

мониторной системе «Дубна». Объем текста подпрограмм в архиве этой системы составляет 13 000 слов и транслируется в объектный код объемом 10 000 слов БЭСМ-6.

Связь между БЭСМ-6 и ЕС-7064 осуществляется средствами операционной системы ОС ИПМ [4]. Трудоемкость разработки 6 чел.-мес.

В препроцессор встроены сервисные возможности: печать листинга, диагностика ошибок и выдача сообщений, организация библиотеки процедур. Служебные подпрограммы также снабжены средствами диагностики: сообщения о семантических ошибках этапа исполнения появляются на экране. Кроме того, поскольку используется мониторная система «Дубна», то весь сервис этой системы также находится в распоряжении пользователя.

Заключение. Реализация АВТОКОДа носит экспериментальный характер. Целью разработки было создание удобного графического языка на базе ФОРТРАНа. Если в распоряжении пользователя имеется пакет графических подпрограмм, то он испытывает неудобство, выписывая длинную последовательность операторов вызова. Например, для рисования ломаной линии ему пришлось бы обратиться к подпрограмме рисования одного сегмента несколько раз подряд. АВТОКОД избавляет пользователя от подобных проблем. Процесс программирования упрощается, программа приобретает удобочитаемый вид. Операторами АВТОКОДа являются встроенные макросы над базисным языком, в нашем случае над ФОРТРАНОм.

Хотя для АВТОКОДа была специально написана библиотека служебных подпрограмм, в принципе для реализации удобного графического языка можно воспользоваться уже имеющимся подходящим графическим пакетом, что приведет к снижению затрат на реализацию.

ЛИТЕРАТУРА

1. Единая система ЭВМ. М., «Статистика», 1974.
2. Катков В. Л., Янчук Т. С. АВТОКОД для работы с графическим дисплеем ЕС-7064.— В кн.: Вычислительные системы. Вып. 71. Программное обеспечение машинной графики для решения научно-технических задач. Новосибирск, изд. ИМ СО АН СССР, 1977.
3. Гололобов В. И., Чеблаков Б. Г., Чинин Г. Д. Машинно-ориентированный язык высокого уровня для ЭВМ БЭСМ-6.— В кн.: Развитие программного обеспечения БЭСМ-6. М., изд. ВЦ АН СССР, 1975.
4. Крюков В. А., Маклашин О. А., Малахова-Камартан К. К. Инструкция по использованию операционной системы ОС ИПМ. Сер. Математическое обеспечение БЭСМ-6. М., изд. ИПМ АН СССР, 1974.

Поступила в редакцию 21 февраля 1978 г.

УДК 681.3 : 517.53 : 518 : 517.944 : 947

А. В. ЕРОФЕЕВ
(Новосибирск)

О НЕКОТОРЫХ ПРИНЦИПАХ ПРОЕКТИРОВАНИЯ ДИАЛОГОВЫХ ГРАФИЧЕСКИХ СИСТЕМ НА ПРИМЕРЕ РЕАЛИЗАЦИИ СИСТЕМЫ СЕТКА

Известны основные требования, предъявляемые к системам для интерактивного режима [1]: простота, логичность структуры входного языка и экономичность системы с точки зрения как пользователя, так

и программы. Кроме этих трех условий, в системе должны быть обеспечены и другие свойства: контроль ошибок, пояснительные сообщения, сокращенные команды для опытных пользователей. При работе с графическими системами важную роль приобретают также наглядность и интенсивность диалога.

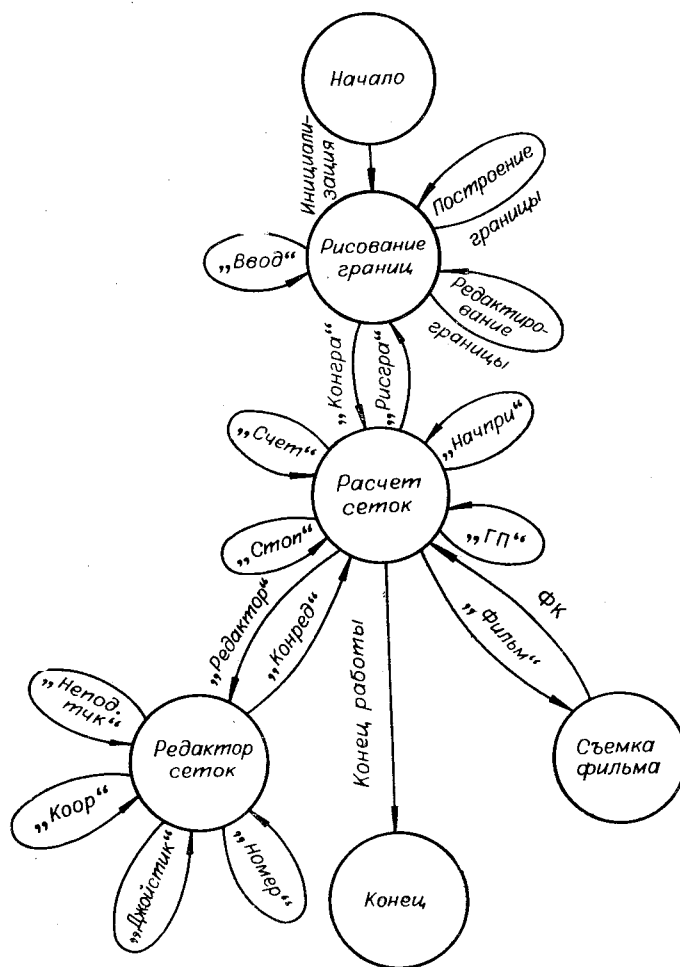
В данной статье описывается небольшая по объему диалоговая графическая система СЕТКА специализированного применения с точки зрения реализации приведенных выше требований.

Система СЕТКА предназначена для построения разностных сеток в двумерных криволинейных областях в режиме диалога. Система ориентирована на пользователя-математика и позволяет ему: рисовать на экране графического дисплея двумерные области произвольной формы; проводить расчеты сеток; управлять процессом построения сеток в режиме диалога; выводить на графопостроитель или киноплёнку окончательные или промежуточные результаты.

Простота и логичность системы были достигнуты за счет управляющего языка системы. Диалог системы с пользователем осуществляется с помощью световых кнопок, иногда используется функциональная клавиатура, еще реже алфавитно-цифровая клавиатура. С каждой световой кнопкой или функциональной клавишей связана определенная подпрограмма или набор подпрограмм, которые начинают работать после нажатия на соответствующую кнопку. В работе [2] подробно приведена архитектура системы СЕТКА. В данной статье приводится только диаграмма состояний, описывающая управляющий язык системы (см. рисунок). Надписи над стрелками означают действия, выполняемые системой между состояниями; надписи в кавычках, кроме того, являются названиями световых кнопок, по нажатию на которые выполняется данное действие.

Каждое состояние системы СЕТКА^{*} отличается от других своей функциональной законченностью. Так, в первом состоянии происходит только рисование внешнего контура области; во втором — расчет сеток с помощью алгоритма, описанного в работе [3, 4]; в третьем — редактирование сеток, в том числе фиксация внутренних узлов; в четвертом — съемка фильма с помощью кинокамеры. Небольшое число состояний, простота и логическая закономерность управляющего языка системы, тщательный подбор названий световых кнопок — все это позволяет оператору освоить работу с системой практически за один сеанс после демонстрации ее возможностей уже обученным пользователем.

Экономичности системы с точки зрения пользователя достигнуть полностью не удастся, так как приходится работать с четырьмя устройствами дисплея ЕС-7064: световым пером, рисовальным рычагом или джойстиком, функциональной и алфавитно-цифровой клавиатурами. Такой большой набор устройств ввода выбран исключительно из-за удобства, специфичных для каждого из этих устройств. Естественно, что идентификацию удобнее всего осуществлять с помощью светового пера. При рисовании лучше всего использовать джойстик и функциональную клавиатуру: джойстик используется как рисовальный инструмент, а клавиатура — для фиксации и редактирования изображения. Такое объединение удобно с точки зрения расположения данных устройств на панели дисплея: джойстик находится справа, а функциональная клавиатура — слева, что позволяет пользователю, не отрываясь, рисовать правой рукой, а все манипуляции с построенными изображениями делать левой рукой. Алфавитно-цифровая клавиатура применяется лишь однажды для ввода порядковых номеров редактируемого узла, она используется только для удобства реализации данной управляющей команды и вполне может быть заменена другим устройством, например световым пером или джойстиком.



Экономия времени работы программы удалось получить за счет разумной организации диалога. Диалог с пользователем может осуществляться в двух режимах: первый — это режим, при котором система ждет акта пользователя, второй — система проверяет, был ли акт от пользователя, и в зависимости от этого либо передает управление на нужную подпрограмму, либо продолжает дальнейшую работу, связанную, например, с обработкой последнего акта пользователя. Первый режим используется, например, в состоянии рисования границ, второй — в состоянии расчета сеток.

Большой экономии времени работы программы удалось достигнуть благодаря реализации некоторых работ на графическом дисплее без привлечения ЭВМ. Так, метод «резиновой нити» [1] реализован на дисплее ЕС-7064 автономно всего с помощью двух специфических команд дисплея.

Интенсивность диалога можно определить как время реакции системы на акт пользователя. В этом отношении в системе СЕТКА удалось добиться удовлетворительного результата. Самые большие задержки могут возникнуть в момент работы вычислительного алгоритма, вычисляющего сетку, когда реакция на акт пользователя наступает в момент окончания очередной итерации. Выбор такой стратегии основан на том, что в противном случае пришлось бы хранить предысторию работы итерационного алгоритма (что отрицательно сказалось бы

на ресурсах памяти), а для больших задач — информационные массивы во внешней памяти. Исключая описанный случай, время ответа системы составляет 1—2 с, что является неплохим показателем.

Наглядность диалога для систем машинной графики играет большую роль. Особенно это важно при рисовании, когда интерактивные методы должны сопровождаться визуальным контролем. Для рисования ломаных линий, из которых состоят границы области расчета, метод «резиновой нити» — один из самых удобных. Его реализация с помощью джойстика удобнее по сравнению со световым пером, так как, во-первых, изображение резиновой нити не «срывается», как в случае с пером; во-вторых, джойстик может работать в двух режимах: быстром и точном (быстрый режим позволяет оперативно передвигать светящуюся точку, а точный — выбирать точку с точностью до одного раstra дисплея 0,25 мм); в-третьих, дискретность направлений (всего восемь) движения светящейся точки позволяет точно рисовать горизонтальные, вертикальные прямые и прямые под углом 45°, что существенно для задания областей расчета в системе СЕТКА.

Контроль ошибок из-за небольшого объема и простоты системы был очень простым. В нескольких глобальных случаях, например при несовпадении числа узлов на противоположных границах, выдавались диагностические сообщения, в остальных — неправильные действия оператора воспринимались как пустые. По той же причине пояснительные сообщения выводились лишь в некоторых наиболее общих случаях: рисуется левая граница, $x = \langle \text{координата точки} \rangle$, $y = \langle \text{координата точки} \rangle$ и т. д.

Принцип сокращенных команд реализован автоматически за счет простоты и лаконичности управляющего языка.

Из опыта реализации изложенных принципов в системе СЕТКА ясно, что небольшие диалоговые графические системы специализированного применения должны быть прежде всего просты в изучении, так как неквалифицированных пользователей, на которых рассчитаны такие системы, никакие другие принципы не привлекут к работе с системой, если ее изучение займет много времени.

В заключение приведем типичный пример работы пользователя с системой СЕТКА.

Перед пользователем стоит задача построить разностную сетку в области, контуры которой ему известны. В первом сеансе работы с системой пользователь, ознакомившись с возможностями системы, рисует на экране графического дисплея «грубый» набросок своей области, в котором граничные узлы расставляются в произвольном порядке. После запуска итерационного алгоритма расчета сетки внутри области пользователь наблюдает за «развитием» сетки на экране дисплея и отмечает критические точки на контуре области, которые существенно влияют на сходимость алгоритма построения сетки. После этого пользователь делает новый набросок контура области с учетом изменения сетки в критических точках. Такая циклическая работа продолжается до тех пор, пока пользователь не убедится, что при данной расстановке граничных узлов сетка в области «сойдется».

При втором сеансе пользователь строит более точный контур области с учетом обнаруженных при первом сеансе критических точек. Теперь он уделяет большее внимание качеству получаемой сетки и скорости сходимости алгоритма. Этого можно добиться двумя путями: изменением расстановки граничных узлов и редактированием внутренних узлов сетки, т. е. изменением координат и фиксацией некоторых узлов во время счета.

При третьем сеансе пользователь вводит точный физический контур области расчета, на котором граничные узлы выбраны с учетом опыта, полученного в первых сеансах работы, и запускает алгоритм

расчета сетки. По желанию пользователя можно промежуточный и окончательные результаты зафиксировать на графопостроителях или отснять на киноплёнку.

Описанная выше система используется самостоятельно, но может являться компонентой более сложных пакетов прикладных программ математической физики. Например, в настоящий момент эта система включается в пакет задач электронной оптики и в пакет задач теории упругости.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ньюмен У., Спрулл Р. Основы интерактивной машинной графики. М., «Мир», 1976.
2. Ерофеев А. В., Катков В. Л. Система для построения разностных сеток в режиме диалога.— В кн.: Вычислительные системы. Вып. 71. Программное обеспечение машинной графики для решения научно-технических задач. Новосибирск, изд. ИМ СО АН СССР, 1977.
3. Белинский П. П., Годунов С. К., Иванов Ю. Б., Яненко И. К. Применение одного класса квазиконформных отображений для построения разностных сеток в областях с криволинейными границами.— «Журн. вычислит. мат. и мат. физ.», 1975, т. 15, № 6, с. 1499—1511.
4. Иванов Ю. Б., Яненко И. К. Построение сетки в области с криволинейными границами.— В кн.: Типовые программы решения задач математической физики. Сер. Математическое обеспечение ЭВМ. Новосибирск, изд. ВЦ СО АН СССР, 1976.

Поступила в редакцию 21 февраля 1978 г.

УДК 681.3.068

Р. С. НИГМАТУЛЛИН, Б. Н. ОДЕЯНКО
(Новосибирск)

КОМПЛЕКСНАЯ МАШИННАЯ СИСТЕМА ГРАФИЧЕСКОГО ВЫВОДА И АНАЛИЗА ГЕОМЕТРИИ СЛОЖНЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Автоматизация научных исследований с помощью ЭВМ — одна из наиболее важных задач настоящего времени. Наибольший эффект системы автоматизации научных исследований дают только в том случае, если они являются комплексными, т. е. в распоряжении пользователя имеются мощная ЭВМ, соответствующие устройства ввода-вывода, удобное программное обеспечение. Такие комплексы, как правило, должны быть проблемно-ориентированными и предназначены для использования их специалистами в данной, конкретной области. Описанию подобной системы, ориентированной на проведение комплексного исследования геометрии сложных молекулярных структур, посвящена предлагаемая работа.

Известно [1], что между пространственной структурой соединения и его физико-химическими свойствами существует тесная корреляция. Поэтому в настоящее время большое значение придается расшифровке пространственной структуры молекул. Важнейший, но весьма трудоемкий экспериментальный метод — рентгеноструктурный анализ — позволяет определить пространственную структуру молекул, находящихся только в кристаллическом состоянии. В тех же случаях, когда необходимо иметь представление о всех потенциальных конформационных возможностях соединения, достаточно точную информацию могут дать только расчетные методы. Однако как рентгеноструктурный анализ,