

## ПРО ДЕЯКІ ПІДХОДИ ДО СТВОРЕННЯ ПРОГРАМНИХ КОМПЛЕКСІВ КОМП'ЮТЕРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ПІДЗЕМНИХ ПРОЦЕСІВ

**В. В. Жуковський**

Національний університет водного господарства та природокористування  
вул. Соборна, 11, м. Рівне, 33028, Україна. E-mail: zeonet@gmail.com

Висвітлено основні проблеми побудови програмних комплексів математичного моделювання підземних процесів. Проведено короткий огляд програмних комплексів HYDRUS, NADRA-3D, ORCHESTRA та PFLOTRAN з точки зору їх функціоналу, математичного апарату, архітектури та відкритості програмного коду. Відсутність об'єктно-орієнтованого підходу при проектуванні класів математичних моделей та велика кількість полів класів є однією із проблем. Адже такий стиль програмування протирічить підходам керування складністю. Враховуючи вищесказане було наведено сучасні методології побудови відповідного програмного забезпечення. На прикладі власного кросплатформеного програмного комплексу NanoSurface запропоновано підхід до вибору методології розробки, архітектури класів та проектування програмної системи. Складні взаємозв'язки між рівняннями математичної моделі в NanoSurface реалізовано завдяки механізму віртуальних функцій та паттерну фабричний метод. Користувачський інтерфейс абстрагувався від конкретної реалізації вибраної користувачем математичної моделі через вказівник на абстрактний клас моделі. Також наводяться практичні аспекти застосування шаблонів проектування, організації чисельних обчислень та побудови користувачського інтерфейсу.

**Ключові слова:** комп'ютерне моделювання, проектування, архітектура, програмний комплекс, NanoSurface, підземні процеси.

## О НЕКОТОРЫХ ПОДХОДАХ К СОЗДАНИЮ ПРОГРАМНЫХ КОМПЛЕКСОВ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ПОДЗЕМНЫХ ПРОЦЕССОВ

**В. В. Жуковский**

Национальный университет водного хозяйства и природопользования  
ул. Соборная, 11, г. Ровно, 33028, Украина. E-mail: zeonet@gmail.com

Рассмотрены основные проблемы построения программных комплексов математического моделирования подземных процессов. Проведен краткий обзор программных комплексов HYDRUS, NADRA-3D, ORCHESTRA и PFLOTRAN с точки зрения их функционала, математического аппарата, архитектуры и открытости кода. Отсутствие объектно-ориентированного подхода при проектировании классов математических моделей и большое количество полей классов является одной из проблем. Ведь такой стиль программирования противоречит подходам управления сложностью. Учитывая вышесказанное были приведены современные методологии построения соответствующего программного обеспечения. На примере собственного кроссплатформенного программного комплекса NanoSurface предложен подход к выбору методологии разработки, архитектуры классов и проектирования программной системы. Сложные взаимосвязи между уравнениями математической модели в NanoSurface реализовано благодаря механизму виртуальных функций и паттерна фабричный метод. Интерфейс абстрагировался от конкретной реализации выбранной пользователем математической модели через указатель на абстрактный класс модели. Также приводятся практические аспекты применения шаблонов проектирования, организации численных вычислений и построения пользовательского интерфейса.

**Ключевые слова:** компьютерное моделирование, проектирование, архитектура, программный комплекс, NanoSurface, подземные процессы.

**АКТУАЛЬНІСТЬ РОБОТИ.** Ряд вчених при моделюванні задач математичної фізики використовують пакети прикладних програм. Зокрема, найпоширенішими є Matlab, Maple, MathCAD. Дані пакети дозволяють здійснити експерименти згідно наперед вибраного чисельного методу. З інтенсивним розвитком математичного та комп'ютерного моделювання з'явилися такі інтегровані середовища, як Comsol, RSOFT FemSIM та ряд інших. Вони дозволяють вирішувати різні прикладні задачі теорії пружності, електромагнетизму, динаміки рідин і газів, моделювати механічну взаємодію, масоперенесення тощо за допомогою як математичної постановки задачі (система рівнянь), так і з фізичної точки зору (вибір фізичної моделі, наприклад модель дифузії). Дані пакети добре адаптовані для інженерів, які хочуть застосувати нескладні математичні моделі до певних умов.

Поряд з тим, для моделювання складних динамічних процесів вчені прагнуть вдосконалити існуючі

математичні моделі геофізики, що враховуватимуть ряд певних чинників. Вони представляють цілі колективи науковців, результатами роботи яких є створення власних програмних продуктів (NADRA-3D [1], ORCHESTRA [2], PHREEQC [3], HPx [4], PHT3D [5], OpenGeoSys (OGS) [6], HYTEC [7], HYDRUS [8], TOUGHREACT [9], eSTOMP [10], HYDROGEOCHEM [11], CrunchFlow [12], MIN3P [13], PFLOTRAN [14] та інші). Розробка таких програмних продуктів вимагає додаткових знань з проектування та конструювання програмного забезпечення. Вони є вузькоспеціалізованими і багато в чому переважають вищезгадані.

Загальний опис деяких із зазначених програмних продуктів, їхній історичний розвиток, список застосованих математичних моделей, властивості і порівняння з іншими програмами наведено в наукових статтях та технічній документації [15], [11].

Метою статті є розгляд основних програмних комплексів комп'ютерного моделювання підземних

процесів та аналіз їх компонентів з точки зору конструювання програмного забезпечення та проведення оцінки якості коду. А також розробка власного програмного комплексу NanoSurface, для роботи з рядом нових математичних моделей, що матиме хороше метрики якості коду та можливість легкого подальшого супроводу та розвитку.

#### МАТЕРІАЛ І РЕЗУЛЬТАТИ ДОСЛІДЖЕНЬ.

Програмний комплекс HYDRUS було створено спільними зусиллями декількох наукових груп із США, Чеської республіки, Ізраїлю, Бельгії та Нідерландів. Він може аналізувати ряд фізичних та хімічних нерівноважних процесів. HYDRUS широко використовується для дослідження фільтрації сольових розчинів в зоні між поверхнею ґрунту і ґрунтовими водами (в насичено- та ненасичених системах). Масоперенесення сольового розчину в цьому випадку можна розглянути на прикладі формування двох областей з подвійною пористістю, яка поділяє рідку фазу на рухомі і нерухомі середовища. Хімічне нерівноважне переміщення розчину може бути враховане шляхом ділення доступних ділянок сорбції на дві фракції, припускаючи миттєву сорбцію в одній фракції одночасно з сорбцією на інших ділянках. Фізичні і/або хімічні моделі для перенесення частинок були розширені в останніх версіях комплексу шляхом включення положень, що стосуються теорії фільтрації і часової або глибинно-залежної функції блокування.

HYDRUS містить реалізацію великої кількості математичних моделей, що дозволяє використовувати їх для вирішення сільськогосподарських, промислових і екологічних проблем, а також надає можливість розв'язку задач в оберненій постановці [8].

До програмного комплексу HYDRUS входять програми HUDRUS-1D (рис. 1) та HUDRUS (2D/3D) (рис. 2), що розв'язують задачі тепло- масоперенесення в різнонасичених середовищах в одно- (HUDRUS-1D), дво- та тривимірних постановках (HUDRUS (2D/3D)). Базові версії програм HUDRUS чисельно розв'язують рівняння Річардса для насичено-ненасиченого водного потоку та рівняння адвекційно-дисперсійного типу для тепло- і масоперенесення. Також даний комплекс містить ряд додаткових модулів (наприклад, Wetland, HP1/2, UnsatChem, DualPerm, Meteo, C-Ride). Дані модулі розширюють функціонал рівнянням потоку із врахуванням процесу поглинання води корінням рослин; рівнянням перенесення тепла, що розглядає рух за рахунок теплопровідності, а також адвекції з проточною водою.

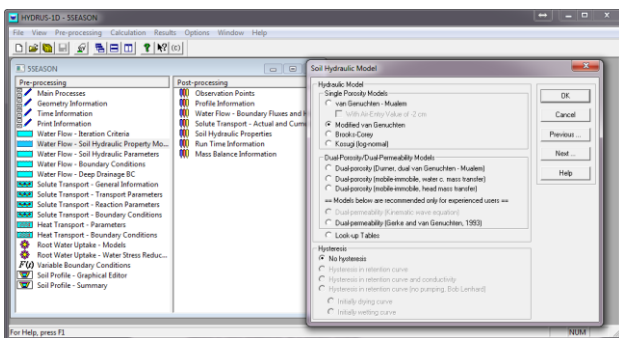


Рисунок 1 – Користувачий інтерфейс програми HYDRUS-1D

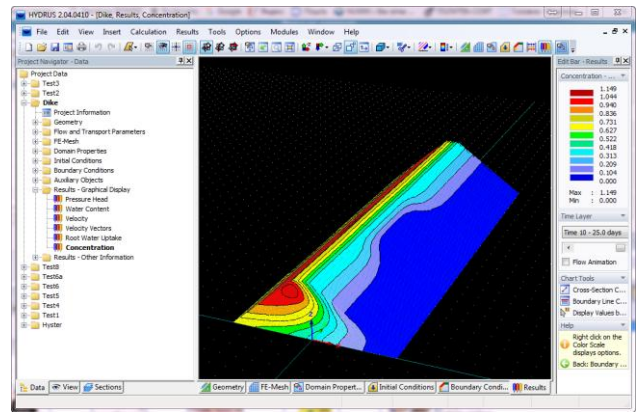


Рисунок 2 – Користувачий інтерфейс програми HYDRUS (2D/3D)

Головні адвекційно-дисперсійні рівняння комплексу записані в дуже загальному вигляді і надають можливість для завдання нелінійних нерівноважних процесів між твердою і рідкою фазами, а також лінійних рівноважних реакцій між рідкою і газовою фазами. Моделі масоперенесення враховують процеси адвекції та дисперсії в рідкій формі, а також дифузії в газовій формі, дозволяючи моделювати переміщення розчинів одночасно як в рідкому, так і в газоподібному середовищах. В HYDRUS розглядається до 15 розчинів, які можуть бути з'єднані в однонаправлений фільтраційний потік або фільтруватимуться незалежно один від одного.

Математичні моделі в даному програмному комплексі строго запрограмовані без можливості внесення змін користувачами. Вибір тієї чи іншої моделі здійснюється у відповідних модальних вікнах. Останні версії комплексу містять деякі вдосконалення, пов'язані з використанням розподілених обчислень. Незважаючи на велику кількість публікацій по темі математичного моделювання з використанням комплексу HYDRUS, архітектура програмного комплексу не описана. Натомість є можливість отримати вихідний код HYDRUS-1D мовою FORTRAN станом на 2009 рік та здійснити його аналіз самостійно.

Програмний комплекс NADRA-3D (рис. 3) було розроблено в Інституті кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України. Він призначений для комп'ютерного моделювання процесів фільтрації, дифузії і зміни напружено-деформованого стану в багатокомпонентних тривимірних об'єктах, які можуть містити тонкі включення [17]. Основу математичного апарату складають математичні моделі просторових процесів у вигляді систем диференціальних рівнянь в частинних похідних.

Основні етапи роботи з даним програмним комплексом полягають у створенні і редагуванні моделі, яка описує геометрію досліджуваної області; задання фізичних властивостей; розбиття області на скінченні елементи; формування і розв'язок системи алгебраїчних рівнянь методом скінченних елементів; представлення результатів обчислень. Вихідний код не доступний для вільного використання, однак у літературі детально описано використання методології ООП для розв'язування задачі опису складних тривимірних об'єктів, наведена відповідна ієрархія класів, колекцій

для геометричних областей та фізичних властивостей моделі [17]. Також розглянуто схему взаємодії модулів, діаграму класів, опис файлів даних та алгоритмів розв'язування методом скінченних елементів.

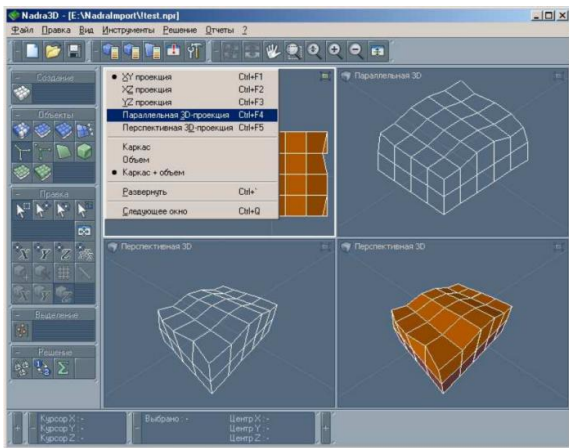


Рисунок 3– Користувачський інтерфейс NADRA-3D при роботі з геометричною моделлю

ORCHESTRA (Objects Representing CHEMical Speciation and TRANsport) являє собою об'єктно-орієнтований фреймворк для моделювання хімічних процесів [18]. На відміну від інших програмних продуктів, що містять рівняння математичних моделей строго запрограмованих в програмі, ORCHESTRA дозволяє легко маніпулювати рівняннями, адже вони розташовані у звичайних текстових файлах. Це робить постановку математичної моделі дуже зручною для користувача і надає можливість її розширювати.

Фреймворк складається з двох окремих частин: (1) модуля обчислень, який написаний на мові програмування Java; (2) файлу з набором хімічних моделей у текстовій формі.

Об'єктно-орієнтований підхід до задання хімічної моделі надає користувачу змогу створити послідовну та зрозумілу ієрархію класів. В основі даного фреймворку лежить три класи: суб'єкт (entity), реакція (reaction), фаза (phase) (рис. 4). Вони є базовими для побудови багатьох моделей хімічного процесу.

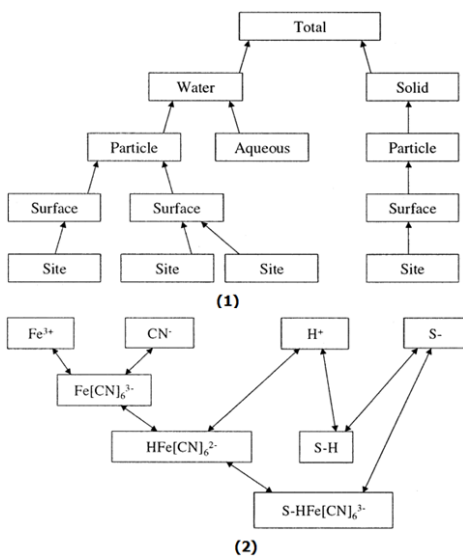


Рисунок 4 – Приклад ієрархії фаз (1) та ієрархії суб'єктів (2) в програмі ORCHESTRA

Фреймворк ORCHESTRA написаний на мові програмування Java. Ідеї, покладені в його основу, є досить хорошими і знайшли своє продовження в ряді інших фреймворків (наприклад, в PROOST [19]).

Програмний комплекс PHREEQC може моделювати широкий спектр одновимірних геохімічних рівноважних процесів, в яких приймають участь вода, мінерали, іони, тверді розчини і гази. В комплексі також задані закони кінетики, що дозволяють моделювати нерівноважні процеси, такі як розчинення та кристалізація мінералів, розкладання органічних сполук та інші кінетичні реакції.

Інтерфейс вхідних даних комплексу (рис. 5) потребує від користувача знань з хімії та теорії взаємодії іонів. Наприклад, математичне моделювання процесів багатоконцентної дифузії в глині згідно закону Фіка вимагає написання спеціального коду, що аж ніяк не покращує зручність користування [20]. Разом з тим, це свідчить про орієнтацію на вузьких спеціалістів, що зможуть доповнити існуючі математичні моделі описом власних досліджуваних процесів. Таким чином, деяка частина задач моделювання покладена на програмний комплекс, а інша – на дослідника.

Для аналізу доступні вихідні коди мовою C/C++. Незважаючи на тривалий час розробки (з 1997 року і донині), в кодї програми помітно суміш структурної та об'єктно-орієнтованої методології розробки. Це ускладнює розуміння архітектури іншими програмістами. Тому стає зрозуміло поява COM інтерфесів для інтеграції PHREEQC модулів з іншими системами [21].

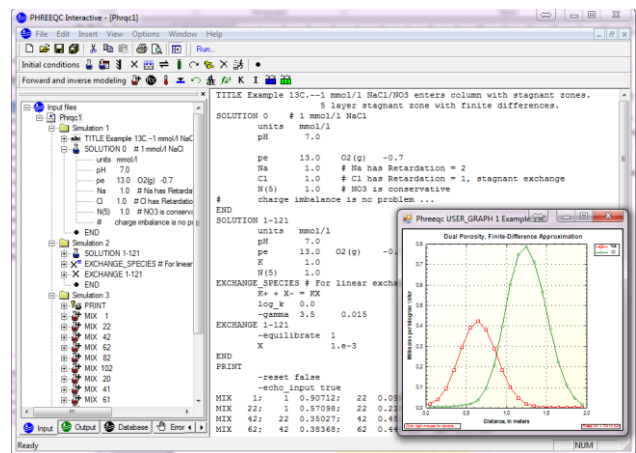


Рисунок 5– Інтерфейс програми PHREEQC в операційній системі Windows

PFLOTRAN– програмний комплекс з відкритим вихідним кодом, що динамічно розвивається. Він дозволяє розв'язувати системи нелінійних диференціальних рівнянь, що описують ряд фізичних та хімічних процесів. Основні режими роботи, що підтримуються комплексом наступні: розв'язання рівнянь Річардса, робота з багатофазним суперкритичним CO<sub>2</sub>, реактивні термо-гідро-хімічні процеси, кристалізація та розчинення мінералів, багатоконцентні термо- та гідропроцеси в пористому середовищі. Процеси тепло- та масоперенесення чисельно розв'язуються за допомогою повністю неявного методу Ейлера, що базується на ітераціях Ньютон-Крилова.

PFLOTRAN написаний з використанням об'єктно-орієнтованої мови Fortran 2003. Вибір мови Fortran над

C/C++ насамперед був обумовлений необхідністю залучення і збереження тісної співпраці з досвідченими науковцями, адже саме вони забезпечують математичну основу програмного комплексу. Разом з тим, основний акцент в PFLOTRAN приділено паралельним та розподіленим обчисленням. Розпаралелювання досягається через декомпозицію задачі з використанням PETSc (Portable Extensible Toolkit для наукових розрахунків) бібліотек. Тому програма не містить графічного інтерфейсу і всі вихідні дані для чисельних експериментів отримують з спеціального текстового файлу, аналогічно до PHREEQC та ORCHESTRA. Це, знову ж таки, вимагає від користувача детального вивчення складного формату вихідного файлу, що задає процес.

Код програми чітко структурований і в ньому легко орієнтуватися. Використовується система контролю версій Mercurial, що дозволяє відслідковувати зміни. Водночас основні класи програми, що формують математичні моделі, переважно аналізують вхідні дані і визначають необхідні коефіцієнти для передачі в об'єкти матричних обчислень. Відсутність підходу наслідування і декомпозиції при описі класів математичних моделей ускладнює розуміння фізичного процесу, адже велика одночасна кількість параметрів є труднощістю для користувача при додаванні нового класу чи модернізації вже існуючого.

**NANOSURFACE.** Даний програмний комплекс розроблено автором в рамках дослідження математичного моделювання масопереносу сольових розчинів в каталітичних та дисперсних середовищах частинок мікропористої структури.

Розглянемо ієрархію класів NanoSurface. В першій версії даного програмного комплексу здійснено комп'ютерне моделювання процесу міграції сольових розчинів у каталітичному пористому середовищі при наявності фільтрів-вловлювачів [25]. Для чисельного розв'язання поставленої крайової задачі використано метод скінченних різниць. Отримано скінченно-різницеві аналоги відповідних диференціальних рівнянь. Для знаходження значень невідомих функцій використано метод прогонки. Для цього зведено відповідні диференціальні рівняння до прогоночного вигляду. Код програми містить реалізацію методу прогонки, а всі математичні операції з виведення коефіцієнтів прогонки здійснено перед початком програмування.

На сьогодні NanoSurface може здійснювати моделювання вертикальної міграції радіонуклідів в каталітичному пористому середовищі у лінійному та нелінійному випадках [26], з урахуванням дифузії зі скелетом ґрунту [27], неізотермічних умов [28], біпористих частинок [29], ненасиченого пористого середовища [30] та інших факторів.

При цьому для чисельних експериментів важливим є порівняння отриманих результатів із попередніми. Тому на основі початкової моделі [25] було спроектовано базовий клас BasicMigrationModel, а всі наступні класи утворили ієрархію класів (рис. 6).

На UML діаграмі (рис. 6) наведено частину класів для розуміння загальної структури комплексу. Основна логіка роботи математичної моделі абстрагована у класі BasicMigrationModel із віртуальними методами

для завдання крайових умов, необхідними полями даних та обчисленнями. Похідні класи для конкретних моделей реалізують відповідні методи і розширюють базових функціонал. Для того, щоб вирішити, який екземпляр класу необхідно створювати, використано шаблон проектування «Параметризований фабричний метод» (Factory Method). Його завдання полягає в прихованні конкретного класу, що має бути створений та повернений під виглядом загальної абстракції. В нашому випадку в класі ModelFactory присутній фабричний метод getModel(), який в залежності від вибору користувача інстанціює потрібний клас математичної моделі.

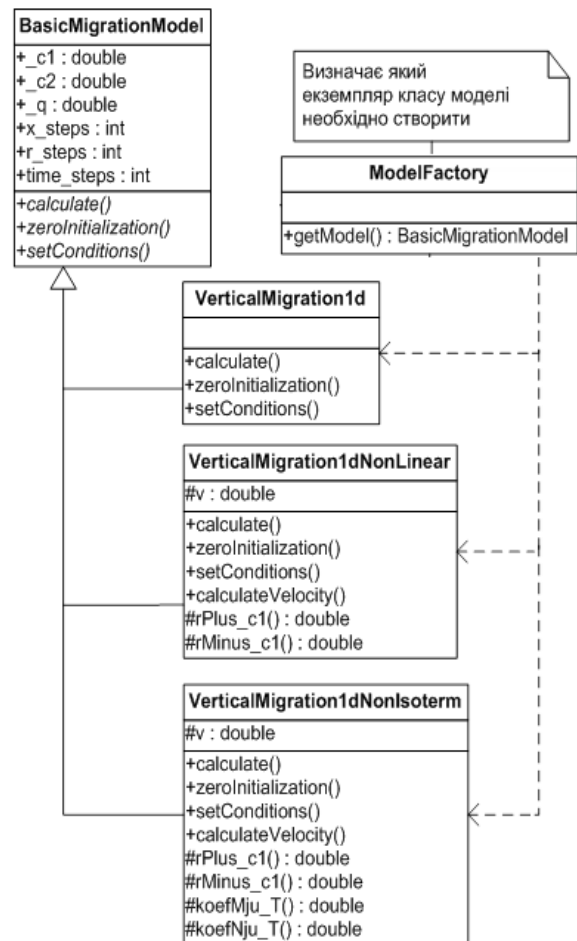


Рисунок 6– Ієрархія класів основних математичних моделей NanoSurface

Ієрархію класів користувацького інтерфейсу для завдання початкових та граничних умов запрограмованих математичних моделей організовано схожим чином. Існує батьківський клас із мінімальною кількістю елементів керування, а його дочірні класи розширюють функціонал. При натисканні кнопки початку обчислення викликається фабричний метод для створення загальної абстракції моделі і подальша робота відбувається з нею.

Таким чином, не потрібно пам'ятати екземпляр якого класу було створено. Всі звертання відбуваються через вказівник на model (Таблиця 1), а виклик методів необхідних класів здійснюється за допомогою віртуальних функцій setConditions(), calculate() тощо.

Таблиця 1– Приклади використання загальної абстракції математичної моделі

```
// Початкова ініціалізація
model->zeroInitialization();
// Задання крайових умов
model->setConditions(...);

// Обрахунок
model->calculate();

//Побудова графіків
graph1 = new GraphWidgetSimple("Concentration
c1", model->_c1, ...);
graph2 = new GraphWidgetSimple("Concentration
c2", model->_c2, ...);
```

Архітектурний паттерн для розділення логіки роботи і користувацького інтерфейсу. Окрему увагу в NanoSurface приділено методу calculate(), що відповідає за алгоритм чисельних обчислень. В перших версіях програми даний метод мав вигляд, наведений в табл. 2.

Таблиця 2– Метод calculate()

```
//Основний цикл по часу
for (int k = 0; k < time_steps; k++) {
// Обчислення швидкості фільтрації
/* Обчислення для рівняння з q
Коеф-и прогонки, прямий та зворотній хід*/
// Обчислення для рівняння з c2
alfa[1] = 0; beta[1] = _c2[0][k];
//Коефіцієнти прогонки
for (int i = 1; i < x_steps; i++) {
a[i] = ...; b[i] = ...; c[i] = ...; f[i] = ...;
}
//Прямий хід
for (int i = 1; i < x_steps; i++) {
alfa[i+1] = b[i] / (c[i] - alfa[i] * a[i]);
beta[i+1] = (a[i] * beta[i] + f[i]) / (c[i] - alfa[i] * a[i]);
}
//Зворотній хід
for (int i = x_steps - 1; i > 0; i--) {
_c2[i][k+1] = _c2[i+1][k+1] * alfa[i+1] + beta[i+1];
}
// Обчислення для рівняння з c1
//Коефіцієнти прогонки
//Прямий хід, зворотній хід
// ...і т. д. для всіх інших рівнянь
} // закінчення циклу по часу
```

Помітно, що код механізму прогонки повторюється для кожного рівняння. У зв'язку з цим його винесено в окремий клас з метою вирішення проблеми повторного використання коду. Це також дозволило вибирати та дослідити різні методи прогонки для обчислень (звичайної, зустрічної, блочної і т.д.). Після відповідного рефакторингу код методу calculate() набув наступного вигляду (табл. 3)

Таблиця 3– Метод calculate() після ре факторингу

```
ThomasBaseAlgo * thomasAlgo =
ThomasFactory::getAlgo(algoUserSelected);
//Основний цикл по часу
for (int k = 0; k < time_steps; k++)
{
// Обчислення швидкості фільтрації
/* Обчислення для рівняння з q
Коефіцієнти прогонки
Використання прогонки, вибраної користувачем
*/
// Обчислення для рівняння з c2
//Коефіцієнти прогонки
for (int i = 1; i < x_steps; i++)
{
a[i] = ...;
b[i] = ...;
c[i] = ...;
f[i] = ...;
}
//Використання прогонки, вибраної користувачем
thomasAlgo->performSweep(_c2,k,a,b,c,f);
/* Обчислення для рівняння з c2
Коефіцієнти прогонки
Використання прогонки, вибраної користувачем
*/
// ...і т. д. для всіх інших рівнянь
} // закінчення циклу по часу
```

Програмний комплекс NanoSurface написаний на мові програмування C/C++ з використанням фреймворку Qt. Це дає змогу підготувати програму без суттєвої зміни вихідного коду до роботи в таких операційних системах як Windows, Linux, MacOS.

В користувацькому інтерфейсі (рис. 7) підписання полів вводу здійснюється з використанням бібліотеки «Qwt MathML Renderer». Вона дозволяє використання мови математичної розмітки MathML (Mathematical Markup Language). Це суттєво спрощує розуміння інтерфейсу комплексу, адже забезпечується повна графічна сумісність назв полів із їхніми аналогами в математичній моделі.

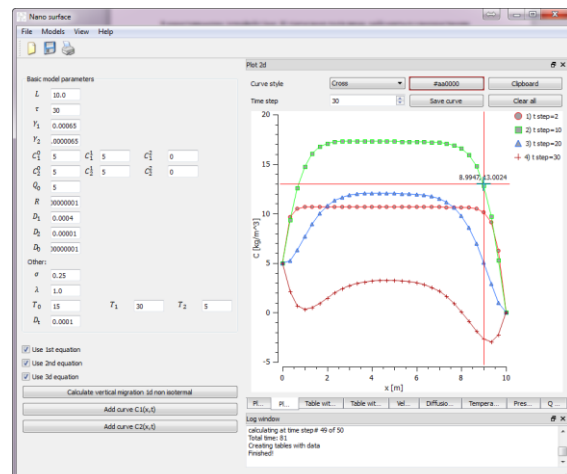


Рисунок 7– Інтерфейс програми NanoSurface

Результати чисельних експериментів можуть бути представлені як у вигляді 2D/3D графіків, так і у вигляді таблиць. Представлення у вигляді таблиць є типовим для Qt і реалізується стандартним класом `QTableWidget`. В роботі було успадковано даний базовий клас класом `TableWidget` для забезпечення додаткового функціоналу по експорту даних у файл та зручної роботи в табличному вигляді з однотиповими даними для значень концентрацій. Графіки в 2D вигляді представляються у віджеті `GraphWidgetSimple`, що є обгорткою класу `QwtPlot`. Даний клас є складовою одноіменної бібліотеки, яка включає різноманітні графічні елементи (циферблати, компаси, термометри і т. д.) для програм, що потребують графічного представлення. Обгортка `NanoSurface` забезпечує додатковий функціонал, що полягає у виборі часового кроку, масштабуванні сітки, порівнянні багатьох графіків, виборі стилю відображення тощо. Аналогічним чином реалізований віджет `Graph3DWidgetSimple`, що є обгорткою

класу `Q3DSurface`. Даний клас входить до складу модуля `Qt Data Visualization`, основна мета якого полягає у візуалізації даних у тривимірному просторі, включає в себе побудову 2D перерізів 3D даних, інтерактивну взаємодію за допомогою вказівника миші (зміна масштабу, обертання, виділення потрібних даних), перспективну та ортогональну проекції, застосування `OpenGL` для рендерингу, налаштування тем оформлення.

Головне меню програми містить пункти для завантаження та збереження граничних та початкових умов, вибору математичної моделі, перегляду допомоги по роботі з програмою та описом математичних моделей.

*Методологія розробки.* Одні з ідей технологічного підходу при автоматизації обрахунків математичного моделювання були запропоновані Сергіємком І.В., Скопечким В.В. та Дейнекою В.С. [23]. В загальному випадку їх можна зобразити у вигляді схеми, зображеної на рис. 8.

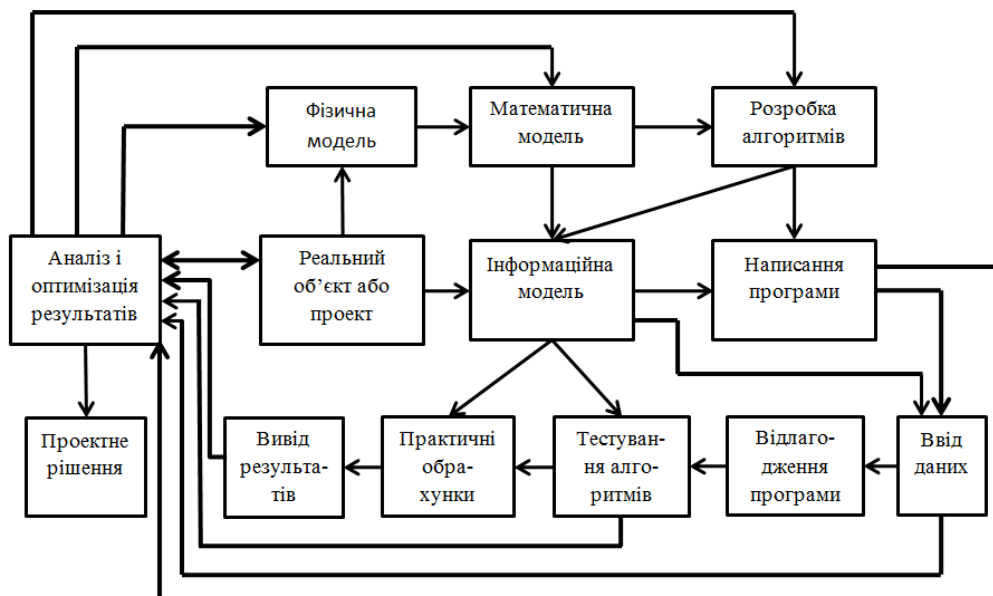


Рисунок 8— Схема автоматизації процесу конструювання програмного забезпечення

Помітно, що вищезгадані програмні комплекси динамічно змінювалися протягом тривалого часу розробки. Це означає, що класична водоспадна модель розробки не підходить для даних продуктів через дослідження нових фізичних явищ та постійне вдосконалення існуючих математичних моделей. Тому схему на рис. 9 потрібно розглядати в контексті однієї ітерації розвитку продукту. Для даного класу задач добре підходять такі сучасні гнучкі методології розробки, як `Agile Scrum`, `TDD`.

*Інструментарій розробки.* У випадку, коли в проекті задіяна велика команда, виникає необхідність в чіткій структуризації змін, зроблених кожним її членом, контролю над виконанням поставлених завдань, усуненням недоліків. Для цього використовують спеціальні інструменти програмування. Знання і використання таких інструментів дозволяють збільшити продуктивність роботи більш ніж на 50%.

Основним інструментом в розробці програм є інтегроване середовище програмування (IDE). Воно зазвичай включає в себе редактор коду, компілятор

та відлагоджувач. Вибір IDE залежить від мови програмування. Найпоширеніші мови програмування для наукових обчислень – це `C/C++`, `Fortran`, `Python`, `Java`, `C#`.

Наступним важливим інструментом для командної розробки є система контролю версій, яка надає змогу одночасно працювати над проектом декільком розробникам і після виправлення помилки точно вказати, в якому саме місці коду вона була. В такому випадку програмісти не схильні до синдрому "працює - не чіпай", тому що можуть безболісно заглиблюватися в найскладніші експерименти зі своєю програмою і в будь-який момент повернутися до "коду, що працював" незалежно від кількості експериментів, що було проведено. Більше того, якщо користувач раптом захоче внести невелику зміну, коли програма знаходиться в багатообіцяючому, але зовсім неробочому стані, то все, що для цього буде потрібно – переключитися на стабільну гілку, внести там необхідні зміни і, задовольнивши запит користувача, переключитися назад на головний стовбур розробки. Серед популярних систем

контролю версій виділяють git, svn, mercurial. Дані системи є безкоштовними. Для роботи з ними необхідно мати репозиторій (місце, де буде зберігатися код). Такі послуги можна безкоштовно отримати на сервісах <https://github.com>, <https://bitbucket.org> та ін.

Для постановки завдань, контролю їх виконання та обговорення документації команди програмістів, математиків та тестувальників використовують системи керування проектами. Для невеликих проектів широкою популярністю користується безкоштовна система trello (<https://trello.com>).

*Архітектура програмного комплексу.* Останнім часом йдуть розмови про уніфікацію підходу до створення програмних продуктів, стандартизацію математичних моделей та створення їх єдиного реєстру [24]. Це дозволить об'єднати зусилля багатьох груп науковців до створення більш універсальних комплексів. Проте, разом з тим, не всі поспішають викладати на загал програмний код. Із усіх вищевказаних програм тільки три містять відкритий код (HYDRUS, PFLOTRAN, PHREEQC). З них лише одна вказала актуальну останню версію (PFLOTRAN). Без розуміння технічної реалізації чисельного моделювання, маючи лише опис математичної моделі, важко реалізувати досконалий програмний продукт.

Очевидно, що для забезпечення повторного використання коду слід розділяти логіку роботи чисельного моделювання від представлення (введення та виведення) даних. При проектуванні програмних комплексів з використанням високорівневих мов це досягається за допомогою класів та паттернів проектування.

*Порівняльна характеристика вихідного коду програмних комплексів.* Для оцінки якості відкритого коду вищезгаданих програмних продуктів скористаємося спеціалізованими утилітами SourceMonitor, FORCHECK та CppDepend. Зведені результати, що відображають кількість файлів, рядків коду, коментарів, визначень класів, методів, максимальну середню складність (згідно визначення Стіва Макконела [22]), відношення абстрактних класів до звичайних та інші параметри, наведено в табл. 4.

Таблиця 4—Оцінка якості відкритого коду

	Hudrus	PFLOTRAN	PHREEQC	NanoSurface
Мова	Fortran	F90/C++	C++	C++
Files	10	86	106	121
Lines	1958	20829	110100	59887
Comments %	17	7.2	19.5	22.4
Branches %	15	23.1	26.4	19.0
Class defs	-	44	170	188
Methods/Class	-	18	38	15
Max Cmplxty	47	200	406	54
Avg Cmplxty	4.21	7.46	8.25	3.11
Abstractness	-	0.08	0.17	0.34
Max Depth	-	8	9+	8
Avg Depth	-	2.59	2.38	1.50
Functions	67	3	162	73

Згідно табл. 4 помітно, що середня складність програмного комплексу NanoSurface є найнижчою серед всіх розглянутих. Велика кількість оголошених класів в NanoSurface є результатом активного використання паттернів проектування та застосування підходів описаних вище. Разом з тим кількість коментарів також є високою. Це хороші показники і відповідають вимогам щодо керування складністю [22].

**ВИСНОВКИ.** Протягом останніх двох десятиліть спостерігається стрімкий розвиток програмних засобів для математичного моделювання підземних процесів. Це зумовило появу різноманітних програмних комплексів для чисельного розв'язання задач моделювання фізичних, гідрологічних, біологічних і геохімічних процесів у пористих середовищах вадозної зони.

Однак, прогрес не стоїть на місці і вимагає вирішення нових задач, зокрема, пов'язаних з уніфікацією процесу розробки подібних комплексів, узгодження їх один з одним.

В даній статті було проведено детальний аналіз декількох програмних рішень з точки зору проектування та конструювання. Виділено їх позитивні сторони та недоліки.

Даний аналіз дозволив розробити власний продукт під назвою NanoSurface для роботи з рядом нових математичних моделей. Важливими параметрами при розробці NanoSurface була якість коду та легкість його подальшої підтримки. Тому в роботі описані основні етапи проектування та конструювання програмного продукту, що використовувалися автором. А саме - вибір інструментальних засобів, побудову архітектури, використання сучасних паттернів конструювання програмного забезпечення та використання актуальних бібліотек.

Складні взаємозв'язки між рівняннями математичної моделі в NanoSurface реалізовано завдяки механізму віртуальних функцій та паттерну фабричний метод. Користувачський інтерфейс абстрагується від конкретної реалізації вибраної користувачем математичної моделі через вказівник на абстрактний клас моделі. Це дозволило уніфікувати відображення та аналіз даних незалежно від вибраної математичної моделі.

Порівняльна характеристика якості коду, що була проведена за допомогою спеціалізованих утиліт, свідчить про успішне виконання поставленої задачі.

Разом з тим, питання створення зручного користувачького інтерфейсу для підбору параметрів математичної моделі залишаються відкритими. Тому програмний продукт NanoSurface потребує подальшого вдосконалення.

#### ЛІТЕРАТУРА

1. NADRA 3D information technology for analysis of processes in multicomponent soil media / I.V. Ser-gienko, V.S. Deineka, V.V. Veshchunov // Cybernetics and Systems Analysis. – 2006. – Vol. 42, № 6. – P. 901–916.
2. ORCHESTRA - Object Representation of Chemical Speciation and Transport models. – <http://www.macaulay.ac.uk/ORCHESTRA/>.
3. PHREEQC - A Computer Program for Speciation, Batch-Reaction, One-Dimensional Transport, and Inverse Geochemical Calculations. – <http://wwwbrr.cr>.

usgs.gov/projects/GWC\_coupled/phreeqc/.

4. Jacques D., Simunek J. HPx - a tool for simulating interactive biogeochemical processes in soil systems // EGU General Assembly Conference Abstracts.

5. Henning. Prommer@csiro.au (Henning Prommer). PHT3D Home / Henning.Prommer@csiro.au (Henning Prommer). – <http://www.pht3d.org/>.

6. OpenGeoSys - Home. – <http://www.openeosys.org/>.

7. Van der Lee J. Module-oriented modeling of reactive transport with HYTEC / J. van der Lee, L. de Windt, V. Lagneau, P. Goblet // *Computers & Geosciences*. – 2003. – Vol. 29. – № 3. – P. 265–275.

8. Numerical modeling of contaminant transport using HYDRUS and its specialized modules / J. Simunek, D. Jacques, G. Langergraber, S.A. Bradford et al. // *Journal of the Indian Institute of Science*. – 2013. – Vol. 93, № 2. – P. 265–284.

9. TOUGH. – <http://esd1.lbl.gov/research/projects/tough/>.

10. PNNL STOMP - Home. – <http://stomp.pnnl.gov/index.stm>.

11. Groundwater Reactive Transport Models / F. Zhang, G.-T. Yeh, J. C. Parker: BENTHAM SCIENCE PUBLISHERS, 2012.

12. WEB Page for CRUNCH. – <http://www.csteefel.com/CrunchFlowIntroduction.html>.

13. The Reactive Transport Code MIN3P. – [http://www.eos.ubc.ca/research/hydro/research/min3p/reactive\\_tran\\_web.htm](http://www.eos.ubc.ca/research/hydro/research/min3p/reactive_tran_web.htm).

14. Mills and Jitendra Kumar. PFLOTRAN Web page / Peter C. Lichtner and Glenn E. Hammond and Chuan Lu and Satish Karra and Gautam Bisht and Benjamin Andre and Richard T. Mills and Jitendra Kumar. – <http://www.pflotran.org/>.

15. Reactive transport codes for subsurface environmental simulation / C.I. Steefel, C. Appelo, B. Arora, D. Jacques, et al. // *Comput Geosci*. – 2015. – Vol. 19, №3. – P. 445–478.

16. Development and Applications of the HYDRUS and STANMOD Software Packages and Related Codes / J. Šimůnek, M.T. van Genuchten, M. Šejna // *Vadose Zone Journal*. – 2008. – Vol. 7, № 2. – 587 p.

17. Белоус М.В., Дейнека В.С. Использование программного комплекса НАДРА-3D для моделирования регионального режима фильтрации воды // *Компьютерная математика*. – 2010. – № 1. – С. 35–42.

18. Meeussen J.C.L. ORCHESTRA // *Environmental Science & Technology*. – 2003. – Vol. 37, № 6. – P. 1175–1182.

19. PROOST: object-oriented approach to multiphase reactive transport modeling in porous media / P. Gamazo, L.J. Slooten, J. Carrera, M.W. Saaltink, et al. // *Journal of Hydroinformatics*. – 2015. – P.jh2015126.

20. Multicomponent diffusion of a suite of tracers (HTO, Cl, Br, I, Na, Sr, Cs) in a single sample of Opalinus Clay / C. Appelo, L.R. van Loon, P. Wersin // *Geochimica et Cosmochimica Acta*. – 2010. – Т. 74, № 4. – С. 1201–1219.

21. Charlton S.R., Parkhurst D.L. Modules based on the geochemical model PHREEQC for use in scripting and programming languages // *Computers & Geosciences*. – 2011. – Vol. 37, № 10. – P. 1653–1663.

22. McConnell S. Code complete. – Redmond, Wash.: Microsoft Press, 2004. – xxxvii, 914.

23. Математическое моделирование и исследование процессов в неоднородных средах / И.В. Сергиенко, В.В. Скопецкий, В.С. Дейнека. – Київ: Наукова думка, 1991. – 432 с.

24. Establishing an International Soil Modelling Consortium / H. Vereecken, A. Schnepf, J. Vanderborght, 2015. – 3043 с. – Т.17.

25. Власюк А.П., Жуковський В.В. Математичне моделювання горизонтальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі при наявності фільтрів-вловлювачів // Тези Всеукр. наук. конф. «Сучасні проблеми математичного моделювання та обчислювальних методів». – 2013. – С. 75–76.

26. Власюк А.П., Жуковський В.В. Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів в каталітичному пористому середовищі у нелінійному випадку // Математичне та комп'ютерне моделювання. Серія: Технічні науки: зб. наук. праць. – 2015. – Т. 12. – С. 161–172.

27. Mathematical Modelling of Vertical Migration of Radionuclides in Catalytic Porous Media with Traps in Linear Case / A.P. Vlasjuk, V.V. Zhukovskyy, M.M. Bon-darchuk // *Theoretical and Applied Aspects of Cybernetics. Proceedings of the 5th International Scientific Conference of Students and Young Scientists*. – 2015. – P. 208–219.

28. Власюк А.П., Жуковський В.В. Математичне моделювання горизонтальної міграції радіонуклідів у каталітичному пористому середовищі при наявності фільтрів-вловлювачів в неізотермічних умовах // Тез. XXI Міжнар. наук. конф. «Прийняття рішень в умовах невизначеності». – 2013. – С. 105–107.

29. Власюк А.П., Жуковський В.В. Математичне моделювання вертикальної міграції радіонуклідів в ненасиченому біпористому середовищі при наявності фільтрів-вловлювачів // Тез. XXIII Міжнар. наук. конф. «Прийняття рішень в умовах невизначеності». – 2014. – С. 75–76.

30. Vlasjuk A.P., Zhukovskyy V.V. Mathematical modelling of vertical migration of radionuclides in unsaturated porous media in non-isothermal conditions one-dimensional case // *Abstracts of XXIV International Conference «Problems of decision making under uncertainties»*. – 2014. – P. 110–111.



**ABOUT SOME APPROACHES TO CONSTRUCTION  
OF UNDERGROUND PROCESSES COMPUTER MODELLING SOFTWARE COMPLEXES**

**V. Zhukovsky**

National University of Water Management and Nature Resources Use  
vul. Soborna, 11, Rivne, 33028, Ukraine. E-mail: zeonet@gmail.com

**Purpose.** To discuss the main problems of underground processes mathematical modeling software construction systems on the example of a number of well-known programs. There are different ways to construct software that might be more or less suitable depending on the nature of the physical problem to be solved. In this paper we acknowledge the importance of methodology, architecture and object-oriented programming approach. **Methodology.** The comparative method has been applied for solving the tasks. We performed a feature-by-feature comparison of software packages using special tools (SourceMonitor, FORCHECK and CppDepend). **Results.** The overview of well-known programs has been carried out. HYDRUS is a public domain Windows-based modeling environment for analysis of water flow and solute transport in variably saturated porous media. The software package includes finite element model HYDRUS for simulating the movement of water, heat, and multiple solutes in variably saturated media. The model is supported by an interactive graphics-based interface for data-preprocessing, discretization of the soil profile, and graphic presentation of the results. There are source code for first versions of a program. Another program called NADRA-3D is designed for computer modeling of filtration processes, diffusion and changes in the stress-strain state in a multi-dimensional objects that can contain subtle inclusion. There are no source codes in free a for analyses but we find architecture description. ORCHESTRA is a tool for modelling chemical and multidimensional transport processes in soil. This software represents an entirely new approach to the implementation of chemical and physical models within computer-based models. It allows users to create their own computer models using conceptual models which they have either developed themselves or have been developed by others. In ORCHESTRA, models are composed of objects, which are stored in an object database and are fully user-definable. There for we investigated this approach. PHREEQC - computer program for speciation, batch-reaction, one-dimensional transport, and inverse geochemical calculations. There are version of program for different platforms and available source codes. PFLOTRAN is an open source, state-of-the-art massively parallel subsurface flow and reactive transport code. PFLOTRAN solves a system of generally nonlinear partial differential equations describing multiphase, multicomponent and multiscale reactive flow and transport in porous materials. The code is designed to run on massively parallel computing architectures as well as workstations and laptops. The source code of programs described below was analysed and compared according to code quality metrics. **Originality.** We took into account program code quality metrics and architectures described below and selected Qt as IDE and framework for developing our own cross-platform software (NanoSurface), Bitbucket as software control system and Trello as a web-based project management application. We provided class architecture of mathematical models. The complex relationships between a mathematical model equations in NanoSurface implemented through the mechanism of virtual functions and factory method pattern. User interface separated from internal logic through object-oriented approach. Moreover we provided more practical aspects of design patterns, of numerical calculations and building the simple and convenient user interface. **Practical value.** A new approach for creating computer modeling systems of underground processes has been provided. It includes a range of tools, software architecture, design patterns, list of actual libraries and other hints.

**Key words:** computer modelling, software complex, NanoSurface, underground processes.

REFERENCES

1. Sergienko, I. V., Deineka, V. S., and Veshchunov, V. V. (2006). "NADRA 3D information technology for analysis of processes in multicomponent soil media," *Cybernetics and Systems Analysis*. Vol. 42, No. 6: pp. 901–916.
2. *ORCHESTRA - Object Representation of Chemical Speciation and Transport models.: A tool for modeling chemical and multidimensional transport processes in soil.* (2006), <http://www.macauley.ac.uk/ORCHESTRA/>. Accessed 20 December 2015.
3. *PHREEQC - A Computer Program for Speciation, Batch-Reaction, One-Dimensional Transport, and Inverse Geochemical Calculations,* [http://wwwwbrr.cr.usgs.gov/projects/GWC\\_coupled/phreeqc/](http://wwwwbrr.cr.usgs.gov/projects/GWC_coupled/phreeqc/). Accessed 20 December 2015.
4. Jacques, D., and Simunek, J. "HPx - a tool for simulating interactive biogeochemical processes in soil systems," in *EGU General Assembly Conference Abstracts*.
5. Henning.Prommer@csiro.au (2012). *PHT3D Home*, <http://www.pht3d.org/>. Accessed 20 December 2015.
6. *OpenGeoSys - Home*, <http://www.opengeosys.org/>. Accessed 20 December 2015.
7. van der Lee, J., Windt, L. de, Lagneau, V., and Goblet, P. (2003). "Module-oriented modeling of reactive transport with HYTEC," *Computers & Geosciences*. Vol. 29, No. 3: pp. 265–275.
8. Simunek, J., Jacques, D., Langergraber, G., Bradford, S. A., Šejna, M., and van Genuchten, M. T. (2013). "Numerical modeling of contaminant transport using HYDRUS and its specialized modules," *Journal of the Indian Institute of Science*. Vol. 93, No. 2: pp. 265–284.
9. *TOUGH: Suite of Simulators for Nonisothermal Multiphase Flow and Transport in Fractured Porous Media* (2015a), <http://esd1.lbl.gov/research/projects/tough/>. Accessed 20 December 2015.
10. *PNNL STOMP - Home: Subsurface Transport Over Multiple Phases*, <http://stomp.pnnl.gov/index.stm>. Accessed 20 December 2015.
11. Zhang, F., Yeh, G.-T., and C. Parker, J. (2012). *Groundwater Reactive Transport Models*, BENTHAM SCIENCE PUBLISHERS.

12. *WEB Page for CRUNCH* (2015b), <http://www.csteefel.com/CrunchFlowIntroduction.html>. Accessed 20 December 2015.
13. *The Reactive Transport Code MIN3P: Multi-component reactive transport modeling in variably saturated porous media* (2004), [http://www.eos.ubc.ca/research/hydro/research/min3p/ractive\\_tran\\_web.htm](http://www.eos.ubc.ca/research/hydro/research/min3p/ractive_tran_web.htm). Accessed 20 December 2015.
14. Peter C. Lichtner and Glenn E. Hammond and Chuan Lu and Satish Karra and Gautam Bisht and Benjamin Andre and Richard T. Mills and Jitendra Kumar (2013). *PFLOTRAN Web page*, <http://www.pflotran.org/>. Accessed 20 December 2015.
15. Steefel, C. I., Appelo, C., Arora, B., Jacques, D., Kalbacher, T., Kolditz, O., Lagneau, V., Lichtner, P. C., Mayer, K. U., Meeussen, J., Molins, S., Moulton, D., Shao, H., Šimůnek, J., Spycher, N., Yabusaki, S. B., and Yeh, G. T. (2015). "Reactive transport codes for subsurface environmental simulation: Computational Geosciences," *Comput Geosci*. Vol. 19, No. 3: pp. 445–478.
16. Šimůnek, J., van Genuchten, M. T., and Šejna, M. (2008). "Development and Applications of the HYDRUS and STANMOD Software Packages and Related Codes," *Vadose Zone Journal*. Vol. 7, No. 2: p. 587.
17. Belous, M.V. and Deineka V.S. (2010), "Using of program complex NADRA-3D for modeling of regional regime of water filtration", *Kompyuternaya matematika*, Vol. 1, pp. 35-42.
18. Meeussen, J. C. L. (2003). "ORCHESTRA: An Object-Oriented Framework for Implementing Chemical Equilibrium Models," *Environmental Science & Technology*. Vol. 37, No. 6: pp. 1175–1182.
19. Gamazo, P., Slooten, L. J., Carrera, J., Saaltink, M. W., Bea, S., and Soler, J. (2015). "PROOST: object-oriented approach to multiphase reactive transport modeling in porous media," *Journal of Hydroinformatics*, pp. jh2015126.
20. Appelo, C., van Loon, L. R., and Wersin, P. (2010). "Multicomponent diffusion of a suite of tracers (HTO, Cl, Br, I, Na, Sr, Cs) in a single sample of Opalinus Clay," *Geochimica et Cosmochimica Acta*. Vol. 74, No. 4: pp. 1201–1219.
21. Charlton, S. R., and Parkhurst, D. L. (2011). "Modules based on the geochemical model PHREEQC for use in scripting and programming languages," *Computers & Geosciences*. Vol. 37, No. 10: pp. 1653–1663.
22. McConnell, S. (2004). *Code complete*, Redmond, Wash.: Microsoft Press.
23. Sergienko, I.V., Skopeckyy, V.V. and Deineka, V.S. (1991), "*Matematicheskoe modelirovanie i issledovanie processov v neodnorodnykh sredach*" [Mathematical modeling and investigation of processes in inhomogeneous media], Naukova dumka, Kyiv, Ukraine.
24. Vereecken, H., Schnepf, A., and Vanderborght, J. (2015). *Establishing an International Soil Modelling Consortium*.
25. Vlasyuk, A.P. and Zhukovskyy, V.V. (2013), "*Matematychni modeliuvannia horyzontalnoi mihratsii radionuklidiv u katalitychnomu porystomu seredovishchi pry naiavnosti filtriv-vlovliuvachiv. Tezy Vseukrainskoi naukovoï konferentsii*" [Mathematical modelling of horizontal migration of radionuclides in catalytic porous medium at presence of filters traps". Proceedings of the Ukrainian conference "Modern problems of mathematical modeling and computational methods"], *Suchasni problemy matematychnoho modeliuvannia ta obchysluvalnykh metodiv*, Lviv, pp. 75–76.
26. Vlasyuk, A.P. and Zhukovskyy, V.V. (2015), "*Matematychni modeliuvannia vertykalnoi mihratsii radionuklidiv v katalitychnomu porystomu seredovishchi u neliniinomu vypadku*" [Mathematical modelling of vertical migration of radionuclides in catalytic porous medium in the nonlinear case], *Matematychni ta kompiuterni modeliuvannia*, Seria: Tekhnichni nauky, Zbirnyk naukovykh prac, Vol. 12, pp. 161–172.
27. Vlasyuk, A. P., Zhukovskyy, V. V., and Bondarchuk, M. M. (2015). "Mathematical Modelling of Vertical Migration of Radionuclides in Catalytic Porous Media with Traps in Linear Case," *Theoretical and Applied Aspects of Cybernetics. Proceedings of the 5th International Scientific Conference of Students and Young Scientists*, pp. 208–219.
28. Vlasyuk, A.P. and Zhukovskyy, V.V. (2013), "*Matematychni modeliuvannia horyzontalnoi mihratsii radionuklidiv u katalitychnomu porystomu seredovishchi pry naiavnosti filtriv-vlovliuvachiv v neizotermichnykh umovakh*" [Mathematical modelling of horizontal migration of radionuclides in catalytic porous medium at presence of filters traps in nonisothermal conditions", Proceedings of the XXI International conference "Problems of decision making under uncertainties"], *Tezy XXI Mizhnarodnoi naukovoï konferentsii "Pryiniattia rishen v umovakh nevyznachenosti"*, pp. 105–107.
29. Vlasyuk, A.P. and Zhukovskyy, V.V. (2014), "*Matematychni modeliuvannia vertykalnoi mihratsii radionuklidiv v nenasychenomu biporystomu seredovishchi pry naiavnosti filtriv-vlovliuvachiv*" [Mathematical modelling of vertical migration of radionuclides in unsaturated biporous medium at presence of filters traps", Proceedings of the XXIII International conference "Problems of decision making under uncertainties"], *Tezy XXIII Mizhnarodnoi naukovoï konferentsii "Pryiniattia rishen v umovakh nevyznachenosti"*, pp. 75–76.
30. Vlasyuk, A. P., and Zhukovskyy, V. V. (2014). "Mathematical modelling of vertical migration of radionuclides in unsaturated porous media in non-isothermal conditions one-dimensional case," *Abstracts of XXIV International Conference "Problems of decision making under uncertainties"*, pp. 110–111.

Стаття надійшла 25.03.2017.