

2. Авдеенко Т.В. Компьютерные методы анализа временных рядов и прогнозирования: учеб. пособие. – Новосибирск: изд-во НГТУ, 2008. – 272 с.
3. Федоров В.В. Теория оптимального эксперимента (планирование регрессионных экспериментов). – М.: Наука, 1971.
4. Working E.J. // Quart. Journal of Economics. 1927. V.41. № 1.
5. Фишер Ф. Проблема идентификации в эконометрии. – М.: Статистика, 1978. – 224 с.
6. Bellman R., Astrom K.J. On Structural Identifiability // Math. Biosci. 1970. V. 7. № 3/4. P. 329-339.
7. Авдеенко Т.В., Горский В.Г. Построение динамических моделей в пространстве состояний. Анализ структурной идентифицируемости: монография. – Новосибирск: изд-во НГТУ, 2007. – 292 с.
8. Авдеенко Т.В., Каргин С.А. Анализ глобальной идентифицируемости линейных динамических моделей с использованием сепараторов параметрического пространства // Сибирский журнал индустриальной математики. 2006. Т. 9. № 3(27). С. 3-16.

Parameter identification problems in Mathematical modelling of processes

*Tat'ana Vladimirovna Avdeenko, Doct. of Sci., Professor
Novosibirsk State Technical University*

The main stages of constructing mathematical models based on experimental data are considered. At each stage the main problems of parametric identification leading to inadequate models are indicated. Special attention is paid to the property of model structure identifiability. Unidentified model structure contains a set of parameters that cannot be uniquely determined from experimental data, even for the ideal experiment. In this case the results of modeling become questionable. Illustrative examples of non-identifiable model structure are given, as well as recommendations for solving this problem.

Key words: parameter identification, model structure, experimental design, local and global identifiability, parameter space

УДК 51-72

МОДЕЛЬ ОНТОЛОГИИ ПРЕДМЕТНОЙ ОБЛАСТИ НАНОМАТЕРИАЛЫ

*Ирина Леонидовна Артемьева, д.т.н., проф., зав. кафедрой
прикладной математики, механики, управления и программного обеспечения
Тел.: 8 423 2681526, e-mail: iartemeva@mail.ru*

*Наталья Валентиновна Рябченко, к.т.н., доцент
кафедры прикладной математики, механики, управления и программного обеспечения
Тел.: 8 914 6522293, e-mail: barison@mail.ru
Дальневосточный федеральный университет
<http://www.dvfu.ru>*

Использование интеллектуальных систем моделирования, позволяющих объяснять результаты полученных вычислений в терминах предметной области, дает дополнительные возможности специалистам этой области по сравнению с программными системами других классов. Наличие формально описанной онтологии области, определяющей однозначную интерпретацию используемой терминологии, позволяет создавать интеллектуальные системы моделирования, интегрирующие знания и данные разных разделов этой области, а также программные системы для решения прикладных задач. Нанонаука носит междисциплинарный характер, что предполагает необходимость вовлечения знаний из различных дисциплин, т.е. в состав ее онтологии входят онтологии других предметных областей. Целью данной работы является определение математической модели онтологии сложноструктурированной предметной области «Наноматериалы», использующей терминологию из онтологий органической и физической химии.

Ключевые слова: математическое моделирование, модель онтологии, разработка систем, основанных на знаниях.

Введение

Значение вычислительной нанотехнологии крайне актуально для создания прототипов наноматериалов, устройств, систем и разнообразных приложений и исследования их свойств до начала разработки. В то же время вычислительная нанотехнология может быть использована не только для того, чтобы понять и охарактеризовать системы, полученные в результате экспериментов, но и прогнозировать свойства новых материалов, так как между структурными, механическими, химическими и электрическими свойствами наноматериалов существует сильная взаимосвязь.



И.Л. Артемьева

Существует ряд специализированных программных систем и пакетов, позволяющих производить небольшое число вычислений, таких как: ABINIT, ADF, CADPAC, CFOUR, CRYSTAL, Dalton, Jaguar, TURBOMOLE, VASP, WIEN2k, Q-Chem. В настоящее время разработано несколько комплексов для моделирования наносистем. Программный комплекс MaterialsStudio используется для решения основных задач современного материаловедения. Он позволяет выполнять квантовомеханические расчёты и компьютерное моделирование наноматериалов. В системе многомасштабного моделирования процессов самоорганизации и самосборки наноструктур SIAMS-CPMultiscaleModeling реализован метод многомасштабного моделирования наносистем с иерархической системой организации, содержащих упорядоченные или неупорядоченные ансамбли элементов разных размеров и архитектур [1].



Н.В. Рябченко

В настоящее время разработан иерархический язык описания наноструктур nanoML (на основе языка XML). С помощью этого языка можно описать наносистему на молекулярном уровне, а также определить её основные электрические, оптические, пространственные свойства, информацию о применении, копирайт и др. Для облегчения работы с языком nanoML компания nanoTITAN выпустила программу NanoXplorer, позволяющую создавать модели наноустройств по примеру программы AutoCAD.

Современные молекулярно-динамические компьютерные системы позволяют проводить компьютерные эксперименты для систем, содержащих миллионы частиц, используя высокоскоростные параллельные вычисления. Как правило, в результате получают файлы координат и скоростей, размером в несколько гигабайт, по которым путём статистической обработки строят функции радиального распределения, а также некоторые термодинамические параметры и коэффициенты диффузии.

Использование интеллектуальных систем моделирования, позволяющих объяснять результаты полученных вычислений в терминах предметной области, даёт дополнительные возможности специалистам этой области. Формальное описание терминологии области (в математической модели её онтологии [2].) позволяет создавать интеллектуальные системы, интегрирующие знания и данные разных разделов области, а также программные системы для решения прикладных задач [3]. Наличие формального определения онтологии области нанотехнологий из литературы не известно.

Нанонаука носит междисциплинарный характер, что предполагает необходимость вовлечения знаний из различных дисциплин. Во многих разделах химии могут быть

найденны задачи, предполагающие связь с нанотехнологиями, т.е. онтология и знания области химии должны входить в состав информационных компонентов интеллектуальной системы в области нанотехнологий. Указанное выше свойство области требует использования при построении модели онтологии такого математического формализма, который позволял бы обобщать уже существующие модели и добавлять к ним новые компоненты (модули). Такой формализм описан в работах [4-5]. Определить всю онтологию сложно структурированной области в рамках одной работы не представляется возможным, поэтому целью данной работы является описание фрагмента модели онтологии области наноматериалов.

Состав онтологии предметной области наноматериалы

Модель онтологии области «Наноматериалы» разбита на модули в соответствии с выделенными видами материалов (рис.1). Так как область наноматериалов тесно связана с органической, коллоидной и физической химией, то в модели используются термины многоуровневой модели химии [6], модульной модели онтологии органической [7] и физической химии [8]. При построении модели использовался метод, описанный в [9] и формализм, определенный в [4-5].

Далее рассмотрим фрагмент модели онтологии, включающий три модуля. Первый модуль определяет термины для описания основных понятий области наноматериалов, общих для всех выделенных видов (в работе приведен фрагмент онтологии, наиболее важный для определения терминов других модулей). Два другие модуля определяют термины, необходимые для описания свойств углеродных нанотрубок и нанокристаллов. При разработке модели онтологии использовалась специализированная литература [10-12].

Модуль «Наноматериалы»

К наноматериалам относят объекты, один из характерных размеров которых лежит в интервале от 1 до 100 нм. Поэтому важным свойством такого объекта является его размер. Приведенная классификация на рис. 1 учитывает не только состав наноматериалов, но и их форму, поэтому важно учитывать и это свойство.



Рис.1. Типы наноматериалов

При определении прикладной логической теории «Наноматериалы», используются терминология модулей «Элементный состав», «Агрегатное состояние» [7]; данный модуль использует стандартное расширение языка прикладной логики [4-5].

$Наноматериалы(ST) = \langle \{Элементный\ состав, Агрегатное\ состояние\}, SS \rangle$, где SS предложения, описанные ниже.

Все предложения каждого модуля прикладной логической теории разбиты на группы, которые определяют содержательный смысл этих предложений.

Вспомогательные термины

1.1. *типы кристаллических решеток* $\equiv \{триклинная, моноклинная, ромбическая, тригональная, тетрагональная, гексагональная, кубическая\}$

Вспомогательный термин *типы кристаллических решеток* описывает типы кристаллических решеток, определяющих тип пространственного расположения атомов в кристалле (кристаллографические системы Федорова).

Основные термины

2.1. *Сорт ПАВ* = {органические соединения}

Термин ПАВ обозначает названия органических амфифильных соединений, являющихся подмножеством множества органических соединений.

2.2. *Сорт возможные нанообъекты* = $\{N\}$

В качестве идентификаторов нанообъектов могут выступать произвольные обозначения.

2.3. *Сорт возможные формы нанообъектов* = $\{N\}$

В качестве идентификаторов всех возможных форм нанообъектов могут выступать произвольные обозначения.

2.4. *Сорт размер* = (возможные нанообъекты \rightarrow ($\times R, R, R$))

Термин *размер* обозначает функцию, которая сопоставляет названию нанообъекта его размер (ширина, толщина, длина). Значение длины, ширины, высоты представляется вещественными числами.

2.5. *Сорт наночастицы соединения* = (химические вещества \rightarrow {возможные нанообъекты})

Термин *наночастицы соединения* обозначает функцию, которая сопоставляет названию химического вещества множество нанообъектов, содержащихся в этом веществе.

2.6. *Сорт упорядоченное строение* = (возможные нанообъекты $\rightarrow L$)

Термин *упорядоченное строение* обозначает функцию, которая сопоставляет названию нанообъекта истину, если его строение упорядочено, и ложь в противном случае.

2.7. *Сорт форма нанообъекта* = (возможные нанообъекты \rightarrow возможные формы нанообъектов)

Термин *форма нанообъекта* обозначает функцию, которая сопоставляет названию нанообъекта его форму.

2.8. *Сорт ПАВ в составе* = (возможные нанообъекты \rightarrow {ПАВ})

Термин *ПАВ в составе* обозначает функцию, которая сопоставляет названию нанообъекта поверхностно-активные вещества, входящие в его состав.

2.9. *Сорт тип кристаллической решетки* = (химические вещества \rightarrow типы кристаллических решеток \cup «нет»)

Термин *тип кристаллической решетки* обозначает функцию, которая сопоставляет названию химического вещества тип кристаллической решетки, определяющей его пространственное расположение.

2.10. *Сорт поверхностное натяжение* = ((v : {химические вещества} | агрегатное состояние соединения(v) = «жидкость»)) $\rightarrow R[0, \infty)$)

Термин *наличие капиллярных свойств* обозначает функцию, которая сопоставляет жидкости её поверхностное натяжение.

2.11. *Сорт способы получения* = $\{N\}$

Термин *способы получения* описывает названия всех известных способов получения нанообъектов.

Модуль «Углеродные нанотрубки»

Углеродные нанотрубки – это цилиндрические структуры с диаметром порядка нескольких нанометров, состоящие из свёрнутых в трубку графитовых плоскостей. Углеродные нанотрубки могут различаться по длине, диаметру, хиральности (симметрии свёрнутой графитовой плоскости) и по количеству слоёв. Углеродные нанотрубки обычно имеют диаметр от <1 нм до 50 нм.

При определении прикладной логической теории «Углеродные нанотрубки», используются терминология модуля «Структурная формула соединения» [7], «Наноматериалы» и «Константы онтологии»; данный модуль использует стандартное расширение

языка прикладной логики, а также специализированные расширения с названиями Математические кванторы и Интервалы [4-5].

Углеродные нанотрубки(*ST*, Математические кванторы, Интервалы) = $\langle \{ \text{Структурная формула соединения, Наноматериалы, Константы онтологии} \}, SS \rangle$, где *SS* предложения, описанные ниже.

Вспомогательные термины

1.1. углеродная нанотрубка $\equiv \{ (v \in \text{химические вещества}) \mid (\forall (i \in [1, \text{length}(\text{структурная формула соединения}(v))]) \text{ компонент структурной формулы}(\text{структурная формула соединения}(v), i) = \langle C \rangle) \ \& \ (\text{тип кристаллической решетки}(v) = \langle \text{гексагональная} \rangle) \ \& \ (\text{наночастицы соединения}(v) \text{ нановолокно}) \ \& \ (\text{форма нанобъекта}(\text{наночастицы соединения}(v)) = \langle \text{цилиндр} \rangle) \}$

Углеродная нанотрубка – полая цилиндрическая структура, образованная атомами углерода и представляющая собой свёрнутую в цилиндр графеновую плоскость.

1.2. типы углеродных нанотрубок $\equiv \{ \text{однослойная, двухслойная, многослойная} \}$

Вспомогательный термин *типы углеродных нанотрубок* описывает три основных типа углеродных трубок.

1.3. виды углеродных нанотрубок $\equiv \{ \text{открытая, закрытая} \}$

Вспомогательный термин *виды углеродных нанотрубок* описывает два основных вида углеродных трубок.

1.4. конфигурация однослойных углеродных трубок $\equiv \{ \text{ахиральная типа «кресла», ахиральная типа «зигзаг», хиральная} \}$

Вспомогательный термин *конфигурация однослойных углеродных трубок* описывает три основных формы углеродных трубок.

1.5. конфигурация многослойных углеродных трубок $\equiv \{ \text{русская матрешка, свиток, папье-маше} \}$

Вспомогательный термин *конфигурация многослойных углеродных трубок* описывает три основных формы углеродных трубок.

Основные термины

2.1. *Сорт вид углеродной трубки* = (углеродная нанотрубка \rightarrow виды углеродных трубок)

Термин *вид углеродной трубки* обозначает функцию, которая сопоставляет названию углеродной трубки её вид.

2.2. *Сорт тип углеродной трубки* = (углеродная нанотрубка \rightarrow типы углеродных трубок)

Термин *тип углеродной трубки* обозначает функцию, которая сопоставляет названию углеродной трубки её тип.

2.3. *Сорт индексы хиральности* = $((v: \{ (v' \in \text{углеродная нанотрубка}) \mid \text{тип углеродной трубки}(v) = \langle \text{однослойная} \rangle \}) \rightarrow (\times R[0, 90], R[0, 90]))$

Термин *индексы хиральности* обозначает функцию, которая сопоставляет названию однослойной углеродной трубке пару чисел, указывающих координаты шестиугольника, который в результате сворачивания плоскости должен совпадать с шестиугольником, находящимся в начале координат.

2.4. *Сорт конфигурация углеродной трубки* = (углеродная нанотрубка \rightarrow конфигурация однослойных углеродных трубок \cup конфигурация многослойных углеродных трубок)

Термин *конфигурация углеродной трубки* обозначает функцию, которая сопоставляет названию однослойной углеродной трубке пару чисел, указывающих координаты шестиугольника, который в результате сворачивания плоскости должен совпадать с шестиугольником, находящимся в начале координат.

2.5. *Сорт число слоёв* = (углеродная нанотрубка $\rightarrow R[1, 10]$)

Термин *число слоёв* обозначает функцию, которая сопоставляет углеродной трубке число слоёв в этой углеродной трубке. Число слоёв чаще всего составляет не больше 10.

2.6. *Сорт расстояния между соседними слоями* = (углеродная нанотрубка \rightarrow $\{R[0, \text{максимальное расстояние между слоями нанотрубки}]\}$)

Термин *расстояние между соседними слоями* обозначает функцию, которая сопоставляет названию углеродной трубки множество чисел, задающих возможные расстояния между соседними слоями в углеродной трубке.

2.7. *Сорт внешний диаметр* = ($(v: \{v' \in \text{углеродная нанотрубка} \mid \text{тип углеродной трубки}(v') = \text{«многослойная»}\}) \rightarrow R(0.4, 100]$)

Термин *внешний диаметр* обозначает функцию, которая сопоставляет названию многослойной углеродной трубки диаметр её внешнего слоя. Внешний диаметр измеряется в нм.

2.8. *Сорт внутренний диаметр* = ($(v: \{v' \in \text{углеродная нанотрубка} \mid \text{тип углеродной трубки}(v') = \text{«многослойная»}\}) \rightarrow R(0, 100]$)

Термин *внутренний диаметр* обозначает функцию, которая сопоставляет названию многослойной углеродной трубки диаметр её внутреннего слоя. Внутренний диаметр измеряется в нм.

2.9. *Сорт наличие капиллярных свойств* = ($(v: \{v' \in (\times \text{углеродная нанотрубка, химические вещества}) \mid (\text{агрегатное состояние соединения}(\pi(2, v'))) = \text{«жидкость»}) \& (\text{тип углеродной трубки}(\pi(2, v'))) = \text{«открытая»}\}) \rightarrow L$)

Термин *наличие капиллярных свойств* обозначает функцию, которая сопоставляет названию углеродной трубки и жидкости, наличие возможности втягивать данную жидкость в углеродную трубку. Капиллярные эффекты проявляются только у открытых углеродных трубок.

2.10. *Сорт удельное электрическое сопротивление* = (углеродная нанотрубка $\rightarrow R[0, \infty)$)

Термин *удельное электрическое сопротивление* обозначает функцию, которая сопоставляет названию углеродной нанотрубки значение её удельного электрического сопротивления, измеряемого в Ом*см.

2.11. *Сорт наличие металлических свойств* = (углеродная нанотрубка $\rightarrow L$)

Термин *наличие металлических свойств* обозначает функцию, которая сопоставляет названию углеродной трубки предикат, говорящий о наличии металлических свойств.

2.12. *Сорт автоэлектронная эмиссия УНТ* = (углеродная нанотрубка $\rightarrow R[0, \infty)$)

Термин *автоэлектронная эмиссия УНТ* обозначает функцию, которая сопоставляет названию углеродной нанотрубки числовое значение электронной эмиссии углеродной нанотрубки.

2.13. *Сорт диаманитная восприимчивость* = (углеродная нанотрубка $\rightarrow R[0, \infty)$)

Термин *диаманитная восприимчивость* обозначает функцию, которая сопоставляет названию углеродной нанотрубки числовое значение.

2.14. *Сорт получение нанотрубок* = (углеродная нанотрубка $\rightarrow \{\text{способы получения}\}$)

Термин *получение нанотрубок*, обозначает функцию, которая сопоставляет названию углеродной нанотрубки все названия способов её получения.

Онтологические соглашения

3.1. $(v: \{v' \in \text{углеродная нанотрубка} \mid \text{тип углеродной трубки}(v') = \text{«однослойная»}\}) \text{ диаметр}(v) = ((\text{Sqr}(3) * 0,142) / 3,14) * \text{Sqr}(\pi(1, \text{индексы хиральности}(v))) * \pi(1, \text{индексы хиральности}(v)) + \pi(2, \text{индексы хиральности}(v))) * \pi(2, \text{индексы хиральности}(v)) + \pi(1, \text{индексы хиральности}(v))) * \pi(2, \text{индексы хиральности}(v))$

Индексы хиральности однослойной нанотрубки (m, n) однозначным образом оп-

ределяют её диаметр D . Указанная связь имеет следующий вид:

$$D = \frac{\sqrt{3}d_0}{\pi} \cdot \sqrt{m^2 + n^2 + mn} \quad \text{где } d_0 = 0,142 \text{ нм — расстояние между соседними атомами углерода в графитовой плоскости.}$$

3.2. ($v: \{v1: \text{углеродная нанотрубка} \mid \text{тип углеродной трубки}(v1) = \text{«однослойная»}\}$) конфигурация углеродной трубки(v) \in конфигурация однослойных углеродных трубок

Конфигурация однослойных углеродных нанотрубок соответствует их типу.

3.3. ($v: \{v' \in \text{углеродная трубка} \mid \text{тип углеродной трубки}(v') = \text{«многослойная»}\}$) конфигурация углеродной трубки($v2$) \in конфигурация многослойных углеродных трубок

Конфигурация многослойных углеродных нанотрубок соответствует их типу.

3.4. ($v: \{v' \in \text{углеродная нанотрубка} \mid (\text{тип углеродной трубки}(v') = \text{«однослойная»}) \& (\text{конфигурация углеродной трубки}(v') = \text{«ахиральная типа «кресла»})\}$) $\pi(1, \text{индексы хиральности}(v)) = \pi(2, \text{индексы хиральности}(v))$

Ахиральные углеродные нанотрубки типа «кресла» имеют индексы хиральности (n, n).

3.5. ($v: \{v' \in \text{углеродная нанотрубка} \mid (\text{тип углеродной трубки}(v') = \text{«однослойная»}) \& (\text{конфигурация углеродной трубки}(v') = \text{«ахиральная типа «зигзаг»})\}$) $((\pi(2, \text{индексы хиральности}(v)) = 0) \& (\pi(1, \text{индексы хиральности}(v) \neq 0)) \square ((\pi(1, \text{индексы хиральности}(v)) = 0) \& (\pi(2, \text{индексы хиральности}(v) \neq 0))$

Ахиральные углеродные нанотрубки типа «зиг-заг» имеют индексы хиральности ($n, 0$) или, что полностью эквивалентно ($0, m$).

3.6. ($v: \{v' \in \text{углеродная нанотрубка} \mid (\text{тип углеродной трубки}(v') = \text{«однослойная»}) \& (\text{конфигурация углеродной трубки}(v') = \text{«хиральная»})\}$) $(\pi(1, \text{индексы хиральности}(v)) > 0) \& (\pi(1, \text{индексы хиральности}(v)) \neq \pi(2, \text{индексы хиральности}(v))) \& (\pi(2, \text{индексы хиральности}(v)) > 0)$

Хиральные углеродные нанотрубки имеют индексы хиральности (n, m).

3.7. ($v: \{v' \in \text{углеродная нанотрубка} \mid (\text{тип углеродной трубки}(v') = \text{«однослойная»})\}$) число слоев(v) = 1) $\&$ (расстояниями между соседними слоями(v) = \emptyset)

У однослойной трубки может быть только один слой.

3.8. ($v: \{v' \in \text{углеродная нанотрубка} \mid (\text{тип углеродной трубки}(v') = \text{«многослойная»})\}$) (число слоев(v) > 1) $\&$ (число слоев(v) ≤ 10)

У однослойной трубки больше одного слоя. Обычно их число составляет не больше 10.

3.9. ($v: \{v' \in \text{углеродная нанотрубка} \mid (\text{тип углеродной трубки}(v') \neq \text{«однослойная»})\}$) $\mu(\text{расстояниями между соседними слоями}(v)) = \text{число слоёв}(v) - 1$

У углеродной трубки описывается расстояние между всеми имеющимися слоями.

3.10. ($v: \{v' \in \text{углеродная нанотрубка} \mid \text{вид углеродной трубки}(v') = \text{«открытая»}\}$) ($v2: \{v' \in \text{химические вещества} \mid (\text{агрегатное состояние соединения}(v') = \text{«жидкость»}) \& (\text{наличие капиллярных свойств}(v, v') = \text{true})\}$) $\text{поверхностное натяжение}(v2) < 200$

Капиллярные свойства углеродных нанотрубок проявляются только при контакте с теми жидкостями, которые имеют поверхностное натяжение меньше 200 Н/м.

3.11. ($v: \{v' \in \text{углеродная нанотрубка} \mid (\text{тип углеродной трубки}(v') = \text{«однослойная»}) \& (\text{конфигурация углеродной трубки}(v') = \text{«ахиральная типа «кресла»})\}$) наличие металлических свойств(v)

Ахиральные углеродные нанотрубки типа «кресла» проявляют металлические свойства.

3.12. ($v: \{v' \in \text{углеродная нанотрубка} \mid (\text{тип углеродной трубки}(v') = \text{«однослойная»}) \& (\text{конфигурация углеродной трубки}(v') \neq \text{«ахиральная типа «кресла»})\}$) ($i:$

$I[1, \infty) \mid (\pi(1, \text{индексы хиральности}(v)) - \pi(2, \text{индексы хиральности}(v)) = 3 \cdot i)$ наличие металлических свойств(v)

Однослойные хиральные и ахиральные углеродные нанотрубки типа «зигзаг» проявляют металлические свойства при условии $n - m = 3q$, где q - целое число.

Модуль «Нанокристаллы»

Нанокристалл – отдельный однородный кристалл, имеющий непрерывную кристаллическую решётку, характеризующийся анизотропией свойств и имеющий размеры (хотя бы один) ≤ 100 нм. Эти материалы имеют большой технологический потенциал, так как многие их электрические и термодинамические свойства зависят от их размеров, и, следовательно, могут контролироваться во время технологического процесса.

При определении прикладной логической теории «Нанокристаллы», используются модуль «Наноматериалы» и «Константы онтологии»; данный модуль использует стандартное расширение языка прикладной логики, а также специализированные расширения с названиями Математические кванторы и Интервалы[4-5].

Нанокристаллы(ST , Математические кванторы, Интервалы) = $\langle \{ \text{Наноматериалы, Константы онтологии} \}, SS \rangle$, где SS предложения, описанные ниже.

Вспомогательные термины

1.1. *нанокристалл* $\equiv (\{v \in \text{возможные нанообъекты} \mid ((\pi(1, \text{размер}(v)) \in R[1, 100]) \& (\pi(2, \text{размер}(v)) \in R[1, 100]) \& (\pi(3, \text{размер}(v)) \in R[1, 100])) \& (\text{тип кристаллической решетки}(v) \neq \text{«нет»}) \& (\text{порядок оси симметрии}(v) \neq 5)\})$

Нанокристаллы характеризуется наличием кристаллической решетки и могут иметь только оси симметрии 1-го, 2-го, 3-го, 4-го и 6-го порядков.

1.2. *виды нанокристаллов* $\equiv \{ \text{органический, неорганический} \}$

Вспомогательный термин *виды нанокристаллов* описывает два основных вида нанокристаллов.

1.3. *виды неорганических нанокристаллов* $\equiv \{ \text{нанокристалл металла, нанокристалл сплава, нанокристалл керамики на основе простого оксида, нанокристалл керамики на основе двойного оксида, нанокристалл керамики на основе тройного оксида, нанокристалл керамики на основе нитрида, нанокристалл керамики на основе оксинитрида, нанокристалл керамики на основе карбида, нанокристалл углерода, нанокристалл полупроводника нанокристалл композиционный} \}$

Вспомогательный термин *виды неорганических нанокристаллов* описывает основные виды неорганических нанокристаллов.

Основные термины

2.1. *Сорт вид нанокристалла* = (нанокристалл \rightarrow виды нанокристаллов)

Термин *вид нанокристалла* обозначает функцию, которая сопоставляет названию нанокристалла его вид.

2.2. *Сорт вид неорганического нанокристалла* = $((v: \{v' \in \text{нанокристалл} \mid \text{вид нанокристалла}(v') = \text{«неорганический»}\}) \rightarrow \text{виды неорганических нанокристаллов})$

Термин *вид неорганического нанокристалла* обозначает функцию, которая сопоставляет названию неорганического нанокристалла его вид.

2.3. *Сорт анизотропия свойств* = (нанокристалл $\rightarrow L$)

Термин *анизотропия свойств* обозначает функцию, которая сопоставляет названию нанокристалла предикат, определяющий выражена ли у него анизотропия его свойств.

2.4. *Сорт доля поверхностного слоя* = (нанокристалл $\rightarrow R[1, 100]$)

Термин *доля поверхностного слоя* обозначает функцию, которая сопоставляет названию нанокристалла долю его поверхностного слоя.

2.5. *Сорт диаметр* = (нанокристалл $\rightarrow R(0, 100]$)

Термин *диаметр* обозначает функцию, которая сопоставляет названию нанокристалла его диаметр, выраженный в нанометрах.

2.6. *Сорт толщина слоя* = (нанокристалл $\rightarrow R(0, 100]$)

Термин *толщина слоя* обозначает функцию, которая сопоставляет названию нанокристалла толщину его поверхностного слоя, выраженную в нанометрах.

2.7. *Сорт период кристаллической решётки* = (нанокристалл $\rightarrow R(0, 100]$)

Термин *период кристаллической решётки* обозначает функцию, которая сопоставляет названию нанокристалла длину ребра элементарной ячейки кристаллической решётки, выраженную в нанометрах.

2.8. *Сорт температура плавления нанокристалла* = ((нанокристалл, $R(0, 100]$) $\rightarrow R$ [минимальная температура плавления, максимальная температура плавления])

Термин *температура плавления нанокристалла* обозначает функцию, которая сопоставляет названию нанокристалла и его размеру, температуру плавления этого нанокристалла.

2.9. *Сорт температура плавления массивного кристалла* = (нанокристалл $\rightarrow R$ [минимальная температура плавления, максимальная температура плавления])

Термин *температура плавления массивного кристалла* обозначает функцию, которая сопоставляет названию нанокристалла, температуру плавления его массивного кристалла.

2.10. *Сорт теплоемкость нанокристалла* = (нанокристалл $\rightarrow R[0$, максимальное значение теплоемкости])

Термин *теплоемкость нанокристалла* обозначает функцию, которая сопоставляет названию нанокристалла его теплоемкость.

2.11. *Сорт теплоемкость массивного кристалла* = (нанокристалл $\rightarrow R[0$, максимальное значение теплоемкости])

Термин *теплоемкость массивного кристалла* обозначает функцию, которая сопоставляет названию нанокристалла теплоемкость его массивного кристалла.

Онтологические соглашения

3.1. ($v: \{v' \in \text{нанокристалл} \mid \text{вид нанокристалла}(v') = \text{«неорганический»}\}$) вид неорганического нанокристалла(v) = «нанокристалл углерода» $\Rightarrow (\pi(1, \text{размер}(v)) \leq 50) \& (\pi(2, \text{размер}(v)) \leq 50) \& (\pi(3, \text{размер}(v)) \leq 50)$

В большинстве случаев нанокристаллы не превышают 50 нм для алмаза и графита.

3.2. ($v: \{v' \in \text{нанокристалл} \mid \text{вид нанокристалла}(v') = \text{«неорганический»}\}$) вид неорганического нанокристалла(v) = «нанокристалл полупроводника» $\Rightarrow (\pi(1, \text{размер}(v)) \leq 10) \& (\pi(2, \text{размер}(v)) \leq 10) \& (\pi(3, \text{размер}(v)) \leq 10)$

В большинстве случаев нанокристаллы не превышают 10 нм для полупроводников.

3.3. ($v: \{v' \in \text{нанокристалл} \mid (\pi(1, \text{размер}(v')) > 10) \& (\pi(2, \text{размер}(v')) > 10) \& (\pi(3, \text{размер}(v')) > 10)\}$) доля поверхностного слоя(v) = $(3.14 * (\text{диаметр}(v) \wedge 3) - (3.14 * (\text{диаметр}(v) - 2 * \text{толщина слоя}(v)) \wedge 3) / 6) / (3.14 * \text{диаметр}(v) \wedge 3) / 6$

Для наночастицы размером более 10 нм с диаметром d и толщиной поверхностного слоя δ доля поверхностного слоя в общем её объёме определяется выражением

$$\frac{\pi d^3 / 6 - \pi(d - 2\delta)^3 / 6}{\pi d^3 / 6} = \frac{\delta}{d}$$

3.4. ($v: \{v' \in \text{нанокристалл} \mid (\pi(1, \text{размер}(v')) < 1) \& (\pi(2, \text{размер}(v')) < 1) \& (\pi(3, \text{размер}(v')) < 1)\}$) доля поверхностного слоя(v) > 90

При размере менее 1 нм практически вся наночастица может приобретать свойства поверхностного слоя.

3.5. $(v: \{v' \in \text{нанокристалл} \mid (\pi(1, \text{размер}(v')) < 10) \& (\pi(2, \text{размер}(v')) < 10) \& (\pi(3, \text{размер}(v')) < 10)\}) (r: R(0, 10))$ температура плавления массивного кристалла(v) \neq температура плавления нанокристалла(v, r)

Размерный эффект температуры плавления имеет место для нанокристаллов размером менее 10 нм.

3.6. $(v: \{v' \in \text{нанокристалл} \mid (\text{вид нанокристалла}(v') = \text{«неорганический»}) \& (\text{вид неорганического нанокристалла}(v') = \text{«нанокристалл металла»})\})$ теплоемкость нанокристалла(v) $>$ теплоемкость массивного кристалла(v)

В нанокристаллах в сравнении с массивными кристаллами наблюдается изменение тепловых свойств. Теплоёмкость нанокристаллов металлов в несколько раз превышает теплоёмкость массивного кристалла.

Заключение

В работе приведены три модуля разрабатываемой математической модели онтологии области нанотехнологий и наноматериалов. Предполагается, что такая модель будет использована при создании интеллектуальных систем моделирования, интегрирующих онтологии, знания, данные указанных областей, а также программные системы, предназначенные при решении прикладных задач (в том числе с использованием существующих программных систем).

Вместе с тем, наличие математической модели онтологии любой области науки имеет самостоятельное значение, поскольку в ней формально определяется вся используемая терминология, что даёт однозначную интерпретацию смысла всех терминов.

Литература

1. *Ибрагимов И.М., Ковшов А.Н., Назаров Ю.Ф.* Основы компьютерного моделирования наносистем: учеб. пособие. – СПб.: Издательство «Лань», 2010. – 384с.
2. *Клещев А.С., Артемьева И.Л.* Математические модели онтологий предметных областей. Часть 1. Существующие подходы к определению понятия «онтология» // Научно-техническая информация. 2001. № 2. С. 20-27.
3. *Артемьева И.Л.* Интеллектуальные системы для сложно структурированных предметных областей // Научно-технические ведомости СПбГТУ. 2008. № 2. С. 108-114.
4. *Артемьева И.Л., Клещев А.С.* Необогатенные системы логических соотношений. Часть 1 // Научно-техническая информация. 2000. № 7. С. 18-28.
5. *Артемьева И.Л., Клещев А.С.* Необогатенные системы логических соотношений. Часть 2//Научно-техническая информация. 2000. № 8.С. 8-18.
6. *Artemieva I.L.* Multilevel modular chemistry ontology: structure and management.- First Russia and Pacific Conf. on Computer Technology and App. 6-9 September, 2010, ISBN: 978-0-9803267-3-4.P. 12-17.
7. *Артемьева И.Л., Рештаненко Н.В.* Модульная модель онтологии органической химии // Информатика и системы управления. 2004. № 2(08).С. 64-68.
8. *Артемьева И.Л., Цветников В.А.* Фрагмент онтологии физической химии и его модель // Исследовано в России. 2002. № 3. С. 454-474.
9. *Артемьева И.Л.* Сложно структурированные предметные области. Построение многоуровневых онтологий // Информационные технологии. 2009. № 1. С.16-21.
10. *Наноматериалы и нанотехнологии /В.М. Анищик [и др.] / под ред. В.Е. Борисенко, Н. К. Толочко. – Минск: изд. Центр БГУ, 2008. – 375 с.*
11. *Поздняков В.А.* Физическое материаловедение наноструктурных материалов: учеб. пособие – М.: МГИУ, 2007. – 423 с.
12. *Дьячков П.Н.* Углеродные нанотрубки: строение, свойства, применения. – М.: БИНОМ.Лаборатория знаний, 2006. – 293 с.

Nanomaterials ontology model

Irene Leonidovna Artem'eva, Full Professor, Dr. Sc. (Engineering)
Head of Applied Mathematics, Mechanics, Management and Computer Software Department,
Far Eastern Federal University

Natalya Valentinovna Reshtanenko, Cand. Sc. (Engineering)
Associate Professor of Applied Mathematics, Mechanics, Management and Computer Software Department,
Far Eastern Federal University

Using intelligent modeling systems for explaining the results of calculations in terms of a particular domain provides more options by contrast with program systems of other classes. A formally described domain ontology that defines the unambiguous interpretation of the terms makes it possible to develop intelligent modeling systems combining knowledge and data of different sections of this domain and program systems for solving application issues. Nanoscience is of a cross-disciplinary nature which implies the necessity to use knowledge of various disciplines, i.e. there are ontologies of other domains in this ontology. The paper proposes a mathematical ontology model of the nanomaterials domain with complicated structures and terms from ontologies of organic chemistry and physical chemistry.

Keywords: Mathematical modeling; ontology model; development of knowledge-based systems.

УДК 004.053, 004.054

АКТУАЛЬНЫЕ ПРОБЛЕМЫ ОРГАНИЗАЦИИ МОДУЛЬНОГО ТЕСТИРОВАНИЯ КЛАССОВ ПРОГРАММНОГО КОДА

Дмитрий Олегович Кожевников, аспирант
кафедра информационных технологий
Тел.: +7 953 5942082, email: d.o.kozhevnikov@gmail.com
Сибирский государственный технологический университет
<http://www.kit-sibstu.ru/>

Данная работа посвящена описанию и анализу некоторых проблем разработки модульных тестов, которые связаны с недостатками тестируемого кода. Различая достижение пригодность к модульному тестированию и получение кратких и понятных модульных тестов, материал работы концентрируется на описании проектных решений, которые приводят к появлению громоздких и сложных для чтения модульных тестов. Анализируются симптомы и признаки таких решений в тестируемом коде программы.

Ключевые слова: модульное тестирование, рефакторинг, слабая связность, внедрение зависимостей, тестовый двойник, конструктор, контейнер инверсии управления.

Введение

Данная работа основана на моделях, методах и алгоритмах, описанных в книгах и статьях Джерарда Мессароша, Роя Ошерова, Мартина Фаулера, Кента Бека, Марка Симана и Роберта Мартина. Целью данной работы является обращение внимания на актуальность конкретизации, формализации и каталогизации моделей и методов проектирования и рефакторинга [5] программного кода, относительно которого разрабатываются и применяются модульные тесты. Работа призвана обозначить предметную область, проблематику и основные направления дальнейшего исследования.



Д.О. Кожевников

Модульное тестирование [1] классов, нагруженных реализацией критически важных правил и ограничений предметной области, является неотъемлемой частью процесса разработки корпоративных приложений. В современных мето-