

РАЗРАБОТКА СИСТЕМЫ ХРАНЕНИЯ ДАННЫХ ДЛЯ ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА МОДЕЛИРОВАНИЯ СВОЙСТВ МАТЕРИАЛОВ

А.М. Захаров, А.В. Обходский

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: amz2@tpu.ru

Программные комплексы для расчета свойств атомных структур материалов оперируют большими наборами разнородной информации. При проведении расчетных экспериментов формируются большие наборы данных с результатами и вспомогательными метаданными, в связи с этим возникают трудности организации эффективных средств доступа и хранения сверхбольших наборов неоднородных данных. Нашим научным коллективом реализуется проект по созданию программного комплекса для моделирования свойств материалов на основе редкоземельных металлов и исследования их характеристик в условиях высоких нагрузок. В состав программного комплекса интегрирована система хранения данных (СХД) на основе единой информационной сети. Экспериментальные данные формируются и сохраняются в СХД отдельного пользователя и синхронизируются с внешним централизованным хранилищем.

Для создания информационной сетевого хранилища используется выделенный файловый сервер предоставляющим всем пользователям доступ к ресурсам памяти при помощи набора сетевых протоколов ТСР/ПР [1]. Физическая организация СХД включает подсистемы – сетевые ресурсы хранения данных и локальные ресурсы ЭВМ пользователя. Сетевые ресурсы СХД включают в себя центральный сервер хранения данных и вспомогательный сервер резервирования. Каждая подсистема состоит из двух серверов: файл-сервера и сервера системы управления базой данных.

Протокол взаимодействия программных компонентов системы хранения данных предусматривает единый формат обмена данными на основе унифицированного транспортного файла [2]. Для функционирования СХД и работы с файл-сервером функционал СУБД был расширен при помощи хранимых процедур. Работа с данными на ЭВМ пользователя осуществляется при помощи клиентской программы, которая предоставляет доступ к ресурсам памяти СХД доступным на ЭВМ пользователя и на сетевых серверах.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации. Соглашение о предоставлении субсидии RFMEFI57814X0095 от 28.11.2014 г.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Deng Y. Deconstructing Network Attached Storage systems // Journal of Network and Computer Applications. – 2012. – V. 32, № 5. – P 1064–1072.
2. Catani L. An XML – based communication protocol for accelerator distributed controls // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. – 2008. – S A. – V 586, № 3. – P. 444–451.

ДИАГНОСТИКА И ОПТИМИЗАЦИЯ РАБОТЫ КАСКАДА ЦЕНТРОБЕЖНЫХ ЭКСТРАКТОРОВ ПО ПЕРЕРАБОТКЕ ОЯТ С РБН

Е.П. Зеленецкая

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: zeka@tpu.ru

Одним из важных факторов, влияющим на эффективность использования экстракционных схем в технологиях переработки отработанного ядерного топлива (ОЯТ), является радиационная устойчивость

экстрагента к повышенным дозам излучения. Многочисленные работы, направленные на оценку влияния радиационных нагрузок показали, что при длительном воздействии ионизирующего излучения (ИИ) на экстракционные системы происходит не только уменьшение коэффициента очистки целевых компонент от осколков деления и снижение полноты их выделения в конечные продукты, но и так называемое «разрушение» экстрагента на стадиях экстракции, промывки и реэкстракции. Более того, при переработке ОЯТ с реакторов на быстрых нейтронах (РБН), радиационная нагрузка на имеющиеся экстракционные системы возрастает в сотни раз за один многоступенчатый цикл.

Относительно простым в реализации путём снижения негативного влияния ИИ на экстрагент при переработке высокоактивных растворов, является использование экстракционной аппаратуры с малым временем контакта фаз, в качестве которой может являться центробежный экстрактор. При этом возникает необходимость в проведении экспериментальных исследований по отработке экстракционных технологий, так как ввод нового или дополнительного оборудования в имеющуюся экстракционную схему вносит существенные изменения в технологии. Проведение подобного рода исследований весьма затруднительно, так как производство по переработке ОЯТ с любых реакторных установок относится к объектам высокой опасности. В связи с этим наиболее целесообразно проводить экспериментальные изыскания с применением компьютерных моделей.

В настоящей работе представлена динамическая компьютерная модель, позволяющая создавать экстракционные схемы на основе центробежных экстракторов практически любой сложности. Данная модель позволяет выполнить полноценную диагностику построенного каскада, за счет реализации не только стационарных, но и пусковых режимов работы каскада. Наряду с этим имеется возможность внесения изменений в протекающие процессы, например, изменение температуры или концентрационного состава исходных реагентов, а так же введение дополнительных потоков в органическую или водную фазы. Помимо этого, реализована возможность графического представления распределения концентрационного состава целевых компонент, как в экстракторе, так и по каскаду в целом.

Данная работа направлена на определение в процессе диагностики собранной экстракционной схемы или узла, оптимального режима работы имеющихся в технологических схемах экстракционных каскадов, с целью обеспечения максимальной очистки целевых компонент от продуктов деления, минимизации вероятности захвата целевых компонент какой-либо из фаз, а так же определения минимального количества циклов для обеспечения полного извлечения целевых компонент.

РАЗРАБОТКА ПРОГРАММНОГО МОДУЛЯ РАСЧЕТА ГЕОМЕТРИИ АТОМНЫХ СТРУКТУР

А.А. Золотарев, А.В. Обходский

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г.Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: art707@tpu.ru

Для синтеза новых материалов с заданными свойствами необходимо знать их структурные особенности, основные свойства и характеристики. Применение компьютерного моделирования и численных методов расчета позволяет получить большое количество данных об атомной структуре и свойствах материалов перед проведением экспериментальных исследований.

Для компьютерного моделирования и расчета свойств молекул методом Хартри-Фока-Рутаана необходимо знать координаты каждого атома в декартовом пространстве. Вследствие этого ведется разработка