

# АВТОМАТИЗИРОВАННЫЕ ИНФОРМАЦИОННЫЕ СИСТЕМЫ В ОБРАЗОВАНИИ И НАУКЕ

## ИМИТАЦИОННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕСТРАИВАЕМЫХ ЛАЗЕРОВ НА ОСНОВЕ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ В ТВЕРДОТЕЛЬНЫХ МАТРИЦАХ

В.П. Демкин, В.Я. Артюхов, Т.Н. Копылова, М.Ш. Шаймарданов, Р.М. Гадиров, Д.А. Казазаев, С.Ю. Никонов  
Томский государственный университет

Описана высокопроизводительная информационная система, позволяющая проводить моделирование лазерно-активных сред на основе органических соединений в растворах и твердотельных матрицах. Моделирование проводится на основе данных экспериментальных либо квантово-химических исследований, хранящихся в базе данных. Система показала высокую эффективность при оптимизации параметров лазерно-активных сред и лазеров на их основе и может быть использована в процессе обучения студентов и аспирантов физического, радиофизического и химического факультетов.

**Ключевые слова:** высокопроизводительная информационная система, имитационное моделирование, твердотельная активная среда лазера.

## SIMULATION MODELING OF THE TUNABLE ORGANIC SOLID-STATE LASERS

V.P. Demkin, V.Ya. Artukhov, T.N. Kopylova, M.Sh. Shaymardanov, R.M. Gadirov, D.A. Kazazaev, S.Yu. Nikonov  
Tomsk State University

The high-power information system that enables the simulation of solid- and liquid-state laser-active media based on organic molecules is described. The simulation is performed on the base of experimental and quantum-chemical data that are stored in the database. The system shows high efficiency in optimizing the parameters of laser-active media and the lasers based on them and can be used in education process at physical, radiophysical and chemical departments.

**Keywords:** High-power information system, simulation technique, solid-state laser-active media.

Профессор К. Колин в работе «Информатизация образования: новые приоритеты» [1] определяет два основных направления информатизации образования следующим образом: «С точки зрения современного состояния и перспектив развития процесса информатизации образования можно выделить два основных направления: инструментально-технологическое, связанное с использованием новых возможностей средств информатики и информационных технологий для повышения эффективности системы образования; и содержательное, связанное с формированием нового содержания самого образовательного процесса». Предлагаемая работа лежит в плоскостях обоих выделенных направлений. С одной стороны, в реализации системы моделирования используются самые современные технологии, которые позволяют получать удаленный доступ к мощ-

ным вычислительным ресурсам университета, а с другой стороны, наполняют образовательный и исследовательский процессы новым содержанием – возможностью дистанционно проводить численные эксперименты.

В рамках государственного контракта №07.514.11.4057 разработана информационная система, которая позволяет проводить моделирование процессов генерации в лазерно-активных средах на основе органических соединений при импульсном оптическом возбуждении. В состав программного комплекса информационной системы входят следующие модули:

- модуль сервера приложений;
- модуль электронной базы данных;
- модуль математического моделирования;
- модуль визуализации;
- модуль преобразования данных («Адаптер»);

модуль «Администратор» программного комплекса.

Каждый компонент программного комплекса имеет свое назначение. Так, модуль сервера приложений осуществляет сбор и обработку экспериментальных и теоретических данных по свойствам органических соединений, исходных данных и результатов численных и лабораторных экспериментов по исследованию спектрально-люминесцентных и генерационных характеристик перестраиваемых лазеров на основе органических соединений. Модуль электронной базы данных предназначен для хранения экспериментальных и теоретических данных по свойствам сложных органических молекул, исходных данных для проведения лабораторного эксперимента, результатов численных и лабораторных экспериментов по исследованию спектрально-люминесцентных и генерационных характеристик. Модуль математического моделирования служит для проведения численных экспериментов. Модуль визуализации – это программное обеспечение для представления результатов физических и численных экспериментов в графическом либо табличном виде, а также обеспечивает управление численным экспериментом. Модуль преобразования данных «Адаптер» предназначен для преобразования результатов измерений в унифицированный формат XML, доступный для хранения в электронной базе данных.

Остановимся более подробно на модуле математического моделирования. Для моделирования лазерно-активной среды используется схема электронно-возбужденных состояний с пятью уровнями: основное состояние, два нижних возбужденных состояния (синглетное и триплетное) и два верхних – обобщающих остальные высоко-возбужденные синглетные и триплетные состояния. Оценка констант скоростей излучательных и безызлучательных процессов между состояниями проводится в рамках подхода, описанного в работе [2]. Населенности электронно-возбужденных состояний с учетом немонахроматического излучения (когда учитываются переходы во всем рассматриваемом диапазоне длин волн) описываются системой кинетических уравнений, подробно описанных в работе [3]. Для этого вся активная среда разделяется на элементарные объемы и в каждом объеме вычисляется динамика населенностей. Обратная связь реализуется по-

мещением активной среды в открытый плоско-параллельный резонатор, образованный глухим зеркалом и гранью активной среды. Программно это реализуется за счет введения геометрических коэффициентов распространения излучения вдоль оси генерации в нужном телесном угле. Через динамики населенностей состояний затем можно определить остальные параметры, такие как спектр генерации, КПД генерации, вклад различных процессов (поглощение из основного и возбужденных состояний, потери на зеркалах, усиление) в общий коэффициент усиления. Входными параметрами для моделирования могут служить экспериментально полученные спектры поглощения, люминесценции, спектры наведенного поглощения, время жизни, квантовый выход флуоресценции либо данные квантово-химических расчетов [2,3]. Моделирование проводится на вычислительных ресурсах Томского государственного университета (суперкомпьютер СКИФ «Cyberia»), что позволило проводить серии численных экспериментов с вариацией входных параметров (концентрация красителя, плотность мощности накачки, коэффициенты отражения зеркал) с целью оптимизации состава активной среды и характеристик лазера на ее основе.

Весь программный комплекс построен по классической трехзвенной схеме – клиентское приложение, сервер приложений, сервер базы данных (БД). БД информационной системы разработана на основе полнофункциональной объектно-реляционной СУБД PostgreSQL и обеспечивает хранение экспериментальных и теоретических результатов исследований, проводимых в лаборатории фотофизики и фотохимии молекул ТГУ. Сервер приложений построен на основе среды Java Tomcat с открытым исходным кодом. Относится к категории middleware – промежуточного программного обеспечения, которое позволяет приложениям работать на разных платформах на основе Web-технологий. Использование сервера приложений, разработанного в среде Java Tomcat, обеспечивает надежность, масштабируемость, гибкость комплекса.

Общая модель программного комплекса представлена на рис. 1.

Рисунок 2 иллюстрирует укрупненную модель базы данных для хранения данных о физических и численных экспериментах. Каждый логический блок на диаграмме содержит соответствующий



Рис. 1. Общая модель программного комплекса

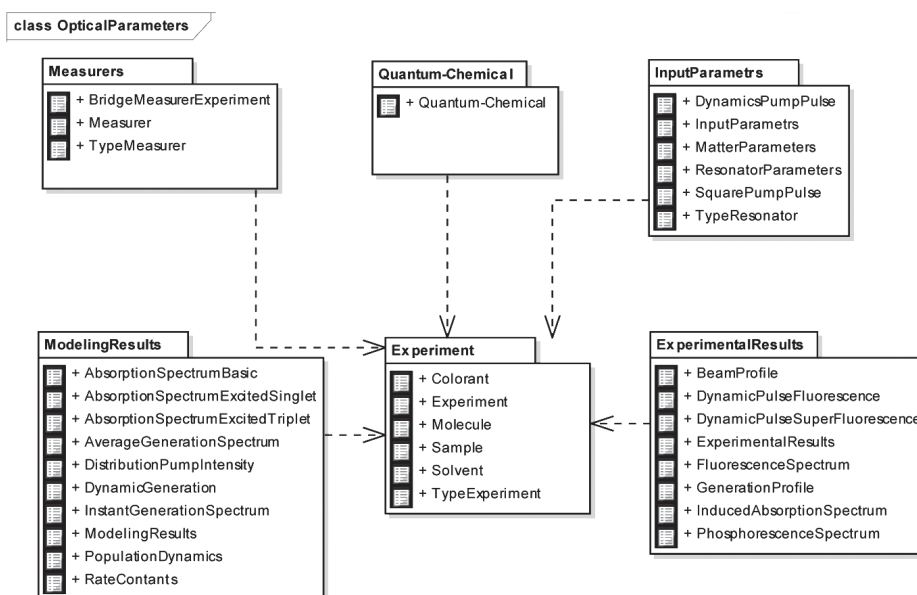


Рис. 2. Укрупненная модель базы данных для хранения данных о расчетных и натуральных экспериментах

набор таблиц, назначение которых будет описано ниже.

Центральным является блок Experiment, в котором хранятся общие данные об эксперименте, данные об образце, красителе, растворителе, молекулах и т.п.

Логический блок InputParameters содержит набор таблиц, необходимых для хранения исходных данных любого эксперимента.

Логический блок ModelingResults содержит набор таблиц, необходимых для хранения результатов численного моделирования.

Логический блок ExperimentalResults содержит набор таблиц, необходимых для хранения результатов натуральных экспериментов.

Логический блок QuantumChemical содержит набор таблиц, необходимых для хранения результатов квантово-химических расчетов, выполненных во внешнем приложении.

Логический блок Measurers содержит набор таблиц, необходимых для хранения общей информации о лабораторном измерительном оборудовании, участвующем в натуральных исследованиях. Информация со всех информационных блоков сводится в блок Experiment.

В базе данных хранятся сущности, описанные в таблице.

#### *Применение комплекса в учебном процессе*

Разработанная информационная система предоставляет возможность научным лаборато-

## Сущности базы данных

| Номер | Сущность   |
|-------|--|
| 1     | Молекула. Описание молекул   |
| 2     | Образец. Описание свойств образца  |
| 3     | Растворители. Справочник растворителей   |
| 4     | Краситель. Справочник красителей   |
| 5     | Эксперимент. Перечисление типов эксперимента                                     |
| 6     | Среда. Параметры среды   |
| 7     | Резонатор. Тип резонатора. Параметры резонатора                                  |
| 8     | Импульс. Динамика импульса накачки. Площадь поперечного сечения импульса накачки |
| 9     | Спектр поглощения. Типы. Характеристики  |

риям и студентам проводить дистанционно имитационное моделирование процессов генерации в лазерах на основе органических соединений в растворах и твердотельных матрицах. Программа моделирования выполняется на высокопроизводительных вычислительных ресурсах Томского госуниверситета, а ее запуск осуществляется через Web-интерфейс, что позволяет проводить обучение больших групп студентов, не занимая дорогостоящее лабораторное оборудование. Результаты расчетов представляются в виде наглядных графиков функций, с возможностью просмотра мгновенных и усредненных по времени или длинам волн спектров и динамики излучения. Использование разработанной информационной системы в образовательном процессе позволяет студентам получать в доступной форме базовые представления о процессах развития генерации

и каналах потерь излучения. Такие знания являются обязательными для любого современного ученого, работающего в области создания активных сред лазеров на красителях.

## ЛИТЕРАТУРА

1. *Коллин К.* Информатизация образования: новые приоритеты\*. – URL: <http://www.ict.edu.ru/ft/004099/kolin.pdf> (дата обращения: 05.05.2012).
2. *Майер Г.В., Артюхов В.Я., Базыль О.К. и др.* Электронно-возбужденные состояния и фотохимия органических соединений. – Новосибирск: Наука, 1997. – 232 с.
3. *Никонов С.Ю., Артюхов В.Я., Копылова Т.Н.* Теоретическое исследование фотопроцессов в сложных органических соединениях при мощном лазерном возбуждении // Известия вузов. Физика. – 2009. – №3. – С. 51–60.

Работа проводилась при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках ГК № 07.514.11.4057 от 12.10.2011 г.