

ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНАЯ СИСТЕМА МОДЕЛИРОВАНИЯ СВОЙСТВ НАНОЧАСТИЦ

М.В. Трофимов, аспирант

Владивостокский государственный университет экономики и сервиса, Владивосток

Цель. Разработать модель и методы реализации интеллектуальной Интернет системы, которая позволяет проводить исследования свойств наночастиц и наноматериалов специалистам в области химии.

Интеллектуальная система должна быть компонентом расширяемой интеллектуальной системы, предназначенной для решения различных классов прикладных задач для разных разделов химии. Ее разработка основывается на методах, предложенных в Институте автоматизации и процессов управления (ИАПУ) ДВО РАН.

Постановка задачи. Для разработки интеллектуальной системы моделирования свойств наночастиц необходимо решить несколько задач.

Первой из задач, требующих решения, является создание математической модели, позволяющей представить свойства объектов моделирования, описать их классификации, задать законы образования таких частиц и законы их участия в физико-химических процессах, а также описать законы прохождения таких процессов с участием наночастиц. Разработка математической модели основывается на созданной в ИАПУ ДВО РАН многоуровневой модели предметной области, которая задает схему анализа объекта моделирования и структуру модели.

Второй из задач выполняемого исследования является анализ классов прикладных задач данного раздела химии, разработка и исследование методов их решения. Одним из классов задач образуют задачи определения пути синтеза химического соединения. Этот класс обобщает класс задач поиска путей синтеза органического соединения, методы решения для которых разработаны в ИАПУ ДВО РАН.

На каждом шаге синтеза соединения производится поиск соответствующей реакции в базе данных (информационная компонента интеллектуальной системы). Условия поиска задаются во входных параметрах интеллектуальной системы. Такие условия могут определять химическое соединение первого шага синтеза, набор соединений, участвующих на других шагах, а также ряд дополнительных условий, которым должен удовлетворять процесс синтеза (например, наличие катализаторов, нагрева или охлаждения и т.д.). При решении задачи формируется множество путей синтеза. Каждый путь синтеза представляется последовательностью веществ, участвующих в синтезе на каждом шаге.

Метод решения задач данного класса обобщает методы решения класса задач поиска путей синтеза органических соединений, разработанные в ИАПУ ДВО РАН. Для решения каждой подзадачи используется отдельный агент, реализующий метод для подзадачи.

Модель агента поиска пути синтеза химического соединения. На рисунке 1 представлена структура метода решения задачи поиска путей синтеза химического соединения.

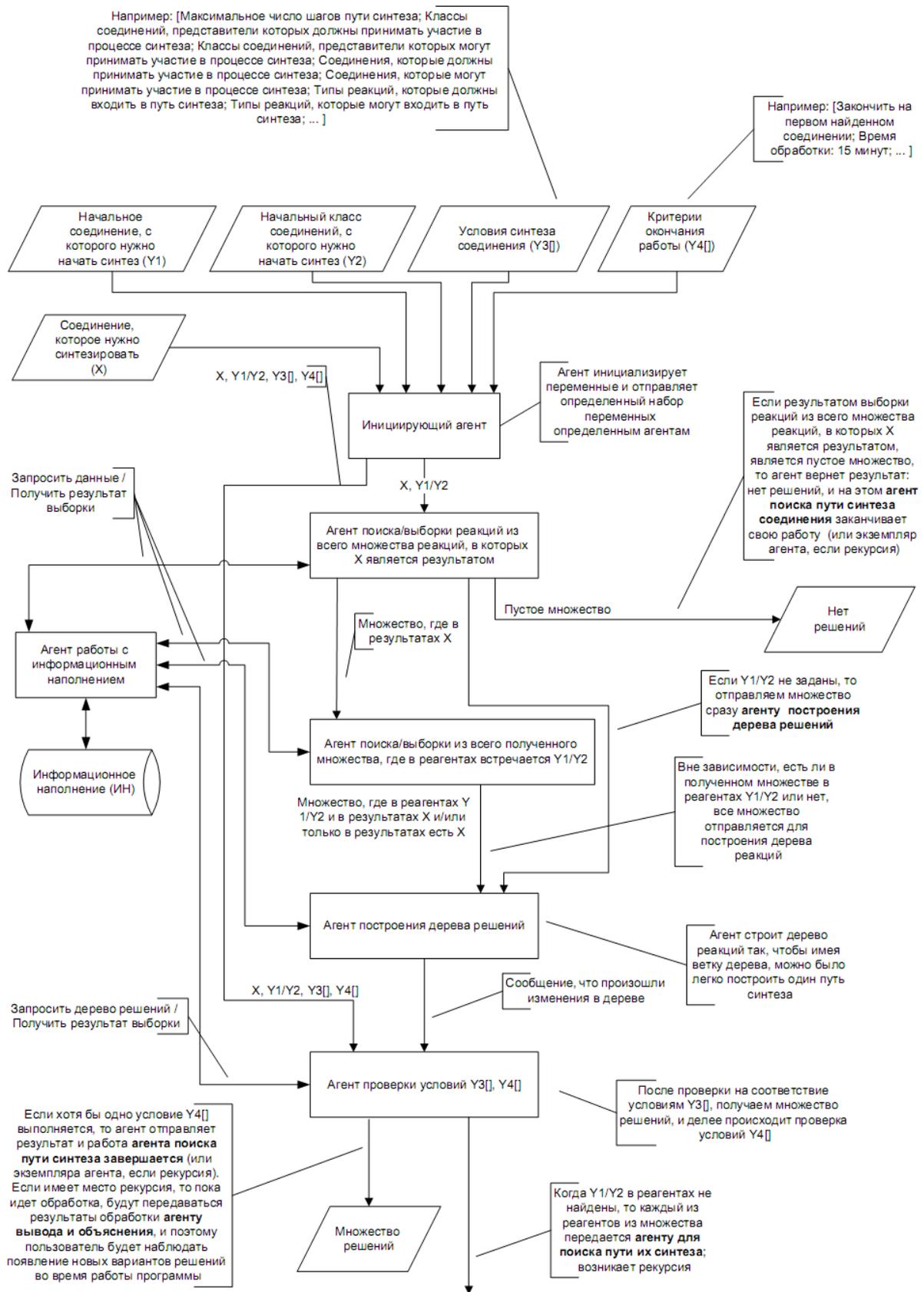


Рисунок 1 – Модель агента поиска пути синтеза

Модель решателя класса задач поиска пути синтеза химического соединения (рисунок 2):

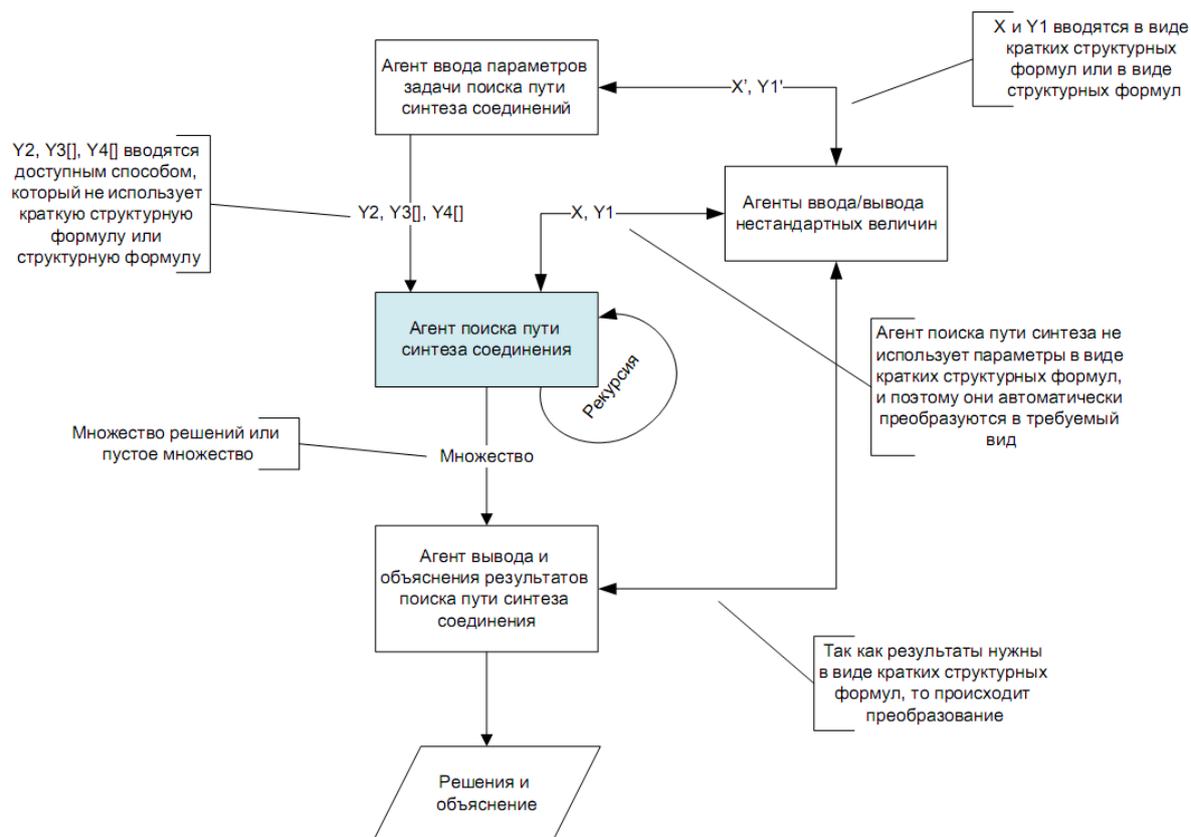


Рисунок 2 – Модель решателя класса задач поиска пути синтеза

Заключение. В работе дана формулировка цели исследования и сформулированы две задачи, которые должны быть решены до начала разработки интеллектуальной системы для моделирования свойств наночастиц. Рассмотрен пример метода решения одного из классов задач. Добавление компонента для моделирования свойств наночастиц в расширяемую интеллектуальную систему по химии является актуальным, поскольку позволяет получить программную систему, которая может быть использована в современных научных исследованиях в указанной области.