

ФОРМАТ ХРАНЕНИЯ ДАННЫХ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОГО И ТЕПЛОФИЗИЧЕСКОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

В.Г. Проняев*, Г.Е. Новиков **, И.А. Чусов*,*, В.И. Диденко***

** Институт атомной энергетики НИЯУ МИФИ*

249040, Калужская обл., г. Обнинск, Студгородок, 1

*** Государственная корпорация по атомной энергии «Росатом»*

119017, Москва, ул. Большая Ордынка, 24

**** ФГУП ОКБ «Гидропресс»*

142103, Московская обл., г. Подольск, ул. Орджоникидзе, 21

Экспериментальные данные по термодинамическим свойствам реакторных материалов и сведения о теплофизических процессах, полученные на стендах и инженерных установках различной степени сложности, необходимо хранить в компьютерных базах данных (БД). Среди множества причин, обуславливающих необходимость иметь такие БД, главными являются возможности систематизации сведений о проведенных экспериментах; проведения оценки достоверности вновь и ранее полученных данных; использования данных опытов при проведении расчетов аналогичных или схожих термодинамических и теплофизических процессов; сопоставления информации, полученной в разное время разными авторами различными методами измерения; проведения прогнозного моделирования на основе уже имеющихся данных и т.д. [1 – 5].

В настоящее время известны хорошо структурированные БД (с устойчивой структурой, например, библиографические базы ядерных данных CINDA, INIS, NSR или микроскопических ядерных данных EXFOR, ENDF, ENSDF). Для поддержания этих БД ведутся тезаурусы (INIS) или словари кодов для осуществления поиска и выборки данных. Состав этих словарей не претерпевает больших изменений во времени и требует дополнений только при введении нового типа данных, появляющихся с развитием методик измерений. Часто такое расширение словарей требует длительного согласования между центрами данных, занимающимися компиляцией. Данные, содержащие результаты сложных корреляционных многопараметрических измерений, часто приводят к проблемам хранения информации. Как правило, результаты выборки из баз оцененных данных используются программами подготовки данных для расчетных программ.

Такой подход представляется нецелесообразным для построения термодинамических и теплофизических БД (ведение кодов для ключевых слов, ввод, хранение и выдача данных в хорошо структурированном виде) и излишне трудоемким, так как теплофизические и теплогидравлические программы, как правило, не используют программные комплексы подготовки данных для введения их в расчетные коды. Здесь данные вводятся в виде рекомендованных функциональных зависимостей (корреляций) или в виде текстовых файлов, содержащих константы или таблицы. В наиболее общем случае корреляционные зависимости могут быть построены не только на основании экспериментальных данных, но и на базе теоретических соображений.

© В.Г. Проняев, Г.Е. Новиков, И.А. Чусов, В.И. Диденко, 2019

Для унификации хранения термодинамических и теплофизических данных, а также способов и методов их получения, оценки погрешности, специфики проведения опытов представляется целесообразным разработать единый формат хранения экспериментальной информации, который может быть использован как оценщиками экспериментальной информации, так и ее конечными потребителями, т.е. расчетчиками.

Основной принцип организации плохо структурированных БД, предлагаемый в данном случае, – приписывание каждому набору данных списка *наблюдаемых*, используемых в компилируемой работе, по которым (одной наблюдаемой или их большому числу) можно вести поиск и выборку данных. Здесь и далее под термином «наблюдаемая» понимается любая физическая величина либо объект, которые относятся к исследуемой предметной области.

К неструктурированным или плохо структурированным БД могут быть отнесены базы, организованные в виде обычного текста, или гипертекстовые системы.

Информацию об экспериментальных данных предлагается хранить в текстовом виде (основной файл – ОФ) как наиболее простом для чтения и обработки. ОФ в общем случае может пополняться файлами, содержащими таблицы, рисунки, дополнительную информацию в различных форматах (*.xls, *.jpg, *.txt и т.д.).

Для обозначения наблюдаемых предлагается использовать следующие синтаксические выражения. В окружении символами двойных плюсов (++) начиная с первой колонки, содержатся наблюдаемые, по которым можно вести поиск. Если внутри после наблюдаемой стоит знак равенства (=), то значение после него или интервал значений в виде двух чисел, разделенных пробелом и с приведенной размерностью, указывает на величину или интервал изменения наблюдаемой (как правило, независимой переменной), по которой может быть организован поиск. Поиск можно вести по совокупности наблюдаемых с указанием границ их изменений. Для некоторых наблюдаемых после знака равенства могут даваться списки элементов из таблицы Менделеева, характеризующие состав материала, или химическая формула материала, или год публикации, или фамилия автора.

Структурно информацию о сведениях экспериментального характера в ОФ предлагается хранить в виде блоков. Здесь и далее под словом «работа» подразумевается совокупность сведений, объединяющая уникальный номер, название источника информации (статья, книга, сообщение и т.д.), авторов публикации, год издания, методы проведения эксперимента, полученные цифровые значения и т.д.

В рассматриваемой версии предлагается пять основных блоков.

Блок 1 содержит номера работы и наборов данных, признаки начала работы и начала набора, окончания работы и окончания набора данных:

- ++НОМЕР РАБОТЫ=номер++ – уникальный номер приписывается каждой работе, содержащей один или более отдельных наборов данных, признак начала работы;
- ++НОМЕР НАБОРА ДАННЫХ=номер++ – уникальный номер набора данных, НАБОР данных под номером 1 содержит общую информацию, относящуюся ко всем наборам данных, и содержит только общие данные для всех наборов, признак начала набора данных;
- ++ОКОНЧАНИЕ НАБОРА ДАННЫХ=номер++ – признак окончания набора данных;
- ++ОКОНЧАНИЕ РАБОТЫ=номер++ – признак окончания работы.

Блок 2 содержит библиографическую информацию:

- ++АВТОР=список++ – содержит фамилию и инициалы имени и отчества одного или список нескольких авторов для данной работы, разделенных запятыми;
- ++ГОД ПУБЛИКАЦИИ=год++ – содержит год публикации данной работы;
- ++ИСТОЧНИК++ – содержит название журнала, справочника, издательства, сборника статей и т.д.

Кроме наблюдаемых блок содержит в свободном формате полную ссылку на работу, включая название работы, и полнотекстовую ссылку на публикацию.

Блок 3 содержит описание типа приведенных в наборе данных:

- ++ЭКСПЕРИМЕНТ++ – экспериментальные данные;
- ++ОЦЕНКА++ – оцененные данные (как правило, с использованием многих наборов экспериментальных данных, возможным привлечением моделей и приведенной погрешностью в виде доверительного интервала или в виде статистической и систематической компоненты погрешности, или полной погрешности);
- ++ОПИСАНИЕ++ – математическое или модельное описание (как правило) одного набора экспериментальных данных.

Блок 4 содержит описание представления данных для данного набора данных:

- ++ТАБЛИЦА=+++ – данные в виде текстовой (TXT-DOS) таблицы колонного вида в свободном формате – следует со следующей строки и содержит колонки независимых и зависимых наблюдаемых и их погрешностей;
- ++PDF ДАННЫЕ=ГИПЕРССЫЛКА++ – PDF-документ с данными в виде таблицы или функциональными зависимостями (корреляциями), хранится отдельно от компилируемого текстового документа; название гиперссылки должно содержать номер набора данных, следующий за буквой Д;
- ++PDF ГЕОМЕТРИЯ=ГИПЕРССЫЛКА++ – PDF документ с представлением геометрии эксперимента (рисунка) – хранится отдельно от компилируемого текстового документа;
- ++ТЕКСТ ФОРТРАН=+++ – уравнение для функциональной зависимости (корреляции), записанное с использованием синтаксиса ФОРТРАН-90 – приводится сразу после данного наблюдаемого;
- ++ПОДПРОГРАММА ФОРТРАН=гиперссылка++ – подпрограмма на языке ФОРТРАН-90 для расчета функциональной зависимости (корреляции), список параметров должен быть согласован с программами расчета, использующими данную подпрограмму, хранится отдельно от компилируемого текстового документа.

Блок 5 содержит набор физических наблюдаемых в пяти подразделах.

5.1. Состав материала (рабочего тела):

- ++ЭЛЕМЕНТ=список++ – используется для описания свойств материала из одного элемента, приведенного в списке химических символов из таблицы Менделеева;
- ++КОМПОЗИЦИЯ ЭЛЕМЕНТОВ=список++ – используется для описания свойств материала из нескольких элементов, приведенных в списке как химические символы, разделенные через запятую, или как формула химического соединения (H_2O), или как обозначение (SS – нержавеющая сталь в общем случае);
- ++ЭЛЕМЕНТ1=список++, ++ЭЛЕМЕНТ2=список++,
- ++КОМПОЗИЦИЯ ЭЛЕМЕНТОВ1=список++, ++КОМПОЗИЦИЯ ЭЛЕМЕНТОВ2=список++ – используются для описания свойств нескольких материалов, например в экспериментах по теплообмену.

5.2. Основные термодинамические наблюдаемые:

- ++ПЛОТНОСТЬ++; ++ТЕМПЕРАТУРА=интервал++;
- ++ДАВЛЕНИЕ=интервал++; ++ТОЧКА ПЛАВЛЕНИЯ В ЭВТЕКТИКЕ++;
- ++ТЕМПЕРАТУРА ПЛАВЛЕНИЯ-ОТВЕРДЕВАНИЯ ПРИ НОРМАЛЬНОМ ДАВЛЕНИИ++;
- ++ТЕМПЕРАТУРА КИПЕНИЯ-КОНДЕНСАЦИИ ПРИ НОРМАЛЬНОМ ДАВЛЕНИИ++;
- ++ТЕМПЕРАТУРА ЛИКВИДУСА=интервал++;
- ++ТЕМПЕРАТУРА СОЛИДУСА=интервал++;
- ++ЭНТАЛЬПИЯ В ТОЧКЕ ПЛАВЛЕНИЯ++; ++ЭНТАЛЬПИЯ В ТОЧКЕ КИПЕНИЯ++;
- ++ДАВЛЕНИЕ НАСЫЩЕННОГО ПАРА=интервал++;
- ++ЭЛЕКТРИЧЕСКОЕ СОПРОТИВЛЕНИЕ=интервал++;

++ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ=интервал++; ++ТЕРМОДИФФУЗИЯ=интервал++;
 ++ПАРАМЕТРЫ В КРИТИЧЕСКОЙ ТОЧКЕ++.

5.3. Термодинамические величины:

++ПЛОТНОСТЬ В ЖИДКОМ СОСТОЯНИИ ПРИ НОРМАЛЬНОМ ДАВЛЕНИИ++;
 ++ПЛОТНОСТЬ В ЖИДКОМ СОСТОЯНИИ=интервал++;
 ++ОБЪЕМНЫЙ КОЭФФИЦИЕНТ ТЕПЛООВОГО РАСШИРЕНИЯ++;
 ++ЛИНЕЙНЫЙ КОЭФФИЦИЕНТ ТЕПЛООВОГО РАСШИРЕНИЯ++;
 ++СКОРОСТЬ ЗВУКА=интервал++;
 ++АДИАБАТИЧЕСКИЙ КОЭФФИЦИЕНТ СЖИМАЕМОСТИ++;
 ++МОДУЛЬ УПРУГОСТИ++;
 ++ИЗОБАРИЧЕСКАЯ УДЕЛЬНАЯ ТЕПЛОЕМКОСТЬ++;
 ++ЛЕТУЧЕСТЬ++; ++ПОТЕНЦИАЛ ГИББСА++;
 ++СВОБОДНАЯ ЭНЕРГИЯ ГЕЛЬМГОЛЬЦА++.

5.4. Транспортные свойства:

++ДИНАМИЧЕСКАЯ ВЯЗКОСТЬ++; ++КИНЕМАТИЧЕСКАЯ ВЯЗКОСТЬ++.

5.5. Теплофизические и гидродинамические свойства:

++ЧИСЛО НУССЕЛЬТА=интервал++; ++ЧИСЛО РЕЙНОЛЬДСА=интервал++;
 ++ЧИСЛО ПРАНДТЛЯ=интервал++; ++ЧИСЛО ШМИДТА=интервал++;
 ++ЧИСЛО ПЕКЛЕ=интервал++; ++ЧИСЛО ШЕРВУДА=интервал++;
 ++СКОРОСТЬ ПОТОКА=интервал++; ++ТЕПЛОВОЙ ПОТОК=интервал++;
 ++ОДНОФАЗНЫЙ ПОТОК++; ++ДВУХФАЗНЫЙ ПОТОК++;
 ++УДЕЛЬНЫЙ ТЕПЛОВОЙ ПОТОК++;

++ТЕРМОДИНАМИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ КИСЛОРОДА++ и многие другие наблюдаемые, которые могут добавляться по мере появления измерений с этими наблюдаемыми.

При такой организации нет необходимости вести словари данных кроме словарей авторов, элементов, их композиций и типов физических наблюдаемых. При загрузке новой работы в БД в словари должны вноситься все новые наблюдаемые, которые ранее в них отсутствовали. Во избежание дублирования наблюдаемых по их названию необходима строгая проверка того, что данная новая наблюдаемая не входит в словари под другим названием.

Словари физических наблюдаемых, приписываемых наборам вводимых в БД, должны готовиться в тематических центрах ГК «Росатом» по направлениям (кроме ядерных данных, где пополнение БД в настоящее время осуществляется в рамках сети международных центров данных и национальные данные представлены на зеркале сайта секции ядерных данных МАГАТЭ) и в ЧУ «Атомстандарт» [6]. Для термодинамических данных тематическим центром является центр данных термодинамических свойств (ЦДТС – [7]).

Тематические центры должны быть ответственны за качество ввода наблюдаемых в словари, отсутствие ошибок и излишнее дублирование. Базисный список физических наблюдаемых должен быть подготовлен до заполнения БД данными.

Программное обеспечение для поиска и выборки данных по корреляции между наблюдаемыми реализуется в рамках СУБД и позволит организовать поиск необходимых данных с возможностью последующего поиска в уже найденном.

В настоящее время специалистами ЦДТС разработана и развернута на сервере система ExThermD [8], которая реализует предложенный подход к организации хранения данных на примере термодинамических свойств реакторных материалов. Структура БД системы ExThermD обеспечивает возможность унификации хранения термодинамических и теплофизических данных (а также способов и методов их получения, оценки погрешности, специфики проведения опытов) и может быть использована оценщиками экспериментальной информации и ее конечными потребителями, т.е. расчетчиками. Система ExThermD обеспечивает возможность выгрузки данных из БД в файлы, форматы

которых удобны для машинной обработки (в том числе, в описанный в статье текстовый формат).

Предлагаемый подход является достаточно универсальным – при переходе к другим инженерным (технологическим) данным, включая физико-химические и материаловедческие, меняется только словарь блока физических наблюдаемых.

После краткого изложения своих соображений в части решения такой сложной задачи, как организация хранения и обработки данных эксперимента, авторы надеются получить отзывы, предложения и дополнения от всех заинтересованных в этой работе коллег.

Литература

1. *Smith W.R., Missen R.W.* Chemical Reaction Equilibrium Analysis: Theory and Algorithms. – N.-Y.: John Wiley, 1982. – 364 p.
2. Термодинамические свойства индивидуальных веществ: Справ. изд. в 4-х т. Том 1, кн. 2. / Под ред. акад. В.П. Глушко – М.: Наука, 1979. – 823 с.
3. Термические константы веществ: Справочник. Том 1. / Под ред. акад. В.П. Глушко. – М.: ВИНТИ, 1965. – 185 с.
4. *Chase M.W. Jr.* NIST-JANAF Thermochemical Tables, Fourth Edition. // J. Phys. Chem. Ref. Data Monograph and Suppl., Monograph 9, Part I and Part II. – 1998. – 1963 p.
5. *Knacke O., Kubaschewski O., Hesselmann K.* Thermochemical Properties of Inorganic Substances. – Berlin: Springer-Verlag, 1991. – 2412 p.
6. Сайт ЧУ «Атомстандарт». Электронный ресурс: <http://atomstandard.ru/> (дата доступа 20.07.2019).
7. Сайт центра данных термодинамических свойств (ЦДТС). Электронный ресурс: <http://www.iate.obninsk.ru/node/1303/> (дата доступа 20.07.2019).
8. Система ExThermD. Электронный ресурс: <http://217.15.201.154:8080/ExThermD> (дата доступа 20.07.2019).

Поступила в редакцию 26.07.2019 г.

Авторы

Проняев Владимир Григорьевич, к.ф.-м.н., в.н.с.
E-mail: vgpronyaev@yandex.ru

Новиков Григорий Евгеньевич, главный специалист департамента
E-mail: genovikov@rosatom.ru

Чусов Игорь Александрович, д.т.н., профессор
E-mail: igrch@mail.ru

Диденко Владимир Иванович, начальник управления
E-mail: vdidenko74@gmail.com

UDC 621.34

FORMAT FOR STORING DATA FROM THERMODYNAMIC AND THERMOPHYSICAL EXPERIMENT

Pronyaev V.G.*, Novikov G.E.**, Chusov I.A.*, ***, Didenko V.I.*

* Obninsk Institute for Nuclear Power Engineering, NRNU MEPhI
1 Studgorodok, Obninsk, Kaluga reg., 249040 Russia

** Rosatom State Atomic Energy Corporation
24 Bol'shaya Ordynka str., Moscow, 119017 Russia

*** Federal State Unitary Enterprise OKB Hidropress
21 Ordzhonikidze str., Podolsk, Moscow reg., 142103 Russia

ABSTRACT

A simple scheme for organizing data storage and retrieval for thematic areas in the field of the use of atomic energy is presented. It is based on the use of the concept of physical observables, presenting the results of a given experiment or an evaluated data. The database may contain, in addition to the data itself in the form of tables in text format, or equations, also the necessary bibliographic information. The scheme is practically implemented as a relational database of thermodynamic properties of liquid metal coolants. It can be quite easy adapted for use in other thematic areas (thermal hydraulics, materials science, physicochemical properties of materials and mass transfer). Such a transition does not require any additional programming, but is based on creating and maintaining dictionaries of physical observables for these thematic areas, replenished when data of a new type are entered.

REFERENCES

1. Smith W.R., Missen R.W. *Chemical Reaction Equilibrium Analysis: Theory and Algorithms*. N.-Y.: John Wiley, 1982, 364 p.
2. *Thermodynamic Properties of Individual Substances: Reference Publication in 4 Volumes. Volume 1, Book 2*. Ed. Acad. V.P. Glushko. Moscow. Nauka Publ., 1979, 823 p. (in Russian).
3. *Thermodynamic Constants of Substances: Reference Publication. Volume 1*. Ed. Acad. V.P. Glushko. Moscow. VNIITI Publ., 1965, 185 p. (in Russian).
4. Chase M.W. Jr. NIST-JANAF Thermochemical Tables, Fourth Edition. *J. Phys. Chem. Ref. Data Monograph and Suppl., Monograph 9, Part I and Part II*, 1998, 1963 p.
5. Knacke O., Kubaschewski O., Hesselmann K. *Thermochemical Properties of Inorganic Substances*. Berlin. Springer-Verlag, 1991, 2412 p.
6. Web-site PI «Atomstandart». Available at: <http://atomstandard.ru/> (accessed Jul 20, 2019).
7. Data Center «CDTS». Available at: <http://www.iate.obninsk.ru/node/1303> (accessed Jul 20, 2019).
8. ExThermD System. Available at: <http://217.15.201.154:8080/ExThermD> (accessed Jul 20, 2019).

Authors

Pronyaev Vladimir Grigorievich, Leading Researcher, Cand. Sci. (Phys.-Math.)

E-mail: vgpronyaev@yandex.ru

Novikov Grigory Evgen'evich, Chief Specialist of Department

E-mail: genovikov@rosatom.ru

Chusov Igor Aleksandrovich, Professor, Dr. Sci. (Engineering)

E-mail: igrch@mail.ru

Didenko Vladimir Ivanovich, Head of Department

E-mail: vdidenko74@gmail.com