



УДК: 004.8

© 2006 г. **И.Л. Артемьева**, канд. техн. наук,  
**Н.Л. Мирошниченко**,

**И.В. Старовойтов**, канд. техн. наук

(Институт автоматизации и процессов управления ДВО РАН, Владивосток)

## **ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНАЯ СИСТЕМА ДЛЯ РЕНТГЕНОФЛУОРИСЦЕНТНОГО АНАЛИЗА<sup>1</sup>**

В работе описана интеллектуальная система по рентгенофлуоресцентному анализу и методы ее разработки по модели онтологии данной предметной области. Показано место этой системы в специализированном компьютерном банке знаний по химии.

### **Введение**

В настоящее время в Институте автоматизации и процессов управления ДВО РАН разрабатывается специализированный компьютерный банк знаний по химии [1], который будет объединять знания различных разделов химии и позволит использовать их при решении разнообразных прикладных задач данной предметной области. Одной из подсистем данного банка является подсистема для решения задачи рентгено флуоресцентного анализа. При разработке подсистемы используется модель онтологии данной предметной области, описанная в работе [2]. Кроме создаваемой подсистемы, существует однопользовательская версия для решения той же задачи. Целью нашей работы является описание методов создания этих программных систем на основе модели онтологии.

### **Структура модели онтологии химии**

При разработке специализированного банка знаний по химии используется трехуровневая модель онтологии данной предметной области [3], структура которой представлена на рис. 1.

---

<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке ДВО РАН, проект "Разработка интеллектуальных информационных технологий генерации и анализа знаний для поддержки фундаментальных научных исследований в области естественных наук", а также РФФИ, проект 06-07-89071-а.



Онтология третьего уровня является более общей. Примерами ее терминов являются типы сущностей, типы сущностей процесса, типы компонент сущности, собственные свойства сущностей.

Названия типов сущностей фиксируются вторым уровнем онтологии; для каждого раздела данной предметной области эта онтология определяет тот набор сущностей, свойства которых изучает данный раздел. Среди сущностей – подмножество сущностей, которые рассматриваются как участники физико-химических процессов. Для рентгенофлуоресцентного анализа сущностями являются: химические элементы, оболочки, энергетические уровни, радиационные переходы орбитальных электронов, радиоактивные изотопы, энергии излучения [2]. При описании свойств физико-химических процессов используются химические элементы и энергии излучения.

Онтология второго уровня определяет также, какие типы сущностей используются в разделе для описания «состава» сущности. Для рентгенофлуоресцентного анализа такое описание говорит о том, что химические элементы имеют энергетические уровни и характеризуются радиационными переходами орбитальных электронов; характеристикой оболочек являются также энергетические уровни (в приведенных примерах при определении терминов использован язык прикладной логики [4]).

Типы компонент сущности  $\equiv (\lambda(\text{Тип: \{Оболочки, Энергетические уровни, Радиационные переходы орбитальных электронов, Химические элементы, Радиоактивные изотопы, Энергии излучения\}}))$  (Тип = Химические элементы  $\Rightarrow$  {Энергетические уровни, Радиационные переходы орбитальных электронов}), (Тип = Оболочки  $\Rightarrow$  {Энергетические уровни}), (Тип  $\in$  {Энергетические уровни, Радиационные переходы орбитальных электронов, Радиоактивные изотопы, Энергии излучения}  $\Rightarrow \emptyset$ ).

Каждая сущность может иметь свой набор собственных свойств. У каждого свойства своя область значений. Термин «собственные свойства сущностей» представляет собой конструктор сорта для задания конкретного свойства. Данный термин определен как функция, аргументом которой является тип сущности, а результатом – множество функций F1. Аргумент каждой функции f1 из множества F1 есть некоторое множество (область возможных значений), а результат – множество функций F2. Аргументом каждой из множества F2 является тип сущности, а результатом – область возможных значений, определяемая значением аргумента функции f1:

Собственные свойства сущностей  $\equiv (\lambda(\text{Тип сущности: Типы сущностей})) (\lambda(\text{Область возможных значений: \{ \}}) (\text{Множества значений} \cup \{ \}) (\text{Кортежи значений})) (j(\text{Тип сущности}) \rightarrow \text{Область возможных значений})$

На втором уровне определяются конструкторы сортов для каждого введенного на этом уровне типа сущностей. Множество названий свойств и область значения каждого свойства фиксируются при определении онто-

логии первого уровня. Значения свойств для каждой сущности задаются знаниями предметной области.

Онтология первого уровня для каждого раздела предметной области состоит из модулей. В каждом модуле определяются термины, используемые для описания свойств сущностей и их компонент.

### **Специализированный компьютерный банк знаний по химии**

Специализированный компьютерный банк знаний по химии имеет две части: серверную и клиентскую. Серверная часть состоит из информационного и программного наполнения. Информационное наполнение содержит онтологию второго и первого уровня, а также знания данной предметной области, а программное наполнение – редакторы этих онтологий и знаний, а также системы для решения различных прикладных задач. Клиентская часть содержит интерфейсы редакторов онтологий и знаний данной области, а также интерфейсы решателей задач. Специалист-эксперт предметной области (ПО) имеет возможность с помощью редакторов изменять онтологию и знания ПО. Графический компонент интерфейса используется при вводе и просмотре графической информации в привычном пользователю графическом виде. Графическая информация хранится в базе знаний (БЗ) в вербальном представлении, определяемом моделью онтологии.

Онтологии и знания хранятся средствами реляционной СУБД: онтологии каждого уровня соответствует своя база данных, знания хранятся в другой базе данных. Структура баз данных для хранения онтологии второго уровня определяется онтологией третьего уровня, для онтологии первого уровня – онтологией второго уровня, базы знаний – онтологией первого уровня. Каждому термину соответствует своя таблица. Задание онтологии второго (первого) уровня состоит в задании значений терминов онтологии третьего (второго) уровня. Задание знаний состоит в задании значений терминов онтологии первого уровня.

Таблицы для представления значений терминов онтологии второго уровня формируются автоматически при определении этого термина в редакторе онтологии данного уровня. Таблицы для представления значений терминов онтологии первого уровня (таблицы базы знаний) формируются автоматически при определении этого термина в редакторе онтологии данного уровня. Онтология первого уровня и знания любого из разделов предметной области могут использоваться в других разделах.

### **Качественный и количественный анализ спектров. Постановки задач**

Входными данными при качественном анализе являются энергия излучения, а также волновой спектр образца – множество пар значений <энергия характеристического излучения, интенсивность>. Выходные

данные представляют собой множество химических элементов, входящих в состав образца.

Входными данными при количественном анализе являются множество пар <химический элемент, интенсивность>, калибровочный элемент <химический элемент, процентное содержание элемента> (данный элемент входит в множество элементов, встречающихся среди первых элементов множества пар <химический элемент, интенсивность>). Выходные данные представляют собой множество пар <химический элемент, процентное содержание элемента>.

При решении данных задач выделяется подзадача: найти все химические элементы, которые имеют энергии переходов (таких переходов, что энергия первичного излучения превышает энергию связи электрона на энергетическом уровне, на который совершается переход), равные какой-то конкретной энергии (назовем ее *энергия пика*).

Метод решения данной подзадачи следующий:

из множества *химические элементы* удаляем все  $e_l$  элементы, для которых не выполняется онтологическое соглашение [2]:  $\{(gr: \{(grp: \text{радиационные переходы элемента}(e_l)) (eu: \text{энергетические уровни элемента}(e_l)) \text{конечное положение электрона при переходе}(grp) = eu\}) \text{ энергия первичного излучения} > \text{ энергия связи электронов на энергетическом уровне элемента}(\langle e_l, eu \rangle) \& \text{ энергия характеристического излучения}(\langle e_l, gr \rangle) = \text{энергия пика}\} \neq \emptyset$ .

Приведем метод решения задачи качественного анализа:

из множества *химические элементы* удаляем все  $e_l$  элементы, для которых не выполняется онтологическое соглашение [2]:  $(eu: \text{энергетические уровни элемента}(e_l))(gr: \{(grp: \text{радиационные переходы элемента}(e_l)) \text{конечное положение электрона при переходе}(grp) = eu\}) \text{ энергия первичного излучения} < \text{ энергия связи электронов на энергетическом уровне элемента}(\langle e_l, eu \rangle) \vee \text{ энергия характеристического излучения}(\langle e_l, gr \rangle) \in \text{энергии рентгенофлуорисцентного излучения}$ .

Приведем теперь метод решения задачи количественного анализа:

для каждого элемента  $e_l$ , входящего в множество *качественный состав пробы* выбираем радиационный переход  $gr$ , который входит в множество возможных при данной энергии первичного излучения радиационных переходов элемента  $e_l$  и калибровочного элемента;

вычисляем *процентное содержание элемента* по формуле (задаваемой в модели онтологии):

$\text{процентное содержание элемента в пробе}(e_l) = (\text{интенсивность излучения}(\text{частота характеристического излучения}(\langle e_l, gr \rangle)) * \pi(2, \text{калибровочный элемент})) / \text{интенсивность излучения}(\text{частота характеристического излучения}(\langle \pi(1, \text{калибровочный элемент}), gr \rangle))$ .

## Подсистема «Анализатор»

Задачи качественного и количественного анализа пробы решает подсистема «Анализатор», графическое изображение которой представлено спектра на рис. 2).

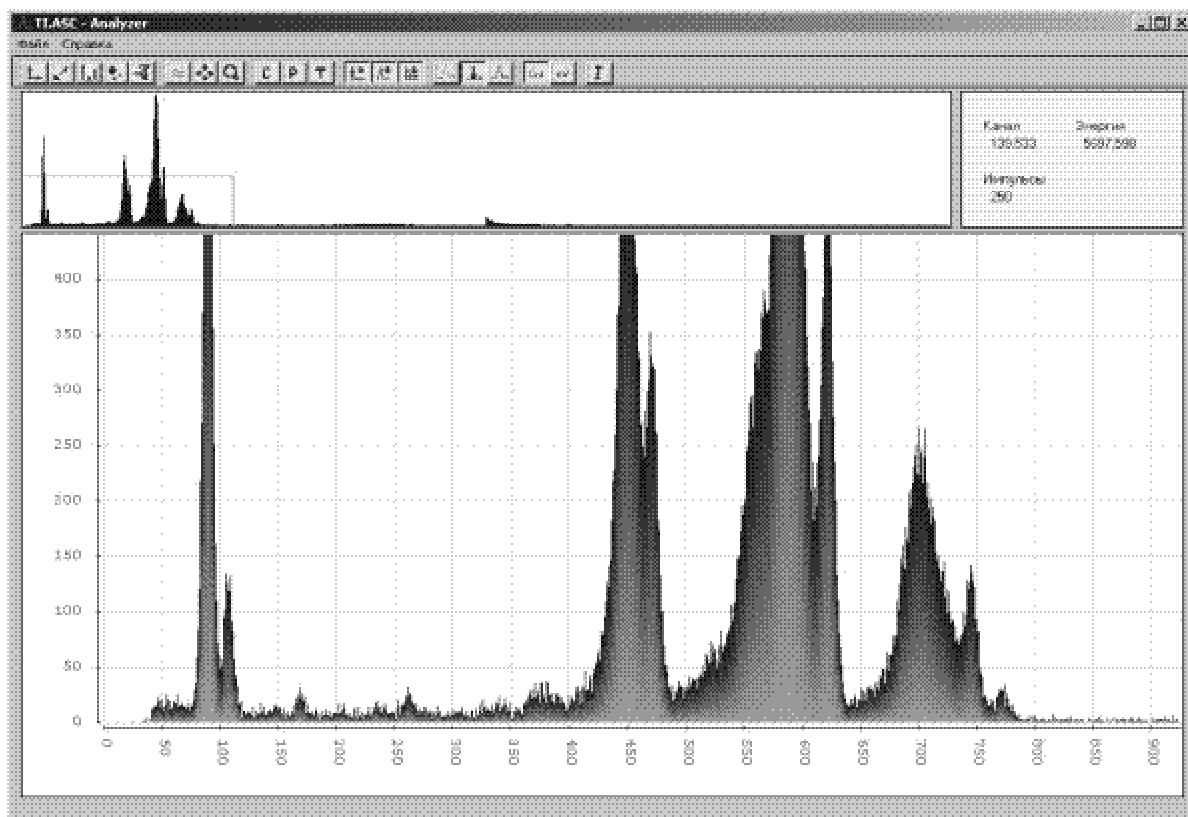


Рис. 2. Подсистема «Анализатор».

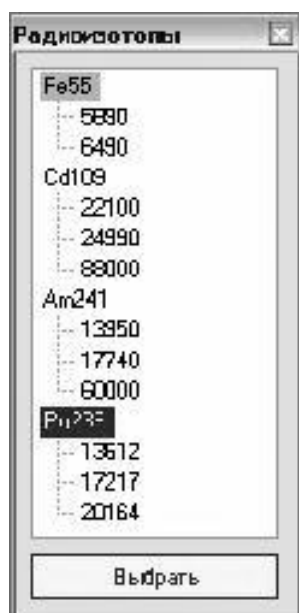


Рис. 3. Выбор изотопа.

Система поддерживает три разных вида представления спектра: точками, вертикальными линиями либо кривой, соединяющей точки спектра. Пользователь имеет возможность задать требуемый ему тип отображения спектра, а также использовать масштабирование.

Для решения задачи качественного анализа пробы в качестве исходных данных должен быть указан радиоактивный изотоп (рис. 3). Список изотопов задается в базе знаний системы, которую пользователь может редактировать. При задании исходных данных пользователь выбирает требуемый элемент из предлагаемого системой списка.

Исходными данными задачи является множество пар <энергия характеристического излучения, интенсивность>, которые вычисляются по спектру. Эти пары задают пики спектра. Пики отмечаются нажатием

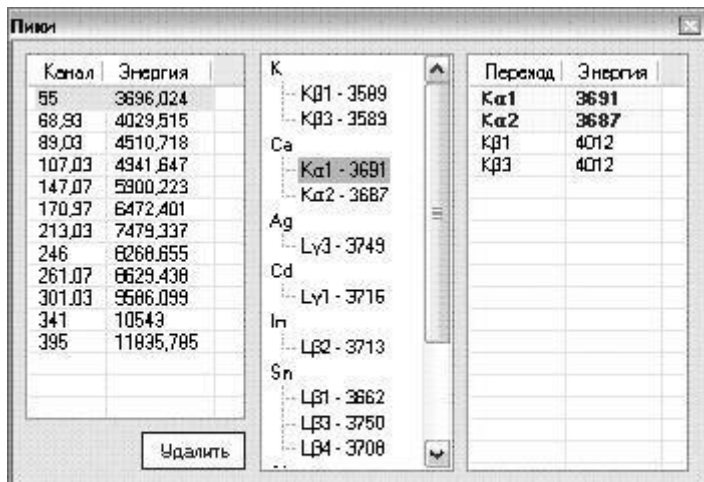


Рис. 4. Представление информации о пиках.

ся в средней части данного окна (см. рис. 4). Пользователь также может получить информацию о спектре отмеченного химического элемента в правой части окна.

В результате качественного анализа определяется множество химических элементов. В этот список попадают те элементы, спектр которых содержит некоторые из

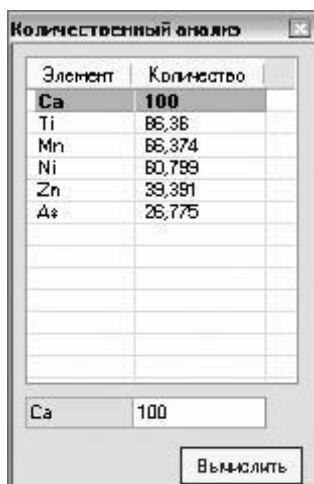


Рис. 6. Представление результатов количественного анализа.

пиков исходного спектра. Химические элементы, спектр которых содержит все выделенные пики, располагаются в начале списка и выделяются жирным шрифтом.

Пользователь имеет возможность получить информацию из базы знаний о радиационных переходах любого из элементов данного списка (рис. 5). Количественный анализ выполняется только для тех элементов, которые были получены в результате качественного анализа. Если пользователь изменяет процентное содержание некоторого элемента пробы, то вычисляется процентное содержание других элементов (рис. 6). Пользователь имеет возможность получить объяснение полученных результатов (рис. 7).

мышью на графике, а их представление в терминах модели онтологии вычисляется автоматически и отображается в специальном окне (рис. 4).

Пользователь имеет возможность получить информацию о химических элементах, в спектре которых присутствует пик, близкий к выделенному пользователем. Эта информация отображает-

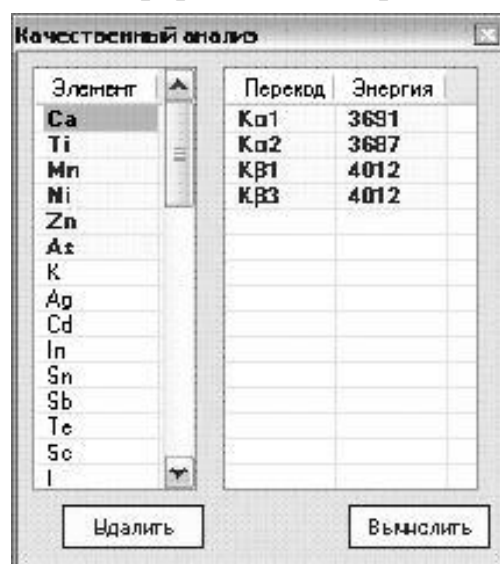


Рис. 5. Представление результатов качественного анализа.

Пользователь имеет возможность получить информацию из базы знаний о радиационных переходах любого из элементов данного списка (рис. 5). Количественный анализ выполняется только для тех элементов, которые были получены в результате качественного анализа. Если пользователь изменяет процентное содержание некоторого элемента пробы, то вычисляется процентное содержание других элементов (рис. 6). Пользователь имеет возможность получить объяснение полученных результатов (рис. 7).

## Заключение

В работе описана подсистема решения задачи рентгенофлуоресцентного анализа специализированного компьютерного банка знаний по химии. Даны постановки решаемой подсистемой задач, показано, как методы ре-

шения задач получены с использованием модели онтологии данной предметной области. В настоящее время существует также однопользовательская версия данной подсистемы. Отличие рассмотренных систем состоит в наличии возможности изменения информации, используемой при решении задач, а также возможности получения объяснения полученных системой результатов.

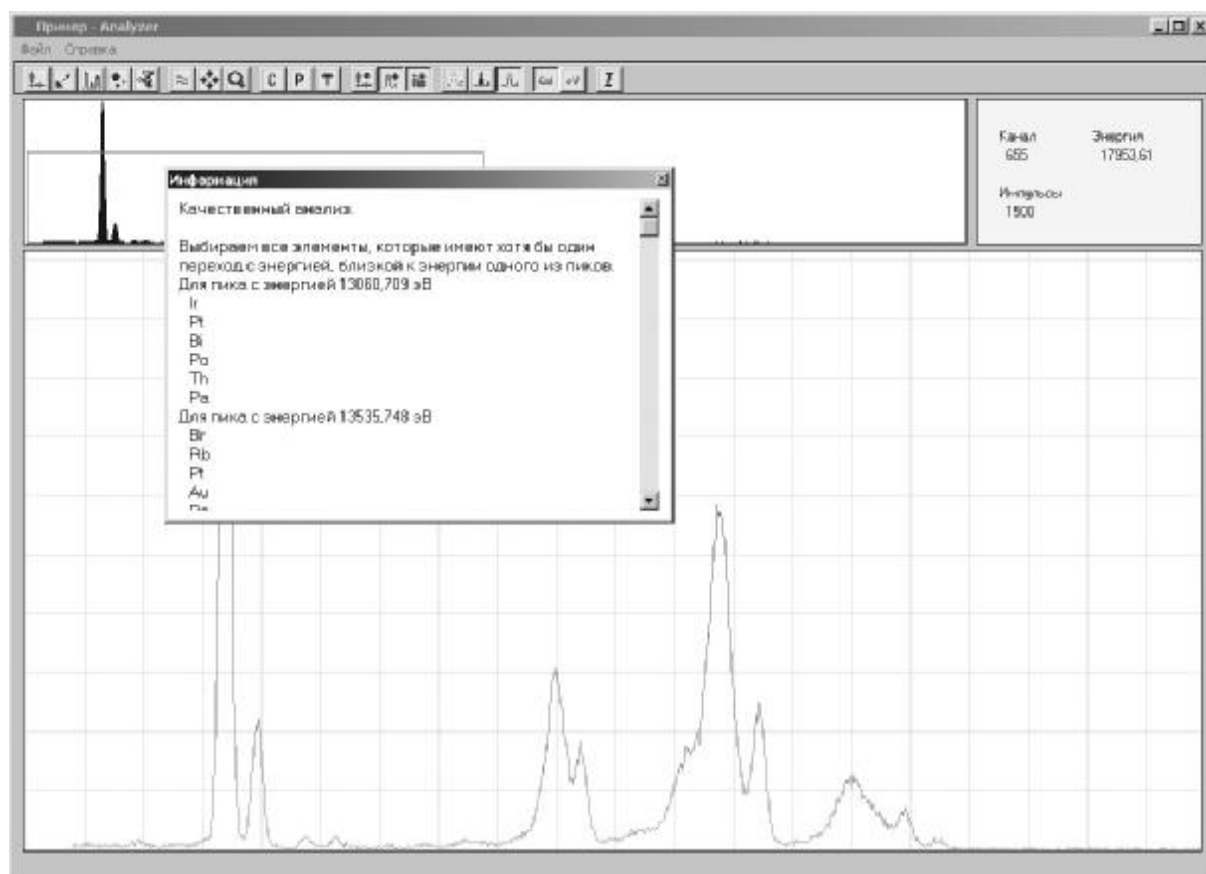


Рис. 7. Объяснение результатов работы подсистемы.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. *Артемяева И.Л., Рештаненко Н.В.* Специализированный компьютерный банк знаний предметной области "Химия" // Искусственный интеллект. – 2004. – Т. 1. – С. 235-244.
2. *Артемяева И.Л., Мирошниченко Н.Л.* Модель онтологии рентгенофлуоресцентного анализа // Информатика и системы управления. – 2005. – № 2 (8). – С.78-88.
3. *Артемяева И.Л.* Многоуровневые математические модели предметных областей // Искусственный интеллект. – 2006. – Т.4. – С. 85-94.
4. *Клецев А.С., Артемяева И.Л.* Необогатенные системы логических соотношений. Ч. 2. // Научно-техническая информация. Сер. 2. – 2000. – №8. – С. 8-18.

*Статья представлена к публикации членом редколлегии А.С. Клецевым.*