

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,

так и расчетные методы, во-первых, весьма трудоемки и, во-вторых, результаты их не наглядны.

С другой стороны, в последнее время появились программы синтеза химических структур соединений по спектрометрическим данным [2] из отдельных фрагментов путем комбинаторного синтеза неизоморфного мультиграфа, наилучшим образом соответствующего данному соединению.

В дальнейшем обычной практикой, как правило, является построение молекулярных моделей соединения либо из механических, либо из молекулярных моделей Кендрию [3]. Однако такая модель не всегда удобна, так как сборка ее для сложных соединений довольно трудоемка. Кроме того, выделение отдельного фрагмента, определение его пространственной структуры, положения относительно других фрагментов, а также поворот всей модели или ее части относительно какой-либо оси с моделями Кендрию довольно затруднительны. Всех этих недостатков можно в значительной степени избежать при применении ЭВМ в исследовании геометрии сложных молекулярных соединений.

Предлагаемая проблемно-ориентированная система графического вывода и анализа геометрии сложных молекулярных соединений является пакетом прикладных программ (ППП) и обеспечивает: 1) построение графических моделей молекул и вывод их на различного рода рисующие устройства; 2) ввод, редактирование и хранение информации о соединении в специальном образом организованном архиве; 3) проведение топологического анализа соединений.

Программное обеспечение системы построено по модульному принципу и состоит из набора модулей и монитора. Каждый модуль в наборе — это специальным образом подготовленная программа, предназначенная для решения одной задачи. Монитор — программа, управляющая ходом вычислительного процесса в соответствии с заданием пользователя. Все модули в наборе можно подразделить на утилиты и модули проблемного математического обеспечения.

Утилиты — набор вспомогательных программ, необходимых для организации функционирования ППП. Утилиты представляют собой нижний уровень программного обеспечения пакета. С их помощью осуществляются все работы по организации процесса взаимодействия пользователя с системой, ввод и редактирование информации, взаимодействие с архивом, диагностика и разбор входного задания и т. д. С целью упрощения логики работы пакета, ускорения вычислительного процесса утилиты построены таким образом, что им запрещается вызывать друг друга, т. е. допустимый уровень вложенности утилит равен двум. В противном случае необходимо было бы строить сложную систему прерываний и их обработки.

Проблемное математическое обеспечение — это набор программ, которые в соответствии с функциями ППП обеспечивают все работы вычислительного характера: по координатам атомов молекулы вычисляют граф связей соединения; проводят анализ графа связей на связность; генерируют графическую модель молекулы; производят необходимые преобразования этой модели; проводят анализ видимости отдельных частей графической модели и т. д.

В ППП для всех модулей стандартизован способ задания аргументов и результатов, что позволяет легко организовать связь между модулями по информации и управлению. Одной из особенностей систем графического моделирования является необходимость хранения и обмена большими массивами информации между отдельными программами. Отсюда следуют требования рациональной организации структуры данных и вычислительного процесса.

Связь между модулями пакета осуществляется монитором через общие сегментированные управляющее и информационное поля.

Управляющее и информационное поля выделяются при инициализации системы, сохраняются в течение всего сеанса и утрачиваются по окончании работы. В различные сегменты информационного поля заносятся константы и аргументы, необходимые для нормального выполнения задания пользователя. После расшифровки задания пользователя монитор настраивает необходимые модули пакета на соответствующий режим работы путем заполнения различных сегментов управляющего поля. Таким образом, на монитор ППП возлагаются следующие функции:

- разбор входного задания;
- формирование и загрузка цепочки модулей, реализующей вычислительный процесс;
- организация семантического контроля и диагностики;
- выполнение режима «по умолчанию».

В целях упрощения работы с ППП в системе широко используется принцип «по умолчанию». Применение принципа «по умолчанию» означает, что некоторые «очевидные» шаги задания («очевидные» с точки зрения логики работы пакета) пользователь может не указывать, но тем не менее они будут выполнены. Например, для построения графической модели молекулы, кроме массива координат атомов, необходим массив связей каждого атома молекулы. Поэтому, если массив связей отсутствует, в цепочку моделей, генерирующих графическую модель, необходимо включить модуль расчета графа связей молекулы. Пользователь может не задавать пакету этот шаг, но монитор, анализируя входное задание и проверяя соответствие информации заданию, обнаружив отсутствие графа связей, выполнит необходимые действия.

Общая организация системы. Каждый пользователь во время работы с системой имеет в своем распоряжении два архива: постоянный и временный.

Временный архив располагается в быстрой памяти (диски, барабан) или на рабочей ленте. В нем хранятся все информационные массивы, относящиеся к соединению, с которым пользователь работает. Временный архив создается только на время сеанса и по окончании его утрачивается. Все обмены информацией в системе проводятся только через временный архив. Если пользователь желает сохранить временный архив, он должен переписать его в постоянный.

Постоянный архив предназначен для длительного хранения информации и располагается на МЛ. В постоянном и временном архивах хранится информация о соединении, а не о графических моделях соединения.

Структура постоянного архива пакета. Каждое химическое соединение в системе может задаваться либо списком атомов, из которых оно состоит, при этом каждый атом задается тройкой чисел (декартовы координаты) плюс имя атома, либо списком фрагментов, причем каждый фрагмент, кроме перечня атомов, образующих его структуру, характеризуется также координатами центра тяжести и именем. Задание соединения как списка фрагментов — фрагментарная модель соединения — может иметь несколько вариантов, в то время как задание соединения атомарной моделью единственно.

Архив системы разбит на две области: область каталога и область архива. Каждая область проквантована на элементарные кванты. Для области каталога длина кванта равна 10 машинным словам, для области архива — 1024 словам, т. е. одной зоне. В каждой из этих областей под информационные массивы может выделяться только целое число квантов.

В процессе создания архива система генерирует следующие списочные структуры, отражающие иерархию взаимосвязей между отдельными его компонентами:

1. Список свободных квантов области каталога. Все свободные кванты каталога объединяются в цепочку, из которой они берутся по мере необходимости и куда возвращаются при всех реорганизациях архива.

2. Список пустых квантов области архива. В самом начале цепочка пустых квантов области архива состоит из одного звена, длина которого равна числу зон, отводимых под архив. По мере реорганизации эта цепочка пополняется новыми звеньями.

3. Список соединений, хранящихся в архиве. В свою очередь, каждое соединение может содержать перечень вариантов фрагментарных моделей, соединенных в цепочку.

Каждое соединение в течение его «жизни» в архиве может характеризоваться различными информационными массивами. Выделение необходимого количества памяти под все информационные массивы в архиве производится динамически таким образом, чтобы свести к минимуму все перестройки и реорганизации архива. Кроме информации, относящейся к конкретным химическим соединениям, в архиве системы может храниться информация, которую использует пакет, а также любое соединение архива.

Структура системы. Система состоит из следующих функциональных блоков: инициализации, монитора, управления структурой данных, архива, формирования графических моделей, связи с графическими устройствами.

Блок инициализации обеспечивает инициализацию системы и создает управляющее и информационное поля, а также временный архив, который в начале работы пуст. В соответствующие сегменты управляющего поля блок инициализации заносит начальную информацию и передает управление программе разбора входного задания.

Монитор организует всю работу по обеспечению сеанса с пользователем, разбирает задание, проводит семантический контроль, выстраивает цепочку модулей и затем передает управление загрузчику.

Блок управления структурой данных обеспечивает все действия со структурой данных, организуя во время сеанса необходимые преобразования. Другой функцией блока является подкачка данных во временный архив.

Блок архива организует взаимодействие пользователя с постоянным и временным архивами пакета:

- поиск и обмен необходимой информации между архивами;
- ввод информации в систему и ее первичное редактирование;
- реорганизацию архивов и редактирование информации;
- просмотры каталогов и вывод на печать необходимой сведений.

Блок формирования графических моделей генерирует графическую модель соединения, проводит все необходимые проективные и геометрические преобразования, анализирует видимость отдельных частей графической модели. С помощью этого блока также организуется топологический анализ геометрической структуры соединения.

Блок формирования графических моделей позволяет выполнять следующие проекции: 1) центральные; 2) ортогональные — диаметрические, изометрические, фронтальные и кабинетные.

Графические модели, построенные с помощью блока, могут быть объемными, шаростержневыми или «скелетными» [1, 4]. «Скелетные» — это модели, которые получаются путем соединения на рисунке центров атомов, между которыми существует химическая связь. Иными словами, «скелетная» модель есть пространственный граф молекулы.

По степени детализации графические модели, генерируемые системой, могут быть полными, фрагментарными и смешанными. Полные — это модели, в которых вычерчивается каждый атом, входящий в соединение. Фрагментарные — такие, в которых вычерчиваются только

отдельные фрагменты молекулы. Смешанные — это модели, которые состоят как из атомов, так и из фрагментов. По способу образования фрагментов графические модели могут быть «однородными» и смешанными. «Однородные» — это модели, образованные атомами соединения одной природы. Например, в модели органического соединения могут вычерчиваться только атомы углерода и т. п.

С помощью ППП возможна выдача на вычерчивание последовательно ряда рисунков графической модели, образованных вращением молекулы или ее части относительно произвольной оси с некоторым шагом. Все геометрические и проективные преобразования в пакете осуществляются с помощью метода однородных координат [5, 6]. Методика построения графических моделей молекул описана в работе [7].

Блок связи с графическими устройствами позволяет пользователю выдавать созданные ППП графические модели соединений на различные «рисующие» устройства. В качестве регистрирующих устройств возможно использование графопостроителей, устройств микрофильмирования, дисплеев. Пакет позволяет в качестве программ нижнего уровня, обеспечивающих выдачу сформированного изображения на регистрирующие устройства, применять, без существенной переделки процедур пакета, либо систему математического обеспечения графики — СМОГ [8], созданную на ВЦ СО АН СССР, либо ГРАФОР [9].

Реализация системы. Конфигурация оборудования. Система ориентирована на использование ЭВМ БЭСМ-6, рулонного графопостроителя ЕС-7052 или планшетного графопостроителя «Benson-220». Интерфейс ЕС-7052 базируется на перфоленточном канале. Графопостроители как ЕС-7052, так и «Benson-220» работают в режиме «on line».

Для нормальной работы системы необходимо не менее 32 трактов МБ и одна МЛ, на которой располагается сама система и могут быть расположены архивы пакета.

Программное обеспечение. Система реализована в мониторинговой системе «Дубна» в рамках операционной системы ДИАПАК и полностью использует возможности, предоставляемые МС «Дубна».

Нижний уровень ППП, обеспечивающий функционирование пакета, реализован на автокодах БЕМШ и МАДЛЕН. Верхний уровень, реализующий основные возможности системы, — на языках высокого уровня АЛГОЛ-ГДР и ФОРТРАН. Составными частями системы являются некоторые процедуры ГРАФОРа и СМОГа.

В заключение авторы считают своим приятным долгом поблагодарить Ю. П. Дробышева, В. Л. Коптюга и В. Л. Каткова, чье благожелательное отношение и неизменная поддержка в значительной степени способствовали успешному выполнению работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Хюккель В. Теоретические основы органической химии. Т. I. М., ИЛ, 1955.
2. Дробышев Ю. П., Соколова Э. М., Соколов С. П. О синтезе неизоморфных мультиграфов. — «Автоматика», 1977, № 6, с. 52.
3. Kendrew J. D., Dickerson R. E., Strandberg B. E., Hart R. G., Davies D. R., Phillips D. C., Store V. C. Structure of Myoglobin. — "Nature", 1960, vol. 185, p. 442.
4. Левинтал С. Построение молекулярных моделей с помощью вычислительной машины. Молекулы и клетки. Вып. 3. М., «Мир», 1968.
5. Ньюмен У., Спрулл Р. Основы интерактивной машинной графики. М., «Мир», 1976.
6. Постников М. М. Аналитическая геометрия. М., «Наука», 1974.
7. Одеянко Б. Н., Нигматуллин Р. С. Построение объемных молекулярных моделей с помощью вычислительной машины. — ЖСХ, 1977, т. 18, № 1, с. 183.
8. Куртуков А. Я. Математическое обеспечение для графопостроителей (первый уровень). — Препринт. Новосибирск, изд. ВЦ СО АН СССР, 1971.
9. Баяковский Ю. М., Михайлова Т. Н., Мишакова С. Г. ГРАФОР: комплекс графических программ на ФОРТРАНе. Вып. I. М., изд. ИПМ АН СССР, 1972.

Поступила в редакцию 15 мая 1978 г.