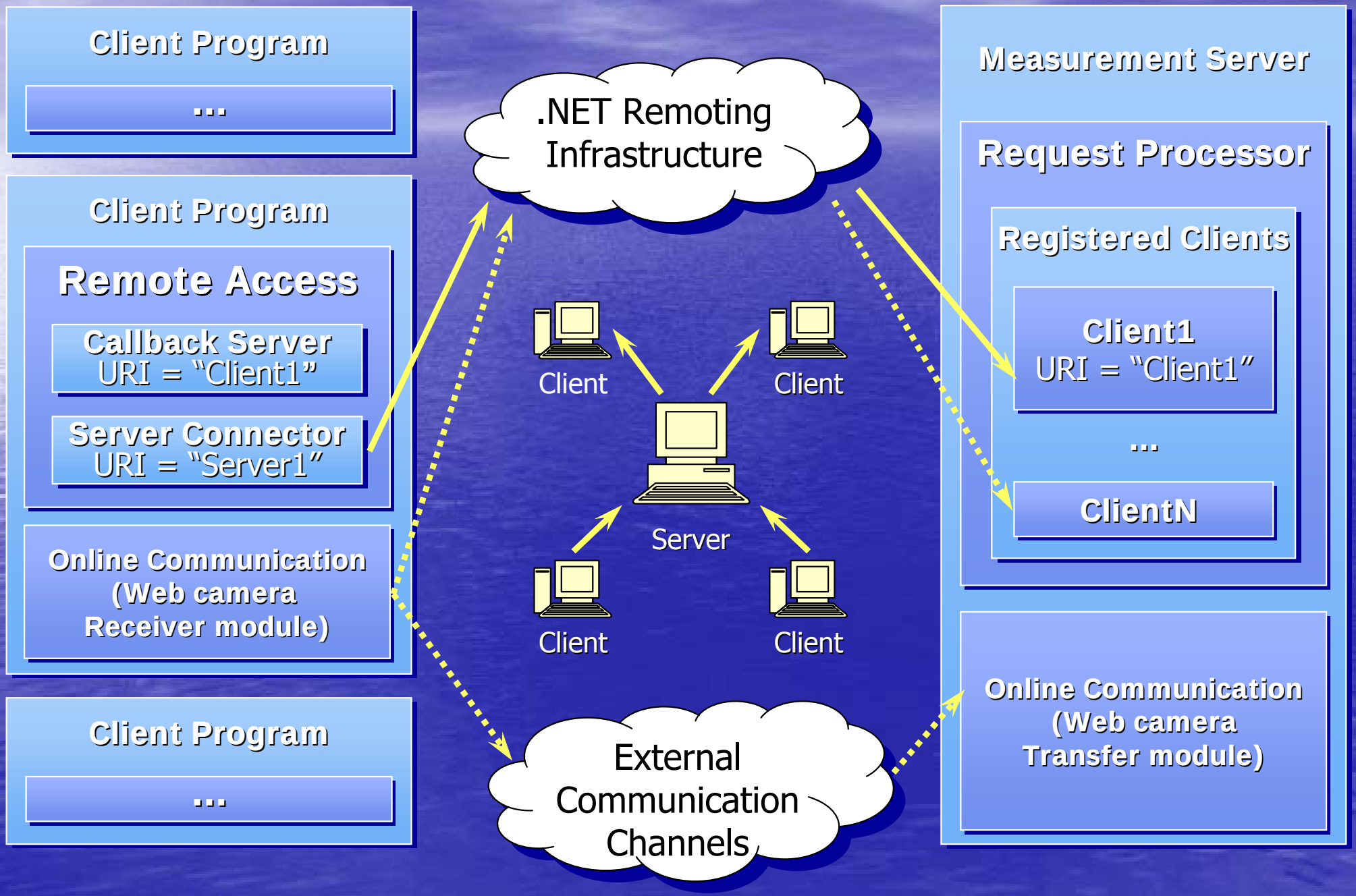
Presentation Level

Geo-Mapping

Device Connection



REMOTE COOPERATION

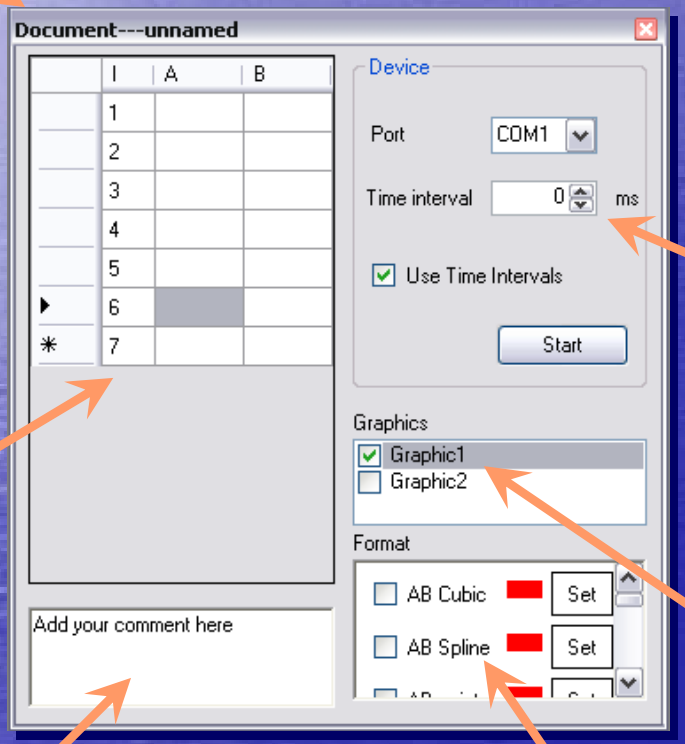


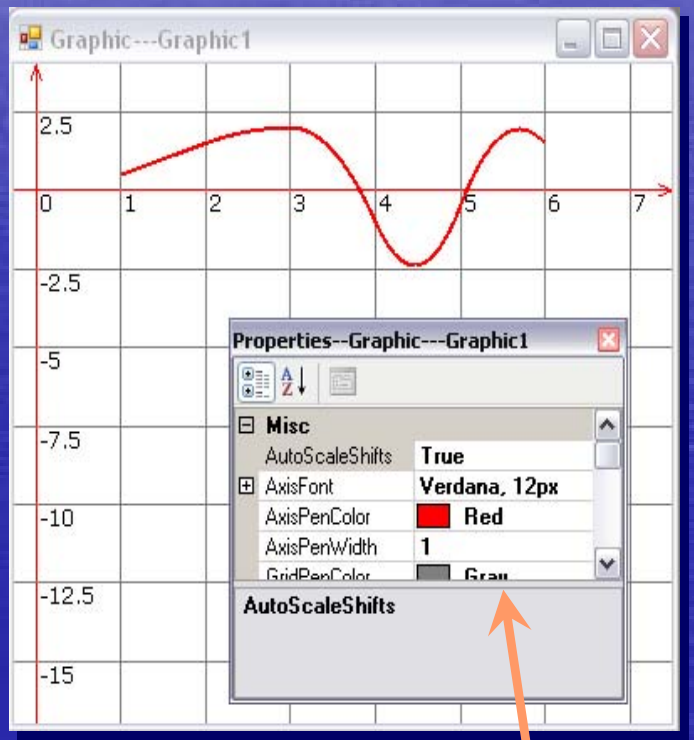
SOFTWARE INTERFACE

Title

Document Window

Plot Window





Device Settings

Data table

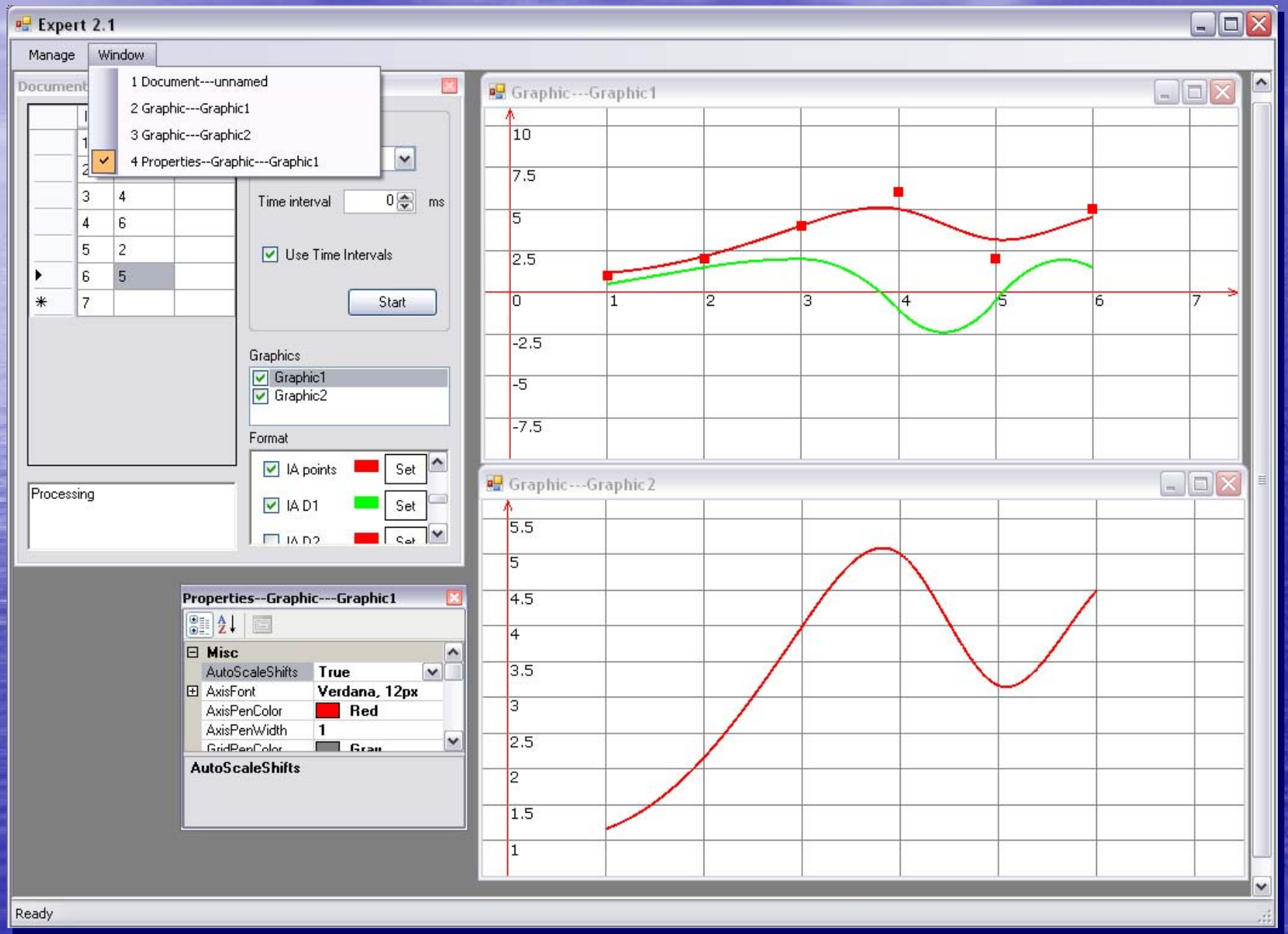
Comments

Choices of plot view

Available windows list

Plot properties

EXAMPLE OF MEASUREMENT SESSION



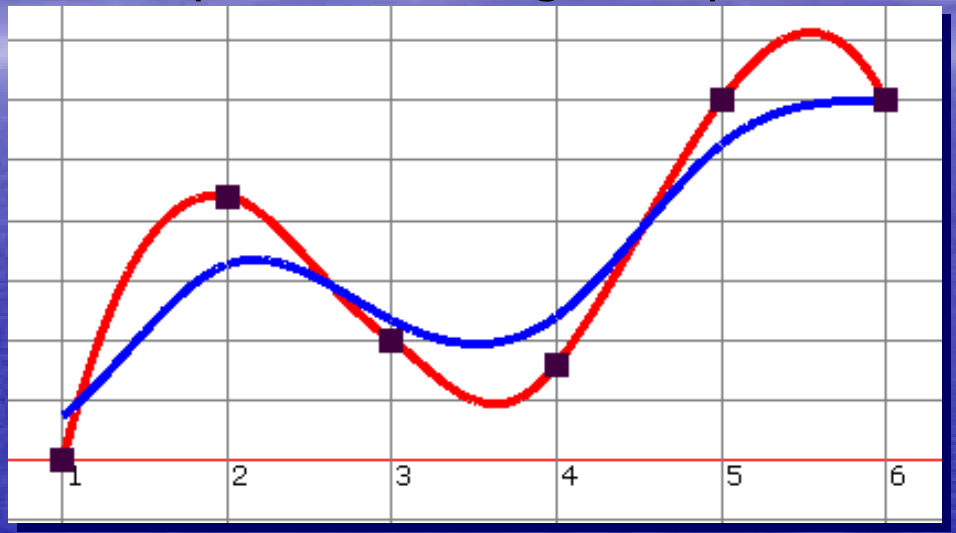
Data Processing Using Cubic Splines

Spline Definition

$$X = fx(t)$$
$$Y = fy(t)$$
$$1 >= t >= 0$$

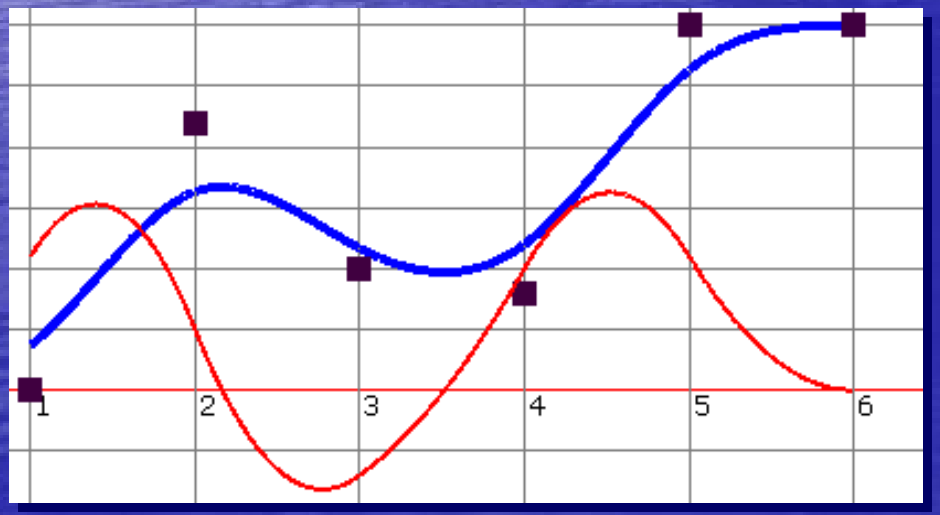
Don't require the plot to pass through the dots exactly

Spline smoothing example

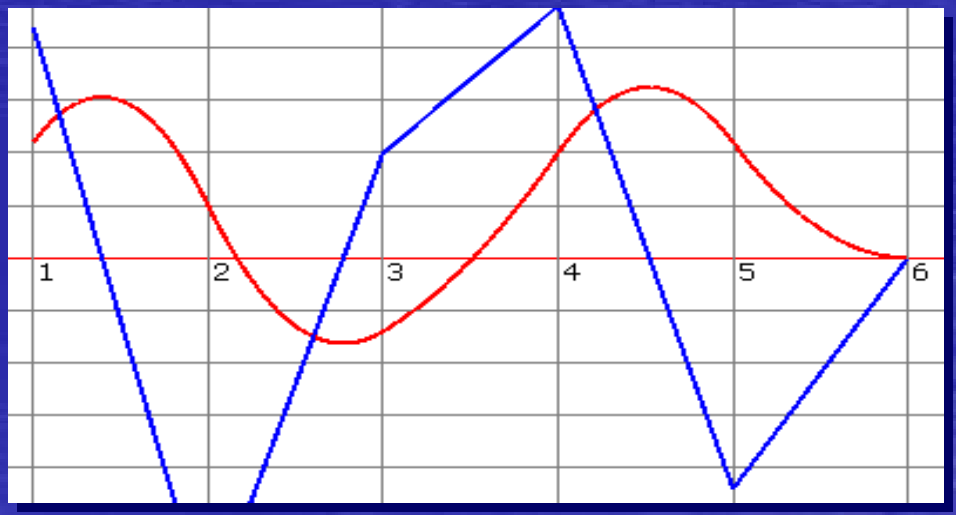


The Advantages

First derivative



Second derivative

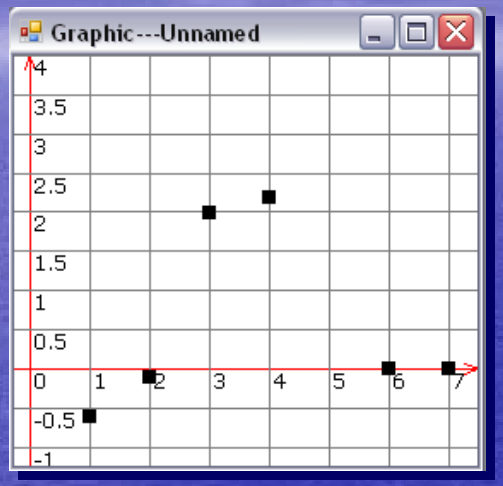


Plotting the Dicrete Data

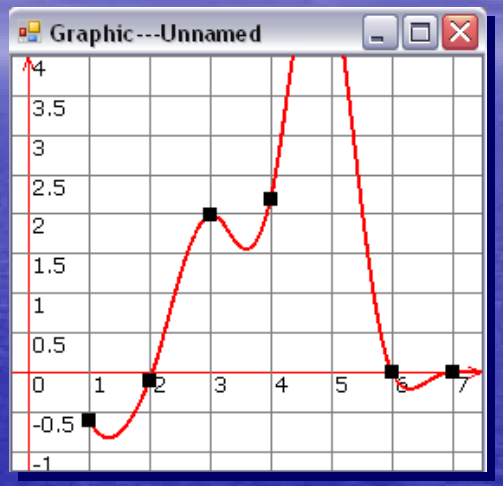
Device Data

A	B
1	-0.6
2	-0.1
3	2
4	2.2
5	5

Discrete plot →

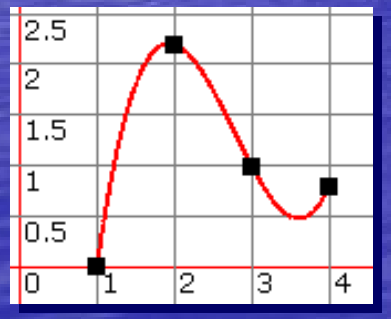


Processing →



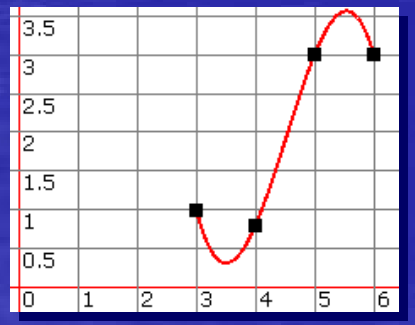
Data Processing

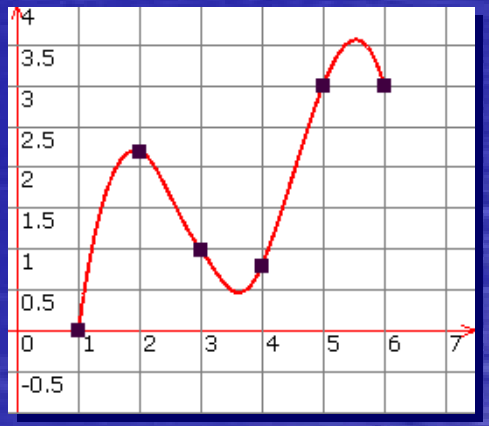
Cubic polynom through x1, x2, x3, x4



+

Cubic polynom through x3, x4, x5, x6



Weighted sum

in [x3; x4]