



Результаты, представленные в таблице 1, отражают значительное преимущество метрики сравнения на основе критерия вложенности перед мерами схожести, предложенными в работах [3, 4], заключающееся в решении проблемы, связанной с неоднозначностью выбора элементарной ячейки. Требование совмещения двух решёток затрудняет задачу относительно применения метрики, поскольку в отдельных случаях посредством сортировки параметров векторы трансляции не совмещаются. Метод «сортировки» решает проблему совмещения примерно в 72% случаев. Для достижения гарантии совмещения векторов требуется метод, который планируется разработать в рамках дальнейших исследований.

#### Заключение

Разработанная метрика сравнения кристаллических решёток, основанная на критерии вложенности одной решётки в другую, лучше справляется с задачей идентификации решёток, чем описанные меры схожести параметров элементарных ячеек. При помощи данной метрики в большинстве случаев решается проблема неоднозначности выбора элементарной ячейки Браве.

В настоящей работе был предложен метод совмещения векторов трансляции посредством построения элементарной ячейки Браве по отсортированным параметрам ячейки. В отдельных случаях метод некорректно совмещает векторы трансляции. Поэтому, в дальнейшем предполагается построение модифицированного алгоритма, который будет гарантировать совмещение векторов трансляции, а, соответственно, сама метрика будет для всех возможных эквивалентных решёток устанавливать их тождественность.

#### Благодарности

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках реализации мероприятий Программы повышения конкурентоспособности СГАУ среди ведущих мировых научно-образовательных центров на 2013–2020 годы; грантов РФФИ 14-01-00369-а, 14-07-97040-р\_поволжье\_а; программы № 6 фундаментальных исследований ОНИТ РАН «Биоинформатика, современные информационные технологии и математические методы в медицине» 2015 г.

#### Литература

1. Кларк, Э.Р. Микроскопические методы исследования материалов / Э. Р. Кларк, К. Н. Эберхардт. – М.: Техносфера, 2007. – 367 с.
2. Широканев, А.С. Анализ идентификации трёхмерных моделей кристаллических решёток при помощи мер схожести множеств / Широканев А.С., Кириш Д.В., Куприянов А.В. // XIII Королёвские чтения, С 08-10-2015 по 06-10-2015, Самара, Издательство Самарского государственного аэрокосмического университета, 2015 г. – С. 141-142.
3. Куприянов А.В. Оценка меры схожести кристаллических решеток по координатам их узлов в трехмерном пространстве [Текст] / А.В. Куприянов, Д.В. Кириш // Компьютерная оптика. – 2012. – Т. 36, № 4. – С. 590-595.



4. Кириш Д.В. Идентификация кристаллических решёток на основе оценивания параметров элементарных ячеек // Вестник Самарского государственного аэрокосмического университета. 2014. – № 3 (45). – С. 130-137.

5. Кириш Д.В., Куприянов А.В. Применение фундаментального метрического тензора в задаче структурной идентификации трёхмерных кристаллических решёток // Сборник статей по результатам XX Байкальской Всероссийской конференции "Информационные и математические технологии в науке и управлении". 2015. – Т. 1. – С. 50-57.

6. Кириш Д.В. Идентификация кристаллических решёток на основе сравнения объёмов ячеек Вигнера-Зейтца // Распознавание - 2013, С 17-09-2013 по 20-09-2013, Курск, Издательство Юго-Западного государственного университета, 2013 г. – С. 143-145.

7. Кириш Д.В. Параметрическая идентификация кристаллических решёток на основе оценивания параметров элементарных ячеек Браве и Вигнера-Зейтца // 64 Молодёжная научная конференция, С 08-04-2014 по 10-04-2014, Самара, Издательство Самарского государственного аэрокосмического университета, 2014 г. – С. 39-40.

Д.Е. Яблоков

#### УНИВЕРСАЛЬНАЯ МОДЕЛЬ ДАННЫХ КАК СРЕДСТВО КЛАССИФИКАЦИИ ПРИ РЕШЕНИИ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИХ ЗАДАЧ

(Самарский национальный исследовательский университет  
имени академика С.П. Королёва)

С всё более глубоким проникновением компьютеров во все сферы научной деятельности, программные системы становятся всё более простыми для использования специалистами, но сложными по внутренней архитектуре. При этом задачи, решаемые современной наукой и современными технологиями, также значительно усложняются. Исследователям, проводящим эксперимент, необходимо получать и обрабатывать достоверную и полную, относящуюся к научным проблемам, информацию, но на процесс подобных исследований негативно влияют обстоятельства, требующие изменения структур хранения данных об исследуемой предметной области или решаемой задаче. Среди них: необходимость тщательного подбора в соответствии с форматом хранения экспериментальных данных, проведение комплексных исследований с использованием разнотипной исходной информации и, как следствие, необходимость ее интерпретации или нормализации для использования в рамках эксперимента. Преодолеть вышеуказанные недостатки можно осуществив выход на качественно новый уровень разработки программного обеспечения подобного класса. Необходимо создание универсальной модели хранения и обработки разнородной информации, которая могла бы служить основой для построения различных информационно-вычислительных систем и формирования среды накопле-



ния формализованных данных для их дальнейшего применения в процессе расчетов, диагностики, прогнозирования или идентификации в любых областях экспериментальных наук.

Классификация является наиболее простой и одновременно наиболее часто решаемой задачей универсальной модели хранения данных. Результат проведения классификации – это обнаружение признаков, характеризующих группы исследуемых объектов как классы, к которым, по этим признакам, можно отнести новый объект, сохраняя общую концепцию, определяющую сходства и различия, а также другие особенности, уже классифицированной или вновь поступающей и анализируемой информации.

Объекты любого типа могут быть описаны в терминах некоторой упрощенной модели данных основными понятиями которой являются сущности и атрибуты (рис. 1). Атрибуты, в этом случае, представляют собой определенные лексические единицы или дескрипторы служащие для описания основного смыслового значения ключевых понятий рассматриваемой предметной области.

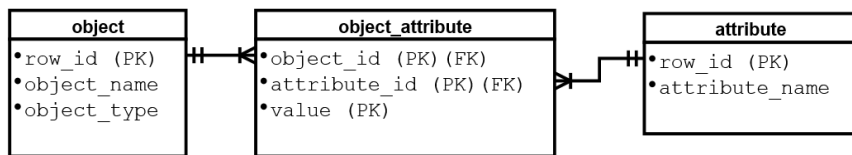


Рис. 9. Связь сущностей и атрибутов

Когда подобные понятия определены, то несложно перейти к более конкретному описанию, распространяя семантику выбранной концептуальной модели на отношения между сущностями и атрибуты отношений (рис. 2).

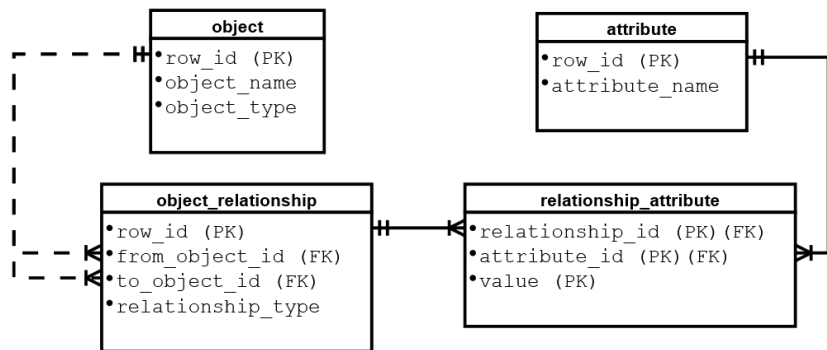


Рис. 10. Отношения сущностей и атрибуты отношений



Этот пример является очень упрощенным, но, в тоже время, он может быть достаточно общим, чтобы поддерживать большинство приложений и обеспечивать добавление данных любого типа без указания конкретных имен таблиц или полей, которые необходимы при использовании реляционной модели данных в чистом виде. В дополнение к этому важно отметить, что при использовании универсальной модели становится возможным ввод информации структура которой не определена заранее, а изменение структурных связей типа «сущность-атрибут», «сущность-сущность» или «отношение-атрибут» может производиться во время работы приложения.

По сути, классификацией является любое системное распределение объектов, явлений или понятий по каким-либо существенным признакам, выбранным для удобства их представления и обработки. Таким образом, классифицированная информация может быть представлена как упорядоченное по некоторому принципу множество абстрактных или конкретных сущностей, которые имеют сходные классификационные признаки (одно или несколько свойств), отобранные для определения критериев общности в описании, поведении или каких-либо других измерениях исходных неструктурированных данных.

Обычно инструменты классификации разделяют по способу их воздействия на классифицируемый элемент информации. Например, возможна организация естественной классификации, которая может проводиться по существенным признакам, характеризующим общность предметов, понятий или явлений. Предметная область, при этом, описывается элементарными единицами данных, соответственно относящихся к некоторым примитивам, перечень которых априори установлен (рис. 3). Основными понятиями при этом являются: «Мета-тип», «Тип экземпляра», «Экземпляр», «Иерархическая связь» и т.д.

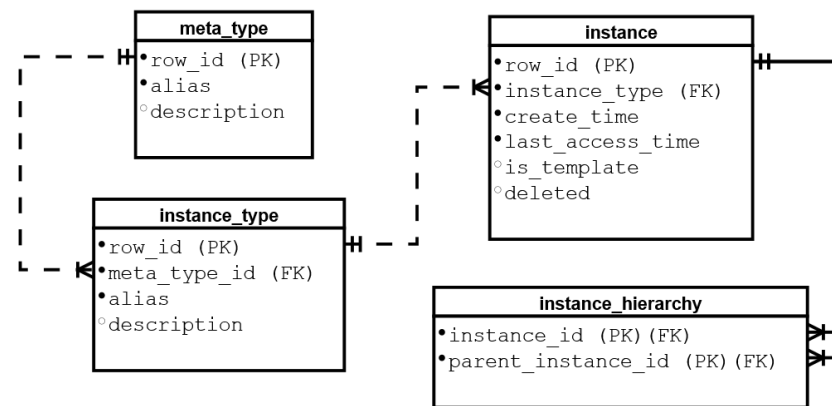


Рис. 11. Типизация данных



Как известно, терминологический и понятийный аппараты в кристаллохимии тесно связаны с определениями из теории графов, что позволяет, используя соответствующие абстракции описывать кристаллохимические данные. Посредством взаимосвязанных понятий из области химии и дискретной математики можно проводить классификацию как базовых элементов, таких как атом, так и более сложных, таких как молекулы, кольца, лиганды, сетки и т.п. Применяя такую классификацию, для приложений хранения и обработки кристаллографической информации данные о молекуле, как о совокупности атомов, могут быть представлены в виде пространственного графа, т.е. непустого множества вершин и множества его двухэлементных подмножеств – ребер.

Также возможно применение искусственной или вспомогательной классификации, которая производится по внешнему или стороннему признаку и служит для придания множеству исследуемых элементов данных необходимого критерия упорядоченности. Такая классификация легко может быть выражена через категорирование, когда категории обеспечивают необходимый уровень косвенности, при определении критериев общности для элементов информации вне зависимости от их принадлежности к конкретному классу. Сущность может быть связана с одной или несколькими категориями, что делает возможным при анализе или декомпозиции получение представления о сущности в терминах множества связанных с ней категорий. Основными понятиями при этом становятся: «Тип категории», «Категория», «Подчиненная категория» и «Связная категория» (рис. 4).



### Литература

1. Блатов В.А. Методы топологического анализа атомных сеток / В.А. Блатов // Журнал структурной химии. – 2009. – № 7. – С. 166-173.
2. Фаулер, М. Архитектура корпоративных программных приложений / Мартин Фаулер – М.: Вильямс, 2007. – 544 с.
3. Эмблер, С.В. Рефакторинг баз данных: Эволюционное проектирование / С.В. Эмблер, П.Дж. Садаладж – М.: Вильямс, 2007. – 368 с.
4. Фаулер, М. Предметно-ориентированные языки программирования / Мартин Фаулер – М.: Вильямс, 2011. – 577 с.
5. Яблоков Д.Е. Парадигмы программирования / Д.Е. Яблоков // XIV МНПК Научное обозрение физико-технических наук в XXI веке. – 2015. – №2(14). – С. 94-98.
6. Rajan, K. Informatics for Materials Science and Engineering / Krishna Rajan – 2013. – 610 p.
7. Сик, Дж. С++ Boost Graph Library / Дж. Сик, Л.-К. Ли, Э. Ламсдейн – М. Питер, 2006. – 304 с.

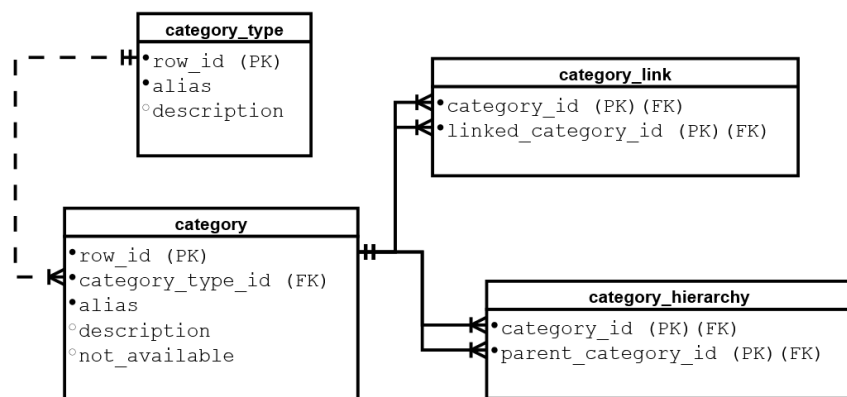


Рис. 12. Категорирование данных

Примером такой классификации может служить периодическая таблица химических элементов, где механизм категорирования может быть применен для указания принадлежности конкретного элемента к той или иной группе, например щелочных металлов, галогенов и т.п.