

ИНФОРМАЦИОННО-ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ СРЕДА ДЛЯ ЗАДАЧ ИССЛЕДОВАНИЯ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ТЕПЛОНОСИТЕЛЕЙ

К.А. Бостанбеков, Ю.И. Молородов

Институт вычислительных технологий СО РАН

boss.kairat@bk.ru, yumo@ict.sbras.ru

Аннотация

Создание информационной среды для хранения, обработки и представления результатов физико-химических исследований поведения теплоносителей необходимы для повышения эффективности этих работ и обеспечения своевременного доступа исследовательских коллективов к новым материалам исследований. Сделать исследования более плодотворными и эффективными способны современные веб-ориентированные информационно-вычислительные системы, позволяющие широкому кругу специалистов не только обрабатывать и визуализировать хранимый массив данных, но и оперативно его пополнять. Создаваемая сетевая база данных содержит сведения о физических и химических свойствах, веществ и материалов в твердом, жидком и парообразном состояниях. В работе предложена и реализована веб-ориентированная систем программа, позволяющая хранить термодинамические свойства химических элементов и обрабатывать их для построения фазовых диаграмм. Ее важными преимуществами являются независимость к архитектуре ОС и повсеместный доступ к материалам исследований через Интернет.

Введение

Многие аспекты деятельности человека требуют исследования различных динамических процессов. Исходные данные этих исследований нередко представляют из себя временные ряды каких-либо физических величин: координат, скоростей, давления, температуры, концентрации каких-либо веществ и т.д. Среди таких временных рядов можно выделить отдельный класс - временные ряды скалярных величин.

Развитие научных основ создания высококачественных металлических материалов, разработки технологии их получения и обработки связано с созданием и внедрением новых, более эффективных и экономичных методов построения диаграмм состояния многокомпонентных систем. Диаграммы состояния имеют большое значение не только при изучении теоретических вопросов науки о металлах и сплавах, но и при решении многих практических задач металлургии и металловедения. Поэтому во всех научно технически развитых странах огромное внимание уделяется работе по построению и исследованию диаграмм состояния. Все более активной и централизованной становится деятельность по сбору, обработке и хранению информации о диаграммах состояния. Современным направлением информационного обеспечения специалистов в области диаграмм состояния является создание и использование банков физико-химических данных, автоматизированных информационных систем для прогнозирования диаграмм состояния.

Однако экспериментальное исследование фазовых равновесий и построение диаграмм состояния металлических систем достигается ценой значительных

материальных затрат и времени. Многообразной и сложней становятся составы сплавов, расширяется диапазон условий, в которых они должны работать. По мере увеличения числа компонентов изучаемых систем, затраты многократно возрастают. Поэтому теоретические исследования фазовых равновесий в многокомпонентных металлических системах, расчет и прогнозирование диаграмм состояния приобрели в настоящее время большой размах. Расчетные методы позволяют привлечь к построению диаграмм состояния достижения теоретической физики, вычислительной техники и успехи в исследованиях термодинамических и физических свойств сплавов. Сочетание теории и опыта дает возможность определить аналитический вид зависимостей термодинамических потенциалов фаз от температуры и состава.

Для поиска путей научно обоснованного управления фазовым составом, структурой и свойствами сплавов необходимы дальнейшие теоретические и экспериментальные исследования всевозможных фазовых переходов в жидких и твердых металлах и сплавах [1].

Методика исследований заключается в следующем: в течение длительных периодов времени выполняются периодические замеры тех или иных параметров. Накопленные данные обрабатываются различными способами, и на основании результатов обработки делаются выводы о динамике происходящих процессов. Сделать исследования более плодотворными и эффективными способны современные веб-ориентированные информационно-вычислительные системы, позволяющие широкому кругу специалистов различным образом обрабатывать и визуализировать хранимый массив данных, а также оперативно его пополнять.

Цель работы

Целью работы является использование веб-ориентированной информационно-вычислительной среды, позволяющей объединять схожие по предназначению компоненты, использовать одни и те же способы обработки, анализа, хранения и визуализации данных, и адаптация этой среды к решению проблемы обработке физико-химических данных, используемых для прогнозирования диаграмм состояния металлических систем. Для чего требуется создание базы данных (БД) по физико-химическим свойствам веществ и материалов. Создаваемая сетевая база данных должна содержать сведения о физических и химических свойствах веществ и материалов в твердом, жидком и парообразном состояниях.

Ее основное предназначение - поддержка пользователей при решении научно-технических и образовательных задач.

Постановка задачи

Разработать метод расчета фазовых равновесий в многокомпонентных металлических системах и построения их диаграмм состояния, основанный на сформулированных условиях определения критических точек фазовых превращений с использованием температурных и концентрационных зависимостей коэффициентов распределения компонентов.

Установить аналитические зависимости между коэффициентами распределения компонентов, средним химическим составом сплавов, составом и относительными количествами равновесных фаз.

Разработать алгоритм количественного описания процессов формирования фазового состава и структуры сплавов при равновесных и неравновесных условиях охлаждения.

Актуальность

В настоящее время приобретают все большую актуальность знания по конституционным свойствам неорганических материалов и металлических систем. Все более необходимой становится деятельность по сбору, обработке и хранению информации о диаграммах состояния, создание и использования банков данных физико-химических данных, автоматизированных поисковых систем для прогнозирования металлических систем. Одним из путей решения поставленной задачи является использование достижений IT-технологий в виде информационно поисковых систем.

Задача разработки информационной системы для хранения, обработки и представления результатов физико-химических данных решалась многими исследователями. Например, в просторах интернета есть сайт “Химия и токсикология” где есть База данных физико-химических свойств и синтезов веществ [9]. Сайт посвящен органическому и неорганическому синтезу, свойствам органических и неорганических веществ, токсикологии, фармакологии, а также сбору книг по соответствующим темам. На сайте имеются бесплатные онлайн-базы данных свойств веществ, описаний растений.

Эта системы, решая в целом близкие задачи, обладает определенными недостатками.

- Сайт рассчитан на поиск и хранение статических данных свойств, каких либо химических элементов. Добавление данных исследования и построение фазовых диаграмм не поддерживается, которое является основной задачей проекта;
 - Является сложным для сопровождения и разработки новой функциональности;
- Таким образом, задача создания новой, расширяемой и гибкой системы, предназначенной для специалистов, занимающихся обработкой и хранением информации физико-химических данных, используемых для прогнозирования диаграмм состояния металлических систем, является актуальной.

Требования к системе и их следствия

Основным требованием к разрабатываемой системе было соответствие следующим характеристикам:

- Доступ к системе должен осуществляться через Интернет;
- Наличие механизмов разграничения прав доступа пользователей к системе;
- Функциональность системы должна быть легко расширяемой и дополняемой;
- Расширение функциональности системы и создание новых компонентов должно быть возможно без модификации существующего кода системы;
- Операции по работе с хранимыми экспериментальными данными, такие как добавление, редактирование, создание отчетов и математическая обработка должны осуществляться с помощью единого унифицированного набора инструментов.

Ключевыми требованиями к процессу разработки являлись:

- Максимально возможная скорость разработки и как можно более быстрый ввод системы в эксплуатацию;
- Обеспечение переносимости системы, как приоритетная задача;
- Использование только свободных, открытых технологий и ПО (Free Open Source Software).

Перечисленными требованиями определена необходимость обеспечить независимость и простоту компонентов системы, максимизировать повторное использование кода и использование сторонних библиотек, использовать в разработке легкие для освоения технологии [2].

Очевидно, что предпочтение следовало отдать современным технологиям, активно развивающимся и имеющим качественную документацию.

С целью повышения эффективности процесса разработки и качества создаваемого продукта было принято решение о необходимости придерживаться следующих принципов:

- Разработка и использование модульной (плагиной, pluggable) платформы. Монолитные архитектуры плохо применимы для данной задачи, поскольку система должна включать в себя много независимых компонентов и быть легко расширяемой;
- Использование ORM вместо непосредственного взаимодействия с базой данных, что позволяет абстрагироваться от особенностей конкретных СУБД и повышает переносимость;
- Использование веб-фреймворка вместо самостоятельного написания “низкоуровневого” кода, что позволяет значительно ускорить разработку;

Выбранные инструменты и технологии для разработки системы

Для реализации данной работы используется ИС “Атлас” разработанная для обработки и анализа данных наблюдений за состоянием атмосферы г. Новосибирска, так как она легко расширяема и подходит по всем требованиям для реализации данной системы.

В данной информационной системе используются нижеперечисленные инструменты и технологии:

- Язык программирования Python [3];
- Веб-фреймворк Pylons [4];
- Объектно-реляционный проектор (ORM) SQLAlchemy [5];
- XHTML 1.0 Transitional и библиотека jQuery [6];
- Сервис Google Maps для отображения географической информации [7];
- Язык программирования C++ и технология OpenMP [8]; для реализации ресурсоемких вычислительных алгоритмов.

Отметим, что вышеперечисленное ПО является свободным (Free Open Source Software), а стандарты являются открытыми. Таким образом, для реализации ИС выбран инструментарий, являющийся открытым, бесплатным и не имеющим тяжелых лицензионных ограничений.

Результаты разработки ИС

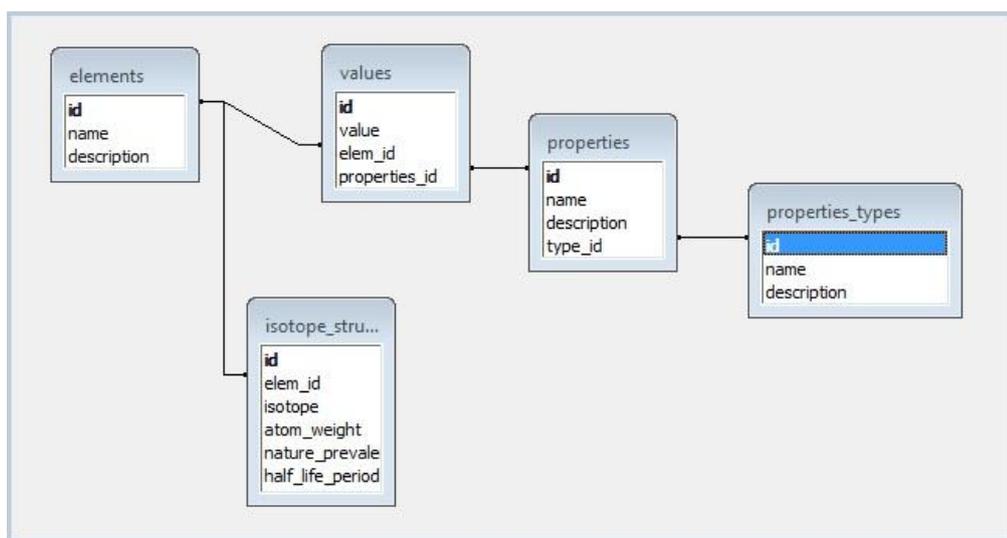


Рис. 1. Структура таблиц базы данных

The screenshot shows the web application interface for 'Metals DB'. The browser address bar shows 'localhost:7000/table'. The page title is 'ICT EIS'. The navigation menu includes: Home, Metals DB, Complex tasks, Stations, Reports, Management, Import, Administration, My profile. There are links for 'Вход', 'Регистрация', and 'Описание системы'. The main content area is titled 'Metals DB' and contains a description of the project and a periodic table of elements. Below the table is a form to 'Add new element' with fields for 'Short name:' and 'Long name:' and an 'Add' button. The footer contains copyright information: '© 2010 «НЭИС»' and links for 'Вход' and 'Регистрация'.

Рис. 2. Пример пользовательского интерфейса ИС

ЛИТЕРАТУРА

- Агеев Н.В./ Диаграммы состояния металлических систем.-М.: ВИНТИ, № 1-24, 1959-1980 г.
- Страуструп, Б. Язык программирования C++ / Б. Страуструп. Бином, 2008.
- Python Programming Language. - <http://www.python.org>.
- Pylons: lightweight web framework. - <http://pylonshq.com/>.
- SQLAlchemy - The Database Toolkit for Python. - <http://www.sqlalchemy.org/>.

JQuery JavaScript Library. - <http://jquery.com/>.

Google Maps API. - <http://code.google.com/intl/en/apis/maps/>.

OpenMP. - <http://www.openmp.org/>.

База данных физико-химических свойств и синтезов веществ -
<http://chemister.da.ru/Database/search.php>