

УДК 378.14

И. Н. Ефимов, доктор технических наук, профессор, Чайковский технологический институт (филиал) Ижевского государственного технического университета

С. Ж. Козлова, кандидат педагогических наук, доцент, Чайковский технологический институт (филиал) Ижевского государственного технического университета

С. А. Жукова, кандидат технических наук, доцент, докторант, Чайковский технологический институт (филиал) Ижевского государственного технического университета

КОНЦЕПТУАЛЬНЫЕ ОСНОВЫ ИНТЕГРАЦИИ ОТКРЫТЫХ ВИРТУАЛЬНЫХ ЛАБОРАТОРНЫХ КОМПЛЕКСОВ*

Интеграция виртуальных лабораторных комплексов для проведения дистанционных экспериментов с компьютерными моделями и управление ими невозможны без применения автоматизированной системы (АС). Предлагается модель формирования лабораторных комплексов в соответствии с технологией открытых систем и концептуальные подходы проектирования архитектуры АС.

Ключевые слова: информационные системы, математическое моделирование, виртуальный эксперимент.

В настоящее время действуют ряд федеральных целевых программ бизнеса, науки и образования, направленных на создание и внедрение новых технологий, продуктов, услуг, а также на инновационное развитие ключевых отраслей промышленности России. Актуальным направлением исследований является формирование технологических платформ [1], объединяющих частные компании, научные организации и институты на базе единых подходов в рамках установленных целей и задач исследования, в том числе с применением современных информационных технологий.

Возникает задача выработки единых принципов и методов к интегрированию ресурсов, как вертикально – на местном, региональном, государственном и межгосударственном уровнях, так и горизонтально – на уровнях отрасли, ведомств, госкорпораций, инфраструктурных монополий, технологических платформ.

В настоящее время большинство организаций науки, образования и бизнеса обладает специализированными виртуальными лабораторными комплексами для проведения научных исследований, в том числе дистанционно [2], существует возможность представления разнородных ресурсов широкому кругу исследователей. Современные потребности в формировании информационной инфраструктуры выдвигают новые требования к качеству информационных систем: расширяемость, масштабируемость, интероперабельность, мобильность. Проведенный анализ вариантов интеграции ресурсов [3] позволил сформулировать концептуальные особенности формирования виртуальных лабораторных комплексов и управление ими, в основе которых лежит технология открытых систем [4, 5].

Определим виртуальный лабораторный комплекс (ВЛК) как систему интеллектуальных, организационных и вычислительных ресурсов, решающую задачи предметной области ресурсами различ-

ных образовательных, научно-производственных и других организаций. Если такая система построена в соответствии с принципами технологии открытых систем, то можно говорить о создании открытого виртуального лабораторного комплекса (ОВЛК). Для разработки модели интеграции ОВЛК в информационное пространство необходимо в первую очередь описать структуру и выявить компонентный состав структурных единиц пространства.

Для описания и исследования информационного пространства введем ряд положений [7, 8, 9].

Если процесс исследования объекта является некоторым динамическим процессом, то он допускает формализацию и выработку решения в терминах динамических систем.

Динамическая модель процесса исследования рассматривает взаимодействия между объектом исследования, исследователем, объектом эксперимента и программно-аппаратным комплексом.

Взаимодействие между выделенными объектами осуществляется информационными процессами, следовательно, динамическая модель порождает собственное информационное пространство.

Такой подход к самому процессу исследования приводит к формулировке концепции создания информационного пространства как адекватного информационным процессам, возникающим при взаимодействии объекта исследования, исследователя, объекта эксперимента и программно-аппаратного комплекса.

Концептуальная модель ОВЛК представлена на рис. 1.

Анализ подходов к построению модели ОВЛК [4] позволил выделить следующие классы информационных процессов: постановка задачи, подготовка к формализации, формализация, построение алгоритма, разработка динамической модели или решение задачи с применением программно-аппаратного комплекса; проведение эксперимента с виртуальной

моделью объекта; анализ полученных результатов и поиск знаний (табл. 1).

Каждый информационный процесс характеризуется конкретным результатом, для получения которого необходим определенный набор информационных, организационных и вычислительных ресурсов.

Взаимосвязь между ОВЛК и его ресурсами можно представить в виде следующей схемы.

1. Области деятельности организации представляют профили: «Наука», «Бизнес», «Образование».

2. Профили определяют состав нормативно-технических документов организации, цели и задачи исследований.

3. Достижение цели и задач исследований реализуется посредством ОВЛК.

4. ОВЛК определяются информационными процессами.

5. Процессы требуют определенный набор информационных, организационных и вычислительных ресурсов.

Таким образом, ОВЛК определяется заданным набором лабораторных ресурсов (рис. 2).

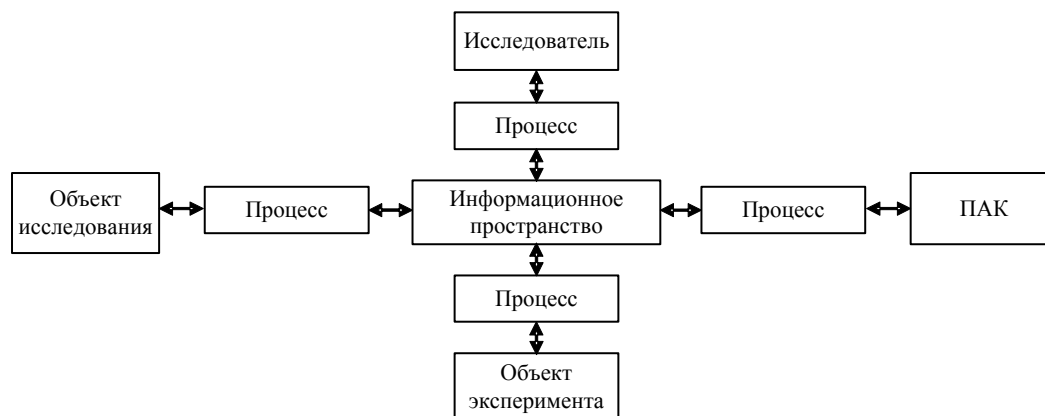


Рис. 1. Концептуальная модель открытого виртуального лабораторного комплекса

Таблица 1. Основные классы информационных процессов

Процесс	Результат
Постановка задачи	Выделение проблемы в сферах науки, образования и бизнеса в естественной постановке, т. е. выделение объекта исследования
Подготовка к формализации	Получение данных о природе объекта, законах его существования, накопленных соответствующими фундаментальными и прикладными разделами науки
Формализация	Построение математической модели объекта исследования
Построение алгоритма	Разрабатываются алгоритмы, которые являются частью будущей динамической модели
Разработка динамической модели или решение задач с применением ПАК	Построение компьютерной модели с применением языковых средств
Проведение эксперимента	Планирование эксперимента с объектом или моделью объекта
Анализ и поиск знаний	Формирование баз знаний, решение задачи поиска новых знаний

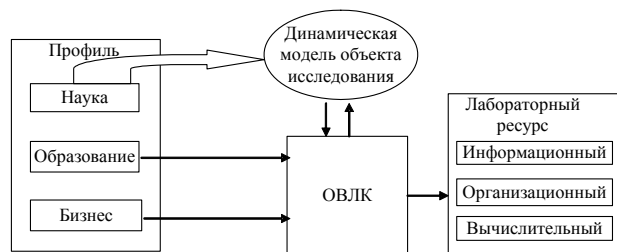


Рис. 2. Схема структуры информационного пространства ОВЛК

Информационный ресурс ОВЛК – это совокупность форм документов, классификаторов, нормативной базы, алгоритмов, математических методов и реализованных решений по объемам, размещению и формам существования информации. В составе информационного ресурса ОВЛК выделим ресурсы,

поддерживающие процессы интеллектуальной деятельности исследователя: постановка задачи, подготовка к формализации, формализация, построение алгоритма, разработка динамической модели или решение задачи с применением программно-аппаратного комплекса; проведение эксперимента с имитационной моделью объекта; анализ полученных результатов и поиск знаний. Введем понятие интеллектуального лабораторного ресурса, которое включает модели исследуемых объектов, методы, алгоритмы, реализуемые отдельной виртуальной лабораторией (ВЛ), а также результаты исследования характеристик исследуемого объекта, полученные в ходе компьютерного эксперимента.

Организационные ресурсы объединяют в себе правила и методы доступа к информационным и вычислительным ресурсам для конкретного предприятия, организации, учреждения.

Вычислительные лабораторные ресурсы или ресурсы обработки данных объединяют в себе программно-аппаратные ресурсы: установки, файловая система, средства коммуникаций, программное обеспечение, хранилище данных, а также сведения о них.

Схема интеграции лабораторных ресурсов представлена на рис. 3.

Структура информационных пространств и процессов позволяют рассмотреть варианты интеграции ресурсов ОВЛК (табл. 2) по следующим критериям.

1. Практическая значимость – оценка выгоды для потребителя системы.

2. Важность – оценка влияния в целом на успешность использования системы (по шкале 0 – очень низкое влияние, 1 – низкое, 2 – среднее, 3 – высокое, 5 – сверхвысокое).

3. Трудоемкость – оценка влияния на затраты времени и усилий для реализации данного варианта (по шкале 0 – очень низкое влияние, 1 – низкое, 2 – среднее, 3 – высокое, 5 – сверхвысокое).

4. Риск – оценка отклонений от заданных показателей качества, сроков и средств по проекту (оценивается по шкале 0 – низкий, 1 – средний, 3 – высокий).

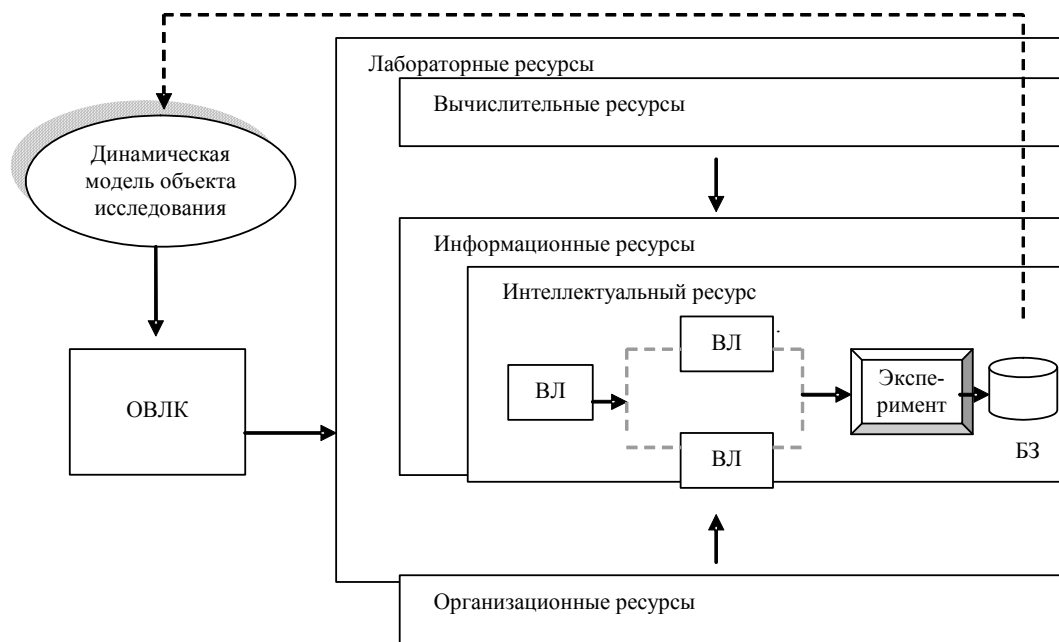


Рис. 3. Схема интеграции лабораторных ресурсов ОВЛК

Таблица 2. Обобщенная оценка вариантов интеграции ОВЛК

Описание	Практическая значимость	Примеры систем, реализующих данный вариант	Важность	Трудоемкость	Риск
По способу предоставления ресурсов					
Объединение информации о доступных лабораторных ресурсах на специализированных сайтах, серверах и порталах	Каталогизация виртуальных лабораторий на едином портале значительно упрощает поиск необходимых инструментов для исследования	<i>Ссылка на портал</i>	3	2	0
Объединение системных ресурсов в единое вычислительное пространство, что обеспечивает заданные характеристики производительности	Обеспечивает приемлемое время реакции на запросы и скорость обработки при функционировании в установленных условиях эксплуатации; обеспечивает использование приемлемого количества и типов ресурсов при функционировании в установленных условиях эксплуатации	Сайт «Университетский кластер» (www.unicluster.ru). Направлен на повышение уровня использования технологий параллельных и распределенных вычислений	4	3	1
Размещение ВЛ в составе ИП, предоставляя все виды ресурсов	Доступность исследовательских инструментов за счет использования унифицированных способов пользования. Способность функционировать в различных заданных средах без приложения дополнительных действий или средств		4	4	1

Окончание табл. 2

Описание	Практическая значимость	Примеры систем, реализующих данный вариант	Важность	Трудоемкость	Риск
По способу предоставления инструментов моделирования для конкретных задач					
Объединение ВЛ, ориентированных на конкретные методы исследования	Доступность исследовательских инструментов за счет использования унифицированных способов пользования. Способность функционировать в различных заданных средах без приложения дополнительных действий или средств	Аналоги не обнаружены	4	4	1
Объединение в составе ВЛК ВЛ, ориентированных на конкретные области знаний исследования	Доступность исследовательских инструментов за счет использования унифицированных способов пользования. Способность функционировать в различных заданных средах без приложения дополнительных действий или средств	Аналоги не обнаружены	4	3	1
Объединение ВЛ, ориентированных на исследование конкретных физических объектов	Доступность исследовательских инструментов за счет использования унифицированных способов пользования. Способность функционировать в различных заданных средах без приложения дополнительных действий или средств		4	4	0
По способу используемых инструментов для разработки ВЛ					
Объединение ВЛ в составе ИП, сторонних разработчиков	Доступность исследовательских инструментов за счет использования унифицированных способов пользования, способность функционировать в различных заданных средах без приложения дополнительных действий или средств	Аналоги не обнаружены	3	5	3
Объединение ВЛ в составе ИП, созданных средствами АС ОВЛК	Доступность исследовательских инструментов за счет использования унифицированных способов пользования. Способность функционировать в различных заданных средах без приложения дополнительных действий или средств	Средство разработки пользовательских систем измерений, автоматизации и управления ZETLab Studio (www.zetms.ru)	4	3	1

На основании обобщенной оценки вариантов интеграции ОВЛК сформулируем следующие понятия и допущения.

1. Виртуальная лаборатория (ВЛ) является программным средством реализации отдельного алгоритма, входящего в схему исследования объекта.

2. В частном случае в состав ОВЛК входит одна ВЛ, в общем случае ОВЛК интегрирует в своей структуре несколько ВЛ.

3. Возможно размещение ВЛК в составе ИП, предоставляя все виды ресурсов: информационные, вычислительные, организационные.

4. В состав ИП включают ВЛ, созданные средствами вычислительных ресурсов ИП на базе готовых архитектурных шаблонов, а также вновь разработанных и удовлетворяющих техническим регламентам.

5. Формирование профиля ОВЛК предполагает интеграцию ресурсов на базе типового профиля «Наука», «Образование» и «Бизнес» и включает ин-

теллектуальные ресурсы, ориентированные на исследование конкретных физических объектов.

Сформулируем основные требования к автоматизированной системе интеграции ОВЛК:

- модифицируемость, добавление новых компонентов по мере их разработки минимальными усилиями;

- мобильность, обеспечение взаимодействия серверных компонентов независимо от программно-аппаратной платформы

- интероперабельность, информационная и программная совместимость аналогичных систем, возможность подключения виртуальных лабораторий от разных производителей;

- производительность, обработка запросов пользователей численностью до нескольких сотен.

В этой связи рассмотрим следующие концептуальные подходы в описании архитектуры системы.

1. Разработка компонентов системы в соответствии с требованиями национальных и международных

стандартов в области ИТ, а также разработка новых технических регламентов на отдельные компоненты, учитывающие специфику исследовательских задач.

2. Создание компонентной архитектуры построения системы на языке JAVA, что позволяет конструировать распределенную систему за счет сочетания компонентов, разработанных разными производителями и добавлять новые программные компоненты по мере наращивания функций системы.

3. Применение архитектурных шаблонов для повторного использования, что позволяет конструировать модули с минимальными временными усилиями.

4. Разделение приложений на несколько уровней, каждый из которых выполнен на отдельном вычислительном узле.

5. Размещение на стороне клиента минимального числа функций, что позволяет снизить требования к вычислительной мощности компьютера клиента.

6. Построение на основе открытых стандартов (J2EE, XML и т. д.) с возможностью работы с различными Web-серверами.

Функциональная структура программного комплекса АС ОВЛК в виде модели декомпозиции (рис. 4) построена на основе требований к системе. Автоматизированная система состоит из 5 подсистем, включающих определенные модули в соответствии со строго отведенными им функциями.

Такое решение обеспечивает низкую связность и возможность компонентного построения системы.

Автоматизированная система представляет распределенную систему обработки данных и строится на основе модели «клиент – сервер» с добавлением звена по управлению виртуальными лабораториями

и звена «вычислительный узел», обеспечивающего выполнение эксперимента (рис. 5).

Модель размещения компонентов АС ОВЛК представляет собой распределение подсистем на физических узлах:

- сервер приложений (СП) – ядро АС ОВЛК, программно-аппаратный комплекс, на котором размещены основные подсистемы управления комплексом виртуальных лабораторий, подсистема обмена информацией, подсистема управления экспериментом. Сервер приложений управляет процессами выполнения необходимых расчетов для проведения исследований, вычислительными ресурсами, а также обрабатывает заявки клиента;

- веб-портал – сервер, на котором установлено Web-приложение, обеспечивающее взаимодействие конечного пользователя и АС ОВЛК, принимает запросы пользователя и возвращает результаты обработки запросов. На данном сервере размещена подсистема управления контентом;

- вычислительный ресурс (ВР) – совокупность вычислительных машин, в качестве которых возможно использование не только серверов, но также и клиентских машин. Предназначается для выполнения расчетов, задание на проведение которых выдает СП;

- базы данных – сервер, предназначенный для хранения видов ресурсов (информационных, организационных), которые необходимы для функционирования ОВЛК;

- клиент – компьютер, инициирующий запросы на проведение экспериментов, а также для получения результатов эксперимента и их дальнейшего отображения исследователю.

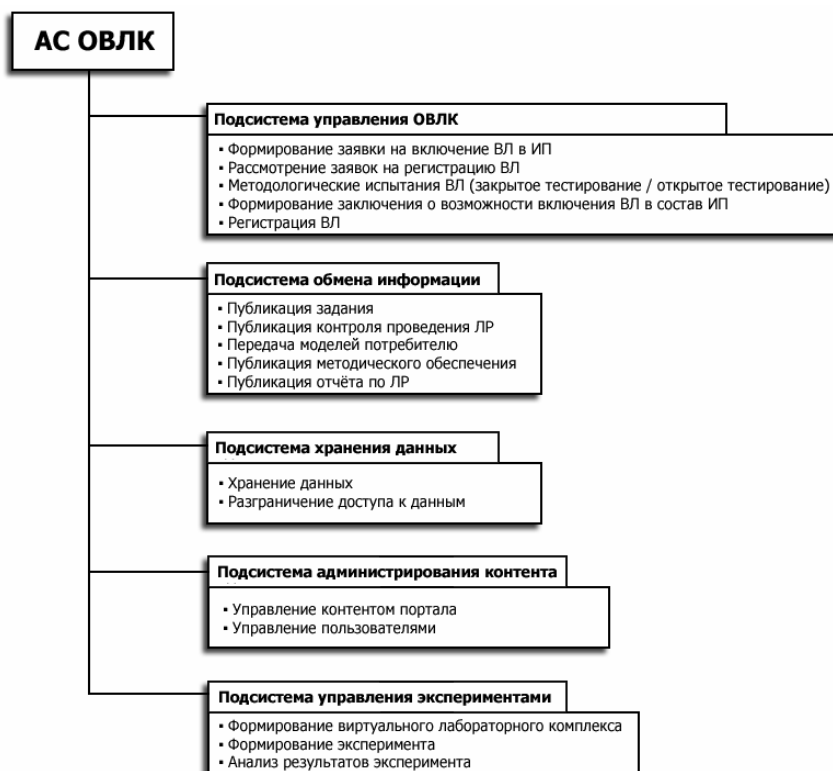


Рис. 4. Функциональная структура АС ОВЛК

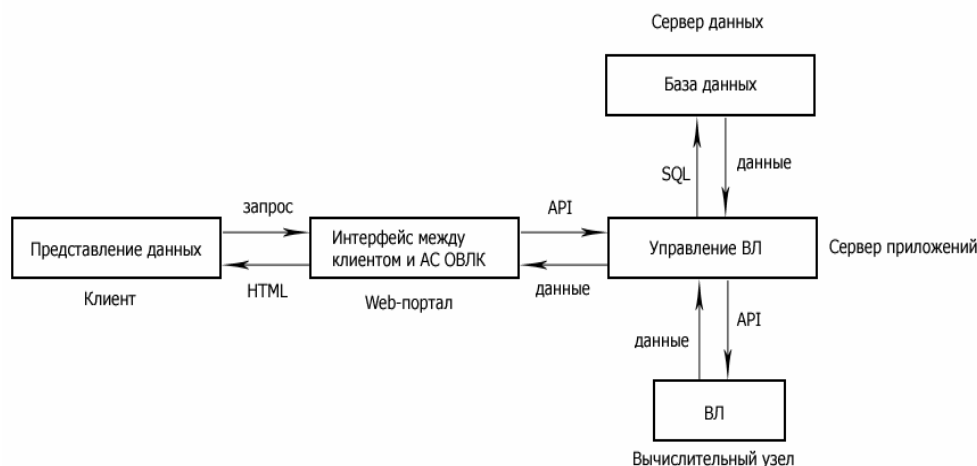


Рис. 5. Модель «клиент – сервер»

В основе технологии открытых систем в формировании информационной инфраструктуры лежит принцип стандартизации, т. е. применение унифицированных методов и способов информационного обмена между компонентами системы, а также между аналогичными системами.

Этого можно достичь:

- с помощью стратегических профилей информационных систем в сфере информатизации науки, образования и бизнеса. Профиль «Наука» отвечает за формирование интеллектуального ресурса, к которому относятся модели и знания. Профиль «Образование» отвечает за формирование организационных ресурсов, связанных с подготовкой специалистов. Профиль «Бизнес» предназначен для решения задач оптимизации и управления ресурсами искусственных систем;

- стандартизации методов и способов интеграции информационных и организационных ресурсов в соответствии с открытыми стандартами информационных технологий и стратегическими профилями «Наука», «Образование» и «Бизнес».

Концептуальные требования отражены в архитектурных решениях автоматизированной системы управления открытыми виртуальными лабораторными комплексами для решения задач науки, образования и бизнеса.

Список литературы

1. Technologies of Development of the Open Systems and Their Application in Science and Education: the Review of Papers and Development Perspective (Технологии построения открытых систем в формировании научно-образовательной среды: обзор работ и перспективы развития) / S. A. Zhukova [et al.] // 12 международная конференция Computer Science and Information Technologies (CSIT'2010) (Информатика и Информационные техноло-

гии), Уфимский государственный авиационный технический университет (УГАТУ). – 2010. – С. 208–212.

2. Ефимов И. Н., Жевнерчук Д. В., Николаев А. В. Открытые виртуальные исследовательские пространства. Аналитический обзор. – Екатеринбург : Изд-во Ин-та экономики УрОРАН, 2008. – С. 83.

3. Разработка модели автоматизированной системы интеграции открытых виртуальных лабораторных комплексов. Этап 2: Построение концепции автоматизированной системы открытых виртуальных лабораторных комплексов (промежуточный) : Отчет о научно-исследовательской работе (промежуточный) // Ижевский государственный технический университет ; рук. И. Н. Ефимов. – Ижевск, 2010. – 199 с. – ГР № 01201001075.

4. Открытые виртуальные исследовательские пространства. Технология построения / И. Н. Ефимов [и др.]. – Нижний Новгород : Изд-во Нижегородского государственного ун-та им. Н. И. Лобачевского, 2008. – С. 203.

5. Разработка модели автоматизированной системы интеграции открытых виртуальных лабораторных комплексов. Этап 1: Анализ и исследование (промежуточный) : Отчет о научно-исследовательской работе (промежуточный) // Ижевский государственный технический университет ; рук. И. Н. Ефимов. – Ижевск, 2010. – 199 с. – ГР № 01201001075.

6. Ефимов И. Н., Козлова С. Ж., Жукова С. А. Автоматизированная система интеграции открытых виртуальных лабораторных комплексов // XIII Междунар. науч.-практич. конф. «Фундаментальные и прикладные проблемы приборостроения и информатики». – Московский государственный университет приборостроения и информатики, 2010. – С. 105–110.

7. Ефимов И. Н., Морозов Е. А. Канонический метод интегрирования нелинейных динамических систем. Нелинейный динамический анализ : тез. докл. междунар. конгр. – СПб., 2007. – С. 274

8. Морозов Е. А. Каноническое интегрирование в проектировании динамических систем. – Екатеринбург ; Ижевск : Изд-во Ин-та экономики УРО РАН, 2006. – С. 196.

9. Ефимов И. Н., Морозов Е. А. Каноническое интегрирование динамических систем. – Екатеринбург ; Ижевск : Изд-во Ин-та экономики УРО РАН, 2006. – С. 199.

Conceptual Principles of Integration of Open Virtual Laboratory Complexes

The integration of virtual laboratory complexes to conduct remote experiments with computer models and their management is impossible without use of an automated system (AS). A model of the laboratory complexes formation in accordance with open systems technology and conceptual approaches to the AS architecture design is proposed.

Key words: information systems, mathematical modeling, virtual experiment.

УДК 51-74:519.711:519.714:666.972.7

А. Н. Бормотов, кандидат технических наук, доцент, Пензенская государственная технологическая академия
И. А. Прошин, доктор технических наук, профессор, Пензенская государственная технологическая академия
А. В. Васильков, ОАО «Научно-производственное предприятие «Рубин», Пенза

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭВОЛЮЦИИ СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЯ ЛИОФИЛЬНЫХ СИСТЕМ ПРИ НАЛИЧИИ СОЛЬВАТНЫХ СЛОЕВ*

Предлагается система компьютерного и имитационного моделирования композитов, включающая в себя методики проведения численного и натурального эксперимента, методы моделирования структурообразования, алгоритмы и комплекс программ, позволяющая установить влияние основных рецептурно-технологических факторов на процесс структурообразования лиофильных дисперсных систем при наличии сольватных слоев и подтверждающая адекватность полученных качественных аналитических решений.

Ключевые слова: математические модели, моделирование, компьютерное моделирование, управление качеством, многокритериальный синтез, структурообразование, композиционные материалы.

Для моделирования дисперсных систем, состоящих из частиц, на поверхности которых находятся сольватные слои дисперсионной среды, потенциал парного взаимодействия представлен суммой выражения функции потенциала Леннарда – Джонса с функцией Гаусса [1]:

$$U(r_{ij}) = U_0 \left(\left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^6 + e^{-(r_{ij}-r_0)^2} \right),$$

где r_{ij} – модуль расстояния между i -й и j -й частицами; U_0 – константа ($U_0 = 10^{-23}$ Дж).

Потенциал имеет три участка монотонности. Между участками убывания расположен участок возрастания. При выбранном выражении потенциала силы притяжения действуют между частицами, находящимися на расстояниях от r_0 до $r_1 = 1,464r_0$. Другие значения расстояний соответствуют силам отталкивания (рис. 1). Образование флокул возможно при преодолении частицами потенциального барьера, образованного сольватным слоем.

Для исследования эволюции дисперсных систем разработано не имеющее аналогов ПО. Программный продукт является автономным (не требует для работы других пакетов численного анализа) и реализован на стандартном языке ANSI C (ANSI X3.158-1989) для операционных систем Windows NT/2000/XP, а также POSIX-совместимых вычислительных платформ.

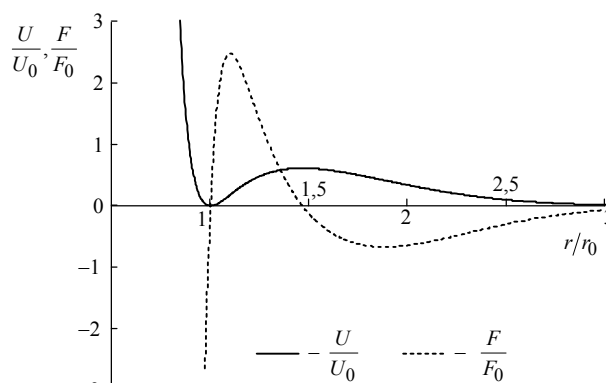


Рис. 1. Потенциал и сила парного взаимодействия для лиофильных систем при наличии сольватных слоев на поверхности частиц

Исполнение ПО начинается с синтаксического анализа командной строки, в которой передается имя управляющей программы.

Управляющая программа содержит текстовое описание моделируемой системы, в котором, в свою очередь, должны быть определены общие параметры системы (число сферических частиц, распределение их по размерам и плотности), начальные условия (пространственное распределение частиц), расположение и вид границ (плоскости, сферы), вид функций парного взаимодействия и взаимодействия с границами, численные значения коэффициентов, входя-