

Документ подписан простой электронной подписью  
Информация о владельце:  
ФИО: Локтионова Оксана Геннадьевна  
Должность: проректор по учебной работе  
Дата подписания: 05.05.2022 22:57:01  
Уникальный программный ключ:  
0b817ca911e6668abb13a5d426d39e5f1c11eabf73e943df4a4851fda56d089

МИНОБРАЗОВАНИЯ РОССИИ  
Федеральное государственное бюджетное образовательное  
учреждение высшего образования  
«Юго-Западный государственный университет»  
(ЮЗГУ)

Кафедра нанотехнологий, микроэлектроники,  
общей и прикладной физики

УТВЕРЖДАЮ  
Проректор по учебной работе  
О.Г. Локтионова  
« 15 » 05 2021 г.



**ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ  
МИКРО- И НАНОСИСТЕМ**

методические указания к выполнению лабораторных работ  
для студентов направления подготовки  
28.04.01 «Нанотехнологии и микросистемная техника»

Курск – 2021

УДК 53

Составители: А.В. Кузько

Рецензент

Директор РИЦ, д.ф.-м.н., профессор А.П. Кузьменко

**Информационные технологии микро- и наносистем:** методические указания к выполнению лабораторных работ для студентов направления подготовки 28.04.01 «Нанотехнологии и микросистемная техника» / Юго-Зап. гос. ун-т; сост.: Кузько А.В. Курск, 2021. 57 с.: ил. 38. Библиогр.: с. 57.

Излагаются методические рекомендации по выполнению лабораторных работ, в которых изучаются обработка изображений с помощью программного обеспечения Gwyddion, интерполяция экспериментальных данных кубическими сплайнами, расчет и визуализация магнитного, электрического и температурного полей методом конечных элементов в программной среде FEMM, программирование микроконтроллера в среде Arduino IDE.

Методические указания соответствуют требованиям Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования и учебного плана направления подготовки 28.04.01 Нанотехнологии и микросистемная техника, степень (квалификация) – магистр. Предназначены для студентов всех форм обучения.

Текст печатается в авторской редакции

Подписано в печать 15.04.21. Формат 60 x 84 1/16.

Усл. печ. л. 2,0. Уч.-изд. л. 0,68. Тираж экз. Заказ 284. Бесплатно.

Юго-Западный государственный университет.

305040 Курск, ул. 50 лет Октября, 94.

## ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА №1

### Работа с программой обработки данных сканирующей зондовой микроскопии **Gwyddion**

#### Цель работы:

- 1) ознакомиться с приемами работы и возможностями программы обработки данных сканирующей зондовой микроскопии **Gwyddion**;
- 2) выполнить обработку АСМ изображений медного и алюминиевого напыления на кремниевой подложке;
- 3) получить распределение по размерам зерен меди;
- 4) сравнить профили отдельных зерен меди и алюминия (высота, радиус кривизны).

**Приборы и принадлежности:** программное обеспечение **Gwyddion**, LibreOffice Calc; АСМ изображения слоев меди и алюминия, полученных магнетронным напылением на кремниевой подложке (0,5 x 0,5 мкм), образец СЭМ-изображения.

#### ***ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ВВЕДЕНИЕ***

**Gwyddion** - это модульная программа анализа данных СЗМ. В первую очередь она предназначена для анализа полей высот, полученных различными техниками сканирующей зондовой микроскопии (АСМ, МСМ, СТМ, СБОМ), но в общем случае её можно использовать для анализа любых полей высот или (монохромных) изображений, например, для анализа данных профилометрии или карт толщины, построенных картирующей спектрофотометрией. **Gwyddion** является свободным программным обеспечением с открытым исходным кодом, выпущенным под лицензией GNU General Public License (GNU GPL).

Основной идеей при разработке **Gwyddion** было создать модульную программу для анализа двумерных данных, которую можно легко расширять отдельными модулями без пересборки ядра. Более того, поскольку программа является свободной, это позволяет предоставить исходный код разработчикам и пользователям, что существенно облегчает дальнейшее её улучшение.

**Gwyddion** в настоящий момент можно использовать на операционных системах семейства Linux/Unix (включая Mac OS X) и Microsoft Windows. Разработка возможна на всех поддерживаемых платформах. Для создания графического интерфейса пользователя использовались библиотеки Gtk+, поэтому программа может быть легко портирована на любую систему, поддерживающую Gtk+.

Разработка **Gwyddion** сейчас поддерживается Чешским институтом метрологии (Czech Metrology Institute). Проект был начат как часть инициативы Nanomet (проходящей по программе Euromet) в августе 2004 года.

## **Установка Gwyddion**

Исходные коды и двоичные файлы **Gwyddion** можно загрузить со страницы download сайта проекта или напрямую со страницы загрузки [SourceForge.net](https://sourceforge.net). Порядок установки слегка меняется в зависимости от используемой операционной системы и различных методов установки, описанных в следующих разделах. **Gwyddion** требует или может использовать различные программные библиотеки. Если вы устанавливаете собранные пакеты это обычно не должно вас волновать, поскольку это задача сборщика пакета убедиться, что всё нужное доступно в системе. Однако, это является важным, если вы собираете **Gwyddion** из исходного кода.

Чтобы попробовать **Gwyddion** в деле вам, возможно, понадобятся образцы файлов **Gwyddion**. Они сохранены в родном формате **Gwyddion** и представляют собой типичные данные ACM.

*Примечание:* Отмена установки

Если вы хотите удалить **Gwyddion**, перейдите в Пуск→Панель управления→Установка и удаление программ (Пуск→Панель управления→Программы и компоненты в некоторых версиях Windows) и выберите **Gwyddion**. Этот путь может отличаться в других версиях Windows.

Ключи реестра

Программа установки создаёт следующие нужные ключи в ветке реестра HKEY\_LOCAL\_MACHINE\Software\Gwyddion\2.0:InstallDir Каталог установки, т.е. C:\Program Files\Gwyddion. Чтение этого ключа может быть полезным, чтобы определить, куда ставить дополнения.

*Locale* Язык интерфейса пользователя **Gwyddion**, выбранный при установке. Можно изменить его используя *regedit* чтобы выбрать другой язык.

## **Запуск Gwyddion**

Запуск **Gwyddion** обычно не требует дополнительных настроек. На рабочем окне появится диалоговое окно **Gwyddion**.

Этот раздел определяет некоторые основные концепции и термины, такие, как маски и выделенные области, объясняет организацию данных в **Gwyddion** и описывает интерфейс пользователя.

Для того чтобы начать работать в **Gwyddion**. Пользовательский интерфейс **Gwyddion** достаточно интуитивен, и многое можно узнать просто играясь с настройками. Также можно получить справку о работе текущей активной функции или окна непосредственно из программы **Gwyddion**. Нажатие клавиши **F1** или кнопки Помощь в большинстве окон должно показать онлайн-версию этого руководства в браузере. Стартовая страница руководства может быть показана выбором меню

Информация→Руководство пользователя. Естественно, оно будет работать только если вы подключены к сети и **Gwyddion** может найти подходящий веб-браузер. Если нужно настроить это поведение, смотрите изменение настроек, например, если вы хотите использовать оффлайн-версию этого руководства.

Подсказка Команда Информация→Совет дня показывает советы по обработке данных и рекомендует полезные возможности, которые вы могли упустить.

### Главное окно

Главное окно, также называемое окном инструментов, является одним из двух окон, которые запускаются при старте **Gwyddion** (если не заданы файлы, которые нужно открыть), другое — это браузер данных. Закрытие этого окна приводит к выходу из **Gwyddion**.

Окно инструментов содержит набор меню **Gwyddion** и несколько строк с кнопками, связанными с обычными функциями и инструментами. В меню функции сгруппированы следующим образом:

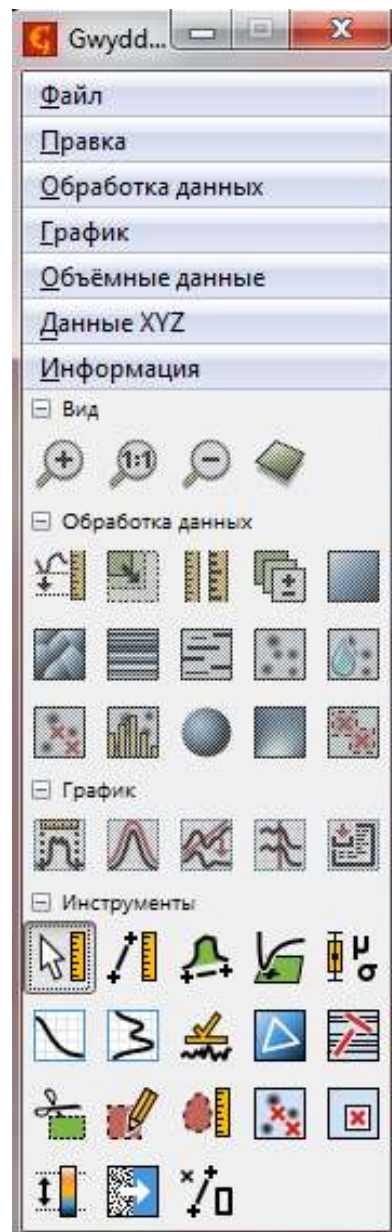
*Файл* объединяет команды, которые используются для загрузки и сохранения файлов. Некоторые из глобальных команд (например, *Выход*) также расположены здесь. История недавно открытых файлов может просматриваться командой Файл→Последние файлы→Предыдущие документы.

*Правка* предоставляет команды управления историей редактирования (Отменить, Повторить) и редакторы для различных глобальных ресурсов, таких как градиенты и материалы для псевдоцветного и трёхмерного представления данных или цвета по умолчанию, используемого для масок.

*Обработка данных* автоматически строится из всех модулей обработки данных, расположенных в каталоге module **Gwyddion** (зависит от операционной системы). Это меню вместе с панелью кнопок Инструменты содержит большую часть команд, которые могут понадобиться для анализа данных СЗМ. Подмножество этих функций также доступно на панели кнопок Обработка данных. Эти кнопки служат кнопками быстрого запуска часто используемых функций из одноимённого меню. Все функции, доступные на этой панели, также можно найти и в меню.

*График* подобен Обработке данных, за исключением того, что состоит из функций для работы с графиками.

Обработка графиков включает в себя аппроксимацию функциями, экспорт данных графиков и т.п. Панель кнопок График снова содержит подмножество наиболее часто используемых функций меню График.





Объём подобно функциям Обработки данных, за исключением того, что содержит функции работы с объёмными данными.

### ***Браузер данных***

Браузер данных — окно, которое показывает структуру текущего активного файла. Оно показывает содержимое так, как оно представлено внутри **Gwyddion**, что может в чём-то отличаться от организации данных в оригинальном программном обеспечении.

**Gwyddion** поддерживает произвольное число двумерных полей данных в файле. В зависимости от контекста в этом руководстве они также называются каналами или полями высоты. Размеры каналов в одном файле могут различаться, физические размеры и значения также могут быть произвольными физическими величинами.

Дополнительно в том же файле могут присутствовать трёхмерные объёмные данные, одномерные данные, представленные в виде графиков, и данные спектроскопии в точках. Окно просмотра данных предназначено для просмотра и управления всеми доступными данными в файле.

#### Управление браузером

Поскольку окно браузера данных всегда показывает структуру текущего активного файла, его содержимое меняется при переходе между разными окнами, которые могут показывать данные различных файлов. Независимо, сохранён ли файл в родном формате **Gwyddion** (.gwy) или в другом, после того, как он загружен, его структура отображается как если бы он хранился в формате **Gwyddion**.

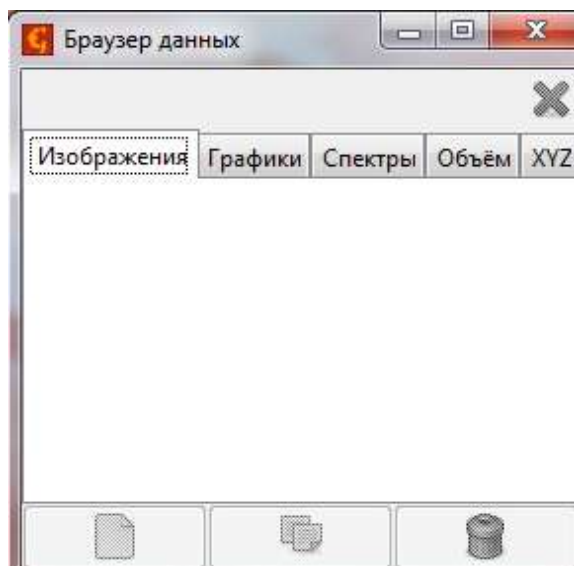
Окно браузера данных содержит четыре вкладки, по одной на каждый тип данных, который может быть в файле:

- Каналы
- Графики
- Спектры
- Объём

Каждый список показывает имена объектов данных и некоторые дополнительные свойства, которые зависят от типа данных. Имена можно править двойным кликом по ним.

Отдельные каналы, графики или спектры можно удалять, копировать или извлечь в новый файл используя кнопки внизу окна браузера данных. Также можно скопировать их в другой файл, перетаскив строку из окна браузера данных в любое окно, относящееся к целевому файлу. Чтобы переименовать элемент данных, его нужно выбрать и нажать Enter или три раза кликнуть по нему мышкой.

Кнопка закрытия в правом верхнем углу браузера данных



закрывает текущий файл, теряя все несохранённые изменения. Файл также закроется когда все окна, отображающие данные из этого файла, будут закрыты.

Если окно списка каналов закрыто, его можно вызвать используя команду *Информация→Показать браузерданных*.

#### Каналы

Браузер данных показывает миниатюры каналов, флажки, управляющие будет ли виден канал (т.е. будет ли он показан в отдельном окне), и названия каналов. Наличие презентации и/или маски отображается показом следующих символов справа от имени:

- М – маска
- Р – презентация
- С – калибровка

#### Графики

Список графиков показывает флажки видимости и имена графиков. Справа от имени отображается число кривых в графике.

#### Спектры

Список спектров показывает названия спектров и число точек в наборе. Поскольку данные спектроскопии в точке отображаются и обрабатываются только в связке с двумерными данными используя инструмент спектроскопии, у них нет флажков, управляющих видимостью.

#### Объём

Список объёмных данных показывает имя данных и число слоёв в направлении оси z, т.е. перпендикулярно сечению, показанному на экране.

### ***Выравнивание данных и вычитание фона***

Данные, полученные со сканирующих зондовых микроскопов нередко вообще никак не выровнены; микроскоп напрямую выводит сырые данные, пересчитанные из напряжения на пьезосканере, измерения деформации, данных интерферометра или значений другой системы обнаружения. Такой способ экспорта данных позволяет выбрать пользователю его/её собственный метод выравнивания данных.

Выбор метода выравнивания должен быть основан на конфигурации вашего СЗМ. В основном, для систем с независимыми сканерами для каждой оси, обычно достаточно вычета плоскости. Для систем со сканером/сканерами,двигающимися по всем трём осям (сканер на пьезотрубке) нужно использовать выравнивание вычетом полинома второго порядка.

Разумеется, можно использовать выравнивание более высоких порядков для любых данных, однако, при этом могут быть утрачены реальные свойства поверхности (а именно её волнистость) и, следовательно, изменятся все статистические функции и величины, получаемые из анализа данной поверхности.



### **Исправить ноль и Обнулить среднее значение**

*Обработка данных → Выравнивание → Исправить ноль*

*Обработка данных → Выравнивание → Обнулить среднее значение*

Простейшие функции, связанные с выравниванием данных это Исправить ноль и Обнулить среднее значение, которые просто добавляют постоянное значение ко всем элементам поля данных чтобы соответственно переместить минимум или среднее значение в ноль.



### **Выравнивание плоскости**

*Обработка данных → Выравнивание → Выровнять плоскость*

Выравнивание плоскости обычно является одной из первых функций, применяемых к необработанным данным СЗМ. Плоскость рассчитывается по всем точкам изображения и затем вычитается из данных.

Если на изображение наложена маска, выравнивание плоскости предлагает или использовать данные под маской для аппроксимации плоскостью, исключить данные под маской или игнорировать маску и использовать полный набор данных.

### ***Наложение псевдоцвета***

Наложение псевдоцвета – основной метод визуализации двумерных данных. Используемый цветовой градиент (также называемый палитрой) может быть выбран с помощью щелчка правой кнопкой мыши на ту часть окна данных, где отображается карта псевдоцвета.

Выпадающее меню быстрого выбора предлагает список предпочитаемых градиентов псевдоцвета. Кроме того, оно позволяет вызвать полный список градиентов с помощью пункта меню Дополнительно. Предпочитаемые градиенты могут быть выбраны с помощью флажков в полном списке или в списке редактора градиентов. Выбор строки в полном списке меняет градиент на выбранный, двойной щелчок (или нажатие Enter) также заканчивает выбор и закрывает окно списка. Градиенты с известными именами могут быть быстро выбраны набором начальных букв названия. Градиент по умолчанию (если он не указан в файле) также может быть задан в редакторе градиентов.

Дополнительный контроль над тем, как значения отображаются на шкалу цвета возможен с помощью инструмента Цветовой диапазон.



### **Инструмент диапазон псевдоцвета**

Инструмент диапазон цвета — специальный инструмент, назначением которого является не анализ или модификация данных, а контроль над тем, как значения данных отображаются на шкалу псевдоцвета. Он предлагает четыре основных способа отображения значений данных на шкалу цвета:

#### **Полный**

Значения данных линейно масштабируются на шкалу псевдоцвета, полный диапазон значений данных соответствует полному диапазону



значений псевдоцвета. Этот тип включен по умолчанию (если вы не меняли настройки по умолчанию).

### Фиксированный

Значения данных отображаются на значения цвета линейно, заданный пользователем диапазон данных (который может быть как меньше, так и больше полного) отображается на полный диапазон цвета. Данные вне диапазона отображаются цветом его краёв. Диапазон может быть задан несколькими способами:

- вводом нужных значений численно в окне инструмента,
- выбором диапазона на графике распределения высот в окне инструмента,
- выбором области в окне данных, диапазон затем устанавливается по минимальному и максимальному значениям только внутри этой области,
- нажатием кнопок *Под маской* или *Не под маской*, которые устанавливают диапазон равным диапазону значений под маской или не под маской соответственно или
- нажатием кнопки *Инвертировать шкалу*, которая меняет верхний и нижний предел диапазона отображения цвета

Если диапазон не задан вручную, фиксированный диапазон ведёт себя подобно полному.

Следует заметить, что операции обработки данных нередко изменяют диапазон значений — и поскольку фиксированный диапазон остаётся таким, каким он был задан, это может привести, например, к полностью чёрному окну данных. В таком случае можно обновить диапазон вручную или переключиться на другой тип отображения.

### Автоматический

Значения данных отображаются на цветовой диапазон линейно, эвристически определённый под-интервал полного диапазона данных отображается на полный диапазон цвета. Значения вне этого под-интервала отображаются цветом на границе диапазона.

### Адаптивный

Полный диапазон данных соответствует полному диапазону цвета, однако, значения данных отображаются на значения цвета нелинейно. Функция отображения основана на инверсной интегральной функции распределения высоты, следовательно плоские области в среднем получают большую часть цветового градиента, и меньшие изменения значения видны на них лучше, чем обычно.

### *Базовые действия*

Считывание значений и основные геометрические операции представляют собой основу любой программы обработки данных. **Gwyddion** предлагает большой набор функций для масштабирования данных,

вращения, изменения количества точек и извлечения профилей. Основные из них:

### Инструмент считать значение

Инструмент Считать значение предлагает больше вариантов считывания данных: он показывает координаты и значения в последней точке окна данных, где была нажата кнопка мыши. Он может усреднить значение в круговой окрестности выбранной точки, это управляется опцией *Радиус усреднения*. Если этот радиус равен 1, показывается значение в единичной точке (как делает простейший метод). Кнопка *Установить ноль* сдвигает поверхность таким образом, чтобы сделать текущее значение  $z$  новым нулевым уровнем.

*Считать значение* также может показывать наклон локальной грани или локальную кривизну поверхности. *Радиус усреднения* снова определяет радиус области, используемой для аппроксимации плоскостью. Кривизна, в частности, требует относительно больших площадей чтобы быть достоверной.

### Инструмент расстояний

Расстояния и разности значений можно измерять с помощью инструмента расстояние. Он показывает горизонтальное ( $\Delta x$ ), вертикальное ( $\Delta y$ ) расстояния и общее расстояние по плоскости ( $R$ ); азимут  $\varphi$  (измеряется так же, как наклон  $\varphi$ ) и разницу значений конечных точек  $\Delta z$  для набора линий выбранных для текущих данных.

Расстояния можно скопировать в буфер обмена или сохранить в текстовый файл с помощью кнопок под списком.

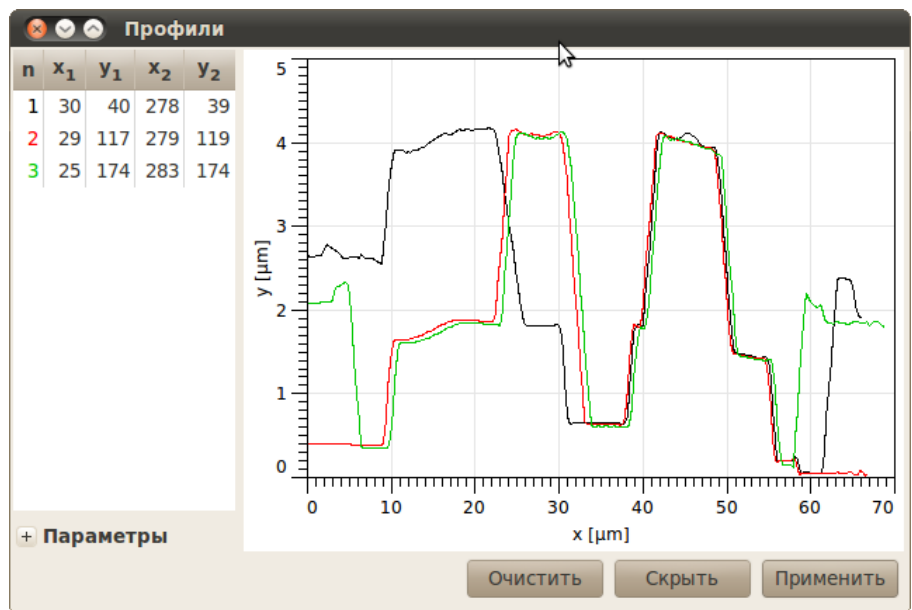


n	$\Delta x$ [ $\mu\text{m}$ ]	$\Delta y$ [ $\mu\text{m}$ ]	$\varphi$ [deg]	R [ $\mu\text{m}$ ]	$\Delta z$ [ $\mu\text{m}$ ]
1	55,2	0,3	-0,3	55,2	-0,336
2	57,1	0,3	-0,3	57,1	-0,519
3	58,9	4,5	-4,4	59,1	0,063

### Извлечение профиля

Инструмент извлечения профиля извлекает профили вдоль линий нарисованных и настроенных с помощью мыши на изображении и показываемые в виде живого предварительного результата в диалоговом окне. Профили могут быть различной «толщины», что означает что больше соседних точек данных в направлении поперёк направления профиля будет использоваться для расчёта одной точки профиля для получения более широких профилей. Это может быть весьма полезно для уменьшения шума при измерении объектов правильной формы.

После того, как профили выбраны, их можно извлечь в виде графиков (как отдельных, так и сгруппированных в одном окне графика), которые в свою очередь могут быть проанализированы соответствующими функциями работы с графиками.



### Инструмент измерения зёрен

Инструмент измерения зёрен является интерактивным способом получения той же информации об отдельных зёрнах. После выбора зерна мышью в окне данных, все доступные величины показываются в окне инструмента.

Помимо физических характеристик, этот инструмент также показывает номер зерна.

Свойства зёрен

Инструменты распределений зёрен и измерения зёрен могут рассчитывать набор свойств зёрен. Некоторые из них:

#### Свойства значений

- *Минимум*, минимальное значение (высота), найденное внутри зерна.
- *Максимум*, максимальное значение (высота), найденное внутри зерна.
- *Среднее*, среднее всех значений внутри зерна, средняя высота зерна.

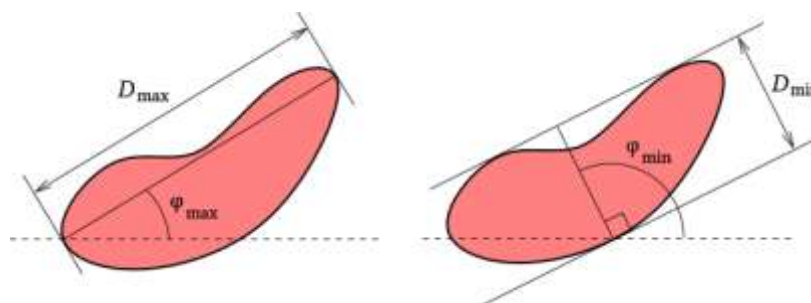
#### Свойства площадей

- *Площадь проекции*, площадь проекции зерна на плоскость.
- *Сторона эквивалентного квадрата*, сторона квадрата с той же площадью проекции, что и у зерна.
- *Радиус эквивалентного диска*, радиус диска с той же площадью проекции, что и у зерна.

#### Свойства границы

- *Минимальный ограничивающий размер*, минимальный размер зерна в горизонтальной плоскости. Может быть показан как минимальная ширина зазора в горизонтальной плоскости, через который может пройти зерно.
- *Максимальный ограничивающий размер*, максимальный размер зерна в горизонтальной плоскости. Может быть показан как максимальная ширина зазора в горизонтальной плоскости, который можно заполнить зерном.

- *Максимальный радиус вписанного диска*, радиус максимального диска, который помещается внутри зерна.
- *Минимальный радиус описанной окружности*, радиус минимальной окружности, целиком содержащей зерно.



#### Свойства, относящиеся к кривизне

- *Центр кривизны по x*, горизонтальное положение центра квадратичной поверхности, которой аппроксимируется поверхность зерна.
- *Центр кривизны по y*, вертикальное положение центра квадратичной поверхности, которой аппроксимируется поверхность зерна.
- *Центр кривизны по z*, значение в центре квадратичной поверхности, которой аппроксимируется поверхность зерна. Следует отметить, что это значение на аппроксимирующей поверхности, не на поверхности зерна.
- *Кривизна 1*, меньшая кривизна (т.е. значение, обратное радиусу кривизны) в центре.
- *Кривизна 2*, большая кривизна (т.е. значение, обратное радиусу кривизны) в центре.

### **Обработка графиков**

Многие из модулей обработки данных получают какие-либо графики в результате своей работы. Графики можно экспортировать в текстовый файл или продолжать анализировать их в **Gwyddion** с помощью нескольких модулей обработки графиков. Эти модули доступны в меню График основного окна **Gwyddion**. Следует заметить, что число модулей обработки графиков на данный момент невелико, и они состоят в основном из простейших модулей для операций, которые часто встречаются при анализе данных СЗМ. Для более сложных аналитических операций лучше использовать вашу любимую программу для обработки графиков.

В этой секции кратко описываются имеющиеся в **Gwyddion** модули обработки графиков.

#### **Базовые операции**

Прежде всего, функции масштабирования и чтения данных доступны непосредственно в окне графика:

- **Логарифмический масштаб осей** – горизонтальные и вертикальные оси могут переключаться между линейным и логарифмическим режимом с использованием кнопок логарифмического масштаба. Переключение

на логарифмический масштаб доступно только для положительных значений (либо по абсциссе, либо по ординате).

- Увеличение и уменьшение масштаба – после выбора режима приближения можно нарисовать мышью область, которую нужно увеличить. Уменьшение восстанавливает тот масштаб, при котором видны все данные.
- Измерение расстояний – позволяет выбрать несколько точек на графике и показать расстояния и углы между ними.

### Экспорт графиков кривых

Данные графиков кривых могут быть экспортированы в текстовые файлы с использованием меню Экспортировать текст. Диалоговое окно экспорта позволяет выбрать между несколькими вариантами стилей, которые потом проще импортировать в другие пакеты программного обеспечения. Опции Экспорт меток, Экспорт единиц измерения и Экспорт метаданных позволяют добавить строки с дополнительной информацией перед блоком числовых данных. Это может оказаться полезным как напоминание, какие данные содержал исходный файл, но может вызывать проблемы при чтении файла другим программным обеспечением.

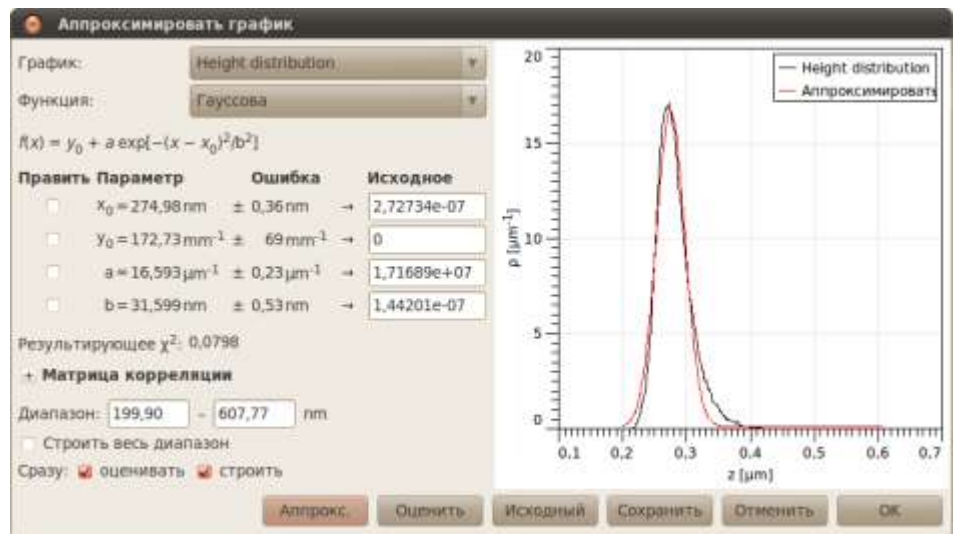
Также можно экспортировать векторное (EPS) или растровое (PNG) графическое представление графика используя пункты меню Экспортировать PostScript или Экспортировать растр.



### Аппроксимировать функцией

Аппроксимация функцией разрабатывалась для аппроксимации данных статистическими функциями, используемыми при оценке параметров шероховатости. Следовательно, большая часть доступных здесь функций является статистическими функциями поверхностей с гауссовой или экспоненциальной функцией автокорреляции. Тем не менее, здесь доступно несколько распространённых функций общего назначения.

В модуле аппроксимации можно задать область, на которой будет производиться аппроксимация (с помощью мыши или численно), сначала надо задать начальные



параметры или дать модулю самому угадать их, и, затем, можно аппроксимировать данные используя алгоритм Левенберга – Маркардта.



В результате получается аппроксимированная кривая и набор её параметров. Отчёт об аппроксимации можно сохранить в файл используя кнопку *Сохранить*. Нажатие кнопки *ОК* добавляет аппроксимирующую кривую к графику, если это нежелательно, закройте диалоговое окно с помощью кнопки *Отмена*.

### *Анализ зёрен*

В **Gwyddion** реализовано несколько алгоритмов для работы с зёрнами. Прежде всего, можно использовать простые пороговые алгоритмы (порог по высоте, наклону и кривизне). Эти процедуры могут быть очень эффективны для анализа частиц (чтобы пометить частицы лежащие на ровной поверхности).

#### **По порогу**

*Обработка данных* → *Зёрна* → *Пометить по порогу*

Выделение по порогу это основной метод выделения зёрен. В этом модуле реализованы пороги по высоте, наклону и кривизне. Результаты отдельных пороговых методов можно объединять вместе используя логические операторы.

#### **Метод Оцу**

*Обработка данных* → *Зёрна* → *Пометить по методу Оцу*

Автоматический метод Оцу выделения зёрен по порогу классифицирует значения данных в два класса, минимизируя дисперсию внутри класса для обоих. Метод хорошо подходит для изображений, которые содержат два относительно хорошо определённых диапазона значений.

#### **Пометить по краю**

*Обработка данных* → *Зёрна* → *Пометить по краю*

Другой вариант функции выделения зёрен основан на обнаружении краёв (локальной кривизне функции высоты). Изображение обрабатывается фильтром «разница гауссианов».

#### **Пометить по водоразделу**

*Обработка данных* → *Зёрна* → *Пометить по водоразделу*

Для более сложных структур данных эффективность пороговых алгоритмов может оказаться весьма плохой. Для этих данных выделение зёрен или частиц более эффективно можно проводить с помощью *алгоритма водораздела*.

Алгоритм водораздела обычно задействуется для определения локальных минимумов и разделения изображения на сегменты в обработке изображений. Поскольку проблема определения положения зёрен может сводиться к проблеме нахождения локальных экстремумов на поверхности, этот алгоритм также можно использовать для нужд разделения и выделения зёрен. Для удобства в дальнейшем мы будем считать данные инвертированными в направлении  $z$  при описании этого алгоритма (т.е.

вершины зёрен формируют локальные минимумы в нижеследующем тексте). Мы применяем две стадии анализа зёрен:

1. Фаза обнаружения зёрен: В каждой точке инвертированной поверхности помещается виртуальная капля воды (количество воды регулируется параметром *Размер капли*). В случае, если капля не находится в локальном минимуме, она следует по пути наискорейшего спуска чтобы минимизировать свою потенциальную энергию. Как только капля достигает любого локального минимума, она остаётся там и покоится на поверхности. Подобным образом она частично заполняет объём локального минимума (см. рисунок ниже и его подпись). Этот процесс повторяется несколько раз (параметр *Число шагов*). В результате получается система водоёмов различного размера, заполняющих впадины в инвертированной поверхности. После этого рассчитывается площадь каждого водоёма и наименьшие из них отбрасываются в предположении, что они формируются в локальных минимумах, образованных шумом (все водоёмы размером меньше, чем задано параметром *Порог*, удаляются). Большие водоёмы используются для определения положения зёрен для разделения на следующем шаге. Подобным образом можно устранить шум на данных АСМ.
2. Фаза разделения: Зёрна, найденные на первом шаге, помечаются (каждое своим уникальным номером). Капли воды продолжают падать на поверхность и заполнять локальные минимумы (количество воды регулируется параметром *Размер капли*). Общее число шагов падения капли в каждую точку поверхности регулируется параметром *Число шагов*. Поскольку зёрна уже обнаружены и помечены после первого шага, следующие пять ситуаций возможны после достижения каплей локального минимума:
  - a. Капля достигла места, ранее отмеченного как определённое зерно. В этом случае капля объединяется с зерном, т.е. помечается как часть того же зерна.
  - b. Капля достигла места, где нет зерна, но отмеченное зерно найдено в ближайшей окрестности капли. В этом случае капля снова объединяется с зерном.
  - c. Капля достигла места, где нет зёрен, и при этом зёрен не было даже в ближайшей окрестности капли. В этом случае капля никак не помечается.
  - d. Капля достигла места, где нет зерна, но более одного отмеченного зерна найдено в ближайшей окрестности. (т.е. в окрестности нашлось два разных зерна). В этом случае капля помечается как граница зерна.
  - e. Капля достигла места, помеченного как граница зерна. В этом случае капля также помечается как граница зерна.

Таким путём мы определяем положения отдельных зёрен и затем определяем объём, занятый каждым зерном по отдельности. Если нас

интересуют на поверхности не зёрна (выпуклости), а долины (впадины), можно использовать параметр *Инвертировать высоту*.

### Статистика

*Обработка данных* → *Зёрна* → *Статистика*

Эта функция рассчитывает общее число помеченных зёрен, их общую площадь (площадь проекции) как в виде абсолютного значения, так и в виде доли общей площади поля данных, общий объём зёрен, общую длину границ зёрен, среднюю площадь и сторону эквивалентного квадрата для отдельного зерна. Средний размер рассчитывается усреднением стороны эквивалентного квадрата, и его квадрат в общем случае не будет равным средней площади.

Общие характеристики области под маской могут быть получены с помощью инструмента «статистические величины» когда включена опция *Использовать маску*. Если инвертировать маску та же информация может быть получена об областях вне зёрен.



### Распределения зёрен

*Обработка данных* → *Зёрна* → *Распределения*

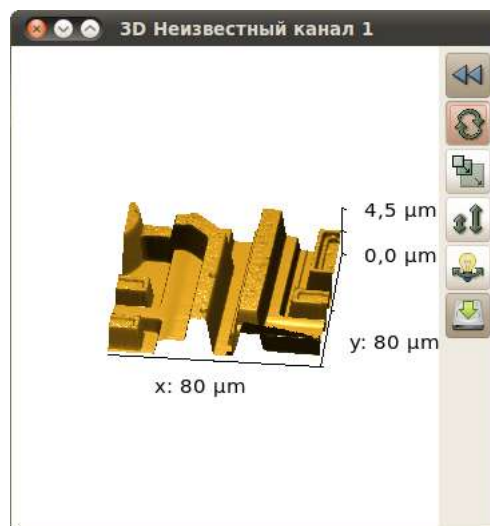
Распределения зёрен является наиболее мощным и сложным инструментом. Он работает в двух режимах: построение графиков и экспорт необработанных данных. В режиме построения графиков выбранные характеристики отдельных зёрен, рассчитываются, собираются, и строятся в виде суммарных графиков, показывающих их распределения.

Экспорт необработанных данных полезен для экспертов, которым нужно, например, рассчитывать корреляцию характеристик отдельных зёрен. В этом режиме выбранные характеристики зёрен рассчитываются и записываются в виде таблицы в текстовый файл, где каждая строка соответствует отдельному зерну, а столбцы соответствуют выбранным величинам. Порядок следования столбцов тот же, что и порядок следования величин в диалоговом окне; все величины записывается в единицах измерения СИ, что является общепринятым в **Gwyddion**.

### *Окно трёхмерного отображения данных с помощью OpenGL*

Трёхмерное отображение OpenGL для текущего окна данных можно вызвать кнопкой с изображением куба в ряду кнопок *Вид* главного окна.

Окно трёхмерного вида может существовать в двух вариантах: с основными и с расширенными элементами управления. Оно запускается только с основными элементами управления, этот вариант показан на следующем рисунке. Можно переключить окно к расширенному виду (и обратно) с помощью кнопки расширения в верхнем правом углу. Нажатие на вид с помощью правой кнопки мыши вызывает окно быстрого выбора градиента псевдоцвета/материала OpenGL.



## Задания к лабораторной работе и порядок действий при их выполнении

### Задание 1

Постройте распределение по размерам зерен меди на кремниевой подложке.

Порядок выполнения:

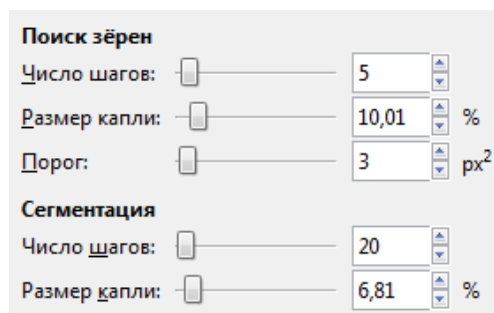
1) Запустите **Gwyddion**. Откройте файл АСМ изображения напыленной на кремниевую подложку меди – Cu.aist. Файлы такого расширения генерируются специальным программным обеспечением атомно-силового микроскопа.

2) Проведите первичную обработку изображения:

- Выравнивание данных: *Главное окно* → *Обработка данных* → *Выровнять данные вычитанием средней плоскости, Корректировать линии выравниванием срединного значения высоты, Убрать горизонтальные царапины, Исправить ноль.*

- Настройка цветов: *Главное окно* → *Диапазон псевдоцвета* - выбрать диапазон на графике распределения высот в окне инструмента, выбрать градиент в выпадающем меню *Окна данных* (щелчок правой кнопкой мыши по оси высот).

3) Проведите поиск и разметку зерен: *Обработка данных* → *Зёрна* → *Пометить по водоразделу*. Необходимо подобрать наиболее адекватные параметры алгоритма разметки зерен в открывшемся окне. Пример таких параметров представлен на рисунке справа.



4) Изучите статистику зерен: *Обработка данных* → *Зёрна* → *Статистика*. Отметьте

Общее количество зерен и их средний размер согласно данной функции.

5) Постройте распределение по максимальному ограничивающему размеру зерна: *Обработка данных* → *Зёрна* → *Распределения*. В окне распределения выберите свойство «Максимальный ограничивающий размер», выберите пункт «Строить графики».

6) Аппроксимируйте полученное распределение с помощью команды *Аппроксимировать функцией* (может быть вызвана щелчком правой кнопкой мыши на графике) наиболее подходящей функцией.

7) Результирующий график сохраните в формате JPG с помощью функции *Экспортировать в растр* (может быть вызвана щелчком правой кнопкой мыши на графике).

8) Полученные данные оформите в виде отчета, сделайте выводы о характере распределения по размерам зерен в напыленном на кремниевую подложку слое меди.

Дополнительно:

Распределение зерен можно построить с помощью средств программы Microsoft Excel. Для этого необходимо в пункте 5) выбрать не «Строить

графики», а «Экспортировать необработанные данные» и сохранить в формате RTF.

В текстовом файле заменить:

- «e» на «E»,
- точки на запятые.

Затем выполнить действия, аналогичные пункту б) задания 2 и, воспользовавшись модулем *Анализ данных* → *Гистограмма*, построить распределение зерен по полученному массиву текстовых данных.

## Задание 2

Сравните профили зерен меди и алюминия на кремниевой подложке по следующим признакам: высота, радиус кривизны.

Порядок выполнения:

- 1) Запустите **Gwyddion**. Откройте 2 файла АСМ изображений напыленных на кремниевую подложку меди и алюминия – Cu.aist и Al.aist.
- 2) Проведите первичную обработку изображений (см. порядок выполнения задания 1).
- 3) На каждом изображении выделите профиль любого зерна: *Главное окно* → *Инструменты* → *Извлечь профили*. Желательно, чтобы отрезки имели приблизительно равную длину, а выбранные зерна целиком (или большая их часть) входили в данный отрезок по ширине.
- 4) Полученные графики экспортируйте в текст с помощью функции *Экспортировать в текст* (может быть вызвана щелчком правой кнопкой мыши на графике) в формате RTF.
- 5) Отредактируйте текстовые файлы следующим образом:
  - с помощью функции замены замените двойные пробелы между столбцами на табуляцию,
  - удалите лишние пробелы в конце строк,
  - замените «e» на «E».
- 6) Полученный текст перенесите в Excel. Для удобства отображения данных переведите координаты в нанометры (например, умножением на  $10^9$ ). Рекомендуется также в обоих столбцах выбрать числовой формат данных. В случае несовпадения количества точек для меди и алюминия лишние рекомендуется удалить.
- 7) По координатам меди и алюминия постройте две точечные диаграммы с гладкими кривыми. Сравните высоты зерен.
- 8) Аппроксимируйте обе кривые полиномом 2-й степени с помощью функции *Добавить линию тренда* и *Формат линии тренда*. Поставьте флажок напротив функции *показывать уравнение на диаграмме* и получите уравнение аппроксимирующей кривой вида:  
$$y = ax^2 + bx + c$$
- 9) Для каждой параболы с помощью полученных уравнений найдите вершину по следующей формуле:



$$x = -\frac{b}{2a}$$

10) Найдите радиус кривизны для каждой параболы по следующей формуле:

$$R = \frac{[1 + (y'(x))^2]^{3/2}}{|y''(x)|},$$

$$R = \frac{1}{K'}$$

где  $x$  – вершина параболы,  $K$  – кривизна.

Из вышеприведенных формул следует, что чем больше кривизна зерна, тем меньше его радиус кривизны.

11) Сравните радиусы кривизны зерен меди и алюминия. Сделайте выводы о различиях их формы. Полученные данные оформите в виде отчета.

### Задание 3

1) Определение размера частиц на СЭМ-изображении с помощью программного обеспечения Gwyddion.

Поместите СЭМ-изображение в программу: перетащите файл изображения в окно инструментов левой кнопкой мыши или откройте изображение через команды *Файл* → *Открыть*.

Определите длину масштабного отрезка автоматически выставляемую в Gwyddion, по пропорции рассчитайте реальный размер.

В поле *ширина* введите полученное в первой части значение (129,70), высоту программа заполнит автоматически в соответствии с количеством пикселей изображения (Рис. 3); кликните *OK*.

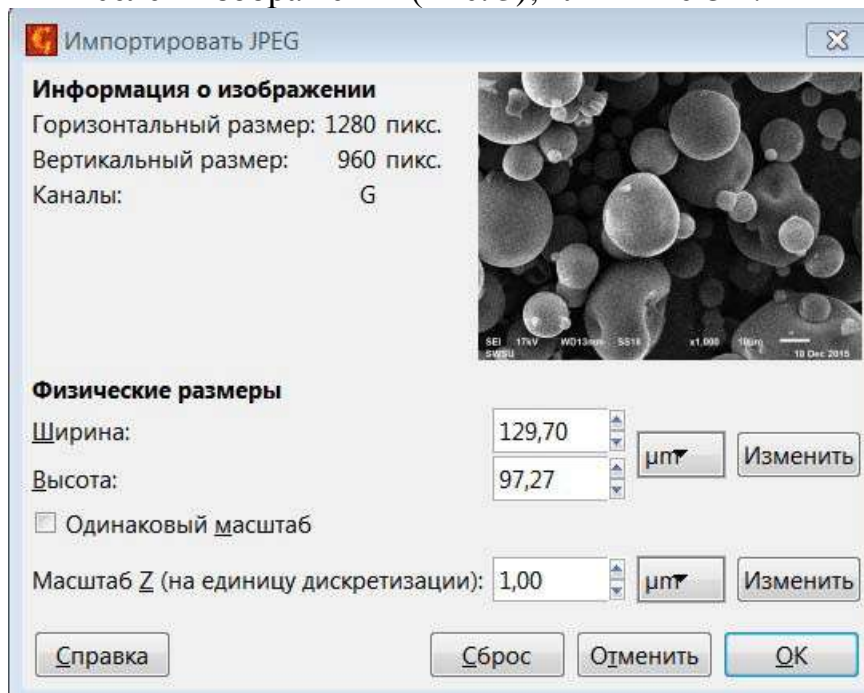



Рисунок 3

2) Установите размеры выбранных частиц:

в окне «браузер данных» задайте удобный градиент цветов, кликнув правой

кнопкой мыши градиентную шкалу в правой части рабочего поля; в окне «инструментов» выберите инструмент *расстояний* ; зажмите левую кнопку мыши с одного края частицы, протяните к другому краю и отпустите, появится отрезок с порядковым номером измерения; проделайте данную операцию три раза (Рис. 4); во вкладке «Расстояний» автоматически построенная таблица значений, столбец *R* соответствует модулям построенных отрезков, т.е. размеру частиц (Рис.5).

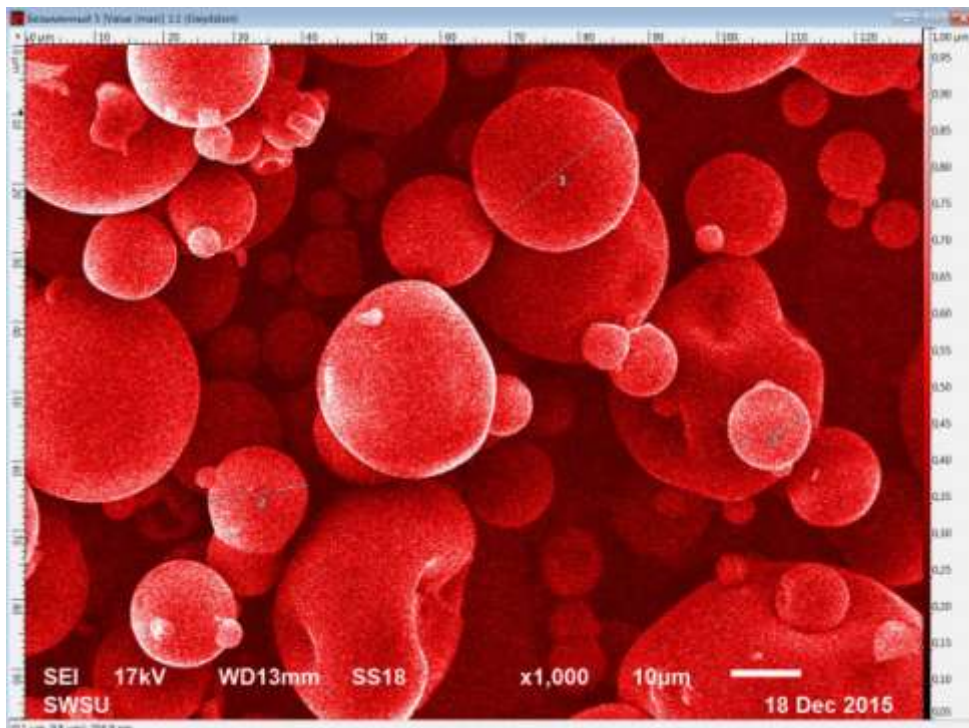


Рисунок 4

n	$\Delta x$ [ $\mu\text{m}$ ]	$\Delta y$ [ $\mu\text{m}$ ]	$\phi$ [°]	R [ $\mu\text{m}$ ]	$\Delta z$ [nm]
1	-18,3	15,1	-140,5	23,8	-419,6
2	14,2	-2,3	9,3	14,4	-176,5
3	11,0	-4,2	20,6	11,8	15,7

Нумеровать линии

Очистить    Скрыть

Рисунок 5

### КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. Какие функции выполняет модуль *Выравнивания данных и вычитания фона*?
2. Какую функцию выполняет инструмент *Извлечь профиль*?
3. В чем сущность *алгоритма водораздела*?
4. Каким инструментом необходимо воспользоваться для выделения зерен на АСМ изображении?

5. Маски нужны для выделения особых областей, таких как...
  - 1) все перечисленное;
  - 2) зёрна;
  - 3) дефекты;
  - 4) грани с определённой ориентацией.
6. Какой функцией анализа зерен необходимо воспользоваться для получения информации о среднем размере зерна?
7. Какой параметр необходимо использовать, чтобы алгоритмом водораздела выделить долины (впадины), а не зерна (выпуклости)?
8. Каким инструментом можно получить информацию о размере отрезка между двумя точками в плоскости изображения?
9. Каким инструментом можно получить рельеф поверхности вдоль линий нарисованных и настроенных с помощью мыши на изображении в виде графиков?
10. Модуль обработки графиков HE содержит функцию:
  - 1) экспорта в Excel;
  - 2) экспорта в растр;
  - 3) экспорта в текст;
  - 4) экспорта в PostScript.
11. Каким инструментом необходимо воспользоваться, чтобы получить информацию о конкретном интересующем зерне?
12. Какой операцией модуля обработки графиков нужно воспользоваться, чтобы аппроксимировать профиль зерна полиномом второго порядка?

## ЛИТЕРАТУРА

1. Petr Klapetek, David Nečas, Christopher Anderson. Русский перевод: Даниил Браташов. Руководство пользователя Gwyddion. 2004–2007, 2009–2017. <http://gwyddion.net/documentation/user-guide-ru/index.html>

## ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА №2

### Методы интерполяции экспериментальных данных

**Цель:** освоить методику обработки экспериментальных данных с помощью кубических сплайнов, определить максимальное значение и интеграл (площадь) под кривой, заданной отдельными точками, с использованием программного обеспечения LibreOffice Calc.

#### ОБЩИЕ СВЕДЕНИЯ

При обработке экспериментальных данных возникает необходимость вычисления интеграла от функции заданной точками. Например, площадь под графиком зависимости силы упругости (нагрузки) от линейной деформации резины в направлении приложения силы – это энергоемкость изделия, под графиком скорости от времени – это путь, под графиком зависимости давления от объема – это работа, под графиком зависимости магнитного потока через катушку от силы тока в ней – энергия магнитного поля.

По полученным экспериментальным данным необходимо сделать анализ по критерию – разброс значений:

- 1) если разброс значений не велик (значения получены через небольшие интервалы изменения независимой величины), то целесообразно воспользоваться методом наименьших квадратов, а потом по полученному уравнению вычислить интеграл аналитически;
- 2) если разброс значений велик (значения получены через большие интервалы изменения независимой величины), то целесообразно воспользоваться интерполяцией кубическими сплайнами, потом вычислить интегралы от каждого сплайна и сложить их значения.

### ИНТЕРПОЛЯЦИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ С ПОМОЩЬЮ КУБИЧЕСКИХ СПЛАЙНОВ

Для изложения методики возьмем результаты исследования всасываемости лекарственного препарата, заданные таблично (табл.1).

Таблица 1 – Экспериментальные данные

Номер пробы	№	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Время после введения препарата t,ч.	$x_i$	0	0,5	1	2	3	4	6	8	10	12
Концентрация препарата в крови C, нг/мл	$y_i$	0,2	1	2	4	3,8	3	2,5	1,6	0,5	0,2

*Замечание.* Попробуем аппроксимировать данные полиномом третьего порядка методом наименьших квадратов. Очевидно, что в данном исследовании, когда необходимо чтобы график проходил строго по экспериментальным точкам, аппроксимация методом наименьших квадратов не подходит для анализа данных, например, видно, что максимум аппроксимирующей кривой расположен примерно на два часа позже предполагаемого (смотри рисунок 3).

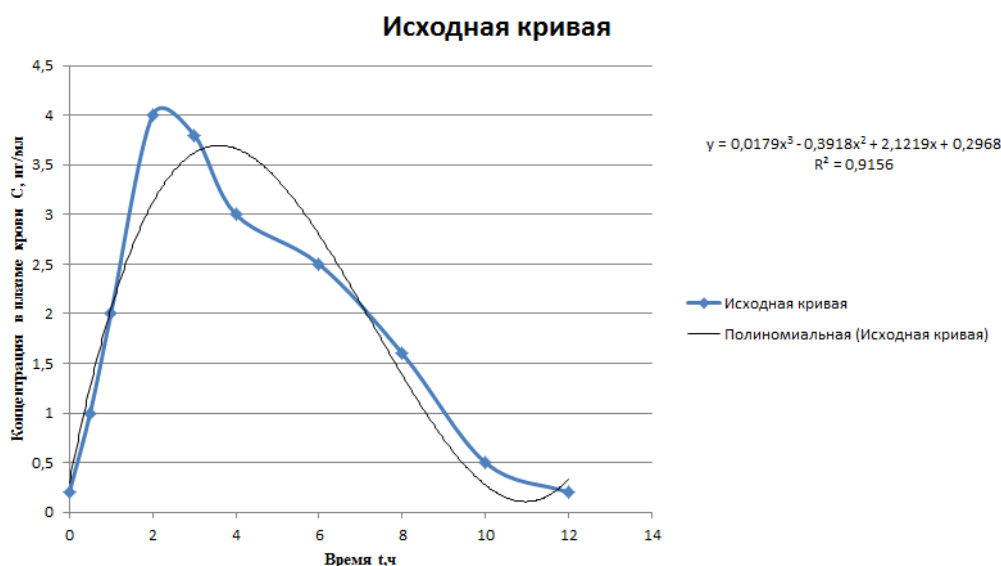


Рисунок 3 – Аппроксимация данных с большим разбросом значений методом наименьших квадратов

Для нахождения времени всасывания препарата необходимо найти время, на которое приходится максимум концентрации, а это без дополнительных измерений можно сделать только с помощью интерполяции кубическими сплайнами и нахождения максимума сплайна в соответствующем интервале между заданными точками.

Интерполяция кубическими сплайнами является частным случаем кусочно-полиномиальной интерполяции. В этом специальном случае между любыми двумя соседними узлами функция интерполируется кубическим полиномом

$$S_i(x) = a_i + b_i(x - x_{i-1}) + c_i(x - x_{i-1})^2 + d_i(x - x_{i-1})^3,$$

его коэффициенты на каждом интервале определяются из условий сопряжения в узлах:

1. Сплайны (кубические параболы) должны проходить через узловые точки

$$S_{i-1}(x_{i-1}) = S_i(x_{i-1})$$

2. В стыках между сплайнами должна обеспечиваться гладкость

2.1. В узлах не должно быть изломов. Значит в узлах должны быть одинаковыми первые производные соседних сплайнов

$$S'_{i-1}(x_{i-1}) = S'_i(x_{i-1})$$

2.2. В узлах, где стыкуются сплайны, должна быть одинаковой кривизна соседних сплайнов. Это означает равенство вторых производных

$$S''_{i-1}(x_{i-1}) = S''_i(x_{i-1})$$

3. Кроме того, необходимо задать поведение сплайнов на левой и правой границах при  $x = x_0$  и  $x = x_N$ . Например, задать нулевую кривизну (естественный сплайн – нулевые значения вторых производных на границах):

$$S''_1(x_0) = 0,$$

$$S''_N(x_N) = 0.$$

При подстановке соответствующих значений в сплайны при выполнении пункта 1, замечаем, что все  $a_i = y_i$ , поэтому количество линейных



уравнений в системе уменьшается на количество коэффициентов  $a_i$  (в нашем случае на 9).

Из заданных условий и экспериментальных данных получаем систему уравнений в матричной форме и заносим ее в таблицу LibreOffice Calc (табл.2).

Таблица 2 – Система уравнений в матричной форме

$b_1$	$c_1$	$d_1$	$b_2$	$c_2$	$d_2$	$b_3$	$c_3$	$d_3$	$b_4$	$c_4$	$d_4$	$b_5$	$c_5$	$d_5$	$b_6$	$c_6$	$d_6$	$b_7$	$c_7$	$d_7$	$b_8$	$c_8$	$d_8$	$b_9$	$c_9$	$d_9$	$y_i$	$y_{i+1}$
0,5	0,25	0,125	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0,8
0	0	0	0,5	0,25	0,125	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
0	0	0	0	0	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2
0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-0,2
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-0,8
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2	4	8	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	-0,5
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2	4	8	0	0	0	0	0	0	0	-0,9
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2	4	8	0	0	0	0	-1,1
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2	4	8	0	-0,3
1	1	0,75	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	1	1	0,75	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	1	2	3	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	2	3	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	2	3	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	4	12	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	4	12	-1	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	4	12	-1	0	0	0	0
0	1	1,5	0	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	1	1,5	0	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	1	3	0	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	3	0	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	3	0	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	6	0	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	6	0	-1	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	6	0	-1	0	0	0	0	0
0	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Решаем приведенную систему уравнений методом обратной матрицы:

$$A^{-1}AX = A^{-1}B \Rightarrow X = A^{-1}B$$

**вначале рассчитаем обратную матрицу**

выделяем пустую ячейку,

ставим знак равенства,

вводим функцию МОБР(MINVERS),

выделяем матрицу, для которой нужно рассчитать обратную (в нашем случае 27x27) (самый правый столбец свободных членов выделять не надо),

нажимаем Enter, появляется одно значение обратной матрицы,

чтобы подобно посчитать остальные, выделяем соразмерное прямой матрице число строк и столбцов (в нашем случае 27x27), так, чтобы единственное рассчитанное значение было в верхнем левом углу,

нажимаем F2,

нажимаем Ctrl+Shift+Enter

**умножаем полученную обратную матрицу на столбец свободных членов**

выделяем пустую ячейку,

ставим знак равенства,

вводим функцию МУМНОЖ(MMULT),

выделяем обратную матрицу и столбец свободных членов,

нажимаем Enter, появляется одно значение первого коэффициента,

чтобы подобно посчитать остальные, выделяем столбец соизмеримый столбцу свободных членов, так, чтобы единственное рассчитанное значение было верхним,

нажимаем F2,

нажимаем Ctrl+Shift+Enter,

получаем коэффициенты

$b_i, c_i, d_i$ , записанные в столбик

добавляем к ним  $a_i=y_i$

получаем коэффициенты, для 9-ти сплайнов (табл.3).

Таблица 3 – Коэффициенты полиномов

$a_1$	$b_1$	$c_1$	$d_1$	$a_2$	$b_2$	$c_2$	$d_2$	$a_3$	$b_3$	$c_3$	$d_3$
0,2	1,521042	0	0,315831	1	1,757916	0,473747	0,020845	2	2,247296	0,505014	-0,75231
$a_4$	$b_4$	$c_4$	$d_4$	$a_5$	$b_5$	$c_5$	$d_5$	$a_6$	$b_6$	$c_6$	$d_6$
4	1,000395	-1,75191	0,551519	3,8	-0,84888	-0,09736	0,146235	3	-0,60489	0,341347	-0,08195
$a_7$	$b_7$	$c_7$	$d_7$	$a_8$	$b_8$	$c_8$	$d_8$	$a_9$	$b_9$	$c_9$	$d_9$
2,5	-0,22292	-0,15036	0,018409	1,6	-0,60345	-0,0399	0,033313	0,5	-0,3633	0,159976	-0,02666

Разбиваем интервалы между узлами на небольшие промежутки по  $x$ , рассчитываем  $y$  на соответствующих интервалах по формулам для сплайнов и строим сплайны (Вставка – Диаграммы – Точечная). По виду кривых определяем, какой сплайн содержит максимальное значение (самый верхний сплайн  $S_4$ ).

Для нахождения времени всасывания, которое определяется интервалом от момента введения препарата до момента достижения максимальной концентрации в крови необходимо рассмотреть максимальное значение сплайна  $S_4$  (между узлами 3 и 4) (узлы с наибольшей концентрацией  $C$ , табл.1).

Рассчитав значения сплайна  $S_4$  на интервале от 2 до 3, получим таблицу значений (табл. 4). Из таблицы 4 видно, что максимальная концентрация наблюдается в момент времени 2,3 ч, который является окончанием фазы всасывания препарата.

Таблица 4 - Значения сплайна  $S_4$  при максимуме концентрации

$t$ , ч	2	2,1	2,2	2,3	2,4	2,5	2,6	2,7	2,8	2,9	3
$C$ , нг/мл	4	4,083	4,135	4,158	4,157	4,133	4,091	4,034	3,964	3,887	3,804

Для оценки биологической доступности способа введения препарата необходимо определять площадь под графиком зависимости концентрации препарата в плазме крови от времени, что легко сделать для полученных полиномов аналитически и найти сумму площадей на соответствующих интервалах под каждым из них. Полученное значение площади под графиком равно 23,785 (рис.1).

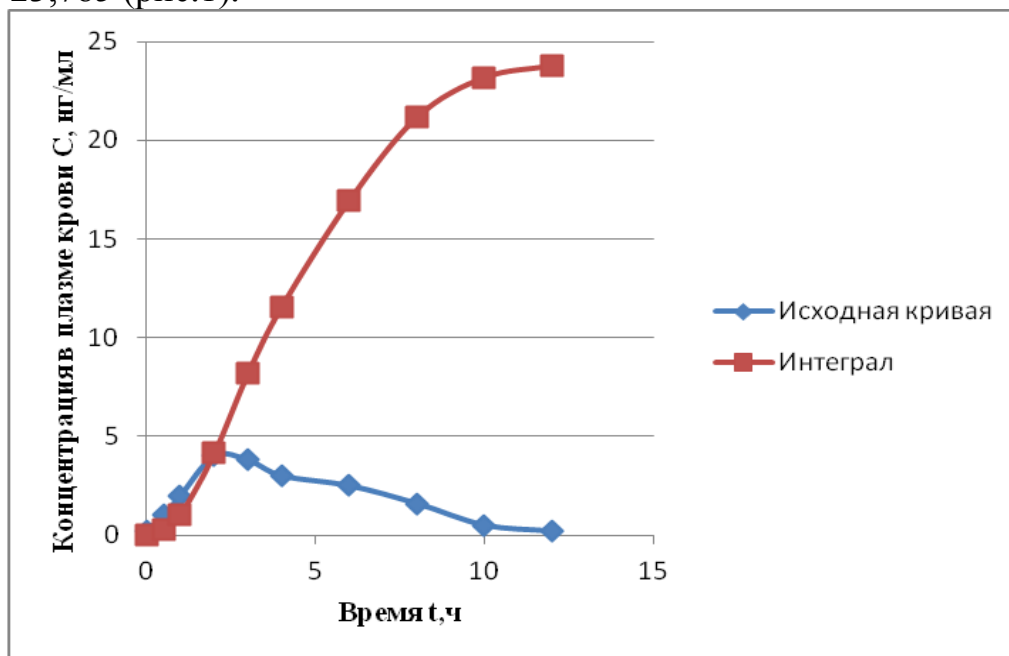


Рисунок 1- Графики зависимостей: экспериментальная кривая и соответствующая интегральная кривая

**Вывод:** на примере зависимости концентрации препарата в крови от времени показана возможность нахождения максимального значения кривой и интеграла под кривой, заданной отдельными точками. Описана методика обработки экспериментальных данных с помощью кубических сплайнов.

### Задание 1

По экспериментальным данным и описанию, представленному выше, создайте файл в программе LibreOffice Calc:

- 1) введите матрицу и столбец свободных членов;
- 2) рассчитайте коэффициенты сплайнов
- 3) найдите максимальное значение;
- 4) получите значение интеграла под интерполяционной кривой.

### Задание 2

Пользуясь предложенной выше пошаговой инструкцией работы с программой LibreOffice Calc, проведите сплайн-интерполяцию с

представленными ниже экспериментальными данными, полученными с помощью спектрофотометра.

Таблица 1 – Исходные данные для выполнения задания 2



Димеры	
C	λ
5,994E-06	624,4778
8,9865E-06	623,6199
1,1976E-05	623,7841
1,4963E-05	621,8222
1,7946E-05	621,4675
2,0927E-05	621,4615
2,3904E-05	620,3536
2,6879E-05	620,2142
2,9851E-05	620,1823
3,2819E-05	616,7894
3,5785E-05	617,3401
3,8748E-05	617,3235

### КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. Почему в экспериментах с большим разбросом значений применение метода наименьших квадратов является некорректным?
2. Для сплайн-интерполяции является ли обязательным условие, что между любыми двумя соседними узлами функция интерполируется кубическим полиномом?
3. При сплайн-интерполяции должно ли выполняться условие, что в стыках между сплайнами могут быть скачки, но они должны быть конечными?
4. С помощью каких условий задается «естественный сплайн»?
5. Число сплайнов (кубических парабол) на единицу меньше, чем экспериментальных точек  $N$ , неизвестных коэффициентов в каждом сплайне 4 ( $a, b, c, d$ ), тогда для решения необходимо составить  $3 \cdot (N - 1)$  уравнений. Можно ли уменьшить количество уравнений на  $(N - 1)$ ?
6. Каким программным обеспечением можно воспользоваться, чтобы решить систему полученных уравнений?
7. Какой метод используется для решения системы полученных уравнений?
8. Какая функция в программной среде LibreOffice Calc используется для расчета обратной матрицы?
9. Какая функция в программной среде LibreOffice Calc используется для умножения матрицы на матрицу?
10. Можно ли определить максимальное и минимальное значение при использовании сплайн-интерполяции экспериментальных данных?
11. Можно ли найти интеграл от функции, заданной кубическими сплайнами?

## ИНФОРМАЦИОННЫЕ ИСТОЧНИКИ

1. Роджерс Д., Адамс Дж. Математические основы машинной графики. – М.: Мир, 2001.
2. Костомаров Д. П., Фаворский А. П. Вводные лекции по численным методам.
3. Волков Е. А. Глава 1. Приближение функций многочленами. § 11. Сплаины // Численные методы. – Учеб. пособие для вузов. – 2-е изд., испр. – М.: Наука, 1987. – С. 63-68. – 248 с.
4. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы М.: Наука, 1989. – 432 с.
5. Костомаров Д.П., Фаворский А.П. Вводные лекции по численным методам. – 2004. – 184 с.
6. Самарский А.А. Введение в численные методы М.: Наука.-1982.- 272 с.
7. Калиткин Н.Н. Численные методы М.: Наука. – 1978. – 512 с.
8. [https://ru.wikipedia.org/wiki/Кубический\\_сплайн](https://ru.wikipedia.org/wiki/Кубический_сплайн)

## ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА №3

### Моделирование физических процессов с помощью метода конечных элементов в программной среде FEMM (Finite Element Method Magnetics)

**Цель:** отработка навыков моделирования и расчёта физических параметров компонентов электрических и магнитных цепей в программной среде FEMM, а также получение представлений о пространственном распределении магнитного поля соленоида и электрического поля конденсатора.

#### ОБЩИЕ СВЕДЕНИЯ

#### 1. Моделирование магнитостатических явлений в FEMM

Finite Element Method Magnetics (FEMM) - это программный пакет на базе метода конечных элементов для решения двумерных (плоских) и осесимметричных задач в магнитостатике и электростатике.

Пакет состоит из интерактивной оболочки, включающей графическую пред- и постобработку, генератора сетки и различных решателей.

**Задача 1.** Рассчитать параметры и визуализировать поле соленоида без сердечника (внутри воздух).

Пусть катушка, изображенная на рисунке 1, имеет внутренний диаметр 1 дюйм, внешний диаметр 3 дюйма и длину 2 дюйма. Катушка состоит из 1000 витков медной проволоки (марка меди 18 AWG). По проводу катушки течет постоянный ток 1 Ампер.

Так как задача осесимметричная для моделирования в FEMM достаточно задать геометрию фрагмента сечения катушки вдоль ее оси.

Ось  $r$  направлена по радиусу соленоида от оси катушки ( $r = 0$ ) горизонтально вправо, в указанном сечении ток течет от наблюдателя.

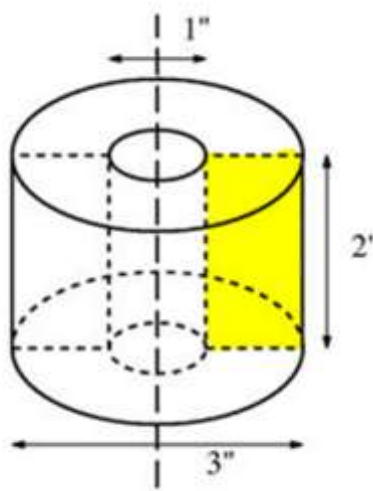




Рисунок 1 - Катушка с воздушным сердечником


#### 1.1 Создание новой модели




Запустите приложение FEMM в меню «Пуск». Настройки по умолчанию вызовут пустое окно с минимальной строкой меню.


Выберите  в главном меню. Появится диалоговое окно с выпадающим списком, позволяющим выбрать тип нового документа, который будет создан. Выберите пункт Magnetics Problem и нажмите кнопку . Будет создана новая задача, и появится ряд новых кнопок панели инструментов.

### 1.2 Задаем тип задачи (уравнения магнитостатики)


Необходимо сообщить программе тип решаемой задачи. Для этого выберите Problem в главном меню. Откроется диалоговое окно «Определение проблемы». В Problem Type установите Axisymmetric. Убедитесь, что единицы длины Length Units установлены в дюймах Inches, а частота Frequency (Hz) установлена в 0. (Так как проблема является осесимметричной, ввод глубины (Depth) не требуется, и это поле редактирования отображается серым цветом. В этом случае вертикальная ось является осью вращения для задачи. Ось  $r$  проходит горизонтально, а ось  $z$  - вертикально.) Нажмите кнопку .

### 1.3 Рисуем катушку

Переключите режим узлов, нажав на кнопку «Работа с узлами» на панели инструментов изображения . Разместите узлы в точках (0.5; -1), (1.5; -1), (1.5;1) и (0.5;1), определяющих размеры катушки. Узлы можно размещать, перемещая указатель мыши в нужное место и нажимая левую кнопку мыши, или нажимая клавишу <ТАВ> и вручную вводя координаты точки через всплывающее диалоговое окно.



Выберите изображение кнопки «Работа с сегментами», чтобы можно было нарисовать линии, соединяющие точки . При выборе узлов, определяющих катушку, щелчками левой кнопки мыши в последовательности, можно получить линии между каждым из узлов и получить большой соединенный блок (прямоугольное сечение катушки).

### 1.4 Размещение меток блоков

Теперь нажмите на кнопку панели инструментов «Использовать метки блоков», обозначенную изображением концентрических зеленых кругов . Поместите метку блока в области катушки и поместите её вне области катушки. Как и узловые точки, метки блоков могут быть размещены либо щелчком левой кнопки мыши, либо с помощью вызова диалогового окна <ТАВ>. Программа использует метки блоков для связи материалов и других свойств с различными замкнутыми областями в геометрии задачи. Далее мы определим некоторые свойства материала, а затем вернемся и свяжем их с определенными метками блока.

Примечание: если включена привязка к сетке, то иногда может быть трудно разместить метку блока в пустом пространстве. Если это так, отключите привязку к сетке, отключив кнопку на панели инструментов с точкой и стрелкой.



### 1.5 Задание материалов модели

Выберите **Properties**, затем **Materials Library** в главном меню. Перетащите элемент  Air из библиотеки материалов в материалы модели, чтобы добавить его в текущую модель. Перейдите в папку  Copper AWG Magnet Wire и перетащите  18 AWG в «Материалы модели». Нажмите на **OK**.

#### 1.6 Задание параметров цепи для катушки

Выберите **Properties**, затем **Circuits** в главном меню. В появившемся диалоговом окне нажмите кнопку **Add Property**, чтобы создать новое свойство схемы. Назовите цепь, заменив New Circuit (новое имя цепи) на Coil. Укажите, что витки в обмотке соединены последовательно, выбрав переключатель «Series». Введите значение тока в цепи 1 А (Circuit Current). Нажмите **OK** для диалогового окна «Свойства цепи» и «Определение свойства».


#### 1.7 Связывание свойств с метками блоков

Щелкните правой кнопкой мыши на узел метки блока в области воздуха вне катушки. Метка блока станет красной, означая, что она выбрана. Нажмите <ПРОБЕЛ>, чтобы «открыть» метку выбранного блока (вместо нажатия клавиши пробела можно использовать изображение кнопки панели инструментов «Открыть окно свойств» ). Появится диалоговое окно, содержащее свойства, назначенные выбранной метке. Установите **Air** в **Block type**. Обычно достаточно принять плотность сетки по умолчанию, установив флажок  **Let Triangle choose Mesh Size**. Если требуется более мелкая сетка, можно снять флажок и ввести в поле **Mesh size** размер сетки. Параметр размера ячейки определяет ограничение на максимально возможный размер элементов, разрешенный в соответствующем разделе. Сетка пытается заполнить область почти равносторонними треугольниками, у которых стороны примерно равны длине указанного параметра **Mesh size**. Нажмите на **OK**. Метка блока будет помечена как .

Выберите и откройте узел метки блока внутри области катушки. Установите для этого типа блока значение **18 AWG**. Мы хотим назначить токи, протекающие в этой области, поэтому выберите в поле **In Circuit** схему **Coil** из выпадающего списка. Поле **Number of Turns** (число витков) станет активным, так как ранее для области выбрана схема последовательного типа «Series». Введите 1000 в качестве числа витков для этой области, что означает, что в области, заполненной 1000 витками, витки навиты против часовой стрелки (положительное направление). Нажмите на **OK**.

Примечание: если бы мы хотели обозначить, что витки навиты против часовой стрелки, мы могли бы указать число витков, равное  $-1000$ .

#### 1.8 Создание граничных условий

Конечно, хотелось бы найти поле катушки в неограниченном пространстве, на которое не влияет соседняя вычислительная граница. Однако метод конечных элементов всегда требует решения задач в ограниченной области. Для имитации открытых границ вызовите мастера построения открытых границ, для этого нажмите на кнопку «Create IABC Open Boundary» на панели инструментов . Смотри рисунок 2 ниже.

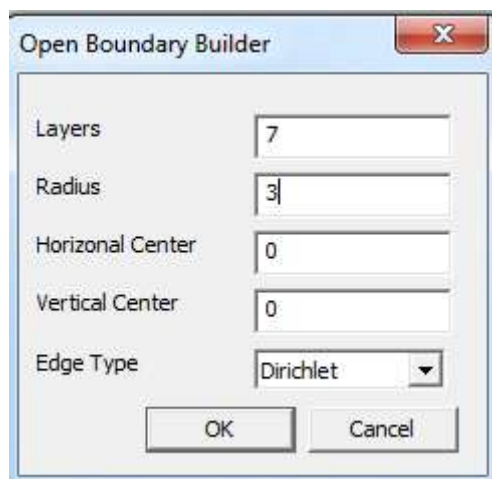


Рисунок 2 - Мастер построения открытых границ

Как правило, достаточно просто принять предложенные граничные параметры, нажав **OK**. На для данной задачи вместо предложенного значения зададим радиус 3 дюйма (внешний радиус катушки). Центр (0,0) совпадает с началом координат сечения катушки.

Заданная геометрия модели выглядит так, как показано на рисунке 3. Многослойная структура создается автоматически после нажатия кнопки **OK** в **Open Boundary Builder** и предоставляет все необходимые граничные условия для решения задачи.

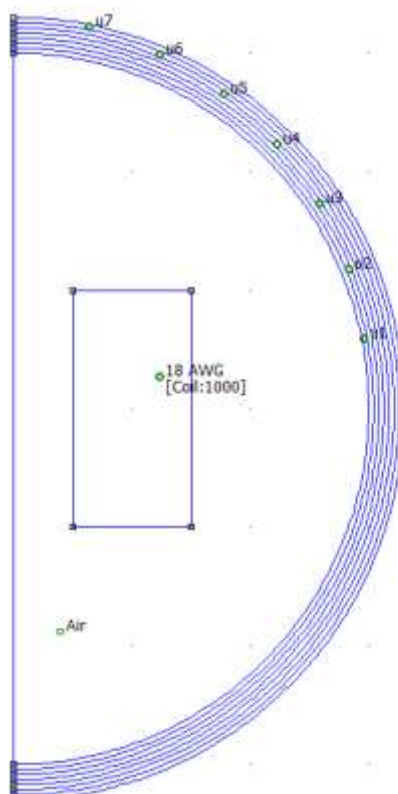




Рисунок 3 - Законченная модель катушки, готовая к анализу


### 1.9 Создание сетки и запуск FEA

Теперь **сохраните файл** и нажмите кнопку на панели инструментов с желтой сеткой: изображение . Это действие создает треугольную сетку (разбивает пространство моделирования на отдельные элементы


(треугольники)). Если размер сетки кажется слишком мелким или слишком грубым, вы можете выбрать метки блоков или сегменты линий и настроить размер сетки, определенный в свойствах каждого объекта. После того, как сетка будет сгенерирована, нажмите на изображение кнопки «Повернуть кривошип» , чтобы проанализировать вашу модель.

Появится информация о статусе обработки. Если индикаторы прогресса не движутся, вероятно, следует отменить расчет. Это может произойти, если были указаны недостаточные граничные условия. Для этой конкретной задачи расчеты должны быть завершены в течение секунды.

#### 1.10 Анализ результатов

Нажмите на изображение значка очки , чтобы просмотреть результаты анализа. Появится окно постпроцессора. Окно постпроцессора позволит вам извлечь из решения множество различных видов информации.

#### 1.11 Значения в точке

Как и в препроцессоре, окно постпроцессора имеет набор различных режимов редактирования: «Точка», «Контур» и «Область». Выбор режима определяется кнопками панели инструментов режима, то есть изображением , где первая кнопка соответствует режиму «Точка», вторая - режиму «Контур», а третья - режиму «Область». По умолчанию, когда программа впервые установлена, постпроцессор запускается в точечном режиме. При нажатии на любую точку левой кнопкой мыши отображаются различные свойства поля, связанные с этой точкой, в плавающем окне вывода FEMM. Как и при рисовании точек в препроцессоре, местоположение точки можно точно указать, нажав кнопку <TAB> и введя координаты нужной точки в появившемся диалоговом окне. Например, если точка (0,0) указана во всплывающем диалоговом окне, то результирующие свойства, отображаемые в окне вывода, будут выглядеть, как показано на рисунке 4.

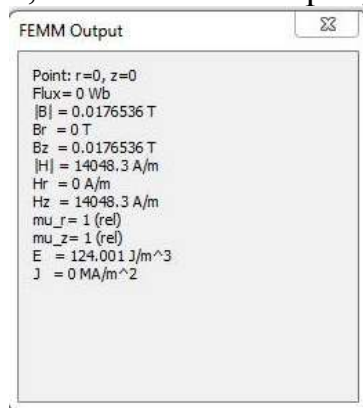



Рисунок 4 - Отображение значений поля в точке (0,0)

#### 1.12 Свойства катушки

В FEMM легко определить индуктивность и сопротивление катушки. Нажмите кнопку изображения  (свойства цепи), чтобы отобразить рассчитанные параметры соленоида. В данном примере, диалоговое окно результатов отображено на рисунке 5.

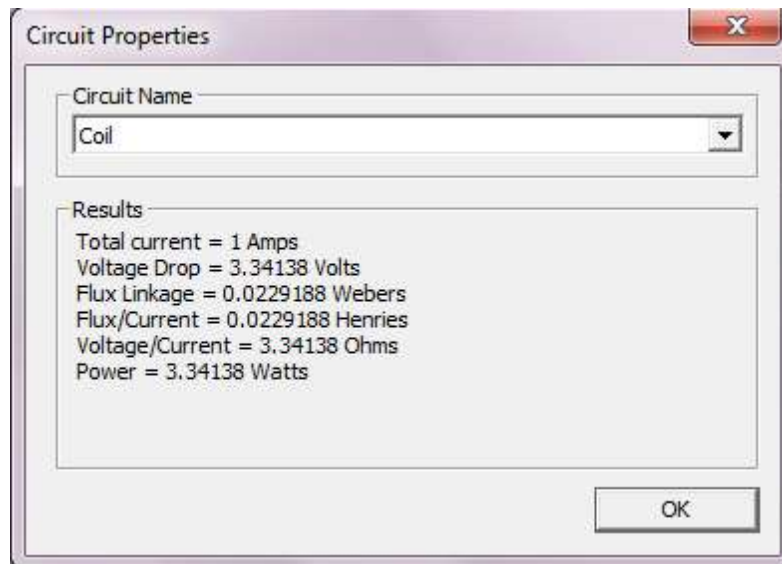



Рисунок 5 - Диалоговое окно рассчитанных свойств цепи

Поскольку задача является линейной и существует только один ток, результат «Flux/Current» («Поток/ток») можно однозначно интерпретировать как индуктивность катушки (т.е. 22,9 мГн). Сопротивление катушки является результатом «Voltage/Current» («Напряжение/ток») (т.е. 3,34 Ом).

#### 1.13 Построение значений поля вдоль контура

FEMM также может отображать значения поля вдоль заданного пользователем контура (линии).


Здесь мы построим график значений вектора магнитной индукции (плотности магнитного потока) вдоль центральной линии катушки.

Переключитесь в режим контура, нажав кнопку на панели инструментов . Теперь вы можете провести контур, вдоль которого будет строиться поток. Есть три способа добавить точки к контуру:

1. Щелчок левой кнопкой мыши добавляет ближайший узел ввода к контуру;

2. Нажатие правой кнопки мыши добавляет текущее положение указателя мыши к контуру;

3. Клавиша <TAB> отображает диалоговое окно ввода точки, которое позволяет вводить координаты точки, добавляемой к контуру.

Здесь можно использовать метод 1. Щелкните левой кнопкой мыши возле узловых точек в точках (0,4), (0,0) и (0, -4), добавляя точки в указанном выше порядке. Затем нажмите кнопку графика на панели инструментов изображения . Нажмите **OK**, появится диалоговое окно X-Y с графиком значений поля. По умолчанию выбрана магнитная индукция (величина плотности магнитного потока) (смотри рисунок 6). При желании из выпадающего списка в этом диалоговом окне можно выбрать различные типы графиков.

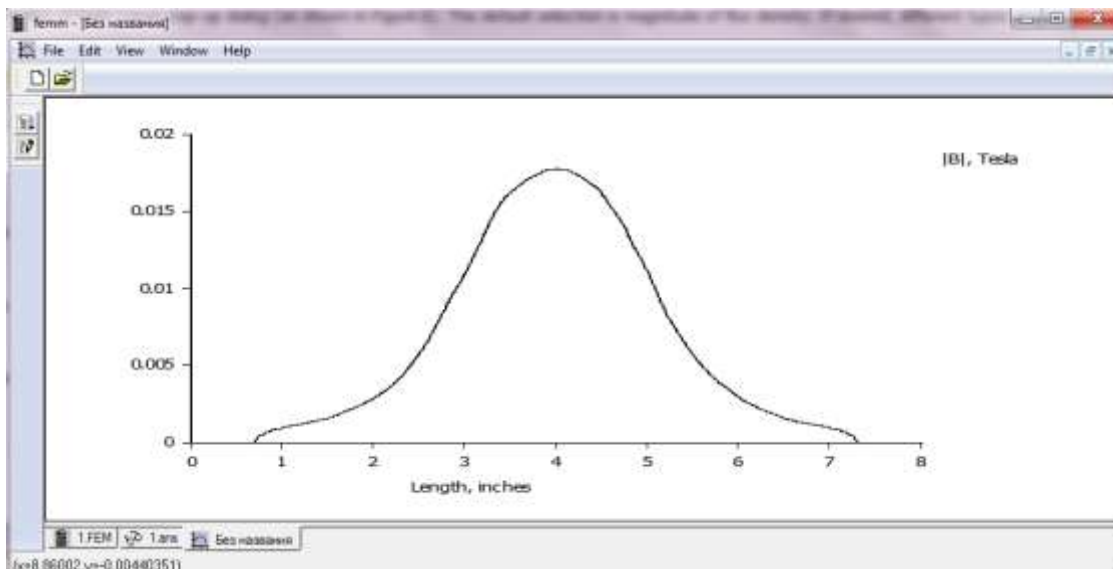
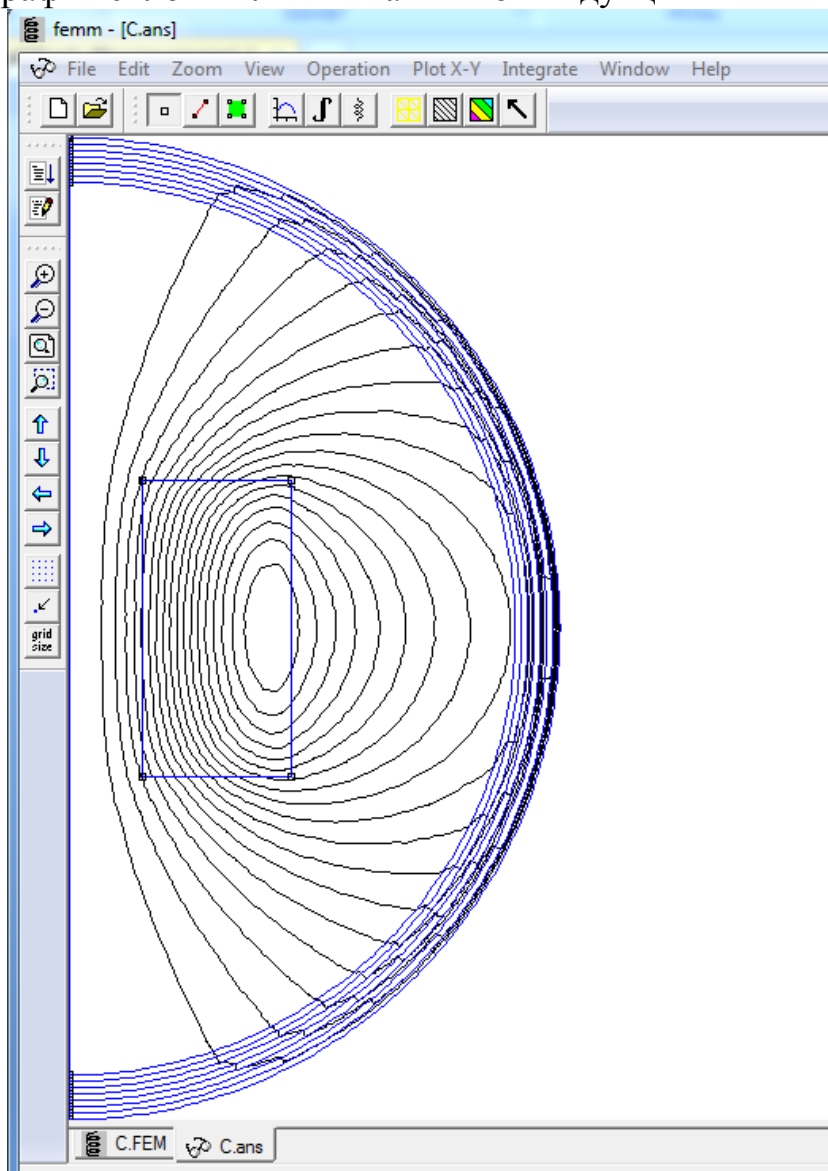



Рисунок 6 - График плотности потока вдоль оси катушки

### 1.14 График силовых линий магнитной индукции



По умолчанию при первой установке программы отображается только черно-белый график силовых линий магнитной индукции. Значения модуля



магнитной индукции можно визуализировать с помощью цвета (каждому численному значению поля в данной точке сопоставить свой цвет). Для этого нажмите на изображение кнопки панели инструментов  (цвета радуги). Когда появится диалоговое окно, выберите переключатель  Show Density Plot и примите другие значения по умолчанию. Нажмите на . Полученный вид решения будет выглядеть так, как показано на рисунке 7.

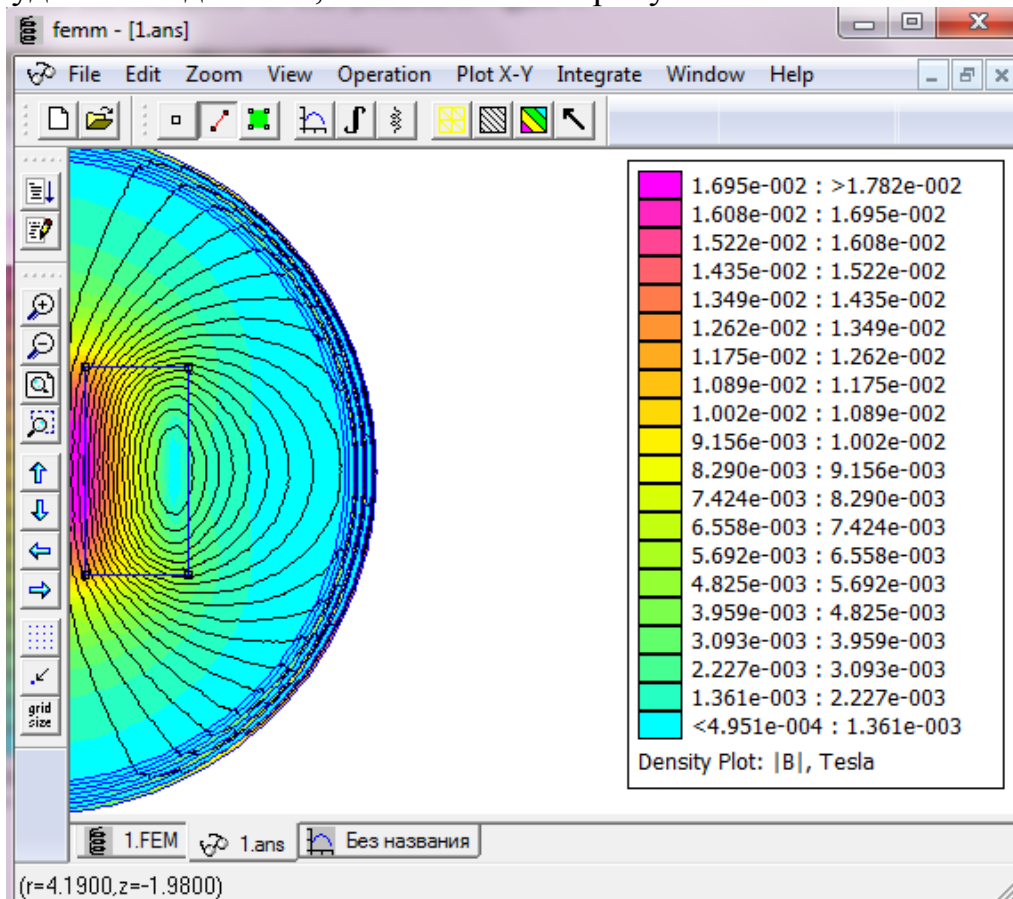


Рисунок 7- График плотности цветового потока раствора

## 2. Моделирование задач электростатики в FEMM

**Задача 2.1.** Рассчитать емкость метрового конденсатора квадратного сечения, сторона внешней обкладки которого равна 4 см, а внутренней – 2 см (смотри рисунок 9). Для расчетов вследствие симметрии достаточно смоделировать только  $\frac{1}{4}$  конденсатора, а потом полученные аддитивные величины умножить на 4. Диэлектрик между пластинами – воздух.

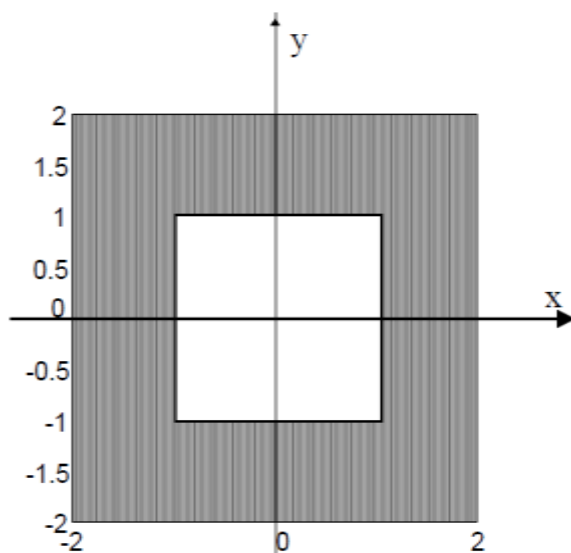


Рисунок 9 - Конденсатор квадратного поперечного сечения

Для создания этой модели необходимо выполнить следующие шаги:


### 2.1 Создание модели


Запустите FEMM в разделе меню «Пуск».

После запуска программы нажимаем **File**, затем **New** из главного меню.

Выберите **Electrostatics Problem** в появившемся диалоговом окне **Create a new problem**.

Нажмите **OK**.


Выберите «узлы» на панели инструментов (это крайняя кнопка слева ) и поместите 6 узлов (например, (0,1), (1, 1), (1,0), (2,0), (2,2) и (0,2)). Это эскиз верхней правой четверти квадратного сечения конденсатора (смотри рисунок 10). Узлы можно размещать, перемещая указатель мыши в нужное место и нажимая левую кнопку мыши, или нажимая клавишу <ТАВ> и вручную вводя координаты точки через всплывающее диалоговое окно.

Выберите «линии» на панели инструментов (вторая кнопка слева ). Чтобы выбрать узел в качестве точки, ограничивающей линию, щелкните левой кнопкой мыши рядом с нужной точкой.

## 2.2 Задание материалов модели

Выберите **Properties**, затем **Materials** в основном меню. В появившемся диалоговом окне нажмите кнопку **Add Property**. Появится диалоговое окно с полями редактирования для различных свойств материала. Измените название свойства с **New Material** на **air**. По умолчанию диэлектрическая проницаемость нового материала равна 1, что нам и требуется для воздуха. Нажмите кнопку **OK**, чтобы завершить создание материала.

## 2.3 Определение материалов для каждой замкнутой области

Теперь нажмите «Метки блока» (кнопка на панели инструментов с изображением зеленых кружков ) и поместите метку блока в середине области решения, между внутренним и внешним квадратами. Как и точки узлов, метки блоков могут быть размещены либо щелчком левой кнопки мыши, либо в диалоговом окне <TAB>.

Щелкните правой кнопкой мыши на узле метки блока, чтобы узел стал красным, что означает, что он выбран. Нажмите пробел, чтобы открыть метку выбранного блока. Появится диалоговое окно, содержащее свойства, назначенные выбранной метке. Установите **Block type** на **Air**. Когда флажок  **Let Triangle choose Mesh Size** установлен, генератор сетки автоматически выбирает размер элемента. Размер сетки по умолчанию подходит для большинства задач. Однако, если вам нужна более мелкая сетка, вы можете снять флажок  **Let Triangle choose Mesh Size** и вручную ввести значение **Mesh size**. Параметр размера ячейки определяет ограничение на максимально возможный размер элементов, разрешенный в соответствующем разделе. Генератор сетки пытается заполнить область почти равносторонними треугольниками, у которых стороны примерно такой же длины, что и указанный параметр **Mesh size**.

## 2.4 Подача напряжения.

Выберите **Properties**, затем **Conductors** в строке меню, затем нажмите кнопку **Add Property**.

Замените имя **New Conductor** на **zero1** (отрицательный электрод). Выберите переключатель  **Prescribed Voltage**. Введите 0 В в качестве значения в соответствующем поле редактирования и нажмите **OK**. Вы только что определили проводник с фиксированным напряжением 0 В, но вам еще предстоит назначить это условие определенной части модели.

Повторите вышеуказанный процесс, но вместо этого назовите новое граничное условие **one1** (положительный электрод) и примените, введите заданное значение напряжения 1В.

Выберите «линии» на панели инструментов, затем щелкните правой кнопкой мыши на каждом из двух сегментов, принадлежащих внутреннему проводнику. Когда сегмент становится красным, вы выбрали его. Теперь нажмите пробел, и появится окно **Segment Property**. Из выпадающего списка **In Conductor** измените выбор с **<None>** на **one1**. Повторите этот процесс для внешнего проводника, но установите тип проводника на **zero1**.

## 2.5 Установление характеристик задачи.

Выберите **Problem** в строке меню. В появившемся диалоговом окне убедитесь, что тип проблемы **Planar**. Установите единицы измерения длины в **Centimeters** и установите для параметра **Depth** (глубина) значение 100 см (длина конденсатора 1 м). Точность решателя по умолчанию  $10^{-8}$  (т.е. решение, определенное с точностью до одной точности), как правило, изменять не нужно. При желании в поле **Comment** можно добавить описательный комментарий.

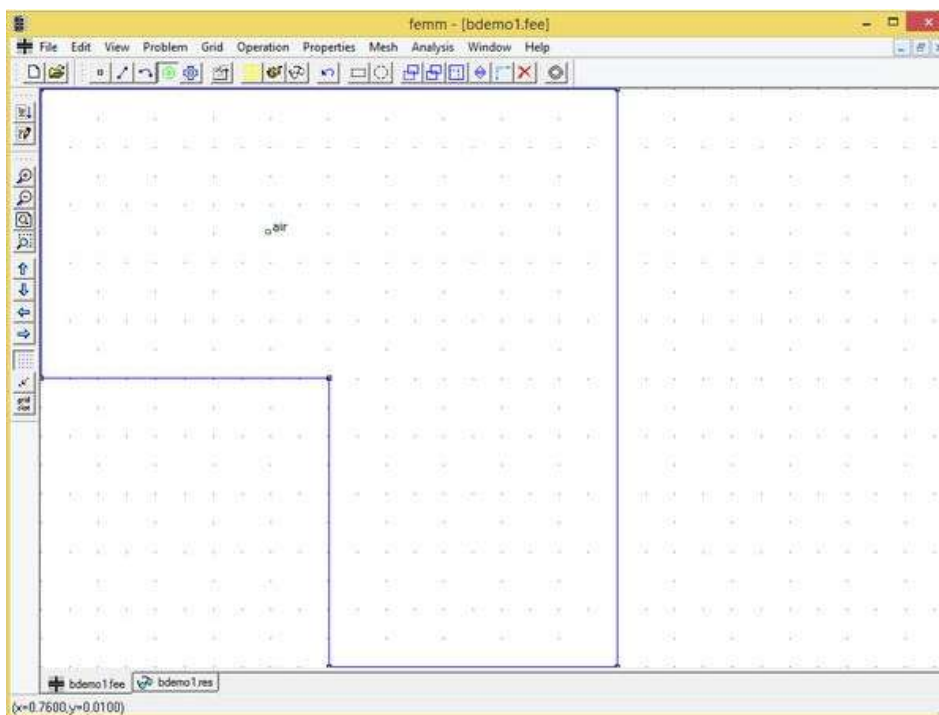





Рисунок 10 - Завершенный пример в препроцессоре электростатики

## 2.6. Генерация сетки и решение.

Теперь сохраните файл и нажмите кнопку на панели инструментов с желтой сеткой: . Это действие создает треугольную сетку. Если интервал сетки кажется слишком мелким или слишком грубым, вы можете выбрать метки блоков или сегменты линий и отрегулировать размер сетки, определенный в свойствах каждого объекта. Когда вы сетка построена, нажмите на изображение кнопки «повернуть кривошип» , чтобы запустить алгоритм конечно-элементного анализа для вашей модели.

Информация о состоянии обработки будет отображаться в диалоговом окне во время работы решателя. Если индикаторы выполнения не движутся, вероятно, следует отменить расчет. Для этой конкретной задачи вычисления должны быть выполнены менее чем за секунду (хотя время решения сильно зависит от скорости машины, выполняющей анализ). После завершения вычислений, окно состояния исчезает.

## 2.7 Визуализация результатов

Нажмите на изображение значка очков , чтобы открыть решение в окне постпроцессора. Решение будет отображено, как показано на рисунке 11. Теперь по умолчанию при запуске постпроцессора поле визуализируется с помощью цвета.

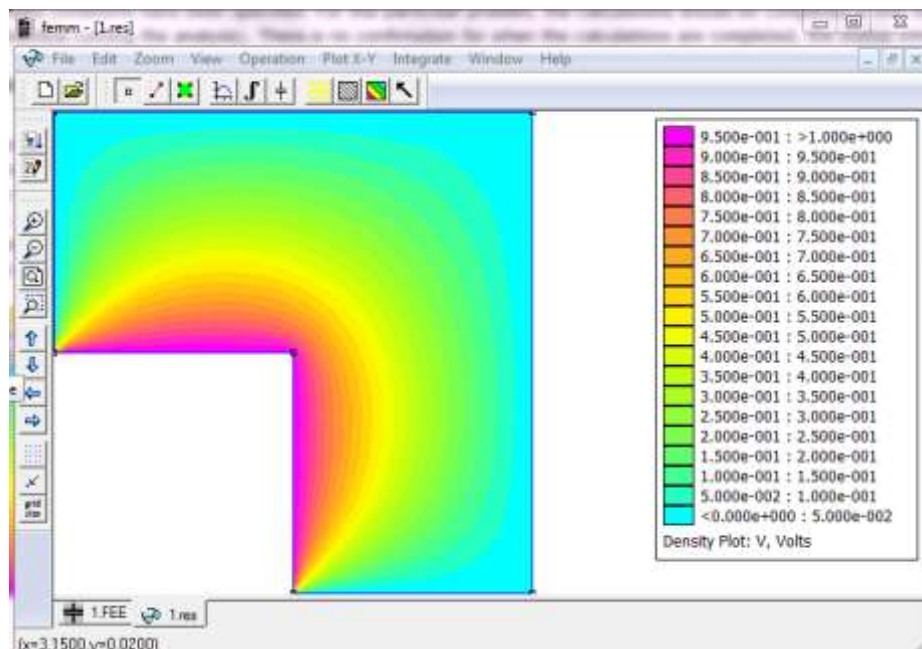


Рисунок 11 – Визуализация поля внутри конденсатора.

Заряд на каждом проводнике можно определить, выбрав **View**, а затем **Conductor Props** в главном меню постпроцессора. Затем появится диалоговое окно, которое отображает напряжение и общий заряд для каждого определенного проводника. Для «одного» проводника с размером ячейки по умолчанию зарегистрированный заряд составляет  $2,26637 \cdot 10^{-11}$  Кл (см. рисунок 12).

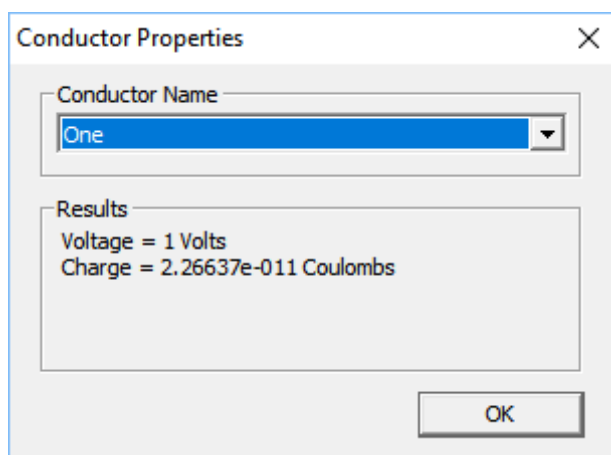


Рисунок 12 – Окно свойства проводника



В этом окне есть все данные для расчета емкости, так как заряд на одной из пластин конденсатора равен произведению емкости на напряжение, следовательно  $C = Q/U$ . Поскольку модель включает лишь  $\frac{1}{4}$  всей геометрии конденсатора, для нахождения его ёмкости следует данное отношение умножить на 4. После несложных вычислений находим ёмкость конденсатора  $9,06548 \cdot 10^{11}$  Ф или 90,6548 пФ.

**Задача 2.2.** Система состоит из двух проводящих сфер, расположенных одна над другой в воздухе, на верхнюю подан потенциал 100 В, на нижнюю - 100 В. Расстояние между центрами сфер 70 м, радиусы сфер одинаковы равны 25 м. Рассчитать заряд верхней сферы.

Рассмотрим пример осесимметричной системы, для которой необходимо использовать специальное «открытое» граничное условие для имитации неограниченной области моделирования.

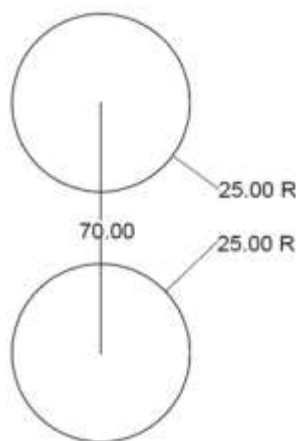




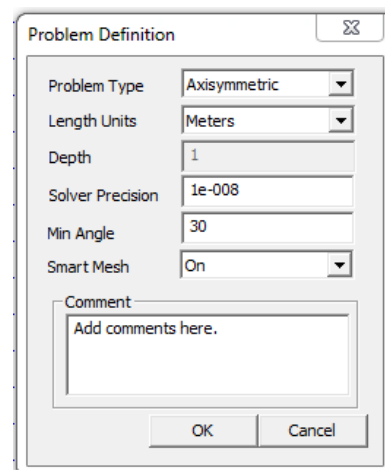
Рисунок 13 - Две проводящие сферы

Расположение сфер изображено на рисунке 11. Две сферы радиусом 25 м каждая расположены в воздухе одна над другой, расстояние между их центрами 70 м. На верхнюю сферу подан потенциал 100 В, а на нижнюю сферу подан потенциал -100 В.

Из соображений симметрии рационально моделировать только четверть вертикального сечения, проходящего через центры сфер. На горизонтальной линии симметрии между двумя сферами потенциал равен 0 В.

Сначала установите свойства **Problem** на осесимметричные **Axisymmetric** и единицы измерения – метры (Meters).

Измените «Размер сетки»  (панель инструментов слева) на 10, что означает, что шаг между двумя ближайшими друг к другу точками теперь равен 10 м, и выберите привязку к сетке, нажав на значок .




Привязка к сетке позволяет точкам и меткам блоков размещаться точно на точках сетки с помощью щелчков левой кнопки мыши.

Для настройки Zoom выберите **View**, а затем **Keyboard** (задание размера области обзора с клавиатуры). В появившемся диалоговом окне укажите координаты нижнего левого угла экрана как (0,0), и координаты верхнего правого угла - (150,150).

Поместите узлы в  $(r, z) = (0,0)$ ,  $(0,10)$  и  $(0,60)$ ,  $(0,150)$  и  $(150,0)$  (воспользуйтесь подсказкой строки состояния для считывания текущей позиции указателя мыши, которая находится в левом нижнем углу на сером фоне).

Соедините линии от  $(0,0)$  до  $(0,10)$  и от  $(0,60)$  до  $(0,150)$ . Эти линии расположены вдоль оси вращения модели. Также нарисуйте линию от  $(0,0)$  до  $(150,0)$  вдоль горизонтальной оси симметрии между двумя сферами.




Выберите изображение  кнопки панели инструментов дуги. Выберите точку  $(0,10)$  (нижняя точка), затем выберите точку  $(0,60)$  (верхняя точка). Когда появится диалоговое окно, введите **180** для **Arc Angle** и 1 для


Max. segment, Degrees

. В FEMM круги моделируются в виде многогранных многоугольников, а **Max. segment, Degrees** задает наибольшую дугу в градусах, которую можно охватить любой стороной многоугольника. Ограничение в  $1^\circ$  представляет довольно точную дискретизацию. (Дуга будет нарисована в направлении против часовой стрелки, поэтому в данном случае важен

порядок выбора точек при ее рисовании.) В результате нарисован полукруг, представляющий собой половину внешней стороны верхней проводящей сферы.

Теперь выберите точку (150,0), за которой следует точка (0,150), и введите  $90^\circ$  для **Arc Angle** и «1» для **Max. segment, Degrees**. Эта дуга будет внешней границей области моделирования.

Отмените выбор , переключитесь в режим «метка блока» (нажав на ) и поместите метку блока  «<None>» внутри замкнутой области между внешней поверхностью проводящей сферы и дугой, представляющей внешнюю границу.

Добавьте  Air к материалам модели, используя **Properties**, а затем **Materials** в основном меню.

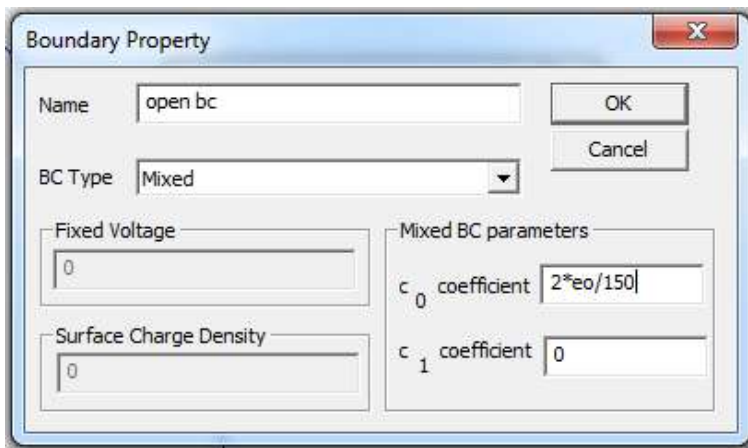
Выберите **Properties**, а затем **Conductors** из меню и создайте проводник с именем «+ 100 В» с заданным напряжением 100 В.

Создайте фиксированную границу напряжения для линии симметрии. Сделайте это, выбрав **Properties**, а затем **Boundary** в основном меню. Нажмите кнопку **Add Property** и создайте свойство с именем **zero**, для которого заданное напряжение равно 0 В.

Зададим свойства для внешней границы, выбрав **Properties**, а затем **Boundary** в основном меню. Переименуйте вашу новую границу **open bc** и измените «BC Type» на **Mixed**. Учитывая, что анализируемая система находится близко к центру дуги (обычно это полный круг, либо полукруг), «коэффициент  $c_0$ » можно установить равным  $(2\epsilon_0/r)$ , где  $r$  - радиус дуги в метрах. В этом случае вы можете позволить программе выполнить вычисления, введя строку:

$$2 * \epsilon_0 / 150$$


в поле для редактирования коэффициента  $c_0$  (коэффициент  $c_1$  должен быть равен нулю). Константа  $\epsilon_0$  зарезервирована в FEMM и равна диэлектрической проницаемости вакуума  $\epsilon_0$  в единицах СИ.



Выберите дугу в четверть круга, представляющую внешнюю границу, щелкнув правой кнопкой мыши на ней или рядом с ней (кнопка панели инструментов «Дуга» также должна быть нажата).

Нажмите пробел и назначьте граничное условие `open bc`.

Выберите полукруг, представляющий поверхность одной из проводящих сфер. Нажмите пробел и назначьте «+ 100 В» в качестве проводника для свойства для этой поверхности.

Переключившись в режим сегмента , назначьте нулевое граничное условие для линии симметрии при  $z = 0$ . В режиме метки блока поставьте метку внутри ограниченной области. Измените `Block type` на `Air`, а `Mesh size` на 1.

После завершения моделируемая область будет выглядеть так, как показано на рисунке 14.

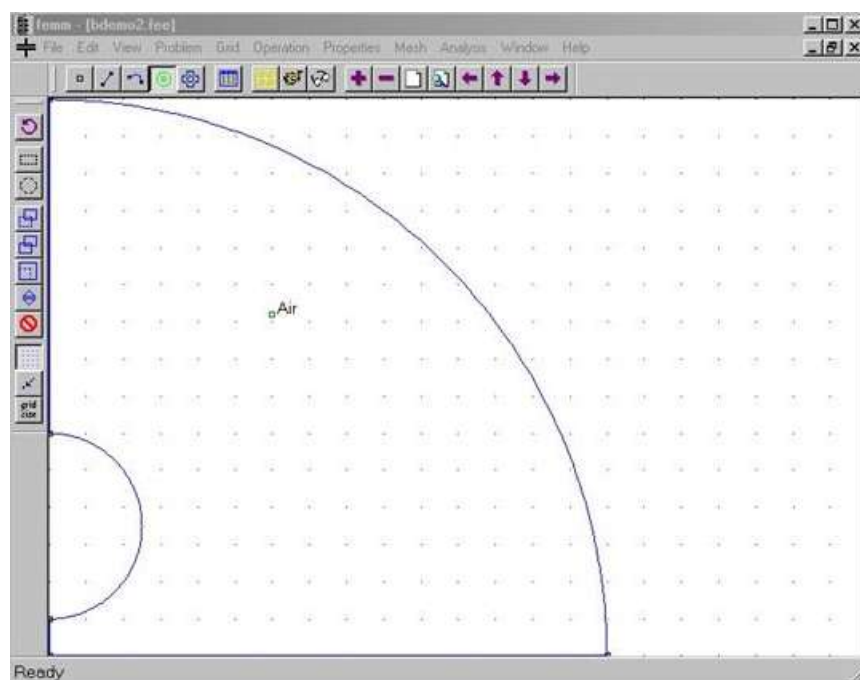



Рисунок 14 - Пример геометрии, показанной в препроцессоре электростатики

Теперь сгенерируйте сетку, выполните расчет и откройте решение в окне постпроцессора , чтобы отобразить результирующие напряжения, как описано в примере 1. Полученное решение должно выглядеть так, как показано на рисунке 15.

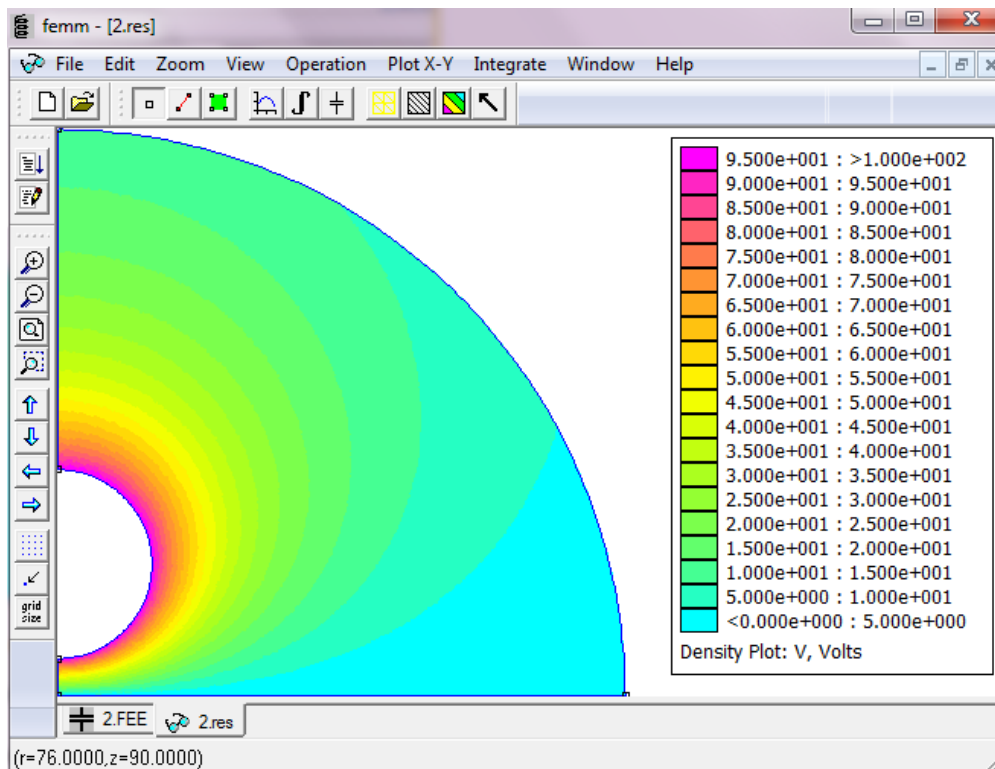



Рисунок 15 - Решение для примера, представленного в электростатическом постпроцессоре

Выбрав **View**, а затем **Conductor Props** из главного меню (или нажав кнопку ) , можно получить заряд  $4.4769e-007$  Кл (0,448 мкКл) на сфере.

В целях сравнения интересно повторить анализ с «нулевым» граничным условием, примененным к внешней границе. При внешней границе  $z=0$  земля находится на конечном расстоянии, а не на бесконечности. В этом случае заряд составляет  $4,58617e-007$  Кл (0,459 мкКл) - наличие искусственной границы немного повышает емкость системы.

### 3. Тепловой поток

**Задача 3.** Рассчитать тепловой поток через стенки 20-тиметровой кирпичной трубы дымохода квадратного сечения, сторона внешней грани которой равна 4 м, а внутренней – 2 м (как показано ниже на рисунке 16). Для расчетов вследствие симметрии достаточно смоделировать только  $\frac{1}{4}$  сечения трубы, а потом полученные аддитивные величины умножить на 4.

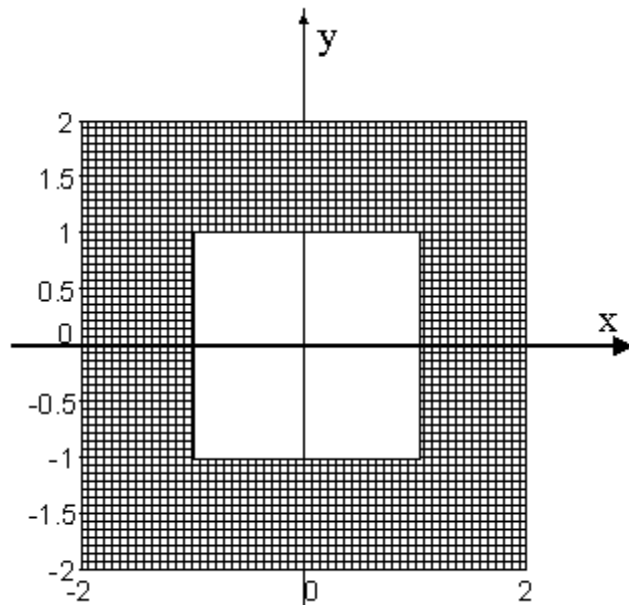




Рисунок 16 - Сечение дымохода

#### 3.1 Задание геометрии

Запустите FEMM, выбрав пункт в разделе меню «Пуск». После запуска программы выберите **File**, затем **New** в главном меню. Появится диалоговое окно, позволяющее выбрать тип создаваемой проблемы. Выберите **Heat Flow Problem** из выпадающего списка для текущего примера. Выберите «узлы» на панели инструментов (это самая крайняя кнопка слева: ) и разместите 6 узлов для угла поля (например, (0,1), (1,1), (1,0), (2,0), (2,2) и (0,2)). Узлы можно размещать, перемещая указатель мыши в нужное место и нажимая левую кнопку мыши, или нажимая клавишу <TAB> и вручную вводя координаты точки через всплывающее диалоговое окно.



Выберите «линии» на панели инструментов (вторая кнопка слева с синей линией: ). Чтобы выбрать узел в качестве конечной точки линии, щелкните левой кнопкой мыши рядом с каждой требуемой конечной точкой. Соедините точки, как показано на рисунке 17.

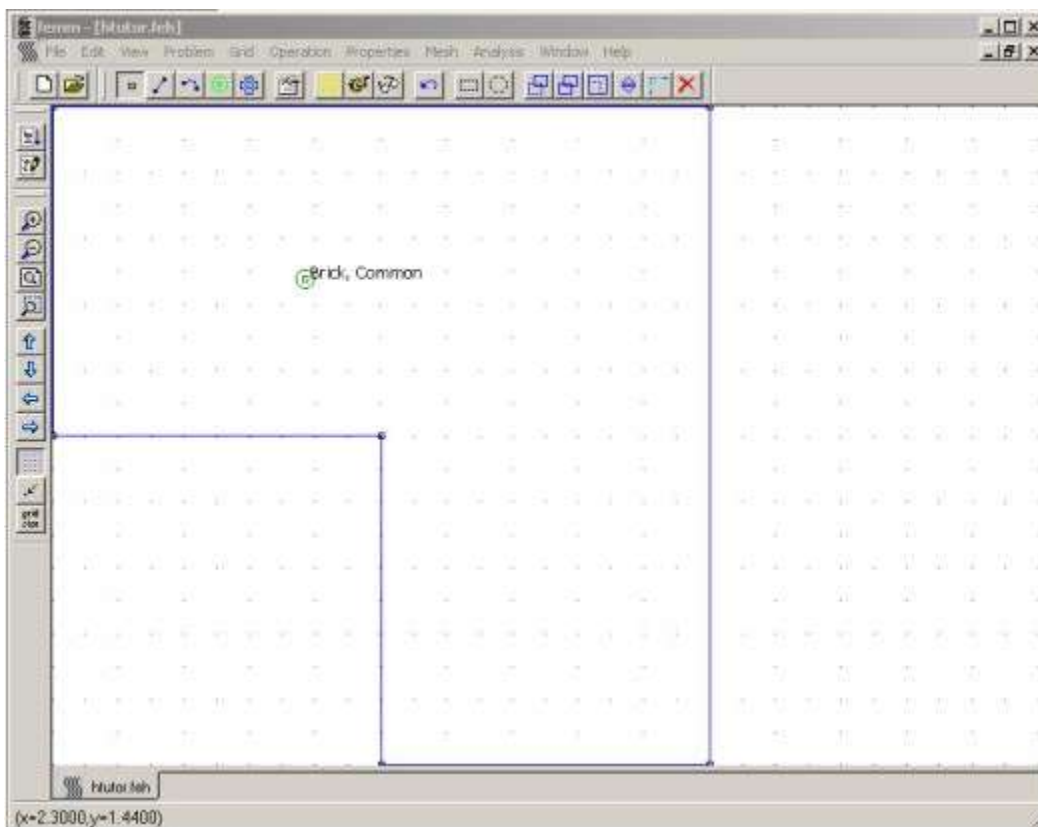






Рисунок 17 – Завершенная модель в препроцессоре

### 3.2 Задание материалов модели

Выберите **Properties**, а затем **Materials Library** в главном меню. Появится диалоговое окно, которое позволит вам перетаскивать материалы из библиотеки в вашу модель. В библиотеке откройте папку  **Nonmetallic Solids**, а затем папку  **Bricks** (кирпичи) внутри нее. Перетащите элемент  **Brick, Common** из библиотеки в модель. Нажмите кнопку **OK**, чтобы выйти из библиотеки материалов.

### 3.3 Задание материалов для каждой замкнутой области модели


Теперь нажмите «Метки блока» (кнопка на панели инструментов с зелеными кружками: ) и поместите метку блока в середине области решения, между внутренним и внешним квадратами. Как и точки узлов,

метки блоков могут быть размещены либо щелчком левой кнопки мыши, либо в диалоговом окне <TAB>.

Щелкните правой кнопкой мыши узел метки блока для внешнего блока, чтобы узел стал красным, обозначая, что он выбран. Нажмите пробел, чтобы «открыть» метку выбранного блока. Появится диалоговое окно, содержащее свойства, назначенные выбранной метке. Установите **Block type** на **Brick, Common**. Снимите флажок  **Let Triangle choose Mesh Size** и введите 0.05 для **Mesh size**. Параметр размера ячейки определяет ограничение на максимально возможный размер элементов, разрешенный в соответствующем разделе. Генератор сетки пытается заполнить область почти равносторонними треугольниками, у которых стороны примерно такой же длины, что и указанный параметр **Mesh size**. Когда установлен флажок  **Let Triangle choose Mesh Size**, генератор сетки выбирает размер элемента автоматически, что обычно приводит к несколько грубой сетке.

### 3.4 Задание граничных условий

Выберите **Properties**, а затем **Boundary** в строке меню, затем нажмите кнопку **Add Property**. Замените название **New Boundary** на **Inner Boundary**. Выберите **Convection** из списка **BC Type**. Для внутренней поверхности дымохода будем считать, что температура воздуха внутри дымохода составляет  $800$  К, а коэффициент теплопередачи -  $10$  Вт/м\*К. Введите эти значения в соответствующие активные поля редактирования. Нажмите **OK**. Вы только что определили граничное условие теплопередачи для внутренней поверхности дымохода. Повторите описанный выше процесс, но вместо этого назовите новое граничное условие **Outer Boundary** и примените коэффициент теплопередачи  $5$  Вт/м\*К и температуру  $300$  К.



Выберите  на панели инструментов, затем щелкните правой кнопкой мыши на каждом из двух сегментов, принадлежащих внутренней поверхности дымохода. Когда сегмент становится красным, вы выбрали его. Теперь нажмите пробел, и появится окно **Segment Property**. Из раскрывающегося

списка **Boundary** измените выбор с **<None>** на **Inner Boundary**. Повторите этот процесс для внешней границы, но установите тип границы **Outer Boundary**.

### 3.5 Установление характеристик задачи


Выберите **Problem** в строке меню. В появившемся диалоговом окне убедитесь, что тип проблемы **Planar**. Установите единицы измерения длины в **Meters** и установите для параметра **Depth** (глубина) значение 20м. Точность решателя, по умолчанию, равна  $10^{-8}$ . При желании в поле «Комментарий» можно добавить описательный комментарий.


### 3.6 Создание сетки и запуск конечно-элементного анализа

Теперь сохраните файл и нажмите кнопку на панели инструментов с желтой сеткой: . Это действие создает треугольную сетку для вашей задачи. Теперь нажмите кнопку , чтобы запустить алгоритм конечно-элементного анализа (решатель) для вашей модели.

Информация о состоянии обработки будет отображаться в диалоговом окне во время работы решателя. Если индикаторы выполнения не движутся, вероятно, следует отменить расчет. Для данной задачи вычисления должны быть выполнены менее чем за секунду (хотя время решения сильно зависит от скорости машины, выполняющей анализ). Когда вычисления завершены, окно состояния просто исчезает.

### 3.7 Визуализация результатов

Нажмите на значок , чтобы визуализировать поле температур (в К). Решение будет отображено, как показано на рисунке 18.

Для определения теплового потока, который подходит к внутренней поверхности трубы, нажмите кнопку , чтобы перевести постпроцессор в режим контура. В этом режиме определите контур, вдоль которого будет выполнено интегрирование теплового потока.

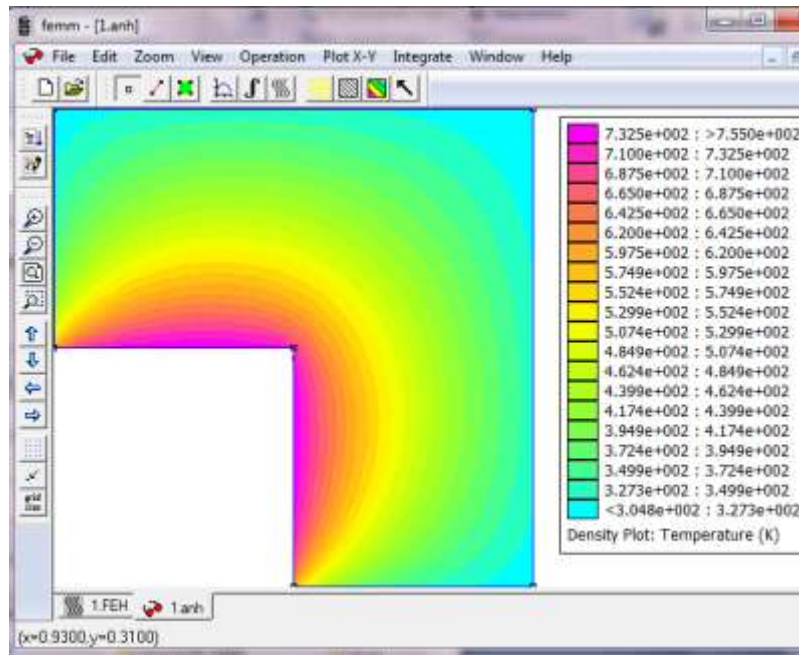



Рисунок 18 – Визуализация распределения поля температур, отображаемого в постпроцессоре

Создайте контур, который идет из центра дымохода. С помощью мыши или диалогового окна, вызываемого клавишей <TAB> постройте контур по узловым точкам (0,1.5), (1.5,1.5) и (1.5,0). Нажмите кнопку , чтобы оценить тепловой поток, распространяющийся по нормали к контуру, в появившемся диалоговом окне выберите **Heat Flux (F.n)** и нажмите **OK**. Затем появится результат интегрирования, который должен быть равен 14883,6 Вт, если задача была правильно построена. Чтобы получить результат для всего дымохода, полученное значение нужно умножить на четыре, что даст значение теплового потока внутри трубы 59534,4 Вт.

### Задание 1

По описаниям, представленным выше, создайте 4 программы в FEMM:

- 1) магнитное поле соленоида,
- 2) электрическое поле квадратного конденсатора,
- 3) электрическое поле между двух заряженных сфер,
- 4) поле температур в поперечном сечении трубы дымохода):

## Задание 2

Пользуясь предложенной выше пошаговой инструкцией работы с программной средой FEMM, проведите моделирование поля катушки с железным сердечником, а геометрические параметры задайте из таблицы в соответствии со своим вариантом.

Таблица 1 – Исходные данные для выполнения задания

Номер варианта	A		B		C		D		I	N
	rA	zA	rB	zB	rC	zC	rD	zD		
1	2	2	4	2	4	-2	2	-2	2	200
2	1	3	2	3	2	-3	1	-3	2	200
3	4	1	6	1	6	-1	4	-1	2	200
4	2	2.5	2.5	2.5	2.5	-2.5	2	-2.5	2	200
5	1	0.5	5	0.5	5	-0.5	1	-0.5	2	200
6	2	2	4	2	4	-2	2	-2	4	150
7	1	3	2	3	2	-3	1	-3	4	150
8	4	1	6	1	6	-1	4	-1	4	150
9	2	2.5	2.5	2.5	2.5	-2.5	2	-2.5	4	150
10	1	0.5	5	0.5	5	-0.5	1	-0.5	4	150
11	2	2	4	2	4	-2	2	-2	5	100
12	1	3	2	3	2	-3	1	-3	5	100
13	4	1	6	1	6	-1	4	-1	5	100
14	2	2.5	2.5	2.5	2.5	-2.5	2	-2.5	5	100
15	1	0.5	5	0.5	5	-0.5	1	-0.5	5	100

В качестве отчета сопоставьте график визуализации модуля вектора магнитной индукции с помощью цвета (на рисунке 19 слева) и график

распределения модуля магнитной индукции вдоль оси катушки (на рисунке 19 справа).

Таким образом, в вашем отчете (как и в образце на рисунке 19) должно быть видно, что магнитная индукция возрастает по мере приближения к катушке и начинает резко возрастать в её сердечнике, достигая максимума в его середине. (Контур, вдоль которого построен график, должен быть выделен красным цветом.)

Пример рисунка для оформления отчета

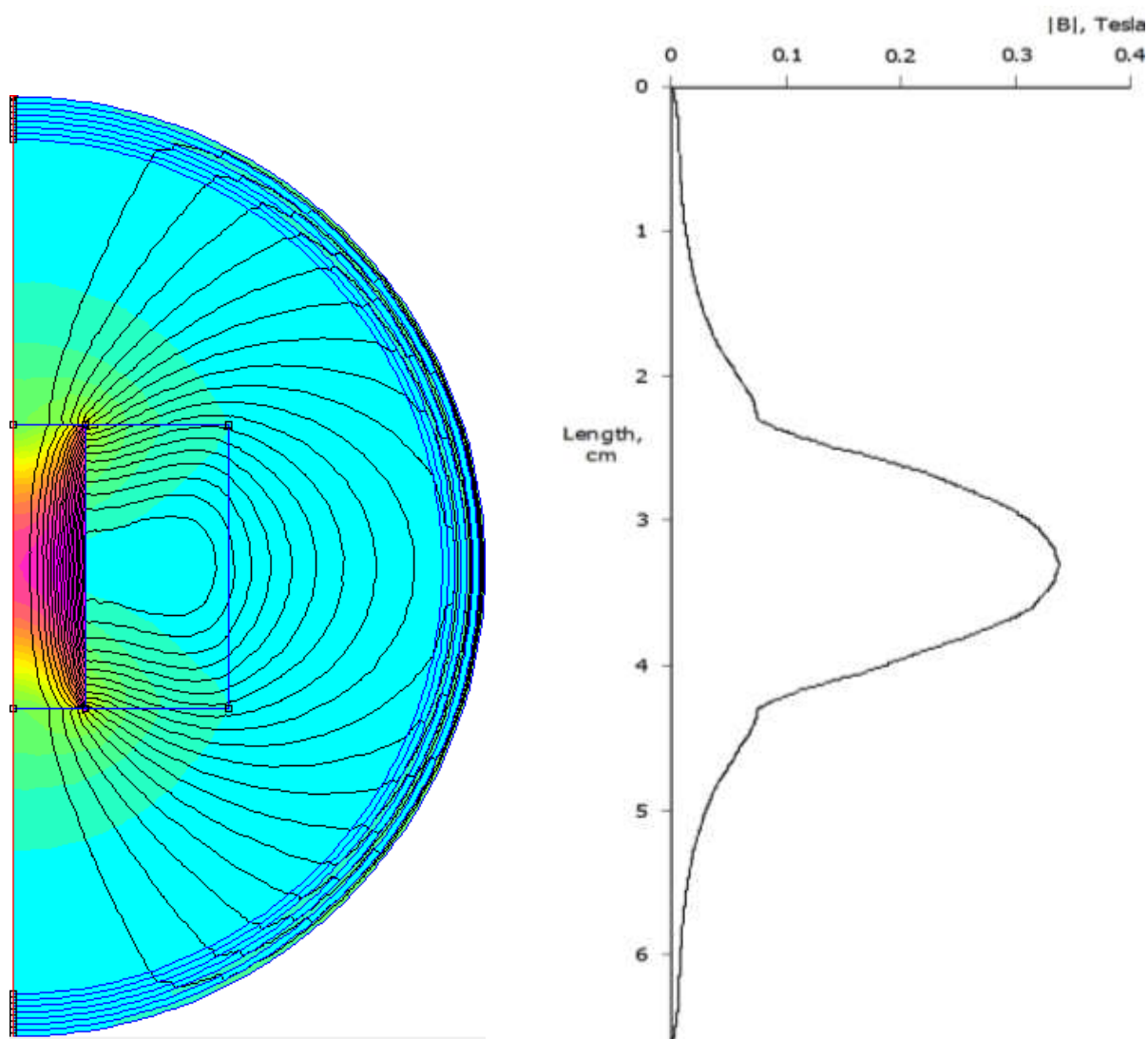


Рисунок 19 – График, показывающий величину магнитной индукции в точках, лежащих на оси катушки индуктивности

### КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. Как задать геометрию модели, используя узлы, сегменты, дуги?
2. Как добавить материал в вашу модель и как распределить его по регионам?
3. Как задать границу для вашей модели?



4. Как определить значение поля в данной точке?
5. Как построить значения поля вдоль линии?
6. Как рассчитать индуктивность и сопротивление?
7. Как визуализировать поле с помощью цвета?
8. Как создать «открытое» граничное условие для анализа неограниченной задачи?
9. Как задать размер сетки конечных элементов?
10. Как применить граничные условия к отрезкам в модели?
11. Как запустить генератор сетки и решатель?
12. Как запустить постпроцессор и вычислить полученный тепловой поток?

#### ИНФОРМАЦИОННЫЕ ИСТОЧНИКИ

1. Галлагер Р. Метод конечных элементов. Основы. М.: Мир, 1984 г. – 428 с.
  2. Finite Element Method Magnetics: Magnetics Tutorial [электронный ресурс] URL: <http://www.femm.info/wiki/MagneticsTutorial>.
  3. Finite Element Method Magnetics: Electrostatics Tutorial [электронный ресурс] URL: <http://www.femm.info/wiki/electrostaticstutorial>.
  4. Finite Element Method Magnetics: Heat Flow Tutorial [электронный ресурс] URL: <http://www.femm.info/wiki/HeatFlowTutorial>.
  5. Finite Element Method Magnetics [электронный ресурс] URL: <http://www.femm.info>.
- Митчелл Э., Уэйт Р. Метод конечных элементов для уравнений с частными производными. М.: Мир, 1981. - 216 с.

## ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА №4

### Использование микроконтроллера для демонстрации обратного пьезоэффекта

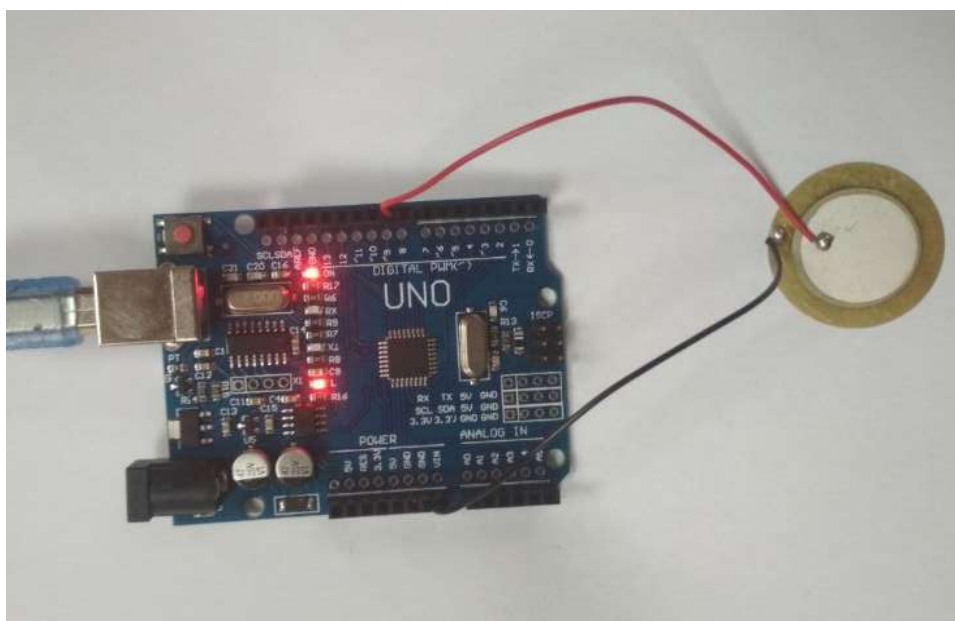
**Цель:** отработка навыков применения микросистемной технике для демонстрации обратного пьезоэлектрического эффекта.

#### ОБЩИЕ СВЕДЕНИЯ

Для наглядной демонстрации обратного пьезоэлектрического эффекта был использован микроконтроллер ATmega328 и простая пьезопластина из цирконат-титаната свинца, покрытая с двух сторон проводящим слоем из серебра, к которому припаяны контакты, выведенные для удобства на одну сторону. Для программирования микроконтроллера используется среда разработки Arduino IDE.

Сущность обратного пьезоэлектрического эффекта заключается в том, что электрическая поляризация вызывает механическое напряжение в материале или изменение геометрических размеров пьезоэлементов. Данное физическое явление широко используется в современной технике и различных устройствах, начиная от простых звуковых излучателей, заканчивая сложными системами точного позиционирования.

Например, при подключении пластины из пьезоэлектрика к источнику переменного электрического напряжения, в ней возникают механические колебания, которые генерируют звуковую волну в воздухе. В нашей модели, на выход микроконтроллера подаётся сигнал, прямоугольная «волна», заданной частоты.



Выводы пьезопластины подключите к пину с ШИМ (~9) и земле (GND). Определите частоты нот первой октавы (например, нота «ЛЯ», которую издают камертоны, это звуковая волна с частотой 440 Гц). С помощью функции `tone(номер пина, частота, длительность сигнала в мс)` на пьезопластину можно подать сигнал с частотой одной из нот и проиграть, например, гамму. Пример программного кода для микроконтроллера приведен ниже.

```
#define BIP 9 //9-номер пина для подключения пьезопластины
#define DO 262 // (Гц) частота звучания ноты "до" первой октавы
#define RE 294 // (Гц) частота звучания ноты "ре" первой октавы
#define MI 330 // (Гц) частота звучания ноты "ми" первой октавы
#define FA 349 // (Гц) частота звучания ноты "фа" первой октавы
#define SOL 392 // (Гц) частота звучания ноты "соль" первой октавы
#define LYA 440 // (Гц) частота звучания ноты "ля" первой октавы
#define SI 494 // (Гц) частота звучания ноты "си" первой октавы
int noty[] = {DO, RE, MI, FA, SOL, LYA, SI, 523};

void setup() // Настройки входа/выхода, код, который выполняется
один раз
{
    pinMode(BIP, OUTPUT);
}

void loop() // Основной (бесконечный) цикл программы
{
    for (int i = 0; i <= 7; i++)
    {
        tone(BIP, noty[i], 400);
        delay(600);
    }
    for (int i = 7; i >= 0; i--)
    {
        tone(BIP, noty[i], 200);
        delay(400);
    }
    delay(600);
}
```

#### Рисунок 4 – Программный код

Если звучание пьезопластины будет очень тихим, то опустите ее в стакан (можно пластиковый) и вы обнаружите, что звук стал громче (стакан по форме схож с громкоговорителем, он усиливает звук).

#### Задание 1

По описанию, представленному выше запрограммируйте микроконтроллер на проигрывание гаммы первой октавы.

## Задание 2

Выполните аналогично заданию 1 симуляцию в среде <https://www.tinkercad.com/> в разделе Circuits, используйте вместо пьезопластины динамик.

## Задание 3

Проиграйте мелодию по представленным ниже нотам, используя пьезопластину и микроконтроллер, предложите способ усиления звука от пьезопластины, используя информацию о форме громкоговорителя.

М.Красев

The musical score is written in 4/4 time and consists of three staves. The first staff has notes with fingerings 0, 2, 2, 0, 3, 2, 0, 3 and dynamics i, p, p, i, p, p, p, p. The second and third staves have notes with fingerings 2, 1 and dynamics i, m, i, m, p, p, i, p, p, p. The piece ends with a double bar line.

Замечание

I II III IV V VI VII  
до ре ми фа соль ля си

## ИНФОРМАЦИОННЫЕ ИСТОЧНИКИ

1. Шарапов В. М. Датчики: Справочное пособие / Под общ. ред. В.М. Шарапова, Е.С. Полищука Москва: Техносфера, 2012. 624 с.
2. <https://www.arduino.cc/en/software>
3. <https://www.tinkercad.com>