

УДК 004.3'2

В.М. Дмитриев, Т.В. Ганджа, В.В. Ганджа, А.В. Сторчак

Вольтамперометрический комплекс для анализа химических растворов на основе многоуровневой компьютерной модели

Рассматривается методика построения вольт-амперных характеристик химических растворов, реализованная в рамках нового программно-аппаратного комплекса, представленного в формате многоуровневой компьютерной модели. Для его создания и разработки алгоритмов его функционирования используются три взаимосвязанных языка: язык программирования измерительно-управляющих контроллеров X-Robot, язык моделирования алгоритмических выражений, использующийся для разработки алгоритмов построения и анализа вольтамперных характеристик химических растворов, и язык виртуальных инструментов и приборов, позволяющий формировать панели визуализации и интерактивного управления параметрами комплекса.

Ключевые слова: вольт-амперная характеристика, химический раствор, вольтамперометрия, виртуальные инструменты и приборы.

В настоящее время для определения содержания вредных веществ в химических растворах, а также в продуктах питания находит широкое распространение метод вольтамперометрии. Его суть состоит в построении вольт-амперных характеристик (ВАХ) исследуемых растворов с последующим анализом их экстремумов при различных значениях напряжения. В настоящее время выпускаются приборы [1], производящие эксперименты по заранее сформированным и записанным методикам. Однако для выявления различных примесей в растворах, а также для быстрого и точного определения их концентраций наряду с высокоточным построением вольт-амперных характеристик требуется формировать новые виды анализа ВАХ с возможностью построения их производных и других кривых.

В данной работе описывается вольтамперометрический комплекс (ВАК), реализованный с использованием архитектуры многоуровневой компьютерной модели, интегрированной с аппаратной частью комплекса и позволяющей представить в графическом виде алгоритмы проведения различных видов построения и анализа характеристик, а также разрабатывать панели визуализации и интерактивного управления его параметрами и характеристиками нужной конфигурации.

Структура вольтамперометрического комплекса. Вольтамперометрический комплекс, предназначенный для построения ВАХ и определения на их основе концентраций входящих в химические растворы тяжелых металлов и других веществ, представляет собой аппаратно-программный комплекс. Его аппаратная часть, управляемая сценарием на языке X-Robot [2], включает в себя:

- контроллер управления CM4 с установленным интерпретатором X-Robot, подключенный к персональному компьютеру по шине USB;
- измерительный контроллер CM5;
- плату измерения, расположенную в непосредственной близости от электродов.

Плата измерения, на которой установлены АЦП и усилители ЦАП, подключается к измерительному контроллеру плоским кабелем. Она должна быть помещена в заземленный металлический экран. Связь между контроллерами CM4 и CM5 осуществляется через оптические кабели для снижения вносимых шумов.

Интерфейс контроллера CM4 с PC выполнен на основе микросхемы FTDI, осуществляющей преобразование шины USB в параллельный байтовый интерфейс. Со стороны PC интерфейс поддерживается драйвером, представленным библиотекой ftdi2xx.dll, который отвечает за организацию канала передачи данных между PC и конечной точкой устройства, организованной на микросхеме FTDI.

Программная часть ВАК представляет собой виртуальный прибор «Анализатор ВАХ», реализованный на основе многоуровневой компьютерной модели (МКМ) [3], на взаимосвязанных уровнях которой реализуются:

- на *объектном уровне* реализуется взаимосвязь компьютерной модели, являющейся программной частью ВАК, с его аппаратной частью;
- на *логическом уровне* в формате алгоритмических компонентных цепей (АКЦ) формируются и подвергаются модификации алгоритмы функционирования комплекса, задачами которых является обработка измеренных контроллером вольт-амперных характеристик и формирование команд управления протекающими в нем параллельными процессами;
- на *визуальном уровне* создается панель визуализации результатов и интерактивного задания параметров вольтамперометрического комплекса.

Работа аппаратной части ВАК осуществляется под управлением сценария, написанного на языке X-Robot. Он представляет собой набор параллельно функционирующих процессов, каждый из которых ожидает кадр определенной команды от программной части. Данные процессы направлены на установление значений напряжений или временных интервалов, участвующих в подготовке и проведении эксперимента. Главный процесс предназначен для непосредственного проведения опыта, направленного на построение вольт-амперной характеристики. Этот опыт, согласно методу инверсионных вольтамперометрических измерений [4], включает в себя этапы очистки электродов, накопления заряда, успокоения и развертки, в ходе которой производится изменение напряжения на электродах и измерения протекающего через них тока.

Взаимодействие аппаратной части ВАК с его программной частью производится путем передачи блоков данных длиной от 4 до 1023 байтов. Любой участвующий в обмене данными блок оформляется в виде кадра – массива байтов, имеющего определенную структуру. Сценарий, осуществляющий управление аппаратной частью ВАК, может обрабатывать любые типы кадров, в котором указывается длина кадров, номер команды, а также значения параметра этой команды.

Формирование кадров, направленных на выполнение определенных команд, осуществляется алгоритмами, представленными в виде алгоритмических компонентных цепей, на основе заданных пользователем значений. Их взаимодействие со сценарием, написанным на языке X-Robot, реализовано в виде соответствующих компонентов логического уровня МКМ. К таким компонентам относятся:

- компонент «Запуск/останов контроллера» (рис. 1), который по сигналу C_1 , поступающему по связи $S_1 = (n_1, b_1)$, производит инициализацию и запуск контроллера, а по сигналу C_2 , поступающему по связи $S_2 = (n_2, b_2)$, осуществляется останов работы контроллера;

- компонент «Чтение данных» (рис. 2), осуществляющий чтение данных измерения наблюдаемых характеристик, который в общем случае может читать данные с нескольких датчиков с последующей передачей измеренных значений на средства математической обработки и визуализации. Применительно к комплексу ВАК данный компонент получает от контроллера значения тока при определенных значениях напряжения;

- компонент «Команда контроллеру» (рис. 3), на входы $S_1 = (n_1, b_1)$ и $S_2 = (n_2, b_2)$ которого поступают младший и старший байты номера определенной команды соответственно, а на вход $S_3 = (n_3, b_3)$ принимается целочисленное значение параметра, которое должно быть передано вместе с командой. Сформированный массив передается контроллеру, когда на вход $S_4 = (n_4, b_4)$ поступит сигнал о выполнении команды.

С помощью перечисленных компонентов в совокупности с компонентами, выполняющими элементарные математические операции, на логическом уровне МКМ реализуются алгоритмы функционирования ВАК, заключающиеся в подготовке определенных команд, приеме и обработке данных, на основе которых строятся вольт-амперные характеристики химических растворов

Лицевая панель виртуального прибора «Анализатор ВАХ». Принимая во внимание обобщенную методику построения вольт-амперных характеристик химических растворов, на лицевой панели виртуального прибора «Анализатор ВАХ» располагаются визуальные компоненты для задания следующих характеристик: потенциал и время очистки; потенциал и время накопления заряда; минимальное и максимальное значения потенциала развертки; ее шаг или количество точек в развертке; усиление сигнала. Все напряжения на лицевой панели прибора задаются в милливольтгах (мВ), а временные интервалы – в секундах.

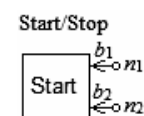


Рис. 1. Компонент «Запуск/остановка контроллера»

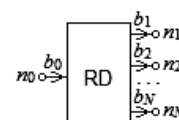


Рис. 2. Компонент «Чтение данных»

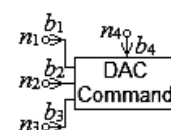


Рис. 3. Компонент «Команда контроллеру»



Рис. 4. Лицевая панель прибора «Анализатор ВАХ»

мационные кнопки: Состояние, Очистка, Накопление, Успокоение, Развертка.

Алгоритм функционирования прибора «Анализатор ВАХ». Для обеспечения функционирования прибора «Анализатор ВАХ» на его логическом уровне располагаются соответствующие алгоритмы обработки измеренных вольт-амперных характеристик и формирования команд управления контроллером.

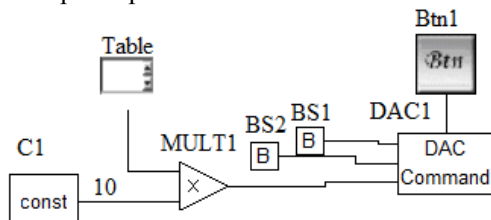


Рис. 5. Алгоритмическая компонентная цепь формирования значений напряжений

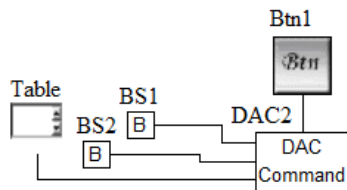


Рис. 6. Алгоритмическая компонентная цепь формирования временных интервалов

повой вид которых приведен на рис. 6. Заданное с помощью цифрового табло со спином Table значение передается непосредственно в компонент команды контроллеру DAC2. Номер команды, который входит в передаваемый контроллеру массив, задается источниками BS1 и BS2.

Непосредственное построение вольт-амперных характеристик химических растворов, подлежащих исследованию методом вольтамперометрии, производится алгоритмической компонентной цепью, представленной на рис. 7.

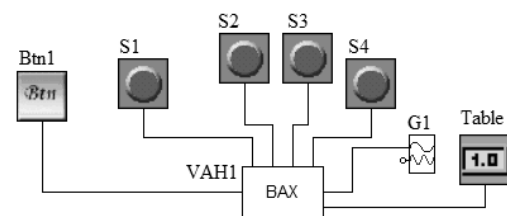


Рис. 7. Алгоритмическая компонентная цепь построения вольт-амперных характеристик

данных согласно заданным значениям минимального и максимального токов. После чего подготовленные данные отправляются на компонент-график G1, где осуществляется построение характеристик. На цифровое табло Table производится передача количества принятых от контроллера точек формируемой ВАХ.

Кроме того, на лицевой панели прибора (рис. 4) установлены кнопки, при нажатии на которые формируются соответствующие команды в виде массивов с последующей их передачей в контроллер. Также она содержит кнопки запуска и останова контроллера ВАХ. В качестве информации о его состоянии на лицевой панели прибора расположены инфор-

Для передачи команд установки соответствующих потенциалов (потенциала очистки, накопления, начального и конечного потенциала развертки) применяются АКЦ, экземпляр которых представлен на рис. 5.

Напряжение, заданное пользователем в милливольт-тах в цифровом табло со спином Table, поступает на компонент MULT1, где согласно требованиям языка X-Robot умножается на 10 и передается в компонент DAC1, который представляет собой команду, передаваемую контроллеру. С помощью источников байтовых значений BS1 и BS2 в компонент DAC1 передаются младший и старший байты номера команды соответственно. После того как эти значения получены компонентом DAC1, по нажатию на кнопку Btn1 производится запись массива, соответствующего команде, в контроллер и ее непосредственное выполнение.

Команды формирования временных интервалов, количества шагов (точек на ВАХ) представлены АКЦ, типового вида которых приведен на рис. 6. Заданное с помощью цифрового табло со спином Table значение передается непосредственно в компонент команды контроллеру DAC2. Номер команды, который входит в передаваемый контроллеру массив, задается источниками BS1 и BS2.

Выполнение сформированной программы построения ВАХ производится по нажатию пользователем кнопки Btn1. В этом случае компонентом VAH1 производится формирование команды запуска цикла измерения. Далее этот компонент начинает читать кадры, приходящие от контроллера. Если пришел кадр переключения этапов эксперимента, то производится формирование и отправка сообщений с соответствующими значениями на компоненты S1...S4. Если пришел кадр с данными, то производится перекодирование

Разработанные компоненты взаимодействия многоуровневой компьютерной модели с контроллером и основанные на них алгоритмические компонентные цепи в совокупности с изменяемыми программами управления контроллером, написанными на языке X-Robot, позволяют формировать разнообразные схемы выполнения экспериментов, направленных на построение и анализ вольтамперных характеристик химических растворов и полупроводниковых приборов.

Построение ВАХ химических растворов для их анализа методом вольтамперометрии. Для анализа растворов химических веществ на предмет исследования нахождения в них вредных веществ и тяжелых металлов согласно сформированной для определенного вещества методике следует ввести необходимые данные в соответствующие поля виртуального прибора «Анализатор ВАХ» и запустить эксперимент. На рис. 8 приведена построенная в ходе эксперимента вольтамперная характеристика испытуемого раствора, в который была добавлена проба ртути.

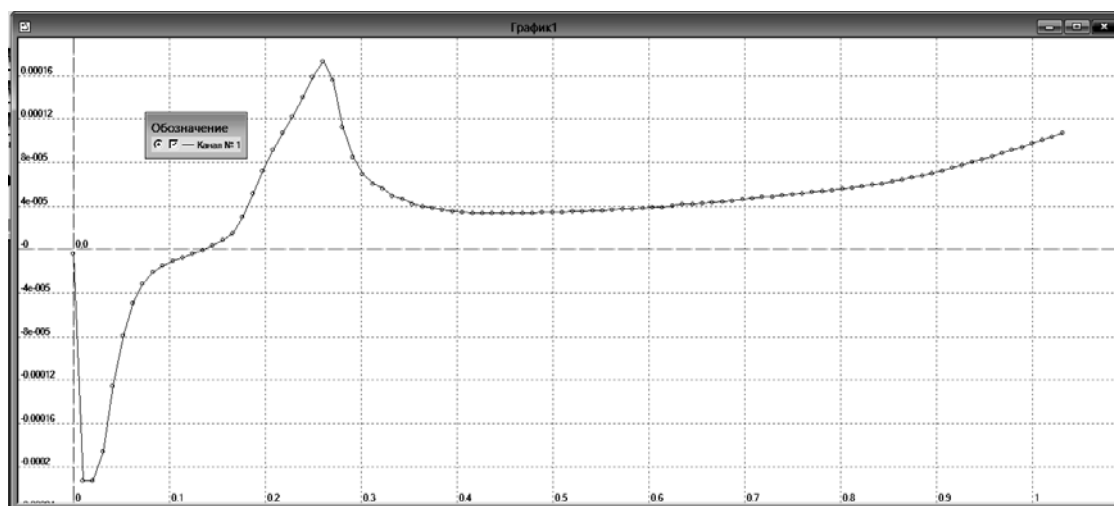


Рис. 8. Вольт-амперная характеристика испытуемого раствора, содержащего ртуть

Максимум тока свидетельствует о содержании ртути в испытуемом растворе. Согласно методике осуществляется пересчет максимального значения тока в ее концентрацию.

Заключение. В настоящее время актуальным является быстрое выполнение опытов для определения содержания и концентрации вредных веществ в различных химических растворах (пищевой продукции, лекарственных препаратах и других веществ). Многообразие химических веществ, а также испытуемых растворов требуют проведения разнообразных методик над одним и тем же образцом.

В данной работе описан новый вольтамперометрический комплекс, который представляет собой аппаратно-программный комплекс, реализованный с применением измерительного контроллера и контроллера управления, работающего под управлением сценария, написанного на языке X-Robot, а также программной части, реализованной в системе виртуальных инструментов и приборов. Преимуществом данного комплекса является возможность разработки различных алгоритмов построения вольт-амперных характеристик химических растворов с применением блоков обработки результатов. Это позволяет, формируя представленные в графическом формате алгоритмические компонентные цепи, создавать новые методики построения и анализа вольт-амперных характеристик.

Также разработанный и представленный в данной работе вольтамперометрический комплекс может быть использован для построения и анализа вольт-амперных характеристик различных полупроводниковых приборов (диодов, стабилитронов, транзисторов), автоматизируя тем самым учебные и научно-исследовательские эксперименты.

Литература

1. Комплекс вольтамперометрический СТА [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://granat-e.ru/complecs_sta.html, свободный (дата обращения: 24.11.2014).
2. Мальцев Ю.И. Язык управления механизмами X-ROBOT // Электронные средства и системы управления: матер. докладов IX Междунар. науч.-практ. конф. (30–31 октября 2013 г.): в 2 ч. – Ч. 2. – Томск: В-Спектр, 2013. – С. 114–118.

3. Дмитриев В.М. Принцип формирования многоуровневых компьютерных моделей SCADA-систем для управления сложными технологическими объектами / В.М. Дмитриев, Т.В. Ганджа // Информатика и системы управления. – 2013. – № 2 (36). – С. 24–36.

4. Применение метода инверсионной вольтамперометрии в анализе экологических объектов [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.kepc.com.ua/stati/stati/post-inv-va>, свободный (дата обращения: 24.11.2014).

5. Дмитриев В.М. Редактор виртуальных инструментов и приборов / В.М. Дмитриев, Т.В. Ганджа, Т.Ю. Коротина // Приборы и системы. Управление. Контроль. Диагностика. – 2009. – № 6. – С. 19–24.

Дмитриев Вячеслав Михайлович

Д-р техн. наук, профессор, зав. каф. моделирования и системного анализа (МиСА) ТУСУРа

Тел.: (382-2) 41-39-15

Эл. почта: dmitriewvm@gmail.com

Ганджа Тарас Викторович

Канд. техн. наук, доцент каф. МиСА ТУСУРа

Тел.: (382-2) 41-39-15

Эл. почта: gandgatv@gmail.com

Ганджа Василий Викторович

Аспирант каф. МиСА ТУСУРа

Тел.: (382-2) 41-39-15

Эл. почта: vasivik@gmail.com

Сторчак Алексей Викторович

Аспирант каф. МиСА ТУСУРа

Тел. (382-2) 41-39-15

Эл. почта: Sav9101983@gmail.com

Dmitriev V.M., Gandzha T.V., Gandzha V.V., Storchak A.V.

Voltammetric system for the analysis of chemical solutions on multilevel computer models

The technique of construction of the current-voltage characteristics of chemical solutions, implemented in the framework of the new hardware and software system is presented in the format of the multilevel computer model. For the establishment and development of algorithm for its functioning there are three interrelated language: a measurement and control X-Robot language, algorithmic modeling expression language are used to develop algorithm design and analysis of current-voltage characteristics of chemical solutions, and the language of virtual instrument and devices, allowing to form panel visualization and interactive control parameters of the complex.

Keywords: current-voltage characteristic a chemical solution, voltammetry, virtual instruments and devices.