

Таблица 2.

Расчетные и экспериментальные энталпии образования молекулярных комплексов (ккал/моль)

№	Соединение	Эксперимент, -ΔН (метод)	Методы расчета (относительная погрешность, %)				
			AM1	PM3	STO-3G	3-21G	6-31G(d)
1	Me ₃ N·BH ₃	32 (КМ п)	21 (28)	25 (22)	44 (38)	38 (19)	27 (16)
2	C ₅ H ₅ N·BH ₃	29 (КМ р)	24 (17)	30 (3)	42 (45)	42 (45)	22 (24)
3	Me ₃ N·BMe ₃	18 (ГД)	-0.25 (99)	10 (44)	21 (17)	16 (11)	3.3 (82)
4	Me ₂ NH·BMe ₃	19 (ГД)	8 (59)	16 (16)	27 (42)	20 (5)	8 (58)
5	Me ₃ N·BF ₃	27 (КМ п)	-2 (107)	59 (119)	15 (44)	52 (93)	25 (7)
6	Me ₂ O·BF ₃	23 (ГД)	7 (70)	9 (61)	14 (39)	41 (78)	12 (48)
7	Et ₃ P·BF ₃	19 (ГД)	-26 (237)	-0.4 (102)	1 (95)	14 (26)	7 (63)

Примечание: КМ п (КМ р) – калориметрия в парах (калориметрия в растворе), ГД - газофазная диссоциация

Результаты расчетов длины координационной связи X→В (табл.1) и энталпии образования комплексов (табл. 2) свидетельствуют о существенном влиянии природы исследуемого аддукта на величину относительной погрешности. В группе боразотных ассоциатов (соединения 1-5) наилучшие результаты расчета длины связи N→В принадлежат методу PM3. С другой стороны, ни один из использованных методов не смог обеспечить достаточно высокую воспроизводимость экспериментальных значений энталпии образования отмеченных комплексов. Если принять за необходимый уровень точности значение относительной погрешности ≤ 5%, то он был достигнут только в двух случаях (табл.2): PM3 (ассоциат 2) и 3-21G (соединение 4). В случае комплексов с координационной связью O→В и P→В наименьшую погрешность в определении длины связи также дает полуэмпирический расчет в приближении PM3 (табл.1). Минимальная погрешность в расчете энталпии образования составляет 39% (STO-3G, комплекс 6) и 26% (3-21G, ассоциат 7, табл.2). Таким образом, точность расчета величины ΔН в рамках использованных приближений в целом неудовлетворительна и требует использования других методов расчета.

Данные работ [5,6] дают основание полагать, что более перспективными для расчета энталпии образования молекулярных комплексов соединений бора являются методы DFT и MP2.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

- Несмеянов А.Н., Соколик Р.А. Методы элементоорганической химии. Бор, алюминий, галлий, индий, таллий. М.: Наука, 1964. 499 с.
- Михайлов Б.М., Бубнов Ю.Н. Борорганические соединения в органическом синтезе. М.: Наука, 1977. 515 с.
- HyperChem 5.02. Trial version. www.hyper.com.
- Ромм И.П., Носков Ю.Г., Мальков А.А. // Изв. АН. Сер. хим. 2007, 1869.
- Rasul G., Prakash S.G.K., Olah G.A. J. Mol. Struct. Theochem. 2007. V.818. N 1-3. P.65.
- Plumley J.A., Evanseck J.D. J. Phys. Chem. A. 2007. V.111. N 51. P.13472.

ЛИНГВИСТИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ РАСПРЕДЕЛЕННЫХ АВТОМАТИЗИРОВАННЫХ СИСТЕМ УПРАВЛЕНИЯ НА БАЗЕ UNIFIED MODELING LANGUAGE

Лосев В.В.
ГОУ ВПО СибГТУ
Красноярск, Россия

Среди приоритетных задач обеспечения функционирования GRID-системы, как архитектурной платформы для распределенных автоматизированных систем управления (АСУ) выделим задачу обмена данными, посредством основной памяти узлов, при взаимодействии прикладных программ с системами управления базами данных (СУБД). С последующим представлением данного метода с помощью информационной модели UML, как лингвистического обеспечения распределенной АСУ.

Рассматривая взаимодействие систем класса SCADA (Supervisory Control And Data Acquisition) с традиционными СУБД, ориентированными на дисковую память, выделим задачу загрузки объекта сущности с целью применения вычислительных процедур со стороны SCADA-системы.

Описание данной модели представлено в виде UML – диаграммы последовательностей Рис.1. Инициатором взаимодействия систем выступает объект *Arc.Trend*, представляющий архивный тренд в SCADA-системе, который, в свою очередь, осуществляет запрос объекта *N.Val.Param*, представляющий n-мерный массив значений параметра технологического процесса (ТП) из таблицы *Val.Param*, с целью последующего представления (визуализации). Объекту *Int.Mng*, представляющему менеджер интерфейса SCADA-системы известно об отсутствии в памяти объекта *N.Val.Param*, рассмотрение данного механизма предполагает UML - диаграмма деятельности. Данное известие влечет за собой попытку обращения к БД. Для реализации поиска объект *Arc.Trend* посылает атрибут *tempr.Val* (значение температуры), как условие поиска, в качестве аргумента операции *getVal.Param()*.

Следующим действием является создание объектом *Int.Mng* строки SQL-запроса и передачи

его объекту *Int.Drv*, представляющему драйвер интерфейса в сообщении *query ()*. Объект *Int.Drv* реализует механизм обращения к БД, который предполагает операции по синтаксическому ана-

лизу, проверке авторизации и компиляции. Результатом данного обращения является получение данных из таблицы *Val.Param*, с последующим их возвращением объекту *Int.Mng*.

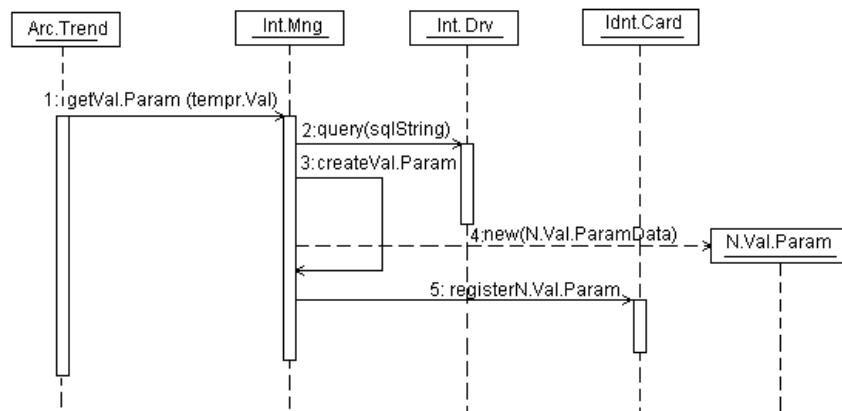


Рис. 1. UML-диаграмма последовательностей загрузки объекта.

Процесс создания объекта *N.Val.Param* реализуется в процессе инициализации метода *createVal.Param ()*, объектом *Int.Mng*. Данный метод отвечает за создание нового объекта *N.Val.Param* с помощью сообщения *new ()*. Завершением процесса загрузки нового объекта *N.Val.Param* является его регистрация объектом *Idnt.Card*, в результате присвоения идентификатора «чистый», по запросу объекта *Int.Mng* соответствующим флагом.

Анализируя полученную диаграмму следует отметить, что вызов персистентных объектов, имеет место при взаимодействии с СУБД, ориентированной на дисковую память и влечет временные задержки при совершении ряда действий.

Успешный результат поиска объекта сущности в памяти предопределяет новую задачу. Необходимо удостовериться, что объект является «чистым», т.е. содержит текущие данные хранящиеся в БД.

Запись значений параметров ТП, следует осуществлять короткими, легковесными транзакциями, характерными для OLTP (On-Line Transaction Processing). Продолжительность выполнения транзакции зависит от частоты опроса, например, устройств полевых сетей. Данное значение будет соответствовать длительности транзакции, и как следствие, «чистоте» данных и их доступности. Например, при запросе чтения объектом *Arc.Trend* данных незавершенной транзакции, результатом запроса будут «грязные» данные, либо блокировка на доступ к данным, до завершения транзакции с последующим выталкиванием данных на дисковую память, откуда и будет произведена загрузка объекта.

Рассматривая GRID-систему как архитектурную платформу для распределенных АСУ, с возможностью размещения в основной памяти узлов OLTP-ориентированной СУБД позволит

исключить временные задержки при взаимодействии с дисковой памятью.

В данном случае станет применима однопотоковая (сериализуемая) модель выполнения транзакций.

Пересмотр интерфейса взаимодействия позволит исключить последовательность действий направленных на синтаксический анализ, проверку ссылок на объекты, оптимизацию и компиляцию. В альтернативу SQL-запросам, со стороны SCADA-систем, посредством интерфейсов, следует рассматривать хранимые процедуры, например, предопределенные транзакции. При соблюдении условия формирования коротких (предопределенных) транзакций, возрастет доступность данных (их «чистота»), что позволит приблизить скорость реализации модели загрузки объектов к реальному времени.

ИННОВАЦИИ СЕВЕРСКОЙ АЭС

Смирнова Т.Л.

Северская государственная технологическая

академия

Северск, Россия

Атомная энергетика является эффективной отраслью российской экономики, с темпами экономического роста выше среднего по стране. Конкурентоспособность атомной энергетики определяют ядерные технологии, которые характеризуются научностью и капиталоемкостью. Современными особенностями ядерных технологий являются: высокая концентрация энергии при незначительном объеме топлива, отходы могут быть переработаны или локализованы. Атомная энергетика обладает расширяющимися перспективами развития в условиях сокращения углеводородных энергоресурсов и нестабильности энер-