РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК ДАЛЬНЕВОСТОЧНОЕ ОТДЕЛЕНИЕ ИНСТИТУТ АВТОМАТИКИ И ПРОЦЕССОВ УПРАВЛЕНИЯ

На правах рукописи

Артемьева Ирина Леонидовна

МНОГОУРОВНЕВЫЕ МОДЕЛИ СЛОЖНО-СТРУКТУРИРОВАННЫХ ПРЕДМЕТНЫХ ОБЛАСТЕЙ И ИХ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПРИ РАЗРАБОТКЕ СИСТЕМ, ОСНОВАННЫХ НА ЗНАНИЯХ

05.13.17 - теоретические основы информатики

Дисс ертация на соискани е уч еной степени доктора техниче ских наук

Научный консультант - д.ф.-м.н., проф е ссор А.С.Клещев

Владивосток

2008

Содержание

Введение 6

Глава 1. Сущ е ственны е свойства сложно структурированных 15

пр е дм етных област ей и структура их онтологий

1. Пр е дм етны е области и их сущ е ственны е свойства 15
2. Объ екты и в еличины предм етной области 16
3. Действительность пр едм етной области 21
4. Конц е птуализация и онтология де йствит ельности 26
5. Система знаний пр едм етной области. Онтология знаний. 29

Онтология пр дм тной области

1. Сложно структурированны е предм етные области и их 41

свойства

1. Опр едел ение сложно структурированной пр едм етной 41

области

1. Свойства онтологии сложно структурированной 43

пр дм тной области

1. Свойства мод ел ей сложно структурированных 49

пр едм етных областей и тре бования к языку для их

пр дставл ния

1. Сущ е ствующи е опр е дел е ния мод ел ей онтологий и языки 51

для их пр дставл ния

1. Методы анализа пр едм етных областей 58
2. Оболочки систем, основанных на знаниях 65
3. Выводы 69

Глава 2. Многоуровневы е модели сложно-структурированных 71

пр е дм етных област ей

1. Н е обогащ енны е систе мы логич е ских соотнош ений уровня 71

m

1. Опр е д ел ени е понятий уровня m и связ е й м е жду ними 72

2.1.2.Определение парам етров уровня m 77

1. Опр е д ел ени е конструкторов сортов уровня m 78
2. Функция интерпр етации им ен 80
3. Обогаще ни е н е обогащ е нной сист е мы логич е ских 82

соотнош ний

1. Обогащенны е системы логиче ских соотношений 87
2. Многоуровневая система логиче ских соотношений 88
3. Адекватность модели и пр едм етной области 90
4. Классы сист е м логич е ских соотнош е ний 93
5. Отнош ения на множ е стве систе м логич е ских соотнош е ний 97
6. Опр е д ел е ни е класса языков прикладной логики 106
7. Обсужд е ни е 109

[Г лава 3. Методы анализа сложно-структурированных 110](#bookmark0)

пр е дм етных област ей

1. Метод "снизу вверх” 110
2. Метод "сверху вниз" 116
3. Использовани е уже постро е нных онтологий и их мод ел ей 120
4. У проще ни е (огру бл е ни е) мод ел е й 121
5. Классы пр е дм етных област ей 123
6. Инт еграция онтологий, знаний и их мод ел е й 124
   1. Анализ задач 126
   2. Анализ методов решения задач 130
   3. Обсужд е ни е 132

Глава 4. Многоуровн е вая мод ель пр е дм етной области "Химия" 133

1. Мод ель онтологии ч етв ертого уровня 134
2. Мод ель онтологии тр етьего уровня 145
3. [Модель онтологии треть его уровня для физич еской 146](#bookmark12)

химии

1. Модель онтологии треть е го уровня для органич е ской 155

химии

1. Модель онтологии треть е го уровня для р е нтг е но- 165

флуор сц нтного анализа

1. Мод ель онтологии второго уровня 169
2. Обсужд е ни е 174

Глава 5. Методы разработки специализированных оболочек 176

инт лл ктуальных сист м для сложно­структурированных пр едм етных областей

1. Тре бования к сп ециализированным оболочкам систем, 176

основанным на знаниях, для сложно-структурированных пр е дм етных област ей

1. Требования к редакторам информационных компонентов 177
2. Тр ебования к системам для р ешения прикладных задач 180
3. Обе спеч ение адаптации к изм енениям пр едм етной 182

области

5.2. Архитектура специализированных оболочек для сложно- 184

структурированных пр едм етных областей

1. Редакторы информационных компонентов 185
2. Системы для р ешения классов прикладных задач 187
3. Подсистема сопровождения сп ециализированной 189

оболочки

1. Методы реализации специализированной оболочки 190
2. Методы р е ализации подсист ем подд ержки библиот е к 191
3. Определение структуры базы данных для хранения 193

информационных компон нтов

1. Разработка р е дакторов информационных компон ентов 195
2. Разработка систем для решения классов прикладных 199

задач

1. Обсужд е ни е 201

Глава 6. Специализированны е оболочки для пр едметной 202

области "Химия”

1. Специализированная оболочка систем, основанных на 202

знаниях, для физиче ской химии

1. Специализированная оболочка для р ентгено- 210

флуор е сцентного анализа

1. Специализированная оболочка систем, основанных на 215

знаниях, для органич ской химии

1. Специализированная оболочка, интегрирующая онтологии 218

и знания разных разд лов химии

1. Обсуждение 222

Глава 7. Т хнология создания и сопровожд ния расширя мой 224

сист мы, основанной на знаниях, с использовани м сп циализированной оболочки

1. Т ехнология создания и изм е н ения информационных 224

компон нтов

1. Создани е информационных компон е нтов 224
2. Изм енение информационных компонентов 233
3. Т ехнология изм енения состава программных компонентов 235
4. Использование методов анализа предметных областей, 242

создания специализированных оболочек и технологии их

сопровожд ния в отличных от химии областях

|  |  |
| --- | --- |
| 7.4. Обсужд е ни е | 245 |
| Заключение | 247 |
| Список литературы | 250 |
| Приложение 1 | 277 |
| Приложение 2 | 297 |
| Прилож ни 3 | 320 |
| Прилож ни 4 | 377 |
| Прилож ни 5 | 390 |
| Прилож ни 6 | 408 |
| Прилож ни 7 | 451 |
| Прилож ни 8 | 461 |
| Прилож ни 9 | 464 |
| Прилож ни 10 | 469 |

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность проблемы

Одним из классов программных систем являются системы, основанные на знаниях (СОЗ), отличительная особенность которых состоит в том, что знания, не обходимые для выполнения профе ссиональной деятельности, отдел ены в этих системах от программ для решения прикладных задач. Система, база знаний которой пуста, называется оболочкой СОЗ. Разработка СОЗ предполагает создание ее оболочки. Сопровождение СОЗ предполагает сопровождение ее базы знаний без изменения программ для решения задач. Использование СОЗ дает преимущества в трудно-формализуемых предметных областях при решении задач диагностики, проектирования, планирования и управления, опр еделения классов объ ектов по описаниям их свойств и т.д. При разработке СОЗ должны быть получены ответы на следующие вопросы: как представить знания пр дм тной области, как их использовать при р ш нии задач, как сопровождать базу знаний. Чем сложнее предметная область, тем сложнее разработка СОЗ и сопровождение е е базы знаний.

Большой вклад в разработку методов создания систем, основанных на знаниях, внесли Г.С. Поспелов, Д.А. Поспелов, Э.В. Попов, В.Ф. Хорошевский, В.К. Финн, В.П. Гладун, В.В. Голенков, В.Н. Вагин, Г.С. Осипов, Т.А. Гаврилова, А.П. Ереме ев, А.С. Клещев, В.Л. Сте фанюк, Н.Г. Загоруйко, Г.В. Рыбина, А.С. Нариньяни, N. Guarino, van Heijst, D.B. Lenat, J. Sowa, M.A Uschold, B.Wielinga, и многие другие.

К настоящ му вр м ни разработаны мод ли пр дставл ния знаний в вид систем фреймов, семантических сетей, систем продукций. Системы фреймов и с емантич е ские с ети позволяют описать структуру объ ектов предм етной области и связи между ними. Системы продукций (правил) используются для пр дставл ния знаний пр дм тной области в вид утв ржд ний " сли-то". На основ мод л й пр дставл ния знаний разработаны различны языки представления знаний, которые являются входными языками универсальных оболочек, используемых при создании систем, основанных на знаниях. Универсальная оболочка фиксиру ет способ использования знаний при р е ш е нии задач. Суще ствуют также системы, в которых структура объ ектов пр едм етной области зада тся с мантич ской с тью или сист мой фр ймов, а правила решения задач - множеством продукций. Сопровождение базы знаний для систем, созданных с использованием универсальных оболочек, выполняет инженер знаний. Однако наличие посредника (инженера знаний) затрудняет создание и изм е не ние базы знаний, поэтому возникает вопрос: как обе спечить редактирование знаний экспертом б ез участия поср едника?

Ответ на данный вопрос дают специализированные оболочки, в которых при пр дставл нии знаний использу тся сп цифичная для пр дм тной области конц птуальная сх ма, опр д ля мая онтологи й той области, для которой созда тся оболочка. Онтология зада т сист му понятий и связи м жду ними, т. . терминологию, понятную эксперту предметной области. Существуют сп циализированны оболочки, разработка которых основана на м таонтологии пр дм тной области, в т рминах которой опр д ляются онтологии н скольких разделов данной области. Информационным компонентом специализированной оболочки явля тся база знаний, а программными компон нтами - р дактор знаний, основанный на онтологии (или метаонтологии), система логического вывода (р шат ль класса прикладных задач), сист ма ввода исходных данных задач, а также система вывода и объяснения р езультатов р ешения. При создании специализированной оболочки обычно фиксируется класс прикладных задач. Р ешатель задач р е ализует м етод решения задач этого класса.

Явное представление онтологии предметной области в информационных компон нтах СОЗ д ла т понятными и повторно использу мыми знания, хранящие ся в баз е знаний СОЗ. В настоящ е е вр е мя сущ е ствуют м етоды создания онтологий, разработки р дакторов знаний, управля мых онтологиями, и специализированных оболочек. Для формального представления онтологий пр длага тся использовать языки логики п рвого порядка и компьют рны языки. Многие из компьютерных языков для пр едставления онтологий имеют средства для представления понятий (часто называемых классами), их таксономии, определения аксиом. Онтология вместе с набором экземпляров классов составляет базу знаний.

Однако остался ряд не решенных проблем. Существуют сложно­структурированные предметные области, имеющие сложную концептуальную сх му, свойства которой н учитывают сущ ствующи языки для пр дставл ния онтологий и м тоды создания онтологий. В сложно-структурированных предметных областях, особенно связанных с наукой, могут изменяться не только знания, но и онтологии, и, как сл дстви , множ ство классов прикладных задач. Однако методы создания специализированных оболочек, которые допускали бы изменение множества классов задач, решаемых системой, основанной на знаниях, из литературы не изв е стны.

В связи с вышесказанным актуальными являются исследования, направл нны на р ш ни пробл мы создания расширя мых сп циализированных оболоч к сист м, основанных на знаниях, для сложно­структурированных пр дм тных област й, которы позволяли бы создани и изменение базы знаний и онтологии пр едметной области, а также поддерживали м еханизмы расширения множе ства классов прикладных задач.

Целью работы является разработка теоретических основ и методов создания сп циализированных оболоч к расширя мых сист м, основанных на знаниях, для сложно-структурированных пр дм тных област й.

Для достижения поставленной в дисс ертационной работе цели не обходимо решить следующие задачи.

1. Иссл едовать сущ е ств е нны е свойства сложно-структурированных предметных областей и в соответствии с ними определить устройство их онтологий.
2. Разработать класс математических соотношений (декларативных моделей), которые могут использоваться при моделировании онтологий и знаний сложно-структурированных пр дм тных област й, а такж язык для представления этих соотношений.
3. Разработать м тоды анализа сложно-структурированных пр дм тных област й.
4. Разработать многоуровн вую мод ль р альной сложно­структурированной пр едм етной области, состоящ е й из не скольких разд елов.
5. Разработать конц пцию и м тоды р ализации расширя мых сп циализированных оболоч к сист м, основанных на знаниях, для сложно­структурированных пр дм тных област й.
6. На основе концепции и методов реализации разработать сп циализированную оболочку для р альной сложно-структурированной пр дм тной области.
7. Разработать т хнологию создания и сопровожд ния расширя мой сист мы, основанной на знаниях, с использовани м сп циализированной оболочки, а такж пров сти эксп рим нтально иссл довани .

Обоснованность результатов. Научные положения и выводы дисс ертации обоснованы с использовани м м тодов дискр тной мат матики, мат матич ской логики, те ории множе ств, те ор етиче ских основ программирования и пров ерены при создании программных сист м.

Методы исследования. Проводимые в работе теоретические и практические исследования базируются на методах системного анализа, искусственного интеллекта, математической логики, теории множеств, теории алгоритмов и исчислений, технологии программирования.

Научная новизна. Основной р езультат дисс ертационной работы состоит в теоретической разработке и практическом решении проблемы создания расширя мых сп циализированных оболоч к для сложно-структурированных предм етных областей. При этом впервые получены следующие р езультаты:

* пр едложе н класс мате матич е ских соотнош е ний (д е кларативных мод ел е й), которы могут использоваться при мод лировании онтологий и знаний сложно­структурированных предм етных областей;
* разработан класс логических языков для представления декларативных мод л й сложно-структурированных пр дм тных област й, вс языки которого им ют общ ядро, каждый язык использу т свой набор расшир ний, что позволя т при пр дставл нии мод ли сложно-структурированной области опр д лять язык, обладающий тр бу мым для данной области набором мат матич ских символов;
* разработаны методы «снизу вверх» и «сверху вниз» анализа сложно­структурированных предметных областей; метод анализа "снизу вверх” пр дназнач н для обобщ ния одноуровн вых онтологий разд лов сложно­структурированной пр дм тной области до многоуровн вых и получ ния онтологии верхнего уровня, определяющей схему анализа "сверху вниз" для новых разд лов данной области, при котором онтологии новых разд лов представляются как конкр етизации онтологии в ерхнего уровня;
* разработана четырехуровневая модель сложно-структурированной предметной области "Химия", охватывающая физическую и органическую химию, а также раздел р ентгено-флуор е сцентного анализа;
* разработана общая архитектура расширяемых специализированных оболоч к сист м, основанных на знаниях, для сложно-структурированных предметных областей; определены механизмы их расширения; разработаны м тоды р ализации сп циализированных оболоч к.

Практическая ценность работы заключается:

* в разработке моделей онтологий физич е ской и органиче ской химии и рентгено-флуор е сцентного анализа, а также четырехуровневой модели химии, охватывающей указанные разделы;
* в разработке расширя емой специализированной оболочки для физич е ской химии, пр дназнач нной для создания сист м, основанных на знаниях, позволяющ ей интегрировать онтологии и знания разных разделов физиче ской химии, а также автоматически формировать системы для решения вычислит льных задач указанного разд ла химии;
* в разработк расширя мой сп циализированной оболочки для химии, пр дназнач нной для создания сист м, основанных на знаниях, для данной области, позволяющей интегрировать онтологии, знания и решатели прикладных задач для разных разд лов химии; в использовании этой оболочки для создания сист мы, основанной на знаниях, инт грирующ й онтологии, знания и решатели прикладных задач разделов физической и органической химии, а такж р нтг нофлуор сц нтного анализа;
* в разработк т хнологии создания и сопровожд ния сист мы, основанной на знаниях, с использовани м расширя мой сп циализированной оболочки;
* в использовании теоретических результатов диссертационной работы в научной работе сотрудников отдела интеллектуальных систем Института автоматики и процессов управления Дальневосточного отделения РАН и каф едры программного обе спечения ЭВМ Дальневосточного государственного унив ерситета при разработке моделей онтологий разных пр едметных областей;
* в использовании те ор етич е ских р езультатов дисс ертационной работы при чтении курсов лекций по дисциплинам "Системы искусственного интеллекта", "Диалогово е р едактирование баз знаний и экспертны е систе мы", "Компьютерная обработка знаний" для студентов института математики и компьютерных наук Дальневосточного государственного университета (г. Владивосток) и института технологии и бизне са (г. Находка); в использовании теоретических результатов диссертационной работы и методов создания сп циализированных оболоч к в уч бном проц сс и при выполн нии курсовых и дипломных работ студентами кафедры программного обеспечения ЭВМ Дальневосточного государственного унив ерситета.

Обоснование и достоверность полученных результатов. Обоснование и достоверность научных положений, выводов и практических результатов подтв ерждена практич е ским использованием пр едложенных в дисс ертационной работе моделей и методов при выполнении анализа сложно-структурированных пр дм тных област й и создании сп циализированных оболоч к расширя мых сист м, основанных на знаниях.

Реализация результатов работы. Материалы дисс ертации использовались в уче бном проце сс е на базовой каф едр е программного обе спечения ЭВМ (ПО ЭВМ) Дальневосточного государств енного унив ерситета (ДВГУ) при Институте автоматике и процессов управления (ИАПУ) ДВО РАН при чтении курса лекций по дисциплинам "Модели знаний и экспертные системы", "Системы искусстве нного интелл е кта", "Диалоговое р едактирование знаний и экспертны е систе мы", "М етоды ре ш е ния задач в систе мах, основанных на знаниях", "Компьют рная обработка знаний", "Разработка инт лл ктуальных сист м", "Основы анализа и формализации информации", а также при создании уче бных сист м, основанных на знаниях, при выполн нии курсовых и дипломных работ студентами каф едры ПО ЭВМ; в Институте технологии и бизне са (г. Находка) при чтении курса лекций по дисциплинам "Математические основы информатики", "Системы искусственного интеллекта", "Компьютерная

обработка знаний" и создании студ нтами сист м, основанных на знаниях; при разработке онтологии и ее модели для предметной области "Оптимизация посл едовательных программ" в ДВГУ; разработанны е программны е систе мы используются в Институт химии ДВО РАН, в ООО "Триумф", Дальне восточном государств е нном технич е ском университе те (г. Владивосток).

Апробация работы. Основны полож ния и р зультаты работы докладывались и обсуждались на сл дующих м ждународных и от ч ств нных конференциях и семинарах: Pacific Int.Conf "Mathematical Modelling and Cryptography" (Владивосток, 1995), 4-ая Международная конфер енция "Non­Standard Logics and Logical Aspects of Computer Science", (Иркутск, 1995), II Междун. научно-техн. конф. "Интерактивные системы: проблемы человеко­компьютерного взаимод е йствия" (Ульяновск, 1997), Дальне вост. мате м. шк.- сем. им. акад. Е.В.Золотова, (Владивосток, 1997, 2001-2004, 2007), 4 World Congress on Expert systems (Mexico, 1998), Тр етий Сибирский конгр е сс по прикладной и индустриальной мате матике (Новосибирск, 1998), Slovenian- Russian Workshop on Software (Владивосток, 1998), The Pacific Asian Conference

on Intelligent systems (Seul, Korea, 2001), 3-й Всерос. Internet-конф.

«Компьютерное и математическое моделирование в естественных и техниче ских науках» (2001), 8-ой, 9-ой, 10-й и 11-й национ. конф. по искусстве нному интелл е кту с м еждународным участие м (Коломна, 2002, Тв ерь, 2004, Обнинск, 2006, Дубна, 2008), М ждународной конф р нции "Knowledge- Dialog-Solution" (Ялта, 1997, Varna, Bulgaria, 2003, 2005-2008), Международной конференции "Интеллектуальные и многопроцессорные системы" (Кацивели, 2000, 2004-2007), Международной конференции "Системный анализ и

информационные технологии" (Переславль-Залесский, 2005, Обнинск, 2007), научной сессии МИФИ (Москва, 2006-2008), II Международной конференции по когнитивной науке (Санкт-Петербург, 2006), Международной конференции «Знания-Онтологии-Теория» (Новосибирск, 2007), IV Международной

конф еренции "Параллельные вычисления и задачи управления" (Москва, 2008), совместном семинаре института систем информатики и ВЦ СО РАН (Новосибирск, 2003), с е минаре института мате матики СО РАН (Новосибирск, 2003), семинаре Российской ассоциации по искусственному интеллекту "Проблемы искусственного интеллекта" (Москва, 2007), совместных научных семинарах отдела интеллектуальных систем ИАПУ ДВО РАН и кафедры программного об е спеч ения ЭВМ ДВГУ (1995-2007).

Публикация результатов работы. Основные результаты диссертации представлены в работах [3, 5-9, 12-21, 37-61, 86-90, 145-146, 197-204], из них [12, 16-17, 21, 40, 53, 57-58, 86-90] опубликованы в журналах, входящих в П ер ечень ВАК.

Под руководством автора и по тематике исследований защищены три кандидатские диссертации по специальности 05.13.11: [121, 125, 136].

Структура и объем работы. Дисс ертационная работа состоит из введения, с е ми глав, заключ е ния, списка литературы и 10 приложе ний. Основно е содержание работы изложе но на 276 страницах. Список литературы включает 251 наиме нование.

В первой главе дисс ертации исследованы суще ств енные свойства сложно­структурированных пр дм тных област й и опр д л но устройство их онтологий. В ней также рассматриваются суще ствующие опр еделения понятия "онтология", языки представления онтологий, методы анализа предметных област й, сущ ствующи оболочки сист м, основанных на знаниях и программные систе мы, созданные на основ е онтологий.

Во второй главе диссертации определен класс математических соотношений (декларативных моделей), которые могут использоваться при мод лировании сложно-структурированных пр дм тных област й, а такж язык для пр едставления этих соотнош ений.

В третьей главе диссертации описаны м тоды анализа сложно­структурированных пр дм тных област й.

Четвертая глава диссертации посвящена разработке многоуровневой онтологии р альной сложно-структурированной пр дм тной области, состоящ е й из не скольких разделов. В кач е стве такой области в работе используется химия. Примерами ее разделов являются физическая, органиче ская и аналитиче ская химия.

В пятой главе разработаны тр бования к сп циализированным оболочкам сист м, основанных на знаниях, для сложно-структурированных пр дм тных областей, приведена общая архитектура специализированных оболочек, разработаны м тоды их р ализации.

Шестая глава диссертации содержит описание специализированных оболочек для предметной области "Химия", созданных с использованием м тодов главы 5. В работ разработаны сп циализированны оболочки сист м, основанных на знаниях, для физической и органической химии, для раздела рентгено-флуоресцентного анализа, а также специализированная оболочка, интегрирующая онтологии, знания и программные системы указанных разделов химии.

Седьмая глава дисс ертации сод ержит описание технологии создания сист м, основанных на знаниях, для сложно-структурированных пр дм тных областей и р езультаты е е экспериментального исследования.

В заключении приведены р езультаты работы.

Приложения содержат определение ядра языка прикладной логики, стандартного и сп циализированных расшир ний языка, мод ли онтологий уровня 2 для физической и органической химии, а также рентгенофлуоресцентного анализа, фрагм ент модели знаний физич е ской химии, постановки классов задач и сп цификации м тодов их р ш ния для органической химии, примеры спецификаций задач для физической химии, сценарий диалога трехуровневого редактора онтологий и знаний химии, прим ры структур таблиц базы данных для пр дставл ния онтологий и структурированных знаний, мод ль языка конфлюэнтных продукций.

Личный вклад автора. Все результаты, составляющие основное содержание дисс ертации, получ е ны автором самостоятельно. В работе [52] автору принадлежит определение многоуровневой онтологии для химии. В работах [16-20, 40, 42, 51, 53-54, 59] автору принадлежит определение онтологии и ее модели для физической и органической химии, а также рентгенофлуоресцентного анализа. В работах [37-39, 55] автору принадлежит опр д л ни м тодов использования многоуровн вых мод л й при создании спе циализированных оболоч е к систе м, основанных на знаниях. В работах [21, 41, 43-50, 60] автору принадл жит опр д л ни м тодов создания

инт лл ктуальных сист м для разных разд лов химии на основ многоуровн вых мод л й. В работ [56] автору принадл жит опр д л ни мод ли модульного языка конфлюэнтных продукций. В работах [57-58] автору принадл жит опр д л ни м тодов создания сист мы, основанной на правилах и м етодов управления проце ссом логиче ского вывода в ней. В работах [86-90, 196-197, 200-204 автору принадл ежит опр ед ел е ние мате матич е ского аппарата для пр едставления моделей онтологий.

ГЛАВА 1. СУЩЕСТВЕННЫЕ СВОЙСТВА СЛОЖНО­СТРУКТУРИРОВАННЫХ ПРЕДМЕТНЫХ ОБЛАСТЕЙ

Разработке программной системы для автоматизации процесса р ш ния задач в сложной пр дм тной области вс гда пр дш ству т постро ни мод ли проф ссиональной д ят льности этой области, которая сод ржит мод ль пр дм тной области и мод ли прикладных задач, а такж методы решения этих задач. Модель может быть неформальной или формальной. Формально описани позволя т пр дставить вс свойства пр дм тной области и задач и позволя т прим нить формальную процедуру для проверки адекватности модели объекту моделирования. Построение модели профессиональной деятельности предполагает выполн ни анализа. Свойства пр дм тных област й опр д ляют

основны е свойства программных систем для них.

В данной главе анализируются свойства сложно-структурированных пр едм етных областей, определяются свойства их моделей, формулируются тр бования к языку пр дставл ния мод л й, рассматриваются сущ ствующи ср дства пр дставл ния мод л й, сущ ствующи м тоды анализа предметных областей, приводится структура оболочек систем, основанных на знаниях, и рассматриваются их особ нности для сложно­структурированных областей.

1. Пр е дм етны е области и их суще ств е нны е свойства

Модель некоторого объекта моделирования всегда представляет его сущ ств нны свойства. Поэтому для опр д л ния класса мод л й, которые требуются для моделирования некоторого класса объектов, необходим анализ свойств объектов этого класса. Традиционно свойства объекта моделирования описаются в содержательных терминах, в мат матич ских мод лях пр дставляются с использовани м языка математики, а в компьютерных моделях (программах) - с использованием ср едств какого-либо из языков программирования.

В работе в качестве объектов моделирования выступают сложно­структурированные предметные области. Задача данной главы состоит в определении свойств таких областей. Поскольку класс сложно­структурированных област й явля тся подклассом пр дм тных област й, то вначале анализируются свойства предметных областей, а потом опр д ля тся их подкласс.

При описании свойств пр дм тных област й используются пр едположения об их свойствах, опр еделенны е в работах [22-23, 29]; при описании свойств онтологий предметных областей использованы работы [88-90, 197, 203-204]. Свойства сложно-структурированных пр е дм етных областе й привед е ны в работах [9, 145-146].

1. Объ е кты и величины пр е дм етной области

Каждая предметная область (ПО) характеризуется тем, что в ней протекает специфиче ская для не е проф ессиональная деятельность, которая состоит в решении задач.

В ПО может быть выделено множество объектов ПО, которые связаны с профессиональной деятельностью в этой ПО. При решении задач вс гда использу тся н которая информация об этих объ ктах и происходит п ер еход от объ е ктов ПО к пр е дставл ению информации о них (или к информационным объектам), т.е. к представлению информации в виде отображения конечного множе ства терминов jti, ..., tm} во множе ство значений. В работах [85, 101] такое отображение названо вербальным пр дставл ни м информации.

Прим ером объ е кта, связанного с проф е ссиональной д еятельностью в пр е дм етной области "Химия", явля ется химич е ский проц е сс. Информация

о химиче ском проце ссе задает число шагов проце сса, множества веще ств - участников каждого шага проце сса, множе ства р е акций, им евших м е сто на каждом шаге процесса, условия, при которых проходил химический проц е сс [53]. Другим прим ером объ е кта явля ется химич е ское со е дин е ни е. Информация о со дин нии опр д ля т различны свойства этих соединений, например, температуру замерзания или кипения, множество химич е ских эл е м е нтов, входящих в состав соедин ения [18]. Объ е ктом такж явля тся химич ская р акция, информация о которой зада т условия прохождения реакции (границы температур и давления, при которых р акция мож т им ть м сто), длит льность р акции, катализаторы реакции, возможны е пути прохождения р е акции, химиче ские со единения, играющи е роль р е аг е нтов и р е зультатов р е акции [20, 51].

Знач ни , сопоставл нно т рмину, принадл жит н которой в личин [29]. Мате матич е ской мод елью величины явля ется моносортная или многосортная алгебраическая система. В программах величине соотв тству т тип данных. Каждая в личина (алг браич ская сист ма и тип данных) характеризуется конечным или бесконечным множеством знач ний, кон чной совокупностью функций и оп раций (функций от двух аргументов), обозначаемых специальными терминами и выполняемых над знач ниями этой в личины, а такж кон чной совокупностью н функциональных отнош ний, в которых знач ния этой в личины могут находиться м жду собой. Отнош ния обозначаются сп циальными т рминами.

В личины могут быть простыми или сложными. Простая в личина - это сист ма, состоящая из кон чной совокупности оп раций, функций и отношений (обозначаемых специальными терминами), а также множе ства тех и только тех значений, которые могут быть аргументами этих оп ераций, функций и отнош е ний, прич е м р е зультат прим е н ения любой из этих оп раций или функций к этим аргум нтам принадл жит этому ж множ ству (свойство замкнутости).

Сложная величина - это система, состоящая из множе ства знач ений этой в личины, кон чной совокупности оп раций, функций и отнош ний (обозначаемых сп ециальными терминами), а также конечной совокупности (простых и/или сложных) величин, элементы которых могут быть аргументами этих операций, функций и отношений, прич ем для каждого аргумента каждой операции, функции и отношения определено, эл ементом какой из этих в личин он мож т быть, а для р зультата прим н ния любой из этих оп раций или функций к этим знач ниям аргум нтов опр д л но, какой из этих в личин он принадл жит (свойство замкнутости). С каждой сложной в личиной н явно связан конструктор знач ний этой в личины из эл м нтов в личин - компон нтов.

Вс разм рны знач ния с одной и той ж разм рностью образуют простую размерную величину относительно операций сложения и вычитания. Все разм ерные значения произвольных разм ерностей образуют сложную размерную величину. Размерные величины были введены в физик , однако используются они практич ски во вс х пр дм тных областях. Размерные величины связаны со способом получения информации о знач нии поср дством изм р ния, т. . сопоставл ния го с эталоном.

Любое разм ерно е значение пр едставляется парой, состоящей из числа и обозначения эталона измерения. Обозначение эталона называется размерностью. Размерность представляется алгебраическим одночленом (произв д ни м ст п н й п рвичных разм рност й). П рвичная размерность - это некоторый термин. Безразмерная размерность - это любая первичная размерность в нулевой степени. Над элементами размерной величины определены операции +, -, \*, / и отношения <,>,=, <, >, ^, при выполнении которых учитываются правила согласования разм ерностей. При п ереходе к математиче ской и компьютерной моделям происходит "отбрасывание" размерностей при условии, что в моделях все соотноше ния м е жду разм ерными понятиями опр е дел е ны корректны. Поэтому при анализ пр дм тной области важно опр д лить использу мы размерные величины, а при "отбрасывании" размерностей в моделях проверить правильность использования операций.

Математической моделью размерной величины является

алг ебраич е ская систе ма чис ел - моносортная алг ебраич е ская сист е ма [109], носителем которой является множество всех вещественных чисел и которая замкнута относительно арифметических операций и отношений. Компьют рной мод лью разм рной в личины явля тся в щ ств нный тип данных.

Другим способом получ ния информации о знач нии явля тся

ид нтификация - узнавани объ кта или знач ния го свойства наблюдат л м, н поср дств нно (с помощью органов чувств) или с помощью эксп ертизы. При ид ентификации информация пр е дставля ется скалярным знач ни м, т. . н которым т рмином (наприм р, цв т мож т быть красным, желтым, зеленым и т.д.). Простую скалярную величину образует множество скалярных значений, используемых при идентификации некоторого свойства. Для скалярных величин множество операций пусто, а множе ство отношений содержит отношения равенства и неравенства. Скалярные величины замкнуты относительно указанных отнош ний.

Мат матич ской мод лью скалярной в личины явля тся

алгебраиче ская система скалярных значений - моносортная алгебраиче ская система, носителем которой является некоторое конечное множество скалярных знач ний, и которая замкнута относит льно отнош ний равенства и неравенства. В компьютерных моделях скалярной величине соответству ет тип данных "п еречисл е ни е".

Примерами сложных величин являются величина множеств,

отображ ний, объ дин нная и структурная в личина, в личина посл едовательност е й [29]. Мате матич е ской мод елью сложной в еличины является многосортная алгебраиче ская система, а компьютерной моделью - н епримитивный тип данных.

Смысл (значения) обозначений операций, функций и отношений, связанных с н которой в личиной, опр д ля тся явно в т рминах мат матики при опр д л нии этой в личины и н зависит от вербализуемой информации, представляемой с помощью этих значений.

Ср ди вс х возможных в личин можно выд лить множ ство в личин, которы часто используются в ход проф ссиональной д ят льности. Такими в личинами являются разм рны и скалярны в личины, в личины множе ств и отображений, объединенны е и структурные в еличины, а также величины последовательностей. Будем называть такие величины стандартными.

Кром е стандартных в еличин в проф е ссиональной деятельности могут использоваться нестандартные величины. Нестандартная величина явля тся сложной в личиной. Для опр д л ния тр бу тся задать способ конструирования эл м нтов этой в личины, опр д лить в личины- компон нты н стандартной в личины, эл м нты которых используются в пр дставл нии эл м нтов этой в личины, а такж опр д лить оп рации, функции и отноше ния, прим е нимы е к эл е м е нтам в еличины. Прим ером н е стандартной в еличины явля ется г е ографич е ская в еличина [29]. С помощью эл м нтов н стандартных в личин задаются структурны формулы органич ских со дин ний и функциональных групп, эл е м е нтарны е формулы химич е ских со е дин е ний [16-18]. Н е стандартные в личины пр дставляются в мат матич ских мод лях многосортными алг браич скими сист мами, а в программах р ализуются с помощью непримитивных типов данных или классов в объектно-ориентированных языках [67].

Используемый набор величин является важным свойством пр едм етной области, поскольку он опр еделяет множе ство математиче ских терминов (используемых для обозначения значений величин, мат ематич е ских оп ераций, функций и отнош ений). Множе ство в еличин пр дм тной области опр д ля т множ ство абстрактных типов данных [2] для этой области, и, следовательно, множество типов алгебраических систем, используемых в математических моделях, а также множество типов данных, использу мых в компьют рных программах, создава мых для р ешения задач в пр едм етной области. В разных предм етных областях мож т использоваться разная совокупность в личин и, сл доват льно, разный набор мат матич ских т рминов.

1. Д е йствит ельность пр е дм етной области

Д йствит льность пр дм тной области - эта та часть физич ского мира, которая связана с соотв тствующ й проф ссиональной деятельностью в ПО. Профессиональная деятельность состоит в решении прикладных задач.

Д йствит льность ПО мож т быть пр дставл на в вид потенциально бесконечного множества не связанных между собой ситуаций (называемых в [178] "state of affairs"). Каждая ситуация соотв тству т н которому фрагм нту д йствит льности, огранич нному как в пространств , так и во вр м ни.

Множества объектов и отношений между ними в любой ситуации являются конечными множе ствами. Отказ от пр едположения о конечности множества объектов в ситуации приводит к рассмотрению таких прикладных задач, при р ш нии которых н обходимо получать, обрабатывать, либо генерировать информацию о бесконечном множестве объектов. Отказ от предположения о том, что ситуация может им еть ме сто только на кон чном пром жутк вр м ни, в д т к н обходимости обрабатывать информацию, относящуюся к сколь угодно дал кому прошлому.

Рассмотрим приемлемость представления о действительности как совокупности отд льных ситуаций для сп циалистов пр дм тных областей. Эти специалисты, как всякие люди, представляют себе д йствит льность как дино ц ло во вр м ни, пространств и многообразии других форм, но огранич нно их возможностями получать информацию о действительности в различных ее аспектах. Вместе с тем профессиональная деятельность этих специалистов протекает лишь в отдельные отрезки времени. Более того, она, как правило, состоит в решении отдельных задач. Отдельная ситуация как раз и соответствует информации, которая рассматривается при решении отдельной задачи. Поэтому разд л ни д йствит льности в рамках пр дм тной области на отд льны ситуации можно считать при мл мым для любой проф ссиональной д ят льности. Отказ от рассмотр ния д йствит льности как множества ситуаций ведет к концепции задач со сколь угодно глубоким использовани м информации о прошлом в их постановк .

М н при мл мым мож т оказаться пр дполож ни о н связанности различных ситуаций между собой. Человек обладает способностью запоминать ситуации и поэтому мож т использовать информацию о прошлых ситуациях при анализ новой, по м ньш й м р , двумя способами:

* находить ср ди прошлых, уж проанализированных, ситуаций т , которы е похожи на новую, и использовать информацию о найде нных ситуациях при анализ новой (поиск пр ц д нтов);
* использовать информацию о прошлых ситуациях для корр ектировки двоих знаний (накопл ни опыта).

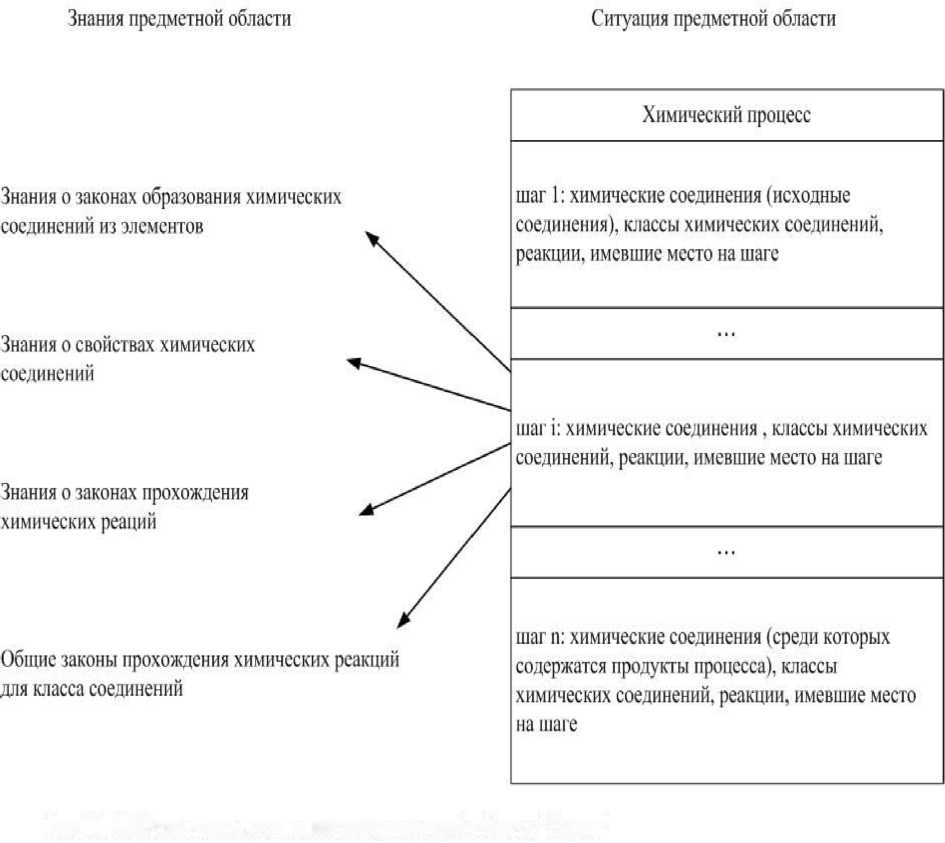
П рвый способ мож т им ть лишь огранич нно прим н ни при р ш нии задач, поскольку информация о новой ситуации, как правило, н полна, сходство с прошлыми ситуациями мож т быть пов рхностным, а выводы, сд ланны на основ информации о похожих прошлых ситуациях, могут оказаться н еверными в новой ситуации.

По отнош нию ко второму способу допустимой явля тся сл дующая точка зр ния: в т ч ни п риода вр м ни, пока н накопл но такого колич ства прошлых ситуаций, которо достаточно для обоснованной корр е ктировки знаний, можно читать, что информация о прошлых ситуациях н использу тся при анализ новых; посл того, как знания скорректированы, образуются новые знания о предметной области - они д е йствуют до сл е дующе й корр е ктировки знаний и т.д. Таким образом, пр дполож ни о н связанности ситуаций мож т быть при мл мо локально, на протяжении тех отрезков времени, пока знания не корр ктируются, т. . когда зависимостью от прошлых ситуаций можно пренебречь.

Прим ром ситуации мож т быть конкр тный химич ский проц сс (рис. 1.1), проходивший в конкр етный п ериод вр е м е ни, в р е зультат е которого из множ ства начальных химич ских со дин ний синт зиру тся н екоторо е со е дин е ни е [42]. Синт ез другого со е дин е ния - это другая ситуация. Химический процесс представляется конечной последовательностью шагов. Каждый шаг характеризуется конечным множ ством химич ских со дин ний, кон чным множ ством химич ских р акций.

Другими прим рами ситуаций являются конкр тный проц сс анализа состава химич ского со дин ния с помощью р нтг но- флуор е сц е нтного м етода иссл едования [40], конкр етная

последовательность состояний термодинамич е ской системы [53]. При оптимизации программ ситуация - это конкр етный проце сс прим енения оптимизирующих пр е образований к конкр етной программ е [33]. Прим ром разд л ния д йствит льности на ситуации мож т служить



**Рис. 1.1. Действительность и знания для предметной области "Химия"** при е м врачом больных в поликлинике: с каждым новым больным,

приш дшим на при м, у врача возника т новая задача (новая ситуация)

[22].

Будем пр едполагать, что информация о ситуации пр едметной области может быть представлена вербально. Используемые при представлении информации о ситуации термины будем называть терминами для описания ситуаций. Множе ство таких т ерминов обозначим TS. При в ербальном пр едставлении информации о ситуации одному термину из множе ства TS сопоставляется одно знач е ни е н е которой в еличины.

Поскольку ситуация - это фрагм ент действительности, ограниченный в пространстве и во времени, то каждому термину в вербальном представлении информации о ситуации сопоставляется некоторое

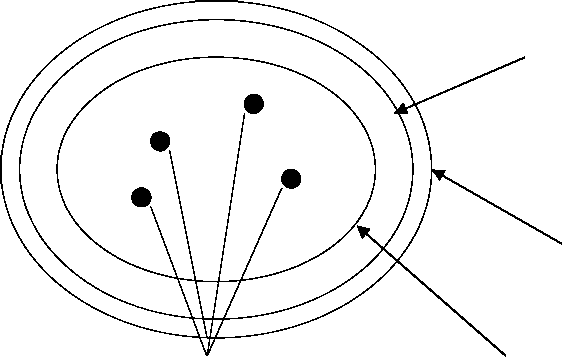
размерное или скалярное значение, некоторое конечное множество или отображ ни с кон чной областью опр д л ния, н которо структурно знач ение, некоторая кон ечная последовательность либо элем ент некоторой н е стандартной в еличины. В мате матич е ской модели т ермину ситуации сопоставля тся эл м нт носит ля алг браич ской сист мы, в программ - знач ение, принадлежаще е некоторому типу данных.

Прим ерами терминов из множества TS, используемыми при описании химического процесса, являются число шагов химического процесса (б езразм ерно е знач е ни е; в мат ематич е ской модели и в программ е представляется целым числом), множество веществ процесса (представляется отображением, сопоставляющим номеру шага процесса множество веществ этого шага), множество реакций процесса (представляется отображением, сопоставляющим номеру шага процесса множество реакций, имевшем место на этом шаге), длительность шагов процесса (представляется отображением, сопоставляющим номеру шага проц е сса ве щ е ств е нно е число).

Информация о действительности пр едм етной области пр едставляется бесконечным множеством вербальных представлений информации о ситуациях предметной области, в которых используется один и тот же набор т ерминов из множе ства TS. При описании каждой ситуации действительности предметной области одному и тому же символу сопоставляется в разных ситуациях знач ение одной и той же величины.

Таким образом, важным свойством любой предм етной области является множество терминов для описания ее ситуаций. Важным свойством также является соответствие между терминами для описания ситуаций и величинами, элементы которых используются при в ербальном пр едставлении информации о ситуации. Это соответствие опр еделяет тип, сопоставляе мый т ермину в программ е.

1. Конц е птуализация и онтология д е йствит ельности

Поскольку д йствит льность ПО явля тся б скон чной и изв стны лишь ситуации, которы им ли м сто в прошлом или им ют м сто в настоящ м, то при р ш нии задач используются пр дставл ния о действительности, задаваемыми концептуализацией действительности [89­90]. Конц е птуализация опр е д еляет множе ство ситуаций, вн е шн е е по отношению к действительности предм етной области (рис. 1.2).

Изве стные ситуации

Рис. 1.2. Действительность, концептуализация и онтология д йствит льности

Пр дставл ния о д йствит льности (множе ство ситуаций, опр д ля мых конц птуализаци й)

Конц птуализация действительности, опр д ля мая онтологи й

Д йствит льность пр е дм етной области

Поняти е конц ептуализации опр еделено в работе [163]: это объекты, понятия и други сущности, которы пр дполагаются сущ ствующими в н которой пр дм тной области, а такж отнош ния, которы опр д л ны между ними. Концептуализация рассматривается как множество н формальных правил, которы ограничивают структуру действительности [178, 235]. Из определения концептуализации следует, что вс наблюдавши ся ситуации принадл жат множ ству ситуаций, опр д ля мых конц птуализаци й.

Для явного пр дставл ния конц птуализации использу тся онтология. Опр е дел е ни е онтологии было дано Груб ером [172]: онтология е сть явная спецификация конц ептуализации. Состав онтологии уточняет работа [235]:"Онтология мож ет им еть различны е формы, но она обязательно включает словарь терминов и некоторую спецификацию их смысла. Она включает опр д л ния и указания о связи понятий, что в совокупности накладыва т структуру на пр дм тную область и ограничива т возможны интерпр етации терминов". Такой ж е состав онтологии опр е д еля ет и стандарт онтологич еского исследования "IDEF5": онтология это словарь пр дм тной области, наполн нный множ ством точных опр д л ний, или аксиом, ограничивающих смысл т рминов в этом словар и позволяющих согласованно инт ерпр етировать данны е [127]. Онтология может задавать и ерархию понятий (что н е явля ется обязат ельным); ср е ди отноше ний м е жду понятиями могут быть отнош е ния типа "is-a" и "part-of и други е [239]. Тако е опр еделение понятия "онтология" совпадает с определением понятия "конц ептуальная модель" [129].

Буд м называть онтологи й д йствит льности ту онтологию, которая задает сп е цификацию конц е птуализации д е йствит ельности [89, 197, 203]. Онтология опр д ля т названия понятий, использу мых для пр дставл ния ситуаций пр дм тной области и связи м жду этими понятиями (онтологич е ски е соглаш е ния).

Каждо опр д л ни названия понятия вводит т рмин, обозначающий это понятие в онтологии, и объем (экстенсионал) этого понятия. Объем каждого понятия либо совпада т с какой-либо в личиной, либо явля тся подмножеством. Онтологические соглашения позволяют уточнить смысл названий понятий, описывая н обходимы взаимосвязи м жду понятиями. Онтологич ски соглаш ния, входящи в онтологию д йствит льности, задают ограничения целостности ситуаций действительности.

Опр д л ния названий понятий и пр дставл ни онтологич ских соглаш ний только в т рминах конц птуализации мож т оказаться в сьма громоздким и трудным для понимания. Поэтому обычно в онтологии вводится ряд названий для обозначения понятий, отсутствующих в конц птуализации, но позволяющих сд лать други опр д л ния и онтологические соглашения онтологии более обозримыми и понятными. Таки е названия понятий и сами понятия, ими обозначае мы е, буде м называть вспомогат льными. В противоположность к ним, названия понятий из множе ства TS будем называть основными.

Каждое определение названия вспомогательного понятия вводит т рмин, обозначающий это поняти в онтологии, и либо знач ни этого понятия (конкр тно знач ни н которой в личины), либо способ вычисл ния знач ния этого понятия по знач ниям других понятий онтологии [89-90].

Например, в онтологии органической химии (Приложение 3), вспомогательные понятия введены для обозначения множе ств возможных формул органических соединений, названий типов связей, типов гибридизации. В этом случае вспомогательным терминам сопоставлены значения. В онтологии физической химии (Приложение 2) одним из вспомогат ельных понятий явля ется "простые вещ е ства", для которого определяется способ вычисления значения: простым является вещество, мол кулу которого образуют атомы одного химич ского эл м нта.

Каждо онтологич ско соглаш ни зада т связь м жду понятиями онтологии и пр дставля т собой н которо утв ржд ни , сод ржащ как термины из множества TS, так и математические термины. Онтологические соглашения задают дополнительные (по сравнению с опр еделениями понятий) ограничения на объемы понятий.

Наприм р, в онтологии д йствит льности физич ской химии (Приложение 2) определено понятие "масса" как масса системы для каждого шага проце сса и как масса в еще ства этого шага. Онтологиче ско е соглаш ни зада т огранич ни : масса сист мы на каждом шаг проц сса сть сумма масс вс х в щ ств этого шага. При опр д л нии данного понятия задано ограничение: знач ение массы н е отрицательно.

Онтология определяет внешнее по отношению к концептуализации множе ство ситуаций (рис. 1.2). Будем назвать это множе ство

конц птуализаци й д йствит льности, опр д ля мой онтологи й.

Таким образом, важным свойством пр дм тной области явля тся

онтология д йствит льности, которая опр д ля т понятия, использу мы при описании действительности, термины для их обозначения, объемы понятий, обозначенных терминами, и онтологические соглашения, задающи огранич ния ц лостности ситуаций д йствит льности.

Онтология д йствит льности опр д ля т структуру пр дставл ния

информации о ситуациях д е йствит ельности [89-90, 203-204]. Онтология д йствит льности использу тся в программах при задании входных данных и р зультатов р ш ния задач и при разработк пользоват льского интерф е йса [75, 76].

1. Систе ма знаний пр е дм етной области. Онтология знаний.

Онтология пр дм тной области

Знания пр дм тной области - это знания о д йствит льности этой области [22]. Они описывают свойства объ е ктов, которы е справ е дливы для всех ситуаций ПО. Например, знания химии описывают свойства химических элементов, соединений, реакций и других типов объектов данной области, формулы химич ских со дин ний и р акций и правила их постро ния, условия прохожд ния р акций, их длит льность и т.д. (рис.

1. . В ситуации (конкр етном физико-химич е ском проц е сс е) участвуют н которы из химич ских со дин ний как участники н которого шага этого проце сса. На каждом шаге конкретного химиче ского проце сса им еют м е сто каки е-либо из химиче ских р е акций - элем енты множе ства ре акций, возможных м жду со дин ниями этого шага. Законы прохожд ния реакций (определяющие, какие соединения могут быть получены для каждой р акции) справ дливы для вс х ситуаций: ср ди со дин ний следующего шага обязательно появятся р езультаты тех ре акций, которы е им ли м сто на пр дыдущ м шаг .

Знания обычно пр дставляются в вид утв ржд ний на н котором язык . При записи этих утв ржд ний используются т рмины онтологии д е йствит ельности предм етной области. Таки е утвержд е ния по форм е (но не по содержанию) ничем не отличаются от онтологических соглашений. Буд м называть это множ ство утв ржд ний сист мой знаний пр дм тной области.

Разница м жду онтологи й и знаниями состоит в том, что онтология явно пр дставля т конц птуализацию д йствит льности, а знания опр еделяют подмножество этой концептуализации (рис. 1.3), задавая дополнительные, по сравн ению с онтологи ей, ограничения на множе ство знач ний т рминов онтологии д йствит льности.

Буде м пр е дполагать, что в ПО сущ е ствуют таки е и только таки е ситуации, относит льно которых справ дливы вс утв ржд ния, входящи в систему знаний ПО. Иными словами, все ситуации ПО согласуются со знаниями ПО. Посл е дн е е означает, что при зам е н е терминов онтологии их знач ниями в ситуации из утв ржд ния знаний буд т получ но тожд ств нно истинно утв ржд ни .

Буд м называть сист му знаний ад кватной д йствит льности пр едм етной области, если множе ство ситуаций действительности является подмноже ством ситуаций, опр еделяемых этой системой знаний (рис. 1.3). Также буде м называть сист е му знаний точной, е сли множе ство ситуаций действительности совпадает с множеством ситуаций, определяемых сист мой знаний.

Знания пр дм тной области могут пр дставляться в рбально в вид отображе ния кон ечного множ е ства т ерминов на множе ство знач е ний [29]. Использу мы при в рбальном пр дставл нии знаний т рмины задают

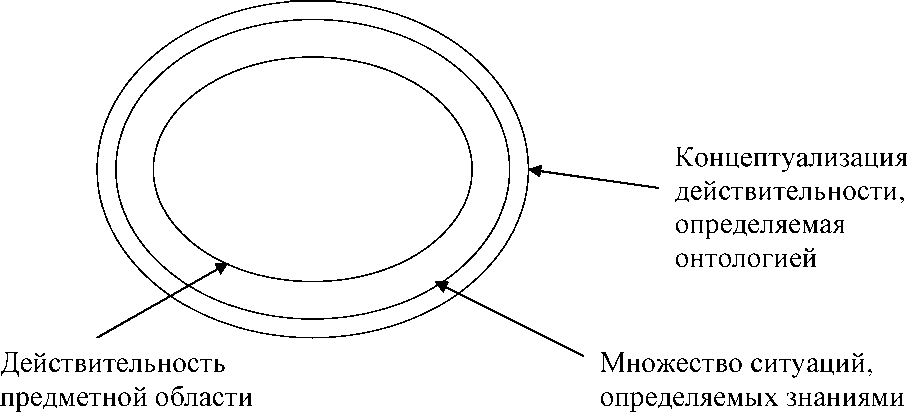


Рис. 1.3. Действительность, онтология и знания

названия свойств объ ктов пр дм тной области, а такж названия (функциональных и не функциональных) отношений между объектами.

Наприм р, знания о множ ств названий химич ских эл м нтов в химии [59] представлены вербально: термину "химические элементы" в таком пр дставл нии соотв тству т множ ство названий химич ских эл е м е нтов. Таким способом в химии пр е дставляются знания о множе стве химич ских со дин ний и р акций, знания о свойствах химич ских эл е м е нтов, сое дин е ний и р е акций, отнош ения "быть р е аг ентами", "быть результатами" между реакциями и соединениями, отношения "входить в состав" м жду со дин ниями и эл м нтами, знания об условиях прохожде ния р е акций и различных м еханизмах этих р е акций и т.д. [16-20, 40, 42, 51, 54]. Н е которы е из этих знаний традиционно пр е дставляются в базах данных по химии.

Прим рами т рминов, использу мых при в рбальном пр дставл нии знаний, являются "атомный номер" (сопоставляет каждому химическому элементу его номер в таблице Д.И.Менделеева), "атомный вес"

(сопоставля т каждому химич скому эл м нту знач ни го атомного веса), "число электронов элемента" (сопоставляет каждому химическому

элементу число его электронов), "формула” (сопоставляет каждому химич е скому со е дин е нию его формулу), "структурная формула”

(сопоставля т каждому химич скому со дин нию го структурную формулу), "реагенты” (сопоставляет реакции множество ее реагентов), возможные пути реакции (сопоставляет реакции множество последовательностей реакций, рассматриваемых как элементарные по отношению к н ей; в конкр етном химиче ском проце сс е р е ализуется только один из возможных путе й).

Если знания пр едметной пр едставляются в ербально, то в предм етной области существует специальная система понятий, отличная от системы понятий для представления действительности. Множество понятий, использованных для в рбального пр дставл ния знаний, и связи м жду знач ниями этих понятий образуют онтологию знаний пр дм тной области [89-90, 197, 203-204], называемую в [237] knowledge modeling ontology.

Наличи структуры, занимающ й пром жуточно полож ни м жду пр дставл ни м знаний, использу мым в мод ли пр дм тной области, и мод лью пр дм тной области (базой знаний) показала практика разработки систем, основанных на знаниях, для сложных предметных областей и задач. В некоторых ранних работах эта структура для конкретных пр едм етных областей была описана словесно [220, 238]. С начала 80-х эта структура изучалась в работах отечественных ученых [139, 195].

Онтология знаний отлича тся от онтологии пр дставл ния знаний [237], которая сп е цифициру ет конц ептуализацию, л е жащую в основ е формализма представления знаний. Примером онтологии представления знаний явля ется фреймовая онтология [172], которая опр е д еля ет примитивы, использу мы в языках на основ фр ймов. С использовани м фр е ймов [111] знания представляются структурами сл е дующ е го вида: имя фр ейма: (имя слота 1: значение слота 1), (имя слота 2: значение слота 2),..., (имя слота n: знач е ни е слота n).

Онтология знаний использу тся при пр дставл нии знаний с использовани м примитивов, опр д ля мых онтологи й пр дставл ния. Например, при использовании системы фреймов имя слота совпадает с им н м н которого свойства объ кта, а имя отнош ния опр д ля т названи отнош ния м жду фр ймами или их компон нтами. При пр е дставл е нии знаний в вид е с е мантич е ской с ети [71] (ори е нтированного графа, в ршинами которого являются понятия, а дуги пр дставляют отношения между понятиями) имя свойства совпадает с названием атрибута объекта, а им ена отношений обычно являются м етками дуг. Одна дуга мож т связывать дв или бол в ршин, т. . отнош ни мож т быть как двухм е стным, так и многом е стным. Т е м самым, онтология знаний опр д ля т структуру фр ймов, м тки в ршин и дуг с мантич ской с ти, использу мых при пр дставл нии знаний.

Онтология знаний есть явная спецификация множества возможных в рбальных пр дставл ний знаний (конц птуализации знаний)[[1]](#footnote-1). Таким образом, онтология знаний опр д ля т названия понятий, использу мых для пр дставл ния знаний пр дм тной области, и связи м жду этими понятиями (ограничения целостности знаний). Каждое определение названия понятия вводит термин, обозначающий это поняти е в онтологии, и объем этого понятия, т.е. множе ство знач ений некоторой величины.

Приведем примеры ограничений целостности знаний. Упрощенная онтология знаний м дицинской диагностики сод ржит сл дующи ограничения: "клиническая картина любого заболевания, отличного от

здоров, н е явля ется пустым множе ством", "для любого забол е вания, для любого признака, входящего в клиническую картину этого заболевания, и для любого п риода динамики этого признака множ ство знач ний этого признака, возможных в этот п риод динамики явля тся н пустым подмножеством множества возможных значений этого признака, а знач ни в рхн й границы этого п риода динамики больш го нижн й границы" (прим р взят из работы [86]). Прив д м прим ры огранич ний ц лостности знаний для физич ской химии: "р акция н мож т

принадл е жать ни одному из своих пут е й прот екания", "изм ен е ни е молярной энтальпии химич ской р акции - это разность сумм молярных энтальпий образования результатов и реагентов, помноженных на стехиометрические коэффициенты" (Приложение 2).

Если знания предметной области представлены вербально, то будем говорить, что знания предметной области структурированы. Структуру знаний опр д ля т онтология знаний.

Поскольку знания пр дм тной области описывают свойства ситуаций пр дм тной области, то для точного описания свойств этих ситуаций вводится щ одна группа онтологич ских соглаш ний. В н входят соглаш ния, задающи связи м жду т рминами онтологии знаний и онтологии действительности предм етной области.

Приведем примеры онтологических соглашений, задающих связи двух онтологий. Прим ерами соглаш е ний данной группы для упроще нной онтологии м едицинской диагностики являются [86]: "для любого признака, н входящ го в клинич скую картину забол вания, которым бол н паци е нт, знач е ни е этого признака в любой мом е нт может быть только нормальным", "для любого признака, входящего в клиническую картину заболевания, которым болен пациент, для любого периода динамики этого признака и любого мом нта наблюд ния, принадл жащ го этому п риоду динамики, наблюда мо в этот мом нт знач ни признака явля тся

возможным знач е ни ем в этом п ериод е динамики”. Прим ерами соглаш ений данной группы для онтологии химии являются: ”опред еля е мые эл е м енты в проб е - это те элементы, которые имеют хотя бы один пер еход, энергия которого больш , ч м минимальная изв стная эн ргия, а эн ргия связи электрона для данного пер ехода у данного элем ента на уровн е, на который совершается п ереход, н е больш е эн ергии п ервичного излуч е ния”, ”ре акция может иметь место на некотором шаге химического процесса, если ее р аг нты являются подмнож ством в щ ств этого шага, а р зультаты - подмноже ством ве щ е ств сл е дующе го шага” (Прилож ения 3 и 4).

Однако сущ ствуют пр дм тны области, в которых только часть знаний им е ет структуру. В этом случае часть знаний пр е дставля ется в виде множе ства пар <термин онтологии знаний, значение термина>, а часть - в вид совокупности утв ржд ний. Таким свойством облада т физич ская химия [59] (фрагм ент базы знаний, сод ержащий н е структурированны е знания данной области прив д н в Прилож нии 5).

Теперь определим понятие "онтология предметной области”. Для пр дм тных област й, в которых знания н структурированы, онтология пр е дм етной области совпадает с онтологи е й д е йствит ельности (таблица

* 1. . Множе ство онтологиче ских соглашений совпадает с множе ством

Таблица 1.1.

Онтологии и знания пр дм тных област й, знания которых н

структурированы

|  |  |
| --- | --- |
| Онтология пр дм тной области | Совпада т с онтологи й  действительности  Онтология знаний пуста |
| Состав множества онтологических соглашений | Ограничения целостности действительности |
| Способ пр дставл ния знаний | Множ ством утв ржд ний (в моделях в виде множества логиче ских формул) |
| Концептуализация предметной области | Совпадает с концептуализацией действительности |

ограничений целостности действительности. Знания представляются множеством утверждений. Концептуализация предметной области в этом случа совпада т с конц птуализаци й д йствит льности.

Для пр дм тных област й, в которых вс знания структурированы, онтология предметной области состоит из трех компонент: онтологии д йствит льности, онтологии знаний и описания взаимосвяз й м жду этими двумя онтологиями (таблица 1.2). Множе ство онтологич еских

Онтология и знания пр дм тных област й, вс знания которых

структурированы

|  |  |
| --- | --- |
| Состав онтологии пр дм тной области | 1. Онтология знаний 2. Онтология действительности 3. Связи м жду онтологи й знаний и онтологией действительности |
| Состав множества онтологических соглаш ний | 1. Огранич е ния ц елостности знаний 2. Ограничения целостности действительности 3. Утв ржд ния, задающи связи м жду онтологи й знаний и онтологией действительности |
| Способ пр дставл ния знаний | В виде множе ства пар  <термин онтологии знаний,  значени е термина> |
| Конц птуализация пр дм тной области | Отнош ни м жду концептуализацией знаний и конц птуализаци й действительности |

Таблица 1.2

соглашений предметной области образуют три подмножества:

ограничения целостности действительности, ограничения целостности знаний и описания взаимосвяз й м жду д йствит льностью и знаниями. Знания пр дставляются множ ством знач ний т рминов онтологии знаний. Конц птуализация пр дм тной области в этом случа сть отнош ни м жду конц птуализаци й знаний и конц птуализаци й д йствит льности.

Для пр дм тных област й, в которых только часть знаний им т структуру, онтология пр дм тной области такж состоит из тр х компонент (таблица 1.3). Множе ство онтологиче ских соглашений

Таблица 1.3

Онтология и знания пр дм тных област й, в которых только часть знаний

им т структуру

|  |  |
| --- | --- |
| Состав онтологии пр дм тной области | 1. Онтология знаний 2. Онтология действительности 3. Связи м жду онтологи й знаний и онтологией действительности |
| Состав множества онтологических соглаш ний | 1. Огранич е ния ц елостности знаний 2. Ограничения целостности действительности 3. Утв ержде ния, задающи е связи м жду онтологи й знаний и онтологией действительности |
| Способ пр дставл ния знаний | В вид пары, состоящ й из множества  <термин онтологии знаний, значени е термина> и множества утверждений (множе ства логиче ских формул) |
| Конц птуализация пр дм тной области | Отнош ни м жду концептуализацией знаний и конц птуализаци й действительности |

предметной области образуют три подмножества: ограничения

целостности действительности, ограничения целостности знаний и описания взаимосвяз е й м ежду д е йствительностью и знаниями. Конц птуализация пр дм тной области в этом случа такж сть отношение между концептуализацией знаний и концептуализацией д йствит льности.

Состав онтологии пр дм тной области явля тся важным свойством, поскольку опр д ля т способ пр дставл ния знаний в программных сист е мах для р е ш е ния прикладных задач. Онтология знаний использу ется при разработке р едакторов знаний. Онтологиче ски е соглашения, задающие связи м жду онтологи й знаний и онтологи й д йствит льности используются при разработк м тодов р ш ния классов задач и программ для их ре ше ния.

Т е п ерь рассмотрим работы, в которых анализировались различия м е жду онтологи ей и знаниями пр е дм етных област ей.

1. Онтология явля тся инт нсиональным описани м знаний в н екоторой предм етной области [237]. Онтология опред еля ет структуру и словарь статических знаний предметной области. Знания предметной области суть множ е ство утвержд е ний о пр е дм етной области. Тогда как знания пр дм тной области описывают фактич скую ситуацию в пр дм тной области, онтология пр дм тной области зада т огранич ния на структуру и сод ржани знаний.
2. Онтология, подобно конц птуализации, описыва т объ кты и отнош ния, н обходимы для опр д л ния с мантики языка пр дставл ния знаний [143]. Формализация знаний означает пр е дставл ени е знаний о предметной области в виде предложений формального языка в терминах объектов и отношений концептуализации этой предметной области. Важным свойством онтологии явля тся то, что она да т точно и н двусмысл нно опр д л ни понятий, н обходимых для пр дставл ния знаний, без ссылки на вычислительные аспекты, такие как структуры данных, оп рации на этих структурах и управл ни .
3. Любая база знаний, система, основанная на знаниях, или агент уровня знаний фиксируют н которую конц птуализацию, явно или н явно [171]. Если знания предм етной области пр е дставляются с использовани е м д е кларативного формализма, множе ство объ е ктов, которо е может быть

представлено, называется универсумом области. Это множество объектов и описат льны соотнош ния м жду ними отражаются в словар пр дставл ния, с помощью которого программа, основанная на знаниях, пр дставля т знания.

1. Онтология фактически всегда является проявлением распр д л нного понимания пр дм тной области, с которым согласно н екоторо е число аг е нтов [235]. Тако е соглаш ени е способству ет точной и эффективной передаче смысла, которое, в свою очередь, ведет к другим преимуществам, таким, как повторное и распределенное использование. Н которы онтологии пр дставляются и используются как словарь для сп цификации базы знаний. На практик мож т н быть ч тких границ м жду онтологи й и базой знаний, сли об сп цифицированы на одном и том же языке. Более того, это не имеет значения. Различия могут быть в том, какая часть знаний явля тся распр д л нной и согласованной, а какая боле е сп ецифичной. Боле е того, эта граница может м еняться со вр ем енем.
2. Онтология есть формальная, явная спецификация распределенной концептуализации [231] ... "Распр еделенная" означает, что онтология пр дставля т согласованны знания, т. . н частны для н которого индивидуума, но принима мы н которой группой. Онтология сод ржит унив рсальны обоснованны знания пр дм тной области, н зависимы от их использования. Онтология претендует на то, чтобы отражать определенную степень консенсуса о знаниях предметной области. Онтология об е спечивает термины, их смысл, их отношения и ограничения и т.д., и в проце сс е взаимодействия вс е участники должны принимать эти опр д л ния. Онтология об сп чива т словарь т рминов и отнош ния, с помощью которых моделируется пр едметная область.

Роль онтологии как конс нсуса о пр дм тной области такж отм чают работы [210, 239].

Таким образом, можно выд лить сл дующи основны различия понятий "онтология" и "знания".

* Онтология пр дм тной области сть та часть знаний пр дм тной

области, относит льно которой пр дполага тся н изм нность.

Относит льно остальной части знаний пр дм тной области пр дполага тся, что она мож т изм няться, но должна оставаться согласованной с онтологией пр едм етной области.

* Онтология пр дм тной области сть та часть знаний пр дм тной области, которая ограничивает значения терминов предметной области. Знач ния т рминов пр дм тной области н зависят от остальной (изм еняемой) части знаний предм етной области.
* Онтология пр дм тной области явля тся множ ством соглаш ний о пр дм тной области, другая часть знаний пр дм тной области явля тся множеством эмпирических и других законов этой области. Онтология опр д ля т ст п нь согласования знач ний т рминов сп циалистами пр едм етной области.

Введенное в данном разделе понятие онтологии для предметных областей со структурированными знаниями обобщает понятие "проблемно-ориентированное представление", введенное в 80-х годах [83], которое состоит из схемы базы знаний (системы фреймов-прототипов, использу мых при пр дставл нии знаний в вид сист м фр ймов- прим ров), сх мы базы данных (сист мы фр ймов-прототипов, использу мых при описании конкр тных данных в вид сист м фр ймов- прим ров), огранич ний ц лостности базы знаний и базы данных и правил соотв тствия состояний базы данных состояниям базы знаний.

Если онтология предметной области содержит большое число понятий, то она мож т быть модульной. Крит рии д л ния онтологии на модули изве стны из литературы [153, 167, 227]. Из этих работ следует, что модуль онтологии содержит определения взаимосвязанных понятий.

Основное назначение модулей - представить онтологию, содержащую большо число понятий, совокупностью фрагм нтов м ньш го разм ра. Модульность онтологии пр дм тной области тр бу т наличия ср дств задания модул й в язык пр дставл ния онтологии и указания связ й м ежду модулями. Так в языке OWL [218], используемом для представления онтологий в Интернет, фрагмент онтологии имеет заголовок, а для указания связ й м жду фрагм нтами используются конструкции Namespace и Imports.

1. Сложно-структурированны е пр едметны е области и их свойства

В данном пункт опр д ля тся подкласс сложно-структурированных пр дм тных област й и их свойства.

1. Опр е дел е ни е сложно-структурированной пр е дм етной области

Назовем предметную область сложно-структурированной, если она обладает сл едующими свойствами:

* в ней существуют разделы, которые описываются в разных, но похожих сист е мах понятий [92],
* разделы, в свою очер едь, им еют подразделы, которы е описываются в разных, но похожих сист мах понятий,
* любой подраздел в свою очередь, может иметь подразделы, обладающие указанным свойством, и т.д.

Разд л (и подразд л) сложно-структурированной ПО явля тся такж предметной областью, в которой происходит своя профессиональная деятельность, которая характеризуется своим множеством задач. Среди множества задач разных разделов могут существовать похожие задачи. При р ш нии задач проф ссиональной д ят льности в сложно­структурированной ПО могут использоваться понятия онтологий разных разд елов, а такж е знания разных разделов. При р е ш е нии задач некоторого раздела сложно-структурированной предметной области в кач е стве подзадач могут использоваться задачи других разделов.

Примером сложно-структурированной предметной области является химия, а примерами ее разделов - физическая, органическая и аналитич е ская химия (рис. 1.4). Физич еская химия изучает физико-



Рис. 1.4. Примеры разделов пр едметной области «Химия»

химиче ски е проце ссы [51, 53, 59]. Описани е этих проц ессов дается в терминах свойств участвующих в процессах веществ и реакций. Органическая химия добавляет терминологию, позволяющую говорить о структурных свойствах ве щ е ств [16-20]. Аналитич е ская химия изучает проц е ссы возд ействия на в е щ е ства различными излуч ениями [40, 54]. Примерами подразделов для физической химии являются химическая т рмодинамика и химич ская кин тика, для аналитич ской химии подразд л связан с конкр тным м тодом анализа (наприм р, р нтг но- флуор сц нтный анализ).

Ещ одним прим ром сложно-структурированной ПО явля тся область «Преобразования программ». В этой области изучаются процессы изм н ния программ в р зультат прим н ния различных пр образований [32-33, 35-36]. Прим рами разд лов являются «Пр образования

структурных программ», «Преобразования параллельных программ». Описание преобразований дается в терминах свойств языков, на которых записаны программы.

1. Свойства онтологии сложно-структурированной предм етной области

Для описания свойств онтологий сложно-структурированных предметных областей рассмотрим примеры. В онтологии знаний физиче ской химии можно выделить термины, которы е пр едставляют собой названия свойств химич ских эл м нтов. Знач ни м каждого такого т рмина явля тся отображ ни , областью опр д л ния которого явля тся множество химических элементов, а областью значений - множество знач ений свойства - подмноже ство н е которой в еличины. Таки е же т рмины можно найти и в онтологии органич ской химии и онтологиях других разделов данной области. Кроме терминов, которые определяют названия свойств элементов, существуют также термины, которые пр дставляют собой названия свойств химич ских со дин ний, р акций, радикалов и т.д.

Анализ упомянутых онтологий такж показал, что сущ ствуют и другие множества терминов, которые обладают некоторыми общими свойствами. Такими т рминами являются т рмины, которы позволяют определить состав химических элементов или химических веществ. Каждый такой термин обозначает функцию, аргум ентом которой является химический элемент или вещество, а результатом является множество компонент элемента или вещества. Существуют также термины, которые позволяют опр д лить различны свойства эл м нта в состав в щ ства, вещества как участника реакции и т.д. [16-20, 40, 51, 53-54, 59].

Существует также сходство между онтологиями действительности физической и органической химии. Физико-химический процесс, изуча мый физич ской хими й, и химич ский проц сс, изуча мый органич е ской хими е й, состоят из посл е доват ельности шагов. Участниками процесса являются химические вещества. В ходе процесса изменяются свойства этих в щ ств либо в р зультат физич ских возд йствий, либо в р зультат химич ских р акций.

Поэтому правом рными явля тся вывод о сущ ствовании онтологии, которая будет описывать свойства множе ства онтологий.

Т е п ерь вв е д е м поняти е уровн е й общности [52, 145]. Множе ство в рбальных пр дставл ний информации о д йствит льности пр дм тной области им т уров нь 0.

Уровень 1 специфицирует конкретное множество вербальных представлений информации о действительности. Этот уровень содержит знания о д йствит льности, пр дставл нны с использовани м т рминов онтологии. Зам тим, что на уровн 1 т рминам онтологии действительности не сопоставлены значения. Сопоставляя терминам онтологии д йствит льности конкр тны знач ния, получим пр дставл ни информации о конкр тной ситуации, которо буд т принадл жать уровню 0.

Уровень 2 содержит онтологию предметной области, но не содержит знания. Задавая разные знания (разные базы знаний) с использованием одной и той ж онтологии, буд м получать сп цификации разных множ ств в рбальных пр дставл ний информации о д йствит льности. Таким образом, уров нь 2 сп цифициру т множ ство баз знаний, которы могут быть заданы с использовани м одной и той ж онтологии.

Онтология, в т рминах которой мож т быть сп цифицировано множе ство онтологий уровня 2, им е ет уровень 3. Е е т ермины опр е деляют множе ства терминов онтологии уровня 2, задавая свойства элем ентов этих множе ств. Наприм ер, для рассмотр е нных прим еров онтология уровня 3 буд ет сод ер жать т ермины "собственны е свойства эл е м е нтов" (опр е д еляет свойства множ ства т рминов, обозначающих функции, областью определения которых является множество химических элементов, а область значений зависит от термина, задающего название свойства), "собственные свойства веществ" (определяет свойства множества

терминов, обозначающих функции, областью определения которых является множество химических веществ, а область значений зависит от термина, задающего название свойства), "компоненты вещества"

(определяет свойства множества терминов, обозначающих функции, областью определения которых является множество химических веществ, а область значений зависит от типа компонента; это может быть, наприм ер, множе ство химиче ских элем ентов) и т.д. [52, 59].

Задание свойства множества терминов онтологии уровня 2 состоит либо в определении объема каждого понятия, обозначенного термином, либо в опр д л нии способа вычисл ния этого объ ма в зависимости от знач ений парам етров, связанных с множ е ством опр е деля е мых терминов. В п рвом случа онтология уровня 3 сод ржит т рмины-им на множ ств терминов онтологии уровня 2, а также для каждого множества утв ржд ния, опр д ляющи объ м понятия вс х т рминов этого множе ства. Во втором случае онтология опр еделяет функции, аргументами которых являются параметры, от которых зависит объем понятий, обозначае мых т ерминами, и им е на этих парам етров.

Задание терминов онтологии уровня 2 в первом случае состоит в перечислении элементов всех множеств, имена которых определены в онтологии уровня 3. Во втором случа для понятия онтологии уровня 2 определяется его название, а объем задается применением функции к конкретному набору значений параметров. Отметим, что для сложно­структурированной предметной области множества терминов разных онтологий уровня 2 будут различными, т.е. различными будут множества т ерминов для описания ситуаций и знаний.

Если онтологич ски соглаш ния уровня 2 могут быть пр дставл ны вербально, то онтология уровня 3 будет содержать термины, при помощи которых можно в рбально пр дставить каждую из онтологий уровня 2. Задани онтологич ских соглаш ний уровня 2 в п рвом случа состоит в определении отображения множества терминов онтологии уровня 3 на множество значений. Во втором случае онтологические соглашения формулируются в вид утв ржд ний с использовани м опр д л нных в онтологии уровня 2 т ерминов.

Из рассмотр нного выш прим ра видно, что сущ ству т сходство уж м е жду онтологиями уровня 3, что позволя ет опр е делить онтологию следующего уровня, которая будет специфицировать множе ство онтологий уровня 3.

Онтология, в т рминах которой мож т быть сп цифицировано множе ство онтологий уровня i, им е ет уров е нь i+1. Е е т ермины опред еляют множе ства терминов онтологии уровня i, задавая свойства элем ентов этих множеств, т.е. термины онтологии более высокого уровня будут задавать имена более общих множеств понятий. Для рассмотренного примера такими терминами могут быть термины ” собственны е свойства сущностей” (множе ство функций, областью опр еделения которых является множество сущностей некоторого типа, а область значений зависит от термина, задающего название свойства) [52]. В этом случае также появляются термины, обозначающие вспомогательные понятия. В рассмотренном примере таким термином является термин ”типы сущност е й”, который обозначает множе ство названий типов сущност ей ( е го знач е ни е м могут быть термины "химич е ски е эл е м е нты", "химич е ски е веще ства" и т.д.).

Все онтологии, уровень которых выше второго, можно назвать метаонтологиями. В [240] онтологии делятся на более общие и более специальные онтологии: первая выражает точку зрения на вторую. Прим ером онтологии уровня 3 явля ется онтология научного знания [82], которая содержит метапонятия, задающие структуру для описания рассматриваемой предметной области. Эта метаонтология используется при описании различных онтологий научной д ят льности. Прим ром онтологии уровня 3 является онтология м е дицинской диагностики [94-95], в т рминах которой описываются онтологии уровня 2 разных разд лов м е дицины.

Онтологию в рхн го уровня буд м называть онтологи й сложно­структурированной предм етной области (рис. 1.5). Она содержит термины,

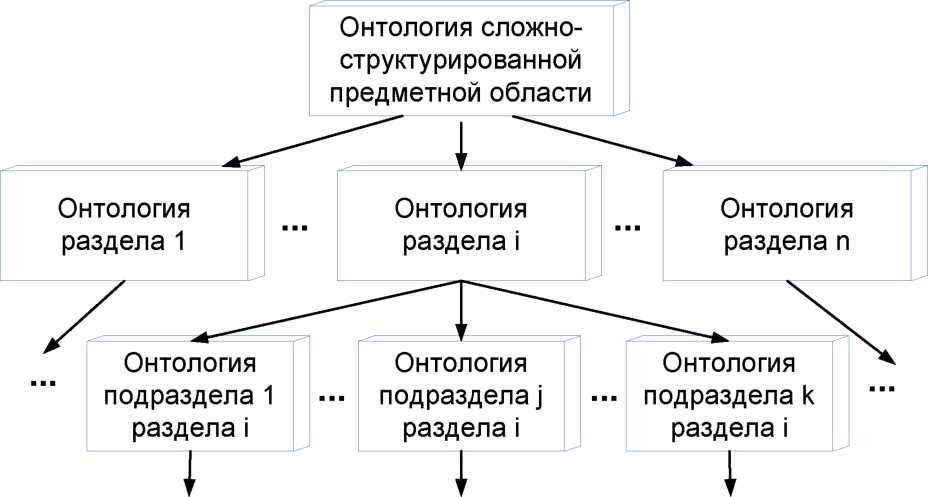


Рис. 1.5. Структура онтологии сложно-структурированной предметной области

при помощи которых определяются онтологии следующего уровня. Эти онтологии образуют множе ство онтологий (множе ство модулей) разделов

предметной области. Переход к онтологии некоторого раздела от онтологии сложно-структурированной области состоит в задании т ерминов онтологии этого разд ела как эл е м е нтов множе ств, опр е д ел енных онтологи й сложно-структурированной пр дм тной области, а такж онтологич е ских соглаш е ний.

Если онтологии разд лов могут быть пр дставл ны в рбально, то онтология сложно-структурированной пр дм тной области буд т опр д лять им на множ ств т рминов каждой онтологии разд ла, а такж сод ержать т ермины, при помощи которых опр ед еляются онтологич е ски е соглаш ния каждого разд ла.

Онтология каждого разд ла сод ржит т рмины, при помощи которых определяется онтология подраздела. Переход к онтологии подраздела состоит в задании т рминов онтологии этого подразд ла, а такж онтологич е ских соглаш е ний. Таким образом, онтологии каждого раздела соответствует множество онтологий подразделов данного раздела. Если подраздел, в свою очередь, имеет подразделы, то его онтология использу ется при опр еделении онтологий подразделов.

Знания сложно-структурированной пр дм тной области такж состоят из модул й. Модуль знаний формулиру тся в т рминах соотв тствующ й онтологии подраздела и содержит знания данного подраздела.

Если подзадачами раздела R1 являются задачи разд ела R2, то и понятия онтологии разд ела R2 используются в онтологии R1. Это в л еч ет за собой наличи е отношения "онтология R2 используется онтологией R1" м е жду этими онтологиями. Тако е же отнош е ни е может быть опр е д ел ено м е жду онтологиями подразд елов. При реш е нии задач мож ет использоваться фрагм е нт онтологии. Таким фрагм е нтом может быть модуль или совокупность модул й. Это вл ч т за собой наличи отношения "онтология R1 использу ет модуль М онтологии R2".

Уровень общности онтологии отличается от уровня понятия (класса) в и ерархии понятий (классов) [72, 142, 182, 218], поскольку позволяет задать отнош ния на множ ств онтологий, а н на множ ств классов одной онтологии. Число уровн ей зависит от предм етной области.

Опр д л ни онтологии в рхн го уровня для сложно­структурированной области отличается от top-level онтологий, рассматриваемых Гуарино [173-176]: top-level онтологии содержат

опр д л ния абстрактных философских понятий.

1. Свойства мод ел е й сложно-структурированных пр е дм етных областей

Таким образом, сущ ств нными свойствами сложно­

структурированных пр дм тных област й являются:

* онтология уровня n, которая опр д ля т понятия, использу мы при задании онтологий уровня n-1, а также задает онтологич е ски е соглаш е ния, которым должна удовл етворять каждая онтология уровня n-1;
* множ ство онтологий для каждого уровня с ном ром i, каждая из которых опр д ля т понятия, использу мы при задании онтологий уровня i-1, а также задает онтологич е ски е соглаш ения, которым должна удовл етворять каждая онтология уровня i-1;
* множе ство онтологий уровня 2, каждая из которых для пр едм етных областей с неструктурированными знаниями определяет множество т рминов для описания ситуаций, а для пр дм тных област й, в которых знания структурированы, сод ржит т рмины для описания ситуаций, т ермины для описания знаний и связи м ежду т ерминами двух множ е ств;
* знания, состоящи из модул й; в каждом модул знания пр дставл ны либо множ ством утв ржд ний, записанных в т рминах соответствующей онтологии уровня 2, либо вербально как множество знач ний т рминов для описания знаний соотв тствующ й онтологии уровня 2, либо парой, состоящей из утверждений и множества значений т ерминов;
* д йствит льность, пр дставляющая собой б скон чно множ ство ситуаций, причем все множество ситуаций разбито на подмножества, каждо из которых сод ржит ситуации с одинаковой структурой, опр д ля мой соотв тствующ й онтологи й уровня 2; структуры ситуаций разных подмнож ств могут быть различны;
* использу мы в личины (использу мы в мод лях сорта и типы данных) и связанный с ними набор терминов для обозначения операций и отнош ний над эл м нтами в личин; эл м нты в личин используются при описании ситуаций и пр дставл нии знаний пр дм тной области; ср ди в личин сущ ствуют стандартны и н стандартны в личины; оп рации и отнош ния, связанны со стандартными в личинами, им ют одинаковый смысл во вс х пр дм тных областях, а с н стандартными в личинами - являются специфич е скими для пр едм етной области.

Из пров д нного выш анализа выт кают свойства мод л й сложно­структурированных пр дм тных област й.

Любая модель всегда представляет существенные свойства объекта моделирования. Если объектом моделирования является сложно­структурированная пр дм тная область, то мод ль должна быть многоуровн вой и состоять из мод л й онтологий вс х уровн й, мод ли знаний, мод ли д йствит льности. Вс уровни мод ли онтологии и мод ль знаний должны быть модульными.

Должна быть возможность определения моделей как структурированных, так и н структурированных онтологий каждого уровня, а такж структурированных и н структурированных знаний.

В мод ли долж н быть формально опр д л н п р ход от уровня с ном ером i к каждому модулю уровня i-1. Мод ель онтологии уровня i должна позволять опр д лять т рмины-им на множ ств т рминов онтологии уровня i-1 и объ емы понятий, обознач енных этими т ерминами. Модель онтологии уровня i также должна позволять задавать способы опр е д ел е ния объ е мов понятий, входящих в онтологию уровня i-1 в зависимости от значений парам етров.

Мод ль должна позволять задавать мод ли как основных, так и вспомогательных понятий каждой онтологии уровня i, а также позволять опр е д елять способ вычисл е ния сорта т ермина онтологии уровня i-1 в зависимости от знач ний т рминов онтологии уровня i.

Мод ль д йствит льности мож т быть задана как объ дин ни подмнож ств мод л й ситуаций, прич м мод ли ситуаций каждого подмножества имеют одну структуру; структура ситуаций разных подмнож ств мож т быть различной.

Наличие модели сложной предметной области, представляющей все сущ ств нны свойства, позволя т создавать программны сист мы, пр едназначенны е для р ешения разных прикладных задач данной области. Декларативное описание предметной области, в котором не учитывается способ го использования при создании программных сист м, явля тся повторно используемым в разных программных проектах. Поэтому потр бу м, чтобы мод ли сложно-структурированных пр дм тных областей относились к классу моделей с декларативной с емантикой.

1. Сущ е ствующи е опр е д ел е ния мод ел е й онтологий и языки для их пр дставл ния

В работе [232] онтология опр еделяется как кортеж O = (C, is-a, R, а), где C - набор, элем енты которого называют понятиями (концепциями), is-a частичный порядок на C (т. e., бинарно е отношение is с CxC, являюще е ся рефлексивным, транзитивным и антисимметрическим), R - множество, эл м нты которого называют им нами отнош ния (или коротко отношениями), и а - функция, которая устанавливает для каждого отноше ния е го арность.

В работе [240] даны опр еделения понятий ”модель конц ептуализации пр е дм етной области”, ”база знаний пр е дм етной области” и ”модель онтологии пр е дм етной области”. Мод ель конц ептуализации пр е дм етной области опр еделяется как многосортная алгебраиче ская система S = <U, R, F, C>, гд е U - множе ство сортов, R - множе ство отнош ений, F - множество функций, C - множество констант, а база знаний - как подсистема этой алгебраиче ской системы. База знаний может быть задана в виде множества аксиом на многосортном логическом языке, сигнатура которого совпада т с сигнатурой мод ли конц птуализации. Мод ль онтологии пр дм тной области пр дставля тся другой алг браич ской системой O, сигнатура которой есть множество метатерминов, позволяющих задавать алг ебраич е ски е систе мы; O (в терминах этой сигнатуры) пр дставля т ту ж мод ль конц птуализации.

В работ е [178] онтология опр е д еляется как логич е ская т е ория, которая ограничивает допустимые модели логического языка. Онтология в этом случае должна обеспечивать аксиомы, которые ограничивают значение н логич ских символов (пр дикатов и функций) логич ского языка, использу емых как ”примитивы” для опр еделенных целей пр едставления.

Оч видно, что сущ ствующи опр д л ния мод л й онтологий н позволяют пр дставить вс свойства сложно-структурированных пр дм тных област й.

В настоящ вр мя сущ ствуют различны языки для пр дставл ния онтологий [158]. Ср е дствами этих языков также пр е дставляются знания пр дм тных област й.

Язык KIF является языком исчисления пр едикатов п ервого порядка для представления непроцедурных знаний, дополненный средствами представления процедурных знаний в виде условных правил п ереписывания выраж ений [64]. Язык им е ет Лисп-подобный синтаксис [164], поэтому вс е выраже ния представл е ны в пр е фиксной форм е. Язык позволяет представлять как декларативные, так и процедурные знания. KIF, расширенный средствами для задания фреймов, используется в системе Ontolingua [170, 215].

Многи из компьют рных языков для пр дставл ния онтологий позволяют задать понятия, их таксономию, опр д лить аксиомы, задать экз мпляры понятий [158]. Во многих языках такж присутствуют средства для записи процедур (например, язык Ontolingua), либо продукционных правил (наприм ер, LOOM и OCML) [158].

Язык SHOE [208], разрабатывался как язык для представл е ния онтологий в Интернет; он является расширением HTML средствами для описания онтологий и позволя т опр д лить понятия (классы или кат гории) и их таксономию, а такж задать д дуктивны правила, использу емые при получении новых знаний из сети.

Объектно-ориентированными языками представления онтологий являются OIL [185], RDF [205] и RDF Schema [154]. Языки RDF [205] и RDF Schema [154] разрабатывались W3C (Интернет консорциум) как языки для описания Инт рн т р сурсов. Второй язык явля тся расшир ни м п рвого ср дствами для задания фр ймов.

В настоящее время в качестве стандарта языка представления онтологий, разрабатываемых для Интернет, предлагается использовать язык OWL [218, 221, 246], разработанный также W3C. Онтология, представленная на этом языке, включает описание понятий (называемых классами) в пр дм тной области, свойств (называ мых слотами) каждого понятия, описывающими различны особ нности и атрибуты понятия, и ограничений на свойства (называемых фасетами). Онтология вместе с набором индивидуальных случаев классов составляет базу знаний. Самые общи понятия в области должны соотв тствовать классам, которы являются корнями различных таксономич е ских д еревьев. Каждый индивидуум в OWL онтологии - чл е н класса owl:Thing. Таким образом, каждый определенный пользователем класс - неявно подкласс owl:Thing. Сп цифичны для н которой области классы опр д ляются просто объявлением имени класса. OWL также допускает пустой класс, owl:Nothing.

Прим ры онтологий, в которых опр д л ны и рархии классов понятий различных предм етных област е й, пр е дставл ены на сайтах [155­157, 165, 233, 242-250] и описаны в работах [118, 222-223, 236].

Язык, используемый для представления декларативных моделей сложно-структурированных предметных областей, должен обладать сл дующими основными свойствами.

1. Язык должен быть многосортным. Он должен содержать набор сортов, об сп чивающих пр дставл ни знач ний, принадл жащих стандартным в личинам.
2. Позволять опр д лять тр бу мый при мод лировании конкр тной области набор математических символов, используемых для обозначений знаков оп ераций, функций и отношений.
3. Позволять опр д лять тр бу мо при мод лировании конкр тной области множество сортов, обеспечивающих представление значений, принадл жащих н стандартным в личинам, а такж тр бу мый для них набор оп раций, функций и отнош ний.
4. Позволять опр д лять как мод ли основных понятий (т. . названия этих понятий и множ е ства их знач ений), так и вспомогат ельных понятий (названи е такого понятия, его знач ение либо способ вычисления знач ения).
5. Позволять явно опр д лять сорт каждого объ ктного, функционального и пр дикатного символа, использу мого при записи логич ской т ории.
6. Позволять при опр д л нии сорта функционального или пр дикатного символа наибол точно задавать область опр д л ния функции и предиката, обозначенного символом, позволяя явно указать зависимости м е жду аргум е нтами функций и пр е дикатов.
7. Позволять задавать множе ство терминов онтологии уровня i-1, ”скрытых” параметрами онтологии уровня i, а также способ вычисления сорта термина онтологии уровня i-1 в зависимости от знач е ний т ерминов онтологии уровня i.
8. Позволять задавать онтологич ски соглаш ния и знания пр дм тной области в вид формул, т. . давать возможность задания н структурированных част й онтологии и знаний.
9. Позволять задавать интерпретацию объектных, функциональных и пр дикатных символов, т. . давать возможность опр д л ния структурированной части мод ли онтологии и знаний, а такж мод л й ситуаций д йствит льности.
10. Позволять явно опред елять сорт каждой п ер е м е нной, используемой в предложениях языка посредством использования огранич е нных кванторов [113], т.е. явно задавать область д е йствия предложения. Причем областью значений переменной может быть множе ство объ ектных, функциональных или пре дикатных символов.
11. Позволять задавать модульны мод ли, при опр д л нии которых позволять задавать связи м жду их модулями.
12. Язык долже н быть языком с де кларативной с е мантикой. Декларативность языка означает, что его семантика должна позволять выполнить пров рку онтологич ских соглаш ний, опр д л нных для онтологии уровня i-1 онтологией уровня i, проверку огранич ений ц лостности знаний, заданных онтологи й уровня 2, пров рку огранич ний целостности ситуаций, заданных онтологией уровня 2, а также проверку соотв тствия мод ли ситуации мод лям онтологии и знаний. Таким образом, с мантика языка должна опр д лять формальную проц дуру зам ны т рминов и п р м нных их знач ниями и условия, при которых такая проц дура прим нима.

Покаж м, что ни один из сущ ствующих языков н облада т вс м набором п ер ечисл е нных свойств.

Язык классич ской мат матич ской логики - язык логики пр дикатов

* был разработан, для достиже ния двух ц ел ей: во-п ервых, как ср е дство описания состояний порождающего процесса в исчислении предикатов (проц сса порожд ния множ ств формул), во-вторых, как ср дство декларативного описания свойств предм етных областей.

Язык описания проце сса порождения множе ств формул должен им еть такой набор символов языка, чтобы исчисл ни пр дикатов, обладающ свойством полноты, содержало конечно е множе ство правил вывода. Набор символов классич ского языка логики пр дикатов образуют

пропозициональные связки и кванторы. Кроме того, в набор символов

неявно входят множества (области значений переменных), декартово

произв д ни множ ств (области опр д л ния функций и пр дикатов являются декартовыми произведениями), а также функциональные отображения (интерпр етациями функциональных и пр едикатных символов являются элем енты множе ства функциональных отображений).

При использовании языка логики пр дикатов как ср дства декларативного описания свойств предметных областей каждую

логич скую т орию можно рассматривать как способ инт нсионального задания множества функций интерпретации, имеющих одну и ту же кон чную область опр д л ния - сигнатуру языка. В этом случа логич ский язык долж н сод ржать такой набор символов, чтобы с помощью конечного множества предложений можно было задать возможно бол точную аппроксимацию любого подразум ва мого множества функций интерпретации. Понятно, что чем шире такой набор, т е м в больш е м числ е случае в мож ет быть достигнута эта ц ель.

В реальных приложениях при задании декларативных моделей, описывающих свойства предметных областей, приходится подбирать соотв тствующую логич скую т орию, которая опр д ля т пр дставл ни данных пр дм тной области, а такж оп рации, выполня мы над этими данными [113]. Такая мод ель мож ет пр е дставляться как систе ма алгебраических, дифференциальных или других уравнений, система н ераве нств. Таким образом, тр ебу е мый при задании де кларативных моделей набор символов языка включает, как минимум, арифметику. Однако, известно, что исчисление предикатов, обладающее свойством полноты и основанно на таком язык , н мож т сод ржать кон чного множе ства правил вывода.

Из сказанного следует, что сосуществуют несколько логических языков, которые могут быть разбиты на две группы. Языки п ервой группы им ют огранич нный набор символов, являются ср дством пр дставл ния состояний порождающ го проц сса исчисл ния пр дикатов и изучаются в рамках мат матич ской логики. Языки второй группы им ют расширенный набор символов, являются средством декларативного описания свойств пр дм тных област й и изучаются в чистой и прикладной мат матик . Язык, тр бу мый для пр дставл ния мод л й сложно-структурированных област й, долж н быть логич ским языком, обладающим свойствами языков второй группы.

Компьют рны языки для описания онтологий позволяют пр дставить как онтологии, так и мод ли пр дм тных област й. Многи из компьют рных языков для пр дставл ния онтологий используют объ е ктно-ори ентированный подход для описания онтологий [158]: поняти е онтологии пр дставля т собой класс. Онтология вм ст с набором экз мпляров классов составля т базу знаний. На множ ств понятий (классов) определяются отношения (”часть-целое ”, множество-элемент” и т.д.). Компьютерные языки содержат средства для задания процедур и правил, что тр бу тся при описании задач и м тодов, а н свойств пр едм етных областей. Наличие процедурных компон ент в компьютерных языках не позволяет относить их к классу языков с декларативной с мантикой.

1. Методы анализа предм етных областей

В настоящ вр мя сущ ству т н сколько подходов к анализу пр дм тных област й. Один из подходов к анализу связан с пр дставл ни м р зультатов анализа с использовани м сист м понятий, использу е мых при ре ализации программной сист е мы. Прим ером м етодов для такого подхода является объектно-ориентированный метод анализа [67]. В этом случае мод ель пр е дм етной области строится в вид е множ е ства классов объектов и программ, реализующих методы класса. Множество классов опр д ля т структуру объ ктов пр дм тной области, а м тоды - поведение этих объектов, требуемое при решении прикладных задач, для р ализации которых разрабатыва тся программная сист ма. Т. . аналитик н только анализиру т свойства пр дм тной области, но и выполня т работу про ктировщика программной сист мы, опр д ляя

функциональность. Поэтому р зультаты такого анализа прим нимы при разработке программных систем, предназначенных для решения фиксированного множества классов задач, а не при построении д кларативных мод л й пр дм тных област й.

Ещ один подход к анализу использу т прикладная мат матика.

Результаты такого анализа представляются с использованием системы понятий прикладной мат матики в вид н которой мат матич ской

модели. Объекты ситуации в этом случае представляются в виде различных математических объектов - чисел, функций, деревьев. Знания пр дм тной области в этом случа пр дставляются в вид мат матич ских соотнош ний, наприм р, лин йных, дифф р нциальных уравн ний. Однако при постро ении таких систем соотношений приходится упрощать свойства предметной области. Кроме этого, данный метод применим для предметных областей, в которых существует традиция использования мат матики.

Тр тий подход к анализу пр дм тных област й назван онтологич е ским [85]. Р е зультаты такого анализа пр е дставляются с использованием системы понятий предметной области. Модель пр дм тной области строится в вид мод л й онтологии и сист мы знаний, постановки задач формулируются в т ерминах модели онтологии. Разработка м тодов р ш ния задач явля тся отд льным этапом анализа. Рассмотрим существующие методы онтологического анализа [85, 158-159, 187].

П рвой из м тодологий создания онтологий счита тся м тодология, пр е дложе нная в про е кте CYC [206-207]. Проц е сс построе ния содержит три шага. На п рвом шаг вручную кодируются статьи и части знаний, для которых такж вручную извл ка тся информация о н явных знаниях общ го смысла. На втором и тр ть м шагах новы знания общ го смысла извл каются полуавтоматич ски (на втором шаг ) или автоматич ски (на тр етьем шаге) с использовани ем программной системы.

Скел етная м етодология разработки онтологий [234], использованная при разработке Enterprise онтологии, определяет четыре шага разработки:

1. ид нтификация ц ли и охвата онтологии, (2) постро ни онтологии (состоит из фиксации и кодирования онтологии, инт грации сущ ствующих), (3) оц нивани онтологии, (4) докум нтировани .

Ид нтификация пр дполага т опр д л ни ключ вых понятий и отнош ний м жду ними в пр дм тной области, формулировани точных опр д л ний смысла понятий и отнош ний, опр д л ни т рминов для обозначения понятий и отношений. Кодирование предполагает запись онтологии ср дствами н которого формального языка. Для опр д л ния ключ евых понятий онтологии пр е длагается н е сколько м етодологий:

* «сверху-вниз» (top-down): вначал е опред еляются бол е е

абстрактны понятия, а потом они конкр тизируются (как прим ры абстрактных),

* «снизу-вверх» (bottom-up): вначал е бол е е конкр етные понятия, а потом бол абстрактны ,
* комбинированный (middle-out): вначале определяются наиболее важны е понятия, которы е затем обобщаются либо конкр етизируются.

Уточн ени е данной м етодологии дано в [213], гд е опред ел е на методология создания онтологий с использованием систем PROTEGE, Ontolingua и Chimaera.

Шаг 1. Определение области и масштаба онтологии. Должны быть получ ны отв ты на основны вопросы: какую область буд т охватывать онтология, для ч го будут использовать, на каки типы вопросов должна давать отв ты информация в онтологии, кто буд т использовать и поддерживать онтологию.

Шаг 2. Рассмотрение вариантов повторного использования сущ е ствующих онтологий. Повторно е использовани е сущ е ствующих онтологий мож т быть н обходимым, сли сист м нужно взаимод йствовать с другими прилож ниями, которы уж вошли в отд льны онтологии или контролиру мы словари.

Шаг 3. П ер ечисл е ни е важных терминов в онтологии. Пол е зно составить список вс х т рминов, о которых тр бу тся сказать что-либо или которы надо объяснить пользоват лю (т. . отв тить на вопросы: каки термины надо рассмотреть, какие свойства имеют эти термины, что хотелось бы сказать об этих т ерминах).

Шаг 4. Опред ел е ни е классов и и ерархии классов. На этом этап е выполняется процесс «сверху-вниз» либо «снизу-вверх», либо комбинированный. Понятие в данном случае - это и е сть класс.

Шаг 5. Опр е д ел ени е свойств классов - слотов. Задача данного шага состоит в описани внутр нн й структуры понятий.

Шаг 6. Определение фацетов слотов. Слоты могут иметь различные фац еты, которы е описывают тип знач ения, разр е ше нны е знач ения, число знач ний (мощность) и други свойства знач ний, которы мож т принимать слот.

Шаг 7. Создани е экз е мпляров. Посл е дний шаг - это создани е отдельных экземпляров классов в иерархии. Для определения отдельного экз е мпляра класса тр ебу ется (1) выбрать класс, (2) создать отд ельный экз е мпляр этого класса и (3) вве сти знач е ния слотов.

Н которо уточн ни опр д л нной выш м тодологии дано на сайт IBM [245]: на шаге 7 тр ебу ется создать базу знаний, опр еделяя экз емпляры классов и задавая знач ния слотов. Схожи шаги разработки пр длагаются в [105, 161, 168, 225].

Н которы из м тодологий поясняют, как правильно опр д лить иерархию понятий (классов) в онтологии. Например, методология, использованная при разработке онтологии MENELAS [158] (для систе мы понимания ст ств нного языка), пр длага т сл дующи ч тыр принципа:

1. подоби (подкласс долж н им ть тот ж самый тип как го родит ль),
2. сп цифика (подкласс долж н им ть н которо различи , которо

отличает это от этого родит еля), (3) оппозиция (подклассы одного понятия н совм стимы друг с другом), (4) уникальная с мантич ская ось

(подклассы понятия могут быть ограничены, чтобы отличаться от родителя в некоторых общих свойствах или 'осях'). В работах [69-70] определяются, что постро нная и рархия понятий в онтологии должна удовл творять принципу хорош й формы: понятия одного уровня связываются с

родит льским конц птом одним и т м ж типом отнош ния, глубина ветвей онтологического дерева должна быть примерно одинакова (+-2), общая картинка должна быть довольно симм тричной, п р кр стны ссылки должны быть по возможности устран ены.

Можно считать, что онтологич ский анализ состоит из ч тыр х этапов: (1) опр ед ел е ни е той конц е птуализации, которую должна

сп е цифицировать онтология, (2) постро ени е этой онтологии, (3)

построение системы знаний в терминах онтологии, (4) поиск ошибок в онтологии и сист е м е знаний [85].

От типа конц птуализации, которую должна пр дставлять онтология, зависит сод ржани шагов каждого этапа. Так, м тодология, использованная в про е кт е TOVE (Toronto Virtual Enterprise) [190], предлагает на первом этапе определить сценарии мотивации (множество проблем предприятия), неформальные вопросы о компетентности (опр д л ни тр бований к онтологии, описанных как н формальны вопросы, на которы онтология должна отв чать).

Важным этапом является последний этап. В On-To-Knowledge (OTK) м етодологии [230] этот этап назван этапом оц е нивания (evaluation) онтологии. Задачей данного этапа является опр еделени е наличия «дыр» и н правильных пр дставл ний в описании онтологии в соотв тствии со спецификацией назначения онтологии (результат первого этапа). Процесс разработки онтологии рассматривается как циклич е ский: при прим е н е нии онтологии, сли тр бу тся, онтология уточня тся и р дактиру тся формальное описание. Аналогичное содержание этапа оценивания онтологии можно увидеть и в других методологиях разработки [158-159, 187].

Многи м тодологии разработки онтологий в кач ств одного из шагов разработки предлагают рассмотреть вопрос повторного использования суще ствующих онтологий [158-159, 187] и построить онтологию как инте грацию сущ е ствующих. Инт е грация пр е дполагает выполн е ни е сл е дующих шагов [194]: (1) поиск м е ст в онтологиях, гд е они частично п р крываются, (2) установл ни отнош ний м жду понятиями онтологий, (3) пров рка р зультата.

В [226, 231] рассматривается проце сс конструирования (сборки) онтологий из повторно использу емых модул ей онтологий. Прост ейшим способом комбинирования онтологий явля тся конструировани посредством присоединения, в результате чего создаваемая онтология состоит из объ дин ния классов, отнош ний и аксиом двух онтологий, при этом конфликты м е жду им енами должны быть разреш е ны. При конструировании мож т ограничиваться область прим нимости онтологии или применяться полиморфное усовершенствование, известное из объ е ктно-ори е нтированных подходов [67].

Для онтологий, пр дставл нных на язык OWL [218], ср дством интеграции является аннотация импорта, например Annotation(imports <[http://www.car.org/car#](http://www.car.org/car%23)>). Аннотация импорта включает все аксиомы из онтологии car в ц ел е вую онтологию. При инте грации сл еду ет установить сл е дующи е отнош е ния м е жду компон ентами онтологии.

* equivalentClass: два класса эквивал е нты, е сли они им еют одни и т е же примеры. Эквивалентность между классами позволяет создать класс- синоним. Если класс А опр е д ел е н как синоним класса Б, то вс е прим еры класса Ф являются прим ерами класса Б.
* equivalentProperty: два свойства объектов А и Б эквиваленты, если они отображают объ кты А и Б в одно и то ж множ ство. Отнош ни эквивалентности позволяет установить свойства-синонимы.
* sameAs: данно е отнош ени е позволя ет задать одному и тому же индивидууму разны им на.
* differentFrom: данное отношение позволяет указать, что разные индивидуумы различны.
* AllDifferent: данное отношение позволяет определить, что все индивидуумы некоторого множе ства являются взаимно различными.

Аналогичны е отнош е ния опр едел е ны в [162].

М тодология, которая позволя т построить н только онтологию пр дм тной области, но и онтологию р ша мых в н й задач, пр длож на в [211-212]. Проце сс построения онтологии состоит из следующих этапов.

1. Извлечение единиц задач: (а) разделение текста технич е ского документа на маленькие блоки для более легкого извлечения словаря; (б) извл ч ни из блоков диничных задач, которы сод ржат только один проце сс (де йстви е ); (в) формирование конкретных потоков задач, объ единяя единичные задачи.
2. Организация действий задач: (а) конкретизация действий задач из глаголов в единичных задачах; (б) организация действий в задачах в is-a иерархию; (в) определение понятий-ролей, называемых ролями-действиями задачи, которые появляются как вход/выход действий задачи.
3. Анализ структуры задачи: (а) обобщ ни конкр тных потоков задач для получ ения общих потоков задач; (б) описание потоков объ ектов, которые ясно выражают отнош ния м жду входами/выходами д йствий задачи в общих потоках; (в) опр д л ни зависящих от задач рол й на основ этих потоков объ е ктов; под зависящими от задачи ролями понимаются понятия- роли, зависящие от всего процесса задачи; (г) извлечение терминов ПО, которы играют зависящи от задачи роли.
4. Организация понятий ПО: (а) опр д л ни различий м жду ролями, зависящими от понятий ПО, и базовых понятий; (б) организация понятий ПО в is-a иерархию.

Методология, разрабатываемая в лаборатории прикладной онтологии (Италия) [173-177, 179], основывается на определении понятий высокого уровня общности, которы могут использоваться как им на м таклассов (например, сущность, процесс, время) в прикладных онтологиях. При опр еделении таких понятий используются м етоды философии.

Из прив д нного обзора видно, что сущ ствующи м тодологии достаточно подробно описывают построение одного уровня онтологии, а такж м тоды создания онтологий из сущ ствующих, основанны на опр еделении различных отнош ений между терминами онтологий.

Однако остался ряд не рассмотренных вопросов. Существующие методологии не рассматривают процесс построения многоуровневой онтологии. Последняя из рассмотренных методологий не может считаться м етодологией постро ения многоуровневой онтологии, поскольку пр едлагает определение понятий высокого уровня абстракции. Существующие м тодологии н описывают проц сс разработки онтологий нижних уровн й, если существует онтология более высокого уровня. Не определены возможны отнош ния на множ ств онтологий. Таким образом, тр бу тся обобщ ни сущ ствующих м тодов онтологич ского анализа на случай сложно-структурированных пр дм тных област й, разработка м тода использования онтологий высокого уровня при анализ пр дм тных областей, а также опр еделение отношений на множе ств е онтологий.

1. Оболочки систем, основанных на знаниях

Компон нтами сист мы, основанной на знаниях (СОЗ), являются интеллектуальный редактор базы знаний, база знаний, решатель задач, подсистема интерфейса с пользователем (обеспечивающая ввод исходных данных задач и вывод р езультатов р е ш е ния) и подсисте ма объясне ния [71].

Сист ма, база знаний которой пуста, называ тся оболочкой сист мы, основанной на знаниях. Разработка СОЗ предполагает разработку ее оболочки. Сопровождение СОЗ пр едполагает сопровождение е е базы знаний.

Для пр едставления знаний в базе знаний используются продукционные мод ели, с е мантич е ские с ети, фр е ймы и логич е ские модели [71]. Сущ е ствуют различные языки представления знаний и программные системы, основанные на этих языках [10-11, 31, 62, 71, 81, 84, 98, 104, 115, 124, 128, 131-135, 138]. Наибольш распростран ни получили языки и сист мы, основанны на правилах [251]. Сущ е ствуют также систе мы, основанны е на использовании мод ел е й пр едставл е ния знаний не скольких типов (наприм ер, систе ма ОМЕГА [123]).

Оболочки, основанные на использовании некоторой модели представления знаний, называются универсальными. Все оболочки, основанные на правилах, являются унив ерсальными. Пр едставление знаний в этом случае выполняются экспертом предметной области совместно с поср едником - инже нером знаний [71].

Если знания пр дм тной области структурированы, то мож т быть создана сп циализированная оболочка, язык пр дставл ния знаний которой основан на онтологии знаний предметной области. Специализированная оболочка позволяет исключить поср едника из проце сса формирования базы знаний, поскольку в этом случа при создании базы знаний эксп рт использу ет изв е стную е му систе му понятий [85]. Р е дактор знаний явля ется интерпретатором онтологии знаний, процесс редактирования управляется этой онтологией. Преимуществом специализированной оболочки перед универсальной является то, что база знаний создается и сопровождается эксп ртом.

Прим рами сп циализированных оболоч к являются оболочка сист мы интеллектуального сопровождения, профилактики, диагностики и лечения элементозов [73], оболочка системы поддержки процесса сочинения хор е ографом совр еменного сольного танца стиля "Фанк" [117],

специализированная оболочка, пр едназначенная для моделирования проце сса оптимизации программ [103].

Метаонтология медицинской диагностики [94-95, 139] использована при разработке специализированных оболочек систе м медицинской диагностики [98, 112], создании систе мы интелл е ктуальной поддержки обсл едования больных [140]. Р едактор знаний, управля е мый м етаонтологие й, позволя ет пр дставить структурированны знания разных разд лов м дицинской диагностики, что расширяет область применимости системы. Онтологии разных разделов м едицины опр еделяют множе ство названий заболеваний и признаков каждого разд ла и н пр дставляются как отд льны компон нты оболочки, а входят в базы знаний разделов медицины.

Множество классов прикладных задач, поддерживаемых решателем задач сп циализированной оболочки, фиксиру тся онтологи й или м таонтологи й. Онтология опр д ля т всю сист му понятий пр дм тной области и, тем самым, все возможные классы задач известны до начала разработки оболочки. М таонтология, в т рминах которой описываются структурированные онтологии разделов, также фиксиру ет множе ство классов задач, поскольку м таонтология сп цифициру т свойства вс х множ ств терминов онтологии. Таким образом, сущ е ствующие спе циализированны е оболочки позволяют развивать базы знаний. Программны компон нты оболочки фиксируются при создании.

Как следует из определения сложно-структурированной области, компонентом специализированной оболочки для такой области должен быть р дактор многоуровн вой онтологии, а р дактор знаний долж н быть интерпретатором класса языков для представления знаний, задаваемых онтологиями уровня 2. Анализ свойств пр дм тных област й показал, что при редактировании знаний могут задаваться значения, для представления которых в предметной области существует принятая графическая нотация. Поэтому р дактор знаний долж н позволять использовани программных систем, поддерживающих такой способ представления значений.

Поскольку знания пр дм тной области могут сод ржать структурированные и неструктурированные части, то и решатели задач должны позволять использовани как структурированных, так и неструктурированных знаний. Во втором случае решатель задач должен ум ть р шать сист мы соотнош ний, т. . обладать свойствами интелл е ктуальных пакетов прикладных программ [61, 130].

Рассмотрим еще одно свойство специализированных оболочек для сложно-структурированных пр дм тных област й. В т рминах онтологии уровня n, на основ которой выполня тся разработка такой оболочки, могут быть заданы спецификации всех классов задач и разработаны решатели классов задач, которы должны быть прим нимы для вс х подклассов, сп цификации которых могут быть заданы в т рминах онтологии уровня n-1 или ниже. Известно, что более общий метод решения задач является менее эффективным. Поэтому специализированные оболочки для сложно­структурированных пр дм тных област й должны позволять добавл ни специализированных р ешателей задач, т.е. им еть ср едства изм енения состава своих программных компоне нтов.

Рассмотрим сущ ствующи программны сист мы, разработка которых основана на использовании онтологий.

Прое кт W3C [246] определя ет сл едующие приложе ния для онтологий: создание управляемых словарей, поддержка организации и навигации по документам, поддержка поиска и просмотра (в том числе структурированного), специализация поиска, поддержка разрешения смысловых н однозначност й, подд ржка взаимод йствия при объ дин нии информации.

Систе мами поиска информации в Интернет являются Exactus [116] и Oyster [180-181, 219]. LightOntos [102] пр едназнач е на для р е ш е ния пробл е мы структуризации и поиска докум нтов с нужной информаци й на п рсональном компьют р . Други прим ры прим н ний онтологий для р ш ния задач поиска и инт грации информации, извл ч ния информации из текстов на естественном языке, описаны в работах [68, 72, 74, 78, 106, 108, 166-167, 209, 216].

В настоящ вр мя на основ онтологий создаются порталы знаний для различных пр дм тных област й. Портал знаний об сп чива т взгляд на сп цифичную для пр дм тной области информацию в Инт рн т, помогая находить р ел е вантную, спе цифичную для области информацию [229]. Онтология описывает структуру области и является концептуальной основой для р еш ения указанных задач. Web портал пр едставляет собой Интернет сайт, структура пр дставл ния информации на котором опр д ля тся OWL онтологие й [218]. Онтология для портала может включать терминологию типа "журнальны статьи", "публикации", "люди", и "автор". Эта онтология также может содержать определения типа "все журнальные статьи - это публикации", или "авторами всех публикаций являются люди. Онтология портала знаний [214, 229, 241] часто состоит из онтологий разных типов: наприм р онтологии, описывающ й эл ктронный профиль участника, онтологии, описывающ й структуру пр дставл ния информации о публикациях, онтологии, описывающ й структуру области и т.д.

Прим ерами порталов знаний являются сайты OntoWeb [217] и KnowledgeWeb [193], порталы по архе ологии [1], компьютерной лингвистике [66]. В работ [63] пр длага тся использовать онтологии для создания диной информационной системы РАН.

Онтологии такж используются для описания видов работ организаций [108], при разработке интерфейсов программных систем [75-76], как средства инте грации баз данных [224], при создании различных образовательных курсов и обучающих систем [79, 114, 183-184, 186, 189, 191-192, 211-212, 228]. Сущ ствуют р дакторы онтологий и знаний [160], разработаны м тоды создания редакторов информации, управля е мых м етаинформацие й [96-97].

Таким образом, разработаны м етоды создания р едакторов онтологий и знаний, м тоды использования онтологий при создании сист м поиска и инт грации информации, а такж пользоват льского инт рф йса. Однако н разработаны м тоды создания сп циализированных оболоч к для сложно­структурированных пр дм тных област й, обладающими вс ми указанными выше свойствами.

1. Выводы

В данной главе определены существенные свойства сложно­структурированных пр дм тных област й и их мод л й, рассмотр ны сущ ствующи опр д л ния мод л й онтологий и языки для их представления, описаны недостатки этих языков, описаны существующие м тоды анализа пр дм тных област й, прив д на структура оболоч к сист м, основанных на знаниях, и рассмотрены свойства специализированных оболоч к для сложно-структурированных пр дм тных област й.

Показано, что актуальными задачами являются разработка класса декларативных моделей для моделирования сложно-структурированных областе й, обладающих свойствами, пер ечисл е нными в п. 1.2.3; языка, им еющего декларативную с емантику, для пр едставления моделей онтологий, обладающ е го свойствами, пе р ечисл е нными в п. 1.3; разработка м етодов анализа сложно-структурированных пр дм тных област й, обобщающих сущ е ствующие м етоды онтологич е ского анализа, описанны е в п. 1.4;

разработка требований, архитектуры и методов реализации сп циализированных оболоч к сист м, основанных на знаниях, для сложно­структурированных пр дм тных област й, обладающих свойствами, перечисленными в п. 1.5.

Разработка класса мод л й, языков и м тодов анализа тр бу т подтверждения их применимости для реальной сложно-структурированной области, поэтому актуальной задач й явля тся разработка мод ли такой области с использовани м пр длага мых м тодов анализа и пр дставл ни ср дствами языка. М тоды создания программных сист м должны апробироваться при создании программных сист м опр д ля мого класса. Поэтому актуальной явля тся задача разработки сп циализированных оболоч к сист м, основанных на знаниях, для р альной сложно­структурированной пр дм тной области, состоящ й из н скольких разд лов, а также технологии создания и сопровождения расширяемой системы, основанной на знаниях, с использовани м сп циализированной оболочки.

ГЛАВА 2. МНОГОУРОВНЕВЫЕ МОДЕЛИ СЛОЖНО­СТРУКТУРИРОВАННЫХ ПРЕДМЕТНЫХ ОБЛАСТЕЙ

В данной глав е определяются класс многоуровн евых систем логиче ских соотнош ний для мод лирования сложно-структурированных пр дм тных областей, а также класс языков прикладной логики, используемых при пр дставл нии мод л й. При разработк класса мод л й и языка использовались опр д л нны в глав 1 свойства сложно-структурированных пр дм тных област й и их мод л й.

Поскольку основным назначением определяемых моделей является пр дставл ни свойств сложно-структурированных пр дм тных област й, то модели относятся к классу декларативных моделей, а язык - к классу языков с декларативной с емантикой.

1. Н е обогаще нны е сист е мы логич е ских соотноше ний уровня m

Необогащенная система логических соотношений Om уровня m (m>2) е сть тройка <Ф1П, Pm, Cm>, где Ф1^ - множе ство определений понятий уровня m, ограничений на множества их значений и связей между значениями понятий, Pm - множе ство парам етров уровня m, Cm - множе ство опр еделений конструкторов уровня m. Множества Pm и Cm могут быть пустыми. Если m=2, то C2 = 0.

При мод лировании сложно-структурированной пр дм тной области каждая н обогащ нная сист ма логич ских соотнош ний Om явля тся модул м мод ли онтологии уровня m. Прим ром н обогащ нной сист мы логич ских соотнош ний уровня 4 явля тся сист ма O4 - мод ль онтологии ч етвертого уровня для химии, привед е нная в п. 4.1 главы 4. Прим ерами н е обогащ е нных систе м логич е ских соотнош е ний уровня 3 являются сист е мы

1. 3 3

O,^ , Oо , Op , пр едставляющи е модели онтологии уровня 3 для физиче ской (п.

1. и органич е ской (п. 4.2.2.) химии, а такж е р е нтг ено-флуор е сц е нтного анализа (п. 4.2.3).
2. Опр е дел е ни е понятий уровня m и связ ей м е жду ними

Опр еделим вид предложений из множе ства Фт.

1. сорт n: M - опр д л ни основного понятия, гд n - имя понятия, M - определение объема (экстенсионала) понятия (множества возможных знач ений для n).

Если объем понятия с им енем n задан множе ством отображений (Mi х М2 х... х Mn——M0), где M1, ... , Mn, M0 - множе ства, причем M0 ^ {true, false}, буд м называть n функциональным им н м. Если объ м понятия с им н м n задан множе ством отображений (M1 х M2 х... х Mn— {true, false}), будем называть n пр дикатным им н м. В остальных случаях буд м назвать n пр дм тным им н м.

1. (V1: M1) (V2: M2(v1)) ... (vq: Mq(v1, v^..., Vq-1)) (n: M(v1, v2,., Vq)) сорт n: M0(v1, v2,..., vq) - опр еделени е основных понятий, им ена которых скрыты парам етрами v1, v2,..., vq. Зде сь v1, v2,..., vq - пер ем енны е, M1- множе ство знач ний п р м нной v1, M2(v1) - множ ство знач ний п р м нной v2, зависяще е от знач ений перем енной v1,., Mq(v1, v2,..., vq-1) - множе ство знач ений п ер е м е нной vq, зависящ е е от знач е ний п ерем е нных v1, v2,..., vq-1; M(v1, v2,..., vq) - опр еделение множества им ен основных понятий с использовани ем парам етров-пер ем енных v1, v2,..., vq; n - пер ем енная, M0(v1, v2,..., vq) - опр е дел е ни е способа вычисл ения объ е мов основных понятий (множе ств возможных значений имен n из M(v1, v2,..., vq)) с использованием знач ений пер ем енных v1,v2, .,vq.

Парам тры могут скрывать пр дм тны , функциональны и пр дикатны им на.

1. n = t - определение вспомогательного понятия, где n - имя понятия, t - знач ни понятия либо способ вычисл ния знач ния по знач ниям других понятий.

Будем также различать предметные, функциональные и предикатные имена вспомогательных понятий. Если значени е понятия с им енем n задано

Х-термом, значение которого является логическим, то n будем назвать предикатным именем вспомогательного понятия. Если значение Х-терма не явля тся логич ским, то n буд м назвать функциональным им н м вспомогательного понятия. Понятие с именем n, при определении значения которого не использован Х-терм, будем назвать предметным именем вспомогательного понятия.

1. (V1: M1) (V2: M2(v0) ... (vq: Mq(v1, V2,..., Vq4)) (n: M(v1, V2,..., Vq)), n = t(v1, v2,..., vq) - опр еделени е множе ства вспомогательных понятий, им ена которых скрыты парам етрами v1, v2,..., vq. Зде сь v1, v2,..., vq - пер ем енные, M1- множ ство знач ний п р м нной v1, M2(v1) - множ ство знач ний п ерем енной v2, зависяще е от значений пер ем енной v1,., Mq(v1, v2,..., vq-1) - множество значений переменной vq, зависящее от значений переменных v1, v2,..., vq-1; M(v1, v2,..., vq) - опр еделение множества имен вспомогательных понятий с использованием параметров-п ерем енных v1, v2,..., vq; n - п ерем енная, t(v1, v2,..., vq) - опр едел ение способа вычисления значения вспомогательных понятий (знач ений имен n из M(v1, v2,..., vq)) с использовани ем пер ем енных v1,v2,.,vq.

Парам тры могут скрывать пр дм тны , функциональны и пр едикатны е им ена вспомогательных понятий.

1. (V1: M1) (V2: M2(V1)) ... (Vq: Mq(V1, V2,..., Vq-1)) f(V1, V2,..., Vq) либо f -

задание ограничений на множество значений понятий и связей между знач ениями понятий. Здесь v1, v2,..., vq - пер ем енны е, M1- множе ство знач ний п р м нной v1, M2(v1) - множ ство знач ний п р м нной v2, зависяще е от знач ений перем енной v1,., Mq(v1, v2,..., vq-1) - множе ство знач ений п ер е м е нной vq, зависящ е е от знач е ний п ерем е нных v1, v2,..., vq-1; f(v1, v2,..., vq) - формула, содержащая п ерем енны е v1, v2,..., vq, f - формула, н сод ржащая п р м нных.

В пр е дложе ниях вида (2), (4) и (5) посл е доват ельность (v1: M1) (v2: M2(v1)) ... (vq: Mq(v1, v2,..., vq-1)) будем называть пр е фиксом.

Определение основных понятий

С помощью пр е дложе ний вида (1) или (2) опр е деляются основны е понятия онтологии н которого разд ла или подразд ла сложно­структурированной пр едм етной области. Предм етны е им ена задают названия множе ств объектов либо названия характеристик объектов данного раздела. Функциональные и предикатные имена задают названия отношений между объ е ктами раздела.

Рассмотрим прим еры пр едложений вида (1) и (2), записанных с использовани м ср дств опр д л нного в п. 3.6. класса языков прикладной логики.

Сл едующ е е предлож ени е вида (1): сорт Признаки: {}N \ 0 опр е д еляет основно е поняти е с (пр е дм етным) им е н е м "признаки”, объ ем которого есть множество всех подмножеств множества обозначений, за исключ ни м пустого множ ства (прим р взят из работы [86]). Другими прим рами пр длож ний данного типа являются пр длож ния с ном рами 3, 9, 11, 14, 15, 16 модели онтологии четв ертого уровня для химии (п. 4.1).

Сл едующ е е предлож ени е вида (1): сорт Типы компонентов сущности: (Типы сущностей ^ {}Типы сущностей) определяет основное понятие с (функциональным) именем "типы компон е нтов сущности", объ е м которого е сть множе ство функций, область опр е д ел е ния которых е сть множ е ство "типы сущност е й", а область знач е ний

* множ е ство вс ех возможных подмноже ств множе ства "типы сущност ей".

Сл едующе е пр едложение вида (1): сорт фазово е равнов е сие: I[1, число шагов проц е сса] ^ {true, false}

определяет основное понятие с (предикатным) именем "фазовое равновесие", объем которого есть множество предикатов, область определения которых есть множество целых чисел, не меньших 1 и не больших знач е ния, задавае мого т ермином "число шагов проц е сса".

Следующее предложение вида (2) определяет множество основных понятий, имена которых скрыты параметром "признаки" (пример взят из работы [86]):

(признак: Признаки) сорт признак: (моменты наблюдения(признак) ^ возможны знач ния(признак))

Объемом каждого понятия, (функциональное) имя которого

принадл е жит знач е нию парам етра "Признаки", явля ется множ е ство функций, областью определения каждой из которых является множество, задаваемое знач ени е м функции "мом е нты наблюд е ния" для аргум е нта "признак", а областью значений - множество, задаваемое функцией "возможные знач ния" для аргум нта "признак" (прим р взят из работы [86]). Другими прим рами пр длож ний вида (2) являются пр длож ния с ном рами 4, 13, 17 (п. 4.1).

Определение вспомогательных понятий

Пр е дложе ния вида (3) или (4) используются при задании вспомогательных понятий раздела или подраздела предметной области. Рассмотрим прим еры предлож ений вида (3):

1. инт енсивны е парам етры = {т е мп ература, давл ени е, плотность, химич е ский пот енциал}

опр еделяет вспомогательное понятие раздела физиче ской химии с им енем "инте нсивные парам етры", знач е ни е м которого явля ется множе ство, состоящее из элементов "температура", "давление", "плотность",

"химич е ский поте нциал".

1. возможная формула веще ства = (u(n: I[1, ^)) {(v; ((х химич е ские элем енты, I[1,~))ft n)) (&(i: I[1, length(v)]) (&(j: I[1, length(v)] \ {i}) n(i, v) \* n(j, v)))}) u (u(n: I[1

, TO)) {(v: ((х химиче ские элем енты u возможная формула вещества, I[1, ^))й n)) (&(i: I[1, length(v)]) (&(j: I[1, length(v)] \ {i}) n(i, v) \* n(j, v)))}) определяет вспомогательное понятие с именем "возможная формула в е щ е ства", знач е ни ем которого явля ется множ е ство вс ех возможных посл доват льност й (простых или сложных) компон нт формулы химич ского со дин ния. Каждая простая компон нта пр дставля т собой пару, состоящую из химич ского эл м нта и го инд кса; каждая сложная компон нта пр дставля т собой пару, п рвым эл м нтом которой явля тся компон нта формулы, а второй - инд кс этой компон нты формулы.

1. индекс = (X (v1: возможная формула в еще ства) (v2: {(v3: химиче ски е элементы и возможная формула в еще ства) принадлежит со единению (v1, v3)}) п(2, компонента^, ном ер компоненты^, v2)))) опр е д еля ет вспомогательно е поняти е с им ен е м "инде кс", для которого X- т рм зада т способ вычисл ния знач ния.

При моделировании сложно-структурированных предметных областей пр е дложе ния вида (3) используются для опр е дел е ния множ е ства знач е ний, принадлежащих некоторой нестандартной величине. Левая часть таких предложений определяет название нестандартной величины (предметное имя), а правая - способ построения элементов множества значений, принадл жащих этой в личин . В рассмотр нном выш прим р 2 определяется нестандартная величина, имеющая название "возможные формулы вещ е ства", правая часть пр е длож ения задает правило постро е ния формул. Пр е дложе ния вида (3) используются также для опр е д ел ения операций и отношений над элем ентами не стандартных в еличин. Л евая часть таких пр длож ний зада т функционально (знак оп рации) или пр дикатно (знак отношения) имя, а правая является X-термом. В рассмотренном выше примере 3 определяется операция "индекс" для величины с названием "возможная формула ве щ е ства".

Определение ограничений на множество значений понятий и связей между значениями понятий

Огранич ния на множ ство знач ний понятий и связи м жду знач ниями понятий задаются пр е дложе ниями вида (5). Наприм ер, пр е дложе ни е Клиническая картина(здоров) = 0 задает ограничение на множество знач ений понятия с им е н е м "клинич е ская картина" [86].

Пр е дложе ни е: (Тип1: Типы сущносте й) (Тип2: Типы сущност ей \ {Тип1}) ](Тип1) п ](Тип2) = 0 задает связи м е жду знач е ниями понятий, имена которых скрыты парам етром "Типы сущностей": множе ства

сущностей различных типов не пересекаются. Другими примерами пр е дложе ний вида (5) являются предложе ния с ном ерами 10, 12, 18 (п. 4.1).

Множество предложений вида (5), которые содержат только имена из множества Pm, представляют ограничения целостности онтологий уровня m-1. Остальные предлож ения вида (5) задают н е которы е огранич е ния ц лостности для онтологий сл дующих уровн й, н которы огранич ния ц лостности знаний пр дм тной области, а такж н которы связи знаний и действительности пр едм етной области.

1. Опр е дел е ни е парам етров уровня m

Элементы множества параметров Pm являются подмножеством множе ства им ен основных понятий уровня m, опр еделенных в пр едложениях вида (2), входящих в Ф1^. Все элементы Pm задают термины для описания онтологии уровня m-1. Если множе ство Pm ^ 0, будем называть Om н еобогащенной системой логиче ских соотношений уровня m с парам етрами. В противном случае Om является н е обогащ е нной сист е мой логич е ских соотноше ний уровня m б е з парам етров.

При m>3 пр едм етны е парам етры являются им енами множе ств терминов онтологии уровня m-1; функциональные и пр е дикатны е парам етры являются им нами функциональных и н функциональных отнош ний м жду т ерминами онтологии уровня т-1. При т=2 пр е дм етные парам етры являются им нами множ ств объ ктов разд ла пр дм тной области; функциональны и предикатные параметры являются именами функциональных и н ефункциональных отношений между объектами.

Т ермин "признаки" явля ется прим ером пр е дм етного парам етра онтологии уровня 3 для модели м е дицинской диагностики [86]. Его знач ением является множе ство названий м едицинских признаков некоторого разд ла м дицины - т рминов онтологии данного разд ла.

Прим ером пр едм етного парам етра онтологии уровня 4 для химии (глава

1. явля ется "Типы сущносте й", знач е ни е которого задает множ е ство типов объектов раздела химии - терминов метаонтологии раздела химии. Например, для физической химии такими типами будут "Химические эл е м е нты", "Химич е ски е ве щ е ства", "Химич е ски е р е акции".

Примером функционального параметра онтологии уровня 4 для химии (глава 4) явля ется "Типы компон е нтов сущност е й", знач ени е которого задает отношение "Компонентами сущностей типа t1 являются сущности типов t2,...,tk", причем t1 пробегает множество значений парам етра "Типы сущност е й".

1. Опр е дел е ни е конструкторов сортов уровня m

Элем енты множе ства Cm = {ст1, ст2,..., стг} являются конструкторами, опр д ляющими способ постро ния сортов т рминов онтологий уровн й, м еньших т. Каждо е ст сопоставляет им ени i-го конструктора X - терм:

t = (X(v\: M11) (v12: M^) ... (v^: M^) (X(v\: M21(vb...vq1)) (v22:

M22(vb...vq1)) ... (v2q2: M^^,.. ^1)) ... (X(v\: Ms1(vb...vqs-1)) (vs2:

Ms2(vb...vqs-1)) ... (vsqs: M^b..^4)) M^,...Vqs))...)), где

* t - имя конструктора;
* (X(v\: M11) (v12: M12) ... (v1q1: M1q1) (X(v\: M21(vb...vq1)) (v22:

M22(v1,.vq1)) ... (v2q2: M2q2(vb.. .vqO) ... (X(vs1: Ms1(v1,.vqs-1)) (vs2:

Ms2(v1,.vqs-1)) ... (vsqs: Msqs(vb.. .vqs-1)) M^b...Vqs))...)) есть X-терм;

* s - порядок конструктора, 1 < s < m-1;
* - v\, v^,..., vsqs - параметры конструктора; парам етры vi+\, vi+12,..., vi+1qi+i будем называть парам етрами (s-i)-ro порядка;
* M11, M12,. , M1q1,., Msqs - множе ства значений парам етров конструктора, причем определение хотя бы одного из множе ств M11, M12,. , M1q1 зависит от парам тров уровня m;
* M(v11,.vsqs) - опр еделени е множе ства, зависящего от парам етров

1. s

v 1,...vqs.

Рассмотрим прим ры опр д л ния конструкторов сорта (прим ры взяты из главы 4).

1. Собственные свойства проц есса = (к (Область возможных значений: {}(Множе ства знач е ний u {}Корт е жи знач е ний)) (I[1, Число шагов проце сса] ^ Область возможных значений))

Опр д ля т конструктор п рвого порядка, парам тром которого явля тся "область возможных значений". При заданном значении параметра конструктор строит сорт как множе ство функций, аргум ентами каждой из которых являются ном р шага проц сса, а р зультатом - эл м нт множе ства, заданного значени ем парам етра.

1. Собстве нные свойства сущност ей = (к(Тип сущности: Типы сущносте й) (к(Область возможных значений: {}(Множе ства знач ений u {}Кортежи знач ений)) ^(Тип сущности) ^ Область возможных знач е ний)))

Опр д ля т конструктор второго порядка. "Тип сущности" явля тся парам тром второго порядка, а "Область возможных знач ний" - п рвого порядка. При задании знач е ния парам етра "Тип сущности" конструктор строит множество функций, у каждой из которых область определения е сть множе ство знач ений или множе ство кортежей m, а область значений

* множе ство функций, аргум ентом каждой из которых является сущность типа t, а р зультатом - эл м нт множ ства m.

Множество предложений Tm = Ф1^ u Cm будем называть множеством логич ских соотнош ний сист мы Om.

1. Функция интерпр етации имен

Будем называть множеством имен, определяемых системой Om, множе ство, составленно е из названий основных и вспомогательных понятий, а также имен конструкторов. Будем предполагать, что на множестве имен системы Om задана функция а, значени е которой для каждого имени е сть интерпр етация этого им е ни [110].

Введем обозначения:

* a(n) - значение им ени n, опр еделенно е функцией интерпретации а;
* 0 = {v1/c1,...,vm/cm} - подстановка значений c1,...,cm вместо переменных V1,...,Vm;
* 0(v) - значени е, задаваемое подстановкой 0 для пер ем енной v;
* Ja,0(t) - знач ение, полученно е в р езультате зам ены им ен, входящих в t, их значениями, задаваемыми функци ей интерпр етации а, а пер ем енных - их знач ениями, задавае мыми подстановкой 0.

Буд м называть функцию а допустимой, сли выполняются сл дующи условия:

1. е сли опр е д ел ени е основного понятия им е ет вид сорт n: M, то a(n) е

Ja,0(M) (сопоставленное имени значение принадлежит множеству,

получ нному в р зультат зам ны им н, входящих в M, знач ниями, задавае мыми функци е й инт ерпр етации а);

1. е сли опр е д ел ени е основного понятия им е ет вид (v1: M1) (v2: M2(v1)) ... (Vq: Mq(V1, V2,..., Vq-1)) (n: M(V1, V2,..., Vq)) сорт n: Mc(V1, V2,..., Vq), то для каждого n е Jo,0(M(vb V2,..., Vq)) выполнено a(n) е J^^C^, V2,..., Vq)), причем 0 = {v!/cb...,vq/cq}, где c1 е Ja>0l(Ml), c2 е J^^^)),..., cqe Jo,eq(Mq(vb v2,..., vq-1)), 01 - пустая подстановка, 02 ={v1/c1},...,0q={v1/c1,...,vq-1/cq-1} (сопоставленное каждому им ени n из множе ства Ja,e(M(v1, v2,..., vq)) знач ение принадл жит множ ству, получ нному в р зультат зам ны им н, входящих в Mo(v1, v2,..., vq), значениями, задаваемыми функцией a, а пер ем енных - знач ениями, задавае мыми подстановкой e);
2. е сли опр е д ел ени е вспомогательного понятия им е ет вид n=t, то a(n) = Ja,0(t) (сопоставленное имени значение должно совпадать со значением, полученным в результате замены имен, входящих в M, значениями, задавае мыми функци е й инт ерпр етации a);
3. е сли опред ел е ни е вспомогат ельного понятия им е ет вид (v1: M1) (v2:

M2(v0) ... (vq: Mq(v1, v2,..., vq-1)) (n: M(v1, v2,., vq)) n=t(vb v2,., vq), то для каждого n e Ja,e(M(v1, v2,..., vq)) выполн ено a(n) = Ja,e(t(v1, v2,..., vq)), причем e = {v1/c1,...,vq/cq}, где C1 e Ja,e1(M0, C2 e Ja,e2(M2(vO),..., CqeJa,eq(Mq(vb v2,..., vq-1)), e1 - пустая подстановка, e2 ={v1/c1},...,eq={v1/c1,...,vq-1/cq-1}

(сопоставленное каждому им ени n из множе ства Ja,e(M(v1, v2,., vq)) знач ение должно совпадать со значением, полученным в результате замены в M0(v1, v2,..., vq) им е н знач е ниями, задавае мыми функци ей a, а п ер е м е нных - знач ениями, задавае мыми подстановкой e);

1. е сли опр еделение конструктора им е ет вид t = (k(v11: M11) (v12: M12) ...

(v1q1: M1q1) (k(v[[2]](#footnote-2)1: M21(v1,.vq1)) (v22: M^b..^)) ... (v2q2: M2q2(v1,.vq1)) ... (k(vs1: Ms1(v1,.vqs-1)) (vs2: M^b..^-^) ... (vsqs: Msqs(v1,.vqs-1))

M(v11,.vsqs)).)), то a(t) есть множество функций Ja,0((k(v11: M11) (v12: M12)

... (v1q1: M1q1) (k(v21: M21(v1,.vq1)) (v22: M^b..^)) ... (v2q2: M2q2(v1,.vq1)) ... (k(vs1: Ms1(vb...vqs-1)) (vs2: Ms2(v1,.vqs-1)) . (vsqs: Msqs(v1,.vqs-1))

M(v11,.vsqs)).))).

Например, допустимая функция интерпретации a сопоставляет имени "признаки" множе ство названий признаков: a(пpизнаки) = {кровяно е

давл е ни е, напряже ни е мышц живота} (подмнож е ство множе ства им е н). Допустимая функция интерпретации сопоставит каждому имени из множе ства {кровяное давление, напряжение мышц живота} функцию,

задающую наблюда мы знач ния признаков в заданны мом нты

наблюд ния.

Назов м мод лью3 для Tm такую допустимую функцию инт рпр тации, что для вс х пр длож ний f, задающих связи м жду понятиями, выполн но J^saf = true, и для всех предложений вида (v1: M1) (v2: M2) ... (vq: Mq) f(v1,

* 2,., Vq) выполнено J^vi: M1) (V2: M2) ... (vq: Mq) f(v1, V2,..., Vq)) = true при вс ех 0 = {vl/cl,...,vq/cq}, где ci е J^^Ml), c2 е J^^^l)),..., Cqе Ja>eq(Mq(vl, v2,..., vq-1)), 01 - пустая подстановка, 02 ={v1/c1},...,0q={v1/c1,...,vq-1/cq-1}.

Н обогащ нную сист му логич ских соотнош ний Om назов м семантически корректной, если существует хотя бы одна модель для Tm. Оч видно, что мод лью онтологии уровня m мож т быть только семантически корректная система логических соотношений. В противном случае система Om опр еделяет пусто е множе ство моделей онтологий уровня m-1.

1. Обогащ е ни е н е обогащ е нной систе мы логич е ских соотнош е ний

П ер еход от мод ели онтологии уровня m к мод ели онтологии (при m>3) или мод ли знаний (при m=2) производится задани м обогащ ния сист мы Om В данном пункте определяются компоненты обогащения и правила построения системы Om-1, е сли задано некоторо е обогащение системы Om.

Задани е онтологии уровня m-1 в т ерминах онтологии уровня m пр дполага т опр д л ни :

* понятий онтологии уровня m-1, им е на которых скрыты парам етрами онтологии уровня m;
* понятий онтологии уровня m-1 с использовани е м конструкторов сорта;
* онтологич е ских соглаш ений онтологии уровня m-1;
* конструкторов сорта уровня m-1;

Мод ль понима тся в традиционном для мат матич ской логики смысл как мод ель для н е которого множ е ства формул [110].

* парам етров уровня т-1.

Поэтому обогащение необогащенной системы логических соотношений

О

т 1 т ^л,т т-’хтт -Г7г»т -пг^т т-’-пт ^,т

е сть пятерка вида k = <а р, EN , ER , EC , EP >, где а р -

интерпретация параметров уровня т, Е^ - множество определений

понятий уровня т-1, ERin - множе ство связ е й м ежду понятиями уровня т-1, ЕСт - множе ство опр е д ел ений конструкторов уровня т-1, ЕРт - множе ство парам етров уровня т-1. Множе ства EN1^ ER1^ ЕРт, ЕСт могут быть пустыми, но Е^ и ERin и ЕРт и ЕСт \*0.

Прим ры задания онтологии уровня 3 как обогащ ния онтологии уровня 4 прив д ны в глав 4. Таким способом опр д л ны онтологии уровня 3 для физич ской и органич ской химии, а такж разд ла р нтг но- флуор е сц ентного анализа.

При т > 3 интерпр етация атР опред еля ет т ермины онтологии (т-1)-го уровня, ограничения на множества их значений и связи между значениями т ерминов: множе ство терминов онтологии образуют знач е ния пр е дм етных параметров, ограничения на множества их значений и связи между знач ниями т рминов зада т инт рпр тация функциональных и пр дикатных парам етров.

Наприм р, обогащ ни онтологии уровня 4 зада т для органич ской химии сл е дующи е т ермины онтологии уровня 3 (знач е ни е парам етра "Типы сущност е й"): Химич е ски е эл е м е нты, Химич е ски е ве щ е ства, Химич е ски е р акции, Н органич ски со дин ния, Органич ски со дин ния, Функциональные группы, Химические реакции, Растворители, Радикалы, Стимуляторы р е акций, и для каждого типа сущностей опр еделяет, сущности каких типов являются е е компон ентами (знач ени е парам етра "Типы компон нтов сущности").

При т = 2 интерпр етация а Р сопоставляет пр едм етным парам етрам объекты или множества объектов определяемого раздела предметной области, функциональным и предикатным параметрам - функциональные и н ефункциональные отношения м ежду объектами.

Наприм ер, знач е ни е парам етра "Химич е ски е эл е м енты" онтологии уровня 2 определяет множество названий этих элементов в модуле знаний физической химии, а значение параметра "Реагенты реакции" определяет отноше ни е "быть р е аг е нтами" м е жду ре акци е й и множе ством химич е ских со дин ний.

Элементы множества ENm определяют термины онтологии раздела, задавая множе ства их значений с помощью одного из конструкторов первого порядка, принадлежащего множеству Cm. Каждое определение понятия уровня m-1 (эл е м е нт множе ства ENm) сопоставля ет названию понятия множество, являющееся результатом применения конструктора первого порядка вида t = (X(v1: M1) (v2: M2) ... (vq: Mq) M(vb...vq)), опр еделенного на уровн m:

сорт p: t(c1, c2,...cq1), где p - имя понятия, t(c1, c2,...cq1) - применение конструктора п рвого порядка, опр д л нного на уровн m, прич м c1 е Jo,0l(Ml), c2 е J^^), ..., cq е J^Mq), где а = а%, 01 - пустая подстановка, 02 ={Vl/cl},...,0q={Vl/cl,...,Vq-l/cq-l}.

При заданной функции инт рпр тации а прим н ни конструктора п ервого порядка t к набору значений c1, c2,...cq парам етров v1, v2,...vq дает множе ство J^MCvb.-.v^), где 0 = {v1/c1, v2/c2,...vq/cq}.

Например, модуль "Электроны" органической химии содержит сл дующи опр д л ния т рминов с использовани м конструкторов сорта:

* сорт число эл е ктронов эл е м е нта: Собств е нны е свойства эл е м ентов(1[1, максимальное число эл е ктронов]);
* сорт электроны элемента: Свойства электронных уровней

элем ента({}(х главно е квантово е число, азимутально е квантово е число, магнитно е квантово е число, спин)).

Элем енты множе ства ERm при m>2 задают онтологиче ски е соглашения онтологии разд ла, а при m = 2 - н структурированны знания разд ла. Если онтологии всех разделов могут быть представлены вербально, то множество ERm пусто. При записи связ ей м ежду понятиями уровня m-1 (элем ентов множества ERm) используются названия основных и вспомогательных понятий, определенных в ENm и Ф1^ и не принадлежащих множеству Pm.

Прим ры опр д л ния н структурированных знаний для разных разд лов физич ской химии прив д ны в Прилож нии 5.

Эл е м е нты множ е ства ECm задают им е на конструкторов (m-1)-ro уровня. Каждое определение конструктора (элемент множества Gm) сопоставляет им ни конструктора k - т рм, являющийся р зультатом прим н ния конструктора t = (k(v11: M\) (v12: M12) ... (v1q1: M^) (k(v21: M21(v1,.vq1)) (v22: M22(v1,.vq1)) ... (v2q2: M2q2(vb.. .vqO) ... (k(vs1: Ms1(vb...vqs-1)) (vs2:

Ms2(v1,.vqs-1)) ... (vsqs: Msqs(vb.. .vqs-1)) M(v\,.. .vsqs))...)), определенного на уровне m: t1=t(c1, c2,...cq1), где

* t1 - имя конструктора;
* c1 e ^(M1^ c2 e Ja,e2(M12X •••, cq1 e Ja,eq1(Mlq1), где a = amp, e1 -

пустая подстановка, e2 ={v1/c1},...,eq1={v1/c1,...,vq1-1/cq1-1};

* t(c1, c2,.cq1) - прим е н е ни е конструктора m-го уровня t, прич е м порядок конструктора s удовл етворяет условию: 1 < s < m-1.

При заданной функции интерпр етации a прим енение конструктора s-го порядка t к набору значений c1, c2,...cq1 парам етров v1, v2,...vq1 дает конструктор (s-1)-ro порядка t(c1, c2,...cq1), знач ение которого е сть k - терм вида (k(v21: Ja,e(M20) (v22: Ja,e(M22)) . (v2q2: Ja,e(M2q2)) . (k(vs1: Ja,e(Ms1)) (vs2: Ja,e(Ms2)) . (vsqs: Ja,e(Msqs)) Ja,e(M(v11,.vsqs))).), где e={v1/c1, v2/c2,.vq1/cq1}.

Наприм р, в онтологии уровня 3 для органич ской химии таким способом опр еделены следующие конструкторы сортов (глава 4):

* Собственные свойства элементов = Собственные свойства сущностей(Химиче ские элем енты)
* Собственные свойства веществ = Собственные свойства сущност й(Химич ски в щ ства)
* Собственные свойства органических соединений = Собственные свойства сущностей(Органич еские соедин ения)

Множество ЕРт является подмножеством множества имен основных понятий, определенных в ENm и Фт и не принадлежащих множеству Рт. Элементы множества ЕРт будем называть терминами для описания онтологии уровня т-2.

Обогащение кт является допустимым для необогащенной системы логич е ских соотнош е ний От, е сли выполн ены сл е дующи е условия:

1. атР явля ется такой допустимой функци е й инт ерпр етации парам етров из множе ства Рт, что суще ствует модель а для Тт, такая, что атР является е е

4

сужением на множе ство парам етров ;

1. если т > 2 и Рт ^ 0, то атР ^0;
2. сли т > 2 и Рт = 0, то атР = 0;
3. е сли т=2, то а2Р и ER2 \*0, ЕС2 = 0, ЕР2= 0;
4. ENm и ЕСт \* 0;
5. суще ству ет хотя бы одна модель для множе ства пр едложений Фт и Ст и ENm и атР и ERm и ЕСт

Опр еделим операцию От • km применения обогащения km = <атР, ENm, ERm, ЕСт, ЕРт> к необогащенной системе логических соотношений От

=<Фт, Рт, Ст>. В результате выполнения данной операции получается

н е обогащ е нная систе ма логич е ских соотнош е ний (т-1)-го уровня От-1 = <Фт-1, Рт-1, Ст-1>, обладающая следующими свойствами:

* Фт-1 = Фт и ENm и атР и ERm;
* Рт-1 = ЕРт;
* Ст-1 = ЕСт и Ст.

Оп ерация От • km опр е д еля ет способ постро е ния сист е мы От-1, используя обогащение km.

Обозначим En^O1^) - множество допустимых функций интерпретации парам етров. Из опр е дел е ния допустимой функции инт ерпр етации сл е ду ет, что н обогащ нная сист ма логич ских соотнош ний Om опр д ля т множе ство En^O1^).

Бесконечное множество всех допустимых обогащений для системы Om обозначим En(Om). Необогащенная система Om определяет множество н еобогащенных систем логиче ских соотношений {Om • km | k^E^O1^} уровня (m-1). Это означает, что мод ель любой онтологии уровня m-1 явля ется эл е м е нтом множе ства {Om • km | к^е En(Om)}.

1. Обогащенные системы логиче ских соотношений

Обогащенная система логических соотношений (ОСЛС) S есть

р зультат прим н ния обогащ ния k2 к н обогащ нной сист м логич ских

2 2 2 1 1 соотношений O , S = O • к , причем S = O = <Ф , 0, 0>, т.е. обогащенная

сист е ма логич е ских соотнош е ний S н е им е ет парам етров и конструкторов.

Будем называть множеством неизвестных системы S множество названий основных понятий S, из которого исключ е ны парам етры вс ех уровней. Множе ство неизве стных системы S будем обозначать X.

Поясним смысл термина "обогащенная система". Для системы S заданы знач ния парам тров вс х уровн й. Обогащ нная сист ма логич ских соотношений не содержит понятий, им ена которых скрыты парам етрами (и парам етров), т.е. вс е множество им ен полностью задано.

При мод лировании сложно-структурированной пр дм тной области каждая обогащ е нная сист е ма логич е ских соотнош е ний S явля ется модул е м модели знаний. Зам етим, что любой модуль модели знаний, определяемый в т рминах н которого модуля O1 мод ли онтологии уровня 2, явля тся эл е м е нтом множе ства {O2 • к2 | к2е En(O2)}.

Множ ство парам тров уровня 2 явля тся множ ством т рминов онтологии знаний. Множество неизвестных образует множество терминов,

использу мых при описании ситуаций д йствит льности, т. . входят в онтологию д йствит льности.

Решением ОСЛС S буд е м называть такую инт ерпр етацию н е изве стных ах, что сущ е ству ет мод ель а для Ф1 такая, что суже ни е а на Рт совпадает с атР, сужение а на Рт-1 совпадает с ат-1Р,..., сужение а на Р1 совпадает с а1Р, а сужение а на X совпадает с ах. Множе ство вс ех решений системы S будем обозначать A(S).

Дадим содержат ельный комм е нтарий к вве де нному понятию. Множество значений неизвестных обогащенной системы логических соотношений является моделью некоторой ситуации. Если ситуация принадл жит д йствит льности пр дм тной области, то мод ль явля тся решением n-уровневой системы логических соотношений. Множество A(S) сод ржит мод ли вс х ситуаций д йствит льности пр дм тной области, описыва мы с использовани м т рминов множ ства X.

Очевидно, что если обогащенная система логических соотношений явля тся мод лью н которого модуля знаний, то множ ство р ш ний (определяемый ею фрагм ент модели действительности) не может быть пусто.

Из опр д л ния допустимой функции инт рпр тации сл ду т, что каждая обогащ нная сист ма логич ских соотнош ний опр д ля т множество своих решений. Это означает, что модель любой ситуации, принадл жащ й д йствит льности пр дм тной области и описыва мой с использовани м т рминов из X, принадл жит множ ству р ш ний обогащ е нной сист е мы S.

1. Многоуровн евая систе ма логич е ских соотноше ний

Мод ль сложно-структурированной пр дм тной области пр дставля тся n-уровневой системой логич еских соотношений.

n-уровневая система логических соотношений [6-7] S е сть последовательность Оп, {<ОП, Оп-1>}, ..., {<ОП, Оп-1,..., О2>}, {<ОП, Оп-1,..., О2, S>}, где

* On - не обогащенная система логич е ских соотношений уровня n;
* {<On, On-1>} - множе ство не обогащенных систем логиче ских

соотноше ний уровня n-1, прич е м каждая из этих сист е м получ е на из On в результате прим енения некоторого допустимого для On обогащения kn;

* {<On, On-1,..., O> - множе ство н еобогащенных систем логич еских соотнош ний уровня i, прич м каждая из этих сист м получ на из одной из систем множе ства {<On, On-1,..., O1+1>} в р езультате прим енения некоторого допустимого обогащения;
* {<On, On-1,..., O2, S>} = {<On, On-1,..., O2, O1>} - множество обогащенных систем логических соотношений, причем каждая из этих систем получена из одной из систем множе ства {<On, On-1,..., O2>} в р зультат прим н ния н которого допустимого обогащ ния.

Мод ели онтологии вс ех уровн ей, начиная со второго, образуют (n-1)- уровн вую н обогащ нную сист му логич ских соотнош ний, которая сть последовательность On, {<On, On-1>}, ..., {<On, On-1,..., O2>}.

Не обогащенная система логиче ских соотношений уровня n е сть модель онтологии сложно-структурированной предметной области. Необогащенные сист е мы логич е ских соотнош е ний уровня n-1 пр едставляют мод ели онтологий разделов, уровня n-2 - модели онтологий подразделов и т.д. Обогащ нны сист мы логич ских соотнош ний пр дставляют модули мод ели знаний.

Решением n-уровневой системы логических соотношений S, являющейся последовательностью On, {<On, On-1>}, ..., {<On, On-1,..., O2>}, {<On, On-1,..., O2, S>}, назовем множество решений всех обогащенных систем логиче ских соотношений из множества {<On, On-1, ... , O2, S>}. Множе ство вс ех решений системы S будем обозначать A(S).

Множество A(S) есть модель действительности предметной области.

Оч е видно, что е сли многоуровн е вая сист ема логич е ских соотнош е ний е сть мод ль сложно-структурированной пр дм тной области, то множ ство р ш ний (опр д ля мая ю мод ль д йствит льности) н мож т быть пустым.

Опр д л ни многоуровн вых сист м логич ских соотнош ний дано в работах [6-7, 145-146]. Одноуровневые необогащенные системы логических соотноше ний рассматривались в [86-87, 202], частные случаи обогаще нных сист е м логич е ских соотнош е ний б е з парам етров были описаны в [24-25, 27], а с парам етрами - в [28].

1. Адекватность модели и пр едм етной области

В процессе построения модели предметной области необходимо отв тить на сл дующи три вопроса: (1) каки свойства пр дм тной области должны быть пр дставл ны в этой мод ли; (2) как должна быть устро на эта мод ль и каким образом в н й пр дставл ны свойства пр дм тной области;

1. в каком смысле эта модель должна быть адекватна этой предметной области. Ответ на первый вопрос дает анализ существенных свойств пр едм етной области. Ответ на второй вопрос быть дан в форм е утверждений об общих свойствах вс х мод л й рассматрива мого класса и соотв тствии между свойствами предметных областей и свойствами моделей. Ответом на третий вопрос является критерий адекватности, т.е. необходимые и достаточны условия того, что мод ль ад кватна пр дм тной области, для которой она постро на.

Каждая н е обогащ е нная систе ма логич е ских соотноше ний уровня 2 может рассматриваться как модель онтологии подраздела предметной области, сли каждо логич ско соотнош ни им т сод ржат льно толкование, с которым согласно некоторое сообщество специалистов этой пр дм тной области, а совокупность вс х н обогащ нных сист м логич ских соотнош ний уровня 2, относящихся к н которому разд лу пр дм тной области, опр д ля т онтологию (уровня 2) разд ла данной пр дм тной области.

Будем говорить, что модуль модели знаний предметной области согласу тся с модул м мод ли онтологии уровня 2, сли выполн ны сл дующи условия:

1. каждо е ограничени е целостности истинно при зам ене терминов онтологии знаний их знач ниями, опр д л нными в модул мод ли знаний;
2. множество р ешений обогащенной системы логич еских соотношений, пр дставляющ й данный модуль мод ли знаний, явля тся н пустым множеством.

Буд м говорить, что мод ль знаний пр дм тной области согласу тся с мод лью онтологии уровня 2, сли каждый модуль согласу тся с соотв тствующим модул м мод ли онтологии уровня 2.

Каждая н е обогащ е нная систе ма логич е ских соотноше ний уровня 3 мож т рассматриваться как мод ль онтологии, сли в т рминах мож т быть опр д л на каждая онтология уровня 2 для каждого разд ла пр дм тной области, обладающая указанными выш свойствами.

Буд м говорить, что модуль мод ли онтологии уровня 2 согласу тся с модул м мод ли онтологии уровня 3, сли выполн ны сл дующи условия:

1. каждое ограничение целостности онтологии уровня 2 истинно при зам н парам тров онтологии уровня 3 их знач ниями из мод ли онтологии уровня 2;
2. множество обогащений необогащенной системы логических соотнош ний, пр дставляющ й данный модуль мод ли онтологии уровня 2, является н е пустым множе ством.

Буд м говорить, что мод ль онтологии уровня 2 согласу тся с мод лью онтологии уровня 3, сли каждый модуль согласу тся с соотв тствующим модул м мод ли онтологии уровня 3.

Каждая необогащенная система логических соотношений уровня i мож т рассматриваться как мод ль онтологии, сли в т рминах мож т быть опр ед ел е на каждая онтология уровня (i-1), обладающая указанными выш свойствами.

Сформулируем критерий адекватности модели и пр едм етной области: буд м говорить, что мод ль пр дм тной области ад кватна этой пр дм тной области, если множество моделей всех ситуаций, образующих

д йствит льность этой пр дм тной области, совпада т с множ ством решений n-уровневой системы логических соотношений, являющейся моделью этой пр едм етной области.

Крит рий ад кватности формулиру т н обходимы и достаточны условия, при выполнении которых модель будет адекватна предметной области.

Из данного критерия следует, что если модель адекватна предметной области, то мод ль каждой ситуации, принадл жащ й д йствит льности данной области, будет являться решением n-уровневой системы логич еских соотнош ний, являющ йся мод лью этой пр дм тной области, а мод ль ситуации, не принадлежащей действительности предметной области, не буд ет принадл е жать множ е ству р е ш е ний.

Поскольку д йствит льность н явля тся полностью изв стной (н вс ситуации, имевшие место в прошлом и настоящем, известны, а также не изв стны вс будущи ситуации), то для любой мод ли пр дм тной области не известно, насколько хорошо модель действительности аппроксимирует действительность, и поэтому ни про одну модель этой предметной области н льзя утв рждать, что она явля тся ад кватной мод лью пр дм тной области. Поэтому практич е ски пол е зными являются сл е дующи е два критерия.

Дадим формулировку критерия неадекватности модели и предметной области: модель предметной области, представленная n-уровневой системой логических соотношений, является неадекватной моделью предметной области, если известна такая ситуация, имевшая место в действительности, что е е мод ель н е явля ется р е ш е ни е м этой сист е мы логич е ских соотнош е ний.

Дадим формулировку критерия неправильности модели: n-уровневая сист ма логич ских соотнош ний н явля тся мод лью пр дм тной области,

сли сущ ству т р ш ни , которо н явля тся мод лью ситуации,

имевшей ме сто в действительности пр едм етной области.

Крит рий н ад кватности позволя т уб диться, что н наруш но н обходимо услови ад кватности мод ли и пр дм тной области: для того, чтобы мод ль была ад кватна пр дм тной области, н обходимо, чтобы мод ли вс х ситуаций пр дм тной области принадл жали множ ству р ш ний сист мы логич ских соотнош ний.

Крит рий н правильности позволя т уб диться, что н наруш но достаточное условие адекватности модели и предметной области: для того, чтобы мод ль была ад кватна пр дм тной области, достаточно, чтобы вс р ш ния сист мы логич ских соотнош ний принадл жали мод ли действительности пр едм етной области.

Последние два критерия имеют следующее практическое значение. Если изв стная выборка прим ров ситуаций д йствит льности и постро ны модели этих ситуаций, то после зам ены терминов действительности в модели пр дм тной области их знач ниями из мод л й ситуаций можно уб диться в отсутствии неадекватности модели и предметной области. Если известна выборка ситуаций, которы е не принадл ежат действительности, и их моделей (назов м таки ситуации и их мод ли контрприм рами), то посл зам ны т рминов д йствит льности в мод ли пр дм тной области их знач ниями из контприм ров можно уб диться в отсутствии н правильности мод ли пр едм етной области.

* 1. Классы сист ем логич е ских соотнош ений

Опр еделим классы n-уровн евых систем логиче ских соотношений.

1. n-уровневая система логиче ских соотношений, в которой Оп = <ФП, Рп, 0> и для вс ех ie [2,m-1] обогащ е ни е ki= <аР, 0, 0, 0, БР^, гд е аР ^ 0 и DPi ^ 0. Буд е м называть такую n-уровн евую сист ему логич е ских соотнош ений чистой системой логиче ских соотношений с парам етрами.
2. n-уровневая система логиче ских соотношений, в которой On = <Фп, Pn, Cn >, для вс ех 1е [3,m-1] обогащ е ни е k1= <а1Р, SN1, R1, а1, DP1>, гд е а1Р ^ 0 и DP ^ 0, обогащени е k име ет вид <а Р, 0, 0, 0, 0>. Будем называть такую n-уровневую систему логиче ских соотношений чистой системой логич еских соотношений с парам етрами и конструкторами.
3. n-уровн е вая сист е ма логич е ских соотнош ений, в которой On = <Фп, 0, 0>, для всех 1е[2,:та-1] обогащение k1= <0, 0, R1, 0, 0>. Такую систему логич ских соотнош ний буд м называть сист мой логич ских соотнош ний б е з парам етров и конструкторов.
4. n-уровневая система логиче ских соотношений, в которой On = <Фп, Pn, Cn >, для вс ех 1е [2,m-1] обогащ е ни е k1= <a1P, SN1, R1, а1, DP1>, гд е a1P ^ 0 и DP1

^ 0, прич е м R2 ^ 0. Такую сист е му логич е ских соотнош е ний буде м называть см шанной.

Рассмотрим свойства пр дм тных област й, которы могут моделироваться с использованием систем вв еденных классов.

1. Чистая n-уровн евая система логич еских соотношений с парам етрами опр д ля т связи м жду т рминами онтологий вс х уровн й, связи м жду т рминами онтологии второго уровня и т рминами для описания знаний, а такж связи м жду т рминами для описания знаний и т рминами для описания действительности предметной области. Переход от онтологии более высокого уровня к онтологии следующего уровня состоит в этом случае в задании значений параметров этого уровня. Построение модели знаний состоит в определении значений параметров онтологии второго уровня.

Т. . в этом случа онтологии вс х уровн й структурированы, знания такж структурированы. Любая онтология уровня 1 пр дставля тся множе ством знач ений парам етров онтологии уровня 1+1, любой модуль знаний представляется множеством значений параметров онтологии уровня

1. В этом случае онтология самого высокого уровня опр е д еля ет им е на множ ств т рминов для пр дставл ния вс х онтологий бол низкого уровня, а также им ена множ е ств терминов для пр е дставл е ния знаний. Сами термины онтологий и т рмины для описания знаний задаются как знач ния парам тров соотв тствующ го уровня.

Термины онтологий д е йствит ельности и знаний в этом случае могут быть скрыты параметрами. Они определяются при задании обогащения для онтологии уровня 3, т.е. при опр е дел е нии онтологии уровня 2. Т е м самым, структура ситуаций действительности, описываемых в терминах разных онтологий уровня 2, буд т различной, такж как и структура баз знаний, описываемых в терминах разных онтологий этого уровня.

Прим рами чистых тр хуровн вых сист м логич ских соотнош ний с парам етрами, являются упрощ енная мод ель м е дицинской диагностики [86], модель предметной области "Оптимизация последовательных программ” [32­33, 35-36]. В класс е чистых трехуровневых систем логиче ских соотношений пр е дставля ется модель м е дицинской диагностики [94-95]. К классу чистых тр хуровн вых сист м логич ских соотнош ний относятся мод ли, полож нны в основу Инт рн т-сист мы классификации и ид нтификации химич ских в щ ств при помощи физико-химич ских м тодов иссл дования [80], Инт ерн ет-систе мы классификации органич е ских со е дин е ний [107], распределенной интеллектуальной системы “Проектировани е эл ектропечей” [141], разработанных с использовани е м пр е дложе нных в работе м етодов и мод л й.

1. Чистая n-уровн евая система логич еских соотношений с парам етрами и конструкторами сортов опр д ля т н которы связи м жду т рминами онтологий вс х уровн й, н которы связи м жду т рминами онтологии второго уровня и т рминами для описания знаний, а такж н которы связи м жду т рминами для описания знаний и т рминами для описания действительности пр едм етной области.

Пер еход от онтологии более высокого уровня к онтологии следующего уровня состоит в этом случае в задании значений параметров и онтологических соглашений этого уровня. Построение модели знаний состоит в опр еделении значений парам етров онтологии второго уровня. Т.е. в этом случа онтологии вс х уровн й структурированы, знания такж структурированы. Любая онтология уровня i пр е дставля ется множе ством знач ений парам етров онтологии уровня i+1, любой модуль знаний пр едставляется множе ством значений парам етров онтологии уровня 2.

Т рмины онтологий д йствит льности и знаний в этом случа могут быть скрыты параметрами. Кроме этого, наличие конструкторов сортов также скрывает термины онтологии действительности и знаний, но фиксиру т способ опр д л ния сортов этих т рминов, зависящих от парам тров онтологии уровня 3. Т рмины онтологии д йствит льности и знаний определяются при задании обогащения для онтологии уровня 3, т.е. при опр ед ел е нии онтологии уровня 2. В этом случае структура ситуаций д йствит льности, описыва мых в т рминах разных онтологий уровня 2, буд т различной, такж как и структура баз знаний, описыва мых в т рминах разных онтологий этого уровня.

1. n-уровн евая сист е ма логич е ских соотнош е ний б е з парам етров и конструкторов сортов опр д ля т н которы связи м жду т рминами онтологий вс х уровн й, н которы связи м жду т рминами онтологии второго уровня и т рминами для описания знаний, а такж н которы связи м жду т рминами для описания знаний и т рминами для описания действительности пр едм етной области.

Вс т рмины этой онтологии пр дставляют собой т рмины для описания ситуаций предметной области. Онтология верхнего уровня определяет все термины для описания ситуаций. Причем при описании ситуаций разных разделов и подразделов предметной области используется один и тот же набор терминов, т.е. все они имеют одинаковую структуру. Онтологии и знания в данном случа н структурированы. П р ход от онтологии бол высокого уровня к онтологии сл дующ го уровня состоит в этом случа в задании онтологич ских соглаш ний этого уровня в вид формул. Знания также задаются в виде совокупности формул. И онтологич ски соглаш ния, и знания в этом случа задают огранич ния ц елостности моделей ситуаций предм етной области.

Одноуровн вы мод ли данного подкласса использовались при создании систем, знания в которых представлены в виде множе ства правил. Модели данного класса также использовались интеллектуальными пакетами прикладных программ, в которых знания пр дставлялись соотнош ниями частного вида, для которых существует процедура автоматического разрешения относительно выходных данных задач.

1. Смешанная n-уровневая система логических соотношений использу тся для пр дм тных област й, в которых структурирована только часть онтологии и (или) часть знаний. Прим ром см шанной четырехуровневой системы логических соотношений с параметрами, явля тся мод ль химии (см. главу 4). Мод ли разд лов химии такж пр едставляются в класс е см ешанных систем логич еских соотношений.

Системы данного класса являются более общими. В них термины онтологий действительности и знаний могут быть скрыты параметрами. Кроме этого, наличие конструкторов сортов также скрывает термины онтологии д йствит льности и знаний, но фиксиру т способ опр д л ния сортов этих терминов, зависящих от парам етров онтологии уровня 3. Поэтому структура ситуаций д йствит льности, описыва мых в т рминах разных онтологий уровня 2, буд т различной, такж как и структура баз знаний, описываемых в терминах разных онтологий этого уровня. Отличие от сист м п рвого и второго типа состоит в наличии н структурированной части онтологич еских соглашений и знаний.

* 1. Отноше ния на множе ств е систе м логич е ских соотнош е ний

Опр еделим отношения на множеств е систем логич еских соотношений.

Буд м говорить, что дв обогащ нны сист мы логич ских соотнош ний S1 и S2 эквивалентны, если A(S1) = A(S2).

Будем говорить, что две n-уровневые системы логических соотношений

S1 и S2 эквивал ентны, е сли A(S1) = A(S2).

Будем считать, что для каждого основного понятия функция sort сопоставляет имени понятия n объем понятия, обознач енного им енем n.

Теорема 2.1. (об исключении парам етров обогащенной системы

логических соотношений). Для любой обогащенной системы логических соотношений S с параметрами, заданного параметра - имени множества р суще ствует эквивалентная ей обогащенная система логиче ских соотношений S', н е сод ержащая этого заданного парам етра.

Для доказательства те ор е мы построим сист е му S' из сист е мы S. Зам етим, что в обогащ енной сист е м е логич е ских соотнош е ний для парам етра p задана е го инт ерпр етация a(p).

Каждо соотнош ни сист мы S относится к одному из сл дующих типов:

1. соотнош е ни е, являющ е е ся конструктором сорта;
2. соотношение, представленно е предложением вида сорт n: M или n = t;
3. соотноше ни е, пре дставл е нно е пр е дложе ни ем вида (v1: M1) (v2: M2(v1)) ... (Vq: Mq(v1, V2,..., Vq-1)) (n: M(V1, V2,..., Vq)) сорт n: M0(V1, V2,..., Vq) или (V1: M1) (V2: M2(V1)) . (Vq: Mq(V1, V2,., Vq-1)) (n: M(V1, V2,., Vq)) n = t(V1, V2,., Vq);
4. соотноше ни е, пре дставл е нно е пр е дложе ни ем вида (v1: M1) (v2: M2(v1))

. (Vq: Mq(V1, V2,., Vq-1)) f(V1, V2,., Vq) или f.

Если соотноше ния тр етье го типа им еют вид (v1: p) (v2: M2(v1)) ... (vq: Mq(v1, V2,..., Vq-1)) (n: M(V1, V2,., Vq)) сорт n: M0(v1, V2,..., Vq) или (V1: p) (V2: M2(V1)) ... (Vq: Mq(V1, V2,., Vq-1)) (n: M(V1, V2,..., Vq)) n = t(V1, V2,., Vq), то сформируем множе ство допустимых подстановок 0 вида (v/c), где сеаф). Для каждой подстановки 0 сформиру ем соотношение (v2: Ja(p),0(M2(v1))) ...

(Vq: Ja(p),0(Mq(V1, V2,., Vq-1))) (n: Ja(p),0(M(vb V2,., Vq))) сорт n: Ja(p),0(M0(V1,

* 2,., Vq)) и соотношени е (V2: Jafc^^fa))) ... (Vq: Ja(p),0(Mq(vb V2,., Vq-1))) (n: Ja(p),0(M(v1, V2,., Vq))), n = Ja(p),0(t(v1, V2,., Vq)). Поме стим полученны е соотноше ния в S'. В остальных соотнош е ниях п ервых тр ех типов зам е ним парам етр p его значени ем а(р) и поме стим полученны е соотношения в S'.

Преобразуем каждое соотношение у четвертого типа следующим образом:

1. если в тело соотношения у входит терм (формула) вида n1(t1,t2, ,

tk-1,n2, tk+1,\_, tr), где n1 и n2 - названия основных понятий системы S, то сформируем определение новой (т.е. не входящей в соотношение у) переменной (v: sort(n2)), формулу n2=v, заменим в теле у указанный терм (формулу) на n1(t1,t2,\_, tk-1,v, tk+1,\_, tr);

1. повторим шаг 1 для вс х т рмов и формул, им ющих вид, указанный в

п.1;

1. е сли в тело соотношения у входит терм (формула) вида n1(t1,t2,\_, tk-1, n2(t), tk+1,\_, tr), где t - в ектор термов, n1 и n2 - названия основных понятий сист е мы S, то сформиру е м опр е д ел е ни е п ер е м е нной (v: sort(n2)), формулу n2(t) = v, зам еним в теле у указанный терм (формулу) на n1(t1,t2,\_,

t^k-b^ tk+b •\_ tr);

1. повторим шаг 3 для вс ех термов и формул, им еющих вид, указанный в

п. 3;

1. сформиру ем ново е соотнош е ни е у':
   1. пр е фикс соотношения у' образуют определения вс ех вв д нных при выполн нии шагов 1 и 3 новых п р м нных, а такж опр д л ния п р м нных соотнош ния у;
   2. т ело соотнош ения у' им е ет вид импликации, услови е которой е сть конъюнкция вс ех формул вида n2(t) = v и n2=v, введенных при выполн нии шагов 1 и 3, а сл дстви сть т ло соотнош ния у, в котором термы и формулы вида n1(t1,t2,\_, tk-1,n2, tk+1,\_, tr) зам енены на n1(t1,t2,\_, tk-1,v, tk+1,\_, tr), а термы и формулы вида n1(t1,t2,\_, tk-1,n2(t), tk+1,\_, tr) зам енены на n1(t1,t2, \_, tk-1,v, tk+1, \_, tr).

Обозначим S” множе ство, состоящ е е из соотнош е ний, получ енных в р зультат выполн ния указанных пр образований из соотнош ний сист мы

S, а такж т соотнош ния ч тв ртого типа, которы н тр бовали пр образований.

П ер е н е с е м в сист е му S' б ез изм е н е ний вс е получ е нные соотнош е ния из множе ства S”, н е сод ержащи е парам етр p. Для каждого из оставшихся соотноше ний для эл ем е нта пр е фикса (v:p) сформиру е м множе ство допустимых подстановок 0 вида (v/c), где се a(p). Для каждой подстановки 0 из соотношения у сформируем соотношение у', не содержащее префикс (v:p), построим Ja(p),0(y').

В р зультат прив д нных пр образований множ ства знач ний н еизв е стных н е изм е нялись. Поэтому можно утв ерждать, что множе ства р ш ний сист м S и S' совпадают, т. . сист мы являются эквивал нтными.

Т ор ма доказана.

Данная те ор ема является обобщением те ор ем об исключении парам етров для сист м логич ских соотнош ний частного вида, формулировки которых даны в [29] и [87].

Замечание. Если параметр является именем функции или предиката, то для его исключения тр ебуется также исключить парам етры-им ена множе ств аргум е нтов и р е зультатов этих функций и пр е дикатов.

Следствие. Для любой обогащенной системы логиче ских соотношений с парам етрами суще ству ет эквивалентная ей обогащенная система логиче ских соотноше ний б е з парам етров.

Замечание. При формировании системы логических соотношений в данном случа тр бу тся для каждого из соотнош ний, сод ржащих параметры, применить шаги преобразования, описанные в доказательстве т е ор е мы 2.1.

Поясним утв ржд ни , сформулированно в данном сл дствии. Обогащенная система логиче ских соотношений с параметрами содержит вс е пр е дложе ния н е обогащ е нной сист емы логич е ских соотнош е ний с параметрами (на основе которой она была построена), и значения всех парам етров. Применяя шаги доказательства те оремы 2.1 для каждого параметра, получим обогащенную систему логических соотношений, содержащую большее количество предложений, чем исходная система с парам етрами. Поскольку в результате пр е образований множе ства значений неизвестных не изменялись, обогащенная система с параметрами и обогащенная система без параметров имеют одинаковые множества решений, т.е. системы являются эквивал ентными.

Зам етим, что из одной и той же н еобогащенной системы с параметрами можно получить н сколько обогащ нных сист м с парам трами поср дством задания разных обогащ ний, тогда как из одной обогащ нной сист мы с парам етрами может быть получена единственная система б ез парам етров.

Теорема 2.2. (об исключ е нии парам етров н е обогащ е нных систе м

логических соотношений уровня 2). Если O = <Ф1 и Ф2, P1u P2, С> - н е обогащ е нная сист е ма логич е ских соотнош е ний уровня 2, им еющая парам етры, где Ф1 е сть множе ство пр едложений, не содержащих парам етров из множ ства P2, то для н обогащ нной сист мы логич ских соотнош ний уровня 2 O1 = <Ф1, P1, С> существует всюду определенное однозначное отображение h множества En(O) в En(O1), такое, что для всех k е En(O) обогащенная система O • k является эквивалентной обогащенной систем е O1 • h(k).

Буд м называть сист му O1 квазиэквивал нтной сист м O. Отнош ни квазиэквивал нтности явля тся р фл ксивным и транзитивным, но антисимм тричным.

Данная т ор ма явля тся сл дстви м т ор мы об исключ нии параметров обогащенных систем логических соотношений. Из нее, в частности, сл ду т, что, в общ м случа , O и O1 н являются эквивалентными, поскольку {h(k)|ke En(O)} с En(O1). Кром е того, е сли множество параметров P1 пусто, то система O1 является необогащенной сист е мой логич е ских соотнош е ний б е з парам етров. Формулировка данной т е ор е мы дана в работе [87].

Теорема 2.3. (об исключ е нии парам етров н е обогащ е нных систе м

логических соотношений уровня m). Если O = <Ф1 и Ф2, P1u P2, С> - н е обогащ е нная сист е ма логич е ских соотнош ений уровня m, им еющая парам етры, где Ф1 е сть множе ство пр едложений, не содержащих парам етров из множ ства P2, то для н обогащ нной сист мы логич ских соотнош ний уровня m с параметрами O1 = <Ф1, P1, С> существует всюду определенное однозначное отображение h множе ства En(O) в En(O1), тако е, что для вс ех k е En(O) н е обогащ енная систе ма (уровня m-1) O1 • h(k) явля ется

квазиэквивал е нтной НСЛС уровня m-1 O^k.

Данная теорема является обобщением теоремы об исключении параметров для одноуровневых необогащенных систем логических соотноше ний, формулировка которой дана в [87].

При описании других отнош ний на множ ств сист м логич ских соотнош ний использована сл дующая сх ма. Для того чтобы опр д лить отношение R между необогащенными системами логических соотношений

O1,O2,...,Om уровня i (i>2), вводится аналогичное по смыслу отношение м жду н обогащ нными сист мами логич ских соотнош ний <O1,k1>, <O2,k2>,...,<Om,km>, где k1e En(O0, к2е En(O2),..., kme En(Om), уровня (i-1), а также отношение R” на множествах En(O1), En(O2),...,En(Om). При этом необогащенные системы O1, O2,...,Om уровня i находятся в отношении R тогда и только тогда, когда для любых k1e En(O1), k2e En(O2),..., kme En(Om) из того, что k1,k2,...,km находятся в отношении R” следует, что необогащенные системы <O1,k1>, <O2,k2>,...,<Om,km> находятся в отношении R'.

Для того чтобы определить отношение R между необогащенными системами логических соотношений O1,O2,...,Om уровня 2, вводятся аналогично по смыслу отнош ни R' м жду обогащ нными сист мами логич ских соотнош ний <O1,k1>, <O2,k2>,... , <Om,km>, гд k1 е En(O1), k2e En(O2),..., km е En(Om), а также отношени е R” на множе ствах En(O1),

En(O2),..., En(Om). При этом O1, O2,..., Om уровня 2 находятся в отнош е нии R тогда и только тогда, когда для любых k1 е En(O1), k2 е En(O2),..., kmeEn(Om) из того, что k1, k2,..., km находятся в отношении R" следует, что обогащенные системы <O1,k1>, <O2,k2>,..., <Om,km> находятся в отношении R'.

При опр д л нии отнош ния м жду многоуровн выми сист мами логич ских соотнош ний используются отнош ния м жду н обогащ нными и обогащ нными сист мами логич ских соотнош ний разных уровн й.

Дв обогащ нны сист мы логич ских соотнош ний буд м называть изоморфными, сли м жду множ ствами их р ш ний сущ ству т взаимно однозначное соотв етстви е [87, 198-199].

Необогащенную систему логических соотношений O1 уровня i (i>2) буд м называть изоморфной н обогащ нной сист м логич ских соотноше ний O2 уровня i-1, е сли сущ е ству ет взаимно однозначно е соответствие E между множествами En(O1) и En(O2), такое, что для всех ke En(O1) сист емы O1 • k и O2 • E(k) изоморфны.

n-уровн е вая сист е ма логич е ских соотнош ений On, {<On, On-1>}, ..., {<On, On-1,..., O2>}, {<On, On-1,..., O2, S>} изоморфна n-уровневой систем е логиче ских соотношений O'n, {<O'n, O'n-1>}, ..., {<O'n, O'n-1,..., O'2>}, {<O'n, O'n-1,..., O'2, S'>}, если выполнены следующие условия:

* н е обогащ е нная сист е ма логич е ских соотнош е ний On изоморфна сист м O'n;
* м е жду множ е ствами {<On, On-1>} и {<O'n, O'n-1>} может быть установл но взаимно-однозначно соотв тстви , при котором

соотв тствующи сист мы изоморфны;

* для каждого i е [2,n-2] м ежду множе ствами {<On, On-1,..., Oi>} и {<O'n, O'n-1,..., O'i>}, построенными с использованием двух изоморфных систем <On, On-1,..., Oi+1> и <O'n, O'n-1,..., O'i+1>, может быть установлено взаимно-однозначно соотв тстви , при котором соотв тствующи сист мы изоморфны;
* м жду множ ствами обогащ нных сист м логич ских соотнош ний {<On, On-1,..., O2, S>} и {<O'n, O'n-1,..., O'2, S'>}, постро енных с использовани ем двух изоморфных систем <On, On-1,..., O2> и <O'n, O'n-1,..., O'2>, мож т быть установл но взаимно-однозначно соотв тстви , при котором соответствующи е сист е мы изоморфны.

Утверждение 2.1. Для любой (обогащенной или н еобогащенной) сист мы логич ских соотнош ний, им ющ й функциональны н изв стны , существует изоморфная ей (обогащенная или необогащенная) система логиче ских соотношений, н е имеющая функциональных н еизв е стных.

Утверждение 2.2. Для любой (обогаще нной или н е обогащ е нной) сист мы логич ских соотнош ний, им ющ й пр дикатны н изв стны , существует изоморфная ей (обогащенная или необогащенная) система логиче ских соотношений, н е имеющая предикатных н еизв е стных.

Обогащ нную сист му логич ских соотнош ний S2 буд м называть гомоморфным образом обогащенной системы S1, если существует всюду опр е д ел е нно е однозначное отображе ни е h1 множе ства р е ш ений систе мы S1 в множе ство р е ш ений сист е мы S2 [87, 198-199]. В этом случае буд ем говорить, что сущ е ству ет гомоморфизм h1: S1 ^ S2.

Необогащенную систему логических соотношений O2 уровня i (i>2) буд м называть гомоморфным образом н обогащ нной сист мы логич ских соотнош ний O1 уровня i, сли сущ ству т всюду опр д л нно однозначно отображени е h множе ства En(O1) в множество En(O2), тако е, что для вс ех k е En(O1) система O2 • h(k) является гомоморфным образом системы O1 • k. В этом случае будем говорить, что суще ствует гомоморфизм h: O1 ^ O2.

n-уровн е вая сист е ма логич е ских соотнош ений On, {<On, On-1>}, ..., {<On, On-1,..., O2>}, {<On, On-1,..., O2, S>} является гомоморфным образом n- уровн е вой сист е мы логич е ских соотнош ений O'n, {<O'n, O'n-1>}, ..., {<O'n, O'n- \..., O'2>}, {<O'n, O'n-1,..., O'2, S'>}, е сли выполнены следующие условия:

* необогащенная система логических соотношений On уровня n является гомоморфным образом системы O'n уровня n;
* для любой НСЛС o’ уровня n-1, принадлежащей множе ству {<On, On-1>}, сущ е ству ет НСЛС о” уровня n-1, принадл е жащая множ е ству {<O'n, O'n-1>}, такая что о’ явля ется гомоморфным образом сист е мы о”;
* для каждого i е [2,n-2] выполняется следующее условие: если НСЛС <On, On-1,\_, Oi+1> уровня i+1 является гомоморфным образом НСЛС <O'n, O'n-1,\_, O'i+1> уровня i+1, то для каждой НСЛС о’ уровня i, принадлежащей множеству {<On, On-1,\_, Oi>}, построенному по НСЛС <On, On-1,\_, Oi+1>, суще ствует НСЛС о” уровня i, принадлежащая множе ству {<O'n, O'n-1,\_, O'i>}, построенному по НСЛС <O'n, O'n-1,\_, O'i+1>, такая, что о’ является гомоморфным образом систе мы о”;
* е сли не обогащенная система логиче ских соотношений <On, On-1,\_, O2> уровня 2 является гомоморфным образом НСЛС <O'n, O'n-1,\_, O'2> уровня 2, то для каждой обогащенной системы логиче ских соотношений s’, принадлежащей множе ству {<On, On-1,\_, O2, S>}, построенному по <On, On-

1. ,\_, O2>, суще ству ет ОСЛС s”, принадлежащая множе ству {<O'n, O'n-1,\_, O'2, S'>}, построенному по <O'n, O'n-1,\_, O'2>, такая, что s’ является гомоморфным образом сист мы s ”.

Обогащ нную сист му логич ских соотнош ний S буд м называть произведением обогащенных систем логических соотношений S1, S2,..., Sm (сомножит л й произв д ния), сли сущ ствуют однозначны отображ ния h1:S ^ S1, h2: S ^ S2,..., hm: S ^ Sm такие, что для любых а'х, а"х е A(S) имеет место а'х ^а"х ^ <^(а'х), h2(а'х),..., hm(а'х)> ^

<Ь1(а"х)^2(а"х),...^1П(а"х)> [87, 198-199].

Необогащенную систему логических соотношений O уровня i (i>2) буд м называть произв д ни м н обогащ нных сист м логич ских соотношений O1,O2,...,Om (сомножителей произведения) уровня i, O = O1 ® O2 ® ... ® Om, если существуют однозначные отображения h1: O ^ O1, h2:O ^ O2,..., hm:O ^ Om такие, что для любых k', k”e En(O) имеет место k'^k" ^ <h1(k'),h2(k'),..., hm(k')> ^ <h1(k”), h2(k”),..., hm(k”)> и для вс ех keEn(O) система

O • k является произведением систем O1 • h1(k), O2 • h2(k),..., Om • hm(k).

* 1. Опр д л ни класса языков прикладной логики

Для пр дставл ния мод л й сложно-структурированных пр дм тных областе й опр е д елим класс многосортных языков прикладной логики (ЯПЛ). Вс е языки данного класса им еют обще е ядро (Приложени е 1, [86-87, 200]). Для расшир ния набора мат матич ских символов для конкр тных прилож ний использу тся набор расшир ний, состоящих из стандартного расширения (Приложение 1, [86-87, 200]) (общего для вс ех предм етных областей) и набора сп ециализированных расширений (Приложение 1, [86-87, 201]) (сво е го для каждой пр е дм етной области). Вс е расшире ния им еют названия.

Такой подход к опр д л нию языка позволя т н фиксировать явно в сь возможный набор мат матич ских символов, а опр д лять тр бу мый набор, задавая новое расширение языка. Этот подход аналогичен подходу, который был использован при определении Алгола-68.

Каждый конкр етный язык прикладной логики включает ядро, стандартно расшир ни и н которы сп циализированны расшир ния, т. . характеризуется некоторой совокупностью названий расширений. Стандартное расширение ЯПЛ вводит синтаксические конструкции, присутствующие в некоторых специальных языках математической логики, арифм тич ски и т ор тико-множ ств нны константы, оп рации и отнош ния, а такж огранич нны кванторы вида:

1. йота-оператор (i(v:t) f(v)), где v - пер ем енная, t - терм, знач ением которого является множе ство, f(v) - формула;
2. ламбда-терм, определяющий функцию с m аргументами, (k(vbt1),(v2:t2),...,(vm:tm) t(vbV2,...,Vm)), где vb V2,...,Vm - переменные, t1,t2,...,tm - термы, t(v1,v2,...,vm) - терм, зависящий от п ерем енных v1,v2,...,vm;
3. ламбда-терм, определяющий предикат, (X(v1:t1),(v2:t2),...,(vm:tm)

f(v1,v2,...,vm)) где v1,...,vm - переменные, t1,...,tm - термы, f(v1,...,vm) - формула, зависящая от п ер е м е нных v1,...,vm.

Таким образом, стандартно е расшире ни е вводит тот набор конструкций, который используется во многих приложениях. Йота-оператор позволяет использовать квантор "тот самый” при описании свойств предметной области, позволяя выделить из множества единственный объект, обладающий некоторым свойством. Ламбда-термы традиционно используются в функциональных языках как способ задания функции.

В работе определены специализированные расширения «Интервалы» (содержащее термы, позволяющие задавать интервалы) и «Математические кванторы» (содержащее ограниченные кванторы, позволяющие определять т рмы в вид кванторов суммирования, произв д ния, объ дин ния и пересечения, а в формулах использовать ограниченные кванторы вс общности и сущ ствования). Мат матич ски оп рации, функции и отнош ния, опр д л нны в данных расшир ниях, такж часто используются при мод лировании пр дм тных област й. Они используются при пр дставл нии мод л й онтологии и знаний химии.

Язык содержит три типа предложений, используемых для определения основных и вспомогательных понятий онтологии, а также ограничений на множества значений понятий. Для всех используемых в предложениях пр дм тных, функциональных и пр дикатных символов долж н быть определен сорт. Сорта используемых в предложениях свободных переменных определяются префиксом предложения, а сорта связанных переменных - ограниченным квантором. Если в предложение не входят свободны е перем енны е, то префикс пуст.

Сорта связанных перем енных опр еделяются ограниченными кванторами вида: (A(v1: t1).(vm: tm) t) или (A(v1: t1).(vm: tm) f), где А обознач ение оп ерации (уникальное для каждого типа квантора), (v1: t1).(vm: tm) - множество описаний связанных переменных, t - терм, а f - формула.

Вн шни скобки, использу мы при записи кванторов, позволяют

фиксировать область опр д л ния связанных п р м нных, а скобки, использованны при задании связанных п р м нных - выд лить их области знач ний.

Модуль модели онтологии или знаний представляется прикладной логич е ской те ори ей (ПЛТ). Каждая ПЛТ им е ет имя; парам етрами им е ни являются имена используемых расширений. Любая ПЛТ T(E1,E2,...,Ek), где E1,E2,...,Ek - им на расшир ний языка, использованных для записи т ории, есть пара <TS, SS>, где TS - конечное множество (возможно, пустое) названий других теорий, SS - конечное множество (возможно, пустое) пр е дложе ний.

Язык относится к классу языков с декларативной семантикой. Декларативность означает, что его с емантика должна позволять выполнить проверку онтологиче ских соглашений, опр еделенных для онтологии уровня i-1 онтологи е й уровня i, пров ерку огранич е ний ц елостности знаний, заданных онтологи ей уровня 2, пров ерку ограничений целостности ситуаций, заданных онтологи й уровня 2, а такж пров рку соотв тствия мод ли ситуации мод лям онтологии и знаний. Поэтому с мантика языка опр д ля т формальную проц дуру зам ны т рминов и п р м нных их знач ниями и условия, при которых такая проц едура прим енима (Приложе ни е 1). При этом пр дполага тся, что на множ ств им н задана функция а, знач ни которой для каждого имени есть интерпретация этого имени. Интерпретация а является допустимой для ПЛТ, если для всех предложений, задающих огранич е ния на инт ерпр етацию им ен с телом f выполн е но: J^f) = true при вс ех допустимых подстановках 0. Прикладная логиче ская те ория называется с мантич ски корр ктной, сли сущ ству т допустимая функция интерпр етации. Оч е видно, что модули мод ели онтологии и знаний должны быть пр дставл ны с мантич ски корр ктными логич скими т ориями.

* 1. Обсужд ени е

В данной глав е прив е д е но р е ш е ни е задачи 2 дисс ертационной работы. В р е зультат е р е ш е ния данной задачи получ е ны сл е дующи е результаты:

1. Дано опр д л ни многоуровн вых мод л й пр дм тных област й и многоуровн вых мод л й онтологий.
2. Разработан класс многоуровневых необогащенных систем логических соотношений (НСЛС). Опр едел ен п ереход от НСЛС уровня m к НСЛС уровня m-1 поср едством задания обогащения НСЛС. Разработан класс обогащенных систем логич е ских соотношений.
3. Разработан класс языков прикладной логики, который мож т использоваться для пр дставл ния многоуровн вых мод л й. Вс языки данного класса имеют общее ядро, каждый характеризуется своим набором использу мых расшир ний. Опр д л ны стандартно расширение языка и некоторые специализированны е расшир ения.

Пр длож нный класс мод л й позволя т пр дставить вс свойства сложно-структурированных пр дм тных област й, описанны в глав 1. При мод лировании конкр тной пр дм тной области с использовани м расшир ний мож т быть опр д л н тр бу мый для данной области язык. Вс языки вв д нного класса обладают свойствами, описанными в глав 1.

ГЛАВА 3. МЕТОДЫ АНАЛИЗА СЛОЖНО-СТРУКТУРИРОВАННЫХ ПРЕДМЕТНЫХ ОБЛАСТЕЙ

В данной главе решается задача разработки методов анализа сложно­структурированных предметных областей, обобщающих существующие м етоды онтологиче ского анализа, описанны е в п. 1.4. Метод анализа "снизу вверх” предназначен для обобщения одноуровневых онтологий разделов сложно-структурированной пр дм тной области до многоуровн вых и получ е ния онтологии в ерхн его уровня, опр е д еляющ е й сх ему анализа "св ерху вниз" для новых разделов данной области, при котором онтологии новых разд лов пр дставляются как конкр тизации онтологии в рхн го уровня. Поэтому анализ "снизу вв ерх" выполняется, когда уже постро ены не сколько онтологий уровня 2 для разных разделов области. В главе также опр д ляются м тоды анализа классов задач и м тодов их р ш ния для сложно-структурированных пр едм етных областей.

Результаты анализа представляются в виде моделей в классе многоуровневых систем логических соотношений, описанных в главе 2. Мод ли записываются ср дствами одного из языков прикладной логики, класс которых опр д л н в глав 2.

Результаты данной главы опубликованы в работах [7, 9, 145-146]. Они основаны на м тодах анализа пр дм тных област й, описанных в работах [22-23, 26, 29, 83, 85].

* 1. Метод "снизу вв ерх"

Метод анализа "снизу вв ерх" прим е ня ется, когда постро ено н е сколько онтологий уровня 2 с использовани м одного из рассмотр нных в п. 1.4 м тодов создания онтологий.

Постро ни онтологии уровня i выполня тся, когда сущ ству т н е сколько онтологий уровня i-1. В р е зультате выполн е ния м етода «снизу вверх» при построении онтологии уровня i производится поиск «р е гулярност ей» в онтологиях уровня i-1.

Опише м вс е этапы анализа м етодом ”снизу вв ерх” при постро е нии онтологии уровня i и е е модели.

Этап 1. Разбиение множества онтологических соглашений на группы таким образом, чтобы в одну группу попали соглашения с похожим смыслом, формулировка общего смысла для соглашений каждой группы, определение терминов, позволяющих этот смысл представить. Этот шаг повторяется для всех групп утверждений.

Результатом данного шага является множество групп онтологических соглаш ний, формулировки общ го смысла для утв ржд ний каждой группы, список вв д нных т рминов.

Поскольку ц лью данного этапа анализа явля тся обобщ ни н скольких онтологических соглашений, то он ничем не отличается от похожего этапа анализа при постро нии онтологии уровня 2, ц лью которого явля тся обобщение нескольких утверждений, задающих знания предметной области [29]. Прод е монстриру е м содержани е данного этапа на прим ер е упрощ енной онтологии медицинской диагностики (пример взят из работ [28, 87]).

Рассмотрим группу утв ержд е ний:

1. е сли паци е нт бол е н панкр е атитом, то число эл ем е нтов в разби е нии оси времени пациента для напряжения мышц живота (входящего в клиническую картину панкреатита) равно 3 (на единицу больше числа п ериодов динамики этого признака при панкр е атите);
2. если пациент болен панкреатитом, то число элементов в разбиении оси времени пациента для кровяного давления (входящего в клиническую картину панкр атита) равно 3 (на диницу больш числа п риодов динамики этого признака при панкр атит );
3. если пациент болен панкреатитом, то число элементов в разбиении оси времени пациента для суточного диуреза (входящего в клиническую картину панкр атита) равно 3 (на диницу больш числа п риодов динамики этого признака при панкр атит ).

Запись в скобках прив д на для лучш го понимания сути обобщ ния.

Обобщающим утвержде ни ем явля ется сл е дующ е е: " е сли паци ент бол е н панкр е атитом, то число элем ентов в разби ении оси вр ем ени пациента любого признака, входящ го в клинич скую картину забол вания, которым бол н пациент, на единицу больше числа п ериодов динамики этого признака при панкр е атите". Анализ утв ержде ний с похожим смыслом для других забол ваний да т бол общ утв ржд ни : "число эл м нтов в разби нии оси вр м ни паци нта любого признака, входящ го в клинич скую картину заболевания, которым болен пациент, на единицу больше числа периодов динамики этого признака при этом забол е вании".

В результате анализа данной группы утверждений вводятся следующие термины: "заболевания", "признаки", "клиническая картина заболевания" (сопоставля т забол ванию множ ство признаков), "число п риодов

динамики" (сопоставляет заболеванию и признаку из клинической картины число п риодов динамики этого признака при этом забол вании). Зам тим, что н которы из вв д нных т рминов оказываются сущ ствующими в пр дм тной области и им ющими тот ж смысл, который выявл н в р зультат анализа.

Другие прим еры групп утв ерждений для данной области и их обобщения привед е ны в работах [4, 28].

Этап 2. Разбиение множества терминов онтологии уровня i-1 на группы таким образом, чтобы в одну группу попали термины с похожим смыслом или похожей схемой определения, задание терминов - названий множеств терминов каждой группы, определение смысла терминов каждой группы, определение терминов, позволяющих этот смысл представить.

Результатом данного этапа анализа является множе ство групп терминов, им на для каждой группы т рминов, опр д л ни смысла т рминов каждой группы.

Продолжим рассмотр е ни е пр е дыдуще го прим ера. Группу т ерминов с похожим смыслом образуют термины "напряже ни е мышц живота", "суточный диур з", "кровяно давл ни ". Названи множ ства этих т рминов задано на пр дыдущ м этап : " признаки". Каждый из этих т рминов сопоставля т мом нту наблюд ния признака наблюда мо в этот мом нт знач ни .

Рассмотрим содержание данного этапа на примерах, взятых из онтологии уровня 2 для нескольких разделов химии [16-20, 40, 42, 51, 53-54].

В онтологии физич ской химии опр д л ны свойства химич ских элементов "атомный номер", "атомный вес", "химическая группа",

"химич ский п риод" и т.д. Вс рассмотр нны т рмины сопоставляют химич скому эл м нту знач ни соотв тствующ го свойства. В онтологии р нтг нофлуор сц нтного анализа опр д л ны свойства эн рг тич ских уровн е й "главное квантово е число эн ерг етич е ского уровня", "орбитально е квантово число", "спин-орбитально связывани " и т.д. Вс рассмотр нны т рмины сопоставляют эн рг тич скому уровню знач ни соотв тствующ го свойства.

Все приведенные термины образуют множества, имеющие смысл "собственные свойства элементов" и "собственные свойства оболочек", которые, в свою очередь, являются элементами множествами терминов, имеющих смысл "собств енны е свойства сущностей". В р езультате данного этапа анализа вводится т ермин "типы сущност е й".

Этап 3. Определение величин, необходимых для представления значений терминов, введенных на этапах 1 и 2. Определение объемов понятий, обозначенных терминами, как подмножества величин. Формулировка ограничений на множество значений введенных терминов.

Цель данного этапа анализа - наиболее точно определить смысл всех введенных терминов. Для этого требуется наиболее точно задать объем понятия, обозначенного введенным термином. Как отмечено в главе 2, задание объема понятия означает задани е связи между поняти ем и н екоторой величиной. Рассмотрим прим еры.

Объемами понятий, обозначенных терминами "заболевания" и "признаки" являются множ ства вс х возможных кон чных подмнож ств (за исключ ением пустого) множе ства названий. Онтологиче ско е соглашени е для данных т ерминов: множе ства забол е ваний и признаков н е п ер е с е каются.

Объем понятия, обозначенного каждым термином из множества "признаки", е сть множе ство отображе ний, областью опр е д ел ения которых является множе ство мом ентов наблюдения признака, а областью знач ений - множе ство возможных значений признака.

Объемом понятия, обозначенного термином "клиническая картина забол е вания", является множе ство отображе ний, область опред ел е ния которых совпада т с множ ством названий забол ваний, а область знач ний есть множество всех возможных конечных подмножеств, элементами которых являются названия признаков. Если к множ ству названий забол ваний относится "здоров", то онтологич ско соглаш ни говорит о том, что клинич ская картина для "здоров" пуста. Если "здоров" н принадл жит множ ству забол ваний, то онтологич ско соглаш ни уж формулируется для термина "заболевания": "здоров" не должен

принадлежать множеству, обозначенному данным термином. На выбор принятого решения оказывает влияние эксперт предм етной области.

Объемом понятия, обозначенного термином "число периодов динамики" является множество отображений, областью определения которых является множество пар, составленных из названия заболевания и признака из его клинической картины, а областью значений является множество целых чис ел, не меньших 1. Других ограничений для данного термина н ет.

Объ е мом понятия, обознач е нного термином "собстве нны е свойства элементов" ("собственные свойства оболочек"), является множество

отображ ний, область опр д л ния которых совпада т с множ ством химич ских эл м нтов (оболоч к), а область знач ния зависит от свойства.

Таким образом, опр е д ел ени е данного множе ства отображе ний зависит от параметра, которым является название свойства. Других ограничений для данных т рминов н т.

Этап 4. Поиск ошибок в онтологии.

Входными данными для данного этапа являются сущ ствующи онтологии уровня 2 для н скольких разд лов области, знания этих разд лов, множе ство примеров ситуаций действительности. Р езультатом данного этапа явля тся список обнаруж нных ошибок и исправл ний.

Этап 5. Построение модели онтологии.

Посл исправл ния ошибок мож т быть постро на мод ль онтологии уровня 3. Постро ни мод ли онтологии уровня 3 пр дполага т опр д л ни сортов всех введенных терминов и запись всех онтологических соглашений. Будем предполагать, что в этом случае используется класс моделей, опр е д ел е нных в глав е 3 и один из языков прикладной логики.

Рассмотрим некоторы е особенности постро ения модели.

Если на этапе 2 выделена группа терминов и опр еделен термин T для обозначения этого множе ства, то в модели будет описан сорт этого термина: сорт Т: {}N \ 0. Тр ебуется также задать сорт каждого термина данной группы. Для этого используются пр е дложе ния одного из сл е дующих видов:

1. (v: Т) сорт v: M1
2. (v: Т) сорт v: M1 и M2 и ... u Mn
3. (v: Т) сорт v: {} M1
4. (v: Т) сорт v: {} (M1 и M2 и ... и Mn)
5. (v: Т) сорт v: M1(v)

Последняя запись означает, что определение множества значений для каждого термина v зависит от v. Например, для рассмотренного выше прим ра опр д л ни буд т сл дующим:

* сорт признаки: {}N \ 0,
* (у:признаки) сорт v: моменты наблюдения(у) ^ возможные

значения(у)

Рассмотрим прим р опр д л ния группы т рминов при постро нии онтологии уровня 4 для химии:

* сорт Типы сущност ей : {}N \ 0
* (Тип: Типы сущносте й) сорт Тип: {}(Ru I и N u L) и Корт е жи

знач ний

Другой способ опр д л ния группы т рминов - использовани конструкторов сорта. Этот способ позволяет определить множество т ерминов, сх е ма опр е д ел е ния которых зависит от дополнит ельных парам тров, наприм р:

Собств е нны е свойства сущносте й = (Х(Тип сущности: Типы сущност е й) (^(Область возможных значений: {}(Множества знач ений и {}Кортежи знач ений)) (|(Тип сущности) ^ Область возможных знач е ний)))

Этот конструктор определяет множество функций, аргументом каждой из которых явля тся сущность типа t, а р зультат зависит от названия функции.

Этап 6. Проверка правильности модели онтологии.

Входными данными для данного этапа являются сущ ствующи мод ли онтологии уровня 2 для н скольких разд лов области, мод ли знаний этих разд лов, множ ство прим ров мод л й ситуаций д йствит льности. Р зультатом данного этапа явля тся список обнаруж нных ошибок и исправл ний. При пров рк использу тся крит рий н ад кватности мод ли и пр дм тной области, формулировка которого дана в глав 3.

Метод "снизу вверх" применяется также, если построены несколько онтологий уровня i, которые могут быть обобщ ены до онтологии уровня i+1. В этом случае выполняются этапы 1-6.

* 1. Метод "св ерху вниз"

Метод "сверху вниз" применим при построении онтологии и ее модели для других разд лов этой ж пр дм тной области, либо для других пр дм тных област й, устройство которых мож т быть описано в т рминах

сущ ствующ й онтологии уровня m. М тод "св рху вниз" прим ним такж при анализ знаний и постро нии мод ли знаний.

Создани е модели онтологии уровня m-1 состоит в постро е нии обогащения для модели онтологии уровня m, т.е. задании значений парам етров уровня m, опр е д ел е нии понятий уровня m-1 с использовани е м конструкторов уровня m, задании связ е й м е жду понятиями уровня m-1, опр е д ел е нии конструкторов уровня m-1 с использовани е м конструкторов уровня m, задании парам етров уровня m-1 (вс е компон е нты обогащ е ния мод ли онтологии описаны в глав 3). Создани мод ли знаний состоит в построении обогащения для модели онтологии уровня 2.

Этап 1. Определение понятий рассматриваемой области, имена которых могут быть значениями параметров онтологии уровня т.

При выполнении данного этапа для каждого понятия необходимо проверить, что его объем совпадает с объемом понятия, определяемого онтологи й уровня m.

Например, для предметной области "Химия" параметром онтологии уровня 4 является "Типы сущностей". Значением данного параметра для раздела "Рентгено-флуоресцентный анализ" (см. приложение 4) является множество, составленное из терминов "Оболочки", "Энергетические уровни", "Радиационные переходы орбитальных электронов", "Химические

эл е м е нты", "Радиоактивны е изотопы" и "Эн ергии излуч ения". Онтология уровня 4 для химии (см. модель онтологии в главе 6) опр еделяет, что каждый т рмин, обозначающий тип сущност й, пр дставля т собой н которо множество сущностей; каждая сущность может иметь имя, ее значением может быть разм ерно е, скалярно е или структурно е знач ение. Действительно, в данном разделе термины "Оболочки", "Энергетические уровни",

"Радиационные переходы орбитальных электронов" и "Химические эл е м е нты" обозначают множе ство названий. Термин "Радиоактивны е изотопы" обозначает множество изотопов, каждый изотоп представляется структурным знач ни м, п рвым эл м нтом этого знач ния явля тся химич е ский эл е м е нт, а вторым - е го заряд в изотоп е. Термин "Эн ергии излучения” обозначает множество значений энергий, используемых при облуч е нии пробы.

Этап 2. Определение понятий уровня m-1 с использованием конструкторов уровня т.

При выполн нии данного этапа тр бу тся задать т рмин, обозначающий понятие, задать значение параметра конструктора и проверить, что объем опр д ля мого понятия явля тся множ ством, получа мым в р зультат прим енения k-терма к значению парам етра конструктора.

Наприм р, опр д лим с использовани конструктора: сорт Атомный ном ер: Собств енны е свойства элем ентов(1[0, 108]).

Получим сл е дующе е опр е д ел е ни е:

сорт Атомный номер: (Химические элементы ^ I[0, 108]), т.е. конструктор использован правильно.

Этап 3. Определение связей между значениями понятий уровня т-1 Онтологич ски соглаш ния задают огранич ния на знач ния т рминов онтологии уровня m-1, которы е дополняют огранич е ния, вв е д енны е онтологи й уровня m. Онтологич ски соглаш ния такж уточняют опр е д ел е ния т ерминов.

Наприм р, сл дующи онтологич ски соглаш ния уточняют опр е д ел е ни е терминов онтологии уровня 3 для физич е ской химии (см. главу

4):

* Химич е ски е ве щ е ства с {}N \ 0
* Табличны е знач е ния т е мп ературы с {} ЩМинимально е знач ени е температуры, максимально е значени е темп ературы] \ 0
* нормальная т е мп ература е Табличные знач е ния т е мп ературы Дополнительны е ограничения задают следующи е соглашения:
* (Номер шага: I[1, Число шагов проц есса]) (Ре акция шага: Р еакции процесса(Номер шага)) Участники реакции процесса(Номер шага, Р е акция шага) = Участники р е акции(Р е акция шага)
* (Номер шага: I[1, Число шагов проце сса]) Веще ства проце сса(Ном ер шага) ^0

Когда сформировано вс е множе ство онтологиче ских соглашений уровня m-1, выполня ется сл е дующий этап.

Этап 4. Определение конструкторов сортов уровня m-1 с использованием конструкторов сортов уровня m

При выполн нии данного этапа тр бу тся задать т рмин, задающий имя конструктора сортов уровня m-1, задать знач е ни е парам етра конструктора уровня m и проверить, что в результате применения Х-терма к заданному знач ению параметра получается тре бу емый конструктор.

Наприм р, опр д лим конструктор уровня 3 для физич ской химии: Зависящие от температуры свойства простых веществ = Совместные свойства сущност ей((хХимич е ски е эл е м енты, Табличны е знач е ния

температуры))

Получим тр бу мый конструктор:

Зависящие от температуры свойства простых веществ = (^(Область возможных знач е ний: {}(Множ е ства знач е ний и {}Корте жи знач е ний)) ((хХимич е ски е эл е м е нты, Табличные знач е ния т емп ературы) ^ Область возможных знач ний))

Этап 5. Определение параметров уровня m-1.

После того, как все компоненты онтологии определены, требуется указание, какие из терминов имеют смысл параметров определяемой онтологии. Множе ство парам етров задается перечислением.

Этап 6. Построение онтологий, имеющих уровень меньший m-1. Построение модели знаний.

Повторяются этапы 1-5 для онтологий и знаний.

Если оказалось что модель онтологии уровня m не позволяет определить все термины и онтологические соглашения определяемой онтологии, то производится усложн ни . Для этого выполня тся анализ "снизу вверх", в результате которого добавляются новы е термины и онтологиче ские соглашения в онтологию верхнего уровня.

* 1. Использовани е уж е постро е нных онтологий и их модел е й

Повторно использовани онтологии уровня m пр дполага т разработку на е е основе онтологии уровня m-1 и вс ех посл е дующих с использовани м м тода анализа "св рху вниз". Повторно использовани онтологии любого уровня может также требовать ее упрощения (или усложн е ния). Сущ е ствуют такж е пр е дм етны е области, онтологии которых похожи. Если при постро нии онтологии новой области обнаруж но сходство с сущ ствующ й онтологи й, то новая онтология строится с уч том этого сходства. Пр дм тны области с похожими онтологиями образуют класс предметных областей. Интеграция онтологий означает построение онтологии из компон е нт. Упрощ е ни е онтологий, сходство онтологий и интеграция онтологий вводят на множестве онтологий отношения. Аналогичны по смыслу отнош ния сущ ствуют такж на множ ств сист м знаний. Наличие отношений на множествах онтологий и знаний означает наличие сходных по смыслу отношений на множе ствах их моделей.

Отнош ни м жду сист мами знаний одной и той ж или разных пр дм тных област й - это отнош ни м жду множ ствами ситуаций, допускае мых этими систе мами знаний [91, 198-199].

Отнош ни м жду онтологиями уровня 2 одной и той ж или разных предметных областей - это отношение, заданное на множествах подразумеваемых систем знаний этих онтологий (т.е. подмножество декартова произведения этих множеств) и обладающее тем свойством, что в н го входят только таки совокупности (корт жи), состоящи из сист м знаний, которы находятся м жду собой в аналогичном по смыслу отноше нии [91, 198-199]. Таким образом, е сли установл е но н е которое отнош ни м жду онтологиями уровня 2, оно опр д ля т аналогичны по смыслу отношения м ежду вс еми подразумеваемыми системами знаний.

Отношение между онтологиями уровня i одной и той же или разных предметных областей - это отношение, заданное на множествах подразум евае мых ими онтологий уровня i-1 и обладающ е е те м свойством, что в н го входят только таки совокупности (корт жи), состоящи из онтологий уровня i-1, которые находятся м е жду собой в аналогичном по смыслу отнош е нии. Таким образом, е сли установл е но н е которое отнош ени е м жду онтологиями уровня i, оно опр д ля т аналогичны по смыслу отноше ния м е жду вс е ми онтологиями уровня i-1.

При опр д л нии отнош ний м жду многоуровн выми онтологиями используются отнош ния м жду онтологиями вс х уровн й и знаниями.

Формализация отношения м ежду онтологиями и знаниями предм етных областей - это аналогичное по смыслу отношение между моделями этих онтологий.

1. Упрощ е ни е (огрубл ени е) онтологий

Сравнивая разны онтологии одной и той ж пр дм тной области, иногда можно говорить о том, что одна онтология явля тся либо упрощ ни м (огрубл ни м) другой, либо бол д тализированным описани м пр дм тной области. Наличи е бол е е простых и бол е е сложных онтологий одной и той же пр едм етной области может быть важным при разработке систем, основанных на знаниях и пр дназнач нных для использования сп циалистами различной квалификации (наприм р, м дицинских сист м, пр дназнач нных для высоко квалифицированных врач й и для ф льдш ров). При этом разработка м тодов р ш ния задач для бол простых онтологий мож т пр дставлять собой упрощение м етодов решения соответствующих задач, разработанных для бол сложных онтологий. То ж само мож т им ть м сто и для онтологий разных пр е дм етных област ей.

Будем говорить, что система знаний, относящаяся к одной онтологии, прощ сист мы знаний, относящ йся к другой онтологии уровня 2 (одной и той же, или разных предметных областей), если каждой ситуации,

допуска мой второй (бол сложной) сист мой знаний, мож т быть

поставл на в соотв тстви динств нная ситуация, допуска мая п рвой

(бол е е простой) сист е мой знаний [91, 198-199].

Будем говорить, что система знаний, относящаяся к одной онтологии уровня 2, прощ сист мы знаний другой онтологии уровня 2, сли мод ль п рвой сист мы знаний явля тся гомоморфным образом мод ли второй сист е мы знаний [91, 198-199].

Будем говорить, что одна онтология уровня 2 проще другой онтологии уровня 2 (одной и той же или разных предметных областей), если каждой сист м знаний второй онтологии мож т быть поставл на в соотв тстви е динств е нная бол е е простая сист е ма знаний п ервой онтологии [91, 198-199].

Буд е м говорить, что онтология O1 уровня i (i>2) прощ е онтологии O2 уровня i (одной и той же или разных пр е дм етных областе й), е сли каждой согласованной с O2 онтологии уровня i-1 мож ет быть поставл е на в соответстви е е динстве нная бол е е простая онтология уровня i-1, согласованная с онтологией O1.

Будем говорить, что одна онтология уровня i (i>2) проще другой онтологии уровня 2, сли мод ль п рвой онтологии явля тся гомоморфным образом модели второй онтологии.

Упрощ е ни е опр е деля ет частичный порядок онтологий. Если В прощ е А и С проще В, то С прощ е А. Если одна онтология проще второй, а вторая прощ п рвой, то они похожи друг на друга.

Опр д лим два способа упрощ ния многоуровн вых онтологий пр дм тных област й. П рвый способ упрощ ния состоит в исключ нии модул е й онтологий н е которых уровн ей. Исключ ени е модуля онтологии на уровн е i в л еч ет за собой исключ е ни е вс ех модул е й, опр е д ел е нных с использовани е м исключае мого модуля на уровн е i-1. Назов е м этот способ упрощ е ния "упрощ е ни е исключ е ни ем модул е й". Второй способ упрощ е ния связан с использовани м отнош ний на множ ств многоуровн вых онтологий. При таком способе упрощения некоторые модули создаваемой

онтологии являются упрощениями соответствующих модулей исходной онтологии. При упрощ нии онтологии могут такж использоваться оба способа. Аналогичные способы упрощения применимы и для упрощения многоуровн вой мод ли пр дм тной области, пр дставл нной

многоуровневой системой логич еских соотношений.

1. Классы пр е дм етных област е й

Буд м говорить, что пр дм тны области образуют класс пр дм тных областей, если их онтологии похожи. Обобщим определение похожих онтологий, прив д нно в глав 1, на случай сложно-структурированных пр дм тных област й.

Буд м говорить, что дв сист мы знаний, относящи ся к разным онтологиям (одной и той ж , или разных пр дм тных област й), похожи, сли м жду множ ствами ситуаций, допуска мых этими сист мами знаний, мож ет быть установл ено взаимно-однозначно е соответстви е [92, 198-199].

Буд м говорить, что дв онтологии уровня 2 одной и той ж или разных пр дм тных област й похожи, сли м жду множ ствами допуска мых ими сист м знаний мож т быть установл но тако взаимно­однозначно соотв тстви , что соотв тствующи сист мы знаний похожи [92, 198-199].

Буд м говорить, что дв онтологии уровня i одной и той ж или разных пр дм тных област й похожи, сли м жду множ ствами допуска мых ими онтологий уровня i-1 может быть установл ено тако е взаимно-однозначно е соответстви е, что соотв етствующи е онтологии уровня i-1 похожи.

Буд м говорить, что дв сист мы знаний, относящи ся к разным онтологиям (одной и той ж , или разных пр дм тных област й), похожи, е сли их мод ели изоморфны [92, 198-199].

Будем говорить, что две онтологии уровня i (i>2) одной и той же или разных пр е дм етных областе й похожи, е сли их мод ели изоморфны.

Если т рмины в онтологии н которой пр дм тной области зам нить другими терминами (в том числе абстрактными обозначениями), то в р зультат буд т получ на похожая онтология. Такой подход прим ня тся в мат матик , когда т рмины пр дм тной области зам няются букв нными обозначениями.

Сходство между онтологиями является отношением эквивалентности - оно р е флексивно, симм етрично и транзитивно.

Две n-уровневые онтологии похожи, если выполнены следующие условия:

* похожи онтологии уровня n;
* м ежду множе ствами модул ей онтологий уровня n-1 можно

установить взаимно-однозначно соотв тстви , при котором

соответствующи е онтологии уровня n-1 похожи,

* для любого i (i>3) м е жду двумя множ е ствами модул е й онтологий уровня i-1, постро е нных с использовани е м двух похожих онтологий уровня i, можно опр д лить взаимно-однозначно отображ ни , при котором соотв тствующи онтологии (опр д ля мы соотв тствующими модулями) похожи;
* м жду двумя множ ствами модул й знаний, постро нных с использовани м двух похожих онтологий уровня 2, можно опр д лить взаимно-однозначное отображение, при котором соответствующие модули знаний похожи.

3.3.3. Инт е грация онтологий, знаний и их мод ел е й

Когда говорят о сложных пр едметных областях, обычно имеют в виду, что таки пр дм тны области включают знания из разных пр дм тных областей. Поэтому при описании знаний и действительности сложной пр дм тной области используются понятия, относящи ся к другим предметным областям - компонентам сложной предметной области.

Онтологии сложных пр дм тных област й строятся из компон нт - онтологий этих других пр е дм етных област ей.

Буд м говорить, что (исходная) сист ма знаний, относящаяся к сложной пр дм тной области, состоит из сист м знаний (компон нт), относящихся к другим пр дм тным областям, сли каждая компон нта прощ исходной сист мы знаний и п р ход от любой ситуации, допуска мой исходной сист мой знаний, к соотв тствующим ситуациям, допуска мым компон е нтами, происходит б е з пот ери информации [92, 198-199]. Посл едн е е означает, что для любых двух различных ситуаций, допускаемых исходной сист мой знаний, два набора, состоящи из ситуаций, соотв тствующих этим двум ситуациям и допускаемых вс еми компонентами, различны.

Буд м говорить, что (исходная) онтология уровня 2 сложной

предметной области состоит из компонент - онтологий уровня 2 других пр е дм етных областе й, е сли каждая компон е нта прощ е исходной онтологии уровня 2, каждая сист ма знаний исходной онтологии уровня 2 состоит из сист м знаний компон нт и п р ход от любой сист мы знаний исходной онтологии уровня 2 к соотв тствующим сист мам знаний компон нт происходит б ез потери информации [92, 198-199]. Посл е дн е е означает, что для любых двух различных сист м знаний исходной онтологии уровня 2 два набора, состоящие из систем знаний компонент, соотв етствующих этим двум сист мам знаний, различны.

Буд м говорить, что (исходная) онтология уровня i сложной

пр дм тной области состоит из компон нт - онтологий уровня i других

пр е дм етных областе й, е сли каждая компон е нта прощ е исходной онтологии

уровня i, каждая онтология уровня i-1, согласованная с онтологией уровня i, состоит из онтологий уровня i-1, согласованных с компон е нтами, и п ер еход от любой онтология уровня i-1, согласованная с онтологией уровня i, к соответствующим онтология уровня i-1, согласованных с компон ентами, происходит без потери информации. Последнее означает, что для любых двух различных онтологий уровня i-1, согласованных с онтологи ей уровня i, два набора, состоящи е из онтологий уровня i-1, согласованных с компон нтами, различны.

Будем говорить, что (исходная) система знаний, относящаяся к сложной предметной области, состоит из систем знаний (компонент), относящихся к другим пр дм тным областям, сли мод ль явля тся произве де ни ем мод ел ей компон е нт [92, 198-199].

Будем говорить, что (исходная) онтология уровня i (i>2) сложной пр дм тной области состоит из компон нт - онтологий уровня i других предметных областей, если ее модель является произведением моделей онтологий - компонент.

1. Анализ задач

Как было сказано ране е, профессиональная деятельность в предметной области состоит в р е ше нии прикладных задач. Таким образом, множе ство прикладных задач ПО также является важным свойством предметной области.

При формулировк прикладной задачи опр д ляются исходны данны задачи (т.е. им е на входных парам етров задачи и их знач е ния), р е зультаты (т.е. имена выходных параметров задачи) и условия задачи, определяющие множество ограничений, накладываемых на значения выходных данных задачи либо на значения терминов онтологии ПО. Входными и выходными параметрами задачи могут быть как термины онтологии ПО, так и новые термины, опр еделяемые с использовани ем терминов онтологии ПО [37-39]. При р ешении задачи используются связи, задаваемы е онтологи ей (уровня 2) и знаниями ПО, а также условия задачи.

Сп цификация задачи зада тся с использовани м т рминов мод ли пр едм етной области, т.е. сп ецификация - это формально е описание задачи с использовани м н которого формального языка. Сп цификация задачи содержит в каче ств е компоненты модель предм етной области.

Таким образом, сп цификация задачи сод ржит сл дующи

компон е нты: им е на входных парам етров задачи и их знач е ния, им е на выходных парам тров задачи и области их знач ний, связи входных и выходных парам тров задачи с т рминами пр дм тной области, условия задачи, модель пр едметной области.

Рассмотрим пример спецификации задачи: Внутренняя энергия

термодинамиче ской системы равна 6344 Дж, энтальпия - 2340 Дж, давление

* 4300 Па, и объем - 2 л. Найти энергию Гиббса. Сп ецификация данной задачи дана с использовани м т рминов модуля "Основы т рмодинамики" онтологии физич ской химии. Сп цификация задачи сод ржит в кач ств компон нты мод ль онтологии и мод ль знаний физич ской химии.

Класс прикладных задач есть множество задач. При задании класса определяются входные и выходные параметры задач класса, а также могут задаваться условия задач - общи для вс х задач класса [37-39]. В спецификации задач класса отсутствуют значения входных параметров. Сп цификация класса прикладных задач такж сод ржит в кач ств компон нты мод ль ПО. Сп цификация класса задач зада т: им на входных парам тров задачи и области их знач ния, им на выходных парам тров задачи и области их значений, связи входных и выходных парам етров задачи с т рминами пр дм тной области, условия задачи, мод ль пр дм тной области.

Рассмотрим прим р сп цификации класса прикладных задач: для первого шага процесса заданы внутренняя энергия, энтальпия, давление и объем. Не обходимо найти энергию Гиббса на этом шаге.

Опр еделим уровни общности сп ецификаций задач.

1. Сп цификация прикладной задачи: заданы мод ль ПО, им на входных параметров задачи и их значения, имена выходных параметров задачи и области их значений, связи входных и выходных парам етров задачи с терминами предм етной области, а также условия задачи.
2. Сп цификация класса прикладных задач: заданы мод ль ПО, им на входных и выходных параметров и области их значений, связи входных и выходных параметров задачи с терминами предметной области, а также условия задач класса.
3. Сп ецификация класса прикладных задач, соответствующих онтологии уровня 2: заданы мод ль онтологии уровня 2, им на входных и выходных парам тров задачи и области их знач ний, связи входных и выходных парам тров задачи с т рминами пр дм тной области, а такж условия задач класса. Знания в данном случа являются входными данными задачи, а множе ство терминов онтологии знаний является подмноже ством множе ства входных парам етров задачи.
4. Сп ецификация класса прикладных задач, соответствующих онтологии уровня i: заданы мод ль онтологии уровня i, им на входных и выходных парам тров задачи и области их знач ний, связи входных и выходных парам тров задачи с т рминами пр дм тной области, а такж условия задач класса. В данном случае онтология уровня i-1 относится к входным данным класса задач, а т рмины, использу мы при опр д л нии, будут входить в множе ство входных парам етров задачи.

Оч видно, что ч м бол общая онтология использу тся в сп цификации задач, тем боле е общим будет класс задач.

В качестве примера спецификации класса задач, соответствующих онтологии уровня 2, рассмотрим сп цификацию одного из классов задач определения путей синтеза органических соединений (см. Приложение 6). В задачах данного подкласса дано названи органич ского со дин ния, которо требуется синтезировать, и соединение, принадлежащее множеству со дин ний п рвого шага синт за. Н обходимо опр д лить число шагов синт за, а такж построить посл доват льность р акций, позволяющих синте зировать тр ебу е мое со е дин е ни е; длина этой посл е доват ельности на диницу м ньш числа шагов синт за.

Определим вид выходного параметра задач данного класса: Result = <Process>. Опр еделим сорт выходного парам етра: сорт Process: {(v: (х I[1,^), seq химические реакции)) length(n(2, v)) = п(1, v)-1}

Зададим связи выходного параметра с терминами онтологии органич ской химии.

7i(1, Process) = число шагов процесса

Число шагов процесса синтеза должно совпадать с числом шагов химич ского проц сса.

(v: I[1, число шагов процесса-1]) 7i(v, П2, Process)) = реакции процесса^)

Данно е утв ерждени е задает связь значения выходного парам етра задачи со значением термина «реакции процесса» модели онтологии органич ской химии.

Зададим условие задач данного класса (требования к процессам, пр е дъявля е мыми в органич е ской химии): п(1, Process) < 16.

Определим входные параметры данной задачи: Data\_In = <Требуется синтезировать, Веще ство п ервого шага>. Зададим сорта входных парам етров: сорт Тр ебу ется синте зировать: органические соединения сорт Веще ство п ервого шага: органические соединения Зададим связи входных и выходных парам тров с т рминами онтологии органич ской химии:

Тр ебуется синтезировать е вещества процесса(число шагов процесса)

Синт зиру мо со дин ни должно принадл жать множ ству со дин ний посл дн го шага.

Веще ство первого шага е вещества процесса( 1)

Начально со дин ни должно принадл жать множ ству со дин ний первого шага.

(v: I[1, число шагов процесса-1]) (vl: I[1, число шагов процесса-1]\{v}) дополнительные вещества(v) п дополнительные вещества(уХ) = 0 Дополнительные ве щ е ства на различных шагах проц е сса различны.

Рассмотрим пример класса прикладных задач, соответствующих онтологии уровня 4 для физич е ской химии: задан ном ер шага проц е сса, а также собственные свойства объектов (элементов, веществ или реакций) на шагах проц е сса, пр е дше ствующих или совпадающих с указанным; тр ебу ется найти знач ния этих свойств для указанного шага проц сса.

Прим ры сп цификаций других классов задач для двух разд лов пр дм тной области химия прив д ны в прилож ниях 6 и 7.

1. Анализ м етодов р ешения задач

Если спецификация задач постро ена, то может быть выполнен анализ сущ ствующих м тодов р ш ния задач с ц лью опр д л ния наличия м тода, который может быть использован при решении задач. Если такой метод найден, то он используется при создании специализированной оболочки.

Разны м тоды р ш ния одной и той ж задачи могут отличаться разными характеристиками сложности. При определении характеристик сложности используются свойства исходных данных задач. Наличие сп цификации задач позволя т выбрать м тод, обладающий лучшими характеристиками сложности.

Если м тод р ш ния задач н найд н, выполня тся го разработка по сп цификации. Сп цификация м тода опр д ля т п р м нны м тода и их связи с терминами спецификации задачи или класса задач. В некоторых работах, посвящ нных анализу разных видов онтологий, сп цификация м тода называ тся онтологи й м тода.

Рассмотрим прим р сп цификации м тода р ш ния класса задач поиска пут й синт за органич ских со дин ний. Р ш ни вс х задач рассматриваемого класса состоит в поиске реакции, удовлетворяющей приведенным связям. Если такая ре акция найдена, то формируется результат реш е ния задачи - проц е сс, состоящий из двух шагов. Если такой р е акции н е найдено, тогда число шагов процесса больше двух, а свойства процесса определяются спецификацией задачи. Приведем метод решения задачи с заданной сп цификаци й, записанный на язык прикладной логики (компон нты формулы нум руются для удобства ссылки на них).

/({(v: химические реакции) Тр ебуется синтезировать е резулътаты(у) & Веще ство первого шага е реагенты^)} ^ 0 ^ число шагов проц есса = 2 & реакции процесса(1) е {(v: химические реакции) Тр ебуется синтезировать е резулътаты(у) & Веще ство первого шага е реагенты(у)\),

{(v: химические реакции) Тре буется синтезировать е резулътаты(у) & Веще ство первого шага е реагенты(у)} = 0 ^

(М.1) число шагов процесса > 2 &

(М.2) реакции процесса(1) е {(v: химические реакции) Веще ство первого шага е реагенты(у)} &

(М.3) реакции процесса(число шагов процесса-1) е {(v: химические реакции) Тр ебуется синтезировать е резулътаты/^)} &

(М.4) (& (v1: I[2, число шагов процесса-2]) реакции процесса(у\) е {(v: химические реакции) реагентыг^) с резулътаты(реакции процесса(у1-\)) и дополнителъные вещества(у\)\)/

Прив д м комм нтарий к м тоду.

Если существует реакция, множеству реагентов которой принадлежит соединение Вещество первого шага, а множеству результатов - Требуется синтезироватъ, то число шагов химич е ского проц е сса равно двум, а данная р акция буд т р акци й п рвого шага проц сса. Если такой р акции н т, то тр бу мый проц сс синт за облада т сл дующими свойствами:

М.1) число шагов проц е сса больш е двух;

М.2) реакцией первого шага является реакция, множеству реагентов которой принадл жит со дин ни Вещество первого шага;

М.3) реакцией предпоследнего шага является реакция, множеству результатов которой принадлежит соединение Требуется синтезироватъ;

М.4) реакцией каждого шага с номером, начиная со второго, и до ном ра, равного разности числа шагов проц сса и 2, явля тся р акция, множе ство р е агентов которой являются подмноже ством р езультатов р е акции пр дыдущ го шага и дополнит льных со дин ний данного шага.

Прим ры сп цификации м тодов для разных классов опр д л ния пут й синт за органич ских со дин ний прив д ны в Прилож нии 6.

1. Обсужд ени е

Описанный в данной главе метод анализа "снизу вверх” развивает онтологич ский м тод на случай сложно-структурированных пр дм тных областей, позволяя обобщить одноуровневые онтологии разделов сложно­структурированной пр дм тной области до многоуровн вых и получить онтологию верхнего уровня, определяющую схему анализа "сверху вниз" для новых разд лов данной области, при котором онтологии новых разд лов пр дставляются как конкр тизации онтологии в рхн го уровня.

В глав такж опр д л ны классы задач разных уровн й общности, сп цификации которых могут быть даны в т рминах многоуровн вых онтологий. Показано, что сп цификация задач мож т вводить новы т рмины и дополнительные по сравнению с онтологией предметной области соотнош ния. Опр д л ны вс компон нты сп цификации задач.

Показано, что сп цификация м тода р ш ния задач вводит п р м нны м тода и зада т их связи с т рминами сп цификации задач и т рминами онтологии предметной области. Формальное представление спецификаций задач и м тода позволя т их иссл довани формальными мат матич скими м етодами до разработки программной системы.

**ГЛАВА 4. МНОГОУРОВНЕВАЯ МОДЕЛЬ ПРЕДМЕТНОЙ ОБЛАСТИ "ХИМИЯ"**

В данной главе описывается четырехуровневая модель химии, охватывающая физич скую и органич скую химию в объ м

университетских курсов, а также раздел рентгено-флуоресцентного анализа

аналитич е ской химии. Структура модели приведена на рис. 4.1.

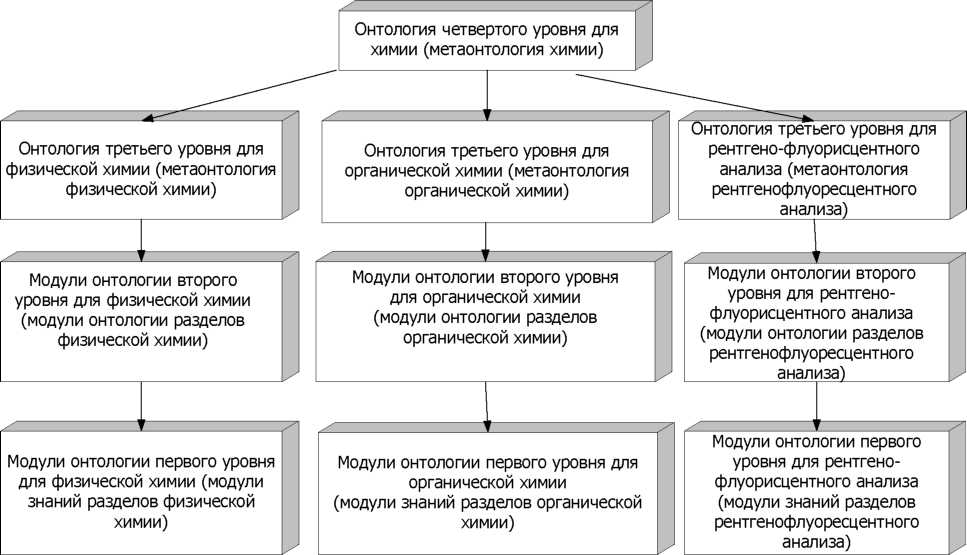


Рис 4.1. Структура четырехуровневой модели химии

Модель была постро ена после выполнения анализа данной пр едм етной области при помощи метода "снизу вверх”, описанного в главе 3, и представлена как четырехуровневая необогащенная система логических соотношений с параметрами, принадлежащая классу моделей,

опр д л нному в глав 2.

Тр тий уров нь мод л й физич ской и органич ской химии, а такж р нтг нофлуор сц нтного анализа постро ны с использовани м м тода "св рху вниз", описанного в глав 3, т. . поср дством задания обогащ ний для модели онтологии четв ертого уровня. Модели онтологий второго уровня пр дставл ны ср дствами языка прикладной логики, опр д л нного в глав 3, и прив д ны в прилож ниях 2-4. В прилож нии 5 прив д н фрагм нт базы знаний физич ской химии, сод ржащий н структурированны знания данного раздела (законы физической химии). Эти знания представлены в вид пр длож ний - огранич ний на инт рпр тацию им н языка прикладной логики.

По р е зультатам данной главы опубликованы работы [16-20, 40, 42, 51­54, 59]. В работе [52] описана ч етыр ехуровн е вая мод ель химии. Мод ели онтологии второго и тр ть го уровн й для физич ской химии опубликованы в работах [51, 53, 59]. В работах [16, 42] опр еделена структура онтологии (и мод ли) второго уровня для органич ской химии; онтология и мод ль опр е д ел е ны в работах [17-20, 51]. Описани е мод ели онтологии второго уровня для р е нтг ено-флуор е сц ентного анализа прив е д ено в работах [40, 54]. В разработке онтологий второго уровня принимали участие эксперты пр едм етной области.

1. Модель онтологии ч етвертого уровня

Мод ль онтологии ч тв ртого уровня пр дставля т собой необогащенную систему логических соотношений с параметрами O4 = <Онтология четвертого уровня(ST, Интервалы, Категории), {Типы сущност й, Типы компон нтов сущности, Типы компон нтов сущности, задаваемых количеством, Типы сущностей процесса, Подмножества компонентов сущности}, Определение конструкторов >. Прикладная логиче ская теория Онтология четвертого уровня($Т, Интервалы, Категории) = <0, SS>, гд е SS - это множе ство пр е дложе ний, опр е д еля е мо е ниже. Данная прикладная логическая теория не использует предложений других п р и к л а д н ы х л о г и ч с к и х т о р и й .

Определим предложения прикладной логической теории Онтология четвертого уровня^Т, Интервалы, Категории). Вначале определим н однозначно инт рпр тиру мы им на и огранич ния на их знач ния.

1. Множества значений = R и I и N и L и ({}(R и I и N и L) \ 0) Вспомогательный термин "Множества значений” обозначает объедин ение множе ств целых и в еще ственных чис ел и множе ства обозначений, а также вс х их возможных подмнож ств
2. Кортежи значений = (и (n: I[1, ^)) Множе ства значений йп ) Вспомогательный термин "Кортежи значений" обозначает множество произвольных кортежей, составленных из элем ентов множе ства значений
3. Сорт Типы сущносте й : {}N \ 0

Параметр "Типы сущностей" обозначает не пустое множество названий типов сущностей

1. (Тип: Типы сущностей) сорт Тип: {}(R и I и N и L) и Кортежи значений Каждый тип сущностей представляет собой некоторое множество сущност й; каждая сущность мож т им ть имя, быть пр дставл на числом, быть логич ским знач ни м либо корт ж м
2. Ограничение: (Тип1: Типы сущностей) (Тип2: Типы сущностей \ {Тип1}) ](Тип1) п ](Тип2) = 0

Множе ства сущностей различных типов не пере секаются

1. Кортежи типов сущностей = (и (n: I[1, ^)) (Типы сущностей йп) Вспомогательный термин "Кортежи типов сущностей" обозначает множе ство произвольных кортежей, составленных из типов сущностей
2. Сущности = (и (Тип: Типы сущностей) ](Тип))

Вспомогательный термин "Сущности" обозначает объедин ение сущностей вс х типов

1. Тип сущности = (^(Сущность: Сущности) (i (Тип: Типы сущностей) Сущность е ](Тип)))

Вспомогат ельный термин "Тип сущности" обозначает функцию, аргументом которой является сущность, а р езультатом е е тип

1. Сорт Типы компон е нтов сущности: (Типы сущност ей ^ {}Типы

сущност й)

Парам етр "Типы компон е нтов сущности" обозначает функцию, которая сопоставляет типу сущности t не пустое множество названий типов сущностей, которы е могут быть компонентами сущностей типа t

1. Ограничение: (Тип: Типы сущностей) Тип £ Типы компонентов

сущности(Тип)

Никакая сущность не может иметь в качестве компонентов сущности такого ж типа, как она

1. Сорт Типы компонентов сущности, задаваемых количе ством: (Типы сущностей ^ {} N)

Парам етр "Типы компон е нтов сущности, задавае мых колич е ством" обозначает функцию, которая сопоставляет типу сущности t множество названий типов сущност й, которы могут быть компон нтами сущност й типа t; множе ство может быть пустым

1. Ограничение: (Тип: Типы сущностей) Типы компонентов сущности, задавае мых колич е ством(Тип) п Типы сущност ей = 0

Множество типов сущностей не пересекается с множествами названий типов компонентов сущностей, задаваемых количе ством

1. (Тип 1: Типы сущност ей) (Тип 2: Типы компон ентов сущност ей, задаваемых количеством(Тип 1)) сорт Тип 2: (|(Тип 1) ^ I[1, то))

Для каждой сущности типа t названи каждого типа компон нта, задаваемого количеством, задает имя функции, аргументом которой является множество сущностей типа t, а результатом целое число, не м ньш 1

1. Сорт Число шагов проц есса: I[0,^)

Термин «Число шагов проц е сса» обозначает колич е ство шагов, из которых состоит физико-химич еский проце сс

1. Сорт Типы сущносте й проц е сса: {} Типы сущност е й \ 0

Термин "Типы сущностей проце сса" обозначает множе ство типов сущност й, которы рассматриваются как компон нты физико- химич ского проц сса

1. сорт Подмноже ства компонентов сущности: ((Тип1 ^ Типы сущностей, Тип2 ^ Типы компон е нтов сущности(Тип1)) ^ {}N)

Термин "Подмноже ства компон е нтов сущности" обозначает функцию, аргум е нтами которой являются тип сущносте й tl и тип t2, принадл жащий множ ству типов сущност й, которы рассматриваются как компоненты сущностей типа tl, а р езультатом - множе ство названий подмнож ств компон нтов сущности типа t1

1. (Тип1: Типы сущностей) (Тип2: Типы компонентов сущности(Тип1)) (элем ент: Подмноже ства компон ентов сущности(Тип1, Тип2)) сорт элем ент: (|(Тип1) ^ {} {(v: Сущности) Тип сущности^) = Тип2} \ 0)

Для каждого типа сущност й t1 и типа t2, принадл жащий множ ству типов сущност й, которы рассматриваются как компон нты сущност й типа tl, термин, принадл е жащий множе ству р е зультатов функции "Подмножества компонентов сущности" обозначает функцию, аргументом которой является сущность типа tl^ а р езультатом некоторо е не пустое подмноже ство сущностей типа t2

1. (Тип1: Типы сущностей) (Тип2: Типы компонентов сущности(Тип1)) (сущность: ](Тип1)) Подмноже ства компон е нтов сущности(Тип1, Тип2) ^ 0 ^ Компоненты сущности(Тип1, Тип2)(сущность) = (и (Элем ент: Подмноже ства компонентов сущности(Тип1, Тип2)) элем ент(сущность)) Для каждого типа сущност й t1 и типа t2, принадл жащий множ ству типов сущност й, которы рассматриваются как компон нты сущност й типа t1, и каждой сущности, им ющ й тип t1, множ ство компон нтов представляет собой объединение подмножеств, имена которых задает знач ни функции "Подмнож ства компон нтов сущности"
2. (Тип1: Типы сущносте й) (Тип2: Типы компон е нтов сущности(Тип1)) (эл1: Подмноже ства компонентов сущности(Тип1, Тип2)) (эл2: Подмноже ства компон е нтов сущности(Тип1, Тип2)\{эл1}) эл1(Тип1) п эл2(Тип1) = 0 Для каждого типа сущност й t1 и типа t2, принадл жащий множ ству типов сущност й, которы рассматриваются как компон нты сущност й типа t1, пер е с ечени е разных подмножеств компон ентов сущности типа t1 пусто.

Т п рь опр д лим конструкторы ч тв ртого уровня

1. Собстве нные свойства сущност ей = (Х(Тип сущности: Типы сущност ей) (^(Область возможных значений: {}(Множе ства знач ений и {}Кортежи знач ений)) (|(Тип сущности) ^ Область возможных знач е ний)))

Термин "Собств енны е свойства сущностей" обозначает функцию, аргументом которой является тип сущности t, а областью значений - множество функций, у каждой из которых область определения есть множество значений или множество кортежей m, а область значений - множество функций, аргументом каждой из которых является сущность типа t, а р зультатом - эл м нт множ ства m

1. Компоненты сущности = (Х(Тип1: Типы сущностей) (Тип2: Типы компон е нтов сущности(Тип1)) (|(Тип1) ^ {} {(v: Сущности) Тип

сущности^) = Тип2} \ 0))

Термин "Компон е нты сущности" обозначает функцию, аргум ентами которой являются тип сущност й t1 и тип t2, принадл жащий множ ству типов сущност й, которы рассматриваются как компон нты сущност й типа t1, а областью знач ний - множ ство функций, аргум нтом каждой из которых является сущность типа t1s а р езультатом - множе ство е е компон нт - н которо н пусто подмнож ство сущност й типа t2

1. Свойства компонентов указанного типа = (Х(Тип1: Типы сущностей) (Тип2: Типы компонентов сущности(Тип1)) (^(Область возможных знач ений: {}(Множ е ства знач ений и {}Корт е жи знач ений)) ((Сущность типа 1 ^ ](Тип1), Сущность типа 2^ Компон енты сущности(Тип1, Тип2)(Сущность типа 1)) ^ Область возможных знач ений)))

Термин "Свойства компонентов указанного типа" обозначает функцию, аргум е нтами которой являются два типа сущност е й t1 и t2, а областью знач ний - множ ство функций, область опр д л ния каждой из которых е сть множ е ство знач ений или корт еж е й знач е ний m, а область знач е ний - множе ство функций, аргум ентами каждой из которых являются сущности, им ющи тип t1 и t2, прич м вторая явля тся компон нтом п рвой, а результатом - эл ем ент множе ства m

1. Свойства подмноже ства компонентов указанного типа = (Х(Тип1: Типы

сущностей) (Тип2: Типы компонентов сущности(Тип1)) (Название

подмноже ства: Подмноже ства компон ентов сущности(Тип1, Тип2))

(^(Область возможных значений: {}(Множе ства знач ений и {}Кортежи знач ений)) ((Сущность типа 1 ^ ](Тип1), Сущность типа 2^ Компон енты сущности(Тип1, Тип2)(Сущность типа 1)) ^ Область возможных

знач ний)))

Т рмин "Свойства подмнож ства компон нтов указанного типа" обозначает функцию, аргументами которой являются два типа сущностей t1 и t2 (один из возможных типов сущност й, которы рассматриваются как компоненты сущностей типа t1), и название подмноже ства, а р зультатом - функция, областью опр д л ния которой явля тся множество значений или кортежей значений m, а областью значений - множе ство функций, аргум ентами каждой из которых являются сущности, им ющи тип t1 и t2, прич м вторая явля тся компон нтом п рвой, а результатом - эл ем ент множе ства m

1. Свойства сущностей, зависящие от значений ее свойств = (X (Тип: Типы

сущностей) (X (Параметр: ](Тип)) (Кортеж множеств: {}Кортежи

знач ений) (Область возможных значений: {}(Множе ства значений и {}Кортежи значений)) ((х ](Тип), Кортеж множеств) ^ Область

возможных знач ний)))

Т рмин "Свойства сущност й, зависящи от знач ний свойств" обозначает функцию, аргум ентами которой является тип сущности t1, а областью знач ний - множ ство функций, аргум нтами каждой из которых являются сущность, им еющая тип t, корте ж множе ств C знач е ний свойств сущности, а также множе ство знач ений или кортежей знач ений m, а р зультатом - функция, аргум нтами которой являются сущность типа t и элемент множества C (кортеж значений свойств), а результатом - элем ент множе ства m

1. Свойства сущност е й, зависящи е от знач ения е е свойства = (X (Тип: Типы сущностей) (X (Параметр множества: ](Тип)) (Множество: {}Множества знач ений) (Область возможных значений: {}(Множе ства значений и {}Кортежи значений)) ((х ](Тип), Множество) ^ Область возможных знач ний)))

Т рмин "Свойства сущност й, зависящи от знач ний свойства" обозначает функцию, аргум ентом которой является тип сущности t1, а областью знач ний - множ ство функций, аргум нтами каждой из которых являются сущность, им еющая тип t, множе ство m1 знач ений н которого свойства сущности, и множ ство знач ний или корт ж й знач ний m2, а р зультатом - функция, аргум нтами которой являются сущность типа t и эл м нт множ ства m1, а р зультатом - эл м нт множе ства m2

1. Свойства компонентов не скольких типов = (Х(Тип1: Типы сущностей) (Множество типов: {} Типы компонентов сущности(Тип1)) (Х(Область возможных знач е ний: {}(Множ е ства знач е ний и {}Корте жи знач ений)) (и(Тип2: Множе ство типов) ((Сущность 1 ^ ](Тип1), Сущность 2 ^ Компон е нты сущности(Тип1, Тип2)(Сущность 1)) ^ Область возможных знач ний))))

Термин "Свойства компон ентов не скольких типов" обозначает функцию, аргум е нтами которой являются тип сущност е й t1 и множе ство типов сущностей m1, а областью значений - множе ство функций, областью определения каждой из которых является множество значений или кортежей значений m, а областью значений - множество функций, аргументами каждой из которых являются сущность типа t1 и сущность типа t2 (гд е t2 е сть один из эл е м ентов множ е ства m1), являющаяся компон нтом сущности типа t1, а р зультатом - эл м нт множ ства m

1. Свойства компонентов, задаваемых количе ством = (Х(Тип1: Типы

сущностей) (Тип2: Типы компонент сущности, задаваемых

количе ством(Тип1)) (^(Область возможных значений: {}(Множества

значений и {}Кортежи значений)) ((Сущность типа 1 ^ ](Тип1), Номер сущности типа 2^ I[1, Тип2(Сущность типа 1)]) ^ Область возможных знач ний)))

Термин "Свойства компонентов, задаваемых количе ством" обозначает функцию, аргум нтами которой являются два типа сущност й t1 и t2, а областью значений - множество функций, областью определения каждой из которых явля тся множ ство знач ний или корт ж й знач ний m, а областью знач ний - множ ство функций, аргум нтами каждой из которых являются сущность типа t1 и ном р сущности типа t2, являющ йся компон нтом сущности типа t1, а р зультатом - эл м нт множе ства m

1. Совместные свойства сущностей = (X (Кортеж типов: {}Кортежи типов сущност е й) (^(Область возможных знач е ний: {}(Множе ства знач е ний и {}Кортежи значений)) ((i ^ I[1,length(Кортеж типов)]), сущ^ {(Сущность: Сущности) Тип сущности(Сущность) = n(i, Кортеж типов)}) ^ Область возможных знач ний)))

Термин "Совм е стные свойства сущност е й" обозначает функцию, аргументом которой является кортеж типов сущностей, а областью значений - множество функций, областью определения каждой из которых является множество значений или кортежей значений m, а областью значений - множе ство функций, аргументом каждой из которых явля тся корт ж сущност й соотв тствующих типов, а р зультатом - элем ент множе ства m

1. Общие свойства сущности и компон е нта = (Х(Тип1: Типы сущност ей) (Тип2: Типы компонент сущности(Тип1)) (^(Область возможных

значений: {}(Множества значений и {}Кортежи значений)) (|(Тип

сущности) и (Сущность 1 ^ ](Тип1), Сущность 2 ^ Компоненты сущности(Тип1, Тип2)(Сущность 1)) ^ Область возможных знач е ний))) Термин "Общие свойства сущности и компон ента" обозначает функцию, аргум е нтами которой являются два типа сущност е й tl и t2, а областью знач ний - множ ство функций, у каждой из которых область опр д л ния е сть множе ство знач ений или множе ство кортежей m, а область значений

* множество функций, у каждой из которых либо один аргумент (сущность типа tl), либо два аргумента (сущность типа tl и сущность типа t2, являющаяся компон е нтом сущности типа tl), а р е зультат явля ется элем ентом множе ства m

1. Собстве нные свойства проц е сса = (X (Область возможных знач е ний: {}(Множества значений и {}Кортежи значений)) (I[1, Число шагов проце сса] ^ Область возможных значений))

Термин "Собств енны е свойства проце сса" обозначает функцию, областью опр д л ния которой явля тся множ ство знач ний или корт ж й знач ний m, а областью знач ний - множ ство функций, аргум нтами каждой из которых являются номер шага процесса, а результатом - элем ент множе ства m

1. Сущности процесса = (Х(Тип: Типы сущностей процесса) {(f: (I[1, Число шагов проце сса] ^ {} {(v: Сущности) Тип сущности^) = Тип})) (& (Ном ер шага: I[1, Число шагов проце сса]-1) ДНом ер шага) ^ ДНом ер шага+1))})

Термин "Сущности проце сса" обозначает функцию, аргум ентом которой является тип сущностей t, а областью значений - множество функций, аргументом каждой из которых является номер шага процесса, а результатом подмножество сущностей типа t, причем каждая функция обладает следующим свойством: множества сущностей соседних шагов проц сса н совпадают

1. Выделенные сущности проце сса = (Х(Тип: Типы сущностей проц есса) {(f: (I[1, Число шагов проце сса] ^ {(v: Сущности) Тип сущности(v) = Тип} \ 0)) (& (Ном ер шага: I[1, Число шагов проц есса]) ^Ном ер шага) е Сущности проце сса(Тип)(Ном ер шага))})

Термин "Выд ел е нные сущности проц е сса" обозначает функцию, аргум е нтом которой явля ется тип сущносте й t, а областью знач е ний - множе ство функций, аргум ентом каждой из которых является ном ер шага проце сса, а р езультатом - н екоторый элем ент множе ства сущностей типа t, прич м каждая функция облада т сл дующим свойством: для любого шага процесса выделенная сущность процесса, имеющая тип t, является элем ентом множе ства сущностей этого шага проце сса, им еющих тип t

1. Свойства сущностей процесса = (Х(Тип: Типы сущностей процесса)

(^(Область возможных значений: {}(Множе ства знач ений и {}Кортежи знач ений)) ((Ном ер шага ^ I[1, Число шагов проце сса], Сущность ^ Сущности проц е сса(Тип)(Ном ер шага)) ^ Область возможных

знач ний)))

Термин "Свойства сущностей проце сса" обозначает функцию, аргум ентом которой является тип сущностей t, а областью значений - множество функций, областью опр еделения каждой из которых является множе ство значений или кортежей значений m, а областью значений - множество функций, аргум ентами каждой из которых являются ном ер шага проце сса и компон нта этого шага (сущность типа t), а р зультатом - эл м нт множе ства m

1. Общие свойства процесса и участвующей в нем сущности = (Х(Тип: Типы сущност е й проц е сса) (^(Область возможных знач е ний: {}(Множ е ства знач ений и {}Корте жи знач е ний)) (I[1, Число шагов проц е сса] и (Ном ер

шага ^ I[1, Число шагов проц е сса], Сущность ^ Сущности

проц е сса(Тип)(Ном ер шага)) ^ Область возможных знач е ний)))

Термин "Общи е свойства проце сса и участвующей в нем сущности" обозначает функцию, аргументом которой является тип сущностей t, а областью знач ний - множ ство функций, у каждой из которых область опр д л ния сть множ ство знач ний или множ ство корт ж й m, а область знач ний - множ ство функций, у каждой из которых либо один аргумент (номер шага процесса), либо два аргумента (номер шага проце сса и сущность типа t), а результатом является элем ент множе ства m

1. Состав сущносте й проц е сса = (Х(Тип1: Типы сущносте й проц е сса) (Тип2: Типы компонентов сущностей(Тип1)) ((Ном ер шага ^ I[1, Число шагов проце сса], Сущность ^ Сущности проце сса(Тип1)(Ном ер шага)) ^ {} {(v: Сущности) Тип сущности(у) = Тип2} \ 0))

Термин "Состав сущностей проце сса" обозначает функцию, аргум ентами которой являются два типа сущност й t1 и t2, а областью знач ний - множество функций, аргументами каждой из которых являются номер шага проце сса и сущность типа t1, а р езультатом - не пусто е подмноже ство сущностей типа t2

1. Свойства компон ента сущности проце сса = (Х(Тип1: Типы сущностей процесса) (Тип2: Типы компонентов сущности(Тип1)) (Х(Область

возможных знач е ний: {}(Множ е ства знач е ний и {}Корте жи знач ений)) ((Ном ер шага ^ I[1, Число шагов проц е сса], Сущность ^ Сущности проц е сса(Тип1)(Ном ер шага), Компон е нта компон енты ^ Состав сущностей проце сса(Тип1, Тип2)(Ном ер шага, Сущность)) ^ Область возможных знач ний)))

Термин "Свойства компонента сущности проце сса" обозначает функцию, аргум е нтами которой являются тип сущност е й t1, тип t2, принадл е жащий множеству типов сущностей, которые рассматриваются как компоненты сущностей типа t1, а областью значений - множе ство функций, областью

определения каждой из которых является множество значений или кортежей значений m, а областью значений - множество функций, аргументами каждой из которых являются ном ер шага проце сса, сущность типа tl и сущность типа t2, а р езультатом - элем ент множе ства m 39. Общие свойства процесса, участвующей в нем сущности и ее компонента = (Х(Тип1: Типы сущностей проце сса) (Тип2: Типы компонент

сущности(Тип1)) (^(Область возможных знач ений: {}(Множества

знач ений и {}Корте жи знач е ний)) (I[1, Число шагов проц е сса] и (Ном ер шага ^ I[1, Число шагов проц е сса], Сущность ^ Сущности

проце сса(Тип)(Ном ер шага)) и (Номер шага ^ I[1, Число шагов процесса], Сущность ^ Сущности процесса(Тип1)(Номер шага), Компонента ^ Состав сущностей проце сса(Тип1, Тип2)(Ном ер шага, Сущность проце сса)) ^ Область возможных значений)))

Т рмин "Общи свойства проц сса, го сущности и компон нта" обозначает функцию, аргументами которой являются два типа сущностей t1 и t2, прич м сущности типа t2 являются компон нтами сущност й типа tl, а областью значений - множе ство функций, у каждой из которых область определения есть множество значений или множество кортежей m, а область знач ний - множ ство функций, у каждой из которых либо один аргум нт (ном р шага проц сса), либо два аргум нта (ном р шага проц е сса и сущность типа tl), либо три аргум ента (ном ер шага проц е сса, сущность типа tl и сущность типа t2), а результатом является элемент множе ства m

1. Модель онтологии треть его уровня

Онтология тр ть го уровня для химии сть композиция онтологий тр ть го уровня для физич ской и органич ской химии, а такж р нтг но- флуор е сц ентного анализа.

1. Мод ель онтологии тр еть е го уровня для физич е ской химии

Мод ль онтологии тр ть го уровня для физич ской химии пр дставля т собой не обогащенную систему логиче ских соотношений без парам етров Оф = <Онтология третьего уровня для физической xumuu(ST, Интервалы, Категории), 0, Определение конструкторов для физической химии>. Прикладная логическая теория Онтология третьего уровня для физической xumuu(ST, Интервалы, Категории) = <{Онтология четвертого уровня, Константы онтологии физической химии}, SS>, где SS - это множе ство пр е дложе ний прикладной логич е ской те ории, опр е деля е мо е ниже.

Мод ль онтологии тр ть го уровня для физич ской химии получа тся из мод ели ч етв ертого уровня с помощью обогащ е ния кф = <3нач е ни е парам тров ч тв ртого уровня для физич ской химии, Опр д л ни сортов имен третьего уровня для физической химии, Множество онтологических соглаш ний для физич ской химии, Опр д л ни конструкторов для физич ской химии, 0>.

Опр д лим знач ния парам тров для физич ской химии.

1. Типы сущносте й = {Химич е ски е эл е м е нты, Химич е ски е ве щ е ства, Химич е ски е р е акции, Табличные знач е ния те мп ературы, Табличны е знач ения давл ения, Фазы}

В онтологии физич ской химии сущностями являются химич ски элементы, вещества и реакции, табличные значения температуры и давл ния и фазы.

1. Типы компон е нтов сущности = (Х(Тип: {Химич е ски е эл е м е нты,

Химич ски в щ ства, Химич ски р акции, Табличны знач ния т е мп ературы, Табличны е знач е ния давл ения, Фазы}) (Тип е {Химич е ски е эл е м е нты, Табличны е знач е ния те мп ературы, Табличны е знач е ния давл е ния} ^ 0), (Тип = Химич е ски е в е щ е ства ^ {Химич е ски е эл е м е нты}), (Тип = Химич е ски е ре акции ^ {Химич е ски е ве щ е ства}), (Тип = Фазы ^ {Химич е ски е ве щ е ства, Химич е ски е р е акции})/)

В качестве компонентов для химических веществ рассматриваются химические элементы, для реакций - вещества, компонентами фазы являются химич ски в щ ства. Сущности остальных типов компон нтов н е им еют.

1. Подмноже ства компон е нтов сущности = (Х(пара: {<Химич е ски е ве щ е ства, Химические элементы>, <Химические реакции, Химические вещества>, <Фазы, Химич е ски е ве ще ства>}) / (пара = <Химич е ски е р е акции, Химич е ски е вещ е ства> ^ {Р е аг енты, Р е зультаты}, (пара ^ <Химич е ски е реакции, Химиче ски е в еще ства> ^ 0)/)

Все множество веществ, рассматриваемых как компоненты реакций, разбивается на два подмножества - реагенты и результаты р е акций

1. Типы компон ентов сущности, задавае мых колич е ством = (Х(Тип:

{Химич е ски е эл е м енты, Химич е ски е вещ е ства, Химич е ски е р е акции, Табличные знач е ния т е мп ературы, Табличны е знач е ния давл е ния, Фазы}) (Тип ^ Химич е ски е эл е м енты ^ 0), (Тип = Химич е ски е эл е м е нты ^ {Число эл е ктронов})/)

Для химич е ских эл е м ентов задается число эл е ктронов. Сущности остальных типов компонентов, задаваемых количе ством, не им еют.

1. Типы сущност ей проц е сса = {Химич е ски е в е щ е ства, Химич е ски е р е акции, Фазы}

Сущностями проц сса являются химич ски в щ ства, р акции и фазы.

Опр д лим сорта им н тр ть го уровня для физич ской химии.

1. Сорт Участники реакции: Компоненты сущности(Химич еские р е акции, Химич ски в щ ства)

Термин "Участники р е акции" обозначает функцию, аргум ентом которой явля тся р акция, а р зультатом - н пусто множ ство химич ских в щ ств

1. Сорт Веще ства проце сса: Сущности проце сса(Химиче ские в еще ства)

Термин "Ве ще ства проц е сса" обозначает функцию, аргум е нтом которой является номер шага процесса, а результатом - множество химических в щ ств этого шага

1. Сорт Фазы проц е сса: Сущности проц е сса(Фазы)

Термин "Фазы проце сса" обозначает функцию, аргум ентом которой явля тся ном р шага проц сса, а р зультатом - множ ство фаз этого шага

1. Сорт Ре акции проце сса: Сущности проце сса(Химич еские реакции)

Термин "Р е акции проц е сса" обозначает функцию, аргум е нтом которой является номер шага процесса, а результатом - множество химических р акций этого шага

1. Сорт В щ ства фазы проц сса: Состав сущности проц сса(Фазы,

Химич ски в щ ства)

Термин "Ве ще ства фазы проц е сса" обозначает функцию, аргум ентами которой являются ном ер шага проце сса и названи е фазы, а р езультатом - множе ство химиче ских в еще ств данной фазы

1. Сорт Участники реакции процесса: Состав сущности проце сса(Химич е ские р е акции, Химич е ские веще ства)

Термин "Участники р е акции проц е сса" обозначает функцию, аргум ентами которой являются ном р шага проц сса и р акция этого шага, а результатом - множе ство химиче ских в еще ств - участников р е акции

1. Сорт Р акции фазы проц сса: Состав сущности проц сса(Фазы,

Химич ски р акции)

Термин "Р е акции фазы проц е сса" обозначает функцию, аргум е нтами которой являются номер шага проце сса и фаза этого шага, а результатом - множе ство химиче ских р е акций, идущих в данной фаз е

Опр д лим онтологич ски соглаш ния для физич ской химии.

1. Химич е ски е эл е м е нты е {}N \ 0

Сущности типа "Химические элементы" представляются своими обознач е ниями

1. Химич е ски е в е щ е ства е {}N \ 0

Сущности типа "Химические вещества" представляются своими обознач е ниями

1. Табличные знач е ния т е мп ературы е {} ЩМинимально е знач е ни е темп ературы, максимально е значение температуры] \ 0

Сущности типа "Табличные значения температуры" представляются в щ ств нными числами, н м ньшими минимального знач ния темп ературы и не пр евышающими максимально е значени е температуры

1. нормальная те мп ература е Табличны е знач е ния те мп ературы Нормальная температура всегда является элементом множества табличных знач ений температуры
2. Табличные знач е ния давл е ния: е {} ЩМинимально е знач ени е давл е ния, Максимально знач ни давл ния] \ 0

Сущности типа "Табличные знач ения давл е ния" пр е дставляются в щ ств нными числами, н м ньшими минимального знач ния давл ния и не пр евышающих максимально е значение давления

1. нормально давл ни е Табличны знач ния давл ния

Нормальное давление всегда является элементом множества табличных знач ений давления

1. Химич е ски е р е акции: е {}N \ 0

Сущности типа "Химические реакции" представляются своими обознач е ниями

1. Фазы: е {}N \ 0

Сущности типа "Фазы" пр едставляются своими обозначениями

1. (Ном ер шага: I[1, Число шагов проце сса]) (Ре акция шага: Р еакции проц сса(Ном р шага)) Участники р акции проц сса(Ном р шага, Р акция шага) = Участники р акции(Р акция шага)

Участниками р акции на любом шаг проц сса являются т химич ски в щ ства, которы могут участвовать в этой р акции

1. (Номер шага: I[1, Число шагов процесса]) Вещества процесса(Номер шага) ^0

Множе ство химиче ских веще ств на вс ех шагах проце сса не пусто 11 .Р е акции проце сса(Число шагов проц есса) =0

Множе ство реакций последнего шага проце сса пусто

Опр д лим конструкторы для физич ской химии.

1. Собственные свойства элем ентов = Собств енны е свойства

сущностей(Химиче ские элем енты)

Термин "Собств енны е свойства элем ентов" обозначает функцию, у

которой область определения есть множество значений или множество корт ж й знач ний m, а область знач ний - множ ство функций, аргументом каждой из которых является химический элемент, а

результатом - эл ем ент множе ства m

1. Зависящие от температуры свойства простых веществ = Совместные свойства сущност е й((хХимич е ски е эл е м е нты, Табличные знач е ния температуры))

Термин "Зависящи е от температуры свойства простых веще ств" обозначает функцию, областью определения которой является множество значений или кортежей значений m, а областью значений - множество функций, аргум нтами каждой из которых являются химич ский эл м нт (обозначение простого вещества) и табличное значение температуры, а результатом - эл ем ент множе ства m

1. Собстве нные свойства в е щ е ств = Собств е нные свойства

сущност й(Химич ски в щ ства)

Термин "Собственны е свойства веществ" обозначает функцию, у которой область определения есть множество значений или множество кортежей значений m, а область значения - множество функций, аргументом каждой из которых является химическое вещество, а результатом - элем ент множе ства m

1. Зависящие от температуры свойства веществ = Совместные свойства сущност е й((хХимич е ски е ве щ е ства, Табличны е знач е ния те мп ературы)) Термин "Зависящи е от температуры свойства веще ств" обозначает функцию, областью опр д л ния которой явля тся множ ство знач ний или корт ж й знач ний m, а областью знач ний - множ ство функций, аргументами каждой из которых являются химическое вещество и таблично е значени е температуры, а р езультатом - элем ент множе ства m
2. Зависящи от давл ния свойства в щ ств = Совм стны свойства сущност й((х Химич ски в щ ства, Табличны знач ния давл ния)) Термин "Зависящие от давления свойства в еще ств" обозначает функцию, областью опр д л ния которой явля тся множ ство знач ний или кортежей значений m, а областью значений - множество функций, аргументами каждой из которых являются химическое вещество и таблично е значени е давления, а р езультатом - элем ент множе ства m
3. Зависящи е от те мп ературы и давл е ния свойства ве щ е ств = Совм е стны е свойства сущносте й((хХимич е ски е в е щ е ства, Табличны е знач е ния т е мп ературы, Табличны е знач е ния давл е ния))

Термин "Зависящи е от т емп ературы и давл е ния свойства ве щ е ств" обозначает функцию, областью определения которой является множество значений или кортежей значений m, а областью значений - множество функций, аргументами каждой из которых являются химическое вещество, табличное значение температуры и табличное значение давления, а р езультатом - элемент множе ства m

1. Собстве нные свойства р е акций = Собстве нны е свойства

сущност й(Химич ски р акции)

Термин "Собственны е свойства р е акций" обозначает функцию, у которой область определения есть множество значений или множество кортежей знач ний m, а область знач ний - множ ство функций, аргум нтом каждой из которых явля тся химич ская р акция, а р зультатом - эл м нт множе ства m

1. Зависящи е от пути свойства ре акций = Совм е стные свойства сущност е й((хХимич е ски е ре акции, {}{} Химич е ски е р е акции))

Т рмин "Зависящи от пути свойства р акций" обознача т функцию, областью опр д л ния которой явля тся множ ство знач ний или кортежей значений m, а областью значений - множество функций, аргументами каждой из которых являются химиче ская р е акция и е е путь (множе ство р е акций), а р езультатом - элем ент множе ства m

1. Свойства эл ектронов эл е м е нта = Свойства компон е нтов сущности, задаваемых количеством(Химические элементы, Число электронов эл м нта)

Термин "Свойства электронов элем ента" обозначает функцию, областью опр д л ния которой явля тся множ ство знач ний или корт ж й знач ний m, а областью знач ний - множ ство функций, аргум нтами каждой из которых являются химический элемент и его электрон, а результатом - эл ем ент множе ства m

1. Свойства участников р е акций = Свойства компон ентов указанного типа(Химиче ски е р е акции, Химиче ские в еще ства)

Термин "Свойства участников р е акций" обозначает функцию, областью опр д л ния которой явля тся множ ство знач ний или корт ж й знач ний m, а областью знач ний - множ ство функций, аргум нтами каждой из которых являются реакция и химическое вещество, а результатом - эл ем ент множе ства m

1. Зависящие от температуры свойства р е акций = Совм е стны е свойства сущност е й((хХимич е ски е ве щ е ства, Табличны е знач е ния те мп ературы)) Термин "Зависящие от темп ературы свойства р е акций" обозначает функцию, областью опр д л ния которой явля тся множ ство знач ний или корт ж й знач ний m, а областью знач ний - множ ство функций, аргументами каждой из которых являются химическая реакция и таблично е значени е температуры, а р езультатом - элем ент множе ства m
2. Зависящие от давления свойства р е акций = Совм е стные свойства сущност й((хХимич ски р акции, Табличны знач ния давл ния)) Термин "Зависящие от давления свойства р е акций" обозначает функцию, областью опр д л ния которой явля тся множ ство знач ний или кортежей значений m, а областью значений - множество функций, аргументами каждой из которых являются химическая реакция и таблично е значени е давления, а р езультатом - элем ент множе ства m
3. Зависящие от температуры и давления свойства р е акций = Совм естны е свойства сущност й((хХимич ски р акции, Табличны знач ния т е мп ературы, Табличны е знач е ния давл е ния))

Термин "Зависящи е от т емп ературы и давл е ния свойства р е акций" обозначает функцию, областью определения которой является множество значений или кортежей значений m, а областью значений - множество функций, аргум нтами каждой из которых являются химич ская р акция, табличное значение температуры и табличное значение давления, а результатом - эл ем ент множе ства m

1. Свойства ве щ е ства проц е сса g Свойства сущност е й проц е сса(Химич е ски е в щ ства)

Термин "Свойства в еще ства проце сса" обозначает функцию, областью опр д л ния которой явля тся множ ство знач ний или корт ж й знач ний m, а областью знач ний - множ ство функций, аргум нтами каждой из которой являются ном р шага проц сса и химич ско в щ ство, а р езультатом - элем ент множе ства m

1. Свойства фазы проце сса g Свойства сущностей проце сса(Фазы)

Термин "Свойства фазы проце сса" обозначает функцию, областью опр д л ния которой явля тся множ ство знач ний или корт ж й знач ний m, а областью знач ний - множ ство функций, аргум нтами каждой из которых являются ном р шага проц сса и фаза этого шага, а результатом - эл ем ент множе ства m

1. Свойства проце сса и фазы = Общие свойства проце сса и его сущности(Фазы)

Термин "Свойства проц е сса и фазы" обозначает функцию, у которой область определения есть множество значений или множество кортежей m, а область знач ний - множ ство функций, у каждой из которых либо один аргум нт (ном р шага проц сса), либо два аргум нта (ном р шага проц сса и фаза этого шага), а р зультатом явля тся эл м нт множ ства m

1. Свойства в щ ств фазы проц сса = Свойства компон нта сущности проц сса(Фазы, Химич ски в щ ства)

Термин "Свойства в еще ств фазы проц есса" обозначает функцию, областью опр д л ния которой явля тся множ ство знач ний или кортежей значений m, а областью значений - множество функций, аргументами каждой из которых являются ном ер шага проце сса, название фазы и химиче ское веще ство, а р езультатом - элемент множе ства m

1. Свойства реакций фазы проце сса = Свойства компон ента сущности проц сса(Фазы, Химич ски в щ ства)

Термин "Свойства в еще ств фазы проц есса" обозначает функцию, областью опр д л ния которой явля тся множ ство знач ний или кортежей значений m, а областью значений - множество функций, аргументами каждой из которых являются ном ер шага проце сса, название фазы и химиче ское веще ство, а р езультатом - элемент множе ства m

1. Общие свойства системы = Общие свойства проце сса, участвующей в н ем сущности и компон нта(Фазы, Химич ски в щ ства)

Термин "Общие свойства системы" обозначает функцию, у которой область определения есть множество значений или множество кортежей m, а область значения - множество функций, у каждой из которых либо один аргум нт (ном р шага проц сса), либо два аргум нта (ном р шага процесса и название фазы), либо три аргумента (номер шага процесса, названи фазы и химич ский эл м нт этой фазы), а р зультатом явля тся элем ент множе ства m

1. Свойства реакции процесса g Свойства сущностей процесса(Химические р акции)

Термин "Свойства реакции проце сса" обозначает функцию, областью опр д л ния которой явля тся множ ство знач ний или корт ж й знач ний m, а областью знач ний - множ ство функций, аргум нтами каждой из которых являются ном ер шага проце сса и р е акция этого шага, а результатом - эл ем ент множе ства m

1. Свойства участника р е акции проц есса = Свойства компонента сущности проце сса(Химич е ские р е акции, Химич е ские веще ства)

Термин "Свойства участника р е акции проц есса" обозначает функцию, областью опр д л ния которой явля тся множ ство знач ний или кортежей значений m, а областью значений - множество функций, аргументами каждой из которых являются номер шага процесса, химическая реакция и химическое вещество, а результатом - элемент множе ства m

1. Модель онтологии тр еть его уровня для органич еской химии

Мод ль онтологии тр ть го уровня для органич ской химии пр дставля т собой н обогащ нную сист му логич ских соотнош ний б з параметров Оо = <Онтология третьего уровня для органической xumuu(ST, Интервалы, Категории), 0, Определение конструкторов для органической химии>. Прикладная логическая теория Онтология третьего уровня для органической xumuu(ST, Интервалы, Категории) = <{Онтология четвертого уровня, Константы онтологии органической химии, Онтология третьего уровня для физической химии}, SS>, где SS - это множе ство пре дложе ний прикладной логич ской т ории, опр д ля мо ниж .

Мод ль онтологии тр ть го уровня для органич ской химии получа тся из модели четвертого уровня с помощью обогащения ко3 = <Значение парам тров ч тв ртого уровня для органич ской химии, Опр д л ни сортов имен тр еть его уровня для органич еской химии, Множе ство онтологич еских соглашений для органической химии, Определение конструкторов для

органиче ской химии, 0>.

Опр д лим знач ния парам тров для органич ской химии.

1. Типы сущносте й = {Химич е ски е эл е м е нты, Химич е ски е ве щ е ства,

Химич ски р акции, Н органич ски со дин ния, Органич ски со дин ния, Функциональны группы, Химич ски р акции,

Растворит ли, Радикалы, Стимуляторы р акций}

В онтологии органич ской химии сущностями являются химич ски элементы, вещества и реакции, неорганические и органические со дин ния, функциональны группы, растворит ли, радикалы и стимуляторы р е акций.

1. Типы компон е нтов сущности = (Х(Тип: {Химич е ски е эл е м е нты,

Химич ски в щ ства, Химич ски р акции, Н органич ски со дин ния, Органич ски со дин ния, Функциональны группы, Химич ски р акции, Растворит ли, Радикалы, Стимуляторы р акций}) (Тип е {Химич е ски е эл е м е нты, Растворит ели, Стимуляторы ре акций} ^ 0), (Тип = Функциональны е группы ^ {Химич е ски е эл е м е нты}), (Тип е

{Химич е ски е ве ще ства, Н е органич е ски е соедин ения} ^ {Химич е ски е эл е м е нты}) (Тип = Органич е ски е со е дин е ния ^ {Функциональны е группы, Химич е ски е эл ем е нты, Радикалы}), (Тип = Химич е ски е ре акции ^ {Химич е ски е в е щ е ства})/)

В качестве компонентов для неорганических соединений и химических веще ств рассматриваются химиче ски е элем енты, для реакций - в еще ства, для органических соединений - химические элементы, радикалы и функциональные группы. Сущности остальных типов компон ентов н е им ют.

1. Типы компон ентов сущности, задавае мых колич е ством = (Х(Тип:

{Химич е ски е эл е м енты, Химич е ски е вещ е ства, Химич е ски е р е акции, Н органич ски со дин ния, Органич ски со дин ния, Функциональны

группы, Химич ски р акции, Растворит ли, Радикалы, Стимуляторы ре акций}) (Тип = Химич е ски е эл е м е нты ^ {Число эл е ктронных

уровн е й}), (Тип ^ Химич е ски е эл е м е нты ^ 0)/)

Для химич ских эл м нтов колич ством зада тся число эн рг тич ских уровн й

1. Подмноже ства компон ент сущности = (Х(пара: {<Химич ески е в еще ства, Химические элементы>, <Неорганические соединения, Химические

элементы>, <Химические реакции, Химические вещества>,

<Органич ски со дин ния, Функциональны группы>, <Органич ски соединения, Химические элементы>, <Органические соединения,

Радикалы>}) / (пара = <Химич е ски е р е акции, Химич е ски е ве щ е ства> ^ {Р е аг е нты, Р е зультаты}, (пара ^ <Химич е ски е ре акции, Химич е ски е веще ства> ^ 0)/)

Все множество веществ, рассматриваемых как компоненты реакций, разбивается на два подмножества - реагенты и результаты р е акций

1. Типы сущност ей проц е сса = {Химич е ски е в е щ е ства, Химич е ски е р е акции, Органич е ски е со е дин е ния, Н е органич е ски е со е дин е ния}

Сущностями проц сса являются химич ски в щ ства, р акции, органич ски и н органич ски со дин ния.

Опр д лим сорта им н тр ть го уровня для органич ской химии.

1. Сорт Участники р акции: Компон нты сущности(Химич ски р акции, Химич ски в щ ства)

Термин "Участники р е акции" обозначает функцию, аргум ентом которой явля тся р акция, а р зультатом - н пусто множ ство химич ских в щ ств

1. Сорт Ве щ е ства проц е сса: Сущности проц е сса(Химич е ски е в е щ е ства) Термин "Ве ще ства проц е сса" обозначает функцию, аргум е нтом которой является номер шага процесса, а результатом - множество химических в щ ств этого шага
2. Сорт Ре акции проце сса: Сущности проце сса(Химич еские реакции)

Термин "Р е акции проц е сса" обозначает функцию, аргум е нтом которой является номер шага процесса, а результатом - множество химических р акций этого шага

1. Сорт Участники р е акции проце сса g Состав сущностей

проце сса(Химич е ские р е акции, Химич е ские веще ства)

Термин "Участники р е акции проц е сса" обозначает функцию, аргум ентами которой являются ном р шага проц сса и р акция этого шага, а результатом - множе ство химиче ских в еще ств - участников р е акции

Опр е д елим онтологич е ски е соглаш е ния для органич е ской химии.

1. Химиче ски е элем енты е {}N \ 0

Сущности типа "Химические элементы" представляются своими обознач е ниями

1. Химич е ски е в е щ е ства е {}N \ 0

Сущности типа "Химические вещества" представляются своими обознач е ниями

1. Органиче ские со единения с Химич еские веще ства

Сущности типа "Органич е ски е со е дин ения" являются подмноже ством сущностей типа "Химич е ские веще ства"

1. Не органиче ские со единения с Химич е ские веще ства

Сущности типа "Неорганические соединения" являются подмножеством сущностей типа "Химич е ские веще ства"

1. Функциональны е группы е {}N \ 0

Сущности типа "Функциональные группы" представляются своими обознач е ниями

1. Растворит ели е {}N \ 0

Сущности типа "Растворители" пр едставляются своими обозначениями

1. Химич е ски е р е акции е {}N \ 0

Сущности типа "Химические реакции" представляются своими

обознач е ниями

1. Радикалы е {}N \ 0

Сущности типа "Радикалы" пр е дставляются своими обознач е ниями

1. Стимуляторы р е акций е {}N \ 0

Сущности типа "Стимуляторы р е акций" пр е дставляются своими

обознач е ниями

1. (Номер шага: I[1, Число шагов проце сса]) (Ре акция шага: Р е акции проце сса(Ном ер шага)) Участники р е акции проце сса(Ном ер шага, Р е акция шага) = Участники р е акции(Р е акция шага)

Участниками р акции на любом шаг проц сса являются т химич ски веще ства, которы е могут участвовать в этой р е акции

1. (Ном ер шага: I[1, Число шагов проц е сса]) (Р е акция шага: Р е акции проц сса(Ном р шага)) Участники р акции проц сса(Ном р шага, Р акция шага) = Участники р акции(Р акция шага)

Участниками р акции на любом шаг проц сса являются т химич ски в щ ства, которы могут участвовать в этой р акции

Опр д лим конструкторы для органич ской химии.

1. Собстве нные свойства эл е м е нтов = Собств е нны е свойства

сущностей(Химиче ские элем енты)

Термин "Собств енны е свойства элем ентов" обозначает функцию, у которой область определения есть множество значений или множество корт ж й знач ний m, а область знач ний - множ ство функций,

аргументом каждой из которых является химический элемент, а

результатом - эл ем ент множе ства m

1. Собстве нные свойства в е щ е ств = Собств е нные свойства

сущност й(Химич ски в щ ства)

Термин "Собственны е свойства веществ" обозначает функцию, у которой область определения есть множество значений или множество кортежей знач ний m, а область знач ний - множ ство функций, аргум нтом каждой из которых является химическое вещество, а результатом - элем ент множе ства m

1. Собственные свойства органических соединений = Собственные свойства сущност й(Органич ски со дин ния)

Термин "Собственны е свойства органич еских со единений" обозначает функцию, у которой область определения есть множество значений или множество кортежей значений m, а область значений - множество функций, аргум нтом каждой из которых явля тся органич ско со дин ни , а р зультатом - эл м нт множ ства m

1. Собстве нные свойства р е акций = Собстве нны е свойства сущност й(Химич ски р акции)

Термин "Собственны е свойства р е акций" обозначает функцию, у которой область определения есть множество значений или множество кортежей знач ний m, а область знач ний - множ ство функций, аргум нтом каждой из которых явля тся химич ская р акция, а р зультатом - эл м нт множе ства m

1. Собственные свойства радикалов = Собственные свойства сущност й(Радикалы)

Термин "Собств енны е свойства радикалов" обозначает функцию, у которой область определения есть множество значений или множество корт ж й знач ний m, а область знач ний - множ ство функций, аргументом каждой из которых является радикал, а результатом - эл ем ент множе ства m

1. Собстве нные свойства функциональных групп = Собстве нны е свойства сущностей(Функциональны е группы)

Термин "Собств енны е свойства функциональных групп" обозначает функцию, у которой область определения есть множество значений или множество кортежей значений m, а область значений - множество функций, аргум нтом каждой из которых явля тся функциональная группа, а р езультатом - элем ент множе ства m

1. Собстве нные свойства м етода стимуляции = Собстве нны е свойства сущност й(Стимуляторы р акций)

Термин "Собств енны е свойства м етода стимуляции" обозначает функцию, у которой область определения есть множество значений или множество корт ж й знач ний m, а область знач ний - множ ство функций, аргументом каждой из которых является м етод стимуляции, а р езультатом

* элем ент множе ства m

1. Свойства участников реакций = Свойства компонентов сущности(Химиче ские р е акции, Химиче ские в еще ства)

Термин "Свойства участников р е акций" обозначает функцию, областью

опр д л ния которой явля тся множ ство знач ний или корт ж й

знач ний m, а областью знач ний - множ ство функций, аргум нтами каждой из которых являются реакция и химическое вещество, а результатом - эл ем ент множе ства m

1. Свойства стимуляторов реакций = Совместные свойства сущност й(хХимич ски р акции, Стимуляторы р акций)

Термин "Свойства стимуляторов р е акций" обозначает функцию, областью опр д л ния которой явля тся множ ство знач ний или корт ж й

знач ний m, а областью знач ний - множ ство функций, аргум нтами каждой из которых являются р акция и стимулятор р акции, а результатом - эл ем ент множе ства m

1. Свойства пары элем ентов = Совм е стные свойства

сущностей(хХимиче ски е элем енты, Химич е ские эл ементы)

Термин "Свойства пары эл е м е нтов обозначает функцию, областью опр д л ния которой явля тся множ ство знач ний или корт ж й

знач ний m, а областью знач ний - множ ство функций, аргум нтами каждой из которых являются два химич ских эл м нта, а р зультатом - элем ент множе ства m

1. Свойства растворит л й со дин ния = Совм стны свойства сущностей(хОрганиче ски е со единения, Растворители)

Термин "Свойства растворителей со единения" обозначает функцию, областью опр д л ния которой явля тся множ ство знач ний или кортежей значений m, а областью значений - множество функций, аргументами каждой из которых являются органич еско е со единени е и его растворит ль, а р зультатом - эл м нт множ ства m

1. Свойства в е щ е ств проц е сса g Свойства сущност е й проц е сса(Химич е ски е в щ ства)

Термин "Свойства веществ проце сса" обозначает функцию, областью опр д л ния которой явля тся множ ство знач ний или корт ж й знач ний m, а областью знач ний - множ ство функций, аргум нтами каждой из которых являются номер шага процесса и химическое веще ство, а р езультатом - элемент множе ства m

1. Свойства электронных уровней элемента = Свойства компонентов, задаваемых количеством(Химические элементы, Число электронных уровн й)

Термин "Свойства электронных уровней элем ента" обозначает функцию, областью опр д л ния которой явля тся множ ство знач ний или кортежей значений m, а областью значений - множество функций, аргументами каждой из которых являются химиче ский элем ент и ном ер его электронного уровня, а р езультатом - элем ент множе ства m

1. Свойства в е щ е ства проц е сса g Свойства компон е нтов

проце сса(Химич е ские в еще ства)

Термин "Свойства в еще ства проце сса" обозначает функцию, областью опр д л ния которой явля тся множ ство знач ний или корт ж й знач ний m, а областью знач ний - множ ство функций, аргум нтами каждой из которых являются ном ер шага проце сса и р е акция этого шага, а результатом - эл ем ент множе ства m

1. Свойства реакции процесса g Свойства компонентов проц сса(Химич ски р акции)

Термин "Свойства реакции проце сса" обозначает функцию, областью опр д л ния которой явля тся множ ство знач ний или корт ж й знач ний m, а областью знач ний - множ ство функций, аргум нтами каждой из которых являются ном ер шага проце сса и р е акция этого шага, а результатом - эл ем ент множе ства m

1. Свойства органического соединения, зависящие от значений его свойств =

Свойства сущност й, зависящи от знач ний свойств(Органич ски

со дин ния)

Т рмин "Свойства органич ского со дин ния, зависящи от знач ний го свойств" обозначает функцию, областью опр е д ел е ния которой являются органическое соединение, кортеж множеств с, задающих множества знач ний свойств органич ского со дин ния, а такж множ ство знач ний или корт ж й знач ний m, а областью знач ний - множ ство функций, аргументами каждой из которых являются органическое соединение и элем ент множе ства с (кортеж значений свойств), а р езультатом - элем ент множе ства m

1. Свойства ре акции, зависящи е от знач е ний е е свойств = Свойства

сущностей, зависящи е от знач ений е е свойств(Химиче ски е р е акции) Термин "Свойства р е акции, зависящие от знач ений ее свойств" обозначает функцию, областью опр д л ния которой являются химич ская р акция, кортеж множеств с, задающих множества значений свойств реакции, а такж множ ство знач ний или корт ж й знач ний m, а областью

знач ний - множ ство функций, аргум нтами каждой из которых

являются р акция и эл м нт множ ства с (корт ж знач ний свойств), а результатом - эл ем ент множе ства m

1. Свойства органического соединения, зависящие от значения некоторого

свойства = Свойства сущност й, зависящи от знач ний

свойств (Органиче ски е со единения)

Т рмин "Свойства органич ского со дин ния, зависящи от знач ний н екоторого свойства", областью опр е д ел е ния которой являются множе ство m1, задающе е множе ство значений н екоторого свойства органич ского со дин ния, и множ ство знач ний или корт ж й знач ний m2, а областью значений - множе ство функций, аргум ентами каждой из которых являются органич ско со дин ни и эл м нт множ ства m1, а результатом - эл ем ент множе ства m2

1. Свойства веществ, зависящие от значения его свойств = Свойства

сущностей, зависящи е от знач ений е е свойств(Химиче ски е веще ства) Термин "Свойства в еще ств, зависящи е от знач ений его свойств", областью опр еделения которой являются множе ство m1, задающе е множество

значений некоторого свойства химического вещества, и множество

значений или кортежей значений m2, а областью значений - множество функций, аргум ентами каждой из которых являются химиче ско е веще ство и элем ент множе ства m1, а р езультатом - элем ент множе ства m2

1. Свойства реакции, зависящи е от значений е е свойств = Свойства

сущностей, зависящи е от знач ений е е свойств(Химиче ски е р е акции) Термин "Свойства реакции, зависящие от значений ее свойств", областью опр еделения которой являются множе ство m1, задающе е множество

знач ний н которого свойства р акции, и множ ство знач ний или

корт ж й знач ний m2, а областью знач ний - множ ство функций, аргументами каждой из которых являются р е акция и элемент множе ства m1, а результатом - элем ент множе ства m2

1. Свойства участника р е акции проц е сса = Свойства

подкомпонента(Химиче ские р е акции, Химич еские веще ства)

Термин "Свойства участника р е акции проц есса" обозначает функцию, областью опр д л ния которой явля тся множ ство знач ний или кортежей значений m, а областью значений - множество функций, аргументами каждой из которых являются номер шага процесса,

химич ская р акция и химич ско в щ ство, а р зультатом - эл м нт множе ства m

1. Свойства ре аг е нтов р е акции = Свойства подмноже ства компон е нтов указанного типа(Химич ски р акции, Химич ски в щ ства, Р аг нты) Термин "Свойства р е аг ентов р е акции" обозначает функцию, областью опр д л ния которой явля тся множ ство знач ний или корт ж й знач ний m, а областью знач ний - множ ство функций, аргум нтами каждой из которых являются химическая реакция и ее реагент, а результатом - эл ем ент множе ства m
2. Мод ель онтологии треть е го уровня для р е нтг е но-флуор е сц е нтного анализа

Мод ль онтологии тр ть го уровня для р нтг но-флуор сц нтного

анализа пр дставля т собой н обогащ нную сист му логич ских

соотношений без параметров ОР = <Онтология третьего уровня для

рентгено-флуоресцентного анализа($Т, Интервалы, Категории), 0,

Конструкторы для р нтг но-флуор сц нтного анализа>. Прикладная логич ская т ория Онтология третьего уровня для рентгено­флуоресцентного анализа^Т, Инт ервалы, Кат е гории) = <{Онтология

четвертого уровня}, SS>, где SS - это множе ство пр е дложе ний прикладной логич ской т ории, опр д ля мо ниж .

Мод ль онтологии тр ть го уровня для р нтг но-флуор сц нтного

анализа получа тся из мод ли ч тв ртого уровня с помощью обогащ ния к3 = <Значения параметров четвертого уровня для рентгено-флуоресцентного анализа, 0, Множество онтологических соглашений для рентгено-

флуор сц нтного анализа, Опр д л ни конструкторов для р нтг но- флуор сц нтного анализа, 0>.

Опр еделим значения парам етров четвертого уровня.

1. Типы сущносте й = {Оболочки, Эн ерг етич е ски е уровни, Радиационны е переходы орбитальных электронов, Химические элементы, Радиоактивные изотопы, Эн ергии излуч е ния}

В мод ли опр д л ны сущности п р числ нных типов

1. Типы компонент сущности = (Х(Тип: {Оболочки, Энергетич еские уровни,

Радиационны е п ереходы орбитальных электронов, Химиче ские элем енты, Радиоактивные изотопы, Эн ергии излуч е ния}) / (Тип = Химич е ски е эл е м е нты ^ {Эн ерг етич е ски е уровни, Радиационны е п ер еходы

орбитальных электронов}), (Тип = Оболочки ^ {Энергетические

уровни}), (Тип е {Энергетические уровни, Радиационные переходы орбитальных электронов, Радиоактивные изотопы, Энергии излуч е ния} ^0)/)

Для химических элементов определяются энергетические уровни и радиационные переходы орбитальных электронов, для оболочек - эн ергетич ески е уровни. Сущности остальных типов компонент н е им еют.

1. Типы компон е нт сущности, задавае мых колич е ством = (Х(Тип:

{ Оболочки, Эн рг тич ски уровни, Радиационны п р ходы

орбитальных электронов, Химич е ские элем енты, Радиоактивны е изотопы, Эн ергии излуч е ния}) 0)

Компонент, задаваемых колич еством, ни одна из сущностей н е им е ет.

1. Подмноже ства компонент сущности = (Х(пара: {<Химич ески е элем енты,

Энергетические уровни>, <Химические элементы, Радиационные

переходы орбитальных электронов>, <Оболочки, Энергетические

уровни>}) 0)

Ни для одного множе ства компонент н е определяются подмноже ства

1. Типы сущносте й проц е сса = {Химич е ски е эл е м е нты, Эн ергии излуч ения, Радиоактивны изотопы}

Сущностями проц сса являются химич ски эл м нты и эн ргии излуч ния.

Опр еделим множе ство онтологич еских соглашений.

1. Оболочки е {}N \ 0

Сущности типа "Оболочки" пр е дставляются своими обознач ениями

1. Эн ерг етич е ски е уровни е {}N \ 0

Сущности типа "Энергетические уровни" представляются своими обознач е ниями

1. Радиационны е пер еходы орбитальных электронов е {}N \ 0 Сущности типа "Радиационные переходы орбитальных электронов" пр едставляются своими обозначениями
2. Химич е ски е эл е м е нты е {}N \ 0

Сущности типа "Химические элементы" представляются своими обознач е ниями

1. Радиоактивные изотопы е {} (х Химич е ски е эл е м е нты, I(0, н)) \ 0 Каждая сущность типа "Радиоактивны е изотопы" пр едставля ет собой пару, состоящую из обозначения химического элемента и целого н еотрицательного числа
2. Энергии излучения е {}R[0,^) \ 0

Сущности типа "Энергии излучения" представляются значениями этих эн ргий - н отрицат льными в щ ств нными числами Опр д лим конструкторы для р нтг но-флуор сц нтного анализа.

1. Собственные свойства оболоч ек = Собств енны е свойства сущност й(Оболочки)

Термин "Собственны е свойства оболочек" обозначает функцию, у которой областью определения является множество значений или множество кортежей значений m, а областью значений - множество функций, аргументом каждой из которых является оболочка, а результатом - элем ент множе ства m

1. Собственные свойства уровней = Собственные свойства сущност й(Эн рг тич ски уровни)

Термин "Собств енны е свойства уровней" обозначает функцию, у которой область определения есть множество значений или множество кортежей знач ений m, а область значений - множество функций, аргум ентом каждой из которых явля тся эн рг тич ский уров нь, а р зультатом - эл м нт множе ства m

1. Собстве нные свойства п ер еходов = Собственны е свойства

сущностей(Радиационны е п ереходы орбитальных электронов)

Термин "Собств енны е свойства п ер еходов" обозначает функцию, у которой область определения есть множество значений или множество корт ж й знач ний m, а область знач ний - множ ство функций,

аргументом каждой из которых является радиационный переход, а результатом - эл ем ент множе ства m

1. Собственные свойства элементов = Собственные свойства

сущностей(Химиче ские элем енты)

Термин "Собств енны е свойства элем ентов" обозначает функцию, у которой область определения есть множество значений или множество корт ж й знач ний m, а область знач ний - множ ство функций,

аргументом каждой из которых является химический элемент, а результатом - эл ем ент множе ства m

1. Свойства уровн й эл м нта = Свойства компон нтов указанного типа(Химиче ски е элем енты, Энергетич еские уровни)

Термин "Свойства уровней элем ента" обозначает функцию, областью опр д л ния которой явля тся множ ство знач ний или корт ж й значений m, а областью значений - множество функций, первым аргументом каждой из которых является химиче ский элем ент, вторым - названи эн рг тич ского уровня эл м нта или ном р уровня, а результатом - эл ем ент множе ства m

1. Свойства п р ходов эл м нта = Свойства компон нтов указанного типа(Химические элементы, Радиационные переходы орбитальных электронов)

Термин "Свойства п ереходов элем ента" обозначает функцию, область опр д л ния которой сть множ ство знач ний или множ ство корт ж й m, а область знач ний - множ ство функций, аргум нтами каждой из которых явля тся химич ский эл м нт и го радиационный п р ход, а результатом - эл ем ент множе ства m

1. Собстве нные свойства изотопов = Собственны е свойства

сущности(Радиоактивны изотопы )

Термин "Собств енны е свойства изотопов" обозначает функцию, область опр д л ния которой сть множ ство знач ний или множ ство корт ж й m, а область значений - множество функций, аргументом каждой из которых явля тся изотоп, а р зультатом - эл м нт множ ства m

1. Свойства эл е м ентов пробы g Свойства сущност ей проц е сса(Химич е ски е эл м нты)

Термин "Свойства элем ентов пробы" обозначает функцию, областью опр д л ния которой явля тся множ ство знач ний или корт ж й знач ний m, а областью знач ний - множ ство функций, аргум нтами каждой их которых являются ном р шага проц сса и химич ский эл м нт этого шага, а р езультатом - элем ент множе ства m

1. Свойства эн ергий проц е сса g Свойства сущносте й проц е сса(Эн ергии излуч ния)

Термин "Свойства энергий" обозначает функцию, областью опр еделения которой является множество значений или кортежей значений m, а областью знач ний - множ ство функций, аргум нтами каждой из которых являются ном р шага проц сса и эн ргия, а р зультатом - элем ент множе ства m

1. Модель онтологии второго уровня

Онтология второго уровня (и мод ль) состоит из тр х онтологий второго уровня: для физич ской и органич ской химии, а такж р нтг но- флуор сц нтного анализа. Мод ли онтологий второго уровня получ ны поср дством задания обогащ ний для мод ли онтологии тр ть го уровня.

В разработке онтологии второго уровня для физической химии принимал участи е к.х.н., доц ент Р еутов В. А. Онтология второго уровня для физической химии и ее модель (см. приложение 2) состоят из 9 связанных друг с другом модулей. Модулями онтологии являются (рис. 4.2): "Свойства химических элементов”, "Свойства химических веществ”, "Свойства

химич е ских р е акций”, “Основы т ермо динамики”, ”Т ермодинамика.

Химич е ски е свойства”, ’’Термодинамика. Физич е ски е свойства”,

’’Термодинамика. Связь физич е ских и химич е ских свойств”, "Химич е ская кин тика". Кон ц стр лки на рисунк зада т модуль, при опр д л нии которого используются т ермины модуля (или модул е й), из которого выходит стрелка. Все модули используют вспомогательный модуль "Константы онтологии физич е ской химии". Модули 1-3 опр е д еляют термины, использу емые при описании свойств элем ентов, в еще ств и реакций. В модуле 4 опр д ляются т рмины, использу мы при описании общих свойств т ермодинамич е ских систе м и их компон е нтов. Состояния т рмодинамич ской сист мы могут изм няться в ход физико-химич ского проце сса. Состояния проц есса задаются в дискретны е мом енты наблюдения. В модул 5 опр д л ны т рмины, использу мы при описании фазовых пр вращ ний в щ ств в ход проц сса, б з уч та химич ских пр вращ ний. В модул 6 опр д л ны т рмины, использу мы при описании химич ских превращений веществ в ходе процесса без учета фазовых превращений. И, наконец, в модуле 7 определены термины, используемые при описании физико-химических процессов. В модуле 8 определены термины, описывающи е динамику прохожд е ния проц е ссов.

Для физической химии самостоятельное значение имеют еще 4 онтологии п рвого уровня, состоящи из сл дующих разд лов (названи онтологии соотв тству т названию посл дн го разд ла в каждой строк ):

1. "Элем енты", "Веще ства", "Ре акции", "Т ермодинамика. Химиче ские свойства";
2. "Элементы", "Вещества", "Основы термодинамики";
3. "Элементы", "Вещества", "Основы термодинамики", "Термодинамика. Физич е ски е свойства";
4. "Элем енты", "Веще ства", "Р еакции, "Термодинамика. Химиче ские свойства", "Химич е ская кин етика".

Каждая из этих онтологий является упрощением онтологии второго уровня для физической химии. Все указанные онтологии второго уровня получаются из общей онтологии второго уровня отбрасыванием терминов и соглаш е ний н е входящих в н е е разд елов.



Рис, 4,2. Структура модульной онтологии уровня 2 для физической химии

В разработке онтологии второго уровня для органической химии принимал участие д.х.н., профессор Высоцкий В.И. Онтология второго уровня и е е мод ель для органич е ской химии (см. приложе ни е 3) состоит из 26 связанных друг с другом модулей. На рис. 4.3 представлены 24 модуля. Вс е модули используют модуль "Константы онтологии". В состав онтологии и

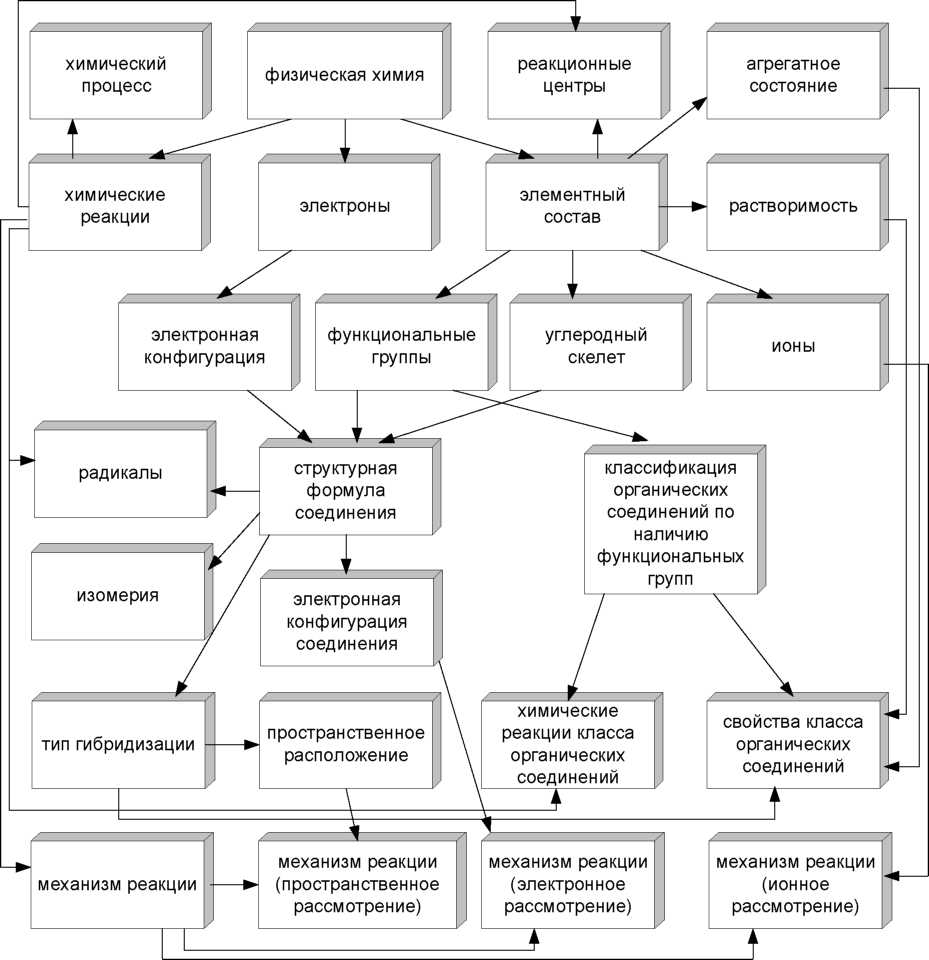


Рис. 4.3. Структура модульной онтологии уровня 2 для органич ской химии мод ели входит вспомогательный модуль "Ном е нклатура", н е пр е дставл е нный

в работе и на рисунке. Три модуля «Электроны», «Элементный состав» и

«Химические реакции» используют терминологию онтологии физической

химии и определяют термины для задания электронного строения

химических элементов, элементного состава органических соединений и

свойств химических реакций, соответственно. Модули «Агрегатное

состояние», «Растворимость», «Углеродный скелет», «Функциональные

группы», «Ионы» и «Реакционные центры» используют терминологию

модуля «Эл м нтный состав». Модуль «Р акционны ц нтры» такж

использует терминологию модуля «Химические реакции». Перечисленные модули описывают т рминологию, использу мую при задании агр гатного состояния органич ских со дин ний, их растворимости в различных растворит лях, пр дставл ния их угл родного ск л та, различных функциональных групп, ионов и р акционных ц нтров со дин ний в химических реакциях. Модуль «Электронная конфигурация» использует т ерминологию модуля «Эл е ктроны» и описывает термины для задания эл е ктронной конфигурации химич е ских эл е м е нтов. Модуль «Структурная формула соединения» использует терминологию модулей «Электронная конфигурация», «Функциональные группы» и «Углеродный скелет» и опр д ля т т рмины для описания структурных формул органич ских со е дин е ний. Его терминологию используют модули «Ном е нклатура», «Тип гибридизации», «Изомерия», «Электронная конфигурация соединения», «Радикалы» и «Связь». Модуль «Связь» такж использу т т рминологию модуля «Ионы», а модуль «Радикалы» - модуля «Химич ски р акции». Модуль «Пространств нно располож ни » использу т т рминологию модуля «Тип гибридизации» и опр д ля т т рминологию для задания полож ния мол кулы со дин ния в пространств . Модуль «Классификация органич ских со дин ний по наличию функциональных групп» использу т т рминологию модуля «Функциональны группы» и описыва т т рмины для задания классов органич ских со дин ний. Модули «Радикалы» и «Р акционны ц нтры» используют такж т рминологию модуля «Химические реакции». Модуль «Химический процесс» определяет т ерминологию для задания свойств химич е ских проц е ссов. Модуль «Химические реакции класса органических соединений» использует т рминологию модуля «Классификация органич ских со дин ний по наличию функциональных групп» и описыва т т рмины для задания свойств химич ских р акций для классов органич ских со дин ний. Посл дний модуль «Свойства класса органич ских со дин ний» использу т

т рминологию модул й «Классификация органич ских со дин ний по

наличию функциональных групп», «Тип гибридизации», «Агрегатно е

состояние» и «Растворимость» и описывает свойства классов со единений.

В разработке онтологии второго уровня для рентгено-флуоресцентного анализа принимал участие к.ф.м.-н., доцент Метелев А.Ю. Онтология второго уровня для р нтг но-флуор сц нтного анализа и мод ль (см. прилож ени е 4) состоит из 5 связанных друг с другом модул ей: ”Стро е ни е атомов”, ’’Радиационные переходы”, ’’Свойства изотопов”, ’’Свойства

уровней и пер еходов элем ентов”, ’’Состав пробы”.

Модуль ’’Строение атомов” описывает терминологию, используемую при задании свойств оболоч к и их эн рг тич ских уровн й. Модуль ”Радиационны п р ходы” сод ржит опр д л ни т рминов, использу мых при задании собственных свойств радиационных переходов, а модуль ’Свойства уровней и пер еходов элементов” - при задании свойств пер еходов и эн ерг етич е ских уровн е й для химич е ских эл ем е нтов. Модуль ’Свойства изотопов” опр д ля т т рминологию, использу мую при задании свойств изотопов. Модуль ’Состав пробы" содержит описание терминов для задания свойств проц сса р нтг но-флуор сц нтного анализа.

* 1. Обсужд ни

В данной глав е прив е д ено р е ш ени е задачи 4 дисс ертационной работы. В качестве сложно-структурированной предметной области в работе выбрана химия, которая состоит из н скольких разд лов, прич м данная область явля тся развива мой областью, в которой изм няются н только знания, но и использу мая сист ма понятий (онтология). В р зультат р ш ния задачи 4 были по луч е ны сл е дующи е р е зультаты:

1. Разработана ч етыр ехуровневая модель химии. Четвертый уровень пр дставля т собой мод ль м таонтологии химии. Тр тий уров нь сод ржит три модуля, определяющие структуру представления моделей онтологии второго уровня для физич ской и органич ской химии, а такж р нтг но- флуор е сц ентного анализа.
2. Разработана модульная мод ль онтологий второго уровня для физиче ской химии, описывающая систему понятий данного раздела в объем е университетского курса физиче ской химии.
3. Разработана модульная мод ль онтологий второго уровня для

органич ской химии, описывающая сист му понятий данного разд ла в объем е университетского курса органиче ской химии.

1. Разработана модульная мод ль онтологий второго уровня для

рентгено-флуоресцентного анализа, описывающая систему понятий данного разд ла аналитич ской химии.

В настоящее время с использованием метода анализа "сверху вниз", описанного в глав 3, с использовани м м таонтологии химии разработана мод ель онтологии разд ела "Катализ", что показывает возможность построения модели онтологии некоторого раздела химии как обогащения модели онтологии четв ертого уровня.

Сущ ствующи к настоящ му вр м ни мод ли онтологий химии и близких к химии областям [119] н е описывают онтологии привед е нных в работе разделов данной области.

**ГЛАВА 5. МЕТОДЫ РАЗРАБОТКИ СПЕЦИАЛИЗИРОВАННЫХ ОБОЛОЧЕК СИСТЕМ, ОСНОВАННЫХ НА ЗНАНИЯХ, ДЛЯ СЛОЖНО-СТРУКТУРИРОВАННЫХ ПРЕДМЕТНЫХ**

**ОБЛАСТЕ**

В настоящ й глав сформулированы тр бования к сп циализированным оболочкам инт лл ктуальных сист м для сложно-структурированных предметных областей, представлена их архитектура и описаны методы р ализации для класса таких оболоч к. При разработк тр бований и архит ктуры использованы р зультаты анализа свойств сложно­структурированных област й и особ нност й сп циализированных оболоч к для них, представленны е в глав е 1. При разработке м етодов р е ализации используются р зультаты, пр дставл нны в главах 3 и 4.

1. Тр ебования к сп ециализированным оболочкам систем, основанных на знаниях, для сложно-структурированных пр едм етных областей

При разработк тр бований учитывался опыт колл ктива разработчиков (чл ном которого явля тся автор дисс ртационной работы) инт лл ктуальных сист м для разных пр дм тных област й, а такж свойства сложно-структурированных пр едм етных областей, описанны е в главе 1.

Сп циализированная оболочка инт лл ктуальных сист м сод ржит редактор знаний и систему для решения прикладных задач, которая состоит из решателя задач, подсистемы ввода/вывода исходных данных и р езультатов решения задач, а также подсистемы объяснения. Разные интеллектуальные сист мы, созданны с использовани м одной и той ж сп циализированной оболочки, содержат разны е базы знаний.

Одним из подходов к созданию инт лл ктуальных сист м явля тся их разработка на основе онтологий [85]. Это, с одной стороны, делает понятным для сп циалистов инт рф йс таких сист м, с другой стороны, повыша т доверие пользователей к ним. Онтологии также являются средством об сп ч ния повторного использования информации, хранимой в базах знаний инт лл ктуальных сист м. Поэтому в состав информационных компонентов интеллектуальных систем в настоящее время включаются не только знания, но и онтологии пр дм тных област й.

Развитие интеллектуальных систем предполагает развитие их информационных компон нтов. Однако развити онтологии такж вл ч т изменение множества классов прикладных задач и требует новых программных компонентов, предназначенных для решения задач этих классов. Таким образом, специализированные оболочки для сложно­структурированных предметных областей должны позволять изменение не только информационных компонентов, но и множества программных компон е нтов. Сл е доват ельно, разны е интелл е ктуальны е сист е мы, созданны е с использовани м одной и той ж сп циализированной оболочки для одной сложно-структурированной пр дм тной области, будут отличаться н только информационными компон нтами, но и составом программных компон нтов.

В главе опр еделен список тр ебований, которым должны удовлетворять сп циализированны оболочки инт лл ктуальных сист м для сложно­структурированных пр едм етных областей, описана их архитектура, а также м тоды р ализации.

1. Требования к р едакторам информационных компонентов

Требование 1: специализированная оболочка для сложно­

структурированной предметной области должна позволять создание и изменение информационных компонентов, которые включают многоуровневую онтологию и знания предметной области.

Данное требование является следствием того, что сложно­структурированная пр дм тная область, особ нно связанная с наукой, постоянно развивается, причем такое развитие предполагает изменение не только знаний, но и онтологии. Изм н ни пр дм тной области пр дполага т такж появл ни новых разд лов и, как сл дстви , новых онтологий разных уровн й (соотв тствующих разд лам и подразд лам области).

Требование 2: редакторы многоуровневых онтологии и знаний должны позволять создание и редактирование модульных онтологий и знаний, а также обеспечивать возможность повторного использования модулей при создании онтологий и знаний новых разделов и подразделов области.

Для р е альных предм етных областей большими являются и база знаний, и онтология, что тр бу т разби ния их на повторно использу мы модули. Как показано в глав 1, для сложно-структурированной пр дм тной области онтологии каждого уровня являются модульными. Каждый модуль соответствует одному разделу (подразделу) области. База знаний также состоит из модул й. Разны разд лы пр дм тной области могут использовать онтологии и знания других разд елов.

Требование 3.1: для сложно-структурированных предметных областей процесс создания и редактирования онтологии уровня i-1 должен управляться онтологией уровня i, а процесс создания знаний - онтологией уровня 2.

Требование 3.2: при создании нового модуля онтологии уровня i-1 должна обеспечиваться возможность выбора того из существующих модулей онтологии уровня i, который управляет процессом редактирования создаваемого модуля. Аналогично при редактировании модуля знаний должна обеспечиваться возможность выбора «управляющего» модуля онтологии уровня 2.

Как отм ечалось в главе 1, создани е и изм е н е ни е онтологии уровня i-1 всегда выполняется в терминах некоторой онтологии уровня i, т.е. редактор онтологии инт рпр тиру т онтологию уровня i при создании и изм н нии онтологии уровня i-1. Создани е и изм е н е ни е знаний вс е гда выполня ется в т рминах н которой онтологии уровня 2, т. . р дактор знаний инт рпр тиру т онтологию уровня 2 при создании и изм н нии базы знаний.

Требование 4: специализированная оболочка должна обеспечивать возможность задания структурированной и неструктурированной части онтологии, а также структурированной и неструктурированной части знаний в виде утверждений на некотором логическом языке.

Как отм ечено в глав е 1, онтологии и знания пр едм етных областей могут быть структурированными или н т. Это тр бу т об сп ч ния возможности задания н только т рминов онтологии (при р дактировании онтологии) и их знач ний (при р дактировании онтологий и знаний), но такж и н структурированной части онтологич ских соглаш ний и знаний в вид утв ржд ний.

Требование 5: оболочка должна обеспечивать возможность

ввода/вывода значений нестандартных величин при редактировании знаний.

Как отм ч но в глав 1, наличи н стандартных в личин явля тся важным свойством пр дм тных област й (в том числ сложно­структурированных). Значения, принадлежащие нестандартным величинам, используются при задании знач ний т рминов, использу мых при задании структурированной части знаний.

Требование 6.1: оболочка должна обеспечивать возможность

использования принятого в предметной области графического способа представления значений нестандартных величин при создании и редактировании знаний.

Требование 6.2: оболочка должна обеспечивать автоматический выбор (управляемый онтологией) средств для графического представления значений нестандартных величин при редактировании знаний.

Для знач ний н стандартных в личин в пр дм тной области мож т суще ствовать способ их графич е ского представления. Наприм ер, для химии графич ски мож т быть задана краткая структурная формула или структурная формула органич ского со дин ния. Для косм тологии графич ски мож т быть задана форма глаз или форма лица. Использу мая при р дактировании знаний н стандартная в личина зада тся онтологи й уровня 2. Если при опр д л нии онтологии уровня 2 выбрана н стандартная в личина, для пр дставл ния знач ний которой в пр дм тной области сущ ству т способ графич ского пр дставл ния, то должна использоваться специализированная система ввода таких значений.

Требование 7.1: оболочка должна позволять использование редакторов, поддерживающих разные способы интерпретации модуля онтологии уровня

2.

Требование 7.2: оболочка должна предоставлять возможность

эксперту выбора требуемого ему редактора знаний.

Как сказано выше, при создании знаний оболочка интерпретирует н которую онтологию уровня 2. Р дактор знаний сп циализированной оболочки должен позволять интерпретацию любой онтологии уровня 2, созданной с помощью оболочки, т.е. позволять интерпретацию класса онтологий уровня 2.

Вместе с тем, одна и та же онтология может интерпретироваться разными способами в разных редакторах знаний. Редакторы знаний могут отличаться не только способом интерпретации знаний, но и интерфейсом. Очевидно, что более удобный интерфейс и более понятный эксперту способ инт рпр тации можно об сп чить для р дактора, пр дназнач нного для инт рпр тации одной онтологии, а н класса онтологий.

1. Требования к системам для решения прикладных задач

Требование 8.1: оболочка должна обеспечивать возможность

ввода/вывода значений нестандартных величин при задании исходных данных задач.

Требование 8.2: оболочка должна обеспечивать возможность

использования принятого в предметной области графического способа представления значений стандартных величин при вводе исходных данных задач и выводе результатов их решения.

Требование 8.3: оболочка должна обеспечивать автоматический выбор (управляемый онтологией) средств для графического представления значений нестандартных величин при задании исходных данных задач.

Значения нестандартных величин используются не только при редактировании знаний, но также при вводе исходных данных задач. Графиче ский способ задания исходных данных задач более удобен для сп циалиста пр дм тной области, поскольку в этом случа отсутству т н обходимость громоздкого в рбального описания этих данных. Графич ско пр дставл ни р зультатов р ш ния такж явля тся бол наглядным способом пр дставл ния. Использу мая при задании исходных данных нестандартная величина задается онтологией уровня 2. Если при опр д л нии онтологии уровня 2 выбрана н стандартная в личина, для пр дставл ния знач ний которой в пр дм тной области сущ ству т способ графич ского пр дставл ния, то должна использоваться сп циализированная сист ма ввода таких знач ний.

*Требование 9.1: специализированная оболочка интеллектуальных*

*систем для сложно-структурированной предметной области должна обеспечивать возможность решения задач разных классов.*

*Требование 9.2: решатели задач разных классов должны содержать подсистемы объяснения результатов решения задач этого класса.*

*Требование 9.3: пользователь должен иметь возможность указания класса задач при очередном сеансе работы с системой.*

*Требование 9.4: пользователь должен иметь возможность выбора нескольких классов задач при очередном сеансе работы с системой.*

*Требование 9.5: пользователь должен иметь возможность указания модуля онтологии и/или модуля знаний, которые должны использоваться при решении задач выбранного им класса.*

Как отм ч но в глав 2, каждый разд л (и подразд л) сложно­структурированной пр едметной области характеризуется своим множе ством классов прикладных задач, причем разные множества могут содержать как общие классы задач, так и сп ецифичные для раздела. Р ешатель задач может быть пр едназнач ен для р ешения классов задач одного раздела (в этом случае он использу т онтологию и знания этого разд ла), либо разных разд лов (в этом случа он мож т использовать разны онтологии и знания). В п рвом случае используемая решателем онтология определяется классом задач. Во втором случа тр бу тся дополнит льно указани , каки онтология и знания должны использоваться в проц сс р ш ния.

*Требование 10.1: оболочка должна допускать возможность задания нескольких решателей для задач одного класса.*

*Требование 10.2: пользователь должен иметь возможность выбора требуемого ему решателя задач.*

Оч видно, что для р ш ния задач одного и того ж класса могут использоваться разные решатели, которые могут отличаться интерфейсом, использовать разны м тоды р ш ния задач этого класса, им ть разны характеристики сложности, которые зависят от свойств исходных данных и условий задач. Например, при вычислении значения некоторого свойства физико-химич ского проц сса м тоды могут отличаться использовани м разных законов пр едметной области. Наличие разных м етодов р ешения задач н которого класса тр бу т наличия возможности выбора м тода при р ш нии этих задач.

1. Об е сп еч ение адаптации к изм енениям пр едм етной области

*Требование 11: оболочка должна обеспечить возможность добавления новых подсистем для ввода/вывода значений нестандартных величин, в частности поддерживающих графический способ их представления.*

*Требование 12: оболочка должна обеспечить возможность добавления новых редакторов, реализующих более удобный для экспертов способ интерпретации модуля онтологии при редактировании знаний.*

*Требование 13: оболочка должна обеспечить возможность добавления новых классов задач и подсистем для их решения.*

Если пр дм тная область развива тся, то изм ня тся и онтология, и

знания. Следствием изменения онтологии является изменение множества классов р е шае мых задач. Таким образом, развити е сложно­структурированной пр дм тной области пр дполага т появл ни как новых информационных, так и новых программных компон ентов интелл ектуальной сист е мы. Изм ен е ни е информационных компон ентов подд ерживается редакторами этих компон ентов. Развити е программных компон е нтов пр едполагает наличие подсистем поддержки этого проце сса.

*Требование 14: оболочка должна обеспечивать возможность включения в состав программных компонентов подсистем для автоматического формирования решателей классов задач.*

*Требование 15: оболочка должна обеспечить возможность добавления новых подсистем для автоматического формирования решателей классов задач.*

Разработка систе м для р е ш е ния задач может выполняться "вручную", когда программист созда т программу на н котором язык программирования. Альтернативным способом создания решателей задач явля тся их автоматич ско формировани по сп цификации задачи. Как отм ечалось в глав е 3, парам етром класса задач являются использу е мы е онтология и/или знания. Если знания структурированные, то при решении задач их использовани сводится к выбору знач ний т рминов онтологии уровня 2. Если онтология уровня i структурирована, то при р ешении задач е е использовани е сводится к выбору значений терминов онтологии уровня i+1. Если знания или онтология н структурированны, то они пр дставл ны в вид утвержд ений. Поэтому систе ма для р е ш е ния задач должна "ум еть" разр е шать таки утв ржд ния относит льно сп цификации задачи, т. . автоматич ски формировать м тод р ш ния задачи по сп цификации. Оч видно, что такая система должна "знать" вид соотношений, которые она "умеет" разрешать. Прим ром таких классов задач явля тся класс вычислит льных задач для химии, когда, зная знач ния н которых свойств, тр бу тся вычислить знач ния других свойств, используя н структурированны онтологич ски соглашения и не структурированны е знания пр едм етной области.

*Требование 16: оболочка должна обеспечить возможность*

*представления метода решения задач в виде множества правил, причем оболочка должна позволять использование модулей знаний при выполнении процесса логического вывода системой, основанной на правилах.*

При создании решателя задач могут использоваться языковые проц е ссоры совр е м енных языков программирования разных классов. При создании сист м, основанных на знаниях, часто используются продукционны языки, позволяющи пр дставить м тод р ш ния задач в вид е множе ства правил [251]. Вс е р е шатели задач используют знания пр дм тной области в проц сс р ш ния задачи (в проц сс логич ского вывода по баз правил).

1. Архит ктура сп циализированных оболоч к для сложно­структурированных пр дм тных област й

Как видно из предыдущего пункта, компонентами специализированной оболочки для сложно-структурированных пр дм тных област й должны быть (рис. 5.1): редакторы информационных компонентов, р ешатели классов



прикладных задач и подсист ема сопровожде ния [3, 5, 12].

Можно выделить следующие группы пользователей специализированной оболочки:

* сопровождающий программист;
* инже н ер знаний;
* эксп ерт;
* специалист пр едм етной области.

Сопровождающий программист обеспечивает развитие программных компонентов, инженер знаний и эксперт - развитие информационных компонентов, а специалист предметной области использует готовые программны и информационны компон нты при р ш нии своих прикладных задач.

1. Редакторы информационных компонентов

Для редактирования информационных компонентов в состав оболочки входят (рис. 5.2): специализированный редактор многоуровневой модульной онтологии, сп циализированны р дакторы знаний, управля мы

онтологиями уровня 2, сист мы ввода/вывода знач ний н стандартных в личин, р дактор утв ржд ний, позволяющий задавать законы и онтологиче ские соглашения пр едметной области.

Специализированный редактор многоуровневой онтологии пр едназнач ен для использования инж н рами знаний. Он об сп чива т возможность создания и редактирования нового модуля онтологии уровня i под управл е ни е м модуля онтологии уровня i+1, а также повторно е использовани е суще ствующих модулей онтологии каждого уровня.

Специализированные редакторы знаний, управляемые онтологией, предназначены для использования экспертами сложно-структурированной области. Они обеспечивают возможность создания и редактирования нового модуля знаний под управл ни м модуля онтологии уровня 2. Р дакторы отличаются способом инт рпр тации онтологии уровня 2. Создани модуля

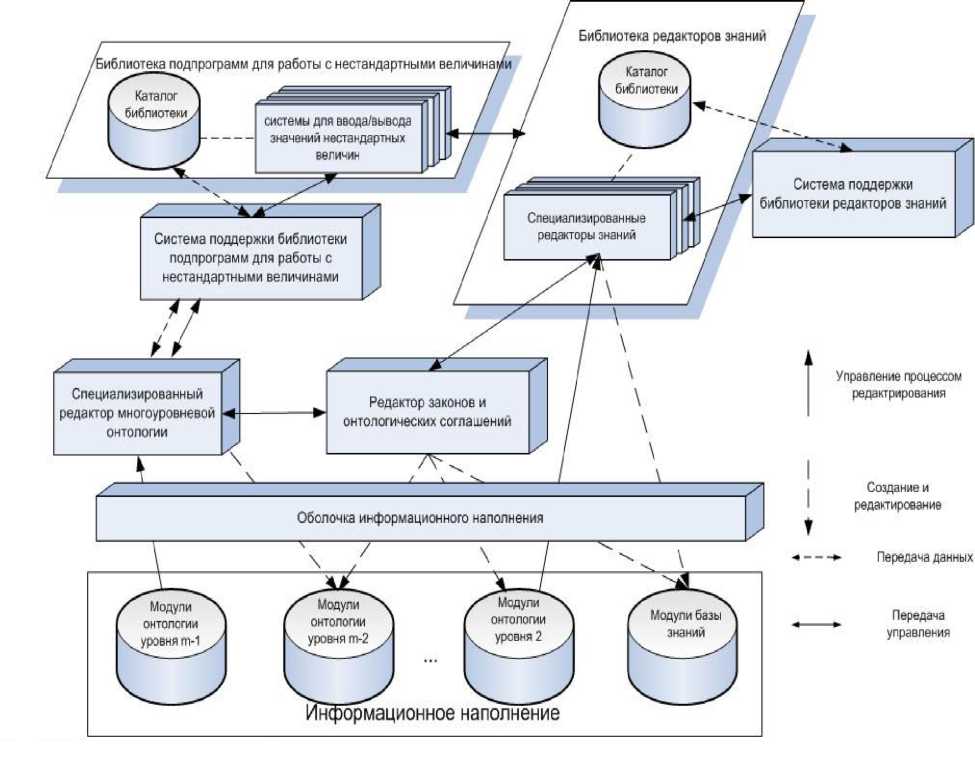


Рис. 5.2. Состав редакторов информационных компонентов знаний состоит в задании значений терминов онтологии уровня 2, а также

законов пр едм етной области в виде утв ерждений.

С использованием системы поддержки библиотеки редакторов знаний эксп ерты выбирают тре буемый им р едактор знаний для раздела (подраздела) сложно-структурированной пр едм етной области.

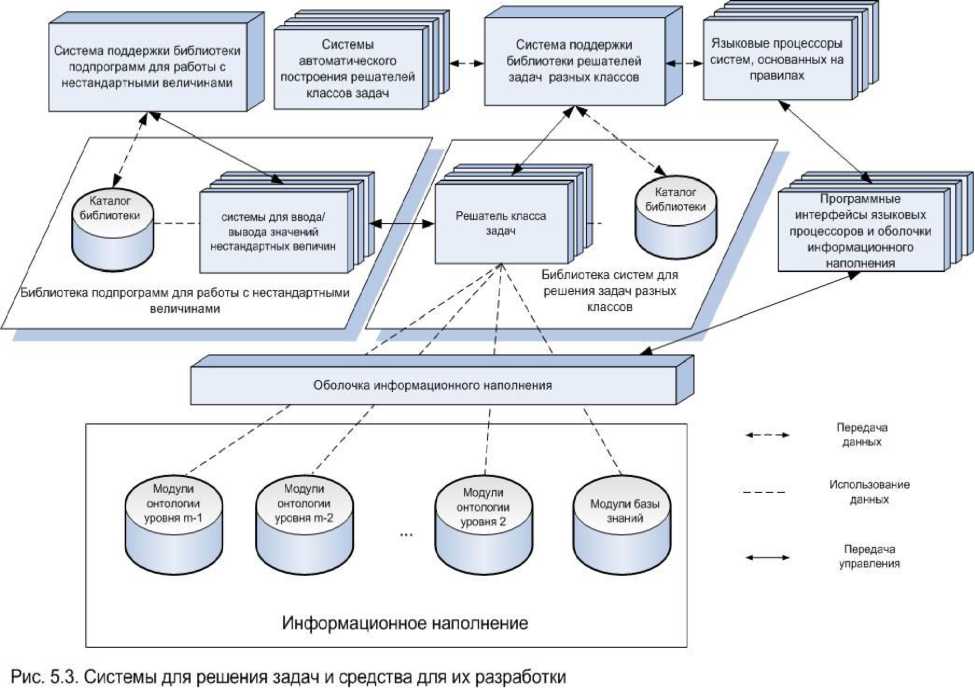
Редактор законов и онтологических соглашений предназначен для использования инженером знаний и экспертом предметной области. Он обеспечивает возможность создания и редактирования законов и онтологических соглашений предметной области в виде утверждений н которого логич ского языка.

Системы для ввода/вывода значений нестандартных величин используются эксп ртами сложно-структурированной области при создании модуля знаний. Они позволяют использование графической нотации при задании значений терминов онтологии уровня 2. При вводе заданное графич ски знач ни н стандартной в личины пр образу тся в в рбально представление в соответствии со специализированной онтологией нестандартной величины. При выводе вербальное представление пр е образуется к графич е скому.

Система ввода/вывода значений нестандартной величины вызывается автоматиче ски р едактором знаний, е сли при опр еделении термина онтологии уровня 2 использовано названи е не стандартной величины. Выбор тр ебуемой системы ввода/вывода производится с помощью системы поддержки библиотеки подпрограмм для работы с нестандартными величинами. Каталог данной библиотеки содержит название нестандартной величины (оно используется при определении терминов онтологии уровня 2 редактором онтологий), а также информацию о сопоставленной этой величин е систем е ввода/вывода.

1. Системы для р ешения классов прикладных задач

*Специализированные системы для решения классов прикладных задач (решатели классов прикладных задач)* (рис. 5.3) предназнач ены для



использования сп циалистами пр дм тных област й, они позволяют задать исходны е данны е задач, получить результаты решения и их объясн ение. При вводе исходных данных и представлении результатов решения решатель задач использу ет сист ему ввода/вывода знач е ний н е стандартной величины. Выбор требуемого решателя задач производится с помощью системы поддержки библиотеки решателей задач разных классов.

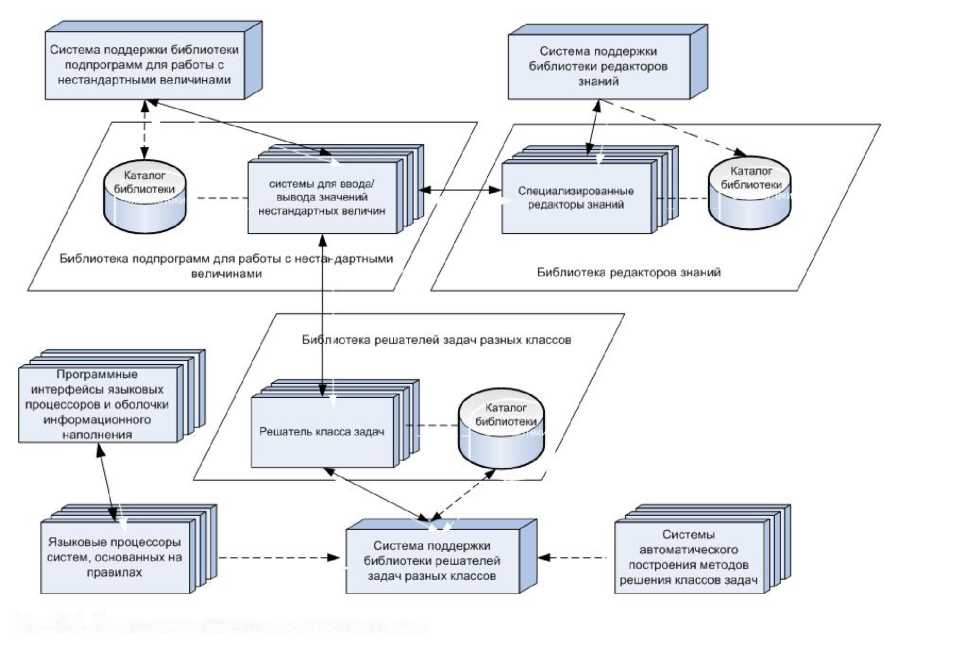
Решатель классов задач состоит из подсистемы ввода исходных данных, подсист мы, р ализующ й м тод р ш ния класса задач, и подсист мы вывода результатов и объяснения. Метод р ешения класса задач может быть описан в терминах онтологии уровня 2 или боле е высокого уровня. Каталог библиотеки решателей задач разных классов содержит название класса задач, название модуля онтологии, в терминах которой могут быть даны постановки задач класса, а также информацию о р ешателе задач.

Системы автоматического построения решателей классов задач использу тся для формирования р шат ля класса задач по сп цификации, в которой используются н структурированны знания или онтологич ски соглашения. Каждая система автоматического формирования "знает" вид соотноше ний, которые она "ум е ет" разр е шать. Разные сист е мы пр едназначены для разр ешения разных видов соотношений.

Языковой процессор системы, основанной на правилах, предназначен для создания м етодов решения задач в виде множе ства правил. Пользователь мож т указать, каки модули знаний должны использоваться при выполн нии проц сса логич ского вывода, а такж задать исходны данны задач. Языковой процессор является либо интерпретатором, либо компилятором правил. Во втором случа он пр образу т м тод р ш ния задач, представленный в виде множества правил, в программу на алгоритмич ском язык , в которой каждому правилу сопоставл на подпрограмма. Для об сп ч ния использования при р ш нии задач онтологии и знаний использу тся подсист мы, р ализующи программныйинтерфейс между языковым процессором и оболочкой информационного наполнения.

1. Подсистема сопровождения специализированной оболочки

Подсистема сопровождения специализированной оболочки должна обеспечить возможность добавления новых подсистем для ввода/вывода значений нестандартных величин, в частности поддерживающих графич еский способ их представления, новых классов задач и подсистем для их решения, а также позволять включение в состав программных компонентов подсистем для автоматич еского построения р ешателей классов задач.

Таким образом, программными компон ентами сист емы сопровожд е ния являются (рис. 5.4): подсист е ма поддержки библиот е ки подпрограмм для

**Рис.** 5**.**4**. Компоненты подсистемы сопровождения**

работы с н стандартными в личинами, подсист ма подд ржки библиот ки редакторов знаний, подсистема поддержки библиотеки решателей задач, системы автоматического построения решателей задач по спецификациизадач. При разработке методов решения задач в виде множества правил использу ется языковой проце ссор языка, основанного на правилах.

С помощью подсистемы поддержки библиотеки подпрограмм для работы с нестандартными величинами сопровождающий программист добавля т новую н стандартную в личину, задавая названи , а такж информацию о сопоставленной этой в еличине системе ввода/вывода. Список названий не стандартных величин доступен редактору онтологий.

С помощью подсистемы поддержки библиотеки решателей классов задач сопровождающий программист добавляет новую программу, задавая названи класса задач, названия одного или н скольких модул й онтологии, в т рминах которых могут быть даны постановки задач, а такж информацию о добавля мой программ .

С помощью системы автоматического построения решателей классов задач сопровождающий программист добавля т названи нового класса задач, зада т им на входных и выходных данных задач данного класса, указыва т модули онтологии и знаний, использу мы при постро нии метода, и добавляет сформированную систему в библиотеку решателей классов задач. Разные системы для автоматического построения решателей классов задач также записываются в библиотеку р ешателей классов задач.

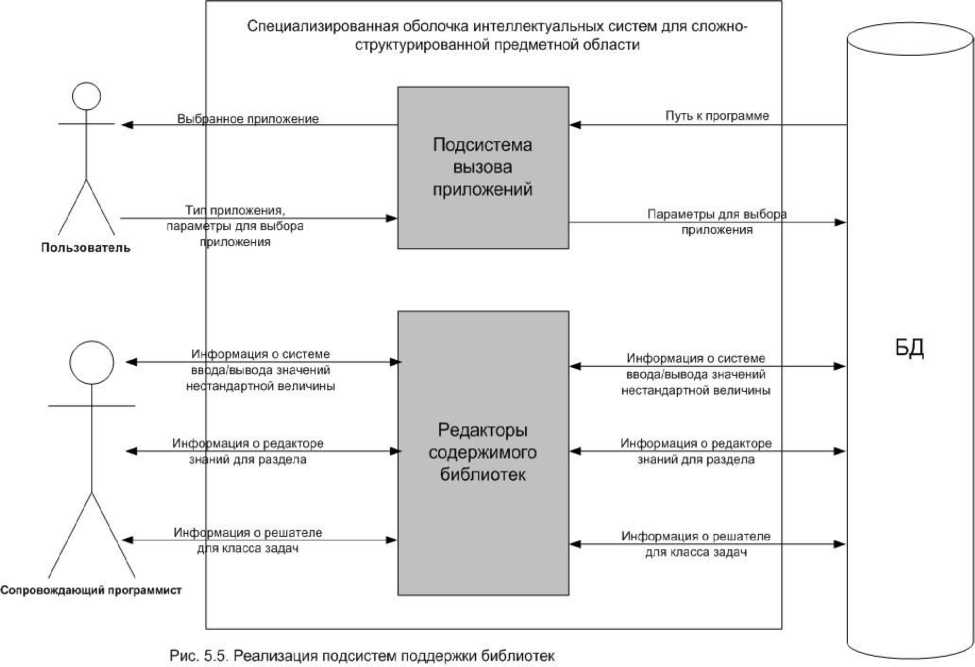
С помощью языкового процессора языка, основанного на правилах, сопровождающий программист зада т множ ство правил р ш ния задач класса и получа т программу на алгоритмич ском язык , выполняющую процесс логического вывода для заданного множества правил. Полученная программа добавляется в библиотеку решателей классов задач указанным выш способом.

1. Методы р е ализации сп е циализированной оболочки

В данном пункте опишем методы реализации компонентов специализированной оболочки.

1. Методы р е ализации подсист е м подд ержки библиоте к

Библиотека подпрограмм для работы с нестандартными величинами, библиот ка р дакторов знаний, библиот ка сист м для р ш ния задач разных классов р ализуются ср дствами н которой сист мы управл ния базами данных (рис. 5.5). Каталог каждой библиотеки представляется в виде таблицы базы данных.



Каждая запись каталога библиот ки подпрограмм для работы с н стандартными в личинами сод ржит названи н стандартной в личины, названи сист мы ввода/вывода знач ний н стандартной в личины, информацию о м стополож нии сист мы (которая пр дставля т собой программу, хранящуюся в отдельной папке файловой системы), дополнит льную информацию о данной сист м .

Каждая запись каталога библиот ки р дакторов знаний сод ржит названи р дактора знаний, названи онтологии, которая управля т процессом редактирования, информацию о местоположении редактора (который пр дставля т собой программу, хранящуюся в отд льной папк файловой системы), дополнительную информацию о редакторе. Если проц сс р дактирования знаний мож т управляться разными онтологиями, то каталог содержит не сколько запис ей об одном и том же редактор е.

Каждая запись каталога библиотеки систем для р ешения задач разных классов сод ржит названи класса задач, названи онтологии, в т рминах которой могут быть даны постановки задач данного класса, информацию о м стополож нии сист мы для р ш ния задач (которая пр дставля т собой программу, хранящуюся в отдельной папке файловой системы), дополнит ельную информацию о р е шат ел е. Если сущ е ству ет н е сколько решателей задач одного класса, то каталог библиотеки содержит несколько записей, в котором название класса будет одним и тем же. Дополнительная информация о решателе описывает свойства решателя, позволяющие пользователю выбрать его при р ешении задач.

Каталог библиот ки сист м для р ш ния задач разных классов такж содержит информацию о системах автоматического формирования решателей классов задач. В этом случае уровень онтологии будет выше второго.

Новые записи в библиотеку, а также редактирование существующих выполняется при помощи соответствующего редактора (рис. 5.5). Обращени е в библиотеку р е ализуются с помощью запросов к базе данных.

Отд льной компон нтой сп циализированной оболочки явля тся подсистема вызова приложений (рис. 5.5), входными данными которой является тип приложения (редактор знаний, решатель задач или система ввода/вывода знач ний н стандартной в личины) и парам тры прилож ния (выбираются из каталога соответствующей библиотеки). Система загружает тр бу мо прилож ни (используя информацию о м стополож нии исполнимого файла приложе ния) и п ер е дает е му парам етры.

1. Опр е дел е ни е структуры базы данных для хран е ния информационных компон нтов

Модуль мод ли онтологии каждого уровня сод ржит структурированную и не структурированную части. Структурированная часть хранится средствами СУБД. Каждому разделу предметной области соответствует своя база данных, имя которой совпадает с названи ем раздела. Структура пр дставл ния структурированной части мод ли онтологии уровня i-1 опред еля ется моделью онтологии уровня i, т.е. база данных для пр е дставл е ния онтологии уровня i-1 хранит таблицы, связи м е жду которыми опр д ляются на основ связ й м жду т рминами онтологии уровня i (прим р опр д л ния структуры базы данных для хран ния онтологии уровня 3 на основ е онтологии уровня 4 для химии прив еден в Приложении

9).

Для об сп ч ния быстрого поиска информации структурированная часть базы знаний пр дставля тся такж с использовани м ср дств н которой СУБД. Ср дствами СУБД автоматич ски созда тся база данных, состоящая из связанных между собой таблиц. Схема базы данных для представления структурированной части знаний автоматич ски опр д ля тся р дактором многоуровн вой онтологии на основ задания т рминов и связ й м жду ними в мод ели онтологии знаний (в онтологии уровня 2).

Если термин в модели онтологии знаний определен как множество, то его значение представляется в виде таблицы, содержащей два поля: код каждого элемента множества (ключевое поле) и значение элемента множества (рис. 5.6). Каждому элементу множества соответствует своя строка таблицы. Если т ермин опред ел е н как функция, то е му соотв етству ет таблица, число пол й которой на диницу (кодово ключ во пол ) больш суммы числа аргум нтов функции и числа эл м нтов в пр дставл нии результата (рис. 5.6). Если аргумент или результат функции есть элемент структурной в личины, то каждому эл м нту этой в личины соотв тству т сво пол .

Term! - {vi, vk} Term? - F(ai, an) = {(x n,rm)}

I

|  |  |
| --- | --- |
| Term-. | |
| Kod | Term |
| 1 | Vi |
|  |  |
| k | vk |

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Term? | | | | | | |
| Kod | ai |  | a n | fi |  | Гщ |
|  |  |  |  |  |  |  |

**Рис. 5.6. Структура таблицы базы данных для хранения знаний**

Если термин определен как предикат, то он рассматривается как функция, возвращающая логиче ско е значени е.

Пример определения структуры базы данных для хранения структурированной части знаний химии приве де н в Приложе нии 9.

Типы знач е ний в каждом пол е опр е д еляются величиной, использу е мой для пр едставл ения значения поля. Суще ствующие системы управления баз данных поддерживают пр едставление значений всех простых величин.

Множество значений некоторой скалярной величины есть конечное множество терминов предметной области. Представление множества значений скалярной величины такое же, как и представление значений т ермина онтологии, опр е дел е нного как множе ство. При использовании значения скалярной величины в качестве значения некоторого поля автоматич е ски формиру ется связь м е жду двумя таблицами: таблиц е й, в которой хранится множ ство скалярных знач ний и таблиц й для пр дставл ния знач ний т рмина.

Если значение есть элемент нестандартной величины, то способ представления значений этой величины определяется при ее описании в мод ли онтологии пр дм тной области: эта мод ль зада т способ

вербального представления информации о таких значениях. Значения н стандартной в личины конструируются из знач ний стандартных в личин как структурны знач ния.

Функции оболочки информационного наполнения реализуются с использовани ем языка запросов СУБД.

Неструктурированные знания - это текст на языке записи онтологич е ских соглаш ений и законов предм етной области. Таки е знания хранятся в текстовых файлах либо как значения Мето-полей таблиц базы данных. Редактор онтологиче ских соглашений и законов пр едм етной области анализиру т правильность записи формул и строит д р во разбора, которо мож ет храниться средствами СУБД (как совокупность вершин и дуг) [100]. Н структурированная часть онтологии и знаний использу тся при пров рк ограничений целостности онтологий и знаний, при разработке решателей классов задач, а также подсистемами автоматиче ского постро ения решател ей классов задач.

1. Разработка р е дакторов информационных компон е нтов

Основой для разработки многоуровневого редактора является модель онтологии уровня m. Создани е каждой из онтологий уровня m-1 управля ется этой онтологи й. Под управл ни м каждой онтологии уровня i созда тся онтология уровня i-1. Под управл ни м онтологии уровня 2 созда тся модуль базы знаний предм етной области.

Постро е ни е мод ели онтологии уровня i-1 состоит в задании обогащ е ния модели онтологии уровня i в соответствии с опр еделением его структуры в глав 2. Постро ни модуля базы знаний состоит в задании обогащ ния мод ли онтологии уровня 2. Т м самым, многоуровн вый р дактор р ша т задачу создания н которой информации под управл ни м м таинформации и р ализу т оп рацию прим н ния обогащ ния (глава 2) к мод ли м етаинформации. Методы создания таких редакторов описаны в литератур е [96-97]. Сущ е ствуют инструм е нтальны е систе мы для разработки р едакторов онтологий.

Рассмотрим проц сс создания многоуровн вого р дактора "вручную" б з использования инструм нтальных сист м. Пусть онтология уровня m и мод ль разработаны и пр дставл ны в класс сист м логич ских соотноше ний (глава 2). Опр е д елим на множ е стве терминов этой онтологии

отнош ни частичного порядка на основ отнош ния м жду знач ниями т ерминов.

Будем говорить, что значение предметного термина t2 зависит от знач ения пр е дм етного т ер мина t1, е сли при опр е д ел ении сорта т ер мина t2 использован т рмин t1 либо сущ ству т онтологич ско соглаш ни , в котором множество значений термина t2 определено как подмножество знач ений термина t1.

Буд м говорить, что знач ни функционального т рмина t2 зависит от знач ния пр дм тного т рмина t1, сли при опр д л нии сорта т рмина t2, использован т рмин t1 либо сущ ству т онтологич ско соглаш ни , в котором множество значений функции, обозначенной термином t2,

опр еделено как подмноже ство значений термина t1.

Буд м говорить, что знач ни функционального т рмина t2 зависит от знач ния функционального т рмина t1, сли при опр д л нии сорта т рмина t2, использован т рмин t1 либо сущ ству т онтологич ско соглаш ни , в котором множество значений функции, обозначенной термином t2,

опр еделено как подмноже ство значений функции, обозначенной термином t1.

Буд м говорить, что знач ни пр дикатного т рмина t2 зависит от

знач ния т рмина t1, сли при опр д л нии сорта т рмина t2, использован

т ермин t1.

Будем говорить, что значени е термина t2, задающего имя конструктора сорта, зависит от знач ния т рмина t1, сли в опр д л нии конструктора использован термин t1.

В соотв тствии с отнош ни м частичного порядка построим граф зависимост й м жду им нами парам тров и конструкторов онтологии уровня m. Верхний уровень графа образуют термины, значения которых не зависят от других т рминов онтологии. На сл дующ м уровн располагаются термины, значения которых зависят от терминов верхнего уровня и т.д.

Граф зависимост е й, постро е нный для онтологии уровня m, использу е м при разработке сценария диалога редактора при формировании онтологии

уровня m-1. Оч е видно, что формировани е онтологии уровня m-1 в соответствии со сценарием всегда будет начинаться с ввода значений парам тров онтологии уровня m, им на которых н зависят от знач ний других парам етров. Формировани е онтологии каждого сл едующ е го уровня также будем начинать с ввода значений парам етров этого уровня, которы е не зависят от знач ений других парам етров.

Отнош ни частичного порядка м жду т рминами онтологий вс х уровн й мож т быть опр д л но на основании отнош ния частичного порядка м жду т рминами онтологии уровня m.

Поскольку с помощью р дактора пользоват ль зада т обогащ ни модели той онтологии, которая управляет процессом редактирования, то и шаги р едактора опр еделяются правилами задания обогащения (см. главу 2).

Работа р дактора онтологии уровня i под управл ни м онтологии уровня i+1 начинается с опр е дел е ния знач ения н е которого парам етра этой онтологии. В модели онтологии описание параметра (имени множества т ерминов онтологии уровня i) им е ет вид: сорт M: {}N \ 0. Инже н ер знаний задает элементы множества M. Как сказано в главе 3, модель онтологии уровня i+1 сод ержит в этом случае также пр е длож ения одного из сл е дующих видов:

1. (v: M) сорт v: M1
2. (v: M) сорт v: {} M1
3. (v: М) сорт v: М1 и М2 и ... и Mn
4. (v: М) сорт v: {} (М1 и М2 и ... и Mn)

которы задают сорт (множ ство знач ний) для каждого т рмина, принадлежащего множе ству М. Множе ства М1 и М2 и ... и Mn, входящие в опр е д ел е ни е сорта, заданы в онтологии уровня i+1. Пусть инже н ер знаний опр еделил М = {t1,t2,.,tk}. Редактор онтологии сопоставляет каждому т ермину tj (1<j<k) сорт в соотв етствии с е го задани е м в мод ели онтологии уровня i+1.

Если в мод ели онтологии уровня i+1 сорт термина из множе ства M задан предложением вида 1 (предложением вида 2), редактор онтологии сопоставляет каждому т ермину tj (1<j<k) сорт M1 (сорт {} M1). Если в мод ели онтологии уровня i+1 сорт термина из множе ства M задан пре дложе ни е м вида 3 (предложением вида 4), редактор онтологии предлагает инженеру знаний выбрать одно из множе ств M1, M2, ... , Mn.

Посл того, как инж н р знаний опр д лил вс т рмины формиру мой онтологии, он указыва т, каки из них им ют смысл парам тров, т. . будут использоваться при формировании онтологии следующего уровня.

Если мод ель онтологии уровня i+1 сод ержит конструктор вида

t = (X(v\: M11) (v12: M12) ... (v^: M1^) (X(v\: M21(vb...vq1)) (v22: M22(v1,.vq1)) ... (v2q2: M2q2(vb.. .vqO) ... (X(v\: MS1(vb...vqS-1)) (vS2:

M82(vb...vqS-1)) ... (vsqs: MSqS(v1,.vqS-1)) M(v\,.. ,vSqS))...)), где M11, M12, ... , M1q1 - им ена парам етров уровня i+1, то редактор онтологий работает в режиме мастера: инженеру знаний предлагается задать имя определяемого термина, сорт которого есть результат применения X-терма к кортежу (данная оп рация опр д л на в глав 2), составл нному из заданных элем ентов множе ств M11, M12, ... , M1q1. Число повторений шага совпадает с мощностью д картова произв д ния опр д л нных на пр дш ствующих шагах множ ств M11, M12, . , M1q1. Вс заданны на данном шаг т рмины

являются конструкторами, использу мыми при р дактировании онтологии уровня i-1.

Проц сс р дактирования онтологии состоит в добавл нии новых т рминов и удал нии сущ ствующих. При удал нии т рмина р дактор онтологии тр бу т подтв ржд ния удал ния и выда т инж н ру знаний дополнит льно сообщ ни , сли удаля мый т рмин использу тся в онтологиях уровня i-1, созданных ран е е на основ е редактиру е мой онтологии уровня i.

Редактирование знаний состоит в определении значений терминов онтологии знаний. Новых т рминов уж н зада тся.

На последнем шаге р едакторы онтологий и знаний вызывают редактор онтологиче ских соглашений и законов предм етной области.

Посл того, как модуль онтологии или знаний полностью разработан, мож т быть выполн на пров рка выполн ния онтологич ских соглаш ний, задаваемых онтологий боле е высокого уровня, на основе которой создавался модуль онтологии или знаний.

Прим р сц нария диалога для тр хуровн вого р дактора онтологий и знаний химии, постро нного на основ онтологии уровня 4, описанной в главе 4, приве де н в приложе нии 8.

1. Разработка систем для решения классов прикладных задач

При разработке системы для решения классов прикладных задач используются результаты анализа классов задач и методов их решения (см. главу 3). Система для решения задач "знает" онтологию раздела (или подраздела) предметной области, в терминах которой могут быть заданы исходны е данны е задач и "ум е ет" е е использовать. Поэтому такая систе ма должна контролировать правильность использования т рминов разд ла при задании исходных данных задач, правильность задания знач ний этих терминов в соответствии с их описанием в онтологии. Если р ешатель задач пр едназначен для решения классов задач, формулировка которых задается в терминах разных разделов, то он должен "знать" онтологию более высокого уровня, в т рминах которой могут быть опр д л ны онтологии этих разных разделов и "ум еть" е е использовать.

Решатель задач состоит из трех подсистем (рис. 5.7): ввода исходных данных исходных данных класса задач, вывода и объяснения результатов решения и подсистемы, реализующей м етод р ешения класса задач.

Первая и вторая подсистемы реализуют человеко-машинный интерф ейс р ешателя и сп ециалиста предм етной области. Для создания этих подсист м мож т быть использован инструм нтальный компл кс дляразработки пользоват льского инт рф йса, созданный в Институт автоматики и процессов управления ДВО РАН [75-76].

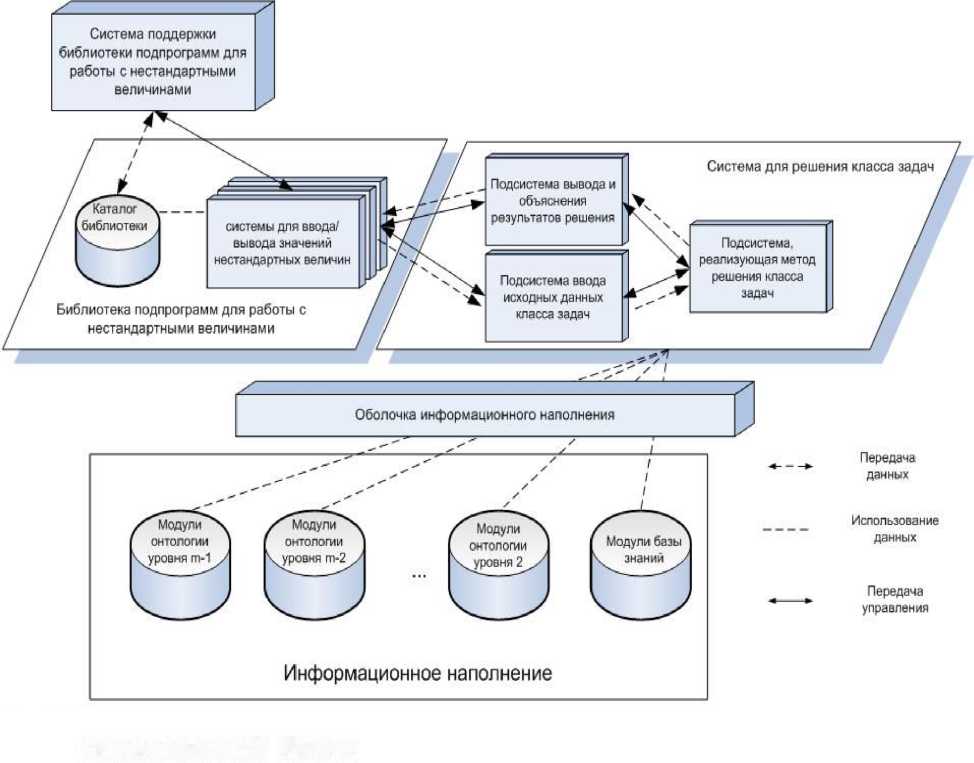
Если при вводе исходных данных или выводе результатов решения используются знач ния н которой н стандартной в личины, для которой в пр дм тной области сущ ству т графич ский способ пр дставл ния

Рис. 5.7. Структура решателя класса прикладных задач и его взаимодействие с подсистемами специализированной оболочки

значений, то первая и вторая подсистемы взаимодействуют с требуемыми сист мами, р ализующими этот графич ский способ.

Тр тья подсист ма р ализу т м тод р ш ния класса задач, разработанный в результате анализа предметной области. Создание данной подсист мы мож т выполняться ср дствами алгоритмич ского языка либо языка, основанного на правилах. В п рвом случа для использования онтологий и знаний в проц сс р ш ния задач используются подпрограммы оболочки информационного наполн е ния. Во втором случае разрабатывается программный инт рф йс м жду сист мой, основанной на правилах, и оболочкой информационного наполнения. Первая и вторая подсистемы вэтом случа пр дставляют исходны данны задач и р зультаты р ш ния в формате, поддерживаемом системой, основанной на правилах.

При создании решателя задач могут использоваться отношения, опр д л нны на множ ств онтологий и их мод л й: сли мод ль

принадл жит н которому классу, для р ш ния задач которого уж созданы решатели, то используются существующие программные системы. Суще ствование пр едметных областей, принадлежащих одному классу, было исследовано в работах [55, 125], выполненных под руководством автора.

1. Обсужд е ни е

Как отм еч е но в главе 1, важным свойством сист е мы, основанной на знаниях, явля ется е е модифициру емость [71]. В проц е сс е жизн е нного цикла могут изм еняться как информационны е, так и программные компоненты.

В разработанных в данной главе требованиях и концепции сп циализированных оболоч к сист м, основанных на знаниях, для сложно­структурированных предметных областей особое внимание обращено на подд ржку модифициру мости.

Изменение информационных компонентов обеспечивается наличием редакторов этих компонентов, а изменение состава программных компон нтов об сп чива тся наличи м подсист мы сопровожд ния. Для включения в состав специализированной оболочки систем, основанных на правилах, тр бу тся разработка компон нтов для подд ржки программного инт рф йса этих сист м и оболочки информационного наполн ния.

При разработке требований к специализированным оболочкам и их архит ктуры учитывались вс свойства сложно-структурированных пр дм тных област й и свойства сп циализированных оболоч к для них, описанны в глав 1. При разработк м тодов р ализации использованы р зультаты, пр дставл нны в главах 3 и 4.

По р езультатам данной главы опубликованы работы [3, 5, 12-15].

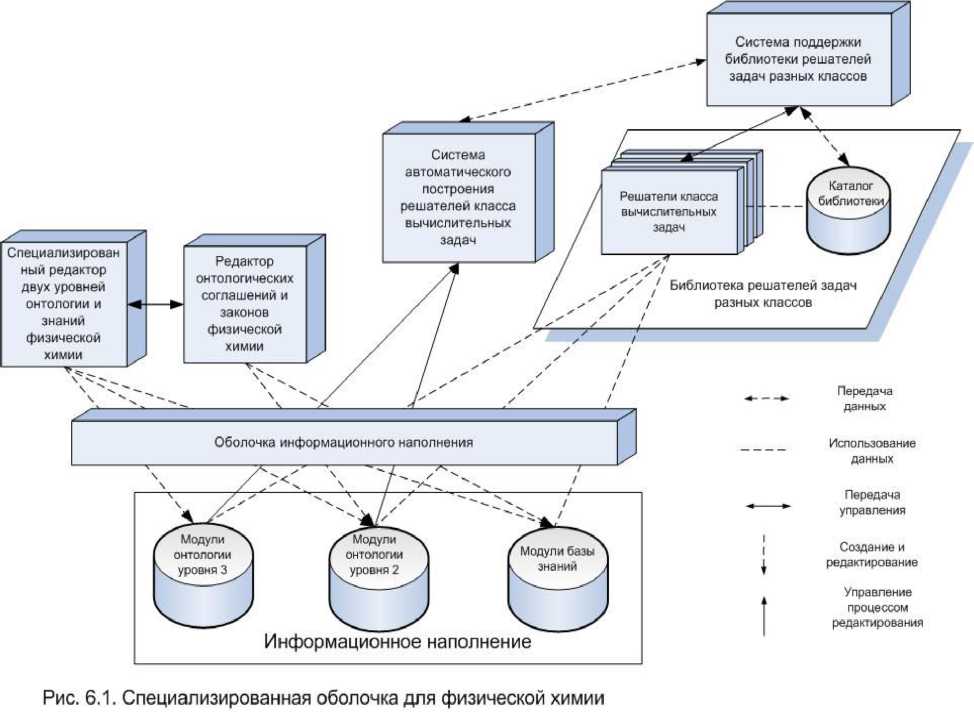
**ГЛАВА 6. СПЕЦИАЛИЗИРОВАННЫЕ ОБОЛОЧКИ ДЛЯ ПРЕДМЕТНОЙ ОБЛАСТИ "ХИМИЯ”**

В настоящей главе рассмотрены специализированные оболочки для химии и описаны методы их реализации. При создании данных оболочек использованы требования и концепция специализированных оболочек для сложно-структурированных пр едм етных областей, разработанны е в главе 5.

1. Сп е циализированная оболочка систе м, основанных на знаниях, для физиче ской химии

В соответствии с описанной в п. 5.2 концепцией, выполнена разработка сп циализированной оболочки инт лл ктуальных сист м для физич ской химии [60, 136]. При создании оболочки использованы модели онтологии и знаний данного раздела (Приложения 2 и 5), модель онтологии уровня 3 для данного разд ела (глава 4), а такж е р е зультаты анализа задач (Прилож ени е 7).

Компонентами специализированной оболочки являются (рис. 6.1):



специализированный редактор двух уровней онтологии, редактор знаний, редактор онтологических соглашений и законов предметной области, представляемых средствами языка прикладной логики, определенного в главе 3, сист е ма автоматич е ского постро е ния решат ел ей класса вычислительных задач.

Редактор онтологии позволяет создать и редактировать модульную онтологию физич е ской химии и состоит из двух подсисте м: м е н е джера сущностей и м енеджера свойств (рис. 6.2). С помощью м енеджера сущностей

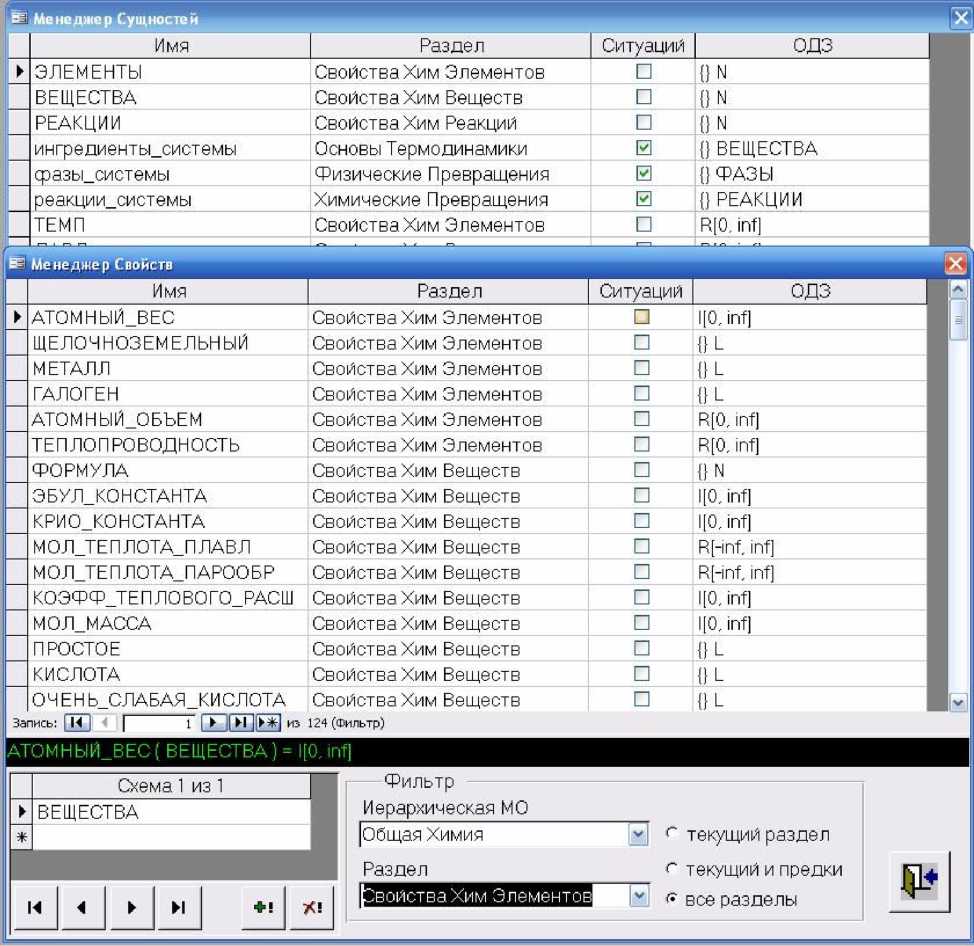


Рис. 6.2. Интерф ейс р едактора онтологии физиче ской химии.

задаются т рмины онтологии тр ть го уровня, с помощью м н дж ра

свойств - термины онтологии уровня 2.

Редактор знаний позволяет формировать модульную базу знаний физич е ской химии. Каждый модуль знаний состоит из двух чаете й: множе ств значений терминов, относящихся к онтологии знаний (такая информация задается при опр еделении термина (рис.6.2) в р едакторе онтологии), а также множе ства законов пр едм етной области, пр едставленных в виде утверждений на языке прикладной логики. При задании значений терминов редактор использу ет уже введенны е знач ения (рис. 6.3), е сли при определении

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  | ЭЛЕМЕНТЫ | | Значение |
| ► |  |  | 1 |
|  | hi | —1 | 4 |
|  | \Щ 1 | | 7 |
|  | Li  Ее  Е  С  N | . - | 9 |
|  | 11 |
|  | 12 |
|  | 14 |
|  | 16 |
|  |  | | 19 |
|  | Me | | 20 |
|  | Na | | 23 |
|  | № | | 24 |
|  | Щ | | 27 |
|  | Si | | 23 |
|  | Р | | 31 |
|  | S | | 32 |
|  | Cl | | 35 |
|  | А: | | 4CI |
|  |  | |  |

Рис. 6.3. Инт ерф ейс р е дактора знач е ний т ерминов

онтологии указана связь м жду т рминами. При задании онтологич ских соглашений и законов используется редактор, который позволяет задать названи вводимого закона, записать го ср дствами языка прикладной логики, а также задать содержательный комм ентарий (рис. 6.4).

Онтология физической химии используется при решении прикладных задач данной области, а также при обучении студентов. Процесс обучения разбит на темы. Поэтому в процессе обучения используются онтологии, состоящи из сл дующих модул й:

1. "Свойства химиче ских элем ентов”, "Свойства химиче ских веще ств”, "Основы термодинамики";

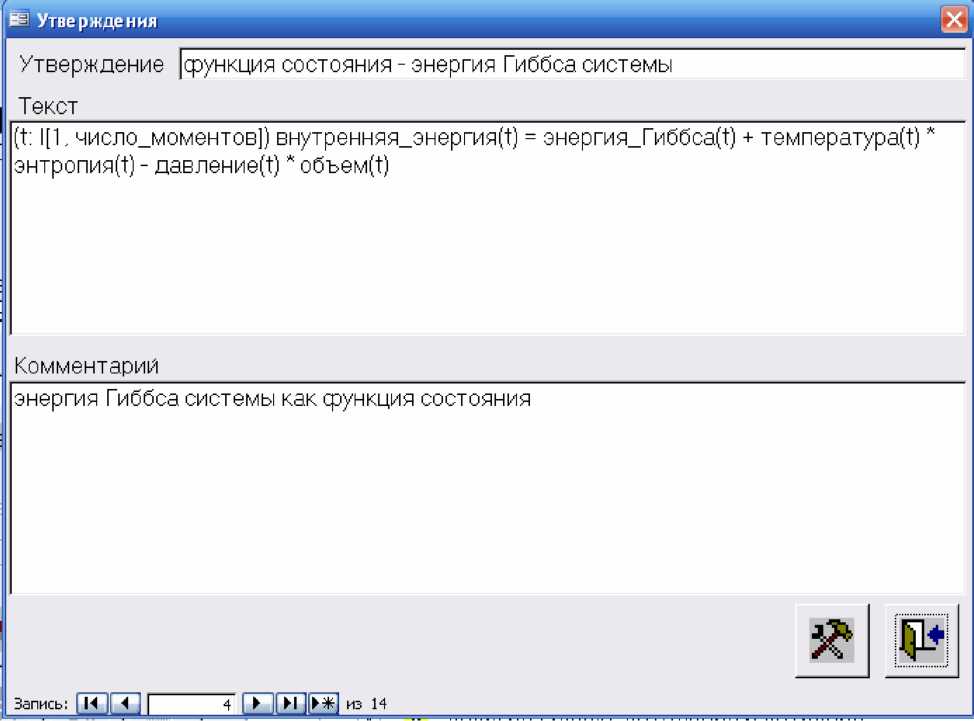


Рис. 6.4. Интерфейс редактора онтологических соглашений и законов пр дм тной области

1. "Свойства химических элементов”, "Свойства химических веществ”, "Основы термодинамики”, "Т ермодинамика. Физиче ские свойства”;
2. "Свойства химических элементов", "Свойства химических веществ",

"Свойства химич е ских р е акций", "Основы т ермо динамики",

"Термодинамика. Химич е ски е свойства";

1. "Свойства химических элементов", "Свойства химических веществ",

"Основы термодинамики", "Термодинамика. Химич е ски е свойства",

"Химич е ская кин етика".

1. "Свойства химических элементов", "Свойства химических веществ",

"Свойства химич е ских р е акций", "Основы т ермо динамики",

"Т рмодинамика. Физич ски свойства", "Т рмодинамика. Химич ски

свойства", "Химич е ская кин етика", "Термодинамика. Связь физич е ских и химич ских свойств".

Первые четыре онтологии являются упрощениями онтологии физич е ской химии ( е е модули прив е д е ны в приложе нии 2).

При сп цификации задачи тр бу тся указать, к какой онтологии относится задача (указав название последнего модуля в каждом списке). Существует четыре типа терминов, определяемые онтологией уровня 4: собственные свойства системы, название сущности процесса, названия собственных и названия совместных свойств сущностей процесса. При постановк задачи задаются знач ния т рминов указанных типов в кач ств исходных данных задач, а такж в кач ств им н выходных данных задач. Причем, если в постановке задачи заданы значения свойств сущностей процесса, то также указаны и названия этих сущностей. Если в качестве выходных данных задачи указаны названия свойств сущност й проц сса, то такж указаны и названия сущност й.

Вс е множество классов задач может быть разбито на четыр е множе ства (м етакласса):

1. в каче стве входных данных задач данного класса задаются знач ения собственных свойств на шагах проце сса, пр едше ствующих или совпадающих с указанным; в задачах требуется найти значения этих свойств для указанного шага проце сса;
2. в качестве входных данных задачи задаются значения сущностей проц сса на шагах проц сса, пр дш ствующих или совпадающих с указанным; в задачах тр бу тся найти знач ния этих свойств для указанного шага проце сса;
3. в качестве входных данных задач задаются значения собственных свойств указанных сущностей проце сса на шагах проце сса, предше ствующих или совпадающих с указанным; в задачах тр бу тся найти знач ния этих свойств для указанного шага проц есса;
4. в кач е ств е входных данных задаются знач ения совм е стных свойств сущност й проц сса на шагах проц сса, пр дш ствующих или совпадающих с указанным; в задачах тр бу тся найти знач ния этих свойств для указанного шага проце сса.

Число классов задач для каждого метакласса бесконечно (примеры классов задач и задач каждого класса прив д ны в прилож нии 7). Поскольку число классов задач бесконечно, специализированная оболочка содержит подсистему автоматиче ского формирования м етодов р ешения задач.

Каждому онтологическому соглашению и закону предметной области (пр дставл нному в вид утв ржд ния на язык прикладной логики) сопоставля тся множ ство проц дур, вычисляющих знач ни одного т рмина на основе других т ерминов. Буде м называть таки е проц е дуры примитивами. Вс примитивы пом щаются в библиот ку сист м для р ш ния классов задач. Имя примитива состоит из термина, знач ение которого он вычисляет, и ном ра. Одному и тому ж т рмину мож т быть сопоставл н список примитивов, которы вычисляют знач ни данного т рмина с использовани м разных утв ржд ний.

В р зультат анализа пр дм тной области и постро ния мод ли было выясн но, что многи онтологич ски соглаш ния и законы физич ской химии имеют вид равенств (см. приложения 2 и 5), которые можно разрешить относительно любого термина, получив, таким образом, примитив, вычисляющий этот термин. Некоторые законы предметной области содержат условия, при выполн е нии которых этот закон прим е ним. В этом случае закон им е ет вид импликации, левая часть которой задает условие применимости закона, а правая представляет собой равенство. Поэтому примитивы, соответствующие таким законам, содержат проверки выполнения условий, при которых возможны вычисления.

Примитивы по утв ржд ниям формируются автоматич ски (рис. 6.5). Число формиру мых примитивов н пр выша т числа входящих в утвержд ени е терминов. В библиоте ку систе м для ре ше ния классов задач такж могут быть пом щ ны примитивы, написанны пользоват л м.

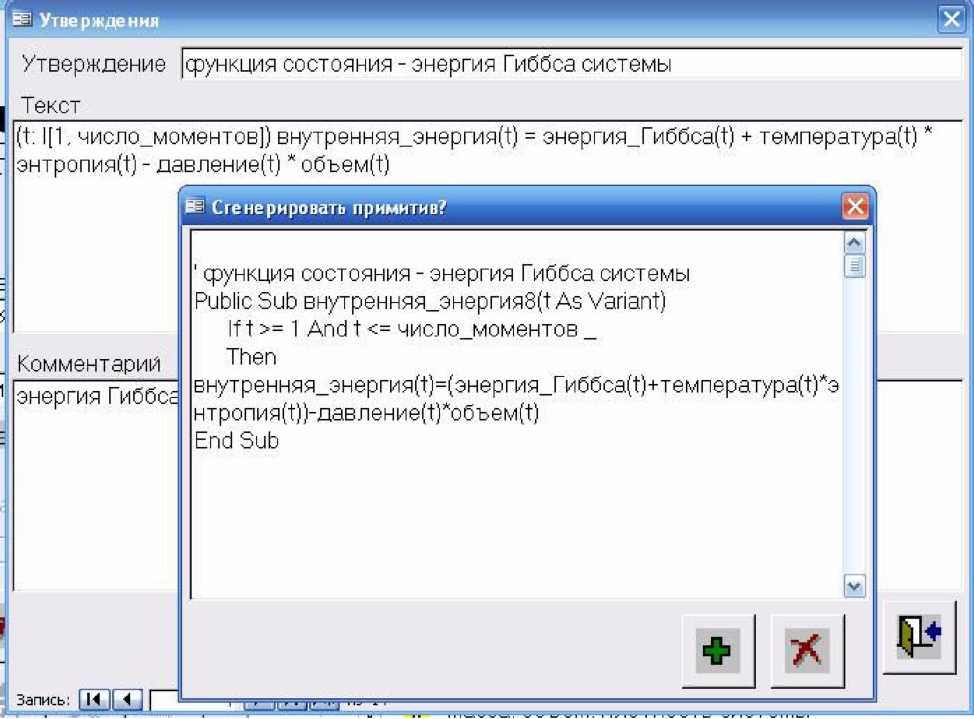


Рис. 6.5. Г ен ерация примитива по утверждению, формулирующему закон физиче ской химии Вс е примитивы можно разд елить на классы. Один критерий классификации - это тип вычисляемого термина. Другой критерий классификации - это способ вычисления термина. Особенностью утверждений предм етной области является также то, что все они связывают знач ния различных т рминов сист мы понятий д йствит льности либо для двух сос е дних шагов проц е сса, либо для одного шага. Таким образом, сущ ствуют примитивы, вычисляющи знач ни т рмина на основании т кущ го шага проц сса, т кущ го и пр дш ствующ го, а такж т кущ го и посл едующ е го. Таким образом, вс е го можно выделить 12 классов примитивов:

А(т), В(т), С(т), Б(т),

А-(т), В-(т), С-(т), Б-(т),

А+(т), В+(т), С+(т), Б+(т).

Здесь А(т) А(т), В(т), С(т), Б(т) означает, что примитив вычисляет значение по текущему моменту, А+(т), В+(т), C+(т), Б+(т) - по текущему и последующему, А-(т), В-(т), С-(т),Б-(т) - по текущему и пр едыдущему.

Методом решения класса задач будем называть последовательность шагов, каждый из которых есть вызов одного из примитивов. Последовательность вызовов примитивов задает последовательность шагов р ш ния сист мы лин йных уравн ний, гд н изв стными выступают выходные параметры задачи (рис. 6.6). Сформированный метод решения класса задач записывается в библиотеку. Для одной и той же задачи может быть сформировано несколько методов решения. Методы отличаются последовательностью использованных при р ешении примитив.

|  |  |
| --- | --- |
| энтропия(2) = 1000 энергия\_Гельмгольца(2) = 177000 Найти внутренняя\_энергия(2) | A j |
| РЕШЕНИЕ: |  |
| Шаг 1. объем изолированной или закрытой системы постоянен: объем(2) = объем(1) | [1 |
| объем(1)=2 |  |
| Шаг 2. для любого момента:  внутренняя\_энергия(2) = энтальпия(2) - давление(2) \* объем(2) |  |
| внутренняя\_энергия(2)=49350 |  |

Рис. 6.6. Формировани е м етодов р е ш ения задачи

Сп циализированная оболочка инт лл ктуальных сист м для физич ской химии использовалась в лаборатории фторидных мат риалов Института химии ДВО РАН.

1. Сп циализированная оболочка для р нтг нофлуор сц нтного анализа

В соотв етствии с описанной в п. 6.2 конц е пци е й, выполн е на разработка сп циализированной оболочки инт лл ктуальных сист м для разд ла

рентгенофлуор е сц ентный анализ аналитич еской химии [40-41, 126]. При создании оболочки использованы мод ль онтологии данного разд ла (Прилож ни 4), а такж р зультаты анализа задач и м тодов их р ш ния.

Компон нтами сп циализированной оболочки являются: р дактор

знаний, и две подсистемы для решения прикладных задач. Первая из подсистем позволяет определить состав пробы по спектру, полученному со спектром етра, а вторая решает задачу постро ения те оретиче ского спектра по заданному составу пробы и описанной конфигурации спектрометра.

При разработке редактора знаний (рис. 6.7) использована модель

онтологии данного разд ла химии, описанная в глав 4.

Для хранения знаний данного раздела использована СУБД Access. При разработке структуры таблиц базы данных использованы м етоды, описанны е в п. 5.3.2. Редактор знаний позволяет пользователю просматривать и редактировать (добавлять, удалять и изм енять) содержащуюся в баз е знаний информацию (множе ство оболочек химиче ских элем ентов, соотв етствующих этим эл м нтам оболоч к, эн рг тич ских уровн й, которым сопоставл ны главны е и орбитальные квантовы е числа этих уровнях и т.д., то е сть информацию, соотв тствующую понятиям, использу мым при описании знаний). Пользоват лю пр доставля тся возможность просмотра знач ний каждого из понятий, сод ржащихся в сист м понятий знаний в т рминах

пр дм тной области, т. . работу по сопровожд нию базы знаний сист мы

выполня т сп циалист пр дм тной области, использующий программную сист е му.

Р дактор знаний н допуска т ввода в базу знаний н корр ктных знач ний, проверяя вводимые значения на соответствие законам предметной

Правка Справка

Оболочки иэнер. уровни | Радиац. переходы | Хим. элементы Переходы Костера-Кронига Радиоактив, изотопы Коэф. поглощения

Поглощающий химический элемент

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| № | | Обозначение | Название | л |
| 1 | Н | Водород |  |
| 2 | Не | Гелий |  |
| 1 | Li | Литий |  |
| 4 | Ве | Бериллий |  |
| 5 | в | Бор | J |
| 6 | с | Углерод |  |
| 7 | N | Азот |  |
| 3 | 0 | Кислород |  |
| а | F | Фтор |  |
| 10 | Ne | Неон |  |
| 11 | Na | Натрий |  |
| и | Mg | Магний |  |
| 13“' | AI | Алюминий |  |
| 14 | . Si | Кремний |  |
| 15 | P | Фосфор |  |
| 16 | re | Сера |  |
| 17 | Cl | Хлор |  |
| 18 | Ar | Аргон |  |
| 19 | ■ К | Калий |  |
| 20 | Co | Кальций |  |
| 21 | : sc | Скандий |  |
| 22: | Г: | Титан |  |
| ■23 | V | Ванадий |  |
| 24 | Cr | Хром |  |
| 25 | Mn | Марганец |  |
| 26 | Fe | Железо |  |
| щ | Co | Кобальт |  |
| 28 | hi | Никель |  |
| 23 | Cu | Медь |  |
| 30 | Zn | Цинк |  |
| 31 | Ga | Галлий |  |
| 32 | Ge | Г ерманий | @ |

Поглощаемое излучение

линии радиоактивного изотопа характеристичесих линий э лемента

Химический элемент

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| N1 | Обозначение | Название | |А |
| ЕЯ  63 | шшмми  Ей | Европий |  |
| 64 | Gd | Г адолиний |  |
| 65 | Th | Т ербий |  |
| 66  67 | Оу  Но | Диспрозий Г ольмий | □ |
| 68 | Гг | Эрбий |
| 63  70  71 | Tm  Yb  Lu | Тулий  Иттербий  Лютеций | г— |
|  |  |  |  |

Коэффициенты поглощения характеристических линий химического элемента

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Название | ИЮПАК | Энергия линии | Масс. коэф. ФП | Масс. козФ. ос л. | | л |
| Ка1 | K-L3 | 40111 | 3,58 |  |
| Ка2 | K-L2 | 39516 |  |  |
| Кр1 | к-мз | 45405 |  |  |
| Ма | K-N3(N2) | 46566 |  |  |
| крз | К-М2 | 45281 |  |  |
| Lnl | L3M5 | 5S35 | 99.9 |  |
| La2 | L3-M4 | 5607 |  |  |
| Lp1 | L2-M4 | 6205 | 0 | |
| ,1ЯЯ. | 1 | ЙЧЯК |

Изменить

Рис. 6.7. Интерфейс редактора знаний раздела рентгенофлуоресцентного анализа

области и выдавая в случае неудачного исхода проверки соответствующее диагностич е ское сообще ни е. Объ е м хранимых знаний достаточно велик. Так, например, фотонных коэффициентов взаимодействия известно порядка ста тысяч. Благодаря наличию редактора знаний, было возможным начать эксплуатацию сист мы с н полностью заполн нной базой знаний и продолжать вводить знания дал е е уж е во вр е мя использования сист е мы.

Задачу построения теор етич е ского сп ектра по заданному составу пробы и описанной конфигурации спектрометра (без проведения реальных эксп ерим ентов) р ешает подсистема "Построитель" (рис. 6.8). Тако е

постро ни позволя т оц нить возможность р нтг норадиом трич ского опр д л ния заданных эл м нтов при выбранных условиях анализа и оц нить влияни м шающих эл м нтов на р зультаты анализа. Благодаря

исключ ению эксп ерим е нтов, дающих сп е ктры, н е пригодны е для

идентификации химиче ских элем ентов, достигается снижени е материальных и вр м нных затрат на выполн ни флуор сц нтного

рентгенорадиометрического анализа. Спектр строится с использованием м етода фундам ентальных парам етров [184, 188] и распр еделения Гаусса по изв стным свойствам пробы и изв стной конфигурации рентгенофлуор е сц ентного сп ектрометра.

Свойства пробы включают химич ский состав (вм сто химич ского можно задать эл м нтный состав) и либо плотность мат риала пробы и толщину слоя, либо массу пробы и площадь дна кюветы. После задания пробы в главном окне приложения отображается ее элементный состав. При наличии ошибок в задании пробы, сист ма выда т сообщ ния об ошибках (рис. 6.8). Пробу можно сохранить в файл в формате, основанном на XML, с ц лью дальн йш го использования.

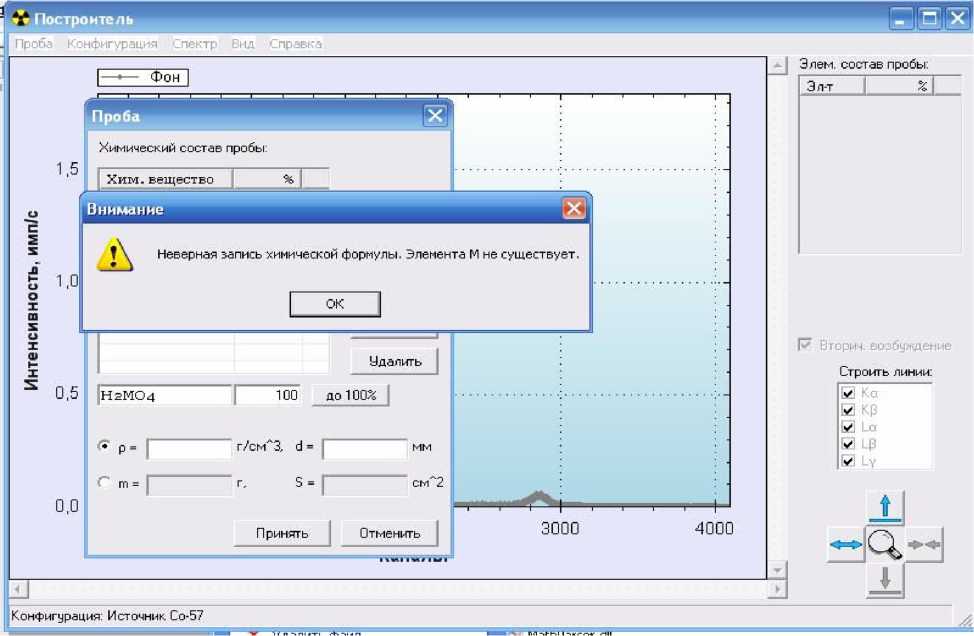


Рис 6.8. Интерфейс подсистемы "Построитель”

Конфигурация спектрометра включает количество каналов, калибровку, относительную эффективность регистрации, энергетическое разрешение,

углы падения первичного излучения и отбора вторичного излучения, радиоактивный изотоп, использу мый в кач ств источника возбуждающ го излуч ния, активность источника, минимальный порядковый ном р химич ского эл м нта (начиная с которого должно выполняться постро ни характеристических линий), инструментальную постоянную. Конфигурацию спектрометра можно сохранить в базе данных, хранящей рабочие данные приложения «Построитель».

Построенный спектр характеристического рентгеновского излучения пробы отображается в окне приложения как графическое представление зависимости интенсивности излучения от ном ера канала сп ектром етра или от энергии излучения по выбору пользователя. Пользователь может отключать построение определенных характеристиче ских линий, отключать вычисление вторичного возбуждения. Доступны функции масштабирования спектра и п ерем ещения по н ему. Им е ется возможность просмотра вс ей информации по каждому из пиков на сп ктр . Сп ктр можно сохранить в вид т кстового файла, сод ержащ е го набор пар знач е ний: эн ергия излуч ения -

соответствующая инте нсивность. Такж е те кущую область отображ ения спектра можно сохранить в виде файла с изображением или распечатать е е на принт р .

Задачи кач ств нного и колич ств нного анализа пробы р ша т подсистема Анализатор. Анализатор поддерживает графическое пр едставление спектра (рис.6.9).

Система поддерживает три разных вида пр едставления спектра: точками, вертикальными линиями либо кривой, соединяющей точки спектра. Пользоват ль им т возможность задать тр бу мый му тип отображ ния спектра, а также использовать масштабирование.

Для р ешения задачи кач еств енного анализа пробы в кач е стве исходных данных долж н быть указан радиоактивный изотоп. Список изотопов зада тся в баз знаний сист мы, которую пользоват ль мож т р дактировать.

При задании исходных данных пользоват ль выбира т тр бу мый эл м нт из пр длага мого сист мой списка.

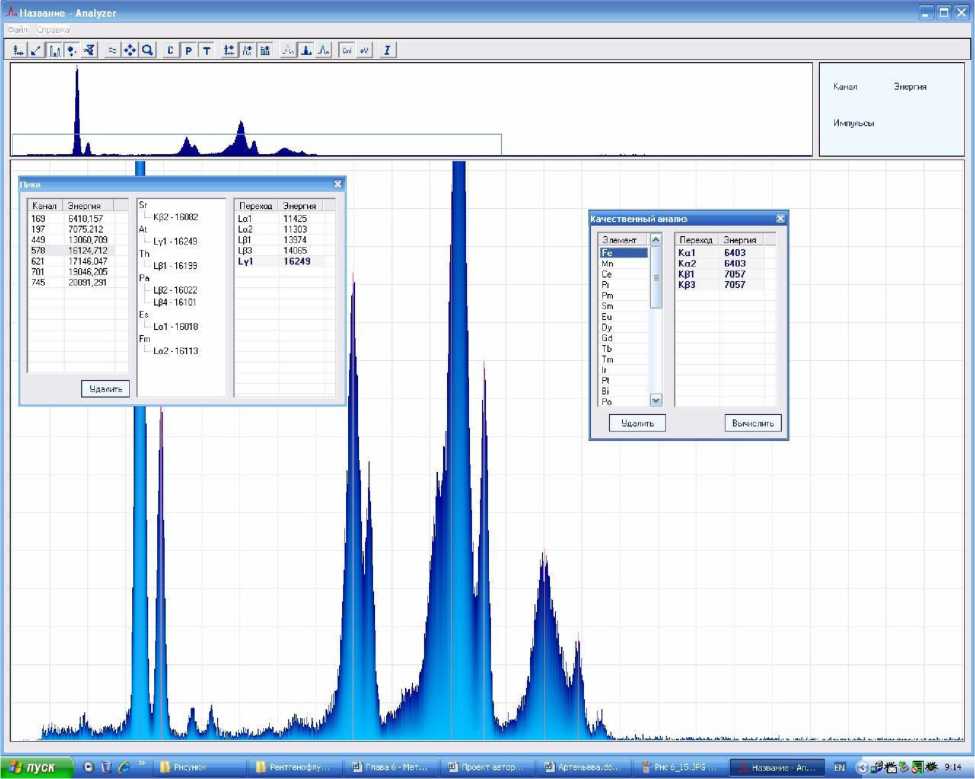


Рис. 6.9. Инт рф йс подсист мы "Анализатор"

Исходными данными задачи является множество пар <энергия характеристического излучения, интенсивностью которые вычисляются по спектру. Эти пары задают пики спектра. Пики отм ечаются нажатием мыши на график , а их пр дставл ни в т рминах мод ли онтологии вычисля тся автоматиче ски и отображается в сп ециальном окне (Рис. 6.16).

Пользоват ль им т возможность получить информацию о химич ских элементах, в спектре которых присутствует пик, близкий к выделенному пользоват л м. Эта информация отобража тся в ср дн й части данного окна (Рис. 6.9). Пользователь также может получить информацию о спектре отм ч нного химич ского эл м нта в правой части окна.

В результате качественного анализа определяется множество химич е ских эл ем е нтов. В этот список попадают те эл е м е нты, сп ектр которых содержит некоторые из пиков исходного спектра. Химические элементы, сп ктр которых сод ржит вс выд л нны пики, располагаются в начал списка и выделяются жирным шрифтом. Пользователь имеет возможность получить информацию из базы знаний о радиационных п р ходах любого из эл е м е нтов данного списка (рис. 6.9).

Колич ств нный анализ выполня тся только для т х эл м нтов, которы были получены в результате качественного анализа. Если пользователь изм ня т проц нтно сод ржани н которого эл м нта пробы, то вычисля ется проц е нтно е сод ержани е других эл е м е нтов.

Программная система реализована в среде разработки Microsoft Visual Studio .NET 2003 на языке С#. База данных, хранящая знания (база знаний) и база данных, хранящая рабочие данные приложения «Построитель», функционируют под управлением ядра Microsoft Jet 4.0.

Сп циализированная оболочка использу тся в лаборатории яд рно- химиче ских м етодов анализа Института химии ДВО РАН.

1. Сп е циализированная оболочка систе м, основанных на знаниях, для органич ской химии

В соответствии с описанной в п. 5.2 концепцией, выполнена разработка сп циализированной оболочки сист м, основанных на знаниях, для органич е ской химии [43-47]. При разработк е оболочки использованы модель онтологии данного разд ела (Приложе ни е 3), а также р е зультаты анализа классов задач и м етодов их р е ш е ния (Приложе ни е 6).

Компон нтами сп циализированной оболочки являются:

сп циализированный р дактор двух уровн й онтологии [48], р дактор знаний, сист ма для р ш ния классов задач опр д л ния пут й синт за органич ских со дин ний.

Не стандартной величиной для данного раздела химии является краткая структурная формула органич ских со дин ний, для пр дставл ния которой в пр дм тной области сущ ству т общ принятая графич ская нотация. Специализированная оболочка содержит специальный редактор кратких графич е ских формул (рис. 6.10), который пр е образу ет графич е ски заданную

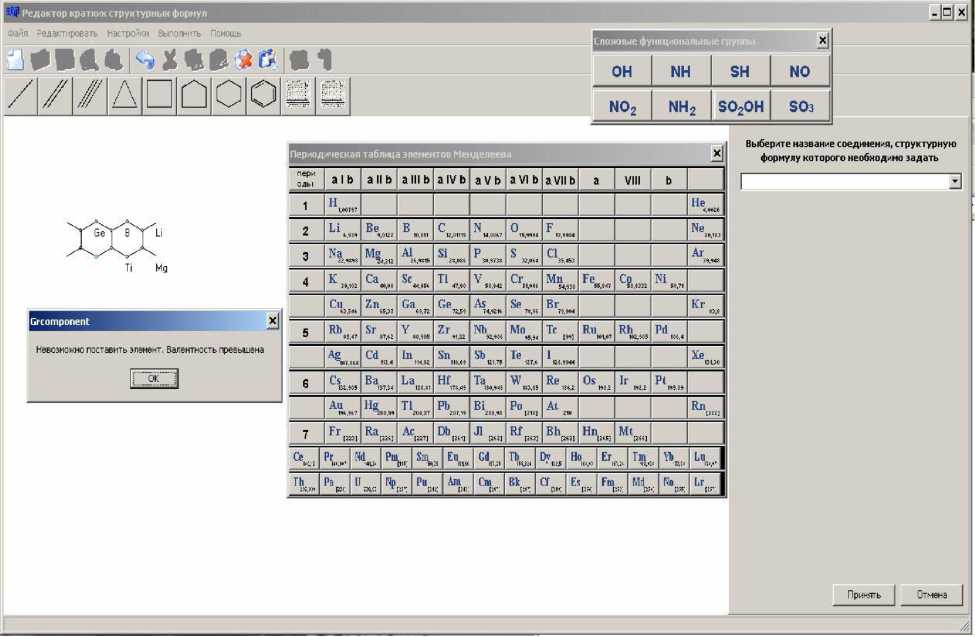


Рис. 6.10. Интерф е йс редактора кратких структурных формул краткую структурную формулу в в рбально пр дставл ни (и обратно) в соотв тствии с онтологи й кратких структурных формул. Графич ский р дактор при задании структурной формулы пров ря т вс онтологич ски соглашения, опр еделенны е в модуле «Структурная формула со единения» (и во вс х использу мых им) (прилож ни 3), н позволяя пользоват лю задать н согласованны с онтологи й знач ния.

Опр д л ни пути синт за осущ ствля тся с помощью р курсивной проц дуры, р ализующ й правила опр д л ния начального состояния проц сса, правила зав рш ния вывода и правила п р хода от одного состояния к другому, сп цификация которых прив д на в прилож нии 6.

Каждому типу правил соотв тству т подпрограмма, р ализующая это правило.

Переход от одного состояния к другому происходит в результате выполн ния н которой химич ской р акции. Правила п р хода м жду состояниями опр д ляют для каждого класса задач синт за свойства р акции, которая мож т быть выполн на на шаг проц сса синт за. Поиск такой ре акции производится по баз е знаний. Условия поиска задаются сп цификациями правил п р хода м жду состояниями, описанными в прилож нии 6.

Исходны данны задачи задаются с использовани м сист мы ввода исходных данных (рис 6.11). Если пользователь задает краткую структурную

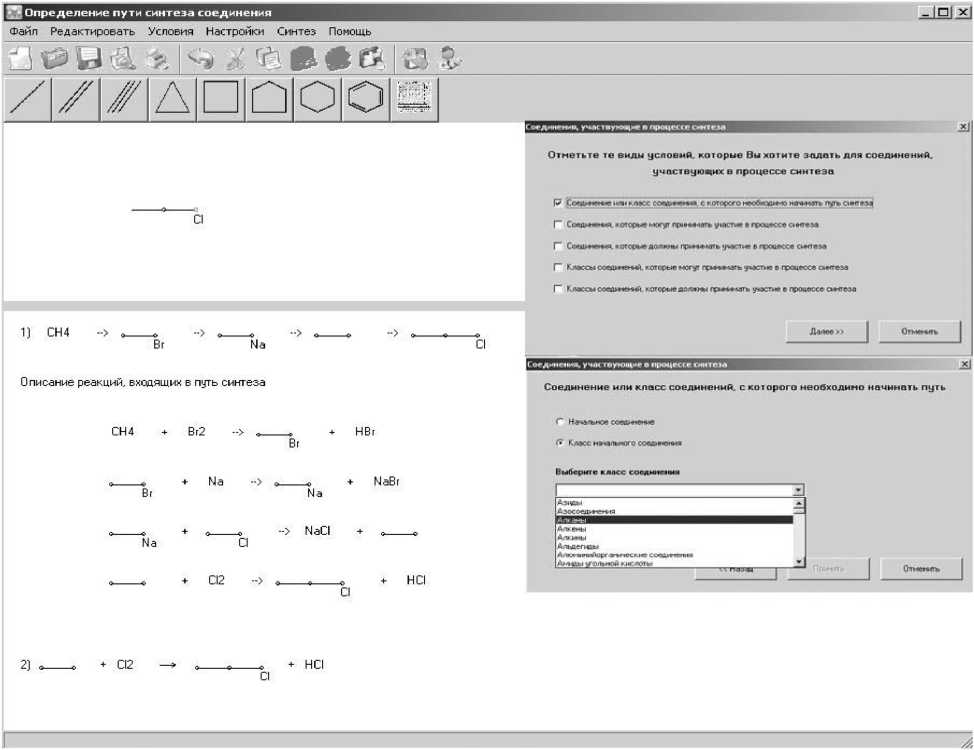


Рис. 6.11. Интерф е йс сист емы р е ш е ния задач поиска путе й синт е за органич ских со дин ний формулу со дин ния, которо тр бу тся синт зировать, то он использу т графич ский р дактор структурных формул. Если пользоват ль в главном

окне системы ввода исходных данных указывает, что должны учитываться условия на путь синт за, то вызываются соотв тствующи окна сист мы ввода исходных данных, гд пользоват ль мож т задать тр бу мую информацию.

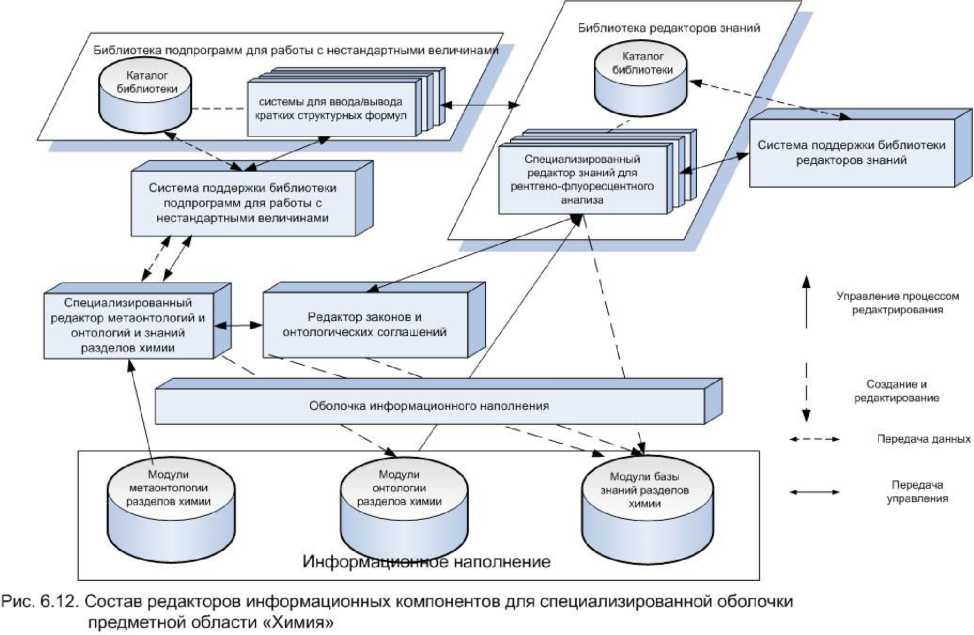
Результат решения задачи и его объяснение выдается пользователю в графич еском виде (рис. 6.11). При р ешении задачи формиру ется не сколько пут й синт за. Каждый путь синт за пр дставля тся посл доват льностью веще ств, участвующих в синтез е на каждом шаге. В объясн ении приводится список р е акций, им евших ме сто на каждом шаге синтеза. Каждое веще ство представляется своей краткой структурной формулой, а каждая реакция записывается с помощью принятых в предметной области графических обозначений.

Прототип решателя задач органической химии, осуществляющий опр еделение пути синтеза органиче ского со единения, ре ализован на Borland C++ Builder 6.0. Система проходит опытную эксплуатацию в институте химии и прикладной экологии Дальн восточного государств нного университета. Планируется расширение базы знаний с участием экспертов пр едм етной области.

1. Специализированная оболочка, интегрирующая онтологии и знания разных разд лов химии

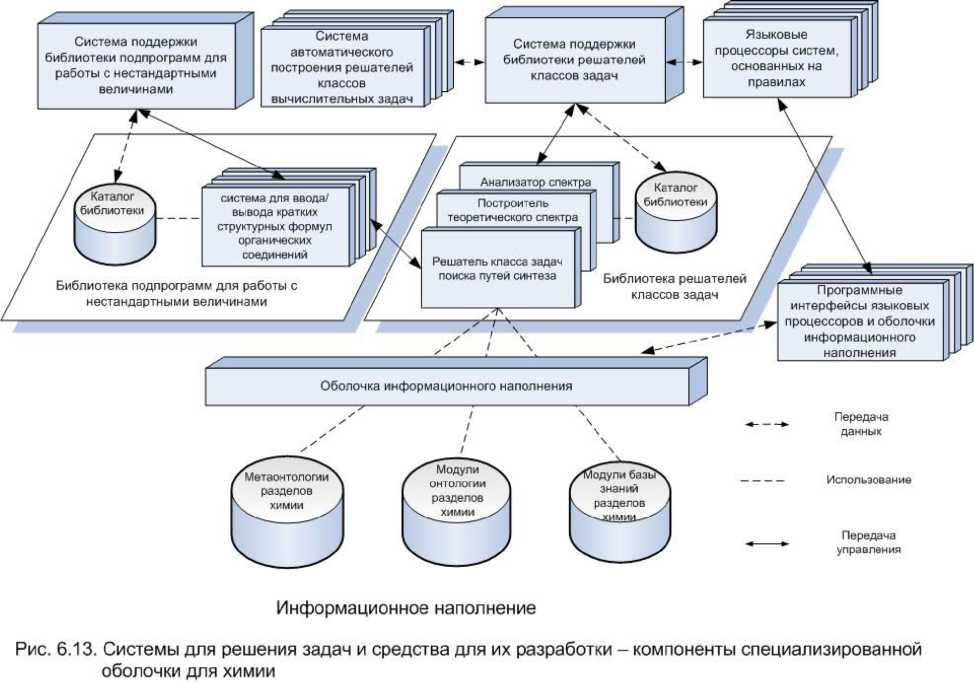
В соотв тствии с описанной в глав 5 конц пци й, выполн на разработка сп е циализированной оболочки интелл е ктуальных сист е м для химии [50], инт грирующая онтологии, знания и программны сист мы для разных разделов химии. При ее создании использована многоуровневая модель химии, опр д л нная в глав 4, а такж р зультаты анализа задач и м тодов их р ш ния для вс х разд лов химии.

Информационными компон нтами сп циализированной оболочки являются м таонтологии, онтологии и знания разных разд лов химии, разработанные с использованием терминов метаонтологии химии, описанной в главе 4. Специализированная оболочка содержит р едакторы м етаонтологий, онтологий и знаний разделов химии (рис. 6.12), разработка которых основана на модели метаонтологии химии, описанной в главе 4. Редактор м етаонтологий, онтологий и знаний химии использу ет сп ециализированный редактор онтологич е ских соглаш ений и законов предм етной области [96,97],



для пр дставл ния которых использу тся н который язык прикладной логики, класс которых определен в главе 2. Для ввода/вывода кратких структурных формул органических соединений используется сп е циализированный р е дактор (рис. 6.10), пом е щ енный в соотв етствуюшую библиотеку. При р едактировании знаний раздела р ентгено-флуор е сцентного анализа оболочка позволяет использование специального редактора - компонента оболочки, описанной в п. 6.3 (рис. 6.7). Данный редактор пом ещен в соотв етствующую библиотеку.

Все перечисленные в предыдущих пунктах системы для решения классов прикладных задач помещены в библиотеку р ешателей классов задач данной сп е циализированной оболочки (рис. 6.13).



В качестве программных компонентов, с помощью которых могут разрабатываться сист мы для р ш ния прикладных задач химии, специализированная оболочка содержит компиляторы двух языков, основанных на модели конфлюэнтных недоопределенных декларативных продукций [10-11].

Первая система, основанная на правилах, позволяет создавать модульны базы правил, для управл ния взаимод йстви м модул й в которой использу ется алгоритмич е ский язык Паскаль. Модули обм е ниваются данными через файлы операционной системы. Компилятор преобразует модульную базу правил в программу на алгоритмич ском язык Паскаль, реализующую проце сс логиче ского вывода (рис. 6.14).

Вторая система [56-58] (рис. 6.15) позволяет создавать модульные базы правил, которы компилятором пр образуются в программу на алгоритмическом языке С++, реализующую распараллеленный логический вывод. Получ нная программа мож т выполняться как на однопроц ссорном компьют ер е, так и на кластер е, состоящ е м из н е скольких компьют еров.

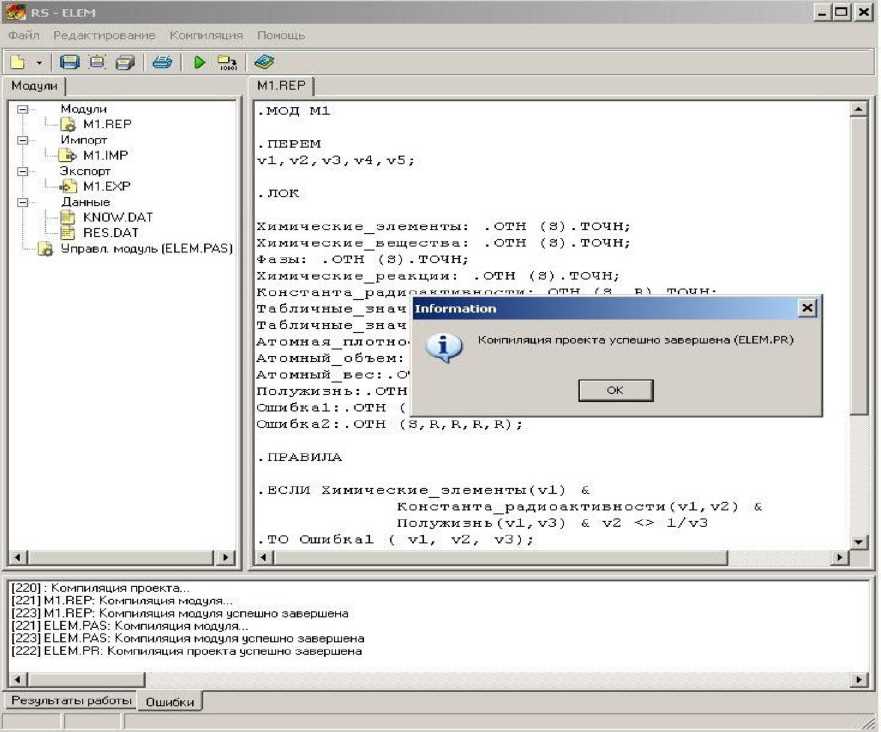


Рис. 6.14. Интерф е йс компилятора языка конфлюэнтных продукций

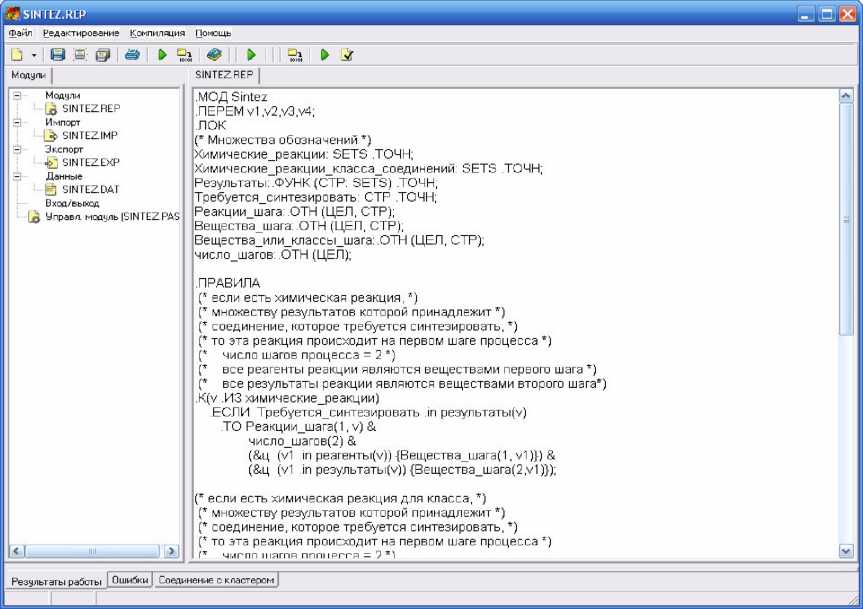


Рис. 6.15. Интерф ейс компилятора системы продукций, поддерживающего язык с расшир нным синтаксисом

Язык записи правил первой системы является подмножеством языка записи правил второй системы. При записи правил язык второй системы позволяет использовать операции над числовыми данными и множествами, ограниченные логические и математические кванторы, определенные в стандартном расшир ении ЯПЛ, а также в специализированных расшир ениях "Интервалы” и "Математические кванторы”, а также допускает правила, зависящие от параметров (схемы правил) и конкретизации схем (модель языка прив едена в приложении 10). Схема задает множе ство правил, т.е. е е можно рассматривать как аналог подпрограммы в алгоритмич ском язык . Конкретизация схемы задает фактические параметры схемы, т.е. ее можно рассматривать как аналог вызова подпрограмм в алгоритмич ских языках.

Описания типов терминов предм етной области, использу емых в модулях правил п рвой и второй сист мы, автоматич ски создаются компон нтами программного инт рф йса компиляторов и оболочки информационного наполн ния.

Компон нты программного инт рф йса компиляторов и оболочки информационного наполн ния автоматич ски пр образуют тр бу мы при решении задач знания к представлению, используемому языковым процессором. Если архивы исходных данных задач хранятся средствами информационного наполн ния оболочки и их пр дставл ни зада тся онтологи й д йствит льности разд ла химии, то программный инт рф йс позволяет автоматически преобразовать эти данные к представлению, использу мому языковыми проц ссорами.

1. Обсужд ени е

В данной главе рассмотрено использование результатов главы 5 при создании оболоч е к для пр е дм етной области "Химия”.

Разработаны сп циализированны оболочки сист м, основанных на знаниях, для физич ской и органич ской химии, для разд ла р нтг но- флуор сц нтного анализа, а такж сп циализированная оболочка, инт грирующая онтологии, знания и программны сист мы указанных разд лов химии. Информационными компон нтами посл дн й оболочки являются онтологии и знания разных разд лов химии, а программными - подсист е мы других оболоч е к.

Сп циализированная оболочка СОЗ для физич ской химии использовалась в лаборатории фторидных материалов Института химии ДВО РАН. Специализированная оболочка используется в лаборатории ядерно- химиче ских м етодов анализа Института химии ДВО РАН. В настояще е вр емя специализированная оболочка, интегрирующая онтологии, знания и программны сист мы разных разд лов химии, использу тся при создании СОЗ для раздела катализ. Методы разработки специализированных оболочек для сложно-структурированных пр дм тных област й такж используются при создании оболочки, инт грирующ й онтологии и знания разных разд лов химии, работающ е й под управл е ни е м Инт ерн ет [49].

**ГЛАВА 7. ТЕХНОЛОГИЯ СОЗДАНИЯ И СОИРОВОЖ-ДЕНИЯ РАСШИРЯЕМОЙ СИСТЕМЫ, ОСНОВАННОЙ НА ЗНАНИИЯХ, С ИСИОЛЬЗОВАНИЕМ СОЦИАЛИЗИ­**

**РОВАННОЙ ОБОЛОЧКИ**

В соотв тствии с конц пци й, описанной в глав 5, начальная в рсия сп циализированной оболочки сист м, основанных на знаниях, для сложно­структурированной предметной области содержит редакторы многоуровн вой онтологии этой области и сист му сопровожд ния, которая позволяет добавлять программные компоненты, типы которых описаны в глав 5. Оболочка мож т использоваться для р ш ния прикладных задач лишь после добавления системы для решения этих классов задач и создания тр бу мых при р ш нии задач информационных компон нтов.

В данной глав пр дставл на т хнология создания и изм н ния информационных и состава программных компон нтов сп циализированной оболочки.

1. Т ехнология создания и изм е н е ния информационных компон е нтов

Создани и изм н ни информационных компон нтов об сп чивают р дакторы этих компон нтов. Создани информационных компон нтов пр дполага т добавл ни п рвого разд ла сложно-структурированной пр дм тной области (т. . добавл ни го многоуровн вой онтологии и знаний), а изменение - либо редактирование онтологии и знаний суще ствующего раздела, либо добавление нового раздела (рис. 7.1).

1. Создание информационных компонентов

Сх ема добавл ения нового разд ела опр е д еля ется сх е мой анализа м етодом "сверху вниз”. Пусть разработка р едакторов информационных компонентов основана на мод ели онтологии уровня m. Тогда при добавл е нии нового

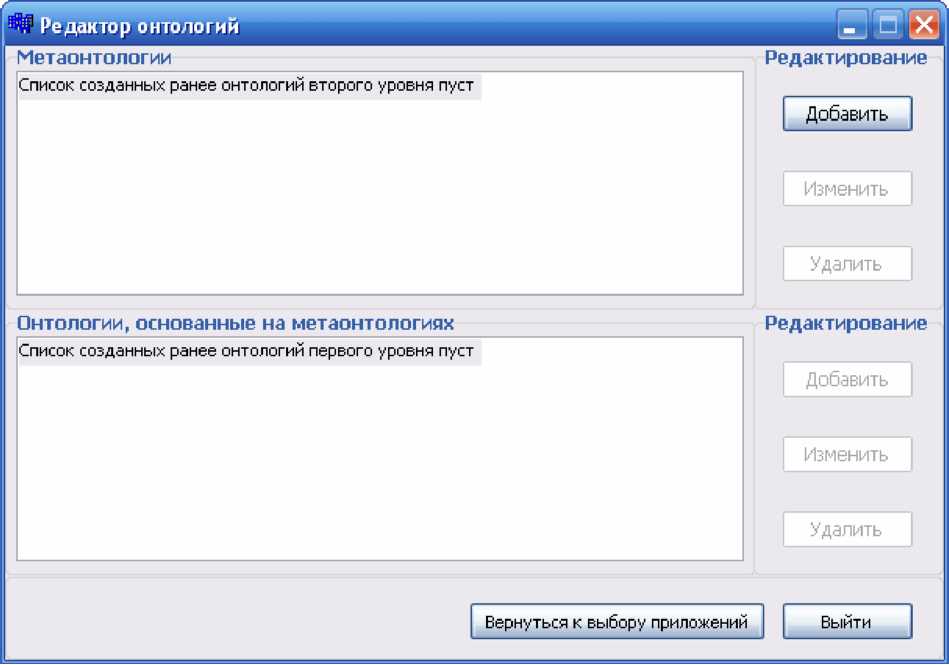


Рис. 7.1. Создание и редактирование онтологий двух уровней ср едствами

сп циализированной оболочки для химии раздела должны быть выполнены следующие шаги: создание онтологии уровня m-1 под управл е ни ем онтологии уровня m; создани е тре бу е мых модул е й онтологий уровн ей ниже m-1 под управл е ни е м модул е й онтологии бол высокого уровня, создани модульной базы знаний разд ла под управл ни м модуля онтологии уровня 2.

Рассмотрим проц сс добавл ния п рвого разд ла для пр дм тной области "Химия” с использованием специализированной оболочки. Создание п рвого разд ла состоит в опр д л нии м таонтологии разд ла (онтологии уровня 3), модул й онтологии разд ла (модул й онтологии уровня 2) и модул й знаний этого разд ла. С помощью р дактора м таонтологий инже н ер знаний задает имя разд ела (рис. 7.2).

Дал р дактор м таонтологии работа т в р жим маст ра и выполня т шаги в соотв етствии со сц е нари е м, описанном в приложе нии 8. Инж ен еру знаний пр едлагается опр еделить термины м етаонтологии, прич ем во многих

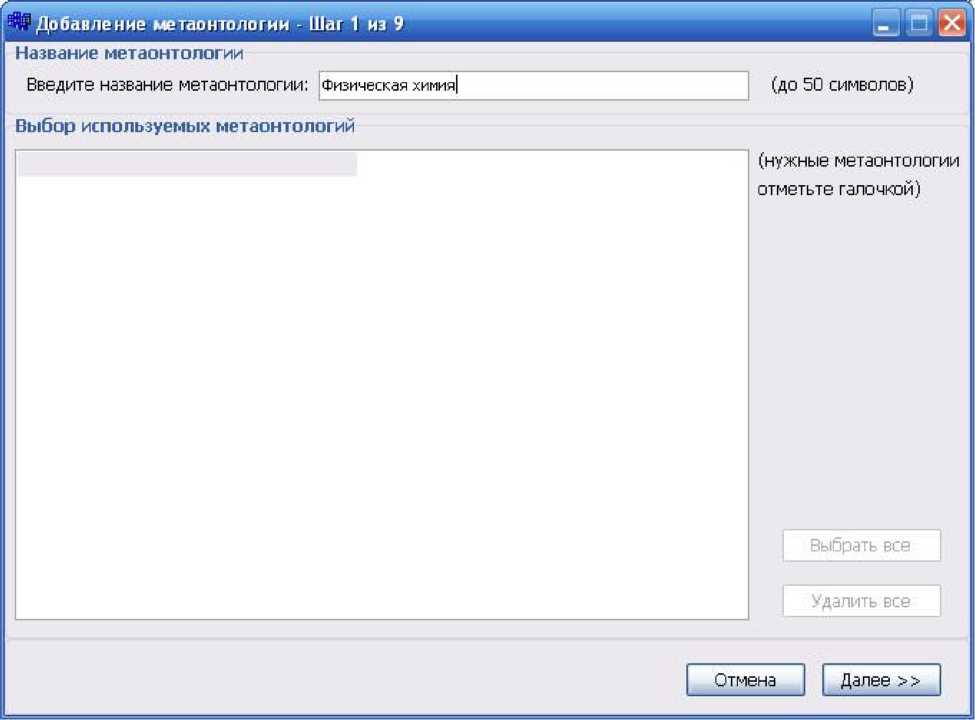


Рис. 7.2. Создание первого модуля метаонтологии (первого раздела пр дм тной области) случаях р дактор автоматич ски формиру т их и пр доставля т возможность их изм н ния, сли сформированны т рмины н удовл творяют инж н ра знаний (рис. 7.3). Сорта т рминов каждой группы зафиксированы мод лью м таонтологии химии (онтологи й уровня 4), поэтому инж н р знаний их н зада т.

После того, как все шаги мастера пройдены, инженеру знаний предлагается задать онтологические соглашения, которым должны удовлетворять все модули онтологии, которые будут определены в дальнейшем с использованием созданного модуля (рис. 7.4). Онтологические соглаш ния задаются с использовани м сп циализированного р дактора онтологич е ских соглаш е ний и законов пр е дм етной области [100-101], для пр дставл ния которых использу тся н который язык прикладной логики, класс которых опр е дел е н в главе 3 (рис. 7.5).

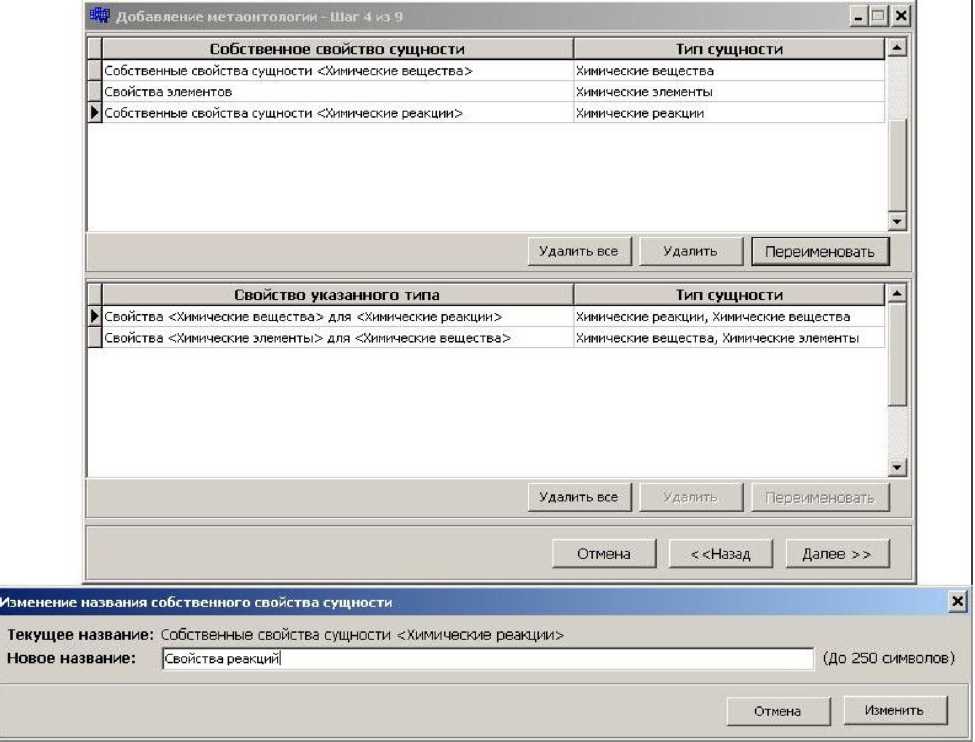


Рис. 7.3. Изм е н е ни е т ерминов, автоматич е ски сформированных редактором м таонтологий

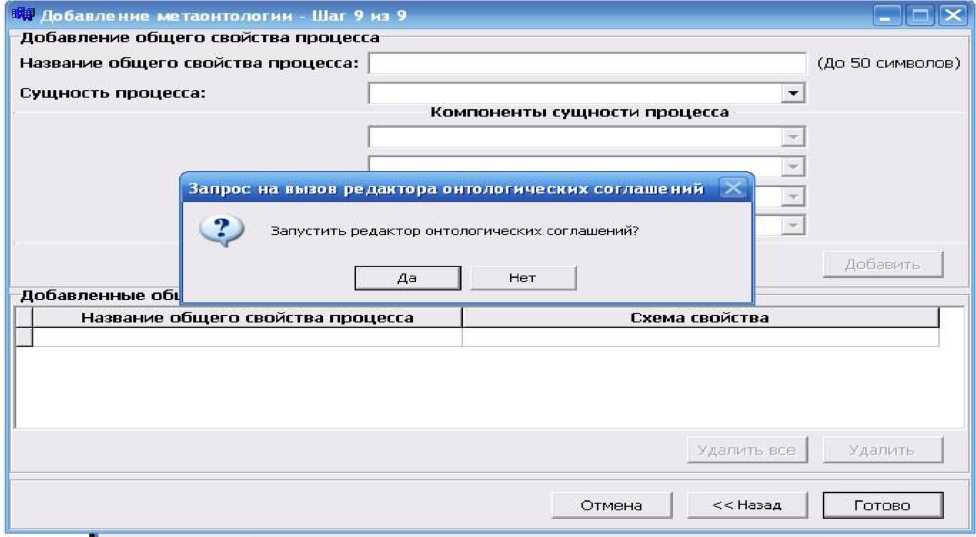
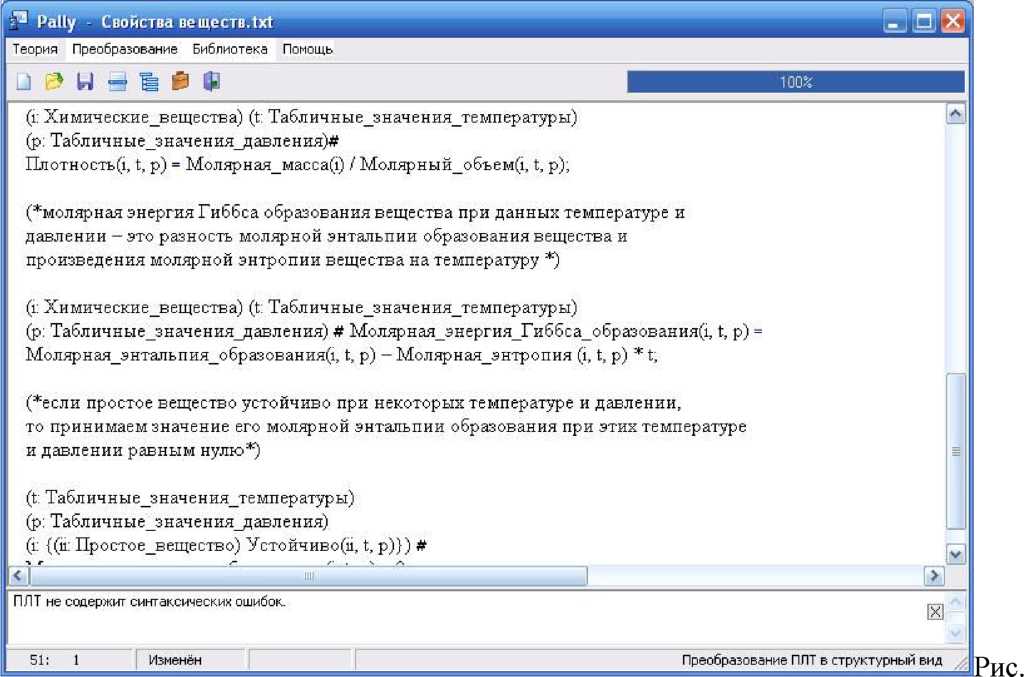


Рис. 7.4. Вызов редактора онтологич еских соглашений



1. Интерфейс редактора онтологических соглашений и законов, записанных ср дствами языка прикладной логики

Т е п ерь рассмотрим проц е сс создания п ервого модуля онтологии уровня 2 п рвого разд ла химии. Инж н р знаний долж н указать, какой из модул й м таонтологии управля т создани м данного модуля онтологии уровня 2 (рис. 7.6).

Дал ее инжен ер знаний опр еделяет термины данного модуля. Как следу ет из многоуровн вой мод ли химии, т рмины онтологии уровня 2 являются либо именами множеств изучаемых в ней объектов (эти им ена задаются при создании онтологии уровня 3 и п р носятся в создава мый модуль автоматиче ски), либо им енами функций, задающих различные свойства этих объектов, в том числе зависящие от других объектов. Задание функции состоит в задании области опр д л ния и области знач ний.

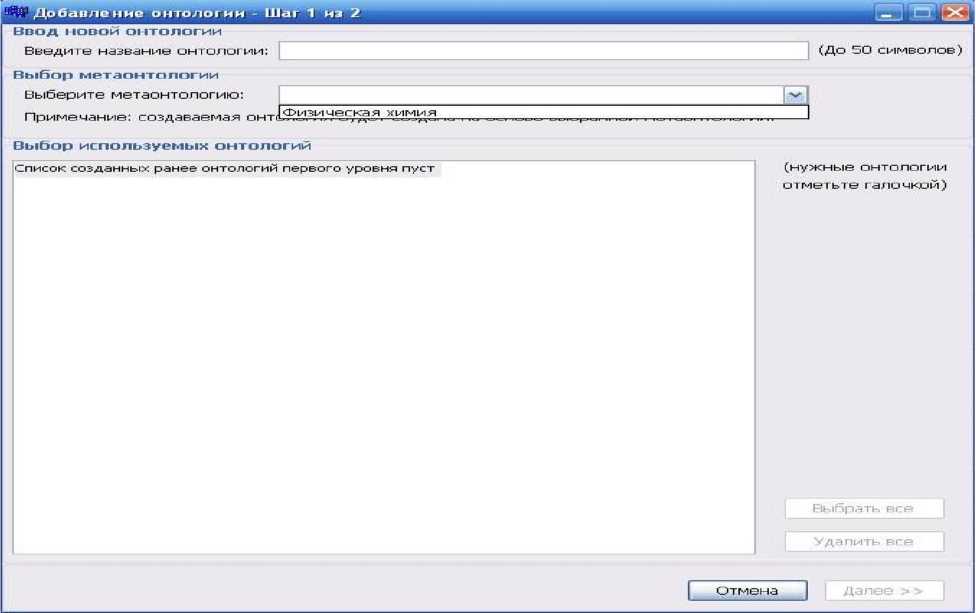


Рис. 7.6. Добавл ни п рвого модуля онтологии уровня 2

**«> I IP Ih ll**

Добавление термина-функции

Введите название функции: [термин! (до 50 символов) [•

Ьшв1шдаадшшдавамшш

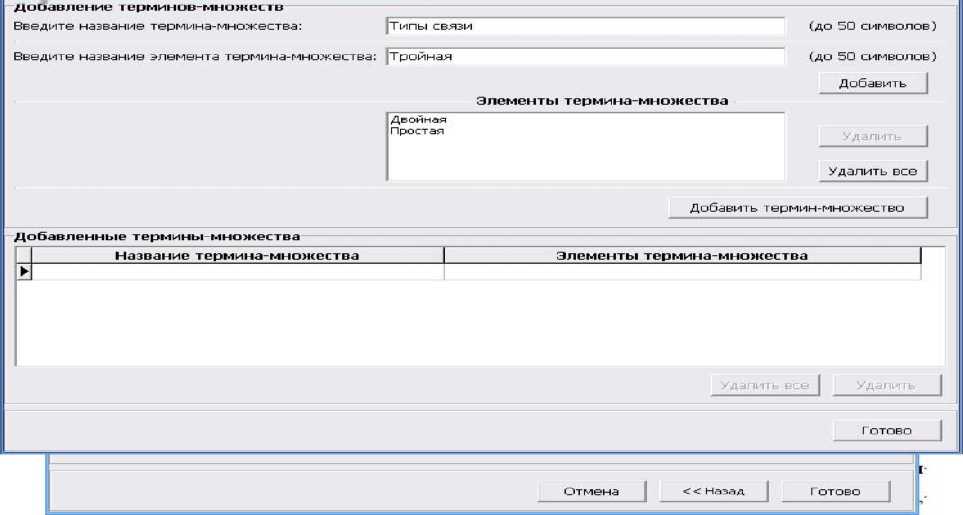


Рис. 7.7. Определени е вспомогательного множе ства

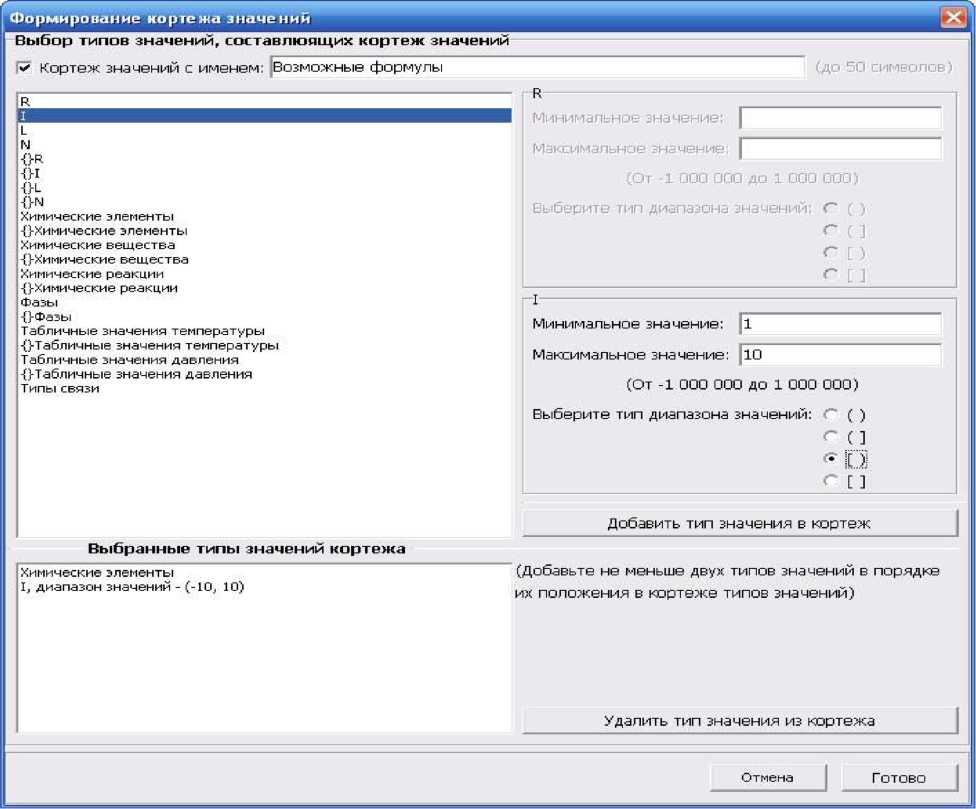


Рис. 7.8. Определени е множества структурных значений

Область опр еделения функции автоматиче ски опр еделяются р едактором после выбора метатермина (принадлежащего метаонтологии, управляющей создани е м модуля).

Для задания области значений функции инжен еру знаний доступны вс е имена стандартных множеств (множества обозначений, целых или вещественных чисел, логических значений), имена типов объектов раздела химии (каждый тип объектов есть имя множества объектов), имена н стандартных в личин, для которых опр д л н способ графич ского пр дставл ния знаний (зада тся при изм н нии состава программных компонентов).

В процессе задания множества значений определяемой функции инженер знаний может задать вспомогательно е множе ство и присвоить ему

имя (рис. 7.7), задать множество структурных значений и присвоить ему имя (рис. 7.8).

Вс им на становятся доступными инж н ру знаний и отображаются в ниспадающ е м списк е (рис. 7.9).

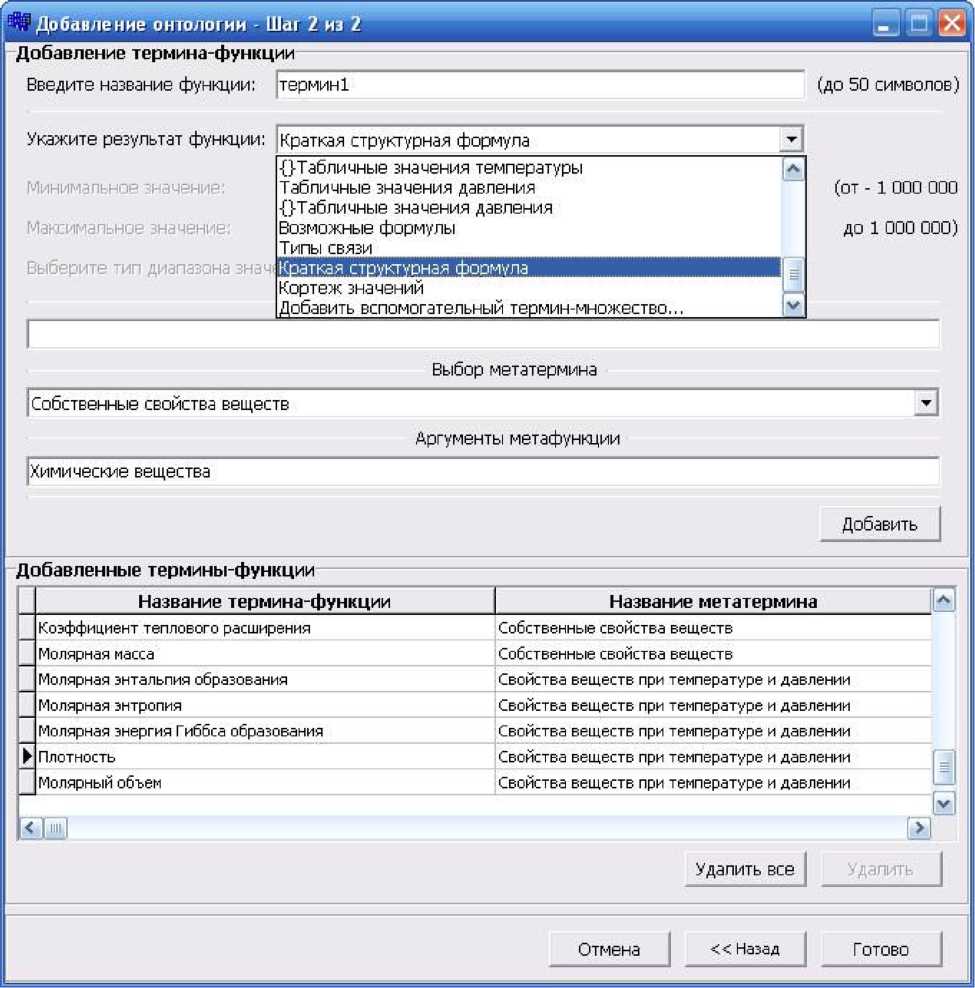


Рис. 7.9. Задани е функции-т ермина онтологии уровня 2

После того, как вся терминология определена, могут быть заданы дополнительные ограничения целостности знаний, для представления которых использу тся сп циализированный р дактор (рис. 7.5).

Создание модуля знаний выполняет эксперт предметной области с использованием редактора знаний. Вначале определяются значения всех т ерминов онтологии, зат е м при помощи р е дактора утв ержд е ний (рис. 7.5) определяются законы предметной области. В процессе создания модуля знаний автоматически проверяются все ограничения, накладываемые сх мами опр д л ния т рминов онтологии, н позволяя задать н корр ктно знач ение (рис. 7.10). Если в проц есс е создания онтологии были опр еделены

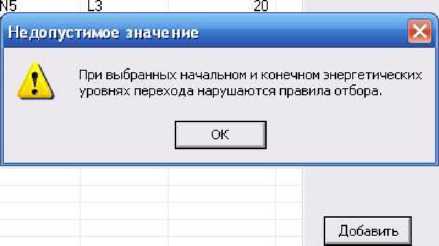
Редактор знаний

Правка Справка

Оболочки иэнер. уровни Радиац. переходы | Хим. элементы | Переходы Костера-Кронига Радиоактив. изотопы Коэф. поглощения

Радиационные переходы

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Название | | ИЮПАК | С уровня | | На уровень | Отн. интенсив. | |
| ш | K-L3 | L3 | К | 100 |
| Ка2 | K-L2 | L2 | К | 50 |
| К01 | к-мз | М3 | к | 17 |
| К(32 | K-N3(N2) | N3 | к | 1 |
| К(33 | К-М2 | М2 | ■ К- | 8 |
| Lol | L3-M5 | М5 | L3 | 100 |
| Lo:2 | L3-M4 | М4 | L3 | 12 |
| ц?1 | L2-M4 | М4 | L2 | 50 |



Изменить

Удалить

[Lpi ... |M2-L3 „! Li М2 ; ю

Рис. 7.10. Задание значений терминов онтологии

дополнит льны огранич ния с помощью р дактора онтологич ских утв ржд ний и законов пр дм тной области, то мож т быть выполн на их проверка. В специализированной оболочке по химии такая проверка производится с помощью средств системы, основанной на правилах. Используемые при проверке данные автоматически формируются на основании содержимого таблиц базы знаний (рис. 7.11).

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| ■■ |  |  |
|  |  | L-J lOj l&j |
| Файл Редактирование Компиляция | Помощь |  |
| □ - R S 0I «г 0 9!?, | Ф |  |

М одули

Ml.REP

mi.exp|

.ПРАВИЛА

|  |  |
| --- | --- |
| В' | Модули |
|  | Ml.REP |
| S | Импорт |
|  | |\_3> M1.IMP |
| 0 | Экспорт |
|  | Й Ml.EXP |
| Ej | Данные |
|  | Й KNOW.DAT |
|  | ij RES.DAT |

(\* проверка соглашения 1: \*)

(\* для любого химического элемента v1 \*}

(\* константа радиактивности(у1) = 1 /гполужизнь(у1)\*)

.ЕСЛИ Химические\_элементы(у1) &

Константа\_радиоактивности(у1 ,v2) & Полужизнь(у1 ,v3) & v2 <> 1А/3 ТО Не\_выполнено\_соглашение\_1 ('для элемента '!! v1!!

Управл. модуль (ЕLEM.PAS)

1 константа радиоактивности = M!v2 !! ' полужизнь = '!! v3);

("проверка соглашения 2: \*)

(\*для любого химического элемента v1 \*)

(\* и любого значения температуры v2 \*)

(\*атомная плотность(у1 ,v2) = \*)

(\* атомный eec(v1 ,v2) / атомный объем (v1 ,v2) \*)

ЕСЛИ Химические\_элементы(у1) &

\_н

и

Табличные\_значения\_температуры(у2) &

ч-’азьц'-назао j

1. Т абличные\_значения\_темпераггуры(4)
2. Т абличные\_значения\_темперагтуры(54)
3. Т абличные\_значения\_темперагтуры(54)
4. Т абличные\_значения\_лавления(1)
5. Т абличные\_значения\_давления(3)
6. Т абличные\_значения\_лавления(4)
7. Конста1-гга\_радиоактивности(,1 2\
8. Полужизнь('1 \2)
9. Атомная\_платность('1 ',4,4)
10. Атомный\_вес('1’,4)
11. Атомный\_объем('1 ',4,4)

Не\_выполнено\_соглашение\_1+ (дляэлемента 1 константа радиоактивности = 2.00 полужизнь = 2.00 ) Не\_выполнено\_соглашение\_2+ ( для элемента 1 и температуры 4.00 атомная плотность = 4.00 атомный вес = 4.00 атомный объем = 4.00 )

Результаты работы | Ошибки

Рис. 7.11. Проверка ограничений целостности знаний средствами системы, основанной на правилах (использованы мод льны данны )

Если для р едактируемого модуля онтологии уровня 3 или 2 существу ет сп циализированный р дактор (добавл нный как программный компон нт оболочки (см. п. 7.2), то р дактор знаний позволя т выбрать го для редактирования (рис. 7.12).

1. Изм енение информационных компонентов

Изменение информационных компонентов предполагает либо р дактировани многоуровн вой онтологии и знаний сущ ствующ го



|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | итделы | |
| Кзгализ для органической химии Метаонтология кггализа Органическая химия | | Специализированный редактор ! |
|  |
| РенггеноФлуоресцент ны£н анализ | Выбрать модуль |
| Физическая химия |
|  |
| 1 1 | | |

Модупи

Специапизированный редактор

СйЩр^нНЬР свойства

Редактировать сущности

Рис. 7.12. Выбор р едактора знаний

раздела, либо добавление нового раздела со своей многоуровневой онтологи е й и знаниями.

Рассмотрим процесс изменения информационных компонентов с использовани ем специализированной оболочки по химии.

Добавление нового раздела состоит в определении м етаонтологии этого разд ела (онтологии уровня 3), модул е й онтологии разд ела (модул е й онтологии уровня 2) и модулей знаний этого раздела. С помощью редактора м етаонтологий инж ен ер знаний задает имя разд ела и выбирает м етаонтологии, термины которой используются в создаваемой (рис. 7.13).

При добавлении нового модуля онтологии уровня 2 инженер знаний зада т названи этого модуля, а такж выбира т ран созданны модули онтологии, т рмины из которых используются в создава мом модул (рис. 7.14).

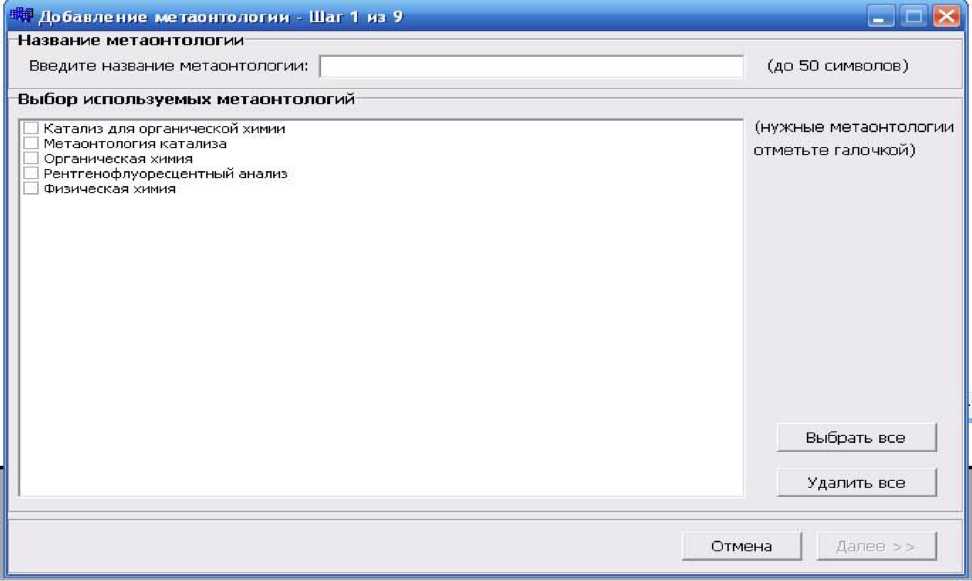


Рис. 7.13. Добавление нового раздела для химии

Изм н ни сущ ствующ й м таонтологии состоит в удал нии и добавлении новых е е терминов (рис. 7.15). Р едактор м етаонтологии отслеживает возможны е ошибки инженера знаний. При удалении онтологии выдается запрос на подтверждение удаления. Изменение существующей онтологии состоит в изм ен ении и удалении е е терминов (рис. 7.16). Редактор онтологий отсл жива т возможны ошибки инж н ра знаний.

1. Т ехнология изм енения состава программных компон ентов

Изм н ни состава программных компон нтов выполня тся сопровождающим программистом, который использу т подсист му сопровождения специализированной оболочки (рис. 7.17).

Сопровождающий программист может добавлять/ редактировать/ удалять информацию о:

1. сист мах ввода/вывода знач ний н стандартных в личин (вкладка ”Р е дакторы для н е стандартных в еличин”);

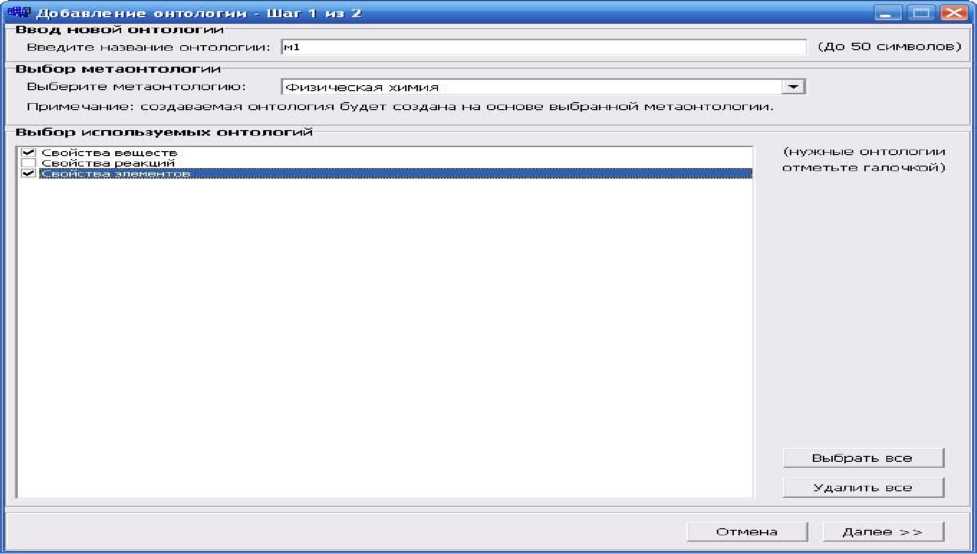


Рис. 7.14. Добавление нового модуля онтологии уровня 2 для химии

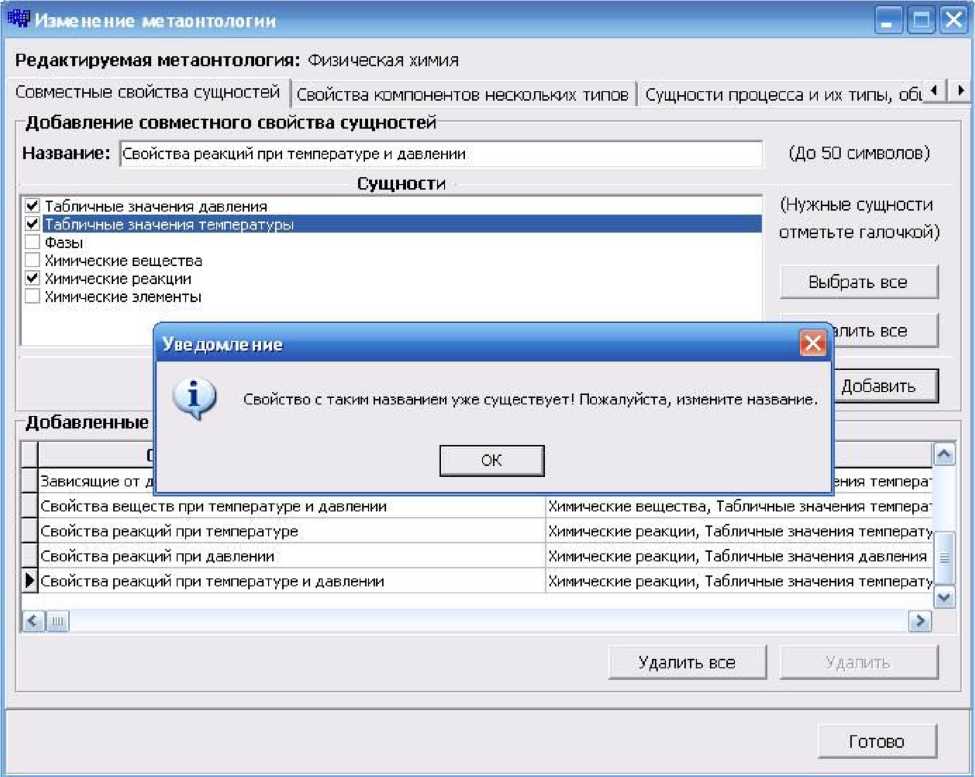


Рис. 7.15. Р е дактировани е сущ е ствующ е й онтологии уровня 3 для химии

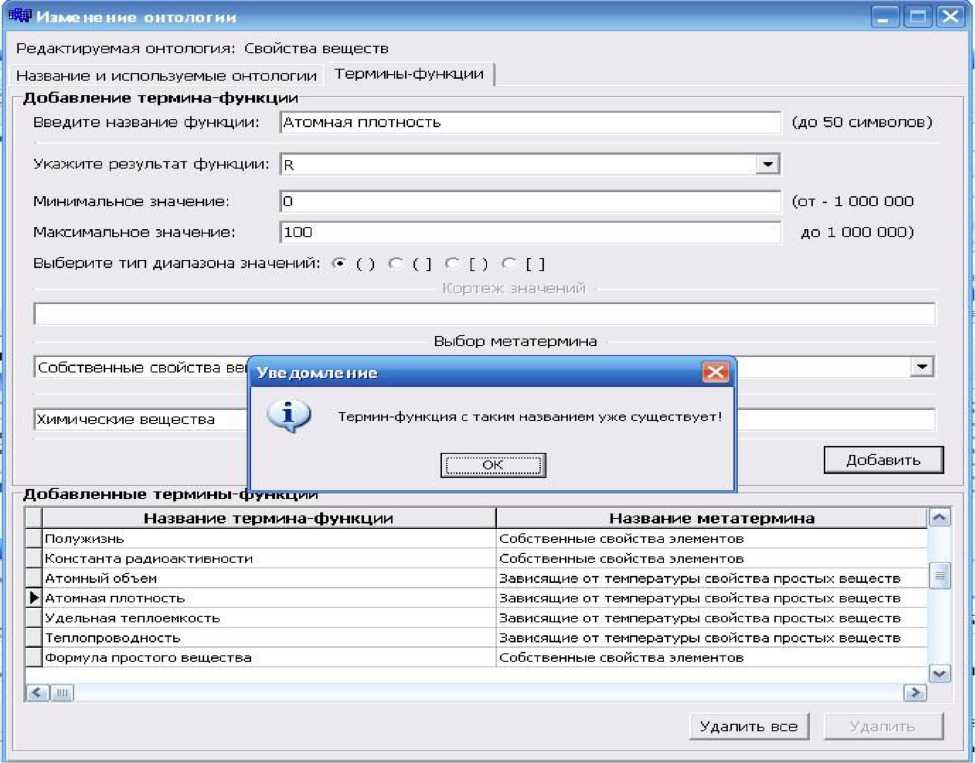


Рис. 7.16. Изм е н е ни е онтологии уровня 2 для химии

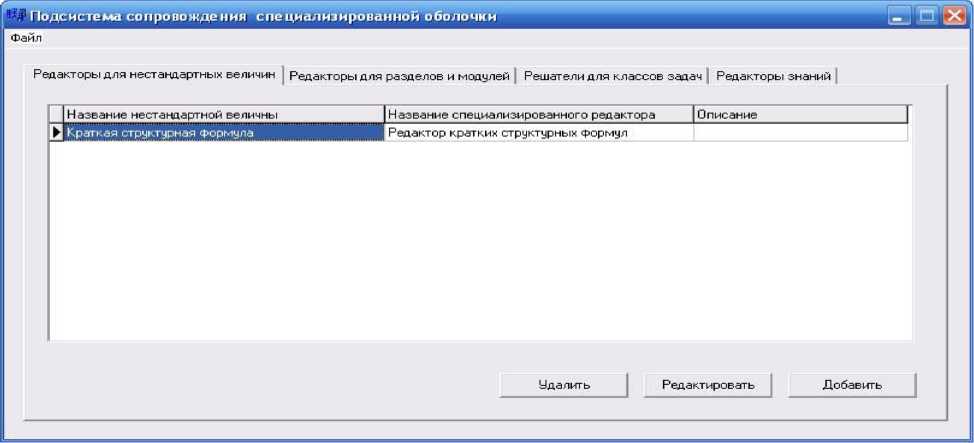


Рис. 7.17. Интерф ейс подсистемы сопровождения сп ециализированной оболочки для химии

1. редакторах для разделов и модулей (вкладка "Редакторы для разд елов и модул е й")
2. р е шат елях для классов задач (вкладка "Р е шатели для классов задач")
3. р е дакторах знаний (вкладка "Р е дакторы знаний")

В соотв тствии с м тодами р ализации подсист м подд ржки библиот к (см. п. 6.3.1.), каталоги всех библиотек хранятся в таблицах базы данных. Сопровождающий программист имеет возможность создать резервную копию сод ржимого каталогов библиот к программных компон нтов или восстановить информацию из р з рвной копии.

Для создания р з рвной копии (и восстановл ния из н ) н обходимо выбрать соотв тствующий пункт м ню прилож ния и в открывш мся диалоговом окне задать м е сто для хран ения копии (рис. 7.18).

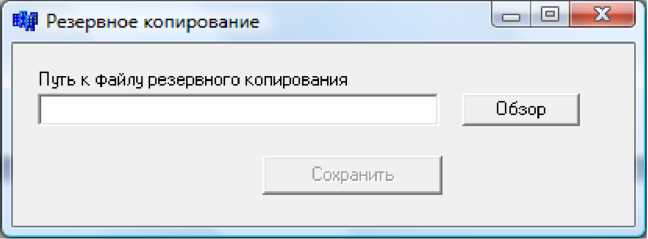


Рис. 7.18. Создани е р е з ервной копии

Для задания папки для хранения копии и им ени файла используются стандартные компоненты операционной системы.

Далее рассмотрим подробнее процесс добавления/ редактирования/ удаления информации о пер ечисленных программных компонентах.

Для того чтобы добавить информацию о сист м ввода/вывода знач ний нестандартной величины, необходимо выбрать вкладку "Редакторы нестандартных величин" и нажать кнопку "Добавить". При добавлении информации в открывш е мся диалоговом окн е (рис. 7.20) сопровождающий программист указывает название нестандартной величины, название добавля мой подсист мы, сод ржат льный комм нтарий, позволяющий

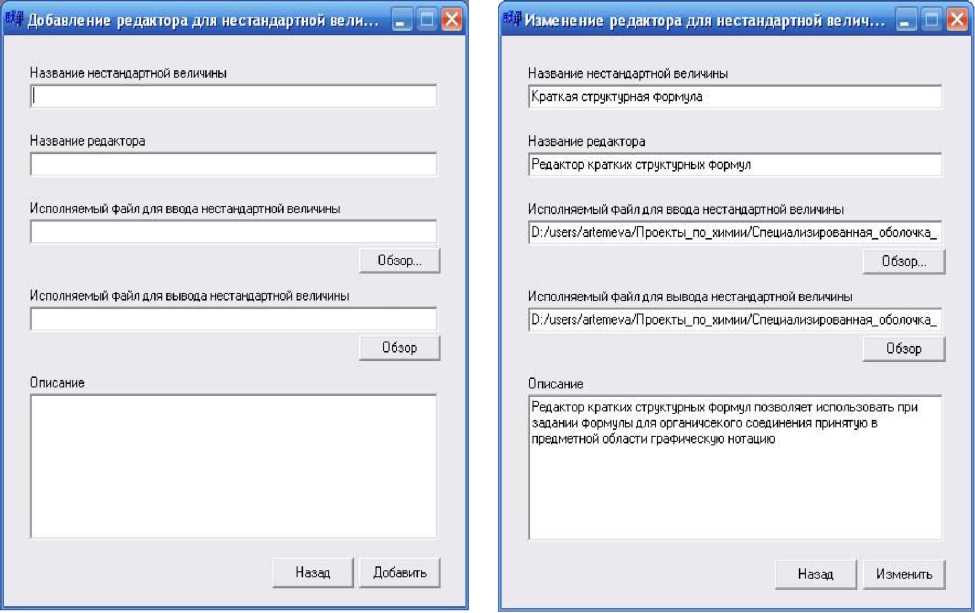


Рис. 7.20. Добавление новой Рис. 7.21. Изм енение информации о

н естандартной величины системах ввода/вывода значений

не стандартных величин понять назначени е добавляемой подсистемы, а также задает информацию о программах для ввода/вывода значений н естандартной в еличины.

Для задания информации о м е стоположении программ для ввода/вывода значений нестандартной величины требуется воспользоваться кнопкой "Обзор".

Для того чтобы изм нить информацию о сист мах ввода/вывода знач ний н стандартной в личины н обходимо выбрать нужную запись в таблиц е, отображае мой на вкладк е "Р е дакторы для н е стандартных величин", и нажать кнопку "Р е дактировать".

Вс е поля заполняются также как и в случае добавления информации о редакторе нестандартных величин (рис. 7.21). После нажатия на кнопку "Изм е нить" информация буд ет изм ен е на в каталог е соотв етствующ е й библиотеки.

Для удаления не обходимо выбрать нужную запись в таблице и нажать кнопку "Удалить” на вкладке "Редакторы для нестандартной величины”. Система запросит подтверждение удал ение.

Для добавления информации о редакторе знаний, специализированных для некоторого раздела предметной области, необходимо нажать кнопку "Добавить” на вкладке "Редакторы для разделов и модулей”. Сопровождающий программист выбирает модуль метаонтологии или онтологии, задает информацию о местоположении редактора (рис. 7.22), а такж сод ржат льный комм нтарий.

Файл

Редакторы для нестандартных величин Редакторы для разделов и модулей I Решатели для классов задач | Редакторы знаний j

[Название раздела или модуля ]Пугь к исполняемому Файлу [Описание |

► [ D/users/artemeva^npoeKTbi по химии/Спеиналнзнрованная оболочка Репактоо знаний для ре

Удалить Редактировать Добавить

Рис. 7.22. Задание и изм енение информации о р едактор е знаний

Если сопровождающий программист выбрал модуль онтологии, то этот модуль управляет процессом редактирования знаний. В случае, когда добавля мый р дактор мож т использоваться при р дактировании знаний под управл ни м н скольких онтологий, сопровождающий программист повторя ет указанны е д е йствия для каждого модуля онтологии. Если сопровождающий программист выбрал модуль м таонтологии, то добавляемый редактор "знает” метаонтологию раздела и позволяет редактировать знания данного раздела.

Для изм н ния информации о р дактор для разд лов и модул й н обходимо выбрать нужную запись в таблиц и нажать кнопку "Редактировать” на вкладке "Редакторы для разделов и модулей”. Для удаления информации необходимо выбрать нужную запись в таблице и нажать кнопку "Удалить” на вкладке "Редакторы для разделов и модулей” и подтвердить удаление.

Для добавления информации о решателе для класса задач необходимо нажать кнопку "Добавить” на вкладке "Решатели для классов задач” (рис. 7.23). Сопровождающий программист выбирает модуль метаонтологии или

C:\Users\IL\AppData\Local\Temp\FineReader11\media\image45.jpeg

Файл

Редакторы для нестандартных величин j Редакторы для разделов и модулей Решатели для классов задач Редакторы знаний

|Название раздела |Название класса задач | Путь к исполняемому файлу

Анализ спектра 0:/и$ег$/аг1ете7а/Проекты\_по\_химии/Специализирован

Ренггенофлуоресцентный анализ Построитель спектра 0:/и$ег$/аКетеуа/Проекты\_по\_химии/Специализирован

Органическая химия Поиск путей синтеза соединений 0:/и$ег$/аг1етеуа/Проекты\_по\_химии/Специализирован

**В**

*Ш Ш*

Удалить Редактировать Добавить

Рис. 7.23. Задание и изменение информации о решателе задач онтологии, в терминах которого могут быть даны постановки данного класса, задает название класса задач, информацию о местоположении решателя, а такж сод ржат льный комм нтарий.

В случае, когда добавляемый решатель может использоваться при р ш нии задач, постановка которых зада тся с использовани м т рминов разных онтологий, сопровождающий программист повторя т указанны д е йствия для каждого модуля онтологии. Если сопровождающий программист выбрал модуль метаонтологии, то добавляемый решатель ”знает” метаонтологию раздела и позволяет формировать задачи с использовани м т рминов вс х модул й онтологии, созданных на основ модуля м етаонтологии.

Если сопровождающий программист записывает систему для автоматического построения решателей задач, то он выбирает модуль м етаонтологии. Для изм е н е ния (удал ения) информации о р е шател е задач н е обходимо выбрать нужную запись в таблиц е и нажать кнопку "Р едактировать" ("Удалить”) на вкладке "Р ешатели для классов задач”.

Для выбора решателей задач предназначена подсистема вызова прилож ений (рис. 7.24).

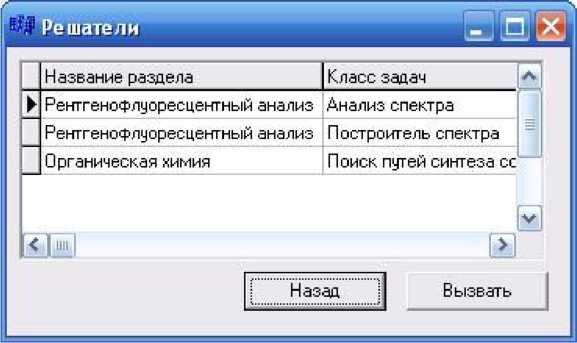


Рис. 7.24. Подсистема вызова приложений

Пользователь должен выбрать тр ебуемый ему р ешатель и нажать кнопку "Вызвать".

1. Использование методов анализа предм етных областей, создания сп циализированных оболоч к и т хнологии их сопровожд ния в отличных от химии областях

Разработанны в дисс ртационной работ м тоды анализа пр дм тных областей и создания сп ециализированных оболочек использовалась в теч ение 8 лет в Дальневосточном государственном университете (ДВГУ) (г.Владивосток) и Институте технологии и бизне са (г. Находка) при чтении курсов л е кций по дисциплинам "Систе мы искусстве нного инт елл е кта", "Диалогово е р е дактировани е баз знаний и эксп ертные систе мы", "Компьют ерная обработка знаний". При обуч е нии студе нты выполняли практические работы. Целью практических работ является освоение метода анализа пр дм тных област й и изуч ни м тодов создания специализированных оболочек для различных типов предм етных областей.

Типы пр е дм етных област е й совпадают с классами р е шае мых задач, для которых традиционно разрабатываются сист мы, основанны на знаниях (классификация, диагностика, мониторинг, инт рпр тация, р монт, про ктировани , планировани , прогнозировани , управл ни и комбинированные) [71].

При выполн е нии заданий студе нты играли сл едующи е роли [4]:

* аналитика;
* эксперта;
* инж н ра знаний;
* разработчика системы, основанной на знаниях.

Исполняя роль эксп рта, студ нты выбирали пр дм тную область, относящуюся к некоторому классу предметных областей, и обосновывали, поч му эта область относится к данному классу. Исполняя роль аналитика, студ нты выполняли анализ данной области с соотв тствии с м тодом анализа, описанном в глав е 4 [4, 93]. Прич е м роли эксп ерта и аналитика исполняются для н е скольких классов предм етных областе й. Такая сх е ма выполн ния заданий позволя т студ нтам лучш понять разницу м жду классами пр дм тных област й (и задач).

При выполн нии анализа пр дм тных област й использовались свойства класса пр е дм етных област ей. Прим еры онтологий уровня 3 для разных классов пр дм тных област й приводились на занятиях (таким прим ром явля ется упрощ е нная онтология м едицинской диагностики [86-87]). При выполн нии задания, в случа н обходимости, онтология уровня 3 упрощалась.

При исполн нии роли разработчика сист мы, основанной на знаниях, студ нты выполняли задания "Разработка сп цификации задач в т рминах онтологии", "Разработка м тодов р ш ния задач", "Разработка про кта сист е мы, основанной на знаниях, и е е р е ализация". Посл едн е е задани е предполагает создание компьютерной программы для решения какого-либо из классов задач в той пр дм тной области, которую выбрал студ нт. Сист е ма, основанная на знаниях, им е ет сл е дуют и е компон енты: р е дактор онтологии уровня 2, р дактор знаний, который позволя т р дактировать знания в т рминах изм нивш йся онтологии уровня 2, сист му для р ш ния прикладных задач, сист му ввода исходных данных (в т рминах онтологии уровня 2) и систему объясн ения.

При создании решателя задач использовались как системы программирования, основанны на алгоритмич ских языках, так и сист мы, основанны е на правилах.

Методы анализа пр едметных областей и создания сп ециализированных оболочек использовались также при выполнении курсовых и дипломных работ студентами базовой кафедры программного обеспечения ЭВМ ДВГУ при Институт е автоматики и проц е ссов управл е ния ДВО РАН [80, 107].

В рамках выполн ния дипломной работы была разработана сп циализированная оболочка сист мы, основанной на знаниях, для пр е дм етной области ”Косм етология”. Данная оболочка содержит р е дактор онтологий, р дактор знаний, сист му подбора косм тики по заданным характеристикам человека. При задании исходных данных задач использу ется развивае мый сп е циализированный графич е ский р е дактор. Развити р дактора об сп чива тся использовани м подсист мой формирования интерфейсов, основанных на графиче ских сц енах, входящей в состав инструм нтального компл кса для разработки пользоват льского интерф е йса [77]. Систе ма им е ет практич е ское использовани е.

Методы анализа предм етных областей использовались в научной работе сотрудниками базовой каф едры программного об е сп еч ения ЭВМ ДВГУ при ИАПУ ДВО РАН и отдела интеллектуальных систем Института автоматики и проц е ссов управл е ния ДВО РАН [32-36].

1. Обсужд ени е

Как сл ду т из описанного в данной глав и пр дыдущих, проц сс создания сп циализированной оболочки сист мы, основанной на знаниях, для сложно-структурированной пр дм тной области состоит из сл дующих этапов.

1. Анализ предм етной области, разработка ее многоуровневой модели.
2. Разработка сп циализированных р дакторов многоуровн вой онтологий и знаний и подсист мы сопровожд ния сп циализированной оболочки.
3. Разработка подсист м для р ш ния прикладных задач либо сист мы их автоматиче ского постро ения.
4. Разработка систем графического ввода/вывода значений н стандартных в личин.
5. Разработка р дакторов знаний, сп циализированных для н которых разд лов сложно-структурированной области

Самым трудо е мким явля ется п ервый этап. Ускор е ни е проц е сса анализа возможно, сли сущ ству т онтология высокого уровня, которую можно использовать при анализ е м етодом "сверху вниз". Если тр ебу ется, эта онтология мож т быть расшир на.

Разработка сп циализированных р дакторов многоуровн вой онтологии и знаний мож т быть ускор на использовани м ср дств автоматизации этого проц е сса [96-97]. Создани е подсисте мы сопровожд е ния сп ециализированной оболочки мож т быть выполн но с использовани м м тодов, описанных в глав 6. Наличи р дакторов знаний, сп циализированных для н которых разд лов сложно-структурированной области, позволя т получить р дактор, имеющий боле е удобный для эксп ерта интерф ейс.

Разработка сист м графич ского ввода/вывода знач ний н стандартных в личин мож т быть ускор на использовани м инструм нтального компл кса для разработки пользоват льского инт рф йса, основанного на графич ских сц е нах [77].

Использование систем, основанных на правилах, упрощает процесс создания решателей прикладных задач. Их разработка сводится к построению правил, используемых при р ешении. Если тр ебуются решатели задач, имеющие лучшие характеристики сложности, чем получаемые при использовании правил, тогда они разрабатываются с использовани м алгоритмических языков. Описанная в данной главе технология позволяет легко зам енять и добавлять любо е множе ство решателей для задач одного и того ж класса.

Возможность добавления любого количе ства р ешателей задач для задач одного или разных классов позволя т при создании р шат л й использовать такж и разны сист мы, основанны на правилах, р ализующи разны сх мы проц сса логич ского вывода, ч го н позволяют сущ ствующи оболочки [251].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В диссертационной работе на основе проведенных автором иссл дований разработаны т ор тич ски полож ния и получ но практическое решение проблемы создания расширяемых сп циализированных оболоч к сист м, основанных на знаниях, для сложно­структурированных предметных областей. В рамках указанной проблемы получ е ны сл е дующи е основные те оретич е ски е и практич е ски е р е зультаты.

1. Опр д л н класс сложно-структурированных пр дм тных област й, в которых существуют разделы и подразделы, описываемые в разных, но похожих системах понятий; раздел и подраздел сложно-структурированной области явля тся пр дм тной областью, в которой происходит сп е цифич е ская проф е ссиональная д еят ельность, характ еризующаяся множеством прикладных задач. Выделены существенные свойства сложно­структурированных пр дм тных област й и их онтологий. Опр д л ны свойства их многоуровн вых мод л й. Сформулированы тр бования к языку для пр дставл ния мод л й сложно-структурированных пр дм тных областей, среди которых основными являются расширяемость набора мат матич ских оп раций и наличи модульности.
2. Разработан класс многоуровн вых н обогащ нных сист м логич е ских соотнош е ний (НСЛС). Опр е дел е н п ер еход от НСЛС уровня m к НСЛС уровня m-1 поср едством задания обогащения СЛС. Предложена интерпретация СЛС как моделей сложно-структурированных предметных областе й. Разработан класс многосортных языков прикладной логики для пр дставл ния многоуровн вых мод л й сложно-структурированных пр дм тных област й. Вс языки данного класса им ют общ ядро, каждый характеризуется своим набором используемых расширений. Языки подд рживают пр дставл ни модульных мод л й.
3. Разработаны методы ”снизу вверх” и ”сверху вниз” анализа сложно-структурированных предметных областей; метод анализа ”снизу вверх” предназначен для обобщения одноуровневых онтологий разделов сложно-структурированной предметной области до многоуровневых и получ е ния онтологии в ерхн его уровня, опр е д еляющ е й сх ему анализа ”св ерху вниз” для новых разд лов данной области, при котором онтологии новых разд лов пр дставляются как конкр тизации онтологии в рхн го уровня.
4. Разработана четырехуровневая модель сложно­

структурированной области ”Химия”. Ч етвертый урове нь представля ет собой мод ель м етаонтологии химии. Тр етий уров е нь сод ержит мод ели

м таонтологий физич ской и органич ской химии, а такж р нтг но- флуор сц нтного анализа. Разработаны модульны мод ли онтологий физич ской и органич ской химии, а такж р нтг но-флуор сц нтного

анализа.

1. Разработаны требования и общая архитектура расширяемых

сп циализированных оболоч к сист м, основанных на знаниях, для сложно­структурированных пр дм тных област й. Оболочка состоит из р дакторов информационных компонентов, которыми являются многоуровневая онтология и знания, сист м для р ш ния разных классов задач и подсист мы сопровожд ния. Р дакторы информационных компон нтов и сист мы для р ш ния классов задач должны позволять использовани принятой в пр е дм етной области графич е ской нотации при задании знаний, исходных данных задач и представлении результатов решения. Подсистема сопровожд ния должна позволять добавл ни подсист м подд ржки графич ской нотации, сист м для р ш ния новых классов задач, в том числ сист м автоматич ского формирования р шат л й задач.

Сп циализированная оболочка должна позволять использовани сист м, основанных на правилах, при создании р шат л й задач.

1. Разработаны сп циализированны оболочки сист м, основанных

на знаниях, для физич ской и органич ской химии, для разд ла р нтг но- флуор сц нтного анализа, а такж сп циализированная оболочка, инт грирующая онтологии, знания и программны сист мы указанных разделов химии. Информационными компонентами последней оболочки являются онтологии и знания разных разд лов химии, а программными - подсист е мы других оболоч е к.

Специализированная оболочка СОЗ для физической химии использовалась в лаборатории фторидных материалов Института химии ДВО РАН. Специализированная оболочка используется в лаборатории ядерно- химиче ских м етодов анализа Института химии ДВО РАН. В настояще е вр емя сп циализированная оболочка, инт грирующая онтологии, знания и программны сист мы разных разд лов химии, использу тся при создании СОЗ для раздела катализ.

1. Разработана т хнология создания и сопровожд ния информационных компон нтов и состава программных компон нтов. Технология использована при создании сист е м, основанных на знаниях, для разных разд лов химии, а такж сист мы, основанной на знаниях, интегрирующей информационные и программны е ресурсы разных разделов химии.

Методы анализа сложно-структурированных предметных областей, р ализации сп циализированных оболоч к для них и т хнология использованы в учебном процессе Института математики и компьютерных наук Дальневосточного государственного университета, а также Института т хнологии и бизн са при выполн нии курсовых и дипломных работ и при чтении лекций по дисциплинам "Системы искусственного интеллекта" и "Компьют ерная обработка знаний".

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Андр е ева О.А., Боровикова О.И, Булгаков С.В., Загорулько Ю.А., Сидорова Е.А., Циркин Б.Г., Холюшкин Ю.П. Археологический портал знаний: сод ержат ельный доступ к знаниям и информационным р е сурсам по арх еологии // Де сятая нац. конф. по искусственному интеллекту с м еждунар. участи е м, Обнинск, 25-28 с ентября 2006: сб. тр. в 3-х томах. Москва: Физматлит. 2006. Т.3. С. 832-840.
2. Агафонов В.Н. Типы и абстракция данных в языках программирования (обзор) // Данны е в языках программирования. Сб. статей / под р ед. В.Н. Агафонова. М.: Мир.- 1982.- С.265-327
3. Арт емье ва И.Л. Разработка р е шат ел ей задач с использовани е м математических моделей онтологий предметных областей. // Юбилейный сборник / под общ. ред. В.П.Мясникова. - Владивосток: ИАПУ ДВО РАН, 2001, с. 285-292. - ISSN 5 7442-1288-4.
4. Артемьева И.Л. Системы искусственного интеллекта. Методические указания по выполн е нию самостоятельных работ для студ ентов. Находка: Институт т ехнологии и бизн е са, 2003. - 46с.
5. Артемьева И.Л. Разработка решателей прикладных задач на основе н епримитивных онтологий // Д е вятая нац. конф. по искусств е нному интеллекту с междунар. участием, Тверь, 28 сентября - 2 октября 2004: сб. тр. в 3-х томах. Москва: Физматлит. 2004. - Т.1. - С. 28-36.
6. Артемьева И.Л. Многоуровневые математические модели пр едм етных областей // Искусственный интеллект.- 2006.- Т.4.- С. 85-94.
7. Артемьева И.Л. Многоуровневые модели предметных областей и м етоды их разработки // Де сятая нац. конф. по искусственному интелл екту с м еждунар. участием, Обнинск, 25-28 с ентября 2006: сб. тр. в 3-х томах. М.: Физматлит, 2006. - Т.1. - С. 44-51. - ISBN 5-9221-0757-7.
8. Артемьева И.Л. Многоуровневые модели предметных областей // Межд. научн.-техн. конф. ''Искусственный интеллект. Интеллектуальные и многопроцесорные системы", Кацивели, 24-29 сентября 2006: сб. тр. Таганрог: Изд. ТРТУ, 2006. - Т.2. - С. 197-199. - ISBN 5-8327-0180-1.
9. Артемьева И.Л. Метод построения многоуровневых онтологий сложно структурированных предметных областей // Всероссийская конф. с м е жд. участи е м «Знания-Онтологии-Те ории». Новосибирск, 14-16 с е нтября 2007. Новосибирск: Институт математики, 2007. - Т.1. - С. 131-137.
10. Арте мь е ва И.Л. Методы н е доопр е дел е нного вывода в сист е мах продукций // Управляющие системы и машины.- 1991.- № 7.- С. 88-93
11. Артемь ева И.Л. Разработка и иеол едование системы н едоопр еделенного вывода для декларативных продукций. Дис. ... канд. техн. наук: 05.13.11: защищена 25.09.92: утв. 25.12.92 / Артемьева Ирина Л е онидовна. - Владивосток. - 1992.- 190 с.
12. Арте мь е ва И.Л. Интелл ектуальные систе мы для сложно­структурированных пр едм етных областей // Научно-техниче ские в едомости СПбГПУ. - 2008. - № 2. - С.108-114.
13. Арте мь е ва И.Л. Инт е грация онтологий, знаний и программных систем для сложно-структурированной предм етной области // IV м ежд. конф. "Паралл ельны е вычисл е ния и задачи управл е ния", Москва, 27-29 октября 2008: сб. тр. [Электронный р е сурс]. М.: ИПУ РАН, 2008. - С. 1161-1171. - ISBN 978-5-91450-016-7.
14. Арте мь е ва И.Л. Сп ециализированны е оболочки

интеллектуальных систем для сложно-структурированных предметных областей // Одиннадцатая нац. конф. по искусств. интеллекту с междунар. участием, Дубна, 28 с ентября - 3 октября 2008: сб. тр. в 3-х томах. М.: ЛЕНАНД, 2008. - Т.1. - С. 95-103.

1. Артемь ева И.Л. Управлени е созданием интеллектуальных систем для сложно-структурированной пр едметной области // Управление созданием и развитием систем, сетей и устройств телекоммуникаций / Под ред. д.эк.н., проф. А.В.Бабкина, д.т.н., проф. В.А.Кежаева: Тр. научн.-пр. конф., СПб.: НОЦ "Перспектива", 2008. - С. 47-50. - ISBN 5-7422-1583-5
2. Артемьева И.Л., Высоцкий В.И., Рештаненко Н.В. Модель онтологии предм етной области (на прим ере органич е ской химии) // Научно- технич еская информация, с ер.2. - 2005. - № 8. - С.19-27.
3. Артемьева И.Л., Высоцкий В.И., Рештаненко Н.В. Описание структурного строения органических соединений в модели онтологии органиче ской химии // НТИ, сер.2.- 2006.- № 2.- С.11-19.
4. Артемь ева И.Л., Высоцкий В.И., Р ештаненко Н.В. Модульная модель онтологии органической химии. Свойства органических соединений // Информатика и системы управления.- № 1.- 2006.- С.121-132.
5. Артемьева И.Л., Высоцкий В.И., Рештаненко Н.В. Описание пространственного расположения атомов, ионного и электронного строения соединений в модели онтологии химии // Информатика и системы управления. - 2007. - № 1. - С. 98-109.
6. Артемьева И.Л., Высоцкий В.И., Рештаненко Н.В. Описание м еханизмов р е акций в модели онтологии химии // Информатика и системы управления. - 2007. - № 1. - С. 109-117.
7. Артемь ева И.Л., Гаврилова Т.Л., Грибова В.В. и др.

Мультидисциплинарная система управления информационными ресурсами различных уровней общности // Проблемы управления.- 2006.- № 4.-С. 64-68.

1. Артемь ева И.Л., Гаврилова Т.Л., Клещев А.С. Модели

предметных областей с атомарными объектами. // НТИ.-1995.-№ 12. - С. 8-17.

1. Артемь ева И.Л., Гаврилова Т.Л., Кл ещев А.С. Адаптация

логических моделей к сложным предметным областям. Препр. Владивосток: ИАПУ ДВО РАН, 1995. - 30 с.

1. Артемь ева И.Л., Гаврилова Т. Л., Клещев А.С. Системы

логиче ских соотношений с атомарными объектами. // НТИ, с ер. 2.- 1996.- №

1. - С. 11-18.
2. Артемь ева И.Л., Гаврилова Т.Л., Клещев А.С. Примитивны е системы логических соотношений с функциональными и предикатными н еизв е стными // НТИ, с ер. 2.- 1996.- № 3. -С. 17.
3. Артемь ева И.Л., Гаврилова Т.Л., Клещев А.С. Использование логич е ских мод ел е й сложных пр е дм етных областе й при р е ше нии задач // Ве стник ДВО РАН.- 1996.- № 4.- С. 14-22.
4. Артемь ева И.Л., Гаврилова Т.Л., Клещев А.С. Примитивны е системы логико-векторных соотношений // НТИ, сер. 2.- 1996.- № 2. - С. 7-12.
5. Артемь ева И.Л., Гаврилова Т.Л., Клещев А.С., Системы

логических соотношений с параметрами // НТИ, сер. 2.- 1997.- № 7.- С. 19-23.

1. Артемь ева И.Л., Гаврилова Т.Л., Клещев А.С., Логиче ские модели второго порядка для предм етных областей // НТИ, сер.2.- 1997.- № 6.- С.14-30.
2. Артемь ева И.Л., Гаврилова Т. Л., Клещев А.С. Системы

логических соотношений как модели предметных областей // Доклады Академии наук.- 1998.- Т.359.- №1.- С.27-28.

1. Артемь ева И.Л., Горбач ев С.Б., Кл ещев А.С. и др.

Инструм ентальный комплекс для р е ализации языков пр едставления знаний // Программировани е.- 1983.- № 4.- С.78-89.

1. Артемьева И.Л., Князева М.А., Купневич О.А. Онтология оптимизации программ // Искусстве нный интелл е кт.- № 3.- 2000.- С. 17-24.
2. Артемьева И.Л., Князева М.А., Купневич О.А. Модель онтологии пр е дм етной области ''Оптимизация посл е доват ельных программ”. Часть 1. Термины для описания объ е кта оптимизации // НТИ, с ер. 2.- 2002.- № 12.- С. 23-28.
3. Артемьева И.Л., Князева М.А., Купневич О.А. Использование

модели онтологии последовательных программ при разработке

интелл е ктуальной моделирующ е й систе мы // Восьмая нац. конф. по искусственному интеллекту с м еждународным участием, Коломна, 7-12 октября: сб. тр. в 3-х томах. М.: Физматлит, 2002. - Т.2. - С. 585-592.

1. Артемь ева И.Л., Княз ева М.А., Купн евич О.А. Модель онтологии предметной области «Оптимизация последовательных программ». Ч.2.

Термины для описания проце сса оптимизации // НТИ, с ер.2. - 2003.- №1.- С.22-29.

1. Артемьева И.Л., Князева М.А., Купневич О.А Модель онтологии пр е дм етной области «Оптимизация посл е доват ельных программ». Ч.3. Примеры описания некоторых оптимизирующих преобразований // НТИ, сер.2. - 2003. - № 2. - С.27-34.
2. Артемьева И.Л., Крылов Д.А. Автоматическое построение интеллектуальных решателей прикладных задач по модели онтологии для некоторых классов предметных областей // Первая международная конф ер е нция "Систе мный анализ и информационные т ехнологии”, Пер е славль-Зале сский 12-16 с ентября 2005: сб. тр. в 2-х томах: М.: КомКнига, 2005. - Т.1. - С.145-148. - ISBN 5-484-00223-0.
3. Арт мь ва И.Л., Крылов Д.А. Конц пция оболочки для

разработки р шат л й задач для пр дм тных област й с н примитивными онтологиями // Межд. научн.-техн. конф. ''Интеллектуальные и

многопроц ссорны сист мы”, 26 с нтября - 1 октября 2005 г.,

Дивноморско е: сб. тр. Таганрог: Изд. ТРТУ, 2005. - Т.2. - С.325-328. - ISBN 5-8327-0216-6.

1. Артемьева И.Л., Крылов Д.А. Концепция оболочки для

разработки решателей задач на основе моделей онтологий // Искусств енный интеллект.- 2005.- Т.3.- С. 109-116.

1. Артемьева И.Л., Мирошниченко Н.Л. Модель онтологии

рентгенофлуоресцентного анализа // Информатика и системы управления.-

1. - № 2.- С.78-88.
2. Артемь ева И.Л., Мирошниченко Н.Л, Старовойтов И.В.

Интеллектуальная система для рентгенофлуоресцентного анализа // Информатика и системы управления.- 2006.- № 2.- С.54-61.

1. Арте мь е ва И. Л., Р е штан е нко Н.В. Модульная мод ель онтологии органической химии // Информатика и системы управления.- 2004.- № 2.- С.98-108.
2. Артемьева И.Л., Рештаненко Н.В. Концепция

специализированного компьютерного банка знаний предметной области "Химия" // Межд. научн.-техн. конф. "Искусственный интеллект.

Инт лл ктуальны и многопроц сорны сист мы", Кацив ли, 20-25 с нтября 2004: сб.тр.: Таганрог: Изд. ТРТУ, 2004. - Т.2. - С. 197-199. -

ISBN 5-8327-0180-1.

1. Артемьева И.Л., Рештаненко Н.В. Специализированный

компьютерный банк знаний предметной области "Химия" // Искусственный интеллект.- 2004.- Т. 1.- С. 235-244.

1. Артемьева И.Л., Рештаненко Н.В. Специализированный

компьютерный банк знаний по органической химии и его разработка на основ е онтологии // Искусств е нный инт елл ект.- 2006.- Т.4, 2006.- С. 95-106.

1. Артемьева И.Л., Рештаненко Н.В. Разработка

сп циализированного банка знаний по органич ской химии на основ онтологии // Межд. научн.-техн. конф. "Искусственный интеллект.

Инт лл ктуальны и многопроц сорны сист мы", Кацив ли, 25 - 30 с ентября 2006: сб.тр. Таганрог: Изд. ТРТУ, 2006. - Т.1. - С. 72-76. - ISBN 5­8327-0255-7.

1. Арте мь е ва И. Л., Р е штан е нко Н.В. Разработка инт елл е ктуальной сист мы по органич ской химии на основ мод ли онтологии // Научная сессия МИФИ-2007, сб. научн. тр. в 17 томах, т. 3. Интеллектуальные системы и технологии. М.: МИФИ. 2007.- С. 75-76. - ISBN 5-7262-0710-6.
2. Артемьева И.Л., Рештаненко Н.В. Специализированный тр хуровн вый р дактор м таонтологий, онтологий и знаний для компьют ерного банка знаний по химии // Искусственный интелл е кт.- 2007.- № 3- С. 40-47.
3. Арте мь е ва И. Л., Р е штан е нко Н.В. Разработка инт елл е ктуальных

Интернет-систем на основе многоуровн евых онтологий // Вторая межд. конф. "Сист емный анализ и информационны е т ехнологии", Обнинск, 10-14 с ентября: сб. тр. в 2- томах. М.: Издательство ЛКИ, 2007. - Т1. - С.96-99. - ISBN 978-5-382-00437-2.

1. Артемьева И.Л., Рештаненко Н.В. Интеллектуальная система, основанная на многоуровн вой онтологии химии // Программны продукты и системы. - 2008. - № 1. - С. 84-87.
2. Артемь ева И.Л., Р ештаненко Н.В., Цветников В.А. Описание свойств р акций в мод ли онтологии химии // Информатика и сист мы управления.- 2006.- № 1.- С.132-143.
3. Арт мь ва И.Л., Р штан нко Н.В., Цв тников В.А.

Многоуровн е вая онтология химии // Вс ероссийская конф. с м ежд. участи е м «Знания-Онтологии-Т е ории». Новосибирск, 14-16 с е нтября: сб.тр.

Новосибирск: Институт математики, 2007. - Т.1. С. 138-146.- ISSN 0568- 661X.

1. Артемьева И.Л., Рештаненко Н.В., Цветников В.А. Описание физико-химич ских проц ссов в мод ли онтологии химии // Информатика и системы управления. - 2008. - № 1 - С. 121-131.
2. Арт мь ва И.Л., Спивачук Н.А. Мод ль онтологии пр дм тной области «Построение характеристического рентгеновского спектра» // Информатика и систе мы управл е ния.- 2007.- № 2. - С. 120-131.
3. Артемьева И.Л., Суров В.В. Принципы организации библиотеки м етодов р ешения задач в экспертных системах // Ше стая Международная конф. ”Диалог-Р ешение ”: сб. научн. тр., Ялта 1997. - Т.1. - С.116-122.
4. Артемьева И.Л., Тютюнник М.Б. Модель модульного языка д кларативных конфлюэнтных продукций с огранич нными кванторами // Искусственный интеллект. - 2007. - № 3. - С. 374-382.
5. Артемьева И.Л., Тютюнник М.Б. Методы управления распаралл еливани ем логич еского вывода системы конфлюэнтных продукций // Научно-техниче ские в едомости СПбГПУ. - 2008. - № 3.-С.99-103.
6. Артемьева И.Л., Тютюнник М.Б. Модульная система

конфлюэнтных продукций для многопроц ссорной вычислит льной сист мы // Программны е продукты и системы.- 2007.- № 2.- С. 38-39.

1. Артемьева И.Л., Цветников В.А. Фрагмент онтологии

физической химии и его модель // Исследовано в России [Электронный ресурс]: многопр едм етн. научн. журн. / Моск.физ.-техн.ин-т. -

Долгопрудный: МФТИ. 2002. № 5. С.454-474. -

<http://zhurnal.ape.relarn.ru/articles/2002/042.pdf> .

1. Арте мь е ва И. Л., Цв етников В.А. Методы р е ализации

интелл е ктуальной обучающ е й программной сист е мы физич е ской химии. Препр., Владивосток: ИАПУ ДВО РАН, 2002. - 55с.

1. Бабаев И.О., Новиков Ф.А., Петрушина Т.И. Язык Декарт - входной язык систе мы СПОРА // Прикладная информатика. Вып.1.- 1981. - С. 35-73.
2. Байдун В.В., Бунин А.И. Средства представления и обработки знаний в системе FRL/PS // Всесоюзн. конф. по искусственному интеллекту: тез.докл. 1990. - Т.1. - С. 66-71.
3. Бездушный А.Н., Гаврилова Э.А, С ер ебряков В.А., Шкотин А.В. Место онтологий в единой интегрированной системе РАН. URL: <http://www.benran.ru/Magazin/cgi-bin/Sb_03/pr03.exe7115>
4. Бениаминов Е.М. Базы онтологий, система Ontolingua для работы

с онтологиями: состояни е и п ерсп е ктивы. URL:

http:// synthesis.ipi .ac.ru/ sigmod/ seminar/ s20000525

1. Бениаминов Е. М., Болдина Д. М. Система представления знаний Ontolingua - принципы и п ерсп е ктивы. URL: <http://beniaminov.rsuh.ru/Stanford.pdf>
2. Боровикова О.И., Загорулько Ю.А., Загорулько Г.Ю., Кононенко И.С. Подход к постро ению портала знаний по компьютерной лингвистике // Вторая м ежд. конф. ''Системный анализ и информационны е технологии”. Обнинск, 10-14 сентября: сб. тр. в 2-х томах. М.: Издательство ЛКИ, 2007. - Т.1.- С.126-129. - ISBN 978-5-382-00437-2.
3. Буч Г. Объектно-ориентированное проектирование с примерами прим е н е ния. - М.: Конкорд.- 1992. - 519 с.
4. Виттих В.А., Волхонцев Д.В., Гинзбург А.Н., Караваев М.А., Скобелев П.О., Сурнин О.Л., Шамашов М.А. Распр еделенны е онтологии и их применение в решении задач интеграции данных. URL: <http://www.kg.ru/support/library/regionmanagement/>
5. Гаврилова Т.А. Об одном подходе к онтологиче скому инжинирингу // Новости искусств енного интеллекта.- 2005. - № 3. - С. 25-30.
6. Гаврилова Т.А. Формирование прикладных онтологий. URL: <http://raai.org/resurs/papers/kii-2006>
7. Гаврилова Т.А., Хорошевский В.Ф. Базы знаний интелл е ктуальных систе м. - СПб.: Пит ер, 2001.
8. Галунов В.И., Лобанов Б.М., Загоруйко Н.Г. Синт з и распознавание речи (попытка построения онтологии)/ URL: <http://www.auditech.ru/art1> .htm
9. Гончар А.М., Загорулько Г.Б., Рубан М.Н., Рябков А.Н. Экспертная система поддержки диагностики, профилактики и лечения элементозов на основе коррекции питания // Десятая нац. конф. по искусственному интеллекту с междунар. участием, Обнинск, 25-28 сентября 2006: сб. тр. в 3-х томах. Москва: Физматлит. 2006. - Т.3. - С. 849-857. - ISSN 5-9221-0759-3.
10. Горовой В.А., Гаврилова Т.А. Архитектура программного

компл е кса ОНТОЛИНЖ-KAON// In the Proceedings of the XII-th International

Conference "Knowledge-Dialog-Solution" - KDS 2006, June 20-25, Varna, Bulgaria, Sofia: F0I-C0MMERGE-2006. - PP. 133-1139. - ISBN-10: 954-16­0038-7

1. Грибова В.В., Кл щ в А.С. Управл ни про ктировани м и реализацией пользовательского интерфейса на основ е онтологий // Проблемы управления, 2006. - № 2. -. С. 58-62.
2. Грибова В.В., Клещев А.С. Использование м етодов

искусственного интеллекта для проектирования пользовательского интерф ейса // Информационны е технологии.- 2005. - №8. - С.58-61

1. Грибова В.В., Сова С.Ю. Разработка и автоматиче ская генерация

диалогов, основанных на графических сценах // Вторая межд. конф. ”Сист емный анализ и информационны е т ехнологии”, Обнинск, 10-14

с ентября, 2007: сб. тр. в 2-х томах. М.: Издательство ЛКИ.,2007. - Т.1. - С. 119-122. - ISBN 978-5-382-00437-2.

1. Дулин С.К., Поповидченко В.Г. Использование онтологий для инт грации г оинформационных р сурсов // Научная с ссия МИФИ-2007, сб. научн. тр. в 17 томах, т. 3. Интелл е ктуальны е систе мы и т ехнологии. М.: МИФИ. 2007.- С. 61-62. - ISBN 5-7262-0710-6.
2. Еремеев А.П., Малиновский В.П. Реализация онтологического подхода в обучающей системе для подготовки менеджеров проектов // Девятая нац. конф. по искусственному интеллекту с междунар. участием, Тверь, 28 сентября - 2 октября 2004: сб. тр. в 3-х томах. Москва: Физматлит.
3. - Т.2. - С. 824-832. - ISBN 5-9221-0535-3.
4. Жевурова М.А. Интернет система Spectrum (классификации и ид нтификации химич ских в щ ств при помощи физико-химич ских м етодов исследования) // Открытый Дальневосточный конкурс программных ср е дств студ е нтов, аспирантов и молодых сп е циалистов: сб. т е з. докл. - Владивосток: ИАПУ ДВО РАН. 2004.- С. 10-12.
5. Жожикашвили А.В., Ст е фанюк В. Л. С ети обощ е нных продукций для представления знаний // Девятая нац. конф. по искусственному интеллекту с междунар. участием, Тверь, 28 сентября - 2 октября 2004: сб. тр. в 3-х томах. Москва: Физматлит. 2004. - Т.1. - С. 63-69. - ISBN 5-9221-0535-3.
6. Загорулько Ю.А., Боровикова О.И., Кононенко И.С., Сидорова Е.А. Подход к построению предметной онтологии для портала знаний по компьютерной лингвистике // Компьютерная лингвистика и инт лл ктуальны т хнологии «Диалог 2006», Б касово. 31 мая - 4 июня 2006: сб.тр. - Москва: Изд-во РГГУ, 2006. -С. 148-151.
7. Кл е щ е в А.С. Пробл емно-ори е нтированны е пр е дставл е ния.

Препр. Владивосток: ИАПУ ДВО РАН. - 1985. - 28 с.

1. Кл щ в А.С. Роль м тазнаний при создании эксп ртных сист м. Препр. Владивосток: ИАПУ ДВО РАН. - 1989. - 25 с.
2. Клещев А.С. Использование онтологий в разработке

программного обеспечения. // Всероссийская конф. с межд. участием «Знания-Онтологии-Теории». Новосибирск, 14-16 сентября 2007.

Новосибирск: Институт математики. - Т.1. - 122-130.- ISSN 0568-661X.

1. Клещев А.С., Артемьева И.Л. Необогащенные системы

логиче ских соотношений. Часть 1. // НТИ, с ер. 2.- 2000.- № 7.- С. 18-28.

1. Клещев А.С., Артемьева И.Л. Необогащенные системы

логиче ских соотношений. Часть 2. // НТИ, с ер. 2.- 2000.- № 8.- С. 8-18.

1. Кл щ в А.С., Арт мь ва И.Л. Мат матич ски мод ли онтологий пр едм етных областей. Часть 1. Суще ствующи е подходы к опр еделению понятия «онтология» // НТИ, с ер. 2.- 2001.- № 2.- С. 20-27.
2. Клещев А.С., Артемьева И.Л. Математиче ски е модели онтологий пр едм етных областей. Часть 2. Компоненты модели. // НТИ, с ер. 2.- 2001.- №
3. - С.19-29.
4. Клещев А.С., Артемьева И.Л. Математиче ски е модели онтологий пр е дм етных областе й. Часть 3. Сравн е ни е разных классов мод ел ей онтологий // НТИ, сер. 2.- 2001.- № 4.- С. 10-15.
5. Клещев А.С., Артемьева И.Л. Отношения между онтологиями пр дм тных област й. Часть 1. Онтологии, пр дставляющи одну и ту ж концептуализацию. Упрощени е онтологий // НТИ,с ер.2.- 2002.- № 1.- С. 4-17.
6. Клещев А.С., Артемьева И.Л. Отношения между онтологиями пр дм тных област й. Часть 2. Отнош ния сходства онтологий, композиция онтологий // НТИ, сер. 2.- 2002.- № 2.- С.24-31.
7. Кл е щ е в А.С., Арте мьева И.Л. Мате матич е ски е основы информатики. М тодич ски указания по выполн нию самостоят льных работ для студентов. Находка: Институт технологии и бизне са, 2003.- 50 с.
8. Клещев А.С., Москаленко Ф.М., Черняховская М.Ю. Модель онтологии пр е дм етной области ”Ме дицинская диагностика”. Часть 1. Неформальное описание и определение базовых терминов // НТИ, сер. 2.­
9. - №12. - С.-7.
10. Клещев А.С., Москаленко Ф.М., Черняховская М.Ю. Модель онтологии пр дм тной области ”М дицинская диагностика”. Часть 2. Формально описани причинно-сл дств нных связ й, причин знач ний признаков и причин заболеваний // НТИ, с ер. 2.- 2006.-№1. - С.19-30.
11. Кл е щ е в А. С., Орлов В.А. Компьют ерны е банки знаний. Универсальный подход к р ешению проблемы редактирования информации // Информационны е технологии. - 2006. - №5. - С.25-31.
12. Кл е щ е в А. С., Орлов В.А. Компьютер ны е банки знаний. Мод ель проц сса р дактирования информационного наполн ния // Информационны т ехнологии. - 2006. - №7. - С. 11-16.
13. Кл щ в А.С., Самсонов В.В., Ч рняховская М.Ю. М дицинская экспертная система Консультант-2. Представление знаний. Препр. Владивосток: ДВНЦ АН СССР, 1985. - 44 с.
14. Клещев А.С., Смагин С.В. Процессор класса языков прикладной логики. Способ описания языка. Владивосток: ИАПУ ДВО РАН, 2008. - 44 с.
15. Клещев А.С., Смагин С.В. Процессор класса языков прикладной логики. Метод р е ализации. Владивосток: ИАПУ ДВО РАН, 2008. 28 с.
16. Клещев А.С., Шалф е ева Е.А. Классификация свойств онтологий. Онтологии и их классификации // НТИ, с ер. 2.- 2005. - № 9. - С. 16-22.
17. Клинцов В., Дробязко Г. Управлять поиском, используя знания. URL: <http://www.avicomp.ru/rus/ontos/byte0504.php>
18. Княз е ва М.А. Эксп ертная систе ма, мод елирующая проц е сс оптимизации программ: Дис. ... канд. техн. наук: 05.13.11. Владивосток. - ИАПУ ДВО АН СССР. - 1988.
19. Ковригин О.В., Перфиль ев К.Г. Гибридны е средства пр е дставл е ния знаний в систе м е СПЭИС // Вс е союзная конф. по искусственному интеллекту: тез. докл. 1988.- Т.2. - С. 490-494.
20. Кудрявц е в Д. В. Разработка пробл емно-ори е нтированных онтологий // Десятая нац. конф. по искусственному интеллекту с междунар. участи е м, Обнинск, 25-28 с ентября 2006: сб. тр. в 3-х томах. Москва: Физматлит. 2006. - Т.1. - С. 69-75. - ISSN 5-9221-0757-7.
21. Ланин В., Лядова Л., Чуприна С. Система интеллектуального поиска и автоматич ской каталогизации докум нтов на основ онтологий // In the Proceedings of the XII-th International Conference ”Knowledge-Dialog- Solution” - KDS 2006, June 20-25, Varna, Bulgaria, Sofia: FOI-COMMERGE-
22. - PP. 139-144. - ISBN-10: 954-16-0038-7.
23. Лицис Н.О. Прототип Интерн ет системы классификации органиче ских со единений // Информатика и системы управления.- 2004. - №
24. - С. 109-120.
25. Малиновский В.П. Использовани е онтологич е ского подхода при мод лировании жизн нного цикла знаний в сист м корпоративно памяти организации. Новости искусств енного интелл екта.- 2005. - № 3. - С. 31-41.
26. Мальц е в А.И. Алг ебраич е ски е сист е мы. М.: Наука, гл.р е д.физ.- мат. лит. - 1970. - 392 с.
27. Мендельсон Э. Введение в математиче скую логику. М.: Наука, гл.р ед.физ.-мат. лит. - 1976. - 220 с.
28. Минский М. Фр еймы для пр едставления знаний. М.:Энергия.- 1979.
29. Москал енко Ф.М. Паралл ельный оптимизированный алгоритм м едицинской диагностики // Информатика и системы управления.- 2006.- №
30. - С. 87-98.
31. Непейвода Н.Н. Прикладная логика. 2-е изд., испр., доп. Н.: Сибирское университетское издательство. 2000. - 521 с.
32. Н етавская Е. Конц е птуальные принципы р е ализации и структура инструментария контроля знаний на баз е онтологий // In the Proceedings of the XIII-th International Conference "Knowledge-Dialog-Solution" - KDS 2007, June 18-25, Varna, Bulgaria, Sofia: F0I-C0MMERGE-2007. - PP. 127-133. - ISSN 1313-0087.
33. Осипов Г.С. Приобр етение знаний интеллектуальными

сист е мами. М: Наука. - 1997.

1. Осипов Г.С., Тихомиров И.А, Смирнов И.В. EXACTUS - система интеллектуального метапоиска в сети интернет// Десятая нац. конф. по искусственному интеллекту с междунар. участием, Обнинск, 25-28 сентября 2006: сб. тр. в 3-х томах. Москва: Физматлит. 2006. - Т.3. - С. 858-866. - ISSN 5-9221-0759-3.
2. Перцовский С.Л., Варнина А.С. Разработка интеллектуальной САПР современного сольного танца на основе онтологий // Вестник ДВО РАН. - 2006. -№ 3 (127). -С. 163-169.
3. Прив ез енц ев А.И., Фазлиев А.З. Прикладная онтология для молекулярной спектроскопии // Всероссийская конф. с межд. участием «Знания-Онтологии-Теории». Новосибирск, 14-16 сентября 2007.

Новосибирск: Институт математики. - Т.2. - С. 82-87.- ISSN 0568-661X.

1. Р ештаненко Н.В. Онтологии химии. Обзор литературы. Препр.. Владивосток: ИАПУ ДВО РАН, 2006. - 32 с.
2. Р е штан е нко Н.В. Программные систе мы для р е ш е ния прикладных задач предметной области «Химия» (обзор литературы). Препр. Владивосток: ИАПУ ДВО РАН, 2006. - 52 с.
3. Р ештаненко Н.В. Разработка и исследование методов создания специализированного компьютерного банка знаний для органиче ской химии. Дис. ... канд. техн. наук: 05.13.11: защищена 31.05.07: утв. 9.11.07 / Р ештаненко Наталья Валентиновна. Владивосток. - 2007.- 186 с.
4. Рогушина Ю. В., Гладун А.Я. Онтологии и

мультилингвистич ски т заурусы как основа с мантич ского поиска информационных ресурсов Интернет // In the Proceedings of the XII-th International Conference ”Knowledge-Dialog-Solution” - KDS 2006, June 20-25, Varna, Bulgaria, Sofia: F0I-C0MMERGE-2006. - PP. 115-121. - ISBN-10: 954­16-0038-7.

1. Справочник по искусстве нному инт елл е кту в 3-х т. / Под р е д Попова Э.Ф. и Посп елова Д. А. М.: Радио и связь. - 1990.
2. Статич еские и динамиче ские экспертны е системы / Э.В.Попов, И.Б. Фоминых, И.Б. Кис ель, М. Д. Шапот. - М.: Финансы и статистика.- 1996.
3. Суров В.В. Иссл е довани е задач и м етодов их р е ш ения для одного класса систем логич еских соотношений. Дис. ... канд. физ.-мат. наук: 05.13.11: защищена 11.05.00, утв. 20.10.00. - Владивосток. - 2000.- 200 с.
4. Спивачук Н.А. Интелл е ктуальная программная систе ма для

построения спектров характеристического рентгеновского излучения «SPECTRAMAX» // Открытый Дальневосточный конкурс программных средств студентов, аспирантов и молодых специалистов: сб. тр. -

Владивосток: ИАПУ ДВО РАН. 2008.- С. 55-58.

1. Стандарт онтологич е ского иссл е дования IDEF5. <http://www.idef.com/idef5.html>
2. Стр ельников Ю.Н., Борисов Н.А. Разработка экспертных систем средствами инструментальной оболочки в среде MS Windows. Тверь. ТГТУ. 1997
3. Толковый словарь по искусстве нному интелл е кту / Авторы- составит ели А.Н. Ав еркин, М.Г. Гааз е-Рапопорт, Д. А. Посп елов. М.: Радио и связь, 1992. -256с.
4. Тыугу Э. X. Концептуальное программирование. М.: Наука.- 1984.- 255с.
5. Уотерм ен Д. Руководство по экспертным системам // П ер. с англ. М.:Мир. 1989.
6. Усп енский В.А., С е мёнов А.Л. Те ория алгоритмов: основны е открытия и приложения. - М.: Наука.- 1987. - 288 с.
7. Хейе с-Рот и др. Постро ение экспертных систем // Под редакци ей X е й е с-Рота, Д.Уотерм е на, Д. Л е ната. М.:Мир. 1987.
8. Хорош е вский В.Ф. Управл е ни е про е ктами в инт елл е ктуальной систем е PIES Workbench // Изв. РАН. Т ехниче ская киб ернетика. - 1993. - № 5.

* С.71-98.

1. Хорош е вский В.Ф, PIES- технология и инструм е нтарий PIES Workbench для разработки систе м, основанных на знаниях // Новости искусственного интеллекта. - 1995. - № 2. - С. 7-64.
2. Цветников В. А. Разработка и иссл е довани е м етодов создания компьют рной сист мы инт лл ктуальной подд ржки р ш ния задач физиче ской химии в объем е унив ерситетского курса. Дис. ... канд. техн. наук: 05.13.11: защищена 25.06.04: утв. 12.11.04. - Владивосток. - 2004.- 206с.
3. Цв тников В. А. Инт лл ктуальная сист ма Entities // Открытый Дальневосточный конкурс программных средств студентов, аспирантов и молодых сп е циалистов: сб. т ез. докл. - Владивосток: ИАПУ ДВО РАН. 2002.- С. 70-73.
4. Цейтин Г.С. Программирование на ассоциативных сетях // ЭВМ в проектировании и производстве. Вып.2. Л.:Машиностроение. 1985.-С. 16-48.
5. Черняховская М.Ю. Пр едставл ение знаний в экспертных сист е мах м е дицинской диагностики. Владивосток: ДВНЦ АН СССР, 1983. - 212 с.
6. Черняховская М.Ю., Грибова В.В., Тарасов А.В. Система интеллектуальной поддержки обследования больных, управляемая онтологи й // Программны продукты и сист мы.- 2007. - №2. - С.49-51
7. Черников Е.С. Распр едел енная интеллектуальная система “Проектирование электропечей” // Открытый Дальневосточный конкурс программных средств студе нтов, аспирантов и молодых сп е циалистов: сб. тр.

* Владивосток: ИАПУ ДВО РАН. 2008. - С. 22-25.

1. Шаврин С. Язык многоуровн евого онтологич е ского

мод лирования // In the Proceedings of the XII-th International Conference "Knowledge-Dialog-Solution" - KDS 2006, June 20-25, Varna, Bulgaria, Sofia: F0I-C0MMERGE-2006. - PP. 115-121. - ISBN-10: 954-16-0038-7.

1. Alberts L.K. 1993. YMIR: an ontology for engineering design. University of Twente.
2. An introduction to Gene 0ntology

<http://www.geneontology.org/doc/G0.doc.html>

1. Artemieva I.L. Multilevel ontologies for domains with complicated structures // In the Proceedings of the XIII-th International Conference "Knowledge-Dialog-Solution" - KDS 2007, June 18-24, Varna, Bulgaria, Sofia: F0I ITHEA. - 2007. - Vol. 2. - PP. 403-410. - ISBN 1313-0087.
2. Artemieva I.L. Domains with complicated structures and their

ontologies // Inf. Theories and Appl. - 2008.- Vol 15.- № 4. - PP. 330-337.

1. Artemjeva I.L., Gavrilova T.L., Kleshchev A.S. Expert systems: from mathematics to technology. Пр епр., Владивосток: ИАПУ ДВО РАН, 1997.-36с.
2. Artemjeva I.L., Gavrilova T.L., Kleshchev A.S. Mathematics for knowledge- based systems // Proceedings of the Slovenian-Russian Workshop on Software, 4 Dec. 1998, Vladivostok. - PP.15-31.
3. Artemjeva I.L., Gavrilova T.L., Kleshchev A.S. Mathematical

approach to solving complex hard - formalizable tasks // Дальневосточный математический сборник.- 1998.- № 5.- С.122-135

1. Artemjeva I.L., Gavrilova T.L., Kleshchev A.S., Surov V.V.

Application of Logical relationship systems for expert system development //

Appl. of Advanced Information Technologies. Proceeding of the 4 World Congress on Expert systems. 16-20 March 1998, Mexico City Cognizant Communication Corporation. 1998. - V.1.- PР. 500-510. - ISBN 1-882345-22-3.

1. Artemjeva I. L., Knyazeva M.A., Kupnevich 0.A. Processing of knowledge about optimization of classical optimizing transformations // In the

Proceedings of X-th International Conference Knowledge-Dialogue-Solution, Varna (Bulgaria), June 16-26. 2003 - PP. 207-213.

1. Artemjeva I. L., Knyazeva M.A., Kupnevich O.A. Processing of knowledge about optimization of classical optimizing transformations // International Journal on Information Theories and Applications. 2003. - Vol. 10, №2. - PP.126-131. - ISSN 1310-0513.
2. Bao J. and Honavar V. G. Divide and Conquer Semantic Web with

Modular Ontologies - A Brief Review of Modular Ontology Language Formalisms // In the Proceedings of the 1st International Workshop on Modular Ontologies (WoMO-2006), Athens, Georgia, USA, November 5, 2006. Edited by: Peter Haase, Vasant Honavar, Oliver Kutz, York Sure, Andrei Tamilin. Submitted by: Oliver Kutz. Published on CEUR-WS: 29-Jan-2007. URL

<http://sunsite.informatik.rwth-aachen.de/Publications/CEUR-WS/Vol-> 232/paper1.pdf

1. Brickley D., Guha R.V. RDF Vocabulary Description Language 1.0: RDF Schema, W3C Draft, 2002. URL: <http://www.w3.org/TR/PR-rdf-schema>
2. Chemical-crystals ontology www-ksl-

svc.stanford.edu:5915/doc/hpkb/query-results/real-ontolingua/ chemical-crystals/

1. Chemical Ontology, <http://cvs.sourceforge.net/cgi->

bin/viewcvs.cgi/obo/obo/ontology/biochemical

1. COME ontology, <http://www.ebi.ac.uk/~kirill/come/COME.xml>
2. Corcho O., Fernandez-Lopez M., Gomez-Perez A. Methodologies, tools and languages for building ontologies. Where is their meeting point7 // Data & Knowledge Engineering. - 2003. - № 46: 41-64.
3. Cristani M., Cuel R. A Survey on Ontology Creation Methodologies. In Int. J. on Semantic Web & Information Systems. - 2005.- 1(2): 48-68.
4. Denny M. Ontology Building: a Survey of Editing Tools // <http://www.xml.com/pub/a/2004/07/14/onto.html>
5. Fernandez, M., Gomez-Perez, A. and Juristo, N. METHONTOLOGY: From Ontological Art Towards Ontological Engineering, AAAI-97 Spring Symposium on Ontological Engineering, Stanford University, 1997, March 24-26.
6. Gangemi A., Pisanelli D.M. and Steve G. An Overview of the

ONIONS Project: Applying Ontologies to the Integration of Medical

Terminologies//Data & Knowledge Engineering.-1999.-Vol. 31.-№ 2.-PP.183-220

1. Genesereth, M.R. and Nilsson, N.J. Logical Foundation of Artificial Intelligence. Morgan Kaufmann, Los Altos, California, 1987.
2. Genesereth, M.R., Fikes R.E. et al. Knowledge Interchange Format (version 3.0) Reference Manual. Interlingua Working Group of the DARPA Knowledge Sharing Effort. Computer Science Department, Stanford University. Report Logic-92-1.
3. Gerbaux F., Gruber T. Theory SUBSTANCES. <http://saussure.irmkant.rm.cnr.it/onto/ON9.3-OL-HTML/substances/index.html>
4. Gladun A., Rogushina J., Shtonda V. Ontological Approach to Domain Knowledge Representation for Information Retrieval in Multiagent Systems // IJ ITA.- 2006. -Vol. 13. -№ 4. - PP. 354-361.
5. Golebiowska J., Dieng-Kuntz R., Corby O., Mousseau D. Building

and Exploiting Ontologies for an Automobile Project Memory // In the Proceedings of the IJCAI-01 Workshop on Ontologies and Information Sharing, Seattle, USA, August 4-5, 2001. Edited by: A. Gomez-Perez, M. Gruninger, H. Stuckenschmidt, M. Uschold Submitted by: H. Stuckenschmidt Published on CEUR-WS: 16-Aug-2001 URL: http://sunsite.informatik.rwth-

aachen.de/Publications/CEUR-WS/Vol-47/golebiowka.pdf

1. Gomez-Perez, A. A Framework to Verify Knowledge Sharing Technology //Expert Systems with Applications. 1997.- 11(4).- PP. 519-529.
2. Grau B. C., Parsia B., Sirin E., and A. Kalyanpur A.. Modularity and web onologies. In Proceedings of the 10th International Conference on Principles of Knowledge Representation and Reasoning (KR2006), 2006.
3. Gruber T.R. 0ntolingua: A Mechanism to Support Portable

0ntologies. Technical report KSL-91-66, Stanford University, Knowledge Systems Laboratory, 1992.

1. Gruber, T.R. Towards Principles for the Design of 0ntologies Used for Knowledge Sharing. // Inter. Journal of Human-Computer Studies.- 1994.- 43 (5/6).- PP.907-928.
2. Gruber T.R. A translation Approach to Portable 0ntology

Specifications. In Knowledge Acquisition Journal.- 1993.- Vol. 5.- PP. 199-220.

1. Guarino N., Welty, C. 0ntological Analysis of Taxonomic

Relationships. In Laender, A. and Storey, V., eds, Proceedings of ER-2000: The 19th International Conference on Conceptual Modeling. Springer-Verlag LNCS. 0ctober, 2000. URL: <http://www.loa-cnr.it/Publications.htm/>

1. Guarino N., Welty, C. A Formal 0ntology of Properties. In, Dieng, R., and Corby, 0., eds, Proceedings of EKAW-2000: The 12th International Conference on Knowledge Engineering and Knowledge Management. Spring- Verlag LNCS. 0ctober, 2000. URL: <http://www.loa-cnr.it/Publications.htm>
2. Guarino N., Welty, C. Identity, Unity, and Individuation: Towards a Formal Toolkit for 0ntological Analysis. In W. Horn, ed., Proceedings of ECAI- 2000: The European Conference on Artificial Intelligence. I0S Press, Amsterdam. August, 2000. URL: <http://www.loa-cnr.it/Publications.htm>
3. Guarino N. and Welty C. Towards a methodology for ontology based model engineering. URL: <http://www.loa-cnr.it/Publications.htm>
4. Guarino N. Formal 0ntology, Conceptual Analysis and Knowledge Representation // International Journal of Human and Computer Studies. 1995.- 43(5/6).- PP. 625-640.
5. Guarino N. Understanding, Building, and Using 0ntologies. // IJHCS.- 1996.- 46 (2-3).
6. Guarino N. General 0ntology of Artefacts. Deliverable 1. 2005. URL: <http://www.loa-cnr.it/Publications.htm>
7. Hartmann J., Palma R., Sure Y., Suarez-Figueroa M. C., Haase P., Gomez-Perez A., and Studer R.. Ontology Metadata Vocabulary and Applications. URL: <http://oyster.ontoware.org/oyster/omv-otm.pdf>
8. Hartmann J., Palma R. and Sure Y. OMV- Ontology Metadata Vocabulary. URL: <http://oyster.ontoware.org/oyster/omv-iswc.pdf>
9. Hayashi Y., Bourdeau J., Mizoguchi R. Ontological Modeling

Approach to Blending Theories for Instructional and Learning Design

//<http://www.ei.sanken.osaka-u.ac.jp/pub/all-publications.html>

1. Hayashi Y., Bourdeau J., Mizoguchi R. Ontological Support for a Theory-Eclectic Approach to Instructional and Learning Design // <http://www.ei.sanken.osaka-u.ac.jp/pub/all-publications.html>
2. He F., Espen P. General approach for quantitative energy dispersive X-ray fluorescence analysis based on fundamental parameters // Anal. Chem. 1991. Vol. 63. P. 2237-2244.
3. An informal description of Standard OIL and Instance OIL // <http://www.ontoknowledge.org/oil/downl/oil-whitepaper.pdf>
4. Isotani S., Mizoguchi R. An Integrated Framework for Fine-Grained Analysis and Design of Group Learning Activities // http://www.ei.sanken.osaka-

u.ac.jp/pub/all-publications.html

1. Jones D., Bench-Capon T. and Visser P. Methodologies For Ontology Development. URL: <http://www.iet.com/Projects/RKF/SME/methodologies-for-> ontology-development.pdf
2. Kataoka Y. Standardless X-ray Fluorescence Spectrometry (Fundamental Parameter Method Using Sensitivity Library) // The Rigaku Journal. 1989. - Vol. 6.- №. 1 - PP. 33-40.
3. Kasai T., Yamaguchi H., Nagano H., Mizoguchi R. Building an ontology of IT education goals // Int. J. Cont. Engineering Education and Lifelong Learning, Vol. 16, Nos. 1/2, 2006//<http://www.ei.sanken.osaka-u.ac.jp/pub/all-> publications.html
4. Kim H.M., Fox M.S., Gruninger M. An ontology for quality management - Enabling quality problem identification and tracing. // BT Technology Journal, vol 17, № 4. PP. 131-140.
5. Kitamura Y., Kashiwase M., Fuse M., and Mizoguchi R. Deployment

of an Ontological Framework of Functional Design Knowledge //

<http://www.ei.sanken.osaka-u.ac.jp/pub/all-publications.html>

1. Kitamura Y., Koji Y. and Mizoguchi R. An Ontological Model of Device Function and Its Deployment with Extensions for Engineering Knowledge Sharing // <http://www.ei.sanken.osaka-u.ac.jp/pub/all-publications.html>
2. KnowledgeWeb. <http://knowledgeweb.semanticweb.org/>

semanticportal/

1. Klein M. Combining and relating ontologies: an analysis of problems

and solutions // In the Proceedings of the IJCAI-01 Workshop on Ontologies and

Information Sharing, Seattle, USA, August 4-5, 2001. Edited by: A. Gomez-Perez, M. Gruninger, H. Stuckenschmidt, M. Uschold Submitted by: H. Stuckenschmidt Published on CEUR-WS: 16-Aug-2001 URL: http://sunsite.informatik.rwth- aachen.de/Publications/CEUR-WS/Vol-47/klein.pdf

1. Kleshchev A.S. Problem-Oriented Representation for Development of Knowledge Bases for Expert Systems. In Third Inter. Conf. ”Artif.Intell. and Inform.Control System of Robots”, Smolenice, 1984.
2. Kleshchev A.S., Artemjeva I.L. Domain Ontologies and knowledge processing. Пр епр., Владивосток: ИАПУ ДВО РАН, 1999. - 25 с.
3. Kleshchev A.S., Artemjeva I.L. A Structure of Domain Ontologies and their Mathematical Models. // The Pacific Asian Conference on Intelligent Systems 2001. Korea. November 16-17, 2001. PP. 410-420.
4. Kleshchev A.S., Artemjeva I.L. How can domain ontologies relate to one another // In the Proceedings of the XI-th International Conference ”Knowledge-Dialog-Solution” - KDS 2005, June 20-27, Varna, Bulgaria, Sofia: FOI-COMMERGE-2005. Vol.1 - PP. 132-140. - ISBN 954-16-0032-8.
5. Kleshchev A.S., Artemjeva I.L. An analysis of some relations among domain ontologies // Int. Journal on Inf. Theories and Appl. - 2005.- Vol. 12.- №
6. - PP. 85-93. - ISSN 1310-0513.
7. Kleshchev A.S., Artemjeva I.L. A mathematical apparatus for domain ontology simulation. An extendable language of applied logic // Int. Journal on Inf. Theories and Appl. - 2005.- Vol. 12.- № 2. - PP. 149-157. - ISSN 1310-0513.
8. Kleshchev A.S., Artemjeva I.L. A mathematical apparatus for ontology simulation. Specialized extensions of the extendable language of applied logic // Int. Journal on Inf. Theories and Appl. - 2005.- Vol 12.- № 3. - PP. 265­271. - ISSN 1310-0513.
9. Kleshchev A.S., Artemjeva I.L. A mathematical apparatus for domain ontology simulation. Logical relationship systems // Int. Journal on Inf. Theories and Appl.- 2005.- Vol. 12.- № 4. - PP. 343-351. - ISSN 1310-0513.
10. Kleshchev A.S., Artemjeva I.L. Mathematical models of domain ontologies // Int. Journal on Inf. Theories and Appl. - 2007.- Vol. 14.- № 1. - PP. 35-43. - ISSN 1310-0513.
11. Kleshchev A.S., Artemjeva I.L. Domain ontologies and their mathematical models // In the Proceedings of the XII-th International Conference "Knowledge-Dialog-Solution" - KDS 2006, June 20-25, Varna, Bulgaria, Sofia: F0I-C0MMERGE-2006. - PP. 107-115. - ISBN 954-16-0038-7.
12. Lassila 0., Swick R. Resource description framework (RDF) model and syntax specification. W3C Recommendation. 1999. URL: <http://www/w3/org/TR/REC-rdf-syntax>
13. Lenat D.B., Guha R.V. Building large knowledge-based systems: representation and inference in the CYC project/ Addison-Wesley, Boston, 1990.
14. Lenat D.B., Guha R.V., Pittman K., etc. CYC: toward programs with common sense // Communication of ACM. - 1990.- Vol 33, №8. - PP.30-49.
15. Luke S., Heflin J. SH0E 1.01. Proposed Specification, SH0E Project technical report, University of Mariland, 2000. URL: <http://www.cs.umd.edu/projects/plus/SH0E/spec1.01.htm>
16. McGee Wood M. and Wang S. Motivation for “Ontology” in Parallel- Text Information Extraction // <http://olp.dfki.de/ecai04/cfp.htm>
17. Mizoguchi R. A Step Towards Ontological Engineering. <http://www.ei.sanken.osaka-u.ac.jp/english/step-onteng.html>.
18. Mizoguchi, R., M. Ikeda, K. Seta and J. Vanwelkenhuysen, Ontology for Modeling the World from Problem Solving Perspectives, Proc. of IJCAI-95 Workshop on Basic Ontological Issues in Knowledge Sharing (1995) 1-12.
19. Mizoguchi R. Tutorial on ontological engineering. Part 2: Ontology

development, tools and languages/ URL: // http://www.ei.sanken.osaka-

u.ac.jp/pub/all-publications.html

1. Noy N., McGuinness D.L. Ontology Development 101: A Guide to

Creating Your First Ontology // Stanford Knowledge Systems Laboratory Technical Report KSL-01-05 and Stanford Medical Informatics Technical Report SMI-2001-0880, March 2001. URL:

<http://protege.stanford.edu/publications/ontology_development/ontology101.html>

1. O’Murchu I., Zhdanova A.V., Breslin J.G. Semantic Community Portals. URL: <http://www.ee.surrey.ac.uk/Personal/A.Zhdanova/publications.html>
2. Ontolingua. URL: <http://www-ksl.svc.stanford.edu>
3. Ontos Miner: Сист ма Извл ч ния Информации из Т кстовых

Докум ентов на Русском Язык е. URL:

<http://www.avicomp.ru/rus/ontos/academic_solutions_rus.php>

1. OntoWeb. <http://www> .ontoweb.org/
2. OWL Web ontology. <http://www.w3.org/TR/webont-req/>
3. Palma R., Haase P. Oyster - Sharing and Re-using Ontologies in a Peer-to-Peer Community // <http://oyster.ontoware.org/oyster/oyster-challenge.pdf>
4. Patil R.S. Causal Representation of Patient Illness for Electrolyte and Acid-Base Diagnosis. PhD Thesis, Laboratory for Computer Science, MT, 1981.
5. Patel-Schneider P. F., Hayes P., and Horrocks I.. OWL Web Ontology Language Semantics and Abstract Syntax. Technical report, W3C, Feb. 2004.

W3C Recommendation, URL <http://www.w3.org/TR/2004/REC-owl-semantics-> 20040210/.

1. Paul E. van der Vet Nicolaas J.I. Mars Bottom-up construction of ontologies: the case of an ontology of pure substances; Memoranda Informatica 95-35 September 20, 1995
2. Paul E. van der Vet Piet-Hein Speel Nicolaas J.I. Mars The Plinius ontology of ceramic materials; April 1995
3. Perez-Rey D., Maojo V., Garcia-Remesal M., Billhardt H. Ontology- based Integration of Biomedical Databases. 17th IMACS World Congress Scientific Computation, Applied Mathematics and Simulation, Paris, July 2005 (<http://sab.sscc.ru/imacs2005/papers/T3-I-68-0930.pdf>)
4. Pinto H. S. and Martins J. P. Ontology Integration: How to perform the Process // In the Proceedings of the IJCAI-01 Workshop on Ontologies and Information Sharing, Seattle, USA, August 4-5, 2001. Edited by: A. Gomez-Perez, M. Gruninger, H. Stuckenschmidt, M. Uschold Submitted by: H. Stuckenschmidt Published on CEUR-WS: 16-Aug-2001. URL: http://sunsite.informatik.rwth- aachen.de/Publications/CEUR-WS/Vol-47/pinto.pdf
5. Pinto H. S., Gomez-Perez A., Martins J.P. Some Issues on Ontology

Integration // Proceedings of the Workshop KRR5 at IJCAI’99, Stockholm, Sweden, August 2, 1999. Edited by: V. Richard Benjamins Submitted by: V. Richard Benjamins Published on CEUR-WS: 22-Jun-1999. URL:

<http://sunsite.informatik.rwth-aachen.de/Publications/CEUR-WS/V> ol-18/7- pinto.pdf

1. Schlicht A., Stuckenschmidt H. Towards Structural Criteria for Ontology Modularization // In the Proceedings of the 1st International Workshop on Modular Ontologies (WoMO-2006), Athens, Georgia, USA, November 5,
2. Edited by: Peter Haase, Vasant Honavar, Oliver Kutz, York Sure, Andrei Tamilin. Submitted by: Oliver Kutz. Published on CEUR-WS: 29-Jan-2007. URL <http://sunsite.informatik.rwth-aachen.de/Publications/CEUR-WS/Vol-> 232/paper7.pdf
3. Sosnovsky S., Gavrilova T. Development of Educational 0ntology for C-Programming // IJ ITA.- 2006. - Vol. 13. - № 4. - P. 303-308.
4. Staab S. and Maedche A. Knowledge Portals: 0ntologies at Work. In AI Magazine. - 2001.- 22(2).- P.63-75
5. Staab S., SchnurrH.P., Studer R., Sure Y. Knowledge process and ontologies. IEEE Intelligent Systems. - 2001.- vol. 16.- № 1.- P.26-34.
6. Studer R., Benjamins V.R., Fensel D. Knowledge Engineering: Principles and Methods. In Data & Knowledge Engineering. - 1998.- 25. - P. 161-197.
7. Stumme G. & Maedche A. 0ntology Merging for Federated

0ntologies on the Semantic Web // In the Proceedings of the IJCAI-01 Workshop on 0ntologies and Information Sharing, Seattle, USA, August 4-5, 2001. Edited by: A. Gomez-Perez, M. Gruninger, H. Stuckenschmidt, M. Uschold Submitted by: H. Stuckenschmidt Published on CEUR-WS: 16-Aug-2001. URL:

<http://sunsite.informatik.rwth-aachen.de/Publications/CEUR-WS/Vol-> 47/stumme.pdf

1. The Sequence 0ntology Project, <http://song.sourceforge.net/>
2. Uschold M., Gruninger M. 0ntologies: Principles, methods and applications. //The Knowledge Engineering Review.-1996.-Vol.11.-№ 2.P. 93-155.
3. Uschold M. Knowledge Level Modeling: Concepts and Terminology. //The Knowledge Engineering Review.- 1998.- Vol. 13:1- P.5-29.
4. van der Vet P., Speel Piet-Hein, Mars, N.J.I. The Plinius ontology of ceramic materials. In Workshop Notes ECAI'94 Workshop Comparison of Implemented 0ntologies, N.J.I Mars (ed.), Amsterdam. - 1994.- P. 187-205.
5. van Heijst G., Schreiber A.T., and Wielinga B.J. Using Explicit 0ntologies in KBS Development. In International Journal of Human and Computer Studies .- 1996.- Vol. 46.- №№ 2-3.- P. 183-292.
6. Weiss S.M., Kulikovski C.A., Amarel S. & Safir A. A Model-Based Method for Computer-Aided Medical Decision Making. In Clancey W.J. &

Shortliffe E.H. Editors, Reading in Medical Artificial Intelligence, the First Decade. Addison Wesley, 1984.

1. Wielinga B.J. & Schreiber A.T. Reusable and sharable knowledge bases: A European perspective. In Proceedings International Conference on Building and Sharing of Very Large-Scaled Knowledge Bases, Tokyo, Japan Information Processing Development Center, 1993: 103-115.
2. Wielinga, B., Schreiber A.T., Jansweijer W., Anjewierden A. and van

Harmelen F. Framework and Formalism for Expressing Ontologies (Version 1). ESPRIT Project 8145 KACTUS, Free University of Amsterdam Deliverable, DO1b.1, 1994. URL:

<http://www.swi.psy.uva.nl/projects/NewKACTUS/Reports.html>

1. Zhdanova A.V. The People’s Portal: Ontology Management on

Community Portals. URL:

<http://www.ee.surrey.ac.uk/Personal/A.Zhdanova/publications.html>

1. http ://musing.deri. at/ontologies/v0.3/
2. <http://ontoware.org/>
3. http ://proton.semanticweb. org/
4. <http://www.alphaworks.ibm.com/contentnr/semanticsfaqs>
5. http ://www. daml.org/ontologies/
6. <http://www.dmoz.org>
7. <http://www.geneontology.org>
8. <http://www.ksl.stanford.edu/software/ontolingua/>
9. <http://www.ontotext.com/kim/2004/12/kimso>
10. <http://inf.susu.ac.ru/~polak/expert/commercial/faq=doc-7.htm>

ПРИЛОЖЕНИЕ 1. ЯЗЫК ПРИКЛАДНОЙ ЛОГИКИ

1. ЯДРО ЯЗЫКА ПРИКЛАДНОЙ логики

При опр еделении ядра языка прикладной логики задается синтаксис и с е мантика т ермов, формул и пр е дложе ний языка.

Ядро языка прикладной логики описано в работах [86, 200].

1. Ядро языка прикладной логики. Синтаксис

Синтаксис термов Т ермами являются:

1. имя n;
2. п ер е м е нная v;
3. N и L;
4. ti—>t2, где ti и t2 - термы;
5. (х t1, t2, ..., tk), где t1,...,tk - термы;
6. t(t1,...,tk), где t , t1,...,tk - термы;
7. j(t), гд е t терм.

Других т рмов ядро языка н сод ржит.

Синтаксис формул Формулами являются:

1. t(t1,...,tk), где t , t1,...,tk - термы
2. —fb f1 & f2, f1 v f2, f1 ^ f2, f1 & f2, где f1 и f2 формулы.

Других формул ядро языка н е содержит.

*Синтаксис предложений*

Предложение состоит из префикса и тела. Префикс есть последовательность описаний переменных (v1:t1) (v2:t2)...(vm:tm)

(ограниченных кванторов все общности [113]), где v1, v2,..., vm - свободные

переменные, причем все переменные vi, v2,..., vm попарно различны; для всех i е [1,m] каждое (vi:ti) е сть описани е пер ем енной, где ti есть терм. Для последовательности описаний пер ем енных должны выполняться сл едующие условия:

* терм t1 не содержит свободных п ерем енных;
* для всех i е [2,m] свободными переменными терма ti могут быть только переменные v1, v2,...,vi-1.

Посл доват льность описаний п р м нных мож т быть пустой.

Тело предлож ения зависит от типа этого предлож е ния. Типами предложений являются описание значения имени, описание сорта имени, огранич е ни е на инт ерпр етацию им е н. Тело описания знач е ния им е ни им е ет вид: t1=t2, гд е t1, t2 - термы. Тело описания сорта им е ни им е ет вид: сорт t1: t2, где t1, t2 - термы. Тело ограничения на интерпр етацию им ен является формулой. Любая свободная переменная, входящая в тело предложения, должна быть описана в е го пр е фикс е.

Пер ем енная может быть связанной в теле пр едложения. В этом случае она должна быть опр д л на в конструкции вида:

(A(v1: t1)...(vm: tm) t) или (A(v1: t1)...(vm: tm) f), где

* А обозначени е оп ерации (уникально е для каждой конструкции),
* (v1: t1)^(vm: tm) - множе ство описаний связанных п ерем е нных,
* t - терм, а f - формула.

Такие конструкции в соответствии с [113] будем называть ограниченными кванторами. Ограниченный квантор позволяют "заставить" переменную пробегать не весь универсум, а лить ту его часть, которая задана в квантор . При мод лировании пр дм тных област й явно указани области знач ний п р м нной позволя т явно опр д лить область, на которой им т смысл т рм, формула или пр длож ни .

Ядро языка н сод ржит конструкций указанного вида, поэтому т рмы и формулы ядра н сод ржат связанных п р м нных.

Если переменная является связанной в теле предложения, то она не может входить в префикс этого пр едложения.

*Синтаксис прикладной логической теории*

Прикладная логическая теория с названием T(EbE2,...,Ek), где Ei,E2,...,Ek - им е на расшире ний языка, использованных для записи т е ории, есть пара <TS, SS>, где TS - конечное множество (возможно, пустое) названий других теорий, SS - конечное множество (возможно, пустое) пр е дложе ний.

Указани расшир ний E1,E2,...,Ek, использу мых для записи прикладной логической теории, определяет набор математических символов, использу мых при пр дставл нии модуля мод ли онтологии и знаний пр едм етной области.

Любая прикладная логическая теория T = <TS, SS> по определению эквивалентна прикладной логической теории <0, SS’>, где SS’ получается в результате следующего процесса. Обозначим ts(T)=TS, ss(T) =SS. Положим TS1= ts(T) и SS1= ss(T). Для каждого i = 1,2,... положим TSi+1 = U ts(t), SSi+1 =

t eTS;

SSi и U ss(t). Если на оч ер едном шаге n им е ет м е сто TSn=0, то SS’ = SSn.

t eTS;

Те орию <0, SS’> будем называть р едукци ей теории <TS, SS>.

Прикладную логич скую т орию буд м называть синтаксич ски корр ктной, сли

* TS сод ржит синтаксич ски корр ктны прикладны логич ски т е ории;
* SS сод ржит пр длож ния, записанны ср дствами только ядра языка и его расширений E1,E2,...,Ek;
* вышеописанный процесс построения редукции логической теории зав рша тся за кон чно число шагов;
* р дукция т ории T сод ржит н пусто множ ство пр длож ний.

Оч е видно, что множ е ство пр е дложе ний р е дукции любой синтаксич ски корр ктной прикладной логич ской т ории явля тся конечным множе ством.

1. Ядро языка прикладной логики. Семантика

*Семантика термов и формул*

С мантика т рмов и формул опр д ля т знач ния т рмов и формул, а также условия, при которых эти знач е ния сущ е ствуют [86, 200]. При этом пр едполагается, что на множе стве им ен задана функция а, значени е которой для каждого им ени есть интерпретация этого им ени.

Знач ния т рмов и формул будут опр д л ны относит льно функции интерпретации а и произвольной допустимой подстановки 0 значений вместо всех свободных переменных терма или формулы. Если переменная, являющаяся свободной в т рм или формул , явля тся свободной и в предложении, куда входит этот терм или эта формула, то в допустимой подстановк 0 знач ни вм сто п р м нной опр д ля тся с мантикой этого пр едложения. Если же эта п ер ем енная, являющаяся свободной в терм е или формул , явля тся связанной в пр длож нии, куда входит этот т рм или эта формула, то в допустимой подстановк 0 знач ни вм сто этой п р м нной опр д ля тся с мантикой того т рма или формулы, в котором эта п р м нная явля тся связанной.

Обозначим Ja,0(t) - значение терма t для функции интерпретации а и допустимой подстановки 0, Ja,0(f) значение формулы f для функции инт рпр тации а и допустимой подстановки 0, 0(v) - знач ни п р м нной v при подстановк 0.

Значения термов опр еделяются сл едующим образом:

1. Ja,0(n) = a(n), где n - имя; Ja,0(n) не зависит от 0; значени е Ja,0(n) опр е д ел е но, е сли n е сть эл е м е нт множ е ства Ja,0(N);
2. Ja,0(v) = 0(v), где v - п ерем енная;
3. Ja,e(N) - б е скон ечно е множе ство вс ех возможных им е н; из Ja,e(N) исключаются вс им на, которы описываются в стандартном и любом использу мом сп циализированном растир нии языка, а такж "N", "L", "=","=", "—", "X", "^", "V", "&", "-", "^", "(", ")", "true", "false", ",", "сорт", "j"; Ja,e(N) н е зависит от a и е;
4. Ja,e(L) - множество, состоящее из двух элементов true и false; Ja,e(L) н е зависит от a и e;
5. Ja,e(t1—>t2) - множе ство вс ех возможных всюду опр е дел е нных однозначных отображений множества Ja,e(t1) в множество Ja,e(t2); терм имеет знач ение, е сли значения Ja,e(t1) и Ja,e(t2) являются множе ствами;
6. Ja,e(xt1,t2,...,tk) - декартово произведение множеств Ja,e(t1),

Ja,e(t2),...,Ja,e(tk); терм имеет значение, если значения Ja,e(t1),Ja,e(t2),..., Ja,e(tk) являются множествами; операция "x" обладает всеми свойствами декартова произведения, кроме ассоциативности: Ja,e(x(xt1,t2),t3)^ Ja,e(xt1,(xt2,t3));

1. Ja,e(t(t1,t2,...,tk)) = 9(Ja,e(t1),Ja,e(t2),...,Ja,e(tk)) - значение функции ф, которая есть интерпретация имени Ja,e(t) (т.е. ф = a(Ja,e(t))), от аргументов Ja,e(t1),...,Ja,e(tk); терм имеет значение, если значение Ja,e(t) есть имя, имеющее сорт (s' —s), где s' есть декартово произведение множеств s1, s2,..., sk или подмножество этого декартова произведения, s есть множество, причем s^Ja,e(L), <Ja,e(t1),Ja,e(t2),...,Ja,e(tk)>es' и в этом случае Ja,e(t(tbt2,...,tk)) е s; заметим, что если t' - терм, такой, что Ja,e(t') = <Ja,e(t1),Ja,e(t2),...,Jae(tk)>, то

J a,e(t(t))=J a,e(t(t1 ,t2,. ..,tk));

1. Ja,e(j(t)) = a(Ja,e(t)) - инт ерпр етация им е ни Ja,e(t); терм им е ет знач ение, е сли Ja,e(t) есть имя.

Значения формул опр е д еляются сл е дующим образом:

1. Ja,e(t(t1,...,tk)) ^ p(Ja,e(t1),Ja,e(t2),...,Ja,e(tk)) - знач ение пр едиката р, который есть интерпретация имени Ja,e(t) (т.е. p=a(Ja,e(t))) от аргументов Ja,e(t1),..., Ja,e(tk); формула имеет значение, если значение Ja,e(t) есть имя,

имеющее сорт (s’ ^L), где s’ есть декартово произведение множеств s1, s2,..., sk или подмножество этого декартова произведения,

<Ja,e(t1),Ja,e(t2),...,Ja,e(tk)>es’; зам етим, что е сли t’ - терм, такой, что Ja,e(t’) =

<Ja,e(t1X Ja,e(t2),..., Ja,e(tk)>, то Ja,e(t(t)) Ja,e(t(t1,t2,...,tk));

1. Ja,e(—f1)^—Ja,e(f1), т.е. значение формулы —f1 есть истина тогда и только тогда, когда знач ение Ja,e(f1) е сть ложь; формула им е ет значение, е сли для функции интерпр етации a и подстановки e им е ет знач е ни е формула f1;
2. Ja,e(f1&f2)^Ja,e(f1)&Ja,e(f2), т.е. значени е формулы f1&f2 е сть истина тогда и только тогда, когда оба значения Ja,e(f1) и Ja,e(f2) суть истина; формула им т знач ни , сли для функции инт рпр тации a и подстановки e им еют знач е ния формулы f1 и f2;
3. Ja,e(f1vf2)^Ja,e(f1)vJa,e(f2), т.е. значение формулы f1vf2 есть истина тогда и только тогда, когда хотя бы одно из значений Ja,e(f1) или Ja,e(f2) е сть истина; формула имеет значение, если для функции интерпретации a и подстановки e им еют значения формулы f1 и f2;
4. Ja,e(f1^f2)^Ja,e(f1)^Ja>e(f2), т.е. знач е ни е формулы f1^f2 е сть истина тогда и только тогда, когда либо ложно значение Ja,e(f1), либо оба значения Ja,e(f1) и Ja,e(f2) суть истина; формула имеет значение, если для функции интерпр етации a и подстановки e им еют значения формулы f1 и f2;
5. Ja,e(f1^-f2)^Ja,e(f1)^Ja,e(f2), т.е. значение формулы f1^f2 есть истина тогда и только тогда, когда либо оба значения Ja,e(f1) и Ja,e(f2) суть ложь, либо оба знач ения Ja,e(f1) и Ja,e(f2) суть истина; формула им е ет значение, е сли для функции интерпретации a и подстановки e им еют знач ения формулы f1 и f2.

*Семантика предложений*

С емантика предложений определяет смысл предложений, а также условия, при которых пр е дложе ния им еют смысл [86, 200].

Определим правила формирования множе ства допустимых подстановок 0 вм е сто свободных п ерем енных пр едложения:

1. е сли префикс предложения отсутствует, множе ство допустимых подстановок этого пр длож ния состоит из динств нной пустой подстановки;
2. пусть префикс предложения имеет вид (v1:t1)(v2:t2)...(vm:tm), тогда множе ство допустимых подстановок есть множе ство вс ех подстановок вида 0=(v1/c1,...,vm/cm), где c е Ja01(t1), c2 е Ja02(t2),..., cm^Ja0m(tm), 01 - пустая подстановка, 02 =(v1/c1),...,0m=(v1/c1,...,vm-1/cm-1).

Будем говорить, что предложение имеет смысл, если Ja01(t1), Ja02(t2),..., Ja0m(tm) - такие множества, что множество допустимых подстановок пр е дложе ния кон ечно.

Т п рь опр д лим с мантику для пр длож ний тр х типов.

1. Описание значения имени с телом t1=t2 име ет сл едующий смысл: для каждой допустимой подстановки 0 интерпретация имени Ja,0(t1) есть Ja,0(t2). Предложение имеет смысл, если для всех допустимых подстановок Ja,0(t1) явля тся им н м, т рм t2 им т знач ни для функции инт рпр тации а и подстановки 0 и из логиче ской теории не следует, что имя Ja,0(t1) им еет боле е одного знач ения. Кроме того, е сли имя Ja,0(t1) име ет сорт s, то для того, чтобы предложение имело смысл, необходимо, чтобы значение Ja,0(t2) было эл е м е нтом множе ства s. Совокупность описаний знач е ний им ен мож ет сод ржать р курсивны опр д л ния знач ний им н.
2. Описани е сорта им е ни с т елом сорт t1: t2 им е ет сл е дующий смысл: для каждой допустимой подстановки 0 имя Ja,0(t1) им е ет сорт Ja,0(t2). Предложение имеет смысл, если для всех допустимых подстановок Ja,0(t1) есть имя, Ja,0(t2) - множество и из логической теории не следует, что имя Ja,0(t1) имеет больше одного сорта. Совокупность описаний сортов имен мож т сод ржать р курсивны опр д л ния сортов им н.

Если описани е сорта им е ни им е ет тело сорт t1: (t2—13) и Ja,0(t3)^ Ja,0(L), то будем говорить, что имя Ja,0(t1) является функциональным именем; если Ja,0(t3)=Ja,0(L), то будем говорить, что имя Ja,0(t1) является предикатным именем; в остальных случаях будем говорить, что имя Ja,0(t1) является пр дм тным им н м.

1. Огранич ни на инт рпр тацию им н им т сл дующий смысл: допустимой является такая функция интерпретации а, что Ja0(f) = true при вс х допустимых подстановках 0, гд f формула, которая явля тся т лом этого предложения. Предложение имеет смысл, если существует такая функция инт рпр тации, что формула f им т знач ни для вс х допустимых подстановок 0.

*Семантика прикладной логической теории*

Множе ство имен, входящих в прикладную логиче скую те орию, может быть разделено на две непересекающиеся части: множество однозначно интерпретируемых имен и множество неоднозначно интерпретируемых им н.

Имя называется однозначно интерпр етируемым, е сли выполнено одно из условий:

* прикладная логич ская т ория н опр д ля т для им ни n ни сорта, ни знач ения; в этом случае при любом а им е ет м е сто а^) = n;
* прикладная логич ская т ория опр д ля т для им ни n знач ни e, которо н зависит от инт рпр таций других им н; в этом случа при любом а им е ет м е сто а^) = e;
* прикладная логич ская т ория опр д ля т для им ни n знач ни e, которо е однозначно опр е деля ется инт ерпр етаци е й других им е н.

Вс е остальные имена являются н еоднозначно интерпр етируемыми. Для каждого такого им ни n прикладная логич ская т ория опр д ля т сорт s, но н е опр е д еля ет знач е ния. В этом случае любая функция инт ерпр етации a удовл етворя ет огранич е нию a(n) e s.

Функция интерпретации a является допустимой для прикладной логич ской т ории, сли вс входящи в р дукцию этой прикладной логич ской т ории пр длож ния им ют смысл при этой функции интерпр етации.

Прикладная логич ская т ория явля тся с мантич ски корр ктной, е сли суще ствует допустимая функция интерпр етации a.

Поскольку множество допустимых подстановок для каждого пр е дложе ния опр е д еля ется пр е фиксом однозначно, а допустимая функция инт рпр тации - н однозначно, то с мантич ски корр ктная прикладная логическая теория определяет множество допустимых функций интерпретации. Легко видеть, что при этих условиях множество неоднозначно интерпретируемых имен любой семантически корректной прикладной логич ской т ории кон чно для любой допустимой функции интерпр етации.

Сужение допустимой функции интерпретации a на множество н еоднозначно интерпр етируемых им ен будем называть моделью прикладной логич ской т ории.

Модель прикладной логической теории может быть задана таким множе ством описаний значений им ен, что после добавления этого множе ства к прикладной логич ской т ории вс им на получ нной таким образом логич ской т ории будут однозначно инт рпр тиру мыми.

1. СТАНДАРТНОЕ РАСШИРЕНИЕ ЯЗЫКА ПРИКЛАДНОЙ ЛОГИКИ

Расшир е ни е языка задает новы е т ермы и формулы, которы е добавляются к ядру многосортного языка прикладной логики. Стандартное расшир ни ST языка прикладной логики вводит синтаксич ски конструкции, присутствующи в н которых сп циальных языках математической логики, а также арифметические и теоретико­множественные константы, операции и отношения. Синтаксис многих конструкций является обычным для математиче ских выражений.

Стандартно расшир ни языка прикладной логики опр д л но в работах [86, 200].

* 1. Т ермы стандартного расшире ния языка прикладной логики

Термами стандартного расширения языка прикладной логики являются:

1. (i(v:t) f(v)) (йота-оператор); J^^i^t) f(v))) равно тому элем енту множества J^t), при подстановке которого вместо переменной v значение J^tfCv)) есть истина; терм имеет значение, если значение J^t) является множеством, а его элемент, при подстановке которого вместо v значение J^tfCv)) е сть истина, явля ется е динстве нным;
2. (X(v1:t1),(v2:t2),...,(vm:tm) t(v1,v2,...,vm)) (ламбда-терм, определяющий функцию с m аргументами); J^XCvbt^^^X.-Xv^O t(v1,v2,...,vm)) есть функция ф от m переменных, всюду определенная на множестве Q^^t^xJ^O^x.^xJ^O^); для любого элем ента <q1,q2,..,qm>eQ знач ение ф^1^2,..^ш) = Jo)0o01(t(vbv2v..,vm)), где подстановка 01=(v1/qbv2/q2v..,vm/qm), а 0°01 есть композиция подстановок; терм имеет значение, если все J^tO, J^efe),..., Ja,0(tm) являются множествами, а терм t(v1,v2,...,vm) для функции инт рпр тации а и подстановки 0 им т знач ни при зам н п р м нных v1,v2,...,vm любыми элементами множеств J^O!)^^^...^^^)

соответстве нно;

1. (A,(v1:t1),(v2:t2),...,(vm:tm) f(vbvm,...,vm)) (ламбда-терм, определяющий предикат); Ja)e((A<(Vl:tl),(v2:t2)v.., (vm:tm) f(vbv2,...,vm))), есть предикат р от m п ерем е нных, всюду опр е д ел енный на множе стве Q=Ja,0(t1)xJa,0(t2)x...xJa,0(tm); для любого элемента <q1,q2,..,qm> е Q значение p(q1,q2,..,qm) & J^^ (f(v1,v2,...,vm)), где подстановка 01 = (v1/q1,v2/q2,...,vm/qm); терм имеет значение, если все J^tO^^),...^,^^) являются множествами, а формула f(v1, v2,...,vm) для функции интерпретации a и подстановки e имеет значение при замене переменных v1,v2,...,vm любыми элементами множеств Ja,e(t1),Jae(t2),..., Ja,e(tm) соответстве нно;
2. /(f1 ^t1),(f2 ^t2),...,(fm ^tm) / (условный терм), где t1,t2 ,...,tm - термы, а fbf2 ,...,fm - формулы; Ja,e(/(f1 ^t0,(f2 ^t2),...,(fm ^tm)/)=Ja,e(tk) при условии, что Ja,e(fk) есть истина; терм имеет значение, если все термы t1,t2 ,...,tm и все формулы f1,f2 ,...,fm имеют значения для функции интерпретации a и подстановки e, а такж сущ ству т динств нно k, при котором Ja,e(fk) сть истина;
3. числовы константы r; Ja,e(r) им т знач ни числа, соотв тствующ го числовой констант r; Ja,e(r) н зависит от a и e;
4. R, причем Ja,e(R) - множество всех вещественных чисел; Ja,e(0) не зависит от a и e;
5. t1+t2, где t1 и t2 - термы; Ja,e(t1+t2) = Ja,e(t1)+Ja,e(t2), т.е. Ja,e(t1+t2) есть сумма Ja,e(t1) и Ja,e(t2); терм имеет значение, если Ja,e(t1) и Ja,e(t2) являются числами;
6. t1-t2, где t1 и t2 - термы; Ja,e(t1-t2) = Ja,e(t1)-Ja,e(t2), т.е. Ja,e(t1-t2) есть

разность м е жду Ja,e(t1) и Ja,e(t2); терм им е ет знач ени е, е сли Ja,e(t1) и Ja,e(t2)

являются числами;

1. t1\*t2, где t1 и t2 - термы; Ja,e(t1\*t2) = Ja,e(t1)\*Ja,e(t2), т.е. Ja,e(t1\*t2) есть произве де ни е Ja,e(t1) и Ja,e(t2); т ерм им е ет знач е ни е, е сли Ja,e(t1) и Ja,e(t2) являются числами;
2. t1/t2, где t1 и t2 - термы; Ja,e(t1/t2) = Ja,e(t1) / Ja,e(t2), т.е. Ja,e(t1/t2) есть частно е от деления Ja,e(t1) на Ja,e(t2); терм им е ет значени е, е сли Ja,e(t1) и Ja,e(t2) являются числами и Ja,e(t2) ^ 0;
3. t1?t2, где t1 и t2 - термы; Ja,e(t1tt2)=Ja,e(t1)TJa,e(t2), т.е. Ja,e(t1tt2) есть

Ja,e(t2) ст еп ень числа Ja,e(t1); терм им е ет знач е ни е, е сли Ja,e(t1) и Ja,e(t2) являются числами и для числа Ja,e(t1) может быть вычислена степ ень Ja,e(t2);

1. 0, прич ем Ja,e(0) есть пусто е множе ство; Ja,e(0) не зависит от a и

e;

1. {tbt2,...,tkj, где t1,t2,...,tk - термы; Ja,e({t1 ,t2,--.,tk})={Ja,e(t1), Ja,e(t2), ..., Ja,e(tk)}, т.е. знач е ни е этого терма е сть множ е ство, эл е м е нтами которого являются Ja,e(t1), Ja,e(t2),..., Ja,e (tk); терм имеет значение, если для функции интерпретации a и подстановки e имеют значения термы t1, t2,..., tk;
2. {}t, где t есть терм; Ja,e({}t) есть множество всех конечных подмноже ств (включая пусто е и, возможно, Ja,e(t)) множе ства Ja,e(t); терм им т знач ни , сли Ja,e(t) явля тся множ ством;
3. {(v:t) f(v)} (интенсиональный квантор); Ja,e({(v:t) f(v)}) е сть подмноже ство вс ех таких элементов множе ства Ja,e(t), что формула Ja,e(f(v))= true при зам ен е v таким элем ентом; терм им е ет значение, е сли Ja,e(t) является множ ством и сли для функции инт рпр тации a и подстановки e формула f(v) им е ет знач е ни е при зам ен е v любым эл е м е нтом множ е ства Ja,e(t);
4. {(v:t) t1(v)} (квантор пр е образования множе ства); Ja,e({(v:t) t1(v)}) сть множ ство вс х знач ний т рма Ja,e(t1) при условии, что п р м нная v

проб е гает вс е эл е м е нты множ е ства Ja,e(t); т ерм им е ет знач е ни е, е сли Ja,e(t) явля тся множ ством и сли для функции инт рпр тации a и подстановки e т ерм t1(v) им е ет знач е ни е при зам е н е v любым эл е м ентом множе ства Ja,e(t);

1. t1 и t2, где t1 и t2 - термы; Ja,e(t1 u t2) = Ja,e(tD u Ja,e(t2), т.е. Ja,e(t1Ut2) есть объединение множеств Ja,e(t1) и Ja,e(t2); терм имеет значение, если Ja,e(t1) и Ja,e(t2) являются множе ствами;
2. t1 n t2, где t1 и t2 - термы; Ja,e(t1 n t2) = Ja,e(tO n Ja,e(t2), т.е. Ja,e(t1nt2) есть пересечение множеств Ja,e(t1) и Ja,e(t2); терм имеет значение, если Ja,e(t1) и Ja,e(t2) являются множе ствами;
3. t1 \ t2, где t1 и t2 - термы, причем Ja,e(t1 \ t2) = Ja,e(tO \ Ja,e(t2), т.е. Ja,e(t1 \ t2) есть разность множеств Ja,e(t1) и Ja,e(t2); терм имеет значение, если Ja,e(t1) и Ja,e(t2) являются множе ствами;
4. ^(t), где t есть терм; Ja,e(^(t)) - мощность множества Ja,e(t); терм им е ет знач е ни е, е сли Ja,e(t) явля ется кон ечным множе ством;
5. t1 й t2, где t1 и t2 - термы; Ja,e(t1 й t2) = Ja,e(t0 й Ja,e(t2), т.е. J^eft^) е сть множе ство Ja,e(t1) в де картовой сте п е ни Ja,e(t2); т ерм им е ет знач е ни е,

сли Ja,e(t1) явля тся множ ством, а Ja,e(t2) - натуральным числом; оп рация "й" обладает всеми свойствами декартовой степени, кроме ассоциативности:

Ja,e((t^ ^)й t3) ^Ja,e(t1 й (t2\* t3));

1. <t1,t2,...,tm>, где t1,t2,...,tm - термы; Ja,e(<t1,t2,...,tm>)=<Ja,e(t1), Ja,e(t2), ...,Ja,e(tm)>, т. . знач ни т рма сть корт ж, составл нный из знач ний Ja,e(t1),Ja,e(t2),...,Jae(tm); терм имеет значение, если для функции интерпр етации a и подстановки e т ермы t1, t2, ..., tm им еют знач е ния;
2. n(t1, t2), где t1 и t2 - термы; Ja,e(n(tb t2)) = n(Ja,e(t1), Ja,e(t2)), т.е.

значение терма есть J^t^-ая проекция кортежа (элемента декартова произве де ния) Ja,e(t2); терм им е ет знач е ни е, е сли Ja,e(t2) явля ется корте же м, состоящим из m элементов, а Ja,e(t1) - натуральным числом, не

пр восходящим m;

1. length(t), гд t - т рм; Ja,e(length(t)) - колич ство эл м нтов в корт еж е Ja,e(t); т ерм им е ет знач ени е, е сли Ja,e(t) явля ется корт е же м.
   1. Формулы стандартного растир ения языка прикладной логики

Формулами стандартного растирения языка прикладной логики являются:

1. t1 = t2, где t1 и t2 - термы; Ja,e(t1 = t2) ^ Ja,e(t1) = Ja,e(t2), т.е. знач ение формулы t1 = t2 сть истина тогда и только тогда, когда знач ния Ja,e(t1) и Ja,e(t2) одинаковы; формула им е ет знач ени е, е сли для функции инт ерпр етации a и подстановки e термы t1 и t2 им еют знач е ния;
2. t1 Ф t2, где t1 и t2 - термы; Ja,e(t1 Ф t2) ^ Ja,e(t1) Ф Ja,e(t2), т.е. значение формулы t1 Ф t2 есть истина тогда и только тогда, когда значения Ja,e(t1) и

J^fe) различны; формула им е ет знач е ни е, е сли для функции инт ерпр етации а и подстановки 0 термы t1 и t2 им еют знач е ния;

1. t1 > t2, где t1 и t2 - термы; J^^ > t2) & J^tD > J^fe), т.е. значение формулы t1 > t2 есть истина тогда и только тогда, когда значение J^tO больше, чем значение J^fe); формула имеет значение, если J^tO и J^fe) являются числами;
2. t1 < t2, где t1 и t2 - термы; J^^ < t2) & J^tD < J^fe), т.е. значение формулы t1 < t2 есть истина тогда и только тогда, когда значение J^tO меньше, чем значение J^fe); формула имеет значение, если J^tO и J^fe) являются числами;
3. t1 < t2, где t1 и t2 - термы; J^^ < t2) & J^tD < J^fe), т.е. значение формулы t1 < t2 есть истина тогда и только тогда, когда значение J^tO м е ньш е либо равно, ч е м знач е ни е J^fe); формула им е ет знач е ни е, е сли J^tD и J^O^) являются числами;
4. t1 > t2, где t1 и t2 - термы; Ja,0(tl > t2) & J^tO > Ja,e(t2), т.е. значение формулы t1 > t2 есть истина тогда и только тогда, когда значение J^tO больш е либо равно, ч е м знач е ни е J^fe); формула им е ет знач е ни е, е сли J^Oi) и J^fe) являются числами;
5. t1 е t2, где t1 и t2 - термы; J^^ е t2) & J^tD е Ja,0(t2), т.е. значение формулы t1 е t2 есть истина тогда и только тогда, когда значение J^tO принадл е жит множ е ству J^fe); формула им е ет знач е ни е, е сли для функции интерпр етации а и подстановки 0 терм t1 име ет значени е, а J^fe) является множ ством;
6. t1 £ t2, где t1 и t2 - термы; J^^ £ t2) & Ja,e(tl) £ J^fe), т.е. значение формулы t1 £ t2 есть истина тогда и только тогда, когда значение J^tO не принадл е жит множ е ству J^fe); формула им е ет знач е ни е, е сли для функции интерпр етации а и подстановки 0 терм t1 име ет значени е, а J^fe) является множ ством;
7. t!Ct2, где t1 и t2 - термы; Ja,e(t1Ct2)^Ja,e(t1)cJa,e(t2), т.е. значение формулы t1 с t2 есть истина тогда и только тогда, когда множество Ja,e(t1) явля ется собственным подмноже ством множ е ства Ja,e(t2); формула им е ет знач ни , сли Ja,e(t1) и Ja,e(t2) являются множ ствами;
8. t!Ct2, где t1 и t2 - термы; Ja,e(t1£t2)^Ja,e(t1)cJa,e(t2), т.е. знач ение формулы t1ct2 есть истина тогда и только тогда, когда множество Ja,e(t1) явля ется подмнож е ством множе ства Ja,e(t2); формула им е ет знач е ни е, е сли Ja,e(t1) и Ja,e(t2) являются множ ствами;
9. t1^t2, где t1 и t2 - термы; Ja,e(t1^t2)^Ja,e(t1)cJa,e(t2), т.е. знач ение формулы t1 <Z t2 есть истина тогда и только тогда, когда множе ство Ja,e(t1) не явля ется подмнож е ством множе ства Ja,e(t2); формула им е ет знач е ни е, е сли Ja,e(t1) и Ja,e(t2) являются множ ствами.
10. ПРИМЕРЫ СПЕЦИАЛИЗИРОВАННЫХ РАСШИРЕНИЙ ЯЗЫКА ПРИКЛАДНОЙ ЛОГИКИ

В данном прилож нии опр д л ны н которы сп циализированны расшир ния языка прикладной логики.

* 1. Специализированное расшир ени е "Интервалы”

Опр е делим сп е циализированное расшир е ни е Интервалы [87,201].

Термами сп ециализированного расшире ния Интервалы являются:

1. [ ]R, причем Ja,e([ ]R) есть множе ство вс ех возможных вещественных интервалов; Ja,e([ ]R) не зависит от a и e;
2. R[t1, t2], где t1 и t2 - термы, значениями которых являются числа, причем значением терма Jae(R[t1, t2]) является подмножество носителя алг браич ской сист мы чис л, эл м нты которого заключ ны м жду значениями термов Jae(t1) и Jae(t2), включая их самих; значение опр еделяемого терма суще ствует, если значени е терма Jae(t1) не больте, чем знач ени е терма Jae(t2);
3. R(t1, t2], где t1 и t2 - термы, значениями которых являются числа, причем значением терма Jae(R(t1, t2]) является подмножество носителя алг браич ской сист мы чис л, эл м нты которого заключ ны м жду знач ениями термов Jae(t1) и Jae(t2), исключая Jae(t1) и включая Jae(t2); знач е ни е определяемого терма существует, если значение терма Jae(t1) меньте, чем знач ени е терма Jae(t2);
4. R[t1, t2), где t1 и t2 - термы, значениями которых являются числа, причем значением терма Jae(R[t1, t2)) является подмножество носителя алг браич ской сист мы чис л, эл м нты которого заключ ны м жду знач ниями т рмов Jae(t1) и Jae(t2), исключая Jae(t2) и включая Jae(t1); знач ни определяемого терма существует, если значение терма Jae(t1) меньте, чем знач ени е терма Jae(t2);
5. R(t1, t2), где t1 и t2 - т ер мы, знач е ниями которых являются числа, причем значением терма Jae(R(t1, t2)) является подмножество носителя алг браич ской сист мы чис л, эл м нты которого заключ ны м жду знач ниями т рмов Jae(t1) и Jae(t2), исключая их самих; знач ни определяемого терма существует, если значение терма Jae(t1) меньте, чем знач ени е терма Jae(t2);
6. R[t, ^), гд е t - терм, знач е ни е м которого явля ется число, прич е м значением терма Jae(R[t, те)) является подмножество носителя алг браич ской сист мы чис л, эл м нты которого н м ньт знач ния т ерма Jae(t);
7. R(t, ^), гд е t - терм, знач е ни е м которого явля ется число, прич е м значением терма Jae(R(t, те)) является подмножество носителя алг браич ской сист мы чис л, эл м нты которого больт знач ния т рма Jae(t);
8. R(-ro, t], где t - терм, значением которого является число, причем знач ени е м т ерма Jae(R(-^, t]) явля ется подмноже ство носит еля

алг браич ской сист мы чис л, эл м нты которого н больш знач ния т рма Jae(t);

1. R(-ro, t), где t - терм, значением которого является число, причем значением терма Jae(R(-^, t)) является подмножество носителя

алг браич ской сист мы чис л, эл м нты которого м ньш знач ния т рма Jae(t);

1. I, причем значением терма Jae(I) является подмноже ство вс ех целых чис л носит ля алг браич ской сист мы чис л;
2. I[t1, t2], гд е t1 и t2 - термы, знач е ниями которых являются ц елы е числа, причем значением терма Jae(I[t1, t2]) является подмножество множества целых чисел, элементы которого заключены между значениями термов Jae(t1) и Jae(t2), включая их самих; значение определяемого терма суще ствует, е сли значение терма Jae(t1) не больше, ч ем значени е терма Jae(t2);
3. I[t, ^), гд е t - т ерм, знач е ни ем которого явля ется ц ело е число, причем значени ем терма Jae(I[t, ^)) является подмноже ство множе ства целых чис ел, эл е м е нты которого н е м е ньш е знач е ния т ерма Jae(t);
4. I(-TO, t], гд е t - т ерм, знач е ни ем которого явля ется ц ело е число, прич е м знач е ни е м терма Jae(I(-^, t]) явля ется подмноже ство множе ства ц лых чис л, эл м нты которого н больш знач ния т рма Jae(t).
5. [ ]I, причем Ja,e([ ]I) есть множество всех возможных

целочисленных интервалов; Ja,e([ ]I) не зависит от a и e;

1. inf(t), где t есть терм; Ja,e(inf(t)) есть минимальный элемент множе ства Ja,e(t); т ерм им е ет знач е ни е, е сли Ja,e(t) является множ е ством чис ел, для которого суще ствует минимальный элемент;
2. sup(t), где t е сть терм; Ja,e(sup(t) е сть максимальный элем ент множе ства Ja,e(t); т ерм им е ет знач е ни е, е сли Ja,e(t) является множ е ством чис ел, для которого суще ствует максимальный элем ент.

Формул новых типов специализированное расширение Интервалы опр д ля т.

* 1. Специализированно е расширение "Математиче ские кванторы”

Определим специализированное расширение Математические кванторы [87,201]. Термами специализированного расширения являются:

1. кванторная конструкция (L(v:t1) t2(v)) (квантор суммирования);

Ja,0(L((v:tl) t2(v))) = Z Ja,0 (t2(v)), т.е. Ja,0(L((v:tl) t2(v))) равно сумм е

vе JO,0(t1)

значений Ja,0(t2(v)), при условии, что связанная переменная v пробегает все элементы множества J^Ol); терм имеет значение, если J^Ol) является множе ством, а Ja,0(t2(v)) - числом при зам ене пер ем енной v любым элем ентом множе ства J^tO;

1. кванторная конструкция (n(v:t1) t2(v)), где (v:t1) (квантор

произведения); Ja,0(n((v:tl) t2(v))) = П J 0(t0(v)), т.е. Ja)0(П((v:tl) t2(v)))

vsJ а,0 (t1) а '0 2

равно произведению значений Ja,0(t2(v)), при условии, что связанная переменная v пробегает все элементы множества J^Ol); терм имеет знач ение, е сли J^Ol) является множе ством, а Ja,0(t2(v)) - числом при зам ене п ерем е нной v любым эл е м е нтом множе ства J^tO;

1. кванторная конструкция (u (v:t1) t2(v)) (квантор объ е дин е ния);

Ja,0(u((v:tl) t2(v))) = и Jа,0 (t2(v)), т.е. Ja,0(u((v:tl) t2(v))) равно

vеJa ,0 (t1)

объединению значений Ja,0(t2(v)), при условии, что связанная переменная v пробегает все элементы множества Ja,0(t1); терм имеет значение, если Ja,0(t1) является множеством, а Ja,0(t2(v)) - множеством при замене переменной v любым эл ем е нтом множе ства Ja,0(t1);

1. квнторная конструкция (n (v:t1) t2(v)) (квантор пересечения); Ja,e

(n((v:t1) t2(v))) = I J a,e (t2(v)) т.е. Ja,e (n((v:t1) t2(v))) равно

veJa,e (t1)

пересечению значений Ja,e(t2(v)), при условии, что связанная переменная v пробегает все элементы множества Ja,e(t1); терм имеет значение, если Ja,e(t1) явля тся множ ством, а Ja,e(t2(v)) - множ ством при зам н п р м нной v любым эл ем ентом множе ства Ja,e(t1).

Формулами сп циализированного растир ния являются:

1. кванторная конструкция (&(v:t) f(v)) (квантор конъюнкции);

Ja,e(&((v:t) f(v)))^ & Ja,e(f(v)), т.е. значение формулы истина тогда и

veJa ,e(t)

только тогда, когда все значения Ja,e(f(v)) есть истина при условии, что связанная п р м нная v проб га т вс эл м нты множ ства Ja,e(t); формула им т знач ни , сли Ja,e(t) явля тся множ ством, и для функции интерпр етации a и подстановки e формула f(v) им е ет значение при зам ене п ерем е нной v любым эл е м е нтом множе ства Ja,e(t1);

1. кванторная конструкция (v(v:t) f(v)) (квантор дизъюнкции);

Ja,e(v((v:t) f(v)))^ v Ja,e(f(v)), т.е. значение формулы истина тогда и

veJ a ,e(t)

только тогда, когда хотя бы одно из значений Ja,e(f(v)) есть истина при условии, что связанная п р м нная v проб га т вс эл м нты множ ства Ja,e(t); формула им е ет знач е ни е, е сли Ja,e(t) явля ется множе ством, и для функции интерпретации a и подстановки e формула f(v) име ет знач ение при зам н п р м нной v любым эл м нтом множ ства Ja,e(t1).

* 1. Специализированное растирение "Псевдонимы"

Определим сп ециализированно е растир ение Псевдонимы [35]. Данно е сп циализированно растир ни опр д ля т динств нный т рм:

(let (v1: t1), (v2: t2), ..., (vm: tm) t(vbv2,.. ..,vm)), где vbv2,.. ..,vm- различны е п ерем енны е, t1, t2,.., tm - термы, t(v1,v2,^.,vm) - терм, содержащий п ерем енны е v1,v2,^.,vm. Пер ем енны е v1,v2,^.,vm являются связанными в этом терм е; терм t1 не содержит пер ем енных v1,v2,^.,vm, терм t2 не содержит п ерем енных v2,....,vm, терм tm н е содержит пер ем енной vm. Значени е Ja,e((let (v1: t1), (v2: t2), ..., (vm: tm) t(v1,v2,..,vm))) есть значение терма t, полученное в р зультат зам ны п р м нных v1,v2,..,vm знач ниями Ja,e(t1), Ja,e(t2), ., Ja,e(tm). Терм им е ет знач е ни е, е сли для функции интерпретации a и подстановки e терм t(v1,v2,..,vm) име ет значени е при зам ене п ерем енных vbv2,....,vm значениями Ja,e(t1), Ja,e(t2), ., Ja,e(tm).

Специализированное расширение Псевдонимы определяет динств нную формулу:

(let (vb t1), (v2: t2), ., (vm: tm) f(vbv2,....,vm)), где v1,v2,..,vm- различные п ерем енны е, t1, t2,.., tm - термы, f(v1,v2,..,vm) - формула, содержащая п ерем енны е v1,v2,..,vm. Пер еменны е v1,v2,..,vm являются связанными в этой формуле; терм t1 не содержит пер ем енных v1,v2,..,vm , терм t2 н е содержит п ерем енных v2,..,vm , терм tm не содержит п ерем енных vm . Знач ение Ja,e((let (vb t1), (v2: t2), ..., (vm: tm) f(vbv2,.. ..,vm))) есть знач е ни е формулы f, полученно е в р езультате зам ены перем енных vbv2,....,vm значениями Ja,e(t1), Ja,e( t2), ..., Ja,e( tm). Формула им е ет значение, е сли для функции

интерпр етации a и подстановки e терм t(v1,v2,..,vm) им е ет знач ение при зам ене пер ем енных v1,v2,..,vm значениями Ja,e(t1), Ja,e(t2), ., Ja,e(tm).

ПРИЛОЖЕНИЕ 2. МОДЕЛЬ ОНТОЛОГИИ ВТОРОГО УРОВНЯ ДЛЯ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ

1. МОДУЛЬ "СВОЙСТВА ЭЛЕМЕНТОВ"

Прикладная логическая теория Свойства элементов^Т, Интервалы) = <{ Онтология тр етьего уровня для физич е ской химии, Константы онтологии физич е ской химии}, SS>, гд е SS - это множе ство пр е дложе ний прикладной логич ской т ории, опр д ля мо ниж . Данная прикладная логич ская теория использует предложения прикладной логической теории, опр еделяющей модель онтологии второго уровня для физиче ской химии. Вс е н однозначно инт рпр тиру мы символы данной логич ской т ории являются т рминами для описания знаний (парам трами п рвого уровня).

1. Сорт Атомный ном ер: Собств енны е свойства элем ентов(1[0, 108]) Атомный ном р эл м нта соотв тству т го числу протонов; б зразм рная в личина
2. сорт Атомный вес: Собственные свойства элементов^[0, Максимальное знач ени е атомного ве са])

Атомный в е с эл е м ента - это отнот е ни е массы данного эл е м ента к 1/12 массы 12-го изотопа угл рода; изм ря тся в атомных диницах массы

1. Названия химич е ских групп = {alb, aIIb, aIIIb, aIVb, aVb, VIII, b}
2. сорт Химическая группа: Собственные свойства элементов(Названия химич ских групп)

Химич ская группа - это названи колонки в таблиц М нд л ва данного эл м нта

1. сорт Химический период: Собственные свойства элементов (I[ 1,7])

Химич ский п риод - это ном р строки в таблиц М нд л ва данного элем ента; безразм ерная в еличина

1. сорт Электроотрицательность : Собственные свойства элементов^[0, граница(Эл ктроотрицат льность)])

Электроотрицательность - это способность элемента приобретать эл е ктроны; б езразм ерная величина

1. сорт Эл е ктронное сходство: Собственны е свойства эл е м е нтов(Я[0,

Граница(Электронное сходство)])

Электронное сходство - это энергия, которая освобождается, когда газообразный нейтральный атом элемента захватывает электрон с образованием аниона; изм еряется в электрон-вольтах, где 1э.в.=1.6\*10-19 Дж

1. сорт Полужизнь: Собств е нны е свойства эл е м е нтов(Я[0,

Граница(Полужизнь)])

Полужизнь - это вр мя, н обходимо для распада половины вс х атомов радиоактивного эл м нта из вс х им ющихся; изм ря тся в годах

1. сорт Энергия ионизации: Свойства эл ектронов элем ента (R[0, то))

Энергия ионизации - энергия, не обходимая для отрыва электрона, самого отдал нного от ядра газообразного атома эл м нта, и пр вращ ния атома в газообразный катион; различают эн ргию ионизации, н обходимую для отрыва самого п ервого эл е ктрона, за ним второго, тр етье го и т.д.; измеряется в электрон-вольтах, где 1 э.в. = 1.6 \* 10-19 Дж

1. сорт Степень окисления: Собственные свойства элем ентов({}1[-

Граница(Сте п ень окисл ения), Граница(Ст еп ень окисл ения)])

Степень окисления - это множество возможных значений, как положит льных так и отрицат льных; б зразм рная в личина

1. Константа радиоактивности = (A (e: Химиче ски е элементы) 1 /

Полужизнь (e))

Вспомогательный термин "Константа радиоактивности" - это вероятность того, что атом распад тся в диницу вр м ни; обратная по отнош нию к полужизни в личина; изм ря тся в 1/год

1. сорт Атомный объем: Зависящи е от температуры свойства простых веще ств^[0, Граница(Атомный объем)])

Атомный объем - это объем, который занимает 1 атом-грамм элемента; измеряется в см3/моль; атомный объем - это функция, аргументами которой являются химич ский эл м нт и таблично знач ни т мп ратуры

1. сорт Сопротивл ни : Зависящи от т мп ратуры свойства простых веще ств^[0, Г раница(Сопротивлени е)])

сопротивл ни - эл ктрич ско сопротивл ни куба со стороной 1 см; изм еря ется в мкОм \* см; сопротивл е ни е - это функция, аргум е нтами которой являются химич ский эл м нт и таблично знач ни т мп ратуры

1. Атомная плотность = (A (e: Химич е ски е эл е м е нты) (t: Табличны е знач ения темп ературы) Атомный в е с^) / Атомный объем^, t))

атомная плотность эл м нта - это в личина, производная от атомного в са и атомного объ ма

1. сорт Удельная теплоемкость: Зависящие от температуры свойства простых веществ^[0, Граница(Удельная тепло емкость)])

удельная теплоемкость - это способность в еще ства аккумулировать тепло на единицу вещества; измеряется в К/(Дж \* моль); удельная т пло мкость- это функция, аргум нтами которой являются химич ский элем ент и таблично е значени е температуры

1. сорт Т еплопроводность: Зависящие от температуры свойства простых веще ств^[0, Граница(Т еплопроводность)])

т е плопроводность - это способность в е щ е ства проводить т е пло; изм еря ется в Дж / (m \* c); те плопроводность - это функция, аргум е нтами которой являются химич ский эл м нт и таблично знач ни т мп ратуры

1. МОДУЛЬ “СВОЙСТВА ВЕЩЕСТВ”

Прикладная логич е ская т е ория "Свойства вещ е ств"(8Т, Инт ервалы, Математиче ски е кванторы) = <{“Свойства элем ентов”}, 8БВ>, где 8БВ е сть множество предложений прикладной логической теории, описанное ниже. Данная прикладная логич ская т ория использу т пр длож ния прикладной логич ской т ории “Свойства эл м нтов”. Вс н однозначно

инт рпр тиру мы символы данной логич ской т ории являются т рминами

для описания знаний.

1. Возможны е формулы = (u (n: I[1, Максимальное число составляющих]) {(v: ((х Химиче ски е элем енты, Ц-Максимальная степень окисления, Максимальная степень окисления], I[1, Максимальный коэффициент])йп)) (&(i: I[1, length(v)]) (&(j: I[1, length(v)] \ {i}) n(i, v) Ф n(j, v)))}) u (u (n: I[1, Максимально число составляющих]) {(v: ((х Возможны формулы u Химич е ски е эл е м е нты, Ц-Максимальная ст е п е нь окисл е ния, Максимальная степень окисления], I[1, Максимальный коэффициент])^)) (&(i: I[1, length(v)]) (&(j: I[1, length(v)] \ {i}) n(i, v) Ф n(j, v)))}) Вспомогательный термин "Возможные формулы" обозначает множество пр е дставл е ний формул химич е ских в е щ е ств.
2. число атомов = (A (v: возможные формулы) (k: Химические элементы) (Z(i: I[1, length(v)]) / (п(1, n(i, v)) e Химиче ски е элем енты & (п(1, n(i, v)) = k ^ п(3, n(i, v))), (п(1, n(i, v)) e Химиче ские элем енты & (п(1, n(i, v)) Ф k ^ 0), (п(1, n(i, v)) ^ Химич е ски е эл е м е нты ^ число атомов(тс(^ v), k) \* п(3, n(i, v)))/))

вспомогат ельный термин "число атомов" е сть функция, которая по формуле вещества и идентификатору элемента возвращает суммарное число атомов этого эл м нта во вс х компон нтах и подкомпон нтах формулы данного в щ ства

1. заряд = (A (v: возможные формулы) (Z (i: I[1, length(v)]) п(2, n(i, v)) \* п(3, n(i, v))))

вспомогательный термин "заряд" есть функция, которая по формуле возвраща т суммарный заряд как сумму зарядов по вс м компон нтам формулы с уч том коэффици нтов

1. Просты е веще ства = {(v: Химиче ски е в еще ства) length(Формула(v)) = 1 & п(1, п(1, Формула(v))) e Химич е ские элементы} просто в щ ство - это в щ ство, мол кулу которого образуют атомы одного химич ского эл м нта
2. сорт Формула: Собств е нны е свойства в е щ е ств(Возможны е формулы) собственным свойством веще ства является его формула
3. (v: {Эбулиоскопиче ская константа, Криоскопич еская константа, Молярная т плота плавл ния, Молярная т плота парообразования, Коэффици нт т е плового расшир е ния, Молярная масса}) сорт v: Собств е нны е свойства веще ств^[0, Граница^)])

собственными свойствами вещества являются следующие свойства:

* эбулиоскопич е ская константа; изм еря ется в К2/(моль \* г)
* криоскопич е ская константа; изм еря ется в К2/(моль \* г)
* молярная т еплота плавл ения; изм еря ется в Дж/(моль \* г)
* молярная т е плота парообразования; изм еря ется в Дж/(моль \* кг)
* коэффициент теплового расширения; измеряется в Дж/см
* молярная масса - это масса одного моля веще ства; изм еряется в г/моль

1. сорт Давл ни насыщ нного пара: Зависящи от т мп ратуры свойства веще ств^[0, Максимальное давлени е ])

давл ни насыщ нного пара; изм ря тся в Па; давл ни насыщ нного зависит от темп ературы

1. сорт Изобарный поте нциал: Зависящи е от те мп ературы свойства

веще ств^[ - Граница(Изобарный потенциал), Граница(Изо барный

поте нциал)])

изобарный поте нциал; изм еря ется в Дж/моль; знач е ни е изобарного потенциала зависит от темп ературы

1. (v: {Температура замерзания, Температура кипения}) сорт v: Зависящие от давл е ния свойства в е щ е ств^[-Граница(Те мп ература),

Г раница(Т е мп ература)])

зависящими от давления свойствами веществ являются температура зам ерзания и температура кипения; измеряются в К

1. (v: {Молярная энтальпия образования, Молярная энтропия, Молярная эн ргия Гиббса образования, Плотность, Молярный объ м}) сорт v: Зависящие от температуры и давления свойства веще ств ^[-Граница©), Граница©)])

зависящие от температуры и давления свойства вещества:

* молярная энтальпия образования; изм ря тся в Дж/моль
* молярная энтропия; изм ря тся в Дж/(К \* моль)
* молярная эн ргия Гиббса образования; изм ря тся в Дж/моль
* плотность; изм ря тся в г/см3
* молярный объ м; изм ря тся в см3

1. сорт Устойчиво: Зависящие от температуры и давления свойства веществ©)

устойчиво - пр дикат, истинный, сли при данных давл нии и

т мп ратур в щ ство устойчиво

Прив д м т п рь онтологич ски соглаш ния.

1. (i: Химиче ские веще ства) (t: Табличны е значения темп ературы) (p: Табличные знач е ния давл е ния) Плотность© t, p) = Молярная масса© / Молярный объем© t, p)

плотность вещества при любых температуре и давлении равна частному от дел е ния е го молярной массы на молярный объ е м

1. (i: Химические вещества) (t: Табличные значения температуры) (p: Табличные знач е ния давл е ния) Молярная эн ергия Гиббса образования© t, p) = Молярная энтальпия образования© t, p) - Молярная энтропия (i,t,p)\*t молярная эн ргия Гиббса образования в щ ства при данных т мп ратур и давлении - это разность молярной энтальпии образования вещества и произведения молярной энтропии в еще ства на температуру
2. (t: Табличны е знач е ния т е мп ературы) (p: Табличны е знач е ния давл е ния) (i: {(i’: Просты е ве щ е ства) Устойчиво©, t, p)}) Молярная энтальпия образования© t, p) = 0 е сли просто е в еще ство устойчиво при некоторых температур е и давлении, то принима м знач ни го молярной энтальпии образования при этих темп ературе и давлении равным нулю
3. МОДУЛЬ “СВОЙСТВА РЕАКЦИЙ”

Прикладная логическая теория Реакции (ST, Интервалы, Мат ематич е ски е кванторы) = <{“Ве щ е ства”}, SS^ использу ет пр е дложе ния прикладной логической теории “Вещества”. Все неоднозначно инт рпр тиру мы символы данной логич ской т ории являются т рминами для описания знаний.

1. постоянная Фарадея = 96485

вспомогательный термин "постоянная Фарадея" - константа предметной области; изм ря тся в Кл/Дж

1. возможны состояния в щ ств = { жидко , раствор нно , газово , тв рдо } вспомогательный термин возможные состояния веществ обозначает множе ство возможных состояний в еще ств
2. сорт Эл е м е нтарная: Собств е нны е свойства р е акций(Ь)

собств енным свойством ре акции является свойство е е элем ентарности

1. сорт Окислительная: Собственные свойства ре акций (L)

собств енным свойством р е акции явля ется е е свойство быть окислительной р акци й

1. сорт Восстановительная: Собств е нны е свойства р е акций (L) собственным свойством реакции является ее свойство быть восстановит льной р акци й
2. сорт Сложная: Собств нны свойства р акций (L)

собственным свойством реакции является ее свойство быть сложной р акци й

1. сорт Обратимая: Собств нны свойства р акций (L)

собственным свойством реакции является ее свойство быть обратимой р акци й

1. сорт Н е обратимая: Собстве нны е свойства р е акций (L)

собственным свойством реакции является ее свойство быть необратимой р акци й

1. сорт Восстановительная: Собств енные свойства р е акций (L) собственным свойством реакции является ее свойство быть восстановит льной р акци й
2. (v: {Верхняя температурная р е акции, Нижняя температура р е акции}) сорт v: Собстве нны е свойства ре акций^[0, Максимальная те мпература])

Свойствами р е акции являются в ерхняя и нижняя температуры р е акции - это максимально е и минимальное значения температуры, при которых р е акция им т м сто

1. (v: {Верхнее давление реакции, Нижнее давление реакции}) сорт v: Собственные свойства ре акций^[0, Максимально е давление ]) свойствами р акции являются в рхн и нижн давл ни р акции - это максимальное и минимальное значения давления, при которых реакция им т м сто
2. Сорт Возможные пути протекания: Собственные свойства

ре акций({ }{}Химич е ские р е акции)

Т ермин "Возможны е пути проте кания" обозначает функцию, аргум е нтом которой явля тся химич ская р акция, а р зультатом - множ ство пут й протекания (каждый путь пр едставляется множе ством р е акций)

1. сорт Катализаторы: Зависящие от пути свойства реакций({}Химические в щ ства)

зависящим от пути свойством р акции явля тся свойство "катализаторы" - это в щ ства, ускоряющи или д лающи возможным тот или иной путь химич ской р акции

1. сорт Стехиометриче ский коэффициент: Свойства участников р е акций(Ц0, Г раница(Стехиом етриче ский коэффициент)])

свойством участника реакции является стехиометрический коэффициент - это ц ло знач ни , обозначающ минимально число мол кул р аг нта или результата принимающе е участие в одном акте химиче ской р е акции вме сте с другими участниками

1. сорт Мольная доля: Свойства участников р е акций^[0, 1])

свойством участника реакции является мольная доля - это отношение колич ства в щ ства участника к общ му колич ству в щ ства участников р акции, при котором р акция им т м сто

1. сорт Состояние участника: Свойства участников ре акций(возможны е

состояния веще ств)

свойством участника р акции явля тся состояни участника - это то состояние участвующего в р е акции в ещ е ства, при котором эта ре акция име ет м сто

1. (v: {Изменение молярной энтальпии, Измене ние молярной энтропии,

Изм е не ние молярной энергии Гиббса, КР, Эл е ктродный поте нциал, Вольт эквивалент}) сорт v: Зависящие от температуры и давления свойства ре акций^[- Г раница^),Г раница^)])

зависящие от температуры и давления свойства реакций:

* изм енение молярной энтальпии р е акции; измеря ется в Дж/моль
* изм е не ние молярной энтропии ре акции; изм еря ется в Дж/(моль \* К)
* изм енение молярной энергии Гиббса; изм еря ется в Дж/моль
* константа равновесия химической реакции по парциальным давлениям, общ е принято е химич е ско е обознач е ние “КР”; безразм ерная в еличина
* эл ктродный пот нциал окислит льно-восстановит льной р акции;

измеря ется в Дж/Кл

* вольт эквивалент окислительно-восстановительной р е акции; изм еря ется в Дж/Кл

1. сорт KC: Собств енные свойства р е акций^[- Граница(КС),Граница(КС)]) константа равнове сия химической р е акции по равнове сным концентрациям, общ принято химич ско обознач ни “КС”; б зразм рная в личина
2. сорт Уравнение диссоциации: Собств енные свойства веще ств({} Химич е ские р акции)

собственным свойством химического вещества является уравнение диссоциации в водном раствор

1. сорт Н е эл е ктролит: Собстве нны е свойства в е щ е ств^)

собственным свойством вещества является его свойство быть неэлектролитом

1. сорт Эл е ктролит: Собств е нны е свойства в е щ е ств^)

собств енным свойством веще ства является его свойство быть электролитом

1. сорт Слабый эл е ктролит: Собств е нны е свойства ве щ е ств^) собственным свойством вещества является его свойство быть слабым электролитом

Приведем теперь онтологиче ские соглаш ения.

1. (i: Химиче ские веще ства) Электролит(1) ^ Уравне ние диссоциации(1)^0 электролит - это химиче ское в ещ е ство, которо е способно диссоциировать
2. (i: Химиче ские веще ства) Н еэлектролит^) ^ Уравнение диссоциации(^=0 неэлектролит - это химическое вещество, которое неспособно диссоциировать
3. (f: Химич е ские ре акции) (2 (г: Р е аге нтыф и Р езультаты(^) Мольная доля(г)) <1

сумма мольных долей р е агентов и р езультатов химиче ских р е акций вс егда не больш диницы

1. (f: {(f: Химиче ские р е акции) Элем ентарная(1)}) Возможные пути

проте кания(^ = 0

у эл м нтарных р акций н т возможных пут й прот кания

1. (f: {(f: Химич е ские ре акции) Сложная^}) Возможны е пути проте кания(1)^

0

у сложных р акций сть возможны пути прот кания

1. (f: Химич е ские ре акции) (ff: Возможны е пути проте кания(1)) f <£ ff

ре акция не может принадлежать ни одному из своих путей протекания

1. (f: Химич е ские р е акции) (ff: Возможные пути проте кания(1)) p,(ff) > 2 каждый возможный путь прот кания н которой р акции сод ржит н м н двух р акций, эл м нтарных по отнот нию к данной
2. (f1: Химич е ские р е акции) (ff: Возможны е пути проте кания(А)) (f2: ff) Р е аге нты(f2) с ( u (f: {(f”: ff) f’’ Ф f2}) P езультаты^ ’)) u P е аге нты(f1) u Катализаторы(f1, ff)

вс е р е агенты любой элементарной р е акции любого пути протекания входят во множество результатов всех других элементарных реакций этого пути, объ дин нно с множ ством р аг нтов исходной р акции и с множ ством катализаторов исходной р акции этого пути;

иными словами, параллельно или последовательно идущие р е акции одного пути могут использовать р аг нты и р зультаты друг друга

1. (f: Химич е ские ре акции) (ff: {(ff’: Возможные пути протекания^)

Катализаторы^, ff) Ф 0}) Катализаторы^, ff) с (u (f”: ff) Р е аге нты(Г’)))

сли для н которого пути прот кания химич ской р акции множ ство катализаторов н пусто, то для этого пути у р акции сть р акции, объ дин нному множ ству р аг нтов которых принадл жат эти катализаторы

1. (f: Химич е ские ре акции) (ff: Возможны е пути проте кания(^) Р езультаты^ с ( u (f’: ff) Р езультаты^))

р зультаты химич ской р акции принадл жат множ ству р зультатов вс х элементарных реакций на любом пути протекания;

иными словами, р зультатами исходной р акции являются р зультаты составляющих р акций

1. (f: Химиче ские р е акции) (ff: Возможные пути протекания^) (f: ff) Верхняя те мпература ре а.кции(Г) < Верхняя те мпература р е акции (f) & Нижняя температура р е а.кции(Г) > Нижняя температура р е а.кттии(^ & Верхне е давл е ние р е акпии(f’) < Верхне е давл е ние р е акции(^ & Нижне е давл е ние ре акции(Г) > Нижне е давл е ние р е акцииф

условия протекания элементарных реакций соответствуют условиям протекания исходной р е акции

1. (v: {^':Химиче ские веще ства) Уравнение диссоциации^) Ф 0}) (vl:

Уравнение диссоциации(v)) (ц(Реагенты^1)) = 1) & v е Реагенты^1) & (ц(Результаты^1)) = 2) & (& (г’: Результаты^)) заряд(Формула(г’)) Ф 0) & (& (г’’: Р е аге нты^1) u Р езультаты(v1)) Стехиом етрич е ский

коэффицие нт(г’’) = 1)

уравнение диссоциации химического вещества описывает процесс его диссоциации в водном растворе по текущей ступени. Единственным реагентом является само вещество, оба результата являются ионами, стехиом етриче ские коэффициенты ре агентов и р езультатов равны 1

1. (v: Химич е ские в ещ е ства) ц(Уравнение диссоциации^)) < 1

для любого химического вещества может быть задано не более одного уравн ния диссоциации

1. (f: Химиче ские р е акции) (i: Химиче ские элеме нты) (Z (г1: Р е агенты^)

Стехиом етрич е ский коэффицие нт(^ г1) \* число атомов(Формула(г1), i)) = (Z (г2: Результаты^) Стехиометрический коэффициент(f, г2) \* число

атомов(Формула(г2), i))

закон сохранения веще ства для р е акций: число атомов любого элем ента для р аг нтов р акции равно числу атомов этого эл м нта для р зультатов р акции

1. (f: Химич е ские р е акции) (t: Табличные знач е ния те мпературы) (p: Табличны е

значения давления) (Z (г2: Результаты^) Молярная энтальпия

образования(г2, t, p) \* Стехиом етриче ский коэффициент^, г2)) - (Z (г1: Р е аге нты (f)) Молярная энтальпия образования(г1, t, p) \* Стехиом етрич е ский коэффицие нт(^ г1)) = Изм е не ние молярной энтальпии^, t, p)

изменение молярной энтальпии химич е ской р е акции - это разность сумм молярных энтальпий образования р езультатов и ре агентов, помноженных на стехиом етриче ские коэффициенты

1. (f: Химич е ские р е акции) (t: Табличные значения температуры) (p: Табличные знач е ния давл е ния) (Z (г2: Р езультаты^) Молярная энтропия(г2, t, p) \* Стехиометриче ский коэффициент^, г2)) - (Z (г1: Ре агенты (f)) Молярная энтропия(г1, t, p) \* Стехиом етрич е ский коэффицие ffr(f, г1)) = Изм е не ние молярной энтропии^, t, p)

изменение молярной энтропии химической реакции - это разность сумм молярных энтропий образования р езультатов и ре агентов, помноженных на стехиом етриче ские коэффициенты

1. (f: Химич е ские р е акции) (t: Табличные знач е ния те мпературы) (p: Табличны е знач е ния давл е ния) Изм е не ние молярной энергии Г иббса(^ t, p) = Изм е не ние молярной энтальпии^, t, p) - Изменение молярной энтропии^, t, p) \* t

изм е не ние молярной энергии Гиббса химич е ской р е акции при данных температуре и давлении - это разность изменения молярной энтальпии р акции и произв д ния изм н ния молярной энтропии р акции на те мпературу

1. (f: Химич е ские р е акции) (t: Табличные знач е ния те мпературы) (p: Табличны е знач е ния давл е ния) Изм е не ние молярной энергии Г иббса(^ t, p) = Изм е не ние молярной энтальпии^, t, p) - Изменение молярной энтропии^, t, p) \* t сумма зарядов всех реагентов химической реакции, помноженных на стехиом етрич е ские коэффицие нты, равна сумм е зарядов вс ех е е р езультатов, помноженных на стехиометриче ские коэффициенты
2. (f: Химич е ские р е акции) Р е аге nrbi(f) п Р езультаты(^ = 0 & Катализаторы^ п Результаты^ = 0 & Ре агенты^ п Катализаторы(^= 0

реагенты, результаты и катализаторы химических реакций попарно не пересекаются, т.е. из рассмотрения исключаются автокаталитические р акции

1. МОДУЛЬ "ОСНОВЫ ТЕРМОДИНАМИКИ"

Введем специальное расширение “Конкатенация имен”, состоящее из одного терма: t1 II t2, прич е м J^e(t1) е N, J^e(t2) е N, J^e(t1 II t2) е N, J^e(t1 II t2)

е сть имя, являющ е е ся конкате нацие й им е н J^e(t1) и J^e(t2).

Прикладная логическая теория “Основы термодинамики”(“Конкатенация им ен”) = <{“Свойства в еще ств}, SS>, где SS - множе ство пр едложений языка прикладной логики, приведенно е ниже.

1. Типы парам етров = {эксте нсивны е парам етры, инте нсивны е парам етры, удельны е парам етры, моляр ны е парам етры, дольны е парам етры} определим пять типов параметров, которые будут использоваться в дальне йт е м: эксте нсивные и инте нсивны е парам етры - это два класса термодинамических параметров состояния (экстенсивные обладают свойством аддитивности, интенсивные характеризуются одними и теми же значениями во всех точках системы в состоянии равновесия); удельные, молярные и дольные - производные от экстенсивных
2. эксте нсивны е парам етры = {масса, колич е ство, объ е м, изохорная

теплоемкость, изобарная теплоемкость, теплоемкость, внутренняя энергия, энтальпия, энтропия, энергия Гиббса, энергия Г ельмгольца}

опр еделим названия экстенсивных параметров состояния

1. инте нсивны е парам етры = {те мпература, давл е ние, плотность, химич е ский поте нциал}

опр еделим названия интенсивных параметров состояния

1. удельные параметры = {(v: экстенсивные парам етры \ {масса }) уд-iiv} названия удельных параметров состояния формируются из названий экстенсивных парам етров (кром е параметра “масса”) добавлением пр е фикса

“уд.”

1. молярные параметры = {(v: экстенсивные параметры \ {количество}) мол-iiv} названия молярных параметров состояния формируются из названий экстенсивных параметров (кроме параметра “количество”) добавлением пре фикса “мол.”
2. дольные парам етры = {(v: экстенсивные\_параметры) дол-iiv}

названия дольных параметров формируются из названий экстенсивных параметров добавлением пр е фикса “дол.”

1. (v: {масса, мол.масса, колич е ство, объ е м, уд.объ е м, мол.объ е м, изохорная теплоемкость, уд.изохорная теплоемкость, мол.изохорная теплоемкость, изобарная теплоемкость, уд.изобарная теплоемкость, мол.изобарная

теплоемкость, теплоемкость, уд.теплоемкость, мол.теплоемкость,

плотность}) сорт v: общие свойства системы(Щ0, ^)) указанные общие свойства системы им еют областью допустимых знач ений множе ство не отрицательных действительных чис ел

1. сорт тип системы: собственные свойства проце сса({ изолированная,

открытая, закрытая})

1. (v: { большой т рмодинамич ской пот нциал, работа, т плообм н}) сорт v: свойства проце сса и фазы^[0, то))

большой термодинамический потенциал, работа и теплообмен являются свойствами проце сса и фазы

1. сорт те мпература: общие свойства систе мы^[0, Максимальная

те мпература])

свойством термодинамиче ской системы явля ется температура

1. сорт давление: общие свойства системы^[0, Максимально е давление ]) свойством термодинамиче ской системы явля ется давление
2. (v: {внутр е нняя энергия, уд.внутр е нняя энергия, мол.внутр е нняя эн ергия, энтальпия, уд.энтальпия, мол. энтальпия, энтропия, уд.энтропия, мол.энтропия, энергия Гиббса, уд.энергия Гиббса, мол.энергия Гиббса, энергия Гельмгольца, уд.энергия Гельмгольца, мол.энергия Гельмгольца, химиче ский потенциал}) сорт v: общие свойства системы^(-го, то))

Указанны е общие свойства систе мы им еют областью допустимых знач е ний всю ось действительных чис ел

1. (v: дольные параметры) сорт v: свойства веще ства проце сса^[0, 1]) множество свойств веществ процесса включает дольные параметры; их областью допустимых значений являются значения в действительном интервал е от 0 до 1

Приведем теперь онтологиче ские соглаш ения.

1. (т: I[1, число шагов процесса]) (v: экстенсивные параметры \ {масса}) v(t) / масса(т) = уд.!к(т)

отне с ение экстенсивного парам етра системы к единице е е массы придает ему свойство интенсивного параметра, называемого удельной величиной

1. (т: I[1, число шагов проце сса]) (v: эксте нсивны е парам етры \ {масса}) (s: веще ства проце сса(т)) v(T,s) / масса(т^) = уд.1к(т^) отнесение экстенсивного параметра ингредиента системы к единице ее массы придает ему свойство интенсивного парам етра, называемого удельной величиной
2. (т: I[1, число шагов проце сса]) (v: экстенсивные парам етры \ {количе ство}) v(t) / колич е ство(т) = мол.!к(т)

отне с ение экстенсивного парам етра системы к единице количе ства придает ему свойство интенсивного параметра, называемого молярной в еличиной

1. (т: I[1, число шагов проце сса]) (v: экстенсивные параметры \ {количе ство}) (s: в ещ е ства проце сса(т)) v(T,s) / колич е ство(т^) = мол.!к(т,8)

отнесение экстенсивного параметра составляющего системы к единице количества придает ему свойство интенсивного параметра, называемого молярной в еличиной

1. (т: I[1, число шагов процесса]) (i: вещества процесса(т)) (v: экстенсивные парам етры) дол.!к(т, i) = v(t, i) / v(t)

доля по экстенсивному парам етру веще ства на некотором шаге проце сса - это отношение значения этого параметра для вещества к значению этого параметра для системы на данном шаге проце сса

1. (т: I[1, число шагов процесса]) (v: экстенсивные параметры) v(t) = (2 (i: веще ства проце сса(т)) v(r, i))

значение экстенсивного параметра для каждого шага процесса есть сумма его значений по вс ем в еще ствам этого шага

1. (т: I[1, число шагов процесса]) плотность(т) = масса(т) / объем(т) связь массы, объ ема и плотности на каждом шаге проце сса
2. (т: I[1, число шагов процесса]) (i: вещества процесса(т)) плотность(тд) = масса(тд) / объ ем(тД)

связь массы, объ ема и плотности для в е ще ств каждого шага проце сса

1. (т: I[1, число шагов процесса]) внутренняя энергия(т+1) - внутренняя энергия(т) = те плообм е н(т+1) + работа(т+1)

перво е начало термодинамики вводит понятие внутр енней энергии системы как функции состояния на каждом шаге проце сса

1. (т: I[1, число тагов проце сса]) (энтальпия(т) = внутренняя энергия(т) + давление (т) \* объ ем(т))

энтальпия системы как функция состояния для каждого тага проце сса

1. (т: I[1, число тагов проце сса]) энергия Г ельмгольца(т) = внутр е нняя энергия(т) - температура(т) \* энтропия(т)

энергия Г ельмгольца систе мы как функция состояния для каждого тага процесса

1. (т: I[1, число тагов проце сса]) энергия Гиббса(т) = внутр е нняя энергия (т) - температура(т) \* энтропия(т) + давление (т) \* объ ем(т)

энергия Гиббса систе мы как функция состояния для каждого тага проце сса

1. (т: I[1, число тагов проце сса]) (i: в ещ ества проце сса(т)) мол. масса(т, i) = Молярная масса(0

молярная масса вещества на каждом таге процесса совпадает с молярной массой этого веще ства

1. МОДУЛЬ “ТЕРМОДИНАМИКА. ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА”

Прикладная логич е ская те ория “Т ермодинамика. Физич еские свойства” = <{“Основы термодинамики”}, SS>, где SS - множе ство предложений языка прикладной логики, приведенно е ниже.

1. сорт фазовое равнове сие: собств енные свойства проце сса (L)

в зависимости от того, присутствуют или отсутствуют на н котором таг проце сса пер еносы в еще ства между фазами проце сса, в термодинамиче ской системе отсутствует или присутствует фазовое равнове сие на этом таге

1. (v: {плотность, те мп зам ерзания, те мп зам ерзания те ор етич е ская, те мп кипения, темп кипения те ор етиче ская, осмотиче ско е давление, осмотич е ско е давл ни т ор тич ско , давл ни насыщ нного пара, давл ни насыщ нного пара теоретическое, изотонический коэффициент, молярная концентрация, моляльная концентрация, разбавление, ионная сила, активность, коэффициент активности, температура плавления, температура плавления те ор етиче ская}) сорт v: свойства фазы проце сса(Щ0, ^]) u свойства веще ств фазы проце сса(Я[0, ^]) областью знач ний сл дующих общих свойств фазы и в щ ств явля тся область не отрицательных действительных чис ел
2. сорт ид е альность: свойства фазы проце сса({ид е альный, р еальный})

любая фаза явля тся раствором, который мож т быть ид альным или р альным

1. сорт насыщ енность: свойства фазы проце сса({ ненасыщенный, насыщенный, пере сыщ е нный})

любая фаза как раствор мож т быть н насыщ нной, насыщ нной или пере сыщ енной

1. вс е возможны е состояния фаз = {жидкая, газовая, твердая}

данный вспомогат льный т рмин обознача т множ ство возможных состояний фаз

1. сорт состояние фазы: свойства фазы проце сса(вс е возможные состояния фаз) на каждом шаге проце сса фаза может быть в одном из тр ех состояний
2. (v: { парциально давл ни , ст п нь диссоциации, константа диссоциации, массовая растворимость, молярная растворимость, молярная концентрация, моляльная концентрация}) сорт v: свойства веще ств фазы проце сса^[0, то)) указанны свойства в щ ств фазы им ют область допустимых знач ний множе ство не отрицательных действительных чис ел
3. сорт перенос в е щ е ства: свойства в е щ е ств фазы проце сса((хфазы, R[0, то)) перенос веще ства - функция, сопоставляющая ном еру шага проце сса, фаз е этого шага и веществу данной фазы название фазы, куда выполняется перенос данного в ещ е ства, и количе ство перене с енного в ещ е ства
4. сорт состояние вещества фазы: свойства веществ фазы процесса(возможные состояния веще ств)

свойством в ещ е ства фазы явля ется его состояние Приведем теперь онтологиче ские соглаш ения.

1. (т: I[1, число шагов проце сса]) (ф: фазы проце сса(т)) (i: веще ства проце сса(т)) i е веще ства фазы проце сса(т, ф) ^ колич е ство(т, ф, i) > 0 вещество некоторого шага процесса принадлежит некоторой фазе тогда и только тогда, когда го колич ство в этой фаз больш нуля
2. (т: I[1, число шагов процесса]) (ф: фазы процесса(т)) ^(вещества фазы проце сса(т, ф))>1

каждая фаза содержит как минимум одно в ещ е ство

1. (т: I[1, число шагов процесса]) ф: фазы процесса(т)) (i: вещества процесса(т)) (v: эксте нсивные парам етры) (дол.!к(т,фД) = v(т,ф,i) / v^^i))

доля по экстенсивному парам етру веще ства фазы проце сса - это отношение значения этого парам етра веще ства к значению этого парам етра для фазы

1. (т: I[1, число шагов процесса]) (i: вещества процесса(т)) (v: экстенсивные параметры) (v(^ i) = (2 (ф: фазы проце сса(т)) v(т, ф, i)))

значение экстенсивного параметра вещества процесса равно сумме его значений для каждой из фаз проце сса

1. (т: I[1, число шагов процесса]) (ф: фазы процесса(т)) (v: экстенсивные парам етры) (v(r, ф) = (2 (i: в е щ е ства фазы проце сса(т,ф)) v(r, ф, i))) значение экстенсивного параметра фазы процесса равно сумме значений этого параметра для вс ех веще ств этой фазы
2. (т: I[1, число шагов процесса]) (ф: фазы процесса(т)) (v: экстенсивные парам етры) дол.!к(т, ф) = v(r, ф) / v(r)

доля по экстенсивному параметру фазы процесса есть отношение значения этого параметра для фазы к значению этого параметра для вс ей системы

1. (т: I[1, число шагов процесса]) (ф: фазы процесса(т)) (энергия Гиббса(т, ф) = (2 (i: ве щ е ства проце сса(т)) колич е ство(т,фД) \* химич е ский

потенциал(т,фД)))

Утв ерждение задает связь значений энергии Гиббса фазы, количе ства в щ ства фазы и химич ского пот нциала в щ ства фазы для каждого шага процесса

1. (т: I[1, число шагов процесса]) (ф: фазы процесса(т)) энтальпия(т, ф) = внутр енняя энергия(т, ф) + давление (т, ф) \* объ ем(т, ф)

Утв ржд ни зада т связь знач ний энтальпии, внутр нн й эн ргии, давл ния и объ ма фазы для каждого шага проц сса

1. (т: I[1, число тагов проце сса]) (ф: фазы проце сса(т)) энергия Гельмгольца(т, ф) = внутр енняя энергия(т, ф) - температура(т, ф) \* энтропия(т, ф)

Утв ерждение задает связь значений энергии Г ельмгольца, внутр енней энергии, температуры и энтропии фазы для каждого тага проце сса

1. (т: I[1, число тагов проце сса]) (ф: фазы проце сса(т)) энергия Гиббса(т, ф) = внутр енняя энергия(т, ф) - температура(т, ф) \* энтропия(т, ф) + давление (т, ф) \* объ м(т, ф)

Утв ерждение задает связь значений энергии Гиббса, внутр енней энергии, температуры, энтропии, давления и объ ема фазы для каждого тага проце сса

1. (т: I[1, число тагов процесса]) (ф: фазы процесса(т)) больтой

термодинамической потенциал(т, ф) = внутренняя энергия(т, ф) - те мпература(т, ф) \* энтропия(т, ф) - ( Z (i: в е щ е ства проце сса(т))

химиче ский потенциал(т, ф, i) \* колич е ство(т, ф, i))

больтой т рмодинамич ский пот нциал вычисля тся для каждого тага проце сса по заданной в утверждении формуле

1. МОДУЛЬ “ТЕРМОДИНАМИКА. ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА”

Прикладная логич е ская те ория “Т ермодинмика. Химич е ские свойства” = T(0) = <{“Ре акции”, “Основы термодинамики”}, SS>, где SS - множе ство предложений языка прикладной логики, приведенное ниже, использует предложения модулей “Ре акции”, “Основы термодинамики”.

1. сорт Энергия активации: Собств енные свойства р е акций(Я[0,

Граница(Энергия активации)])

энергия активации реакции - это та энергия, которая необходима для пре одоления энергетиче ского барь ера

1. сорт Границы те мп ературы для пути ре акции: Зависящие от пути свойства

ре акций((хК[-Граница(Температура), Граница(Т емпература)], R[-

Г раница(Т е мпература), Г раница(Т е мпература)]))

термин опр еделя ет границы температуры для некоторого пути р е акции

1. сорт Границы давл ния для пути р акции: Зависящи от пути свойства

ре акций((хR[-Граница(Давл е ние), Граница(Давл е ние)], R[-

Граница(Давл ни ), Граница(Давл ни )]))

т рмин опр д ля т границы давл ния для н которого пути р акции

1. сорт химиче ско е равнов е сие: собственные свойства проце сса(Ь)

в зависимости от того, наступили или н т в мом нт наблюд ния термодинамической системы равновесия всех химических превращений ингредиентов, в термодинамической системе присутствует или отсутствует химич ско равнов си

1. сорт произв ед е ние растворимости: собстве нные свойства ре акций^[0, то)) свойство р е акции “произв едение растворимости” им еют область допустимых значений множе ство не отрицательных действительных чис ел
2. (v: {изменение энергии Гиббса, изменение энтальпии, изменение энтропии}) сорт v: свойства р е акции проце сса^(-то, то))

свойства р е акции “изменение энергии Гиббса”, “изменение энтальпии” и “изм н ни энтропии” им ют область допустимых знач ний множ ство вс х д йствит льных чис л

1. сорт путь: свойства ре акции проце сса({ }Химич е ские р е акции)

свойство “путь” определяет тот единственный путь из множества возможных, который имеет место при текущих условиях в т рмодинамич ской сист м для р акции на этом шаг

1. сорт Получ е нное колич е ство: Свойства участников р е акции проце сса^[0,то)) свойством участника реакции является его количество, полученное в результате р е акции на некотором шаге проце сса

Приведем теперь онтологиче ские соглаш ения.

1. (т: [1, число моментов]) (f: р е акции проце сса(т)) путь(т, f) е возможные пути проте кания(1)

в кач ств знач ния свойства “путь” для данного мом нта наблюд ния и данной химич ской р акции знаний могут выступать только возможны пути

1. МОДУЛЬ “ХИМИЧЕСКАЯ КИНЕТИКА”

Прикладная логическая теория “Химическая кинетика” =

<{“Термодинамика. Химиче ские свойства”}, SS>, где SS - множе ство предложений языка прикладной логики, приведенное ниже, использует предложе ния модуля “Т ермодинамика. Химич е ские свойства”. сорт Т е мпературно-зависимая константа скорости: Собстве нны е свойства реакций(Ь)

с кин тич ской точки зр ния скорость р акции мож т быть т мп ратурно- зависимая или температурно- независимая (v: {Константа скорости ре акции, А-фактор, Температурная экспонента}) сорт v: Собств енные свойства р е акций(Я[0, ^])

Свойства р е акций "константа скорости р е акции", “а-фактор” и

“температурная экспонента” имеют область допустимых значений множе ство не отрицательных действительных чис ел сорт Порядок: Свойства участников р е акций(Ц0, ^))

свойства “порядок” участников реакций определяет степень, в которой молярные концентрации или парциальные давления участников входит в уравнение для константы скорости; областью допустимых значений этого свойства является положительная полуось целых чис ел сорт вр е мя: собстве нные свойства проце сса(Щ0, ^))

свойство “время” указывает значение временного интервала с начала химиче ского эксперимента по настоящий мом ент наблюдения (v: {константа скорости, скорость прямой, скорость обратной}) сорт v: Свойства ре акции проце сса(Я[0, ^))

у р е акций термодинамиче ской системы е сть три собств енных кинетич е ских свойства: “константа скорости”, “скорость прямой” и “скорость обратной” реакций; их областью допустимых значений является положительная полуось д йствит льных чис л Приведем теперь онтологиче ские соглаш ения.

1. вр мя(0) = 0

для нулевого мом ента наблюдения значение вр ем ени е сть 0

1. (т: I[1, число мом ентов]) (т’: {(т’’: I[1, число моментов]) т’’ > т }) вр емя(т’) > вр мя(т)

вр емя - строго возрастающая функция

1. МОДУЛЬ “ТЕРМОДИНАМИКА. ФИЗИЧЕСКИЕ И ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА”

Прикладная логич е ская те ория “Т ермодинамика. Физич е ские и химич е ские свойства” = <{“Термодинамика. Физиче ские свойства”, “Термодинамика. Химиче ские свойства”}, SS>, где SS - множе ство пр едложений языка прикладной логики, приведенное ниже, использует предложения модулей “Термодинамика. Физические свойства”, “Термодинамика. Химические

свойства”.

1. сорт термодинамич е ско е равнов е сие: собстве нны е свойства проце сса({^) термодинамическое равновесие - это одновременное присутствие не скольких равнове сий в термодинамич е ской системе
2. фазы р е акции = (А (т: I[1, число тагов проце сса]) (f: р е акции проце сса(т)) {(ф: фазы проце сса(т)) (& (i: Р е аге нты(^ u Р езультаты(^ u Катализаторы(^)
3. e вещества фазы процесса(т, ф) & Состояние участника^, i) = состояние в щ ства фазы(т, ф, i))})

вспомогательный термин "фазы реакции" обозначает функцию, которая по номеру тага и идентификатору реакции процесса возвращает множество идентификаторов фаз, которые затрагивает данная реакция. Реакция в том случае затрагивает фазу, если в этой фазе присутствуют реагенты, результаты или катализаторы в соответствующих состояниях

1. ре акции фазы = (А (т: I[1, число тагов проце сса]) (ф: фазы проце сса(т)) {(f: ре акции проце сса(т)) ф e фазы р е акции(т, f)})

вспомогательный термин "реакции фазы" обозначает функцию, которая по номеру тага процесса и идентификатору фазы возвращает множество ре акций, затрагивающих эту фазу

ПРИЛОЖЕНИЕ 3. МОДЕЛЬ ОНТОЛОГИИ ВТОРОГО УРОВНЯ для

ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ

1. МОДУЛЬ "ЭЛЕКТРОНЫ"

При определении прикладной логической теории Электроны, используются модули Элементы и Константы онтологии (Приложение 2). Данный модуль использу т стандартно расшир ни языка прикладной логики, а такж сп циализированны расшир ния с названиями Математические кванторы и Интервалы (Приложение 1).

*Электроны(8Т, Математические кванторы, Интервалы) = <{Элементы, Константы онтологии, Онтология третьего уровня для органической химии}, SS>,* гд е SS пр е дложе ния, описанные ниже.

*Определим вспомогательные термины модуля*

* 1. *главное квантовое число = I[1, максимальное значение главного*

*квантового числа]*

*Термин* главное квантовое число *обозначает множество возможных значений главного квантового числа.*

* 1. *азимутальное квантовое число = I[0, максимальное значение главного квантового числа -1]*

*Термин* азимутальное квантовое число *обозначает множество возможных значений азимутального квантового числа.*

* 1. *магнитное квантовое число = 1[-максимальное значение главного квантового числа -1, максимальное значение главного квантового числа-1 ]*

*Термин* магнитное квантовое число *обозначает множество возможных значений магнитного квантового числа.*

* 1. *спин = {-1/2, 1/2}*

*Термин* спин *обозначает множество возможных значений спина.*

*Определим основные термины модуля*

1. сорт *число электронов элемента: Собственные свойства элементов(1[1, максимальное число электронов])*

*Термин* число электронов элемента *обозначает функцию, которая сопоставляет химическому элементу число электронов этого элемента (число электронов элемента соответствует номеру в таблице Менделеева).*

1. сорт *электроны элемента: Свойства электронных уровней элемента({}(хглавное квантовое число, азимутальное квантовое число, магнитное квантовое число, спин))*

*Термин* электроны элемента *обозначает функцию, которая сопоставляет химическому элементу и номеру уровня множество характеристик его электронов на этом уровне; каждый электрон характеризуется значением главного квантового числа, значением азимутального квантового числа, значением магнитного квантового числа и значением спина.*

1. сорт *минимальная энергия элемента: Собственные свойства элементов(Я[1, максимальное значение энергии элемента])*

Т рмин обознача т функцию, которая сопоставля т химич скому эл м нту минимальную эн ргию атома данного химич ского эл м нта.

Опр еделим онтологиче ски е соглашения модуля

* 1. *(v: химические элементы) число электронных уровней (v) = химический период(у)*

*Значение термина* число электронных уровней *совпадает со значением термина* химич ский п риод*.*

* 1. *(v: химические элементы) (i: 1[1, число электронных уровней(v)])*

*(v1: электроны элемента(v,i)) л(2, v1) <л(1, v1) - 1& л(3, v1) е[-п(2, v1), П2, v1)]*

Знач ни азимутального квантового числа н пр выта т знач ния главного квантового числа, а знач ни магнитного квантового числа принадл жит числовому интервалу [-азимутальное квантовое число, азимутальное квантово число].

* 1. *(v: химические элементы) (i: I[1, число электронных уровней(у)])*

*(v1: электроны элемента(v, i)) (v2: электроны элемента(v, i))*

*п(1, v1) = П1, v2) & п(2, v1) = п(2, v2) & п(3, v1) = л(3, v2) & л(4, v1) = П4, v2) =>v1 = v2*

Никакие два электрона не могут иметь все четыре квантовых числа одинаковыми.

* 1. *(v: химические элементы) (Z (v1: I[1, число электронных уровней(v)]) /ц(электроны элемента(v, v1))) = число электронов элемента(v)*

Для каждого электрона химического элемента должна быть задана его характеристика.

* 1. *(v: химические элементы) (v1: I[1, число электронных уровней(v)])*

*/ (v1 = 1 электроны элемента(v, v1)) <2), (v1 = 2 => fj(электроны*

*элемента(v, v1)) < 8), (v1 =3 электроны элемента(v, v1)) < 18),*

*(ve{4, 5, 6, 7} fj{электроны элемента(v, v1)) <32) /)*

Утверждение задает ограничение на максимально возможное число эл е ктронов химич е ского эл е м е нта на каждом эл е ктронном уровн е: на п ервом электронном уровне число электронов химиче ского элем ента не пр евытает

1. на втором - 8, на тр етьем - 18, на вс ех остальных - 32 электрона.
2. МОДУЛЬ "ЭЛЕКТРОННАЯ КОНФИГУРАЦИЯ"

При определении прикладной логической теории Электронная конфигурация, использу ется модуль Электроны; данный модуль использу ет стандартно растир ни языка прикладной логики, а такж специализированные расширения с названиями Интервалы и Псевдонимы (Приложе ни е 1).

*Электронная конфигурация(БТ, Интервалы, Псевдонимы) = <{ Электроны}, SS>,* где SS пр едложения, описанные ниже.

Опр д лим вспомогат льны т рмины модуля

1. *число s-электронов =1[1, 2]*

Вспомогательный термин число s-электронов обозначает множество, состоящ из двух ц лых чис л 1 и 2.

1. *число p-электронов =1[0, 6]*

Вспомогательный термин число p-электронов обозначает множество целых чис ел, принадл е жащих интервалу от 0 до 6.

1. *число d-электронов =1[0, 10]*

Вспомогательный термин число d-электронов обозначает множество целых чис ел от 0 до 10.

1. *число f-электронов =1[0, 14]*

Вспомогательный термин число f-электронов обозначает множе ство ц елых чис ел от 0 до 14.

1. *число неспаренных электронов элемента =(A(v: химические элементы) число неспаренных электронов на уровнях(v, число электронных уровней(v)) + число неспаренных электронов на уровнях(v, число электронных уровней(v) -1))*

Вспомогат льный т рмин число неспаренных электронов элемента обознача т функцию, которая каждому химич скому эл м нту сопоставля т число, равное сумме числа электронов для присоединения на последнем и пр едпоследнем энергетиче ских уровнях этого химиче ского элем ента.

1. *электронная конфигурация = (Un: I[1, 7]) (х число s-электронов, число р-электронов, число d-электронов, число f-электронов)Й п)*

Вспомогательный термин электронная конфигурация множество всех возможных последовательностей четверок, состоящих из числа s-, p-, d- и f- электронов, находящихся на электронном уровне. В каждой посл едовательности мож ет быть от одного до с е ми эл е м е нтов.

1. *электронная конфигурация уровня = (Л (v: электронная конфигурация) (i: I [1, length(v)]) n(i, v))*

Термин электронная конфигурация уровня обозначает функцию, аргументами которой являются электронная конфигурация элем ента и ном ер уровня, а результатом - электронная конфигурация этого уровня (одна ч тв рка).

Опр д лим основны т рмины модуля

1. сорт *электронная конфигурация элемента: Собственные свойства элементов({} электронная конфигурация)*

*Термин* электронная конфигурация элемента *обозначает функцию, сопоставляющую химическому элементу множество возможных электронных конфигураций этого элемента.*

1. сорт *число неспаренных электронов на уровнях: Свойства электронных уровней элемента (I[0, 18])*

*Термин* число н е спар е нных эл е ктронов на уровнях *обозначает функцию, аргументами которой являются химический элемент и номер электронного уровня этого химического элемента, а результатом - число неспаренных электронов на данном уровне. На каждом уровне число электронов для присоединения не может быть больше 18.*

1. сорт *возможная валентность элемента: Собственные свойства*

*элементов({}Ц-18, 18])*

Т рмин возможная валентность элемента обознача т функцию, которая ставит в соотв тстви химич скому эл м нту множ ство возможных знач ний вал нтности этого эл м нта.

1. сорт *число свободных мест для электронов: Собственные свойства элементов(1[1, 18])*

Т рмин число свободных мест для электронов обознача т функцию, которая ставит в соотв тстви химич скому эл м нту число свободных м ст для электронов, им еющихся у этого элем ента.

Опр д лим онтологич ски соглаш ния

1. *(v: химические элементы) (v1: 1[1, число электронных уровней(v) - 2]) число неспаренных электронов на уровнях(v, v1) = 0*

У химич ского эл м нта сть н спар нны эл ктроны только на посл дн м и пр едпоследнем энергетиче ских уровнях.

1. *(v: химические элементы) (i: 1[1, число электронных уровней(v)]) (v1:*

*электронная конфигурация элемента(v)) (let (v2 = электронная*

*конфигурация уровня^1, i)) / (i = 1 => п(1, v2) <2 & п(2, v2) = 0 & п(3, v2) = 0 & п(4, v2)=0), (i = 2* ^ *n(1, v2) <2 & n(2, v2) <6 & л(3, v2) = 0 & П4, v2) = 0), (i = 3* ^ *л(1, v2) <2 & л(2, v2) <6 & л(3, v2) <10 & л(4, v2) = 0), (i е{4, 5, 6, 7} л(1, v2) <2 & л(2, v2) <6 & л(3, v2) <10 & л(4, v2) <14) /)*

Для каждого электронного уровня химиче ского элем ента число электронов каждого вида на заданном уровн н должно пр вышать максимально возможно е число электронов этого вида на этом уровне.

1. *(v: химические элементы) число неспаренных электронов элемента(v) е возможная валентность элемента(v)*

Число неспаренных электронов химического элемента равно одной из возможных валентностей этого элем ента.

1. *(v: химические элементы)(v1: I[1, число электронных уровней(v)])) число неспаренных электронов на уровнях(v, v1) = ju({(v4: электроны элемента(v, v1)) л{4, v4) = 1/2})* - *ju({(v6: электроны элемента(v, v1)) П4, v6) =-1/2})*

Число неспаренных электронов соответствует числу электронов, не имеющих парных электронов с параллельно направленным спином.

1. *(v: химические элементы) (v1: I[1, число электронных уровней(v)]))*

*число неспаренных электронов на уровнях(v, v1) < ju(электроны*

*элемента(v, v1))*

Число неспаренных электронов не может быть больте, чем число эл е ктронов.

1. *(v: химические элементы) число электронов элемента(v) / 2* \* *2 Ф число*

*электронов элемента(v) число неспаренных электронов*

*элемента^) >1*

Если у химич е ского эл е м е нта н еч етно е число эл ектронов, то этот эл е м е нт содержит хотя бы один н еспаренный электрон.

1. *(v: {(v1: химические элементы) химический период^1) = 2 & число неспаренных электронов элемента^1) = 0}) (v2: электронная*

*конфигурация элемента(v)) (v2’ : v2) (let(v3 = электронная*

*конфигурация уровня^2’, число электронных уровней(v))) л(1, v3) + л(2, v3) + п(3, v3) + П4, v3) > 3 число свободных мест для электронов(v) = 8 - (л(1, v3) + п(2, v3) + п(3, v3) + п(4, v3)))*

Для элементов второго периода, не содержащих неспаренных электронов, верно, что число электронов на последнем уровне больте трех, то число свободных ме ст для электронов этого химиче ского элем ента равно разности восьми и числа электронов на последн ем уровн е.

1. МОДУЛЬ "ЭЛЕМЕНТНЫЙ СОСТАВ"

При опр д л нии прикладной логич ской т ории Элементный состав, использу ется модуль Вещества физич е ской химии (см. приложе ни е 2); данный модуль использу т стандартно расшир ни языка прикладной логики, а такж сп циализированны расшир ния с названиями Математические кванторы и Интервалы.

*Элементный состав(ST, Математические кванторы, Интервалы)* =

<{Вещества}, SS>, где SS предложения, описанные ниже.

Опр еделим вспомогательны е термины модуля

1. *возможная формула вещества = (Цп: I[1, °°]) {(v: ((х химические элементы, I[1,o])ft п)) (&(i: I[1, length(v)]) (&(j: I[1, length(v)]* \ *{i}) 7i(i, v) ^n(j, v)))}) и(Цп: I[1, oo]) {(v: ((ххимические элементы ивозможная формула вещества, I[1, о])Й п)) (&(i: I[1, length(v)]) (&(j: I[1, length(v)]* \ *{i}) n(i, v) ?n(j, v)))})*

Вспомогательный термин возможная формула вещества обозначает множество всех возможных последовательностей (простых или сложных) компонент формулы химического соединения. Каждая простая компонента пр дставля т собой пару, состоящую из химич ского эл м нта и го инд кса; каждая сложная компон нта пр дставля т собой пару, п рвым эл м нтом которой явля тся компон нта формулы, а второй - инд кс этой компон нты формулы.

1. *принадлежит соединению = (Л (v: возможная формула вещества) (v1: химические элементы и возможная формула вещества) ( / (v1 £ химические элементы (v (i: I[1, length(v)]) П1, n(i, v)) = v1)), (v1 е химические элементы (v (i: I[1, length(v)]) ( / (n(1, n(i, v)) е*

*химические элементы л(1, n(i, v)) = v1), (n(1, n(i, v)) £ химические*

*элементы => принадлежит соединению(п(1, n(i, v)), v1)) /)) /))*

Термин принадлежит соединению обозначает предикат, который истин е н, если заданное химическое соединение содержит указанный вторым аргументом фрагм ент.

1. *компонент = (Л (v: возможная формула вещества) (i: I [1, length(v)]) n(i,v))*

Т рмин компонент обознача т функцию, аргум нтами которой являются формула органич ского со дин ния и ном р компон нта в н й, а р зультатом

* компон нт органич ского со дин ния с этим ном ром.

1. *номер компонента = (A(v1: возможная формула вещества) (v2: {(v3: химические элементы и возможная формула вещества) принадлежит соединению(v1, v3)}) (l(i: I[1, length(v1)]) v2 = П1, компонента(v1, i))))*

Т рмин номер компонента обознача т функцию, аргум нтами которой являются формула органиче ского со единения и компонент, который входит в состав этого органич ского со дин ния, а р зультатом - ном р компон нта в формул .

1. *индекс = (Л (v1: возможная формула вещества) (v2: {(v3: химические элементы и возможная формула вещества) принадлежит соединению (v1, v3)}) П2, компонента(v1, номер компоненты(v1, v2))))*

Т рмин индекс обознача т функцию, п рвым аргум нтом которой явля тся формула, вторым - формула или химический элемент, а результатом является число вхождений компонента, заданного вторым аргументом, в формулу, заданную п ервым аргум е нтом.

1. *число атомов = (Л (v1: возможная формула вещества) (v2: {(v3: химические элементы) принадлежит соединению(v1, v3)}) (X (i: I [1, length(v1)]) (/(v2 = П1, компонента(v1, i))^ n(2, компонента(v1, i))), (v2 ^П 1,компонента(v1,i)) =^число атомов(П1, компонента(v1, i)), v2))/)))*

Т рмин число атомов обознача т функцию, аргум нтами которой явля тся некоторая формула и входящий в нее химический элемент, а результатом явля тся сумма инд ксов вс х вхожд ний этого эл м нта в заданную формулу

1. *число атомов всех элементов =(А (v1: возможная формула вещества) (Z (v2: {(v3: химические элементы) принадлежит соединению(v1, v3)}) число атомов^1^2)))*

Т рмин число атомов всех элементов обознача т функцию, аргум нтом которой явля тся н которая формула, а р зультатом суммарно число атомов вс х химич ских эл м нтов, входящих в формулу

1. *число атомов углерода = (А (v: органическое соединение) число атомов (формула соединения(v), С))*

Т рмин число атомов углерода обознача т функцию, аргум нтами которой явля тся формула органич ского со дин ния, а р зультатом - число атомов угл рода в данном органич ском со дин нии.

1. *число атомов водорода = (A(v: органическое соединение) число атомов (формула соединения(v), Н))*

Т рмин число атомов водорода обознача т функцию, аргум нтами которой явля тся формула органич ского со дин ния, а р зультатом - число атомов водорода в данном органиче ском со единении.

Опр д лим основны т рмины модуля

1. сорт *формула соединения: Собственные свойства веществ(возможная формула вещества)*

Т рмин формула соединения обознача т функцию, которая ставит в соотв тстви органич скому со дин нию го эл м нтарную формулу.

Опр д лим онтологич ски соглат ния

1. *(v: органическое соединение) принадлежит соединению(формула*

*соединения(v), С)*

Н обходимо услови : к органич ским со дин ниям относятся со дин ния, сод ржащи , как минимум, угл род.

1. МОДУЛЬ "СТРУКТУРНАЯ ФОРМУЛА СОЕДИНЕНИЯ"

При опр д л нии прикладной логич ской т ории Структурная формула соединения используются модули Электронная конфигурация, Функциональные группы, Углеродный скелет и Константы онтологии; данный модуль использу т стандартно растир ни языка прикладной логики, а такж сп циализированны растир ния с названиями Математические кванторы и Интервалы.

*Структурная формула соединения(^Т, Математические кванторы, Интервалы)* = *<{Электронная конфигурация, Функциональные группы, Углеродный скелет, Константы онтологии}, SS>,* где *SS* предложения, описанны ниж .

Опр д лим вспомогат льны т рмины

1. *типы связи = {простая, двойная, тройная}*

Вспомогательный термин типы связи обозначает множество возможных названий типов связи.

1. *компоненты структурной формулы = функциональные группы u{C}*

Вспомогат льный т рмин компоненты структурной формулы обознача т множе ство возможных компон е нтов. Под компон ентом понимается угл ерод или функциональная группа.

1. *номера элементов =I[1, °°)*

Вспомогательный термин номера элементов обозначает множество возможных ном еров эл е м е нтов структурной формулы. Под эл е м е нтом структурной формулы понима тся химич ский эл м нт или функциональная группа.

1. *множество связей = (и (n:[1, максимальное количество связей])(х химические элементы и компоненты структурной формулы, номера элементов, типы связи) Й n)*

Вспомогательный термин множество связей обозначает множество троек, состоящих из химич ского эл м нта или функциональной группы, ном ра и типа связи этого эл е м е нта или функциональной группы.

1. *возможные компоненты структурной формулы = (х химические*

*элементы и компоненты структурной формулы, номера элементов, {}множество связей)*

Вспомогат льный т рмин возможные компоненты структурной формулы обозначает множество троек, составленных из: химического элемента или функциональной группы, ном ра эл м нта или группы, а такж множ ства связей, которые образует этот химиче ский элемент или группа.

1. *возможные структурные формулы = {(f: {(n: 1[1,то)) возможные компоненты структурной формулы Й n})(&(i: I[1, length(f)])(&(j1: {(j: I[1, length(f)]) i j П2, Mi, f)) \*П2, nj1, f))))}*

Вспомогат льный т рмин возможные структурные формулы обознача т множе ство посл е доват ельносте й компон е нт структурной формулы; в каждой посл доват льности ном ра эл м нтов в различных компон нтах различны.

1. *компонент структурной формулы = (My: {(v1: (х возможная*

*структурная формула, I[1, то))) П2, v1) еЦ1, length(n(1, v1))]}) П1, ПП2, v), П1, v))))*

*Вспомогательный термин* компон нт структурной формулы *обозначает функцию, которая ставит в соответствие структурной формуле и номеру компонента в этой структурной формуле представление этого компонента в структурной формуле.*

1. *связи элемента в компоненте структурной формулы = (My: {(v1: (х возможные структурные формулы, I[1, о))) п(2, v1) eI[1, length(n(1, v1))]}) П3, ПП2, v), n(1, v))))*

Вспомогательный термин связи элемента в компоненте структурной формулы обозначает функцию, которая ставит в соответствие структурной формул и ном ру компон нта множ ство связ й этого компон нта.

1. *валентность элемента = (Mv: {(v1: (х возможные структурные формулы, I[1, оо))) П2, v1) е I[1, length(n(1, v1))]}) fi({(v3: связи элемента в компоненте структурной формулы(П1, v1), 71(2, v1))) 7J(3,v3)= простая}) + ju({(v2: связи элемента в компоненте структурной формулы(п( 1, v1), 71(2, v1))) 7J(3, v2) = двойная})* \* *2 + jii({(v3: связи элемента в компоненте структурной формулы(п(1, v1), 71(2, v1))) 7J(3, v3) = тройная})* \* *3)*

Вспомогательный термин валентность элемента обозначает функцию, которая ставит в соответствие структурной формуле и номеру компонента колич ство связ й эл м нта структурной формулы, им ющ го данный ном р в этой структурной формул .

1. *номер компонента структурной формулы = (Mv: (х возможные*

*структурные формулы, возможная формула вещества)) {(v1: номера элементов) (& (i: I[1, length(n(1, v))]) / (компонент структурной формулы(л(1у), i) £ функциональные группы компонент*

*структурной формулы(п(1, v), i) = 71(2, v)), (компонент структурной формулы(п( 1,v),i) ефункциональные группы формула функциональной группы(компонент структурной формулы(n( 1,v),i)) = 71(2, v))})*

Вспомогат льный т рмин номер компонента структурной формулы обознача т функцию, которая ставит в соотв тстви структурной формул и формул компон нта множ ство ном ров компон нта в структурной формул .

1. *структурная формула = (A(v: возможная формула вещества) {(f: возможные структурные формулы) (& (i: I[1, length(f)]) л(2, 7i(i, f)) < length(f)) & (& (v1: {(v2: химические элементы) принадлежит*

*соединению(v, v2)}) (v (i: I[1, length(f)]) v1 = n(1, n(i, f)) & ((M ({(i: I[1, length(f)]) n(1, n(i, f)) = v1}) = индекф, v1))) & (&(i: I[1, length(f)]) n(1, n(i, f)) e химические элементы валентность элемента(f, i)) < тах(возможная валентность элемента(компонент структурной формулы(f i))))) & (&(i: I[1, length(f)]) n(1, n(i, f)) £ химические элементы валентность элемента(f, i)) < тах(возможная*

*валентность функциональной группы(компонент структурной формулы(f i))))) & (&(i: I[1, length(f)]) связи элемента в компоненте структурной формулы(f i) Ф0)})*

Т рмин структурная формула обознача т функцию, которая ставит в соответствие элементарной формуле множество возможных структурных формул, удовл творяющих сл дующим условиям:

* знач ение второго элем ента каждой компоненты структурной формулы н должно пр вытать числа компон нтов структурной формулы;
* структурная формула сод ржит описани каждого химич ского эл м нта, входящ го в опр д л ни эл м нтарной формулы;
* число связ й каждого атома н которого химич ского эл м нта н может превытать максимально возможное значение электронной валентности этого химиче ского элем ента;
* число связ й каждой функциональной группы н мож т пр вытать максимально возможно знач ни эл ктронной вал нтности этой группы;
* в со е дин е нии н е мож ет быть н е связанных атомов.

Опр д лим основны т рмины

1. сорт *структурная формула соединения: Собственные свойства*

*органических соединений(возможные структурные формулы)*

Т рмин структурная формула соединения обознача т функцию, которая ставит в соотв тстви данному химич скому со дин нию го структурную формулу.

1. сорт *сокращенная структурная формула: Собственные свойства органических соединений(возможные структурные формулы)*

Т рмин сокращенная структурная формула обознача т функцию, которая ставит в соотв тстви органич скому со дин нию го сокращ нную структурную формулу.

1. сорт *структурная формула функциональной группы: Собственные свойства функциональных групп(возможные структурные формулы)*

Т рмин структурная формула функциональной группы обознача т функцию, аргум нтом которой явля тся функциональная группа, а р зультатом - структурная формула этой функциональной группы.

1. сорт *структурная формула углеродного скелета соединения: Собственные свойства органических соединений(возможные структурные формулы)*

Т рмин структурная формула углеродного скелета соединения обознача т функцию, которая сопоставля т органич скому со дин нию структурно пр дставл ни угл родного ск л та данного со дин ния.

Опр д лим онтологич ски соглаш ния

1. *(v: органические соединения) структурная формула соединения(v) е структурная формула(формула соединения(v))*

Структурная формула со дин ния явля тся одной из структурных формул,

соответствующих его элем ентарной формуле.

1. *(v: органические соединения) (i: {(i1: I[1, length(структурная формула соединения(v))]) ПИ, структурная формула соединения(v))) = С}) валентность элемента(структурная формула соединения(v), i) = 4*

Вс е атомы углерода любого органич еского соедин ения ч етырех вал ентны.

1. *(v: органические соединения) (i: I[1, length(структурная формула соединения(v))]) валентность элемента( структурная формула соединения(v), i) e возможная валентность элемента(компонент структурной формулы(структурная формула соединения(v), i))*

Валентность элем ента соотв етству ет одной из возможных валентностей этого

эл м нта.

1. *(v: {(v1: органические соединения) тип структуры углеродного скелета соединения^1) = цепь}) (i: {(i1: I[1, length(структурная формула углеродного скелета соединения(v))]) П1, ПИ, структурная формула углеродного скелета соединения(v))) = С}) M({(v2: связи элемента в компоненте структурной формулы(структурная формула углеродного скелета соединения(v), i)) П1, v2) = С}) <2*

Если тип структуры угл родного ск л та со дин ния явля тся ц пью, то вс

атомы угл рода связаны н бол ч м с двумя другими атомами угл рода.

1. *(v: {(v1: органические соединения) тип структуры углеродного скелета соединения^1) = цепь}) (i: {(i1: I[1, length(структурная формула углеродного скелета соединения(v))]) П1, ПИ, структурная формула углеродного скелета соединения(v))) Ф С}) M({(v2: связи элемента в компоненте структурной формулы(структурная формула углеродного скелета соединения(v), i)) П1, v2) = С}) = 2*

Если тип структуры углеродного скелета соединения является ц епью, то вс е химические элементы, входящие в углеродный скелет, кроме атомов угл рода, связаны с двумя атомами угл рода.

1. *(v: органические соединения) (v1: {(v2: химические элементы)*

*принадлежит соединению( формула соединения(v), v2)}) (i: I[1,*

*length(структурная формула углеродного скелета соединения(v))]) п(1, n(i, структурная формула углеродного скелета соединения(v))) ^ С) ^ f({(v3: связи элемента в компоненте структурной*

*формулы(структурная формула углеродного скелета соединения(v), i)) П1, v3) = С}) >2*

Структурное представление углеродного скелета соединения состоит из атомов углерода или из атомов других химич е ских элем ентов, связанных как минимум с двумя атомами угл рода.

1. *(v: органические соединения) (i: I[1, length(структурная формула*

*углеродного скелета соединения(v))]) length(сокращенная структурная формула(v)) = length(структурная формула углеродного скелета*

*соединения(v)) - fi({(j1: I[1, length( сокращенная структурная*

*формула(v))]) П1, Mj1, сокращенная структурная формула(v))) ^ C}) + общее число функциональных групп(v) & сокращенная структурная формула(v) = структурная формула углеродного скелета соединения(v) и (и (v1: функциональные группы соединения(v)) формула*

*функциональной группы^1))*

Сокращ нная структурная формула пр дставля т собой структурную формулу угл родного ск л та с функциональными группами (т. . сложны функциональны группы рассматриваются б з разлож ния их на состав ляющи е)

1. МОДУЛЬ "ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ ГРУППЫ"

При определении прикладной логической теории Функциональные группы использу тся модуль Элементный состав; данный модуль использу т стандартно расшир ни языка прикладной логики, а такж сп циализированно расшир ни с названи м Математические кванторы.

*Функциональные группы(ST, Математические кванторы) =*

<({Элементный состав}), SS>, где SS предложения, описанны е ниже.

Опр еделим вспомогательны е термины

1. *возможные формулы функциональных групп = возможная формула вещества*

Вспомогательный термин возможные формулы функциональных групп обозначает возможно е пр е дставл е ни е функциональной группы в кач е ств е компон е нты формулы.

1. *индекс функциональной группы = (Mv: (х органические соединения, функциональные группы)) индекс(формула соединения(л(v,1)), формула функциональной группы(Jrty, 2))))*

Вспомогательный термин индекс функциональной группы обозначает функцию, аргум нтами которой являются органич ско со дин ни и функциональная группа, а р зультатом - число атомов функциональной группы в данном органич е ском со е дин е нии.

1. *число различных функциональных групп =(Mv: органические соединения) jj{функциональные группы соединения(v)))*

Вспомогательный термин число различных функциональных групп обозначает функцию, аргум нтом которой явля тся органич ско со дин ни , а р зультатом - число различных функциональных групп, входящих в состав органич ского со дин ния.

1. *общее число функциональных групп = (Mv: органические соединения)*

*(U(v1: функциональные группы соединения(v)) индекс( формула*

*соединения(v), формула функциональной группы^1))))*

Вспомогательный термин общее число функциональных групп обозначает функцию, аргум нтом которой явля тся органич ско со дин ни , а р зультатом - общ число атомов вс х функциональных групп данного органич ского со дин ния.

1. *простые функциональные группы = {(v: функциональные группы)*

*length(формула функциональной группы(v)) = 1 & п(1, формула*

*функциональной группы(v)) ехимические элементы* \ *{C, H}}*

Термин простые функциональные группы обозначает множе ство функциональных групп, состоящих из одного химич ского эл м нта. К простым функциональным группам могут относиться любы химич ски элем енты кром е углерода и водорода.

Опр д лим основны т рмины

1. сорт *функциональные группы соединения: Компоненты*

*сущности(Органические соединения, Функциональные группы)*

Термин функциональные группы соединения обозначает функцию, которая сопоставляет данному органическому соединению множество функциональных групп, которы входят в органич ско со дин ни .

1. сорт *формула функциональной группы: Собственные свойства*

*функциональных групп(возможные формулы функциональных групп)*

Термин формула функциональной группы обозначает функцию, аргум е нтом которой явля тся функциональная группа, а р зультатом - формула этой функциональной группы.

1. сорт *возможная валентность функциональной группы: Собственные свойства функциональных групп({}I[-18, 18])*

Т рмин возможная валентность функциональной группы обознача т функцию, которая ставит в соответствие функциональной группе множе ство возможных знач е ний вал ентности этой группы.

Опр еделим онтологиче ски е соглашения

* 1. *(v: органические соединения) (v1: функциональные группы соединения(v)) принадлежит соединению( формула соединения(v), формула функциональной группы^1))*

К функциональным группам органического соединения относятся функциональные группы, входящие в состав этого со единения.

* 1. *(v: простые функциональные группы) возможная валентность*

*функциональной группы(v) = возможная валентность элемента(п(1, формула функциональной группы(v)))*

Для простой функциональной группы возможная вал нтность совпада т с возможной валентностью химиче ского элем ента.

1. МОДУЛЬ "ТИП ГИБРИДИЗАЦИИ"

При определении прикладной логической теории Тип гибридизации использу тся модуль Структурная формула соединения; данный модуль использу т стандартно расшир ни языка прикладной логики, а такж специализированно е расшир ени е с названием Интервалы.

*Тип гибридизации(ST, Интервалы) = <({Структурная формула*

соединения}), SS>, где SS пре дложе ния, описанны е ниже.

Опр д лим вспомогат льны т рмины

3 2

1. *возможный тип гибридизации ={sp -гибридизация, sp -гибридизация, sp- гибридизация}*

Вспомогат льный т рмин возможный тип гибридизации обознача т множе ство типов гибридизации в химиче ском со единении.

1. *валентный угол связей для типа гибридизации =(A(v: {sp3-гибридизация,*

2 3

*sp -гибридизация, sp-гибридизация}) (/ (v= sp -гибридизациям* ... *), (v = sp -гибридизациям*... *), (v= sp-гибридизация м. ) /)*

Вспомогат льный т рмин валентный угол связей для типа гибридизации обознача т функцию, которая типу гибридизации сопоставля т вал нтный угол (знач е ни е угла в данной работе н е представл е но).

Опр д лим основны т рмины

* 1. сорт *тип гибридизации соединения: Собственные свойства*

*органических соединений({}возможный тип гибридизации)*

Т рмин тип гибридизации соединения обознача т функцию, которая сопоставля т данному органич скому со дин нию типы гибридизации, опр еделяющие его стро ение.

* 1. сорт *тип гибридизации атомов в соединении: Свойства органического*

*соединения, зависящие от значения некоторого свойства((соединением Органические соединения, номер м {(v: I[1, ЫщЩСтруктурная формула соединения( соединение)]) компонент структурной*

*формулы(соединение, v) e {С, N, S, P, O}}, тип м возможный тип гибридизации))*

Т рмин тип гибридизации атомов в соединении обознача т функцию, которая сопоставля т органич скому со дин нию и ном ру химич ского эл м нта в го структурной формул , способному к гибридизации, тип гибридизации атома этого химич ского эл м нта.

Опр д лим онтологич ски соглат ния

1. *(v: органические соединения) (i: {(i1: I[1, length(структурная формула*

*соединения(v))]) П1 ПИ, структурная формула соединения(v))) е{С,*

*N, S, P, O}}) тип гибридизации атомов в соединении(v, i) е тип гибридизации соединения(v)*

У органич ского со дин ния рассматриваются типы гибридизации вс х атомов вс х химич ских эл м нтов, способных к гибридизации и входящих в состав этого органич ского со дин ния.

1. *(v: органические соединения) (i: {(i1: I[1, length(структурная формула соединения(v))]) л(1, л(И, структурная формула соединения(v))) е{С, N,*

*S, P, O}}) валентность элемента(структурная формула соединения(v), i) = 4 =^тип гибридизации атомов в соединении(v, i) = sp -гибридизация*

Если атом химич ского эл м нта, способного к гибридизации, им т ч тыр химич ских связи, то этот атом им т sp3 тип гибридизации.

1. *(v: органические соединения) (i: {(i1: I[1, length(структурная формула соединения(v))]) л(1, л(И, структурная формула соединения(v))) е{С, N,*

*S, P, O}}) валентность элемента(структурная формула соединения(v), i) = 3 =>тип гибридизации атомов в соединении(v, i) = sp -гибридизация*

Если атом химич ского эл м нта, способного к гибридизации, им т три химич ских связи, то этот атом им т sp2 тип гибридизации.

1. *(v: органические соединения) (i: {(i1: I[1, length(структурная формула соединения(v))]) n(1, ПИ, структурная формула соединения(v))) е {С, N,*

*S, P, O}}) валентность элемента(структурная формула соединения(v), i) = 2 =>тип гибридизации атомов в соединении(v, i) = sp-гибридизация*

Если атом химич ского эл м нта, способного к гибридизации, им т дв химич ских связи, то этот атом им т sp тип гибридизации.

1. МОДУЛЬ "АГРЕГАТНОЕ СОСТОЯНИЕ"

При опр еделении прикладной логиче ской те ории Агрегатное состояние использу тся модуль Элементный состав; данный модуль использу т стандартное растир ени е языка прикладной логики.

*Агрегатное состояние(ST) = <({Элементный состав}), SS>,* где SS пр едложения, описанны е ниже.

Опр д лим вспомогат льны т рмины

1. *возможное агрегатное состояние ={твердое вещество, жидкость, газ}*

Термин возможное агрегатное состояние обозначает множе ство названий возможных агр гатных состояний органич ских со дин ний.

*Определим основные термины*

1. *сорт агрегатное состояние соединения: Собственные свойства*

*органических соединений(возможное агрегатное состояние)*

*Термин агрегатное состояние соединения обозначает функцию, которая сопоставляет данному органическому соединению его агрегатное состояние при нормальных условиях.*

1. МОДУЛЬ "РАСТВОРИМОСТЬ"

При опр д л нии прикладной логич ской т ории астворимость, использу тся модуль Элементный состав; данный модуль использу т стандартное растир ени е языка прикладной логики.

*Pастворимость(ST) = <({Элементный состав}), SS>,* где SS

пр едложения, описанны е ниже.

1. *возможная степень растворения = {нерастворим, слаборастворим, растворим}*

Т рмин возможная степень растворения обознача т множ ство названий ст еп е н е й раствор е ния органич е ских в е щ е ств.

*Определим основные термины*

1. *сорт растворимость вещества: Свойства растворителей*

*соединения(возможная степень растворения)*

Т рмин растворимость вещества обознача т функцию, которая сопоставля т органич скому со дин нию и растворит лю ст п нь раствор ния заданного в щ ства в заданном растворит л .

1. МОДУЛЬ "УГЛЕРОДНЫЙ СКЕЛЕТ"

При определении прикладной логической теории Углеродный скелет используются модули Элементный состав и Константы онтологии (Приложе ни е 2); данный модуль использу ет стандартно е расшир е ни е языка прикладной логики, а такж сп циализированны расшир ния с названиями Математические кванторы и Интервалы.

*Углеродный скелет^Т, Математические кванторы, Интервалы) = <({Элементный состав, Константы онтологии}),* SS>, где SS пр едложения, описанны ниж .

*Определим вспомогательные термины*

1. *типы структуры углеродного скелета = {цепь, цикл, комбинированный, разветвленная цепь}*

Вспомогат льный т рмин типы структуры углеродного скелета обознача т множество названий типов структуры углеродного скелета органических веществ.

1. сорт *число колец: Собственные свойства органических соединений (I[0, максимально возможное число колец])*

Термин число колец обозначает функцию, которая сопоставля ет органич скому со дин нию число кол ц, сод ржащихся в данном со дин нии.

1. сорт *параметры кольца: Собственные свойства органических соединений({}(х I[3, максимально возможное число элементов кольца], I[0, максимально возможное число элементов кольца]))*

Т рмин параметры кольца обознача т функцию, которая сопоставля т органическому соединению множество пар, каждая из которых характеризует одно кольцо данного соединения; элементами каждой пары являются: число элементов, образующих кольцо, и число двойных связей в кольц .

1. сорт *тип структуры углеродного скелета соединения: Собственные свойства органических соединений(типы структуры углеродного скелета)*

Т рмин тип структуры углеродного скелета соединения обознача т функцию, которая сопоставля т органич скому со дин нию тип структуры угл родного ск л та данного со дин ния.

*Определим онтологические соглашения*

* 1. *(v: органические соединения) тип структуры углеродного скелета соединения(v) е{цепь, разветвленная цепь} м число колец(v) = 0*

Если тип структуры угл родного ск л та органич ского со дин ния явля тся ц пью, то в органич ском со дин нии н т кол ц.

* 1. *(v: органические соединения) тип структуры углеродного скелета соединения(v) = цикл м число колец(v) = 1*

Если тип структуры угл родного ск л та органич ского со дин ния явля тся циклом, то в органич ском со дин нии им тся только одно кольцо.

* 1. *(v: органические соединения) тип структуры углеродного скелета соединения(v) = комбинированный ^ число колец(v) >1*

Если тип структуры угл родного ск л та органич ского со дин ния явля тся комбинированным, то в органич ском со дин нии им тся хотя бы одно кольцо.

* 1. *(v: органические соединения) (v1: параметры кольца(v)) M2,v1) <M,1,v1)*

Число двойных связей в кольце органического соединения не превышает числа эл м нтов в кольц .

* 1. *(v: органические соединения) f параметры кольца(v)) = число колец(v)*

У любого органич еского со единения рассматриваются парам етры всех колец, входящих в го угл родный ск л т.

1. МОДУЛЬ "ЭЛЕКТРОННАЯ КОНФИГУРАЦИЯ СОЕДИНЕНИЯ"

При опр д л нии прикладной логич ской т ории Электронная конфигурация соединения используются модули Электронная конфигурация и Структурная формула соединения; данный модуль использу т стандартно расшир ни языка прикладной логики.

*Электронная конфигурация соединения(ST) = <({Структурная формула соединения, Электронная конфигурация}), SS>,* где SS пр е дложе ния, описанны ниж .

Опр д лим вспомогат льны т рмины

1. *число неспаренных электронов у элемента соединения = (Л(соединение: химические соединения) (номер: {(v: I[1, length(структурная формула соединения(соединение))]) л(1, Mv, структурная формула соединения(соединение))) е химические элементы}) число неспаренных электронов у элемента соединения на уровнях(соединение, номер, число электронных уровней(компонент структурной формулы(структурная*

*формула соединения( соединение, номер)) + число неспаренных*

*электронов у элемента соединения на уровнях(соединение, номер, число электронных уровней(компонент структурной формулы(структурная формула соединения(соединение, номер)) -1))*

Вспомогательный термин число неспаренных электронов у элемента соединения обозначает функцию, которая сопоставляет химическому со дин нию и ном ру химич ского эл м нта в структурной формул этого соединения число, равное сумме неспаренных электронов на последнем и пр едпоследнем энергетиче ских уровнях этого химиче ского элем ента.

1. *число электронов соединения = (Mсоединение: химические соединения)*

*(Цэлемент: {(v: химические элементы) принадлежит*

*соединению(соединение, v)}) число электронов элемента(компонент структурной формулы(структурная формула соединения(соединение), элемент)))*

Вспомогательный термин число электронов соединения обозначает функцию, которая сопоставляет химическому соединению число электронов этого со е дин е ния, равно е сумм е чис ел эл е ктронов вс ех химич е ских эл е м е нтов, составляющих со дин ни .

1. *свободные радикалы = {(вещество: химические вещества) (v (номер*

*компоненты: {(v: I[1, length( структурная формула*

*соединения(вещество))]) л(1, Jtiy, структурная формула*

*соединения(вещество))) е химические элементы}) число неспаренных электронов у элемента соединения(вещество, номер компоненты) > 0 & число электронов соединения(вещество) /2\*2 ^ число электронов соединения(вещество))*

Свободными радикалами называются химич ски со дин ния, им ющи н еспаренный электрон на последнем или пр едпоследнем уровнях, и нечетно е число эл е ктронов.

Опр д лим основны т рмины

1. сорт *электронная конфигурация элемента в соединении: Свойства органического соединения, зависящие от значений его свойств((соединением органические соединения, (номер м {(v: I[1, length( структурная формула соединения(соединение))]) П1 П, структурная формула соединения(соединение))) e химические элементы}), I[1, число электронных уровней(компонент структурной формулы( структурная формула соединения(соединение), номер))], результат м (х число s-электронов, число p-электронов, число d- электронов, число f-электронов)))*

*Термин* эл е ктронная конфигурация эл е м ента в со е дин е нии *обозначает функцию, аргументами которой являются химическое соединение, номер химического элемента структурной формулы этого соединения и номер электронного уровня этого химического элемента, а результатом - число s- электронов, число p-электронов, число d-электронов, число f-электронов на данном электронном уровне данного химического элемента.*

1. сорт *число неспаренных электронов у элемента соединения на уровнях: Свойства органического соединения, зависящие от значений его свойств((соединением органические соединения, (номер м {(v: I[1, length( структурная формула соединения(соединение))]) П1, П, структурная формула соединения(соединение)) e химические элементы}), номер уровням I[1, число электронных уровней(компонент структурной формулы(структурная формула соединения(соединение), номер)), результат м I[0, 18]))*

Термин число неспаренных электронов у элемента соединения на уровнях

*обозначает функцию, аргументами которой являются химическое соединение, номер химического элемента в структурной формуле этого соединения и номер энергетического уровня этого химического элемента, а результатом - число неспаренных электронов данного химического элемента в заданном соединении.*

1. сорт *элементы с неспаренным электроном: Собственные свойства веществ( {}I[1, то))*

Термин элементы с неспаренным электроном обозначает функцию, которая сопоставляет химическому соединению множество номеров химических эл м нтов в структурной формул заданного химич ского со дин ния, имеющих не спар енный электрон.

1. сорт *элементы со свободными местами для электронов: Собственные свойства веществ({}I[1, то))*

Термин элементы со свободными местами для электронов обозначает функцию, которая сопоставляет химическому соединению множество ном ров химич ских эл м нтов в структурной формул заданного химич е ского со е дин е ния, им еющих свободны е м е ста для эл е ктронов.

Опр д лим онтологич ски соглаш ния

1. *(v: химические соединения) (i: {(v': I[1, length(структурная формула*

*соединения( соединение))]) л(1, Mv', структурная формула соединения(соединение))) е химические элементы}) (j: I[1, число электронных уровней(компонент структурной формулы(структурная формула соединения(v), i)) - 2]) электронная конфигурация элемента в соединении(v, i, j) е электронная конфигурация уровня (электронная конфигурация элемента(компонент структурной*

*формулы(структурная формула соединения(v), i)), j)*

Электронная конфигурация элемента в соединении на всех уровнях, кроме посл дн го и пр дпосл дн го такая ж , как и эл ктронная конфигурация эл м нта вн со дин ния.

1. *(соединение: химические соединения) (i: {(v: I[1, length(структурная формула соединения(соединение))]) л(1, Mv, структурная формула*

*соединения(соединение))) е химические элементы}) (Ш(последний*

*уровень = число электронных уровней(компонент структурной формулы(структурная формула соединения(соединение), i)))*

*электронная конфигурация элемента в соединении(соединение, i, последний уровень) £ электронная конфигурация уровня (электронная конфигурация элемента(компонент структурной*

*формулы(структурная формула соединения(соединение), i)), последний уровень))*

Электронная конфигурация элемента в соединении на последнем уровне отлича тся от эл ктронной конфигурации эл м нта вн со дин ния.

1. *(соединение: химические соединения) (i: {(v: I[1, length(структурная формула соединения(соединение))]) л(1, 7$у, структурная формула соединения(соединение))) е химические элементы}) (Ш(предпоследний уровень = число электронных уровней(компонент структурной формулы(структурная формула соединения(соединение), i)) - 1) число неспаренных электронов на уровнях(компонент структурной формулы(структурная формула соединения(соединение), i),*

*предпоследний уровень) - число неспаренных электронов у элемента соединения на уровнях(соединение, i, предпоследний уровень) > 0 ^ электронная конфигурация элемента в соединении(соединение, i, предпоследний уровень) £ электронная конфигурация*

*уровня(электронная конфигурация элемента(компонент структурной формулы(структурная формула соединения(соединение), i)),*

*предпоследний уровень)*

Если число не спар енных электронов на пр едпоследнем уровне у элем ента со единения отличается от числа не спаренных электронов на пр едпоследнем уровне элемента вне соединения, то электронная конфигурация на предпоследнем уровне химического элемента в соединении отличается от электронной конфигурации на предпоследнем уровне химиче ского элем ента вне этого со единения.

1. *(соединение: химические вещества) (i: {(v: I[1, length(структурная формула соединения(соединение))]) П1, П, структурная формула соединения(соединение))) e химические элементы}) число неспаренных электронов у элемента соединения(соединение, i) > 0 м i e элементы с неспаренным электроном(соединение)*

К элементам соединения с неспаренным электроном относятся все химич ски эл м нты со дин ния, им ющи хотя бы один н спар нный электрон.

1. МОДУЛЬ "ПРОСТРАНСТВЕННОЕ РАСПОЛОЖЕНИЕ"

При определении прикладной логической теории Пространственное расположение использу тся модуль Тип гибридизации; данный модуль использу т стандартно растир ни языка прикладной логики, а такж специализированны е растирения с названиями Математические кванторы и Интервалы.

*Пространственное расположение(ST, Математические кванторы, Интервалы) = <({Тип гибридизации}), SS>,* где SS пр едложения, описанны е ниж .

Опр д лим вспомогат льны т рмины

1. *форма электронного облака = (A (v: {s-электроны, p-электроны, d- электроны}) /(v= s-электроным шар), (v= p-электроны м восьмерка), (v= d-электроны м четырехлистный клевер)/)*

Вспомогат льный т рмин форма электронного облака обознача т функцию, которая сопоставля ет виду эл е ктрона форму е го эл е ктронных облаков.

1. *форма гибридного облака =(Л (v: возможный тип гибридизации) / (v = sp-гибридизация => линейная), (v = sp -гибридизация => треугольная),*

3

*(v= sp -гибридизация тетраэдрическая)/)*

Вспомогательный термин форма гибридного облака обозначает функцию, которая сопоставляет типу гибридизации форму гибридного электронного облака при данном тип гибридизации.

Опр д лим основны т рмины

* 1. сорт *угол связей в соединении: Свойства органического соединения,*

*зависящие от значений его свойств( соединением органические соединения, <номер компоненты 1 MI[1, length(структурная формула соединения( соединение))], номер компоненты 2 м {(v: I[1,*

*length(структурная формула соединения(соединение))] v е л(2, связи элемента в компоненте структурной формулы(структурная формула соединения(соединение), номер компоненты 1))}, номер компоненты 3 м {(v1: I[1, length(структурная формула соединения(соединение))]) v1 е П2, связи элемента в компоненте структурной формулы(структурная формула соединения(соединение, номер компоненты 1))) } >,*

*результат м R[0, 360]))*

Т рмин угол связей в соединении обознача т функцию, которая сопоставля т структурной формул и ном рам тр х химич ских эл м нтов в этой структурной формул , один из которых связан с двумя другими, угол м жду этими двумя связями в структурной формул этого со дин ния.

* 1. сорт *длина связи: Свойства пары элементов( R[0, 0.5))*

Т рмин длина связи обознача т функцию, которая сопоставля т двум химич ским эл м нтам длину связи м жду атомами этих химич ских эл е м е нтов, т.е. расстояни е от ц е нтра атома одного эл е м е нта до ц е нтра атома другого элем ента (длина связи н е пр евышает 0.5 наном етров).

1. *(v: органические соединения) (i: {(i1: I[1, length(структурная формула соединения(v))]) компонент структурной формулы( структурная формула соединения(v), i1) е {С, N, S, P, O}}) (j: {(j1: I[1, length(структурная формула соединения(v))]) j1 ^ i & j е n(2, связи элемента в компоненте структурной формулы(структурная формула соединения(v)), i)}) (k: {(k1: I[1, length( структурная формула*

*соединения(v))]) j ^ k1 & k1 ^ i & k1 ел(2, связи элемента в компоненте структурной формулы(структурная формула соединения(v)), i)}) угол связей в соединении(структурная формула соединения(v), i, j, k) - валентный угол связей для типа гибридизации(тип гибридизации атомов в соединении(структурная формула соединения(v), i)) е [-24, 24]*

Угол связи м жду атомами, связанными с атомом химич ского эл м нта, способного вступать в гибридизацию, равен валентному углу типа гибридизации этого атома с уч етом погр ешности на 24 градуса.

1. МОДУЛЬ "ИЗОМЕРИЯ"

При определении прикладной логической теории Изомерия использу ется модуль Структурная формула соединения; данный модуль использу т стандартно расшир ни языка прикладной логики, а такж сп циализированно расшир ни с названи м Математические кванторы.

*Изомерия(ST, Математические кванторы) = <{Структурная формула соединения}, SS>,* гд е SS пр е длож ения, описанны е ниже.

Опр д лим основны т рмины

1. сорт *изомеры соединения: Собственные свойства органических*

*соединений({}органические соединения)*

Термин изомеры соединения обозначает функцию, которая сопоставля ет органич скому со дин нию н которо множ ство го возможных изом ров.

1. *(v: органические соединения) (v1: изомеры соединения(v)) (v2: {(v3:*

*химические элементы) принадлежит соединению( формула*

*соединения(v), v3)}) принадлежит соединению(формула соединения^1), v2) & число атомов( формула соединения^1), v2) = число*

*атомов( формула соединения(v), v2) & структурная формула*

*соединения^1) Ф структурная формула соединения(v)*

Изом рами заданного органич ского со дин ния являются органич ски со дин ния, у которых одинаковый с данным со дин ни м эл м нтный состав, но различны структурны формулы.

1. *(v: органические соединения) число атомов углерода(v) = 1 м изомеры соединения(v) = 0*

Изомерия рассматривается только у соединений, содержащих не меньте двух атомов углерода.

1. *(v: органические соединения) (v1: органические соединения) v1 eизомеры соединения(v) м v изомеры соединения^1)*

Если одно органическое вещество является изомером другого органического веще ства, то второ е в еще ство также явля ется изомером первого.

1. *(v: {(v1: органические соединения) тип структуры углеродного скелета соединения^1) = цикл & (П1, параметры кольца(v)) = П2, параметры кольца(v))) & (& (i: I[1, length(структурная формула соединения(v))])*

*Пь структурная формула соединения(v))) = С) & (&(i: I[1,*

*length(структурная формула соединения(v))]) П3, П3, Пi, структурная формула соединения(v)))) = двойная)}) изомеры соединения(v) = 0 & структурная формула углеродного скелета соединения(v) = структурная формула соединения(v)*

Если органич ско со дин ни пр дставля т собой кольцо, состоящ из атомов угл рода, и вс атомы со дин ны двойной связью, то у этого органич ского со дин ния н т изом ров и, го структурная формула совпадает со структурной формулой его углеродного скел ета.

1. МОДУЛЬ "ИОНЫ"

При опр ед ел е нии прикладной логич е ской те ории Ионы, используются модули Элементный состав и Константы онтологии; данный модуль использу т стандартно расшир ни языка прикладной логики, а такж сп е циализированно е расшир е ни е с названи е м Интервалы [87].

*Ионы(ST, Интервалы) = <{Элементный состав, Константы*

онтологии}, SS>, гд SS пр длож ния, описанны ниж .

Опр д лим вспомогат льны т рмины

1. *ион = (хвозможная формула вещества, заряд иона)*

Термин ион обозначает множе ство пар. П ервым эл е м е нтом пары явля ется формула иона, а вторым - заряд иона.

1. *заряд иона = I[-7,0)uI(0,7]*

Т рмин заряд иона обознача т диапазон возможных знач ний заряда иона.

1. *простые ионы = {(v: ион) length(n(1, v)) = 1 & П1, v) ехимические элементы}*

Термин простые ионы обозначает множе ство ионов, состоящих из одного химиче ского элем ента.

1. *сложные ионы = ион* \ *простые ионы*

Т рмин сложные ионы обознача т множ ство ионов, состоящих бол ч м из одного химич ского эл м нта.

1. *катион ={(v: ион) л(2, v) > 0}*

Термин катион обозначает множе ство ионов им еющих положит ельный заряд.

1. *анион ={(v: ион) п(2, v) < 0}*

Термин анион обозначает множе ство ионов им еющих отрицательный заряд.

1. *предполагаемое число электронов иона = (Mv: ион) (Jj(i: I[1,*

*length( структурная формула(п(1, v)))]) число электронов*

*элемента(компонент структурной формулы(структурная формула(п(1, v)), i)))*

Вспомогательный термин предполагаемое число электронов иона обозначает функцию, сопоставляющую иону сумму чис ел эл е ктронов вс ех химич е ских эл е м е нтов, входящих в е го состав.

1. *число совместных электронов= (M(v: ион)( / (v е сложные ионы (X (i:I[1,length(структурная формула(П(1у)))]) валентность элемента (структурная формула(п(1, v)), i))), (v епростые ионы =^0)/))*

Вспомогат льный т рмин число совместных электронов обознача т функцию, которая сопоставля т иону удво нно число связ й внутри иона.

Опр д лим основны т рмины

1. *х(ионы соединения) = Собственные свойства веществ({} ион)*

Т ермин ионы соединения обозначает функцию, которая сопоставля ет химиче скому со единению множе ство ионов этого химиче ского со единения.

1. *Xотносительная электроотрицательность) = Собственные свойства элементов( R[0, максимальное значение электроотрицательности])*

Т рмин относительная электроотрицательность обознача т функцию, аргументом которой является химический элемент, а результатом - число, обозначающее относительную электроотрицательность данного химического эл м нта.

Опр еделим онтологиче ские соглашения

1. *(v: химические вещества) ju({(v2: ионы соединения(v)) v2 екатион}) = f4{(v4: ионы соединения(v)) v4 е анион})*

В со дин нии число различных отрицат льно заряж нных и положит льно заряженных ионов одинаково.

1. *(v: химические вещества) (Hv1: {(v2: ионы соединения(v)) v2 eкатион})*

*индекс(П1, v1))* \* *П2, v1)) + (Hv3: {(v4: ионы соединения(v)) v4 еанион})*

*индекс(П1, v3))* \* *П2, v3)) = 0*

Заряды отрицательно и положительно заряженных ионов комп енсируют друг друга в молекул е, т.е. молекула нейтральна.

1. *(v: химические вещества) (v1: {(v2: химические элементы) принадлежит*

*соединению( формула соединения(v), v2)}) (v3: {(v4: химические*

*элементы) принадлежит соединению(формула соединения(v), v4)}) max( относительная электроотрицательность^1), относительная электроотри-цательность^3)) - min(относительная электроотрица- тельность^1), относительная электроотрицательность^3))>1 м ионы соединения(v) Ф 0*

Ионы е сть только у тех со единений, которые содержат химич е ские элементы, р зко различающи ся по полярности.

1. *(v: органические соединения) (v1: ионы соединения(v)) (v (v2:*

*функциональные группы соединения(v)) формула функциональной группы(v2) = П1, v1))*

Ионы, входящи в состав органич ского со дин ния, являются функциональными группами этого со единения.

1. МОДУЛЬ "ХИМИЧЕСКИЕ РЕАКЦИИ"

При опр е дел е нии прикладной логич е ской т е ории Химические реакции, используются модули еакции мод ли онтологии физич ской химии и Константы онтологии; данный модуль использует стандартное растирение языка прикладной логики, а такж сп циализированны растир ния с названиями Математические кванторы и Интервалы.

*Химические реакции(ST, Математические кванторы, Интервалы) = <{Константы онтологии, Реакции}, SS>,* где SS пр едложения, описанны е ниж .

Опр д лим вспомогат льны т рмины

1. *термодинамический потенциал =(Я (v: химические реакции) изменение энтальпии(v) - изменение энтропии(v)\* абсолютная температура)*

Т рмин термодинамический потенциал обознача т функцию, аргум нтом которой явля тся химич ская р акция, а р зультатом - числ нная характеристика, относящаяся к термодинамическому потенциалу этой р акции.

1. *изменение энтропии =(Л (v: химические реакции) (E(v': результаты(v)) коэффициент(v, v')) - (E(v':реагенты(v)) коэффициент(v,v')))*

Т рмин изменение энтропии обознача т функцию, аргум нтом которой явля тся химич ская р акция, а р зультатом - разность суммы коэффици е нтов р е зультатов к сумм е коэффици е нтов р е аг ентов этой р е акции.

1. *изменение энтальпии =(A(v: химические реакции) (E(v': результаты(v)) удельная теплоемкость вещества (v')) - (Е (v': реагенты(v)) удельная теплоемкость вещества(v')))*

Т рмин изменение энтальпии обознача т функцию, аргум нтом которой явля тся химич ская р акция, а р зультатом - разность суммы уд льной т пло мкости р зультатов к сумм уд льной т пло мкости р аг нтов этой р акции.

1. *допустимая скорость реакции = максимально возможная скорость реакции*

Т рмин допустимая скорость реакции обознача т знач ни скорости р акции, которая явля тся допустимой (скорость р акции изм ря тся в количе ств е в еще ства в единицу врем ени).

Опр д лим основны т рмины

1. сорт *область значения метода стимуляции: Собственные свойства метода стимуляции({}химические вещества и {}R(-о оо)и{}N)*

Термин область значения метода стимуляции обозначает функцию, которая сопоставляет методу стимуляции реакции область её значения из области возможных знач ний м тодов стимуляции.

1. сорт *стимулятор реакции: Собственные свойства*

*реакций( {}Стимуляторы реакций)*

Термин стимулятор реакции обозначает функцию, которая сопоставляет реакции некоторое множество названий методов стимуляции этой реакции. Стимулятора р е акции может н е быть.

1. сорт *значение для стимулятора реакции: Свойства реакции, зависящие от значений ее свойств(реакцияХимические реакции, <стимулятор*

*стимулятор реакции(реакция)>, результат {}химические*

*вещества u{}R(-o oo)u{}N)*

Термин значение для стимулятора реакции обозначает функцию, аргументами которой являются реакция и метод ее стимуляции, а результатом - значение, которо е име ет стимулятор в этой р е акции.

1. сорт *коэффициент: Свойства участников реакции(Ц0, максимально возможный коэффициент])*

Термин коэффициент обозначает функцию, аргум ентами которой являются идентификатор реакции и химическое вещество, принадлежащее либо множ ству р аг нтов, либо множ ству р зультатов р акции, а р зультатом - коэффициент пер ед этим в еще ством в уравн ении р е акции.

1. сорт *скорость реакции: Собственные свойства реакций^[0,*

*максимально возможная скорость реакции])*

Т рмин скорость реакции обознача т функцию, аргум нтом которой является реакция, а результатом - скорость протекания реакции (скорость ре акции изм еря ется в колич е стве ве щ е ства в е диницу вр е м е ни).

1. сорт *возможность прохождения реакции: Собственные свойства реакций( L))*

Т рмин возможность прохождения реакции обознача т пр дикат, задающий условие прохождения реакции.

1. сорт *удельная теплоемкость вещества: Собственные свойства*

*веществ(Я[0, максимально возможное значение теплоемкости])*

Т рмин удельная теплоемкость вещества обознача т функцию, которая сопоставля т химич скому со дин нию н которую колич ств нную характеристику тепло емкости заданного в еще ства.

Опр д лим онтологич ски соглат ния

1. (v: химические реакции) реагенты(v) Ф 0 У любой р е акции е сть хотя бы один реагент.
2. *(v: химические реакции) результаты(v) Ф 0* У любой р акции сть хотя бы один р зультат.
3. *(v: химические реакции) реагенты(v) п результаты(v) = 0* Р аг нты и р зультаты любой р акции должны быть различны.
4. *(v: химические реакции) (v1: химические элементы) (Hv3: реагенты(v)) число атомов(формула соединения^3), v1) \* коэффициент(v, v3)) = (Hv4: результаты(v)) число атомов(формула соединения(v4), v1)* \* *коэффициент(v, v4))*

Закон сохран ния состава: число атомов любого химич ского эл м нта в формуле реакции слева (множество регентов) и справа (множество р зультатов) должно быть одинаковым.

1. *(v: {(v1: химические реакции) термодинамический потенциал^1) < 0 & скорость реакции(v) > допустимая скорость реакции}) стимулятор реакции(v) = 0*

Если т рмодинамич ский пот нциал м ньш нуля и скорость прохожд ния ре акции явля ется допустимой, то у р е акции н ет стимуляторов.

1. МОДУЛЬ "РЕАКЦИОННЫЕ ЦЕНТРЫ"

При определении прикладной логической теории Реакционные центры используются модули Элементный состав и Химические реакции; данный модуль использу т стандартно расшир ни языка прикладной логики, а также специализированно е расширение с названием Интервалы.

*Реакционные центры (ST, Интервалы) = <({Элементный состав, Химические реакции}), SS>,* где SS пре дложе ния, описанны е ниже.

Опр д лим вспомогат льны т рмины

1. *реакционные центры с максимальным приоритетом в реакции =(Л (v1:*

*химические реакции) (v2: реагенты^1)) {(v3: возможные реакционные центры соединения(v2)) приоритет реакционного центра соединения(v2, v3) = sup({(v4: возможные реакционные центры*

*соединения(v2)) приоритет реакционного центра соединения^2у4)})})*

Вспомогат льный т рмин реакционные центры с максимальным приоритетом в реакции обознача т функцию, которая сопоставля т р акции и р аг нту множ ство р акционных ц нтров этого со дин ния, им ющих наивысший приорит т.

1. *реакционные центры = Ц1,то)*

Вспомогательный термин реакционные центры обозначает множество реакционных центров, пр едставляемых ном ерами.

1. сорт *возможные реакционные центры соединения = Собственные свойства веществ( {} реакционные центры)*

Термин возможные реакционные центры соединения обозначает функцию, которая сопоставля т химич скому со дин нию множ ство возможных р акционных ц нтров данного химич ского со дин ния.

1. сорт *приоритет реакционного центра соединения: Свойства веществ,*

*зависящие от значений его свойств(вещество химические вещества,*

*<реакционный центр возможные реакционные центры*

*соединения(вещество)>, результат ~^R[0, 1])*

Термин приоритет реакционного центра соединения обозначает функцию, которая сопоставля т химич скому со дин нию и р акционному ц нтру этого со единения числово е знач ение приоритета этого р е акционного центра.

1. сорт *реакционный центр: Свойство реагентов реакции(реакционные центры)*

Термин реакционный центр обозначает функцию, которая сопоставля ет реакции и химиче скому со единению, являющемуся р е агентом в этой р е акции р акционный ц нтр этого со дин ния, который вступа т во взаимод йстви в данной р акции.

Опр д лим онтологич ски соглаш ния

* 1. *(v: химические реакции) (v1: реагенты(v)) реакционный центр(v, v1)е реакционные центры с максимальным приоритетом в реакции(v, v1)*

Во взаимод йстви при химич ской р акции вс гда вступа т р акционный ц ентр с наивысшим приоритетом.

1. МОДУЛЬ "РАДИКАЛЫ"

При определении прикладной логической теории Радикалы, используются модули Структурная формула соединения и Химические

реакции; данный модуль использу т стандартно растир ни языка прикладной логики.

*Р адикалы(ST) = <{Структурная формула соединения, Химические реакции}, SS>,* гд SS пр длож ния, описанны ниж .

Опр д лим вспомогат льны т рмины

1. *возможные формулы радикалов = возможная формула вещества*

Вспомогательный термин возможные формулы радикалов обозначает возможно е представл е ни е радикала в кач е ств е компон е нты формулы.

Опр д лим основны т рмины

1. сорт *возможные радикалы соединения: Компоненты*

*сущности(Химические вещества, Радикалы)*

Т рмин возможные радикалы соединения обознача т функцию, которая сопоставляет химическому соединению множество радикалов этого со дин ния.

1. сорт *реакционный центр радикала: Собственные свойства*

*радикалов(реакционные центры)*

Термин реакционные центры радикала обозначает функцию, которая сопоставляет радикалу единственный реакционный центр, имеющийся у данного радикала.

1. сорт *формула радикала: Собственные свойства радикалов(возможные формулы радикалов)*

Т рмин формула радикала обознача т функцию, аргум нтом которой явля тся радикал, а р зультатом - формула этого радикала.

1. сорт *структурная формула радикала: Собственные свойства*

*радикалов(возможная структурная формула)*

Т рмин структурная формула радикала обознача т функцию, аргум нтом которой явля тся радикал, а р зультатом - структурная формула этого радикала.

*2.5.* сорт *радикалы соединения в реакции: Свойства реагентов реакции({} радикалы)*

Т рмин радикалы соединения в реакции обознача т функцию, которая сопоставляет реакции и ее реагенту множество радикалов. Множество радикалов может быть пустым.

Опр д лим онтологич ски соглаш ния

1. *(v1: химические реакции) (v2: реагенты^1)) (v3: {(v3': возможные радикалы соединения(v2)) принадлежит соединению( формула соединения(v2), формула радикала^3'))}) (v (v4: результаты^1)) принадлежит соединению( формула соединения(v4), формула радикала( v3))*

Если в формул н которого р аг нта химич ской р акции выд л н радикал, то такой ж радикал буд т присутствовать в формул одного из р зультатов этой р акции.

1. *(v: химические реакции) {(v1: реагенты(v)) возможные радикалы*

*соединения^1)} = 0 {(v1: результаты(v)) возможные радикалы*

*соединения^1)} = 0*

Если в формулах вс х р аг нтов р акции н выд л ны радикалы, то и в формулах р езультатов реакции радикалы не выделены.

1. *(v: химические реакции) (v1: реагенты(v)) радикалы соединения в реакции(v, v1) а возможные радикалы соединения^1)*

Множество радикалов соединений в реакции есть подмножество радикалов этого со единения.

1. *(v: простые вещества) f( возможные радикалы соединения^1)) = 0*

У простых в щ ств н мож т быть радикалов.

1. МОДУЛЬ "МЕХАНИЗМ РЕАКЦИИ"

При опр д л нии прикладной логич ской т ории Механизм реакции, использу тся модуль Химические реакции; данный модуль использу т стандартное растир ени е языка прикладной логики.

*Механизм реакции(ST) = <{Химические реакции}, SS>,* где SS

пр едложения, описанны е ниже.

Опр д лим вспомогат льны т рмины

1. *возможные типы механизмов реакций = {радикальный, ионный, перициклический}*

Вспомогат льный т рмин возможные типы механизмов реакций обознача т множе ство идентификаторов возможных типов м еханизмов р е акций.

1. *возможные механизмы реакции = (и (n: I[2, о)) ({}химические вещества) Йп)*

Вспомогат льный т рмин возможные типы механизмов реакций обознача т множество представлений всех возможных механизмов реакций; механизм р акции пр дставля т собой посл доват льность (им ющую длину, н меньтую 2) множеств химических веществ. На каждой стадии реакции множество веществ этой стадии отличается от множеств веществ пр дыдущ й стадии располож ни м мол кул и длиной связи хотя бы одного химиче ского элем ента хотя бы одного химич е ского в еще ства.

Опр д лим основны т рмины

* 1. сорт *механизм реакции: собственные свойства реакций({}возможные механизмы реакции)*

Т рмин механизм реакции обознача т функцию, которая сопоставля т ре акции е е возможны е м еханизмы.

* 1. сорт *тип механизма реакции: Свойства реакции, зависящие от значений*

*ее свойств(реакцияхимические реакции, <возможный механизм механизм реакции(реакция)>, результат возможные типы*

*механизмов реакций)*

Термин тип механизма реакции обозначает функцию, которая сопоставля ет р акции и м ханизму этой р акции тип этого м ханизма.

* 1. сорт *механизм: Свойства реакции процесса(возможные механизмы реакции)*

Термин механизм обозначает функцию, которая сопоставля ет ном еру шага проц сса и р акции этого шага м ханизм р акции, р ализующийся на данном шаг химич ского проц сса.

* 1. сорт *дополнительное воздействие: Свойства реакции, зависящие от*

*значений ее свойств(реакцияхимические реакции, <возможный*

*механизм механизм реакции(реакция), номер шага I[1,*

*ЫщЩвозможный механизм) -1 ]>, результата {} методы стимуляции реакции)*

Термин дополнительное воздействие обозначает функцию, которая каждой стадии реакции (кроме последней) сопоставляет множество методов стимуляции р акции на этом шаг .

Опр д лим онтологич ски соглаш ния

1. *(v: химические реакции) (v1: механизм реакции(v)) П1, v1) п*

*n(length(v1), v1) = 0*

В щ ства, рассматрива мы на п рвой и посл дн й стадии любого м еханизма р е акции различны.

1. *(v: химические реакции) реагенты(v) z п(1, механизм реакции(v)) & результаты(v) z л(length(механизм реакции(v)), механизм реакции(v))*

При рассмотрении механизма реакции реагентами являются вещества на п рвом шаг рассмотр ния м ханизма, а р зультатами - в щ ства на посл дн м шаг .

1. *(v: химические реакции) стимулятор реакции(v) = {(i: I[1,*

*Ы^Щмеханизм реакции(v)) -1]) дополнительное воздействие(v,*

*механизм реакции(v), i)}*

При описании м ханизма р акции рассматриваются вс м тоды стимуляции реакции для заданной реакции, т.е. множество стимуляторов реакции есть объ е дин е ни е множ е ств стимуляторов каждой стадии.

Рассмотрим т п рь различны уровни пр дставл ния м ханизма р акции.

1. МОДУЛЬ "МЕХАНИЗМ РЕАКЦИИ (ПРОСТРАНСТВЕННОЕ РАССМОТРЕНИЕ)"

При опр д л нии прикладной логич ской т ории Механизм реакции (пространственное рассмотрение), используются модули

Пространственное расположение и Механизм реакции; данный модуль использу т стандартно расшир ни языка прикладной логики.

*Механизм реакции (пространственное рассмотрение )(ST) =*

*<{Пространственное расположение, Механизм реакции}, SS>,* где SS пр едложения, описанны е ниже.

Опр д лим основны т рмины

1. сорт *длина связи в соединении: Свойства реакции, зависящие от значений ее свойств(реакция м химические реакции, <возможный механизм м механизм реакции(реакция), номер стадии м I[1, ЫщЩвозможный механизм) - 1], соединением Пномер стадии, возможный механизм), элемент 1 м I[1, length(структурная формула соединения( соединение))], элемент 2 м I[1, length( структурная формула соединения(соединение))]>, результат м R[0, 0.5))*

Т рмин длина связи в соединении обознача т функцию, которая сопоставля т м ханизму р акции, стадии р акции для этого м ханизма, химич скому со дин нию, принадл жащ му множ ству со дин ний этой стадии, и двум химич ским эл м нтам длину связи м жду этими химич скими эл м нтами в со единении, т.е. расстояние от центра атома одного элем ента до центра атома другого элем ента. Длина связи изм еряется в наном етрах.

1. сорт *расположение молекулы в пространстве: Свойства реакции, зависящие от значений ее свойств(реакция м химические реакции, <возможный механизм м механизм реакции(реакция), номер стадии м I[1, ЫщЩвозможный механизм) - 1], соединением Пномер стадии, возможный механизм) >, результат м {}(х I[1, о), Ц-юю), Ц-юю), I(-*

*о, о)))*

Т рмин расположение молекулы в пространстве обознача т функцию, которая сопоставля т м ханизму р акции, стадии р акции для этого механизма и химическому соединению, принадлежащему множеству соединений на этой стадии, множество четвёрок: номер химического эл м нта, входящ го в состав заданного химич ского со дин ния, и координаты этого эл м нта в пространств .

Опр д лим онтологич ски соглат ния

1. *(реакция: химические реакции) (возможный механизм: механизм*

*реакции(реакция)) (i: I[1, ЫщЩвозможный механизм -1]) (v1: {(v': 7i(i, возможный механизм)) v' e П* + *1, возможный механизм)})*

*расположение молекулы в пространстве(реакция, <возможный*

*механизм, i, v1>) Ф расположение молекулы в пространстве(реакция, <возможный механизм, i + 1, v1>)*

Пространственное расположение молекул одного и того же вещества при рассмотр ении м еханизма ре акции различно на каждом шаге.

1. *(реакция: химические реакции) (возможный механизм: механизм*

*реакции(реакция)) (i: I[1, ЫщЩвозможный механизм -1]) (v1: {(v': Mi, возможный механизм)) v' ел(i + 1, возможный механизм)}) (v (j: I[1, length( структурная формула соединения^1))]) (v (k: {(k': I[1,*

*length(структурная формула соединения^1))]) j^k'}) длина связи в соединении(реакция, <возможный механизм, i, v1, j, k>) ^ длина связи в соединении(реакция, <возможный механизм, i+1, v1, j, k>)))*

Одни и т ж со дин ния на различных стадиях одного м ханизма р акции различаются длиной хотя бы одной связи м ежду какими-либо элем ентами.

1. *(реакция: химические реакции) (возможный механизм: механизм*

*реакции(реакция)) (номер стадии: I[1, ЫщЩвозможный механизм)]) (соединение: Пномер стадии, возможный механизм)) ц(\_расположение молекулы в пространстве(реакция, <возможный механизм, номер*

*стадии, соединение>)) = (X (элемент: {(v3: химические элементы) принадлежит соединению(формула соединения(соединение), v3)}) число атомов(формула соединения(соединение), элемент))*

Пространств нно располож ни описыва тся для вс х атомов химич ских эл м нтов в мол кул со дин ния

1. *(реакция: химические реакции) (возможный механизм: механизм*

*реакции(реакция)) (соединение: л(1, возможный механизм)) (i: {(v: I[1, length( структурная формула соединения( соединение))]) п(1, Mv, структурная формула соединения(соединение))) е химические элементы}) (j: {(j': {(v: I[1, length( структурная формула*

*соединения( соединение))]) л(1, Mv, структурная формула соединения(соединение))) е химические элементы & j'^i & j' е связи элемента в компоненте структурной формулы(структурная формула*

*соединения(соединение), i)}) длина связи в соединении(соединение, i, j) = длина связи(компонент структурной формулы(структурная формула соединения( соединение), i), компонент структурной*

*формулы(структурная формула соединения(соединение), j))*

При рассмотр нии м ханизма р акции на п рвой стадии длина связи вс х связанных химич ских эл м нтов соотв тству т обычной длин м жду этими химич е скими эл е м е нтами.

1. МОДУЛЬ "МЕХАНИЗМ РЕАКЦИИ (ИОННОЕ РАССМОТРЕНИЕ)"

При опр д л нии прикладной логич ской т ории Механизм реакции (ионное рассмотрение), используются модули Ионы и Механизм реакции; данный модуль использу т стандартно расшир ни языка прикладной логики, а такж е сп е циализированное расшир е ни е с названи ем Интервалы.

*Механизм реакции (ионное рассмотрение)(ST, Интервалы) = <{Ионы, Механизм реакции}, SS>,* где SS пр едложения, описанны е ниже.

Опр д лим основны т рмины

1. сорт *ионы в соединении: Свойства реакции, зависящие от значений ее свойств(реакциям химические реакции, <возможный механизм м механизм реакции(реакция)), номер стадии м I[1, ЫщЩвозможный механизм)], вещество м Пномер стадии, возможный механизм)>, результат м {} ион)*

Т рмин ионы в соединении обознача т функцию, аргум нтами которой являются р акция, м ханизм, ном р стадии, и со дин ни этой стадии, а результатом - множе ство ионов этого со единения.

Опр д лим онтологич ски соглаш ния

1. *(реакция: химические реакции) (возможный механизм: механизм*

*реакции(реакция)) (& (вещество: П1, возможный механизм)) ионы в соединении(реакция, <возможный механизм, 1, вещество>) = 0) & (& (вещество: П^^Щвозможный механизм), возможный механизм)) ионы соединения(реакция, <возможный механизм, ЫщЩвозможный механизм), вещество>) = 0)*

Вещества, рассматриваемые на первой и последней стадии реакции, н йтральны (н им ют ионов).

1. *(реакция: химические реакции) (возможный механизм: механизм*

*реакции(реакция)) (номер стадии: I[1, ЫщЩвозможный механизм-1]) (вещество: {(v: Пномер стадии, возможный механизм)) v e Пномер стадии+1, возможный механизм)}) ионы соединения(реакция, <возможный механизм, номер стадии, вещество>) Ф ионы соединения(реакция, <возможный механизм, номер стадии + 1,*

*вещество>)*

Если на сос дних стадиях рассматриваются одинаковы со дин ния, то ионы этих со дин ний различны.

1. МОДУЛЬ "МЕХАНИЗМ РЕАКЦИИ (ЭЛЕКТРОННОЕ РАССМОТРЕНИЕ)"

При опр д л нии прикладной логич ской т ории Механизм реакции (электронное рассмотрение), используются модули Электронная конфигурация соединения и Механизм реакции; данный модуль использу т стандартно растир ни языка прикладной логики, а такж специализированно е растир ени е с названием Интервалы.

*Механизм реакции (электронное рассмотрение)(ST, Интервалы) = <{Электронная конфигурация соединения, Механизм реакции}, SS>,* гд е SS пр едложения, описанны е ниже.

Опр д лим основны т рмины

1. сорт *электронная конфигурация соединения: Свойства реакции,*

*зависящие от значений ее свойств (реакциям химические реакции,*

*<возможный механизм ммеханизм реакции(реакция)), номер стадии м I[1, ЫщЩвозможный механизм)], вещество м Пномер стадии, возможный механизм), номер элемента м {(v: I[1, length(структурная формула соединения(вещество))]) П1, П, структурная формула соединения(вещество))) е химические элементы}, номер уровня м I[1, число электронных уровней(компонент структурной*

*формулы(структурная формула соединения(вещество), номер элемента))] >, результат м(х число s-электронов, число p-электронов, число d-электронов, число f-электронов)*

Т рмин электронная конфигурация соединения обознача т функцию, которая каждой стадии м ханизма р акции, в щ ству на этой стадии, химич скому элементу, входящему в состав этого соединения и электронному уровню сопоставляет четверку: число s-электронов, число р-электронов, число d- электронов, число f-электронов на данном электронном уровне данного химич ского эл м нта заданного со дин ния.

Опр д лим онтологич ски соглаш ния

1. *(v: химические реакции) (i: I[2, lengЩмеханизм реакции(v))]) (v1: {(v2: химические вещества) v2 е 7i{i, механизм реакции(v)) & v2е Пi - 1, механизм реакции(v))}) (j: {(v: I[1, length(структурная формула*

*соединения(v1))]) П1, П, структурная формула соединения(v1))) е химические элементы}) (к: число электронных уровней(компонент структурной формулы( структурная формула соединения^1), j)))*

*электронная конфигурация соединения(i, v1, j, k) ^ электронная конфигурация соединения(i - 1, v1, j, к)*

Одно и тож в щ ство для двух сос дних стадий р акции различа тся электронной конфигураци ей хотя бы одного атома химиче ского элем ента, входящ го в го состав.

1. *(реакция: химические реакции) (возможный механизм': механизм*

*реакции(реакция)) (вещество: П1, возможный механизм)) (номер*

*элемента: {(v: I[1, length(структурная формула соединения^1))]) П1 П, структурная формула соединения^1))) e химические элементы}) (номер уровня: I[1, число электронных уровней(П1, компонент*

*структурной формулы(структурная формула соединения(вещество)), номер элемента))]) электронная конфигурация соединения(реакция, <возможный механизм, 1, вещество, номер элемента, номер уровня>) = электронная конфигурация элемента в соединении(вещество, <номер элемента, номер уровня>)*

Все элементы всех веществ, рассматриваемых в механизме реакции на

п рвой стадии, им ют свойств нную им эл ктронную конфигурацию.

1. *(реакция: химические реакции) (возможный механизм': механизм*

*реакции(реакция)) (вещество: Пlength(возможный механизм),*

*возможный механизм)) (номер элемента: {(v: I[1, length(структурная формула соединения^1))]) П1, П, структурная формула соединения(v1)) e химические элементы}) (номер уровня: I[1, число электронных уровней(П1, компонент структурной*

*формулы(структурная формула соединения(вещество)), номер элемента))]) электронная конфигурация соединения(реакция, <возможный механизм, length(возможный механизм), вещество, номер элемента, номер уровня>) = электронная конфигурация элемента в соединении(вещество, <номер элемента, номер уровня>)*

Все элементы всех веществ, рассматриваемых в механизме реакции на

посл едн е й стадии, им еют свойстве нную им эл е ктронную конфигурацию.

1. *(реакция: химические реакции) (возможный механизм': механизм*

*реакции(реакция)) (номер стадии: I[2, ЫщЩвозможный механизм)-1]) (v (вещество: Пномер стадии, возможный механизм)) (v (номер*

*элемента: {(v: I[1, length(структурная формула соединения^1))]) П1 n(v, структурная формула соединения^1))) е химические элементы}) (v (номер уровня: I[1, число электронных уровней(П1, компонент*

*структурной формулы(структурная формула соединения(вещество)), номер элемента))]) электронная конфигурация соединения(реакция, <возможный механизм, номер стадии, вещество, номер элемента, номер уровня>) ^ электронная конфигурация элемента в*

*соединении(вещество, <номер элемента, номер уровня>))))*

Существуют элементы веществ, рассматриваемых в механизме реакции на любой стадии, кром е п ервой и посл едн е й, которы е им еют отличную от свойстве нной им эл е ктронную конфигурацию.

1. *(реакция: химические реакции) (возможный механизм': механизм*

*реакции(реакция)) (номер стадии: I[2, ЫщЩвозможный механизм)-1]) (вещество: Пномер стадии, возможный механизм)) (v (номер*

*элемента: {(v: I[1, length(структурная формула соединения^1))]) П1 Mv, структурная формула соединения^1)) е химические элементы & v е элементы с неспаренным электроном(вещество) и элементы со свободными местами для электронов(вещество)}) (v (номер уровня: I[1, число электронных уровней(П1, компонент структурной формулы(структурная формула соединения(вещество)), номер элемента))]) электронная конфигурация соединения(реакция, <возможный механизм, номер стадии, вещество, номер элемента, номер уровня>) ^ электронная конфигурация соединения(реакция, <возможный механизм, номер стадии+1, вещество, номер элемента, номер уровня>)))*

У веще ств, рассматриваемых в м еханизме р е акции, на любой стадии, кром е первой и последней изменение электронной конфигурации происходит у химических элементов с неспаренным электроном или у элементов со свободными м е стами для эл ектронов.

1. МОДУЛЬ "ХИМИЧЕСКИЙ ПРОЦЕСС"

При опр д л нии прикладной логич ской т ории Химический процесс, использу тся модуль Химические реакции; данный модуль использу т стандартно расшир ни языка прикладной логики, а такж

сп циализированно расшир ни с названи м Математические кванторы. Данный модуль опр д ля т т рмины онтологии д йствит льности.

*Химический процесс(ST, Математические кванторы, Интервалы) = <({Химическиереакции}), SS>,* где *SS* предложения, описанны е ниже.

Опр д лим основны т рмины

1. *сорт дополнительные вещества: Компоненты процесса({}Химические вещества)*

Т рмин дополнительные вещества пр дставля т собой функцию, аргументом которой является номер шага химического процесса (кроме последнего), а результатом - множе ство химиче ских веще ств, добавленных на этом шаге. Это множе ство может быть пустым.

Опр д лим онтологич ски соглаш ния

1. *реакции процесса(число шагов процесса) = 0* На посл дн м шаг проц сса р акций н т.
2. *(v: I[1, число шагов процесса-1 ]) (v1: реакции процесса(v)) реагенты^1) свещества процесса (v) & результаты^1) свещества процесса(v + 1)*

Р акция мож т им ть м сто на н котором шаг химич ского проц сса, сли р аг нты являются подмнож ством в щ ств этого шага, а р зультаты - подмноже ством веще ств следующего шага.

1. *(v1: I[2, число шагов процесса-1]) вещества процесса^1) = вещества процесса^1-1)* \ *(и (v2: реакции процесса^1)) реагенты^2)) и (и (v4:*

*реакции процесса^1)) результаты(v4)) и (дополнительные*

*вещества( v1+1))*

Множество веществ каждого следующего тага есть множество веществ текущего тага, из которого удалены р е агенты ре акций пр едыдущего тага, добавлены результаты всех реакций, имевтих место на текущем таге, а также дополнительные в еще ства.

1. МОДУЛЬ "КОНСТАНТЫ ОНТОЛОГИИ ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ"

Данный модуль явля тся вспомогат льным, он сод ржит опр д л ни констант, задающих максимальные знач ения, при которых онтология считается справедливой.

1. сорт *максимальное значение главного квантового числа: I[1, о)*

*Термин* максимальное значение главного квантового числа *обозначает максимально допустимое значение главного квантового числа, при котором онтология является справедливой.*

1. сорт *максимально допустимое значение энергии: R[0, о)*

*Термин* максимально допустимо знач ни эн ргии *определяет то максимальное значение энергии, при котором модель онтологии считается справедливой*

1. сорт *максимальное значение электроотрицательности: R[0, о)*

*Термин* максимально знач ни эл ктроотрицат льности *обозначает максимально допустимое значение электроотрицательности, при котором онтология является справедливой.*

1. сорт *максимально возможное число колец: I[0, о)*

*Термин* максимально возможно число кол ц *обозначает максимально допустимое число колец органического соединения, при котором онтология является справедливой.*

1. сорт *максимально возможное количество связей: I[0, о)*

*Термин* максимально возможно е количе ство связ ей *обозначает максимально допустимое количество связей в органическом соединении, при котором онтология является справедливой.*

1. *X'максимально возможное число атомов) = I[0, о)*

*Термин* максимально возможно число атомов *обозначает максимально допустимое число углерода в органическом соединении, при котором онтология является справедливой.*

1. *Xмаксимально возможное значение теплоемкости) = R[0, о)*

*Термин «максимально возможное значение теплоемкости» обозначает максимально допустимое значение теплоемкости химического соединения, при котором онтология является справедливой.*

1. сорт *максимально возможная скорость реакции: I[0, о)*

*Термин* максимально возможная скорость р акции *обозначает максимально допустимое значение скорости реакции, при котором онтология является справедливой.*

1. сорт *абсолютная температура: R[-270, максимальное значение*

*температуры ]*

Т ер мин абсолютная температура обозначает знач е ние абсолютной температуры, единицей измер ения температуры является К.

1. сорт *максимальное значение температуры: R[0, о)*

*Термин* максимальное значение температуры *обозначает максимально допустимое значение температуры, при котором онтология является справедливой.*

1. сорт *максимально возможный коэффициент: I[0, о)*

*Термин* максимально возможный коэффици нт *обозначает максимально допустимый коэффициент, т.е. максимально допустимое число атомов вещества, при котором онтология является справедливой.*

**ПРИЛОЖЕНИЕ 4. МОДЕЛЬ ОНТОЛОГИИ ВТОРОГО УРОВНЯ ДЛЯ**

**РЕНТГЕНО-ФЛУОРЕСЦЕНТНОГО АНАЛИЗА**

1. МОДУЛЬ «СТРОЕНИЕ АТОМОВ»

Прикладная логическая теория Строение атомов(БТ, Интервалы) = <{Онтология третьего уровня для рентгенофлуоресцентного анализа, Константы онтологии рентгено-флуоресцентного анализа}, SS>, где SS - это множество предложений прикладной логической теории, определяемое ниж . Вс н однозначно инт рпр тиру мы символы данной логич ской те ории являются терминами для описания знаний (параметрами онтологии второго уровня).

1. Скорость св ета = 2,9979246 \* 10?8

Вспомогательный т ермин "Скорость св ета" задает знач е ни е скорости света в вакуум .

1. Постоянная Планка = 6,62618 \* 10Т(-34)

Вспомогательный термин "Постоянная Планка" задает значение данной константы.

1. Сорт Эн ерг етич е ски е уровни оболочки: Компон енты сущности(Оболочки, Энергетиче ские уровни)

Т ермин "Эн ерг етич е ски е уровни" оболочки обозначает функцию, сопоставляющую оболочке множество е ё эн ергетич еских уровней.

1. Сорт Главно е квантово е число: Собственны е свойства оболочек(1[1,н))

Т ермин "Главно е квантово е число" обозначает функцию, сопоставляющую оболочке значени е главного квантового числа электронов, расположенных на данной оболочк .

1. Сорт Эн рг тич ски уровни эл м нта: Компон нты сущности

(Химиче ские элем енты, Энергетич е ские уровни)

Т рмин "Эн рг тич ски уровни эл м нта" обознача т функцию, аргументом которой является химический элемент, а результатом - не пусто е множе ство энергетиче ских уровней

8. Сорт Главно е квантово е число энергетиче ского уровня: Собств енны е свойства уровн е й(1[1, н))

Т рмин "Главно квантово число эн рг тич ского уровня" обознача т функцию, сопоставляющую эн рг тич скому уровню знач ни главного квантового числа.

1. Сорт Орбитально е квантово е число: Собственные свойства уровней(1[0, н)) Термин "Орбитальное квантовое число" обозначает функцию, сопоставляющую эн рг тич скому уровню орбитально квантово число электронов, находящихся на этом уровн е.
2. Сорт Спин-орбитально е связывание: Собств енные свойства уровней(1[1/2, н))

Т рмин "Спин-орбитально связывани " обознача т функцию,

сопоставляющую энергетическому уровню спин-орбитальное связывание электронов, расположенных на данном эн ергетич еском уровне.

Т е п ерь опр е д елим онтологич е ски е соглат ения данного модуля.

1. (o1: Оболочки) Главное квантовое число(о1) = 1 v ^({(o2: Оболочки) Главно е квантово е число(о2) = Главно е квантово е число(о1) - 1}) Ф 0 Если суще ствует оболочка с главным квантовым числом n, то суще ствуют и оболочки со значениями главных квантовых чис ел, м еньтими n.
2. (о: Оболочки)(еи: Энергетические уровни оболочки(о)) Орбитальное квантовое число(еи) < Главное квантовое число(о)

Орбитальное квантовое число всегда меньте, чем главное квантовое число оболочки, на которой расположен энергетиче ский уров ень.

1. (о: Оболочки)(еи: Энергетич е ские уровни оболочки(о)) Орбитально е квантовое число(еи) = 0 v ^({(ue2: Эн ергетиче ски е уровни оболочки(о)) Орбитальное квантовое число(еи2) = Орбитальное квантовое число(еи2) - 1}) Ф 0

Если на оболочке существует энергетический уровень с орбитальным квантовым числом, равным m, то суще ствуют и энергетич еские уровни со вс евозможными орбитальными квантовыми числами из отр е зка [0, m-1], расположенны е на этой же оболочке.

1. (eu: Энергетические уровни) (Спин-орбитальное связывание(еи) = (Орбитальное квантовое число(еи) -1/2)) v (Спин-орбитальное связывани е (eu) = (Орбитально е квантовое число(еи) +1/2))

Знач ни м спин-орбитального связывания на эн рг тич ском уровн равно (орбитально е квантовое число -1/2) или (орбитально е квантово е число + 1/2).

1. (о: Оболочки) (eul: Эн ергетиче ские уровни оболочки(о)) (eu2: {(euu: Энергетиче ские уровни оболочки(о)) euu Ф eul}) (Орбитальное квантово е число^^) Ф Орбитально е квантово е число(eu2)) v (Спин-орбитально е связывани е (eul) Ф Спин-орбитально е связывани е (eu2))

Н мож т быть двух эн рг тич ских уровн й, располож нных на одной оболочке, которым соответствуют и одинаковые орбитальные квантовые числа, и одинаковы знач ния спин-орбитального связывания.

1. (о: Оболочки) ^(Энергетиче ски е уровни оболочки(о)) = (2\*Главно е квантово число(о) - 1)

Количество энергетических уровней на оболочке с главным квантовым числом n равно (2\*n -1).

1. МОДУЛЬ «РАДИАЦИОННЫЕ ПЕРЕХОДЫ»

Прикладная логич е ская те ория Радиационны е п ереходы^Т, Интервалы) = <{Стро е ни е атомов}, SS>, гд е SS - это множе ство пр е дложе ний прикладной логич ской т ории, опр д ля мо ниж . Вс н однозначно инт рпр тиру мы символы данной логич ской т ории являются т рминами для описания знаний (парам етрами п ервого уровня). Данный модуль использу т т рминологию пр дыдущ го модуля. Опр д лим т рмины данного модуля.

1. Сорт Начально е положение электрона при пер еходе: Собственные свойства п р ходов(Эн рг тич ски уровни)

Т ермин "Начально е положе ни е эл е ктрона при п ереход е" обозначает функцию, которая сопоставля т радиационному п р ходу эн рг тич ский уровень, с которого электрон пер ем ещается при этом пер еходе.

1. Сорт Конечно е положение электрона при пер еходе: Собственны е свойства п р ходов(Эн рг тич ски уровни)

Т ермин "Кон ечное положе ни е эл е ктрона при п ер еходе" обозначает функцию, которая сопоставля т радиационному п р ходу эн рг тич ский уровень, на который электрон пер ем ещается при этом переходе.

1. Сорт Радиационны п р ходы эл м нта: Компон нты

сущности(Химические элементы, Радиационные переходы орбитальных электронов)

1. Сорт Константа экранирования: Собственны е свойства пер еходов(Я(0,н)) Т ермин "Константа экранирования" обозначает функцию, которая сопоставля т радиационному п р ходу соотв тствующую му константу экранирования (константа постоянна для каждой линии спектра и не изм еня ется от эл е м е нта к эл е м енту).
2. Сорт Константа см ещения: Собственны е свойства пер еходов(Я[0, н))

Т ермин "Константа см е щ ения" обозначает функцию, которая сопоставля ет радиационному п р ходу соотв тствующую му константу см щ ния (константа является общей для одноименных линий всех элементов, но различной для разных линий).

1. Сорт Относительная инт енсивность: Собств е нны е свойства

пер еходов(Я[0,н))

Термин "Относительная интенсивность" обозначает функцию, которая сопоставля т радиационному п р ходу соотв тствующую му относит льную инт нсивность.

Т е п ерь опр е д елим онтологич е ски е соглат ения данного модуля.

1. (rp: Радиационны е пер еходы орбитальных электронов) Главно е квантово е число энергетического уровня(Начальное положение электрона при п ереход е (rp) - Главно е квантово е число эн ерг етич е ского уровня (Конечное положение электрона при пер еходе (rp))) > 0 Радиационный п ереход с одной оболочки на другую должен удовлетворять следующему правилу: главное квантовое число того энергетического уровня, с которого был сов ртён п р ход, должно быть больт главного квантового числа эн рг тич ского уровня, на который сов ртён п р ход.
2. (rp: Радиационные переходы орбитальных электронов) (Орбитальное квантовое число(Конечное положение электрона при переходе (rp)) - Орбитальное квантовое число (Начальное положение электрона при п ереход е (rp)) e {-1, 1})

Радиационный п ереход с одной оболочки на другую должен удовлетворять сл едующему правилу: Д1 = ±1, где l - орбитальное квантово е число.

1. (rp: Радиационны е п ереходы орбитальных электронов) (Спин-орбитально е связывание (Конечное положение электрона при переходе (rp)) - Спин- орбитальное связывание (Начальное положение электрона при п ереход е (rp)) e {0, -1, 1})

Радиационный п ереход с одной оболочки на другую должен удовлетворять сл едующему правилу: Aj = 0 или ±1, где j - спин-орбитально е связывание.

1. МОДУЛЬ «СВОЙСТВА УРОВНЕЙ И ПЕРЕХОДОВ ЭЛЕМЕНТОВ»

Прикладная логическая теория Свойства уровней и переходов эл е м е нта^Т, Инт ервалы) = <{ Радиационны е п ереходы}, SS>, где SS - это множе ство пр едложений прикладной логич еской те ории, опр еделяемо е ниже. Все неоднозначно интерпретируемые символы данной логической теории являются т рминами для описания знаний (парам трами п рвого уровня).

Данный модуль использу т т рминологию пр дыдущ го модуля. Опр д лим термины данного модуля.

1. Сорт Порядковый ном ер элем ента: Собств енные свойства

эл е м е нтов(1[1,108])

Т рмин "Порядковый ном р эл м нта" обознача т функцию, которая сопоставля т химич скому эл м нту го ном р в п риодич ской сист м химич е ских эл е м е нтов.

1. Сорт Эн ергия связи эл е ктронов на эн ерг етич е ском уровн е эл е м е нта: Свойства уровней элем ента(Я(0, н))

Т ермин "Эн ергия связи эл е ктронов на эн ерг етич е ском уровн е эл е м ента" (синоним термина «край поглощения») обозначает функцию, которая сопоставля т химич скому эл м нту и го эн рг тич скому уровню эн ергию связи эл ектронов, расположе нных на этом эн ерг етич е ском уровн .

1. Сорт Частота характеристич е ского излуч е ния: Свойства п ер еходов элемента(Я(0, н))

Т ермин "Частота характеристич е ского излуч е ния" обозначает функцию, которая сопоставля т эл м нту и радиационному п р ходу частоту характ ристич ского излуч ния, которо возника т в р зультат этого перехода.

1. Сорт Длина волны характеристич е ского излуч е ния: Свойства п ер еходов элемента(Я(0, н))

Т рмин "Длина волны характ ристич ского излуч ния" обознача т функцию, которая сопоставля т эл м нту и радиационному п р ходу длину волны характеристического излучения, которое возникает в р зультат этого п р хода.

1. Сорт Эн ергия характеристич е ского излуч е ния: Свойства п ереходов эл м нта(Эн ргии излуч ния)

Т ермин "Эн ергия характ еристич е ского излуч е ния" обозначает функцию, которая сопоставля т эл м нту и радиационному п р ходу эн ргию характеристического излучения, которое возникает в результате этого п р хода.

Т п рь опр д лим онтологич ски соглаш ния данного модуля.

1. (el1: Химиче ски е элем енты)(е12: Химиче ские элем енты) Порядковый ном ер эл е м е нта(е11) \* Порядковый ном ер эл е м е нта(е12) v e11 = e12 Каждый химич ский эл м нт им т свой порядковый ном р, который н мож т совпадать с ном рами других химич ских эл м нтов.
2. (е1: Химиче ски е элем енты)(еи: {(eeu: Энергетиче ские уровни элем ента(е1)) Главно е квантово е число(ееи) \* 1}) ^({(eus: Энергетиче ские уровни эл е м е нта(е1)) Главно е квантово е число(еш) = Главно е квантово е число(еи)

* 1}) \* 0

Если у химического элемента существует энергетический уровень, которому соответствует главное квантовое число n, то у этого элемента должны быть и вс уровни, которым соотв тствуют знач ния главных квантовых чис ел в диапазон е [1, п-1].

1. (е1: Химич еские элем енты)(гр: Радиационны е пер еходы элем ента(е1))

Начальное положение электрона при переходе(гр) е Энергетические уровни элем ента(е1)

Н который радиационный п р ход мож т быть осущ ствлён для электронов химического элементе, только если в этом элементе есть энергетический уровень, с которого происходит переход электрона при данном радиационном п р ход .

1. (е1: Химические элементы)(гр: Радиационные переходы элемента(е1))

Конечно е положени е электрона при п ер еходе (гр) е Энергетиче ски е уровни эл м нта(е1)

Некоторый радиационный пер еход может быть осуще ствлён для электрона химич ского эл м нта, только сли в этом эл м нт сть эн рг тич ский уровень, на который будет выполняется переход электрона при данном радиационном п р ход .

1. (е1: Химические элементы)(гр: Радиационные переходы элемента(е1))

Энергия связи электронов на энергетическом уровне элемеш^^, конечное положение электрона при переходе(гр)>) <Энергия связи электронов на эн ергетиче ском уровне элемеш^^, начально е положение электрона при пер еходе (гр)>)

Чтобы п р ход был радиационным (т. . чтобы в р зультат этого п р ходы происходило излуч ни эн ргии) н обходимо, чтобы эн ргия эн рг тич ского уровня данного химич ского эл м нта, с которого был сов ершён пер еход, была больше энергии энергетиче ского уровня данного химиче ского элем ента, на который был произв едён п ереход.

1. (el: Химические элементы)(гр: Радиационные переходы элемента^)) Частота характеристиче ского излучения(<el, гр>) = Скорость св ета / Длина волны характеристиче ского излучения (<el, гр>)

Длина волны связаны с частотой соотношением v = с / X, где V - частота, X

* длина волны, с - скорость света.

1. (el: Химические элементы)(гр: Радиационные переходы элемента^)) Энергия характеристиче ского излучения(<el, гр>) = Постоянная Планка \* Частота характеристиче ского излучения(<el, гр>)

Энергия излучения связана с его частотой следующей формулой: e = hv, где h - постоянная планка.

1. Длина волны характеристич е ского излуч ения (<el, гр>) = Скорость св ета / Частота характеристиче ского излучения (<el, гр>)

Длина волны связана с частотой соотношени ем X = с / V, где V - частота, X

* длина волны, с - скорость света.

1. (el: Химические элементы)(гр: Радиационные переходы элемента^))

Частота характеристического излучения(<el, гр>) = Константа смещения(гр) \* (Порядковый номер элемента^) - Константа

экранирования(гр))Т 2

Закон Мозли: v = K (Z - a)2, где K - константа см ещения, Z - порядковый ном ер эл емента, а - константа экранирования элем ента.

1. (ell: Химиче ски е эл ем енты)^^: Химиче ски е элементы) (eu:

Эн ерг етич е ски е уровни эл е м е нта(е11) п Эн ергетич е ски е уровни эл е м е нта (e12)) Порядковый ном ер эл е м е нта(е11) > Порядковый ном ер эл ем е нта(е12) м Эн ергия связи эл ектронов на эн ерг етич е ском уровн е эл е м е нта (<e11, еи>) > Энергия связи электронов на энергетиче ском уровне элем ента (<e12, еи>)

У электрона, расположенного на одном и том же уровне одного и того же эн рг тич ского подуровня, эн ргия связи т м больт , ч м больт порядковый ном ер химиче ского элем ента.

1. МОДУЛЬ «СВОЙСТВА ИЗОТОПОВ»

Прикладная логическая теория Свойства изотопов^Т, Интервалы) = <{Радиационны е п ер еходы}, SS>, гд е SS - это множе ство предлож ений прикладной логич ской т ории, опр д ля мо ниж . Вс н однозначно инт рпр тиру мы символы данной логич ской т ории являются т рминами для описания знаний. Данный модуль использу т т рминологию пр едыдущего модуля. Опр еделим термины данного модуля.

1. Сорт Массово е число изотопа: Собственны е свойства изотопов(1(0,н))

Знач ни м т рмина массово число изотопа явля тся сумма протонов и нейтронов ядра изотопа.

1. Сорт Энергии линий изотопа: Собственны е свойства изотопов({ }R(0,h))

Т ермин "Эн ергии линий изотопа" опр е д еля ет множе ство возможных эн ргий линий изотопа.

Т е п ерь опр е д елим онтологич е ски е соглат ения данного модуля.

1. (ri: Радиоактивны е изотопы) п(2, Радиоактивны е изотопы) = Массово е число изотопа(п)

Изотопы обозначаются парой <химиче ский эл емент, массовое число>.

1. (ri: Радиоактивны е изотопы) Порядковый номер элем ента(тс(1,

Радиоактивные изотопы)) < Массовое число изотопа(п)

Массово число изотопа н мож т быть м ньт порядкового ном ра химич ского эл м нта, изотопом которого он явля тся.

1. МОДУЛЬ «СОСТАВ ПРОБЫ»

Вс пр дыдущи модули опр д ляли т рмины, использу мы при описании знаний предметной области. В данном модуле определяется т рминология, использу мая при р ш нии задач в данной пр дм тной области (сист е ма понятий д е йствительности). Данный модуль использу ет т рминологию пр дыдущих модул й. Прикладная логич ская т ория Р ентгено-флуоресц ентный анализ^Т, Интервалы) = <{ Свойства изотопов, Свойства уровн ей и п ер еходов эл ем е нта}, SS>, где SS - это множе ство пр е дложе ний прикладной логич е ской те ории, опр е деля е мо е ниже.

1. сорт Кач е ств е нный состав пробы: Сущности проц е сса(Химич е ски е эл м нты)

Т ермин "Кач е ств е нный состав пробы" обозначает множе ство химич е ских элементов, которые входят в состав анализируемой пробы.

1. сорт Проц нтно сод ржани эл м нта в проб : Свойства эл м нтов пробы(Я(0, н))

Т ермин "Проц е нтно е сод ержани е эл е м е нта в проб е" обозначает функцию, которая сопоставля т химич скому эл м нту го проц нтно сод ржани в проб .

1. сорт Калибровочный эл ем е нт: Выд ел е нны е сущности

проце сса(Химич е ские элем енты)

Т ермин калибровочный эл е м е нт обозначает н е который химич е ский эл м нта проц сса р нтг но-флуор сц нтного анализа.

1. сорт Изотопы проце сса: Сущности проце сса(Радиоактивны е изотопы) Значением термина источник радиоактивного излучения является радиоактивный изотоп, который явля тся источником наблюда мого излуч ния.
2. сорт Источник радиоактивного излуч е ния: Выд ел енны е сущности

проц сса(Радиоактивны изотопы)

Знач ни м т рмина "Источник радиоактивного излуч ния" явля тся радиоактивный изотоп, который явля тся источником наблюда мого излуч е ния.

1. сорт минимальная изве стная эн ергия: Собственные свойства проце сса^(0,

н))

Знач ни м т рмина минимальная изв стная эн ргия явля тся знач ни минимальной эн ргии, наблюда мой при излуч нии.

1. Сорт Эн ергия п ервичного излуч ения: Собств е нны е свойства

проце сса^(0,о))

Данный термин обозначает энергию первичного рентгеновского излучения, которо е воздейству ет на анализируемую пробу.

1. Сорт Эн ергии рентг е но-флуор е сц е нтного излуч е ния: Сущности

проц сса(Эн ргии излуч ния))

Эн ргии р нтг нофлуор сц нтного излуч ния» описыва т, какими эн ргиями обладают волны излуч ния, получ нного в р зультат облучения пробы р ентгеновскими лучами

1. сорт интенсивность излучения: Свойства энергий проце сса^(0,н))

Данный т рмин обознача т инт нсивность наблюда мого излуч ния.

Т п рь прив д м онтологич ски соглат ния данного модуля, задающие ограничения целостности действительности и связи онтологии д йствит льности и онтологии знаний.

1. Sup(энергии линий изотопа(источник радиоактивного излучения)) = эн ергия п ервичного излуч ения(1)

Эн ргия п рвичного излуч ния - это число, равно максимальному значению энергии, излучаемой источником радиоактивного излучения.

1. (e1: кач еств енный состав пробы(1)) процентно е содержани е элем ента в проб е (1,e1) > 0

Если химический элемент входит в качественный состав пробы, то его проц нтно сод ржани в проб больш 0.

1. (е1: качественный состав пробы(1)) {(гр: радиационные переходы

эл е м е нта(е1)) ((эн ергия п ервичного излуч е ния(1) > эн ергия связи

электронов на энергетиче ском уровне элем ента(<е1, конечно е положение электрона при переходе (гр)>))& энергия характеристического излуч е ния(<е1, гр>) > минимальная изв е стная эн ергия(1))} N 0 Определяемые элементы - это те элементы, которые имеют хотя бы один п р ход, эн ргия которого больш , ч м минимальная изв стная эн ргия, а энергия связи электрона для данного перехода у данного элемента на уровн , на который сов рша тся п р ход, н больш эн ргии п рвичного излуч ния.

1. (е1: кач е ственный состав пробы(1))(еи: энергетиче ские уровни

элем ента(е1))(гр: {(грр: радиационны е пер еходы элем ента(е1)) конечно е положе ни е эл е ктрона при п ер еходе (грр) = еи}) эн ергия п ервичного излуч е ния(1) <эн ергия связи эл е ктронов на эн ерг етич е ском уровн е элем ента(<е1, еи>) v эн ергия характеристиче ского излуч ения(<е1, гр>) е эн ергии р е нтг е нофлуор е сц е нтного излуч е ния(1)

Для каждого эл м нта, входящ го в кач ств нный состав анализиру мого образца, выполняется сл е дующ е е услови е: е сли эн ергия п ервичного излучения превышает энергию связи электрона в атоме химического элемента, то все энергии характеристического излучения, которые соотв тствуют радиационным п р ходам, оканчивающимся на энергетич е ском уровне, соответствующем этому электрону, присутствуют в множе ств е эн ергий полученного рентгенофлуоресцентного излучения.

1. (е1: кач е стве нный состав пробы(1))(еи: эн ерг етич е ски е уровни эле м е нта(е1)

п радиационны е пер еходы элем ента((<п(1, калибровочный эл е м е нт)>)))(гр: {(грр: (радиационные п ер еходы эл е м е нта(е1) п

радиационны п р ходы эл м нта(калибровочный эл м нт))) кон чно положе ни е эл е ктрона при п ер еходе (грр) = еи}) эн ергия п ервичного

излуч е ния(1) < эн ергия связи эл е ктронов на эн ерг етич е ском уровн е элем ента^^ eu>) v энергия характеристич е ского излучения (<el, гр>) е эн ергии р ентгенофлуоресцентного излуч ения(2) д процентно е содержани е эл м нта в проб (el) = (инт нсивность излуч ния(эн ргия

характеристического излучения (<el, гр>)) \* процентное содержание эл м нта в проб (калибровочный эл м нт) / инт нсивность

излуч ния(эн ргия характ ристич ского излуч ния (калибровочный эл м нт), гр))

Для каждого элем ента, входящего в каче ственный состав анализируемого образца, выполняется сл е дующе е услови е: проц е нтно е содержани е

эл м нта в проб равно произв д нию инт нсивности излуч ния и проц нтного сод ржания в проб калибровочного эл м нта, разд лённого на инт нсивность излуч ния калибровочного эл м нта.

1. Число шагов проц сса = 2 Число шагов проц сса равно 2
2. ^(Изотопы проц е сса(1)) = 1 Радиоактивный изотоп динств нный

**ПРИЛОЖЕНИЕ 5. ФРАГМЕНТ БАЗЫ ЗНАНИЙ ФИЗИЧЕСКОЙ**

**ХИМИИ**

В данном приложении приведен фрагмент неструктурированной части знаний физич ской химии. Знания пр дставл ны в вид пр длож ний - огранич ний на знач ния им н и записаны ср дствами одного из языков прикладной логики, класс которых опр д л н в прилож нии 1.

1. ФРАГМЕНТ БАЗЫ ЗНАНИЙ МОДУЛЯ “ОСНОВЫ ТЕРМОДИНАМИКИ”
2. любая изолированная т рмодинамич ская сист ма н обм нива тся с внетним миром в еще ством, поэтому число атомов любого элем ента ср еди вс х ингр ди нтов сист мы сть в личина постоянная

(& (т: I[1, число тагов процесса -1]) тип системы(т) = изолированная) м (Z (i: вещества процесса(т)) (Z (k: Химические элементы) число атомов^, k))) = (Z (j: в е щ е ства проц е сса(т+1)) (Z (k: Химич е ски е эл е м енты) число атомов^, k)))

1. изолированная т рмодинамич ская сист ма н обм нива тся с вн тним миром эн рги й

(& (т: I[1, число тагов процесса -1]) тип системы(т) = изолированная) м (& (т: I[1, число тагов процесса -1]) внутр енняя эн ергия(т) = внутр енняя эн ергия(т+1))

1. объ е м изолированной и закрытой т ермодинамич е ской сист е мы постоян е н (& (т: I[1, число тагов процесса -1]) тип системы(т) e {изолированная, закрытая}) м (& (т: I[1, число тагов процесса-1]) объем(т) = объем(т+1))
2. давл ни в открытой т рмодинамич ской сист м равно атмосф рному

(& (т: I[1, число тагов процесса -1]) тип системы(т) = открытая) м (&(т: I[1, число тагов проце сса]) давление (т) = нормально е давление)

1. в начальный мом нт наблюд ния работа любой сист мы равна нулю работа(1) = 0
2. сист ма сов рша т работу только против вн шн го давл ния, изм няя свой объ е м

(т: I[1, число шагов процесса-1]) работа(т+1) = (объем(т+1) - объем(т)) \* нормально давл ни

1. сли в сист м н т химич ских р акций, набор ингр ди нтов постоян н

(т: {(т’:1[1, число шагов процесса-1]) реакции процесса(т’) = 0}) (в е щ е ства проц е сса(т) = ве щ е ства проц е сса(т+1))

1. ФРАГМЕНТ БАЗЫ ЗНАНИЙ МОДУЛЯ “ТЕРМОДИНАМИКА. ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА”
2. ид нтификатор динств нной фазы в т рмодинамич ской сист м , н им ющ й других фаз в том ж агр гатном состоянии, совпада т с названи м агр гатного состояния

(s: вс е возможны е состояния фаз) (т: {(т’: I[1, число шагов проце сса]) ^({(ф: фазы проце сса(т)) состояние фазы(т, ф) = s}) = 1}) (ф: {(ф': фазы проц е сса(т)) состояни е фазы(т, ф') = s}) ф = s

1. критерием наступления в термодинамической системе фазового равнов сия явля тся рав нство химич ских пот нциалов каждого компон нта сист мы во вс х фазах, гд этот компон нт присутству т

(т: I[1, число шагов проце сса]) фазово е равновеси е (т) ^ (& (i: веще ства проц е сса(т)) (& (ф1: {(ф1’: фазы проц е сса(т)) колич е ство(т, ф1’, i) Ф 0}) (& (ф2: {(ф2’: фазы процесса(т)) ф2’ Ф ф1 & количество(т, ф2’, i) Ф 0}) химич ский пот нциал(т, ф1, i) = химич ский пот нциал(т, ф2, i))))

1. ид альным раствором явля тся жидкая фаза, вс ингр ди нты которой н являются электролитами, а доля количества вещества каждого из раствор нных ингр ди нтов м ньш одной тысячной

(т: I[1, число шагов процесса-1]) (ф: фазы процесса(т)) идеальность(т, ф) = иде альный ^ состояние фазы(т, ф) = жидкая & (& (i: {(i’: веще ства фазы проц е сса(т, ф)) состояни е в е щ е ства фазы(т, ф, i’) е {жидко е, растворенно е}}) Н е эл е ктролит(1)) & (& (j: {(j’: в е щ е ства фазы проц е сса(т, ф)) состояни е в е щ е ства фазы(т, ф, j’) = раствор е нное}) дол.колич е ство(т, ф, j) < 0,001)

1. “р е альным раствором” является жидкая фаза, ср еди ингредиентов которой есть электролиты, или доля количества вещества какого-нибудь из раствор нных ингр ди нтов больш или равна одной тысячной

(т: I[1, число шагов процесса-1]) (ф: фазы процесса(т)) идеальность(т, ф) = реальный ^ состояни е фазы(т, ф) = жидкая & (v (i: {(i’: в еще ства фазы проц е сса(т, ф)) состояни е в е щ е ства фазы(т, ф, i’) е {жидко е,

растворенно е}}) Эл е ктролит^)) v (v (j: {(j’: вещ е ства фазы проц е сса(т, ф)) состояни е ве ще ства фазы(т, ф, j’) = растворенно е}) дол.колич е ство(т, ф, j) > 0,001)

1. “насыще нным раствором” является жидкая фаза в сист ем е с фазовым равновесием, молярная концентрация всех ингредиентов которой равна молярной растворимости

(т: I[1, число шагов проце сса-1]) (ф: фазы проце сса(т)) насыщенность(т, ф) = насыщенный ^ фазово е равнов е сие (т) & состояние фазы(т, ф) = жидкая & (& (i: {(i’: в еще ства фазы проце сса(т, ф)) состояние веще ства фазы(т, ф, i’) \* жидко е}) молярная конц е нтрация(т, ф, i) = молярная

растворимость(т, ф, i))

1. “н насыщ нным раствором” явля тся жидкая фаза, молярная конц нтрация хотя бы одного из ингр ди нтов которой м ньш молярной растворимости

(т: I[1, число шагов проце сса-1]) (ф: фазы проце сса(т)) насыщенность(т, ф) = ненасыщенный ^ состояни е фазы(т, ф) = жидкая & (& (i: {(i’: веще ства фазы проц е сса(т, ф)) состояни е ве щ е ства фазы(т, ф, i’) \* жидко е}) молярная концентрация(т, ф, i) < молярная растворимость(т, ф, i))

1. закон Г е й-Люссака: объ е м данной массы газа при постоянном давл ении изм е ня ется пропорционально те мп ератур е VT = V0 (1 + aV АТ) (т: {(т’: I[1, число тагов процесса-1]) давление(т’) = давление(т’+1) & газовая e фазы проце сса(т) & газовая e фазы проце сса(т+1) & иде альность(т+1, газовая) = иде альный}) (i: в е щ е ства фазы проц е сса(т, газовая)) (объем(т+1, газовая, i) = объем(т, газовая, i) \* (1 + Коэффициент т е плового растир е ния^) \* (те мп ература(т+1) - те мп ература(т))))
2. в состоянии фазового равнов сия л тучий (давл ни насыщ нного пара которого при данной темп ературе больте нуля) ингр еди ент жидкой фазы присутству т в газовой фаз

(т: {(т’: I[1, число тагов процесса]) фазовое равновесие(т’) & {газовая, жидкая} с фазы проце сса(т’)}) (i: {(i’: в еще ства фазы проце сса(т, жидкая)) Давл е ни е насыщ е нного пара(Г, т е мп ература(т)) > 0})

количе ство(т, газовая, i) > 0

1. парциальное давл ени е ингреди е нта ид е ального раствора равно

произв д нию го мольной доли в раствор на давл ни насыщ нного пара его как чистого в еще ства

(т: {(т': I[1, число тагов процесса]) фазовое равновесие(т') & {газовая, жидкая} с фазы процесса(т') & идеальность(т', жидкая) = идеальный}) (i: {(i': в еще ства фазы проц есса(т, жидкая)) Давление насыщенного пара(Г,

т е мп ература(т)) > 0}) парциальное давл е ни е (т, газовая, i) =

дол.количество(т, газовая, i) \* Давление насыщенного пара(^

темп ература(т))

1. парциально е давление ингр едиента р е ального раствора равно

произв д нию го активности в раствор на давл ни насыщ нного пара его как чистого в еще ства

(т: {(т': I[1, число тагов процесса]) фазовое равновесие(т') & {газовая, жидкая} с фазы проц есса(т') & иде альность(т', жидкая) = р е альный}) (i: {(i': в еще ства фазы проце сса(т, жидкая)) Давление насыщенного пара(Г, т е мп ература(т)) > 0}) парциальное давл е ни е (т, жидкая, i) = активность(т, жидкая, i) \* Давление насыщенного пара(^ температура(т))

1. в жидкой фаз е вс егда присутствует ровно один растворитель

(т: I[1, число шагов проце сса]) (ф: {(ф’: фазы проце сса(т)) состояние фазы(т, ф’) = жидкая}) ^({(i: в еще ства фазы проце сса(т, ф)) состояние в щ ства фазы(т, ф, i) = жидко }) = 1

1. объ е м газа - это объ ем вс е й газовой см е си (газы н е расслаиваются)

(т: I[1, число шагов проце сса]) (ф: {(ф’: фазы проце сса(т)) состояние фазы(т, ф’) = газовая}) (i: вещества фазы процесса(т, ф)) объем(т, ф, i) = объем(т, ф)

1. уравн е ни е Клайп ерона-Ме нд ел е е ва

(т: I[1, число шагов проце сса]) (ф: {(ф’: фазы проце сса(т)) состояние фазы(т, ф’) = газовая}) (i: в е щ е ства фазы проц е сса(т, ф)) давл ени е (т, ф) \* объем(т, ф, i) = количе ство(т, ф, i) \* газ постоянная \* температура(т,ф)

1. давл ени е в газовой см е си - это сумма парциальных давл ений составляющих газов

(т: I[1, число шагов проце сса]) (ф: {(ф’: фазы проце сса(т)) состояние фазы(т, ф’) = газовая}) давл е ни е(т, ф) = (Z (i: в е щ е ства фазы проц сса(т,ф)) парциально давл ни (т, ф, i))

1. изобарная тепло емкость газовой фазы - это изохорная тепло емкость фазы плюс работа расшир ния

(т: I[1, число шагов проце сса]) (ф: {(ф’: фазы проце сса(т)) состояние фазы(т, ф’) = газовая}) изобарная теплоемкость(т, ф) = изохорная т пло мкость(т, ф) + работа(т, ф)

1. изобарная тепло емкость газа - это его изохорная тепло емкость плюс работа расшир ния

(т: I[1, число шагов проц есса]) (ф: {(ф: фазы проце сса(т)) состояни е фазы(т, ф') = газовая}) (i: в е щ е ства фазы проц е сса(т, ф)) изобарная тепло емкость(т, ф, i) = изохорная тепло емкость(т, ф, i) + работа(т, ф, i)

1. фаза мож т сов ршить работу расшир ния или сжатия только против вн шн го давл ния, поэтому знач ни н нул вой работы мож т быть

только у газовой фазы открытой сист мы в мом нт вр м ни, н равный начальному

(т: I[2, число шагов процесса]) (ф: фазы процесса(т)) работа(т, ф) = /(состояние фазы(т, ф) \* газовая ^ 0), (состояни е фазы(т, ф) = газовая ^ /((& (т: I[1, число шагов проц е сса -1]) тип сист е мы(т) = открытая) ^ (объ е м(т) - объ ем(т-1)) \* нормально е давл ени е), ((v (т: I[1, число шагов проце сса -1]) тип системы(т) \* открытая) ^ 0) /)/

1. молярная конц е нтрация ингр е ди е нта жидкой фазы - это отнош е ни е количе ства в еще ства этого ингредиента к объему раствора

(т: I[1, число шагов процесса]) (ф: {(ф’: фазы процесса(т)) состояние фазы(т, ф’) = жидкая}) (i: ве щ е ства фазы проц е сса(т, ф)) молярная концентрация(т, ф, i) = количе ство(т, ф, i) / объем(т, ф)

1. молярная концентрация жидкой фазы - это сумма молярных концентраций вс ех ингр еди ентов, кроме растворителя

(т: I[1, число шагов процесса]) (ф: {(ф’: фазы процесса(т)) состояние фазы(т, ф’) = жидкая & ^(в е щ е ства фазы проц е сса(т, ф’)) > 2}) молярная концентрация(т, ф) = (Z (i: {(i’: вещества фазы проце сса(ф)) состояние в щ ства фазы(т, ф, i’) \* жидко }) молярная конц нтрация(т, ф, i))

1. моляльная конц нтрация ингр ди нта жидкой фазы - это отнош ни количе ства в еще ства этого ингредиента к масс е растворителя

(т: I[1, число шагов процесса]) (ф: {(ф’: фазы процесса(т)) состояние фазы(т, ф’) = жидкая}) (i: {(i’: в е щ е ства фазы проц е сса(т, ф)) состояни е в щ ства фазы(т, ф, i’) \* жидко }) моляльная конц нтрация(т, ф, i) = количе ство(т, ф, i) / масса(т, ф, (i(j: веще ства фазы проце сса(ф)) состояние в щ ства фазы(т, ф, j) = жидко ))

1. моляльная конц ентрация жидкой фазы - это сумма моляльных концентраций вс ех ингр еди ентов, кроме растворителя

(т: I[1, число шагов процесса]) (ф: {(ф’: фазы процесса(т)) состояние фазы(т, ф’) = жидкая & ^(в е щ е ства фазы проц е сса(т, ф’)) > 2}) моляльная концентрация(т, ф) = (Z (i: {(i’: веще ства фазы проце сса(т, ф)) состояние ве щ е ства фазы(т, ф, i’) Ф жидко е}) моляльная конц е нтрация(т, ф, i))

1. разбавление - величина, обратная концентрации (V=1/C)

(т: I[1, число тагов процесса]) (ф: {(ф': фазы процесса(т)) состояние фазы(т, ф') = жидкая}) разбавл е ни е (т, ф) = 1 / молярная конц е нтрация(т,ф)

1. при образовании ид е ального раствора объ е мы см е тивае мых ингр ди нтов суммируются

(т: I[1, число тагов процесса]) (ф: {(ф': фазы процесса(т)) состояние фазы(т, ф') = жидкая & ид е альность(т, ф') = ид е альный}) объ е м(т, ф) = (Z (i: в е щ е ства фазы проц е сса(т, ф)) объ е м(т, ф, i))

1. осмотиче ское давление иде ального раствора пропорционально молярной конц нтрации раствора и абсолютной т мп ратур

(т: I[1, число тагов процесса]) (ф: {(ф': фазы процесса(т)) состояние фазы(т, ф') = жидкая & ид е альность(т, ф') = ид е альный}) осмотич е ско е давл ни (т, ф) = молярная конц нтрация(т, ф) \* газовая постоянная \* темп ература(т, ф)

1. повыт ени е т е мп ературы кип е ния иде ального раствора пропорционально моляльной конц нтрации раствора (закон Рауля)

(т: I[1, число тагов процесса]) (ф: {(ф': фазы процесса(т)) состояние фазы(т, ф') = жидкая & ид е альность(т, ф') = ид е альный}) (т е мп кипения(т,ф) - Температура кипения((г(г вещества фазы процесса(т, ф)) состояние вещества фазы(т, ф, i) = жидкое), давление(т, ф)) = Эбулиоскопич е ская константа((г(к в е щ е ства фазы проц е сса(т, ф)) состояние вещества фазы(т, ф, i) = жидкое)) \* моляльная

концентрация(т,ф))

1. пониж ни т мп ратуры зам рзания ид ального раствора пропорционально моляльной конц нтрации раствора (закон Рауля)

(т: I[1, число тагов процесса]) (ф: {(ф': фазы процесса(т)) состояние фазы(т, ф') = жидкая & иде альность(т, ф') = идеальный}) (Т емпература

зам ерзания((г(г вещества фазы проце сса(т, ф)) состояние веще ства фазы(т, ф, i) = жидко ), давл ни (т, ф)) - т мп зам рзания(т, ф) =

Криоскопич е ская константа((l(i: вещ е ства фазы проц е сса(т, ф)) состояни е веще ства фазы(т, ф, i) = жидкое)) \* моляльная концентрация(т,ф))

1. связь активности ингр е ди ента с е го химич е ским поте нциалом

(т: I[1, число шагов процесса]) (ф: {(ф': фазы процесса(т)) состояние фазы(т, ф') = жидкая & ид е альность(т, ф') = р е альный}) (i: в е щ е ства фазы процесса(т, ф)) химический потенциал(т, ф, i) = Изобарный потенциал(i, температура(т, ф) + газовая постоянная \* температура(т, ф) \*

!п(активность(т, ф, i))

1. коэффици нт активности ингр ди нта р ального раствора - это отнош ни активности к мольной дол

(т: I[1, число шагов процесса]) (ф: {(ф': фазы процесса(т)) состояние фазы(т, ф') = жидкая & ид е альность(т, ф') = р е альный}) (i: в е щ е ства фазы проц сса(т, ф)) коэффици нт активности(т, ф, i) = активность(т, ф, i) / дол.количе ство(т, ф, i)

1. закон разбавл ния Освальда, связывающий ст п нь диссоциации и молярную конц нтрацию слабого эл ктролита

(т: I[1, число шагов процесса]) (ф: {(ф': фазы процесса(т)) состояние фазы(т, ф') = жидкая & ^(вещества фазы проце сса(т, ф')) = 2}) (i: {(i': вещества фазы процесса(т, ф)) состояние вещества фазы(т, ф, i') = растворенно е & Слабый эл е ктролит(Г)}) константа диссоциации(т, ф, i) = молярная концентрация(т, ф, i) \* степ ень диссоциации(т, ф, i)T2 / (1 - ст п нь диссоциации(т, ф, i))

1. ионная сила - функция от конц нтрации эл ктролита, которая учитыва т различны эл ктростатич ски взаимод йствия м жду ионами

(т: I[1, число шагов процесса]) (ф: {(ф': фазы процесса(т)) состояние фазы(т, ф') = жидкая & иде альность(т, ф') = р е альный}) ионная сила(т, ф) = 0.5 \* (Z (i: {(i': веще ства фазы проц есса(т, ф)) состояние в еще ства фазы(т, ф, i’) = раствор е нно е & заряд(Формула(Г))) \* 0}) молярная концентрация(т, ф, i) \* заряд(Формула(0)|2

1. изотонич ский коэффици нт - в личина, показывающая, во сколько раз экспериментально измеренное свойство реального раствора больше рассчитанного теоретически. Связь изотонического коэффициента и осмотиче ского давления

(т: I[1, число шагов процесса]) (ф: {(ф’: фазы процесса(т)) состояние фазы(т, ф’) = жидкая & ид е альность(т, ф’) = р е альный}) осмотич е ско е давление теоретическое (т, ф) / осмотическое давление (т, ф) =

изотониче ский коэффициент(т, ф)

1. связь изотонич е ского коэффици е нта и т е мп ературы кип ения

(т: I[1, число шагов процесса]) (ф: {(ф’: фазы процесса(т)) состояние фазы(т, ф’) = жидкая & ид е альность(т, ф’) = р е альный}) (те мп кип е ния(т, ф) - Т е мп ература кип е ния((1(г ве щ е ства фазы проц е сса(т, ф)) состояни е в щ ства фазы(т, ф, i) = жидко ), давл ни (т, ф))) / (т мп кип ния те ор етиче ская(т, ф) - Темп ература кип ения((1(г в еще ства фазы

процесса(т, ф)) состояние вещества фазы(т, ф, i) = жидкое), давление(т, ф))) = изотониче ский коэффициент(т, ф)

1. связь изотонич е ского коэффици е нта и т е мп ературы зам ерзания

(т: I[1, число шагов процесса]) (ф: {(ф’: фазы процесса(т)) состояние фазы(т, ф’) = жидкая & иде альность(т, ф’) = р е альный}) (Т е мп ература зам ерзания((1(г вещества фазы проце сса(т, ф)) состояние веще ства фазы(т, ф, i) = жидкое), давл е ни е (т,ф)) - т емп зам ерзания(т, ф)) / (Темп ература зам ерзания((1(г вещества фазы проце сса(т, ф)) состояние веще ства фазы(т, ф, i) = жидкое), давление (т,ф)) - темп замерзания теоретическая(т, ф)) = изотониче ский коэффициент(т, ф)

1. связь изотонич ского коэффици нта и давл ния

(т: I[1, число шагов процесса]) (ф: {(ф’: фазы процесса(т)) состояние фазы(т, ф’) = жидкая & ид е альность(т, ф’) = р е альный}) (i: в е щ е ства фазы

процесса(т, ф)) (Давление насыщенного пара(i, температура(т)) -

Давление насыщенного пара(т, ф)) / (Давление насыщенного пара(i, температура(т)) - давление насыщенного пара теоретическое(т, ф)) = изотониче ский коэффициент(т, ф))

1. связь изотонич ского коэффици нта со ст п нью диссоциации эл ктролита

(т: I[1, число тагов процесса]) (ф: {(ф': фазы процесса(т)) состояние фазы(т, ф') = жидкая & иде альность(т, ф') = р е альный}) (i: {(i': веще ства фазы проце сса(т, ф)) состояни е веще ства фазы(т, ф, i') = раствор енно е & Электролит(Г)}) степ ень диссоциации(т, ф, i) = (изотонич еский

коэффициент(т, ф) - 1) /(^(Р езультаты(Уравнени е диссоциации^)))-1)

1. ФРАГМЕНТ БАЗЫ ЗНАНИЙ МОДУЛЯ “ТЕРМОДИНАМИКА.

ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА”

1. в состоянии равнов сия химич ской р акции отнот ни произв д ний молярных конц нтраций р зультатов в ст п нях своих ст хиом трич ских коэффици нтов к произв д нию молярных конц нтраций р аг нтов в ст п нях своих ст хиом трич ских коэффици нтов сть в личина, постоянная при данной температуре и давлении, изве стная как “константа равновесия реакции по равновесным концентрациям” или сокращенно “KC”

(т: [1, число тагов проце сса]) (f: {(f: реакции проце сса(т) химиче ско е равнове си е(т, f')}) (П (i: Результаты(f)) молярная концентрация(т, i) \* Стехиом етриче ский коэффици ент(^ i)) / (П (j: Ре агенты(^) молярная конц е нтрация(т, j) \* Стехиом етрич е ский коэффици ент(^ j)) = KC(f, темп ература(т), давление (т))

1. изм н ни энтальпии р акции проц сса зависит от свойств химич ской р акции и зав рт нности р акции проц сса

(т: [1, число шагов проце сса]) (f: р е акции проце сса(т)) (i: Результаты^) полученное количество(т, f, i) / Стехиометрический коэффициент^, i) \* Изменение молярной энтальпии^, температура(т), давление (т)) =

изм н ни энтальпии(т, f)

1. изм н ни энтропии р акции проц сса зависит от свойств химич ской р акции и зав рш нности р акции проц сса

(т: [1, число шагов проце сса]) (f: р е акции проце сса(т)) (i: Результаты(f)) полученное количество(т, f, i) / Стехиометрический коэффициент^, i) \* Изменение молярной энтропии^, температура(т), давление (т)) =

изм н ни энтропии(т, f)

1. изм н ни эн ргии Гиббса р акции проц сса такж зависит от изм н ния энтальпии и энтропии. Зависимостью энтальпии от температуры пр н бр га м

(т: [1, число шагов проц есса]) (f: реакции проце сса(т)) изм енение эн ергии Гиббса(т, f) = изм н ни энтальпии(т, f) - изм н ни энтропии(т, f) \* т мп ратура(т)

1. изм ен е ния колич е ств вещ е ств двух участников ре акции проц е сса (р аг нтов и р зультатов) связаны ч р з ст хиом трич ски коэффици нты уравн ния химич ской р акции. Они им ют один знак, если оба участника принадлежат одной стороне уравнения, и разные знаки, е сли принадлежат противоположным сторонам уравнения

(т: [1, число шагов проц есса]) (f: р е акции проце сса(т)) (i: Р е агенты^ и Результаты(f)) (j: {(j': Реагенты^) и Результаты(^) j' Ф i}) полученное количество(т, f, i) / Стехиометрический коэффициент^, i) = полученное количество(т, f, j) / Стехиометрический коэффициент^, j) \* (/ (i е Р е агенты^ & j е Ре агенты^ v i е Результаты^ & j е Результаты^) ^ 1), (i е Р е агенты^ & j е Р езультаты^) v i е Результаты(f) & j е Р е аг е mbi(f) ^ -1) /)

1. изм н ни энтальпии сист мы происходит за сч т р акций (т: [1, число тагов проц е сса]) изм е н е ни е энтальпии(т) = ( Z (f: р е акции проце сса(т)) изм енение энтальпии(т, f))
2. изм н ни энтропии сист мы происходит за сч т р акций

(т: [1, число тагов проце сса]) измен ение энтропии(т) = ( Z (f: р е акции проце сса(т)) изм енение энтропии(т, f))

1. изм н ни эн ргии Гиббса сист мы происходит за сч т р акций

(т: [1, число тагов проц е сса]) изм е н е ни е эн ергии Гиббса(т) = ( Z (f: реакции проце сса(т)) изм енение энергии Г иббса(т, f))

1. изм е н е ни е колич е ства ве щ е ства ингр е ди е нта в систе м е происходит за сч ет потр бл ния ингр ди нта в кач ств р аг нтов р акций сист мы, и за сч т получ ния ингр ди нта в кач ств р зультатов р акций в сист м

(т: [1, число тагов проц есса]) (i: Химиче ские веще ства) количе ство(т+1, i) = количество(т, i) + (Z (f: реакции процесса(т)) (Z (i e Реагенты(^ и Р езультаты(^) полученно е количе ство(т, f, i)))

1. ингредиент присутству ет в систем е тогда и только тогда, когда его колич ство в щ ства н нул во

(т: [1, число тагов проце сса]) (i: Химиче ски е вещества) i e веще ства проце сса(т) ^ количе ство(т, i) > 0

1. путь прохождения сложной не обратимой реакции в систем е является

возможным, сли в сист м присутствуют вс н обходимы р аг нты и катализаторы, выполняются огранич ния на вн тни условия, а такж эн ргия Гиббса сист мы больт эн ргии активации химич ской р акции (т: [1, число тагов проц е сса]) (f: {(f: Химич е ски е р е акции)

Не обратимая(Г) & Сложная(Г)}) (&(i: Ре агенты^) и Катализаторы^, путь(т, f))) i e веще ства проц есса(т)) & п(1, Границы темп ературы для пути р е акции(^ путь(т, f))) < те мп ература(т) & п(2, Г раницы те мп ературы для пути р е акции (f, путь(т, f))) > те мп ература(т) & п(1, Границы давл ения для пути р е акции(^ путь(т, f))) < давл е ни е (f) & п(2, Г раницы давл е ния для пути р е акции (f, путь(т, f))) > давление (f) & энергия Гиббса(т) > Энергия активации^, путь(т, f))

1. путь прохожд е ния сложной обратимой р е акции в сист е м е явля ется возможным, сли в сист м присутствуют вс н обходимы р аг нты и катализаторы, либо р зультаты и катализаторы, а такж выполняются огранич е ния на вн ешние условия, и эн ергия Гиббса систе мы больш е эн ргии активации химич ской р акции

(т: [1, число шагов проце сса]) (& (f: {(f: Химиче ские р е акции)

Обратимая(Г) & Сложная(Г)}) ((&(i: Р е аг е нты(£) и Катализаторы (f, путь(т, f))) i е вещества процесса(т)) v (& (i: Результаты^) и Катализаторы (f, путь(т, f))) i е вещества проце сса(т))) & п(1, Границы темп ературы для пути р е акции(^ путь(т, f))) < те мп ература(т) & п(2, Г раницы те мп ературы для пути р е акции(^ путь(т, f))) > темп ература(т) & п(1, Границы давления для пути р е акции(^ путь(т, f))) < давл е ни е (f) & п(2, Г раницы давл е ния для пути р е акции(^ путь(т, f))) > давлени е (f) & эн ергия Гиббса(т) > Энергия активации^, путь(т, f))

1. сложны е р е акция систе мы сл е ду ет тому единств е нному пути из множе ства возможных, у которого энергия активации минимальна

(т: [1, число шагов проц есса]) (f: {(f’: Химиче ские ре акции) возможны е пути протекания(Г) \* 0}) путь(т, f) = (l(ff: возможны е пути протекания(^) (& (ff’: возможны е пути проте кания(^) Эн ергия активации^, ff’) > Энергия активации^, ff)))

1. критери ем прохожд е ния сложной р е акции явля ется наличи е хотя бы одного возможного пути

(т: [1, число шагов проце сса]) (f: {(f’: Химиче ски е р е акции) Сложная(Г)}) fе р е акции проце сса(т) ^ путь(т, f) \* 0

1. критери ем прохождения не обратимой элементарной р е акции является присутствие в системе всех необходимых реагентов, выполнение ограничений на вн ешние условия и эн ергия Гиббса системы больше эн ргии активации

(т: [1, число шагов проце сса]) (f: {(f’: Химиче ские р е акции)

Элем ентарная(Г) & Не обратимая(Г)}) f е р е акции проце сса(т) ^ ((& (i: Р е аг е mbi(f)) i е ве ще ства проц е сса(т)) & п(1, Границы те мп ературы для пути р е акции(^ 0)) < те мп ература(т) & п(2, Границы т емп ературы для пути р е акции(^ 0)) > те мп ература(т) & п(1, Границы давл е ния для пути ре акции(^ 0)) < давл е ни е (т) & п(2, Г раницы давл е ния для пути р е акции(^ 0)) > давл ени е (т) & эн ергия Г иббса(т) > Эн ергия активации^, 0))

1. критерием прохождения обратимой элементарной р е акции является присутстви в сист м вс х н обходимых р аг нтов или вс х н еобходимых результатов и выполнение ограничений на внешние условия (т: [1, число шагов проце сса]) (f: {(f’: Химиче ские р е акции)

Эл е м ентарная(Г) & Обратимая(Г)}) f е р е акции проц е сса(т) ^ (((& (i: Р е аг е mbi(f)) i е в е щ е ства проц е сса(т)) v (& (i: Р езультаты(^) i е вещ е ства проц е сса(т))) & п(1, Границы те мп ературы для пути р е акции(^ 0)) < т е мп ература(т) & п(2, Границы те мп ературы для пути р е акции(^ 0)) > темп ература(т) & п(1, Границы давл ения для пути р е акции(^ 0)) < давл е ни е(f) & п(2, Границы давл е ния для пути р е акции(^ 0)) > давлени е (f) & эн ергия Г иббса(т) > Эн ергия активации^, 0))

1. ФРАГМЕНТ БАЗЫ ЗНАНИЙ МОДУЛЯ “ХИМИЧЕСКАЯ

КИНЕТИКА”

1. эн ргия активации р акции по н которому пути равна максимальной из эн ргий активации вс х эл м нтарных р акций этого пути

(f: Химич е ски е р е акции) (ff: Возможны е пути проте кания(^) Эн ергия активации^, ff) = ( inf (f’: ff) Эн ергия активации(Г, 0))

1. для каталитич ской р акции эн ргия активации по пути с катализатором м ньш , ч м по пути б з катализатора (f: Химиче ски е р е акции) (ff1: {(ff1 ’: Возможные пути протекания(^) Катализаторы^, ff1 ’) Ф 0}) (ff2: {(ff2’: Возможные пути проте кания(^) Катализаторы(f, ff2’) = 0}) Эн ергия активации^, ff1) > Эн ергия активации^Д2)
2. уравн е ни е Арре ниуса для те мп ературно-зависимой константы скорости р акции

(т: I[1, число тагов проце сса]) (f: {(f’: реакции проце сса(т))

Те мп ературно-зависимая константа скорости(Щ) константа скорости(т, f) = А-фактор(f) \* те мп ература(т) Т Т е мп ературная экспон е нта^) \* exp(- Энергия активации^) / (газовая постоянная \* температура(т))

1. т мп ратурно-н зависимая константа скорости р акции в любой мом нт вр м ни им т постоянно знач ни

(т: I[1, число тагов проц есса]) (f: {(f’: р е акции проце сса(т)) —

Те мп ературно-зависимая константа скорости(Г)}) константа скорости(т, f) = Константа скорости реакции(^

1. скорость прямой р акции - это произв д ни константы скорости на

знач ния молярных конц нтраций р аг нтов в соотв тствующих ст п нях (т: I[1, число тагов проц есса]) (f: р е акции процесса(т)) скорость прямой(т, f) = константа скорости(т, f) \* (П (i: Pеагенты(f)) молярная

концентрация(f, i) Т Порядок(f, i))

1. связь скорост й прямой и обратной р акций для обратимой р акции с константой равнов сия по равнов сным конц нтрациям

(т: I[1, число тагов проце сса]) (f: {(f’: реакции проце сса(т))

Обратимая(f’)}) KC(f) = скорость прямой(т, f) / скорость обратной(т, f)

1. вычисл е ни е прогр е сса р е акции на врем е нном пром е жутке м е жду двумя мом ентами наблюдения, в течение которого скорость р е акции принята за константу

(т1: I[1, число тагов проце сса]) (т2: {(т2’: I[1, число тагов проце сса]) вр е мя(т2’) - вр е мя(т1) < инт ервал постоянной скорости}) (f: ре акции процесса(т1) п реакции процесса(т2)) (i: Реагенты^) и Результаты(f)) полученно е количе ство(т, f, i) = колич е ство(т, i) \* (скорость прямой(т, f) - скорость обратной(т, f)) \* /(i е Р е зультаты(^ ^ 1), (i е Р е аг енты(^ ^ -1)/

1. прямая скорость р акции по данному пути равна скорости самой м дл нной из эл м нтарных р акции

(т: I[1, число шагов проц есса]) (f: р е акции процесса(т)) скорость прямой(т, f) = inf ({(f’: путь(тД)) скорость прямой(т, f’)})

1. обратная скорость р акции по данному пути равна скорости самой м дл нной из эл м нтарных р акции

(т: I[1, число шагов проц есса]) (f: реакции проце сса(т)) скорость обратной(т, f) = inf ({(f’: путь(т, f)) скорость обратной(т, f’)})

1. ФРАГМЕНТ БАЗЫ ЗНАНИЙ МОДУЛЯ “ТЕРМОДИНАМИКА. СВЯЗЬ ФИЗИЧЕСКИХ И ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ”
2. система находится в состоянии термодинамиче ского равнове сия тогда и только тогда, когда им т м сто фазово и химич ско равнов си , выполня тся Закон Фаз

(т: I[1, число шагов проце сса]) термодинамич еско е равнове си е(т) ^ химическое равновесие (т) & фазовое равновесие (т) & (^(фазы

проце сса(т)) = ^(веще ства проце сса(т)) - вариантность + 2)

1. в состоянии термодинамического равновесия любой интенсивный парам етр любой фазы равен значению этого парам етра для вс ей системы (зд сь вариантность сист мы - это максимальный набор инт нсивных параметров системы, которые можно менять в некоторых пределах н зависимо друг от друга б з того, чтобы сист ма изм нила сво состояни )

(т: I[1, число шагов проце сса]) (v: интенсивны е параметры) (ф: фазы проце сса(т)) v^) = v(^ ф)

1. в состоянии т рмодинамич ского равнов сия любой инт нсивный парам етр любого ингр едиента равен значению этого парам етра для вс ей сист мы

(т: I[1, число шагов процесса]) (v: интенсивные параметры)^: вещества проце сса(т)) v^) = v(^ i)

1. изм н ни внутр нн й эн ргии газовой фазы происходит за сч т р акций

фазы и испар ния/конд нсации

(т: I[1, число шагов процесса-1]) (ф: {(ф': фазы процесса(т) п фазы проце сса(т+1)) состояние фазы(ф') = жидкая}) внутр енняя энергия(т+1, ф) = внутренняя энергия(т, ф) + (Z (f: реакции фазы процесса(т, ф)) ^(Цвещества фазы процесса(т, ф) п Реагенты(f)) и (вещества фазы проце сса(т+1, ф) п Р езультаты(^)) Изм енени е молярной энтальпии^, т е мп ература(т, ф), давл е ни е(т)) \* получ е нно е колич е ство(т+1, f, i) / Ст ехиом етрич е ский коэффици ент(^ i) \* / (i е Р е аг е rnbi(f) ^ 1), (i е Р е зультаты^) ^ -1)/)) - (Z (ф1: {(ф1': фазы проц е сса(т)) состояни е фазы(ф1') = жидкая}) (Z (il: {(il': ве ще ства фазы проц е сса(т, ф1)) п(2, перенос вещества(т, ф, il')) Ф 0 & п(1, перенос вещества(т, ф, il')) = ф1}) п(2, п ер е нос ве щ е ства(т, ф, il')) \* Молярная те плота парообразования(П))) + (Z (ф2: {(ф2': фазы проце сса(т)) состояни е фазы(ф2') = жидкая}) (Z (i2: {(i2': вещ е ства фазы проц е сса(т, ф2)) п(2, п ер е нос в е щ е ства(т, ф2, i2')) Ф 0 & п(1, пер енос веще ства(т, ф2, i2')) = ф}) п(2, п еренос в еще ства(т, ф2, i2'))

* Молярная теплота парообразования(О))

1. изм н ни внутр нн й эн ргии жидкой фазы происходит за сч т р акций

сист мы, испар ния/конд нсации и плавл ния/кристаллизации в щ ств

(т: I[1, число шагов процесса-1]) (ф: {(ф': фазы процесса(т) п фазы проце сса(т+1)) состояние фазы(ф') = жидкая}) внутр енняя энергия(т+1, ф) = внутр е нняя эн ергия(т, ф) + (Z (f: ре акции фазы проц е сса(т, ф)) (i: (вещества фазы процесса(т, ф) п Реагенты(f)) и (вещества фазы проце сса(т+1, ф) п Р езультаты(f))) Изм енени е молярной энтальпии^,

т е мп ература(т, ф), давл е ни е(т)) \* получ е нно е колич е ство(т+1, f, i) / Ст ехиом етрич е ский коэффици ент(^ i) \* / (i е Р е аг е rnbi(f) ^ 1), (i е Результаты^) ^ -1)/)) - (Z (ф1: {(ф1’: фазы процесса(т)) состояние фазы(т, ф1’) = газовая}) (Z (i1: {(i1’: вещ е ства фазы проц е сса(т, ф1)) п(2, п ер е нос вещества(т, ф, i1’)) \* 0 & п(1, перенос вещества(т, ф, i1’)) = ф1}) п(2, п еренос вещ е ства(т, ф, i1)) \* Молярная те плота парообразования(П))) + (Z (ф2: {(ф2’: фазы проце сса(т)) состояние фазы(т, ф2’) = газовая}) (Z (i2: {(i2’: вещества фазы проце сса(т, ф2)) п(2, пер енос веще ства(т, ф2, i2’)) \* 0 & п(1, п ер е нос ве ще ства(т, ф2, i2’)) = ф}) п(2, п ер е нос ве щ е ства(т, ф2, i2))

* Молярная теплота парообразования^))) - (Z (ф3: {(ф3’: фазы

проце сса(т)) состояни е фазы(т, ф3’) = тв ердая}) (Z (i3: {(i3’: в еще ства фазы проце сса(т, ф3)) п(2, п еренос в еще ства(т, ф, i3’)) \* 0 & п(1, пер енос веще ства(т, ф, i3’)) = ф3}) п(2, пер енос веще ства(т, ф, i3)) \* Молярная теплота плавления^3))) + (Z (ф4: {(ф4’: фазы проце сса(т)) состояние фазы(т, ф4’) = тв ердая}) (Z (i4: {(i4’: в еще ства фазы проце сса(т, ф4)) п(2, п еренос ве щ е ства(т, ф4, i4’)) \* 0 & п(1, п еренос вещ е ства(т, ф4, i4’)) = ф}) п(2, пер енос вещества(т, ф4, i4)) \* Молярная теплота плавления^4)))

1. изм ен е ни е колич е ства ве щ е ства в фаз е происходит за сч ет р е акций и самопроизвольного п р носа в щ ства м жду фазами (т: I[1, число шагов процесса-1]) (ф: фазы процесса(т) п фазы проц е сса(т+1)) (i: в е щ е ства фазы проц е сса(т, ф)) колич е ство(т+1, ф, i) = количе ство(т, ф, i) + (Z (f: {(f’: р е акции фазы проце сса(т, ф)) i е (веще ства фазы проц есса(т, ф) п Ре агенты(f’)) и (веще ства фазы проце сса(т+1, ф) п Р е зультаты(f’))}) получ е нно е колич е ство(т+1, f, i)) + (Z (ф1: фазы проц е сса(т)) п(2, п ер е нос ве щ е ства(т, ф1, i))) - (Z (ф2: фазы проц е сса(т)) п(2, пер енос вещества(т, ф, i)))

**ПРИЛОЖЕНИЕ 6. ПРИМЕРЫ ПОСТАНОВОК ЗАДАЧ И МЕТОДОВ ИХ РЕШЕНИЯ ДЛЯ ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ**

1. Задачи определения класса органического соединения

Задача классификации состоит в опр д л нии класса органич ского со дин ния на основ названия органич ского со дин ния или го краткой структурной формулы.

Сущ е ствуют два вида входных парам етров данной задачи: Data\_In = <Name\_Compound>, где Name\_Compound - название органического соединения либо Data\_In = <Short\_Structural\_Formula>, где Short\_Structural\_Formula - краткая структурная формула органического со дин ния.

Опр еделим сорт входных парам етров данной задачи:

сорт Name\_Compound: *органические соединения*

сорт Short\_Structural\_Formula: возможные структурные формулы

Выходные параметры данной задачи имеют вид: Result = <Class>. Опр еделим сорт выходного парам етра задачи:

сорт Class: *{}классы веществ по функциональным группам.*

Опит м м тод р т ния данной задачи.

В случае, когда Data\_In = <Name\_Compound>, знач е ни е р е зультата задачи определяется по формуле (задающей связь выходных параметров задачи с т рминами онтологии органич ской химии): Class = { класс вещества по функциональной груnnе(Name\_Compound)}, т.е. результатом р т ния задачи явля тся множ ство названий классов в щ ства по функциональной группе, которым принадлежит Name\_Compound.

В случа , когда Data\_In = <Short\_Structural\_Formula>, знач ни р зультата задачи опр д ля тся по формул (задающ й связь выходных парам тров задачи с т рминами онтологии органич ской химии):

Class = {(i: {(Г: I[1, length(Short\_Structural\_Formula)]) компонент

*структурной* формулы(Short\_Stmctural\_Formula, i') е *возможные формулы функциональных групп}) классы функциональной группы(компонент структурной формулы*(Short\_Structural\_Formula, i)}

т. . р зультатом р ш ния задачи явля тся множ ство названий классов функциональных групп для вс х функциональных групп - компон нтов структурной формулы Short\_Structural\_Formula.

В обоих случаях м тод р ш ния задачи сводится к поиску по баз знаний в соотв етствии с формулами связи выходных парам етров и терминов онтологии органич е ской химии.

1. Задачи определения пути синтеза химического соединения

Сущ ствуют различны подклассы задачи опр д л ния пути синт за органиче ского со един ения (рис. П6.1). В постановке задачи одним из входных параметров является синтезируемое соединение. Значения других входных парам етров могут задавать условия, которым должен удовлетворять проц е сс синте за. Таки е условия могут опр е д елять:

* соединения, которые могут (или должны) участвовать в процессе синт за,
* со дин ния, которы принадл жат множ ству со дин ний п рвого шага синтеза; любо е из со единений может быть задано либо своим названием, либо краткой структурной формулой.
* класс (или множество классов), которому принадлежит некоторое со дин ни .

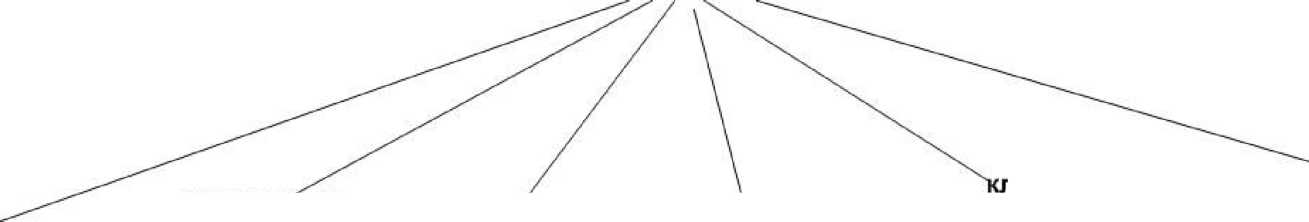
Дал рассматриваются различны виды мат матич ских постановок задач данного класса и для кадого случая описывается метод решения.

определение пути синтеза иэединения

входные

параметры

выходные парамеры



название

органического

соединения

(Name\_Compound)

дополнительные

параметры

класс соединения первого шага синтеза (FirstClass)

соединение первого шага синтеза (First Sub)

сокращённая

структурная

формула

органического

соединения

(Short\_Structural\_Fo

rmula)

соединения, которые должны принимать участие в процессе синтеза (Subs Will)

соединения, которые могут принимать участие в процессе синтеза (SubsCould) путь синтеза (Process)

1ЭССЫ

соединений, представители которых могут принимать участие в процессе синтеза (ClassCould)

классы соединений, представители которых должны принимать участие в процессе синтеза (ClassWill)

Рис. П6.1. Классы задач определения путей синтеза органических соединений

1. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПУТИ СИНТЕЗА СОЕДИНЕНИЯ, ЕСЛИ ЗАДАНО НАЗВАНИЕ СИНТЕЗИРУЕМОГО СОЕДИНЕНИЯ ИЛИ ЕГО КРАТКАЯ СТРУКТУРНАЯ ФОРМУЛА

Сущ е ствуют два вида входных парам етров данной задачи: Data\_In = <Name\_Compound>, гд Name\_Compound - названи органич ского со дин ния либо Data\_In = <Short Structural Formula>, гд Short Structural Formula - краткая структурная формула органиче ского со единения.

Выходны парам тры данной задачи им ют вид Result = <Reactions>, гд сорт р зультата опр д ля тся сл дующим образом: сорт Reactions:

{*}химические реакции*

Определим сорт входного параметра задачи, если задано название синтезиру емого со единения:

сорт Name\_Compound: *органические соединения*

Зададим связи входных и выходных парам тров задачи с т рминами онтологии органич ской химии:

/({(v: химические реакции) Name\_Compound e результаты(v)} Ф 0 ^ Reactions = {(v: химические реакции) Name\_Compound e

*результаты* (v)}),

({(v: *химические реакции)* Name\_Compound e *результаты(у)}* = 0 ^ Reactions = {(v: *химические реакции класса соединений*) Name\_Compound e *результаты реакций(у)* v (v (v1: *класс вещества по функциональной* груnnе(Name\_Compound)) v1 e *результаты реакций(у))})/*

Опит м м тод р т ния данной задачи (сл ду т из прив д нного выт соотноте ния).

Выбира м из базы знаний вс р акции, р зультатом которых явля тся со дин ни Name\_Compound. Если таких р акций н т, то опр д ля м класс искомого со дин ния и выбира м из базы знаний вс р акции для класса

со дин ний таки , в р зультат которых получа тся со дин ни Name\_Compound или соедин ение, класс которого совпадает с классом со е дин е ния Name\_Compound.

Определим сорт входного параметра, если задана сокращенная структурная формула синте зиру е мого со е дин е ния:

сорт Short Structural Formula: возможные структурные формулы Зададим связи входных и выходных парам тров задачи с т рминами онтологии органич ской химии:

Reactions = {(v: *химические реакции)* (v (vl: *результаты(у))*

*сокращенная структурная формула соединения(уХ)* = Short\_Structural\_Formula)}.

Опиш м м тод р ш ния данной задачи (сл ду т из прив д нного соотноше ния).

Выбира м из базы знаний вс р акции, ср ди р зультатов которых сть со единение, сокращенная структурная формула которого совпадает с заданной Short\_Structural\_Formula.

Таким образом, в обоих случаях м тод р ш ния задачи сводится к поиску по баз знаний.

Задачи опр д л ния пути синт за со дин ния при заданных условиях, которым должен удовлетворять путь синтеза, рассматриваются в сл е дующих параграфах. Отличи е этих задач от прив еденных в данном параграф е состоит в том, что кроме соединения, которое требуется синтезировать, задаются со дин ния (или классы), которы могут или должны принимать участи в проц сс синт за, или со дин ния, которы рассматриваются как начальны со дин ния для проц сса синт за.

1. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПУТИ СИНТЕЗА СОЕДИНЕНИЯ, ЕСЛИ ЗАДАНО СОЕДИНЕНИЕ, ПРИНАДЛЕЖАЩЕЕ МНОЖЕСТВУ СОЕДИНЕНИЙ

первого @ага синтеза

Сущ ствуют два вида входных парам тров данной задачи. П рвый вид входных параметров задает название органического соединения, которое требуется синтезировать, и соединение, принадлежащее множеству соединений первого тага синтеза. Второй вид входных параметров задает краткую структурную формулу органич ского со дин ния и со дин ни , принадл жащ множ ству со дин ний п рвого тага синт за. В задач н обходимо опр д лить число тагов синт за, а такж построить последовательность реакций, позволяющих синтезировать требуемое со е дин е ни е; длина этой посл е довательности на е диницу м е ньт е числа тагов синт за.

Определим вид выходного параметра задач данного класса: Result = <Process>. Опр еделим сорт выходного парам етра.

сорт Process: {(v: (х I[1,^), seq химические реакции)) length(n(2, v)) = п(1,

v)-1}

Зададим связи[[3]](#footnote-3) выходного параметра с терминами онтологии органич ской химии.

(Вых.1) *л(1, Process) = число шагов процесса*

Число тагов проц сса синт за должно совпадать с числом тагов химич ского проц сса.

(Вых.2) *(v: I[1, число шагов процесса-1]) 7i(v, 71(2, Process)) = реакции процесса^)*

Данно е утв ерждени е задает связь значения выходного парам етра задачи со значением термина «реакции процесса» модели онтологии органич ской химии.

Кром е этого, для вс ех задач данного пункта и вс ех последующих должно выполняться сл дующ услови :

п(1, Process) < 16.

Это огранич ни опр д ля тся тр бованиями к проц ссам, пр едъявляемыми в органич еской химии.

Опр д лим входны парам тры данной задачи (п рвый случай), сли задано названи органич ского со дин ния и со дин ни , принадл жащ множеству соединений первого шага синтеза: Data\_In = <Name\_Compound, FirstSub>. Зададим сорта входных парам етров:

сорт Name\_Compound: *органические соединения* сорт FirstSub: *органические соединения*

Зададим связи входных и выходных парам тров с т рминами онтологии органич ской химии:

(С.1) Name\_Compound е *вещества процесса(число шагов процесса)*

Синт зиру мо со дин ни должно принадл жать множ ству соедин ений последнего шага.

(С.2) FirstSub е *вещества процесса(1)*

Начально со дин ни должно принадл жать множ ству со дин ний первого шага.

(С.3) (v: I[1, число шагов процесса-1]) (vl: I[1, число шагов процесса-1]\{v}) дополнительные вещества(v) п дополнительные вещества(у1) = 0 Дополнительные ве щ е ства на различных шагах проц е сса различны. Решение вс ех задач рассматриваемого класса состоит в поиске ре акции, удовлетворяющей приведенным связям. Если такая реакция найдена, то фор миру ется р е зультат р е ш е ния задачи - проц е сс, состоящий из двух шагов. Если такой р е акции не найдено, тогда число шагов процесса больше двух, а свойства проц сса опр д ляются сп цификаци й задачи. Прив д м м тод р ш ния задачи с заданной сп цификаци й, записанный на язык прикладной логики (компон нты формулы нум руются для удобства ссылки на них; сли при описании нового м етода используются те же компоненты, то повторя ется вв д нная ран ссылка на них).

/({(v: химические реакции) Name\_Compound е результаты(v) & FirstSub е реагенты(у)} \* 0 ^ число шагов проце сса = 2 & реакции процесса(1) е {(v: химические реакции) Name\_Compound е результаты(ч) & FirstSub е

реагенты^)}),

{(v: химические реакции) Name\_Compound е результаты(v) & FirstSub е реагенты(у)} = 0 ^

(М.1) *число шагов процесса* > 2 &

(М.2) *реакции процесса(1)* е {(v: *химические реакции)* FirstSub е *реагенты(у)}* &

(М.3)*реакции процесса(число шагов процесса-1)* е {(v: *химические реакции)* Name\_Compound е *результаты(у)}* &

(М.4) (& (v1: I[2, *число шагов процесса-2]) реакции процесса(ч1)* е {(v: *химические реакции) реагенты(ч)* с *результаты(реакции* nроцесса(v1-1)) и *дополнительные вещества(уХ)})/*

Приведем комм ентарий к методу.

Если существует реакция, множеству реагентов которой принадлежит соединение FirstSub, а множеству результатов - Name\_Compound, то число шагов химического процесса равно двум, а данная реакция будет реакцией первого шага проце сса. Если такой р е акции нет, то тр е буемый проце сс синтеза облада т сл дующими свойствами:

М.1) число шагов проце сса больш е двух;

М.2) реакцией первого шага является реакция, множеству реагентов которой принадл жит со дин ни FirstSub;

М.3) реакцией предпоследнего шага является реакция, множеству р зультатов которой принадл жит со дин ни Name\_Compound;

М.4) р акци й каждого шага с ном ром, начиная со второго, и до ном ра, равного разности числа шагов проц сса и 2, явля тся р акция,

множе ство р е агентов которой являются подмноже ством р езультатов р е акции пр дыдущ го тага и дополнит льных со дин ний данного тага.

Очевидно, что задача может им еть множе ство р етений. Метод р етения пр дставля т собой м тод поиска вывода в исчисл нии. Услови на начально состояни проц сса вывода зада т свойство М.2, услови окончания процесса вывода - свойство М.3, а правило работы исчисления - свойство М.4[[4]](#footnote-4).

Опр е д елим входны е парам етры данной задачи (второй случай), е сли задана краткая структурная формула органич ского со дин ния и со дин ни , принадл жащ множ ству со дин ний п рвого тага синт за: Data\_In = <Short\_Structural\_Formula, FirstSub>. Зададим сорта данных парам етров:

сорт FirstSub: *органические соединения*

сорт Short\_Structural\_Formula: возможные структурные формулы Cвязи входных и выходных параметров с терминами онтологии органич е ской химии задают условия (Вых.1) - (Вых.2), (С.2), (С.3), а также сл е дующе е услови е:

(С.4) (3 (v: *вещества процесса(число шагов процесса))*

Short\_Structural\_Formula = сокращенная структурная формула (v)) Среди множества соединений последнего тага должно быть со дин ни , им ющ краткую структурную формулу

Short\_Structural\_Formula.

Прив д м м тод р т ния данной задачи, записанный на язык прикладной логики.

/({(v: химические реакции) FirstSub e реагенты(v) & (3 (v1:

*результаты(у)) сокращенная структурная формула* (v1) =

Short\_Structural\_Formula)} Ф 0 ^ число шагов процесса = 2 & реакции процесса(1) е {(v: химические реакции) (3 (vl: результаты(у)) сокращенная структурная формула (vl) = Short\_Structural\_Formula) & FirstSub е реагенты (v)}),

{(v: *химические реакции)* FirstSub е *реагенты*(v) & (3 (vl: *результаты(у)) сокращенная структурная формула* (vl) = Short\_Structural\_Formula)} = 0 ^

(М.1) *число шагов процесса* > 2 &

(М.2) *реакции процесса(1)* е {(v: *химические реакции)* FirstSub е *реагенты*(v)} &

(М.5) *реакции процесса(число шагов процесса)* е {(v: *химические реакции)* (3 (vl:*результаты(у)) сокращенная структурная формула* (vl) = Short\_Structural\_Formula)} &

(М.4) (& (vl: I[2, *число шагов процесса-2*])*реакции процесса(уХ)* е {(v: *химические реакции) реагенты*(v) с *результаты(реакции процесса^1-1))* и *дополнительные вещества(уХ)})/*

Прив д м комм нтарий к м тоду.

Если существует реакция, множеству реагентов которой принадлежит соединение FirstSub, а множеству результатов - соединение, краткая структурная формула которого Short\_Structural\_Formula, то число шагов химического процесса равно двум, а данная реакция будет реакцией первого шага проце сса. Если такой р е акции нет, то тр е буемый проце сс синтеза обладает свойствами М.1, М.2, М.4, а также сл е дующим свойством:

М.5) реакцией предпоследнего шага является реакция, множеству р зультатов которой принадл жит со дин ни , краткая структурная формула которого Short\_Structural\_Formula;

Очевидно, что задача может иметь множество решений. Метод решения представля ет собой м етод поиска вывода в исчисл е нии. Условие на начально е состояние процесса вывода задает свойство 2, условие окончания вывода - свойство 3, а правило работы исчисл ния - свойство 4.

К данному классу принадлежат также задачи определения пути синтеза соединения, если задан класс соединений, представитель которого принадл жит множ ству со дин ний п рвого шага синт за.

Сущ е ству ет два вида входных парам етров данной задачи:

* Data\_In = <Name\_Compound, FirstClass>, где Сорт Name\_Compound: органические соединения

Сорт FirstClass: *классы веществ по функциональным группам*

* Data\_In = < Short\_Structural\_Formula, FirstClass>, где

Сорт Short\_Structural\_Formula: возможные структурные формулы Сорт FirstClass: классы веществ по функциональным группам В первом случае первый входной параметр задает название органич ского со дин ния, которо тр бу тся синт зировать, а второй - класс со дин ний, пр дставит ль которого принадл жит множ ству со дин ний п рвого шага синт за. Во втором случа п рвый входной парам тр зада т краткую структурную формулу органич ского со дин ния, которо е тр е буется синтезировать, а второй - класс со единений, пр едставитель которого принадл жит множ ству со дин ний п рвого шага синт за.

В первом случае связи входных параметров с терминами онтологии органиче ской химии задают (С.1), (С.3), а также утверждение:

(С.5) FirstClass е {(v: *органические соединения* п *вещества процесса(1)) класс вещества по функциональной группе(у)}*

Ср ди органич ских со дин ний п рвого шага должно быть хотя бы одно со дин ни , у которого класс по функциональной групп сть FirstClass.

Во втором случае связи входных параметров с терминами онтологии органиче ской химии задают (С.1), (С.4) и (С.5).

Приведем метод решения задачи для первого случая, записанный на язык прикладной логики.

/({(v: *химические реакции)* FirstClass е {(v1: *органические соединения* п *реагенты(у)) класс вещества по функциональной группе(уХ)}* &

Name\_Compound e *результаты(у)}* Ф 0 ^ *число шагов процесса* = 2 & *реакции процесса(1)* e {(v: *химические реакции)* FirstClass e {(v1: *органические соединения* п реагенты(v)) *класс вещества по функциональной группе^1)}* & Name\_Compound e *результаты(у)*}),

{(v: *химические реакции)* FirstClass e {(v1: *органические соединения* п реагенты(v)) *класс вещества по функциональной группе^1)}* & Name\_Compound e *результаты(у)}* = 0 ^

(М.1) *число шагов процесса* > 2 &

(М.6) *реакции процесса(1)* e {(v: *химические реакции)* FirstClass e {(v1: *органические соединения* п реагенты(v)) *класс вещества по функциональной группе^1)}* &

(М.3) *реакции процесса(число шагов процесса*-1) e {(v: *химические реакции)* Name\_Compound e *результаты(у)}* &

(М.4) (& (v1: I[2, *число шагов процесса-2*]) *реакции процесса(уХ)* e {(v: *химические реакции) реагенты*(v) с *результаты(реакции* nроцесса(v1-1)) и *дополнительные вещества(уХ)})/*

Прив д м комм нтарий к фрагм нту М.6: р акци й п рвого тага явля тся р акция, при которой хотя бы один класс хотя бы одного из органич ских со дин ний р аг нтов данной р акции сть FirstClass.

Во втором случа м тод р т ния задачи отлича тся от прив д нного выше использовани ем формулы (М.5) вм е сто (М.3).

1. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПУТИ СИНТЕЗА СОЕДИНЕНИЯ, ДЛЯ КОТОРОГО ЗАДАНЫ СОЕДИНЕНИЯ, КОТОРЫЕ МОГУТ ПРИНИМАТЬ УЧАСТИЕ В ПРОЦЕССЕ СИНТЕЗА

Сущ ствуют два вида входных парам тров данной задачи. В п рвом вид п рвый входной парам тр зада т названи органич ского со дин ния, а

второй - соедин ения, которые могут принимать участи е в проце сс е синтеза. Во втором виде первый входной парам етр задает сокращенную структурную формулу органич ского со дин ния, которо тр бу тся синт зировать, а второй - соедин ения, которые могут принимать участи е в проце сс е синтеза. Н обходимо опр д лить число шагов синт за, а такж построить последовательность реакций, позволяющих синтезировать требуемое со единение, при этом со единения, задаваемые значением второго парам етра, могут принимать участи в проц сс синт за.

Определим вид выходного параметра задач данного класса: Result = <Process>. Сорт выходного парам етра и е го связи с т ерминами онтологии органич ской химии прив д ны в п. 1.

Опр д лим входны парам тры данной задачи (п рвый случай), сли задано названи органич ского со дин ния и со дин ния, которы могут принимать участи в проц сс синт за: Data\_In = <Name\_Compound, SubsCould>. Зададим сорта данных парам етров:

сорт Name\_Compound: *органические соединения* сорт SubsCould: *{}органические соединения*

Cвязи входных парам етров с терминами онтологии органиче ской химии задают условия (С.1), (С.3), а также следующие условия:

(С.6) вещества процесса(1) п органические соединения Ф 0 ^ (вещества процесса(1) п органические соединения) с SubsCould Вс органич ски со дин ния п рвого шага проц сса должны принадлежать множеству SubsCould.

(С.7) (v: I[2, число шагов процесса-1]) дополнительные вещества(v) п органические соединения с SubsCould Вс органич ски со дин ния, добавл нны на любом шаг проц сса, принадлежат множеству SubsCould.

(С.8) (v: I[2, *число шагов процесса-1]) дополнительные вещества*(v) п *вещества процесса(1)* = 0

Вещества процесса на первом шаге не могут принадлежать множеству дополнительных в еще ств любого из шагов проце сса.

Прив д м м тод р ш ния данной задачи, записанный на язык прикладной логики.

/({(v: *химические реакции) органические соединения* п *реагенты*(v) с SubsCould & Name\_Compound е *результаты(у)}* \* 0 ^ *число шагов процесса* = 2 & *реакции процесса(1)* е {(v: *химические реакции)* Name\_Compound е *результаты*(v) & *органические соединения* преагенmы(v) с SubsCould}),

({(v: *химические реакции)* {(v1: *органические соединения)* v1 е *реагенты*(v)} с SubsCould & Name\_Compound е *результаты(ч)}* = 0 ^

М.1) *число шагов процесса* > 2 &

М.7) *реакции процесса(1)* е {(v: *химические реакции) органические соединения* п*реагенты(у)* с SubsCould} &

М.3) *реакции процесса(число шагов процесса-1)* е {(v: *химические реакции)* Name\_Compound е *результаты(ч)}* &

М.8) (v1: I[2, *число шагов процесса-2*]) *реакции nроцесса(v1)* е {(v: *химические реакции) реагенты*(v) с *результаты(реакции процесса^1-1))* и *дополнительные* вещесmва(v1) & *(реагенты(у)* п *органические соединения)* с SubsCould}

Приведем комм ентарий к методу.

Если сущ ству т р акция, ср ди р аг нтов которой сть органич ски соединения, принадлежащие множеству SubsCould, а множеству результатов которой принадл ежит со едине ние Name\_Compound, то число шагов химич ского проц сса равно двум, а данная р акция буд т р акци й п рвого шага проце сса. Если такой р е акции нет, то тр е буемый проце сс синтеза обладает свойствами М.1, М. 3, а также сл едующими свойствами:

М.7) реакцией первого шага является реакция, множеству реагентов которой принадл жит органич ско со дин ни из множ ства SubsCould;

М.8) реакцией каждого тага с номером, начиная со второго, и до номера, равного разности числа тагов процесса и 2, является реакция, множество р аг нтов которой явля тся подмнож ством р зультатов р акции пр дыдущ го тага и дополнительных соединений данного тага, причем все органические соединения - ре агенты р е акции являются элементами множе ства SubsCould.

Очевидно, что задача может иметь множество ретений. Метод ретения представля ет собой м етод поиска вывода в исчисл е нии. Условие на начально е состояние процесса вывода задает свойство М.7, условие окончания вывода - свойство М.3, а правило работы исчисл ения - свойство М.8.

Определим входные параметры данной задачи (второй случай), если заданы краткая структурная формула органического соединения, а также соединения, которые могут принимать участие в процессе синтеза: Data\_In = <Short\_Structural\_Formula, SubsCould>. Зададим сорта данных парам етров: сорт Short\_Structural\_Formula: возможные структурные формулы сорт SubsCould: {}органические соединения

Cвязи входных парам етров с терминами онтологии органиче ской химии задают условия (С.3), (С.4), (С.6), (С.7).

Прив д м м тод р т ния данной задачи, записанный на язык прикладной логики.

/({(v: *химические реакции) органические соединения* п *реагенты(у)* с SubsCould & (3 (v2: *результаты(у)) сокращенная структурная формула* (v2) = Short\_Structural\_Formula)} Ф 0 ^ *число шагов процесса* = 2 & *реакции процесса(1)* e {(v: *химические реакции) органические соединения* п *реагенты*(v) с SubsCould & (3 (v2: *результаты(у)) сокращенная*

структурная формула (v2) = Short\_Structural\_Formula)}),

({(v: *химические реакции)* {(v1: *органические соединения)* v1 e *реагенты(у)}* с SubsCould & (3 (v2: *результаты(у)) сокращенная структурная формула* (v2) = Short\_Structural\_Formula)} = 0 ^

М.1) *число шагов процесса* > 2 &

М.7) *реакции процесса(1)* е {(v: *химические реакции) органические соединения* п*реагенты*(v) с SubsCould} &

М.5) *реакции процесса(число шагов процесса-1)* е {(v: *химические реакции)* (3 (v2: *результаты(у)) сокращенная структурная формула соединения(уТ)* = Short\_Structural\_Formula)} &

М.8) (& (vl: I[2, *число шагов процесса-2])реакции процесса(\1)* е {(v: *химические реакции) реагенты*(v) с *результаты(реакции процесса(у1-Х))* и *дополнительные вещества(уХ)* & *(реагенты(у)* п *органические соединения)* с SubsCould}) /

Если сущ ству т р акция, множ ству р зультатов которой принадл жит со дин ни , им ющ краткую структурную формулу

Short\_Structural\_Formula, а органич ски со дин ния - р аг нты данной реакции принадлежат множеству SubsCould, то число шагов химического проц сса равно двум, а данная р акция буд т р акци й п рвого шага проц сса. Если такой р акции н т, то тр бу мый проц сс синт за облада т свойствами М.1, М.7, М.5, М.8.

К данному классу принадлежат также задачи определения пути синтеза со дин ния, сли заданы классы со дин ний, пр дставит ли которых могут принимать участи в проц сс синт за.

Сущ е ству ет два вида входных парам етров данной задачи:

* Data\_In = <Name\_Compound, ClassCould>, где Сорт Name\_Compound: органические соединения

Сорт ClassCould: {} *классы веществ по функциональным группам*

* Data\_In = <Short\_Structural\_Formula, ClassCould>, где

сорт Short\_Structural\_Formula: *возможные структурные формулы* сорт ClassCould: {} *классы веществ по функциональным группам*

В первом виде связи входных параметров с терминами онтологии органич е ской химии задают условия (С.1), (С.3) - (С.9), а также сл едующи е условия:

(С.9) *вещества процесса(1)* п *органические соединения* \* 0 ^

({(v*:(вещества процесса(1)* п *органические соединения)) класс вещества по функциональной группе(у)}* п ClassCould \* 0)

Ср ди органич ских со дин ний п рвого шага сущ ствуют таки , класс которых принадл е жит множе ству ClassCould.

(С.10) (v: I[2, *число шагов процесса-1]) {(v1: дополнительные вещества*(v) п *органические соединения) класс вещества по функциональной группе(у1)}* п ClassCould \* 0)

Ср ди дополнит льных органич ских со дин ний каждого шага процесса существуют такие, класс которых принадлежит множеству ClassCould.

Во втором вид связи входных парам тров с т рминами онтологии органич е ской химии задают условия (С.4), (С.3) - (С.10).

Прив д м м тод р ш ния задачи для п рвого случая, записанный на язык прикладной логики.

/({(v: *химические реакции)* {(v1: *органические соединения* п

*реагенты(у)) класс вещества по функциональной группе(уХ)}* п ClassCould \* 0

& Name\_Compound е *результаты(у)}* \* 0 ^ *число шагов процесса* = 2 & *реакции процесса(1)* е {(v: *химические реакции)* Name\_Compound е

*результаты*(v) & {(v1: *органические соединения* п *реагенты(у)) класс*

*вещества по функциональной группе(чХ)}* п ClassCould \* 0)},

({(v: *химические реакции)* {(v1: *органические соединения* п *реагенты(ч)) класс вещества по функциональной группе(чХ)}* п ClassCould \* 0 & Name\_Compound е *результаты(ч)}* = 0 ^

М.1) *число шагов процесса* > 2 &

М.9) *реакции процесса(1)* е {(v: *химические реакции)* {(vl: *органические соединения* п*реагенты(у)) класс вещества по функциональной группе^1)}* п ClassCould Ф 0)} &

М.3) *реакции процесса(число шагов процесса-1)* е {(v: *химические реакции)* Name\_Compound е *результаты(у)}* &

М.10) (vl: I[2, *число шагов процесса-2])реакции процесса(\1)* е {(v: *химические реакции) реагенты*(v) с *результаты(реакции* процесса(v1-1)) и *дополнительные вещества(уХ)* & {(v2: *органические соединения* п *реагенты(у)) класс вещества по функциональной группе(у2)}* п ClassCould Ф 0}

Прив д м комм нтарий к м тоду.

Если сущ ству т р акция, ср ди р аг нтов которой сть органич ски со дин ния, класс которых принадл жит множ ству ClassCould, а множ ству результатов которой принадлежит соединение Name\_Compound, то число шагов химич ского проц сса равно двум, а данная р акция буд т р акци й п рвого шага проц сса. Если такой р акции н т, то тр бу мый проц сс синтеза обладает свойствами М.1, М.3, а также следующими свойствами:

М.11) р е акци ей п ервого шага явля ется р е акция, множ е ству р е аг е нтов которой принадл жит органич ско со дин ни , класс которого принадл жит множе ству ClassCould;

М.12) р е акцие й каждого шага с ном ером, начиная со второго, и до ном ера, равного разности числа шагов процесса и 2, является реакция, множество р аг нтов которой явля тся подмнож ством р зультатов р акции пр дыдущ го шага и дополнительных соединений данного шага, причем все органические соединения - р е агенты р е акции принадлежат некоторому классу из множе ства ClassCould.

Очевидно, что задача может им еть множе ство р ешений. Метод р ешения пр дставля т собой м тод поиска вывода в исчисл нии. Услови на начально состояни проц сса вывода зада т свойство М.9, услови окончания вывода - свойство М.3, а правило работы исчисл ения - свойство М.10.

Во втором случа м тод р т ния задачи отлича тся от прив д нного выте использовани ем формулы (М.5) вм е сто (М.3).

4. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПУТИ СИНТЕЗА СОЕДИНЕНИЯ, ДЛЯ КОТОРОГО ЗАДАНЫ СОЕДИНЕНИЯ, КОТОРЫЕ ДОЛЖНЫ ПРИНИМАТЬ УЧАСТИЕ В ПРОЦЕССЕ СИНТЕЗА

Сущ е ствуют н е сколько видов входных парам етров данной задачи. В п рвом случа п рвый входной парам тр зада т названи органич ского соединения, а второй - множество органических соединений, которые должны принимать участи в проц сс синт за. Во втором случа п рвый входной парам тр зада т краткую структурную формулу органич ского соединения, которое требуется синтезировать, а второй - множество органических соединений, которые должны принимать участие в процессе синт за. Н обходимо опр д лить число тагов синт за, а такж построить последовательность реакций, позволяющих синтезировать требуемое со единение, при этом со единения, задаваемые значением второго парам етра, должны принимать участи в проц сс синт за.

Определим имя выходного параметра задач данного класса: Result = <Process>. Сорт выходного парам етра и е го связи с т ерминами онтологии органич ской химии прив д ны в п. 1.

Опр д лим входны парам тры данной задачи (п рвый случай), сли задано название органического соединения и множество органических со дин ний, которы должны принимать участи в проц сс синт за: Data\_In = <Name\_Compound, SubsWill>. Зададим сорта данных парам етров: сорт Name\_Compound: органические соединения сорт SubsWill: {}органические соединения

Cвязи входных парам етров с терминами онтологии органиче ской химии задают условия (C.1), (C.3), (C.8), а также следующие условия:

(C.11) вещества процесса(1) п органиче ски е со единения Ф 0 ^ SubsWill п вещества процесса(1) Ф 0

На п рвом таг проц сса должны участвовать каки -либо из органич ских в щ ств множ ства SubsWill (C.12) (v: I[2, число шагов процесса-1])органич еские со един ения п

*дополнительные вещества(v)* с SubsWill

На вс х тагах проц сса, начиная со второго и до пр дпосл дн го, вс дополнит льны органич ски со дин ния должны принадл жать множ ству SubsWill (C.13) SubsWill = (вещества процесса(1) п органические соединения) и (и (v: I[2, число шагов процесса-1]) (дополнительные вещества(v) п органические соединения)

Множество органических соединений, которые должны принимать участи е в проц е сс е синт е за, явля ется объ е дин е ни е м множе ств органич ских со дин ний, принадл жащих множ ству со дин ний п рвого тага проц сса, а такж множ ств дополнит льных органич ских соединений, принадлежащих всем тагам процесса, за исключением посл дн го.

Прив д м м тод р т ния данной задачи, записанный на язык прикладной логики.

/({(v: *химические реакции) органические соединения* п *реагенты*(v) = SubsWill & Name\_Compound e *результаты(у)}* Ф 0 ^ *число шагов процесса* = 2 & *реакции процесса(1)* e {(v: *химические реакции) органические соединения* п *реагенты*(v) = SubsWill & Name\_Compound e

*результаты(у)\),*

{(v: *химические реакции) органические соединения* п *реагенты(у)* = SubsWill & Name\_Compound e *результаты*(v)} = 0 ^

М.1) *число шагов процесса* > 2 &

М.11) *реакции процесса(1)* е {(v: *химические реакции) (органические соединения* п *реагенты(у))* с SubsWill} &

М.3) *реакции процесса(число шагов процесса-1)* е {(v: *химические реакции)* Name\_Compound е *результаты(ч)}* &

М.12) *дополнительные вещества(число шагов процесса-1)* п *органические соединения =* (SubsWill \ (u(v1: I[2, *число шагов процесса-2*]) *дополнительные вещества(уХ))* \ *вещества процесса(1))* &

М.13) *дополнительные вещества(2)* п *органические соединения* = (SubsWill \ *вещества процесса(1))* п *реагенты(реакции процесса(2))* &

М.14) (& (v1: I[2, *число шагов процесса-2*]) *реакции процесса*(v1) е {(v: *химические реакции) реагенты(ч)* с *результаты(реакции* nроцесса(v1-1)) и *дополнительные вещества(уХ))* & *дополнительные* вещесmва(v1) п *органические соединения =* (SubsWill \ *дополнительные вещества(ч1-1))* п *реагенты(реакции процесса(уХ)))/*

Приведем комм ентарий к методу.

Если сущ ству т р акция, множ ство органич ских со дин ний - ре агентов которой совпадает с множе ством SubsWill, а множе ству р езультатов которой принадл ежит со едине ние Name\_Compound, то число шагов химич ского проц сса равно двум, а данная р акция буд т р акци й п рвого шага проце сса. Если такой р е акции нет, то тр е буемый проце сс синтеза обладает свойствами М.1, М.3, а также сл е дующими свойствами:

М.11) р е акцие й первого шага буд ет р е акция, органич е ские со едине ния - р аг нты которой принадл жат множ ству SubsWill;

М.12) множе ство дополните льных органич е ских соедине ний пр дпосл дн го шага сод ржит вс в щ ства множ ства SubsWill, из которого исключ ны в щ ства п рвого шага, а такж в щ ства, принадл жащи объ единению множе ств дополнительных органиче ских соединений вс ех шагов, начиная от второго шага и до шага с ном ром, равным разности числа шагов проце сса и 2;

М.13) множ е ство дополнительных органич е ских со е дин ений второго шага совпадает с множеством реагентов реакции второго шага, принадлежащих разности множе ств SubsWill и веществ первого шага;

М.14) для вс ех шагов, начиная со второго и до шага с ном ером, равным разности числа шагов проц сса и 2, выполняются сл дующи условия:

* р акци й этого шага явля тся р акция, множ ство р аг нтов которой являются подмнож ством р зультатов р акции пр дыдущ го шага и дополнит льных со дин ний т кущ го шага
* множество дополнительных органических соединений этого шага совпада т с множ ством р аг нтов р акции пр дыдущ го шага, принадл жащих разности множ ств SubsWill и в щ ств предыдущего шага.

Очевидно, что задача может им еть множе ство р ешений. Метод р ешения пр дставля т собой м тод поиска вывода в исчисл нии. Услови на начальное состояние проце сса вывода задает свойство М.13, условия окончания вывода - свойства М.3 и М.12, а правила работы исчисл ния задаются свойствами М.13-М14.

Опр ед елим входны е парам етры данной задачи (второй случай), е сли задана краткая структурная формула органического соединения и множество органических соединений, которые должны принимать участие в процессе синтеза: Data\_In = <Short Structural Formula, SubsWill>. Зададим сорта данных парам етров:

сорт Short Structural Formula: возможные структурные формулы

сорт SubsWill: {} *органические соединения*

Cвязи входных параметров с терминами онтологии органиче ской химии задают условия (C.4), (C.8), (C.9), (С.12) - (С.14).

Приведем комм ентарий к м етоду.

Если сущ ству т р акция, множ ство органич ских со дин ний реагентов, которой совпадает с множеством SubsWill, а множеству р зультатов которой принадл жит со дин ни , им ющ краткую структурную формулу Short Structural Formula, то число тагов химич ского проц сса равно двум, а данная р акция буд т р акци й п рвого тага проц сса. Если такой р акции н т, то тр бу мый проц сс синт за облада т свойствами М.1, М.11, М.5, М.12-М.14.

К данному классу принадл жат такж задачи опр д л ния пути синт за со дин ния, сли заданы классы со дин ний, пр дставит ли которых должны принимать участи в проц сс синт за.

Сущ е ству ет два вида входных парам етров:

* Data\_In = <Name\_Compound, ClassWill>, где сорт Name\_Compound: органические соединения

сорт ClassWill: {} *классы веществ по функциональным группам*

* Data\_In = <Short\_Structural\_Formula, ClassWill>, где

сорт Short\_Structural\_Formula: возможные структурные формулы сорт ClassWill: {} классы веществ по функциональным группам В первом виде связи входных параметров с терминами онтологии органиче ской химии задают условия (C.1), (C.3), (C.8), а также следующие условия:

(C.14) {(v: *вещества процесса(1)* п *органические соединения) класс вещества по функциональной группе(у)}* п ClassWill Ф 0)

Ср ди органич ских со дин ний п рвого тага сущ ствуют таки , класс которых принадлежит множе ству ClassWill.

(C.15) (v: I[2, число шагов процесса-1]) {(v1: органические соединения п

*дополнительные вещества*(v)) *класс вещества по функциональной группе(у)}* п ClassWill Ф 0))

На вс ех тагах проц е сса, начиная со второго и до пр е дпосл е дн его, класс хотя бы одного дополнит льного органич ского со дин ния долж н принадл жать множ ству ClassWill (C.17) ClassWill с {(v: (вещества процесса(1) п органические соединения) класс вещества по функциональной группе(у)} и (и (v: I[2, число шагов

процесса-l]) {(vl: *(дополнительные вещества*(v) п *органические*

*соединения) класс вещества по функциональной группе^Х)})*

Множество классов органических соединений, представители которых должны принимать участие в проце ссе синтеза, явля ется подмноже ством объ дин ния множ ств классов органич ских со дин ний, принадл жащих множе ству соединений первого шага проце сса, а также множе ств классов дополнительных органических соединений, принадлежащих всем шагам проце сса, за исключ е ние м посл едне го.

Приведем метод р ешения данной задачи, записанный на языке прикладной логики.

/({(v: *химические реакции)* {(vl: *органические соединения* п *реагенты(у) класс вещества по функциональной группе^1)}* п ClassWill Ф 0 &

Name\_Compound е *результаты(у)}* Ф 0 ^ *число шагов процесса* = 2 & *реакции процесса(1)* е {(v: *химические реакции)* {(vl: *органические соединения* п *реагенты*(v) *класс вещества по функциональной группе^1)}* п ClassWill Ф 0 & Name\_Compound е *результаты(у)\),*

{(v: *химические реакции)* {(vl: *органические соединения* п *реагенты*(v) *класс вещества по функциональной группе^1)}* п ClassWill Ф 0 &

Name\_Compound е результаты(у)} = 0 =>

М.1) *число шагов процесса* > 2 &

М.15) *реакции процесса(1)* е {(v: *химические реакции)* {(vl: *органические соединения* п *реагенты(у) класс вещества по функциональной группе^Х)}* п ClassWill Ф 0} &

М.3) *реакции процесса(число шагов процесса-1)* е {(v: *химические реакции)* Name\_Compound е *результаты(у)}* &

М.16) {(vl: *дополнительные вещества(число шагов процесса-1)* п

*органические соединения) класс вещества по функциональной группе(у1)}* п ClassWill = (ClassWill \ (u(v2: I[2, *число шагов процесса-2*]) {(v3: *дополнительные вещества^2)) класс вещества по функциональной группе^3)})* \ {(v4: *вещества процесса(1)) класс вещества по функциональной группе^4)})* &

М.17) {(v1: *дополнительные вещества(2)* п *органические соединения) класс вещества по функциональной группе(чХ)}* □ (ClassWill \ {(v2: *вещества процесса(1) класс вещества по функциональной группе(у2)})* п {(v3: *реагенты(реакции процесса(2)) класс вещества по функциональной группе(ч3)}* &

М.18) (& (v1: I[2, *число шагов процесса-2*]) *реакции процесса^1)* е {(v: *химические реакции) реагенты(у)* с *результаты(реакции процесса(у1-Х))* и *дополнительные* вещесmва(v1)) *& {(v2: дополнительные вещества*(v1) п *органические соединения класс вещества по функциональной группе(у2)}* □ (ClassWill \ {(v3: *дополнительные* вещесmва(v1-1)) *класс вещества по функциональной группе(у2)})* п {(v4: *реагенты(реакции* nроцесса(v1)) *класс вещества по функциональной группе^2)*} /

Приведем комм ентарий к методу.

Если существует реакция, такая, что множество классов органических со дин ний - р аг нтов совпада т с множ ством ClassWill, а множ ству р зультатов принадл жит со дин ни Name\_Compound, то число шагов химич ского проц сса равно двум, а данная р акция буд т р акци й п рвого шага проце сса. Если такой р е акции нет, то тр е буемый проце сс синтеза обладает свойствами М.1, М.3, а также сл едующими свойствами:

М.15) р е акцие й первого шага буд ет такая р е акция, что классы вс ех органич ских со дин ний - р аг нтов принадл жат множ ству ClassWill;

М.16) множе ство классов дополнительных органич е ских со едине ний предпоследнего шага содержит вс е элементы множе ства ClassWill, из которого исключ ны классы органич ских со дин ний п рвого шага, а такж классы органич ских со дин ний, принадл жащих объ дин нию множ ств дополнит льных органич ских со дин ний вс х шагов, начиная от второго шага и до шага с ном ром, равным разности числа шагов проц сса и 2;

М.17) множ ство классов дополнит льных органич ских со дин ний второго тага совпада т с множ ством классов р аг нтов р акции второго тага, принадл жащих разности множ ств ClassWill и множ ства классов веще ств первого тага;

М.18) для вс ех тагов, начиная со второго и до тага с ном ером, равным разности числа тагов проц сса и 2, выполняются сл дующи условия:

* р акци й этого тага явля тся р акция, множ ство р аг нтов которой являются подмнож ством р зультатов р акции пр дыдущ го тага и дополнит льных со дин ний т кущ го тага;
* множе ство классов дополнительных органиче ских соедин ений этого тага совпада т с множ ством классов р аг нтов р акции предыдущего тага, принадлежащих разности множе ства ClassWill и множе ства классов органич еских соединений пр едыдущего тага.

Очевидно, что задача может им еть множе ство р етений. Метод р етения пр дставля т собой м тод поиска вывода в исчисл нии. Услови на начальное состояни е проц е сса вывода задает свойство М.15, условия окончания вывода - свойства М.3 и М.16, а правила работы исчисл ния задаются свойствами М.17-М18.

Во втором вид связи входных парам тров с т рминами онтологии органической химии задают условия (С.4), (С.3), (С.8), (С.14-С.16). Метод р т ния задачи отлича тся от прив д нного м тода использовани м формулы (М.5) вм е сто (М.3).

1. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПУТИ СИНТЕЗА СОЕДИНЕНИЯ, ЕСЛИ ЗАДАНО СОЕДИНЕНИЕ, ПРИНАДЛЕЖАЩЕЕ МНОЖЕСТВУ СОЕДИНЕНИЙ ПЕРВОГО ШАГА СИНТЕЗА, И СОЕДИНЕНИЯ, КОТОРЫЕ МОГУТ ПРИНИМАТЬ УЧАСТИЕ В ПРОЦЕССЕ СИНТЕЗА

Сущ е ствуют н е сколько видов входных парам етров данной задачи. В п рвом случа п рвый входной парам тр зада т названи органич ского со дин ния, которо тр бу тся синт зировать, второй - со дин ни , принадл жащ множ ству со дин ний п рвого шага синт за, а тр тий - множество соединений, которые могут принимать участие в процессе синт за. Во втором случа п рвый входной парам тр зада т краткую структурную формулу органич ского со дин ния, которо тр бу тся синтезировать, второй - со единение, принадлежаще е множе ству со единений первого шага синтеза, а третий - множество соединений, которые могут принимать участи в проц сс синт за.

Определим имя выходного параметра задач данного класса: Result = <Process>. Сорт выходного парам етра и е го связи с т ерминами онтологии органиче ской химии приведены в п. 4.3.1.

Опр д лим входны парам тры данной задачи (п рвый случай), сли задано названи органич ского со дин ния, которо тр бу тся

синтезировать, соединение, принадлежащее множеству соединений первого шага, а также множество органических соединений, которые могут принимать участи в проц сс синт за: Data\_In = <Name\_Compound, FirstSub, SubsCould>. Зададим сорта данных парам етров:

сорт Name\_Compound: *органические соединения* сорт FirstSub: *органические соединения* сорт SubsCould: {} *органические соединения*

Cвязи входных парам етров с терминами онтологии органиче ской химии задают условия (C.1)-(C.3), (C.6)-(C.8).

Прив д м м тод р ш ния данной задачи, записанный на язык прикладной логики.

/({(v: *химические реакции) органические соединения* п *реагенты(у)* с SubsCould & FirstSub е *реагенты*(v) & Name\_Compound е *результаты*(v)} Ф 0 ^ *число шагов процесса* = 2 & *реакции процесса(1)* е {(v: *химические реакции)* Name\_Compound е *результаты(у)* & FirstSub е *реагенты*(v) & *органические соединения* п*реагенты*(v) с SubsCould}),

({(v: химические реакции) органические соединения п реагенты(v) с SubsCould & FirstSub e реагенты(v) & Name\_Compound e результаты(v)} = 0 ^

М.1) *число шагов процесса* > 2 &

М.19) *реакции процесса(1)* e {(v: *химические реакции)* FirstSub e *реагенты*(v) & *органические соединения* п *реагенты*(v) с SubsCould} &

М.3) *реакции процесса(число шагов процесса*-1) e {(v: *химические реакции)* Name\_Compound e *результаты(у)}* &

М.8) (v1: I[2, *число шагов процесса-2]) реакции процесса{\1)* e {(v: *химические реакции) реагенты*(v) с *результаты(реакции процесса(у1-Х))* и *дополнительные вещества(уХ)* & *(реагенты(у)* п *органические соединения)* с SubsCould}

Прив д м комм нтарий к м тоду.

Если сущ ству т такая р акция, что First Sub принадл жит множ ству реагентов, ср еди е е р е агентов е сть органиче ские соедин ения, принадлежащие множ ству SubsCould, а множ ству р зультатов принадл жит со дин ни Name\_Compound, то число тагов химич ского проц сса равно двум, а данная р акция буд т р акци й п рвого тага проц сса. Если такой р акции н т, то тр ебуемый проце сс синтеза обладает свойствами М.1, М.3, М.8, а также сл дующими свойствами:

М.19) р е акци ей п ервого тага явля ется такая ре акция, при которой First Sub принадл жит множ ству р аг нтов и ср ди органич ских со дин ний

* е е ре аг ентов есть со единения из множе ства SubsCould;

Очевидно, что задача может им еть множе ство р етений. Метод р етения пр дставля т собой м тод поиска вывода в исчисл нии. Услови на начальное состояни е проц е сса вывода задает свойство М.19, услови е окончания вывода - свойство М.3, а правило работы исчисл ния - свойство М.8.

Определим входные параметры данной задачи (второй случай), если заданы краткая структурная формула органического соединения, которое требуется синтезировать, соединение, принадлежащее множеству соединений первого шага, а также соединения, которые могут принимать участие в проце сс е синтеза: Data\_In = <Short\_Structural\_Formula, FirstSub, SubsCould>. Зададим сорта данных парам етров:

сорт Short\_Structural\_Formula: *возможные структурные формулы* сорт FirstSub: *органические соединения* сорт SubsCould: {} *органические соединения*

Cвязи входных параметров и терминов онтологии органической химии задают условия (C.2)-(C.4), (C.6)-(C.8).

Прив д м м тод р ш ния данной задачи, записанный на язык прикладной логики.

/({(v: *химические реакции) органические соединения* п *реагенты(у)* с SubsCould & FirstSub е реагенmы(v) & (3 (v1: *результаты(у)) сокращенная структурная формула соединения(ч1)* = Short\_Structural\_Formula)} \* 0 ^ *число шагов процесса* = 2 & *реакции процесса(1)* е {(v: *химические реакции)* (3 (v1: *результаты(у*)) *сокращенная структурная формула соединения(у* 1) =

Short\_Structural\_Formula) & FirstSub е реагенmы(v) & органические соединения п реагенты(у) с SubsCould}),

({(v: *химические реакции) органические соединения* п *реагенты(у)* с SubsCould & FirstSub е реагенmы(v) & (3 (v1: *результаты(у)) сокращенная структурная формула соединения(уХ)* = Short\_Structural\_Formula)} = 0 ^

М.1) *число шагов процесса* > 2 &

М.19) *реакции процесса(1)* е {(v: *химические реакции)* FirstSub е *реагенты*(v) & *органические соединения* п *реагенты*(v) с SubsCould} &

М.5) *реакции процесса(число шагов процесса-1)* е {(v: *химические реакции)* (3 (v1: *результаты(у)) сокращенная структурная формула соединения*(v1) = Short\_Structural\_Formula)} &

М.8) (vl: I[2, *число шагов процесса-2])реакции процесса^1)* е {(v: *химические реакции) реагенты(у)* с *результаты(реакции процесса(у1-Х))* и *дополнительные вещества(уХ)* & *(реагенты(у)* п *органические соединения)* с SubsCould}

Определим входные параметры данной задачи (третий случай), если заданы соединение, которое требуется синтезировать, класс соединений, пр дставит ль которого принадл жит множ ству со дин ний п рвого шага, а также множество соединений, которые могут принимать участие в процессе синт за: Data\_In = <Name\_Compound, FirstClass, SubsCould>. Зададим сорта данных парам етров:

сорт Name\_Compound: *органические соединения*

сорт FirstClass: *классы веществ по функциональным группам*

сорт SubsCould: {} *органические соединения*

Связи входных параметров и терминов онтологии органической химии задают условия (С.1), (С.5), (С.3), (С.6) - (С.8).

Прив д м м тод р ш ния данной задачи, записанный на язык прикладной логики.

/({(v: *химические реакции) органические соединения* п *реагенты(у)* с SubsCould & (v (vl: *реагенты(у))* FirstClass е *класс вещества по*

*функциональной группе(уХ))* & Name\_Compound е *результаты(у)}* Ф 0 ^ *число шагов процесса* = 2 & *реакции процесса(1)* е {(v: *химические реакции)* Name\_Compound е *результаты*(v) & (v (vl: *реагенты(у)) класс вещества по функциональной группе(уХ)* = FirstClass) & *органические соединения* п *реагенты(у)* с SubsCould}),

({(v: *химические реакции) органические соединения* п *реагенты*(v) с SubsCould & (v (vl: *реагенты(у))* FirstClass е *класс вещества по функциональной группе(уХ))* & Name\_Compound е *результаты(у)}* = 0 ^

М.1) *число шагов процесса* > 2 &

М.20) *реакции процесса(1)* e {(v: *химические реакции)* (v (v1: *реагенты(у)) класс вещества по функциональной группе(уХ)* п FirstClass Ф 0) & *органические соединения* п *реагенты*(v) с SubsCould} &

М.3) *реакции процесса(число шагов процесса*-1) e {(v: *химические реакции)* Name\_Compound e *результаты(у)}* &

М.8) (v1: I[2, *число шагов процесса-2]) реакции процесса{\1)* e {(v: *химические реакции) реагенты*(v) с *результаты(реакции* nроцесса(v1-1)) и *дополнительные вещества(уХ)* & *(реагенты(у)* п *органические соединения)* с SubsCould}

Опр е д елим входны е парам етры данной задачи (ч етв ертый случай), е сли заданы краткая структурная формула со дин ния, которо тр бу тся синте зировать, класс со е дин е ний, пр е дставит ель которого принадл е жит множ ству со дин ний п рвого тага, а такж множ ство со дин ний, которы могут принимать участи в проц сс синт за: Data\_In = <Short Structural Formula, FirstClass, SubsCould>. Определим сорта входных парам етров:

сорт Short Structural Formula: *возможные структурные формулы* сорт FirstClass: *классы веществ по функциональным группам* сорт SubsCould: {} *органические соединения*

Связи входных параметров и терминов онтологии органической химии задают условия (С.4), (С.5), (С.6) - (С.9).

Приведем метод р етения данной задачи, записанный на языке прикладной логики.

/({(v: *химические реакции) органические соединения* п *реагенты(у)* с SubsCould & (v (v1: *реагенты(у))* FirstClass e *класс вещества по*

*функциональной группе(уХ))* & (3 (v1: *результаты(уУ) сокращенная*

*структурная формула* (v1) = Short\_Structural\_Formula)} Ф 0 ^ *число шагов процесса* = 2 & *реакции процесса(1)* e {(v: *химические реакции)* (3 (v1: *результаты(у)) сокращенная структурная формула* (v1) =

Short\_Structural\_Formula) & (v (v1: *реагенты(у))* FirstClass е *класс вещества по функциональной группе(уХ))* & *органические соединения* п *реагенты*(v) с SubsCould}),

({(v: *химические реакции) органические соединения* п реагенmы(v) с SubsCould & (v (v1: *реагенты(у)) класс вещества по функциональной группе(уХ)* е FirstClass) & (3 (v1: *результаты(у)) сокращенная структурная формула* (v1) = Short\_Structural\_Formula)} = 0 ^

М.1) *число шагов процесса* > 2 &

М.23) *реакции процесса(1)* е {(v: *химические реакции)* (v (v1: *реагенты(у)) класс вещества по функциональной группе(уХ)* е FirstClass) & *органические соединения* п *реагенты*(v) с SubsCould} &

М.5) *реакции процесса(число шагов процесса-1)* е {(v: *химические реакции)* (3 (v1: *результаты(у)) сокращенная структурная формула* (v1) = Short\_Structural\_Formula)} &

М.10) (v1: I[2, *число шагов процесса-2]) реакции процесса(\Х)* е {(v: *химические реакции) реагенты*(v) с *результаты(реакции* nроцесса(v1-1)) и *дополнительные вещества(уХ)* & *(реагенты(у)* п *органические соединения)* с SubsCould}

К данному классу принадлежат также задачи со следующими входными данными:

1. Data\_In = <Name\_Compound, FirstSub, ClassCould>, где сорт Name\_Compound: органические соединения сорт FirstSub: органические соединения

сорт ClassCould: {} *классы веществ по функциональным группам*

Связи входных парам етров с терминами онтологии органиче ской химии задают условия (С.1) - (С.3), (С.8) - (С.10).

Прив д м м тод р ш ния данной задачи, записанный на язык прикладной логики.

/({(v: *химические реакции)* {(vl: *органические соединения* п

*реагенты(у)) класс вещества по функциональной группе^1)}* п ClassCould Ф 0 & FirstSub е *реагенты*(v) & Name\_Compound е *результат*b/(v)} Ф 0 ^ *число шагов процесса* = 2 & *реакции процесса(1)* е {(v: *химические реакции)* Name\_Compound е *результаты(у)* & FirstSub е *реагенты*(v) & {(vl: *органические соединения* п *реагенты(у)) класс вещества по функциональной группе(у1)}* п ClassCould Ф 0}),

({(v: *химические реакции)* {(vl: *органические соединения* п *реагенты(уУ) класс вещества по функциональной группе^1)}* п ClassCould Ф 0 & FirstSub е *реагенты*(v) & Name\_Compound е *результаты(у)}* = 0 ^

М.1) *число шагов процесса* > 2 &

М.21) *реакции процесса(1)* е {(v: *химические реакции)* FirstSub е *реагенты*(v) & (& (vl: *органические соединения* п*реагенты(у)) класс вещества по функциональной группе(у1)* е ClassCould)} &

М.3) *реакции процесса(число шагов процесса-1)* е {(v: *химические реакции)* Name\_Compound е *результаты(у)}* &

М.10) (vl: I[2, *число шагов процесса-2*])*реакции процесса^Х)* е {(v: *химические реакции) реагенты(у)* с *результаты(реакции процесса(у1Л))* и *дополнительные вещества(у\)* & {(vl: *органические соединения* п*реагенты(у)) класс вещества по функциональной группе^\)}* п ClassCould Ф 0)}

1. Data\_In = <Short\_Structural\_Formula, FirstSub, ClassCould>, гд сорт Short Structural Formula: возможные структурные формулы сорт FirstSub: органические соединения

сорт ClassCould: {} *классы веществ по функциональным группам*

Связи входных парам тров и т рминов онтологии органич ской химии задают условия (С.2) - (С.4), (С.8) - (С.10). М етод ре ш е ния задачи отличается от приведенного выше использованием формулы (М.5) вм е сто (М.3).

1. Data\_In = <Name\_Compound, FirstClass, ClassCould>, где сорт Name\_Compound:органuческuе соединения сорт FirstClass:классы веществ по функциональным группам сорт ClassCould:{} классы веществ по функциональным группам

Связи входных парам тров и т рминов онтологии органич ской химии задают условия (С.1) - (С.3), (С.8) - (С.10).

Прив д м м тод р т ния данной задачи, записанный на язык прикладной логики.

/({(v: *химические реакции)* {(v1: *органические соединения* п

*реагенты(у)) класс вещества по функциональной группе^1)}* п ClassCould Ф

1. & FirstClass e {(v1: реагенты(v)) *класс вещества по функциональной группе^1)}* & Name\_Compound e *результаты(у)}* Ф 0 ^ *число шагов процесса* = 2 & *реакции процесса(1)* e {(v: *химические реакции*)

Name\_Compound e *результаты(у)* & FirstClass e {(v1: реагенты(v)) *класс вещества по функциональной группе^1)}* & {(v1: *органические соединения* п *реагенты(у)) класс вещества по функциональной группе^1)}* п ClassCould Ф

0)}),

({(v: *химические реакции)* {(v1: *органические соединения* п *реагенты(уУ) класс вещества по функциональной группе^1)}* п ClassCould Ф 0) & FirstClass e {(v1: реагенты(v)) *класс вещества по функциональной группе^1)}* & Name\_Compound e *результаты*(v)} = 0 ^

М.1) *число шагов процесса* > 2 &

М.22) *реакции процесса(1)* e {(v: *химические реакции)* FirstClass e {(v1: реагенты(v)) *класс вещества по функциональной группе^1)}* & {(v1: *органические соединения* п *реагенты(уУ) класс вещества по функциональной группе^1)}* п ClassCould Ф 0)} &

М.3) *реакции процесса(число шагов процесса*-1) e {(v: *химические реакции)* Name\_Compound e *результаты(у)}* &

М.10) (v1: I[2, *число шагов процесса-2]) реакции процесса^1)* е {(v: *химические реакции) реагенты*(v) с *результаты(реакции процесса(у1-\))* и *дополнительные вещества(уХ)* & {(v1: *органические соединения* п *реагенты(у)) класс вещества по функциональной группе(уХ)}* п ClassCould \* 0}

1. Data\_In = <Short\_Structural\_Formula, FirstClass, ClassCould>, где сорт Short\_Structural\_Formula: возможные структурные формулы сорт FirstClass: классы веществ по функциональным группам сорт ClassCould: {} классы веществ по функциональным группам

Связи входных парам тров и т рминов онтологии органич ской химии задают условия (С.2) - (С.4), (С.8) - (С.10). Метод р ешения задачи отличается от приведенного выше использованием формулы (М.5) вместо (М.3).

1. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПУТИ СИНТЕЗА СОЕДИНЕНИЯ, ЕСЛИ ЗАДАНО СОЕДИНЕНИЕ, ПРИНАДЛЕЖАЩЕЕ МНОЖЕСТВУ СОЕДИНЕНИЙ ПЕРВОГО ШАГА СИНТЕЗА, И СОЕДИНЕНИЯ, КОТОРЫЕ ДОЛЖНЫ ПРИНИМАТЬ УЧАСТИЕ В ПРОЦЕССЕ СИНТЕЗА

Сущ е ствуют н е сколько видов входных парам етров данной задачи. В п рвом случа п рвый входной парам тр зада т названи органич ского со дин ния, которо тр бу тся синт зировать, второй - со дин ни , принадл жащ множ ству со дин ний п рвого шага синт за, а тр тий - множество соединений, которые должны принимать участие в процессе синт за. Во втором случа п рвый входной парам тр зада т краткую структурную формулу органич ского со дин ния, которо тр бу тся синтезировать, второй - со единение, принадлежаще е множе ству со единений первого шага синтеза, а третий - множество соединений, которые должны принимать участи в проц сс синт за.

Определим имя выходного параметра задач данного класса: Result = <Process>. Сорт выходного параметра и его связи с терминами онтологии органич ской химии прив д ны в п. 1.

Определим входные параметры данной задачи (первый случай), если задано название органического соединения, которое требуется синтезировать, со дин ни , принадл жащ множ ству со дин ний п рвого шага, а такж множество органических соединений, которые должны принимать участие в процессе синтеза: Data\_In = <Name\_Compound, FirstSub, SubsWill>. Зададим сорта данных парам етров:

сорт Name\_Compound: *органические соединения* сорт FirstSub: *органические соединения* сорт SubsWill: *{}органические соединения*

Cвязи входных параметров с терминами онтологии органиче ской химии задают условия (C.l) - (C.3), (C.8), (С.11) - (С.13).

Прив д м м тод р ш ния данной задачи, записанный на язык прикладной логики.

/({(v: *химические реакции) органические соединения* п *реагенты(у)* = SubsWill & FirstSub е *реагенты*(v) & Name\_Compound е *результаты(у)}* Ф 0 ^ *число шагов процесса* = 2 & *реакции процесса(1)* е {(v: *химические реакции)* Name\_Compound е *результаты*(v) & FirstSub е *реагенты(у)* & *органические соединения* п*реагенты(у)* = SubsWill}),

({(v: *химические реакции) органические соединения* п *реагенты(у)* = SubsWill & FirstSub е *реагенты*(v) & Name\_Compound е *результаты(у')}* = 0

М.1) *число шагов процесса* > 2 &

М.23) *реакции процесса(1)* е {(v: *химические реакции)* First Sub е *реагенты(у)* & *(органические соединения п реагенты(у))* с SubsWill} &

М.3) *реакции процесса(число шагов процесса-1) е {(v: химические реакции)* Name\_Compound е *результаты(у)}* &

М.12) *дополнительные вещества(число шагов процесса-1)* п *органические соединения =* (SubsWill \ (u(v1: I[2, *число шагов процесса-2*]) *дополнительные вещества(уХ))* \ *вещества процесса(1))* &

М.13) *дополнительные вещества(2)* п *органические соединения* = (SubsWill \ *вещества процесса(1))* п*реагенты(реакции процесса(2))* &

М.14) (& (v1: I[2, *число шагов процесса-2*])*реакции процесса(^Х)* e {(v: *химические реакции) реагенты*(v) с *результаты(реакции процесса(у1-Х))* и *дополнительные* вещества(v1)) *& дополнительные вещества(уХ)* п *органические соединения =* (SubsWill \ *дополнительные вещества^1-1))* п *реагенты(реакции* nроцесса(v1)))/

Прив д м комм нтарий к м тоду.

Если существует такая реакция, что множество органических со единений - ее р е агентов совпадает с множе ством SubsWill, в еще ство First Sub принадлежит множеству ее реагентов, а множеству ее результатов принадл е жит со е дин е ни е Name\_Compound, то число тагов химич е ского проц сса равно двум, а данная р акция буд т р акци й п рвого тага проц сса. Если такой р акции н т, то тр бу мый проц сс синт за облада т свойствами М.1, М.3, М.12, М.13, М.14, а также следующим свойством:

М.23) реакцией первого тага будет реакция, органические соединения - р аг нты которой принадл жат множ ству SubsWill и множ ству р аг нтов которой принадл жит со дин ни First Sub;

Очевидно, что задача может иметь множество ретений. Метод ретения представля ет собой м етод поиска вывода в исчисл е нии. Условие на начально е состояние процесса вывода задает свойство М.23, условия окончания вывода - свойства М.3 и М.12, а правила работы исчисл е ния задаются свойствами М.13 - М14.

Опр е д елим входны е парам етры данной задачи (второй случай), е сли заданы краткая структурная формула органич ского со дин ния, которо тр бу тся синт зировать, со дин ни , принадл жащ множ ству со дин ний п рвого шага, а такж со дин ния, которы могут принимать участи в проц сс синт за: Data\_In = <Short\_Structural\_Formula, FirstSub, SubsWill>. Зададим сорта данных парам етров:

сорт Short\_Structural\_Formula: *возможные структурные формулы* сорт FirstSub: *органические соединения* сорт SubsWill: {} *органические соединения*

Cвязи входных парам етров с терминами онтологии органиче ской химии задают условия (C.2) - (C.4), (C.8), (С.11)-(С.13). Метод решения задачи отличается от приведенного выше использованием формулы (М.5) вместо (М.3).

Определим входные параметры данной задачи (третий случай), если заданы соединение, которое требуется синтезировать, класс соединений, пр дставит ль которого принадл жит множ ству со дин ний п рвого шага, а такж со дин ния, которы могут принимать участи в проц сс синт за: Data\_In = <Name\_Compound, FirstClass, SubsWill>. Зададим сорта данных парам етров:

сорт Name\_Compound: органические соединения сорт FirstClass: классы веществ по функциональным группам сорт SubsWill: {} органические соединения Связи входных параметров с терминами онтологии органиче ской химии задают условия (С.1), (С.5), (C.3), (C.8), (С.11) - (С.13).

Прив д м м тод р ш ния данной задачи, записанный на язык прикладной логики.

/({(v: *химические реакции) органические соединения* п *реагенты(у)* = SubsWill & FirstClass е {(v1: *реагенты(уУ) класс вещества по функциональной группе^!)}* & Name\_Compound е *результаты(у)}* \* 0 ^ *число шагов процесса* = 2 & *реакции процесса(1)* е {(v: *химические реакции)* Name\_Compound е *результаты*(v) & (v (v1: *реагенты(у))* FirstClass е *класс вещества по функциональной группе(уХ))* & *органические соединения* п *реагенты*(v) = SubsWill}),

({(v: *химические реакции) органические соединения* п *реагенты*(v) = SubsWill & FirstClass е {(vl: *реагенты(у)) класс вещества по функциональной группе^1)}* & Name\_Compound е *результаты*(v)} = 0 ^

М.1) *число шагов процесса* > 2 &

М.24) *реакции процесса(1)* е {(v: *химические реакции)* (v (vl: реагенты(v)) *класс вещества по функциональной группе(у1)* = FirstClass) & *(органические соединения* п *реагенты(у))* с SubsWill} &

М.3) *реакции процесса(число шагов процесса-1)* е {(v: *химические реакции)* Name\_Compound е *результаты(у)}* &

М.12) *дополнительные вещества(число шагов процесса-1)* п *органические соединения =* (SubsWill \ (u(v1: I[2, *число шагов процесса-2*]) *дополнительные вещества(у\))* \ *вещества процесса(1))* &

М.13) *дополнительные вещества(2)* п *органические соединения* = (SubsWill \ *вещества процесса(1))* п*реагенты(реакции процесса(2))* &

М.14) (& (vl: I[2, *число шагов процесса-2])реакции процесса(\1)* е {(v: *химические реакции) реагенты*(v) с *результаты(реакции* процесса(v1-1)) и *дополнительные вещества(у\)) & дополнительные* вещества(v1) п *органические соединения =* (SubsWill \ *дополнительные вещества(у1А))* п *реагенты(реакции процесса(у\)))/*

Опр е д елим входны е парам етры данной задачи (ч етв ертый случай), е сли заданы краткая структурная формула со дин ния, которо тр бу тся синте зировать, класс со е дин е ний, пр е дставит ель которого принадл е жит множ ству со дин ний п рвого шага, а такж со дин ния, которы могут принимать участие в проце сс е синтеза: Data\_In = <Short\_Structural\_Formula, FirstClass, SubsWill>. Определим сорта входных парам етров:

сорт Short\_Structural\_Formula: *возможные структурные формулы* сорт FirstClass: *классы веществ по функциональным группам*

сорт SubsWill: {} органические соединения Связи входных парам етров с терминами онтологии органиче ской химии задают условия (С.3) - (С.5), (C.8), (С.10) - (С.12). Метод р ешения задачи отличается от приведенного выше использованием формулы (М.5) вместо (М.3).

К данному классу принадл жат такж задачи со сл дующими входными данными:

1. Data\_In = <Name\_Compound, FirstSub, ClassWill>, гд сорт Name\_Compound: органические соединения сорт FirstSub: органические соединения

сорт ClassWill: {} классы веществ по функциональным группам Связи входных парам етров с терминами онтологии органиче ской химии задают условия (С.1) - (С.3), (С.8), (С.13) - (С.15).

Прив д м м тод р ш ния данной задачи, записанный на язык прикладной логики.

/({(v: *химические реакции)* FirstSub е *реагенты*(v) & {(v1: *органические соединения* п *реагенты*(v) *класс вещества по функциональной группе(уХ)}* п ClassWill \* 0 & Name\_Compound е *результаты*(v)} \* 0 ^ *число шагов процесса* = 2 & *реакции процесса(1)* е {(v: *химические реакции)* FirstSub е *реагенты^)* & {(v1: *органические соединения* п *реагенты*(v) *класс вещества по функциональной группе(уХ)}* п ClassWill \* 0 & Name\_Compound е *результаты(у)}),*

{(v: *химические реакции)* FirstSub е *реагенты(у)* & {(v1: *органические соединения* п *реагенты*(v) *класс вещества по функциональной группе(уХ)}* = ClassWill & Name\_Compound е *результаты*(v)} = 0 ^

М.1) *число шагов процесса* > 2 &

М.25) *реакции процесса(1)* е {(v: *химические реакции)* FirstSub е *реагенты(у)* & {(v1: *органические соединения* п *реагенты(у) класс вещества по функциональной* группе^!)} п ClassWill \* 0} &

М.3) *реакции процесса(число шагов процесса-1) e {(v: химические реакции)* Name\_Compound e *результаты(у)}* &

М.16) {(v1: *дополнительные вещества(число шагов процесса-1)* п *органические соединения) класс вещества по функциональной* груnnе(v1)} п ClassWill = (ClassWill \ (u(v2: I[2, *число шагов процесса-2*]) {(v3: *дополнительные вещества(у2)) класс вещества по функциональной* группе^3)}) \ {(v4: *вещества процесса(1)) класс вещества по функциональной* группе^4)}) &

М.17) {(v1: *дополнительные вещества(2)* п *органические соединения) класс вещества по функциональной группе^!)}* □ (ClassWill \ {(v2: *вещества процесса(1) класс вещества по функциональной группе(уТ)})* п {(v3: *реагенты(реакции процесса(2)) класс вещества по функциональной группе(у3)}* &

М.14) (& (v1: I[2, *число шагов процесса-2*]) *реакции процесса^1)* e {(v: *химические реакции) реагенты(у)* с *результаты(реакции процесса(у1-Х))* и *дополнительные вещества(уХ)) & {(v2: дополнительные вещества*(v1) п *органические соединения класс вещества по функциональной группе(у2)}* = (ClassWill \ {(v3: *дополнительные* вещесmва(v1-1)) *класс вещества по функциональной группе(уТ)})* п {(v4: *реагенты(реакции процесса(уХ)) класс вещества по функциональной группе(уТ)*} /

Очевидно, что задача может иметь множество ретений. Метод ретения представля ет собой м етод поиска вывода в исчисл е нии. Условие на начально е состояние проце сса вывода задает свойство М.25, условия окончания вывода - свойства М.3 и М.16, а правила работы исчисления задаются свойствами М.17 - М.18.

1. Data\_In = <Short\_Structural\_Formula, FirstSub, ClassWill>, гд сорт Short\_Structural\_Formula: возможные структурные формулы сорт FirstSub: органические соединения

сорт ClassWill: {} *классы веществ по функциональным группам*

Связи входных параметров с терминами онтологии органиче ской химии задают условия (С.2) - (С.4), (С.8) - (С.10), (С.18). Метод решения задачи отличается от прив еденного выше использованием формулы (М.5) вм е сто (М.3).

1. Data\_In = <Name\_Compound, FirstClass, ClassWill>, гд сорт Name\_Compound: органические соединения сорт FirstClass: классы веществ по функциональным группам сорт ClassWill: {} классы веществ по функциональным группам

Связи входных параметров с терминами онтологии органиче ской химии задают условия (С.1) - (С.3), (С.8), (С.13) - (С.15).

Прив д м м тод р ш ния данной задачи, записанный на язык прикладной логики.

/({(v: *химические реакции)* FirstClass е {(vl: *реагенты(у)) класс вещества по функциональной группе^\)}* & {(vl: *органические соединения* п*реагенты(у) класс вещества по функциональной группе^1)}* п ClassWill Ф 0 &

Name\_Compound е *результаты(у)}* Ф 0 ^ *число шагов процесса* = 2 & *реакции процесса(1)* е {(v: *химические реакции)* (v (vl: *реагенты(у))* FirstClass е *класс вещества по функциональной группе(у\))* & {(vl: *органические соединения* п *реагенты(у) класс вещества по функциональной группе^\)}* п ClassWill Ф 0 & Name\_Compound е *результаты(у)\),*

{(v: *химические реакции)* FirstClass е {(vl: *реагенты(у)) класс вещества по функциональной* группе^1)} & {(vl: *органические соединения* п*реагенты(у) класс вещества по функциональной группе^1)}* п ClassWill Ф 0& Name\_Compound е *результаты(у)}* = 0 *=>*

М.1) *число шагов процесса* > 2 &

М.26) *реакции процесса(1)* е {(v: *химические реакции)* FirstClass е {(vl: *реагенты*(v)) *класс вещества по функциональной группе^1)}* & {(vl: *органические соединения* п *реагенты*(v) *класс вещества по функциональной группе(у\)}* с ClassWill} &

М.3) *реакции процесса(число шагов процесса-1)* е {(v: *химические реакции)* Name\_Compound е *результаты(ч)}* &

М.16) {(v1: *дополнительные вещества(число шагов процесса-1)* п *органические соединения) класс вещества по функциональной группе^1)}* п ClassWill = (ClassWill \ (u(v2: I[2, *число шагов процесса-2*]) {(v3: *дополнительные вещества(у2)) класс вещества по функциональной* группе^3)}) \ {(v4: *вещества процесса(1)) класс вещества по функциональной группе(чА-)})* &

М.17) {(v1: *дополнительные вещества(2)* п *органические соединения) класс вещества по функциональной группе(чХ)}* □ (ClassWill \ {(v2: *вещества процесса(1) класс вещества по функциональной группе(у2)})* п {(v3: *реагенты(реакции процесса(2)) класс вещества по функциональной группе(ч3)}* &

М.14) (& (v1: I[2, *число шагов процесса-2*]) *реакции процесса^1)* е {(v: *химические реакции) реагенты(у)* с *результаты(реакции процесса(у1-\))* и *дополнительные* вещесmва(v1)) *& {(v2: дополнительные вещества(уХ)* п *органические соединения класс вещества по функциональной группе(уТ)}* = (ClassWill \ {(v3: *дополнительные* вещесmва(v1-1)) *класс вещества по функциональной группе(у2)})* п {(v4: *реагенты(реакции процесса(уХ)) класс вещества по функциональной группе(уТ)*} /

1. Data\_In = <Short\_Structural\_Formula, FirstClass, ClassWill>, где сорт Short\_Structural\_Formula: возможные структурные формулы сорт FirstClass: классы веществ по функциональным группам сорт ClassWill: {} классы веществ по функциональным группам

Связи входных параметров с терминами онтологии органиче ской химии задают условия (С.2) - (С.4), (С.9), (С.13) - (С.15). Метод решения задачи отличается от прив еденного выше использованием формулы (М.5) вм е сто (М.3).

2 ПРИЛОЖЕНИЕ 7. ПРИМЕРЫ КЛАССОВ ЗАДАЧ ДЛЯ ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ

Ниже приведены примеры классов задач, соответствующих четырем метаклассам, и задач, соответствующих этим классам. В примерах опустим опр д л ни сортов входных и выходных парам тров, поскольку их можно опр д лить на основ связ й парам тров с т рминами онтологии.

1. Метакласс задач “A”

Прим ер 1. Для первого тага процесса известны следующие параметры т рмодинамич ской сист мы: внутр нняя эн ргия, энтальпия, давл ни и объем. Не обходимо найти энергию Гиббса на этом таге.

Данный класс задач относится к модулю "Основы термодинамики”. Имена входных парам етров класса задач: {ВНУТРЕННЯЯ ЭНЕРГИЯ,

ЭНТАЛЬПИЯ, ДАВЛЕНИЕ, ОБЪЕМ}. Имя выходного парам етра класса задач: {ЭНЕРГИЯ ГИББСА}. Связи парам етров с т ерминами онтологии физич е ской химии: ВНУТРЕННЯЯ ЭНЕРГИЯ = внутр е нняя эн ергия(1), ЭНТАЛЬПИЯ = энтальпия(1), ДАВЛЕНИЕ = давление(1), ОБЪЕМ = объем(1), ЭНЕРГИЯ ГИББСА = энергия Гиббса(1).

Прим р задачи данного класса: Внутр нняя эн ргия т рмодинамич ской

системы равна 6344 Дж, энтальпия - 2340 Дж, давление - 4300 Па, и объем - 2 л. Н обходимо найти эн ргию Гиббса.

Дано: ВНУТРЕННЯЯ ЭНЕРГИЯ = 6344, ЭНТАЛЬПИЯ = 2340, ДАВЛЕНИЕ = 4300, ОБЪЕМ = 2 Найти: ЭНЕРГИЯ ГИББСА

Прим ер 2: Для первого тага процесса известны молярные изобарная и изохорная т пло мкости открытой т рмодинамич ской сист мы, общ количество вещества системы, масса и плотность в начальный момент наблюде ния. Также изв е сте н объ е м сист е мы для второго шага. Н е обходимо найти колич ство т плоты, получ нной или пот рянной сист мой м жду двумя шагами.

Данный класс задач относится к модулю "Основы термодинамики”. Имена входных парам етров задачи: {тепло емкость\_1, тепло емкость\_2, количе ство на п рвом шаг , масса на п рвом шаг , плотность на п рвом шаг , объ м на втором шаг е}. Связи входных парам етров с т ерминами онтологии

физич е ской химии: те пло е мкость\_1 = изобарная т е пло е мкость(1),

т е пло е мкость\_2 = изохорная т е пло е мкость(1), колич е ство на п ервом шаг е = количество(1), масса на первом шаге = масса(1), плотность на первом шаге = плотность(1), объем на втором шаге = объем(2). Условия задачи: тип системы(1) = открытая. Имя выходного парам етра задачи: теплообм ен на втором шаг е. Связь выходного парам етра с т ерминами онтологии:

т плообм н на втором шаг = т плообм н(2).

Прим ер задачи данного класса: Молярная изобарная теплоемкость

открытой т рмодинамич ской сист мы равна 2300 Дж/моль, а молярная изохорная те пло е мкость - 1420 Дж/моль. Общ е е колич е ство вещ е ства ингр ди нтов сист мы составля т 23.2 моль, суммарная масса - 340 г, а

ср е дняя плотность - 1000 г/л. Также изв е стно, что объ е м сист е мы в

последующий мом ент наблюдения равен 1.2 л. Необходимо найти колич ство т плоты, получ нной или пот рянной сист мой м жду двумя мом ентами наблюдения.

Дано: теплоемкость\_1 = 2300, тепло емкость\_2 = 1420, количе ство на п ервом шаг е = 23.2, масса на п ервом шаг е = 340, плотность на п ервом шаг е = 1000, объ е м на втором шаг е = 1.2 Найти: т плообм н на втором шаг

Прим ер 3: Двухфазная закрытая система “раствор-газ”, находящаяся в фазовом равнов е сии, состоит из изв е стного набора в е щ е ств. Найти давл ени е в систем е, исходя из предположения, что раствор является иде альным, е сли изв стны такж молярны конц нтрации вс х в щ ств в раствор , темп ература системы и объем раствора.

Данный класс задач относится к модулю ”Т ермодинамика. Физич е ски е свойства”.

Им на входных парам тров задачи: { ТЕМПЕРАТУРА, МНОЖЕСТВО

ИНГРЕДИЕНТОВ, ОБЪЕМ ФАЗЫ, КОНЦЕНТРАЦИЯ ИНГРЕДИЕНТОВ}. Связи входных парам тров с т рминами онтологии физич ской химии: ТЕМПЕРАТУРА = те мп ература(1), МНОЖЕСТВО ИНГРЕДИЕНТОВ = вс е ингредиенты системы(1), ОБЪЕМ ФАЗЫ = объем(1, жидкая),

(i: все ингредиенты системы(1)) КОНЦЕНТРАЦИЯ ИНГРЕДИЕНТОВ (i) = молярная конц е нтрация(1, жидкая, i)

Условия задачи: тип сист е мы(1) = закрытая & фазово е равнов е си е (1) = TRUE & вс е фазы сист е мы(1) = {газовая, жидкая} & ид е альность(1, жидкая) = ид альный..

Имя выходного парам етра задачи: ДАВЛЕНИЕ.

Связь выходного парам етра с т ерминами онтологии: ДАВЛЕНИЕ = давл ни (1).

Прим ер задачи данного класса: Двухфазная закрытая система “раствор-

газ”, находящаяся в фазовом равновесии, состоит из воды (300 моль/л в раствор ), сахара (23 моль/л в раствор ) и глиц рина (14 моль/л в раствор ). Те мп ература сист е мы 300 K, объ ем раствора 2.3 л. Найти давл е ни е в сист е м е, исходя из пр дполож ния, что раствор явля тся ид альным.

Дано: ТЕМПЕРАТУРА = 300, МНОЖЕСТВО ИНГРЕДИЕНТОВ = {H2O, C12H22O11, глицерин}, ОБЪЕМ ФАЗЫ = 2.3, КОНЦЕНТРАЦИЯ

ИНГРЕДИЕНТОВ(Н20) = 300, КОНЦЕНТРАЦИЯ

ИНГРЕДИЕНТ ОВ (C12H22011) = 23, КОНЦЕНТРАЦИЯ

ИНГРЕДИЕНТ ОВ (глиц ерин) = 14.

Найти: ДАВЛЕНИЕ

Прим ер 4: В реакции CO + Cl2 = COCl2 известны исходные молярные концентрации реагентов. Реакция протекает при постоянном объеме. Вычислить давление в мом ент, когда прореагировало некоторое колич е ство CO, сли изв стно знач ни т мп ратуры в начал р акции и в указанный момент.

Данный класс задач относится к модулю "Термодинамика. Связь физич еских и химиче ских свойств".

Им ена входных парам етров задачи: {ТЕМПЕРАТУРА\_1, ТЕМПЕРАТУРА\_2, КОНЦЕНТРАЦИЯ^, КОНЦЕТРАЦИЯ\_2, КОНЦЕНТРАЦИЯ\_3}.

Связи входных парам етров с т ерминами онтологии физич е ской химии: ТЕМПЕРАТУРА\_1 = т е мп ература(1), ТЕМПЕРАТУРА\_2 = т емп ература(2), К ОНЦЕНТРАЦИ Я\_ 1 = молярная концентрация(2, газовая, CO),

К ОНЦЕНТРАЦИ Я\_2 = молярная конц е нтрация(1, газовая, CO),

К ОНЦЕНТРАЦИ Я\_3 = молярная конц ентрация(1, газовая, Cl2).

Условия задачи: тип систе мы(1) = закрытая, тип систе мы(2) = закрытая, вс е ингр едиенты системы(1) = {CO, Cl2}, все ингредиенты системы(2) = {CO, Cl2, COCl2}, вс е фазы систе мы(1) = {газовая}, вс е фазы сист е мы(2) = газовая}, вс е ре акции сист е мы(1) = {CO+Cl2=COCl2}, вс е р е акции сист е мы(2) =

{CO+Cl2=COCl2}.

Имя выходного парам етра задачи: ДАВЛЕНИЕ.

Связь выходного парам етра с т ерминами онтологии: ДАВЛЕНИЕ = давл е ни е (2).

Прим ер задачи данного класса: В реакции CO + Cl2 = COCl2 исходны е

[CO] = 0.05 моль/л; [Cl2] = 0.06 моль/л. Реакция протекает при постоянном объем е. Вычислить давлени е в мом ент, когда прор е агировало 50% CO, е сли темп ература в начальный в начале р е акции была 20°C, а в указанный мом ент повысилась до 50°C.

Дано: КОНЦЕНТРАЦИЯМ = 0.025, К ОНЦЕНТРАЦИ Я\_2 = 0.05,

КОНЦЕНТРАЦИЯ\_3 = 0.06.

Найти: ДАВЛЕНИЕ

1. Метакласс задач “B”

Прим ер 1: Известна температура закрытой однокомпонентной системы, находящейся в фазовом равнов е сии. Найти вс е фазы системы.

Данный класс задач относится к модулю "Т ермодинамика. Физич е ски е свойства".

Им е на входных парам етров задачи: {ИНГРЕДИЕНТ СИСТЕМЫ,

ТЕМПЕРАТУРА}.

Связи входных парам етров с т ерминами онтологии физич е ской химии:

вс е ингр е ди енты систе мы(1) = {ИНГРЕДИЕНТ СИСТЕМЫ},

ТЕМПЕРАТУРА = т е мп ература(1).

Условия задачи: тип системы(1) = закрытая, фазовое равновесие (1) = TRUE. Имя выходного парам етра задачи: ФАЗЫ СИСТЕМЫ.

Связь выходного парам етра с т ерминами онтологии: ФАЗЫ СИСТЕМЫ = вс е фазы систе мы(1).

Прим р задачи данного класса: Т мп ратура закрытой сист мы,

находящейся в фазовом равновесии, равна 180 °C. Единственным

ингр е ди е нтом систе мы явля ется вода. Найти вс е фазы сист емы.

Дано: ИНГРЕДИЕНТ СИСТЕМЫ = вода, ТЕМПЕРАТУРА = 453 Найти: ФАЗЫ СИСТЕМЫ

Прим ер 2: Паралл ельно идущие в открытой систем е р е акции COCl2 = CO + Cl2 и H2 + Cl2 = 2HCl наблюдались три раза, при этом известна продолжит льность вр м ни м жду вторым и тр тьим мом нтами наблюдения. Известны также концентрации Н2 и COCl2 в начале эксперимента и начальная температура системы. Известно, что первая реакция завершилась к концу эксперимента. Найти ингредиенты системы в конце эксперимента.

Данный класс задач относится к модулю "Химич е ская кин етика".

Им е на входных парам етров задачи: {ВРЕМЯ, ТЕМПЕРАТУРА,

КОНЦЕНТРАЦИЯ^, К ОНЦЕНТРАЦИ Я\_2}.

Связи входных парам тров с т рминами онтологии физич ской химии: ВРЕМЯ = время(3), ТЕМПЕРАТУРА = температура(1), КОНЦЕНТРАЦИЯ\_ 1 = молярная конц ентрация(1, H2), К ОНЦЕНТРАЦИ Я\_2 = молярная

концентрация(1, C0Cl2).

Условия задачи: тип системы(1) = открытая, тип системы(2) = открытая, тип системы(3) = открытая, все реакции системы(1) = {C0Cl2=C0+Cl2,

H2+Cl2=2HCl}), все реакции системы(2) = {C0Cl2 = C0+Cl2, H2+Cl2=2HCl}), все реакции системы(3) = {H2+Cl2=2HCl}), все ингредиенты системы(1) з {H2, C0Cl2}.

Имя выходного парам етра задачи: ИНГРЕДИЕНТЫ СИСТЕМЫ.

Связь выходного парам етра с терминами онтологии: ИНГРЕДИЕНТЫ СИСТЕМЫ = вс ингр ди нты сист мы(3).

Прим ер задачи данного класса: Паралл ельно идущие в открытой систем е

реакции C0Cl2 = C0 + Cl2 и H2 + Cl2 = 2HCl наблюдались три раза - в мом ент начала эксперим ента, в некоторый мом ент посл е начала, и в момент ч ерез 1.2 с посл второго мом нта наблюд ния. Изв стны конц нтрации двух ингредиентов в начале эксперимента: H2 (4.73 моль/л) и C0Cl2 (0.3 моль/л), начальная те мп ература сист емы: 457 K. Изв е стно, что п ервая р е акция зав ршилась к концу эксп рим нта. Найти ингр ди нты сист мы в конц эксп рим нта.

Дано: ВРЕМЯ = 1.2, ТЕМПЕРАТУРА = 457, КОНЦЕНТРАЦИЯМ = 4.73, КОНЦЕНТРАЦИЯ\_2 = 0.3.

Найти: ИНГРЕДИЕНТЫ СИСТЕМЫ.

1. Метакласс задач “C”

Прим ер 1: Изве стно давл е ни е водяного пара над раствором CaCl2. Также изв е стны массы воды и CaCl2 и те мп ература в систе м е. Найти изотонич е ский коэффициент.

Данный класс задач относится к модулю ”Т ермодинамика. Физич е ски е свойства”.

Им ена входных парам етров задачи: {ТЕМПЕРАТУРА, ДАВЛЕНИЕ,

МАССА\_1, МАССА\_2}.

Связи входных парам тров с т рминами онтологии физич ской химии: ТЕМПЕРАТУРА = температура(1), ДАВЛЕНИЕ = давление (1), МАССА\_1 = масса(1, CaCl2), МАССА\_2= масса(1, жидкая, H2O).

Условия задачи: тип системы(1) = закрытая, все ингредиенты системы(1) = {CaCl2, H2O}), вс е фазы сист емы(1) = {жидкая}.

Имя выходного парам етра задачи: КОЭФФИЦИЕНТ.

Связь выходного парам етра с терминами онтологии: КОЭФФИЦИЕНТ = изотониче ский коэффициент(1, жидкая).

Прим р задачи данного класса: Давл ни водяного пара над раствором

66.6 г CaCl2 в 90 г H2O при 90°C равно 56690 Па. Чему равен изотонич еский коэффициент?

Дано: ТЕМПЕРАТУРА = 363, ДАВЛЕНИЕ = 56690, МАССА\_1 = 66.6,

МАССА\_2 = 90

Найти: КОЭФФИЦИЕНТ

Прим ер 2: Паралл ельно идущие в открытой систем е р е акции COCl2 = CO + Cl2 и H2 + Cl2 = 2HCl наблюдались три раза, при этом известна продолжит льность вр м ни м жду вторым и тр тьим мом нтами наблюдения. Известны также концентрации H2 и COCl2 в начале эксперимента и начальная температура системы. Известно, что первая р акция зав ршилась к концу эксп рим нта. Найти скорость прямой р акции H2 + Cl2 = 2HCl в конце эксперимента.

Данный класс задач относится к модулю "Химич е ская кин етика".

Им на входных парам тров задачи: { ВРЕМЯ, ТЕМПЕРАТУРА,

КОНЦЕНТРАЦИЯ^, КОНЦЕНТРАЦИЯ\_2}.

Связи входных парам тров с т рминами онтологии физич ской химии: ВРЕМЯ = время(3), ТЕМПЕРАТУРА = температура(1), КОНЦЕНТРАЦИЯ\_ 1

= молярная конц ентрация(1, H2), К ОНЦЕНТРАЦИ Я\_2 = молярная

концентрация(1, Cl2).

Условия задачи: тип системы(1) = открытая, тип системы(2) = открытая, тип системы(3) = открытая, вс е ре акции системы(1) = {COCl2=CO+Cl2, H2+Cl2=2HCl}), вс е р е акции систе мы(2) = {COCl2= CO+Cl2, H2+Cl2=2HCl}), вс е р е акции сист е мы(3) = {H2+Cl2=2HCl}, вс е ингреди е нты сист е мы(1) = {H2, COCl2}, вс е ингр е ди е нты систе мы(2) = {H2, COCl2, Cl2, 2HCl}), вс е ингр е ди е нты систе мы(3) = {H2, Cl2, 2HCl})}.

Имя выходного парам етра задачи: СКОРОСТЬ.

Связь выходного парам етра с терминами онтологии: СКОРОСТЬ = скорость прямой(3, H2+Cl2=2HCl).

Пример задачи данного класса: Параллельно идущие в открытой системе реакции COCl2 = CO + Cl2 и H2 + Cl2 = 2HCl наблюдались три раза - в мом ент начала эксперим ента, в некоторый мом ент посл е начала, и в момент ч ерез 1.2 с посл второго мом нта наблюд ния. Изв стны конц нтрации двух ингредиентов в начале эксперимента: H2 (4.73 моль/л) и COCl2 (0.3 моль/л), начальная те мп ература сист емы: 457 K. Изв е стно, что п ервая р е акция завертилась к концу эксперим ента. Найти скорость прямой р е акции H2 + Cl2 = 2HCl в конц эксп рим нта.

Дано: ВРЕМЯ = 1.2, ТЕМПЕРАТУРА= 457,КОНЦЕНТРАЦИЯМ = 4.73,

КОНЦЕНТРАЦИЯ\_2 = 0.3.

Найти: СКОРОСТЬ.

1. Метакласс задач “D”

Прим ер 1: Известна температура, при которой кристаллизуется водный раствор н е ко е го вещ е ства. Такж е изв е стна масса воды и масса этого веще ства. Опр еделить степень диссоциации этого вещества.

Данный класс задач относится к модулю "Т ермодинамика. Физич е ски е свойства".

Им е на входных парам етров задачи: {ИНГРЕДИЕНТ, ТЕМПЕРАТУРА, МАССА\_1, МАССА\_2}.

Связи входных парам тров с т рминами онтологии физич ской химии: ИНГРЕДИЕНТ е все ингр едиенты системы(1), температура замерзания(1, жидкая), МАССА\_1 = масса(1, жидкая, ИНГРЕДИЕНТ), МАССА\_2 = масса(1, жидкая, H20).

Условия задачи: вс е фазы систе мы(1) = {жидкая}, вс е ингреди е нты сист е мы(1) = {H20, ИНГРЕДИЕНТ}.

Имя выходного парам етра задачи: СТЕПЕНЬ.

Связь выходного парам етра с терминами онтологии: СТЕПЕНЬ = сте п е нь диссоциации(1, жидкая, ИНГРЕДИЕНТ).

Прим ер задачи данного класса: Раствор, содержащий 0.85 г хлорида

цинка в 125 г воды, кристаллизу ется при -0.23°C. Опр еделить степень диссоциации соли.

Дано: ИНГРЕДИЕНТ = ZnCl2, ТЕМПЕРАТУРА = 272.77, МАССА\_1 = 125, МАССА\_2 = 0.85 Найти: СТЕПЕНЬ

Прим ер 2: Найти массовую долю некоторого веще ства в бинарном водном раствор изв стной массы, получ нном от см шивания н скольких бинарных водных растворов, про каждый из которых изв е стно: объ е м, плотность и массовая доля растворенного в еще ства.

Данный класс задач относится к модулю ”Т ермодинамика. Физич е ски е свойства”.

Им ена входных парам етров задачи: {ИНГРЕДИЕНТ, ФАЗЫ\_1,

ПЛОТНОСТЬ, ОБЪЕМ, МАССА, ДОЛЕВАЯ МАССА, МАССА\_1}.

Связи входных парам етров с т ерминами онтологии физич е ской химии: ИНГРЕДИЕНТ е вс е ингр е ди е нты сист е мы(1), ИНГРЕДИЕНТ е вс е ингредиенты системы(2), ФАЗЫ\_1 = все фазы системы(1), (ф: ФАЗЫ\_1) ПЛОТНОСТЬ(ф) = плотность(1, ф), (ф: ФАЗЫ\_1) ОБЪЕМ(ф) = объем(1, ф), (ф: ФАЗЫ\_1) МАССА(ф) = масса(1, ф), (ф: ФАЗЫ\_1) ДОЛЕВАЯ МАССА(ф) = долевая масса(1, ф, ИНГРЕДИЕНТ), МАССА\_1 = масса(2, раствор).

Условия задачи: вс фазы сист мы(2) = { раствор}, вс ингр ди нты системы(1) = {H2O, ИНГРЕДИЕНТ}), все ингредиенты системы(2) = {H2O, ИНГРЕДИЕНТ}.

Имя выходного парам етра задачи: ДОЛЕВАЯ МАССА\_2.

Связь выходного парам етра с терминами онтологии: ДОЛЕВАЯ МАССА\_2 = дол е вая масса(2, раствор, ИНГРЕДИЕНТ)}

Прим р задачи данного класса: Какая массовая доля с рной кислоты

буд т в водном раствор массой 240 г, получ нном от см шивания двух растворов: раствора объемом 1.2 л, плотностью 1500 г/л с массовой долей кислоты 0.6 и раствора объемом 0.7 л, плотностью 1200 г/л с массовой долей кислоты 0.3?

Дано: ФАЗЫ\_1 = {раствор1, раствор2}, ИНГРЕДИЕНТ = H2SO4, ПЛОТНОСТЬ (раствор 1) = 1500, ПЛОТНОСТЬ(раствор2) = 1200,

ОБЪЕМ(раствор1) = 1.2, ОБЪЕМ(раствор2) = 0.7, МАССА\_1 = 240, ДОЛЕВАЯ МАССА(растворО = 0.6, ДОЛЕВАЯ МАССА(раствор2) = 0.3 Найти: ДОЛЕВАЯ МАССА\_2.

ПРИЛОЖЕНИЕ 8. СЦЕНАРИЙ ДИАЛОГА ТРЕХУРОВНЕВОГО РЕДАКТОРА ПРИ СОЗДАНИИ ОНТОЛОГИИ УРОВНЯ 3

Опиш м сц нарий диалога при создании онтологии уровня 3 с использованием трехуровневого редактора, использованного в специализированной оболочке для органиче ской химии.

1. Задани названия создава мой онтологии уровня 3 (названи разд ла пр е дм етной области). В этом случае происходит создани е пустой базы данных, имя которой совпада т с им н м онтологии уровня 3.
2. Опр еделение сущностей - названий множе ств объектов, изучаемых в опр е д еля е мом разд ел е пр е дм етной области. Заполняется таблица SubStances. Задани способа пр дставл ния сущност й каждого типа производится выбором одного из пр едлагаемых знач ений: {}R, {}I, {}N, {}L.
3. Опред ел е ни е структуры объ е ктов каждого типа, т.е. сопоставл ени е сущности множ ства других сущност й, которы в разд л рассматриваются компонентами. Наприм ер, для сущности с названием «химиче ские в еще ства» компонентами являются объекты сущности с названием «химические элем енты», для сущности с названи ем «химиче ские р е акции» компонентами являются объекты сущности с названием «химические вещества» и т.д. Для каждого типа сущност й опр д л ни компон нтов производится выбором множе ства типов сущносте й из пр е длагае мого списка типов.
4. Задание терминов для обозначения множеств собственных свойств сущност й. В этом случа тр хуровн вый р дактор автоматич ски г е н ериру ет названия этих множе ств; пользоват елю предоставля ется возможность эти т рмины р дактировать. Наприм р, р дактор формиру т названия «собственные свойства сущности <химические элементы>» и «собственные свойства сущности <химические вещества>». Пользователь задает свои названия: «собственные свойства химических элементов», «собственные свойства химических веществ». Редактор формирует все множе ство им ен в соответствии с задани ем типов сущностей на таге 2.
5. Задани е т ерминов для обознач е ния множе ств свойств компон е нтов сущности. В этом случае р едактор также автоматич ески формирует названия, которые пользователь может изменить. Например, редактор формирует названия «свойства компонентов <химические элементы> для сущности <химические вещества>», «свойства компонентов <химические вещества> для сущности <химические реакции>». Пользователь задает свои названия: «свойства химич е ских эл ем е нтов в е щ е ства», «свойства участников р е акций». Р дактор формиру т вс множ ство им н в соотв тствии с задани м пар <тип сущности, тип компон нта> на таг 3.
6. Задани т рминов для обознач ния множ ств названий отнот ний м жду сущностями н скольких типов - множ ств совм стных свойств сущност й. В этом случа р дактор пр доставля т возможность выбрать н сколько типов сущност й и вв сти названи т рмина. Наприм р, пользователь вводит названи е термина «зависящие от температуры свойства веществ» и указывает (выбирая элементы из списка всех сущностей), что типами сущност й, опр д ляющих это свойство, являются «химич ски ве щ е ства» и «табличны е знач е ния те мп ературы».
7. Один и тот ж т рмин онтологии мож т им ть разную сх му опр д л ния. Множ ство таких сх м для т рминов изв стно в пр дм тной области. На данном этапе пользователь задает для каждого множества терминов его название и множество возможных схем определения. При задании сх м использу тся информация, ран заданная при р дактировании.
8. Один и тот ж т рмин онтологии мож т рассматриваться как свойство объекта н екоторой сущности, так и свойство компонента этой сущности. На данном этап е пользователь опр е д еля ет множе ства названий таких т ерминов. Р дактор м таонтологии автоматич ски г н риру т названия т рминов, давая возможность пользователю задать свои термины. Редактор формирует все множество имен в соответствии с заданием пар <тип сущности, тип компон е нта> на шаг е 3.
9. Определение уровня рассмотрения химического процесса, т.е опр д л ни , объ кты каких сущност й участвуют в химич ских проц ссах, рассматриваются ли свойства их компон нт в химич ском проц сс . Пользоват лю посл доват льно задаются вопросы про вс опр д л нны им ран ее сущности и их компоненты.
10. Задани е терминов для обознач е ния общих свойств проц е сса и е го компонента. Поскольку пользователь уже определил на шаге 9 уровни рассмотрения процесса, редактор метаонтологии автоматически формирует названия для множ ств т рминов онтологии. Пользоват ль мож т эти названия изм енить.
11. Задание отношений м ежду объектами «объект - его компонент» приводит к тому, что у компонента, в свою очер едь, может быть компонент и т.д. При изуч нии прохожд ния конкр тного химич ского проц сса рассматриваются н только свойства го участников, но и свойства их компонент, и, в свою очередь, свойства их подкомпонент. Поэтому сл дующий этап состоит в опр д л нии таких уровн й рассмотр ния химиче ского проце сса. Поскольку отношения «объект - его компон ент» уже опр д л ны, р дактор посл доват льно зада т пользоват лю вопросы, пр длагая задать, каки уровни рассмотр ния нужны в данном разд л . На данном шаг использу тся информация, опр д л нная на шагах 3 и 9.
12. Сл едующий этап состоит в опр е д ел е нии названий множ е ств, опр е д ел е нных на пр е дыдуще м этап е. Р е дактор такж е автоматич е ски фор миру ет названия и дает возможность пользоват елю их изм е нить.
13. Н которы из т рминов, с помощью которых описываются свойства проц сса, им ют н сколько сх м опр д л ния. На данном этап пользоват ль зада т названия множ ств т рминов онтологии (н опр д ляя самих терминов) с такими схемами и схемы.

ПРИЛОЖЕНИЕ 9. СТРУКТУРЫ БАЗ ДАННЫХ

1. СТРУКТУРА БАЗЫ ДАННЫХ, ПРЕДНАЗНАЧЕННОЙ ДЛЯ ХРАНЕНИЯ ОПРЕДЕЛЕНИЙ ПОНЯТИЙ ОНТОЛОГИЙ УРОВНЯ 3 ДЛЯ ПРЕДМЕТНОЙ ОБЛАСТИ "ХИМИЯ"

Структура базы данных, пр дназнач нной для хран ния опр д л ний понятий онтологии уровня 3, зада тся онтологи й уровня 4 для химии. На рис. П9.1 представл е ны н е которые из таблиц базы данных и связи м е жду ними.

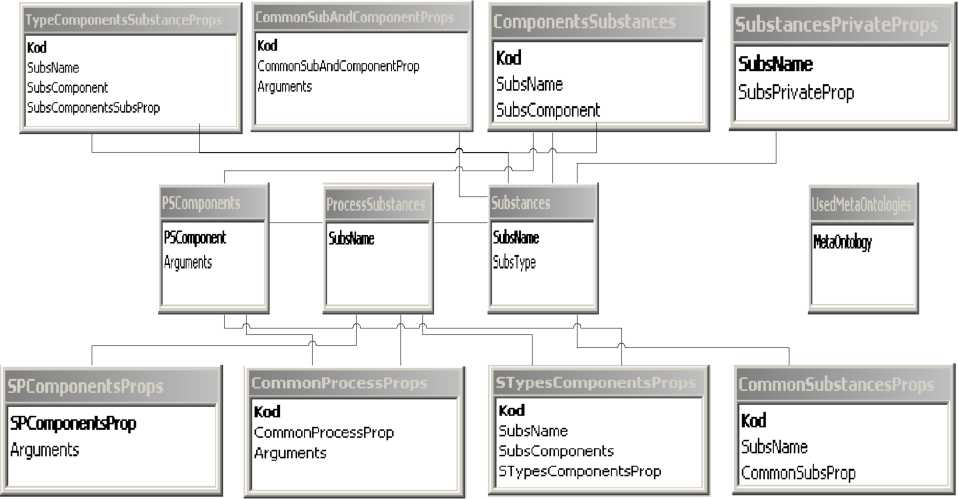


Рис. П9.1. Структура представления онтологии уровня 3.

* UseMetaOntologies - таблица, содержащая им ена онтологий уровня

1. которы использу т создава мая онтология уровня 3.

* Substances - таблица, содержащая определения типов сущностей создава мой онтологии уровня 3 (опр д ля т, каки типы объ ктов (пол Subname) изучаются в описываемом онтологией уровня 3 разделе и как они пр е дставляются (пол е SubsType). Знач е ни е м поля Subname явля ется строка, задающая имя типа сущности. Поле SubType имеет одно из следующих знач ений: {}R, {}I, {}N, {}L. Данная таблица хранит значение парам етра "Типы сущност й" онтологии уровня 4 (глава 4).
* ComponentsSubstances - таблица, содержащая определения типов компонентов сущностей для создаваемой онтологии уровня 3 (для каждого типа объ ктов (пол Subname) опр д ля т, объ кты каких типов рассматриваются компоне нтами данного (пол е Subs Component). Данная таблица связана с таблице й SubNames: знач е ниями пол е й Subname и Subs Component могут быть только те типы, которые определены в поле SubName таблицы Substances. В таблиц мож т быть н сколько строк, в которых одинаковыми являются знач ния поля Subname, но разными знач ния поля Subs Component. Данная таблица хранит значение параметра "Типы компонентов сущности" онтологии уровня 4.
* SubstancesPrivateProps - таблица, содержащая имена конструкторов, созданных с помощью конструктора "Собственные свойства сущностей" (глава 4) для создава мой онтологии уровня 3. Данная таблица связана с таблиц й Substances: значением поля SubsName может быть только тот тип сущности, который опр д л н в таблиц Substances. Знач ни поля SubPrivateProp совпадает с тем именем, которое ввел пользователь.
* TypeComponentsSubstanceProps - таблица, содержащая имена конструкторов, созданных с помощью конструктора "Свойства компонентов указанного типа". Данная таблица связана с таблице й ComponentsSubstances: знач ни м пол й SubName и SubComponent могут быть только пары знач ний пол й SubName и SubComponent таблицы ComponentsSubstances, знач ни поля SubsComponentsSubsProp совпадает с те м им енем, которо е задал пользователь.
* StypesComponentsProps - таблица, сод ржащая им на конструкторов, созданных с помощью конструктора "Общие свойства проце сса, участвующ ей в не м сущности и е е компоне нта". Данная таблица связана с таблицами ProcessSubstances и PSComponents: знач ни м поля SubName мож т быть только одно из значений поля SubName таблицы ProcessSubstances; значением поля SubComponents может быть только одно из значений поля подмножество значений поля SubComponent (соответствующих значению из SubName) таблицы ComponentsSubstances. Значение поля StypeComponentsProp совпадает с тем именем, которое задал пользователь.
* CommonSubAndComponentProps - таблица, содержащая имена конструкторов, созданных с помощью конструктора ”Общи свойства сущности и компоне нта”. Данная таблица связана с таблице й ComponentsSubstances.
* ProcessSubstances - таблица, определяющая уровень рассмотрения физико-химиче ского проце сса в опр еделя емом разделе. Содержит им ена типов сущност й (выбираются из таблицы Substances), которы могут быть участниками процесса. Данная таблица содержит значение параметра "Типы сущност й проц сса” онтологии уровня 4.
* CommonProcessProps - таблица, сод ржащая им на конструкторов, созданных с помощью конструктора "Общие свойства проце сса и участвующей в не м сущности". Данная таблица связана с таблице й ProcessSubstances: значением поля Arguments может быть только тот тип сущности, который опр д л н в таблиц ProcessSubstances. Знач ни поля CommonSubProp совпадает с тем именем, которое ввел пользователь.
* SPComponentsProps - таблица, содержащая имена конструкторов, созданных с помощью конструктора "Свойства сущносте й проце сса". Данная таблица связана с таблиц й ProcessSubstances: при задании знач ний Arguments могут использоваться только типы сущностей процесса. Значение поля SPComponentsProp совпадает с тем име нем, которо е ввел пользователь.
* PSComponents - таблица, сод ржащая им на конструкторов, созданных с помощью конструктора "Состав сущносте й проце сса". Данная таблица связана с таблицами ProcessSubstances и ComponentsSubstances: при задании знач ний Arguments могут использоваться только типы сущност й проц сса и опр еделенные для них типы компонент. Знач ение поля PSComponent совпадает с тем именем, которое ввел пользователь.

Связи м жду таблицами данной базы данных соотв тствуют связям м жду терминами онтологии уровня 3, определя е мым онтологие й уровня 4.

1. ПРИМЕР ОПРЕДЕЛЕНИЯ СХЕМЫ ТАБЛИЦ БАЗЫ ДАННЫХ, ПРЕДНАЗНАЧЕННЫХ ДЛЯ ХРАНЕНИЯ

СТРУКТУРИРОВАННЫХ ЗНАНИЙ ПРЕДМЕТНОЙ ОБЛАСТИ "ХИМИЯ"

В данном примере таблица Properties - хранит определения основных терминов онтологии уровня 2 (каждой онтологии соответствует своя таблица). Она сод ержит сл е дующую информацию: т ермин онтологии уровня 2 (имя н е которой функции); множе ство, которому этот термин принадл е жит (термин онтологии уровня 3); аргум е нты функции - знач е ни е данного поля определяется автоматически при указании имени множества-термина онтологии уровня 3; область знач е ния функции. Областью знач е ния функции может быть некоторое множе ство им ен, множе ство целых или веще ств енных чис ел из некоторого интервала, множе ство структурных формул, множе ство кортежей определенного вида, множество элементов вспомогательного множества и т.д. Если значением функции является интервал, то данная таблица содержит границы данного интервала.

Таблица Properties использу тся при формировании базы данных для хран ния знаний (прим р опр д л ния структуры пр дставл ния таблиц приведен на рис. П9.2).

**Возможностьпронождения**

**Удельная\_теплоемкость\_вещест**



|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | \ 1 PropertyName / | / PropertyType | / Argumei)ts / | Results | \* |
|  | stNormula | СобственныеДвойства веществ | химу4еские вещества / / | структурная формула | |
|  | Возможность прохождения реакции | Собственьшт свойства реакций | х>шические реакции/^ / | L | |
|  | Коэффициент / | СвржГгва участников реакций | (химические p^a+cfym, химические вещества) | 1 | |
|  | Метод стимуляции реакции | Собственные свойства реакций | х и м и ч е\_£кпе'ре а кци | методы стимуляции реакций | |
| — | Реагенты  Результаты ~  Скорость реакции ~  Удельная теплоемкость вещества | Собственные свойства-реакции —-  Собственные свойства-реакций- '  Собственные свойства реакций —  Собственные свойетеа ьеще~ств ^ | -комические р^ак£|ии | {[химические вещества {[химические вещества R R |  |
| — | мимические реакции  химические вещества | - |

9 **► 1 Н** U **+ I** из 9

Рис. П9.2. Прим ер опр еделения структуры таблиц для хран ения структурированных знаний

В соотв тствии с описани м аргум нтов и р зультатов функций в Properties формируются связи создава мых таблиц с таблицами, хранящими сущности (наприм ер, множе ства названий химич еских элем ентов, в еще ств и реакций), а также таблицами, используемыми для хранения значений вспомогательных терминов онтологии (например, методы стимуляции р акций), эл м нты н стандартных в личин (наприм р, структурны формулы).

Тип знач е ния поля создавае мой таблицы опр е д еля ется сортом аргум е нта или р зультата функции.

ПРИЛОЖЕНИЕ 10. МОДЕЛЬ ЯЗЫКА СИСТЕМЫ, ОСНОВАННОЙ НА ПРАВИЛАХ

При разработке модели данного языка использована модель недоопредел е нных продукций, описанная в работах [10-11].

1. Модель языка. Синтаксис

1.1 Описание имен

Все используемые в правилах предметные, функциональные и предикатные имена являются терминами предметной области. Они должны быть описаны. Описание имеет вид: <Name, S, C>, где Name - термин предм етной области, S - описание сорта термина, C - описание опр еделенности знач ния т рмина.

Сорт может быть задан одним из термов языка прикладной логики, входящих в ядро языка (Приложе ние 1), стандартное расшир е ние (Приложе ние

1. или расшир е ние "Интервалы" (Приложе ние 1), знач е ние м которого явля ется множество.

Вс е им ена делятся на объ ектные, функциональные и пр едикатные.

Описани опр д л нности знач ния т рмина C зада т тип знач ния (точно либо н точно ).

* 1. Синтаксис термов, используемых в правилах

В правилах могут использоваться термы сл едующих видов:

1. цело е или в ещ е ственно е число, имя, для которого не задан сорт (т.е. значением этого имени явля ется оно само);
2. пр едм етный символ n;
3. пер е м е нная v;
4. пустое множе ство 0;
5. множе ство {t1,t2,...,tk}, где t1,t2,...,tk - те рмы;
6. ^(t) - мощность множе ства, где t - терм-множе ство.
7. (Z (v : t1) t2) - кванторный терм, где Zе {+,\*}, v - связанная

переменная (индекс операции), t1 - терм, значением которого является множе ство, терм t1 задает область значений для переменной v, t2 - терм (тело кванторного т рма), сод ржащий инд кс оп рации v;

1. (Z (v : t1) t2) - кванторный терм, где Zе {u, n}, v - связанная

переменная (индекс операции), t1 - терм, задающий область значений v, t2 - т рм (т ло кванторного т рма), сод ржащий инд кс оп рации v;

1. (jota (v : t) f) - йота-операция, гд е v - связанная пер е м е нная, f - формула, сод ржащая инд кс оп рации v;
2. f(t1,...,tk) - функциональный терм, гд е f - функциональное имя, t1,...,tk - термы (аргум е нты функционального терма);
3. t1 О t2 - выраже ние, где t1 и t2 - термы, «О» е {+, -, \*, /} - знак арифм тич ской оп рации;
4. t1 О t2, гд е t1 и t2 - термы-множе ства, «О» е {u, n, \} - знак операции над множе ствами.

Т ермы других видов в правила входить не могут.

* 1. Синтаксис формул, используемых в правилах

Формулами являются:

1. p(t1,...,tk) - атомная формула, где p - пр едикатно е имя, t1,...,tk - термы (аргументы атомной формулы), вид которых описан в п. 2;
2. —p(t1,...,tk) - отрицательная атомная формула, где p - предикатное имя, t1,...,tk - термы (аргум е нты атомной формулы), вид которых описан в п. 2;
3. t1 @ t2 - соотнош е ние над термами, где t1 и t2 - термы, вид которых описан в п. 2, «@» е {=, ^, >, <, <, >, с, с, <£, е } - знак отнош е ния;
4. (& (v: t) f) - квантор ная формула, где v - связанная пер е м е нная (инд е кс операции), t - терм-множе ство, задающий область значений v, f - формула (тело кванторной формулы), содержащая индекс операции v;
5. (v (v: t) f) - кванторная формула, где v - связанная переменная (индекс операции), t - терм-множе ство, задающий область значений v, f - формула (тело кванторной формулы), содержащая индекс операции v;
6. f1 & f2, f1 v f2, — f1, (f1), где f1, f2 - формулы.

Формулы других видов в правила входить не могут.

* 1. Синтаксис правил

Правило состоит из префикса и тела правила. Префикс есть последовательность описаний свободных переменных (v1:t1)(v2:t2)...(vm:tm), где (vi:ti) - описание переменной, для всех i=1,...,m vi - переменная, ti - терм ядра языка прикладной логики, стандартного расшир ния или сп циализированного расшир е ния "Интервалы", знач е ние м которого явля ется конечно е множе ство. Т ерм t1 не сод ержит свободных пер е м е нных. Для i=2,..., m свободными переменными терма ti могут быть только переменные v1, v2,...,vi-1. Префикс может отсутствовать. Вс е переменные v1, v2,..., vm попарно различны.

Любая свободная переменная, входящая в тело правила, должна быть описана в го пр фикс . Если п р м нная явля тся связанной в т л правила (кванторной формулой или кванторным т рмом), то она н мож т входить в пре фикс этого правила.

Правила (продукции) могут быть одного из сл е дующих видов.

1. (пре фикс) P ^ S1 &...& Sk, где P - формула (см. п. 1.3), S1, ..., Sk -

формулы вида (1) - (4) (см. п. 1.3).

Для свободных п р м нных, входящих в правило, должно выполняться следующе е условие: V({S1, ..., Sn}) u V(P) с У(пр е фикс), где V(0) - множе ство пере м е нных, входящих в 0 (0 может быть любой конструкцие й).

1. (пр е фикс) P ^ NameMod(S1, ..., Sk), где P - формула (см. п. 1.3), NameMod(S1, ..., Sk) - вызов модуля, S1, ..., Sk - термы, значение м которых являются им на.

Вс е правила вида (1) образуют множе ство правил R', а вида (2) - множе ство R''. Часть правила до символа «q» будем называть условием правила, а часть после символа «q» - следствием.

* 1. Схемы правил и конкретизации схем

Назов ем схемой конструкцию вида:

1. NameSc^^^^!, [.КОНСТ]ш2, ..., [.КОНСТ^): rule, где

NameSch - имя схемы, w1, w2, ..., wn - пер еменные, rule е R’. Перем енные w1, w2, ..., wn являются формальными параметрами схемы. Тело схемы

представляет собой правило и должно содержать формальные параметры. Запись «[.КОНСТ]» означает, что «.КОНСТ» может отсутствовать. Наличие «.КОНСТ» означает, что данному формальному парам етру в кач е ств е фактического параметра будет сопоставлено некоторое имя. В противном случае формальному параметру в качестве фактического параметра будет сопоставлена константа.

Пусть У(пр е фикс) - множе ство пере м е нных, входящих в правило вида (1) - тела схе мы, тогда {w1, w2, ., wn} с У(пр е фикс).

Конкр етизация схе мы им е ет вид:

1. NameSch(zw1, zw2, ..., zwn), гд е

NameSch - имя схемы, zw1, zw2, ..., zwn - термы (см. п.2). Термы zw1, zw2, ..., zwn являются фактиче скими параметрами схемы.

Вс е конкр етизации схем образуют множе ство R'''.

* 1. Описание модуля

Модулем будем называть конструкцию вида:

<NameMod, GlobD, LocD, R>, гд е NameMod - имя модуля, GlobD - множе ство описаний глобальных им е н, LocD - множе ство описаний локальных им е н и сх е м, R = R' u R'' и R''' - множе ство правил. При этом GlobD Ф 0, а LocD может быть 0. Множе ство описаний глобальных им н состоит из описания им н, являющихся формальными аргум нтами модуля. Знач ния сопоставляются глобальным им нам в р зультат ввода данных из файла или п р дачи знач ний из вызвавшего модуля, они могут быть пер еданы за пр еделы модуля (наприм ер, в файл или в другой модуль) после выполнения модуля. LocD описывает имена и схемы, использующиеся только в пределах данного модуля. Все глобальные и локальны им на различны м жду собой. При этом п р с ч ни глобальных имен двух модулей не пусто, если один модуль вызывает другой. Каждое из множе ств R', R'', R''' может быть пустым, но при этом их объ единение не пусто.

1. Процесс логического вывода

Процесс логического вывода (ПЛВ) определяется как исчисление со входом [132].

Введе м обознач е ния:

* 0 = {v1/c1, ., vm/cm} - допустимая подстановка;
* K - конечное множе ство правил модуля;

-r - правило;

* А - рабочая ср еда ПЛВ ( е е представл е ние буде т описано ниже);
* 8i - состояние ПЛВ на i-том шаге, 8i е А.
* Jgi(F, 0) - значение формулы F, получаемое в результате применения к ней подстановки 0 в состоянии 8I;
* p(Jgi(t1,t2,...,tk, 0)) - атомная формула, получаемая в результате выполне ния подстановки 0 в в е ктор термов t1,t2,...,tk в состоянии 8i;
* 8(NameMod(S1, ..., Sk)) - состояние ПЛВ, полученно е в р езультате выполн ния модуля NameMod, состоит из знач ний, сопоставл нным им нам S1, ., Sk;
* Л(8) - множество всех возможных подстановок для правила,

сформированных на основ 8.

1. Рабочая среда модуля

Каждый модуль имеет свою рабочую среду. Рабочая среда модуля характеризуется множеством состояний. Начальное состояние (81) ПЛВ формиру тся в р зультат ввода исходных данных модуля. Каждо сл дующ состояни ПЛВ получа тся из пр дыдущ го в р зультат прим н ния некоторого правила, конкр етизации схемы или вызова модуля.

Состояние рабочей среды 8i е сть множе ство пар вида <n, valuei(n)>, где n

* имя, valuei(n) - значение, сопоставленно е этому имени в состоянии 8i.

Для всех имен, при описании определенности значения которых C = точно е, выполнено: valuei(n) = valuej(n) = value1(n) для любых i и j, т.е. если значение, сопоставленное имени, является точным, то оно не изменяется в процессе логического вывода и совпадает со значением, заданным при вводе исходных данных модуля. Задаваемое в этом случае значение принадлежит сорту, указанному при описании имени. Если при вводе исходных данных им ени n не сопоставлено значение, то будем считать, что это значение е сть ^ ("неопределенное значение"). Для предикатных имен value1(n) есть множество кортежей {(c1,c2,.,cm)}, задающих значения аргум ентов, на которых отношение с им е не м n истинно.

Для вс х функциональных и пр дикатных им н, при описании опр едел е нности знач е ния которых C = неточно е, выполне но: valuei(n) с valuei+1(n) для любого i. Сопоставл е нно е им е ни n неточно е знач е ние valuei(n) есть множество кортежей {(c1,c2,.,cm:c0)}, где ci (1 < i < m) - значение, принадлежащее множеству, задаваемому сортом аргумента функции или пр диката, указанному при описании им ни n; для функционального им ни c0 - значение, принадлежаще е множе ству, задаваемому сортом р езультата функции; для предикатного им е ни c0 е {истина, ложь}. Из прив ед е нного соотнош е ния valuei(n) с valuei+1(n) следует, что на каждом шаге логического вывода к множ ству корт ж й valuei(n) могут быть добавл ны новы корт жи. При ввод исходных данных им ни n мож т быть сопоставл но пусто множ ство кортежей. Будем обозначать argi(n) = {(c1,c2,.,cm) | (c1,c2,.,cm:c0) е valuei(n)}.

Для вс х пр дм тных им н, при описании опр д л нности знач ния которых C = неточно е, выполнено: valuei+1(n) с valuei(n) с value1(n) для любого i. Сопоставл нно им ни n н точно знач ни valuei(n) сть множ ство вариантов {c1,c2,.,cm} (неточное значение), где ci (1 < i < m) - значение, принадлежащее множеству, задаваемому сортом имени n. Причем множество вариантов задается при вводе исходных данных модуля. В проце сс е логич е ского вывода из этого множе ства исключаются варианты. Если при вводе исходных данных им ни n н сопоставл но знач ни , то буд м считать, что это знач ни есть ^ ("неопределенное значение"). Такое значение не может изменяться в проце сс е логиче ского вывода.

Будем считать, что каждому функциональному и пр едикатному им ени в каждом состоянии процесса логического вывода сопоставлен единственный вариант.

1. Определение значений формул для состояния рабочей среды

Если p(t1,...,tk) атомная формула, где p - предикатное имя, при описании которого C = точное, то J8i(p(t1,...,tk), 0) = true, если J8i((t1,...,tk), 0) е valuei(p) и

J8i(p(t1, ,tk), 0) = false в противном случае. Такое определение задает семантику

"замкнутого мира": отнош е ни е истинно на том кортеже знач е ний аргум е нтов, которо е принадлежит состоянию рабочей ср еды, и ложно для вс ех остальных кортежей. Значение отрицательной атомной формулы —p(t1,...,tk), где p - пр дикатно имя, при описании которого C = точно , вычисля тся сл дующим образом: J8i(— p(t1,...,tk), 0) = — J8i(p(t1,...,tk), 0).

Если p(t1,...,tk) атомная формула, где p - предикатное имя, при описании которого C = н точно , то:

* J8i(p(t1,...,tk), 0) = true, если J8i((tb...,tk), 0) е argi(p) и (Jgi((t1,...,tk), 0): true) е valuei(p);
* J8i(p(t1,...,tk), 0) = false, если Jgi((t1,...,tk), 0) е argi(p) и (Jgi((t1,...,tk), 0): false) е valuei(p);
* J8i(p(t1,...,tk), 0) = ^, е сли J8i((t1,...,tk), 0) € argi(p).

Тако е опр ед ел е ние задает с е мантику "открытого мира": знач е ние

отношения определено только для тех наборов значений аргументов, которые принадл жат состоянию рабоч й ср ды, для остальных корт ж й знач ни н опр едел е но.

Значение отрицательной атомной формулы —p(t1,...,tk), где p - пр дикатно имя, при описании которого C = н точно , вычисля тся сл е дующим образом: Jgi(— p(t1,...,tk), 0) = - Jgi(p(t1,...,tk), 0), если J§i(p(tb...,tk), 0) опр еделено, и равно ^ в противном случае.

Обозначим \ - подстановку вариантов вм е сто им ен, входящих в терм или формулу, Jgi((t, ^), 0) - значение терма или формулы t при замене имен значениями, задаваемыми подстановкой а переменных - значениями, задавае мыми подстановкой 0.

Обозначим Si - множе ство подстановок \, возможных при состоянии 8i. Если т рм или формула t сод ржит пр дм тны им на, при описании которых C = неточно е, то множе ство {Jgi((t, ^), 0) | ^eSi} содержит бол е е одного эл е м е нта. Оно зада т множ ство вариантов знач ний т рма или формулы.

Зафиксиру е м имя n и вариант var е valuei(n). Обозначим Si(n,var) - подмноже ство подстановок возможных при состоянии 8i, у которых им ени n сопоставлен вариант var.

1. Применимость правил

Правило вида (1) (v1:t1)(v2:t2)...(vm:tm) P ^ S1 &...& Sk применимо при те кущ е м состоянии 8i рабоч е й ср еды, е сли выполне ны сл едующие условия:

1. для вс ех j, 1<j<m множе ство {J8i((tj, ^), 0) | ^eSi} состоит из одного эл м нта;
2. сущ ству т подстановка знач ний вм сто п р м нных, опр д ля мая пре фиксом правила и состоянием 8i, при которой истинно условие правила;
3. могут быть произв ед е ны изм е не ния состояния рабоч е й ср еды.

В результате применения правила состояние рабочей среды изменяется в соответствии с с е мантикой формул S1 &.& Sk.

Поясним условие 3 и опиш ем правила изм енения состояния рабочей ср еды в зависимости от вида формул S1,., Sk.

Пусть Si = p(t1,...,tk), причем при описании им ени p знач ение C = неточно е. Тогда могут быть произвед е ны изм е не ния состояния рабоч е й среды при подстановке 0, если J8i(p(t1,...,tk), 0) = В этом случае valuei+1(p) = valuei(p) u {(J8i((t1,...,tk), 0): true)}, т.е. к множе ству кортежей отношения с именем p добавля ется кортеж, полученный из аргум ентов атомной формулы в р езультате выполне ния подстановки 0, прич е м отнош е ние с им е не м p на этом кортеже истинно.

Пусть Si = — p(t1,...,tk), прич е м при описании им е ни p знач е ние C = неточное. Тогда могут быть произв ед е ны изм е не ния состояния рабоч е й среды при подстановке 0, если J8i(p(t1,...,tk), 0) = В этом случае valuei+1(p) = valuei(p) u {(J8i((t1,...,tk), 0): false)}, т.е. к множе ству кортежей отношения с им енем p добавля ется кортеж, полученный из аргум ентов атомной формулы в р езультате выполне ния подстановки 0, прич е м отнош е ние с им е не м p на этом кортеже ложно.

Пусть Si = t1 @ t2, прич ем соотношение содержит хотя бы одно имя n, при описании которого C = неточное. Тогда могут быть произведены изменения состояния рабочей ср еды при подстановке 0, е сли суще ствует имя n и вариант var е valuei(n) такие, что {J8i((t, ^), 0) I ^S^var)} = {false}. В этом случае valuei+1(n) = valuei(n) \ {var}, т.е. в результате из множества вариантов, сопоставленных им ени n в состоянии 8i, исключен тот вариант, который дает ложь при соч таниях го с вариантами знач ний, сопоставл нных другим им е нам.

Если Si = (& (v: t) f) и формула f не сод ержит соотнош е ний вида t1 @ t2, то для каждого значения переменной v, принадлежащего множеству (J8i(t),0), состояние ПЛВ изменя ется в соответствии с с емантикой атомных формул.

Если Si = (& (v: t) f) и формула f содержит соотношения вида t1 @ t2, то для каждого значения переменной v, принадлежащего множеству (J8i(t),0), состояние ПЛВ изменя ется в соответствии с с емантикой соотношений.

Правило вида (2) применимо при текущем состоянии 8i рабочей среды, т кущ м состоянии 8i рабоч й ср ды, сли выполн ны сл дующи условия:

1. для вс ех j, 1<j<m множе ство {J8i((tj, ^), 0) I ^е2^ состоит из одного эл м нта;
2. сущ ству т подстановка знач ний вм сто п р м нных, опр д ля мая пре фиксом правила и состоянием 8i, при которой истинно условие правила.

В р зультат выполн ния правила происходит вызов модуля NameMod, которому передаются знач е ния, сопоставл е нны е им е нам S1, ..., Sk. Эти знач е ния входят в состояние 81 для вызываемого модуля. В результате выполнения модуля знач е ния, сопоставл е нны е им е нам S1, ..., Sk в состоянии 8i+1

вызывающ его модуля будут совпадать со значениями, сопоставленными этим им нам в заключит льном состоянии для модуля NameMod.

Проце сс логич е ского вывода зав ершается, е сли достигнуто тако е состояние 8е (заключительно е состояние ), в котором не прим енимо ни одно из правил.

Правило вывода для конкр етизации схемы опр еделя ется видом схемы. При этом формальным параметрам схемы сопоставляются значения фактических парам етров, формиру е мы е при те кущ е м состоянии ПЛВ.

Проце сс логич е ского вывода явля ется конфлюэнтным: е го р езультат не зависит от порядка прим е не ния правил [11].

4 Интерпр етация а является функци ей, сопоставляющей им енам их значения. Сужение понимается в традиционном для функций смысле: если а: X^Y и M с X, то сужение функции а на M е сть. а IM: M^Y.

1. В настоящ вр мя рассматриваются различны классы онтологий в зависимости от того, какую концептуализацию они представляют: онтология наблюдений, онтология приложений, онтология задач, онтология методов и т.д. Анализ классов онтологий приведен в обзоре [101]. Их рассмотре ни е выходит за рамки дисс ертационной работы. [↑](#footnote-ref-1)
2. зде сь 0 - обозначает пустую подстановку [↑](#footnote-ref-2)
3. Связи нум руются для удобства ссылки на них; для каждой связи прив д н комм нтарий [↑](#footnote-ref-3)
4. Свойство М.4 явля тся сл дстви м онтологич ских соглат ний, опр еделяющих свойства химиче ского проце сса. [↑](#footnote-ref-4)