

М. Ф. Мизинцева, В. В. Бондарь

## ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ХИМИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИИ ПОСРЕДСТВОМ СОЧЕТАНИЯ СЕМАНТИЧЕСКИХ СЕТЕЙ И ФРЕЙМОВЫХ СТРУКТУР

*Рассматривается возможность представления химических знаний посредством расширения семантических сетей фреймовыми структурами. Для конкретной области химии — химии твердого тела — разработана и построена семантическая сеть. Приведены примеры расширения некоторых вершин семантических сетей: «Химия твердого тела» и «Теория электролитической диссоциации». Предложена методика расширения семантических сетей фреймовыми структурами.*

Современная химическая наука включает не только комплекс понятий, определений и законов, но и сложный математический аппарат для получения количественных характеристик и определения необходимых параметров. В связи с этим нами был использован прием сочетания двух способов представления знаний — семантические сети и фреймовые структуры, которые позволяют представить знания достаточно точно, сохраняя иерархическую структуру с классификационными и обобщающими свойствами.

На основе сформулированных нами принципов построения семантических сетей [1], были построены фреймовые структуры для рассмотрения отдельных циклов семантических сетей ТЭД и «Химия комплексных соединений», которые предусматривают в качестве акцептов количественные экспериментальные данные. [2]

### 1. РАСШИРЕНИЕ СЕМАНТИЧЕСКИХ СЕТЕЙ ПО ХИМИИ ПОСРЕДСТВОМ ФРЕЙМОВЫХ СТРУКТУР

В семантической сети ТЭД существует цикл, образованный понятиями «сила —  $pH$  раствора — константа диссоциации — степень диссоциации — концентрация».

Рассмотрим пример фактографического фрейма «ТЭД». В общем виде фрейм «ТЭД» включает основные положения о процессах диссоциации (сведения об электропроводности, распаде электролитов в водном растворе, процессе диссоциации и т. д.).

Фрейм «Харэл» — «характеристика электролита» — согласно соответствующему фрагменту семантической сети включает следующие параметры:

$\alpha$  — степень диссоциации (показывает, какая часть растворенных молекул диссоциировала;  $\alpha < 30\%$  — сильные электролиты,  $\alpha < 3\%$  — слабые);

константа диссоциации ( $K_d$ ) — постоянная величина при данной  $t^\circ$ , не зависит от концентрации;

$pH$  раствора — водородный показатель ( $-\log[H^+]$ ,  $pH < 7$  — кислая,  $pH = 7$  — нейтральная,  $pH > 7$  — щелочная среда);

$C$  — концентрация.

Таким образом, для расчета величин  $pH$  в растворе электролита или смеси электролитов можно использо-

вать заданные параметры и их функциональные связи, определенные структурой фрейма. Фрейм будет иметь вид:

ТЭД (основные положения);

Электролит (классы химических соединений — кислоты, соли, основания);

Харэл (« $\alpha$ », « $k$ »,  $t^\circ$ ,  $C$ ,  $pH$ ).

Пусть имеются факты:

раствор соли  $NH_4Cl$ , концентрация  $C_1 = 0,1 M$ ,  $C_2 = 0,02 M$ ,  $t^\circ = 25$ ;

$\alpha$  — степень диссоциации;

$pH$  данного раствора ( $pH < 7$ ).

Формальный фрагмент фреймовой сети:

ТЭД,

Харэл ( $NH_4Cl$ ,  $\alpha > 30\%$ ),  $C_1 = 0,1 M$ ,  $t^\circ = 25$ ),  $\Phi 1$ ,  $pH$  — раствора ( $pH < 7$ ), ( $\Phi 2$   $C_2 = 0,02$ ,  $t = 20^\circ$ ),  $\Phi 1$ : Харэл ( $\alpha$ ,  $C$ ,  $t$ ).

Формальный фрагмент фреймовой сети имеет вид:

ТЭД,

Харэл ( $NH_4OH$ ,  $\alpha < 10^{-9}$ ,  $C_1 = 0,1 M$ ,  $t = 25^\circ$ ) —  $\Phi 1$ , Харэл ( $NH_4OH$ ,  $\alpha < 10^{-9}$ ,  $C_2 = 0,01 M$ ,  $t = 20^\circ$ ) —  $\Phi 2$ ,  $\Phi 1$ : Харэл ( $\alpha$ ,  $C$ ,  $t$ ),  $pH$  раствора [значение  $C$ , значение  $K$ ].

Описание фрейма ТЭД было основано на различного рода литературных источниках (справочники, словари, учебники) и экспериментальных исследованиях специалистов-химиков [3—5]. Данный пример показывает возможность постановки и решения задачи.

Для семантической сети «Комплексные соединения» интерес представляет цикл «Физико-химические характеристики — методы расчета — константы устойчивости — методы исследования». Представим этот фрагмент в виде фреймов. Для этого выделим следующие фактографические фреймы:

КС — комплексные или координационные соединения;

Ств — состав;

Сва — свойства;

Фрейм Сва имеет слоты:

$K$  — константы устойчивости,

$M$  — металл-комплексобразователь,

$C_m$  — концентрация металла,

$L$  — лиганд,

$C_L$  — концентрация лиганда,

$kч$  — координационное число;

$n$  — функция образования Бьеррума, связанная функционально с  $K$ ;

$$\bar{n} = f / K, C, C_{kc} \text{ или}$$

$$\bar{n} = \sum_{j=1}^n JK_j [L]^j / \left( \sum_{j=0}^n K_j [L]^j \right),$$

где

$$k = \frac{C_{kc}}{C_m C}, \quad \bar{n} = \frac{C_L - C_k}{C_m}.$$

Пусть имеются факты  $K_f \bar{n}$  ( $C_m, C_L$ , экспериментальные,  $t, I$  — константы).

Фреймовая сеть будет иметь вид:  $KC/Ств, Сва, K, Z/; Ств /M, L, кч/; Сва /K/$ .

Формальный фрагмент фреймовой сети:  $KC; K, n$   
/к. ч.=2;  $M=Cu, L=NH_3, C_m=0, 01; C_L=0,1504, t=$   
 $=22^\circ C, I=0, 2, \bar{n}=0, 48/ \Phi 1;$

к. ч.=2;  $M=Cu, L=NH_3, C_m=0, 05; C_L=0,2505,$   
 $t=22^\circ C, I=0,2, \bar{n}=3,88/ \Phi 2;$

$\Phi 1: K(C_m, C_L, n)$ .

В приведенном фрагменте использованы данные расчета констант устойчивости аммиачных комплексов меди методом Н. Бьеррума [6]. Этот пример иллюстрирует возможность использования фреймовых структур для описания теоретических и практических знаний, решения информационных задач, создания обучающих программ и осуществления систематической обработки экспериментальных данных и др.

## 2. РАЗРАБОТКА

### И ПОСТРОЕНИЕ СЕМАНТИЧЕСКОЙ СЕТИ ПО ХИМИИ ТВЕРДОГО ТЕЛА (ХТТ)

#### 2.1. Описание предметной области (ПО) химии твердого тела

Химия твердого тела (ХТТ) — одно из новых важных направлений современной химии — изучает химические свойства и строение твердых тел, пути получения и практическое использование различных типов твердых тел.

Важным открытием в ХТТ было обнаружение дефектов в кристаллах и явление сверхпроводимости. Большое теоретическое и практическое значение имеет также термодинамика твердого состояния, включающая учение о фазовых превращениях. Физическая природа химических реакций в твердых телах определила пограничное положение ХТТ и переплетение ее с такими науками, как фотохимия и механика, радиационная химия и материаловедение, химическая кинетика и физика твердого тела и др. Вместе с тем, закономерности, терминология и разработка теоретических положений ХТТ находится в стадии становления и формирования.

Один из центральных вопросов ХТТ — характеристика состояния твердого тела. Как известно, твердое состояние реализуется в двух формах — кристаллической и некристаллической. Данные о некристаллическом твердом теле позволили сформулировать основное положение: любое вещество может существовать в некристаллическом твердом состоянии [7]. Так как некристаллическое состояние твердого тела метастабильно, то внешние условия определяют его устойчивость.

У большинства некристаллических твердых тел (НКТ) термическая устойчивость ограничена температурами значительно более низкими, чем комнатная, а формирование большинства НКТ происходит, как правило, в некоторых экстремальных условиях, для создания которых требуется использование специальной техники. В

результате этого длительное время НКТ, за исключением традиционных стекол, оставались вне поля зрения исследователей. К настоящему времени накоплен значительный фактический материал по НКТ, рассмотрение которого и позволяет высказать предположение о возможности получения любого вещества в какой-либо из форм состояния НКТ — аморфной, стеклообразной, аморфно-стеклообразной и т. д.

Из этого положения следует, что образование НКТ можно ожидать как в однокомпонентных, так и в многокомпонентных системах при любых типах взаимодействия компонентов.

Из этого положения также следует, что те ограничения в отношении образования НКТ, которые были предложены ранее, носят частный характер и применимы не шире, чем к какой-либо группе веществ или определенным условиям получения. Возьмем, например, правила, по которым температура перехода из некристаллического в кристаллическое состояние ( $T_x$ ) равна 0, 3 или  $2/3 T_{пл}$ . В действительности  $T_x = AT_{пл}$ , где коэффициент  $A$  может изменяться от 0,02 (для  $M_0$ ) до  $\sim 1$  (для некоторых традиционных стекол), т. е. в последнем случае  $T_x$  может фактически не фиксироваться. Известно правило, по которому образования аморфных сплавов можно ожидать, если разница в радиусах атомов компонентов превышает 10%. В действительности, как на это уже обращалось внимание [8], разница в радиусах атомов не играет какой-либо роли. То же можно сказать о правиле глубокой эвтектики, которое, на наш взгляд, приводит только к сужению фронта поиска новых систем в состоянии НКТ. В действительности некристаллические системы могут быть получены в любой области диаграммы состояния, как это, например, недавно было показано на системах  $Fe-Sn, Co-Sn, Ni-Sn$  [9]. Характерно, что для сплавов с 50%  $Sn$  в случае  $Fe-Sn$  и  $Co-Sn$   $T_x$  превышает  $T_{пл}$  одного из компонентов.

Необходимо также обратить внимание на то, что использование такого понятия, как стеклообразующая способность, возможно и удобно в случае традиционных стекол или при получении НКТ из расплава, однако утрачивает смысл при рассмотрении НКТ в общем виде. Действительно, как оценить, например, стеклообразующую способность сплавов  $Fe-P, Co-P, Ni-P$ . При получении их из расплава стеклообразующая способность мала, в то же время при электроосаждении этих сплавов скорее следует говорить об их низкой кристаллообразующей способности, поскольку в определенном интервале составов получить электролизом эти расплавы в кристаллическом состоянии не удается. Этот пример показывает, что некорректное использование терминологии, возникшей при изучении традиционных стекол, может искажать правильное восприятие мира некристаллического твердого тела.

Понятие «аморфное состояние» в литературе определено недостаточно четко. Согласно одной из крайних точек зрения, термины *аморфное* и *стеклообразное* являются синонимами [7], согласно другой — аморфное состояние рассматривается как самостоятельное агрегатное состояние [10]. В последние годы широкое распространение нашел термин *некристаллическое твердое тело*. Этот термин констатирует основное различие между кристаллическим и некристаллическим твердым телом (в НКТ нет дальнего порядка в расположении атомов), ничего не говоря, правда, о характере ближнего порядка. Между тем, как известно, именно характер ближнего порядка ответствен за многие свойства тел.

В отношении металлических аморфных систем в настоящее время используются два равноценных понятия — аморфные сплавы (металлы) и металлические стекла, т. е. в этой области исследователи, как правило, не делают различия между терминами *аморфное* и *стеклообразное* [11].

Таким образом, вопрос об аморфном состоянии вещества представляется одним из центральных как в теоретическом, так и практическом смысле.

Рассматривая содержание химии твердого тела как предметной области можно отметить следующие ее особенности:

ХТТ находится на стыке многих направлений науки и техники,

ХТТ имеет большое практическое значение и широкое применение;

теоретические положения ХТТ во многом противоречивы,

важным вопросом ХТТ является проблема характеристики состояния твердого тела.

## 2.2. Построение семантической сети ХТТ

Как было указано выше, одна из особенностей ХТТ состоит в противоречивости теоретических положений.

В связи с этим представляется возможным использовать лишь один из сформированных в настоящей работе принципов построения семантических сетей, т. е. лишь общее основополагающее теоретическое положение химии как науки, а именно: взаимосвязь основных химических понятий «состав—свойство». Для ХТТ эти параметры имеют принципиальное значение, так как предмет большинства научных работ в этой области составляет поиск оптимального состава двухкомпонентных систем и выявления их свойств [12]. Для построения семантических сетей в качестве вершины взяты объекты, которым присвоены имена «состав», «структура» и «свойства». Каждая из вершин образует цикл иерархически связанных понятий. Циклы сообщаются между собой непосредственно или через основные вершинные понятия. Семантическая сеть ХТТ приведена на рис. 1.

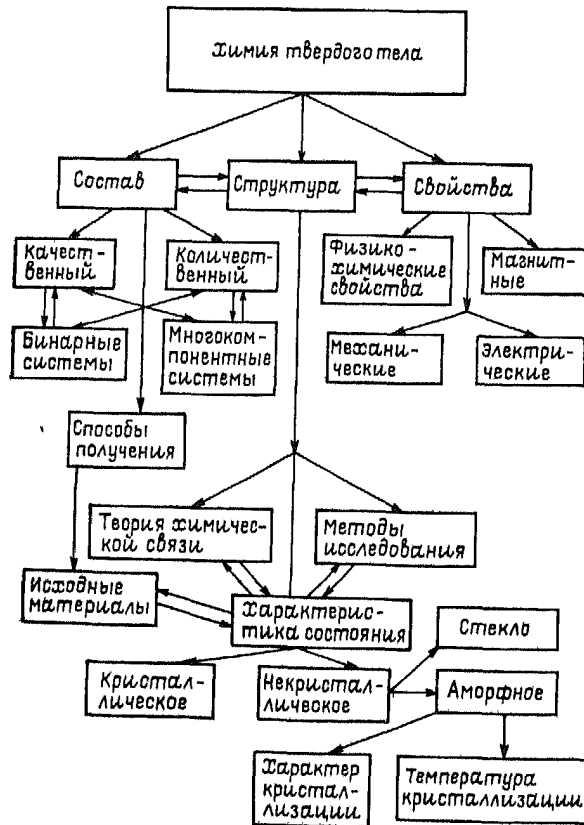


Рис. 1. Семантическая сеть ХТТ

Интересно отметить, что понятие концептов, связанных непосредственно с вершинами семантической сети, совпадает со значениями лексических единиц машинного словаря. Следует отметить наиболее часто встречающиеся слова и словосочетания: «аморфное состояние», «кристаллическая структура», «стекло», «магнитные свойства», «твердые тела», «температура кристаллизации», ряд других.

Для более полного представления содержания данной ПО можно расширить семантическую сеть ХТТ, выделяя отдельные циклы. Например, рассмотрим фрагмент семантической сети, связанный с концептом «способы получения». В описываемом фрагменте этот концепт является вершиной сети (рис. 2).

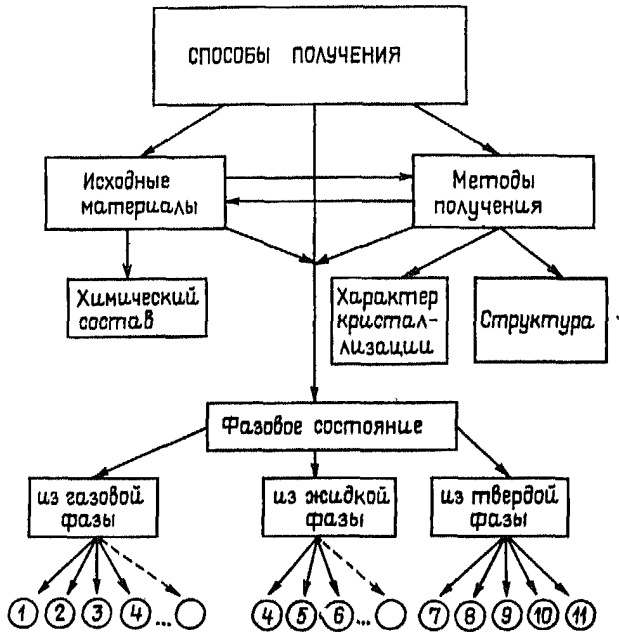


Рис. 2. Семантическая сеть «Способы получения аморфных тел»: 1. Конденсация пара, 2. Напыление, 3. ВЧ распыление, 4. Химическая реакция, 5. Закалка расплава, 6. Электролиз, 7. Механическое воздействие, 8. Диффузия, 9. Имплантация, 10. Лазерная обработка, 11. Термическое разложение

Аналогичное расширение можно произвести на основе концепта «свойства» (рис. 3). Приведенные примеры хорошо иллюстрируют возможности семантических сетей (гибкость, возможность расширения и др.) для представления знаний в области химии.

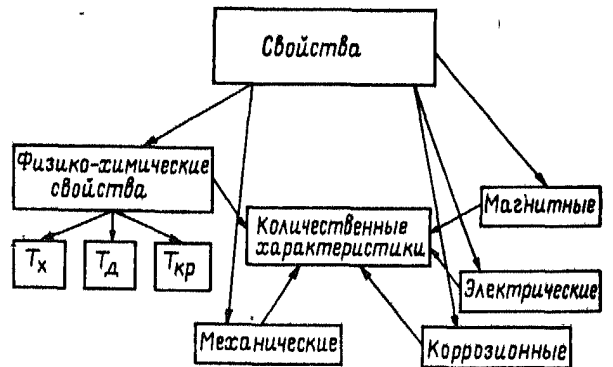


Рис. 3. Семантическая сеть «Свойства твердого тела»

Представление знаний в виде семантических сетей имеет различные функции, например, структурирование знаний. Нами была построена семантическая сеть на базе иерархической структуры отдельных циклов.

Выделим цикл, иерархически связанный с вершиной «структура». Воспользуемся так называемой процедурной семантической сетью, которая отображает иерархические отношения между концептами [13]. Как видно из рис. 4, при расширении семантической сети ХТТ процедурами обнаруживаются новые отношения между

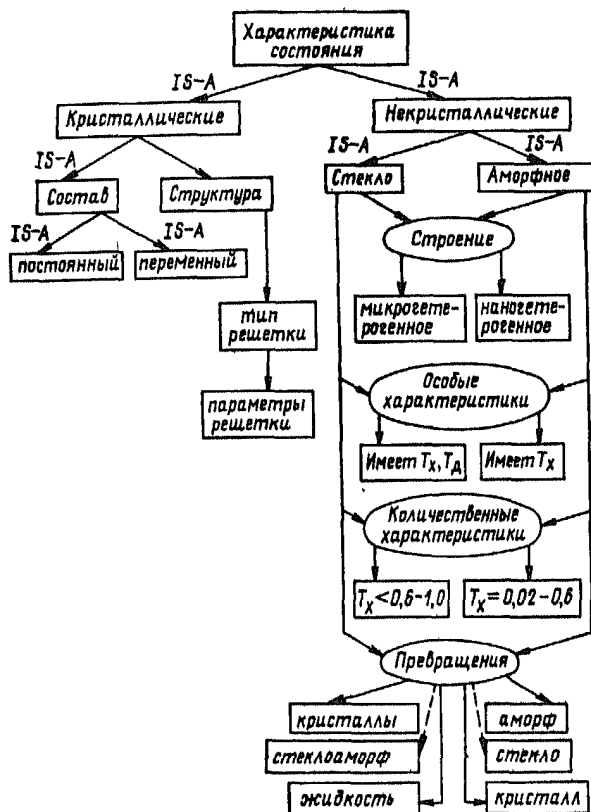


Рис. 4. Процедурная семантическая сеть, отражающая иерархическую структуру узла «Характеристика состояния»

концептами, которые связаны ветвями IS—A. В данном случае сеть строится на основе понятия «характеристика состояния», а остальные ее элементы — вершины, отношения, связи — представлены как объекты. Использование процедур семантических сетей через отношения IS—A обеспечивает наследование значений. Однако, как уже отмечалось выше, представление знаний по химии семантическими сетями не позволяет в необходи-

мой степени использовать экспериментальные данные. Поэтому для ПО ХТТ нами используется метод расширения семантических сетей фреймовыми структурами.

### 3. ВЫВОДЫ

В данной работе химическая наука рассматривается как предметная область. Показано, что химические знания можно представить с помощью семантических сетей, процедурных семантических сетей, а также фреймовых структур, при составлении семантических сетей по конкретным ПО были использованы формальные признаки, теоретические положения и закономерности, установлены внутренние связи семантической сети; произведено расширение семантических сетей «Химия комплексных соединений» и ТЭД фреймовыми структурами; показана целесообразность сочетания различных методов представления химических знаний.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Мизинцева М. Ф., Ананьева Т. Н., Бондарь В. В., Лангбайн Д. Концепция лингвистического обеспечения проблемно-ориентированной базы знаний // НТИ. Сер. 3.— 1991.— № 6.— С. 9—14.
2. Мизинцева М. Ф. Исследование и разработка способов представления химической информации для формирования проблемно-ориентированной базы знаний: Автореф. дис. канд. техн. наук.— М., 1993.
3. Альберт А., Сергент Е. Константы конденсации кислот и оснований.— М.: Иностран. лит-ра, 1972.
4. Курс физической химии / Под ред. Кирсева А. В.—М.: Высшая школа, 1972.
5. Химический энциклопедический словарь.— М.: Сов. энциклопедия, 1983.
6. Бьеррум Я. Образование аммиачных комплексов металлов в водном растворе.— М.: ИЛ, 1961.
7. Мотт М., Дэвис Э. Электронные процессы в некристаллических веществах.— М.: Мир, 1982.
8. Такаута S., J. Mater. Sci.— 1976.— № 11.— P. 164—185.
9. Sommer F., Dudder G., Predel B., Z. Metallkunde.— 1988.— Vol. 69, N 9.— P. 587—590.
10. Jenu J., Marchal J. and all, Phys. Rev.— 1982.— Vol. 25 B, N 12.— P. 7449—69.
11. Бондарь В. В. Некоторые вопросы некристаллического твердого состояния.— М.: 1980.— Деп. в ВИНТИ, № 3570 (1—17).
12. Бондарь В. В. Некоторые аспекты НКТС // Итоги науки и техники Сер. Химия твердого тела.— М.: ВИНТИ АН СССР, 1983.— № 2.— С. 4—14.
13. Представление и использование знаний / Под ред. Х. Уэно, М. Исидзука.— М.: Мир, 1989.— 220 с.

Материал поступил в редакцию 05.01.95.