

УДК 519.68

ИНТЕГРИРОВАННАЯ ИНФОРМАЦИОННО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКАЯ СРЕДА ДЛЯ РАЗРАБОТКИ УРАВНЕНИЙ СОСТОЯНИЙ

О. В. Вербицкая, О. В. Кузнецова, Е. Е. Миронова, А. Т. Сапожников, В. П. Соколов
(РФЯЦ-ВНИИТФ)

Описывается интерфейсная оболочка комплекса программ ТУР, представляющая собой специализированную интегрированную информационно-технологическую среду — рабочее место разработчиков уравнений состояний. Реализованы различные специализированные базы данных для организации хранения результатов расчетов, экспериментальных данных и справочной информации. Среда позволяет автоматизировать расчетные и исследовательские операции, проводимые по комплексу ТУР.

Введение

В РФЯЦ-ВНИИТФ длительное время ведутся работы по созданию различных информационно-технологических средств, обеспечивающих полный цикл работ по построению уравнений состояний (УРСов), начиная от этапа их исследования и до реализации в виде универсальных высокоэффективных программных модулей, которые могут использоваться при проведении массовых расчетов на ЭВМ. Эти средства разнородны и ориентированы как на разработчиков УРСов, так и на специалистов в области математического моделирования физических процессов.

Создание современных УРСов является трудоемким делом и невозможно без использования специализированных средств, которые, как правило, должны содержать:

- достаточно полную базу экспериментальных данных, включающую данные по ударному сжатию сплошных и пористых образцов, по изэнтропической разгрузке и статическому сжатию, а также по теплофизическим свойствам при различных давлениях и температурах;
- набор разных по математической форме УРСов, позволяющих с точностью, не ниже чем достигнута в эксперименте, описать поведение веществ как в ограниченном, так и в широком диапазоне плотностей и температур;
- комплекс программ, позволяющий из базы данных или путем расчета по теоретическим

моделям получить необходимую информацию и по ней подбирать оптимальные параметры УРСов или составлять оптимальные таблицы.

Этим требованиям удовлетворяет созданный во ВНИИТФ комплекс программ ТУР. Более детально комплекс описывается в статье [1], здесь же приводится лишь краткая его характеристика.

Организация работ в комплексе ТУР

Комплекс ТУР предоставляет набор специализированных программ для подбора оптимальных значений параметров аналитических УРСов, составления таблиц термодинамических функций на оптимальных сетках, построения широкодиапазонных УРСов на основе локальных, проведения термодинамических и элементарных газодинамических расчетов по УРСам и теоретическим моделям, обработки экспериментальных данных по ударной сжимаемости.

Организационно комплекс ТУР состоит из четырех логических библиотек:

- специализированных программ;
- теоретических моделей термодинамических свойств веществ;
- УРСов;
- наборов констант (НК) УРСов для конкретных веществ.

Специализированные программы в процессе выполнения используют УРСы из библиотеки

УРСов. Возможен доступ к любому уравнению. Теоретические модели используются при построении широкодиапазонных табличных УРСов.

Библиотека УРСов комплекса содержит УРСы двух видов:

- выступающие как источник информации о термодинамических свойствах веществ. В силу сложной организации и низкой экономичности эти УРСы не могут быть применены в прикладных программах массового счета, но зато полезны при построении прикладных УРСов;
- прикладные УРСы, предназначенные для вычислений на ЭВМ в прикладных комплексах.

Библиотека НК содержит наборы параметров, используемые программами УРСов.

Все библиотеки комплекса не являются законченными и в любой момент могут быть пополнены новыми объектами.

Процесс построения УРСов предполагает определенный порядок работ. Упрощенная схема этого процесса приведена на рис. 1.

Как видно из схемы, процесс имеет в значительной степени итерационный характер. Наиболее кропотливая работа выполняется на этапах визуального представления расчетно-теоретических данных, сравнения их с экспериментальными данными, а также анализа результатов построения.

Такой порядок работ приводит к возникновению определенных организационных трудно-

стей. Во-первых, пользователь должен уделять много внимания последовательности промежуточных действий и отдельным манипуляциям, которые нужно в это время производить, вместо того чтобы сосредоточиться на содержательной стороне построения; во-вторых, возникает опасность неправильной компоновки данных из разнообразных многочисленных файлов во время проведения анализа данных.

Структура информационно-технологической среды

Для облегчения проведения исследований была разработана интерфейсная оболочка комплекса ТУР, представляющая собой специализированную интегрированную информационно-технологическую среду (ИТС) (рабочее место разработчиков УРСов), автоматизирующую расчетные и исследовательские операции. Структура оболочки приведена на рис. 2.

Центральное место в ИТС занимает набор графических программ, обеспечивающий интерфейс с пользователем и интеграцию отдельных компонентов в единое целое.

Собственно интерфейсную оболочку можно условно разбить на пять модулей:

управление — вход в интерфейс и выбор вида работ;

проведение расчетов — выбор специализированных программ, задание начальных данных к ним, выполнение вычислений, сохранение результатов расчетов;

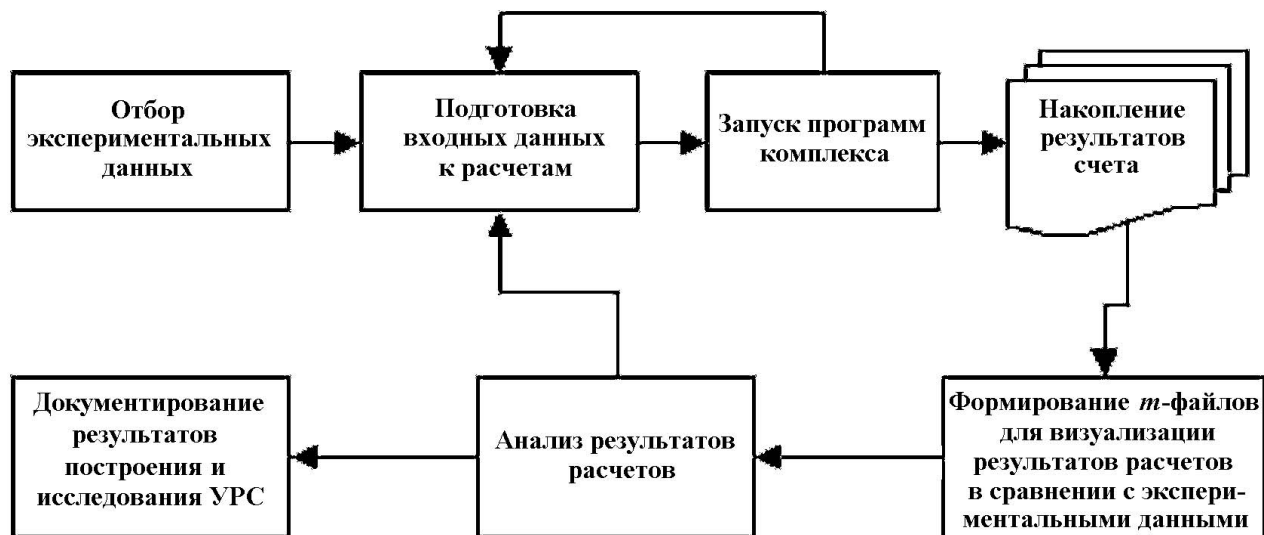


Рис. 1. Схема проведения работ при построении и исследовании УРСов

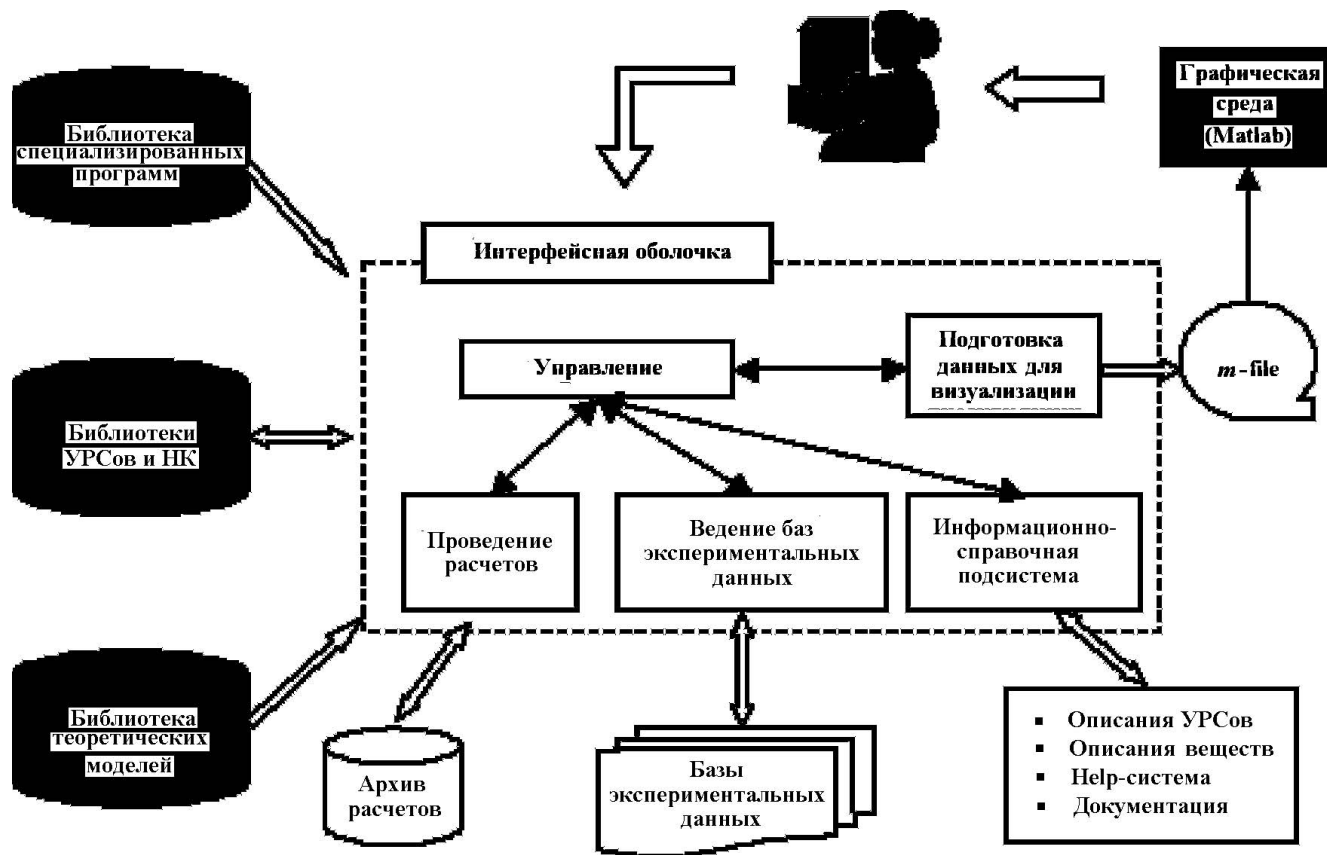


Рис. 2. Информационно-логическая схема оболочки

ведение баз экспериментальных данных — отбор необходимых данных и пополнение новыми данными;

информационно-справочная подсистема — обеспечение пользователя справочными данными обо всех функциональных объектах среды и порядке работы с интерфейсной оболочкой;

подготовка данных для визуализации — подбор данных из результатов проведенных расчетов и баз экспериментальных данных и компоновка их для графической системы (в настоящее время Matlab).

В рамках среды реализованы различные специализированные базы данных для организации хранения результатов расчетов, экспериментальных данных и справочной информации. Последние две базы, содержащие функциональные данные, могут пополняться за счет данных, вводимых привилегированными пользователями или администратором ИТС.

Серым цветом на схеме (см. рис. 2) окрашены компоненты, включенные в среду и ранее ис-

пользовавшиеся автономно. При этом возможность проведения работ с ними по традиционной технологии сохраняется и теперь.

Взаимодействие пользователя с программами комплекса ТУР

Рассмотрим некоторые наиболее важные компоненты среды, обеспечивающие выполнение этапов работ в традиционной технологии, через описание реализованного пользовательского интерфейса.

Выбор этапа работы осуществляется в главном окне управления комплексом ТУР (рис. 3). Это окно позволяет перейти к одному из двух видов работы с комплексом:

- ведению информационно-справочной системы по УРСам и веществам, которое осуществляется через подсистему STORM;
- проведению расчетов по специализированным программам (подсистема BRIZ).

Первоначально STORM и BRIZ представляли собой две самостоятельные системы. Позднее они были объединены в единый комплекс.

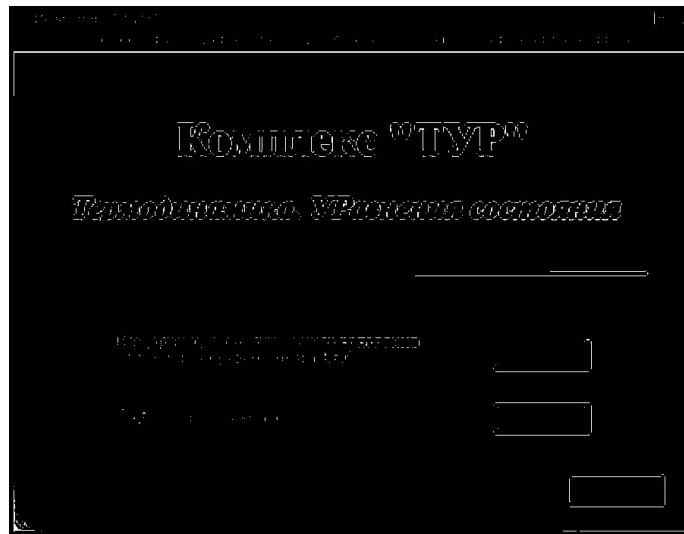


Рис. 3. Главное окно управления комплексом ТУР

Запуск программ комплекса. Выбор специализированной программы для расчетов происходит в окне, изображенном на рис. 4. Для формирования варианта входных данных и запуска каждой из программ имеется свое собственное специальное окно. Описание программ приводится в работе [1].

Все окна специализированных программ организованы по единому принципу. Они обеспечивают подготовку, хранение и редактирование входных данных, а также запуск этих программ. Для проведения расчета, помимо входных данных конкретной программы, пользователь дол-

жен указать УРС и НК. Выбор УРСа осуществляется из каталога библиотеки УРСов комплекса ТУР. Допускается оперативное редактирование некоторых НК. Если пользователь не знаком с программой и у него возникают трудности в задании входных данных, он может с помощью специальной кнопки вызвать пример, демонстрирующий заполнение всех полей оконного интерфейса, и произвести тестовый расчет, иллюстрирующий порядок вычислений. Такие примеры имеются для каждой специализированной программы.



Рис. 4. Выбор специализированных программ

На рис. 5 приведено окно для запуска специализированной программы UDARM (расчет ударных адиабат), применяемой при построении УРСов.

После выполнения расчета в рамках данного интерфейса пользователь получает доступ к результатам счета (кнопка "Просмотреть"), возможность отобразить результаты на графике (кнопка "График") и сохранить их в архиве результатов счета.

Визуализация результатов расчетов.

Данная операция может выполняться на различных этапах проведения исследований. В окне для работы с графиками имеется список термодинамических функций, по которым можно строить графики (рис. 6). Содержимое списка зависит от конкретной счетной программы. Здесь же можно установить масштаб графика, выбрать формат его представления.

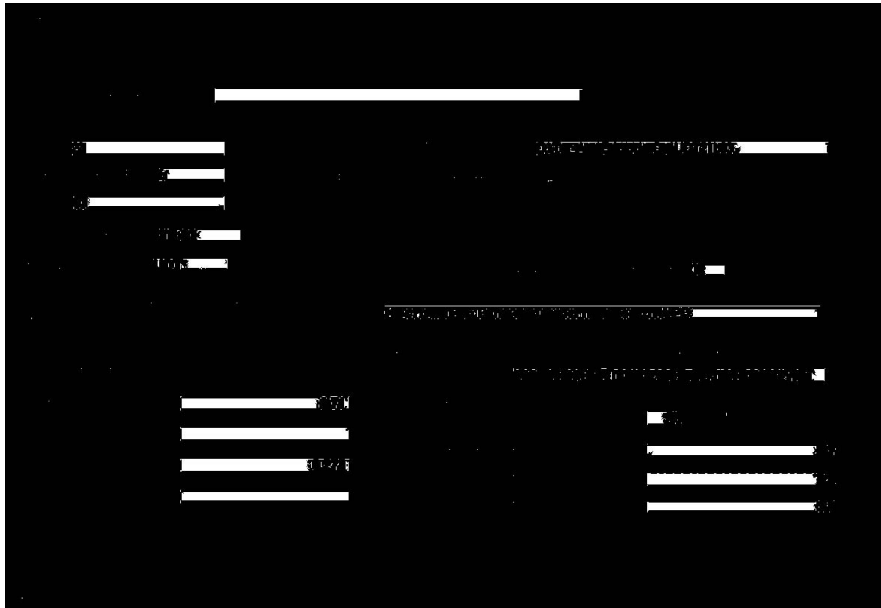


Рис. 5. Запуск программы UDARM

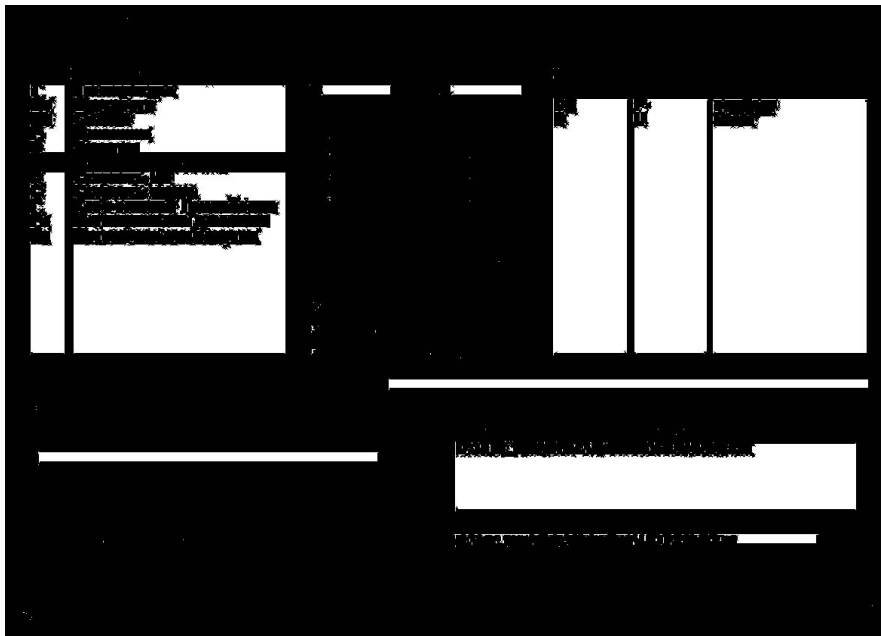


Рис. 6. Построение графиков

По отобраным для визуализации данным автоматически формируется входной *m*-файл для системы Matlab, вызов которой пользователь может осуществить тут же, нажав специальную кнопку.

Отбор экспериментальных данных. Часто бывает необходимо сравнить данные, полученные в результате расчетов, с аналогичными экспериментальными данными. Отбор экспериментальных данных можно выполнить с помощью оконного интерфейса, представленного на рис. 7. Расчетные данные выбираются из архи-

ва результатов счета, а экспериментальные данные — из соответствующих баз.

Ведение баз экспериментальных данных. В рамках ИТС созданы две базы экспериментальных данных, содержащие сведения из источников [2] и [3, 4]. Базы отличаются по составу и структуре данных, что нашло отражение в реализации обслуживающего их интерфейса.

Работа с базой данных по ударно-волновому сжатию и адиабатическому расширению конденсированных веществ [2] осуществляется с помощью окна, представленного на рис. 8.

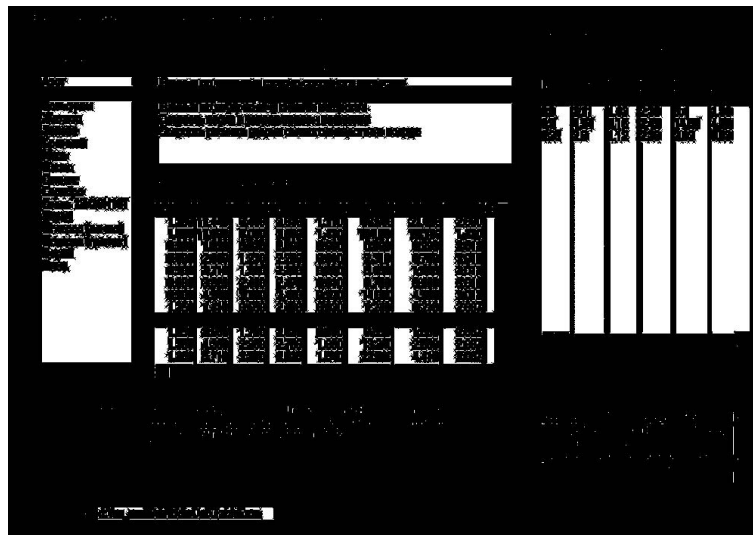


Рис. 7. Выбор экспериментальных данных

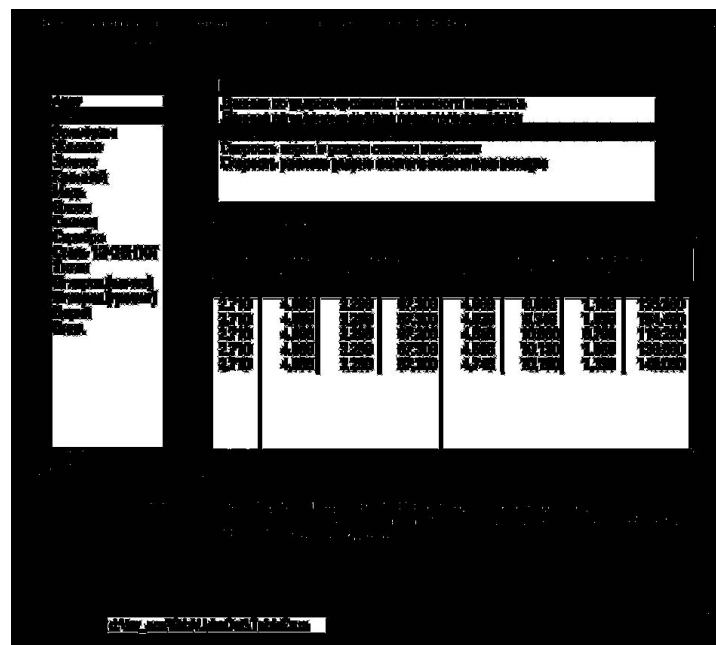


Рис. 8. Окно для работы с экспериментальными данными из справочника [2]

Существует возможность записать необходимые экспериментальные данные в текстовый файл для последующего анализа и обработки.

Пополнение баз новыми данными и их сопровождение осуществляет администратор комплекса ТУР.

Информационно-справочная подсистема.

В состав ИТС входит подсистема STORM, являющаяся по сути универсальной информационно-справочной системой комплекса ТУР. Основу этой системы составляет архив анкет УРСов и НК к ним. Анкеты создаются параллельно с разработкой УРСов и заносятся в архив администратором комплекса. Головное окно подсистемы представлено на рис. 9. С помощью него обычный пользователь может получить полную информацию о составе библиотек УРСов и НК. Согласование содержимого анкет и наполнения библиотек возлагается на администратора комплекса.

Анкета УРСа (рис. 10) содержит общую информацию об УРСе: кодовый номер, имя, список создателей УРСа, при необходимости расширенное описание в виде комментария. Кроме того, в анкете есть такие важные характеристики, как описание модели, области физической точности, физический или математический смысл задаваемых констант и др. Дополнительно к анкете

УРСа может быть подключен отчет по этому УРСу.

Для каждого УРСа создается некоторое множество НК. Характеристики НК описываются в соответствующей анкете (рис. 11). Анкета НК содержит такие сведения, как номер НК, название вещества, авторы НК, область применимости УРСа с данным НК, ссылки на источники, нулевые ($T = 0$; $P = 0$) и нормальные ($T = 300\text{ К}$, $P = 10^{-4}\text{ ГПа}$) условия. Может быть подключен документ, иллюстрирующий результаты сравнения расчетных и экспериментальных данных вещества.

Помимо представленной в окне информации, пользователь может получить сведения об области физической точности, термодинамической совместности, непрерывности, гладкости УРСа и др.

Имеется возможность через головное окно просмотреть содержимое всего НК или его части, если набор представлен в виде таблиц большого размера.

В дополнение к архиву анкет подсистема STORM снабжена Help-системой, охватывающей широкий круг вопросов, начиная от функционального описания специализированных программ и кончая подробным описанием порядка работы с оболочкой.

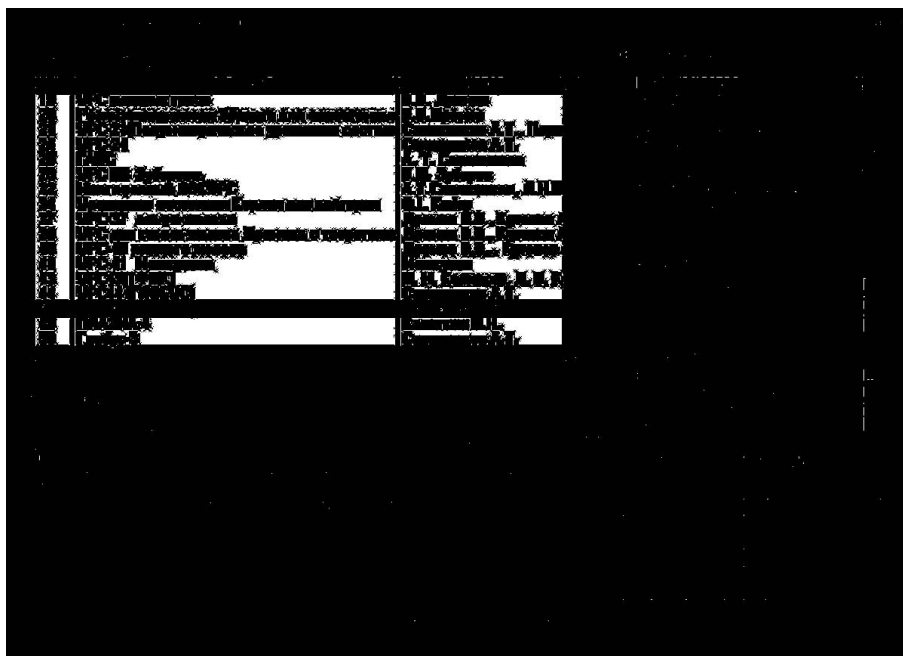


Рис. 9. Информационно-справочная система по УРСам и веществам

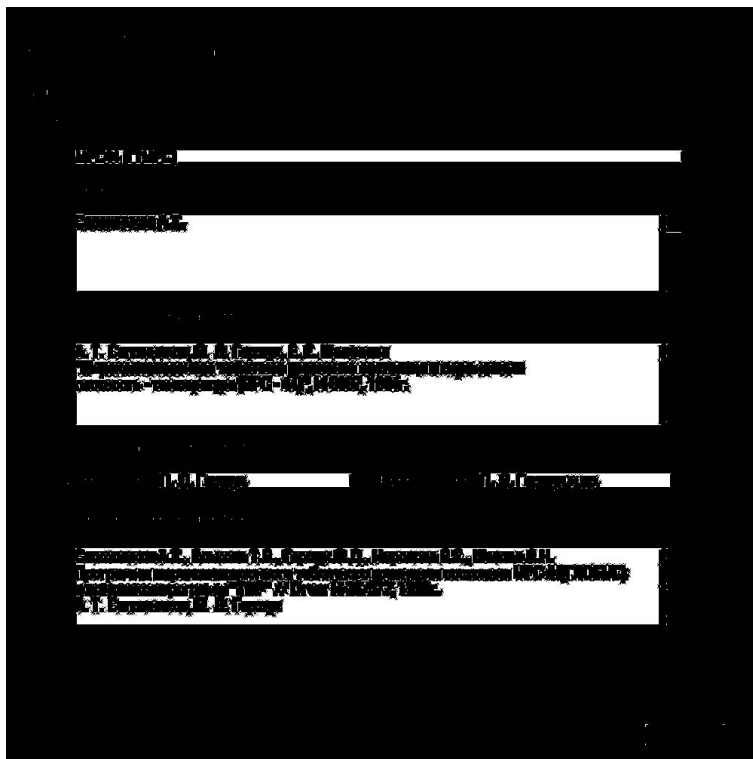


Рис. 10. Анкета УРСа (общий раздел)

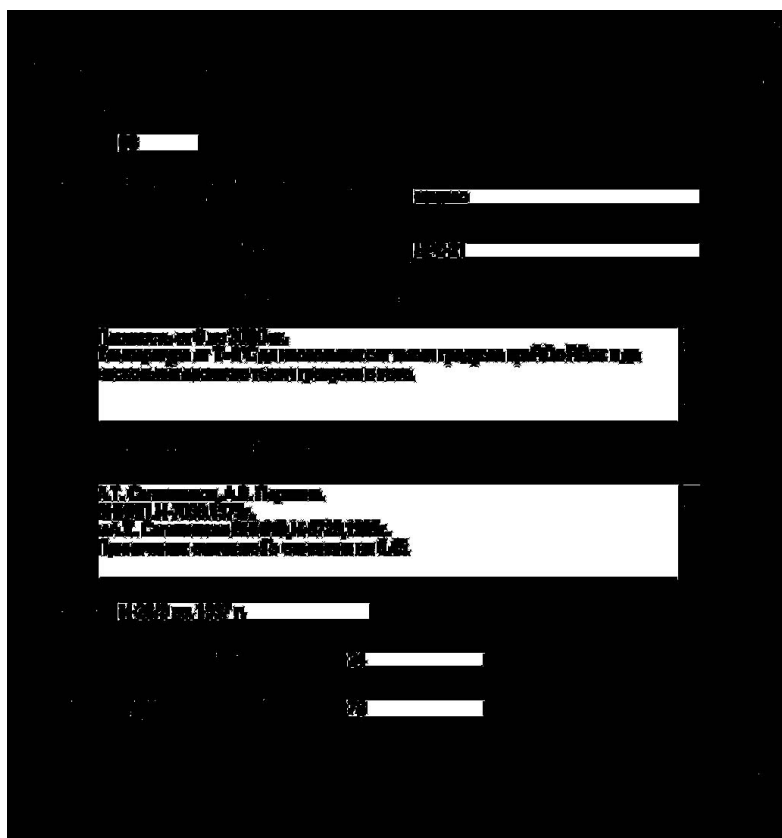


Рис. 11. Анкета НК (общий раздел)

Заключение

Данные, используемые различными компонентами ИТС на отдельных этапах построения УРСов, разнородны по своей структуре и способам представления. Среди них есть бинарные и текстовые файлы, базы данных, архивы. Как видно из выше представленного описания, все компоненты ИТС комплекса программ ТУР интегрированы между собой с помощью единого интерфейса и совокупности внутренних унифицированных баз данных.

Наличие ИТС комплекса ТУР позволило существенно ускорить процесс исследования и разработки УРСов и повысить их точность.

Список литературы

1. Сапожников А. Т., Миронова Е. Е. Комплекс программ ТУР для построения и ис-

следования уравнений состояния // См. настоящий выпуск. С. 27–36.

2. Экспериментальные данные по ударно-волновому сжатию и адиабатическому расширению конденсированных веществ. Справочник под ред. Р. Ф. Трунина. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2001.
3. Compendium of Shock Wave Data / Ed. by M. van Thiel. Livermore: Univ. of California Press, 1997.
4. LASL Shock Hugoniot Data / Ed. by S. P. Marsh. Berkley: Univ. of California Press, 1980.

Статья поступила в редакцию 09.07.07.
