

Коллекция электронных научных ресурсов Института оптики атмосферы СО РАН

Бабилов Ю.Л., Головки В.Ф., Гордов Е.П., Родимова О.Б., Фазлиев А.З.
Институт оптики атмосферы СО РАН, Томск, Россия
E-mail: faz@iao.ru, ylb@iao.ru, gordov@iao.ru, rod@iao.ru

1 ВВЕДЕНИЕ

В Институте оптики атмосферы СО РАН накоплен значительный объем экспериментальных и расчетных данных по разным параметрам атмосферы, характеризующих физические и химические процессы протекающие в атмосфере. Часть этих данных опубликована в журналах и они положены в основу отдельных монографий десяти томной серии "Современные проблемы атмосферной оптики". В последнее время в ИОА СО РАН проводится работа по созданию электронной коллекции по атмосферной оптике. В коллекцию входят две составные части: информационная система по научным публикациям, состоящая из двух сайтов (конференции ИОА СО РАН (<http://symp.iao.ru>) [1] и журнал "Оптика атмосферы и океана" (<http://ao.iao.ru>) [2] и информационно-вычислительная система (ИВС) "Оптика атмосферы".

В настоящей работе описаны структура, назначение и программная реализация ИВС "Оптика атмосферы".

Особенность электронных коллекций, создаваемых в предметных областях естественных наук, состоит в применении модельных компьютерных экспериментов [3], позволяющих использовать систематизированные экспериментальные и фундаментальные данные для сравнения с расчетными данными, проведения экспертных оценок и т.д.

ИВС "Оптика атмосферы" состоит из четырех научных сайтов, охватывающих следующие предметные области: атмосферная спектроскопия, атмосферная химия, атмосферный аэрозоль и статистические модели атмосферы.

Основной целью создания ИВС "Оптика атмосферы" является:

1. систематизация, собранных в Институте данных (экспериментальных, расчетных и литературных);
2. построение математических моделей второго (численная аппроксимация систем дифференциальных

уравнений) и третьего уровня (программное обеспечение для реализации численных аппроксимаций) [4];

3. интеграция данных и согласование моделей разных предметных областей атмосферной оптики;
4. организация доступа широкого круга пользователей для использования данных, типовых методов их обработки и выполнения модельных расчетов в оптике атмосферы.

Существуют разные программные подходы для достижения этих целей. Современные подходы основаны на хранении данных в БД, построении численных моделей, допускающих распараллеливание вычислений и использовании Интернет-технологий для организации доступа к информационным ресурсам. Информационные системы, создаваемые в рамках указанных подходов, становятся все более распространенными, например, в области экологии и мониторинга окружающей среды отметим работы К.Fedra (<http://www.ess.co.at>). В меньшей степени в Интернете представлены информационно-вычислительные системы по наукам о Земле. Известные нам общедоступные приложения (например, по молекулярной спектроскопии [5]) сводятся к простым ИС и не содержат модельной обработки данных. Нам неизвестно о доступных в интернете интегрированных ИВС в области наук о Земле.

Ниже используется термин "научный сайт", под которым понимается программная реализация ИВС на www-сервере средствами интернет-технологий. Обязательными компонентами такого сайта являются базы данных, модели и система отображения (инструментарий для графического, табличного и аналитического отображения результатов расчетов, включая диалоговую систему (меню)). Составной частью сайта могут являться отдельные типовые информационные системы, имеющие более простую структуру, а именно, данные и система отображения данных. С помощью типовых ИС упорядочивается сопутствующая информация, например, интернет-ссылки, комментарии к фундаментальным данным, библиография, предметные словари и т.д.

Основное принцип использования вычислительного ресурса, заложенный при создании ИВС, состоит в том, что все сложные расчеты проводятся на сервере, а элементарная обработка данных, например, перевод физических

©Вторая Всероссийская научная конференция
ЭЛЕКТРОННЫЕ БИБЛИОТЕКИ:
ПЕРСПЕКТИВНЫЕ МЕТОДЫ И ТЕХНОЛОГИИ,
ЭЛЕКТРОННЫЕ КОЛЛЕКЦИИ
26-28 сентября 2000г., Протвино

величин в разные системы единиц измерения, на клиентском месте.

2 ДАННЫЕ

На каждом научном сайте используются три типа данных: фундаментальные и экспериментальные данные в предметных областях, сопутствующие данные о предметной области и данные пользователя, генерируемые при решении задач.

Экспериментальные данные включают в себя собранный в ИОА СО РАН оригинальный материал по полевым, полетным и лабораторным измерениям параметров атмосферы. Он включает измерения оптических характеристик атмосферы (прозрачность, вертикальные профили аэрозоля [6]) и метеопараметры при которых проводились измерения. Систематизированы данные теоретических расчетов по спектрам атмосферных молекул, статистическим характеристикам высотного хода температуры и газовых составляющих атмосферы [7]. К фундаментальным данным относятся базы данных HITRAN'98 [8], GEISA'97 [9] и данные о коэффициентах скоростей атмосферных химических реакций [10]. Все перечисленные данные размещаются в реляционных базах данных, для каждой из которых построены соответствующие интерфейсы администратора баз данных и пользователя. На рис.1 приведен интерфейс администратора для работы с базой данных по атмосферной химии. На рис.2 представлена структура базы данных по атмосферной спектроскопии.

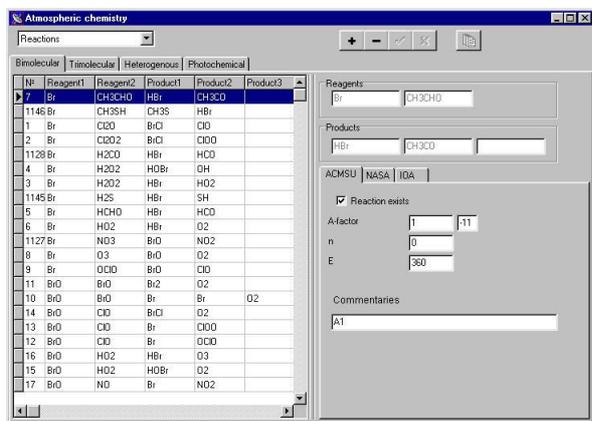


Рис. 1: Интерфейс администратора для работы с базой данных по атмосферной химии.

Данные о предметной области включают в себя комментарии к фундаментальным и экспериментальным данным, библиографию, терминологические словари, ссылки на интернет - ресурсы, учебники и т.д.

Индивидуальная работа пользователя требует его авторизации и выделения ресурса для хранения результатов выборок и расчетов. Результаты работы каждого пользователя на сайте хранятся в реляционной СУБД. Время хранения данных в БД пользователя является конечным.

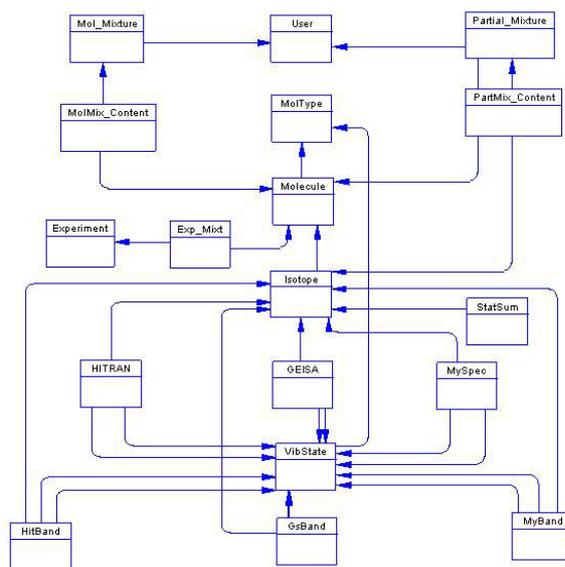


Рис. 2: Структура базы данных по атмосферной спектроскопии.

3 ФИЗИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Предметной областью, для которой создается электронная коллекция, является оптика атмосферы. Являясь частью наук о Земле, она описывает оптические свойства трех взаимодействующих, но разных по природе, объектов. Это - атмосфера, как газовая оболочка вращающейся планеты (совокупность присущих динамических процессов), атмосфера, как смесь газов, в которой взвешены аэрозольные частицы (химические и физические свойства ее состава) и радиация (излучение естественных и искусственных источников, восходящие и нисходящие потоки радиации). В общем случае, для понимания процессов изучаемых атмосферной оптикой требуется знание свойств всех трех объектов. Однако, пренебрежение деталями динамического поведения атмосферы и замена динамической модели (глобальная и региональная циркуляция, перенос и т.д.) на статистическую модель атмосферы, хотя и приводит к сужению класса рассматриваемых задач, все еще оставляет широкое поле деятельности для моделирования оптических процессов в атмосфере.

Именно в таком приближении и строится в настоящее время базовая физическая модель оптики атмосферы, являющаяся основой для последующего построения используемых в ИВС математических моделей. Применение статистических моделей с усреднением по пространству позволяет сводить пространственные задачи к точечным. В упрощенной модели изучается поведение химических и физических свойств компонентов атмосферы и взаимодействующие с ними потоки радиации на базе статистических моделей атмосферы.

Вещество в атмосфере существует в трех состояниях. Атмосферный аэрозоль (вещество в жидком или твердом состоянии) является наименее изученным атмосферным объектом. Газовый состав атмосферы изучен более де-

тально. В нашей модели мы ограничиваемся описанием только физических и химических свойств атмосферного вещества.

Изучение взаимодействия вещества с излучением требует привлечения информации о микрофизических свойствах атомов и молекул, в первую очередь, их спектральных характеристик.

Следующий уровень огрубления модели состоит в выделении основных химических и физических процессов. Химическое описание ограничено учетом кинетических процессов для би- и тримолекулярных реакций, фотолизных и гетерогенных реакций. В физических процессах выделены: взаимодействие излучения с атомами и молекулами (формирование контура спектральных линий), процессы распространения (переноса) радиации в поглощающей среде, поведение плотности и температуры атмосферы с высотой.

Упрощенная схема связей между предметными областями атмосферной оптики, представленными в существующей версии ИВС, представлена на рис. 3.

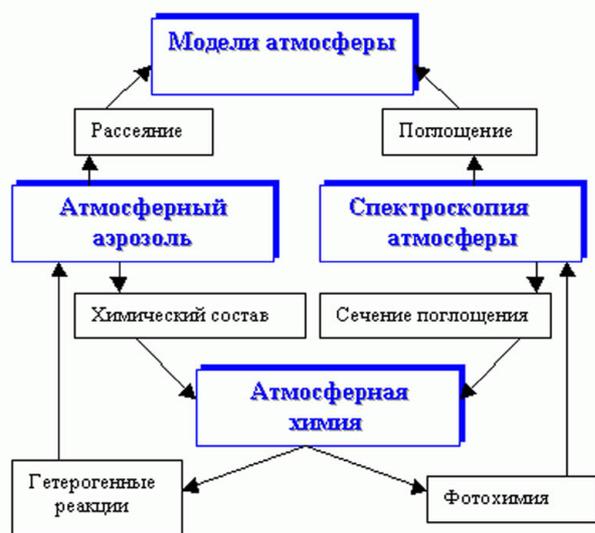


Рис. 3: Схема связей между компонентами ИВС.

Математическая модель, построенная на основе физической модели, требует программного обеспечения для решения дифференциальных и алгебраических уравнений, задач матричной алгебры, вычисления интегралов.

При создании научных сайтов использовано два типа алгоритмов: алгоритмы, обеспечивающие подготовку данных для расчета и вычислительные алгоритмы. Первый тип алгоритмов включает в себя работу с базами данных, организацию диалога с пользователем и алгоритмы символьных манипуляций (например, вывод символьных уравнений). Алгоритмы второго типа предназначены для реализации численных аппроксимаций моделей. С их помощью реализовано решение системы нелинейных дифференциальных и алгебраических уравнений, расчет функций пропускания, коэффициентов поглощения, нахождения коэффициентов скорости фотолизных реакций.

4 ОТОБРАЖЕНИЕ И СЕРВИСЫ

Элементарный сеанс работы пользователя с ИВС состоит из заполнения формы или выбора пункта меню, выполнения вычислений на сервере и формировании гипертекстовой страницы, представляющей результаты вычислений.

Для работы с базами данных и интерактивного обмена информацией с ИВС необходима развитая система меню. Меню является составным элементом каждой гипертекстовой страницы доступной пользователю. Новая страница формируется при использовании меню исходной страницы.

Представление информации в задачах атмосферной оптики осуществляется в трех видах: графическом, табличном и аналитическом. Аналитические расчеты, проводимые в описываемой ИВС, в настоящее время, сводятся к выводу кинетических уравнений и определению законов сохранения. Для табличного представления используются стандартные средства HTML и реализованный на основе скриптов механизм замены строк или столбцов в таблице. Графическая поддержка обеспечивает адекватное представление данных, их масштабирование, выделение фрагмента графика и другие типовые функции, используемые при работе с графиками. Для предоставления пользователю возможности использования иного программного обеспечения для работы с графиками предусмотрена доставка данных в виде пригодном для работы с типовыми программами построения графиков на клиентском месте (например, в виде ASCII-файлов). Такой подход позволил развивать в ИВС графическую поддержку, обеспечивающую только простейшие операции по работе с графикой.

Для предоставления сопутствующей информации по оптике атмосферы используются отдельные информационные системы, работающие как с предметными БД (спектроскопия, атмосферная химия, модели атмосферы), так и БД информационного сервиса (БД по ссылкам на интернет-ресурсы, терминологические словари, справки, учебники и т.д.). Информационный сервис типизирован и распространяется на все сайты ИВС.

Помимо информационного сервиса пользователям предоставляется возможность хранения промежуточных результатов решения задач на сервере и их использования при повторном обращении к ИВС. Такой сервис предоставляется после прохождения авторизации. На каждую задачу пользователя заводится база данных, в которой пошагово отражаются результаты работы пользователя. Результат решения задач, представляемый в виде набора гипертекстовых страниц, может быть отправлен пользователю по электронной почте для автономной работы. Эта услуга полезна при решении задач, требующих продолжительного времени.

5 БАЗОВЫЕ САЙТЫ

В настоящее время ИВС состоит из четырех научных сайтов, предоставляя возможность решения только части задач атмосферной оптики [11, 12]. Информационный сервис на каждом сайте представлен в полном объеме в соответствии с перечнем предыдущего параграфа [12, 13].

Основные функции сайта по атмосферной химии (<http://atmos.iao.ru>) состоят в предоставлении пользователю информации о типовых химических процессах, протекающих в атмосфере, возможности выбора необходимого для анализа набора реакции, вывода кинетических уравнений и законов сохранения, исключения не представляющих интереса веществ из анализа, расчета равновесных состояний, анализа их устойчивости, определения динамики поведения концентраций химических веществ и построения фазовых портретов для определения возможных типов динамического поведения газов в атмосфере.

Основной функцией сайта по молекулярной спектроскопии (<http://spectra.iao.ru>) является предоставление доступа к информации о параметрах спектральных линий (ПСЛ) атмосферных газов и малых примесей, необходимой для решения задач оптики атмосферы. Основу базы данных ПСЛ составляют широко распространенные банки данных Hitran-98 и Geisa-97. Пользователю предоставлена возможность использования собственных оригинальных данных о спектрах. Выборка данных может осуществляться в разрезе молекула/изотоп/спектральная полоса или в заданном диапазоне частот для выбранной или предложенной пользователем газовой смеси. К числу задач, решаемых системой, можно отнести построение частотных профилей коэффициентов поглощения, спектров пропускания и поглощения, конволюцию спектра поглощения заданной аппаратной функцией и сравнения его с экспериментом, расчет функции пропускания на вертикальных и наклонных трассах в оптически неоднородных средах. Все результаты могут быть получены в графическом или табличном виде, а также загружены на компьютер пользователя в виде текстовых файлов для дальнейшей обработки другими программами.

На рис. 4 представлен интерфейс пользователя при работе по вычислению коэффициента поглощения основного изотопа углекислого газа для заданных термодинамических условий в рамках банка данных HITRAN.

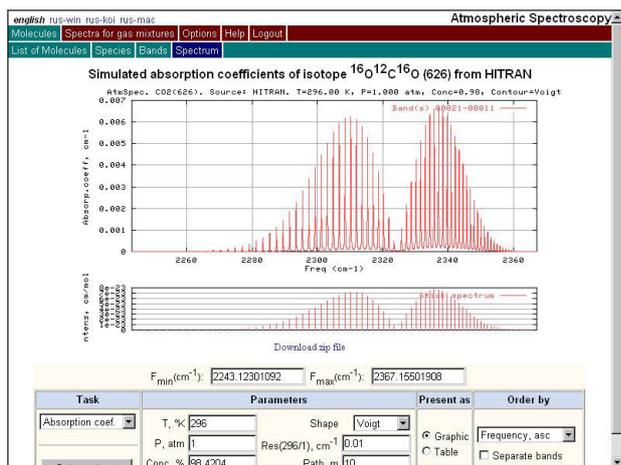


Рис. 4: Интерфейс сайта "Атмосферная спектроскопия".

Основные функции сайта по моделям атмосферы (<http://model.iao.ru>) состоят в предоставлении информации о статистических характеристиках атмосферы (зональные и региональные модели атмосферы, спектр солнечного излучения в верхних слоях атмосферы и на по-

верхности, альbedo земной поверхности для разных сезонов). Высотные профили концентраций атмосферных компонент и температуры используются при расчете функций пропускания излучения на трассе заданной протяженности и углом наклона, для расчета коэффициентов скорости фотохимических реакций

Основные функции сайта по атмосферному аэрозолю состоят в предоставлении информации о физических и химических процессах, приводящих к изменению его химического состава и размеров его компонент, высотных профилей аэрозоля для разных регионов России. В настоящее время систематизирована часть экспериментальных данных, создан вспомогательный информационный сайт (<http://aerosol.iao.ru>), предоставляющий информацию в Интернете о почасовом изменении метеопараметров, оптических характеристиках атмосферы, концентрациях атмосферных газов (озон и углекислый газ) в Томске.

6 ПРОГРАММНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ

Серверная часть программного обеспечения реализована в ОС Linux.

Систематизация данных организована в СУБД MySQL и InterBase. Отметим, что база данных по химическим реакциям содержит данные о сечениях поглощения молекул. Такие же данные находятся в спектроскопической БД. Существующая избыточность БД обусловлена существующими традициями публикации данных соответствующими сообществами химиков и спектроскопистов. Интерфейсы для администратора баз данных созданы в двух технологиях: www-интерфейс и типовой для ОС Windows интерфейс, реализованный средствами пакета Delphi. Отметим, что практика показала неэффективность использования пакета Delphi для работы с базами данных ориентированных на Интернет-приложения.

Алгоритмы по работе с диалоговой системой, символическими манипуляциями, работой с графикой и таблицами написаны являются оригинальными. Для решения дифференциальных и алгебраических уравнений используются типовые пакеты программ. Основной пакет для графического представления информации - GNUPlot.

На рис.5 представлена общая схема связи сайтов, баз данных и моделей.



Рис. 5: Схема взаимосвязей сайтов в разрезе модели-данные-отображение по сайтам.

На рис. 6 показана схема вариантов выполнения запросов пользователя.

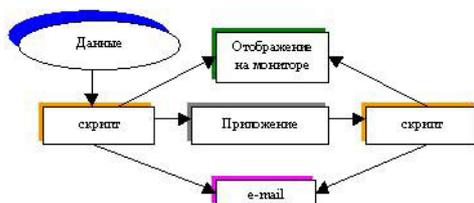


Рис. 6: Принципиальная схема функционирования ИВС.

Решение проблемы увеличения скорости вычислений, например, в задачах определения динамики поведения химического состава атмосферы, включающего десятки веществ, мы видим в использовании кластера персональных компьютеров (ОС Beowulf Linux). Нами проведен ряд предварительных численных экспериментов по распараллеливанию на уровне заданий (создан диспетчер, распределяющий процессы по узлам кластера) и на уровне алгоритмов вычислений (на типовой задаче перемножения многомерных матриц оптимизировался кластер компьютеров в рамках существующих аппаратных средств [14]).

7 ЗАКЛЮЧЕНИЕ

За рамками коллекции остались такие темы атмосферной оптики, как турбулентность в атмосфере, распространение лазерного излучения, рассеяние света в атмосфере и другие. Работы по этим темам планируются.

Моделирование химических процессов в атмосфере, проводимое на сайте по атмосферной химии, проводится для точечных систем и не касается задач пространственного изменения концентраций химических веществ. Такое рассмотрение требует создания сайта описывающего динамические модели атмосферы различного пространственного масштаба.

На наш взгляд модульная структура сайтов позволяет проводить актуализацию алгоритмов и данных без существенных накладных расходов для исследователей. Например, после ожидаемого создания кластера серверов в ИОА СО РАН будет совершен переход на солверы, использующие параллельные алгоритмы решения жестких дифференциальных уравнений. Это позволяет поддерживать профессиональный уровень расчетов проводимых на сайтах. Информационный ресурс и возможность моделирования, как элементарных процессов, так и их композиций позволяет надеяться на то, что данная ИВС будет использована также в образовательных учреждениях.

Авторы благодарят Российский фонд фундаментальных исследований за поддержку работы (грант 99-07-90104).

Список литературы

[1] Карякин А.С., Фазлиев А.З. Электронное представление материалов конференций в Институте оптики атмосферы СО РАН. Доклад на V рабочей группе по электронным публикациям. Новосибирск, 21-23 июня 2000 г. Опубликовано в Интернете: <http://www-sbras.nsc.ru/ws/abstract.dhtml?1+30>

[2] Ахлестин А.Ю., Бабиков Ю.Л., Карякин А.С., Фазлиев А.З. Информационные системы Института оптики атмосферы СО РАН: Структура и отображение электронной информации. Труды 1 Всероссийской конференции "Электронные библиотеки: перспективные методы и технологии, электронные коллекции", Санкт-Петербург, 19-22 октября 1999г. с. 245-249.

[3] Коголовский М.Р. Научные коллекции информационных ресурсов в электронных библиотеках. Труды 1 Всероссийской конференции "Электронные библиотеки: перспективные методы и технологии, электронные коллекции", Санкт-Петербург, 19-22 октября 1999г, с.16-31.

[4] Дымников В.П., Филатов А.Н. Основы математической теории климата. М., 1994, ВИНТИ, 252с.

[5] <http://www.ara.polytechnique.fr/geisaen.html>

[6] B.D. Belan, V.E. Zuev, M.V. Panchenko, Main results of airborne sounding of aerosol conducted at the Institute of Atmospheric Optics from 1981 till 1991. Atmos. Oceanic Optics, 1995, v.8, No.1-2, p. 66.

[7] Зуев В.Е., Комаров В.С. Статистические модели температуры и газовых компонент атмосферы. Л., Гидрометеиздат, 1986, 264с.

[8] Rothman L.S., Rinsland C.P., Goldman A., et al. The HITRAN molecular spectroscopic database and HAWKS (HITRAN Atmospheric workstation): 1996 Edition. JQRST, 1998, v.60, p.665-710.

[9] Jacquinet-Husson N., Arie E., Ballard J., et al. The 1997 Spectroscopic databank. JQSRT, 1999, v.62, p.205-254.

[10] W.B. De Moore, S.P. Sander, et al. Chemical Kinetics and Photochemical Data for use in Stratospheric Modeling. JPL Publication 97-4, 1997.

[11] E.P. Gordov, Y.L. Babikov, B.D. Belan, V.F. Golovko, M.V. Panchenko, O.B. Rodimova, A.Z. Fazliev. Integrated model of the atmospheric optics. Proceedings of SPIE 6 International Conference Atmospheric and Ocean Optics, v.3983, 1999, p. 553-561.

[12] D.P. Adamov, A.Yu. Akhlyostin, A.Z. Fazliev, E.P. Gordov, et al. Information-computational system: atmospheric chemistry. Proceedings of SPIE 6 International Conference Atmospheric and Ocean Optics, v.3983, 1999, p. 578-581.

[13] Отчет по гранту РФФИ (99-07-90104). <http://www-sbras.nsc.ru/win/elbib/iao>

[14] Адамов Д.П., Михайлов С.А., Фазлиев А.З. Об использовании вычислительного кластера для проведения расчетов в ИВС "Атмосферная химия", Доклады ТГУСУР, т.2. Сб. научных трудов, в.2, Томск, 1999.