

ВЫВОД ГИПОТЕЗ О СОСТАВЕ И СВОЙСТВАХ ОБЪЕКТОВ НА ОСНОВЕ АНАЛОГИИ

ВВЕДЕНИЕ

В творческом мышлении важную роль играют процессы гипотетического моделирования [1]. Гипотетическим моделированием называется процесс формирования модели исследуемого объекта в условиях, когда достоверных знаний о некоторых его существенных характеристиках нет и приобретение таких знаний путем непосредственного наблюдения затруднительно или невозможно. По своему содержанию гипотетическое моделирование является процессом формирования гипотез об исследуемом объекте. Гипотетические модели широко используются в науке, проектировании, производственной деятельности, политике и т.п.

Формирование гипотез связано с применением различных форм умозаключений: аналогии, индукции, дедукции. Аналогия [2, 3, 4], как правило, дает толчок для высказывания предположения. Индукция необходима в тех случаях, когда целью является обобщение данных. В дальнейшем развитии и обосновании гипотезы важную роль играют дедуктивные умозаключения.

В статье предлагается сетевая структура для представления знаний при выводе гипотез о свойствах и составе объектов, описывается задача и метод проектирования состава сложных объектов на основе вывода по аналогии. Задача проектирования состава приобретает все большее прикладное значение, прежде всего, в таких областях, как химия, материаловедение, фармацевтика, вычислительная техника (проектирование состава вычислительных комплексов). В статье развиваются положения, приведенные авторами в [1, 5].

ОЦЕНКА СТЕПЕНИ АНАЛОГИИ

Принцип вывода по аналогии можно описать следующим образом [4]. Пусть Q_A и Q_B - множество фактов, характеризующих соответственно объекты A и B , причем некоторые из фактов множества Q_B неизвестны. Пусть известно о существовании соответствия (анalogии) $\varphi: Q'_A \rightarrow Q'_B$, где $Q'_A \subset Q_A$ и $Q'_B \subset Q_B$. Тогда для некоторого $a \in Q_A \setminus Q'_A$ может быть выдвинута гипотеза о существовании факта $b \in Q_B \setminus Q'_B$ такого, что $a \varphi b$.

Объект B обычно называется целью, объект A - базисом или аналогом. При выводе по аналогии выдвигается гипотеза о существовании нового, ранее неизвестного факта, характеризующего цель, на основании существования аналогичного факта среди фактов, характеризующих базис. Иногда выдвижение гипотезы по аналогии называют переносом фактов (свойств или отношений) от базиса к цели. При использовании вы-

вода по аналогии для решения практических задач естественно возникает вопрос о степени сходства. Для оценки степени аналогии нужна классификация видов аналогии и формализованные правила установления аналогии.

В основу классификации видов аналогии положим представление о мире в структурном плане как о системе объектов, свойств и отношений. Слово "объект" в философской литературе является синонимом слов "предмет", "вещь" и всегда обозначает нечто качественно обособленное. Объект тоже можно рассматривать как систему, элементами которой являются свойства и другие объекты. Элементы объекта связываются между собой отношениями. Объекты в результате взаимных воздействий подвергаются преобразованиям и превращениям. При изучении аналогии важное значение имеет также понятие "ситуация", обозначающее композицию взаимосвязанных объектов, свойств и отношений.

Среди свойств объекта будем выделять собственные свойства, т.е. те свойства, которые всегда присущи объекту независимо от ситуаций или процессов, в которых он участвует. Это, прежде всего, физические, химические и биологические свойства. К числу собственных свойств не относятся ситуативные связи объектов с другими объектами, а также роли (функции) объектов в различных процессах. Объект будем считать элементарным, если он рассматривается как единое целое, без учета его внутренней структуры. Введем несколько обозначений:

$a(b)$ - объект (свойство) a входит в состав (является собственным свойством) объекта b ;

$(a \equiv b)$ - a тождественно b ;

$(a \approx b)$ - a аналогично b ;

$(a r b)$ - объекты a и b связаны отношением r ;

$S_i(a)$ - внутренняя связь i объекта a (связь i между объектами, входящими в состав объекта a);

$\tilde{S}_i(a)$ - внешняя связь i объекта a (связь i объекта a с другим объектом);

$(a \rightarrow b)$ - процесс (действие), преобразующий a в b ;

$F_i(a)$ - функция i объекта a .

Правила установления аналогии сформулируем следующим образом:

1. Элементарные объекты (свойства) a и b аналогичны, если $(a \equiv b)$ или существует класс объектов (свойств) D такой, что $(a \in D)$, $(b \in D)$.
2. Отношения r_i , r_j аналогичны, если $(r_i \equiv r_j)$ или существует класс отношений R такой, что $(r_i \in R)$ и $(r_j \in R)$.
3. Связи $(a r_i b)$ и $(c r_j d)$ аналогичны, если $(r_i \approx r_j)$ и $(a \approx c)$ или $(b \approx d)$.
4. Процессы $(a \rightarrow b)$ и $(c \rightarrow d)$ аналогичны, если $(a \approx c)$ или $(b \approx d)$.

Используя введенные правила, определим основные виды аналогии:

1. Между объектами a и b существует атрибутивная аналогия, если

$$\exists p(a) \exists h(b) (p(a) \approx h(b));$$

2. Между объектами a и b существует структурная (или релятивная) аналогия, если

$$\exists S_i(a) \exists S_j(b) (S_i(a) \approx S_j(b));$$

3. Между объектами a и b существует контекстная (или внешняя) аналогия, если $\exists \tilde{S}_i(a) \exists \tilde{S}_j(b) (\tilde{S}_i(a) \approx \tilde{S}_j(b))$;

4. Между объектами a и b существует функциональная аналогия, если $\exists F_i(a) \exists F_j(b) (F_i(a) \approx F_j(b))$.

Из приведенных определений и правила 3 следует, что при наличии структурной аналогии всегда имеет место атрибутивная аналогия.

Между ситуациями может существовать атрибутивная, структурная или контекстная аналогии. Эти виды аналогии для ситуаций определяются так же, как и для объектов. В конкретных приложениях может возникнуть необходимость усилить ограничения, используемые в приведенных выше определениях, и таким образом детализировать приведенную классификацию. Степень сходства объектов и ситуаций можно оценивать на основе представления их в виде множеств свойств, связей и объектов. Оценка степени сходства зависит от числа и значимости аналогичных элементов множеств, представляющих сравниваемые объекты или ситуации. Введем следующие обозначения:

z - степень аналогии сравниваемых объектов (ситуаций);

U_{ab} - множество аналогичных элементов в каждом из сравниваемых объектов (ситуаций);

U_a - множество элементов объекта (ситуации) a , не имеющих аналогов в представлении объекта (ситуации), который сравнивается с a ;

p_i^a - оценка значимости элемента для объекта (ситуации) a .

Степень аналогии объектов (ситуаций) a и b может быть определена с помощью следующей формулы

$$z = \frac{\sum_{u \in U_{ab}} (p_u^a + p_u^b)}{\sum_{u \in U_a} p_u^a + \sum_{u \in U_b} p_u^b}.$$

Если значимости всех элементов сравниваемых объектов (ситуаций) равны 1, то:

$$z = \frac{2 \times |U_{ab}|}{|U_a| + |U_b|}.$$

Достоверность гипотезы, выведенной по аналогии, тем больше, чем выше степень аналогии между базисом и целью. В случае отсутствия аналогичных элементов у сравниваемых объектов (ситуаций) $z = 0$. Если все элементы сравниваемых объектов (ситуаций) имеют аналоги, $z = \infty$.

В качестве критериев классификации выводов по аналогии используют характер факта, переносимого от базиса к цели. В зависимости от того, является ли переносимый факт свойством или отношением, различают вывод свойств по аналогии и вывод отношений по аналогии. Переносимым свойством может быть свойство существования. Вывод по аналогии, в результате которого устанавливается аналогия причин базиса и цели, называется выводом причин по аналогии или каузальной аналогией.

Обязательной частью всех процессов, связанных с аналогией, является поиск аналогичных объектов, причем от этой операции в наибольшей степени зависит время реализации всего процесса. Поэтому одним из главных показателей качества поиска по аналогии является время его выполнения, которое, в основном, зависит от объемов информации, просматриваемой во время поиска. Принципиальное решение проблемы сокращения времени поиска состоит в перенесении действий по установлению подобия объектов в операции ввода информации в память. При этом общий выигрыш в эффективности достигается за счет более редкого применения операций ввода по сравнению с поисковыми операциями. Таким образом, проблемы поиска по аналогии необходимо решать в комплексе с вопросами организации памяти, обеспечивающей установление подобия объектов и выделение классов подобия на этапе занесения информации. В свете современных представлений это должна быть память коннекционистского типа, допускающая параллельное выполнение поисковых операций и отражающая в своей структуре семантические пересечения блоков информации. Такого рода требованиям удовлетворяют пирамидальные сети [6, 7]. Алгоритм построения сети, работающий при вводе описаний новых объектов, является одновременно алгоритмом поиска в сети аналогов нового объекта, имеющих с ним общие фрагменты описаний.

СЕТЬ “ОБЪЕКТ-СВОЙСТВО”

Приведем еще один тип сетевой структуры, специально ориентированной на вывод по аналогии. Сеть “объект-свойство” представляет собой ориентированный ациклический граф, в котором вершины соответствуют “объектам” и “свойствам”. Имеется два типа объектов: первичные объекты и сложные – соединения. Дуги соответствуют отношениям: “включает” и “имеет свойство”. Дуги “включает” соединяют вершины, соответствующие объектам, и всегда направлены от вершин, соответствующих первичным объектам, к вершинам, соответствующим соединениям. Дуги “имеет свойство” соединяют вершины, представляющие объекты, с вершинами, представляющими свойства, и направлены от свойств к первичным объектам и от соединений к свойствам.

Сеть “объект-свойство” удобно изображать четырехслойным графом в котором отдельные слои образуют вершины, представляющие соответственно свойства первичных объектов, первичные объекты, соединения, свойства сложных объектов. Такая структура является удобным инструментом вывода гипотез о свойствах и составе объектов на основе аналогии.

Объекты, образующие базис и цель для вывода по аналогии, могут быть заданы непосредственно именами соответствующих вершин сети или путем указания характеризующих их свойств. Отображение, связывающее базис с целью, устанавливается в пространстве свойств первичных объектов. Сложные или первичные объекты, группы объектов считаются аналогичными, если они характеризуются общим набором свойств первичных объектов. На основе аналогии объектам-целям присваиваются свойства объектов, служащих базисом.

Все поисковые процессы, связанные с выводом по аналогии, реализуются в сети с помощью двух поисковых операций – просмотров путей от заданной вершины в направлении или против стрелок.

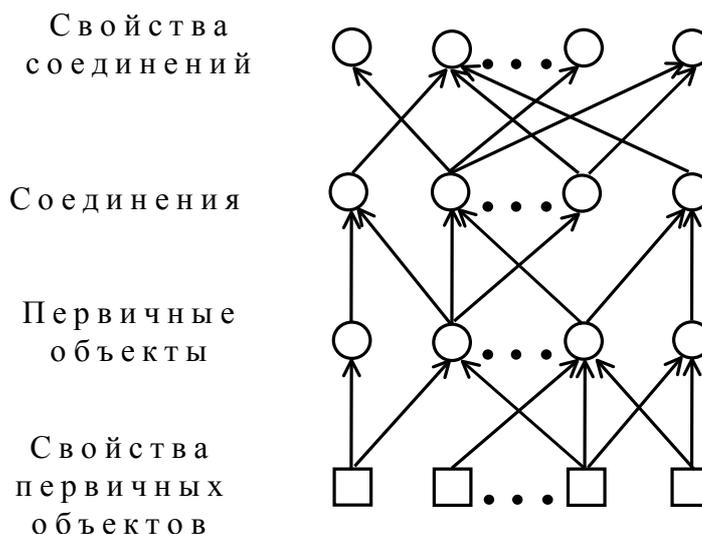


Рис. Сеть “Объект-свойство”

При решении различных задач часто приходится вводить дополнительные ограничения на выбор базиса и цели, обусловленные, например, спецификой типов или классов объектов, структурой соединений, возможной несовместимостью первичных объектов при формировании соединений и т.п. Степень аналогии зависит от числа и значимости общих свойств, связывающих базис и цель. Значимость свойства оценивается весовыми коэффициентами, которые формируются при выполнении поисковых операций и присваиваются вершинам сети.

ПРОЕКТИРОВАНИЕ СОСТАВА СЛОЖНЫХ ОБЪЕКТОВ

К числу наиболее характерных задач, решаемых на сети “объект-свойство”, относится задача проектирования состава сложных объектов – задача комплектации. Введем обозначения:

A – множество первичных объектов;

$B = \{b | b \subset A, |b| > 1\}$ – семейство множеств, представляющих соединения;

C – множество свойств первичных объектов;

D – множество свойств соединений.

Известны отображения множеств A и B в множества C и D .

$$\forall (a \in A) \exists (C_a \subset C) (a \rightarrow C_a); \quad \forall (b \in B) \exists (D_b \subset D) (b \rightarrow D_b)$$

Пусть заданы $D^+ \subseteq D$ и $D^- \subseteq D$, $D^+ \cap D^- = \emptyset$, а также ограничение R , определяющее допустимую структуру соединений. Необходимо сформировать новое соединение, имеющее все свойства множества D^+ и ни одного свойства из множества D^- . Структура соединения должна удовлетворять ограничению R .

При решении задачи комплектации подбор первичных объектов, входящих в состав соединения, осуществляется на основе знания зависимостей между заданными свойствами соединения и свойствами первичных объектов. Эти зависимости могут быть простыми или обусловленными многими факторами.

Например, при проектировании состава вычислительных комплексов, свойства соединения (вычислительного комплекса) такие, как частота, разрядность, объем памяти либо совпадают со свойствами составляющих (процессоров, блоков памяти, мониторов и т.п.), либо являются их функцией (объем внешней памяти является суммой емкостей дисков). В этом случае задача комплектации является вполне детерминированной.

При проектировании состава химических соединений зависимости между заданными свойствами соединения и свойствами химических элементов обусловлены большим количеством факторов. Результат решения представляет собой гипотезу о составе соединения, который мог бы обеспечить заданные свойства соединения. В этом случае задача недетерминирована и по сути является задачей прогнозирования состава соединения.

Проектирование состава сложных объектов с заданными свойствами состоит из следующих этапов:

1. Выделение в сети вершин верхнего слоя, соответствующих требуемым свойствам соединения (множество D^+), а также тем свойствам, которые не должно иметь проектируемое соединение (множество D^-).
2. Выделение в сети вершин, соответствующих известным соединениям, которые удовлетворяют заданным требованиям.
3. Выделение релевантных свойств, т.е. свойств таких первичных объектов, которые входят в состав известных соединений, удовлетворяющих заданным требованиям.
4. Выделение первичных объектов, аналогичным тем первичным объектам, которые входят в состав соединений, выделенных на этапе 2.
5. Формирование новых соединений из первичных объектов, выделенных на 4-ом этапе, в соответствии с заданными ограничениями на структуру соединений.

Рассмотрим более детально отдельные этапы процедуры комплектации сложных объектов.

На первом этапе, согласно формулировке задачи, выделяются множества вершин сети, соответствующие D^+ и D^- . На втором этапе, вершины, представляющие те известные соединения, которые удовлетворяют заданным требованиям, отыскиваются в третьем снизу слое путем прослеживания заходящих дуг вершин верхнего слоя, представляющих свойства из множеств D^+ и D^- . При этом в конкретных задачах можно допускать неполное соответствие соединений заданным требованиям. Например, можно выделять лишь соединения, имеющие свойства множества D^+ , не обращая внимания на отсутствие свойств множества D^- .

На третьем этапе просматриваются сверху вниз (против стрелок) пути, заходящие в вершины, выделенные на первом этапе, и проходящие через вершины, выделенные на втором этапе. Для каждого найденного свойства, представленного вершиной c самого нижнего слоя, записывается строка:

$$(n_1^c, n_2^c, \dots, n_i^c, \dots, n_l^c) (m_1^c, m_2^c, \dots, m_j^c, \dots, m_j^c),$$

где: $n_i^c (i = \overline{1, I})$ - количество прослеженных путей, соединяющих вершину c с вершиной, представляющей i -ое свойство из множества D^+ (вес вершины c по i -ому заданному свойству); $m_j^c (j = \overline{1, J})$ - количество прослеженных путей, соединяющих вершину c с вершиной, представляющей j -ое свойство из множества D^- (вес вершины c по j -ому запрещенному свойству); I - мощность множества D^+ ; J - мощность множества D^- .

Могут быть учтены различного рода ограничения, уменьшающие число релевантных свойств. Например, могут быть установлены пороговые значения для $n_i^c (i = \overline{1, I})$ и $m_j^c (j = \overline{1, J})$. В число релевантных свойств вносятся лишь те найденные свойства первичных объектов, у которых вес хотя бы по одному заданному свойству соединений превышает соответствующий порог.

На четвертом этапе выделяются первичные объекты, представленные теми вершинами второго слоя, которые имеют связи с вершинами, представляющими релевантные свойства. При просмотре сети снизу вверх от вершин, соответствующих релевантным свойствам, для каждого найденного первичного объекта записывается строка:

$$(N_1^a, N_2^a, \dots, N_i^a, \dots, N_I^a) (M_1^a, M_2^a, \dots, M_j^a, \dots, M_J^a),$$

где: a – имя вершины, соответствующей объекту;

$$N_i^a = \sum_{c \in C_a} n_i^c, (i = \overline{1, I}); M_j^a = \sum_{c \in C_a} m_j^c, (j = \overline{1, J}),$$

C_a – множество релевантных свойств, присущих первичному объекту a , т.е. множество заходящих дуг вершины a , которые исходят от вершин, соответствующих релевантным свойствам.

Список первичных объектов-кандидатов, найденных на этапе 4, упорядочивается. Наиболее приоритетными для формирования новых соединений считаются объекты, имеющие $\min \sum_{j=1}^J M_j^a$ и $\max \sum_{i=1}^I N_i^a$.

Таким образом, для формирования новых соединений отбираются первичные объекты, аналогичные тем объектам, которые входят в состав известных соединений заданного типа. Критерием существования аналогии является наличие общих релевантных свойств; степень аналогии оценивается их числом.

По упорядоченному списку объектов-кандидатов на пятом этапе формируются с учетом заданного структурного ограничения R различные варианты соединений, которые предположительно могут отвечать заданным исходным требованиям, т.е. генерируются гипотезы о составе соединений, которые бы могли иметь свойства множества D^+ и не иметь свойств множества D^- .

Модификации описанной процедуры отличаются характером ограничений, с помощью которых отбираются известные соединения (этап 2), релевантные свойства и объекты-кандидаты, а также средствами учета совместимости первичных объектов при формировании соединений.

Методы проектирования состава сложных объектов на основе сетей “объект-свойство” реализованы в программной системе ANALOG [5, 8]. Система предназначена для решения научно-технических, экономических и социальных задач с использованием вывода по аналогии. Области применения системы являются химия, материаловедение, рыночная экономика, медицина, экология, геология и т.п. Экспериментальный синтез новых материалов методом проб и ошибок оплачивается чрезмерными трудовыми, финансовыми и временными затратами. Методы прогнозирования возможности получения материалов с заданными свойствами позволяют правильно сориентировать эксперименты, связанные с получением новых материалов, и за счет этого значительно повысить их эффективность.

При использовании индуктивных методов для решения задачи проектирования состава сложных объектов гипотеза о составе соединения формируется путем обобщения информации об известных соединениях, имеющих полный набор заданных свойств [6]. Наличие такой информации (обучающей выборки) является принципиальным фактором во всех процессах индуктивного вывода. Достоверность выведенной гипотезы зависит от качества обучения, т.е. от того, насколько полно объекты обучающей выборки отражают существенные свойства и закономерности исследуемого класса соединений.

Необходимость иметь представительную обучающую выборку является серьезной трудностью в практическом применении индуктивных методов в целях проектирования состава соединений. Использование при проектировании состава вывода по аналогии позволяет значительно смягчить требования к исходной информации. В качестве базиса для вывода по аналогии могут привлекаться известные соединения, лишь частично удовлетворяющие заданным требованиям. В результате расширяется круг генерируемых гипотез, возникает принципиальная возможность генерации гипотез о составе даже при отсутствии известных соединений, полностью удовлетворяющих заданным требованиям.

С целью сравнения индуктивных методов и методов, использующих вывод по аналогии, на системах CONFOR [7] и ANALOG [8] решалась задача проектирования состава окислов, имеющих требуемую температуру плавления. Исследовались окислы двух классов: с температурой плавления выше и ниже 2000°C. В этой задаче в качестве соединений рассматриваются окислы, первичными объектами являются химические элементы, первичными свойствами служат физико-химические свойства элементов, в качестве свойств проектируемых соединений задается температура плавления. Известные окислы этих классов были представлены очень малой обучающей выборкой (6 окислов с $T_{пл.} > 2000^\circ\text{C}$ и 4 окисла с $T_{пл.} < 2000^\circ\text{C}$). Обучающая выборка такого размера оказалась недостаточной для получения удовлетворительных результатов с помощью системы CONFOR. Результаты прогнозирования с помощью системы ANALOG, полностью совпали с тестовыми данными.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Вывод по аналогии является эффективным инструментом решения аналитических задач, прежде всего, задач диагностики и прогнозирования. Эффективность реализации методов, использующих аналогю, зависит от избирательности поисковых опера-

ций, которая, в свою очередь, зависит от выбранных средств представления знаний. Предложенная в статье сетевая структура объект-свойство непосредственно отображает связи между объектами, их свойствами и составными частями, следствием чего является минимизация объемов и времени поисковых операций

В описанном методе проектирования состава сложных объектов отбор вариантов состава осуществляется на основе оценки степени аналогии. Эксперименты по проектированию состава химических соединений с помощью системы ANALOG показали, что этот механизм в сочетании с эффективными средствами представления знаний обеспечивает высокий уровень достоверности выведенных гипотез о свойствах и составе объектов.

Авторы выражают благодарность профессору З.Л.Рабиновичу за ценные замечания, сделанные им при подготовке статьи.

ЛИТЕРАТУРА

1. Гладун В.П. Гипотетическое моделирование: методология и применение / Кибернетика и системный анализ, 1997. - № 1. - С. 10-20
2. Уемов А.И. Аналогия в практике научного исследования, М.: Наука, 1970. - 264 с.
3. Пойа Д. Математическое открытие. - М.: Наука, 1976. - 448 с.
4. Hall R. Computational approaches to Analogical Reasoning: a comparative analysis // Artificial Intelligence - 1989. - 3, № 39. - P. 39-120
5. Гладун В.П., Величко В.Ю., Москалькова Н.М. Интеллектуальные технологии автоматизации научных исследований // Труды конференции "Знание-Диалог-Решение" KDS-97, Ялта, 1997. - С. 16-25
6. Гладун В.П. Процессы формирования новых знаний. - София, Педагог, 1994. - 191 с.
7. Гладун В.П., Ващенко Н.Д. Локально-статистические методы формирования знаний / Кибернетика и системный анализ. – 1995. - № 2. - С. 62-74
8. Величко В.Ю., Москалькова Н.М. Застосування виведення по аналогії для розв'язування задач комплектації. Вісник Київського Університету. - 1998. - Випуск 3. - С. 139-149.