

Введение Экспертная система (ЭС) это компьютерная программа, способная частично заменить специалиста-эксперта при решении проблемных многоходовых ситуаций, которые необходимо решать в повседневной жизни. Такие задачи очень часто встречаются в различных областях, как химии, так и химической технологии. Например, подбор оптимальных условий очистки сточных вод [1] или подбор катализаторов [2]. Хорошо данное решение может быть представлено на примере качественного анализа химических веществ, что и показано далее. Химический анализ вещества проводят с целью установления его качественного и количественного состава. Качественный анализ устанавливает какие элементы, ионы, группы атомов или молекул входят в состав вещества. Для обнаружения катиона используют кислотно-основную классификацию, согласно которой катионы делятся на шесть основных групп в зависимости от кислотно-основных свойств. При анализе вещества сначала с помощью групповых реагентов определяют аналитическую группу, к которой принадлежит искомый катион, затем внутри этой группы катион идентифицируют, проводя соответствующие специфические или селективные реакции, что требует строгого соблюдения порядка реакций [3]. Основная часть

Для решения данной задачи предлагается экспертная система, построенная на ответах «Да» и Нет», как например, в известной игре в вопросы и ответы по отгадыванию животных (или чего либо другого). Программа реализована в среде MS Excel с использованием программ и пользовательских форм Visual Basic. База знаний сохраняется на листах таблицы MS Excel по следующей схеме: в первом столбце находятся заключения, которые могут быть получены, а в первой строке – указания и вопросы, которые система задаёт для поиска нужных заключений. Остальное пространство листа занимают ответы для каждого заключения на соответствующий вопрос в форме «Да» или «Нет». Для упрощения ввода ответов, можно воспользоваться логическими фактами (Истина и Ложь) или числовыми значениями (1 и 0). Образец фрагмента листа показан на рис.1.

Следуя первому указанию, которое выводит нам программа, выясняем выпадает ли осадок при добавлении раствора $\text{HCl}(2\text{n})$. Если "Да", то программа сообщает нам, что катион принадлежит хлоридной группе, если "Нет", то переходим к следующему указанию: "Добавьте H_2SO_4 . Выпал осадок?". Программа продолжает опрос пока не получит первый положительный ответ, который определит группу. Как только группа, к которой принадлежит катион, определена, программа переходит на лист с соответствующим набором вопросов-указаний по катионам этой группы и ведет пользователя по цепочке действий для определения катиона.

группа	Добавьте раствор $\text{HCl}(2\text{n})$. Выпал осадок?	Добавьте H_2SO_4 . Выпал осадок?	Добавьте 1-2 капли $\text{NaOH}(2\text{n})$. Выпал осадок?	хлоридная	Да	Нет	Нет	сульфатная	Нет	Да	Нет	амфотерная	Нет	Нет	Да
гидроксидная	Нет	Нет	Да	аммиакатная	Нет	Нет	Да	растворимая	Нет	Нет	Нет	Рис. 1			

1 - Фрагмент листа программы После достижения правильного заключения (все

ответы совпадают с ответами базы знаний по конкретному катиону) система сообщает, что исследуемое вещество содержит такой-то катион. В противном случае система переходит в режим самообучения и пытается расширить свою базу знаний, запрашивая, что же за вещество изучалось и какие факторы это подтверждают. Для удобства работы программа снабжена удобным и понятным интерфейсом (рис. 2). Рис. 2 - Начальная форма окна программы. Перед каждым вопросом пользователь программы может получить информацию о причине задаваемого ему вопроса (Почему задается этот вопрос?) и в конце узнать всю цепочку действий, которую он выполнил для получения конечного заключения (Как получено данное заключение?). Выбор варианта ответа на вопрос «Почему?» строится в зависимости от выбора режима оптимизации решения (галочка в нижней части окна). Данная программа может быть легко переделана для реализации поиска заключений по любой проблеме, которая может быть решена на основании данного алгоритма. Для этого надо иметь: – набор заключения, который является гипотезами, определяемыми на основании предоставленных ответов на следующие вопросы; – набор вопроса, который система задает для выбора наиболее вероятных гипотез; – шаблоны ответов, которые позволяют системе выбрать наиболее верную гипотезу. Для улучшения работы системы можно применить различные эвристики. Для сокращения числа задаваемых вопросов, можно находить самый оптимальный из них на каждом шаге по числу отбрасываемых заключений, которое (число) должно стремиться к половине из оставшихся заключений. Второй эвристикой может быть статистика по полученным заключениям с перемещением вверх заключений с наибольшим количеством запросов. В этой работе предлагается подход к решению таких задач и пример её реализации на примере аналитической химии. Программная реализация системы полностью отработана и проверена. Для её внедрения достаточно просто наполнить базу знаний первичной информацией с последующим её обучением.