



УДК 519.68:15:54

© 2005 г. **И.Л. Артемьева**, канд. техн. наук,
Н.Л. Мирошниченко

(Институт автоматики и процессов управления ДВО РАН, Владивосток)

МОДЕЛЬ ОНТОЛОГИИ РЕНТГЕНОФЛУОРЕСЦЕНТНОГО АНАЛИЗА¹

В работе описана модель онтологии рентгенофлуоресцентного анализа, используемая при разработке интеллектуальной программной системы, решающей указанную задачу. Программная система позволяет изменять используемые при решении задачи знания о свойствах химических элементов и веществ, а также задавать новые знания, она также выдает объяснение результатов решения задачи в терминах онтологии.

Введение

Рентгенофлуоресцентный метод анализа позволяет установить наличие и содержание отдельных элементов в заданном химическом веществе, т.е. определить элементный состав химического вещества. При решении данной задачи используется характеристическое излучение, возникающее в результате облучения образца высокочастотным электромагнитным излучением. Каждый элемент обладает своим характеристическим излучением, которое отлично от излучения других элементов. Это объясняется различиями в строении атомов различных химических элементов.

Программное обеспечение, поставляемое с прибором для рентгенофлуоресцентного анализа, не дает пользователям объяснения, почему системой был получен тот или иной результат. Еще одним недостатком является отсутствие возможностей расширения набора анализируемых химических элементов, а также редактирования данных об уже описанных ранее элементах. Таким образом, программное средство не является интеллектуальным.

При разработке интеллектуальных программных систем используется онтология предметной области (ПО), которая, с одной стороны, явно определяет совокупность терминов ПО, а с другой, – структуру знаний ПО.

¹ Работа выполнена в рамках программы № 16 фундаментальных исследований Президиума РАН, проект "Теоретические основы интеллектуальных систем, основанных на онтологиях, для интеллектуальной поддержки научных исследований".

Целью данной работы является описание модели онтологии рентгенофлуоресцентного анализа и подсистем интеллектуальной программной системы, разработанной в Институте автоматизации и процессов управления для указанного прибора.

Согласно работе [1] онтология предметной области содержит:

систему понятий действительности;

систему понятий знаний;

связь между системой понятий знаний и системой понятий действительности.

Модель онтологии построена в классе небогатых систем логических соотношений с параметрами [2] и записана средствами языка прикладной логики [3]. Модель онтологии имеет модульную структуру. При выполнении анализа предметной области и построении онтологии использованы работы [4, 5], онтология обсуждалась с экспертами предметной области.

Модуль «Строение атомов»

Определим сначала термины данного модуля.

1. *Скорость света* $\equiv 2,9979246 * 10^8$, вспомогательное понятие *скорость света* задает значение скорости света в вакууме.

2. *Постоянная Планка* $\equiv 6,62618 * 10^{-34}$, вспомогательное понятие *постоянная Планка* задает значение данной константы.

3. *Сорт оболочки*: $\{ \} N$, значением термина *оболочка* является множество обозначений электронных оболочек химических элементов.

4. *Сорт энергетические уровни*: $\{ \} N$, значением термина *энергетические уровни* является множество обозначений энергетических уровней химических элементов.

5. *Сорт энергетические уровни оболочки*: (*оболочки* $\rightarrow \{ \}$ *энергетические уровни*), термин *энергетические уровни оболочки* обозначает функцию, сопоставляющую оболочке список ее *энергетических уровней*.

6. *Сорт главное квантовое число*: (*оболочки* $\rightarrow I[1, \infty)$), термин *главное квантовое число* обозначает функцию, сопоставляющую оболочке главное квантовое число электронов, *расположенных* на данной оболочке.

7. *Сорт главное квантовое число энергетического уровня*: (*энергетические уровни* $\rightarrow I[1, \infty)$), термин *главное квантовое число энергетического уровня* обозначает функцию, сопоставляющую энергетическому уровню главное квантовое число.

8. *Сорт орбитальное квантовое число*: (*энергетические уровни* $\rightarrow I[0, \infty)$), термин *орбитальное квантовое число* обозначает функцию, сопоставляющую энергетическому уровню орбитальное квантовое число электронов, находящихся на этом уровне.

9. *Сорт спин-орбитальное связывание*: (*энергетические уровни* $\rightarrow I[1/2, \infty)$), термин *спин-орбитальное связывание* обозначает функцию, со-

поставляющую энергетическому уровню так называемое спин-орбитальное связывание электронов, расположенных на данном энергетическом уровне.

Теперь определим онтологические соглашения данного модуля.

1. Если существует оболочка с главным квантовым числом n , то существуют и оболочки со значениями главных квантовых чисел, меньшими n . ($o1$: оболочки) *главное квантовое число*($o1$) = $1 \vee \mu(\{(o2$: оболочки) *главное квантовое число*($o2$) = *главное квантовое число*($o1$) - 1\}) \neq 0.

2. Орбитальное квантовое число всегда меньше, чем главное квантовое число оболочки, на которой расположен энергетический уровень. (o : оболочки)(eu : энергетические уровни оболочки (o)) *орбитальное квантовое число*(eu) < *главное квантовое число*(o).

3. Если на оболочке существует энергетический уровень с орбитальным квантовым числом, равным m , то существуют и энергетические уровни со всевозможными орбитальными квантовыми числами из отрезка $[0, m-1]$, расположенные на этой же оболочке. (o : оболочки)(eu : энергетические уровни оболочки(o)) *орбитальное квантовое число*(eu) = $0 \vee \mu(\{(eu2$: энергетические уровни оболочки(o)) *орбитальное квантовое число*($eu2$) = *орбитальное квантовое число*(eu) - 1\}) \neq 0.

4. Значение спин-орбитального связывания на энергетическом уровне равно (орбитальное квантовое число $-1/2$) или (орбитальное квантовое число $+ 1/2$). (eu : энергетические уровни) (*спин-орбитальное связывание*(eu) = (*орбитальное квантовое число*(eu) $-1/2$)) \vee (*спин-орбитальное связывание*(eu) = (*орбитальное квантовое число*(eu) $+1/2$)).

5. Не может быть двух энергетических уровней, расположенных на одной оболочке, которым соответствуют и одинаковые орбитальные квантовые числа, и одинаковые значения спин-орбитального связывания. (o : оболочки) ($eu1$: энергетические уровни оболочки(o)) ($eu2$: $\{(eu1$: энергетические уровни оболочки(o)) $eu1 \neq eu2\}$) (*орбитальное квантовое число*($eu1$) \neq *орбитальное квантовое число*($eu2$)) \vee (*спин-орбитальное связывание*($eu1$) \neq *спин-орбитальное связывание*($eu2$)).

6. Количество энергетических уровней на оболочке с главным квантовым числом n равно $(2*n - 1)$. (o : оболочки) μ (*энергетические уровни оболочки*(o)) = $(2*\text{главное квантовое число}(o) - 1)$.

Модуль «Радиационные переходы»

Данный модуль использует терминологию предыдущего модуля. Определим термины данного модуля.

1. Сорт *радиационные переходы орбитальных электронов*: $\{ \}N$, значением термина *радиационные переходы орбитальных электронов* является множество обозначений радиационных переходов орбитальных электронов.

2. Сорт *начальное положение электрона при переходе*: (радиационные переходы орбитальных электронов \rightarrow энергетические уровни), термин *начальное положение электрона при переходе* обозначает функцию, которая сопоставляет радиационному переходу энергетический уровень, с которого электрон перемещается при этом переходе.

3. Сорт *конечное положение электрона при переходе*: (радиационные переходы орбитальных электронов \rightarrow энергетические уровни), термин *конечное положение электрона при переходе* обозначает функцию, которая сопоставляет радиационному переходу энергетический уровень, на который электрон перемещается при этом переходе.

4. Сорт *константа экранирования*: (радиационные переходы орбитальных электронов $\rightarrow R(0, \infty)$), термин *константа экранирования* обозначает функцию, которая сопоставляет радиационному переходу соответствующую ему константу экранирования (константа постоянна для каждой линии спектра и не изменяется от элемента к элементу).

5. Сорт *константа смещения*: (радиационные переходы орбитальных электронов $\rightarrow R[0, \infty)$), термин *константа смещения* обозначает функцию, которая сопоставляет радиационному переходу соответствующую ему константу смещения (константа является общей для одноименных линий всех элементов, но различной для разных линий).

6. Сорт *относительная интенсивность*: (радиационные переходы орбитальных электронов $\rightarrow R[0, \infty)$), термин *относительная интенсивность* обозначает функцию, которая сопоставляет радиационному переходу соответствующую ему относительную интенсивность.

Теперь определим онтологические соглашения данного модуля.

1. Радиационный переход с одной оболочки на другую должен удовлетворять следующему правилу: главное квантовое число того энергетического уровня, с которого был совершен переход, должно быть больше главного квантового числа энергетического уровня, на который совершен переход. (гр: *радиационные переходы орбитальных электронов*) *главное квантовое число энергетического уровня (начальное положение электрона при переходе(гр))* – *главное квантовое число энергетического уровня (конечное положение электрона при переходе(гр))*) > 0 .

2. Радиационный переход с одной оболочки на другую должен удовлетворять следующему правилу: $\Delta l = \pm 1$, где l – орбитальное квантовое число. (гр: *радиационные переходы орбитальных электронов*) (*орбитальное квантовое число (конечное положение электрона при переходе(гр))* – *орбитальное квантовое число (начальное положение электрона при переходе(гр))*) $\in \{-1, 1\}$.

3. Радиационный переход с одной оболочки на другую должен удовлетворять следующему правилу: $\Delta j = 0$ или ± 1 , где j – спин-орбитальное связывание. (гр: *радиационные переходы орбитальных электронов*) (*спин-орбитальное связывание (конечное положение электрона*

при переходе($g\rangle\rangle$) – спин-орбитальное связывание (начальное положение электрона при переходе($g\rangle\rangle$) $\in \{0, -1, 1\}$).

Модуль «Химические элементы»

Данный модуль использует терминологию предыдущих модулей. Определим термины данного модуля.

1. Сорт *химические элементы*: $\{ \}N$, значением термина *химические элементы* является множество всех обозначений химических элементов.

2. Сорт *порядковый номер элемента*: (*химические элементы* $\rightarrow \mathbb{I}[1, \infty)$), термин *порядковый номер элемента* обозначает функцию, которая сопоставляет химическому элементу его номер в периодической системе химических элементов.

3. Сорт *энергетические уровни элемента*: (*химические элементы* $\rightarrow \{ \}$ *энергетические уровни*), термин *энергетические уровни элемента* обозначает функцию, которая сопоставляет элементу множество энергетических уровней этого элемента.

4. Сорт *энергия связи электронов на энергетическом уровне элемента*: ($\{(v: (\times \text{химические элементы, энергетические уровни})) (\pi(2,v) \in \text{энергетические уровни элемента}(\pi(1,v)))\} \rightarrow \mathbb{R}(0, \infty)$), термин *энергия связи электронов на энергетическом уровне элемента* (синоним термина «край поглощения») обозначает функцию, которая сопоставляет химическому элементу и его энергетическому уровню энергию связи электронов, расположенных на этом энергетическом уровне.

5. Сорт *радиационные переходы элемента*: (*химические элементы* $\rightarrow \{ \}$ *радиационные переходы орбитальных электронов*), термин *радиационные переходы элемента* описывает функцию, которая сопоставляет элементу множество радиационных переходов, которые могут произойти у данного элемента.

6. Сорт *частота характеристического излучения*: ($\{(v: (\times \text{химические элементы, радиационные переходы орбитальных электронов})) (\pi(2,v) \in \text{радиационные переходы элемента}(\pi(1,v)))\} \rightarrow \mathbb{R}(0, \infty)$), термин *частота характеристического излучения* обозначает функцию, которая сопоставляет элементу и радиационному переходу частоту характеристического излучения, которое возникает в результате этого перехода.

7. Сорт *длина волны характеристического излучения*: ($\{(v: (\times \text{химические элементы, радиационные переходы орбитальных электронов})) (\pi(2,v) \in \text{радиационные переходы элемента}(\pi(1,v)))\} \rightarrow \mathbb{R}(0, \infty)$), термин *длина волны характеристического излучения* обозначает функцию, которая сопоставляет элементу и радиационному переходу длину волны характеристического излучения, которое возникает в результате этого перехода.

8. Сорт *энергия характеристического излучения*: ($\{(v: (\times \text{химические элементы, радиационные переходы орбитальных электронов})) (\pi(2,v) \in$

радиационные переходы элемента ($\pi(1, \nu) \}) \rightarrow R(0, \infty)$), термин энергия характеристического излучения обозначает функцию, которая сопоставляет элементу и радиационному переходу энергию характеристического излучения, которое возникает в результате этого перехода.

Теперь определим онтологические соглашения данного модуля.

1. Каждый химический элемент имеет свой порядковый номер, который не может совпадать с номерами других химических элементов. (e1: химические элементы)(e2: химические элементы) порядковый номер элемента(e1) \neq порядковый номер элемента(e2) \vee e1 = e2.

2. Если у химического элемента существует энергетический уровень, которому соответствует главное квантовое число n, то у этого элемента должны быть и все уровни, которым соответствуют значения главных квантовых чисел в диапазоне [1, n - 1]. (e: химические элементы)(eu: {(eeu: энергетические уровни элемента(e)) главное квантовое число(eeu) \neq 1}) μ ({(eus: энергетические уровни элемента(e)) главное квантовое число(eus) = главное квантовое число(eu) - 1}) \neq 0.

3. Некоторый радиационный переход может быть осуществлен для электронов химического элемента, только если в этом элементе есть энергетический уровень, с которого происходит переход электрона при данном радиационном переходе. (e: химические элементы)(gr: радиационные переходы элемента(e)) начальное положение электрона при переходе(gr) \in энергетические уровни элемента(e).

4. Некоторый радиационный переход может быть осуществлен для электрона химического элемента, только если в этом элементе есть энергетический уровень, на который будет выполняться переход электрона при данном радиационном переходе. (e: химические элементы)(gr: радиационные переходы элемента(e)) конечное положение электрона при переходе(gr) \in энергетические уровни элемента(e).

5. Чтобы переход был радиационным (т.е. чтобы в результате этого переходы происходило излучение энергии), необходимо, чтобы энергия энергетического уровня данного химического элемента, с которого был совершен переход, была больше энергии энергетического уровня данного химического элемента, на который был произведен переход (e: химические элементы)(gr: радиационные переходы элемента(e)) энергия связи электронов на энергетическом уровне элемента(< e1, конечное положение электрона при переходе(gr)>) < энергия связи электронов на энергетическом уровне элемента(< e1, начальное положение электрона при переходе(gr)>).

6. Длина волны связана с частотой соотношением $\lambda = c / \nu$, где ν – частота; λ – длина волны; c – скорость света. (e: химические элементы)(gr: радиационные переходы элемента(e)) частота характеристического излучения(<e1, gr>) = скорость света / длина волны характеристического из-

лучения ($\langle e1, gr \rangle$).

7. Энергия излучения связана с его частотой следующей формулой: $e = h\nu$, где h – постоянная Планка. ($e1$: химические элементы)(gr : радиационные переходы элемента($e1$)) энергия характеристического излучения($\langle e1, gr \rangle$) = постоянная Планка * частота характеристического излучения($\langle e1, gr \rangle$).

8. Длина волны связана с частотой соотношением $\lambda = c / \nu$, где ν – частота; λ – длина волны; c – скорость света ($e1$: химические элементы)(gr : радиационные переходы элемента($e1$)). Длина волны характеристического излучения ($\langle e1, gr \rangle$) = скорость света / частота характеристического излучения ($\langle e1, gr \rangle$).

9. Из закона Мозли следует, что $\nu = K(Z - a)^2$, где K – константа смещения; Z – порядковый номер элемента; a – константа экранирования элемента ($e1$: химические элементы)(gr : радиационные переходы элемента($e1$)) частота характеристического излучения($\langle e1, gr \rangle$) = константа смещения(gr) * (порядковый номер элемента($e1$) – константа экранирования(gr)) * (порядковый номер элемента($e1$) – константа экранирования(gr)).

10. У электрона, расположенного на одном и том же уровне одного и того же энергетического подуровня, энергия связи тем больше, чем больше порядковый номер химического элемента. ($e11$: химические элементы)($e12$: химические элементы) (eu : энергетические уровни элемента($e11$) \cap энергетические уровни элемента ($e12$)) порядковый номер элемента($e11$) > порядковый номер элемента($e12$) \Rightarrow энергия связи электронов на энергетическом уровне элемента ($\langle e11, eu \rangle$) > энергия связи электронов на энергетическом уровне элемента ($\langle e12, eu \rangle$).

Модуль «Изотопы»

Данный модуль использует терминологию предыдущих модулей. Определим термины данного модуля.

1. Сорт радиоактивные изотопы: (\times химические элементы, $\mathbb{I}[0, \infty)$), значением термина радиоактивные изотопы является множество всех известных радиоактивных изотопов.

2. Сорт массовое число изотопа: (радиоактивные изотопы $\rightarrow \mathbb{I}[0, \infty)$), значением термина массовое число изотопа является сумма протонов и нейтронов ядра изотопа.

3. Сорт энергии линий изотопа: (радиоактивные изотопы $\rightarrow \{ \} \mathbb{R}(0, \infty)$), термин энергии линий изотопа определяет множество возможных энергий линий изотопа.

Теперь определим онтологические соглашения данного модуля.

1. Изотопы обозначаются парой \langle химический элемент, массовое число \rangle . (ri : радиоактивные изотопы) $\pi(2, \text{радиоактивные изотопы}) = \text{мас-$

совое число изотопа(g_i).

2. Массовое число изотопа не может быть меньше порядкового номера химического элемента, изотопом которого он является (g_i : радиоактивные изотопы) порядковый номер элемента($\pi(1, \text{радиоактивные изотопы}) \leq \text{массовое число изотопа}(g_i)$).

Модуль «Радиационные переходы»

Все предыдущие модули определяли термины, используемые при описании знаний предметной области. В данном модуле определяется терминология, используемая при решении задач в данной предметной области (система понятий действительности [1]). Данный модуль использует терминологию предыдущих модулей.

1. Сорт *качественный состав пробы*: $\{ \}$ определяемые элементы, термин *качественный состав пробы* обозначает множество химических элементов, которые входят в состав анализируемой пробы.

2. Сорт *процентное содержание элемента в пробе*: (химические элементы $\rightarrow R(0, \infty)$), термин *процентное содержание элемента в пробе* обозначает функцию, которая сопоставляет химическому элементу его процентное содержание в пробе.

3. Сорт *калибровочный элемент*: (\times химические элементы, $R(0, \infty)$), термин *калибровочный элемент* обозначает пару, состоящую из химического элемента и его количества в пробе.

4. Сорт *источник радиоактивного излучения*: радиоактивные изотопы, значением термина *источник радиоактивного излучения* является радиоактивный изотоп, который является источником наблюдаемого излучения.

5. Сорт *минимальная известная энергия*: $R(0, \infty)$, значением термина *минимальная известная энергия* является значение минимальной энергии, наблюдаемой при излучении.

6. Сорт *определяемые элементы*: $\{ \}$ химические элементы, термин *определяемые элементы* обозначает множество химических элементов, которые возможно определить на основе заданного спектра.

7. Сорт *энергия первичного излучения*: $R(0, \infty)$, данный термин обозначает энергию первичного рентгеновского излучения, которое воздействует на анализируемую пробу.

8. Сорт *интенсивность излучения*: (энергии рентгенофлуоресцентного излучения $\rightarrow R(0, \infty)$), данный термин обозначает интенсивность наблюдаемого излучения.

9. Сорт *энергия рентгенофлуоресцентного излучения*: $\{ \}R$, термин *энергии рентгенофлуоресцентного излучения* описывает, какими энергиями обладают волны излучения, полученного в результате облучения пробы рентгеновскими лучами.

Теперь приведем онтологические соглашения данного модуля, пред-

ставляющие собой ограничения целостности действительности [1].

1. Энергия первичного излучения – это число, равное максимальному значению энергии, излучаемой источником радиоактивного излучения. $\text{Sup}(\text{энергии линий изотопа}(\text{источник радиоактивного излучения})) = \text{энергия первичного излучения}$.

2. Если химический элемент входит в качественный состав пробы, то его процентное содержание в пробе больше 0 ($e1$: *качественный состав пробы*) процентное содержание элемента в пробе($e1$) > 0.

3. Химический элемент – первый компонент калибровочного элемента должен принадлежать множеству элементов образца $\pi(1, \text{калибровочный элемент}) \in \text{качественный состав пробы}$.

Модуль «Онтология рентгенофлуоресцентного анализа»

Данный модуль использует терминологию всех предыдущих модулей, не определяя новых терминов. Он содержит онтологические соглашения, задающие связь между терминами для описания знаний и терминами для описания действительности.

1. Определяемые элементы – это те элементы, которые имеют хотя бы один переход, энергия которого больше, чем минимальная известная энергия, а энергия связи электрона для данного перехода у данного элемента на уровне, на который совершается переход, не больше энергии первичного излучения ($e1$: *определяемые элементы*) $\{(gr: \text{радиационные переходы элемента}(e1)) ((\text{энергия первичного излучения} > \text{энергия связи электронов на энергетическом уровне элемента}(<e1, \text{конечное положение электрона при переходе}(gr)>)) \& \text{энергия характеристического излучения}(<e1, gr>) > \text{минимальная известная энергия})\} \neq \emptyset$.

2. Для каждого элемента, входящего в качественный состав анализируемого образца, выполняется следующее условие: если энергия первичного излучения превышает энергию связи электрона в атоме химического элемента, то все энергии характеристического излучения, которые соответствуют радиационным переходам, оканчивающимся на энергетическом уровне, соответствующем этому электрону, присутствуют в множестве энергий полученного рентгенофлуоресцентного излучения ($e1$: *качественный состав пробы*)($e1$: *энергетические уровни элемента*($e1$))(gr : $\{(grp: \text{радиационные переходы элемента}(e1)) \text{конечное положение электрона при переходе}(grp) = e1\}$) *энергия первичного излучения* <*энергия связи электронов на энергетическом уровне элемента*($<e1, e1>$) \vee *энергия характеристического излучения*($<e1, gr>$) \in *энергии рентгенофлуоресцентного излучения*.

3. Для каждого элемента, входящего в качественный состав анализируемого образца, выполняется следующее условие: процентное содержание элемента в пробе равно произведению интенсивности излучения и

процентного содержания в пробе калибровочного элемента, разделенного на интенсивность излучения калибровочного элемента (e_l : *качественный состав пробы*)(e_u : *энергетические уровни элемента*(e_l) \cap *радиационные переходы элемента*(($\pi(1, \text{калибровочный элемент})$)))(gr : {(grp : (*радиационные переходы элемента*(e_l) \cap *радиационные переходы элемента*(($\pi(1, \text{калибровочный элемент})$))) *конечное положение электрона при переходе*(grp) = e_u }) *энергия первичного излучения* < *энергия связи электронов на энергетическом уровне элемента*($\langle e_l, e_u \rangle$) \vee *энергия характеристического излучения* ($\langle e_l, gr \rangle$) \in *энергии рентгенофлуоресцентного излучения* \wedge *процентное содержание элемента в пробе*(e_l) = (*интенсивность излучения*(*энергия характеристического излучения* ($\langle e_l, gr \rangle$)) * $\pi(2, \text{калибровочный элемент})$) / *интенсивность излучения*(*энергия характеристического излучения* ($\langle \pi(1, \text{калибровочный элемент}) \rangle, gr$)).

Интеллектуальная система решения задачи рентгенофлуоресцентного анализа

На основе описанной выше онтологии создана программная система, состоящая из двух подсистем: редактора знаний и анализатора (решателя задачи рентгенофлуоресцентного анализа).

Редактор знаний позволяет пользователю просматривать и редактировать (добавлять, удалять и изменять) содержащуюся в базе знаний информацию (множество оболочек химических элементов, соответствующих этим элементам оболочек, энергетических уровней, которым сопоставлены главные и орбитальные квантовые числа этих уровней и т.д., то есть информацию, соответствующую понятиям, используемым при описании знаний). Пользователю предоставляется возможность просмотра значений каждого из понятий, содержащихся в системе понятий знаний в терминах предметной области, т.е. работу по сопровождению базы знаний системы выполняет специалист предметной области, использующий программную систему. Первоначально база знаний системы была заполнена известными значениями всех определенных в онтологии терминов знаний.

База знаний используется при решении задачи. Решение задачи выполняет анализатор. Чтобы решить задачу, пользователь вводит значения терминов системы понятий действительности, являющиеся исходными данными задачи. Подсистема ввода значений является подсистемой анализатора. При решении задачи анализа используется метод, полученный из онтологических соглашений, задающих связь между терминами для описания знаний и терминами для описания действительности.

Анализатор поддерживает графическое представление информации о значениях некоторых исходных данных, в частности система позволяет пользователю получить графическое представление наблюдаемого спектра и задать все необходимые для решения задачи данные для спектра.

Анализатор позволяет пользователю проводить качественный и количественный анализ спектра, сохраненного в файле. Для этого пользователь должен указать файл, содержащий спектр, задать калибровку, указать, какой радиоизотоп был использован в качестве источника излучения, с помощью приложения задать пики, указать количество калибровочного элемента. Все это позволит пользователю узнать, какие химические элементы и в каком количестве содержатся в образце.

Редактор знаний и анализатор имеют справочную систему. Пользователь может получить контекстную подсказку по каждому используемому в системе термину предметной области, в которой описан смысл этого термина. В процессе решения задачи формируется объяснение полученных результатов. Пользователь может посмотреть все действия системы по данному объяснению. Разработка выполнена в среде Visual Studio.Net 7.1, язык разработки C#.

Заключение

Таким образом, в работе описаны модульная модель онтологии рентгенофлуоресцентного анализа, а также основные функции интеллектуальной программной системы, решающей данную задачу. Особенностью программной системы является наличие редактора знаний, позволяющего задавать и редактировать значения всех терминов системы понятий знаний, а также системы объяснения, что позволяет получить информацию о полученном системой решении задачи.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Клещев А.С., Артемьева И.Л.* Математические модели онтологии предметной области. Ч. 2. Компоненты модели // Научно-техническая информация. Сер. 2. 2001. № 3. С. 19-28.
2. *Клещев А.С., Артемьева И.Л.* Необогатенные системы логических соотношений. Ч. 2. // Научно-техническая информация. Сер. 2. 2000. №8. С. 8-18.
3. *Клещев А.С., Артемьева И.Л.* Необогатенные системы логических соотношений. Ч. 1. // Научно-техническая информация. Сер. 2. 2000. №7. С. 18-28.
4. *Пилипенко А.Т., Пятницкий И.В.* Аналитическая химия: В 2-х кн. М.: Химия, 1990.
5. *Васильев В.П.* Аналитическая химия. В 2 ч. Ч. 2. Физико-химические методы анализа: Учебник для химико-технол. вузов. М.: Высш. шк., 1989.

Статья представлена к публикации членом редколлегии А.С. Клещев.