



УДК 519.95

Ю. В. Кук, канд. физ.-мат. наук, **Е. И. Лаврикова**
Ин-т кибернетики им. В. М. Глушкова НАН Украины
(Украина, 03680, Киев, пр-т Академика Глушкова, 40,
тел.: (044)5263209, e-mail: 1913@i.com.ua, icdepval@ln.ua)

Применение моделирования знаний в семантических сетях «объект—свойство» для проектирования новых химических соединений с заданными свойствами

Представлено моделирование знаний в семантических сетях «объект—свойство». Предложена методика получения новых знаний о составе соединений с требуемыми свойствами, которая основана на измерении расстояний между группами свойств. Рассмотрено ее применение при получении новых химических соединений, обладающих электрооптическими свойствами.

Наведено моделювання знань у семантичних мережах «об'єкт—властивість». Запропоновано методику отримання нових знань про склад сполук з необхідними властивостями, яка базується на вимірі відстаней між групами властивостей. Розглянуто її застосування при отриманні нових хімічних сполук з електрооптичними властивостями.

К л ю ч е в ы е с л о в а: моделирование, знания, семантическая сеть, расстояния, свойства.

Различные виды знаний образуют иерархическую систему, отдельные элементы которой связаны структурными и семантическими связями. Поэтому с учетом работы [1], в которой рассматривается специальный тип сетевой структуры — сеть «объект — свойство», систему знаний удобно представлять в виде семантической сети, вершины которой соответствуют понятиям, а дуги отношениям между понятиями. Эта сеть представляет собой ориентированный ациклический граф, в котором вершины соответствуют объектам и свойствам. Будем рассматривать два типа объектов — составные и первичные — и два типа свойств: свойства составных и свойства первичных объектов (ПО). Под первичными будем понимать объекты, входящие в состав составных объектов. Предлагаемая процедура получения новых знаний о составе сложных объектов, обладающих нужными свойствами, основана на измерении расстояний между группами свойств ПО [2]. Проектирование структуры соединений с требуемыми

свойствами является важной прикладной проблемой, которую поможет решить разработка эффективного математического метода получения новых знаний о структуре составных объектов, обладающих нужными свойствами.

Сеть объект — свойство. Семантическая сеть объект — свойство представляет собой четырехслойный граф пирамидальной сети, отдельные слои которого образуют его вершины. Обозначим P, A, S, V следующие множества вершин сети объект — свойство. Слой P соответствует свойствам, обозначающим свойства и отношения ПО. Элементы P — первичные свойства. Слой A соответствует наименованиям ПО. Слой S соответствует наименованиям составных объектов, слой V — свойствам составных объектов. Вершины слоя A , соответствующие ПО, соединяются дугами с вершинами слоя P , представляющими первичные свойства, а вершины слоя S , соответствующие составным объектам, соединяются дугами с вершинами слоя V , представляющими свойства составных объектов. Дуги направлены от первичных и составных объектов к свойствам. Кроме того, вершины слоя A , соответствующие ПО, соединяются дугами с вершинами слоя S , представляющими составные объекты. Дуги направлены от ПО к соединениям, причем ПО, от которых исходят дуги, входят в состав тех составных объектов, в котором эти дуги заканчиваются.

Общие принципы получения новых знаний в сети. Новые знания в сети объект — свойство получают выводом по аналогии. Вывод рассуждений по аналогии основан на перенесении рассуждений из исследованной области на гомоморфную, т. е. область в некотором смысле похожую на исследованную. В качестве исследованной области для логического вывода рассуждений по аналогии принимают две группы сложных объектов G_1 и G_2 некоторой предметной области. Группа G_1 состоит из объектов, каждый из которых обладает хотя бы одним из требуемых свойств V^+ . В группу G_2 входят соединения из предметной области, обладающие нежелательными свойствами V^- .

Задача состоит в том, чтобы наилучшим образом построить гомоморфную область, т.е. требуется сконструировать объекты группы G_3 , для которых с максимальной вероятностью можно сделать следующий логический вывод рассуждений по аналогии: объекты группы G_3 суммарно обладают свойствами объектов группы G_1 и не обладают свойствами объектов группы G_2 . Такой вывод есть не что иное, как некоторое новое знание о составе объектов, обладающих нужными свойствами. Очевидно, что достоверность такого знания требует дальнейшей проверки на практике.

Предполагаем, что степень подобия объектов гомоморфной области объектам исследованной области определяется степенью похожести или

близости первичных свойств соединений группы G_3 к первичным свойствам группы G_1 и степени отличия или удаленности от первичных свойств группы G_2 . Правило вывода по аналогии можно сформулировать следующим образом.

Пусть P_1 и P_2 — множества первичных свойств соединений групп G_1 и G_2 , V^+ и V^- — соответственно желательные и нежелательные свойства соединений. Пусть P_3 — первичные свойства некоторого проектируемого соединения с неизвестными свойствами из группы G_3 . Тогда, если расстояние между множествами первичных свойств P_1 и P_3 составляет $d(P_1, P_3) < r_1$, где r_1 — некоторый порог, то $P_3 \rightarrow (V^+) \wedge (\neg V^-)$ с некоторой достоверностью q_1 , т. е. проектируемое соединение будет обладать желательными свойствами и, если $d(P_2, P_3) < r_2$, где r_2 — некоторый порог, то $P_3 \rightarrow (V^-) \wedge (\neg V^+)$ с некоторой достоверностью q_2 , т. е. проектируемое соединение будет обладать нежелательными свойствами. Здесь исследованная область — G_1 и G_2 , а гомоморфная ей — группа G_3 . Для применения этого правила необходимо правильно измерять расстояние между множествами первичных свойств.

Построение меры для измерения расстояния между свойствами.

Мера для измерения степени близости групп свойств должна обладать следующим естественным свойством: максимально различать разные группы свойств. Построим меру, удовлетворяющую этому свойству. Обозначим N — число первичных свойств в семантической сети объект — свойство, M — число свойств составных объектов, $n(k)$ — число ПО, входящих в составной объект s_k . Символами p_1, \dots, p_N обозначим первичные свойства сети. Будем кодировать свойство, выражающее некоторое качество объекта, числом 1 при наличии данного качества у объекта, а числом 0 — в случае его отсутствия. Числовые свойства объектов будем кодировать числами, которые выражают эти свойства.

Вектором кодов $x_k = (x_{1k}, x_{2k}, \dots, x_{Nk})$ первичных свойств составного объекта s_k назовем вектор, элементами которого являются коды для s_k всех первичных свойств, входящих в семантическую сеть объект — свойство.

Усредненным вектором кодов для группы составных объектов $G_1 = \{s_1^{(1)}, s_2^{(1)}, \dots, s_K^{(1)}\}$ назовем вектор $h^{(1)} = (\bar{x}_1^{(1)}, \bar{x}_2^{(1)}, \dots, \bar{x}_N^{(1)})$, координаты которого равны покомпонентным средним значениям кодов первичных свойств всех составных объектов, входящих в данную группу:

$$\bar{x}_1^{(1)} = \frac{1}{K} \sum_{v=1}^K x_{1v}^{(1)}, \dots, \bar{x}_N^{(1)} = \frac{1}{K} \sum_{v=1}^K x_{Nv}^{(1)}.$$

Векторы кодов первичных свойств некоторой группы составных объектов представляют собой совокупность точек в пространстве R_N . Если имеются две группы составных объектов, то получим две такие сово-

купности точек. В качестве меры для измерения степени близости групп свойств целесообразно взять меру, построенную следующим образом.

Для каждой из совокупностей точек находят точки с усредненными координатами, которые представляют собой усредненные векторы кодов соответствующих групп. В качестве меры близости этих групп берут евклидову длину расстояния между ними. Однако построенная таким способом мера не является оптимальной, поскольку она не обладает свойством максимального различения разных групп свойств. Для нахождения меры, обладающей таким свойством, построим в R_N одномерное подпространство W (некоторую прямую линию) и спроектируем на это подпространство обе совокупности точек. В результате получим два в общем случае пересекающихся множества точек на этой прямой.

Поскольку выбор направления линии W влияет на расстояния между проекциями векторов кодов и, следовательно, на их близость, то прямая W должна быть выбрана так, чтобы центры проекций \bar{z}_1 и \bar{z}_2 векторов кодов из разных групп составных объектов были удалены один от другого настолько далеко, насколько это возможно. Такой выбор направления прямой позволит наиболее оптимально различать разные группы составных объектов. Полученное в результате такой оптимизации расстояние между точками \bar{z}_1 и \bar{z}_2 следует взять в качестве меры близости свойств обеих групп. Подпространство W , на которое проектируются векторы кодов первичных свойств составных объектов, назовем проективной прямой.

Проекция z_k векторов кодов первичных свойств $x_k = (x_{1k}, x_{2k}, \dots, x_{Nk})$ составного объекта s_k на прямую W определяется формулой

$$z_k = c_1 x_{1k} + c_2 x_{2k} + \dots + c_N x_{Nk}, \quad (1)$$

где c_1, c_2, \dots, c_N — косинусы углов, образуемых прямой W с осями координат.

Разбросом относительно произвольной точки z проекций векторов кодов первичных свойств для группы составных объектов назовем суммарное расстояние этих проекций до точки z и обозначим $D_1(z)$.

Центром проекций группы составных объектов назовем среднее значение проекций для векторов кодов первичных свойств данной группы. Пусть G_1 и G_2 — две группы составных объектов, состоящих соответственно из K и L составных объектов. Для каждого составного объекта из этих групп построим на основе семантической сети объект — свойство вектор кодов его первичных свойств. Получим $K+L$ векторов, которые в пространстве R_N отобразятся двумя множествами векторов: X_1 и X_2 . Спроецируем эти множества на проективную прямую. Обозначим множества проекций X_1 и X_2 соответственно Z_1 и Z_2 , а их центры — \bar{z}_1 и \bar{z}_2 :

$$\bar{z}_1 = \frac{1}{K} \left(z_1^{(1)} + z_2^{(1)} + \dots + z_K^{(1)} \right), \quad \bar{z}_2 = \frac{1}{L} \left(z_1^{(2)} + z_2^{(2)} + \dots + z_L^{(2)} \right). \quad (2)$$

Общим разбросом относительно некоторой точки z проекций для векторов кодов первичных свойств объединенной группы составных объектов $G = G_1 \cup G_2$ назовем суммарное расстояние проекций объединенной группы составных объектов $G = G_1 \cup G_2$ до точки z . Обозначим его $D(z)$.

Общий центр объединенного множества проекций $Z = Z_1 \cup Z_2$ имеет вид

$$\bar{z} = \frac{1}{K+L}(z_1^{(1)} + z_2^{(1)} + \dots + z_K^{(1)} + z_1^{(2)} + z_2^{(2)} + \dots + z_L^{(2)}). \quad (3)$$

Вектор разности h усредненных векторов кодов для групп составных объектов G_1 и G_2 , умноженный на коэффициент

$$\sqrt{\frac{KL}{K+L}}, h = h^{(1)} - h^{(2)} = \sqrt{\frac{KL}{K+L}}(\bar{x}_1^{(1)} - \bar{x}_1^{(2)}, \bar{x}_2^{(1)} - \bar{x}_2^{(2)}, \dots, \bar{x}_N^{(1)} - \bar{x}_N^{(2)}),$$

имеет следующие компоненты:

$$h_j = \sqrt{\frac{KL}{K+L}}(\bar{x}_j^{(1)} - \bar{x}_j^{(2)}), \quad j=1, \dots, N.$$

Построим квадратную матрицу $H = h^T h$, где верхний индекс T обозначает операцию транспонирования с элементами

$$g_{jk} = h_j h_k = \frac{KL}{K+L}(\bar{x}_j^{(1)} - \bar{x}_j^{(2)})(\bar{x}_k^{(1)} - \bar{x}_k^{(2)}), \quad j, k=1, \dots, N. \quad (4)$$

Введем матрицы $B^{(1)}$, $B^{(2)}$ и $B = B^{(1)} + B^{(2)}$, состоящие соответственно из элементов

$$\begin{aligned} b_{ij}^{(1)} &= \sum_{u=1}^K (x_{iu}^{(1)} - \bar{x}_u^{(1)})(x_{ju}^{(1)} - \bar{x}_u^{(1)}), \quad i, j=1, \dots, N, \\ b_{ij}^{(2)} &= \sum_{u=1}^L (x_{iu}^{(2)} - \bar{x}_u^{(2)})(x_{ju}^{(2)} - \bar{x}_u^{(2)}), \quad i, j=1, \dots, N, \\ b_{ij} &= b_{ij}^{(2)} + b_{ij}^{(1)}, \quad i, j=1, \dots, N. \end{aligned} \quad (5)$$

Предположим, что матрица B не вырождена. Обозначим $b_{jk}^{(-1)}$ элементы матрицы B^{-1} , обратной матрице B . Докажем следующую теорему о значениях направляющих косинусов углов прямой W .

Теорема 1. Для того чтобы проективная прямая W обеспечивала максимум расстояния между центрами проекций \bar{z}_1 и \bar{z}_2 векторов кодов групп соединений G_1 и G_2 при фиксированном значении разбросов проекций каждой группы относительно своего центра, достаточно, чтобы вектор значений направляющих косинусов углов проективной прямой W

являлся собственным вектором матрицы $B^{-1}H$ для ее ненулевого собственного значения $l = hB^{-1}h^T$.

Доказательство. Общий разброс проекций для векторов кодов первичных свойств составных объектов объединенной группы $G = G_1 \cup G_2$ относительно общего центра \bar{z} имеет вид

$$D(\bar{z}) = (z_1^{(1)} - \bar{z})^2 + \dots + (z_K^{(1)} - \bar{z})^2 + (z_1^{(2)} - \bar{z})^2 + \dots + (z_L^{(2)} - \bar{z})^2. \quad (6)$$

Преобразуем (6) к виду

$$\begin{aligned} D(\bar{z}) &= (z_1^{(1)} - \bar{z}_1 + \bar{z}_1 - \bar{z})^2 + \dots + (z_K^{(1)} - \bar{z}_1 + \bar{z}_1 - \bar{z})^2 + \\ &+ (z_1^{(2)} - \bar{z}_2 + \bar{z}_2 - \bar{z})^2 + \dots + (z_L^{(2)} - \bar{z}_2 + \bar{z}_2 - \bar{z})^2 = \\ &= (z_1^{(1)} - \bar{z}_1)^2 + (\bar{z}_1 - \bar{z})^2 + \dots + (z_K^{(1)} - \bar{z}_1)^2 + (\bar{z}_1 - \bar{z})^2 + \\ &+ (z_1^{(2)} - \bar{z}_2)^2 + (\bar{z}_2 - \bar{z})^2 + \dots + (z_L^{(2)} - \bar{z}_2)^2 + (\bar{z}_2 - \bar{z})^2 + \\ &+ 2(\bar{z}_1 - \bar{z}) \sum_{i=1}^K (z_i^{(1)} - \bar{z}_1) + 2(\bar{z}_2 - \bar{z}) \sum_{i=1}^L (z_i^{(2)} - \bar{z}_2). \end{aligned}$$

Поскольку, $K \bar{z}_1 = \sum_{i=1}^K z_i^{(1)}$ а $L \bar{z}_2 = \sum_{i=1}^L z_i^{(2)}$, находим

$$D(\bar{z}) = D_1 + K(\bar{z}_1 - \bar{z})^2 + L(\bar{z}_2 - \bar{z})^2, \quad (7)$$

где D_1 представляет собой значение суммы разбросов для проекций векторов кодов соединений групп G_1 и G_2 относительно своих центров,

$$D_1 = \sum_{i=1}^K (z_i^{(1)} - \bar{z}_1)^2 + \sum_{i=1}^L (z_i^{(2)} - \bar{z}_2)^2.$$

Из (2) и (3) получаем

$$\bar{z} = \frac{1}{K+L} \left(\frac{K(z_1^{(1)} + z_2^{(1)} + \dots + z_K^{(1)})}{K} + \frac{L(z_1^{(2)} + z_2^{(2)} + \dots + z_L^{(2)})}{L} \right) = \frac{K \bar{z}_1 + L \bar{z}_2}{K+L}. \quad (8)$$

Подставляя (8) в (7), находим

$$D(\bar{z}) = D_1 + \frac{KL}{K+L} (\bar{z}_1 - \bar{z}_2)^2. \quad (9)$$

Обозначим второе слагаемое в (9) D_2 . Таким образом, для доказательства теоремы достаточно найти такие коэффициенты c_1, c_2, \dots, c_N , которые максимизировали бы D_2 при фиксированном значении первого слагаемого: $D_1 = \text{const} = C \neq 0$. Для решения задачи максимизации восполь-

зуюемся методом Лагранжа. Для этого введем множитель Лагранжа l и максимизируем выражение

$$f = D_2 + (C - D_1)l \quad (10)$$

по коэффициентам c_1, c_2, \dots, c_N и l . Для того чтобы найти максимум f , надо решить систему уравнений

$$\frac{\partial f}{\partial c_i} = 0, \quad i=1, \dots, N, \quad \frac{\partial f}{\partial l} = 0. \quad (11)$$

Используя (1), (2) и (5), преобразуем D_1 к виду

$$\begin{aligned} D_1 &= \sum_{i=1}^K \left(\sum_{j=1}^N c_j x_{ji}^{(1)} - \frac{1}{K} \sum_{i=1}^K \sum_{j=1}^N c_j x_{ji}^{(1)} \right)^2 + \sum_{i=1}^L \left(\sum_{j=1}^N c_j x_{ji}^{(2)} - \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^N c_j x_{ji}^{(2)} \right)^2 = \\ &= \sum_{i=1}^K \sum_{j=1}^N c_j (x_{ji}^{(1)} - \bar{x}_i^{(1)})^2 + \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^N c_j (x_{ji}^{(2)} - \bar{x}_i^{(2)})^2 = \\ &= \sum_{i=1}^K \sum_{j,k=1}^N c_j c_k (x_{ji}^{(1)} - \bar{x}_i^{(1)})(x_{ki}^{(1)} - \bar{x}_i^{(1)}) + \sum_{i=1}^L \sum_{j,k=1}^N c_j c_k (x_{ji}^{(2)} - \bar{x}_i^{(2)})(x_{ki}^{(2)} - \bar{x}_i^{(2)}) = \\ &= \sum_{j,k=1}^N c_j c_k b_{jk}^{(1)} + \sum_{j,k=1}^N c_j c_k b_{jk}^{(2)} = \sum_{j,k=1}^N c_j c_k b_{jk}. \end{aligned} \quad (12)$$

Применяя (1) и (2), преобразуем D_2 к виду

$$\begin{aligned} D_2 &= \frac{KL}{K+L} (\bar{z}_1 - \bar{z}_2)^2 = \frac{KL}{K+L} \left(\frac{1}{K} \sum_{i=1}^K \sum_{j=1}^N c_j x_{ji}^{(1)} - \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^N c_j x_{ji}^{(2)} \right)^2 = \\ &= \frac{KL}{K+L} \left(\sum_{j=1}^N c_j \bar{x}_j^{(1)} - \sum_{j=1}^N c_j \bar{x}_j^{(2)} \right)^2 = \frac{KL}{K+L} \left(\sum_{j=1}^N c_j (\bar{x}_j^{(1)} - \bar{x}_j^{(2)}) \right)^2. \end{aligned} \quad (13)$$

Используя (12) и (13), запишем выражение (10) в виде

$$f = \frac{KL}{K+L} \left(\sum_{j=1}^N c_j (\bar{x}_j^{(1)} - \bar{x}_j^{(2)}) \right)^2 + \left(C - \sum_{j,k=1}^N c_j c_k b_{jk} \right) l. \quad (14)$$

Из (11), учитывая (4) и (14), получаем следующую систему уравнений для нахождения вектора неизвестных коэффициентов $\mathbf{c} = (c_1, c_2, \dots, c_N)$:

$$\sum_{j=1}^N (h_j h_k - b_{jk} l) c_j = 0, \quad k=1, \dots, N. \quad (15)$$

В матричном виде (15) можно записать так: $(B^{-1}H - lE)\mathbf{c}^T = 0$, где E — единичная матрица. Отсюда вытекает утверждение теоремы о том, что искомое решение $\mathbf{c} = (c_1, c_2, \dots, c_N)$ является собственным вектором матрицы $B^{-1}H$ для ее ненулевого собственного значения l . Найдем это значение l из уравнения $\det(B^{-1}H - lE) = 0$, которое равносильно уравнению $\det(h_j h_k - b_{jk} l)_{j,k=1, \dots, N} = 0$. Отсюда получаем

$$l^N \det \left(\frac{h_j h_k}{l} - b_{jk} \right)_{j,k=1, \dots, N} = 0. \quad (16)$$

Используя свойства определителей, разложим определитель в правой части (16) на сумму определителей и перепишем (16) в виде

$$l^{N-1} \left[-l \det B - \sum_{i=1}^N h_i \det B_i - \sum_{i_1, \dots, i_K} (h_{i_1} \dots h_{i_K}) \det B_{i_1, \dots, i_K} \right] = 0. \quad (17)$$

Здесь B_i — матрица, получаемая из матрицы B заменой в ней i -го столбца на вектор-столбец h^T . Символом B_{i_1, \dots, i_K} обозначена матрица, получаемая из матрицы B заменой в ней нескольких столбцов i_1, i_2, \dots, i_K , $K > 1$, на вектор-столбец h^T . В силу этого определитель такой матрицы равен нулю, и, следовательно, (17) можно переписать в виде

$$l^{N-1} \det B \left[l - \sum_{i=1}^N h_i \frac{\det B_i}{\det B} \right] = 0. \quad (18)$$

Рассмотрим вспомогательную систему линейных уравнений $(yB)^T = h^T$ относительно неизвестного вектора $y = (y_1, y_2, \dots, y_N)$. Ее решение равно $y = hB^{-1}$. Отсюда получаем $yh^T = hB^{-1}h^T$. Однако на основании правила Крамера $y_i = \frac{\det B_i}{\det B}$, $i = 1, \dots, N$. Таким образом,

$$yh^T = \sum_{i=1}^N h_i \frac{\det B_i}{\det B}.$$

Поэтому

$$hB^{-1}h^T = \sum_{i=1}^N h_i \frac{\det B_i}{\det B}.$$

Следовательно, из (18) находим $l = hB^{-1}h^T$. Теорема доказана.

Этапы решения задачи проектирования состава составных объектов с заданными свойствами. Для наглядности решение этой задачи

будем сопровождать практическим примером, основанным на данных, приведенных в [3]. Пусть требуется спроектировать новые химические соединения (составные объекты), обладающие электрооптическими свойствами. Известно, что электрооптическими свойствами обладают кристаллы фторидов, имеющие кристаллические структуры типа LiCaAlF_6 и Na_2SiF_6 , а кристаллы фторидов, имеющие структуру типа Trirutile, такими свойствами не обладают. Для простоты ограничимся рассмотрением составных объектов со структурами типа Na_2SiF_6 и Trirutile.

На первом этапе проектирования строим семантическую сеть объект — свойство, описывающую знания о свойствах составных объектов фторидов.

На втором этапе в семантической сети объект — свойство выделяем множество свойств составных объектов V^+ , которым соответствуют требуемые свойства проектируемого составного объекта, и множество свойств V^- , которым соответствуют нежелательные свойства проектируемого составного объекта. В рассматриваемом примере V^+ — это свойство «иметь структуру типа Na_2SiF_6 », а V^- — свойство «иметь структуру типа Trirutile».

На третьем этапе в семантической сети объект — свойство выделяем множество вершин группы G_1 , соответствующих известным составным объектам, которые имеют связи со свойствами множества V^+ , и не имеют связей со свойствами множества V^- , и множество вершин G_2 , соответст-

Табл. 1. Первичные свойства для группы соединений G_1 со свойствами V^+

Химическое соединение	ПО		Первый ПО					Второй По				
	1	2	Tm	So	H	Rs	C	Tm	So	H	Rs	C
LiMgAlF_6	MgF_2	AlF_3	1536	13,68	268,7	0,72	14,7	1545	15,8 9	361	0,39	17,95
LiMnAlF_6	MnF_2	AlF_3	1133	22,25	202,4	0,83	16,2	1545	15,89	361	0,39	17,95
LiCaInF_6	CaF_2	InF_3	1691	16,36	291,8	1	16,0	1445	33,5	250	0,8	15,93
LiMnTiF_6	MnF_2	TiF_3	1133	22,25	202,4	0,83	16,2	1500	21,1	342	0,67	15,93
LiMnVF_6	MnF_2	VF_3	1133	22,25	202,4	0,83	16,2	1679	23,18	271	0,64	21,62
LiMnCrF_6	MnF_2	CrF_3	1133	22,25	202,4	0,83	16,2	1677	22,5	277	0,61	18,82
LiMnRhF_6	MnF_2	RhF_3	1133	22,25	202,4	0,83	16,2	1460	26	175	0,66	15,93
LiFeGaF_6	FeF_2	GaF_3	1375	20,79	158	0,78	16,2	1225	28	255	0,62	15,93
LiCoInF_6	CoF_2	InF_3	1400	19,59	159,1	0,74	16,4	1445	33,5	250	0,8	15,93
LiNiInF_6	NiF_2	InF_3	1430	17,6	157,2	0,69	15,3	1445	33,5	250	0,8	15,93
Усредненное значение	h_1		Tm_1^* 1309	So_1^* 19,92	H_1^* 204,7	Rs_1^* 0,8	C_1^* 15,9	Tm_2^* 1496	So_2^* 25,3	H_2^* 279	Rs_2^* 0,64	C_2^* 17,3

вующих известным составным объектам, которые имеют связи со свойствами множества V^- , и не имеют связей со свойствами множества V^+ . Предположим, в первую группу вошли 10 химических соединений, приведенные в табл. 1, а во вторую группу — 10 химических соединений, приведенные в табл. 2.

На четвертом этапе в семантической сети объект — свойство выделяем множество вершин, соответствующих ПО для составных объектов групп G_1 и G_2 , а также множество вершин, соответствующих первичным свойствам, к которым подходят стрелки от этих ПО. Первый и второй ПО представлены в табл. 1 и 2. Первичный объект LiF входит во все соединения, поэтому его первичные свойства не влияют на принадлежность соединения к той или иной группе и он в дальнейшем не учитывается.

На пятом этапе определяем векторы кодов первичных свойств для групп составных объектов G_1 и G_2 . В примере рассмотрено пять первичных свойств: Tm — точка плавления; So и H — стандартная энтропия и стандартная энтальпия для соответствующих простых окислов; Rs — радиус ионов; C — изобарическая теплоемкость. Их значения приведены в табл. 1 и 2 для первого и второго ПО, при этом коды свойств выбраны так, чтобы они совпадали с этими значениями.

На шестом этапе вычисляем усредненные векторы кодов h_1 и h_2 усреднением значений первичных свойств (см. табл. 1 и 2). Затем находим центрированные векторы кодов вычитанием полученных усредненных значений каждого столбца из фактических их значений.

Табл. 2. Первичные свойства для группы соединений G_2 со свойствами V^-

Химическое соединение	ПО		Первый ПО					Второй ПО				
	1	2	Tm	So	H	Rs	C	Tm	So	H	Rs	C
LiMgCrF ₆	MgF ₂	CrF ₃	1536	13,68	268,7	0,72	14,72	1677	22,5	277	0,615	18,82
LiMgGaF ₆	MgF ₂	GaF ₃	1536	13,68	268,7	0,72	14,72	1225	28	255	0,62	15,93
LiMgRhF ₆	MgF ₂	Rh ₃	1536	13,68	268,7	0,72	14,72	1460	26	175	0,665	15,93
LiNiTiF ₆	NiF ₂	TiF ₃	1430	17,6	157,2	0,69	15,31	1500	21,1	342,2	0,67	15,93
LiNiVF ₆	NiF ₂	VF ₃	1430	17,6	157,2	0,69	15,31	1679	23,1	271	0,64	21,62
LiCoCrF ₆	CoF ₂	CrF ₃	1400	19,59	159,1	0,745	16,44	1677	22,5	277	0,615	18,82
LiCuCrF ₆	CuF ₂	CrF ₃	1043	16,4	128,5	0,73	16,8	1677	22,5	277	0,615	18,82
LiZnCrF ₆	ZnF ₂	CrF ₃	1148	17,61	183	0,74	15,69	1677	22,5	277	0,615	18,82
LiNiFeF ₆	NiF ₂	FeF ₃	1430	17,6	157,2	0,69	15,31	1300	25	239	0,645	15,93
LiNiCoF ₆	NiF ₂	CoF ₃	1430	17,6	157,2	0,69	15,31	1230	27	187,2	0,61	15,93
Усредненное значение	h_2		Tm_3^* 1352	So_3^* 16,96	H_3^* 184,9	Rs_3^* 0,72	C_3^* 15,6	Tm_4^* 1474	So_4^* 24,7	H_4^* 245	Rs_4^* 0,63	C_4^* 17,4

На седьмом этапе проектирования вычисляем матрицы $B^{(1)}$, $B^{(2)}$ и $B = B^{(1)} + B^{(2)}$, обратная матрица B^{-1} , а также матрица H при $K = L = 10$.

На восьмом этапе вычисляется ненулевое собственное значение матрицы $B^{-1}H$ и для него — собственный вектор. Для рассматриваемого примера соответствующий собственный вектор имеет вид $(-0,0002, 0,0359, 0,0017, 0,6283, -0,0276, 0,0004, 0,0363, 0,0015, -0,7754, -0,0242)$. Косинусы углов, образуемых оптимальной проективной прямой с координатными углами пропорциональны значениям этого вектора, при этом коэффициент пропорциональности не играет никакой роли.

На девятом этапе находим проекции усредненных векторов кодов на эту прямую: $\bar{z}_1 = ch_1^T$ и $\bar{z}_2 = ch_2^T$. Тогда $\bar{z}_1 = 1,889$, $\bar{z}_2 = 1,6201$. Их общий центр равен 1,7545.

Табл. 3. Первичные свойства проектируемых соединений группы G_3

Химическое соединение	ПО		Первый ПО					Второй По				
	1	2	Tm	So	H	Rs	C	Tm	So	H	Rs	C
LiMgInF ₆	MgF ₂	InF ₃	1536	13,68	268,7	0,72	14,72	1445	33,5	250	0,8	15,93
LiMnFeF ₆	MnF ₂	FeF ₃	1133	22,25	202,4	0,83	16,24	1300	25	239	0,645	15,93
LiMnGaF ₆	MnF ₂	GaF ₃	1133	22,25	202,4	0,83	16,24	1225	28	255	0,62	15,93
LiMnInF ₆	MnF ₂	InF ₃	1133	22,25	202,4	0,83	16,24	1445	33,5	250	0,8	15,93
LiZnInF ₆	ZnF ₂	InF ₃	1148	17,61	183	0,74	15,69	1445	33,5	250	0,8	15,93
LiCdInF ₆	CdF ₂	InF ₃	1345	20	167,4	0,95	15,93	1445	33,5	250	0,8	15,93
LiMgTiF ₆	MgF ₂	TiF ₃	1536	13,68	268,7	0,72	14,72	1500	21,1	342,2	0,67	15,93
LiMgFeF ₆	MgF ₂	FeF ₃	1536	13,68	268,7	0,72	14,72	1300	25	239	0,645	15,93
LiMgCoF ₆	MgF ₂	CoF ₃	1536	13,68	268,7	0,72	14,72	1230	27	187,2	0,61	15,93
LiFeTiF ₆	FeF ₂	TiF ₃	1375	20,79	158	0,78	16,28	1500	21,1	342,2	0,67	15,93
LiCoTiF ₆	CoF ₂	TiF ₃	1400	19,59	159,1	0,745	16,44	1500	21,1	342,2	0,67	15,93
LiZnTiF ₆	ZnF ₂	TiF ₃	1148	17,61	183	0,74	15,69	1500	21,1	342,2	0,67	15,93
LiZnVF ₆	ZnF ₂	VF ₃	1148	17,61	183	0,74	15,69	1679	23,18	271	0,64	21,62
LiNiCrF ₆	NiF ₂	CrF ₃	1430	17,6	157,2	0,69	15,31	1677	22,5	277	0,615	18,82
LiFeFeF ₆	FeF ₂	FeF ₃	1375	20,79	158	0,78	16,28	1300	25	239	0,645	15,93
LiCoFeF ₆	CoF ₂	FeF ₃	1400	19,59	159,1	0,745	16,44	1300	25	239	0,645	15,93
LiCuFeF ₆	CuF ₂	FeF ₃	1043	16,4	128,5	0,73	16,8	1300	25	239	0,645	15,93
LiZnFeF ₆	ZnF ₂	FeF ₃	1148	17,61	183	0,74	15,69	1300	25	239	0,645	15,93
LiCuCoF ₆	CuF ₂	CoF ₃	1043	16,4	128,5	0,73	16,8	1230	27	187,2	0,61	15,93
LiCoRhF ₆	CoF ₂	RhF ₃	1400	19,59	159,1	0,745	16,44	1460	26	175	0,665	15,93
LiNiRhF ₆	NiF ₂	RhF ₃	1430	17,6	157,2	0,69	15,31	1460	26	175	0,665	15,93
LiCuGaF ₆	CuF ₂	GaF ₃	1043	16,4	128,5	0,73	16,8	1225	28	255	0,62	15,93

На десятом этапе в семантической сети объект — свойство выбираем ПО для проектируемого составного объекта в соответствии с правилом выбора, которое состоит в следующем. Выбираются объекты, имеющие связи с первичными свойствами, с которыми имеют связи ПО группы составных объектов G_1 . У выбранных объектов отсутствуют связи с первичными свойствами, с которыми имеют связи ПО группы составных объектов G_2 . При выборе ПО следует учитывать их совместимость в структуре получаемого составного объекта. Предположим, что таким образом были выбраны составные объекты, представленные в табл. 3.

Для проверки правильности выбора вычисляем проекцию $z = c_1 x_1^{(3)} + c_2 x_2^{(3)} + \dots + c_N x_N^{(3)}$ вектора кодов каждого выбранного составного объекта на проективную прямую. Если $|z_1^* - z| < |z_2^* - z|$, то выбор считается правильным. Для составных объектов, приведенных в табл. 3 последовательно сверху вниз z равно 1,8395; 1,9060; 2,0089; 2,1339; 1,8838; 2,0870; 1,6272; 1,6115; 1,5784; 1,7448; 1,6329; 1,6715; 1,6521; 1,6135; 1,7291; 1,6173; 1,5107; 1,6558; 1,4776; 1,5440; 1,4934; 1,6136. Поскольку $\bar{z}_1 = 1,889$, $\bar{z}_2 = 1,6201$, только первые шесть составных объектов согласно данной методике выбраны правильно, а остальные — ошибочно.

Рассмотренный пример позволяет проверить правильность методики, так как структура решетки составных объектов в табл. 3 заранее известна: первые шесть соединений имеют структуру кристаллической решетки типа Na_2SiF_6 , а все последующие химические соединения имеют структуру кристаллической решетки типа Trirutile. Таким образом, получено 100 % правильных ответов, что подтверждает правильность методики.

Выводы. Знания о ПО, входящих в состав сложных объектов, используются при получении новых знаний о составе сложных объектов, которые обладают требуемыми свойствами. Для оптимизации вычислений при нахождении такого рода знаний использована вспомогательная проективная прямая в многомерном евклидовом пространстве, которая построена таким образом, чтобы проекции на эту прямую векторов кодов из разных групп составных объектов были удалены один от другого настолько далеко, насколько это возможно. Доказанная теорема о выборе направления проективной прямой позволяет оптимальным образом различать разные группы соединений. Предложенная методика позволяет решать задачи проектирования составных объектов с нужными свойствами.

The knowledge modeling in the «object-property» semantic network is presented. The technique of the new knowledge receiving about a combination structure with properties demanded. This technique is based on the distance measuring between the groups of properties. Its application is considered for new chemical compounds receiving which possess the electro optical properties.

1. *Гладун В. П.* Партнерство с компьютером. Человеко-машинные целеустремленные системы. — Киев : Port-Royal, 2000. — 128 с.
2. *Koval V. N., Kuk Yu. V.* Distances between predicates in by-analogy reasoning systems //Information Theories and Applications. — 2003. — Vol. 10, № 1. — P. 15—22.
3. *Величко В. Ю.* Розв'язання дослідницьких задач в дискретних середовищах методами виведення за аналогією. Дис. ...канд. техн. наук. — Киев : Ин-т кибернетики им. В. М. Глушкова НАН Украины, 2003. —150 с.

Поступила 03.08.06;
после доработки 22.02.07

КУК Юрий Васильевич, канд. физ-мат. наук, ст. науч. сотр. Ин-та кибернетики им. В.М. Глушкова НАН Украины. В 1971 г. окончил Киевский госуниверситет. Область научных исследований — интеллектуальный анализ данных и знаний.

ЛАВРИКОВА Елена Ивановна, науч. сотр. Ин-та кибернетики им. В.М.Глушкова НАН Украины. В 1981 г. окончила Киевский политехнический ин-т. Область научных исследований — компьютерное моделирование.