

# ЗАСТОСУВАННЯ СПЕЦІАЛІЗОВАНИХ ПРОГРАМ ТА ДИСТАНЦІЙНИХ ТЕХНОЛОГІЙ ДЛЯ ОБРОБКИ ДАНИХ СТРУКТУРНОГО АНАЛІЗУ

Шовкопляс О.А.<sup>1,\*</sup>, керівник навчально-методичного відділу  
електронного навчання ОМЦТЕН

Соболь О.В.<sup>2</sup>, д.ф.-м.н., проф.

<sup>1</sup>*Сумський державний університет*

<sup>2</sup>*Національний технічний університет “ХПІ”*

*\*sana@mss.sumdu.edu.ua*

Оволодіння навичками побудов емпіричних моделей з використанням програм для обробки експериментальних даних, вміння оцінити коректність отриманих результатів є необхідними складовими у підготовці кваліфікованих спеціалістів. Застосування ВНЗ дистанційних технологій поряд із традиційними формами для отримання практичних знань в області обробки даних структурного аналізу значно підвищує рівень та якість підготовки майбутніх науковців.

Найбільшу ефективність в отриманні наукових результатів показують ті технології, що орієнтовані на спільну роботу учасників. Дослідження можуть проводитися синхронно або асинхронно в залежності від поставленої задачі.

Обробка даних здійснюється із використанням адаптованих до вирішення задач структурного аналізу спеціалізованих програмних пакетів “SpecDec” і “New\_profile”, які є основою прикладної частини курсу “Комп’ютерне матеріалознавство”. На всіх етапах обробки експериментальних даних передбачена можливість порівняння ефективності різних алгоритмів, закладених у програмах.

Важливою процедурою первинної обробки є згладжування експериментальних даних, які можуть суттєво відрізнятись від реальної залежності через накладання на корисний сигнал шумів різного походження. В програмних пакетах для цього використовується спосіб цифрової фільтрації – “ковзне середнє”. Найпростіше згладжування проводиться за допомогою лінійного наближення, яке дозволяє знизити рівень шумів на величину, що

приблизно дорівнює кореню квадратному з числа використуваних точок. У той же час лінійний фільтр може спотворювати й корисну компоненту сигналу, зокрема, знижувати пікову інтенсивність. Для певних випадків доцільно використувувати передбачене програмою кубічне поліноміальне згладжування.

Наступним етапом попередньої обробки експериментальних рентгендіфрактограм є операція по відокремленню фону. Спосіб реалізації цієї процедури залежить від виду експериментальних даних.

Ручний вибір параметрів лінійного косого фону може бути використаний тільки для випадків обробки профілів з “обірваними хвостами”, тобто для тих спектрів, до яких через неповноту інформації можна застосувати апробований раніше підхід обробки аналогічних масивів. Частіше відокремлення лінійного фону відбувається за методом найменших квадратів (МНК). Третій варіант проведення зазначеної процедури передбачає повністю автоматичне визначення параметрів лінійного або криволінійного фону.

Декомпозиція складних спектрів відбувається за методикою повнопрофільного аналізу, тобто, моделюється контур, який послідовно уточнюється шляхом додавання нових ліній і варіюванням їх параметрів для найкращого збігу з реальним профілем. Критерієм точності визначення параметрів слугує величина середнього остаточного відхилення. Для пошуку оптимальних значень параметрів використовуються методи мінімізації Хука-Дживса, Нелдера-Міда, спряжених напрямків Пауела, Давідона-Флетчера-Пауела та Левенберга-Маркуарта.

Результат декомпозиції складного профілю (кількість компонент, їх інтенсивність і положення) є основою для проведення якісного фазового аналізу. Осмислений вибір студентами старших курсів рішення в умовах багатопараметричної задачі аналізу структурного стану матеріалу є основою діяльності випускників спеціальностей матеріалознавчого профілю в умовах реального промислового підприємства.

Електронні засоби та дистанційні технології для навчання протягом життя: тези доповідей ІХ Міжнародної науково-методичної конференції, м. Суми, 14–15 листопада 2013 р. / Відп. за вип. В.В. Божкова. - Суми: СумДУ, 2013. - С. 86-87.