

SISTEM INFORMATIC ADAPTIV

„DETERMINAREA STĂRILOR PROPRII ALE MOLECULELOR DE FULLERENE”

Victor CIOBU, Florentin PALADI, Gheorghe CĂPĂȚĂNĂ

Universitatea de Stat din Moldova

În articol sunt studiate comportamentul și proprietățile fizice ale fullereneilor. Avantajul tehnologiilor informaționale inteligente este de a construi automat programul de calcul din specificarea inițială a problemei slab-structurate și informațiile de concretizare, furnizate de către beneficiarul problemei în cadrul dialogului cu SSD (parametrii necunoscuți ai problemei, metoda de calcul, criteriile de optimizare etc.). SSD a fost folosit la cercetarea fullereneilor: C_{60} , C_{70} , C_{76} , C_{82} .

Cuvinte-cheie: molecule de fulleren, model semiclasic, SSD, stări proprii, simetrie icosaedrală.

ADAPTIVE INFORMATIC SYSTEM

„DETERMINATION OF THE EIGENSTATES OF FULLERENE MOLECULES”

In the present article the behavior and physical properties of fullerenes are studied. The advantage of intelligent information technologies is to build automatically computer program from the initial specification of a poorly-structured problem and the embodiment information provided by the recipient of the problem through a dialogue with DSS (unknown parameters of the problem, the method of calculation, optimization criteria etc.). DSS was used to research fullerenes C_{60} , C_{70} , C_{76} , C_{82} .

Keywords: fullerene molecules, semiclassical model, DSS, eigenstates, icosahedral symmetry.

Fullerenele reprezintă o familie de molecule alcătuite din atomi de carbon care sunt plasați în vârfurile unui icosaedru trunchiat și sunt uniți între ei prin legături simple și duble (*a se vedea* Fig.1). Denumirea moleculei vine de la numele unui arhitect american care folosea structuri similare în arhitectură. Numele său este R.Buckminster Fuller, de unde și denumirea moleculei – buckminsterfulleren, sau fulleren.

Dintre toate structurile de fullerene ce au o stabilitate superioară se caracterizează molecula C_{60} , la care se face referință adesea ca fiind cea de-a treia stare a carbonului după diamant și grafit. Proprietățile electrice, optice și mecanice ale fullereneilor în stare condensată atrag atenția atât prin bogatul evantai de fenomene fizice care au loc în fullerene, cât și prin perspectivele utilizării lor în electronică, optoelectronică și în alte domenii ale tehnicii, inclusiv computere moleculare [5].

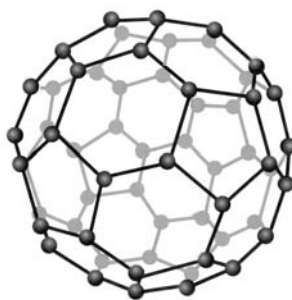


Fig.1. Structura moleculei de fulleren.

În termeni matematici, structura unui fulleren este un poliedru convex trivalent cu fețe pentagonale și hexagonale. Familia de fullerene are următoarea reprezentare: $C = \{C_{2n}, n=12, 13, 14, \dots\}$. În această familie probleme importante de studiu sunt considerate „Determinarea stărilor proprii a moleculelor de fullerene (DSPMF)” (1).

Dicționarul explicativ al limbii română definește problema ca o „chestiune în care, fiind date anumite ipoteze, se cere rezolvarea, prin calcule sau prin raționamente, a unor date (www.dexonline.ro)”.

Fiecare din elementele familiei (1) reprezintă o *problemă slab-structurată*. În literatura de specialitate mulțimea universală a problemelor este divizată în trei clase (*a se vedea*, de exemplu, https://en.wikipedia.org/wiki/Systems_analysis):

- *bine-structurate (well-structured)*, sau probleme exprimate cantitativ, în care dependențele esențiale sunt clarificate foarte bine;
- *non-structurate (unstructured)*, sau probleme exprimate calitativ, care conțin doar descrierea resurselor, a trăsăturilor și caracteristicilor mai importante, iar dependențele cantitative dintre acestea sunt complet necunoscute;
- *slab-structurate (ill-structured)*, sau probleme combinate, care conțin și elemente cantitative, dar elementele calitative demonstrează tendința de a domina.

Problemele bine-structurate pot fi reprezentate algoritmic și rezolvate efectiv în cadrul tehnologiilor informaționale convenționale bazate pe conceptele: algoritm, limbaj imperativ de programare și mașina cu arhitectură von Neumann.

Problemele slab-structurate nu pot fi realizate algoritmic, de aceea rezolvarea lor pe calculator este asistată de un *sistem suport pentru decizii (SSD)* corespunzător. Algoritmii de soluționare a unei probleme slab-structurate este construit în procesul dialogului dintre *utilizatorul final* – beneficiarul problemei, expertul domeniului de activitate/cercetare (frecvent, non-informaticianul) și SSD.

SSD sunt numite „o clasă de sisteme informatice, cu caracteristici antropocentrice, adaptive și evolutive, care integrează o serie de tehnologii informatice și de comunicații de uz general și specifice și care interacționează cu celelalte părți ale sistemului informatic global al organizației” [3].

În cadrul *tehnologiilor informaționale convenționale* rezolvarea oricărei probleme pe calculator solicită, preventiv, proiectarea de către informatician a unei *aplicații informatice*.

Aplicația informatică este o secvență de instrucțiuni concepute pentru dispozitivul de control de execuție a computerului, adică reprezintă algoritmul problemei formulate prezentat într-un *limbaj imperativ de programare*.

După ce calculatorul electronic este *dotat* cu algoritmul elaborat, beneficiarul problemei poate rezolva pe calculator problema/problemele corespunzătoare solicitării specificate. În cadrul *tehnologiilor informaționale convenționale* „*instruirea*” calculatoarelor electronice solicită resurse financiare și timp pentru proiectarea aplicațiilor informatice corespunzătoare.

În cadrul *tehnologiilor informaționale non-convenționale* – tehnologii care folosesc metodele de inteligență artificială, algoritmul problemei formulate de către beneficiar este construit automat în cadrul tehnologiei inteligente, care preventiv este instruită cu *cunoștințe* referitoare la domeniul problemei. Aceste cunoștințe sunt stocate în *baze de cunoștințe*.

În cadrul prezentei lucrări vom folosi conceptul de *SSD inteligent* – o simbioză a conceptelor: (a) *SSD* și (b) *tehnologie informațională inteligentă*. Avantajul SSD este de a asista beneficiarul la rezolvarea pe calculator a problemelor slab-structurate.

Se observă că, în cadrul dialogului, utilizatorul final ghidează SSD inteligent analogic modului în care conducătorul auto ghidează navigatorul unui automobil la rezolvarea unei probleme de deplasare din *punctul curent* în *punctul dorit*.

Domeniului de cercetare *DSPMF* este un *domeniu adaptiv*.

Aplicație informatică adaptivă este numită aplicația informatică care își schimbă automat algoritmul de funcționare și (uneori) structura ei, în scopul de a menține sau pentru a atinge o stare funcțională sau și optimă, atunci când se schimbă condițiile mediului de funcționare.

Pentru a proiecta un SSD inteligent original, vom folosi conceptul de *teorie formală (axiomatizată)* a domeniului de cercetare *DSPMF*. În acest scop propunem o metodologie originală de proiectare a unui *sistem suport pentru decizii (SSD)*, sistem inteligent adaptiv.

Teorie – formă superioară a cunoașterii științifice – model al realității obiective. Teoria formală (axiomatizată) \mathfrak{T} a unui oarecare domeniu de cercetare, conform [4], este considerată definită, dacă:

- (1) Este specificat un *alfabet finit*.
- (2) Mulțimea cuvintelor finite peste acest alfabet este numită *mulțimea expresiilor* ale teoriei \mathfrak{T} .
- (3) Există o submulțime a expresiilor, numită *mulțimea formulelor*.
- (4) În mulțimea formulelor este conturată o submulțime, numită *mulțimea axiomelor*.
- (5) Există o mulțime finită de relații stabilită între formule, numită *mulțimea regulilor de inferență*.

Alfabetul, mulțimea formulelor și mulțimea regulilor de inferență constituie limbajul teoriei formale \mathfrak{T} .

Pentru descrierea teoriei formale (axiomatizate) a domeniului de cercetare *DSPMF* vom folosi forma de descriere Backus-Naur [https://en.wikipedia.org/wiki/Backus-Naur_Form].

$\langle \text{teoria formală (axiomatizată) a DSPMF} \rangle ::= \langle \text{alfabetul DSPMF} \rangle \mid \langle \text{mulțimea cuvintelor finite peste alfabetul DSPMF} \rangle \mid \langle \text{mulțimea formulelor DSPMF} \rangle \mid \langle \text{mulțimea axiomelor DSPMF} \rangle \mid \langle \text{mulțimea regulilor de inferență ale DSPMF} \rangle$

$\langle \text{alfabetul DSPMF} \rangle ::= \langle \text{atom de carbon} \rangle \mid \langle \text{număr natural} \rangle \mid \langle \text{frecvențele proprii ale moleculelor de fullerene} \rangle$

$\langle \text{atom de carbon} \rangle ::= C$

$\langle \text{număr natural} \rangle ::= 1 \mid 2 \mid 3 \mid \dots$

$\langle \text{frecvențele proprii ale moleculelor de fullerene} \rangle ::= \omega^{(1)} \mid \omega^{(2)} \mid \omega^{(3)} \mid \dots \mid \omega^{(2n)}$

$\langle \text{mulțimea cuvintelor finite peste alfabetul DSPMF} \rangle ::= \langle \text{mulțimea moleculelor din atomi de carbon} \rangle$

$\langle \text{mulțimea formulelor DSPMF} \rangle ::= \langle \text{mulțimea cuvintelor finite peste alfabetul DSPMF, care respectă topologia fullerenă} \rangle$

$\langle \text{topologie fullerenă} \rangle ::= \langle \text{atomi care respectă simetria icosaedrală a familiei de molecule fullerene} \rangle$ [2].

Simetria fullerenului C_{60} aparține de grupul punctual I_h , cea mai superioară simetrie din grupurile punctuale existente în spațiul euclidian. Cele 12 fețe pentagonale și 20 hexagonale ale fullerenului C_{60} coincid cu cele 12 vârfuri și 20 de fețe ale icosaedrului. Fiecare atom de carbon este localizat în unul dintre cele 60 de vârfuri ale acestui icosaedru trunchiat. Fiecare punct este legat într-un plan simetric de reflexie și de-a lungul unei axe simetrice de rotație. Grupul punctual I_h icosaedral este format din 120 de elemente, este cel icosaedral I înmulțit direct cu grupul C_2 . Grupul C_2 constă doar din operatorul unitate și operatorul de inversie, fiecare dintre aceștia comutând cu cele 60 de rotații ale grupului I . Fiecare operator de rotație al icosaedrului rotește icosaedrul sub un unghi ω în raport cu o axă de simetrie de gradul 2,3 sau 5. Acest unghi de rotație ω divide rotațiile icosaedrale în 5 clase. Aceste clase sunt notate astfel: C_1 , C_R , C_{R^2} , C_r și C_i și conțin, respectiv, 1,12,12,20 și 15 operatori. Clasa C_1 conține doar operatorul unitate cu unghiul de rotație $\omega=0^\circ$. Clasa C_R și clasa C_{R^2} conțin toate rotațiile în raport cu axele de simetrie de ordinul 5 cu unghiul de rotație $\omega_R=72^\circ$ și $\omega_{R^2}=144^\circ$. Clasa C_r conține toate rotațiile în raport cu axele de simetrie de ordinul 3 cu $\omega_r=120^\circ$ și clasa C_i conține toate rotațiile în raport cu axele de ordinul 2 cu unghiul de rotație $\omega_i=180^\circ$.

Deci,

$$I = \{C_1\} \cup \{C_R\} \cup \{C_{R^2}\} \cup \{C_r\} \cup \{C_i\}$$

Elementele grupului icosaedral I_h sunt generate de toate rotațiile din I cu operatorul unitate din C_1 . Atunci, toate rotațiile grupului I se înmulțesc direct cu grupul C_2 . Astfel, în grupul icosaedral de simetrie avem 120 de operații și 10 clase (Tab.1).

Tabelul 1

Structura claselor grupului icosaedral de simetrie

Structura claselor grupului icosaedral $\{I\}$				Structura claselor grupului icosaedral $\{I\}$			
$C_1=1$							
C_R	C_{R^2}	C_r	C_i	$C_I=I$			
$\omega=72$	$\omega=144$	$\omega=120$	$\omega=180$	C_ρ	C_{ρ^2}	C_η	C_σ
R_1	R_1^2	r_1	i_1	$I R_1 = \rho_1$	$I R_1^2 = \rho_1^2$	$I r_1 = \eta_1$	$I i_1 = \sigma_1$
R_2	R_2^2	r_2	i_2	$I R_2 = \rho_2$	$I R_2^2 = \rho_2^2$	$I r_2 = \eta_2$	$I i_2 = \sigma_2$
R_3	R_3^2	r_3	i_3	$I R_3 = \rho_3$	$I R_3^2 = \rho_3^2$	$I r_3 = \eta_3$	$I i_3 = \sigma_3$
R_4	R_4^2	r_4	i_4	$I R_4 = \rho_4$	$I R_4^2 = \rho_4^2$	$I r_4 = \eta_4$	$I i_4 = \sigma_4$
R_5	R_5^2	r_5	i_5	$I R_5 = \rho_5$	$I R_5^2 = \rho_5^2$	$I r_5 = \eta_5$	$I i_5 = \sigma_5$
R_6	R_6^2	r_6	i_6	$I R_6 = \rho_6$	$I R_6^2 = \rho_6^2$	$I r_6 = \eta_6$	$I i_6 = \sigma_6$

R_1^4	R_1^3	r_7	i_7	$I R_1^4 = \rho_1^4$	$I R_1^3 = \rho_1^3$	$I r_7 = \eta_7$	$I i_7 = \sigma_7$
R_2^4	R_2^3	r_8	i_8	$I R_2^4 = \rho_2^4$	$I R_2^3 = \rho_2^3$	$I r_8 = \eta_8$	$I i_8 = \sigma_8$
R_3^4	R_3^3	r_9	i_9	$I R_3^4 = \rho_3^4$	$I R_3^3 = \rho_3^3$	$I r_9 = \eta_9$	$I i_9 = \sigma_9$
R_4^4	R_4^3	r_{10}	i_{10}	$I R_4^4 = \rho_4^4$	$I R_4^3 = \rho_4^3$	$I r_{10} = \eta_{10}$	$I i_{10} = \sigma_{10}$
R_5^4	R_5^3	r_1^2	i_{11}	$I R_5^4 = \rho_5^4$	$I R_5^3 = \rho_5^3$	$I r_1^2 = \eta_1^2$	$I i_{11} = \sigma_{11}$
R_6^4	R_6^3	r_2^2	i_{12}	$I R_6^4 = \rho_6^4$	$I R_6^3 = \rho_6^3$	$I r_2^2 = \eta_2^2$	$I i_{12} = \sigma_{12}$
		r_3^2	i_{13}			$I r_3^2 = \eta_3^2$	$I i_{13} = \sigma_{13}$
		r_4^2	i_{14}			$I r_4^2 = \eta_4^2$	$I i_{14} = \sigma_{14}$
		r_5^2	i_{15}			$I r_5^2 = \eta_5^2$	$I i_{15} = \sigma_{15}$
		r_6^2				$I r_6^2 = \eta_6^2$	
		r_7^2				$I r_7^2 = \eta_7^2$	
		r_8^2				$I r_8^2 = \eta_8^2$	
		r_9^2				$I r_9^2 = \eta_9^2$	
		r_{10}^2				$I r_{10}^2 = \eta_{10}^2$	

Operatorii grupului și structura claselor grupului I_h sunt prezentate în Tabelul 2. Din tabelul Kelley pentru operațiile din primele 5 clase se observă că orice operație de acolo poate fi generată doar de 2 operații: r_1 (rotirea cu 120°) și i_{11} (rotirea cu 180°). Prin urmare, reprezentările oricărei operații de aici se vor exprima prin reprezentările acestor două operații generatoare. Reprezentările ireductibile generatoare au fost prezentate de David E. Weeks și William G. Harter în [1]. Reprezentările ireductibile ale grupului I_h sunt: $A_u, A_g, T_{1u}, T_{1g}, T_{3u}, T_{3g}$ și H_u, H_g de dimensiunile 1,1,3,3,3,3,4,4 și 5,5 respectiv.

Tabelul 2

Operatorii grupului și structura claselor grupului I_h

	C_1	C_R	C_{R2}	C_r	C_i	C_1	C_p	C_{p2}	C_n	C_σ
A_g	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
T_{1g}	3	G^+	G^-	0	1	3	G^+	G^-	0	-1
T_{3g}	3	G^-	G^+	0	-1	3	G^-	G^+	0	-1
G_g	4	-1	-1	1	0	4	-1	-1	1	0
H_g	5	0	0	-1	1	5	0	0	-1	1
A_u	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
T_{1u}	3	G^+	G^-	0	-1	-3	$-G^+$	$-G^-$	0	1
T_{3u}	3	G^-	G^+	0	-1	3	$-G^-$	$-G^+$	0	1
G_u	4	-1	-1	1	0	-4	1	1	-1	0
H_u	5	0	0	-1	1	-5	0	0	1	-1

$\langle \text{mulțimea axiomei DSPMF} \rangle ::= \langle \text{familia moleculelor de fullerene, formule DSPMF alcătuite din } i \text{ atomi de carbon, unde: } i = 2n, n \geq 12 \rangle$

Moleculele de fullerene sunt *sisteme complexe*.

Un *sistem complex* se referă la orice sistem informatic ce conține un număr mare de entități (agenți, procese etc.) interdependente ce interacționează. Principalele proprietăți ale sistemelor complexe includ *emergența, autoorganizarea și adaptabilitatea*. În sistemele complexe se manifestă fenomenul sinergetic,

adică de asociere a mai multor subsisteme, care desfășoară activități simultane. Un sistem complex demonstrează unele abilități ale sistemului – abilități care nu sunt întâlnite la elementele sistemului.

\langle mulțimea regulilor de inferență ale DSPMF $\rangle ::= \langle$ hamiltonianul oscilațiilor \rangle , \langle ecuațiile Hamilton clasice \rangle ,
 \langle frecvențele proprii ale experimentelor finalizate la moment \rangle
 \langle hamiltonianul oscilațiilor $\rangle ::= H(\alpha=x,y,z, \Delta R_\alpha(l), P_\alpha(l), K_{\alpha\alpha}(l,l'))$

$$\text{unde } H(\alpha=x,y,z, \Delta R_\alpha(l), P_\alpha(l), K_{\alpha\alpha}(l,l')) = \sum_{l,\alpha} \frac{P_\alpha^2(l)}{2M_l} + \frac{1}{2} \sum_{l,l',\alpha,\alpha'} K_{\alpha\alpha'}(l,l') \Delta R_\alpha(l) \Delta R_{\alpha'}(l'),$$

$\alpha=x,y,z$, $\Delta R_\alpha(l)$ sunt deplasările de la poziția de echilibru a atomului l , $P_\alpha(l)$ – impulsul atomului l , iar $K_{\alpha\alpha'}(l,l')$ se numește matricea dinamică a sistemului.

$$\langle$$
 ecuațiile Hamilton clasice $\rangle ::= \langle \Delta \dot{R}_\alpha(l) = \frac{\partial H}{\partial P_\alpha(l)} = \frac{P_\alpha(l)}{M_l} \rangle | \langle \dot{P}_\alpha(l) = -\frac{\partial H}{\partial \Delta R_\alpha(l)} = -\sum_{l',\alpha'} K_{\alpha\alpha'}(l,l') \Delta R_{\alpha'}(l') \rangle,$

unde $K_{\alpha\alpha'}(l,l')$ este o matrice reală.

$$\langle$$
 frecvențele proprii ale experimentelor finalizate la moment $\rangle ::= \{\omega_{2n,\text{exp}}^{(i)} \mid n \geq 13\}.$

Utilizatorul final poate, independent de informatician, să adapteze SSD inteligent la cercetarea oricărei molecule de fullerene (*a se vedea* Fig.2). Extinderea sistemului se face declarând în sistem un nou model de moleculă de fullerene. Operațiunea solicită numărul de identificare – n .

Ajustarea modelului specific al moleculei de fullerene se face folosind \langle frecvențele proprii ale experimentelor finalizate la moment \rangle .

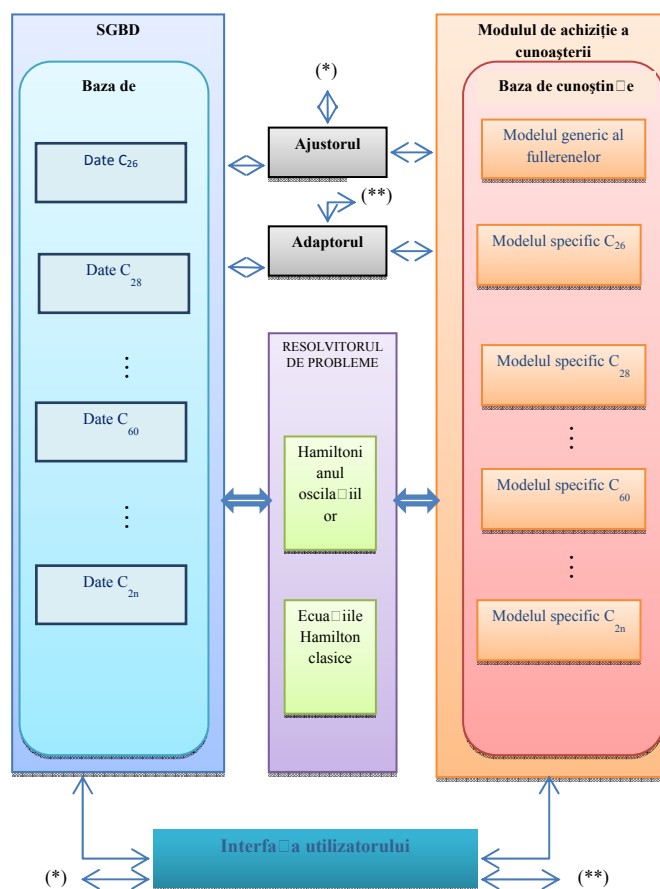


Fig.2. Structura SSD inteligent adaptiv pentru determinarea stărilor proprii ale moleculelor de fullerene.

Rezultate și concluzii

Rezultate în proiectarea SSD inteligent adaptiv

1. A fost elaborată o metodologie originală de proiectare a SSD inteligente adaptive pentru asistența utilizatorilor finali în soluționarea *familiei problemelor de determinare a stărilor proprii ale moleculelor de fullerene*.
2. Metodologia propusă utilizează conceptele: *problemă, problemă bine-structurată, problemă slab-structurată, sistem suport pentru decizii, aplicație inteligentă, familie de fullerene, familia problemelor de determinare a stărilor proprii ale moleculelor de fullerene, teorie formală (axiomatizată) a domeniului de cercetare*.
3. Familia problemelor de determinare a stărilor proprii ale moleculelor de fullerene este o familie infinită (numărabilă) de probleme. Elementele acestei familii sunt probleme slab-structurate.
4. Modelul matematic adaptiv de soluționare pe calculator a *problemelor de determinare a stărilor proprii ale moleculelor de fullerene* propus include următoarele componente: *alfabetul domeniului de cercetare, modelul abstract al familiei de fullerene, o familie infinită (numărabilă) de modele specifice ale fullereneilor, motorul inferențial, un rezolvitor de probleme care realizează automat pe calculator procesul de determinare a stărilor proprii ale moleculelor de fullerene folosind hamiltonianul oscilațiilor și ecuațiile Hamilton*.
5. Utilizatorul final poate ajusta modele specifice ale fullereneilor cercetate folosind rezultatele experimentale acumulate la moment în sistem.
6. Hamiltonianul oscilațiilor, ecuațiile Hamilton, modelele specifice, frecvențele, rezultatele experimentale menționate în pct.5 sunt comportamente ale *bazei de cunoștință* a SSD inteligent.
7. Astfel, modelul SSD inteligent expus reprezintă un sistem software efectiv pentru adaptarea/extinderea SSD pentru asistența utilizatorului final la cercetarea oricărui element din familia universală (infinită, numărabilă) a fullereneilor.
8. SSD a fost folosit la cercetarea fullereneilor C_{60} , C_{70} , C_{76} , C_{82} .

Bibliografie:

1. DAVID, E.W., WILLIAM, G. Harter. Rotation-vibration spectra of icosahedral molecules. In: *J. Chem. Phys.*, 1989, vol.90, p.4744-4771.
2. ENACHI, V. CIOBU, V. Modelul semiclassical și metoda numerică de evaluare a proprietăților electron-fononice în fullerenul C_{60} . În: *Analele Științifice ale USM. Seria „Științe fizico-matematice”*. Chișinău, 1999, p.117-118.
3. FILIP, F.G. *Sisteme suport pentru decizii*. Ed. a II-a. București: Editura Tehnică, 2007. 363 p.
4. МЕНДЕЛЬСОН, Э. *Введение в математическую логику*. Москва: Наука, 1971. 320 с.
5. PUENTE, F.L., NIERENGARTEN, J.-F. *Fullerenes: Principles And Applications (RSC Nanoscience & Nanotechnology)*. Royal Society of Chemistry. 1 edition, 2007. 410 p.

Prezentat la 07.04.2015