

ХАРЬКОВСКИЙ ОРДЕНА ТРУДОВОГО  
КРАСНОГО ЗНАМЕНИ  
ИНСТИТУТ РАДИОЭЛЕКТРОНИКИ  
ИМЕНИ АКАДЕМИКА М. К. ЯНГЕЛЯ

---

На правах рукописи

АСЕЕВ

Георгий Георгиевич

ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНАЯ СИСТЕМА  
УПРАВЛЕНИЯ ЗНАНИЯМИ  
О СВОЙСТВАХ НЕОРГАНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ

Специальность: 05.25.05 - Информационные системы и  
процессы

05.17.01 - Технология неорганических  
веществ

Диссертация

в форме научного доклада на соискание  
ученой степени доктора технических наук

Харьков - 1992



00360424 (J)

1546 Работа выполнена в Харьковском научном объединении "ХАРЬКОВСКИЙ НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ЦЕНТР"

Научные консультанты:

Академик ИА Украины,  
доктор технических наук, профессор,  
лауреат Государственной премии Украины,  
лауреат премии Совета Министров СССР,  
лауреат премии им. Костандова Л. А.

Зайцев И. Д.

Доктор технических наук - Зозуля А. Ф.

Официальные оппоненты:

Академик ИА Украины,  
доктор технических наук, профессор,  
Воронов В. Г. ( Харьков )

Доктор технических наук, профессор,  
Сухоруков Г. А. ( Харьков )

Доктор технических наук, профессор,  
Шабанов - Кушнарченко Ю. П. ( Харьков )

Ведущая организация -

- Днепропетровский технологический институт

Защита состоится "26" февраля 1993 г. в 14<sup>00</sup> час.  
на заседании специализированного совета Д 068.37.01 Харьковского  
ордена Трудового Красного Знамени института радиэлектроники имени  
академика М. К. Янгеля по адресу: 310726, ГСП, Харьков, пр. Ленина, 14.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Харьковского  
ордена Трудового Красного Знамени института радиэлектроники имени  
академика М. К. Янгеля.

Доклад разослан "26" января 1993 года.

Ученый секретарь  
специализированного совета

В. И. ЛЕВЫКИН  
ЛННБ ім. В. Стефаніка  
АН УРСР

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность проблемы. В настоящее время большое внимание уделяется развитию различных автоматизированных систем: системам автоматизированного проектирования (САПР), автоматизированным системам научных исследований (АСНИ), автоматизированным системам управления (АСУ), в том числе и в таких отраслях промышленности, как химическая, металлургическая, нефтехимическая, нефтеперерабатывающая и др. Основной компонент таких систем является технологическая, в которой функционируют различные программы математических моделей описания процессов переработки технологических жидкостей. Математические модели подобного типа в своем составе используют многочисленные данные о свойствах веществ. Для успешного функционирования технологических компонент САПР, АСНИ, АСУ необходимы различные базы данных (БЗД), в том числе и о свойствах веществ, предусматривающие автоматический режим запросов и ответов.

С другой стороны во все времена свойства водных растворов электролитов вызвали интерес в области различных электрохимических и химических технологий, металлургии, биологии, медицины, геологии, океанографии, озераведении и пр., в частности, электролиты необходимы для высокоэнергетических батарей, влажных конденсаторов, гальванопокрытий, катализе с переносом фазы, электроорганическом синтезе, солнечных батареях, тонкопленочных покрытиях и т. д.

Во всех случаях необходимо знание свойств растворов электролитов. Большим препятствием для поиска свойств растворов электролитов, особенно, для специальных применений, является недостаток справочников или баз данных по электролитным растворам. Многие данные по свойствам растворов электролитов разбросаны в периодической

печати и, весьма часто, литературные исследования, занимающие много времени, не дают требуемой информации. Поэтому проектирование банков данных, включающих в себя интегрированные базы данных (БЗД) по свойствам неорганических веществ, является весьма актуальным.

Создание банков данных (БД) по свойствам веществ и материалов — важное направление развития научно-технической информации, позволяющее как качественно, так и количественно удовлетворить практически все разнообразие запросов специалистов в области естественных наук, техники и промышленности. Это достигается путем создания гибкой системы хранения и манипулирования данными в БД, обладающей возможностью их записи, многоаспектной переработки и организации их поиска и выдачи в виде массивов информации, форма которых может задаваться пользователем.

Основными предпосылками создания БД в области свойств веществ и материалов являются:

актуальная взаимосвязь разнообразных фрагментов фактографической информации по свойствам, обуславливающая пересечение информационно-интересов различных групп пользователей;

большой объем данных;

огромный технико-экономический потенциал работ по созданию, исследованию и применению материалов и веществ практически во всех промышленно развитых странах, определяющий динамику формирования потоков данных по свойствам веществ и т. д.

Весьма распространенным является факт пересечения интересов различных потребителей по свойствам и применению материалов: одни и те же свойства представляют интерес для различных областей. Например, растворы электролитов используются в химической промышленности,

радиоэлектронике, металлургической промышленности и др. отраслях. Однако, существует и объектная взаимосвязь интересов: один и тот же материал оказывается необходимым для, казалось бы, совершенно не связанных потребителей.

Таким образом, логично говорить о сети взаимосвязанных информационных потребностей в области данных о свойствах веществ. Ясно, что в условиях такого пересечения интересов различных групп потребителей данных нецелесообразно хранить информацию в виде независимых файлов. Наиболее рациональным типом информационной системы в таких условиях оказывается БД.

Под БД по свойствам веществ понимается совокупность данных большого объема и сложной структуры, а также комплекса средств их обработки и обслуживания, обеспечивающих выполнение заданного набора требований и ограничений. Эти требования охватывают различные аспекты данных, программ функционирования БД и, в частности, включают: разнообразие данных и их связуемость в произвольные структуры; избыточность данных; независимость данных; возможность взаимодействия с различными пользователями; возможность защиты от случайного или преднамеренного разрушения информации и соответственно обеспечение целесообразной корректировки данных; обеспечение секретности; технологичность обработки данных и т. д. Обработка данных должна включать обновление, поддержание, преобразование для запросов, изменяющихся в очень широких пределах. Комплекс средств обработки и обслуживания данных включает алгоритмы, специализированные языки, программные и технические средства.

БД - это, по-существу, проблемно-ориентированные автоматизированные информационно-поисковые системы с элементами получения но-

вых знаний.

Область свойств веществ имеет ряд специальных задач, представляющих большой теоретический и практический интерес, например:

идентификация веществ и материалов;

создание материалов с заданными свойствами;

оптимальный выбор материалов при проектировании устройств и технологических процессов;

оптимальное планирование эксперимента по исследованию свойств;

дальнейшее развитие моделей предметной области (ПО) и соответствия систем понятий предметной области, в которой решаются задачи, и систем понятий формальных моделей, на основе которых решаются задачи для получения новых знаний;

углубление интеллектуального интерфейса.

Естественно, общие программы БД, рассчитанные на широкий круг специальных задач в области свойств веществ и материалов. Эти задачи будут решаться программами пользователей. Однако, несмотря на спектральный характер этих задач, они не останутся "изолированными островками" в потоке массовых задач. По-видимому будут иметь место два встречных процесса: дифференциации и типизации задач и типизации программ пользователей для решения родственных задач в области свойств веществ и материалов. При этом, имеется в виду, многоаспектная типизация. Например, задача идентификации веществ может рассматриваться в рамках содержательного аспекта. В этом смысле можно говорить, например, о спектральных методах идентификации. С другой стороны, задача идентификации веществ является частным вариантом задачи распознавания образов. Иначе говоря, типизация за-

дач БД по свойствам веществ выходит далеко за рамки свойств веществ.

Создание гибкой системы хранения и манипулирования данными в БД достигается за счет применения понятий, инструментальных средств и методов все более высокого уровня. С другой стороны растут требования к точности представляемых данных. Для удовлетворения возникающих потребностей делаются попытки определения нового, более абстрактного уровня описания системы, называемого концептуальным.

Если раньше БД, БЗД, базы знаний (БЗ) и языки программирования давали независимые вклады в дело концептуального моделирования, то в настоящее время считается, что дальнейшие успехи концептуального моделирования возникнут из интеграции понятий, инструментальных средств и методов, предназначенных для описания системы. Под интеграцией, в широком смысле, понимают усиливающуюся коммуникацию различных исследователей, работающих в смежных областях. В некоторых случаях рассматривают интеграцию различных систем представления знаний, БЗД, а также систем программирования. Практически во всех методах построения БЗ используют понятие концептуального моделирования как средство прямого, естественного и интегрированного представления совокупности информации, необходимой для решения задачи, включающей в себя в том числе информацию:

- 1) о системе понятий предметной области, в которой решаются задачи;
- 2) о системе понятий формальных моделей, на основе которых решаются задачи;
- 3) о соответствии систем понятий п. п. 1) и 2);
- 4) о текущем состоянии предметной области;

5) о методах решения задач,

а затем приступают к проектированию различных баз данных на логическом и физическом уровнях.

Общие тенденции интеграции прослеживаются как в сфере представления знания, так и в сферах семантического моделирования данных и абстракции данных. Можно заметить все более и более настойчивые попытки обеспечить единую основу базам знаний, базам данных и языкам программирования.

Представленная точка зрения носит традиционный характер и в самой незначительной степени затрагивает проблему представления знаний о предметной области. Между тем именно эта проблема находится в центре внимания исследователей, ищущих новую технологию моделирования ПО с привлечением вычислительной техники, особенно в области данных о свойствах веществ и материалов. Практически работающие исследователи технологию моделирования ПО часто называют концептуальным моделированием, а задачу проектирования интегрированных баз данных — концептуальным проектированием. Следует отметить, что общепринятой методологии проектирования еще не выработано, особенно в такой области, как интегрированные БЗД о свойствах веществ. Можно установить точку зрения на проектирование банка данных (БД), которую можно сформулировать в виде тезиса, что банк данных является верхним уровнем управления по отношению к базе знаний и базе данных.

В настоящее время под БД понимают автоматизированную информационную систему, под БЗД — отображенную предметную область, а БЗ — возникли в результате активного поиска новых (интегрированных, концептуальных и подобных им) методов проектирования БЗД.

Указанные факторы делают чрезвычайно актуальной проблему разработки интегральной интеллектуальной системы свойств веществ и растворов.

Исследования, проведенные в работе по созданию интегральной интеллектуальной системы свойств веществ и растворов, выполнены в соответствии с "Научно-технической программой Государственной Службы Стандартных Справочных Данных (ГСССД) "Водные растворы": Обеспечить народное хозяйство данными о свойствах водных растворов в широком интервале температур и давлений", утвержденной АН СССР 25 ноября 1987 года.

Цель и задачи исследования. Целью работы является:

- решение научной проблемы создания системы и форм представления знаний о предметной области (ПО);
- вывод достоверных и новых знаний о ПО на основе развития новой технологии обработки информации, ориентированной на данные;
- создание нового класса банков данных, являющихся верхним уровнем управления по отношению к экспертной системе (базе правил), базе знаний, базе данных и базе методов, имеющего возможность применения в различных структурах автоматизированных систем САПР, АСНИ, АСУ в автоматическом режиме запросов и ответов и обслуживания пользователей-людей в автоматизированном режиме запросов и ответов в терминах и понятиях предметной области.

Для достижения поставленной цели в работе решены следующие основные задачи:

- теоретическое обобщение, систематизация принципов и методов построения в существующих и создаваемых БД по свойствам веществ для различных автоматизированных систем САПР, АСНИ, АСУ информации о те-

хнологии обработки данных в БЗД и БЗ, структуры диалога, форм представления информации и т. д., проблемы интеллектуального интерфейса и интеллектуализации ЭВМ;

-теоретическое обобщение и, при необходимости, разработка новых, форм представления знаний о ПО;

-разработка теории передачи информации и управления между различными формами представления знаний (семантические сети → правила продукций → доска объявлений → сети фреймов, а также между разрабатываемой и поисковой формой обработки знаний) и механизмов правил вывода;

-создание научных основ применения среды программирования для автоматического синтеза алгоритма решения задачи, построенного из элементарных процедур, программных модулей или пакетов программ;

-разработка методов и средств хранения больших объемов знаний и эффективной работы с ними;

-обеспечение для пользователя возможности постановки задачи для ЭВМ путем сообщения только условий ее решения без задания программы решения;

-возможность получения для пользователя новых знаний о ПО.

При решении поставленных задач автор использует методы исследования и математический аппарат, базирующиеся на разделах алгебры логики предикатов, информации, систем счисления, кодирования, чисел, логики и алгоритмов, теории представления знаний, а также использует разработанный математический аппарат передачи информации и управления между различными формами представления знаний и обоснования применения средств вычислительной среды для синтеза алгоритма решения задачи.

Основное научное содержание. Автор защищает:

1. Методологию концептуального проектирования системы знаний о свойствах веществ и материалов, в которой интегрированы достижения различных исследователей предметной области, систем представления знаний, баз данных и систем программирования.

2. Теорию передачи информации и управления между различными формами представления знаний (семантические сети → правила продукций → доска объявлений → сети фреймов, а также между разрабатываемой и поисковой формой обработки знаний).

3. Теорию обоснования среды программирования, позволяющей в диалоге с пользователем произвести автоматический синтез программы решения задачи на основе введенных в вычислительную систему исходных данных и состоящей из элементарных процедур, программных модулей или пакетов программ.

4. Принципы отображения проблемной среды в ее семиотической модели, т. е. концептуальное моделирование проблемной области о свойствах веществ и материалов, развивающие методы работы со знаниями, их представление, хранение, преобразование и т. п., с целью получения новых знаний на каждом уровне проектирования базы знаний.

5. Целостную технологию работы со знаниями о свойствах веществ и материалов, в состав которой входит развитый язык представления знаний, методика и средства автоматизированного построения моделей проблемной среды, методы и средства хранения больших объемов знаний и эффективной работы с ними.

6. Функционально-ориентированные компоненты интеллектуальной системы о свойствах веществ и материалов: решатели, графические системы, диалоговые подсистемы, статистические, математические и

физико-химические модули, компоновщики метода расчета, ориентированные на получение новых знаний о свойствах веществ в составе интегрального банка данных.

7. Проблемно-ориентированную интеллектуальную систему нового класса в виде банка данных о свойствах веществ и материалов, являющегося верхним уровнем управления по отношению к экспертной системе (базе правил), базе знаний, базе данных и базе методов, имеющего возможность применения в различных структурах автоматизированных систем САПР, АСНИ, АСУ в автоматическом режиме запросов и ответов и обслуживания пользователей-людей в автоматизированном режиме запросов и ответов, ориентированного на решение задач определенного типа, адаптируемого внутри этого круга к конкретной модели предметной области, на основе выбора необходимой конфигурации базовых функционально-ориентированных компонентов интегральной интеллектуальной системы.

8. Новые формы представления знаний: многослойные семантические сети и многослойная доска объявлений, позволяющие наиболее полно передать специфику ПО и наиболее просто реализовать правила вывода.

Достоверность результатов подтверждается корректными обоснованиями, строгими математическими выводами и доказательствами; получением из вновь разработанных общих научных положений широко известных частных результатов; результатами промышленных разработок, опытом практического внедрения предложений; ясной физической интерпретацией полученных результатов и их непротиворечивостью существующим представлениям о новой технологии обработки информации, ориентированной на данные.

Практическая ценность и реализация результатов работы.

Математическое и программное обеспечение базы знаний по свойствам веществ было передано и применяется в различных структурах САПР и АСНИ следующих организаций: Гипрохимреактив, г. Харьков; НФ ГИАП, г. Новомосковск; КАЗНИИГИПРОФОСФОР, г. Чимкент; Гипрополимер, г. Дзержинск; филиал Гипрохим, г. Сумы; ВСФ Госниихлорпроект, г. Иркутск; ГосНИИметанолпроект, г. Северодонецк; ВИПХСЭР, г. Киев, а также внедрены в НПО Карбонат, г. Харьков. Общий экономический эффект от внедрения составляет 844,8 тыс. руб. в ценах 1990 г.

Принципы построения интегральной интеллектуальной системы свойств веществ и растворов внедрены в учебные процессы Киевского политехнического института, Одесского политехнического института, Украинского заочного политехнического института, Харьковского политехнического института.

Работа включалась в сообщения о результатах важнейших научно-исследовательских разработок организаций и учреждений УССР за 1988, 1989 и 1990 г. г., издаваемые научным советом по проблеме "Кибернетика" АН УССР.

Фактографическая база данных используется ИОНХ АН бывшей СССР для создания национальной базы данных по свойствам водных систем в соответствии с НТП ГСССД Госстандарта и АН бывшей СССР.

Результаты разработки системы теоретических знаний по свойствам веществ концентрированных растворов электролитов запрашивались и используются учеными, работающими в: университете им. Коперника, Польша; университете им. Мартина-Лютера, Виттенберг, ФРГ; университете Манитоба, Виннипег, Канада; Национальном университете Йогоама, Япония; отделения электроники университета Сарагоса,

Испания: института химической технологии, Чехо-Словакия: университете Комбра, Португалия.

По результатам диссертационной работы в издательстве "Химия" издана монография: "Машинный расчет физико-химических параметров неорганических веществ", 256 с., в соавторстве с Зайцевым И. Д. и Зозудей А. Ф. и справочник "Физико-химические свойства бинарных и многокомпонентных растворов неорганических веществ", 416 с., в соавторстве с Зайцевым И. Д.

По предложению одного из крупнейшего издательства в мире: Hemisphere Publishing Corporation, USA, New York, справочник, являющийся базой данных и базой знаний по свойствам растворов электролитов с увеличением объема до 100 печ. листов издан в 1992 г. в США, согласно контракту N 9-89-023-639-070 от 7 марта 1989 г., для англо-язычной группы стран.

Апробация работы. Основные положения и результаты диссертационной работы докладывались, обсуждались и получены положительные оценки на :

-республиканском семинаре "Интегрированные автоматизированные системы проектирования объектов химической технологии", (Киев, 1983);

-республиканском семинаре "Системы автоматизации проектирования химических производств", (Харьков, 1985);

-республиканском семинаре "Интенсификация производственных процессов на базе внедрения ГПС и прогрессивной технологии", (Киев, 1987);

-республиканском школе-семинаре "Математическое обеспечение ЭВМ и систем", (Алушта, 1988);

6-Всесоюзной конференции " Математические методы в химии ",  
(Новочеркасск, 1989);

-семинарах Научного Совета АН УССР по проблеме "Кибернетика",  
(Харьков, 1988- 1991);

-всесоюзном семинаре "Проблемы использования материальных и  
энергетических ресурсов, состояние охраны природы и пути достиже-  
ния норм предельно допустимых концентраций выбросов на пред-  
приятиях содовой подотрасли", (Черкассы, 1991).

Публикации. По теме диссертации опубликовано свыше 100 работ,  
среди которых монография и справочник, изданные в СССР и спра-  
вочник, изданный в США.

## СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

## 1. ПРЕДМЕТ ИССЛЕДОВАНИЯ, СУЩНОСТЬ НАУЧНОЙ ПРОБЛЕМЫ И ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ ИССЛЕДОВАНИЯ

Основным направлением повышения эффективности исследования, проектирования и использования технологического оборудования является дальнейшее развитие автоматизированных систем АСНИ, САПР и АСУ. Одним из основных видов обеспечений таких автоматизированных систем является информационное, включающее в себя различные банки данных. Назначение банков данных (БД) — переработка и выдача различных видов информации. Информация является объектом сбора, приема-выдачи, хранения и обработки в БД. Реализация сложных алгоритмов управления в БД связана прежде всего с подготовкой, представлением, хранением, преобразованием и переработкой больших массивов информации и знаний о предметной области (ПО) в реальном масштабе времени. Поэтому предметом исследования служат технология представления, быстрой переработки и выдачи текущих знаний и новых знаний о ПО на примере знаний о свойствах неорганических веществ. Увеличение объема и сложности решаемых алгоритмами управления задач в БД, а также необходимой возможностью применения их в различных структурах АСНИ, САПР и АСУ и возможностью использования в прикладном программном обеспечении для моделирования технологических схем, процессов и оборудования [31, 33-35, 37, 39-41, 43-46, 54-56, 60-62, 66, 71-73, 77-81, 85, 89-93, 97-107, 111], обуславливает совершенствование БД и разработку принципиально новых средств переработки и представления знаний о ПО. Следовательно, областью применения предмета исследования является новый класс БД, являющимся верхним уровнем управления по отношению к экспертной системе (базе правил), базе знаний, базе данных и базе

методов, синтезируемый на основе теоретических и практических подходов представления знаний о ПО.

Краткая характеристика предметной среды. Весь мир, который нас окружает, состоит из веществ, находящихся в одном из основных агрегатных состояний: твердое, жидкое или газообразное. Каждое агрегатное состояние состоит из веществ, обладающих определенными свойствами: плотностью, вязкостью, электропроводностью, диффузией, теплоемкостью и т. д. Каждое свойство описывается методами расчета свойств (формальными моделями предметной среды) или фактографическими данными, представляемыми в виде таблиц значений свойств, атрибутами которой являются температура и концентрация вещества. Задачей БД является переработка и выдача текущих знаний о ПО и новых знаний, отсутствующих в литературе.

Современный уровень состояния разработок в области БД о свойствах веществ и материалов и постановка задачи исследования.

Анализ литературных источников автора [1, 4, 23, 25, 48, 64, 110], а также других ученых, показал следующее:

1. Изучение существующих и создаваемых БД о свойствах веществ и материалов в качестве компоненты информационного обеспечения АСНИ, САПР и АСУ выявляет очень пеструю картину. В зависимости от структур АСНИ, САПР или АСУ, банки данных различаются своими масштабами, ориентацией, контингентом своих пользователей, характером обрабатываемой информации, режимами обслуживания пользователей, и, наконец своим аппаратурным и программным оформлением.

2. Прикладные программы оказываются существенно зависимыми от конкретных СУБД и используемых в них структур данных (фактически смена СУБД влечет за собой необходимость переписывания программ,



что является весьма трудоемкой процедурой).

3. В развитых автоматизированных системах АСНИ, САПР или АСУ нередки случаи применения нескольких баз данных, поддерживаемых одной и той же или рядом разнотипных СУБД. По мере развития систем возникают прикладные задачи, требующие одновременного использования информации, накопленной в нескольких (возможно, различных) базах данных (БЗД), что при существующих методах организации СУБД трудно реализуемо.

4. Особое место занимает проблема управления распределенными базами данных, организованными разнотипными СУБД, что практически сводит на нет организацию сети БД по свойствам веществ.

5. Отсутствует единая методологическая основа концептуального проектирования БД.

6. Отсутствует описание целостной технологии работы с данными и правилами их вывода.

7. Прикладное программное обеспечение разработанных БД ориентировано на процесс, отсутствуют системы, учитывающие требования новой технологии обработки информации, ориентированной на данные.

Исходя из перечисленных недостатков, задачей настоящей работы является разработка целостной технологии обработки, хранения и представления знаний о ПО, комплекса программных средств вычисления, связи, общения, сбора и распределения знаний о ПО, учитывающей требования новой технологии переработки информации, ориентированной на данные. Переход от технологии разработки программного обеспечения ориентированного на процесс, к разработке программного обеспечения, ориентированного на данные, приводит к концепции создания баз знаний под управлением интегрального БД и возможностью применения

его в качестве компоненты информационного обеспечения различных структур АСНИ, САПР и АСУ, в состав которой входит:

1. Методология концептуального проектирования системы знаний о свойствах веществ и материалов.
2. Теория передачи информации и управления между различными формами представления знаний и, при необходимости, разработка новых форм представления знаний.
3. Создание научных основ обоснования среды программирования, позволяющей в диалоге с пользователем произвести автоматический синтез алгоритма решения задачи.
4. Принципы отображения проблемной среды в ее семиотической модели, т. е. концептуальное моделирование проблемной области о свойствах веществ и материалов, развивающие методы работы со знаниями, их представление, хранение, преобразование и т. п., с целью получения новых знаний на каждом уровне проектирования базы знаний.
5. Целостную технологию работы со знаниями о ПО, в состав которой входит развитый язык представления знаний, методика и средства автоматизированного построения моделей проблемной среды, методы и средства хранения больших объемов знаний и эффективной работы с ними.
6. Функционально-ориентированные компоненты интеллектуальной системы о свойствах веществ и материалов: решатели, графические системы, диалоговые подсистемы, статистические, математические и физико-химические модули, компоновщики метода расчета, ориентированные на получение новых знаний о ПО в составе интегрального банка данных.
7. Проблемно-ориентированную интеллектуальную систему нового

класса в виде банка данных о свойствах веществ и материалов, являющегося верхним уровнем управления по отношению к экспертной системе (базе правил), базе знаний, базе данных и базе методов, имеющего возможность применения в различных структурах автоматизированных систем САПР, АСНИ, АСУ в автоматическом режиме запросов и ответов и обслуживания пользователей-людей в автоматизированном режиме запросов и ответов, ориентированного на решение задач определенного типа, адаптируемого внутри этого круга к конкретной модели предметной области, на основе выбора необходимой конфигурации базовых функционально-ориентированных компонентов интегральной интеллектуальной системы.

## 2. ЦЕЛОСТНАЯ ТЕХНОЛОГИЯ РАБОТЫ СО ЗНАНИЯМИ О ПРЕДМЕТНОЙ ОБЛАСТИ

Для упорядочения всех решаемых проблем, возникающих при подготовке информации о знаниях ПО для ввода их на логический и физический уровень БЗД и БЗ, проведем, исходя из характерных особенностей их постановки, классификацию и формализацию типов проблем, включая сюда и те, которые определяются неформально, в том числе аналитические и синтетические проблемы.

Проблемы, с которыми имеет дело компьютер в области данных о свойствах веществ, бывают самыми разнообразными, что зависит в первую очередь от их содержания и целей-анализ, предсказание, диагностика, проектирование, контроль, управление и другие, однако по методам представления и алгоритмам решения их можно разделить на небольшое число классов. Все проблемы можно описать формой, определяющей отношения между сущностями, являющимися объектом исследования, атрибутами, свойствами, поведением (характеристиками) в условиях

некоторой внешней среды. Иными словами, в проблеме что-нибудь одно является неизвестным—сущность, среда или характеристики, и это неизвестное должно быть получено из оставшихся двух компонентов.

В целостной технологии со знаниями о ПО под объектами будем понимать методы расчета физико-химических свойств или таблицы фактографических данных; под характеристиками—полученные свойства в диапазонах температур и концентраций. В зависимости от того, что именно является неизвестным, все проблемы работы со знаниями о ПО разделяются на три класса:

Первый класс—проблемы оценки внешней среды. В проблемах этого класса заданы сущности и их характеристики и надо получить такую среду (пока неизвестную), в условиях которой сущности проявят свои характеристики. В качестве примера на рис. 2.1 показан лингвистический уровень проектирования базы знаний о ПО. К проблемам этого класса относятся блоки 1-8, описанные в работах [1, 48, 53, 63, 86].

Второй класс—проблемы анализа проблемной среды. В проблемах этого класса заданы сущности и исследуется вопрос о том, какие характеристики (неизвестные) они имеют в условиях заданной внешней среды. К проблемам этого класса относятся блоки 9-17, 19, 20, 21, описанные в работах [1, 2, 14, 50, 59, 74-76, 82, 83, 86, 94, 110].

Третий класс—синтез знаний о предметной области. В проблемах этого класса заданы требуемые характеристики и необходимо определить сущности, которые в условиях заданной среды обеспечивают получение этих характеристик. Этот класс подразделяется на две компоненты:

а) синтез знаний о ПО на лингвистическом уровне. К проблемам этой компоненты относятся блоки 22, 23, описанные в работах [2, 5, 8,

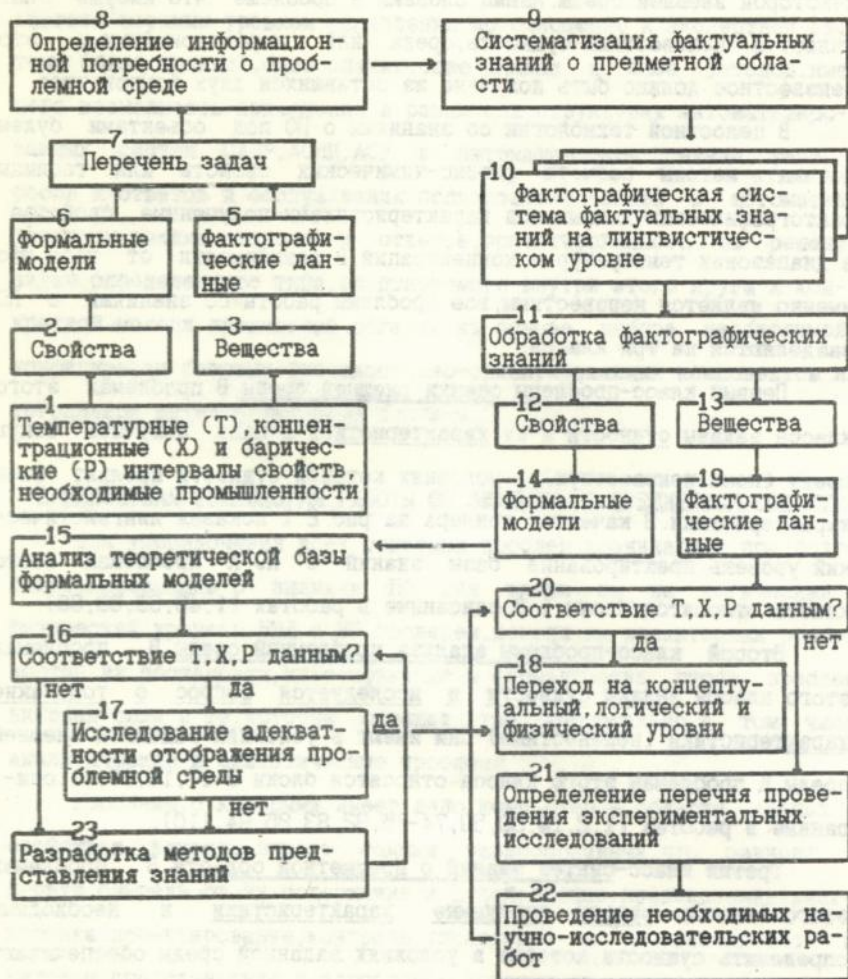


Рис. 2.1. Лингвистический уровень проектирования базы знаний о свойствах неорганических веществ

11, 17, 19, 21, 24, 26, 28-30, 32, 36, 42, 47, 49, 59, 63, 74, 83, 86];

б) синтез знаний о ПО на логическом и физическом уровнях. К проблемам этой компоненты относится блок 18, развернутое описание которого представлено в последующих разделах и описанный в работах [1, 4, 6, 7, 9, 10, 12, 13, 15, 16, 18, 20, 22, 23, 25, 27, 38, 48, 49, 51-53, 57, 65, 67-70, 84, 87, 88, 95, 96, 108, 110].

#### Учет состояния знаний пользователя

Изложенные выше методы концептуального проектирования БЗ и исследования ПО предусматривают возможности обнаружения и учета в БЗ еще не известных, новых объектов и отношений между ними, причем сами отношения в свою очередь могут рассматриваться как новые объекты, между которыми устанавливаются отношения и т. д.

При таком подходе исследование БЗ должно предусматривать прямой учет субъекта, познающего ПО в котором каждый момент времени ассоциируется со специфическим состоянием (уровнем знаний); конструктивное знание, полученное на определенной стадии, будет сохранено и в будущем, т. е. на более поздних стадиях.

Учет состояний знания пользователя. Пусть предметная область  $P$  имеет объекты  $A, B, C, \dots$ . Пусть  $T$  - совокупность отрезков времени или приобретения знаний, которые будем называть термином «отрезки». Для произвольного  $S$  и отрезка  $A \in T \subseteq P$  зададим непустое множество

$$P_S(A) = \{ w | w: A \rightarrow S \}.$$

Множество  $P_S(A)$  областью предметных объектов (предметной областью), известных к отрезку  $A$ , т. е. доменом.

Рассмотрим совокупность отрезков  $T$ , между элементами которых можно осуществлять переходы по закону  $f: B \rightarrow A$ , где  $A, B \in T$ . Будем называть  $f$  отношением достижимости  $G_p$  и трактовать его следующим

образом:

$G_p(B, A) = BG_p A$  означает, что пользователь  $p$ , находясь в состоянии  $A$ , может перейти в состояние  $B$ .

Трактовка:

пользователь знает, что в настоящий момент он находится в состоянии  $A$ , — это его « действительный мир », в котором он располагает определенной информацией — имеются объекты  $P_S(A)$ , которые пользователь обнаружил путем взаимодействия с вычислительной системой  $K$  отрезку  $A \in T$ ;

относительно этих обнаруженных объектов известны первоначальные факты;

над обнаруженными объектами можно производить преобразования; если  $BG_p A$ , то состояние познания  $B$  будем рассматривать как более позднее, как результат развития  $A$  « вдоль » закона  $G_p$ ; информацию, приписанную  $B$ , считаем расширением знания  $A$ .

На  $T$  определим функцию  $P$ :

если отрезок  $A \in T$ , то  $P(A) \subseteq NT$ , т. е. является семейством подмножеств  $T$  отрезков познания;

если  $w \in P(A)$ , то говорим, что  $w$  есть путь познания, начинающийся в момент  $A$ :

$$P(A) = \{ w | w: A \rightarrow P \}.$$

По определению полагаем для  $P', P \in NT$

$$(P' \subseteq P) = (\forall A \in P) (\exists B \in P') (BG_p A).$$

Функцию  $P(A)$  назовем спектром путей познания, возможных в момент  $A$ .

Стратегия приобретения знаний пользователем:

пользователю известна структура  $\langle T, G_p, P \rangle$ ;

пользователю известно, что из любого отрезка  $B$  приобретение знания идет вдоль одного из путей  $w \in P(B)$ ;

пользователю неизвестно по какому конкретному пути  $w \in P(B)$  «пойдет» приобретение знания.

#### Постулаты приобретения знания:

согласно принципу сохранности число обнаруженных со временем объектов может лишь возрастать, отсюда вытекает ограничение, накладываемое на расширение доменов:

$$BG_p A \rightarrow P_S(A) \subseteq P_S(B);$$

принцип ориентированности течения времени для  
( $\forall w \in P(A)$ )  $\exists B (B \in w)$ :

$$B \in w \in P(A) \rightarrow (\exists A' \in w) (A' G_p B \text{ и } A' G_p A),$$

т.е. для отрезка  $B$  на пути познания  $w$  в спектре отрезка  $A$  имеется на том же пути  $w$  более поздний отрезок, чем  $A$  и  $B$ ;

со временем в ходе взаимодействия с вычислительной системой число возможных путей познания сокращается:

$$BG_p A \rightarrow (\forall w' \in P(B)) (\exists w \in P(A) (P' \subseteq P));$$

для отрезка  $B$  на пути познания  $w$  в спектре отрезка  $A$  имеется на том же пути  $w$  отрезок, на котором будет открыто новое знание:

$$B \in w \in P(A) \rightarrow (\exists P' \in P(B)) (P \subseteq P').$$

### 3. ИССЛЕДОВАНИЯ ФОРМ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ЗНАНИЯ

#### О ПРЕДМЕТНОЙ ОБЛАСТИ

В настоящее время знания о ПО в экспертных системах описываются одной из следующих форм представления знаний:

- а) продукционные правила;
- б) семантические сети;

- в) логка предикатов;
- г) модель доски объявлений (модель классной доски);
- д) фреймовые системы (процедурные знания).

При исследовании и создании БЗ рассматриваемой ПО необходимо было решить три класса проблем:

- 1) адаптацию к конечному пользователю;
- 2) адаптацию к предметной области;
- 3) адаптацию к типу задач.

#### Адаптация к конечному пользователю

Адаптацию к конечному пользователю необходимо было провести в части выбора синонима вещества из их многообразной классификации, а также выбора определенной модели расчета свойства, принадлежащей тому или иному автору, характеристик температур, давлений и т. п.

Важной частью консультирующей системы базы правил является Тезаурус, содержащий классификацию электролитов, веществ и синонимы терминов. Для ввода данных тезаурус поддерживает интеграцию независимых источников данных и преобразование запроса (т. е. упрощение преобразования путем фокусирования внимания на предпочтительное наименование из наименований атрибута). Для пользователя он обеспечивает применение различных номенклатур, положение схем классификации и различные уровни абстракции данных.

Тезаурус внедряется за счет пользования технологией организации текущих данных. Зависимости ТЕЗАУРУСА (см. табл. 4.1) улучшают семантическую мощност модели относительно данных. Он содержит атрибуты "ключ наименования, наименование, предпочтительное наименование, супертермин (используемый для обобщения), подтермин (используется для классификации и формирования иерархий, обеспечивающих

наследственность свойств). Атрибуты синоним, супертермин, подтермин и ассоциативный термин являются повторяющимися атрибутами; синонимические термины в количестве более одного могут принадлежать одному предпочтительному наименованию. На рис. 3.1 показан эскиз полииерархической структуры тезауруса в виде многослойной семантической сети.

Декларативная семантика. Декларативная семантика семантической сети тезауруса предназначена для определения истин, касающихся системы процессов и мира, в котором эти процессы протекают. Подобная семантика ничего не говорит о том, как можно использовать знания для достижения конкретных целей, — она позволяет просто константировать факты, относящиеся к некоторым типам поведения. Дадим более формальное определение семантики процессуального утверждения, а для этого сначала необходимо более точно интерпретировать символы, фигурирующие в нашем языке описаний. Будем рассматривать фиксированную область объектов  $D$  и, возможно, бесконечное множество состояний. При данном конкретном состоянии интерпретация состояния связывает каждый постоянный символ и переменную с объектом из  $D$ , каждый символ предиката с отношением, определенным на  $D$ , и каждый символ функции с функцией, заданной на  $D$ . Тогда смысл описания данного состояния определяется обычной семантикой исчисления предикатов первого порядка.

Аналогичным образом можно определить интерпретацию поведения, которая связывает множество поведений с каждым предикатом действия. Тогда под смыслом предиката действия подразумевается соответствующее множество линий поведения, предусматриваемых интерпретацией данного предиката. Необходимо также пояснить смысл

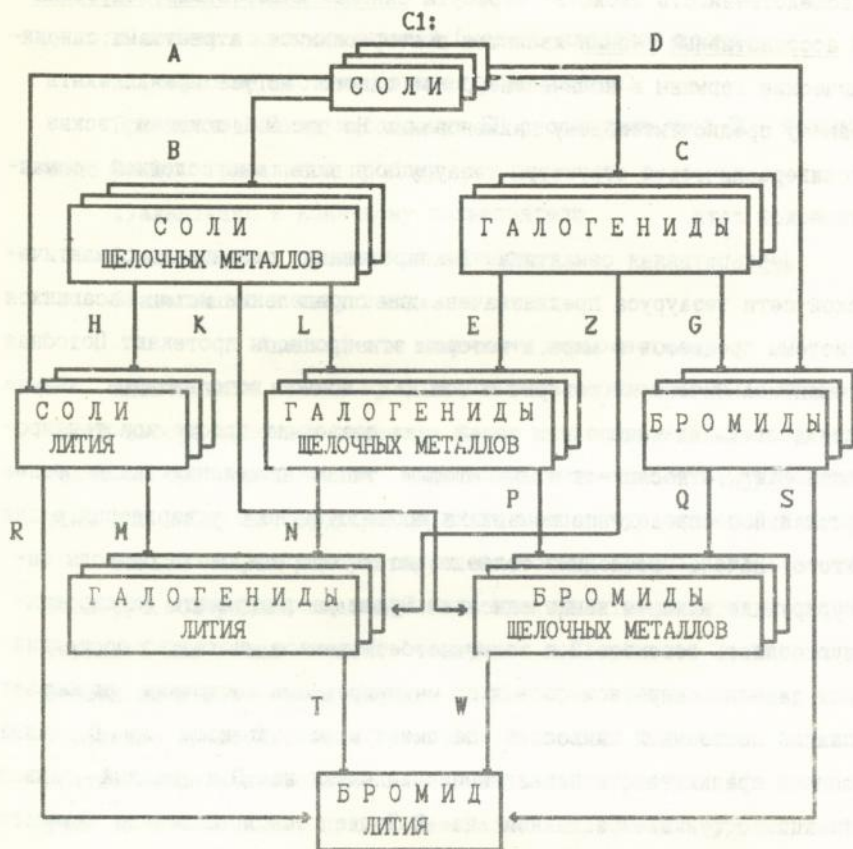


Рис. 3.1. Фрагмент из сети Тезауруса БД,  
показывающий различные уровни иерархических соединений

C1: (D<sub>F</sub> | C<sub>F</sub>), C. (E<sub>F</sub> | Z<sub>F</sub> | G<sub>F</sub>), E. (N<sub>F</sub> | P<sub>F</sub>), N. (T<sub>F</sub>), T  
(D<sub>F</sub> | B<sub>F</sub>), B. (H<sub>F</sub> | K<sub>F</sub> | L<sub>F</sub>), L. (N<sub>F</sub> | P<sub>F</sub>), N. (T<sub>F</sub>), T

описаний действия во временной области. Если  $p$ -это описание состояния, то

- $(!p)$  обозначают линии поведения, конечные состояния которых удовлетворяют  $p$ ;
- $(?p)$  обозначают линии поведения, начальные состояния которых удовлетворяют  $p$ ;
- $(\#p)$  обозначают линии поведения, все состояния которых удовлетворяют  $p$ .

Конъюнкция и дизъюнкция описаний действия обозначают соответственно пересечение и объединение множеств линий поведения.

Теперь мы в состоянии придать конкретный смысл описанию процесса. Примем, что каждое такое описание должно обозначать множество успешных и множество неудачных линий поведения. Для определения способа описания указанных линий поведения введем сначала понятие применимости процесса. Процесс  $P$  считается применимым к цели (типу действий)  $B$  на множестве состояний  $S$ , если каждая линия поведения из множества успешных исходов процесса  $P$ , начинающегося в некотором состоянии  $s \in S$ , также принадлежит  $B$ .

Пусть  $n$ -это узел в формальном описании процесса  $P$ . Допустимым поведением, начинающимся в узле  $n$ , назовем последовательность линий поведения процессов, применимых к целям, которыми помечены дуги, исходящие из  $n$ . Каждое допустимое поведение представляет собой серию попыток со стороны применимых процессов провести дугу, исходящую из  $n$ , до тех пор, пока один из процессов не завершится успехом или все они потерпят неудачу. Таким образом, множество допустимых поведений, начинающихся в узле  $n$ , можно разбить на два множества: одно из них представляет успешные переходы к следующему узлу, а другое-неудач-

ные попытки выйти из узла. Обозначим первое множество как  $succ(n, a)$ . Каждая линия поведения, принадлежащая этому множеству, должна складываться из ряда неудачных попыток, соответствующих процессам с целями, обозначенными на выходящих из  $n$  дугах, и следующей за ними линии поведения применимого процесса с успешным исходом относительно цели для некоторой дуги  $a$ . Второе множество  $fail(n)$  включает в себя нулевое поведение и линии поведения, образованные только неудачными попытками со стороны применимых процессов.

Рассмотренные выше типы допустимого поведения позволяют дать следующее рекурсивное определение множеств успешных и неудачных исходов для узла  $n$ , обозначаемых  $S(n)$  и  $F(n)$  соответственно:

1) Если  $n$ -конечный узел, то  $S(n)$  и  $F(n)$  — пустые множества.

2) Если из  $n$  выходят дуги  $a_i$  к узлам  $m_i$ ,  $1 \leq i \leq k$ , то

$$S(n) = \bigcup_i succ(n, a_i). S(m_i)$$

$$F(n) = \bigcup \{ fail(n), \bigcup_i succ(n, a_i). F(m_i) \}.$$

Теперь множества успешных и неудачных исходов в описании процесса  $P$  могут быть соответственно определены как множества успешных и неудачных исходов для начального узла этого процесса.

В качестве примера на рис. 3.1 рассмотрены сетевые схемы процессов, где дуги помечены применимыми процессами. Индекс  $(F)$  обозначает множество неудачных линий поведения. Множество успешных и неудачных исходов для каждой сети процесса на рис. 3.1 показаны внизу рисунка.

Дав интерпретацию описаниям процесса, мы наконец можем пояснить смысл множества процессуальных утверждений. Рассмотрим утверждение  $s\langle P \rangle g$ . Это утверждение фактически представляет собой

требование следующего вида: если для каждой линии поведения из множества успешных исходов  $P$  начальное состояние процесса  $b$  удовлетворяет условию  $c$ , то  $b$  соответствует цели  $g$ . Указанному требованию должны удовлетворять все процессуальные утверждения.

Операционная семантика. Процессуальные утверждения представляют собой средство описания результатов действий в некоторой динамической проблемной области. Но как система может использовать эти знания для достижения своих целей? Мы теперь вооружены способом представления знаний, позволяющим декларировать определенные свойства действий и узнавать, из каких линий поведения составлены эти действия. Однако, мы еще не объяснили, каким образом те или иные "устремления" пользователя могут способствовать выработке логического обоснования действия или вынуждать пользователя действовать определенным образом.

Одним из средств установления причинной связи между рассуждением и действием является интерпретатор, который на входе воспринимает цели и знания о состоянии мира, а на выходе формирует намерения осуществить определенные действия (и затем действует соответствующим образом). Интерпретатор с указанными свойствами можно абстрактно рассматривать как операционную семантику языка представления знаний. Дадим описание интерпретатора такого рода.

Чтобы воплотить наш интерпретатор в форму некоторой реализуемой структуры, нужно сделать ряд предположений. Прежде всего, для достижения собственных целей система должна инициировать определенные действия и, следовательно, управлять своим поведением. Таким образом, мы предполагаем, что система с помощью определенных первичных процессов (примитивов) способна активировать различные

внешние исполнительные механизмы. Система также должна быть в состоянии воспринимать внешний мир в той мере, насколько это необходимо для определения фактов успешного и неудачного завершения первичных процессов (действительно, это единственный способ восприятия системой состояния окружающего мира).

Обладая перечисленными возможностями, система предпринимает попытки достичь своих целей с помощью применимых процессов, порождаемых интерпретатором. Интерпретатор обследует методом поиска в глубину различные пути в описании процесса  $P$ , исходящие из данного узла  $n$ . Чтобы провести дугу, интерпретатор объединяет соответствующие ей утверждение с соответствующими результатами множества всех описаний процесса и поочередно реализует множество объединенных процессов, пока один из них не завершится успехом. Если соответствующих процессов нет или ни один из них не приводит к успеху ни на одной из нисходящих дуг, выполнение процесса  $P$  оканчивается неудачей. Чтобы процессы были действительно применимыми, для каждого из них в момент активации должны быть выполнены соответствующие предусловия.

```
function succesful (P n)
  if (is-end-node n) then
    return true
  else
    arc-set := (outgoing-arcs n)
    pr-a-set := (processes-that-unify arc-set)
    do until (empty pr-a-set)
      pr-a := (select pr-a-set)
      pr := (process pr-a)
      a := (arc pr-a)
      if (satisfied (precondition pr)) then
        if (succesful pr (start node pr)) then
```

```

return (succesful P (terminating-node a))
pr-a-set := (processes-that-unify arc-set)
end-do
return false
end-function

```

Функция `processes-that-unify` (объединяемые процессы) имеет на входе множество дуг и дает на выходе множество процессов, связанных с некоторой дугой, а также ее самое. Функция `process` (процесс) и `arc` (дуга) обеспечивают выбор определенного экземпляра процесса и соответствующей ему дуги из каждого элемента множества процессов. Функция `select` (отбор) реализует выбор отдельного элемента из множества. Порядок такого выбора называется правилом отбора. Будем называть правило, по которому определяется необходимое число попыток реализации процесса, правилом применения (в рассматриваемом интерпретаторе правило применения включено в функцию `processes-that-unify`). Функция `return` осуществляет возврат из вложенной функции `function`, но не из вложенного цикла `do`. Система начинает работу с реализации описания процесса на единственной дуге, помеченной начальной целью.

Правила декомпозиции действий. Предложенная нами семантика не так сильна, как могла бы быть. Например, если некоторая дуга процесса помечена целью в форме  $(!(p \vee q))$ , мы можем, руководствуясь декларативной семантикой, установить, что процесс с результатом  $p$  (или результатом  $q$ ) будет применим к данной цели (если его предусловия считаются выполненными). Однако рассмотренный интерпретатор не способен справиться с такой задачей.

Один из способов усилить наш интерпретатор — снабдить его дополнительными правилами доказательства фактов, касающихся

поведения процессов. Для этого применяются правила логики совместно с правилами доказательства следующим образом:

$$c1\langle P \rangle g1 \wedge c2\langle P \rangle g2 = (c1 \wedge c2)\langle P \rangle (g1 \wedge g2)$$

$$c1\langle P \rangle g1 \vee c2\langle P \rangle g2 = (c1 \wedge c2)\langle P \rangle (g1 \vee g2) .$$

Вводятся также дополнительные правила комбинирования процессов. Как и раньше, мы используем запись  $c\langle P \rangle q$  для обозначения того, что каждая успешная линия поведения из множества  $P$ , начальное состояние которой удовлетворяет условию  $c$ , соответствует также и временному утверждению  $q$ . Чтобы наша система обозначений охватывала и неудачные исходы, мы расширим ее, используя утверждения вида  $c\langle P \rangle_{\neq} q$  на описание результатов неудачных линий поведения. Символы « ; » и « | » обозначают соответственно последовательную композицию и (недетерминированное) ветвление.

Конъюнктивная проверка

$$\frac{c\langle P_1 \rangle (?p \wedge !c' \wedge (\#q \vee \#(-q))) \quad c' \langle P_2 \rangle (?q)}{c\langle P_1 ; P_2 \rangle (?p \wedge q)}$$

Конъюнктивное достижение

$$\frac{c\langle P_1 \rangle (!p \wedge !c') \quad c' \langle P_2 \rangle (!q \wedge \#p)}{c\langle P_1 ; P_2 \rangle (!p \wedge q)}$$

Дизъюнктивная проверка

$$\begin{array}{l}
 c\langle P_1 \rangle (? p) \\
 c\langle P_2 \rangle (? q) \\
 c\langle P_1 \rangle_F ((\# q \vee \#(-q)) \wedge ! c) \\
 c\langle P_2 \rangle_F ((\# p \vee \#(-p)) \wedge ! c) \\
 \hline
 c\langle P_1 | P_2 \rangle (? (p \vee q))
 \end{array}$$

#### Дизъюнктивное достижение

$$\begin{array}{l}
 c\langle P_1 \rangle (! p) \\
 c\langle P_2 \rangle (! q) \\
 c\langle P_1 \rangle_F (\#c) \\
 c\langle P_2 \rangle_F (\#c) \\
 \hline
 c\langle P_1 | P_2 \rangle (! (p \vee q))
 \end{array}$$

Чтобы построить новую операционную семантику, включающую в себя перечисленные правила доказательства, рассмотренный интерпретатор следует модифицировать с учетом применения этих правил.

#### Адаптация к предметной области

Адаптация к предметной области была осуществлена с помощью БЗ. В БЗ содержится система знаний о проблемной среде как части объективного мира, отражающая среду как целостное явление со всеми взаимосвязями, которые существуют между ее элементами и динамикой их изменения. Система обладает достаточной полнотой, т.е. содержит все знания, необходимые для решения задач по свойствам веществ.

В широком смысле слова, формирование такой системы знаний также является частью решения задачи, т.е. включенные в нее знания отбираются направленно и также направленно выбираются способы ее

структурирования, которые обеспечивают эффективную работу с ней при решении задач о свойствах веществ. При формировании системы знаний осуществляется создание фундамента для решения некоторого множества задач, а ее использование в каждом конкретном случае обеспечивает решение отдельной задачи. Архитектура БЗ показана на рис. 3.2. Система знаний о свойствах неорганических веществ, в виде многослойной доски с выделением, состоит из двух компонент: формальных моделей предметной области, которые составляют часть процедурных знаний предметной области и фактографической информации на физическом уровне. Многослойность исходит из различных агрегатных состояний веществ.

Первая компонента относится к разрабатываемой форме обработки знаний, получение новых знаний происходит посредством применения формальных моделей предметной области и выводом данных о свойствах многокомпонентных растворов или смесей, отсутствующих в литературе.

Вторая компонента системы знаний о свойствах веществ относится к поисковой форме обработки знаний. На физическом уровне хранится фактографическая информация о свойствах бинарных систем. Эта информация является составной частью национальной базы данных, создаваемой в ИОНХ АН бывшей СССР. В этой компоненте также происходит получение новых знаний посредством применения программных модулей регрессионного анализа, экстраполяции, интерполяции, графического представления и пр. бинарных данных о свойствах веществ. Получаемые элементы данных, группы, групповые отношения и др., отсутствующие ранее в литературе, поступают на логический и физический уровни интегрированной базы данных, которые затем используются в разрабатываемой форме обработки знаний для получения новых знаний о много-

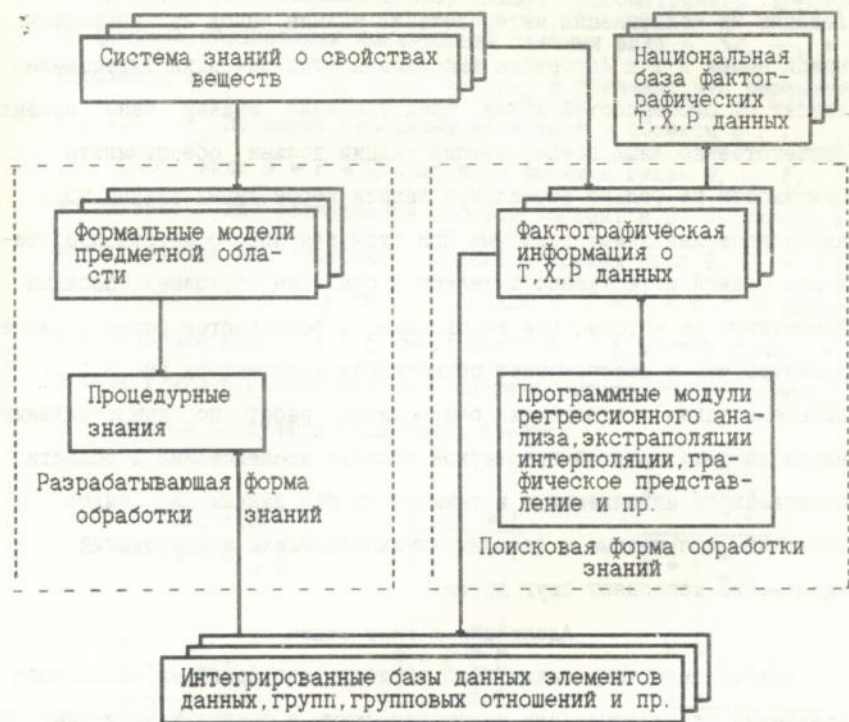


Рис. 3.2. Архитектура базы знаний о свойствах неорганических веществ

компонентных растворах или смесях.

Таким образом, как видно из рис. 3.2 вычислительная система использует систему знаний о свойствах веществ, выполняет над ней разнообразные действия (операции), такие, как поиск необходимых сведений, их модификация, интерпретация знаний, вывод из имеющихся знаний новых и т. д. Алгоритмы выполнения этих операций существенно зависят от особенностей языка представления знаний базы правил. Соответственно, язык представления знаний должен обеспечивать возможности не только формальной записи необходимых знаний, но и манипулирования этими записями. При этом, для любого метода представления знаний, естественно, выделяются основные (базовые) операции (примитивы), из которых при необходимости формируются более сложные процедуры, что и обеспечивает приведенная архитектура рис. 3.1. Соблюдена также интеграция результатов работ по представлению знаний системы понятий предметной области, исследований в области искусственного интеллекта и в технологии баз данных. Как видно, результаты, полученные в упомянутых направлениях исследований, существенно дополняют друг друга.

#### Адаптация к типу задач

Адаптацию к типу задач было осуществлено фреймами различного назначения: статистическими, математическими и физико-химическими. В настоящем разделе обсуждаются основные средства и методы интерпретации, позволяющие использовать фреймы. Объясняются механизмы передачи информации и управления между фреймами. Фрейм считается концептом одного или нескольких отношений базы знаний, т. е. задает целое семейство возможных конкретных отношений.

Основные соглашения. Пусть  $a$  и  $b$  - объекты,  $x$  - переменная. В

дальнейшем  $a, b, c$  будут обозначать произвольные объекты,  $x_1, x_2, \dots, y_1, y_2, \dots, v, z$  - переменные. Выражения  $(ab)$  и  $\lambda x \cdot a$  считаются объектами;  $\lambda$  - оператор, связывающий переменные. Добавим дополнительную возможность, позволяющую рассматривать конструкции из фреймов, соединенных логическими связями вида  $\&, \vee, \neg, =$  и др. Выражение « $x_1, \dots, x_n \varepsilon a_1, \dots, a_m$ » означает, что переменные  $x_1, \dots, x_n$  не имеют свободных вхождений в объекты  $a_1, \dots, a_m$ .

Слово вида  $\Psi \leftarrow F \rightarrow \Omega$  считается фреймом. Буквы  $\Psi, \Omega, \xi, \dots$ , используются для обозначения наборов объектов. В частности, наборы могут вообще не содержать объектов. Фреймы вида  $\Psi, \Omega \leftarrow F \rightarrow \Lambda, \xi$  понимаются: если  $\Psi \wedge \Omega$ , то  $\Lambda \vee \xi$ ; вида  $\Psi, \Omega \leftarrow F - \Psi \wedge \Omega$  приводит к противоречию; вида  $F \rightarrow \Lambda, \xi$  имеет место  $\Lambda \vee \xi$ . Пустой фрейм  $\leftarrow F \rightarrow$  означает, что в рассматриваемой системе имеется противоречие.

Введем постулаты расширения фреймов:

$$\frac{\Psi \leftarrow F \rightarrow \xi}{\Psi \leftarrow F \rightarrow \xi a}; \quad \frac{\Psi \leftarrow F \rightarrow \xi}{a \leftarrow F \rightarrow \xi}; \quad \frac{\Psi \leftarrow F \rightarrow \xi}{\Psi \leftarrow F \rightarrow \xi a};$$

$$\frac{a \leftarrow F \rightarrow \xi}{a \Psi \leftarrow F \rightarrow \xi}; \quad \frac{\Psi \leftarrow F \rightarrow \Lambda \begin{matrix} a \\ b \\ \xi \end{matrix}}{\Psi \leftarrow F \rightarrow \Lambda \begin{matrix} b \\ a \\ \xi \end{matrix}}; \quad \frac{\Lambda \leftarrow \begin{matrix} b \\ a \\ \xi \end{matrix} \rightarrow F \rightarrow \xi}{\Lambda \leftarrow \begin{matrix} a \\ b \\ \xi \end{matrix} \rightarrow F \rightarrow \xi};$$

$$\frac{ax \leftarrow F \rightarrow \xi; x \varepsilon a, b, \Psi, \xi}{\Psi \leftarrow F \rightarrow \xi ab};$$

$$\frac{\Omega \leftarrow p \rightarrow \Lambda \begin{matrix} ac \\ bc \end{matrix} \quad \Psi \leftarrow q \rightarrow \xi}{\begin{matrix} ab \leftarrow \\ \Omega \leftarrow r \rightarrow \Omega \\ \Psi \leftarrow \end{matrix} \rightarrow \xi};$$

$$\text{Правило сечения: } \frac{\Psi \leftarrow p \rightarrow D \quad D \leftarrow q \rightarrow \Lambda}{\Psi \leftarrow k \rightarrow \Lambda}$$

В сформулированной системе можно построить фреймы  $\Rightarrow$ ,  $\&$ ,  $\vee$ ,  $\neg$ ,  $\forall$ ,  $\exists$ , обладающие свойствами логических связок и кванторов в смысле их правил введения и возможностями передачи и управления между ними. Это доказывается следующими утверждениями.

Обоснование организации фреймов. Утверждение 1. Пусть  $F1$  и  $F2$  - 2 два подобных фрейма, выражаемые посредством

$$\begin{aligned} (x_1 : \tau_1) \dots (x_1 : \tau_1) \dots (x_n : \tau_n) : M; \\ (x_1 : \tau_1) \dots (c : \tau_1) \dots (x_n : \tau_n) : M \end{aligned}$$

соответственно, где  $c$  - константа типа  $\tau_1$ . Тогда ( $F2 \leq F1$ ) и ( $F1 \neg \leq F2$ ).

Доказательство утверждения: очевидно.

Утверждение 2. Пусть  $F1$  и  $F2$  - 2 подобных фрейма, выражаемые посредством

$$\begin{aligned} (x_1 : \tau_1) \dots (x_1 : \tau_1) \dots (x_n : \tau_n) : M; \\ (x_1 : \tau_1) \dots (x_1 : \tau_1') \dots (x_n : \tau_n) : M; \end{aligned}$$

соответственно, где ( $|\tau_1'| \leq |\tau_1|$ ). Тогда ( $F2 \leq F1$ ).

Доказательство утверждения: Каждое значение  $|\tau_1'|$  дает множество означиваний  $F2$ , которые в то же время являются означиваниями  $F1$ , согласно утверждению 1. Следовательно, каждое означивание  $F2$  является означиванием  $F1$ . С другой стороны, значения  $|\tau_1|$ , которых нет в  $|\tau_1'|$ , могут появиться в означиваниях  $F1$ , которые не являются означиваниями  $F2$ .

Утверждение 3. Пусть  $F1$  и  $F2$  - 2 подобных фрейма, выражаемые посредством

$$(x_1 : \tau_1) \dots (x_i : \tau_i) (Q_{i+1} x_{i+1} : \tau_{i+1}) \dots (Q_n x_n : \tau_n) : M;$$

$$(x_1 : \tau_1) \dots (Q_1 x_1 : \tau_1) (Q_{i+1} x_{i+1} : \tau_{i+1}) \dots (Q_n x_n : \tau_n) : M$$

соответственно, где  $Q_i$  и  $Q_{i+1} \dots$  - кванторы. Тогда  $(F2 \leq F1)$  и  $(F1 \rightarrow \neg \leq F2)$ .

Доказательство утверждения: Каждая группа означиваний, удовлетворяющая зависимостям между значениями  $x_1, x_{i+1}, \dots, x_n$  и  $F2$ , также удовлетворяет зависимостям между значениями  $x_{i+1}, \dots, x_n$  в  $F1$ . Следовательно,  $(F2 \leq F1)$ . Очевидно, что противоположное не истинно. Так как  $\leq$  транзитивно, то можем обобщить вышеприведенные утверждения до следующего утверждения.

Утверждение 4. Пусть  $F1$  и  $F2$  - 2 подобных фрейма, выражаемые посредством

$$(x_1 : \tau_1) \dots (x_i : \tau_i) (Q_{i+1} x_{i+1} : \tau_{i+1}) \dots (Q_{i+j} x_{i+j} : \tau_{i+j}) : M;$$

$$(x_1 : \tau_1') \dots (x_k : \tau_k') (Q_{k+1} x_{k+1} : \tau_{k+1}') \dots (Q_{i+j} x_{i+j} : \tau_{i+j}') : M;$$

соответственно, где  $1 < i, 0 \leq j, 1 \leq k \leq i$ ;

Доказательство утверждения: Можно установить последовательность фреймов  $F_{S_1}, F_{S_2}, \dots, F_{S_n}$  так, что  $F_{S_1} \bar{=} F1, F_{S_n} \bar{=} F2$  и  $(F_{S_i} \leq F_{S_{i+1}})$ ,  $i=1, \dots, n-1$ , используя утверждения 1, 2 и 3. Следовательно  $(F2 \leq F1)$ .

#### 4. СТРУКТУРА БАНКА ДАННЫХ НОВОГО КЛАССА

Проведенные исследования показали, что знания, производимые и используемые учеными и инженерами не могут быть представлены только одним из четырех элементарных типов представления знаний, т.е. логическим программированием, семантическими сетями, правилами продукций и фреймами [1, 4, 7, 9, 10, 25, 38, 48, 51-53, 64, 70, 88, 110]. Под термином знания, при этом, понимается вся совокупность информации, необходимой для решения задачи, включающая в себя в том числе информацию:

-о системе знаний предметной области, в которой решаются задачи;

-о системе понятий формальных моделей, на основе которых решаются задачи;

-о соответствии систем понятий, упомянутых выше;

-о текущем состоянии предметной области;

-о методах решения задач.

При этом система знаний должна быть организована в ЭВМ таким образом, чтобы обеспечить взаимодействие вычислительной системы с пользователем в системе понятий и терминов предметной области.

БД управляет знаниями по растворам электролитов в трех категориях:

-фактуальные знания (знания различных правил) представлены многослойной семантической сетью и правилами продукций и управляются базой правил с основными связями, приведенными на рис. 4.1, которые поясняются их признаками в табл. 4.1;

знания о предметной области представлены в виде многослойной доски объявлений и управляются базой знаний;

-алгоритмические знания представлены в виде сети статистических, математических и физико-химических фреймов и управляются базой методов (исполнительной системой);

База правил (интеллектуальный интерфейс) имеет гибкую структуру, которая обеспечивает возможность адаптации в широком спектре интересов конечных пользователей. Документация правил отображена в связи ПРАВИЛО, см. табл. 4.1. База правил включает в себя все средства уровня конечного пользователя, обеспечивающие взаимодействие между конечным пользователем и вычислительной системой в процессе

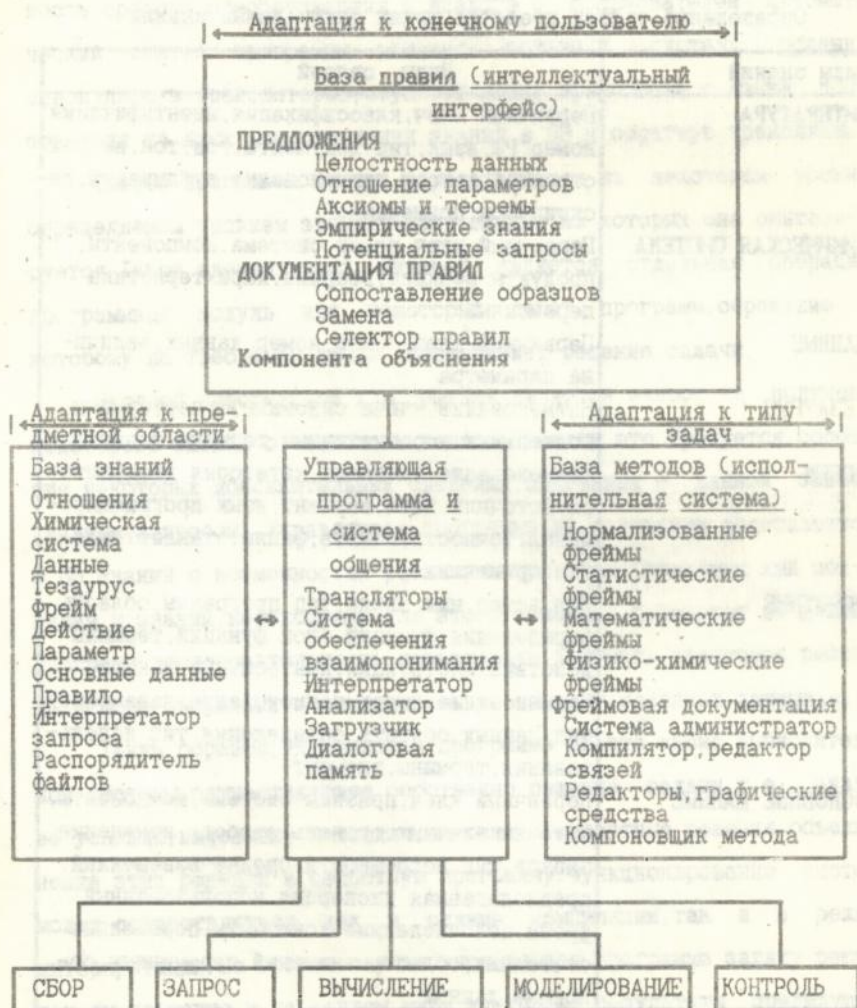


Рис. 4.1. Архитектура банка данных о свойствах неорганических веществ

Таблица 4.1

Определение связей, представляющих фактуальные знания

Виды знаний	Виды связей
ЛИТЕРАТУРА	Первичный ключ, классификация, идентификация номер РЖ, язык, тип документа, год, том, выпуск страница, авторы, наименование, публикация, дескрипторы, примечания
ХИМИЧЕСКАЯ СИСТЕМА	Первичный ключ, номер, система, компоненты, продукты реакции, реакция, характеристика переменных
ДАННЫЕ	Первичный ключ, номер, номер данных, величина параметра
ТЕЗАУРУС	Наименование ключа, синонимы, супертермины, подтермины, ассоциативные термины, формула
ФРЕЙМ	Наименование, название, категория, дескрипторы, источник, дата, вариант, язык программирования, точность, память, файлы, стандарт, теория, примечания
ДЕЙСТВИЕ	Имя, номер, имя входа, тип программы, область определения функций, блок функций, термины действия, инструкция, контрольные данные
ПАРАМЕТРЫ	Наименование, номер, наименование параметров тип данных, область определения, тип использования, термины, элемент
ОСНОВНЫЕ ДАННЫЕ	Первичный ключ, признак системы, компоненты, источник данных, степень свободы, изменение знаков, тип погрешности, средне-взвешенный, предполагаемая дисперсия, использованный фрейм, целочисленные константы, переменные состояния, область значений переменных, основные данные
ПРАВИЛО	Первичный ключ, заглавие, категория, дескрипторы, источник, дата, связи, язык, вероятность, пояснение, примечания.

решения задачи.

В базе правил можно выделить управляющую программу-совокупность средств, обеспечивающих в диалоге с пользователем автоматический синтез программы решения задачи, и систему общения-совокупность трансляторов, осуществляющих трансляцию с языка пользователя на язык представления знаний в БЗ и обратную трансляцию.

Синтез программы всегда осуществляется на некотором уровне, определяемом уровнем элементарных единиц, из которых она синтезируется. Такой элементарной единицей является отдельная операция, программный модуль или некоторый пакет программ, обращение к которому на требуемом языке обеспечивает решение задачи.

Входной информацией для решения является запрос на получение некоторого знания о свойствах веществ и, если это требуется, сообщение некоторых дополнительных сведений, связанных с данной задачей (данном запросом). Управляющая программа, на основании содержащихся в БЗ знаний о возможностях различных программ (решаемых ими подзадач и знаний, необходимых для этого решения), формирует из данных программ последовательность, позволяющую получить требуемое решение на основе введенных в вычислительную систему исходных данных.

Таким образом, управляющая программа БЗ-это звено вычислительной системы, осуществляющее собственно решение задачи, т.е. анализ ее условий, выделение подзадач, имеющих стандартные решения, объединение этих решений в целостную программу. Функционирование системы может осуществляться как в режиме компиляции, так и в режиме интерпретации. Во втором случае, управляющая программа задачу решает как бы поэтапно и на каждом шаге учитывает результаты предыдущего этапа.

Теоретически синтез алгоритма решения выглядит следующим образом. Определим некоторые часто употребляемые домены:

$$D = \text{Num} = \{0, 1, 2, \dots\}; D' = \text{Bool} = \{ \text{true}, \text{false} \};$$

$$D'' = \text{Ide} = \{ I \mid I - \text{строка букв или цифр, начинающаяся с буквы} \};$$

$D''' = \text{Спектр} = \{ \text{плотность, вязкость, электропроводность, диффузия, теплоемкость и т. д.} \}$

Функциональное пространство определяется посредством

$$(D_1 \rightarrow D_2) = \{ f \mid f: D_1 \rightarrow D_2 \},$$

где  $f \in (D_1 \rightarrow D_2) \leftrightarrow f: D_1 \rightarrow D_2$ .

Декартово произведение определяется посредством

$$(D_1 \times \dots \times D_n) = \{ (d_1, \dots, d_n) \mid d_1 \in D_1 \& \dots \& d_n \in D_n \},$$

где  $\text{el id} - i$ -я координата  $d \in (D_1 \times \dots \times D_n)$ :

$$\text{el id } (d_1, \dots, d_n) = d_i;$$

$$d = (\text{el } 1d, \dots, \text{el } nd).$$

Конечные последовательности элементов  $D$  задаются с помощью  $D^*$ :

$$D^* = \{ (d_1, \dots, d_n) \mid 0 < n; d_i \in D \} + \{ \emptyset \},$$

где а)  $\text{el } i (d_1, \dots, d_n) = d_i$ ;

$$\text{hd } (d_1, \dots, d_n) = d_1;$$

$$\text{tl } (d_1, \dots, d_n) = (d_2, \dots, d_n);$$

$$\text{null } d = \begin{cases} \text{true, если } d = \emptyset, \\ \text{false в противном случае;} \end{cases}$$

$$\text{б) el } : \text{Num} \rightarrow (D^* \rightarrow D);$$

$$\text{hd} : D^* \rightarrow D;$$

$$\text{tl} : D^* \rightarrow D^*;$$

$$\text{null} : D^* \rightarrow \text{Bool},$$

предполагая, что в качестве аргументов выбираются непустые последовательности:

$$\text{в) } (d_1, d_2, \dots, d_n) = d_1 \cdot d_2 \cdot \dots \cdot d_n.$$

Тогда  $d \cdot d^n = (d, d_1, \dots, d_n)$ .

Введем понятие суммы (раздельного объединения) доменов:

$$(D_1 + D_2 + \dots + D_n) = \{(d_i, i) \mid d_i \in D_i; 0 < i < n+1\};$$

где

$$\text{is } D_1 d = \begin{cases} \text{true, если } d = (d_1, i) \\ \text{false в противном случае;} \end{cases}$$

$$\text{out } D_1 d = \begin{cases} d_1, \text{ если } d = (d_1, i); \\ \text{«неопределенно» в противном случае;} \\ \text{in } D_1 d_1 = (d_1, i). \end{cases}$$

Припишем типы новым функциям  $\text{is } D_1 d$ ;  $\text{out } D_1 d$ ;  $\text{in } D_1 d_1$ :

$$\text{is } D_1 : (D_1 + D_2 + \dots + D_n) \rightarrow \text{Bool};$$

$$\text{out } D_1 : (D_1 + D_2 + \dots + D_n) \rightarrow D_1;$$

$$\text{in } D_1 : D_1 \rightarrow (D_1 + D_2 + \dots + D_n).$$

Использование суммы доменов приводит к формулированию следующих соглашений, обычных для языков программирования:

а) запись  $d_1 \in D_1$  понимается как  $\text{in } D_1 d_1$ , т.е., если например,  $n \in \text{Num}$ ;  $\text{Value} = \text{Num} + \text{Bool}$ ;  $f: \text{Value} \rightarrow D$ , то  $fn$  понимается как  $f(\text{in Num } n)$ ;

б) запись  $d \in (D_1 + D_2 + \dots + D_n)$  может пониматься как  $\text{out } D_1 d$ , т.е., если, например,  $f: D \rightarrow (\text{Num} + \text{Bool})$  и  $g: \text{Bool} \rightarrow D$ , то  $g(fd)$  понимается как  $g(\text{out Bool } (fd))$ ;

в)  $D^n = \{\emptyset\} + D + (D \times D) + \dots + (D \times \dots \times D) + \dots$

Пример. В качестве частного случая системы уравнений доменов

$$D_i = \prod_1 (D_1, \dots, D_n), 0 < i < n + 1,$$

где  $\prod_1 (D_1, \dots, D_n)$  - выражение, полученное из  $D_1, \dots, D_n$  с помощью  $\rightarrow, \times, +, =$ , можно указать следующую систему.

Пусть  $D_1 = \text{state}$ ;  $D_2 = \text{Memory}$ ;  $D_3 = \text{input}$ ;  $D_4 = \text{Output}$ ;  $D_5 =$

= Value;  $D_6 = \text{Proc}$ ;  $D_7 = \text{Ide}$ ;  $D_8 = \text{Num}$ ;  $D_9 = \text{Bool}$ ;  $D_{10} = \text{state}$ ;  $D_{11} =$   
 = { не определено };  $D_{12} = \{ \text{ошибка} \}$ .

Тогда

$$\begin{aligned} D_1 &= D_2 \times D_3 \times D_4; \\ D_2 &= D_2 \rightarrow (D_5 + D_{11}); \\ D_3 &= D_5; \\ D_5 &= D_6 + D_9 + D_{10}; \\ D_6 &= D_1 \rightarrow (D_1 + D_{12}), \end{aligned}$$

или

$$\begin{aligned} \text{State} &= \text{Memory} \times \text{Input} \times \text{Output}; \\ \text{Memory} &= \text{Ide} \rightarrow (\text{Value} + \{ \text{не определено} \}); \\ \text{Input} &= \text{Value}; \\ \text{Output} &= \text{Value}; \\ \text{Value} &= \text{Num} + \text{Bool} + \text{Proc}; \\ \text{Proc} &= \text{State} \rightarrow (\text{State} + \{ \text{ошибка} \}). \end{aligned}$$

## 5. ФАКТУАЛЬНЫЕ ЗНАНИЯ И МОДЕЛЬ ОТНОСИТЕЛЬНЫХ ДАННЫХ

### Фактографические фактуальные знания на физическом уровне.

Каждому, занимающемуся поиском информации по растворам электролитов, требуется набор литературных ссылок и результатов измерений, методов расчета для определения свойств растворов, и набор правил, контролирующих применение этих методов. Вдобавок к модулям и правилам, консультирующих пользователя, БД организует нижеследующие фактические данные:

- литература и результаты измерений;
- документация по модулям и параметрам;
- основные данные;

-регулирующая документация;

фреймовая документация.

Для хранения в БЗД только замеренных данных имеются основательные причины. Сглаженные данные являются результатом приписывания формальным моделям оригинальных данных и непригодны для определений, основанных на других моделях. В БД отделяются результаты измерений от методов расчета свойств, оставляя определение всех свойств раствора открытым для пользователя, который может свободно сочетать фактографические данные и методы расчета.

Литература, оригинальные данные и документы данных, графически представленные в нисходящем виде на рис. 5.1, состоят из элементов "Публикация", "Библиография", "Описание" и повторения "Блок данных". Блок данных состоит из химической системы и ее данных. Раздел, называемый "Химическая система", подразделяется на систему атрибутов классификации: компоненты, продукты реакции, реакция и определение переменных характеристик. Компоненты атрибута (продукты), в свою очередь состоят из атрибутов РЖ: наименование, синонимы, супертермины, подтермины, регистрационный номер РЖ, ионы и формула.

Раздел "Данные" является повторением кортежа данных состоящего из переменных состояния и принадлежности с их значениями, единицами, погрешностями и типами погрешностей.

Шестиугольник на рис. 5.1 показывает повторение атрибутов, представленных на его правой стороне. Повторяющийся атрибут определяется, когда правая сторона шестиугольника содержит только один атрибут, например "авторы". Определение соответствующей зависимости необходимо, когда правая сторона шестиугольника является дальнейшим повторением элементарного атрибута, например, кортежа данных на

рис. 5.1 с повторением переменной. Таким же образом, каждый шестиугольник с более чем с одним атрибутом с правой стороны требует определения конкретной зависимости для атрибутов с правой стороны, например, определения зависимости "химическая система" на рис. 6.1.

Определение четырех зависимостей ЛИТЕРАТУРА, ХИМИЧЕСКАЯ СИСТЕМА, ДАННЫЕ и ТЕЗАУРУС для литературы и поиска данных представлены в табл. 4.1. Если бы мы не использовали повторяющиеся атрибуты, то вместо этих четырех зависимостей потребовалось бы гораздо больше для представления структуры данных, что является сложной и забирающей много времени проблемой при формировании запросов.

Фреймовая документация. Большим барьером для использования программ пользователем является недостаточное понимание фоновой теории алгоритмов. Какое уравнение должно быть выбрано для анализа данных? Действительно ли это уравнение для всего диапазона рассматриваемых данных? Каков доверительный интервал для метода и полученных им данных?

БД предлагает полную документацию и примеры расчета для каждого фрейма в БЗД. Фреймовая документация состоит из объяснения, организации и программ, документации по теории и описания результатов. Фрейм может иметь больше одного результата в зависимости от управляющих параметров и один результат может иметь более одного параметра вход/выход. Эта структура представлена на рис. 5.2. Фреймовая документация внесена в модель относительных данных, производящую основные зависимости ФРЕЙМ (пример в табл. 5.1), ДЕЙСТВИЕ, ПАРАМЕТР с атрибутами, представленными в табл. 4.1. Повторяющимися атрибутами рис. 5.2 являются: категория, дескриптор, термин действия и термин. Большое разнообразие уравнений различной структуры

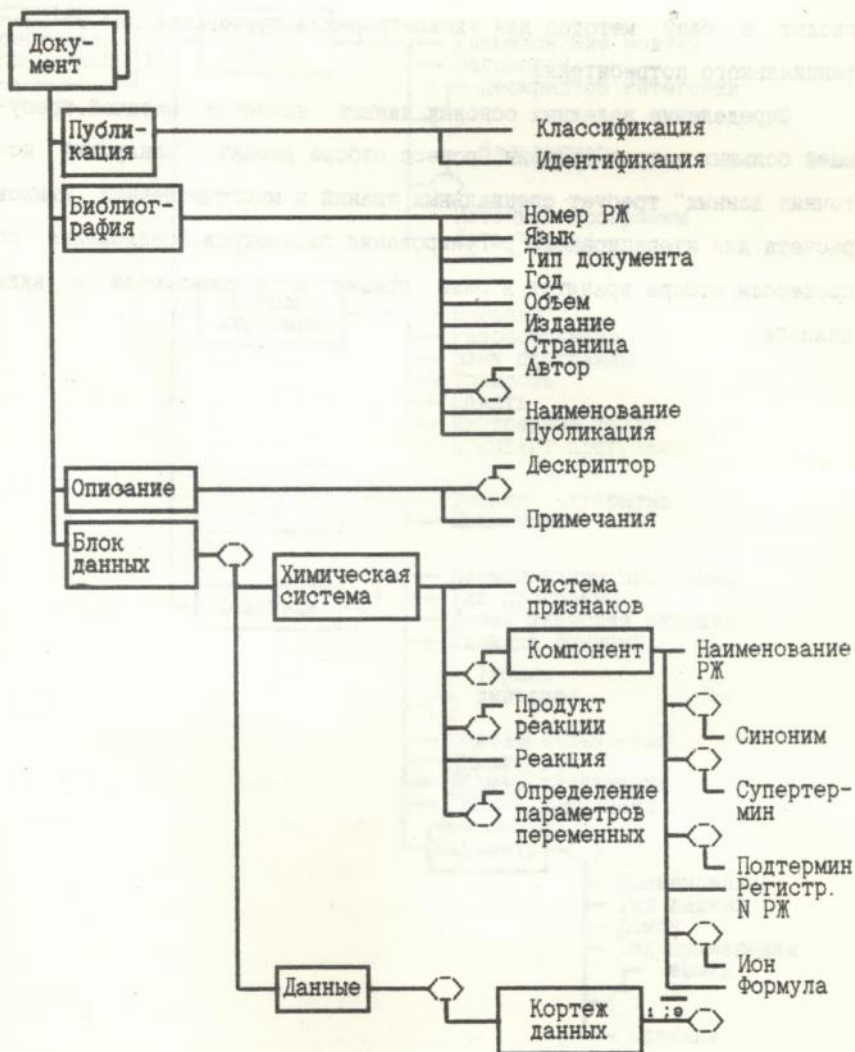
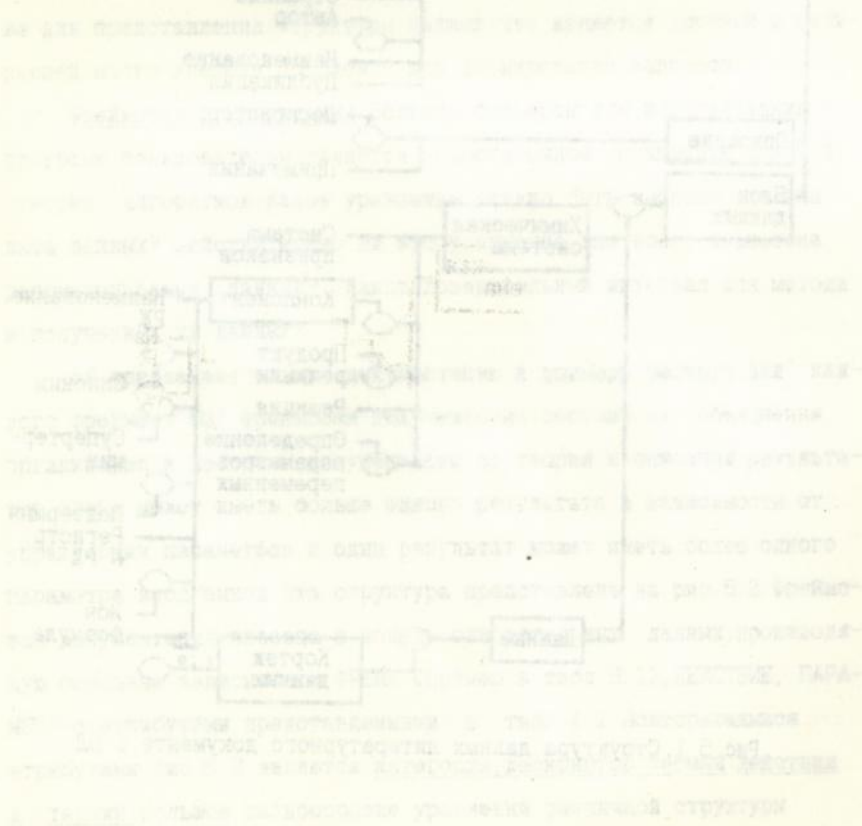


Рис. 5.1. Структура данных литературного документа в БД

входит в базу методов для удовлетворения требований любого потенциального потребителя.

Определение надежных основ данных является задачей, требующей больших затрат времени. Процесс отбора, дающий "наилучший источник данных" требует специальных знаний и многочисленных циклов расчета для итерационного регулирования параметров. Предложения по процессам отбора хранятся в базе правил и используются в виде диалога.



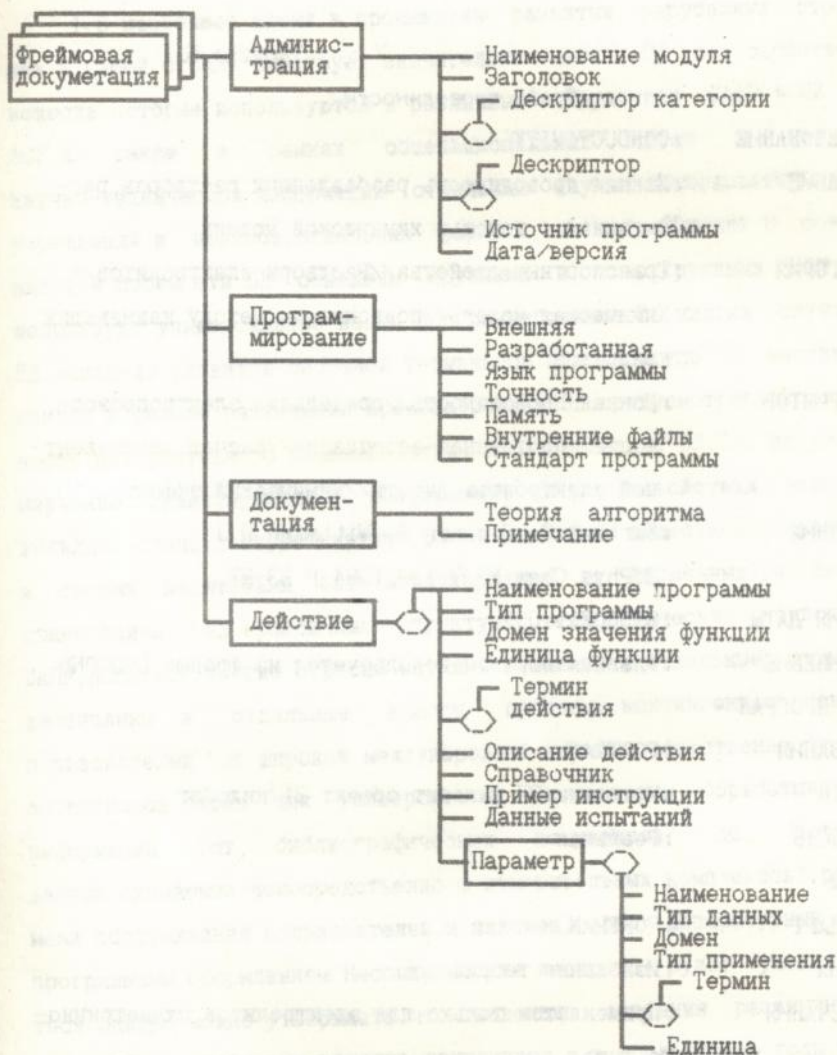


Рис. 5.2. Структура данных фреймовой документации

Таблица 5.1

## Фрейм проводимости

НАИМЕНОВАНИЕ	: CONDUCTIVITY
ЗАГЛАВИЕ	: Ионная проводимость разбавленных растворов, рассчитанная с помощью химической модели
КАТЕГОРИЯ	: Транспортные свойства//Растворы электролитов// Химическая модель//подгонка по методу наименьших квадратов.
ДЕСКРИПТОР	: Ионная проводимость//предельная электропроводность//постоянная ассоциации//расчет эквивалентной электропроводности//химический эффект
ИСТОЧНИК	: Bartbel J., Buchner R., Wittmann H. J. Z. Phys. Chem. NF. V. 139. 1984. P. 23-37.
ВЕРСИЯ ДАТЫ	: 893007(1.00)
СОЕДИНЕНИЕ	: Главным образом используется из фрейма LSQCOND
ЯЗЫК ПРОГРАММИРОВАНИЯ	: FORTRAN
ПАМЯТЬ	: Источник 27 килобит, объект 21 килобит
ТОЧНОСТЬ	: Реальная
ФАЙЛЫ	:
СТАНДАРТ	: FORTRAN
ТЕОРИЯ	: Изложение теории
ПРИМЕЧАНИЯ	: Применяется только для электролитов симметричного типа

## ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. В настоящее время, в промышленно развитых зарубежных странах и нашей стране действует значительное число БД по свойствам веществ которые используются в различных структурах САПР, АСНИ и АСУ, а также в рамках общенациональных служб и систем научно-технической информации, отдельных научно-исследовательских учреждений и центров, отдельных фирм и их объединений. В большинстве своем эти БД оснащены крупными и сверхкрупными ЭВМ и используют универсальные языки программирования. Во многих случаях БД оснащены развитой системой терминалов для доступа к массивам данных в режиме разделения времени. В ряде БД предусмотрена возможность интерактивного взаимодействия пользователя с БД. Тем не менее изучение существующих и создаваемых БД по свойствам веществ выявляет очень пеструю картину. БД по свойствам веществ различаются и своими масштабами (от международных до фирменных), и своей ориентацией (на различные структуры технологических компонент САПР, АСНИ, АСУ, многие отрасли науки и техники, на отдельные научные дисциплины и отдельные классы проблем), контингентом своих пользователей (от широкой международной научной общественности до сотрудников фирмы или университета), характером обрабатываемой информации (от библиографических документов до потоков данных, снимаемых непосредственно с измерительных комплексов), режимами обслуживания пользователей, и, наконец, своим аппаратурным и программным оформлением. Несомненно, эта пестрота будет уменьшаться. Однако можно утверждать, что тенденции создания различных типов БД по свойствам веществ сохранятся и в последующие годы, поскольку она определяется объективными факторами-многообразием

интересов различных пользователей, наличием сложной сети информационных потребностей, а также необходимым условием развития автоматизированных систем АСНИ, САПР, АСУ.

2. Хотя во всех публикациях о БД по свойствам веществ практически отсутствует подробная информация о технологии обработки данных в БЗД и БЗ, структуры диалога, форм представления информации и т. д., проблемы интеллектуального интерфейса и интеллектуализации ЭВМ позволили выявить следующие основные причины, сдерживающие переход на новую технологию хранения и обработки информации, ориентированной на данные и возможность применения в автоматизированных системах АСНИ, САПР, АСУ:

1) принципы построения СУБД и их концепции все еще продолжают оставаться тесно связанными с чисто техническими проблемами хранения данных, решаемыми в ЭВМ в соответствии с достигнутым уровнем технологии;

2) прикладные программы оказываются существенно зависимыми от конкретных СУБД и используемых в них структур данных (фактически прикладные программы ориентированы на вполне определенный тип СУБД);

3) мобильность прикладных программ по отношению к типам ЭВМ и СУБД оказывается весьма низкой (фактически смена ЭВМ или СУБД влечет за собой необходимость переписывания программ, что весьма и весьма трудоемко для БД по свойствам веществ в силу большого объема хранимой информации в БЗД);

4) в развитых автоматизированных системах нередко случаи применения нескольких баз данных, поддерживаемых одной и той же или рядом разнотипных СУБД. По мере развития систем возникает приклад-

ные задачи, требующие одновременного использования информации, накопленной в нескольких (возможно, различных) базах данных, что при существующих методах организации СУБД трудно реализуемо;

5) наконец, особое место занимает проблема управления распределенными базами данных, организованными разнотипными СУБД, что практически сводит на нет организацию сети БД по свойствам веществ.

3. Вышеперечисленные недостатки позволяют углубить методы концептуального моделирования БД и БЗД, опереться на развитые методы работы со знаниями, их представлению, хранению, преобразованию и т. д. на примере системы знаний о свойствах неорганических веществ.

4. Предложена и реализована методология концептуального проектирования системы знаний о свойствах веществ и материалов, в которой интегрированы достижения различных исследователей предметной области, систем представления знаний, баз данных и систем программирования.

5. Разработаны и реализованы принципы отображения проблемной среды в ее семиотической модели, т. е. концептуальное моделирование проблемной области о свойствах веществ и материалов, развивающие методы работы со знаниями, их представление, хранение, преобразование и т. п., в результате чего новые знания получают уже на лингвистическом уровне проектирования базы знаний.

6. Впервые разработана и реализована целостная технология работы со знаниями, ориентированной на данные, на примере знаний о свойствах веществ и материалов, в состав которой входят следующие этапы работы со знаниями:

-оценка проблемной среды;

-анализ проблемной среды;

-синтез знаний о проблемной области:

а) на лингвистическом уровне проектирования базы знаний;

б) на логическом и физическом уровнях проектирования базы данных и базы знаний,

а также развитый язык представления знаний, методика и средства автоматизированного построения моделей проблемной среды, методы и средства хранения больших объемов знаний и эффективной работы с ними.

7. Создан единый комплекс инструментальных средств, поддерживающих разработанную технологию, и последовательная аппаратная реализация этих средств, обеспечивающая их необходимую эффективность.

8. Разработаны и реализованы базисные инструментальные системы, обеспечивающие объединение технологии работы со знаниями о свойствах веществ и материалов с технологией традиционных вычислительных средств. Базисные инструментальные системы обеспечивают, с одной стороны, независимость создаваемых средств интеллектуализации от разнообразных технических и программных средств традиционной вычислительной техники, с другой — работу последних под управлением интеллектуальных систем.

9. Разработаны и реализованы функционально-ориентированные компоненты интеллектуальной системы о свойствах веществ и материалов: решатели, графические системы, диалоговые подсистемы, статистические, математические и физико-химические модули, компоновщики метода расчета, ориентированные на выполнение какой-либо функции в составе интегрального банка данных.

10. Разработана и реализована проблемно-ориентированная интеллектуальная система в виде банка данных о свойствах веществ и ма-

териалов, обладающего возможностью применения в различных структурах технологических компонент САПР, АСНИ, АСУ, ориентированного на решение задач определенного типа, адаптируемого внутри этого круга к конкретной модели предметной области, на основе выбора необходимой конфигурации базовых функционально-ориентированных компонентов интегральной интеллектуальной системы.

11. Впервые теоретически обоснована и практически реализована база знаний о свойствах веществ и материалов, в которой новые знания получаются путем сочетания поисковой и разрабатывающей форм обработки знаний.

12. Поисковая форма обработки знаний о свойствах веществ и материалов, реализованная в виде фактографической базы данных, применяется и используется в Национальной базе данных (ИОНХ АН бывшей СССР, г. Москва).

13. Впервые введена такая форма представления знаний о предметной области, как многослойная доска объявлений, в которой теоретически обоснованы и практически реализованы механизмы вывода.

14. Впервые введена такая форма представления знаний о предметной области, как многослойные семантические сети, в которой теоретически обоснованы и практически реализованы механизмы вывода.

15. Впервые теоретически обоснованы и практически реализованы в базе правил передача информации и управления "по горизонтали" между такими формами представления знаний, как многослойные семантические сети и правила Productions.

16. Впервые теоретически обоснованы и практически реализованы

в базе знаний передача информации и управления "по горизонтали" между такими формами представления знаний, как многослойная доска объявлений и сеть фреймов.

17. Впервые теоретически обоснованы и практически реализованы передача информации и управления в БД "по вертикали": многослойные семантические сети → правила продукций → многослойная доска объявлений → сеть фреймов.

18. Математическое и программное обеспечение базы знаний по свойствам веществ было передано и функционирует в различных структурах САПР и АСНИ организаций СНГ: Гипрохимреактив, г. Харьков; НФ ГИАП, г. Новомосковск; КАЗНИИГИПРОФОСФОР, г. Чимкент; Гипрополимер, г. Дзержинск; филиал Гипрохим, г. Сумы; ВСФ Госниихлорпроект, г. Иркутск; ГосНИИметанолпроект, г. Северодонецк; ВИПХСЗР, г. Киев, а также внедрены в НПО Карбонат, г. Харьков. Общий экономический эффект от внедрения составляет 844,8 тыс. руб. в ценах 1990 г.

Принципы построения интегральной интеллектуальной системы свойств веществ и растворов внедрены в учебные процессы Киевского политехнического института, Одесского политехнического института, Украинского заочного политехнического института, Харьковского политехнического института.

Работа включалась в сообщения о результатах важнейших научно-исследовательских разработок организаций и учреждений УССР за 1988, 1989 и 1990 г. г., издаваемый научным советом по проблеме "Кибернетика" АН УССР.

Фактографическая база данных используется ИОНХ АН бывшей СССР для создания национальной базы данных по свойствам водных систем в соответствии с Научно-технической программой Госу-

дарственной Службы Стандартных Справочных Данных (НТП ГСССД) Госстандарта и АН бывшей СССР.

Результаты разработки системы теоретических знаний по свойствам веществ концентрированных растворов электролитов по просьбе ученых были переданы и используются учеными в странах:

Польша, Германия, Канада, Чехословакия, Португалия, Испания, Япония.

По результатам диссертационной работы в издательстве "Химия" издана монография: "Машинный расчет физико-химических параметров неорганических веществ", 256 с., в соавторстве с Зайцевым И. Д. и Зозулей А. Ф. и справочник "Физико-химические свойства бинарных и многокомпонентных растворов неорганических веществ", 416 с., в соавторстве с Зайцевым И. Д., рассматриваемый как база данных и база знаний.

По предложению одного из крупнейшего издательства в мире, фирмы Hemisphere Publishing Corporation, USA, New York, справочник по свойствам растворов электролитов с увеличением объема до 100 печ. листов издан в 1992 г. в США, согласно контракту N Э-89-023-639-070 от 7 марта 1989 г., для англо-язычной группы стран.

## НАУЧНЫЕ ТРУДЫ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Зайцев И. Д., Зозуля А. Ф., Асеев Г. Г. Машинный расчет физико-химических параметров неорганических веществ. М.: Химия, 1983. - 256 с.
2. Зайцев И. Д., Асеев Г. Г. Физико-химические свойства бинарных и многокомпонентных растворов неорганических веществ. Справочник. М.: Химия, 1988. - 416 с.
3. Zaytsev I. D., Aseyev G. G. Properties of Aqueous solutions of Elektrolites. CRC Press. Boca Raton, Ann Arbor, London, Tokyo. 1992. - 1774 p.
4. Асеев Г. Г. Системы автоматизированного поиска параметров теплофизических свойств в химической промышленности. ОИ. Серия: Социальная промышленность. М.: НИИТЭХИМ, 1981. - 30 с.
5. Асеев Г. Г. Переносные свойства в концентрированных растворах электролитов (электрическая проводимость, вязкость, диффузия). Обзоры по теплофизическим свойствам веществ. N 5(91) М.: АН СССР. 1991. - 84 с.
6. Асеев Г. Г. Автоматизированная информационная система расчета физико-химических свойств неорганических веществ: Технические условия на промышленную эксплуатацию/ХНПО "Карбонат". - А08808400050; N ГР 81059147. - Харьков, 1987. - 135 с.
7. Асеев Г. Г. Разработка машинной диалоговой системы расчета физико-химических свойств растворов неизученных солей, закрепленных за подотраслью, с использованием новых экспериментальных и теоретических исследований. Программы управления базой данных по физико-химическим свойствам на основе диалоговой системы. Книга 7: Отчет о НИР/ХНПО "Карбонат"; з/н 2134858800709; N ГР 01850077344. - Харьков, 1988. - 124 с.
8. Асеев Г. Г. Электростатические, сольватационные и химические взаимодействия в концентрированных растворах электролитов/Харьков, 1988. 181 с. Деп. в ОНИИТЕХИМе, г. Черкассы, N1153-хп88.
9. Асеев Г. Г. Разработка машинной диалоговой системы расчета физико-химических свойств растворов неизученных солей, закрепленных за подотраслью, с использованием новых экспериментальных и теоретических исследований. Книга 1: Отчет о НИР/ХНПО "Карбонат"; з/н 2134858800709; N ГР 01850077344. - Харьков, 1988. - 512 с.

10. Асеев Г. Г. Расширение и внедрение автоматизированной информационно-поисковой системы расчета теплофизических свойств веществ производств, закрепленных за подотраслью. Разработка алгоритмов и программ расчета параметров физико-химических свойств веществ.

Книга 1: Отчет о НИР/ХНПО "Карбонат"; з/н А08808400050; N ГР 81059147. - Харьков, 1984. - 143 с.

11. Асеев Г. Г. Развитие теории концентрированных растворов электролитов. М.: НИИТЭХИМ. Сер. Общепромышленные вопросы.

Вып. 8(286). 1989. - 57 с.

12. Асеев Г. Г. Разработка машинной диалоговой системы расчета физико-химических свойств растворов неизученных солей, закрепленных за подотраслью, с использованием новых экспериментальных и теоретических исследований. Обработка методами регрессионного анализа экспериментальных данных по изобарной теплоемкости. Книга 5: Отчет о НИР/ХНПО "Карбонат"; з/н 2134858800709; N ГР 01850077344. -

- Харьков, 1988. - 98 с.

13. Асеев Г. Г. Расширение и внедрение автоматизированной информационно-поисковой системы расчета теплофизических свойств веществ производств, закрепленных за подотраслью. Плотность. Книга 3: Отчет о НИР/ХНПО "Карбонат"; з/н А08808400050; N ГР 81059147. -

- Харьков, 1984. - 351 с.

14. Асеев Г. Г. Исследование уравнения расчета коэффициентов активности концентрированных растворов электролитов/ХНПО "Карбонат". Харьков. 1990. 158с. Деп. в ОНИИТЕХИМ, г. Черкассы, N98-хп90.

15. Асеев Г. Г. Расширение и внедрение автоматизированной информационно-поисковой системы расчета теплофизических свойств веществ производств, закрепленных за подотраслью. Вязкость. Книга 4: Отчет о НИР/ХНПО "Карбонат"; з/н А08808400050; N ГР 81059147. -

- Харьков, 1984. - 356 с.

16. Асеев Г. Г. Разработка машинной диалоговой системы расчета физико-химических свойств растворов неизученных солей, закрепленных за подотраслью, с использованием новых экспериментальных и теоретических исследований. Обработка методами регрессионного анализа экспериментальных данных по плотности. Книга 3: Отчет о НИР/ХНПО "Карбонат"; з/н 2134858800709; N ГР 01850077344.

- Харьков, 1988. - 113 с.

17. Асеев Г. Г. Зависимость активности воды в концентрированных растворах электролитов от электростатических, сольватационных и химических взаимодействий/ХНПО "Карбонат". Харьков. 1990. 31с. Деп. в ОНИИТЕХИМе, г. Черкассы, N 202-хп90.

18. Асеев Г. Г. Разработка алгоритмов и программ расчета параметров физико-химических свойств веществ. Теплоемкость. Книга 5: Отчет о НИР/ХНПО "Карбонат"; з/н А08808400050; N ГР 81059147. - Харьков, 1984. -266 с.

19. Асеев Г. Г. Теоретическая зависимость коэффициентов активности концентрированных растворов электролитов, основанная на потенциале межионного взаимодействия/ХНПО "Карбонат". Харьков. 1989. 48с. Деп. в ОНИИТЕХИМе, г. Черкассы, N528-хп89.

20. Асеев Г. Г. Разработка алгоритмов и программ расчета параметров физико-химических свойств веществ. Теплопроводность. Книга 6: Отчет о НИР/ХНПО "Карбонат"; з/н А08808400050; N ГР 81059147. - Харьков, 1984. -281 с.

21. Асеев Г. Г. Теория необратимых процессов, протекающих в растворах электролитов. ОИ. Сер. Общеотраслевые вопросы. - М.: НИИТЭХИМ. Вып. 2(304), 1991. -74 с.

22. Асеев Г. Г. Разработка машинной диалоговой системы расчета физико-химических свойств растворов неизученных солей, закрепленных за подотраслью, с использованием новых экспериментальных и теоретических исследований. Обработка методами регрессионного анализа экспериментальных данных по теплопроводности. Книга 6: Отчет о НИР/ХНПО "Карбонат"; з/н 2134858800709; N ГР 01850077344. - Харьков, 1988. -110 с.

23. Асеев Г. Г. Создание фонда справочных данных по НТП ГСССД "Водные растворы": Отчет о НИР/ХНПО "Карбонат"; N ГР 01880088209. - Харьков, 1990. -308с.

24. Асеев Г. Г. /В кн.: Метрологическое обеспечение измерений параметров состава и свойств веществ и материалов на предприятиях и в организациях химической промышленности: Труды. Т. 67. ХНПО "Карбонат". Харьков: 1988. С. 186-190.

25. Асеев Г. Г. Разработка библиотеки программ на ЭВМ параметров физико-химических свойств для системы автоматизированного проектирования (САПР) производств нефелиновой соды: Отчет о НИР/ХНПО

"Карбонат". з/н 38-016/76-80; N ГР 78068895. -Харьков, 1980. -120 с.

26. Асеев Г. Г. /В кн.: Метрологическое обеспечение измерений параметров состава и свойств веществ и материалов на предприятиях и в организациях химической промышленности: Труды. Т. 67. ХНПО "Карбонат". Харьков: 1988. С. 181-186.

27. Асеев Г. Г. Разработка машинной диалоговой системы расчета физико-химических свойств растворов неизученных солей, закрепленных за подотраслью, с использованием новых экспериментальных и теоретических исследований. Обработка методами регрессионного анализа экспериментальных данных по динамической вязкости. Книга 4: Отчет о НИР/ХНПО "Карбонат"; з/н 2134858800709; N ГР 01850077344. -Харьков, 1988. -118 с.

28. Асеев Г. Г., Зайцев И. Д. Расчет коэффициентов активности многокомпонентных растворов сильных электролитов/Укр. хим. журн. Киев: 1982. Т. 48. №6. С. 596-600.

29. Асеев Г. Г., Калужная Л. Н. /В кн.: Научно-технический прогресс в производстве химических веществ и материалов. Киев: Наукова думка, 1984. С. 99-100.

30. Асеев Г. Г., Юдина Л. В. Средние ионные коэффициенты активности сильных электролитов в водных растворах, зависящие от электростатических, сольватационных и химических взаимодействий/ХНПО "Карбонат". Харьков. 1990. 207с. Деп. в ОНИИТЕХИме, г. Черкассы, №688-хп90.

31. САПР технологических процессов. Выбор и расчет конструктивных и технологических параметров оборудования в т. ч.: отстойники: Отчет о НИР/ХНПО "Карбонат"; Асеев Г. Г., Шац В. И., Юдина Л. В. N ГР 01830046016. -Харьков, 1984. -32с.

32. Асеев Г. Г., Юдина Л. В. Активность воды в концентрированных растворах электролитов и межионные взаимодействия/ХНПО "Карбонат". Харьков. 1990. 53с. Деп. в ОНИИТЕХИме, г. Черкассы, N 133-хп91.

33. САПР технологических процессов. Выбор и расчет конструктивных и технологических параметров оборудования в т. ч.: сушилки барабанного типа: Отчет о НИР/ХНПО "Карбонат"; Асеев Г. Г., Шац В. И., Юдина Л. В. N ГР 01830046016. -Харьков, 1984. -68с.

34. Асеев Г. Г., Юдина Л. В., Бердник В. П. Алгоритмы расчета технологических параметров известково-обжигательной печи, работающей

на твердом топливе/Харьков. 1979. 10с. Деп. в ОНИИТЕХИМ, г. Черкассы, N 3010/79.

35. САПР технологических процессов. Выбор и расчет конструктивных и технологических параметров оборудования в т.ч.: скрубберы Вентурри: Отчет о НИР/ХНПО "Карбонат"; Асеев Г. Г., Шац В. И., Юдина Л. В. N ГР 01830046016. - Харьков, 1984. - 47с.

36. Асеев Г. Г., Токарь М. И. /В кн.: Научно-технический прогресс в производстве химических веществ и материалов. Киев: Наукова думка, 1984. С. 98-99.

37. САПР технологических процессов. Выбор и расчет конструктивных и технологических параметров оборудования в т.ч.: барометрические конденсаторы: Отчет о НИР/ХНПО "Карбонат"; Асеев Г. Г., Шац В. И., Юдина Л. В. N ГР 01830046016. - Харьков, 1984. - 36с.

38. Асеев Г. Г., Зайцев И. Д., Зозуля А. Ф. Автоматизированная справочно-поисковая система по термодинамическим и теплофизическим свойствам водных растворов электролитов. ЭИ. Серия: Содовая промышленность. М.: НИИТЭХИМ, 1979. N 4. - 10 с.

39. САПР технологических процессов. Выбор и расчет конструктивных и технологических параметров оборудования в т.ч.: распылительные сушилки. Отчет о НИР/ХНПО "Карбонат"; Асеев Г. Г., Шац В. И., Юдина Л. В. N ГР 01830046016. - Харьков, 1984. - 58с.

40. Асеев Г. Г., Хоменко А. З., Юдина Л. В. Математическая модель сушилок распыливающего типа/Харьков. 1979. 15с. Деп. в ОНИИТЕХИМ г. Черкассы, N 3009/79.

41. САПР технологических процессов. Выбор и расчет конструктивных и технологических параметров оборудования в т.ч.: сушилки пневматического типа: Отчет о НИР/ХНПО "Карбонат"; Асеев Г. Г., Шац В. И., Юдина Л. В. N ГР 01830046016. - Харьков, 1984. - 37с.

42. Асеев Г. Г., Токарь М. И., Калужная Л. Н. /В кн.: Научно-технический прогресс в производстве химических веществ и материалов. Киев: Наукова думка, 1984. С. 98-99.

43. САПР технологических процессов. Выбор и расчет конструктивных и технологических параметров оборудования в т.ч.: пенные газопромыватели. Отчет о НИР/ХНПО "Карбонат"; Асеев Г. Г., Шац В. И., Юдина Л. В. N ГР 01830046016. - Харьков, 1984. - 44с.

44. Создание САПР содовой промышленности. Разработка математи-

ческой модели, алгоритма и программы оптимизационного расчета технологических параметров известково-обжигательной печи шахтного типа на газообразном топливе: Отчет о НИР/НИОХИМ; Асеев Г. Г.

№ ГР 79076385. Харьков, 1979. -39 с.

45. САПР технологических процессов. Выбор и расчет конструктивных и технологических параметров оборудования в т.ч.: циклоны Отчет о НИР/ХНПО "Карбонат"; Асеев Г. Г., Шац В. И., Юдина Л. В.

№ ГР 01830046016. -Харьков, 1984. -27с.

46. САПР технологических процессов. Выбор и расчет конструктивных и технологических параметров оборудования в т.ч.: рукавные фильтры. Отчет о НИР/ХНПО "Карбонат"; Асеев Г. Г., Шац В. И., Юдина Л. В.

№ ГР 01830046016. -Харьков, 1984. -27с.

47. Зайцев И. Д., Асеев Г. Г. О расчете активности воды концентрированных растворов электролитов /Журн. физ. химии. 1982. Т. 36.

Вып. 2. С. 397-399.

48. Зайцев И. Д., Асеев Г. Г. Автоматизированная информационно-поисковая система по теплофизическим свойствам неорганических веществ /Упр. сист. и машины. Киев: 1982. С. 122-124.

49. Зайцев И. Д., Асеев Г. Г. Методы расчета вязкости неорганических газов с применением ЭВМ /Журн. физ. химии. 1982. Т. 56. Вып. 8. С. 2086-2088.

50. Зайцев И. Д., Асеев Г. Г. Исследование погрешностей методов расчета динамической вязкости газовых смесей в технологии неорганических веществ /Харьков, 1981. 105с. Деп. в ОНИТЕХИМе, г. Черкассы, № 540хп-Д81.

51. Зайцев И. Д., Асеев Г. Г. Опыт эксплуатации САПФИР (системы автоматизированного поиска и расчета параметров физико-химических свойств неорганических веществ на ЭВМ). -III Всесоюзная конференция: Математическое моделирование сложных химико-технологических систем (СХТС-III). Таллин: 1982, ч. 2. С. 56.

52. Зайцев И. Д., Асеев Г. Г. Система САПФИР для автоматизированного поиска параметров и расчета физико-химических свойств неорганических веществ /Информ. бюл. по хим. пром-ти (ПК по хим. пром-ти СЭВ). М.: 1979. № 5(80). С. 37-39.

53. Зайцев И. Д., Асеев Г. Г. Система САПФИР для расчета физико-химических свойств неорганических веществ и их смесей /Информ. бюл.

по хим. пром-ти (ПК по хим. пром-ти СЭВ). М.: 1984. N2(105). С. 33.

54. Зозуля А. Ф., Асеев Г. Г. Циклический метод анализа и расчета потоковых схем в системах автоматизированного проектирования/Автоматиз. сист. управл. и приоб. авт-ки. Харьков. 1979. N 50. С. 132-135.

55. Зозуля А. Ф., Асеев Г. Г. Об одном методе моделирования сложных потоковых схем/Автоматиз. сист. управл. и приоб. авт-ки. Харьков. 1979. N 52. С. 60-64.

56. Зозуля А. Ф., Асеев Г. Г. Опыт использования автоматизированной системы материальных и тепловых балансов при создании интенсивной технологии регенерации аммиака/В кн.: Проблемы использования материальных и энергетических ресурсов, состояние охраны природы и пути достижения норм предельно допустимых концентраций на предприятиях содовой подотрасли. Черкассы, 1991. С. 27-29.

57. Систематизация методов расчета агрегатно-фазового состояния "Газы и газовые смеси". Пакет прикладных программ. Т. 5.: Отчет о НИР/ХНПО "Карбонат"; Зайцев И. Д., Асеев Г. Г. -з/н 38-003/77-80; N ГР 77045565. -Харьков, 1980. -107 с.

58. Систематизация методов расчета и нормативная информация агрегатно-фазового состояния "Твердые вещества": Отчет о НИР/НИО-ХИМ; Зайцев И. Д., Асеев Г. Г. -з/н 38-003/77-80. Т. 4. N ГР 77045565. -Харьков, 1980. -63 с.

59. Зайцев И. Д., Асеев Г. Г., Цейтлин Н. А. Методы расчета на ЭВМ параметров физико-химических свойств водных растворов электролитов/Харьков, 1980. 20с. Деп. в ОНИИТЕХИМе, г. Черкассы, N3264/79.

60. Зозуля А. Ф., Асеев Г. Г., Юдина Л. В. Оптимальное проектирование сушилок барабанного типа с применением ЭВМ/В кн.: IV Республиканская конференция. Повышение эффективности, совершенствование процессов и аппаратов химических производств. II часть, системное проектирование, тепловые и химико-технологические процессы. Харьков: 1976. С. 16.

61. Зозуля А. Ф., Асеев Г. Г., Цветков Г. А. /В кн.: Механизация и автоматизация управления. Киев: 1977. N 4. С. 10.

62. Зозуля А. Ф., Асеев Г. Г., Спесивцев В. Ю. Информационное обеспечение подсистемы автоматизированных расчетов МТБ ХТС/Автоматиз. сист. управл. и приоб. авт-ки. Харьков. 1978. N 47. С. 113-118.

63. Систематизация экспериментальных данных плотности, вязко-

сти, теплопроводности, теплоемкости, энтальпии, активности, температур кипения и замерзания, растворимости водно-солевых систем: Отчет о НИР/НИОХИМ; Зайцев И. Д., Асеев Г. Г., Книгавко И. П. -з/н 38-003/77-80. Т. 2. N ГР 77045565. -Харьков, 1980. -311 с.

64. Обзор существующих разработок по библиотекам программ свойств (БПС). Т. 1. : Отчет о НИР/ХНПО "Карбонат"; Зайцев И. Д., Асеев Г. Г., Цейтлин Н. А. -з/н 38-003/77-80; N ГР 77045565. -Харьков, 1980. -236 с.

65. Моделирование газопарожидкостных систем содового и смежных производств: Отчет о НИР/ХНПО "Карбонат"; Зайцев И. Д., Асеев Г. Г., Цейтлин Н. А. -з/н 38-003/77-80; N ГР 77045565. -Харьков, 1980. -153 с

66. Зайцев И. Д., Асеев Г. Г., Хоменко А. З., Юдина Л. В. Оптимизационная модель сушилок аэрофонтанного и пневматического типа/Харьков 1979. 20с. Деп. в ОНИИТЕХИМе, г. Черкассы, N 3008/79.

67. Зайцев И. Д., Зозуля А. Ф., Асеев Г. Г. Расчет физико-химических свойств веществ производств основной химии/Информ. бюл. по хим. пром-ти(ПК по хим. пром-ти СЭВ). М.: 1978. N2(71). С. 41-44.

68. Зайцев И. Д., Зозуля А. Ф., Асеев Г. Г. Автоматизация расчетов газопарожидкостных систем аммиачно-содового производства. ЭИ. Серия: Содовая промышленность. М.: НИИТЭХИМ, 1980. N 1. -11 с.

69. Зайцев И. Д., Зозуля А. Ф., Асеев Г. Г. Расчет физико-химических свойств газопарожидкостных систем основной химии/Информ. бюл. по хим. пром-ти (ПК по хим. пром-ти СЭВ). М.: 1980. N2(83). С. 80-81.

70. Зайцев И. Д., Зозуля А. Ф., Асеев Г. Г. Структура библиотеки программ расчета параметров физико-химических свойств веществ для производств основной химии/В кн.: Математическое моделирование и системный анализ технологических процессов (материалы всесоюзного совещания). Киев: Наукова думка, 1981. С. 41-42.

71. Зайцев И. Д., Зозуля А. Ф., Асеев Г. Г. К вопросу оптимизации аппаратурно-технологических схем химических производств/Харьков, 1977. 11с. Деп. в ОНИИТЕХИМе, г. Черкассы, N 1149/77.

72. Зайцев И. Д., Зозуля А. Ф., Асеев Г. Г. Оптимизационный расчет технологических параметров известково-обжигательной печи, работающей на газообразном топливе/Современные проблемы химии и химической промышленности. Сводный обзор программ для расчетов на ЭВМ, применяемых при проектировании химических предприятий в странах-чле-

нах СЭВ. М. : НИИТЭХИМ. 1981. N 10(112). С. 29-30.

73. Зайцев И. Д., Зозуля А. Ф., Асеев Г. Г. Расчет пневматических сушилок/Современные проблемы химии и химической промышленности. Сводный обзор программ для расчетов на ЭВМ, применяемых при проектировании химических предприятий в странах-членах СЭВ. М. : НИИТЭХИМ. 1981. N 10(112). С. 29-30.

74. Зайцев И. Д., Зозуля А. Ф., Асеев Г. Г. О методах и погрешностях расчета коэффициентов диффузии смесей неорганических газов. Харьков, 1981. 127с. Деп. в ОНИИТЕХИМЕ, г. Черкассы, N741хп-Д81.

75. Зайцев И. Д., Зозуля А. Ф., Асеев Г. Г. Исследование погрешностей методов расчета теплопроводности газов основной химии/Харьков, 1981. 52с. Деп. в ОНИИТЕХИМЕ, г. Черкассы, N471хп-Д81.

76. Зайцев И. Д., Зозуля А. Ф., Асеев Г. Г. Исследование погрешностей методов расчета теплопроводности смесей неорганических газов. Харьков, 1981. 126с. Деп. в ОНИИТЕХИМЕ, г. Черкассы, N524хп-Д81.

77. Зозуля А. Ф., Романий П. Г., Асеев Г. Г. Об одном алгоритме расчета балансовых уравнений сложных химико-технологических систем Автоматиз. сист. управл. и приоб. авт-ки. Харьков. 1983. N 65. С. 54-59.

78. Зозуля А. Ф., Романий П. Г., Асеев Г. Г. Последовательно-декомпозиционный метод расчета балансовых уравнений сложных технологических комплексов с обратными потоками/Автоматиз. сист. управл. и приоб. авт-ки. Харьков. 1983. N 66. С. 33-41.

79. Зозуля А. Ф., Романий П. Г., Асеев Г. Г. Построение вычислительной последовательности при декомпозиционном методе расчета сложных технологических систем/Автоматиз. сист. управл. и приоб. авт-ки. Харьков. 1983. N 68. С. 21-25.

80. Зозуля А. Ф., Романий П. Г., Асеев Г. Г. Человеко-машинная система формирования решений несовместных балансовых моделей сложных технологических комплексов/Информ. бюл. по хим. пром-ти (ПК по хим. пром-ти СЭВ). М. : 1988. N 2. С. 41-42.

81. Романий П. Г., Зозуля А. Ф., Асеев Г. Г. Использование методологии системной оптимизации при балансовых расчетах технологических комплексов/Информ. бюл. по хим. пром-ти (ПК по хим. пром-ти СЭВ). М. : 1990. N 6(133). С. 54-55.

82. Черненькая Е. И., Павлюченко Е. Н., Асеев Г. Г. Исследование теплоемкости водных растворов бромидов калия, аммония, магния и кад-

мия в зависимости от температуры и концентрации/Харьков, 1985. 8с.  
Деп. в ОНИИТЕХИМе, г. Черкассы, N1198хп-85деп.

83. Черненко Е. И., Павлыченко Е. Н., Асеев Г. Г. Теплоемкость растворов хлоридов некоторых металлов четвертого периода при температурах от 298,15 до 348,15 К/Харьков, 1985. 11с. Деп. в ОНИИТЕХИМе, г. Черкассы, N1077хп-85деп.

84. Разработать библиотеку программ расчета на ЭВМ параметров физико-химических свойств веществ для системы автоматизированного проектирования (САПР) производств соды аммиачным способом, бариевых соединений, белой сажи. Математическое обеспечение ЭВМ по статистике. Т. 6. Отчет о НИР/НИОХИМ; Зайцев И. Д., Цейтлин Н. А., Асеев Г. Г. -з/н 38-003/77-80. N ГР 77045565. -Харьков, 1980. -242 с.

85. Разработка диалоговых процедур решения задач оптимизации в САПР. Системная оптимизация стационарных режимов сложных химико-технологических систем на основе балансовых моделей: Отчет о НИР/ХИРЭ; Романий П. Г., Зозуля А. Ф., Асеев Г. Г. з/н 85-11; N ГР 01850067843. Харьков, 1990. -179 с.

86. Зайцев И. Д., Можарова Т. В., Асеев Г. Г. и др. Физико-химические свойства бинарных водных растворов электролитов в широкой области концентраций и температур. Справочное пособие/Харьков. 147с. Деп. в ОНИИТЕХИМе, г. Черкассы, N576-хп88.

87. Зайцев И. Д., Зозуля А. Ф., Асеев Г. Г., Юдина Л. В. Подсистема автоматизированного расчета теплофизических свойств твердых веществ неорганической химии с нормативной информацией/Харьков, 1981. 35с. Деп. в ОНИИТЕХИМе, г. Черкассы, N 83хп-Д81.

88. Гогунский В. Д., Зайцев И. Д., Асеев Г. Г. и др. Система автоматизированного поиска параметров физико-химических свойств неорганических веществ и их расчета (программа САПФИР). Одесса: ОПИ, 1987. -28 с.

89. Зозуля А. Ф., Зайцев И. Д., Асеев Г. Г. и др. /В кн.: Математические методы в проектировании производств основной химии (НИОХИМ) Харьков, 1976. С. 25-28.

90. Зайцев И. Д., Зозуля А. Ф., Асеев Г. Г. и др. Расчет распылительных сушилок/Информ. бюл. по хим. пром-ти (ПК по хим. пром-ти СЭВ). М.: 1979. N 5(80). С. 99-100.

91. Зозуля А. Ф., Романий П. Г., Асеев Г. Г. и др. Реализация после-

довательно-декомпозиционного метода расчета балансовых уравнений для технологических комплексов с обратными потоками/Автоматиз. сист. и приоб. авт-ки. Харьков. 1983. N 67. С. 45-53.

92. Зайцев И. Д., Зозуля А. Ф., Асеев Г. Г. и др. Система автоматизированного проектирования предприятий содовой промышленности (САПР "Карбонат"). Киев: ВДНХ УССР. 1990.

93. Зайцев И. Д., Зозуля А. Ф., Асеев Г. Г. и др. Оптимальный расчет известково-обжигательной печи шахтного типа/Информ. бюл. по хим. пром-ти (ПК по хим. пром-ти СЭВ). М.: 1979. N 5(80). С. 99-100.

94. Зайцев И. Д., Зозуля А. Ф., Асеев Г. Г., Черноусова В. Г. Исследование точности методов расчета динамического коэффициента вязкости неорганических газов/Харьков, 1981. 82с. Деп. в ОНИИТЕХИме, г. Черкассы, N365хп-Д81.

95. Расчет параметров физико-химических свойств растворов электролитов//И. Д. Зайцев, А. Ф. Зозуля, Г. Г. Асеев и др. /Информ. бюл. по хим. пром-ти (ПК по хим. пром-ти СЭВ). М.: 1979. N5(80). С. 95-96.

96. Система программ для расчета физико-химических свойств твердых веществ, газов и газовых смесей/И. Д. Зайцев, А. Ф. Зозуля, Г. Г. Асеев и др. Информ. бюл. по хим. пром-ти (ПК по хим. пром-ти СЭВ). М.: 1978. N 5(74). С. 66-67.

97. Расчет барометрического конденсатора/И. Д. Зайцев, А. Ф. Зозуля, Г. Г. Асеев и др. Информ. бюл. по хим. пром-ти (ПК по хим. пром-ти СЭВ). М.: 1977. N 2(65). С. 89-90.

98. Программа расчета технологических режимов и конструктивных параметров скрубберов Вентури/И. Д. Зайцев, А. Ф. Зозуля, Г. Г. Асеев и др. Фонд алгоритмов и программ ВНИИЦентр. 1990. N 50900000593.

99. Программа расчета технологических режимов и конструктивных параметров сушилок пневматического типа/И. Д. Зайцев, А. Ф. Зозуля, Г. Г. Асеев и др. Фонд алгоритмов и программ ВНИИЦентр. 1990. N 50900000614.

100. Программа расчета технологических режимов и конструктивных параметров рукавных фильтров/И. Д. Зайцев, А. Ф. Зозуля, Г. Г. Асеев и др. Фонд алгоритмов и программ ВНИИЦентр. 1990. N 50900000595.

101. Расчет и выбор барабанных сушилок/И. Д. Зайцев, А. Ф. Зозуля, Г. Г. Асеев и др. Информ. бюл. по хим. пром-ти (ПК по хим. пром-ти СЭВ). М.: 1977. N 2(65). С. 89-90.

102. Программа расчета технологических режимов и конструктивных параметров циклонов/И. Д. Зайцев, А. Ф. Зозуля, Г. Г. Асеев и др. Фонд алгоритмов и программ ВНИЦентр. 1990. N 50900000596.

103. Пакет программ по расчету материального и теплового балансов производства кальцинированной соды по аммиачному способу/А. Ф. Зозуля, В. Ю. Спесивцев, Г. Г. Асеев и др. РФАП АН УССР. Киев: 1977. N 138.

104. Программа расчета технологических режимов и конструктивных параметров химико-технологических систем/И. Д. Зайцев, А. Ф. Зозуля, Г. Г. Асеев и др. Фонд алгоритмов и программ ВНИЦентр. 1990. N 50900000592.

105. Программа расчета технологических режимов и конструктивных параметров барабанных сушилок/И. Д. Зайцев, А. Ф. Зозуля, Г. Г. Асеев и др. Фонд алгоритмов и программ ВНИЦентр. 1990. N 50900000618.

106. Пакет программ по расчету технологического оборудования химической промышленности/И. Д. Зайцев, А. Ф. Зозуля, Г. Г. Асеев и др. РФАП АН УССР. Киев: 1977. N 139.

107. Программа расчета прямоточной выпарной установки с количеством корпусов от 2-х до 6-ти и с возможностью ограничения температуры кипения в любом корпусе, с подогревом раствора экстрапаром и с универсальной системой расширения конденсата/И. Д. Зайцев, А. Ф. Зозуля, Г. Г. Асеев и др. Фонд алгоритмов и программ ВНИЦентр. 1990. N 50900000515.

108. Расчет параметров физико-химических свойств газов и газовых смесей/И. Д. Зайцев, А. Ф. Зозуля, Г. Г. Асеев и др. Информ. бюл. по хим. пром-ти (ПК по хим. пром-ти СЭВ). М.: 1977. N5(68). С. 105-106.

109. Зайцев И. Д., Зозуля А. Ф., Романий П. Г., Асеев Г. Г. Система программ для решения балансовых моделей сложных химико-технологических комплексов/Информ. бюл. по хим. пром-ти (ПК по хим. пром-ти СЭВ). М.: 1987. N 4(117). С. 60-61.

110. Зайцев И. Д., Зозуля А. Ф., Шац В. И., Асеев Г. Г., Шемраев В. Н. К вопросу создания и функционирования библиотеки физико-химических свойств веществ в условиях САПРХИМ/В кн.: IV Республиканская конференция. Повышение эффективности, совершенствование процессов и аппаратов химических производств. II часть, системное проектирование, тепловые и химико-технологические процессы. Харьков: 1976. С. 4-5.



Подписано к печати 11.01.93г. Зак. № 01

Бумага типографская. Объем 3 п.л. т. 100 экз.

РПН ХНПО "Карбонат" 310002 г. Харьков, ул. Мироносицкая, 25

AB 26.405