**«ОБРАЗЫ» АТОМОВ И МОЛЕКУЛ В КРИСТАЛЛЕ КАК НЕЧЕТКИЕ МНОЖЕСТВА**

Ю.Л.Словохотов1,2

*1Институт проблем управления РАН*

*2Факультет наук о материалах МГУ*

yurislovo@yandex.ru

Нечеткие множества (fuzzy sets), впервые предложенные в 1965 г. американским математиком Лотфи Аскер-заде [1], в настоящее время широко применяются для формализации соотношений, включающих неопределенности. *Нечеткое множество* A={*x*,A(*x*)|*x*∈U} состоит из элементов {*x*} *универсального множества* U=suppA, или *носителя* А, дополненного *функцией принадлежности* 0≤A(*x*)≤1, которая определяет «степень» принадлежности элемента *x*∈U множеству А. В простейшем одномерном случае U=[*a,b*] функция принадлежности (нередко линейная), заданная на отрезке *a≤x≤b*, имеет смысл вероятности; условие A(*x*)=1 при *x*∈[*a,b*] и A(*x*)=0 при *x*∉[*a,b*] отвечает обычному («четкому») множеству точек отрезка [*a,b*] (см. рисунок)

*b*

*a*

1

0

*b*

*a*

0

*b*

*a*

0

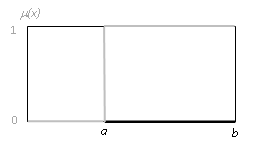
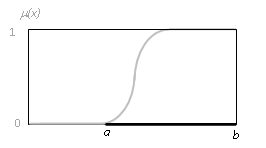
*(x)*

*b*

*a*

1

0



(а) (б)

Рисунок. (а) Обычное множество (*x*∈[*a,b*]), (б) нечеткое множество

Нечеткие множества позволяют формализовать соотношения, выраженные средствами естественного языка (*лингвистической переменной*): «в среднем больше», «как правило, меньше», «примерно одинаковы» и т.д. Развитая на их основе *нечеткая логик*а отличается от классической булевской логики: для объединения множеств

A∪B: =max(A,B), поэтому, если A,‾A («не-А») ⊂ U, то A ∪‾A ≠ U

(нет *исключения третьего*), а также

A∩B: =min(A,B), поэтому для A,‾A ⊂ U пересечение A ∩‾A ≠ ∅

(нет *закона противоречия*), и др. [2]. Нечеткие множества являются мощным средством «свертки» информации в распознавании образов, робототехнике, приложениях искусственного интеллекта и других областях.

В кристаллографии, как одной из наиболее формализованных естественных наук, не вполне определенные соотношения количественных параметров широко используются для классификации геометрических объектов. В частности, поверхности Хиршфельда [3] как условные границы, выделяющие многоатомные фрагменты (молекулы) в элементарной ячейке, определяются весовой функцией

,

где в числителе – электронная плотность «промолекулы» в точке ***r***, а в

кристаллографии: при использовании систем ван-дер-ваальсовых радиусов, выявлении координационных полиэдров, анализе мотивов упаковки и во многих знаменателе – сумма плотностей ат(***r***) всех атомов внутри элементарной ячейки кристалла (включая саму молекулу) в этой точке. Внутри области молекулы *w*(***r***) близка к 1; за ее пределами быстро стремится к 0. Таким образом, весовая функция *w(****r****)* является функцией принадлежности точек элементарной ячейки кристалла к нечеткому множеству: области, занимаемой молекулой в пространстве.

Проблемы отнесения численных данных к нечетко заданным либо условным категориям возникают в целом ряде химических приложений и других задачах. В докладе рассматриваются «нечеткие» соотношения для длин невалентных контактов, показателей точности кристаллических структур и геометрических параметров типичных структурных фрагментов.

[1] *L.A. Zadeh*  Information & Control.  1965, **8**(3), 338-53.

[2] Л.К.Конышева, Д.М.Назаров, Основы теории нечетких множеств, Питер, 2011.

[3] M.A. Spackman, D. Jayatilaka, CrystEngComm, 2009, 11, 19.