

благодаря использованию компьютерной графики [1]. Компьютерная графика позволяет показать протекающие физические процессы наглядно, что помогает понять, как именно протекает моделируемый процесс [2].

В ходе проекта были разработаны алгоритмы и структура программы визуализации, которая выполняет функции чтения и обработки массивов данных, содержащих сведения о положении объектов атомных структур и их связях, и обеспечивает возможность изменения свойств объектов и их связей, построение графиков по полученным данным с возможностью выбора отображаемых параметров, интерактивную настройку графиков.

Результаты работы программы визуализации показаны на рисунках 1 и 2.

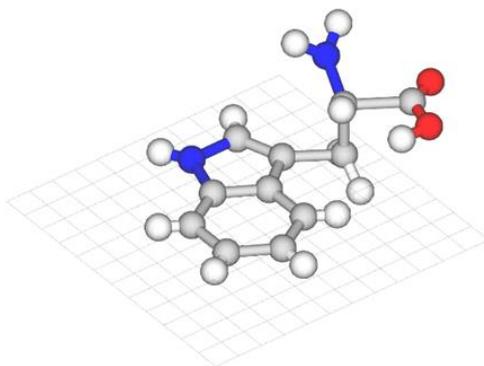


Рисунок 1. Результат визуализации молекулы триптофана

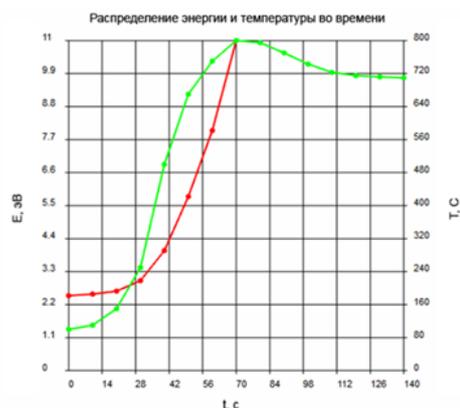


Рисунок 2. Результат построения графика

Все алгоритмы программы включают проверку на возможность визуализации, а также проверку вводимых пользователем данных во избежание ошибок в работе программы.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации. Соглашение о предоставлении субсидии RFMEFI57814X0095 от 28.11.2014 г.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Паклин Н.Б., Орешков В.И. Визуализация данных. Бизнес-аналитика. От данных к знаниям. - 2-е изд. – СПб.: Питер, 2013. – 173 с.
2. Эйнджел Э. Интерактивная компьютерная графика. Вводный курс на базе OpenGL, 2 изд. Пер. с англ. – М., Вильямс, 2001.

РЕАЛИЗАЦИЯ РЕШАТЕЛЯ ODE23S В ПРОГРАММНОМ СРЕДСТВЕ SIMSAR, МОДЕЛИРУЮЩЕМ ПРОЦЕССЫ ЯДЕРНОГО ТОПЛИВНОГО ЦИКЛА

К.В. Ларина, Ю.А. Чурсин

Научный руководитель: Чурсин Ю.А., доцент

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина 30, 634050

E-mail: kslar.27@gmail.com

Сущность методологии компьютерного моделирования состоит в замене исходного технологического объекта его математической моделью и в дальнейшем изучении модели с помощью реализуемых на компьютерах вычислительно-логических алгоритмов. Наиболее предпочтительным методом реализации моделей является предметно-ориентированный подход, при котором реализация моделей отдельных аппаратов осуществляется в виде программного кода, а модели аппаратов и технологического оборудования соединяются графическим способом.

Основные установки и процессы (в общем случае нелинейные) ядерного топливного цикла (ЯТЦ) могут анализироваться в упрощенном виде в формате Коши. При этом правые части систем дифференциальных уравнений, для каждой модели в отдельности, могут быть приведены в виде функций, написанных на языке С или С++. Решение систем осуществляется, как правило, единым решателем (инструментом для решения дифференциальных уравнений моделей), позволяющим делать это различными способами.

Объектом исследования является проект SimSAR, разработанный в среде проектирования Qt Creator. Данный проект реализует графическое приложение для синтеза схем из предложенных элементов, описывающих ЯТЦ, и выполнения расчетов этих схем при выбранном шаге, времени и режиме вычисления. Целью работы является реализация решателя для SimSAR, направленного на решение жестких систем дифференциальных уравнений.

Реализованные в проекте SimSAR решатели ode1 (метод Эйлера) и ode45 (метод Рунге-Кутты) дают хорошие результаты при решении нежестких систем, но имеют значительно худшие результаты для жестких систем. С целью преодоления сложившейся проблемы был реализован решатель ode23s (модифицированный метод Розенброка), который подходит для решения как жестких, так и нежестких систем. Решатель ode23s представляет собой тройку модифицированных неявных методов Розенброка третьего и второго порядков с контролем ошибок для жестких систем. Он выполняет переход от текущего рассчитываемого значения к последующему при помощи метода второго порядка (то есть без локальной экстраполяции) и контролирует локальную ошибку, взяв разницу между численными решениями третьего и второго порядков [1].

В результате проделанной работы было улучшено программное средство SimSAR, разработанное сотрудниками кафедры ЭАФУ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. R. Ashino, M. Nagase, R. Vaillancourt. Behind and beyond the Matlab ODE suite. – 2000. – 12, 13 с.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЫПАРНОГО АППАРАТА

П.П. Локтюшин, А.А. Полосин, С.Н. Ливенцов

Томский Политехнический университет

Россия, Томск, ул. Ленина. 30, 634050

E-mail: p.p.loktushin@gmail.com

В данной работе рассмотрена проблема физического и математического моделирования выпарного аппарата. Проблема выпаривания растворов связана с термодинамикой, теплофизикой, тепло- и массопереносом, гидродинамикой одно- и многофазных систем, конструированием, технологией и экономикой. [1] Одним из самых распространенных аппаратов в атомной, химической и пищевой промышленности, предназначенный для концентрирования растворов различных веществ путём испарения растворителя является выпарной аппарата с естественной циркуляцией и выносной греющей камерой. Физическая модель выпарного аппарата выполнена в прозрачном варианте и оснащена системой контроля температуры, давления и расхода растворов в разных точках. Кроме того, предусмотрено точное дозирование исходного и конечного растворов и подводимого тепла (рис. 1).