

УДК 004.891.2

ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ПОДДЕРЖКИ ПОЛЬЗОВАТЕЛЕЙ В ОБЛАСТИ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ НАНОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУР И НАНОМАТЕРИАЛОВ

А.А. Гуськов, А.В. Дунаев, Ф.В. Подтелкин, А.В. Бухановский

Рассматриваются технологические аспекты разработки экспертной системы для интеллектуальной поддержки в области моделирования наноразмерных структур и наноматериалов.

Ключевые слова: нанотехнологии, экспертные системы, базы знаний.

Активное развитие новых научных областей (к которым, в частности, относятся исследования в области нанотехнологий) связано со сложностями усвоения их результатов сообществом потребителей полученных знаний в условиях отсутствия устоявшейся терминологии. В связи с этим конечный потребитель знаний (ученый или инженер, пользователь предметно-ориентированных программных комплексов) встает перед проблемой выбора наиболее подходящей методики решения поставленной задачи в условиях отсутствия общепризнанных стандартизированных и проверенных подходов. Для обеспечения интеллектуальной поддержки пользователей традиционно используется подход на основе отчуждаемых знаний, интерпретируемых посредством интерактивной экспертной системы (ЭС). ЭС помогает пользователю сформировать терминологически корректную постановку задачи и выбрать для нее адекватное решение (в рамках возможностей программного комплекса), учитывающее не только современное состояние предметной области, но и предпочтения пользователя.

Примером реализации такого подхода является ЭС в составе высокопроизводительного программного комплекса HPC-NASIS для квантовомеханических расчетов и моделирования наноразмерных атомно-молекулярных систем и комплексов [1]. Конструктивно ЭС состоит из четырех компонентов:

- база знаний, записанная в текстовом виде на диалекте языка CLIPS в виде связанного множества продукционных правил;
- компилятор базы знаний из текстового представления во внутреннее объектное дерево с сохранением его как самостоятельной базы знаний для последующего использования;
- скомпилированный бинарный вариант базы знаний, хранящий не только сами знания, но и текущее состояние вычислений: рабочую память, наполненное фактами дерево, активирующие правила;
- интерпретатор, состоящий из машины логического вывода (МЛВ) и обвязки методов, связывающих базу знаний с внешней средой.

База содержит структурированные знания, определяющие приоритеты применения существующих математических моделей, численных методов, алгоритмов и их программных реализаций для выполнения квантово-механических расчетов из первых принципов и для компьютерного моделирования и расчета наноструктур и наноматериалов, включая электронные и фононные характеристики молекулярных систем, оптические и фотоэлектрические свойства ансамблей наночастиц, перенос возбуждения, транспортные свойства нанотрубок, формирование наночастиц, нанотрубок и наносвитков. Экспертные знания, представленные в форме продукций, ассоциированы с гипертекстовыми элементами электронной библиотеки и используют последнюю для предоставления пользователю кратких объяснений касательно методов, инструментов, программных и инфраструктурных решений в области вычислительных нанотехнологий. Для текстового представления базы знаний использован собственный язык описания знаний, совместимый с экспертной системой CLIPS. Диалект записан в расширенной форме Бэкуса–Наура, а для программной реализации использована среда генерирования анализаторов ANTLR [2]. Разработка собственной реализации МЛВ была обусловлена необходимостью активного взаимодействия с другими подсистемами комплекса HPC-NASIS через веб-сервисы, а также лицензионной чистотой используемых библиотек и готовых решений. МЛВ реализована на основе RETE-алгоритма поиска активированных правил [3], использующего двухслойную сеть фильтрации неактивирующих фактов рабочей памяти.

1. Ядро высокопроизводительного программного комплекса для квантово-механических расчетов и моделирования наноразмерных атомно-молекулярных систем и комплексов “HPC-NASIS” // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 20010610161 – 2010.
2. The Definitive Antlr Reference: Building Domain-Specific Languages, Terence Parr – Pragmatic Bookshelf, 2007. – 376 с.
3. Forgy C. RETE: A Fast Algorithm for the Many Pattern/Many Object Pattern Match Problem // Artificial Intelligence. – 1982. – № 19. – P. 17–37.

Гуськов Александр Александрович – НИИ НКТ СПбГУ ИТМО, мл. научн. сотр., i@garfa.spb.ru; Дунаев Антон Валентинович – НИИ НКТ СПбГУ ИТМО, к.т.н., ст. н.с., anton.dunaev@gmail.com; Подтелкин Федор Васильевич – СПбГУ ИТМО, студент, podtelkin@rain.ifmo.ru; Бухановский Александр Валерьевич – д.т.н., профессор, avb_mail@mail.ru