



UNIVERSITY
OF
JOHANNESBURG

COPYRIGHT AND CITATION CONSIDERATIONS FOR THIS THESIS/ DISSERTATION



- Attribution — You must give appropriate credit, provide a link to the license, and indicate if changes were made. You may do so in any reasonable manner, but not in any way that suggests the licensor endorses you or your use.
- NonCommercial — You may not use the material for commercial purposes.
- ShareAlike — If you remix, transform, or build upon the material, you must distribute your contributions under the same license as the original.

How to cite this thesis

Surname, Initial(s). (2012) Title of the thesis or dissertation. PhD. (Chemistry)/ M.Sc. (Physics)/ M.A. (Philosophy)/M.Com. (Finance) etc. [Unpublished]: [University of Johannesburg](https://ujdigispace.uj.ac.za). Retrieved from: <https://ujdigispace.uj.ac.za> (Accessed: Date).

STRUKTUURGRAFIEGRAMMATIKAS

deur

ARTHUR WILLIAM TEW

VERHANDELING

voorgelê ter vervulling van die vereistes

vir die graad

MAGISTER IN DIE NATUURWETENSKAPPE

in

REKENAARWETENSKAP

in die

FAKULTEIT NATUURWETENSKAPPE



Studieleier: Prof. E. M. Ehlers

Mede-studieleier : Prof. S. H. Von Solms

DESEMBER 1989

Opsomming

In hierdie verhandeling word 'n studie gemaak van grafieke, grafiekgrammatikas en grammatikas wat strukture in drie dimensies voorstel.

Strukturgrafieke word in die verhandeling vir die eerste maal gedefinieer. Die definisie daarvan is gebaseer op die van gewone grafieke met die verskil dat sekere geometriese eienskappe aan die boë van die grafiek geheg word.

Twee verskillende strukturgrafiekgrammatikas word gedefinieer. Strukturgrafiekgrammatikas lewer strukturgrafieke as taal. Die geometriese eienskappe van die strukturgrafieke wat gegenereer word, kom as kontekste in die grammatikas voor.

'n Studie word gemaak van eienskappe van elkeen van die grammatikas wat gedefinieer word. Daar word 'n vergelyking getref tussen die twee grammatikas. Die eienskappe van die taal wat elk genereer word ook bespreek.

Verder word bestaande rekenaarstelsels ondersoek wat chemiese prosesse modelleer.

Ter afsluiting word 'n rekenaarstelsel wat as deel van die studie ontwikkel is waarmee strukturgrafiekgrammatikas ontwerp kan word bespreek.

Abstract.

In this thesis a study is made of graphs, graph grammars as well as grammars which represent structures in three dimensions.

Structure graphs are defined for the first time in this thesis. The definition thereof is based upon that of ordinary graphs, they differ however in that certain geometric properties are assigned to the arcs of the graphs.

Two different types of structure graph grammars are defined. Structure graph grammars derive structure graphs as language. The geometric properties of the structure graphs appear as context's in the grammars.

A study is made of the properties of the structure graph grammars. A comparison between the two types of grammars is also given. The properties of the languages derived by each are also discussed.

Existing computer systems which model chemical processes are also discussed.

Finally a discussion is given of a software system which was developed as part of this study. This system can be used in the design of such a structure graph grammar.



UNIVERSITY
OF
JOHANNESBURG

Inhoudsopgawe

1. Inleiding	1-1
1.1 Doel	1-1
1.2 Oorsig	1-2
1.3 Grammar-Cad	1-3
2. Grafiekgrammatikas	2-1
2.1 Grafiek	2-2
2.2 Web	2-6
2.3 Web-grammatikas	2-9
2.4 Grafiekgrammatikas	2-13
2.5 NLC grammatikas (Node Label controlled grammars)	2-17
2.6 Hegting van grafieke	2-21
2.7 Vergelyking van grammatikas en samevatting	2-24
3. Drie-dimensionele grammatikas	3-1
3.1 Syferfigure	3-1
3.2 Ongeordende Konteks Struktuur-grammatikas	3-2
3.3 Vorm-grammatikas	3-10
3.4 3D-Plex grammatikas	3-16
3.5 Opsomming	3-22

4. Struktuurgrafieke	4-1
4.1 Struktuurgrafiek	4-1
4.2 Die hoek tussen boë	4-6
4.3 Ander definisies	4-8
5. Struktuurgrafiekgrammatikas uitbreiding 1 (SGG-1)	5-1
5.1 SGG-1	5-1
5.2 Tekortkominge	5-10
6. Struktuurgrafiekgrammatikas uitbreiding 2 (SGG-2)	6-1
7. 'n Vergelyking tussen SGG-1's en SGG-2's.	7-1
7.1 Elementêre eienskappe	7-1
7.2 SGG-1's genereer makliker ketting strukture	7-10
8. Modelling van chemiese stelsels met behulp van rekenaars	8-1
9. Die "Grammar-Cad" stelsel	9-1
9.1 Inleiding	9-1
9.2 Stelselbeskrywing	9-3
9.3 Apparatuur	9-8
9.4 Voorbeeld	9-8
9.5 Tegnieuse beskrywing van sommige van die algoritmes	9-10

9.6 Gebruik van die ingeslote stelsel	9-15
9.7 Opsomming	9-17
10. Gevolgtrekking	



Hoofstuk 1.

Inleiding.

Die voorstelling van drie-dimensionele strukture deur middel van formele tale is 'n redelike nuwe studieveld. Dit is egter 'n studieveld wat aandag geniet [1,10,12].

Eerstens sal die doel van hierdie studie bespreek word. 'n Oorsig oor elke hoofstuk sal daarna gegee word. Laastens sal 'n bespreking van die rekenaarstelsel "Grammar-cad" gegee word.

1.1 Doel.

Hierdie studie het hom eerstens ten doel gestel om bestaande drie-dimensionele voorstellingstegnieke te ondersoek. Tweedens is 'n studie gemaak van grafiekgrammatikas om hulle eienskappe te bepaal. Derdens is struktuurgrafieke gedefinieer asook twee grammatikas wat sulke struktuurgrafieke genereer.

Die studie na bestaande voorstellingstegnieke is gedoen om eerstens die tekortkominge van bestaande stelsels te ondersoek en tweedens om 'n voorstelling te vind wat uitgebrei sou kon word. Die stelsel wat wel hieraan voldoen het is ongeordende konteks struktuurgrammatikas (OKSG's). Hierdie tegniek het egter die beperking dat simbole slegs op die rand van 'n figuur in ses verskillende rigtings (noord, oos, suid, wes, op, af) geplaas kan word.

Die ondersoek na die eienskappe van grafiekgrammatikas is gedoen om 'n bestaande twee-dimensionele tegniek te vind waarop ons, ons uitbreidings kon baseer. Grafiekgrammatikas is gekies omdat dit die noodgedwonge vervanging na links en na regs van bestaande stringe in die geval van string-grammatikas oorkom het. 'n Uitbreiding van grafieke na drie-dimensionele struktuurgrafieke sal die beperkinge van OKSG's oorkom.

Struktuurgrafieke het die gewone eienskappe van grafieke behalwe dat daar sekere geometriese eienskappe (bv. rigting en lengte) aan hulle geheg word.

Strukturgrafiekgrammatikas tipe 1 (SGG-1) en Strukturgrafiekgrammatikas tipe 2 (SGG-2) is twee uitbreidings van grafiekgrammatikas wat strukturgrafieke as taal genereer.

Die uiteindelijke doel van die studie is om 'n formele taal te definieer waarmee drie-dimensionele strukture beskryf kan word. Die grammatikas wat gedefinieer is, is gedefinieer om strukturgrafieke in die algemeen voort te bring. Die gebruik van die grammatikas om chemiese molekules in drie-dimensies te modelleer is egter 'n goeie toepassing van die grammatikas.

1.2 Oorsig.

'n Kort oorsig oor elke hoofstuk sal vervolgens gegee word.

In hoofstuk twee word grafieke en grafiekgrammatikas bespreek. Verskeie variasies van sulke grafieke en grafiekgrammatikas word gegee. Die eienskappe van die grafiekgrammatikas wat gegee word, word later na strukturgrafiekgrammatikas oorgedra.

Hoofstuk drie bespreek reeds bestaande voorstellings van drie-dimensionele strukture. Die eienskappe van die voorstellings word bespreek en voorbeelde van elk word gegee.

Die volgende hoofstukke naamlik 4, 5, 6 en 7 bevat die studie wat gedoen is om 'n nuwe grammatika daar te stel vir die voorstelling van drie-dimensionele strukture.

Strukturgrafieke word in hoofstuk vier gedefinieer. Die eienskappe van die grafieke word gegee. Ander eienskappe soos samehangendheid en nie-samehangendheid word gedefinieer vir strukturgrafieke. Definisies word ook gegee vir konsepte wat in die volgende hoofstuk bespreek word.

Strukturgrafiekgrammatikas tipe 1 (SGG-1's) word in hoofstuk vyf gedefinieer. Die eienskappe van die grammatika word bespreek en met voorbeelde toegelig.

Strukturgrafiekgrammatikas tipe 2 (SGG-2's) word in hoofstuk ses gedefinieer. Die verskille met SGG-1's word bespreek. Enkele voorbeelde word gegee om die eienskappe van SGG-2's te illustreer.

In hoofstuk sewe word 'n bespreking gegee oor die verskille tussen SGG-1's en SGG-2's. Die voordele wat die verskille in elke geval mag hê word ook bespreek.

Dit is belangrik om daarop te let dat die navorsing wat in hoofstukke vier tot sewe neerslag vind slegs in 'n aanvanklike stadium is. Hier is gepoog om 'n voorstelling te kry vir strukture in drie-dimensies. Dit is gedoen deur 'n grammatika te definieer wat strukture genereer wat geometriese eienskappe besit.

In hoofstuk agt word reeds bestaande chemiese rekenaarstelsels bespreek.

Hoofstuk 9 bevat 'n bespreking van die Grammar-cad rekenaarstelsel wat ontwikkel is om strukturgrafieke met behulp van SGG-2's te genereer. 'n Kort oorsig oor hierdie stelsel sal in die volgende afdeling gegee word.

1.3 Grammar-cad.

Grammar-cad is 'n rekenaarstelsel wat geskryf is om die gebruik van SGG-2's te illustreer. Dit bied ook 'n omgewing waarin so 'n grammatika ontwikkel kan word.

Die stelsel het die voordeel dat die gebruiker interaktief met die grammatika besig is. Die gebruiker kan dus aan die grammatika verander en het beheer oor die struktuur wat gegeneer word.

Die rekenaar maak gebruik van grafika as gebruikerskoppelvlak. Die gebruiker verkry dus 'n visuele beeld van die struktuur wat hy besig is om te genereer. Die stelsel maak ook voorsiening vir transformasies wat die gebruiker in staat stel om die struktuur uit enige rigting uit te bestudeer.

Die stelsel het ook eienskappe wat dit vir die gebruiker met ondervinding maklik maak om te gebruik. Dit gebruik as invoer teksleërs wat 'n gram-

matika bevat en lewer sulke leërs as afvoer. Formele definisies van grafieke word ook as afvoer gelewer.



Hoofstuk 2.

Grafiekgrammatikas

Om die grammatikas wat later voorgestel word te verstaan en die beginsels daar agter, is dit nodig dat ons sekere begrippe en historiese (reeds bestaande) definisies gebruik om die toepaslikheid van die tipe grammatikas te illustreer.

'n Groot probleem in die herkenning van beelde is om die basiese beginsels van string-grammatikas oor te dra na strukture wat op meer algemene maniere verbind is. In 1969 definieer Rosenfeld en Pfaltz [2] grafiekgrammatikas. Grafiekgrammatikas is gedefinieer vir die eenvoudige geval waar slegs die nodi van 'n grafiek etiket waardes het. Aangesien vervangings in enige rigting kan plaasvind oorkom hierdie tipe grammatikas die beperking van string-grammatikas waar vervanging noodgedwonge aan die linker- en regterkante van 'n simbool in 'n string moet plaasvind.

Die nut van die tipe grammatikas in veral die gebied van beeldverwerking en beeldherkenning het daartoe gelei dat baie navorsing oor die onderwerp gedoen is.

In [17] word web grammatikas gedefinieer wat 'n direkte uitvloeisel is van die grammatikas soos gedefinieer deur Rosenfeld en Pfaltz.

In 1979 [5] word 'n inleiding gegee tot die algebra van grafiekgrammatikas en veral hegtings van grafieke en die sogenaamde Church Rosser eienskappe van grafiekgrammatikas word bespreek. Hierdie spesifieke benadering tot grafiekgrammatikas staan dan ook as die "Berlin" benadering bekend.

In 1980 [3, 4] word NLC grammatikas gedefinieer, wat ook 'n uitbreiding van grafiekgrammatikas is. NLC grammatikas het egter die eienskap dat dit op die verwantskap tussen die verbindings van die waardes van die nodi in die grafiek gebaseer is.

In hierdie hoofstuk sal die definisies vir grafieke en webbe eerstens gegee word. Daarna sal grammatikas vir elk gedefinieer word. NLC grammatikas se definisie en voorbeelde van NLC grammatikas sal daarna gegee word.

Die hegting van grafieke in grammatikas sal vervolgens bespreek word.

Ter afsluiting sal 'n vergelyking getref word tussen die verskillende grammatikas om die gebruik van die beginsels van elk in die definisie van struktuurgrafiekgrammatikas te illustreer.

2. 1 Grafiek

2. 1. 1 Definisie

'n Grafiek kan as volg beskryf word:

Dit bestaan uit 'n aantal nodi van 'n versameling N en 'n aantal boë wat elemente is van 'n versameling van boë A . 'n Boog verbind twee nodi met mekaar. Verder kan die boë en nodi in so 'n grafiek sekere waardes (labels) met hulle ge-assosieer hê. 'n Logiese funksie (labeling function) ken die waardes aan die boë en nodi toe.

Op 'n meer formele wyse kan 'n grafiek as volg gedefinieer word.

Indien ons twee alfabette N (versameling nodi) en A (versameling boë) het, kan ons 'n grafiek G oor A en N definieer as $G = (G_n, G_a, G_f)$ waar

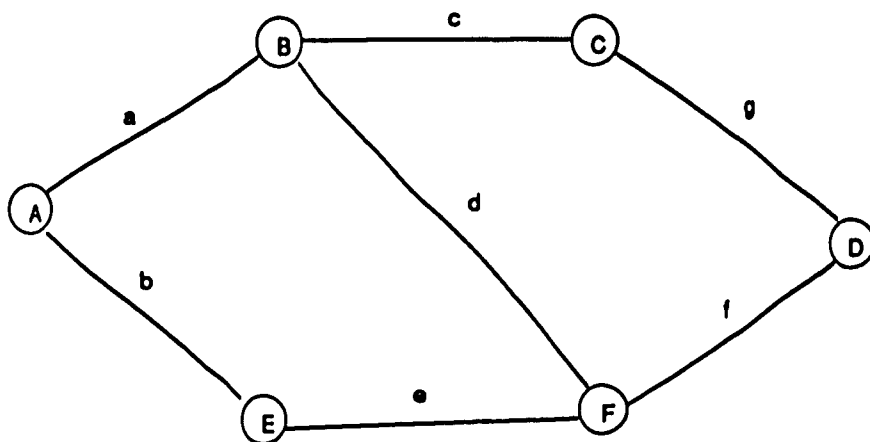
G_n die versameling nodi is, $G_n \neq \emptyset$, $G_n \subseteq N$.

G_a die boogwaarde funksie is. Dit is 'n funksie wat boë beskryf deur 'n drietal $(n_1, a, n_2) \in N \times A \times N$.

G_f is die beeldfunksie wat G_n op N afbeeld.

2. 1. 2 Voorbeeld

Die onderstaande voorbeeld is 'n eenvoudige voorstelling van 'n grafiek en illustreer slegs die boë en nodi.



figuur 2-1. Voorbeeld van 'n grafiek

Die formele definisie van die grafiek sal as volg lyk

$$G = (G_n, G_a, G_f)$$

$$G_n = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$$

$$G_a = \{(1, a, 2), (2, c, 3), (3, g, 4), (1, b, 5), (5, e, 6), (6, f, 4), (2, d, 6)\}$$

$$G_f = F(1) = A,$$

$$F(2) = B,$$

$$F(3) = C,$$

$$F(4) = D,$$

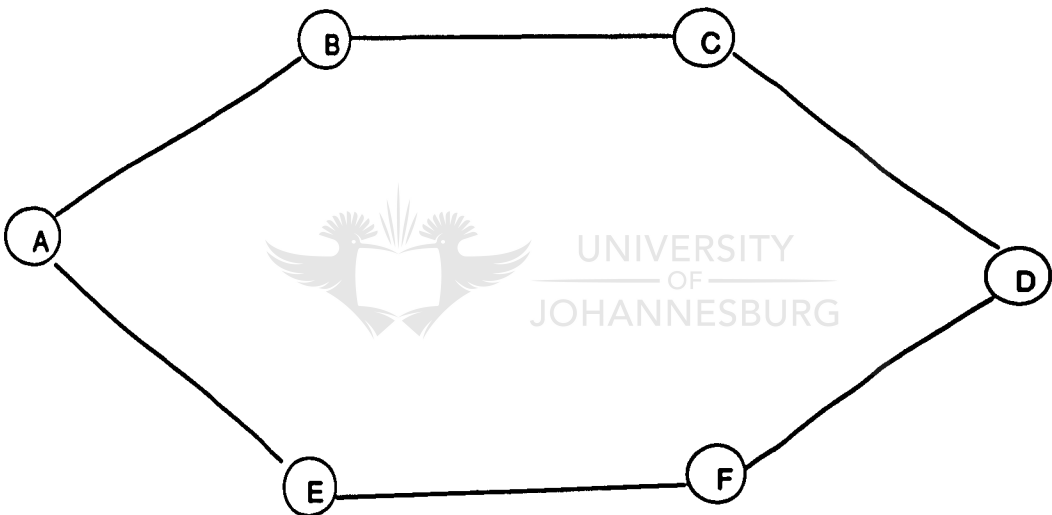
$$F(5) = E \text{ en}$$

$$F(6) = F.$$

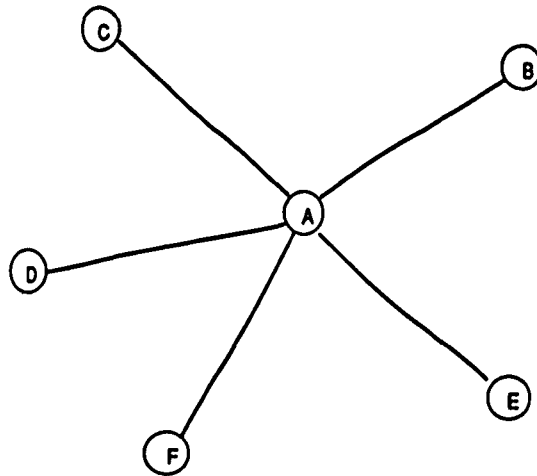
In die latere voorstelling van grafieke sal die voorstelling wat in die figuur voorkom gebruik word.

2. 1. 3 Toepassings

Verdere voorbeelde van grafieke kan gesien word in datakommunikasie netwerke waar die stasies nodi is en die verbindings boë. Die gebruik van grafiekteorie om die kortste pad tussen nodi te bepaal, is 'n bekende gebruik van grafiekteorie in datakommunikasie. Verder is dit ook maklik om die netwerk te visualiseer deur dit met 'n grafiek voor te stel. Figure 2.2 en 2.3 is voorbeelde van kommunikasie netwerke wat met behulp van grafieke voorgestel is.

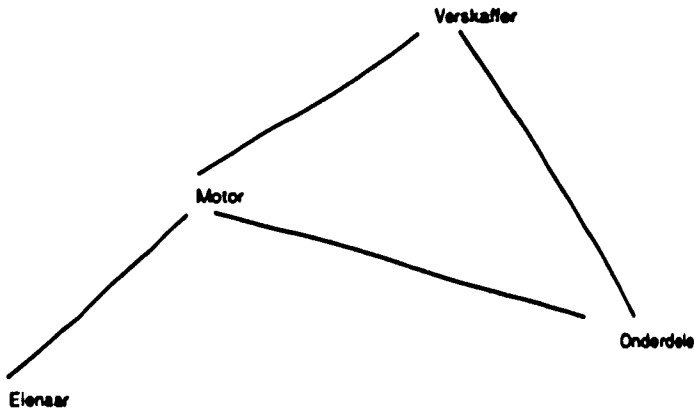


Figuur 2-2. Voorbeeld van 'n ringnetwerk



Figuur 2-3. 'n Grafiek wat 'n sternetwerk voorstel.

Grafieke word ook gebruik in databasisse om die verwantskappe tussen sekere datavelde in rekords en datavelde in ander rekords aan te dui. In die onderstaande skets word 'n databasis voorgestel deur die verwantskap tussen die rekords wat op 'n motor van belang is te illustreer. Die verskaffer voorsien die motors en die onderdele, terwyl elke motor 'n eienaar het. Die verwantskap tussen die vier mag moontlik as volg voorgestel word.



Figuur 2-4.'n Relasie voorstelling van 'n databasis

2. 2 Web

'n Web kan as 'n spesiale geval van 'n grafiek gesien word. 'n Web bestaan uit nodi en boë en is in die opsig verwant aan grafieke. Dit is ook belangrik om daarop te let dat die grafiekgrammatikas en web-grammatikas verwant is en slegs in klein opsigte van mekaar verskil.

Die grootste verskil tussen 'n web en 'n grafiek is dat daar waardes aan die boë van 'n grafiek toegeken word terwyl daar geen waardes aan die boë van 'n web toegeken word nie.

2. 2. 1 Definisie

In [17] word 'n web as volg gedefinieer :

As V 'n geslote versameling simbole is word 'n web gedefinieer as die drietal $W = (N_w, F_w, A_w)$ waar

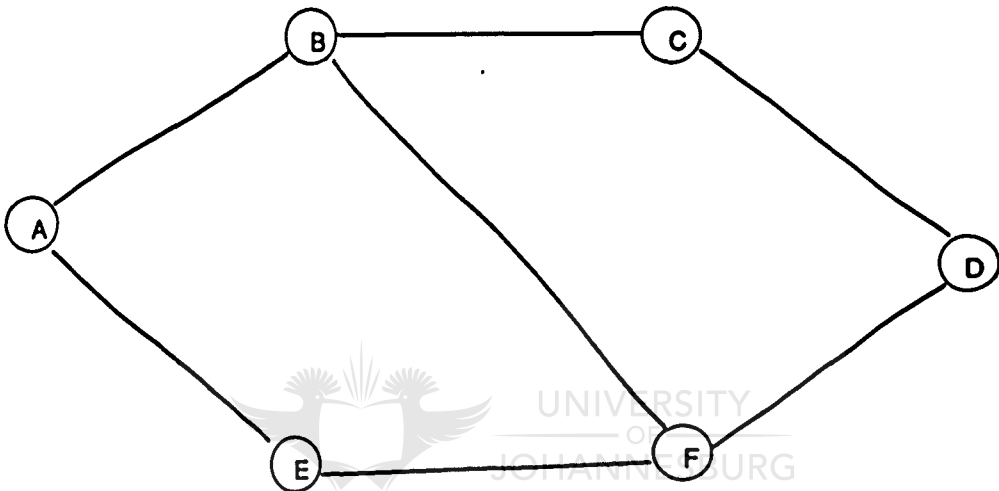
1) N_w die versameling nodi is,

2) F_w die beeldfunksie van N_w op V is en

3) A_w die versameling twee-talle is wat die boë aandui. Die twee-talle is van die vorm $n_1 \times n_2$ en $n_1, n_2 \in N$.

2. 2. 2 Voorbeeld.

Die onderstaande voorbeeld is 'n eenvoudige voorstelling van 'n web. Dieselfde voorbeeld as in die vorige afdeling word gebruik om die verskil tussen die grafiek en webbe te illustreer.



Figuur 2-5. 'n Voorbeeld van 'n web.

Die formele definisie van die web sal as volg lyk

$$W = (N_w, F_w, A_w)$$

$$N_w = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$$

$$A_w = \{(1, 2), (2, 3), (3, 4), (1, 5), (5, 6), (6, 4), (2, 6)\}$$

$F_w = F(1) = A,$

$F(2) = B,$

$F(3) = C,$

$F(4) = D,$

$F(5) = E$ en

$F(6) = F.$

2. 2. 3 Toepassing

Die toepassings vir webbe is analoog aan die vir grafieke. Dit kan maklik gesien word dat daar geen spesiale toepassings vir webbe kan wees wat nie ewe goed, indien nie beter deur grafieke gedoen kan word nie.

2. 3 Web-grammatikas

Die definisie van grafiekgrammatikas soos gedefinieer in [2] kan in die lig van die bostaande verskille in die definisies van grafieke en webbe as 'n web-grammatika gesien word. Hierdie is dus die eenvoudigste definisie vir 'n grafiekgrammatika.

2. 3. 1 Definisie

Die definisie soos gegee deur Montanari [17] word vervolgens weergegee.

'n Web-grammatika is 'n drietal $G = (V, I, R).$

Elk van die simbole word as volg verklaar

V is die versameling van simbole van die grammatika en bestaan uit twee deelversamelings nl. V_t die terminaal simbole en V_{nt} die nie-terminaal simbole.

I is die versameling van begin ^{webbe?} grafieke.

R is die versameling van reëls.

Die reëls is viertal (a, C, b, E)

waar

$a \in V_{nt}$ en a die grafiek is wat vervang moet word.

$b \in V$ is en die grafiek waarmee a vervang moet word.

C is die konteks waaraan die huidige struktuur moet voldoen sodat die produksie $P \in R$ uitgevoer kan word.

E is gewoonlik 'n logiese funksie wat beskryf hoe a met b vervang moet word. Die beskrywing bied gewoonlik ook verder inhoud oor hoe die grafiek na die vervanging weer gekonnekteer moet word. 'n Ondersoek na die eienskappe van die produksie-reëls sal bepaal of die grammatika kontekssensitief is al dan nie [13]

2. 3. 2 Voorbeeld

Die onderstaande voorbeeld genereer alle binêre bome.

$G=(V, I, R)$

$V_{nt} = \{t\}$

$V_t = \{\}$

$V = \{t\}$

$I = \{t\}$

$R = \{$

$(t$ Daar mag nie meer as een boog vanaf L_1 wees
nie

L_1
 $t \quad t$ al die nodi van die grafiek wat aan L_1 verbind was
 --- , word aan R_1 verbind en geen aan R_2 nie
 $R_1 \quad R_2$)
)

Die reël kan as volg ge-interpreteer word:

L_1 is 'n etiket wat aan die nodus toegeken word wat vervang word. R_1 en R_2 is etikette wat aan die nodi weerskante van die boog waarmee L_1 vervang word toegeken word.


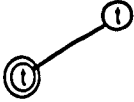
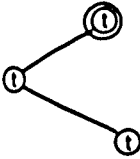
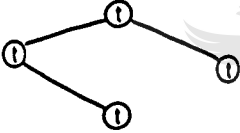

Die bogenoemde voorbeeld word volledig bespreek in [17].

Die waardes L_1 , R_1 en R_2 word deur die skrywers gebruik om waardes toe te ken aan die nodi aan die regter- en linkerkant van die produksie-reël. Hierdie waardes word gebruik in die skryf van die toepaslikheidsvoorwaardes en die herverbindings-definisie.

Die produksie proses sal as volg geskied:



UNIVERSITY
OF
JOHANNESBURG

Produksie	Produksie-reël	Kommentaar
	\Rightarrow	<p>Daar is slegs een reël. Hierdie reël word telkens uitgevoer.</p> <p>Die simbool wat vervang word, word telkens omkring.</p>
	\Rightarrow	
	\Rightarrow	
	\Rightarrow	 <p>UNIVERSITY OF JOHANNESBURG</p>

Let op dat die simbool wat vervang gaan word telkens omkring word in die vorige stap.

Verder is dit ook belangrik om daarop te let dat in die laaste stap van die voorbeeld 'n nuwe t gekies is aangesien die eerste t reeds twee boë aan hom verbind het.

2. 4 Grafiekgrammatikas

'n Grafiekgrammatika is 'n grammatika wat as taal 'n eindige versameling van grafieke lewer.

2. 4. 1 Definisie

Gegee die boog alfabet A en die nodi alfabet N kan ons 'n grafiekgrammatika definieer as die viertal $G=(N, T, S, R)$ waar

N die versameling nie-terminaal simbole is,

T die versameling terminaal simbole is,

S die beginsimbool is en

R die versameling reëls is

Die reëls in R is van die vorm (F, T, I, O) waar

F die simbool of subgrafiek is wat vervang moet word

T is die subgrafiek waarmee F vervang moet word,

I is die invoer node in T en

O is die uitvoer node in T .

'n Reël R kan uitgevoer word as F in die grafiek wat bestudeer word voorkom. Wanneer F met T vervang word, word alle boë wat na F gaan met boë na I vervang en boë vanaf F met boë vanaf O vervang. Verder word alle sikliese boë vanaf F na F met boë vanaf O na I vervang.

2. 4. 2 Voorbeeld

Die volgende voorbeeld van 'n grafiekgrammatika genereer alle bome. Weereens is 'n identiese voorbeeld gekies as hierbo by die web-grammatikas om die verskil tussen die twee te illustreer.

$G=(N, T, S, R)$

waar

$N = \{ S \},$

$T = \{ A \},$

$S = \{ S \}$ en


$R = \{$

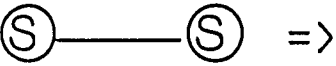
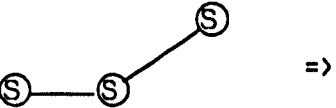
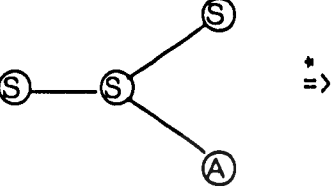
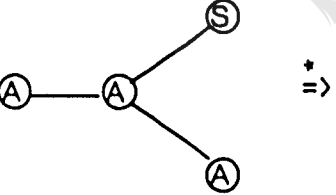
1) $(S, S-S, S, S),$

2) $(S, S-A, S, A),$

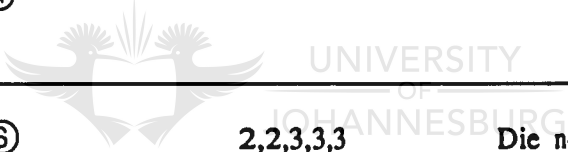
3) $(S, A, A, A))$

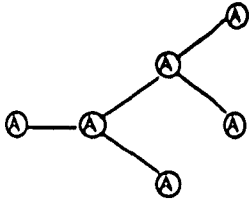
Die onderstaande skets illustreer die produksie proses.

Produksie	Produksie-reël	Kommentaar
	\Rightarrow	1

Produksie	Produksie-reël	Kommentaar
	1	
	2	
	3,3	<p>Die twee nodi met waarde S word met A's vervang</p>
	2,2,3,3,3	<p>Die nodus S word uitgebrei en alle S'e word met A's vervang.</p>

?



Produksie	Produksie-reël	Kommentaar
		

'n Verdere voorbeeld om die uitvoer van produksie-reëls te illustreer word vervolgens gegee:

Beskou die grafiek (a) in die onderstaande skets (figuur 2-8) en 'n grammatika $G=(N, T, S, P)$

$N = \{c\}$

$T = \{A, B, C, D, E, F, G\}$

$P = \{ \dots$



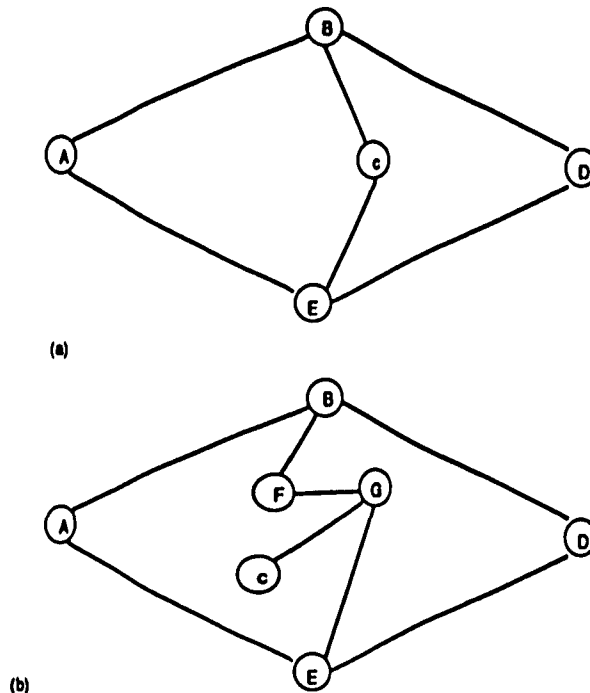
$(c,$

\dots

$)$

Indien hierdie produksie uitgevoer word op die grafiek in figuur 2-8(a) sal die grafiek lyk soos in figuur 2-8 (b).





Figuur 2-8. Illustrasie van produksie reël

Die bostaande skets wys duidelik hoe die nodi met waardes F en G gebruik is om die grafiek te hervind. Later in die hoofstuk sal heging van grafieke bespreek word waar meer as twee nodi in die hegingsproses betrokke is.

2. 4. 3 Toepassings

Grafiekgrammatikas word gebruik in die daarstel van konsistente bewerkings op databasisse. Grafiekgrammatikas kan gebruik word om die invoeg van rekords in 'n databasis te illustreer. 'n Uitstekende voorbeeld hiervan word gegee in [11]

2. 5 NLC grammatikas (node label controlled grammars)

Hierdie grammatikas is 'n variasie op die grafiekgrammatikas wat reeds gedefinieer is. Dit verskil van die vorige definisies in die manier waarop die her-

verbinding van 'n grafiek gedefinieer word. Hierdie grammatikas is ook nader verwant aan web-grammatikas.

2. 5. 1 Definisie

So 'n grammatika bestaan uit 'n vyftal naamlik :

$G=(G_s, G_d, G_p, G_c, G_z)$ waar

G_s die versameling van alle terminale en nie-terminaal simbole (d. w. s. die volledige alfabet) is,

G_d die versameling van alle terminaal simbole is,

G_p die versameling van alle produksies is,

G_c die versameling wat alle boë in die struktuur aandui, is en

G_z die beginsimbool of grafiek is.

Die produksies van G_p is van die vorm (P, p) waar die

$P \in G_s$ en $p \in G_s$

Die vervanging van 'n simbool v in 'n grafiek H deur die grammatika vind as volg plaas: v word verwyder en alle boë wat aan hom gekoppel was word verwyder, dit lewer die Grafiek Hv . Nou word die simbool met 'n isomorfiëse beeld van die regterkant van die produksie vervang : dus as die reël in die vorm (d, D) was word $v = d$ met D vervang. Die grafiek is nou disjunk en word weer gekoppel deur die volgende proses:

As 'n nodus x in D 'n waarde a het en 'n nodus y in Hv 'n waarde b het word die boog (x, y) slegs geskep as $(a, b) \in G_c$ en (v, y) 'n boog in die oorspronklike H was. Ons sien dus dat die waarde van die nodi die herkonneksie van die grafiek beïnvloed.

2. 5. 2 Voorbeeld

Die onderstaande voorbeeld word gegee in [3] en word volledig daar bespreek.

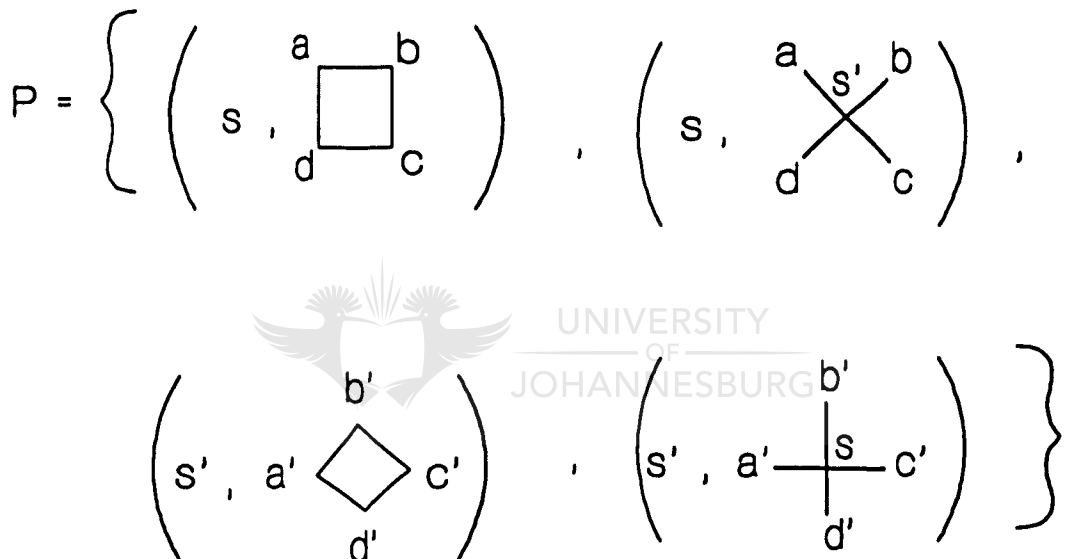
Die grammatika word hieronder gegee. Die produksie-reëls word in die skets daarna gegee in figuur 2-9. Die afleiding van 'n grafiek word in figuur 2-10 ge-illustreer.

$$G_s = \{a, b, c, d, a', b', c', d', S, S'\},$$

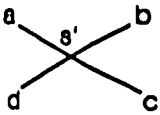
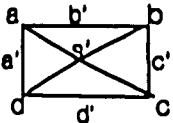
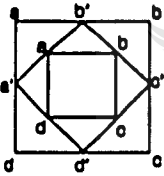

$$G_d = \{a, b, c, d, a', b', d', c'\},$$

$$G_c = \{(a, a'), (a, b'), (a', a), (a', d), (b, b'), (b, c'), (b', b), (b', a), (c, c'), (c, d'), (c', c), (c', b), (d, d'), (d, a'), (d', d), (d', c)\}$$

$$G_z = \{S\}$$



Figuur 2-9. Die produksie-reëls van 'n NLC grammatika

Produksie	Produksie-reël	Kommentaar
S \Rightarrow	2	
 \Rightarrow	1	
 \Rightarrow	3	
		UNIVERSITY OF JOHANNESBURG

2. 5. 3 Toepassings

Hierdie spesifieke tipe grafiekgrammatika is gedefinieer om 'n wiskundige metode daar te stel vir die beskrywing van die struktuur van die taal wat grafiekgrammatikas voortbring. [3].

2. 6 Hegting van grafieke (gluing of graphs).

Die definisie van grafiekgrammatikas in afdeling 2.4 maak slegs voorsiening daarvoor dat twee nodi in die herverbinding van 'n grafiek van belang is. Die definisie maak dan ook slegs verder daarvoor voorsiening dat een nodus op 'n slag vervang kan word. As voorbeeld hiervan beskou die onderstaande :

'n Produksie-reël soos gedefinieer in afdeling 2.4.1 is van die vorm

(F, T, I, O)

F is die enkel nodi wat oorskryf word en I en O is die nodi wat in die herverbinding gebruik word.

Die hegting van grafieke is gedefinieer om grafieke op 'n meer algemene manier te vervang. Dit beteken dat subgrafieke vervang kan word en nie net 'n enkel nodus nie. Dit is ook gedefinieer om die grafieke na die uitvoer van 'n produksie-reël op 'n meer algemene wyse te herverbind. Hierdie tipe grafiekgrammatikas word in [5] bespreek.

2. 6. 1 Definisie

Die definisie vir 'n grafiekgrammatika is identies aan die definisie gegee in afdeling 2.4.1. Die definisie van 'n produksie-reël verskil egter van die definisie in afdeling 2.4.1. Die definisie vir 'n grafiekgrammatika soos in afdeling 2.4.1 sal weereens gegee word. Gegee die boog alfabet A en die nodi alfabet N kan ons 'n grafiekgrammatika definieer as die viertal $G=(N, T, S, R)$ waar

N die versameling nie-terminaal simbole is,

T die versameling terminaal simbole is,

S die beginsimbool is en

R die versameling reëls is.

'n Produksie-reël in die grammatika word as volg gedefinieer:

'n Produksie p sal as volg lyk $p:(B_1 \leftarrow K \rightarrow B_2)$. Die simbole B_1 en B_2 is onderskeidelik die linker- en regterkant van die vervanging en B_1 verskil van die vorige definisie in die opsig dat dit nie net 'n enkele nodus is nie maar 'n hele grafiek.

K is die versameling hegtingspunte (gluing points).

Om die skryf wyse te vereenvoudig kan 'n produksie-reël as volg geskryf word:

$B_1 \Rightarrow B_2$.

Die versameling K kan uit die linker en regterkante afgelei word aangesien die hegtingsnodi in beide moet voorkom. Om eger nodi wat nie hegtingspunte is nie en in beide voorkom aan te dui sal die hegtingsnodi in voorbeelde as sulks gemerk word.

Hierdie metode van voorstelling bied vir ons die voordeel dat 'n hele subgrafiek vervang mag word en dat meer as twee nodi 'n rol kan speel in die herverbinding van die grafiek. Verder is hierdie definisie ook 'n meer formele wyse om die herverbinding van 'n grafiek te beskryf.

Om 'n produksie $p:B_1 \Rightarrow B_2$ op 'n grafiek G uit te voer moet ons sorg dat daar aan die volgende hegtingsvoorwaarde (gluing condition) voldoen word:

B_1 moet 'n subgrafiek van G wees en al die nodi in B_1 wat aan boë in G grens en hierdie boë is nie deel van B_1 nie moet hegpunte wees.

Die volgende stappe moet gevolg word wanneer ons hierdie produksie wil uitvoer:

Stap 1.

Verwyder al die boë van B_1 en ook al die nodi van B_1 wat nie hegpunte is nie uit G uit. Dit sal vir ons 'n grafiek D lewer wat die behoudende grafiek is.

Stap 2.

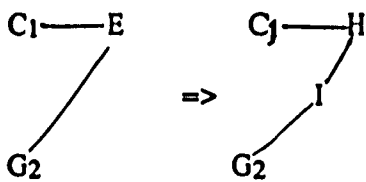
Plaas al die nodi van B_2 in die grafiek D en heg nou die boë van B_2 aan die grafiek D wat vir ons die grafiek H lewer.

Ons kan na so 'n produksie sê dat $G \Rightarrow H$ of te wel dat H uit G afgelei is deur p .

2. 6. 1 Voorbeeld

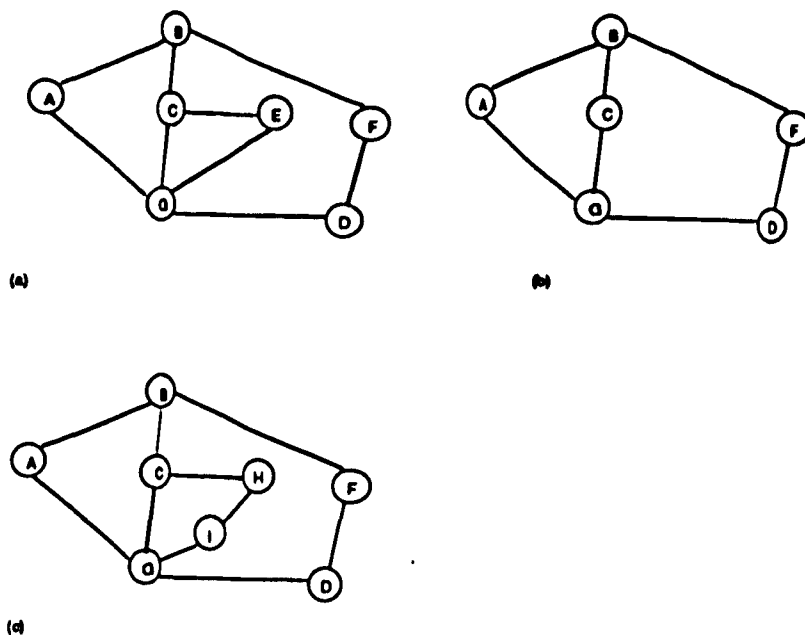
Die onderstaande voorbeeld illustreer slegs die uitvoer van 'n enkele reël. Om die hegtingsnodi aan te dui word hulle met 'n voetskrif genommer.

Beskou die onderstaande produksie-reël en die grafiek soos in figuur 2-11(a).



G en C is die hegtingsnodi. Nadat stap 1 soos hierbo beskryf uitgevoer is sal die behoudende grafiek lyk soos in figuur 2-11(b). Vervolgens sal stap 2 uitgevoer word en die grafiek sal lyk soos figuur 2-11(c).





Figuur 2-11. Die hegting van 'n grafiek.

Ons sien dus duidelik dat B_2 (die regterkant van die produksie-reël) wel 'n subgrafiek van die grafiek H is.

2. 7 Vergelyking van grammatikas en samevatting.

In die voorafgaande definisies van die verskillende grafiekgrammatikas kan ons duidelik sien dat die verskillende grammatikas slegs verskil in die metode wat gedefinieer is vir die herverbinding van die grafieke nadat 'n produksie-reël toegepas is.

Hierdie herverbinding word telkens in die produksie-reëls gedefinieer. In die geval van web grammatikas word hierdie hegting bepaal deur 'n beskrywende funksie. Grafiekgrammatikas soos gedefinieer in 2. 4 maak egter gebruik van

twee nodi wat as invoer en uitvoer nodi geklassifiseer word. 'n Heeltemal ander benadering word egter in die geval van NLC grammatikas gevolg waar die waardes van die nodi in 'n grafiek die herverbinding na die uitvoer van 'n produksie-reël bepaal. In die laaste geval sien ons in die hegting van grafieke 'n wiskundige wyse om die herverbinding van die grafiek te bepaal.

Die definisie van grafiekgrammatikas in die algemeen het dus 'n baie belangrike bydrae gelewer in die daarstel van 'n tegniek of tegnieke om ruimtelike strukture of strukture met baie verwantskappe te beskryf op 'n formele manier. Baie van die eienskappe en herverbindings tegnieke hierbo gegee sal gebruik word as basis vir die struktuurgrafieke en struktuurgrafiekgrammatikas wat in die vierde hoofstuk gedefinieer sal word.



Hoofstuk 3

Drie-dimensionele Grammatikas.

Die voorstelling van syferfigure in drie-dimensies met behulp van grammatikas is 'n redelike nuwe studieveld. Daar is 'n klein hoeveelheid voorstellings tegnieke wat van grammatikas gebruik maak om objekte in drie-dimensies te beskryf.

In hierdie hoofstuk sal gepoog word om 'n oorsig te gee oor 'n paar van hierdie tegnieke. Die tegnieke en toepassings daarvan sal gegee word.

Eerstens sal ongeordende konteks struktuur-grammatikas bespreek word. Vorm-grammatikas (shape grammars) sal vervolgens bespreek word en 3D-plex grammatikas sal daarna bespreek word.

3. 1 Syferfigure.

3. 1. 1 Definisie

Syferfigure word gebruik om drie-dimensionele beelde te beskryf. Dit word veral gebruik op die gebied van beeldherkenning. Syferfigure word in [12] as volg gedefinieer :

'n Syferfiguur word gekenmerk deur 'n vaste koördinaat stelsel. In die drie-dimensionele geval sal hierdie koördinaat stelsel gewoonlik die vorm (x, y, z) aanneem. Waar x, y en z waardes is wat op grond van 'n vaste asstelsel die posisie van 'n punt relatief tot die oorsprong van die asstelsel (gewoonlik die punt $(0, 0, 0)$) aandui. Die term syferstrukture word gebruik vir drie-dimensionele syferfigure.

Die eenvoudigste vorm van so 'n stelsel is die binêre stelsel waar elke punt in hierdie ruimte wat deur die koördinate voorgestel word op die versameling $\{0, 1\}$ af gebeeld word . Laat $\Sigma = \{(i, j, k) | 1 \leq i, j, k \leq n\}$ wees. Laat S 'n deelversameling van Σ wees sodanig dat S die punte is wat op 1 afbeeld en \bar{S} die punte is wat op 0 afbeeld.

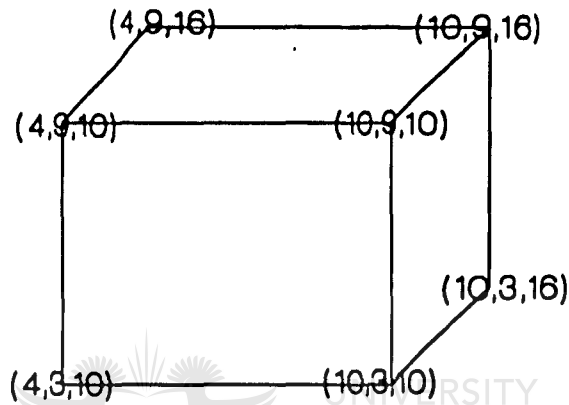
In afdeling 3. 1. 2 word 'n voorbeeld gegee van 'n syferfiguur.

3. 1. 2 Voorbeeld

Die volgende voorbeeld beskryf 'n vierkantige volume in die ruimte. Die versameling S soos hierbo gedefinieer word bepaal deur

$$S = \{ (i, j, k) \mid 4 \leq i \leq 10, 3 \leq j \leq 9, 10 \leq k \leq 16 \}$$

Die volgende kubus word dus voorgestel.



Figuur 3-1. 'n Digitale volume

3. 2 Ongeordende Konteks Struktuur-grammatikas.

Hierdie grammatika is gedefinieer as 'n uitbreiding op twee-dimensionele matriks grammatikas. Die grammatikas gebruik die beginsel van ongeordende kontekste om syferfigure te genereer. Hierdie syferfigure is drie-dimensioneel en daar is sewe verskillende kontekste wat bepaal of 'n sekere produksie uitgevoer word.

3. 2. 1 Definisie

'n OKSG kan formeel as volg gedefinieer word [1, 10]:

'n OKSG is 'n viertal $G=(V_n, V_l, P, S)$ waar P en S die gewone betekenis soos vir formele tale het. Die produksies van G , die elemente van P het die vorm :

$$A \rightarrow \alpha (U_1; T_1 / U_2; T_2 / U_3; T_3 / U_4; T_4 / U_5; T_5 / U_6; T_6 / U_7; T_7).$$

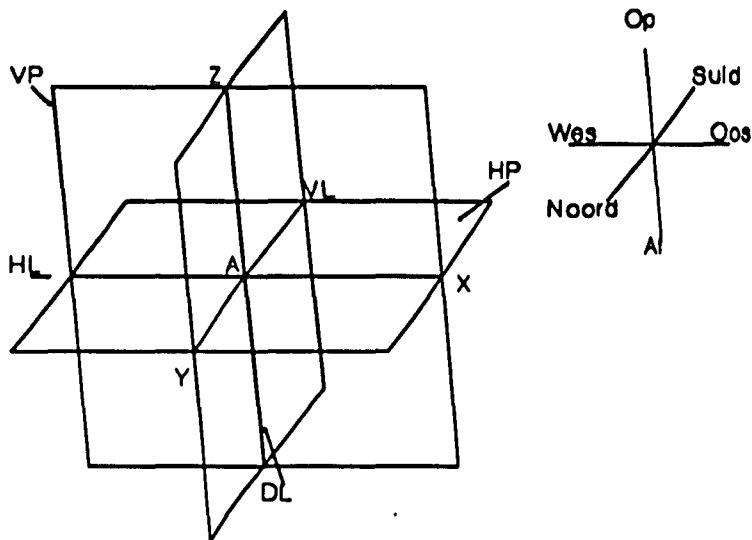
waar $A \in V_n$, $\alpha \in (V_n \cup V_l)^+$ $U_i, T_i \in V_n \cup V_l$, $1 \leq i \leq 7$

$$1 \leq i \leq 2, U_i \cap T_i = \emptyset, 1 \leq i \leq 7.$$

Die lyne en vlakke wat deur 'n punt gaan bepaal sy konteks. Alvorens 'n produksie van P uitgevoer word, moet die konteks van A bepaal word, vervolgens moet dit met die van die produksie-reël van P gekontroleer word om te bepaal of dit geld.

In die onderstaande skets kan die verskillende kontekste wat met 'n simbool geassosieer word gesien word. Daar is sewe van hierdie verskillende kontekste. Die kontekste van die simbool A word in die skets aangetoon.





Figuur 3-2. Die kontekste wat met A ge-assosieer word.

1) HL : Dit is die horisontale lynkonteks. Die konteks is die versameling wat bestaan uit al die simbole wat op die lyn deur A parallel aan die X-as lê. $U_1, T_1 \subseteq HL$

2) VL : Dit is die vertikale lynkonteks. Hierdie konteks is die versameling wat bestaan uit al die simbole wat op die lyn deur A parallel aan die Y-as lê. $U_2, T_2 \subseteq VL$

3) DL : Dit is die diepte lynkonteks. Dit bestaan uit al die simbole wat op die lyn deur A parallel aan die Z-as lê.

$U_3, T_3 \subseteq DL$

4) HP : Dit is die horisontale vlakkonteks. Die konteks is die versameling wat bestaan uit al die simbole wat op die vlak lê wat deur A gaan en parallel is aan die vlak wat deur die X en Y-asse gevorm word. $U_4, T_4 \subseteq HP$

5) VP : Dit is die vertikale vlakkonteks. Die konteks is die versameling wat bestaan uit al die simbole wat op die vlak lê wat deur A gaan en parallel is aan die vlak wat deur die X en Z-asse gevorm word. $U_5, T_5 \subset VP$

6) DP: dit is die diepte vlakkonteks. Dit is die versameling wat bestaan uit al die simbole wat op die vlak lê wat deur A gaan en parallel is aan die vlak wat deur die Y en Z-asse gevorm word. $U_6, T_6 \subset DP$

7) Dit is die globale konteks wat bestaan uit al die simbole wat in die figuur voorkom.

Produksies kan vervanging van simbole in ses verskillende rigtings tot gevolg hê naamlik

$A \rightarrow \alpha$ ooswaarts, $A \leftarrow \alpha$ weswaarts, $A \nearrow \alpha$ suidwaarts,

$A \nwarrow \alpha$ noord, $A \uparrow \alpha$ opwaarts and $A \downarrow \alpha$ afwaarts.

'n Reël

$A \rightarrow \alpha (U_1; T_1/U_2; T_2/U_3; T_3/U_4; T_4/U_5; T_5/U_6; T_6/U_7; T_7)$.

kan as volg ge-interpreteer word:

As A in 'n syferfiguur voorkom wat uit simbole bestaan wat elemente van $V_n \cup V_l$ is, kan A deur α vervang word mits die volgende voorwaardes geld :

a) Al die simbole van U_i en geen van die simbole in T_i verskyn in die toepaslike konteks van A nie ($1 \leq i \leq 7$).

b) $|\alpha| = 2$. Die agtergrond simbool moet direk oos van A verskyn.

c) $|\alpha| = 1$. A word eenvoudig deur α vervang mits die voorwaarde soos gestel in (a) geld.

3. 2. 2 Voorbeeld

In die onderstaande voorbeeld sal 'n grammatika gegee word om 'n eenvoudige vierkant te genereer. Die sye van die vierkant sal met S_1 tot S_4 aangedui word en die hoekpunte met H_1 tot H_4 .

$$G = (V_n, V_t, R, S)$$

$$V_n = \{s\}$$

$$V_t = \{S_1, S_2, S_3, S_4, H_1, H_2, H_3, H_4\}$$

$$S = \{s\}$$

$$R = \{$$

$$1. s \overset{s}{\uparrow} H_1 \ (/(\{);\{H_1\}\!\!\!\!\!\!/)$$

$$2. s \overset{s}{\uparrow} S_1 \ (/(\{H_1\};\{S_1\}\!\!\!\!\!\!/)$$

$$3. s \rightarrow H_2 \underset{s}{s} \ (/(\{H_1, S_1\};\{\}\{);\{H_2\}\!\!\!\!\!\!/)$$

$$4. s \rightarrow S_2 \underset{s}{s} \ ((\{H_2\};\{S_2\}\!\!\!\!\!\!/)$$

$$5. s \underset{s}{\downarrow} H_3 \ ((\{H_2, S_2\};\{\}\{);\{H_3\}\!\!\!\!\!\!/)$$

$$6. s \underset{s}{\downarrow} S_3 \ (/(\{H_3\};\{S_3\}\!\!\!\!\!\!/)$$

$$7. s \leftarrow s \ H_4 \ (\{\};\{H_4\}\!\!\!\!\!\!/)$$

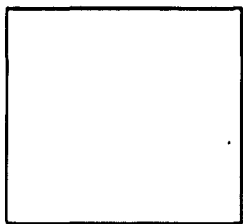
$$8. s \leftarrow S_4 \ (\!\!\!\!\!\!/\{S_1, S_2, S_3, H_1, H_2, H_3, H_4\};\{\}).$$

Die afleidingsproses sal as volg plaasvind

Produksie	Produksie-reël	Kommentaar
S \Rightarrow	1	
S H ₁ \Rightarrow	2	
s S ₁ \Rightarrow H ₁	3	
H ₂ s S ₁ \Rightarrow H ₁	4,5,6,7,8	Al die produksie vind plaas soos hierbo
H ₂ S ₂ H ₃ S ₁ S ₃ H ₁ S ₄ H ₄		

Indien ons die simbole in die bostaande grammatika nou met die grafiese entiteite wat hulle voorstel vervang, kry ons die volgende syferfiguur.

$$\begin{array}{cccc} H_1 = L & H_2 = \Gamma & H_3 = \neg & H_4 = J \\ S_1 = | & S_2 = - & S_3 = | & S_4 = - \end{array}$$



Figuur 3-3. Voorstelling van 'n syferfiguur.

Die boonste figuur is die resulterende figuur as ons al die produksies van 1 tot 8 sekwensieël uitgevoer het. Die kontekste is verder so gekies dat die kontekste streng in hierdie volgorde waar sal word. Dit is maklik om te sien dat deur die kontekste te verswak ander figure verkry kan word.

Ter illustrasie hiervan beskou dieselfde voorbeeld. Daar is egter sommige van die simbole in die produksie-reëls se kontekste verwyder wat langer sye tot gevolg sal hê.

$$G = (V_n, V_t, R, S)$$

$$V_n = \{s\}$$

$$V_1 = (S_1, S_2, S_3, S_4, H_1, H_2, H_3, H_4)$$

$$S = \{s\}$$

$$R = \{$$

$$1. s \stackrel{s}{\uparrow} H_1 \mathcal{V}(\{ \}; \{H_1\} // // //)$$

$$2. s \stackrel{s}{\uparrow} S_1 \mathcal{V}(\{H_1\}; \{ \} // // //)$$

$$3. s \rightarrow H_2 s \mathcal{V}(\{H_1, S_1\}; \{ \} / \{ \}; \{H_2\} // //)$$

$$4. s \rightarrow S_2 s \mathcal{V}(\{H_2\}; \{ \} // // //)$$

$$5. s \stackrel{s}{\downarrow} H_3 \mathcal{V}(\{H_2, S_2\}; \{ \} / \{ \}; \{H_3\} // // //)$$

$$6. s \stackrel{s}{\downarrow} S_3 \mathcal{V}(\{H_3\}; \{ \} // // //)$$

$$7. s \leftarrow s H_4 \mathcal{V}(\{ \}; \{H_4\} // // //)$$

$$8. s \leftarrow S_4 \mathcal{V} // // // (\{S_1, S_2, S_3, H_1, H_2, H_3, H_4\}; \{ \} .)$$

Produksie	Produksie-reël	Kommentaar
S $\stackrel{*}{\Rightarrow}$	1, 2, 2, 2, 3	Die produksie-reël 2 word telkens uitgevoer. Dit het dus 'n langer sy tot gevolg

Produksie	Produksie-reël	Kommentaar
H_2 ■ S_1 S_1 ↗ S_1 H_1	4, 4, 4, 5, 6, 6, 6, 7, 8, 8, 8.	
H_2 S_2 S_2 S_2 H_3 S_1 S_3 S_1 S_3 S_1 S_3 H_1 S_4 S_4 S_4 H_4		

Reëls 2, 4, 6 sal nou telkens uitgevoer kan word al kom die simbole s_1 tot s_4 reeds voor. Dit sal langer sye tot gevolg hê.

3. 2. 3 Toepassings

In [10] kan duidelik gesien word hoe hierdie grammatikas gebruik kan word om syferfigure te genereer. 'n Verdere toepassing hiervan kan gesien word in [1] waar OKSG's gebruik word vir die modellering van chemiese molekules.

3. 3 Vorm-grammatikas(Shape grammars)

Daar is sekere natuurlike prosesse wat die vorm van 'n voorwerp beïnvloed. Meeste vorme bestaan uit bulte en holtes. Hierdie bulte en holtes het sekere eienskappe wat hulle grootte en rigting bepaal. Vorm-grammatikas is gedefinieer om uit hierdie eienskappe die prosesgeskiedenis van 'n voorwerp af te lei.

Vorm grammatikas werk deur sekere vasgestelde produksie reëls wat bepaal hoe een vorm uit 'n ander afgelei word. Alle moontlike vorme word in tabel vorm gegee.

Indien ons 'n drie dimensionele struktuur of vorm neem en ons sny dit in 'n aantal plat vlakke kry ons vorme wat deur vorm-grammatikas afgelei en beskryf kan word.

3. 4 3D-Plex grammatikas.

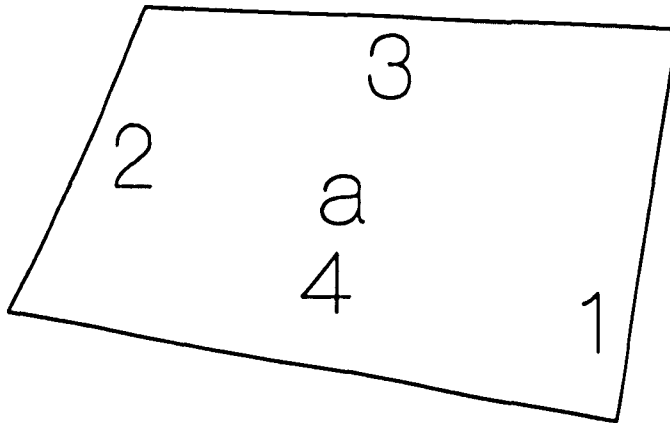
Die gebruik van oppervlakke om objekte in drie-dimensies te beskryf vorm die basiese beginsel van hierdie grammatikas.

In die beskrywing van 'n objek word dit eers in 'n aantal oppervlaktes verdeel en beskryf deur hierdie oppervlaktes en hulle rande. Verder word ook beskryf op watter wyse die rande van vlakke aan mekaar verbind is [15].

3. 4. 1 Definisie

'n NACE's (n-attaching-curve entity) word gedefinieer as 'n oppervlak in die ruimte wat begrens word deur n rande wat dit met ander oppervlakke verbind. Die rande van so 'n NACE wat dit met sy bure verbind word 'n hegtingskurwe genoem. In die onderstaande skets word so 'n NACE met naam a en hegtings kurwes 1 tot 4 getoon.





'n Voorbeeld van 'n NACE

'n 3D-plex grammatika kan deur die sestel $G_p = \{N, T, R, S, I, i_0\}$

beskryf word waar :

N die versameling nie-terminaal NACE's is,

T is die versameling terminaal NACE's,

R is die versameling produksie-reëls,

S is die beginsimbool of begin-NACE,

I is die versameling identifiseerders wat gebruik word om die hegingskurwes van die NACE's te definieer.

i_0 is 'n element van **I** en word die nul-identifiseerder genoem, hierdie simbool beskryf geen rand nie maar word slegs as plekhouer in die reëls gebruik.

'n Reël van **R** word as volg gedefinieer

$$\Psi \Gamma \psi \Delta \psi \rightarrow \omega \Gamma \omega \Delta \omega$$

waar Ψ die linkerhandse komponent lys is,

ω die regterhandse komponent lys is.

Hierdie komponent lyste is stringe wat bestaan uit NACE's se simbole.

Γ is die versamelings aan weerskante wat die verbinding tussen die verskillende komponente aandui.

Hierdie lyste word saamgestel uit 'n aantal velde, een vir elke verbinding. 'n veld sal dus 'n inskrywing hê vir elke komponent wat in Ψ of ω voorkom. Dit beteken dat indien daar n komponente voor Γ gegee word, elke veld in Γ deur n elemente beskryf sal word. Indien 'n sekere veld nie van belang is nie sal die spesiale nul karakter \emptyset in die veld se plek voorkom.

Laastens word $\Delta \psi$ en $\Delta \omega$ gebruik om aan te dui hoe beeld die verskillende rande aan die linkerkant van 'n produksie-reël op die regterkant daarvan af.

Ter illustrasie hiervan beskou die volgende voorbeeld

abc (110, 102, 051)



UNIVERSITY
OF
JOHANNESBURG

Die string beteken die volgende :

a) NACE's a, b en c is betrokke by die komponent lys.

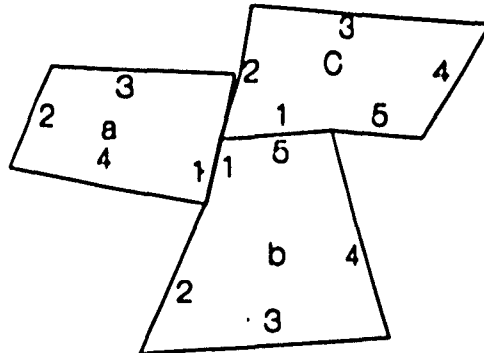
b) Daar is drie verbindings tussen die NACE's.

1) 110. Dit beteken sy 1 van NACE a en sy 2 van NACE b en geen sye van NACE 3 kom in die verbinding voor nie.

2) 102. Hierdie verbinding beteken dat sy 1 van NACE a en sy 2 van NACE c by die verbinding betrokke is.

3) 051 . Dit beteken sy 5 van NACE b en sy 1 van NACE b is betrokke by die verbinding.

Die onderstaande skets illustreer die NACE's met hulle hegings kurwes. Dis verskillende verbinding kan duidelik gesien word.



Die verskillende sye in 'n plex



UNIVERSITY
OF
JOHANNESBURG

3. 4. 2 Voorbeeld

In die artikel [15] word 'n meer algemene definisie vir die grammatikas gegee. In die voorbeeld sal hierdie vereenvoudiging gebruik word om te illustreer hoe 'n grammatika sal lyk en die produksie-reëls wat betrokke is in die proses.

Die onderstaande plex grammatika genereer die figure soos in die skets wat daarop volg.

$N = \{A, B\}$

$T = \{a, b, c\}$

$I = \{0, 1, 2\}$

$i_0 = 0$

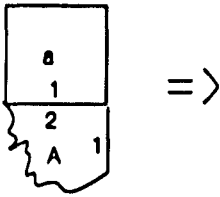
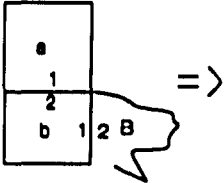
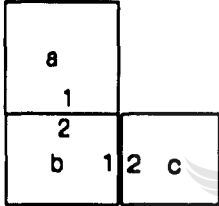
$S = \{\}$

1) $S() \rightarrow aA(12)()$

2) $A(1) \rightarrow bB(12)(1)$

3) $B(1) \rightarrow c()(1)$



Produksie	Produksie-reëls	Kommentaar
	2	<p>Hierdie figuur is gevorm na produksie-reël 1. NACE A word vervang met b en het B by sy 2 tot gevolg.</p>
	3	<p>NACE B word eenvoudig deur c vervang en sy 1 van beide B en c beslaan dieselfde ruimte .3</p>
		

3. 4. 3 Toepassings.

Die tipe grammatika vind groot toepassing in die gebied van rekenaarvisie. Tradisioneel is daar in die herkenning van drie-dimensionele beelde gepoog om 'n hele drie-dimensionele objek te erken. Die werk kan egter vereenvoudig word as ons slegs oppervlaktes in die ruimte hoef te herken. 3D-Plex grammatikas maak dit vir ons moontlik. Nadat ons slegs oppervlaktes herken het, kan ons die relasies tussen die oppervlaktes beskryf met 3D-plex grammatikas. Hier beskrywings kan weer op hul beurt gebruik word om die objek te herken.

3. 5 Opsomming.

In die voorafgaande hoofstuk is verskeie grammatikas bespreek waar formele tale aangewend is om objekte drie-dimensioneel voor te stel.

In die volgende hoofstuk sal 'n nuwe tegniek gedefinieer word. Veral die konsepte wat in OKSG's voorkom sal gebruik word.



Hoofstuk 4.

Struktuurgrafieke.

In hierdie hoofstuk word struktuurgrafieke deur ons gedefinieer. Hierdie definisie is nodig aangesien ons dit later gebruik om grammatikas te definieer wat sulke struktuurgrafieke as taal voortbring.

Uit die voorafgaande hoofstuk is dit duidelik dat daar nog baie ruimte vir verbetering is in die studie van formele voorstellings vir objekte in drie dimensies.

In die definisie van ongeordende konteks struktuur-grammatikas is 'n formele wyse daar gestel vir die voorstelling van syferstrukture. Hierdie strukture is egter beperk in die opsig dat simbole op vaste posisies en op vaste afstande van mekaar af in die ruimte voorkom.

Om grafieke te gebruik om objekte in drie dimensies formeel voor te stel, sal sekere geometriese eienskappe aan die grafieke geheg word. Die lengte van boë, hulle oriëntasie met betrekking tot mekaar asook die helling waarmee hulle in die ruimte voorkom is voorbeelde van sulke geometriese eienskappe.

In hierdie hoofstuk sal struktuurgrafieke gedefinieer word en moontlike toepassings daarvan sal gegee word. Ons sal egter in hierdie hoofstuk slegs 'n eenvoudige geometriese eienskap aan hierdie struktuurgrafieke heg en later ander eienskappe bespreek wat ook gebruik kan word.

4. 1 Struktuurgrafieke

'n Struktuurgrafiek bestaan uit 'n aantal nodi en boë, soos in die geval van gewone grafieke. Dit het egter die eienskap dat die boë sekere geometriese eienskappe kan besit.

Hierdie eienskappe sluit onder meer in die lengte van boë, die hoek wat boë met mekaar vorm en die helling van 'n boog in die ruimte.

In die onderstaande definisie sal slegs die hoek wat boë met mekaar maak van belang wees. Daar sal egter later aangetoon word hoe die definisie uitgebrei kan word om vir ander geometriese eienskappe voorsiening te maak.

Die eenvoudige definisie soos hieronder word gegee aangesien die grammatika wat later gedefinieer word op die definisie geskoei is.

4. 1. 1 Definisie

Gegee N ('n versameling nodi) en 'n versameling boë A in die vorm (n_1-n_2) en $n_1, n_2 \in N$, kan 'n struktuurgrafiek as volg gedefinieer word:

$SG=(M, B, F)$ waar

M die versameling nodi is,

B die versameling boë is en

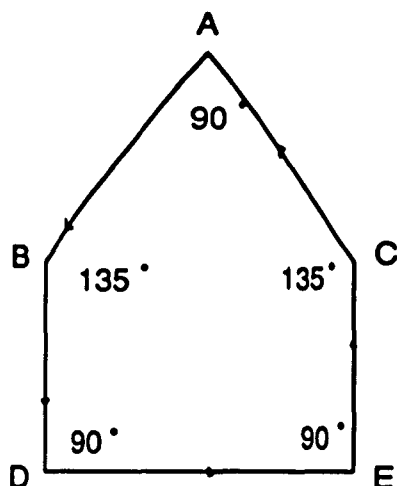
F die beeldfunksie is $(F:M \rightarrow N)$.

Die elemente van B is van die vorm (a_1, a_2, α) waar $a_1, a_2 \in A$ en α die hoek tussen die boë a_1 en a_2 is.

Uit die definisie is dit duidelik dat slegs boë mag voorkom wat in B gedefinieer is. Slegs die boë wat van belang is word in B gespesifiseer. Dit beteken dat nie elke moontlike boog paar in die struktuur gespesifiseer word nie.

4. 1. 2 Voorbeeld

In die onderstaande voorbeeld word 'n struktuurgrafiek gegee wat die buitelyne van 'n eenvoudige figuur beskryf.



Figuur 4-1. 'n Struktuurgrafiek

Formeel kan die struktuurgrafiek as volg beskryf word

$$N = \{A, B, C, D, E\}$$

$$A = \{A-B, B-D, D-E, E-C, C-A\}$$

$$SG = \{M, B, F\}$$

$$M = \{A, B, C, D, E\}$$

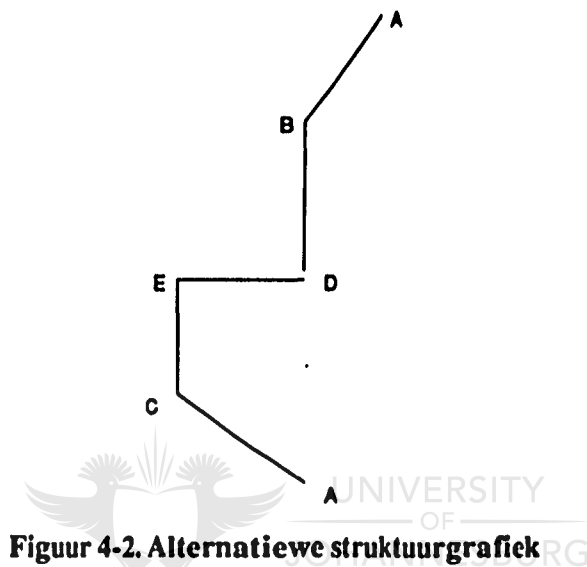
$F: \underline{F(X)} = \underline{X}$ (hierdie beeldfunksie beteken maar net dat M direk op N afgebeeld word).

$$B = \{(A-B, B-D, 135^\circ), (B-D, D-E, 90^\circ), (D-E, E-C, 90^\circ), (E-C, C-A, 135^\circ),$$

$$(C-A, A-B, 90^\circ)\}$$

Uit hierdie voorbeeld sien ons duidelik dat die hoek tussen C-A en D-E nie gespesifiseer is nie, maar dat die verband tussen hulle wel deur die hoeke van ander boë gegee word. As die verband egter belangrik is kan ons dit eenvoudig by spesifiseer.

Uit die bostaande formele definisie is dit moontlik om die volgende grafiek te teken.



Figuur 4-2. Alternatiewe struktuurgrafiek

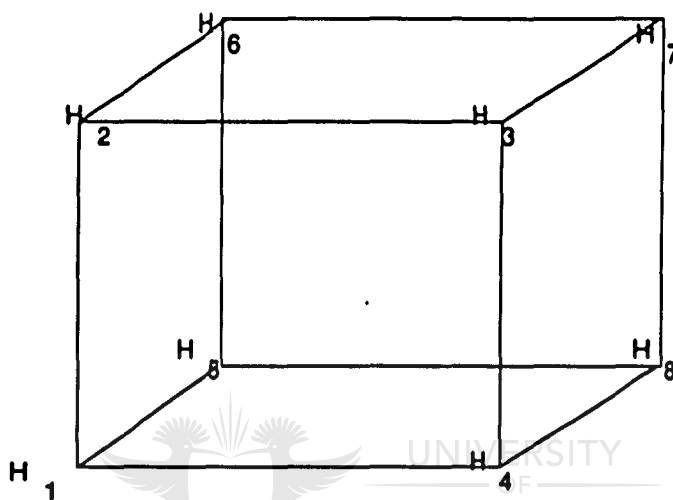
Dit sal dus nodig wees om verdere beperkinge op die boë te plaas om 'n spesifieke grafiek te definieer. Die resulterende boog versameling sal dus as volg lyk

$$B = \{(A-B, B-D, 135^\circ), (B-D, D-E, 90^\circ), (D-E, E-C, 90^\circ), (E-C, C-A, 135^\circ)\},$$

(C-A, A-B, 90°), (E-C, A-B, 135°), (B-D, C-A, 135°)). Die laaste twee boogspesifikasies is voldoende om die struktuurgrafiek te dwing om die regte struktuur te bepaal.

4. 1. 3 Toepassings

'n Voorbeeld waar so 'n struktuurgrafiek gebruik kan word is in die beskrywing van die rande van veelvlakke in drie-dimensionele ruimte.



Figuur 4-3. 'n Struktuurgrafiek van 'n kubus

Hierdie kubus is 'n eenvoudige voorstelling van so 'n veelvlak in drie dimensies wat deur 'n struktuurgrafiek beskryf kan word.

Die struktuurgrafiek van die kubus sal as volg formeel gedefinieer kan word.

$$SG = (M, B, F)$$

$$M = \{H_1, \dots, H_8\}$$

$F(X) = X$ (M word op M afgebeeld)

$$B = \{(H_1-H_2, H_1-H_5, 90^\circ), (H_1-H_2, H_1-H_4, 90^\circ), \\ (H_7-H_8, H_7-H_4, 90^\circ), (H_7-H_8, H_7-H_4, 90^\circ), \\ (H_3-H_4, H_3-H_2, 90^\circ), (H_3-H_4, H_3-H_7, 90^\circ), \\ (H_8-H_7, H_8-H_5, 90^\circ), (H_8-H_7, H_8-H_4, 90^\circ), \\ (H_7-H_8, H_4-H_3, 180^\circ), (H_4-H_8, H_7-H_3, 90^\circ)\}$$

4. 1. 4 Ander geometriese eienskappe

Let daarop dat die definisie baie algemeen is wat betref die lengtes van boë maar dat dit gespesifiseer kan word na gelang 'n toepassing dit nodig het al dan nie. Al wat nodig sal wees in so 'n geval sal wees om 'n addisionele parameter by die reeds bestaande definisie van 'n boog te plaas om die lengte van so 'n boog te spesifiseer. Die boogversameling A sal dus nou as volg gedefinieer word $A = \{(n_1-n_2, l)$ waar $n_1, n_2 \in N$ en l die lengte van 'n boog spesifiseer).

Die ruimtelike oriëntasie van 'n boog met betrekking tot 'n spesifieke asse-stelsel kan ook gegee word. Dit word eenvoudig gedoen deur die l in bostaande voorbeeld met 'n silindriese koördinaat te vervang of met enige ander stelsel wat die oriëntasie van 'n boog voldoende beskryf.

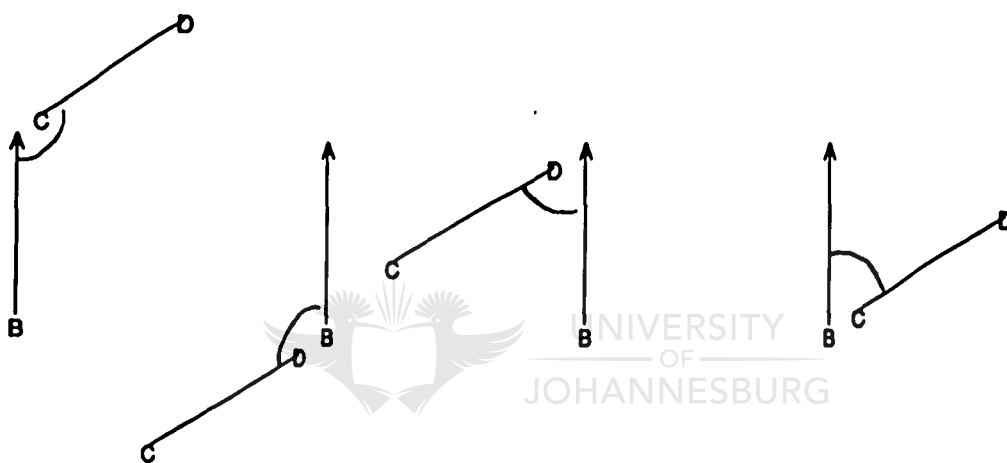
4. 2 Die hoek tussen boë

Om verwarring te voorkom is dit nodig dat ons 'n tegniek definieer waarvolgens die hoek tussen boë bepaal word.

Die rigting van 'n boog word gegee in die volgorde waarin dit in die spesifikasie vir die boog voorkom.

'n Boog van A na B word dus geskryf as A-B en dit bepaal die rigting van die boog. Die twee nodi A en B is dus onderskeidelik die oorsprong- en bestemmingnodi vir die boog A-B. Die hoek tussen twee boë word bepaal deur die oorsprong nodi van die twee boë by dieselde punt te laat aangryp. As ons nou die twee boë as vektore beskou, vorm hulle 'n vlak in die ruimte. Die hoek wat die twee vektore nou met mekaar maak (die kleinste hoek) word gemeet en bepaal die hoek tussen die boë.

Die belangrikheid vir die bogenoemde definisie (of daarstel van die spesifieke metode) kan as volg ge-illustreer word. Gestel ons het twee boë A-B en C-D kan ons verskillende hoeke as volg kry.



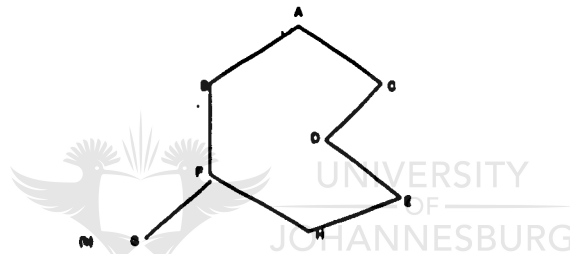
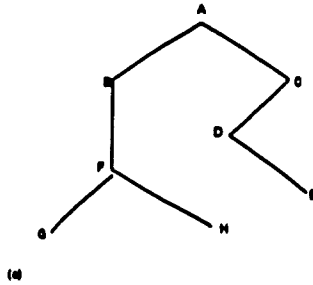
figuur 4-4. Verskillende hoeke tussen twee boë

In hoofstukke 5 en 6 word twee grammatikas nl. struktuurgrafiekgrammatikas (SGG-1 en SGG-2) voorgestel wat as taal bogenoemde tipe grafieke genereer.

4. 3 Ander definisies

4. 3. 1 'n Boom

'n Boom in die geval van struktuurgrafieke is 'n grafiek waarin daar geen sikliese paaie voorkom nie. Dit is dus identies aan 'n boom in die geval van gewone grafieke.

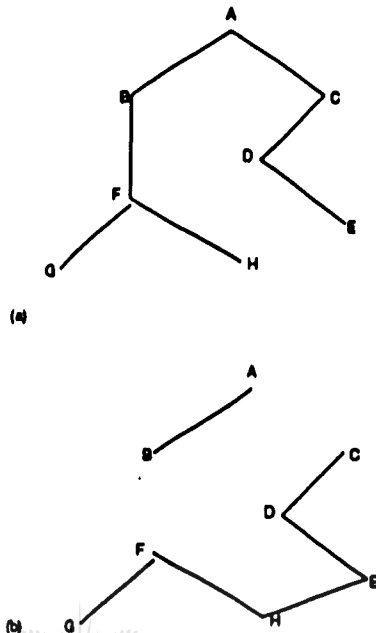


Figuur 4-5. a) Boomtipe- en b) Sikliese struktuurgrafieke.

4. 3. 2 Samehangende struktuurgrafiek.

'n Samehangende struktuurgrafiek is 'n grafiek waarvoor daar tussen elke paar nodi in hierdie grafiek 'n pad bestaan.

Die onderstaande twee sketse illustreer die verskil tussen 'n samehangende en nie-samehangende struktuurgrafieke.



Figuur 4-6. a) Samehangende- en b) Nie-samehangende

Die bostaande definisies omskryf en definieer die terme wat in die volgende hoofstukke gebruik sal word wanneer SGG-1's en SGG-2's bespreek en gedefinieer word.

Hoofstuk 5

Struktuurgrafiekgrammatikas uitbreiding 1.(SGG-1)

In hierdie hoofstuk sal ons poog om 'n eerste definisie te gee van 'n grammatika wat struktuurgrafieke as taal sal voortbring. Die grammatika en sy eienskappe sal volledig bespreek word. 'n Kort opsomming van die tekortkominge van SGG-1's sal gegee word.

5. 1 SGG-1

Hierdie grammatika genereer as taal die versameling boomtipe struktuurgrafieke wat samhangend is. Dit beteken dus dat daar nie sikliese paaie in so 'n struktuurgrafiek sal wees nie en dat daar wel 'n pad tussen enige twee nodi in die grafiek sal wees.

5. 1. 1 Definisie

'n SGG-1 word gedefinieer deur 'n viertal wat bestaan uit 'n versameling terminaal simbole en 'n versameling nie-terminaal simbole, 'n beginsimbool wat 'n enkele nodus is en 'n element van die versameling nie-terminaal simbole is asook 'n versameling produksie-reëls.

'n SGG-1 bevat laastens 'n versameling produksie-reëls. Elke reël bevat 'n konteks wat met daardie reël ge-assosieer word. 'n SGG-1 se kontekste is tweërlei van aard en bestaan uit 'n hoekkonteks en 'n globale konteks.

'n SGG-1 kan gedefinieer word deur die viertal $G=(N, T, S, R)$ waar

N die eindige versameling nie-terminaal simbole,

T die eindige versameling terminaal simbole,

S die beginsimbool is en

R die versameling produksies.

'n Produksie r word deur die drietal $r = (F_s, T_s, C)$ gedefinieer waar

F_s 'n enkele nodus in 'n struktuurgrafiek is en $F_s \in N$,

T_s of 'n enkele nodus is, of 'n boog simbool is (n_1-n_2) .

Verder is $C = (C_a/U;T)$ die konteks vir die produksie wat bestaan uit 'n globale toelatende konteks U en verbiedende konteks T , dit het ook 'n hoek konteks (C_a) .

$U, T \subseteq N \cup T$.

Elemente van die hoekkonteks C_a is van die vorm (a, α) waar α die hoek tussen a en die boog in r is.

Beskou die volgende produksie-reël

$(s, A-B, ((A-C,90^\circ))/(D);(E))$

Hierdie reël kan as volg ge-interpreteer word:

s kan met $A-B$ vervang word mits 'n nodus met waarde D reeds voorkom en daar geen nodus met waarde E voorkom nie. Verder moet $A-B$ ook so geplaas kan word dat dit 'n hoek van 90° met die boog $A-C$ maak.

Indien 'n simbool F_s in 'n struktuurgrafiek S voorkom kan dit met T_s vervang word mits die konteks C geld. 'n Konteks C geld as dit aan die volgende voorwaardes voldoen.

- 1) Al die simbole van U en geen van T kom in die struktuur voor,
- 2) Al die boë wat in C_a gespesifiseer word kom in die struktuur S voor en
- 3) Die nuwe boog T_s kan op so 'n wyse in die struktuur geplaas word dat die hoeke soos in C_a gespesifiseer behoue bly.

In die geval waar T_s slegs 'n enkele nodus is word slegs die globale konteks beskou.

Beskou die onderstaande produksie-reël van R

$(f, t, ((b_i, x_i) \mid (1 \leq i \leq n)) / T; U)$ n =aantal boë wat vir die reël van belang is.

Hierdie reël kan as volg ge-interpreteer word: f kan deur t vervang word mits die boogsimbool op 'n hoek x_i met boog b_i geplaas kan word en al die simbole van T en geen van die simbole van U in die struktuur voorkom nie.

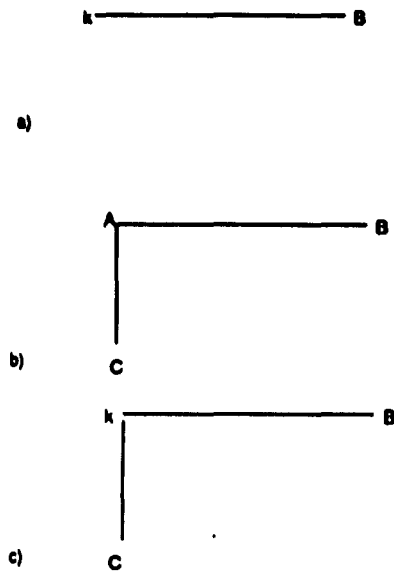
Indien ons 'n simbool met 'n boogsimbool vervang, word die simbool wat ons vervang direk met die eerste nodus van die boogsimbool vervang.

5. 1. 2 Eienskappe.

Dit is belangrik dat ons daarop sal let dat die simbool wat in die struktuur direk vervang word nie gebruik kan word om te bepaal of 'n konteks geld nie.

As voorbeeld hiervan beskou die onderstaande struktuur





Figuur 5-1.

In figuur 5-1 (a) is die boog wat beskou word, die boog k -B.

k is die nie-terminaal simbool wat vervang word.

Beskou die volgende twee reëls

1) $(k, A-C, ((A-B, 90^\circ)) /)$

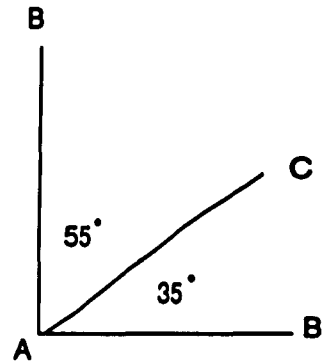
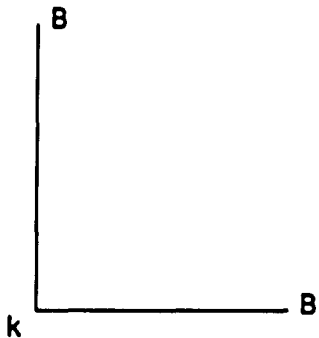
en

2) $(k, A-C, ((k-B, 90^\circ)) /)$.

Ons sal nie die produksie in die tweede geval kan uitvoer nie. Dit gebeur omdat die simbool k met A vervang word en daar geen k in die struktuurgrafiek sal wees nadat die produksie uitgevoer is nie. Die figure (b) en (c) dui die twee gevalle aan.

Ons moet ook verder daarop let dat alle boë in 'n struktuur wat sekere waardes het die uitvoer van 'n produksie sal beïnvloed.

Ter illustrasie hiervan beskou weereens die onderstaande struktuurgrafiek (a) met twee verskillende produksie-reëls waarvan slegs die tweede uitgevoer sal kan word.



a)



UNIVERSITY OF JOHANNESBURG

b)

Figuur 5-2.

1) $(k, A-C, ((A-B, 35^\circ)) /)$

en

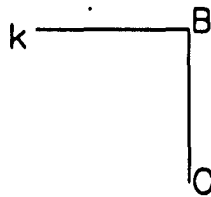
2) $(k, A-C, ((A-B, 35^\circ), (A-B, 55^\circ)) /)$.

In die tweede geval maak ons dus nou eksplisiet daarvoor voorsiening dat verskillende boë wat dieselfde etikette het maar verskillende invloede kan hê ook in aanmerking kom vir 'n sekere produksie-reël. Daar is dus geen voorskrif wat bestaan oor hoeveel keer sekere boëkombinasies mag voorkom nie.

As uitbreiding van die konsep dat alle boë van belang is en nie slegs die wat by 'n nodus aangryp nie, beskou die volgende struktuurgrafiek (a) en die produksie-reël

$(k, A-D, ((A-B, 90^\circ), (B-C, 0^\circ))/)$

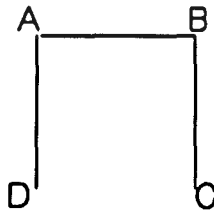
die uitvoer van die produksie sal figuur 5-3(b) tot gevolg hê.



a)



UNIVERSITY
OF
JOHANNESBURG



b)

Figuur 5-3.

Ons sien dus dat alhoewel die boog B-C nie by die nodus k aangryp nie dit wel 'n invloed het in die uitvoer van die produksie.

Bostaande beteken maar net dat alle boë in 'n struktuurgrafiek 'n invloed op 'n produksie het en nie net die boë wat aan die nodus wat vervang word grens nie.

Daar is ook geen voorskrif wat ons belet om simbole dieselfde fisiese ruimte te laat beslaan nie. Dit beteken dus een of meer simbole mag dieselfe posisie beslaan. Dit kan gebruik word om sikliese struktuurgrafieke mee te simuleer maar dit sal egter nie ware sikliese struktuurgrafieke tot gevolg hê nie. Dit beteken dus dat 'n sekere tipe boog sê A-B telkens oor mekaar gelê mag word mits die produksie-reëls daarvoor voorsiening maak.

5. 1. 3 Voorbeeld

Die voorbeeld soos geneem uit [1] word nou gebruik om die verbetering van die tipe grammatika op OKSG's te illustreer. Die grammatika soos in die geval van OKSG's sal eers gegee word. Daarna sal die SGG-1 daarvoor gegee word. Let daarop dat die SGG-1 korter is met die gevolg dat dieselfde struktuur in 'n korter tyd afgelei word. Die leser word na [1] verwys vir die produksie proses in die geval van OKSG's.

Die volgende is die grammatika vir 'n metaanmolekule met behulp van 'n OKSG's.

Slegs die produksie-reëls word gegee.

1. $S \rightarrow K$.

2. $K \xrightarrow{V_1} K (//////\{\}; \{V_2, V_3, V_4\})$.

3. $K \rightarrow K V_2 (//\{V_1\}; \{\}////\{\}; \{V_3, V_4\})$.

4. $K \nabla K ((\{V_1\}; \{V_2\}; \{V_4\}) / \{V_3\}; \{V_4\})$.
5. $K \leftarrow V_4 K ((\{V_1\}; \{V_2, V_3\}; \{V_4\}) / \{V_3\}; \{V_4\})$.
6. $K \leftarrow C ((\{V_1\}; \{C\}) / (\{V_2, V_4, V_3\}; \{V_4\}) / \{V_3\}; \{V_4\})$.
7. $V_1 \uparrow V_1 ((\{C\}; \{V_2, V_3, V_4\}; \{V_4\}) / \{V_3\}; \{V_4\})$.
8. $V_2 \rightarrow V_2 K ((\{C\}; \{V_3, V_4\}; \{V_4\}) / (\{V_1\}; \{V_4\}))$.
9. $V_3 \nabla K ((\{C\}; \{V_4, V_2\}; \{V_4\}) / (\{V_1\}; \{V_4\}))$.
10. $V_4 \leftarrow K V_4 ((\{C\}; \{V_2, V_4\}; \{V_4\}) / (\{V_1\}; \{V_4\}))$.
11. $V_1 \uparrow B_1 ((\{C\}; \{V_1, B_2, B_3, B_4\}) / \{V_3\}; \{V_4\})$.
12. $V_2 \rightarrow B_2 ((\{C\}; \{B_3, B_4\}) / (\{B_1\}; \{V_4\}))$.
13. $V_3 \nabla B_3 ((\{C\}; \{B_2, B_4\}) / (\{B_1\}; \{V_4\}))$.
14. $V_4 \leftarrow B_4 ((\{C\}; \{B_2, B_3\}; \{V_4\}) / (\{B_1\}; \{V_4\}))$.
15. $K \rightarrow H (\{B_1, B_2, B_3, B_4\}; \{V_4\})$.

Die volgende is 'n SGG-1 vir dieselfde metaanmolekule.

$$G = (N, T, S, R)$$

$$N = \{s\}$$

$$T = \{C, H_1, H_2, H_3, H_4\}$$

S = {s}

R = {

1) (s, s-H1, $\cup(\{ \}; \{H1\})$),



2) (s, s-H2, $\cup(\{(s-H1, 109.5^\circ)\} / \{ \})$),

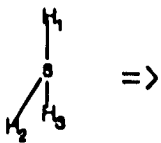
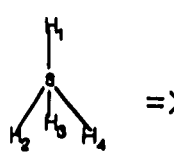
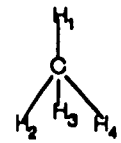
3) (s, s-H3, $\cup(\{(s-H1, 109.5^\circ), (s-H2, 109.5^\circ)\} / \{ \})$),

4) (s, s-H4, $\cup(\{(s-H1, 109.5^\circ), (s-H2, 109.5^\circ), (s-H3, 109.5^\circ)\} / \{ \})$),

5) (s, C, $\cup(\{H1, H2, H3, H4\}; \{ \})$)

Die produksies sal nou ge-illustreer word om aan te dui hoe die produksies werk.

Produksie	Produksie-reël	Kommentaar
$s \Rightarrow$	1	Die eerste waterstof atoom word in die struktuur geplaas.
 \Rightarrow	2	
 \Rightarrow	3	

Produksie	Produksie-reël	Kommentaar
	4	Al die waterstowwe kom nou voor.
	5	Die koolstof word in die struktuur geplaas.
		

Omdat die lengtes van die bindings in die geval almal ewelank is hoef die lengtes van die boë nie noodwendig gespesifiseer te word nie, behalwe dat ons moet noem soos in die geval van OKSG's dat dit 1.09 Å lank is. Ons gebruik dus die boë en die hoek tussen hulle as konteks om die posisie van die atome in die verbinding te bepaal.

As ons na die geval van OKSG's gaan kyk vir die spesifieke voorbeeld sien ons dat daar baie meer produksie-reëls is. Dit is ook baie moeilik om uit die syferstruktuur wat genereer word met OKSG's die molekule te visualiseer.

5. 2 Tekortkominge.

Dit is reeds in die bostaande gedeelte duidelik gemaak dat hierdie grammatika nie sikliese grafieke kan genereer nie. Daar is geen meganisme in die definisie

van SGG-1's om hiervoor voorsiening te maak nie. Alhoewel dit gesimuleer kan word is hierdie simulaties nie baie goed nie en sal die produksie-reëls van sulke sikliese struktuurgrafieke die grammatika lomp maak.

Die beheer van kontekste is slegs aktief wanneer 'n spesifieke produksie uitgevoer word. Daar is nie 'n algemene meganisme om die struktuur van die grafiek globaal te beskryf nie.



Hoofstuk 6.

Strukturgrafiekgrammatikas uitbreiding 2 (SGG-2).

In die voorafgaande hoofstuk word 'n definisie vir 'n strukturgrafiekgrammatika (SGG-1) gegee. Hierdie definisie het egter sommige beperkings. Onder hierdie beperkings tel onder meer die feit dat slegs boomtipe strukturgrafieke gegeneer kan word. Verder is die kontekste slegs van toepassing op 'n sekere reël en nie op die hele gegeneerde struktuur nie. SGG-1 leen hom verder slegs goed daaraan toe om eenvoudige molekules bv CH_4 te genereer.

Om spesifiek die beperkings van SGG-1 te oorbrug word die volgende uitbreiding op strukturgrafiekgrammatikas voorgestel. Al die definisies en begrippe soos gedefinieer in die eerste tipe strukturgrafiekgrammatika geld ook vir hierdie uitbreiding. Dit wil sê boë word dieselfde beskryf en die hoeke tussen hulle word op dieselfde wyse bepaal.

6. 1. 1 Definisie

Op 'n informele wyse kan hierdie spesifieke uitbreiding van strukturgrafiek grammatikas gedefinieer word deur 'n vyftal wat bestaan uit 'n versameling terminaal en 'n versameling nie-terminaal simbole, 'n beginsimbool, 'n versameling produksies en 'n versameling boogspesifikasies.

Die versameling boogspesifikasies bepaal die strukturgrafiek wat die grammatika sal genereer. Die produksies is eenvoudige vervangings en word beskryf deur 'n tweetal wat bestaan uit die simbool wat vervang moet word en die simbool of boog waarmee dit vervang moet word.

Hierdie grammatika kan as volg formeel gedefinieer word:

$G = (G_t, G_{nt}, S, R, A)$ waar

G_t die versameling terminaal simbole is,

G_{nt} die versameling nie-terminaal simbole is,

S die beginsimbool is,

R die versameling produksie-reëls is en

A die versameling boogpare is.

'n Produksie $p \in R$ is van die vorm (F, T) waar

$F \in G_{nt}$ 'n enkele nodus is wat vervang moet word en

T 'n boog of 'n nodus is waarmee F vervang moet word.

Die versameling boogpare A bepaal vir ons die struktuur van die grafiek. Die elemente van hierdie boog versameling is van die vorm (b_1, b_2, α) waar b_1 en b_2 twee boë in die struktuurgrafiek is en α die hoek tussen hulle is.

Alvorens ons 'n produksie $P = (F, T)$ kan uitvoer moet ons eers aan die volgende vereistes voldoen.

1) Indien T slegs uit 'n enkele nodus bestaan kan dit eenvoudig vervang word.

2) Indien T egter uit 'n boog bestaan moet ons eers gaan kyk of die boog wel so in die struktuur geplaas sal kan word dat die boog versameling A se boogspesifikasies bevredig word.

Indien ons aan die bogenoemde voorwaardes voldoen kan ons die simbool in F met T gaan vervang. Hierdie proses van vervanging vind as volg plaas:

1) Al die boë aangrensend aan die simbool in F word verwyder.

2) F word vervolgens met T vervang. Die struktuurgrafiek word nou gherkonnekteer deur al die boë in die struktuur te plaas wat aan die simbole in T grens en ook nog aan die globale boog versameling A se boogspesifikasies voldoen.

Ter illustrasie van die proses wat betrokke is by die uitvoer van 'n produksie beskou die struktuurgrafiek (a) in die onderstaande skets. As ons nou die volgende grammatika het :

$$G = (G_{nt}, G_t, S, R, A)$$

waar

$$R = \{ \dots$$

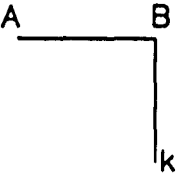
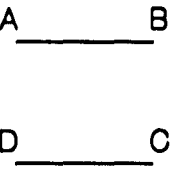
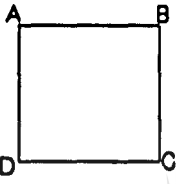
$$(k, C-D)$$

$$\dots \}$$

$$\text{en } A = \{(A-B, B-C, 90^\circ), (B-C, C-D, 90^\circ), (A-B, \overset{D-C}{\cancel{C-D}}, 0^\circ), (D-A, A-B, 90^\circ), (D-A, C-B, 0^\circ)\}$$

(Let daarop dat slegs die gedeelte in die voorbeeld wat van toepassing is, gegee is en nie die hele grammatika nie. Hierdie tegniek sal deurgaans gebruik word aangesien daar telkens van reeds gegeneerde struktuurgrafieke gebruik gemaak sal word om eienskappe te illustreer).

Skets (b) sal aandui hoe die struktuurgrafiek lyk wanneer die boël wat aan k grens verwyder is. Dit dui ook die posisie van die boog aan. In skets (c) word die struktuurgrafiek voorgestel soos wat dit sal lyk as die boël herverbind is. Let daarop dat die boog A-D bygekom het alhoewel die produksie dit nie eksplisiet aandui nie.

Struktuur	Kommentaar
a) 	k is die simbool wat vervang word.
b) 	Die struktuurgrafiek lyk so wanneer die boog D-C in die struktuur geplaas is maar dit is nog nie herverbind nie.
c) 	Die struktuurgrafiek lyk so nadat dit herverbind is.

x



6. 1. 2 Voorbeelde

Vervolgens sal 'n hele aantal voorbeelde van die tipe grammatika gegee word om aan te dui hoe die verskillende produksies werk.

Voorbeeld 1.

Die volgende voorbeeld illustreer hoe 'n enkel simbool substitusie gebruik kan word om 'n geheel en al nuwe grafiek te kan genereer. Beskou weereens die struktuurgrafiek in die onderstaande skets.


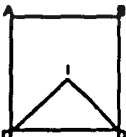
Indien die grammatika die volgende boogspesifikasie versameling het:

$A = ((B-A, B-C, 90^\circ), (C-B, C-D, 90^\circ), (C-D, A-B, 0^\circ), (A-k, A-B, 45^\circ),$
 $(B-k, B-A, 45^\circ), (C-l, C-D, 45^\circ), (D-l, D-C, 45^\circ))$

en die volgende produksie reël

(k, l)

sal die struktuurgrafiek verander soos in skets (b) van die figuur.

Struktuur	Kommentaar
 <p style="text-align: center;">a</p>	<p>Die simbool k word vervang</p>
 <p style="text-align: center;">b</p>	<p>Daar is nie boë in die boogspesifikasie vir boë A-l en B-l nie. Hulle word dus nie herverbind nie.</p>

Uit die bostaande figuur is dit duidelik dat nie-samehangende struktuurgrafieke deur hierdie grammatika gegenereer kan word. Hierdie eienskap bied vir ons die

?

moontlikheid om strukture te genereer wat lostaande eenhede is maar wat tog 'n verband tussen hulle het.

Voorbeeld 2.

Die voorbeeld van 'n metaan molekule soos in hoofstuk 5 gegee word nou vervolgens hier gegee om te illustreer hoe hierdie spesifieke grammatika ook sulke grafieke kan genereer.

$$G = (G_{nt}, G_t, S, R, A)$$

$$G_{nt} = \{s_1, s_2, s_3, s\}$$

$$G_t = \{C, H_1, H_2, H_3, H_4\}$$

$$S = \{s\}$$

$$A = \{(s-H_i, s-H_j, 109.5^\circ)$$

$$(C-H_i, C-H_j, 109.5^\circ) \mid 1 \leq i, j \leq 4, i \neq j\}$$

$$R = \{$$

$$1) (s, s-H_1),$$


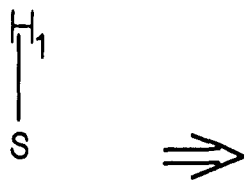
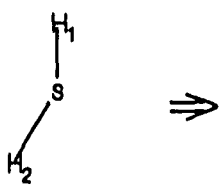
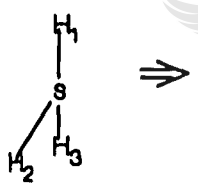
$$2) (s, s-H_{i+1}) \mid 1 \leq i \leq 3$$

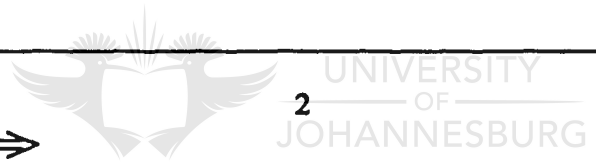
$$3) (s, C)\}$$

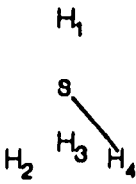


UNIVERSITY
OF
JOHANNESBURG

Die afleidingsproses vind plaas soos in die onderstaande skets. In figuur 6-3 (d) word aangetoon hoe die struktuurgrafiek sal lyk as 'n boog reeds in hom geplaas is, maar die struktuurgrafiek nog nie herverbind is nie.

Produksie	Produksie-reël	Kommentaar
	1	
	2	i=2
	2	i=3
	2	i=4



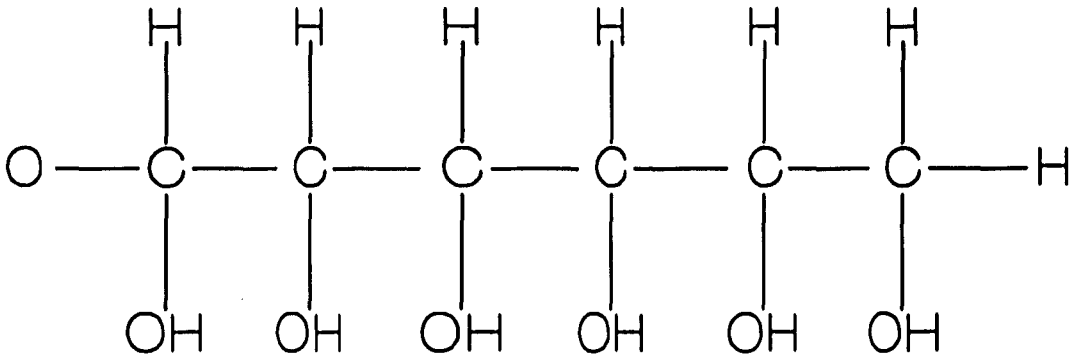
Produksie	Produksie-reël	Kommentaar
		<p>Die struktuurgrafiek lyk so wanneer dit nog nie herverbind is nie. Die afleidingsproses is gelykstaande aan die afleidingsproses in die geval van SGG-1's</p>

Let daarop dat daar in beide die SGG-1 en SGG-2 grammatikas vir 'n metaan molekule ewe veel produksie-reëls is. Dit beteken die tweede is nie 'n besparing op die eerste geval nie maar wel dat dit makliker verstaanbaar is.

As 'n verdere voorbeeld van die toepassing van hierdie tipe grammatika word 'n grammatika nou gegee wat 'n suiker molekule sal genereer.

As ons na die struktuur van suiker kyk sal dit as volg lyk :





Die struktuur van 'n suiker molekule

Uit die chemie weet ons dat om die hoek tussen die bindings te verkry moet ons eers die lewis struktuur van die molekule teken. Die lewis struktuur van suiker voorspel dat die bindingshoek tussen alle atome 109.5° sal wees.

Die grammatika om suiker te genereer word gegee deur

$$G_t = (O, H, C)$$

$$G_{nt} = (s, os)$$

$$R = \{$$

$$1) (s, \overset{O-b}{\cancel{O}})$$

$$2) (s, s-os)$$

3) (s, s-H)

4) (s, C)

5) (os, O)

6) (os, os-H)

7) (s, s-s)

8) (s, s-O))


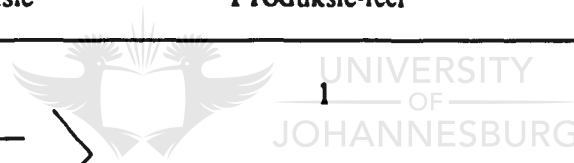
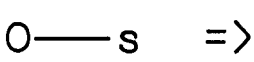
A = ((H-O, H-C, 109.5°), (C-O, O-H, 109.5°),

(s-H, s-os, 109.5°), (os-H, s-os, 109.5°))

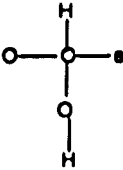
(O-s, S-os, 109,5°)

?

Die onderstaande skets dui aan hoe die eerste koolstof en sy verbinding gevorm word met die eerste uitbreiding van s. Die produksieproses sal voortduur todat 'n suiker gevorm is.

Produksie	Produksie-reël	Kommentaar
		1
	2	

Produksie	Produksie-reël	Kommentaar
$\begin{array}{c} \text{O} - \text{S} \\ \\ \text{OS} \end{array} \Rightarrow$	3	
$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{O} - \text{S} \\ \\ \text{OS} \end{array} \Rightarrow$	6	
$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{O} - \text{S} \\ \\ \text{H} \end{array} \Rightarrow$	5	
$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{O} - \text{S} \\ \\ \text{O} \\ \\ \text{H} \end{array} \Rightarrow$	7	UNIVERSITY OF JOHANNESBURG
$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{O} - \text{S} \\ \\ \text{O} \\ \\ \text{H} \end{array} \Rightarrow$	4	

Produksie	Produksie-reël	Kommentaar
		Die afleidingsproses sal herhaal todat die molekule gegengereer is. Die huidige simbool s dien nou as die beginsimbool



UNIVERSITY
OF
JOHANNESBURG

Hoofstuk 7

'n Vergelyking tussen SGG-1's en SGG-2's.

In die vorige hoofstuk is reeds genoem dat SGG-2's gedefinieer is om sekere tekortkominge van SGG-1's te oorbrug.

Daar is egter ander eienskappe wat die twee verskillende tipes grammatika's van mekaar skei. Daar is ook eienskappe wat die tipe tale wat deur elk voortgebring word sal beïnvloed.

In hierdie hoofstuk sal die oorspronklike eienskappe wat die twee van mekaar skei bespreek word. Daar sal ook 'n bespreking gegee word van die ander eienskappe wat SGG-1's en SGG-2's van mekaar skei.

7. 1 Elementêre eienskappe.

In die vorige hoofstuk word daar drie basiese eienskappe wat SGG-1's van SGG-2's skei gegee. Hierdie eienskappe is as volg :

- 1) SGG-2's kan sikliese struktuurgrafieke genereer terwyl SGG-1's slegs boomtipe struktuurgrafieke kan genereer.
- 2) In die geval van SGG-1's word die konteks by die reëls geplaas, terwyl die konteks in die geval van SGG-2's globaal geplaas word.
- 3) SGG-1's kan slegs samehangende struktuurgrafieke genereer. SGG-2's is so gedefinieer dat losstaande of nie-samehangende struktuurgrafieke gegenereer kan word.

7. 1. 1 Sikliese struktuurgrafieke.

SGG-1's kan slegs boomtipe struktuurgrafieke genereer. Aangesien daar chemiese molokules is wat sikliese verbindings het, is dit nodig dat ons daarvoor voorsiening maak. SGG-2's se definisie laat toe vir struktuurgrafieke om siklies te wees.

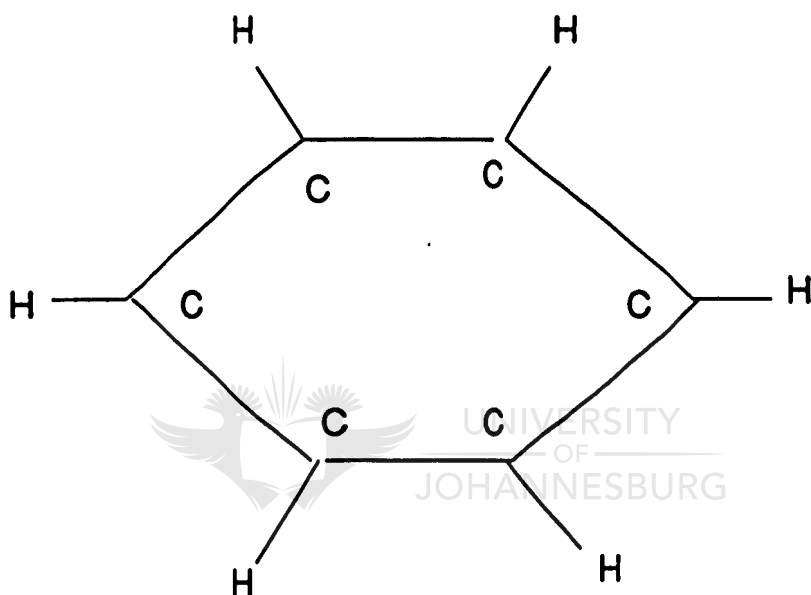
Voorbeeld.

In die onderstaande voorbeeld sal die molekule van benseen C_6H_6 bestudeer word. Hierdie molekule het die volgende eienskappe :

Dit is 'n planêre molekule d. w. s. kom op 'n plat vlak voor.

Die hoeke tussen die H-C-C en C-C-C bindings is 120° .

Die lengtes van die bindings is byna ewe lank. Hierdie molekule het dus die struktuur van 'n seskant.



Figuur 7-1. 'n Benseen molekule

Die onderstaande grammatika is 'n SGG-1 en genereer die bostaande struktuurgrafiek. Let daarop dat die sikliese binding slegs gesimuleer word.

$G=(N, T, S, R)$
 $N=(s, s_1, s_2, \dots, s_6)$
 $T=(C_1, C_2, \dots, C_6, H)$
 $S = \{s\}$
 $R = \{$

1) $(s, s_1-H, /)$

2) $(s_1, s_1-s_2, ((s_1-H, 120^\circ))/\{s_2\})$

3) $(s_i, s_i-s_{i+1}, ((s_i-H, 120^\circ))/) \ 2 \leq i \leq 5$

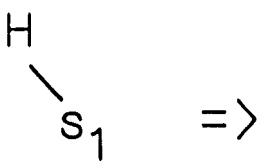
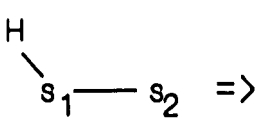
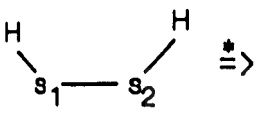
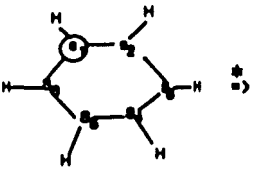
4) $(s_i, C_i, / \{s_i\}) \ 1 \leq i \leq 6$

5) $(s_i, s_i-H, ((s_i-s_{i-1}, 120^\circ))/\{s_i\}) \ 2 \leq i \leq 6$

6) $(s_6, s_6-s_1, ((s_6-H, 120^\circ))/)$

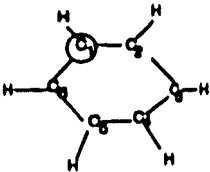
Die produksie proses lyk as volg

Produksie	Produksie-reël	Kommentaar
$S \Rightarrow$	1	Die eerste boog word in die struktuur geplaas.

Produksie	Produksie-reël	Kommentaar
	2	
	6.5	
	<p>§ 7</p>	<p>Die produksie-reël 6.5 word herhaal todat al die s simbole en hulle waterstowwe voorkom. Produksie 7 het tot gevolg dat daar twee s simbole dieselfde ruimte beslaan.</p>
	5	<p>Al die simbole word met C's vervang. Die sirkel dui aan waar twee simbole dieselfde ruimte beslaan</p>

?



Produksie	Produksie-reël	Kommentaar
		<p>'n Sikliese grafiek word dus so gesimuleer maar dit is in werklikheid nie 'n sikliese grafiek nie.</p>

In die geval van SGG-2 lyk die grammatika as volg :

$G = (N, T, S, R, A)$

$N = \{s_i \mid 1 \leq i \leq 6\}$

$T = \{C_1, C_2, \dots, C_6, H_i, \text{~~H}_i\text{, H}_i\}~~$

$S = \{s\}$

$A = \{ (C_1-s_1, C_1-C_6, 120^\circ), (C_1-C_2, C_1-C_6, 120^\circ), (C_6-C_5, C_6-C_1, 120^\circ),$

$(C_i-s, C_i-C_{i-1}, 120^\circ) \mid 2 \leq i \leq 6,$

$(C_i-C_{i+1}, C_i-C_{i-1}, 120^\circ) \mid 2 \leq i \leq 5,$

$(C_i-H_i, C_i-C_{i+1}, 120^\circ) \mid 1 \leq i \leq 5,$

$(C_i-H_i, C_i-C_{i-1}, 120^\circ) \mid 2 \leq i \leq 6 \}$

$(C_i-H_i, C_i-s_{i+1}, 120^\circ)$

$(H-s_{i+1}, C_i-s_{i+1}, 120^\circ)$

R = {

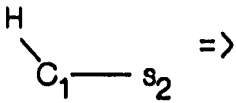
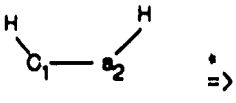
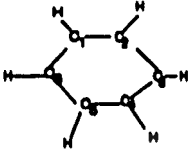
1) (s, s1)

2) (s_i, s_{i+1}) | 1 ≤ i ≤ 6

3) (s_i, C_{i-s_i+1}) | 1 ≤ i ≤ 5 }

Die produksie proses sal as volg lyk:

Produksie	Produksie-reël	Kommentaar
S ⇒	1	
S ₁ ⇒	2	
H s ₁ ⇒	3	

Produksie	Produksie-reël	Komm ^e ntaar
	2, i=2	voeg die tweede boog in
	2,3, i=3..5	
		Let daarop dat die boog C6-C1 self verskyn het.



Let daarop dat die laaste produksie die boog C6-C1 genereer wat vir ons 'n sikliese struktuur grafiek genereer.

7. 1. 2 Die globale konteks

In die geval van SGG-2's word die konteks globaal deur die boogversameling A in die definisie gegee. Hierdie vaste versameling gee dus vir ons beheer oor die struktuur. In die geval van SGG-1's het ons die eienskap dat die konteks of boogspesifikasie by elke reël gegee word.

As ons 'n formele beskrywing vir alle moontlike struktuurgrafieke wil neerskryf wat 'n SGG-1 sal voortbring, sal dit bestaan uit 'n samevoeging van die

boogspesifikasies in die reëls. 'n SGG-2 se formele beskrywing se boogversameling is eenvoudig die boogversameling wat in die grammatika gegee word.

Gestel ons het die volgende reëls vir die eerste uitbreiding.

$(s, s-H, ((s-K, 10^\circ))/)$

$(s, s-H, ((s-K, 15^\circ))/)$

$(s, s-H, ((s-K, 40^\circ))/)$

Beskou die volgende boog s-K:

s ————— K

Die produksie-reël wat ons kies sal bepaal hoe die struktuur sal lyk nadat dit uitgevoer is. Wanneer ons slegs een produksie op 'n slag kies sal ons moontlik drie verskillende struktuurgrafieke uit die bostaande skets kan aflei. Indien ons egter al die reëls kies sal ons 'n struktuur hê wat uit drie boë bestaan. Die formele definisie vir die struktuurgrafiek in die geval waar al die produksies gekies word, word hieronder gegee.

Wanneer slegs een produksie gekies word, sal die boogspesifikasie versameling van die struktuurgrafiek 'n deelversameling van die onderstaande wees.

$SG=(M, B, F)$

waar $F(X) = X$

$M=\{K, H, s\}$

$B=\{(s-K, s-H, 10^\circ), (s-K, s-H, 15^\circ), (s-K, s-H, 40^\circ)\}$

as ons egter nou 'n globale verbiedende konteks by elk van die reëls voeg om H te verbied en ons genereer B' sal B' 'n deelversameling van B wees.

Aanvanklike boë.

Indien daar geen boë in 'n struktuur is nie kan ons enige reël uitvoer en die reël se boog in enige rigting plaas.

In 'n SGG-1 moet ons eksplisiet 'n produksie reël daarstel om 'n aanvanklike boog daar te stel. Hierdie produksie reël moet geen boogspesifikasie in die konteks hê nie.

In die tweede geval kan ons egter vanaf die begin simbool enige boog produksie gaan uitvoer aangesien daar nie bestaande boë in die gegeneerde struktuur is nie en ons nie die boogversameling se beperkinge kan oorskrei nie.

Hierdie is dan ook 'n eienskap wat die tweede uitbreiding meer kragtig as die eerste maak.

7. 1. 3 Nie-samehangende struktuurgrafieke.

Hierdie is 'n verdere eienskap wat die tweede uitbreiding van die eerste onderskei. Die definisie vir herverbinding in die tweede geval is verantwoordelik hiervoor. Aangesien die tweede uitbreiding nie-samehangende struktuurgrafieke kan genereer is dit belangrik dat ons die eienskappe van so 'n struktuurgrafiek sal ondersoek.

Uit die produksie proses verkry die nodi in 'n struktuur 'n sekere vaste ruimtelike posisie. In die eenvoudige geval vir struktuurgrafieke soos hier gedefinieer word hierdie ruimtelik posisie bepaal deur die hoek wat boë met mekaar vorm.

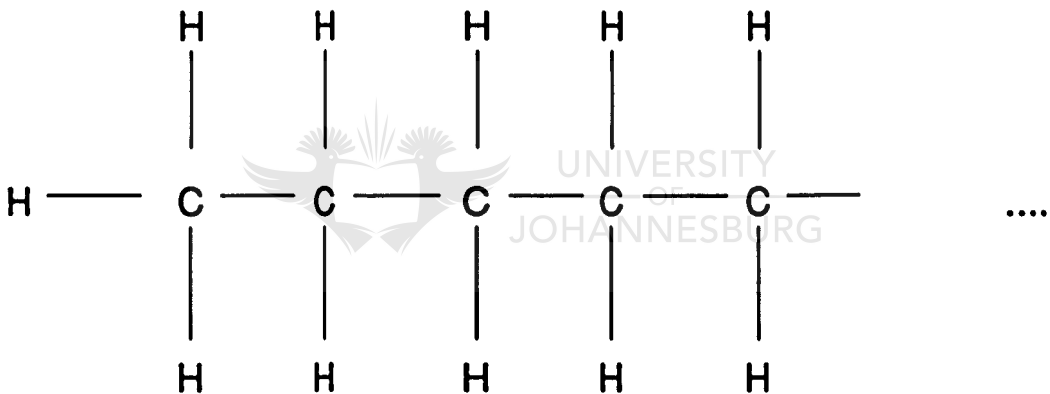
Sommige van die boë in die geval van SGG-2's se bestaan is slegs tydelik. Die boë se invloed is dus slegs tydelik van aard. Hierdie boë kan egter in die tyd wat hulle bestaan die hele struktuur beïnvloed. Die gebruik van sulke tydelike boë bied ons dus weereens groter beheer oor die uiteindelijke struktuur en kan gebruik word om strukture korrek te hou in tussenstappe in die generasie van 'n uiteindelijke struktuur.

Soos reeds genoem kan hierdie eienskap aangewend word om objekte te genereer wat lostaande, herhalende substrukture het. 'n Voorbeeld hiervan is om molekules wat in kristal roosters voorkom asook hulle orientasie in hierdie kristal roosters te modelleer.

7. 2 SGG-1's genereer makliker ketting strukture.

SGG-2's se globale konteks maak dit moeilik om 'n algemene definisie neer te skryf vir ketting strukture. In die geval van SGG-2's sal ons vir elke boog moet voorsiening maak. Dit beperk die aantal boë wat in 'n gegeneerde struktuurgrafiek kan wees.

Kom ons beskou die volgende hipotetiese voorbeeld van 'n ketting struktuur:



Figuur 7-4. Voorbeeld van 'n koolstof ketting

Die ketting bestaan uit 'n aantal koolstowwe en waterstowwe in 'n ketting.

SGG-1's sal so 'n ketting genereer met die volgende reëls

$N = (s)$

$S = (s)$

$T = (C, H)$

$R = \{$

1 $(s, s-H, ()/();(H))$

2 $(s, s-H, ((s-H, 109.5^\circ))/)$

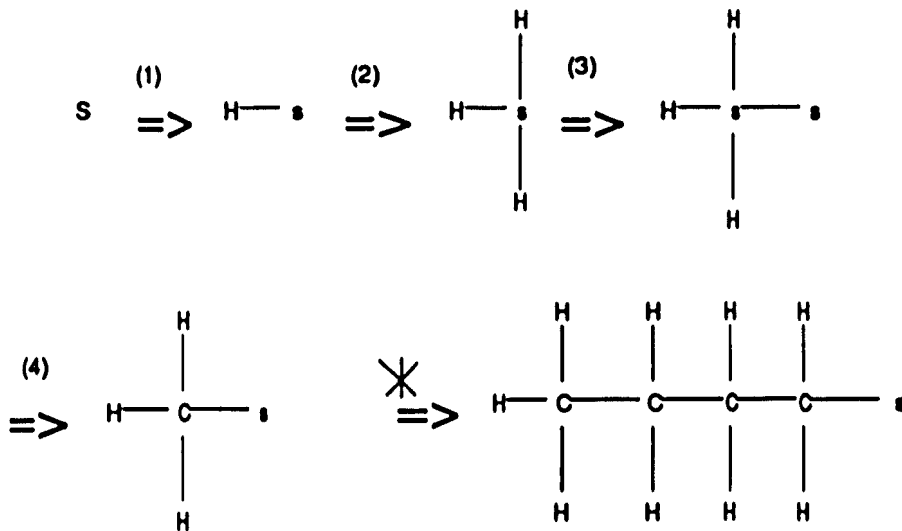
3 $(s, \text{↺}s, ((s-H, 109.5^\circ))/)$

4 $(s, s-H, ((s-s, 109.5^\circ))/)$

Die produksie proses sal as volg lyk:



UNIVERSITY
OF
JOHANNESBURG



figuur 7-5. Afleiding van ketting met SGG-1

Dit is maklik om te sien dat hierdie bostaande grammatika enige ketting van die tipe kan genereer.

In die geval van SGG-2's is dit egter moeilik omdat ons vir elke koolstof in die ketting voorsiening moet maak. Dit beteken ons moet vooraf besluit wat is die langste wat ons die ketting wil hê.

Die rede hiervoor is die volgende:

In so 'n ketting struktuur is die hoek tussen alle koolstowwe nie 109.5° nie. Slegs tussen aangrensende koolstowwe is die hoek 109.5° . Om dit te beskryf moet elke koolstof 'n nommer gegee word, sodat hulle uniek ge-identifiseer kan word .

In die bostaande geval laat n die aantal koolstowwe wees wat ons as bogrens van die ketting sien.

$$N = \{s\}$$

$$S = \{s\}$$

$$T = \{H, C_i \mid 1 \leq i \leq n\}$$

$$A = \{(C_i-H, C_i-H, 109.5^\circ) \mid 1 \leq i \leq n,$$

$$(s-H, s-H, 109.5^\circ),$$

$$(s-s, s-H, 109.5^\circ)\}$$

$$R = \{$$

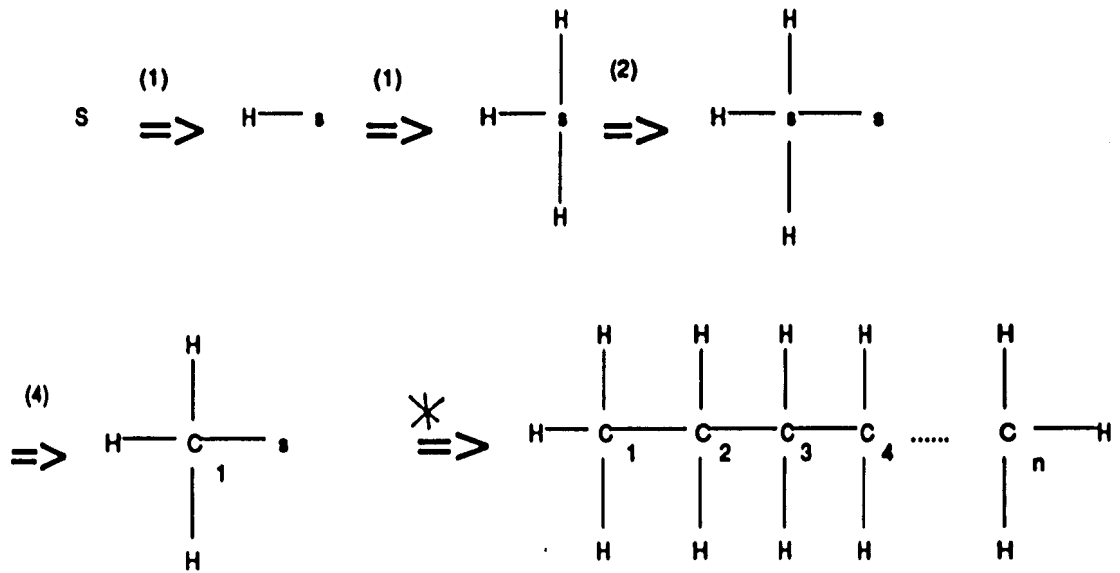
$$1) (s, s-H)$$

$$2) (s, s-s)$$

$$3) (s, C) \}$$



UNIVERSITY
OF
JOHANNESBURG



Figuur 7-6. Afleiding van ketting met SGG-2's

Die afleidings proses is gelykstaande aan die van SGG-1's dit verskil daarin dat dit na n koolstowwe sal stop. Ons kan egter voordeel hieruit verkry as ons net beperkte strukture wil genereer. Let verder ook daarop dat elke koolstof genummer is. Die boogspesifikasies maak slegs voorsiening vir boë met aangrensende koolstowwe.

Hoofstuk 8.

Modellering van chemiese stelsels met behulp van rekenaars.

Die modellering van chemiese prosesse met behulp van rekenaars is 'n gebied wat redelik intensiewe navorsing beleef [9, 18, 19]. Daar word veral aandag geskenk aan die simulاسie van chemiese prosesse. Verder word ook aandag geskenk aan die simulاسie van eienskappe van chemiese verbindings.

In hierdie hoofstuk sal sommige bestaande stelsels wat chemiese prosesse simuleer oorsigtelik bespreek word. 'n Stelsel wat gebruik word om chemiese verbindings mee te simuleer sal eerstens bespreek word. Verder sal twee artikels [18,19] wat waterstof binding in vloeistowwe modelleer, bespreek word. In die voorafgenoemde twee artikels word rekenaar simulاسie gebruik om die gedrag van die vloeistowwe te modelleer.

8.1 Rekenaar gesteunde chemiese ontwerp.

Hierdie stelsel wat bespreek word in [9] benodig redelike gevorderde apparatuur asook 'n groot aantal geheue.

Die stelsel bevat teoretiese metodes en 'n ekspertstelsel wat op empiriese data werk. Die stelsel is geskryf om in die algemeen te werk met spesiale toepassings in die gebied van organiese chemie.

Die stelsel bied onder andere die voordeel dat dit die gebruik van diere vir eksperimente in die ontwikkelingsfase van 'n chemiese produk verminder. Klein chemiese ondernemings kan voordeel put uit die ekspertstelsel deur dat hulle die ekspert kennis saam met die stelsel verkry. Die organisasies het dus nie nodig om mense met die kennis aan te stel nie.

'n Verkorte ontwikkelings tyd beteken dat medisyne en serums vinniger en goedkoper op die mark geplaas word.

8.2 Struktuur en eienskappe van vloeibare Metanol.

In die artikel van Jorgensen [19] word simulasië tegnieke bespreek wat vloeibare metanol simuleer.

Sekere temperature en digtheid word aan die model geheg en die gedrag van metanol word bestudeer. Wat veral van belang is, is dat die resultate van hierdie simulasië ooreenstem met die waardes wat in eksperimente verkry word.

8.3 Die modellering van waterstof binding.

In hierdie artikel [18] word weereens van simulasië gebruik gemaak om die gedrag van vloeistowwe waarin waterstof bindinge voorkom te simuleer.

Daar word gebruik gemaak van 'ab initio' berekeninge om die gedrag te bepaal. 'Ab initio' berekeninge is berekeninge wat gebaseer is op kwantum meganiese beginsels.

Semi-empiriese berekeninge kan ook gebruik word. Hierdie berekeninge is ook soos 'Ab initio' berekeninge op kwantum meganiese beginsels gebaseer. Dit verskil egter in die opsig dat dit ook van eksperimentele gegewens gebruik maak.

Verder word daar in hierdie artikel ook melding gemaak van twee verskillende metodes van simulasië. Die Monte Carlo-metode is een en die molekulêre dinamika-metode die ander.

In die Monte Carlo benadering word klassieke statistiese metodes gebruik om die gemiddelde van die eienskappe van die vloeistof te bepaal. 'n Aanvanklike konfigurasie word gegee met 'n vaste druk en temperatuur. Molekules word beweeg en die potensiale en ander eienskappe word bereken.

In die molekulêre dinamika-metode word die besondere beweging van 'n aantal molekules gesimuleer. Die stelsel groei met tyd. Hierdie proses van groei word bepaal deur wette van klassieke dinamika en word onderwerp aan 'n sekere potensiaal.

Die molekulêre dinamika-metode is die beste van die twee tegnieke omdat die resultate meer realisties is. Dit het egter die beperking dat baie rekenaar krag gebruik word in die simulasië. Die Monte Carlo simulasië tegniek gebruik minder berekeningstyd en daar is dus meer resultate oor hierdie tegniek.

8.4 Gevolgtrekking.

In die laasgenoemde twee afdelings word molekules en hulle gedrag met wiskundige modelle voorgestel. 'n Eienskap van die ekspertstelsel gebaseerde model[9] is dat dit 'n groot aantal geheue gebruik om molekules en kettings van molekules se eienskappe voor te stel.

'n Generatiewe voorstelling vir molekules kan die grootte van 'n molekulêre databasis verklein. 'n Grammatika soos SGG-1's of SGG-2's bied vir ons so 'n generatiewe stelsel.

'n Stelsel is ontwikkel wat van SGG-2's gebruik maak. Hierdie stelsel dien as 'n werktafel vir eksperimente met SGG-2's. Dit is geskryf om die generasie van struktuurgrafieke (soos bv. molekules) in drie-dimensies voor te stel en word in die volgende hoofstuk bespreek.

Die voordeel wat so 'n generatiewe data voorstelling ons bied is daarin geleë dat ons 'n grammatika daar kan stel vir die algemene geval van kettings en klasse molekules. As voorbeeld kan ons 'n ketting koolwaterstowwe beskou. Al wat dus nodig is, is om spesifieke reëls by so 'n grammatika te voeg om 'n spesifieke molekule te genereer.



Hoofstuk 9.

Die "Grammar-Cad" stelsel.

Hierdie stelsel is geskryf om die gebruiker in staat te stel om

- a) 'n Grammatika te kan ontwerp en
- b) 'n Struktuurgrafiek vanaf die grammatika te genereer om die eienskappe van die spesifieke grammatika te ondersoek.

In hierdie hoofstuk sal 'n beskrywing van die stelsel gegee word. Die inleiding sal dien as 'n inleiding tot die konsepte agter die stelsel.

Die stelsel beskrywing in afdeling 2 van hierdie hoofstuk sal elk van die funksies wat die stelsel bied bespreek. Die gebruikerskoppelvlak sal ook bespreek word.

Daarna sal die apparatuur wat die stelsel benodig bespreek word. In die volgende afdeling sal 'n voorbeeld volledig bespreek word.

Laastens sal 'n tegniese beskrywing gegee word van sommige van die interessante algoritmes wat gebruik word. 'n Oorsig sal ook oor die vertoon "pyplyn" gegee word.



9.1 Inleiding.

"Grammar-cad" is 'n rekenaar ondersteunde grammatika ontwerpsgereedskapstuk wat vir die studie ontwikkel is . Dit dien die spesifieke doel om 'n omgewing daar te stel waarin die gebruiker interaktief 'n SGG-2 grammatika kan ontwerp en toets.

Die interaktiwiteit van die stelsel beteken dat die gebruiker op enige stadium 'n nuwe reël of simbole kan byvoeg. Indien 'n gebruiker dus alreeds 'n struktuurgrafiek gegenereer het en 'n nuwe reël benodig kan hy dit eenvoudig byvoeg.

Dit beteken verder die gebruiker kan met 'n idee begin van die tipe struktuurgrafiek wat hy wil genereer. Hy kan vervolgens produksie-reëls en boogspesifikasies byvoeg todat hy die tipe grafiek genereer wat hy ingedagte gehad het.

Dieselfde grammatika kan nou van vooraf uitvoer word. Dit stel die gebruiker in staat om sodoende ander strukture wat met die spesifieke grammatika gegeneer kan word te ondersoek.

Om hierdie interaktiwiteit moontlik te maak is die grammatika ontwerps module en die generator module twee afsonderlike entiteite. Hulle het egter 'n enkele gemeenskaplike grammatika as koppeling.

Die stelsel se hoofresultaat is egter die struktuurgrafieke wat gegeneer word. Hierdie struktuurgrafiek word grafies op die skerm vertoon. Die gebruiker kan egter ook 'n formele struktuurgrafiek definisie na 'n teksleër stuur wat op sy beurt gedruk kan word.

Verder lewer die stelsel ook as afvoer 'n teksleër wat die grammatika beskryf wat ontwerp is. Hierdie afvoer is in die volgende vorm :

$N = \{.. \}$

$T = \{.. \}$

$S = \{.. \}$

$A = \{.. \}$

$R = \{.. \}$



Die versameling N is die nie-terminaal simbole, T die versameling terminaal simbole, S die begin simbool, A die versameling boogspesifikasies en R die produksie-reëls.

Hierdie definisie stem dus ooreen met die formele definisie soos gegee vir SGG-2's.

Die stelsel word verdeel in modules soos in die onderstaande eenvoudige tabel aangetoon word.

Stelsel

Redigeerder	Generator
- Ontwerp	- Grafiese voorstelling
- Grammatika skrywer	- Transaksie spoor
- Grammatika vertaler	- Grafiekskrywer.

Elk van die modules in die bostaande tabel bevat sekere funksies. Dit is hierdie funksies wat in die volgende afdeling bespreek sal word. Daar sal egter eers 'n kort beskrywing oor die gebruikerskoppelvlak gegee word.

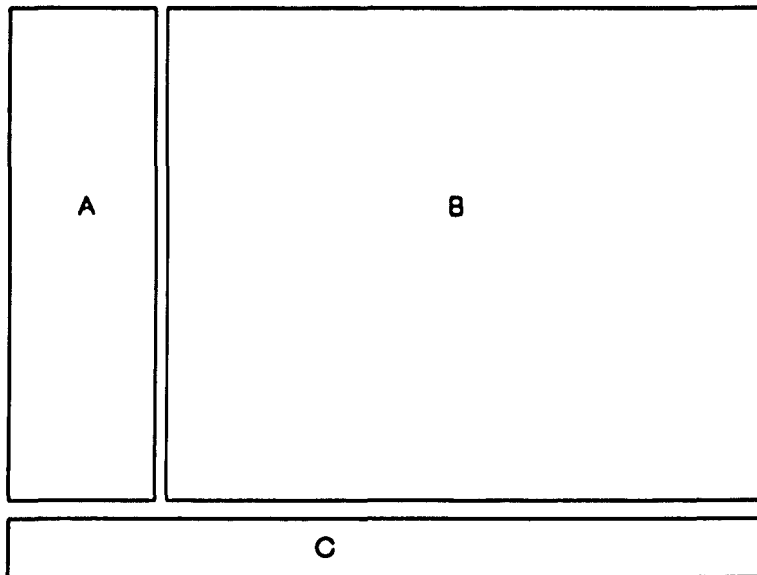
Dit is ook verder belangrik dat ons daarop let dat die stelsel slegs SGG-2's gebruik om struktuurgrafieke te genereer.



9.2 Stelselbeskrywing.

Die gebruikerskoppelvlak.

Die skerm wat vir die gebruiker vertoon word bestaan uit drie areas.



Figuur 9-1. Die skerm uitleg

A) 'n Funksie gebied.

Hierdie gedeelte bevat al die funksies wat op 'n bepaalde tydstip aktief is. Die gebruiker kan op enige stadium na so 'n funksie wys met die looper en dit sal uitgevoer word.

B) 'n Afvoer gedeelte. Die afvoer van die huidige aktiewe deel van die stelsel (ontwerp of generator) word hier vertoon.

B) 'n Status gebied. Alle status boodskappe word hier vertoon. Die huidige aktiewe deel van die stelsel word ook hier aangedui.

Die gebruiker kan enige tyd vanaf een gedeelte na die ander gaan deur net die hoof funksie in beide te kies.

Indien die stelsel op 'n kritieke stadium is sal die gebruiker egter nie toegelaat word om dit te doen nie. Die gebruiker sal egter deur 'n foutboodskap hiervan gewaarsku word.

Funksies.

Elk van die modules en hulle funksies sal nou bespreek word. Die bespreking is slegs oorsigtelik.

Die skermnaam van die funksie sal telkens in hakkies () langsaaan die naam gegee word. Die vlakke van die opdrag hiërargie word met koppeltekens ge-skei in die beskrywing.

Die volgende (Generate-Tracking-Save) beteken dat die stoor funksie (save) van die spoormodule (Tracking) van die generator(generate) geroep word.

Die redigeerder.

Die redigeerder stelsel sal vervolgens bespreek word.

Die stelsel bied die gebruiker die funksie om 'n grammatika te genereer. Die generasie is interaktief en die gebruiker kan die rekenaar telkens gebruik om simbole te kies. Die integriteit van reëls en simbole word ook deurgaans deur die stelsel ondersoek en beheer. Die gebruiker word dus nie toegelaat om simbole wat nie bestaan nie in produksie-reëls te gebruik nie.

Die modules het die volgende funksies.

- Ontwerp



UNIVERSITY
OF
JOHANNESBURG

Redigeer grammatika. (Design-Edit)

Hierdie funksie redigeer 'n grammatika interaktief. Die gebruiker kies simbole vanaf lyste en bou reëls en boogspesifikasies op die wyse.

Stoor grammatika. (Design-Save)

Die grammatika wat ontwerp word kan gestoor word en later weer gelaai word. Dit kan ook gebruik word om gedeeltelike ontwerpe te stoor. Die grammatika word in dieselfde vorm as die interne voorstelling gestoor. Wanneer die grammatika dus gelaai word, word dit nie weer vertaal nie.

Lees grammatika. (Design-Load)

Hierdie funksie laai 'n grammatika vanaf die skyfspasie.

Voeg grammatikas saam (Design-merge).

Hierdie funksie bied ons die moontlikheid om twee grammatikas saam te voeg. 'n Samevoeging van alle simbole, boogspesifikasies en produksie-reëls word gemaak.

- Grammatika skrywer (Design-write).

Hierdie funksie dien as koppelvlak vir ervare gebruikers. Dit sal 'n interne voorstelling van die ontwerpmodule neem en na teks vertaal. Hierdie teks word dan na 'n leër geskryf. Die teks wat so gegeneer is kan dan in gewone teksredigeerders ingetrek word. Hierdie funksie is nuttig in die skryf van grammatikas vir dokumentasie doeleindes.

- Grammatika vertaler (Read)

Hierdie funksie neem teksleërs soos hierbo en vertaal dit na die interne koppelvlak. Dit dien as koppelvlak vir ervare gebruikers. 'n Ervare gebruiker mag dit verkies om die grammatika eers in 'n gewone teksredigeerder te ontwerp en dan in die stelsel te toets.

Die vertaler sal die gebruiker van alle foute verwittig. 'n Grammatika teks sal ook eers gelaai word as dit foutloos vertaal.

Die generator.

Dit is die funksie van die substelsel om die huidige grammatika te interpreteer en die struktuurgrafieke te bou.

Die proses geskied as volg.

- 1) Die gebruiker kies 'n simbool wat vervang moet word.
- 2) Die simbool word gevalideer. Dit beteken dat

- a) Die simbool moet 'n nie-terminaal simbool wees.
 - b) Daar moet produksie-reëls bestaan vir die simbool.
- 3) Indien die simbool geldig is, m.a.w. aan die bostaande vereistes voldoen word die produksie-reëls aan die gebruiker vertoon.
- 4) Die gebruiker kies 'n reël en dit word uitgevoer.

Transaksie-spoor.

Hierdie transaksie-spoor hou rekord van al die produksies wat op 'n struktuur uitgevoer is. Dit stel ons in staat om 'n aantal produksies terug te gaan en nuwe strukture te genereer. Die funksies wat die transaksie-spoor bied word nou beskryf.

1) Herspeel (replay).

Die funksie gebruik die transaksie-spoor om die generasie vanaf die beginsimbool tot by die huidige simbool te vertoon.

Die gebruiker kan die herspeel op enige stadium stop. Dit stel die gebruiker dan in staat om 'n nuwe struktuur vanaf daardie struktuur te genereer.

2) Terug (Back)

Dit neem die gebruiker een stap terug in die generasie geskiedenis.

3) Stoor (Save)

Die funksie stoor die spesifieke transaksie-spoor.

4) Laai (load)

Die funksie laai 'n transaksie-spoor. Wanneer 'n transaksie-spoor gelaai word, word toetse gedoen om te sien of die relevante grammatika ondersoek word. 'n Weergawe toets word ook gedoen om te sien of die transaksie spoor nie dalk

verouderd is nie. Die Herspeel funksie word geaktiveer en die struktuur vir die spesifieke geskiedenis word vertoon.

Die laai en stoor funksie bied dus vir die gebruiker die geleentheid om met verskillende struktuurgrafieke te eksperimenteer.

Grafiek skryf (write graph).

Hierdie module skryf 'n formele definisie van die huidige grafiek.

Hierdie module het slegs die een funksie .

9.3 Apparatuur.

Die apparatuur wat die stelsel ondersteun is die volgende.

IBM aanpasbare rekenaar.

Die stelsel ondersteun beide die 8086 en 80286 reeks mikroverwerkers.

Die stelsel ondersteun ook verder die numeriese ko-verwerkers van die onderskeie argitekture.

Die stelsel benodig Microsoft MS-DOS versie 2.00 of hoër.

'n Muis is 'n opsionele ekstra. Dit is egter baie handig om so 'n muis aan die stelsel te koppel aangesien dit die koppelvlak makliker maak om te gebruik.

9.4 Voorbeeld.

Die onderstaande voorbeeld gegenereer die voorstelling van 'n metaan molekule.

Om die grammatika te skep sal ons as volg te werk gaan:

- 1) Wys met die loper na die (Edit) funksie. Druk of die 'enter' sleutel of die linker knoppie op die muis.
- 2) 'n Keusegids sal verskyn. Die volgende opsies sal beskikbaar wees.

- 1) Add terminal - Voeg terminaal simbool by.
- 2) Add nonterminal - Voeg nie-terminaal simbool by.
- 3) Add rule - Voeg reël by.
- 4) Add arc - Voeg 'n boogspesifikasie by.
- 5) Define start - Definieer die beginsimbool.

Kies die opsies om die simbole en reëls by te voeg.

- 3) Kies die Exit opsie.
- 4) Kies nou die (generate) opsie.

Die beginsimbool sal in die uitvoer gebied verskyn.

Wys na die simbool met die loper.

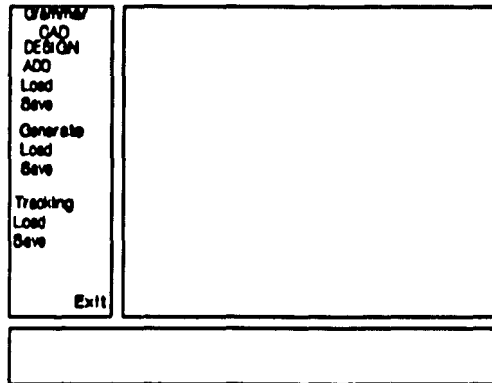
Die reëls wat op die simbool van toepassing is sal nou verskyn.

Kies 'n reël deur na hom met die loper te wys.

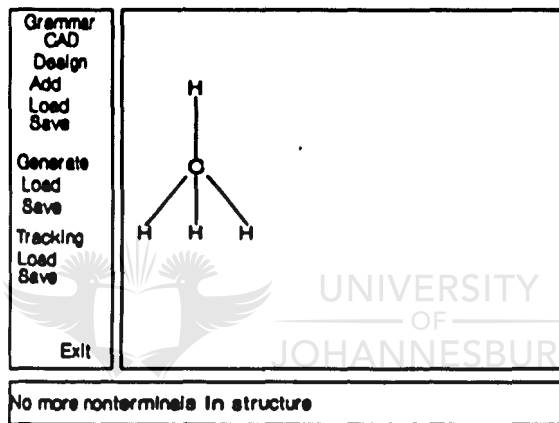
Kies vervolgens 'n nuwe simbool. Herhaal die proses todat die gewenste struktuur verkry is.

9.4.1 Voorbeelde

Die onderstaande sketse is voorbeelde van die skerm. Die onderskrifte sal die aksie beskryf wat op die skerm plaasvind of die aksies wat daartoe gelei het.



Figuur 9-2. Die skerm met die funksie.



Figuur 9-3. Skerm met gegenereerde metaan

9.5 Tegniese beskrywing van sommige van die algoritmes.

Slegs die interessante algoritmes sal hier bespreek word. Baie van die laai en stoor algoritmes is standaard C algoritmes. Die algoritmes wat wel bespreek sal word is die vertaler en die interpreteerder.

Die stelsel is in die C programmeertaal geskryf. Daar is van die TURBO C vertaler en ontwikkelingsomgewing gebruik gemaak. Daar is van C gebruik gemaak omdat dit 'n omgewing daar stel waarin die kode na ander bedryfstelsels oorgedra kan word. Die grafiese koppelvlak is egter die wat deur Borland verskaf word. 'n Oordrag na 'n ander bedryfstelsel of argitektuur sou oorskryf van sommige van die funksies noodsaak.

9.5.1 Die vertaler.

Die vertaler kan beskryf word as 'n sekwenšiele toestandsmasjien. Die toestand veranderingstabel word hieronder getoon. Dit is wel in die vorm huidige toestand, simbool, aksie, nuwe toestand.

Huidige Toestand	Simbool	Nuwe toestand	Aksie
cs_wait	N = {	cs_non_term	
cs_wait	T = {	cs_terminal	
cs_wait	A = {	cs_arcs	
cs_wait	R = {	cs_rules	
cs_wait	S = {	cs_start	
cs_nonterm	,	cs_nonterm	Voeg simbool by nie-terminaal simbole

Huidige Toestand	Simbool	Nuwe toestand	Aksie
cs_nonterm)	cs_wait	Voeg simbool by nie-terminaal simbole
cs_terminal	,	cs_terminal	Voeg simbool by terminaal simbole
cs_terminal)	cs_wait	Voeg simbool by terminaal simbole
cs_start)	cs_wait	Definieer begin simbool
cs_arc	(cs_arc_a1	
cs_arc_a1	,	cs_arc_a2	Voeg eerste boog by
cs_arc_a2	, cs_arc_ang	Voeg tweede boog by.	
cs_arc_ang)	cs_arc	Voeg hoek by boogbeskrywing

Huidige Toestand	Simbool	Nuwe toestand	Aksie
cs_arc)	cs_wait	
cs_rule	(cs_from	
cs_from	,	cs_to	Voeg eerste simbool reël in.
cs_to)	cs_rule	Voeg tweede simbool van reël in.

Bostaande is dan die algoritme wat gebruik word om teks na die interne voorstelling om te skakel.



UNIVERSITY
OF
JOHANNESBURG

Die interpreteerder.

Die interpreteerder of generator gebruik die bostaande grammatika se interne voorstelling om struktuurgrafieke te spesifiseer. Die simbool wat vervang word en die kies van reëls is reeds by die gebruikerskoppelvlak bespreek.

Wat interessant is, is die metode wat gebruik word om te bepaal watter produksies vir 'n simbool geldig is. Hierdie tegniek sal nou bespreek word.

Die boogspesifikasies wat beskou word, word bepaal deur te sien of die vervangings boogsimbool in enige van hulle voorkom. Na gelang van hierdie boogspesifikasies word die reël wat ondersoek word as volg getoets.

'n Vektor in drie dimensies word voorgestel deur (x,y,z) .

Die hoek tussen twee vektore word deur hulle puntproduk gegee.

$$A \cdot B = |A||B| \cos(\alpha)$$

α is dus die hoek tussen die twee vektore.

Indien ons dus een boog teen 'n sekere hoek met 'n ander wil plaas moet hulle puntproduk die hoek lewer soos hierbo.

Elke boog verkry dus 'n eenheidsvektor wat sy rigting aandui.

Indien ons dus drie vektore het nl. K L M en ons wil vektor X so plaas dat dit hoeke k_1, k_2 tot k_3 met K L en M onderskeidelik maak kan ons van die volgende gebruik maak om te bepaal in watter rigting vektor X sal lê.

As

$$K = (x_k, y_k, z_k)$$

$$L = (x_l, y_l, z_l)$$

$$M = (x_m, y_m, z_m)$$

$$X = (x_x, y_x, z_x)$$

word X gegee deur

$$x_x x_k + y_x y_k + z_x z_k = \cos(k_1)$$

$$x_x x_l + y_x y_l + z_x z_l = \cos(k_2)$$



$$x_x x_m + y_x y_m + z_x z_m = \cos(k_3).$$

Indien ons egter minder as drie boë het wat betrokke is kan ons dit as 'n eenvoudige platvlakkige probleem beskou.

In die geval van een boogspesifikasie kan ons die boog X op enige vlak met die hoek k plaas.

In die geval van twee boë kan ons die probleem vereenvoudig deur slegs vir twee veranderlikes op te los en die derde veranderlike na 0 stel.

Indien ons egter meer as drie boogspesifikasies het, kan ons die vergelyking vir enige drie oplos en dan kyk of dit die ander boogspesifikasies bevredig deur die dot produkte tussen X en hierdie boë te bepaal.

Indien 'n reël gekies word en hy voldoen aan die vereistes soos hierbo gestel, word hy in die rigting geplaas soos deur X bepaal. Die toets van kontekste is dus tweërlei van aard.

Dit bepaal eerstens die geldigheid van 'n reël en tweedens bepaal dit die rigting van die resulterende boog.

In die oplos van die vergelykings word van eenvoudige matriks tegnieke gebruik gemaak.

9.6 Gebruik van die ingeslote stelsel.

Ingeslote saam met hierdie verhandeling is 'n sagteskyf met die volgende lêers op:

GRACAD.EXE

METHANE.GTX

METHANE.GTC

METHANE.GHS

BENSEEN.GTX

BENSEEN.GTC

BENSEEN.GHS

Die lêers bevat elk die volgende inligting

GRACAD.EXE

Hierdie is die vertaalde weergawe van die "Grammar-cad" stelsel.

METHANE.GTX

Hierdie lêer bevat die grammatika teks vir 'n metaan molekule.

METHANE.GTC

Hierdie lêer bevat die interne voorstelling van die grammatika vir 'n metaan molekule.

METHANE.GHS

Hierdie lêer bevat die transaksie-spoor van die metaan molekule. Ingeslote is ook 'n voorbeeld van benseen wat in die onderste drie lêers voorkom.

BENSEEN.GTX

BENSEEN.GTC

BENSEEN.GHS

Om enige van die bogenoemde te genereer moet die volgende stappe gevolg word.

Sorg dat die stelsel op die A skyf gelog is .

Tik in GRACAD

Die hoofskerm (soos figuur 9.2) sal verskyn.

Plaas nou die loper op die Load opsie van die (Edit) funksie.

Plaas die loper op die gewenste lêer in venster wat verskyn.

Druk of die enter sleutel of die linker knoppie op die muis.

Plaas die loper op die "OK" raampie en druk enter (enter en die muis se linker knoppie verrig dieselfde funksie).

Die grammatika sal nou gelaai wees.

Plaas die loper op die generate funksie en kies dit.

Die beginsimbool sal nou verskyn.

Plaas vervolgens die loper op enige simbool en kies dit.

Die stelsel sal toepaslike reëls vertoon wat uitgevoer kan word.

Kies 'n reël en herhaal die vorige drie stappe totdat gewenste figuur verkry is.

Om 'n outomatiese generasie te sien kies die (load) keuse onder die (tracking).

Laai die toepaslike geskiedenis lêer.

'n Struktuur sal outomaties gegenereer word.

9.7 Opsomming

In die voorafgaande hoofstuk word die "Grammar-cad" stelsel oorsigtelik bespreek. Die gebruik van die ingeslote stelsel word ook bespreek.

Hierdie stelsel bied dus 'n grafiese manier om die resultate van 'n grammatika vir ons te gee.



Hoofstuk 10.

Gevolgtrekking.

Hierdie hoofstuk bevat 'n opsomming van die werk wat in die voorafgaande hoofstukke gedoen is. 'n Gevolgtrekking sal ook oor hierdie werk gedoen word.

In die voorafgaande hoofstukke is grafieke en grafiekgrammatikas bestudeer. 'n Belangrike eienskap van grafiekgrammatikas is dat dit string-grammatikas na twee dimensies uitgebrei het.

Daar is ook 'n studie gemaak van grammatikas wat strukture in drie dimensies voorstel. Hierdie tegnieke wat bestudeer is het egter sommige tekortkominge gehad. In die geval van OKSG's het ons gesien dat simbole in slegs 6 verskillende rigtings aan die rand van 'n figuur geplaas kan word.

In die verdere hoofstukke word struktuurgrafieke gedefinieer. Dit word gedoen om later te dien as basis waarop struktuurgrafiekgrammatikas gedefinieer word. Hierdie grammatikas genereer strukture in drie dimensies. Dit is egter so gedefinieer dat dit die beperkinge van die bogenoemde grammatikas oorkom.

Die verskille en eienskappe van struktuurgrafiekgrammatikas word ook bespreek.

Uit die bostaande werk kan ons die volgende gevolgtrekking maak. Die eienskappe van struktuurgrafiek leen hom goed daartoe om die rande van vlakke in drie dimensies te beskryf.

Strukturgrafieke kan ook soos in die geval van die modellering van chemiese molekules gebruik word om die relatiewe posisie van elemente in strukture te bepaal.

Uit die eienskappe van strukturgrafiekgrammatikas en die definisie daarvan sien ons dat die gebied homself leen tot verdere navorsing.

Navorsing kan onder andere gedoen word om 'n konteks te definieer op die pad van een nodus in 'n strukturgrafiek en 'n ander nodus. Die eienskappe van die grammatikas leen hulle ook goed daartoe in die modelering van chemiese molekules. Navorsing gebaseer op strukturgrafieke en strukturgrafiekgrammatikas om die eienskappe van atome te simuleer blyk 'n interessante studie veld te wees.



UNIVERSITY
OF
JOHANNESBURG

Bibliografie:

- 1) Ehlers E.M. & Von Solms S.H. Using random context structure grammars to represent chemical structures. *Inf. Proc. Letters*, 30, 159 - 166, (1989).
- 2) Rosenfeld A., Pfalz J, Web grammars, *Proc Joint. Int conf. on Artificial intelligence.*,(1969).
- 3) Janssens D. & Rozenberg G., Restrictions, Extensions and variations of NLC grammars. *Inf. sci.* 20, 217-244, (1980).
- 4) Janssens D. & Rozenberg G., On the structure of node label controlled graph languages. *Inf. sci.* 20, 191-216, (1980).
- 5) Ehrig H., Introduction to the algebraic theory of graph grammars (A survey) *Lec. notes in Comp. Sci.* 73,1-69, (1978).
- 6) Vigna P. D. & Ghezzi C., Context-Free graph grammars. , *Inf & Cont.* 37 207-233,(1978).
- 7) Cook C. R., First order graph grammars, *SIAM J .comp*, 3, 90 - 99,1974.
- 8) Rosen B.K., Deriving graphs from graphs by applying a production. *Acta Informatica* 4, 337-357, (1975).
- 9) Computer-aided drug design to save costs, *Computing S.A.*,12 June 1989.
- 10) Ehlers E.M., Random Context structure grammars and Automata, Ph.D Thesis, RAU, Johannesburg, 1986.
- 11) Ehrig H, Kreowski H.J., Applications of graph grammar theory to consistency, synchronization and scheduling in data base systems. *Inform. systems* 5, 225-238., (1980)
- 12) Rosenfeld A., Three-dimensional digital topology, *Inform. and Cont.*, 50, 119-127,(1981).

- 13) Abe N., Mizumoto M., Toyoda J, Tanaka K., Web grammars and several graphs., *Jour. Comp and Sys. sci.*, 7 , 37-65, (1973).
- 14) Pratt T. W., Pair grammars, Graph languages en string to graph translations., *Jour. Comp and Sys. sci.*, 5, 560-595, (1971).
- 15) Lin W., Fu K., 3D-plex grammars, *Inf. Sci.*, 34, 1-24, (1984).
- 16) Aalbersberg IJ. J., Rozenberg G., Ehrenfeucht A., On the membership problem for regular DNLC grammars., *Disc. Appl. Math.*, 13, 79-85, (1986).
- 17) Montanari U.G., Seperable Graphs, Planar Graphs and Web grammars., *Inf. and Cont.*, 16, 243-267, (1970).
- 18) Brink G., Glasser L., Computer modelling of hydrogen bonding: the state of the art., *S. Afr. tydskr. Chem.* 35, 105-110, (1982).
- 19) Jorgensen W.L., Structure and properties of liquid Methanol., *Jour. Am. Chem Soc.*, 102, 543-549, (1980).
- 20) Leyton M., A Process-Grammar for shape, *Artificial Intelligence.*, 34, 213-247, (1988).



UNIVERSITY
OF
JOHANNESBURG