

моделирование различных микроэлектронных устройств СВЧ на основе использования математических моделей и алгоритмов, позволяющих повысить точность расчетов, расширять динамическую библиотеку базовых элементов, типовых устройств, целевых функций и подключать дополнительные блоки (оптимизации, статистического моделирования и др.). Это обеспечивает беспрецедентно высокую производительность и переводит технологию проектирования ИС на современный уровень.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Васильев Е. П., Коваленко В. В., Круглякова И.А. Особенности и критерии оценки САПР СВЧ//Труды Четвертой Всероссийской научно-практической конференции "Современные проблемы создания и эксплуатации радиотехнических систем". Ульяновск: УлГТУ, 2004, с.140-143.
2. Разевиг В.Д., Потапов Ю.В., Курушин А.А. Проектирование СВЧ-устройств с помощью Microwave Office //М.: СОЛОН-Пресс, 2003. – 496с.
3. Васильев Е.П. Архитектура и сравнительные характеристики системы проектирования микроволновых устройств ПОИСК-Д //Информационные технологии. Вып.11, 1998. с.22-26.

КОНЦЕПТУАЛЬНАЯ МОДЕЛЬ АНАЛИЗА ВВХ СИСТЕМЫ УПРАВЛЕНИЯ ТЕЛЕКОММУНИКАЦИЯМИ (СУТ)

Мочалов В.П., Яковлев С.В.

*Северо-Кавказский государственный
технический университет,
Ставрополь*

Для исследования процесса функционирования СУТ в условиях реального времени ее целесообразно представить в виде двухуровневой модели, первый уровень которой задает процесс взаимодействия с внешним окружением при помощи сообщений, предусмотренных системами сигнализации, а второй – процесс реализации транзакций в интервалах времени между поступлением входных и выдачей ответных выходных сообщений. Подобный подход обеспечивает гибкость, повышает достоверность описания и дает возможность, с одной стороны, использовать отдельные уровни описания для построения математических моделей подсистем и, с другой стороны, связать модели этих подсистем в модель СУТ как цельной системы.

На первом уровне процесс функционирования предлагается представлять в виде древовидного графа, который может быть получен при помощи формальных процедур из описания процессов сигнализации.

Для этого могут использоваться следующие языки: SDL, MSC, ASN.1, TTCN и GDMO. Этот перечень может быть дополнен языком IDL (Interface Definition Language), разрабатываемым OMG (Object Management Group) и ISO, языком ODL (Object Definition Language) из TINA-C, который является расширением IDL и поддерживает современные концепции объектов с разнообразными интерфейсами, групповых объ-

ектов, потоковых интерфейсов и описаний QoS (Quality of Service).

Основу языка SDL составляет концепция взаимодействия конечных автоматов. Динамическое поведение системы описывается с помощью механизмов функционирования расширенных конечных автоматов и связей между ними, называемых процессами. Наборы процессов образуют блоки. Блоки, соединенные друг с другом и со своим окружением каналами, в свою очередь, образуют SDL-систему.

Каждый блок в диаграмме SDL-системы может быть в дальнейшем разделен либо еще на блоки, либо на набор процессов. Процесс описывает поведение в SDL и является наиболее важным объектом в языке. Поведение каждого процесса определяется расширенным конечным автоматом, который выполняет действия и генерирует реакции (сигналы) в ответ на внешние дискретные воздействия (сигналы).

Такой автомат имеет конечное число внутренних состояний и оперирует с конечным дискретным множеством входов и выходов. Под влиянием входных сигналов автомат переходит из одного состояния в другое, которое может совпадать с предыдущим, и выдает выходной сигнал. При этом для каждого состояния S_i и для каждого входного сигнала I_j однозначно известно, в какое состояние S_i перейдет автомат и какой выходной сигнал J_o он при этом выдаст.

На втором уровне находятся модели транзакций, для составления которых необходимо располагать информацией о структуре программного обеспечения СУТ, составе и функциях программных модулей и внутренних сигнальных сообщений, о способах взаимодействия управляющей и исполняющей систем. Описание составляется в терминах фаз реализации этапов процесса предоставления услуг. Анализ ВВХ процесса выполнения транзакций позволяет определить параметры отдельных функциональных задач, реализуемых СУТ.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ФОРМЫ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Рукавишников В.В., Белик А.В.

*Челябинский государственный университет
Челябинск*

Молекулярное моделирование играет важную роль в развитии современной химии. Для каждого круга задач предлагались свои модели, как, например, шаро-стержневые, Стюарта-Бриглеба и т.д. С развитием новых компьютерных технологий возникли потребности в новых представлениях молекул в трехмерном пространстве. В частности, интересные результаты получены в результате анализа поверхности постоянной электронной плотности Р.Бейдером [1].

В настоящей работе предлагается новый, более простой и доступный химикам подход, базирующийся на модели DENSON [2]. Новизна его состоит в том что, в конечном итоге, атомы в молекуле не имеют сферической симметрии, в сравнении с более ранним подходом [3].

Для получения пространственной формы молекулы требуется знание декартовых координат атомов

ее составляющих. Такую информацию можно получить, например, в рамках вычислительного комплекса "Hyper Chemistry" [4] посредством оптимизации геометрии молекулы одним из доступных методов, вычисляя полную энергию системы методом РМЗ. Далее каждому типу атомов Периодической системы Д.И.Менделеева приписывается собственный атомный радиус (r^0), являющийся параметром модели. В частности, нами предлагается в качестве r^0 для атома водорода принять величину в 0,3325 ангстрем. Соответственно для атома углерода - $r^0(C) = 0,6500$. Предполагается, что в результате атом-атомного взаимодействия в молекуле сферические оболочки атомов должны деформироваться. Величина деформации (Δr^0) для атомов, находящихся на валентных расстояниях, вычисляется по формуле (1), где $R_{i\mu}$ евклидово расстояние между атомами i и μ ; n – главное квантовое число атома μ . Для невалентных взаимодействий такая поправка имеет вид (2). Очевидно, что если рассматриваемый атом имеет несколько соседних атомов, с которыми есть взаимодействие, то исходная сферическая оболочка будет деформироваться в разных направлениях и на разную величину. Предлагает-

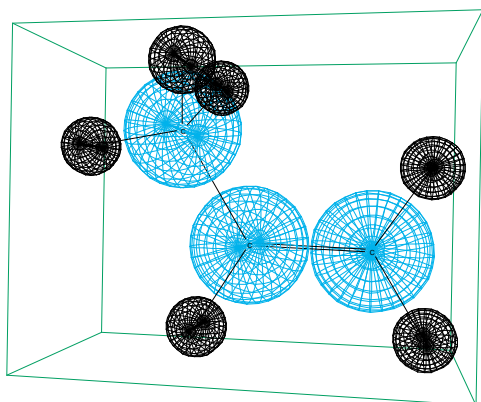
ся простой механизм трансформации исходной атомной оболочки.

$$r r_i = r_\mu^0 \exp(R_{i\mu}/R_{i\mu}^{n-1}) \quad (1)$$

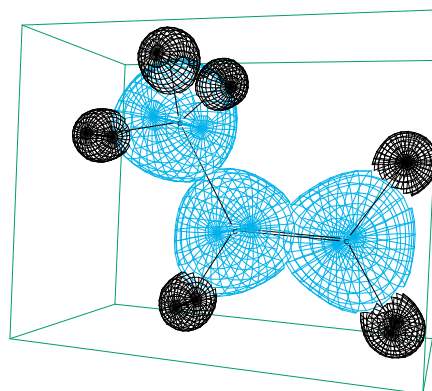
$$r r_i = -r_\mu^0 \exp(R_{\mu j}/R_{\mu j}^6) - r_\mu^0 \exp(R_{\mu j}/R_{\mu j}^{12}) \quad (2)$$

В начале поверхность каждого из атомов молекулы разбивается на N - точек, координаты которых запоминаются. Далее для каждой из точек поверхности атома рассматриваются все возможные взаимодействия и строятся вектора различного направления и значения согласно вычисленным Δr . В итоге имеем для каждой точки несколько векторов для которых потом находится результирующий. Координаты конца результирующего вектора запоминаются и определяют местоположение новой точки поверхности атома с учетом всех взаимодействий.

На рисунке видны результаты трансформации исходной атомной оболочки каждого из атомов молекулы на примере пропилена. На сколько новый молекулярный объем получил удовлетворительную оценку можно определить путем сравнения экспериментальных и вычисленных величин относительных плотностей веществ при 20°C (d_4^{20}), как это и делалось ранее [2,3]. Отдельные результаты расчетов приведены в таблице.



без учета атомных взаимодействий



с учетом атомных взаимодействий

Рисунок 1. Вид молекулы пропилена без учета атомных взаимодействий с их учетом

Таблица 1. Экспериментальные d_4^{20} (эксп.) [5] и вычисленные d_4^{20} (расч.) относительные плотности некоторых углеводородов

| Соединения | d420(эксп.) | d420(расч.) | Соединения | d420(эксп.) | d420(расч.) |
|-------------|-------------|-------------|--------------------------|-------------|-------------|
| Гексан | 0,6548 | 0,6966 | Циклобутан | 0,703 | 0,712 |
| Гептан | 0,6838 | 0,6985 | Циклопентан | 0,7554 | 0,7105 |
| Октан | 0,7025 | 0,6999 | Пентин-2 | 0,7127 | 0,7503 |
| Нонан | 0,7176 | 0,701 | Гексадиен-1,5 | 0,688 | 0,742 |
| Декан | 0,7301 | 0,7019 | 2-метилбутен-2 | 0,668 | 0,718 |
| Додекан | 0,7437 | 0,7033 | 2-метилпентан | 0,6599 | 0,6969 |
| Тетрадекан | 0,764 | 0,704 | 2,2-диметилбутан | 0,6485 | 0,6973 |
| Пентадекан | 0,769 | 0,705 | 2,3-диметилбутадие-1,3 | 0,745 | 0,741 |
| Циклопропан | 0,6886 | 0,7061 | 2,5-диметилгексадиен-2,4 | 0,716 | 0,731 |

Анализ полученных результатов показывает, что согласие теории и эксперимента удовлетворительное.

Разработанное программное обеспечение на базе предложенного алгоритма требует незначительных компьютерных ресурсов. В программе

реализована полная визуализация процесса деформации атомных оболочек.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бейдер Р. Атомы в молекулах: Квантовая теория.-М.:Мир, 2001.-532с.

2. Белик А.В. Компьютерное моделирование атомных радиусов для прогноза плотности органических веществ //Изв. вузов. Сер. Химия и хим. технология. 1992. Т. 35, №4. С.51-55.

3. Белик А.В., Потемкин В.А. Новый подход к компьютерному моделированию атомных радиусов //ЖОХ. 1993. Т.63. Вып.6. С.1201-1203.

4. <http://www.hyper.com>.

5. Свойства органических соединений. Справочник / Под ред. А. А. Потехина. Л.: Химия, 1984. 520 С.

ИЕРАРХИЯ БАЗОВЫХ СТЕРЕОТИПОВ UML-МОДЕЛИ ОБУЧАЮЩЕЙ СИСТЕМЫ

Рыков В.Т., * Рыкова Е.В.**

*Кубанский государственный университет,

**Кубанский государственный

технологический университет,

Краснодар

1. Решение задачи спецификации процесса обучения – первый шаг к созданию технологий разработки обучающих систем.

Одной из основных проблем, возникающих при разработке заданий-заказов на подготовку программной продукции для компьютерных средств обучения, является отсутствие достаточно ясной спецификации задач программирования, направленных на решение задач обучения. Исходя из анализа педагогических и методических задач и опыта организации работы студентов младших курсов по разработке программных продуктов для обучающих систем, можно выделить три основных направления спецификации [1].

1. Спецификация задач программирования, основанная на представлении процесса обучения как семантического информационного потока.

2. Спецификация, вытекающая из подхода к процессу обучения как специфическому театральному действию, для которой целесообразно использовать интуитивно понятную терминологию театрального искусства.

3. Спецификация задач представления информации, исходящая из принципа инвариантности – независимости содержания информации о предмете от форм представления этой информации, учитывающая количественные характеристики передаваемой и усваиваемой информации.

Наилучшим образом спецификация любого изделия осуществляется с помощью модели (схемы, чертежа), отражающей все необходимые характеристики изделия. Создание такой модели требует наличия строгой (однозначно толкуемой) терминологической базы. Именуящихся в настоящее время средств описания требований к обучающим системам явно недостаточно. Несмотря на огромное количество методических и педагогических исследований области преподавания различных дисциплин, единое четкое представление о функционировании системы обучения как некоего механизма со своими строго определенными характеристиками практически отсутствует. Связано это, прежде всего, с

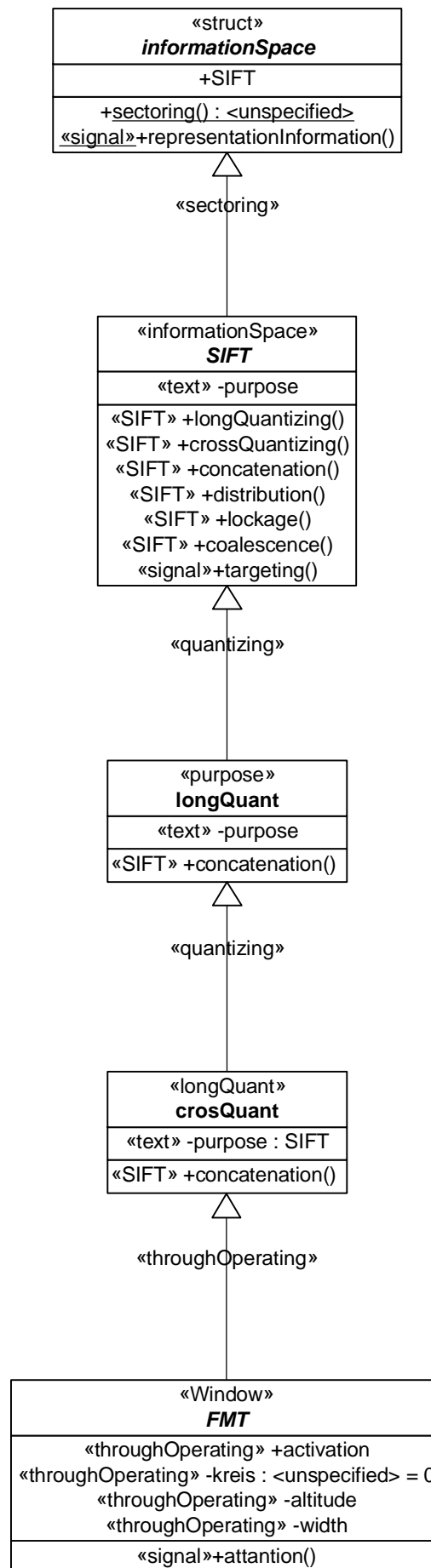


Рисунок 1. Иерархия стереотипов