

## REZUMAT

### ETAPA I 2006

#### *Consolidarea cunoașterii la nivel de Consorțiu pentru materialele nanomagnetice disponibile. Fundamentarea cercetării*

Designul și fabricarea materialelor nanocristaline și amorfe cu proprietăți programate este o problemă actuală. Controlul și manipularea materiei la dimensiuni nanometrice, dimensiuni caracteristice atomilor și moleculelor a fost visul oamenilor de știință și al inginerilor de mult timp. Datorită dezvoltării științifice din ultimii ani, a creșterii *puterii de caracterizare* a materialelor prin dezvoltarea microscopiei, spectroscopiei, metodelor de difracție cât și datorită dezvoltării noilor *unelte* care permit manipularea atomilor în mod individual (microscopie de forță atomică) sau a obiectelor foarte mici (nano tweezers) noile structuri nanomagnetice au ajuns mult mai aproape de realitate. La nivel atomic forțele și interacțiunile sunt fundamentale diferite de cele de la nivel macroscopic, fapt care a condus la confuzii în elaborarea conceptelor științifice pentru o bună perioadă de timp. Nanomagnetismul include structurarea artificială a materialelor magnetice la nivel de micron și apariția spontană a entităților magnetice de tip moleculă sau *cluster*. Apare tot mai evident că particulele de dimensiuni nanometrice sunt situate la frontiera dintre magnetismul clasic și cel cuantic. În acest context soluția la problema designului programat al materialelor nanomagnetice este laborioasă, și atât de complexă încât este posibil să nu găsim metode analitice de rezolvare.

În această situație proiectul propune introducerea de noi "unelte" și anume: o metodă ce utilizează Artificial Neural Network (ANN), rețele neuronale artificiale. Pentru operarea acestora stim că odată ce avem o formă vagă a definiției unei probleme următorul pas este selectarea variabilelor de input și a răspunsului dorit. La început se folosește bunul simț pentru selecția variabilelor care par a fi relevante pentru problema discutată. Trebuie cautate variabile și condiții care apar ca relevante în cadrul problemei analizate. Trebuie cautate de asemenea și date care acoperă un spectru larg de cazuri. ***Scopul acestui proiect este de a crea premisele teoretice pentru formularea unui model teoretic și a unui instrument IT de înaltă performanță, care ulterior să permită obținerea de către experimențatori, pe baza rezultatelor proiectului, de noi materiale nanomagnetice.*** Se poate spune că materialele magnetice sunt constituite din clustere magnetice care pot fi redimensionate și rearanjate din punct de vedere al compoziției și a celorlalte proprietăți magnetice nano și mezoscopice (moment individual de cluster, anizotropie, etc.) pot fi variate independent într-o gamă de valori. Programul de sinteză virtuală și caracterizare va clarifica corelările între proprietățile fizice și magnetice ale materialelor și astfel va fundamenta designul, din punct de vedere fizico-chimic pentru materialele nanomagnetice. Ca instrument pentru soluționarea acestei probleme va fi folosită metoda cu ANN.

Aproape orice efect folosit în domeniul nano/micro depinde de proprietățile materialului. Posibilitatea de a sintetiza blocuri la nivel nanometric cu dimensiune și compoziție precis controlate și apoi asamblarea acestora în structuri mai mari cu proprietăți și funcții unice va revoluționa, probabil - largi segmente ale industriei producătoare de materiale. Cea mai importantă caracteristică a lor este dată de faptul că blocurile construite la nivel nanometric oferă proprietăți îmbunătățite și funcționalități care nu sunt disponibile în materialele și dispozitivele obișnuite – proprietăți derivate din comportamentul nou, dat de construcția la nivel nanometric. De exemplu, proprietățile de undă ale electronilor în stare condensată sunt influențate de variațiile structurale la nivel nanometric. Mai mult, prin sablonizarea materiei la nivel nanometric este posibilă variația proprietăților fundamentale ale materialelor, de exemplu temperatura de topire, magnetizarea, culoarea etc, fără a se schimba însă compoziția chimică.

În consecință, materialele macroscopice și structurile cu noi proprietăți pot fi obținute prin noi metode și reguli de design.

#### Studiul comparativ al algoritmilor de data clustering

*Clusteringul* este o operație fundamentală pentru data mining. Clusteringul generalizează micro-date și le organizează în mai multe clase omogene, determinând astfel o formă a conceptelor și o operație de generalizare care ocupă un loc central în descoperirea de noi cunoștințe. Cantitățile foarte mari de date necesită instrumente automate pentru analiză și în consecință, instrumentele de clustering prezintă o importanță deosebită. În acest context se analizează comparativ cele mai cunoscute metode iterative de clustering utilizate în cadrul data mining, atunci când se lucrează cu mulțimi de date de mari dimensiuni (K-means, CLARANS, BIRCH, STING). În afara ideii constructive de bază a algoritmilor discutați, analiza comparativă vizează complexitatea referitoare la timpul de execuție și resursele de memorie necesare, scalabilitatea, dimensionalitatea, geometria clusterelor, sensibilitatea la zgomote și potențialul de paralelizare din perspectiva unei implementări distribuite, evidențindu-se avantajele și dezavantajele acestor metode. Evaluarea are ca scop și extragerea unui grup de metode candidate pentru a fi folosite pentru hibridizarea unui algoritm genetic pentru data clustering.