МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение

высшего профессионального образования

**«Дальневосточный федеральный университет»**

**ШКОЛА ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК**

**Кафедра прикладной математики, механики, управления и программного обеспечения**

Дегтярев Илья Владимирович

РАЗРАБОТКА WEB-ПРИЛОЖЕНИЯ ДЛЯ РЕДАТИРОВАНИЯ МЕТАОНТОЛОГИЙ, ОНТОЛОГИЙ И БАЗ ЗНАНИЙ ПРЕДМЕТНЫХ ОБЛАСТЕЙ ХИМИИ

**ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА**

по образовательной программе подготовки специалистов

по направлению 010503.65 «Математическое обеспечение и администрирование информационных систем»

Владивосток

2013

Автор работы \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

подпись

«\_\_\_» \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ 2013 г.

Консультант (если имеется) \_\_\_\_\_\_

подпись

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

(должность, ФИО, уч. степень, уч. звание)

«\_\_\_» \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ 2013 г.

Руководитель ВКР

зав. кафедрой ПММУПО ДВФУ, д.т.н., профессор

Артемьева Ирина Леонидовна

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

подпись

«\_\_\_\_\_»\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_2013 г.

Назначен рецензент \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

(должность

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

ФИО, уч. степень, уч. звание)

Защищена в ГАК с оценкой \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ «Допустить к защите»

Заведующий кафедрой

Секретарь ГАК\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ д.т.н., профессор Артемьева И. Л.

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

(И.О. Фамилия) подпись

«\_\_\_\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ 2013г. «\_\_\_\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_2013г.

Введение 5

Цель дипломной работы 5

Содержание Дипломной работы 6

Глава 1. Онтологии и программные системы, позволяющие их редактировать, обзор литературы 7

Глава 2. 8

2.1. Модель метаонтологии для физической химии 8

2.2 Онтология, основанная на метаонтологии для физической химии. 17

2.2.1 Структура онтологии 17

2.2.2 Описание модулей онтологии. 19

2.2.2.1 Модуль «Свойства элементо» 19

2.2.2.2 Модуль «Свойства веществ» 22

2.2.2.3 Модуль «Свойства реакций» 25

2.2.2.4 Модуль «Основы термодинамики» 33

2.2.2.5 Модуль «Термодинамика. Физические свойства» 37

2.2.2.6 Модуль «Термодинамика. Химические свойства» 40

2.2.2.7 Модуль «Химическая кинетика» 42

2.2.2.8 Модуль «Термодинамика. Физические и химические свойства» 43

Глава 3. Техническая документация 45

3.1 Характеристики пользователей 45

3.1.1 Характеристика эксперта 45

3.1.2 Характеристика инженера знаний 45

3.2 Требования к программной системе 47

3.2.1 Требования к редактору метаонтологий 47

3.2.1.1 Функциональные требования 47

3.2.1.2 Требования к входным данным 50

3.2.1.3 Требования к выходным данным 52

3.2.2 Требования к редактору онтологий 53

3.2.2.1 Функциональные требования 53

3.2.2.2 Требования к входным данным 55

3.2.2.3 Требования к выходным данным 56

3.2.3 Требования к редактору знаний 57

3.2.3.1 Функциональные требования 57

3.2.3.2 Требования к входным данным 57

3.2.3.3 Требования к выходным данным 59

3.2.4 Требования к интерфейсу системы 59

3.2.5 Требования к архитектурной среде 60

3.2.6 Требования к надежности 60

3.3 Проект базы данных 61

3.4 Архитектурно-контекстная диаграмма 74

3.5 Внешние спецификации 78

3.5.1 Сценарий диалога с пользователем 78

3.5.1.1 Редактор метаонтологий и онтологий, редактор базы знаний 78

3.5.2 Спецификация входных данных 78

3.5.3 Спецификация выходных данных 78

3.5.4 Спецификация функций 78

Список литературы 80

# Введение

В настоящее время в связи с развитием компьютерных технологий, появилась потребность в программных системах, автоматизирующих деятельность в таких сложных предметных областях, как химия.

Одним из классов программных систем являются системы, основанные на знаниях, отличительная особенность которых состоит в том, что знания, необходимые для выполнения профессиональной деятельности, отделены в этих системах от программ для решения прикладных задач.

В рамках диссертационной работы д.т.н., профессора кафедры ПО ЭВМ ДВФУ – Артемьевой Ирины Леонидовны «Многоуровневые модели сложно-структурированных предметных областей и их использования при разработке систем, основанных на знаниях» автором были разработаны теоретические положения и получено практическое решение проблемы создания расширяемых специализированных оболочек систем, основанных на знаниях, для сложно-структурированных предметных областей.

На настоящий момент имеется необходимость в создании системы, выполняющей те же функции, что и специализированная оболочка интеллектуальных систем для химии, но в виде веб-приложения.

# Цель дипломной работы

Целью дипломной работы является разработка компонентов программной системы, которая позволяет создавать и редактировать метаонтологии и онтологии предметных областей в области химии, формировать и редактировать базу знаний для каждой созданной онтологии.

# Содержание Дипломной работы

**\*\*\*\*\*\*\***

# Глава 1. Онтологии и программные системы, позволяющие их редактировать, обзор литературы

В данной главе рассматриваются существующие онтологии и модели онтологий предметной области «Химия». Также в обзоре рассматриваются программные решения, дающие возможность описывать, редактировать, удалять и использовать онтологии предметных областей в различных целях.

# 1.1 Онтологии

В данном разделе рассматриваются примеры существующих онтологий, имеющих отношение к предметной области «Катализ».

Согласно [15], можно делить онтологии на два главных класса: неформальные и формальные онтологии. Неформальная онтология состоит из понятий, которые являются или неопределенными, или определенными только предложениями на естественном языке, например словарь баз данных. Формальная онтология определяется с помощью средств некоторого формального языка.

Формальные онтологии делятся на два класса [15]: онтологии с узким контекстом (например EcoCyc, НinСус, IMGT-ONTOLOGY, онтология КЕGG и GDВ) и онтологии с широким контекстом (например, ТаО [16], ОМВ и GО [17]). Контекст обозначает степень покрытия онтологией предметной области. Например, НinСус (онтология для генома и метаболических путей гриппа) рассматривается как онтология узкого контекста по сравнению с GО (онтология молекулярного функционального, биологического процесса и клеточного компонента генных продуктов).

Другой способ классификации учитывает назначение онтологий [15]. Онтологии делятся на следующие классы: описывающие схемы базы данных, являющиеся управляемыми словарями или управляющие трансляцией запроса. Например, онтология ЕсоСус используется для того, чтобы определить схему базы данных. Онтологии ОМВ и GО направлены на обеспечение общего словаря. ТAMBIS использует динамическую онтологию ТаО для перевода запросов, полученных из одного общего пользовательского интерфейса, в информационно и кодозависимые запросы.

КЕGG - база данных информации о способах получения генов и генных продуктов [15]. КЕGG описывает иерархическую классификацию. Например, ферменты в онтологии КЕGG классифицируются по характеру химических реакций, которые катализируют ферменты. Одна из уникальных особенностей КЕGG онтологии заключается в том, что она использует двойные отношения в таблицах отношений для представления взаимодействующих молекул или генов.

Онтология ВАО [15] предназначена для нескольких целей:

• руководство пользователями для создания эффективных запросов;

• облегчения анализа изменчивости среди различных форматов данных и источников данных;

• облегчения интеграции биологических и химических сетевых баз данных.

Понятия данной онтологии определяются с помощью понятий высокого уровня: Свойство, Отношение и Объект.

Информация в ЕсоСус и НinСус [15] хранится в фреймовом представлении, которое реализуется с использованием объектно¬ориентированной модели данных. Онтология ЕсоСус и НтСус содержит иерархию классов и отношений, связанных с этими классами. Онтология ЕсоСус использует единственную базовую концепцию для моделирования всех реакций. Она кодирует классы молекул, реакции и фрагменты реакции в качестве отдельных объектов.

Назначение Gene Ontology (GО) [17] - возможность совместимых описаний генных продуктов в различных базах данных. Первоначально предполагалось ее использование в трех базах данных: FlyBase (Drosophila), Mouse Genome(MGD) и Saccharomyces Genome. В настоящее время используется во многих базах данных, содержащих информацию о растительных, животных и микробных генах. GО содержит три структурированных, управляемых словаря (онтологии), которые описывают генные продукты в терминах связанных биологических процессов, клеточных компонентов и молекулярных функций. Использование GО терминов несколькими базами данных облегчает выполнение однородных запросов между ними. Управляемые словари структурированы так, чтобы пользователи могли запрашивать их на различных уровнях.

Термины GО организованы в структуры, называемые ориентированными нециклическими графами (DAGs), которые отличаются от иерархий тем, что «потомок» (более специализированный термин) может иметь много «родителей» (менее специализированных терминов). Каждый термин GО должен подчиняться «правилу правильного пути»: если термин «потомок» описывает некоторый генный продукт, то все его «родители» должны также относиться к этому генному продукту.

Онтология Chemical-Crystals [18] описывает различные типы кристаллической структуры веществ. Эта онтология была построена с использованием методологии, известной как МЕТОДОЛОГИЯ [19], которая обеспечивает точным руководством по созданию новых онтологий. Методология помогает убедиться в том, что онтология хоро о определена и обеспечивает адекватное покрытие.

В работах [20-24] определена онтология физической химии в пределах вузовского курса обучения и ее модель. Физическая химия рассматривается как состоящая из связанных друг с другом разделов: «Элементы», «Вещества», «Реакции», «Основы термодинамики», «Термодинамика. Химические свойства», «Термодинамика. Физические свойства», «Термодинамика. Связь физических и химических свойств», «Химическая кинетика». Раздел «Вещества» базируется на разделе «Элементы», а раздел «Реакции» - на разделе «Вещества». В разделе «Основы термодинамики», базирующемся на разделе «Вещества», определены термины, используемые при описании общих свойств термодинамических систем и их компонентов. Состояния термодинамической системы могут изменяться в ходе физико¬химического процесса. Состояния процесса задаются в дискретные моменты наблюдения. В разделе «Термодинамика. Физические свойства», базирующемся на разделе «Основы термодинамики» определены термины, используемые при описании фазовых превращений веществ в ходе процесса, без учета химических превращений. В разделе «Термодинамика. Химические свойства», базирующемся на разделах «Основы термодинамики» и «Реакции», определены термины, используемые при описании химических превращений веществ в ходе процесса без учета фазовых превращений. И, наконец, в разделе «Термодинамика. Связь физических и химических свойств», базирующемся на разделах «Термодинамика. Физические свойства» и «Термодинамика. Химические свойства», определены термины, используемые при описании физико-химических процессов. В разделе «Химическая кинетика» определены термины, описывающие динамику прохождения процессов.

Модель онтологии некоторых разделов в области органической химии, а также иерархическая модель онтологии физической химии построены с использованием многосортного языка прикладной логики, разработанного в ИАПУ ДВО РАН в лаборатории № 71. В первой модели рассмотрены многие важные разделы органики, в том числе и раздел “Радикальные реакции”. Большая часть терминологии, используемая в этом разделе, определена в онтологии физической химии. Во второй также присутствует раздел, посвященный химическим реакциям, который также рассмотрен в аспекте физической, но неорганической химии.

Одной из самых известных онтологий в области химии является Chemicals [25]. Онтология построена с использованием методологии, которая называется Methontology, и представленная на языке Ontolingua. Схема методологии Methontology позволяет строить онтологии на уровне знаний. Корни Мethonthology прослеживаются от главных видов деятельности, определенных для процесса разработки ПО и методологий инженерии знаний. Она включает: идентификацию процесса построения онтологии, жизненный цикл, основанный на развивающихся прототипах, и особые технологии для выполнения каждого вида деятельности. Эта методология определяет четыре фазы: спецификацию, концептуализацию, интеграцию, реализацию. Во время фазы спецификации авторы пишут структурированный документ, определяющий предметную область, широту охвата, уровень формализации, и источники знаний, которые будут использованы. Во время фазы концептуализации авторы разрабатывают глоссарий терминов, иерархию понятий, словарь данных, таблицы атрибутов экземпляров и классов, примеры, аксиомы и формулы. Это структурированное промежуточное представление онтологии подвергается ряду легко поддающихся обработке методов верификации. Директивы этой фазы помогают авторам решить, какие понятия включить, и адекватны ли их описания. Во время фазы интеграции авторы идентифицируют соответствующие понятия в существующих реализованных онтологиях и объединяют концептуализацию предыдущей фазы и эти понятия, соответствующим образом изменяя существующую или новую онтологию. Во время последней фазы — фазы реализации — промежуточное представление транслируется в синтаксис Ontolingua. Оценка спецификаций и промежуточного представления имеет место в течение всего времени жизненного цикла онтологии. Методология допускает откат назад и продвижение вперед даже между далеко отстоящими друг от друга фазами. Chemicals включает в себя два подраздела: Chemical-Elements и Chemical-Crystals. Chemical-Elements содержит 16 классов, 21 отношение, 3 функции и 103 индивидуума, а также 27 аксиом. Chemical-Crystals содержит 19 классов, 8 отношений, 1 функцию и 66 индивидуума, а также 26 аксиом.

# 1.2 Программные системы для построения и использования онтологий

В данном разделе приведено описание систем, предназначенных для построения и использования онтологий.

Основными инструментальными средствами [26] для построения онтологий являются: Ontolingua Server, Ontosaurus, ODE и Tadzebao и WebOnto. Ontolingua Server это наиболее известная среда для построения онтологий на языке Ontolingua. Эта среда представляет собой набор инструментов и услуг для поддержки построения онтологий, совместно используемых географически разделенными друг от друга группами. Она была разработана в контексте проекта совместного использования знаний ARPA. Архитектура Ontolingua Server обеспечивает доступ к библиотекам онтологий, трансляторам с языков (Prolog, CLIPS, KI, IDL CORBA, LOOM) и редакторам для создания и просмотра онтологий. Существуют три режима взаимодействия: удаленные сотрудники, которые могут писать и инспектировать онтологии, удаленные приложения, которые могут запрашивать и модифицировать онтологии, хранящиеся на сервере в Интернете, используя протоколы фреймов-прототипов; и автономные приложения.

Тadzebao и WebOnto являются взаимодополняющими средствами: Tadzebao дает инженерам знаний возможность проводить синхронные и асинхронные дискуссии на тему онтологий, а WebOnto поддерживает совместный просмотр, создание и редактирование онтологий.

Главным достоинством ODE (Ontology Desiagn Environment) является модуль концептуализации для построения онтологий, которое позволяет разработчику онтологии создать онтологию на уровне знаний, используя набор промежуточных представлений, которые не зависят от конечного языка, на котором будет реализована онтология. Когда концептуализация выполнена, код генерируется автоматически, используя генераторы кода ODE (Flogic, Ontolingua и реляционную базу данных). Так что лица, не являющиеся экспертами в языках, на которых реализуются онтологии, могут специфицировать и проверять онтологии, используя эту среду.

Средство Ontosaurus состоит из двух частей: сервер онтологий, который использует LOOM в качестве системы представления знаний, и сервер «браузера» онтологий, который динамически создает НТМL- страницы (включая текстовую информацию и рисунки), на которых отображается иерархия онтологии. Этот сервер также использует НТМL- формы, позволяющие пользователю редактировать онтологию. Были также созданы трансляторы с LООМ на Ontolingua, KRSS, KIF и С++.

# 1.3 Базы данных, имеющие отношение к предметной области «Химия»

В этом разделе рассмотрены существующие базы данных, содержащие химическую информацию, используемую в предметной области «Химия».

Ежегодный прирост библиографической информации в области химической информации достигает 0.5 млн. документов о химических соединениях и 250 тыс. документов о химических реакциях. В настоящее время существует несколько типов баз данных по химии [27, 28]: библиографические базы данных, базы данных структур и базы данных реакций.

***Библиографические базы данных***. Библиографическая база данных (БД) может содержать библиографическую информацию, относящуюся к патентам, техническим данным, или научно-технической литературе [27, 28]. Библиографическая база данных патентов включает такую информацию как: имя изобретателя, имя представителя, номер патента и краткое описание. Библиографическая база данных для научно-технической литературы содержит такую информацию как: ссылка на документ, имя автора, название, ключевые слова и краткое описание. База данных цитат содержит цитаты, найденные в научно-технической литературе. Поиск цитаты выдает документы, содержащие ссылки на искомую цитату. Эту информацию можно использовать при поиске последних документов, содержащих информацию, относящуюся к определенному предмету.

Belstein Online - самая большая база данных органической химии, содержащая библиографическую информацию в форме кратких описаний. База данных организована на основе Справочника по Органической Химии Бельштейна и охватывает химическую литературу (включая структуры и факты) начиная с 1771 года. Belstein Online содержит информацию о химических реакциях, приготовлениях и производных. База данных также включает номера патентов и физические свойства, включая оптические данные, механические свойства и термодинамические свойства. База данных регулярно обновляется последней информацией, изданной в химической литературе. Belstein Online может осуществлять поиск, используя структуры, факты или библиографическую информацию, включая CAS регистрационный номер, регистрационный номер Бельштейна, химическое название, молекулярную формулу, имя автора или название документа.

***Базы данных структур***. Базы данных структур - это базы данных, которые содержат описания химических структур [27, 28]. Химические структуры описаны в топологической форме (в виде связанных таблиц). При ответе на запрос информация отображается в графической форме.

Химическую информацию можно получить, вводя химическую структуру или подструктуру. Поиск подструктуры возвратит список химикалий, которые содержат общую подструктуру. Выбирая химикалии из списка, пользователь БД может получить информацию об этом химикалии. Для выполнения поиска структуры может потребоваться нарисовать химическую структуру, используя программное обеспечение и импортируя эту структуру в базу данных поиска.

Базы данных могут предоставлять поиск помеченных структур. Помеченная структура - это химическая структура, которая содержит функциональные эквиваленты (обычно обозначаемые как X или Y) в одном или более связанных узлах. X или Y представляют одну или более функциональные группы, которые могут содержаться в структуре. Отдельная помеченная структура может представлять много химикалий, которые являются функционально подобными.

База данных ACD [29] содержит информацию о 235978 уникальных веществ. Поиск производится по структуре, подструктуре, а также по названию и регистрационному номеру САS. В базе данных также хранится информация о цене и о производителе. База данных позволяет искать и отображать 3D молекулы.

База данных ChemACX, Available Chemicals Xchange [27, 28] - большой и растущий ресурс информации о доступных компонентах. Он содержит список компонентов, начиная с Alfa Aesar и Aldrich и заканчивая TCI и Zeneca с сотнями между ними, включая 500,000 продуктов из 300 каталогов.

База данных CHEMTOX Online [27, 28] содержит химикалии и информацию об их воздействии на здоровье, окружающую среду и безопасность. База данных Dictionary of Substances and their Effects (DOSE) также содержит химикалии и информацию о воздействии химикалий на организмы и окружающую среду.

База данных CHIRBASE [31] содержит 85000 хиральных разбиения, более 28000 молекулярных структур, 4000 новых разбиений, обновляемых каждые четыре месяца, и большое число неопубликованных данных. Является инструментом для подготовительного или аналитического анализа различных препаратов (лекарственных, агрохимических и др.). Данные включают молекулярные структуры (энантиомер и CSP), хроматографические данные, экспериментальные условия и источник.

База данных CLAIMS Compund Registry [27, 28] содержит список определенных химикалий, включающий химические названия, синонимы и молекулярные формулы.

Environmental Chemicals Data Information Network (ECDIN) - Банк данных химикалий [27, 27]. Поиск можно осуществлять по названию, молекулярной формуле или CAS регистрационному номеру. Данные включают: физико-химические свойства, производство и использование.

MALT2 (Materials-oriented Little Thermodynamic Database for Personal Computers) [27, 28] - база данных по термодинамическим свойствам индивидуальных веществ с программами расчета равновесного состава и ре ения задач материаловедения. Содержит такие сведения, как стандартная энтальпия образования, DfH (298.15 К), стандартная энергия Гиббса образования, DfH (298.15 К), стандартная энтропия, S (298.15 К), теплоемкость, Ср, сведения о теплоте фазовых переходов и изменениях энтальпии фазовых переходов для примерно 5000 веществ; база данных ориентирована на анализ процессов производства керамики, полупроводников, ядерных топлив, материалов для производства ядерных реакторов, анализа плазмохимических процессов и т.д. Информация из базы данных может быть представлена в виде таблиц.

База данных MARPAT [27, 28], произведенная Chemical Abstract Service (Службой Химических Аннотаций), может осуществлять поиск, используя помеченные структуры. База данных содержит библиографическую запись помеченных структур, найденных в файле Химические Описания с 1988 года по сей день. Эта база данных учитывает исправление библиографической информации, относящейся к помеченным структурам. В настоящее время база данных содержит более 122000 записей из 29 национальных патентных офисов, включая Европейский Патентный Офис и Мировую Организацию Интеллектуальной собственности.

База данных OrganicCompounds Database [27, 28] содержит физические данные о большом количестве органических составов, включая молекулярный вес, температуру плавления, температуру кипения, индекс преломления и UV поглотительные пики. Поиск может осуществляться по имени, молекулярной формуле или по значениям данных для вы еупомянутых свойств.

Примером базы данных структур является база данных Registry [27,28]. Поиск в базе данных осуществляется с использованием программного обеспечения Messenger, разработанного Chemical Abstract Service, которое позволяет осуществлять поиск полной структуры и подструктуры, а также поиск номенклатуры.

База данных SmileCAS Database[30] содержит SMILES записи, химические названия и САS (Chemical Abstract Service) номера для 103,000 компонентов.

База данных SOLV-DB [27, 28] - база данных физических и химических свойств более 100 обычных органических растворителей. Содержит информации о воздействии на здоровье, безопасность и окружающую среду. Поиск может осуществляться по названию, формуле, CAS регистрационному номеру, значениям свойств и т.д.

База данных The Solvents Database (SOLVDB) [27, 28] содержит информацию о растворителях, их физико-химических свойствах, воздействии на окружающую среду, здоровье и безопасность.

База данных World Drug Index (WDI) [27, 28] содержит более 58000 компонент с известным биологическим действием. Позволяет классифицировать компоненты согласно типу биологического действия, механизма, синонимов, профессиональному названию, ссылкам и прочему.

***Базы данных реакций.*** Базы данных реакций - это базы данных, содержащие информацию о химических реакциях [54, 80]. Базы данных содержат:

• таблицы связи компонентов;

• информацию о реакционных центрах;

• информацию о распределении атомов и атомных групп в реакции;

• информацию о реагентах и результатах реакций;

• информацию о катализаторах и условиях прохождения реакций.

Эти базы данных содержат не только данные о реакциях, но также библиографическую и фактическую информацию. Поиск в базе данных реакции может осуществляться по структуре, но обычно поиск ведется по реакционным центрам или данным реакции.

Примерами баз данных реакций являются ChemInformRX, CASREACT и Chemreact. Ни одна из баз данных реакций не содержит всех реакций, описанных в химической литературе.

Beilshtein Handbuch der Organischen Chemie [27, 28] содержит числовые и фактические данные миллионов компонент. CrossFire является расширенной версией базы данных Beilstein. База данных состоит из 30 миллионов отчетов, из которых 5 миллионов относятся к реакциям. База данных Hence - база данных реакций. Но помимо этого, она покрывает структурную, библиографическую и фактическую информацию.

CHC [27, 28] содержит собранные обзоры гетероциклических химических синтезов и реакций, изданные до 1983. Делает упор на синтез гетероциклических соединений, реакции гетероциклических систем и использование гетероциклических соединений в синтезе не гетероциклических структур. Содержит 42376 реакции и 62188 молекул.

ChemInform была высоко ценимым еженедельным компендиумом около четверти века. Ее отличают избранные резюме из приблизительно 230 основных журналов, фокусирующихся на информационных потребностях практически любого химика, занимающегося органическим синтезом и металлоорганической химией. Типичная запись ChemInform состоит из аккуратно подготовленного резюме и общей схемы в виде формулы, которая описывает все, о чем написано в статье, используя язык, наилучшим образом понятный каждому химику. Около 10000 из примерно 18000 статей, публикуемых в ChemInform каждый год, содержат точную информацию о реакции. Это и делает ChemInform одним из богатейших источников реакций, известных на настоящий момент с приростом примерно в 60000 за год. С 1990 года на основе данных, собранных для ChemInform, пополняются базы данных реакций Current Synthetic Methodology(CSM) и ChemInformRX (CIRX). В этих базах данных каждая реакция представлена отдельной записью, хотя из одного исходного документа выбираются обычно сразу несколько реакций. Для того чтобы просмотреть все примеры некоторой реакции, или полный синтез, центральной частью которого является эта реакция, пользователю приходилось осуществлять дополнительный поиск, например, полного пути синтезирования или всех реакций, взятых из одной конкретной статьи. С 1995 года в базе данных CIRX появилась новая особенность, которая выводит схему формулы ChemInform на экран по щелчку мыши. Полное резюме ChemInform появляется вместе с полезной дополнительной информацией в отдельном окне. Можно сразу увидеть все имеющиеся примеры реакции, оценить масштабы метода или увидеть полную последовательность синтеза нескольких реакций.

Chemreact - база данных реакций, которая содержит более 300000 химических реакций, изданных в химической литературе с 1974 по 1991 года. Информация, содержащаяся в базе данных, включает: структуры реагентов и результатов, химические названия растворителей и катализаторов, стереохимию реагентов и результатов, результаты химических реакций и информацию о реакциях. База данных может осуществлять поиск по любой из вы еуказанной информации.

ChemReact41 - база данных, которая охватывает 41300 реакций. Она предназначена специально для тех химиков, у которых нет необходимости в очень подробной информации.

База данных ChemRXN [27, 28] содержит информацию о более 29000 полных реакциях с распределенными атомами. Включает тщательно отобранные реакции из баз данных ChemSelect и ChemPrep.

ChemSynth [37] - база данных реакций, продаваемая на компакт-дисках. ChemSynth содержит важнейшую информацию о более 102000 реакций. Реакции взяты из родительской базы данных InfoChem, и выбраны они согласно тому критерию, что выход продукта каждой из них превы ает 50%. ChemSynth разработана для химиков-экспертов по синтезу, которые ищут новые и более эффективные способы достичь определенных превращений.

База данных CHIRAS [27, 28] содержит полный список полезных методов асимметричного синтеза. Основана на химической литературе 1975¬1991 годов. Делает упор на: энантио-выборочные реакции, использующие оптически активные агенты диостереовыборочных реакций, вовлекающих хиральные вспомогательные реакции молекул с существующими хиральными центрами - синтез "хирального пространства”. CHIRAS содержит 13220 реакций и 20316 молекул.

База данных Core [27, 28] содержит 75000 реакций. Создана на основе литературы 1946-1991. Типы охваченных реакций включают: синтез гетероциклических структур и больших колец, новые синтетические методы, применение новых реактивов, новые методологии, улучшающие результаты, синтез асимметричных структур.

Current Chemical Reactions (CCR) [27, 28] содержит информацию как о текущих данных, так и о приложениях добычи информации, используемой для создания химических синтезов. Содержит информацию из более 300000 статей, сообщающих о полном синтезе молекул.

Current Literature File (CLF) [27, 28] - база данных синтетических методов новых разработок в органической химии, созданная на основе литературы 1983-1991. Делает упор на новые методы и реактивы, а также отборные преобразования мультифункциональных молекул. Содержит 36601 реакций и 55683 молекул.

Environmental Fate Data Base (EFDB) [27, 28] содержит библиографические и экспериментальные значения информационных файлов, полученных на основе результатов ухудшения окружающей среды и изменения физико-химических свойств.

Примером базы данных реакций также может служить база данных Failed Reactions [32]. База данных Failed Reactions содержит реакции, описанные в литературе, при проведении которых не были получены ожидаемые результаты. Эти реакции делятся на три категории: неожиданный результат, дополнительная реакция и не произошедшая реакция. данных Failed Reactions содержит тысячи реакций. Хотя данных Failed Reactions может быть использована независимо, ее луч е использовать совместно с другими комплексными базами данных, такими как MOS, поскольку примеры удачных и неудачных экспериментов позволяют лучше оценить результаты эксперимента. Для облегчения подобной работы авторы позаботились о разработке форм пользовательского интерфейса, чтобы можно было отличать описания неудавшихся реакций от описаний реакций в других базах данных. данных Failed Reactions является уникальным ресурсом для химика-аналитика и позволяет избежать ошибок, на которые постоянно натыкаются другие. База данных содержит реакции, описанные в литературе, но которые не проходят как ожидается. Эти реакции делятся на три категории: неожиданные результаты, незапланированное продолжение реакции, или отсутствие реакции там, где результат ожидался. В настоящее время большое внимание уделяется вопросам молекулярной информации и представления ее в виде работающих систем, моделирующих работу клеток [3].

Metalysis [27, 28] - база данных промежуточных преобразований металлов, охватывает органические применения катализаторов преобразования металла и реактивы. Создана на основе химической литературы 1974-1991 годов. Содержит синтетические применения и органические преобразования металлических комплексов. Делает упор на: активацию и функционализацию маленьких молекул, формирование олигомеров и более сложных полимеров, разработку новых материалов и новых процессов. Содержит 11,999 реакций и 18,484 молекул.

NME Express: New Molecular Entities [27, 28] содержит информацию о составах, выбранных для фармакологической оценки и структурного усовершенствования, которое улучшает действие препарата или добавляет разнообразие к известным классам механических лекарств и составов, полезных для исследования роли различных препаратов.

ORGSYN [33] содержит информацию, полезную для химиков в разнообразных областях органической химии. Содержит информацию о новых общих методах синтеза. Основной упор делается на: модель синтетических процедур и приготовление общих реагентов, независимо проверенные и оптимизированные процедуры и явные экспериментальные детали и предупреждения об опасности. Содержит 5690 реакций и 6090 молекул. Ежегодно обновляется.

База Данных Физических Свойств (PHYSPROP) [35] содержит химические структуры, названия и физические свойства для более 25250 химикалий. Физические свойства собраны из многих источников, и включают экспериментальные, экстраполируемые, и оцененные значения для температуры плавления, температуры кипения, растворимость в воде, октанол- водный коэффициент разделения, давление пара, рКа, закон константы Генри, и отношение константы ОН в атмосфере. В настоящее время РНYSPRОР содержит следующее число экспериментальных записей: Точка плавления (10120), Точка кипения (6629), Растворимость в воде (6340), Октанол-водный коэффициент разделения (13250), Давление Пара (2837), рКа (1652), Закон константы Генри (1713), Коэффициент ОН (разряд) (500).

RCI [27, 28] охватывает недавно зарегистрированные мировые патенты и лидирующие международные органические журналы химии с 1980 до настоящего времени, обеспечивая доступ к более чем 500000 реакциям. Содержит одно- и многошаговые синтетические методы, взятые из ведущих журналов и международных патентов. Для каждого метода предусмотрен полный поток реакции наряду с детальным и точным графическим представлением каждого шага реакции.

Synthetic Organic Reaction [34] databases содержит более 1233000 реакции. Поиск можно осуществлять по: молекулярной структуре, преобразованиям атомов и связи в реакции, реагентам, продуктам, растворителям или катализаторам, данным о реакции (например, температура или результат), литературным ссылкам, ключевому слову описания типов реакции.

База данных THEILHEIMER. [27, 28] представляет собой сборник высокопродуктивных функциональных преобразований групп и синтетических методов, отобранных из литературы 1946-1980. Содержит новые синтетические методы и применения известных реактивов, высокопродуктивные функциональные преобразования групп, структуры углеродных скелетов. Содержит 46784 реакций и 60643 молекул.

Thermodynamics Research Center Databases [27, 28] содержит информацию о примерно 15 800 чистых веществах, свойствах 9000 бинарных и тройных растворов и примерно 2500 реагирующих систем. Содержит около 17 900 образцов, использованных при измерениях тех или иных свойств. Описание образца включает происхождение образца, его чистоту и метод очистки. Также содержит сведения о 82 000 работах, примерно 22 000 из которых связаны с числовыми значениями в базе данных и примерно 850 000 численных значений различных свойств.

Базы данных, пополняющиеся за счет информации из Всемирной Компьютерной Сети, очень популярны. Это связано с тем, что Интернет, безусловно, представляет собой, во-первых, один из самых емких, а во- вторых, очень быстро обновляющихся источников информации. Примером базы данных, формируемой посредством сбора информации в Интернете, является WWW-Chemical-Structures-Database. Она содержит более 2250 автоматически собранных в Интернете химических структур, дополненных информацией об HTML-страницах, с которых они были взяты. В этой базе данных также осуществляется поиск по структурам и подструктурам, по формулам, названиям и т.д.

# 1.4 Программные системы, решающие з адачи, имеющие отношение к предметной области «Химия», а также системы, основанные на онтологиях

В этом разделе описаны программные системы, ре ающие различные задачи, имеющие отно ение к предметной области «Химия».

Программная система Encore [38] позволяет вводить информацию, которую можно найти в химической литературе, обеспечивает ее индексацию, а также структурирует информацию так, чтобы она могла использоваться для гибкого компьютерного поиска.

Продукты Afferent TeamWorks 3.0 [39] состоят из трех функциональных модулей: Структура Afferent, Синтез Afferent, и Аналитический Afferent. Система позволяет хранить информацию о реакциях и поддерживает выполнение различных простых и сложных запросов о реакциях.

Интеллектуальный пакет прикладных программ для физической химии предназначен для решения вычислительных задач данной области. Разработка данного пакета основана на метаонтологии физической химии. Пакет содержит две части: информационную и программную.

Информационная часть используется для хранения онтологии и знаний разделов физической химии. Онтология описывает названия физических свойств элементов, веществ и реакций. Знания описывают физические свойства элементов, веществ и реакций, в том числе и зависящие от значений температуры и давления, а также связи между значениями свойств. Связи представляются импликациями. Условие импликации описывает, когда задаваемая зависимость между значениями справедлива, а следствие - задает эту зависимость в виде равенств. Пользователь может определить зависимость между значениями свойств веществ одного шага физико-химического процесса, а также зависимость значений свойств веществ на некотором шаге от значений других свойств (в том числе и других веществ) на предыдущих шагах физико-химического процесса. Программная часть содержит редакторы онтологий и знаний, систему ввода исходных данных задач, а также систему автоматического построения решателя вычислительных задач. Набор классов задач, решаемых с помощью пакета, определяется содержимым онтологии и базы знаний. Пользователь может добавить новый раздел со своей онтологией и знаниями, если структура онтологии согласуется со структурой метаонтологии физической химии.

Экспертная система AIPHOS (Artificial Intelligence for Planning and Handling Organic Synthesis) [48] может предлагать первоначальные и новые маршруты ретросинтеза, основываясь на информации из базы знаний реакции.

AOCR [97] основана на математическом представлении органического синтеза. Смесь органических веществ представлена ребрами разноцветного графа, шаги реакции - перемещением ребер. Ограничения в перемещениях гарантируют, что ни тип, ни валентность атома, ни группа, ни заряд не могут изменяться в ходе реакции. Химик подготавливает правила для этапов реакции, используя знакомый формализм стрелок из органического синтеза. Программа не использует никакой базы данных. Программа предлагает постоянно улуч аемую среду в Интернете для вычисления синтеза органической химии в режиме реального времени. Цель AOCR — создать программное обеспечение, которое позволяет организовать правильное, полное, быстрое и химически наглядное вычисление синтеза органической химии.

CAMEO (Computer-Assisted Mechanistic Evaluation of Organic Reactions/Компьютеризованная Оценка Органических Реакций) — это модульная экспертная система, которая прогнозирует продукты органических реакций при заданных исходных материалах, реагентах и условиях. Отличительной чертой анализа является, прежде всего, механистический характер рассуждения; кроме того, механизм вывода был расширен с целью охватить боль инство основных классов органических реакций. Важным аспектом проекта было точное определение логики, стоящей за правильным прогнозом продуктов и одновременный поиск организующих принципов, управляющих реакционной способностью органических реакций. При заданных исходных материалах и условиях реакции, CAMEO/ChemDraw прогнозирует различные продукты реакции, причем результат прогноза сопровождается комментариями, объясняющими те факторы, которые на него повлияли.

CARAT-MB [40] - это объединенный пакет программ, который включает Построитель Механизма, Базу данных и Базу знаний. Построитель Механизма основан на наборе современных реакторных моделей и позволяет исследователю или инженеру описывать комплекс физико-химических процессов для ирокого диапазона потока, высокой температуры и условий массового перемещения, и дает возможность строить и проверять механизмы процессов газовой стадии. Построитель Механизма позволяет пользователю создавать и проверять химический механизм газовой стадии химических процессов, работая в ручном режиме и, используя автоматическую процедуру Генерации Механизма Реакции, основанного на объединенной Базе данных. Для кинетической информации, недостающей в Базе данных, поддерживается автоматический доступ к диалоговой Базе знаний. Анализ Чувствительности доступен для улучшения неточности результатов и сокращения механизма. Широкий диапазон Реакторных Моделей можно использовать для того, чтобы проверить полученный механизм на различный ход, высокую температуру и условия передвижения масс. Пакет баз данных содержит термодинамическую и кинетическую информацию о химических процессах и отдельных молекул и обеспечивает ирокие возможности для быстрого и легкого построения сложных механизмов реакции. CARAT-MB включает несколько объединенных баз данных: базу данных структурных и термодинамических свойств, содержащую приблизительно 3000 атомов, молекул и радикалов; базу данных параметров взаимодействия для столкновения молекул; и кинетическую Базу данных, которая содержит несколько тысяч констант скорости для реакций газовой стадии. Пользователь может добавлять новые данные в существующие базы данных. База знаний включает современные модели элементарных процессов обмена энергии газовой стадии, химических реакций и плазменных химических реакций и позволяет исследователю компенсировать недостающие кинетические данные. База знаний включает приблизительно 100 моделей, оцененных ведущими Российскими учеными в области элементарных газовых и плазменных процессов. Эти модели позволяют оценить взаимные секции и скорость констант эластичного рассеивания нейтральных и заряженных частиц, вращательные и колебательные неэластичные столкновения, электронный обмен энергии, равновесие и не равновесие химических реакции и плазменных химических реакций. Интерфейс позволяет пользователю формировать диаграммы для всех полученных результатов.

ChemBalance Wizard [45] - мастер моделирования уравнений химического равновесия. Если для данной разновидности химических равновесий уравнений не существует, программа проинформирует об этом.

Chemical WorkBench - программный комплекс для моделирования, оптимизации и проектирования ирокого класса процессов, реакторов и технологий, обусловленных возможностью протекания химических реакций. Chemical WorkBench дает возможность представить реальный процесс в виде цепочки реакторов, каждые из которых моделирует отдельную часть процесса (горение, охлаждение, плазменная обработка и т.д.). В состав программного комплекса включен банк данных, содержащий сведения о термодинамических и термохимических свойствах веществ, а также информацию о константах скоростей химических реакций. Отличительной особенностью программы является возможность моделирования сложных многоступенчатых процессов с химическими превращениями, используя не только равновесные, но и кинетические модели. Структурной единицей модели процесса является реактор - модель некоторой части процесса. Программный комплекс позволяет представить реальный процесс в виде цепочки реакторов (термодинамически равновесного, реактора идеального смешения, реактора идеального вытеснения и т.д.). Исследователь имеет возможность задать параметры для каждого реактора, при этом между реакторами можно установить связь, т.е. передавать продукты реакции из одного реактора в другой. После проведения расчетов результаты моделирования можно представить в виде графиков и таблиц.

Пакет программного обеспечения CHEMKIN содержит множество процедур и функций, облегчающих постановку задач, связанных с исследованием химической кинетики газо-фазных и гетерогенных процессов, их решение и анализ. Программы и библиотеки процедур могут быть использованы при разработке программных комплексов для моделирования кинетики химических процессов в реагирующих потоках. Средства CHEMKIN можно использовать для анализа процессов горения, катализа, осаждения из газовой фазы и т.д.

В состав CHEMKIN входят:

• совокупность процедур для анализа газофазной химической кинетики и кинетики плазмы;

• совокупность процедур для анализа гетерогенной химической кинетики на границе газ - твердое;

• база данных по термодинамическим свойствам веществ;

• совокупность процедур для расчета свойств переноса газов и газовых смесей (коэффициенты диффузии, вязкости, теплопроводности);

• база данных для расчета свойств переноса газов.

CORA (Classification of Organic Reactions for Applications/Классификация Органических Реакций для Приложений) - программная система является богатым источником информации об органических реакциях. Для группировки отдельных реакций в типы реакций на основе физико-химического описания центра реакции используется комбинация классификатора Bayes'a с самоорганизующейся нейронной сетью. Это позволяет обнаружить и визуализировать важные характеристики класса реакций, а также их движущие силы. Набор химических реакций, характеризующихся физико-химическими свойствами атомов и связями центра реакции, вводится в нейронную сеть КоЬопеп. Это приводит к двумерному виду органических реакций. Похожие реакции группируются в типы, непохожие — отделяются друг от друга. Кроме того, этот метод может распознавать особые реакции, определяя, таким образом, границы каждого из типов реакций, и может классифицировать необычные реакции. Автоматическая классификация реакций может использоваться для эффективного поиска в базах данных реакций и, имея ряд отдельных реакций, получать знания о химических реакциях в целом. Такие знания могут использоваться в системах прогнозирования реакций.

EROS (Elaboration of Reactions for Organic Synthesis/ Разработка Реакций для Органического Синтеза) - программная система для моделирования и прогнозирования хода органических реакций. Ход химической реакции и ее продукты предсказываются с учетом данных исходных материалов. Система ЕROS разрабатывалась более 20 лет. В последней версии, EROS 7.0, база знаний и методы ре ения задач четко отделены друг от друга. База знаний состоит из методов вычисления важных электронных и энергетических эффектов в молекулах органических соединений, а также из правил оценивания хода элементарных химических процессов.

Экспертная система EXPRES (EXPert system for chemical REaction cycles Synthesis) [46] может автоматически генерировать два вида реакционных циклов, т.е. циклы химических реакций и группы химических реакций с помощью БД реакций. В БД реакций объединены известные реакции, которые точно идут при допустимых скоростях. EXPRES содержит информацию о правилах прохождения реакций. Имеется метод перевода формул химических реакций в список выражений на языке LISP. EXPRES можно использовать для получения многошаговой группы реакций из одиночной реакции, которую сложно получить в промышленных условиях, и поиска химических циклов выработки тепла, происходящих в необходимом температурном интервале.

Gepasi - программа, работающая под управлением Microsoft Windows, предназначенная для моделирования кинетики систем химических и биохимических реакций. Gepasi способна моделировать статическое и временное поведение реакций в нескольких ячейках различных объемов. Пользователь предоставляет программе информацию о структуре стехиометрической траектории, кинетике каждой реакции, об объемах ячеек и о начальной концентрации всех химических видов. Затем программа формирует дифференциальные уравнения, которые управляют поведением системы, и решает их. Результаты могут импортироваться в электронные таблицы или другие программы обработки данных. Данные могут также быть представлены в виде 2D и 3D графиков. Gepasi позволяет просмотреть диапазоны значений параметров системы и производить отображение поведения системы внутри этих диапазонов. Gepasi характеризует устойчивые состояния, которые найдены посредством Метаболического Анализа Управления и линейного анализа стабильности кинетики.

HSC Chemistry [41-43] - это пакет программ, содержащий обширную термохимическую базу данных из более 11000 структур. Программа включает 7 различных опций расчетов для вычисления свободной энергии Гибса и констант равновесия для уравнений реакции, температуры и материальных балансов, составов равновесия, весов формул, электрохимического равновесия клетки, диаграмм стабильности стадии, и Eh-pH (Pourbaix) диаграмм.

Kinetics [41, 44] - автоматически отслеживает реагенты и продукты, генерирует список химических групп в системе. Входными данными являются интересующие реакции и связанные константы скорости. Могут быть исследованы системы, содержащие до 100 обратимых реакций и 50 химических элементов. Каждая индивидуальная реакция может содержать 5 реагентов и 5 продуктов, позволяя исследовать большинство интересующих систем. Программа имеет интерфейс, позволяющий пользователям создавать сложные системы реакций. В программу также включен графический пакет для отображения и печати результатов моделирования. Можно получить графический вывод результатов или сгенерировать файл, подходящий для использования в программе крупноформатных таблиц. Kinetics позволяет рассмотреть течение химических реакций на молекулярном уровне. Есть возможность управлять температурой и добавлять катализаторы. Существует возможность приостановить процесс для более подробного изучения.

Kinetics Simulation Project представляет собой многофазную систему кинетических расчетов, выполняет по шаговые вычисления концентраций участвующих в реакциях ингредиентов с большой точностью. Она распознает различные фазы, но не учитывает их пространственное расположение, что не позволяет рассматривать гетерогенные реакции и влияние площади поверхности раздела фаз на их скорости. Она также позволяет отслеживать момент наступление термодинамического равновесия, но эта функция реализована при помощи очень сильных аппроксимаций и не является ключевой.

LHASA (Logic and Heuristics Applies ti Wynthetic Analysis) [47] - экспертная система, предназначенная для помощи химикам в разработке результативного пути для получения молекул органического синтеза. LHASA ищет собственный способ синтезирования известных и неизвестных компонент, используя химическую БЗ (не БЗ примеров в литературе). БЗ содержит информацию о ретро-реакциях (или трансформациях), а не о реакциях. Текущая версия LHASA содержит 2242 трансформаций и 494 так называемых тактических комбинаций.

МХ раствор. Версия 1.0 - программа, предназначенная для определения массы вещества для приготовления раствора с заданной концентрацией и объемом.

Synthematix [49] - инструмент планирования реакции. Synthematix выполняет работу по развитию структуры. Технологии Syntematix позволяют химикам быстро находить и проектировать синтетические реакции и процедуры систематического построения интеллектуальной собственности.

TEP (Thermal Equilibrium Program) [41] - диалоговый химический инструмент анализа сгорания, для оценки результата сгорания при условиях равновесия, использующий минимизацию свободной энергии Гибса.

WODCA Workbench for the Organization of Data For Chemical Applications/АРМ для Организации Данных Приложений в Области Химии) - программная система для конструирования органического синтеза. Система конструирования синтеза WODCA распространяется компанией Molecular Networks и находится в практическом использовании в нескольких химических компаниях.

# 1.5 Задачи, решаемые программными системами, предназначенными для построения и использования онтологий

В данном разделе рассматриваются задачи, которые позволяют решать системы предназначенные для построения и использования онтологий.

Программная среда Ontolingua Server предоставляет набор инструментов для построения онтологий на языке Ontolingua, их редактирования, удаления, с использованием ранее созданных библиотек онтологий и обеспечивает возможность работы географически разделённых друг от друга групп пользователей.

Программная система Ontosaurus позволяет пользователю создавать, редактировать и удалять онтологии, заполнять и редактировать для созданных онтологий базы знаний, представляемые на языке LOOM, а также просматривать иерархию созданных онтологий.

Программная система ODE (Ontology Design Environment) предоставляет возможности создания, редактирования и удаления онтологий на уровне знаний, используя набор промежуточных представлений, которые не зависят от конечного языка, на котором будет реализована онтология, а также позволяет специфицировать и проверить онтологию пользователям, не являющимися экспертами в языках, на которых реализуются онтологии.

Комплекс, состоящий из двух программных систем Tadzebao и WebOnto предоставляет пользователям следующие возможности: программная система Tadzebao позволяет инженерам знаний проводить заполнение и редактирование базы знаний онтологии, а программная система WebOnto позволяет просматривать, создавать и редактировать онтологии.

# 1.6 Архитектура программных систем, имеющих отношение к предметной области «Химия» и систем основанных на онтологиях

В данном разделе описываются доступные и наиболее интересные архитектуры программных систем, имеющих отношение к предметной области «Химия».

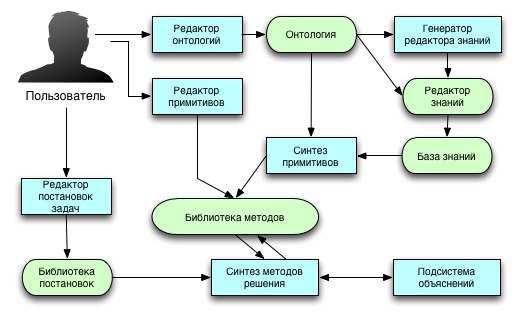
На основе онтологии физической химии создана оболочка интеллектуального пакета прикладных программ для физической химии. 

Рисунок 1.1. АКД оболочки.

Редактор онтологий состоит из редактора утверждений и четырех менеджеров: менеджера модульных моделей онтологий, менеджера сущностей, менеджера свойств и менеджера метасвойств.

Редактор знаний состоит из системы управления базой данных и редактора утверждений (одного для всех редакторов знаний), предназначенного для задания законов раздела в виде предложений языка прикладной логики.

Генератор редакторов знаний состоит из генератора редактора таблиц знаний и генератора подпрограмм вычисления значений терминов по онтологическим соглашениям. Генератор редакторов таблиц предназначен для генерации совокупности таблиц знаний и системы управления этой совокупностью. Генератор подпрограмм вычисления значений терминов сопоставляет каждому онтологическому утверждению, имеющему вид равенства, подпрограммы вычисления значений терминов.

Программная система АOCR, которая доступна в настоящее время, включает вычисляющую часть и построитель для ввода данных и вывода результатов. Смесь органических соединений представлена графами с раскрашенными ребрами, шаги реакции — перемещениями ребер.

В программном комплексе EROS база знаний и методы решения задач четко отделены друг от друга. База знаний состоит из методов вычисления важных электронных и энергетических эффектов в молекулах органических соединений, а также из правил оценивания хода элементарных химических процессов.

В системе CORA для группировки отдельных реакций в типы реакций на основе физико-химического описания центра реакции используется комбинация классификатора Вауеs’а с самоорганизующейся нейронной сетью. Это позволяет обнаружить и визуализировать важные характеристики класса реакций, а также их движущие силы. Набор химических реакций, характеризующихся физико-химическими свойствами атомов и связями центра реакции, вводится в нейронную сеть Kohonen. Это приводит к двумерному виду органических реакций.

Экспертная система САМЕО, в отличие от других программ, которые используют базы данных, содержащие информацию о превращениях, имеющих место в ходе реакции, для ответа на запросы, САМЕО/ChemDraw использует ту же эвристическую логику, которой пользуются ученые- химики. Это позволяет программе сочетать в себе гораздо больше эффектов, которые являются ключевыми в области моделирования обширного, относительно плоского потенциального рельефа органических структур. поскольку САМЕО/ChemDraw не использует базы данных зафиксированных превращений, то она способна на большее, когда дело касается новых представителей химии. Она применяет основную и общую эвристику, в то время как база данных беспомощна, если в нее не занесена правильная реакция. Механистическая логика САМЕО распределена по нескольким механистическим модулям, причем каждый специализируется по типу промежуточных продуктов или условий реакции: кислотный, основной, перициклический, электрофильный/ароматический, радикальный, карбеноид и перициклический. К тому же, имеются модули, специализирующиеся на окислительно-восстановительной, переходной металлоорганической, и гетероциклической химии. Эти типы являются «не такими механистическими», благодаря либо неясности, либо сложности механизма, но они все еще базируются на эвристике. Гетероциклический модуль - это вид исполняемого модуля, неоднократно просматривающего реагенты и промежуточные продукты в соответствующих модулях. Модули САМЕО для принятия решения имеют доступ к множеству объективных физических свойств реагентов. Эти свойства включают рКа (кислотность в системе DMSO), граничные молекулярные орбитали (то есть, ВЗМО и HCMO), фазатеплоты парообразования газа, энергия диссоциации связи (ЭДС) и пространственный параметр Тафта. Каждое из этих свойств также является доступным для контроля в окне представления САМЕО. На более специализированном уровне «карбеновый» модуль, например, анализирует промежуточные карбены в терминах их реакционной способности (больше активных частиц являются менее селективными), разнообразия электронной конфигурации (синглетные и триплетные карбены ведут себя совершенно по- разному) и энергии синглет-триплетного перехода.

В состав пакета программного обеспечения CHEMKIN входят: совокупность процедур для анализа газофазной химической кинетики и кинетики плазмы, совокупность процедур для анализа гетерогенной химической кинетики на границе газ - твердое, база данных по термодинамическим свойствам веществ, совокупность процедур для расчета свойств переноса газов и газовых смесей (коэффициенты диффузии, вязкости, теплопроводности), база данных для расчета свойств переноса газов.

# 1.7 Выводы из обзора

Как показали результаты обзора, в настоящее время существует достаточно большое количество программных систем для решения различных задач, имеющих отношение к химии. Ранние системы для данной области не являлись интеллектуальными, поскольку при их разработке не использовались методы искусственного интеллекта. Но после того, как такие методы получили широкое применение, появились интеллектуальные программные системы для решения задач данной области. Одним из подходов к созданию интеллектуальных систем является их разработка на основе онтологий. Это, с одной стороны, делает понятным для специалистов интерфейс таких систем, с другой стороны, повышает доверие пользователей к ним. Онтологии также являются средством обеспечения повторного использования информации, хранимой в базах знаний интеллектуальных систем, а также методов, применяемых при решении задач.

За последнее время появилось много различных баз данных в области химии, которые содержат огромный объем информации, имеющей отношение к различным разделам химии. Часть из них основывается на информации, собранной в Интернете. Существуют и коммерческие базы данных, имеющие самый разный объем, как правило, они поставляются непосредственно с прибором, к которому жёстко привязаны. Однако доступ к коммерческим базам данных весьма затруднен из-за высокой стоимости информации.

В области химии, немалое внимание уделяется онтологиям, где они уже проявили свою значимость, во-первых, являясь источником единой терминологии, с помощью которой беспрепятственно могут взаимодействовать люди и приложения, а во-вторых, благодаря формальному представлению, так как они являются ядром многих информационных программных систем. Наличие онтологий в области химии, связано с определенной спецификой предметной области — с огромным объемом уже существующих на данный момент данных и постоянным увеличением их количества, что требует систематизации и структуризации. При построении онтологий используются различные методологии, обладающие как рядом достоинств, так и недостатками. О практической значимости онтологий свидетельствуют приложения, созданные на их основе. Онтологии могут применяться в качестве спецификаций для систем, основанных на знаниях, для доступа к информационным ресурсам и для поиска информации на их основе. Несмотря на это, не было найдено ни одной программной системы, которая бы основывалась на онтологии и решала задачи, сформулированные в предметной области «Химия». О сложности и трудоемкости разработки таких программ говорит тот факт, что сбор информации, проектирование и реализация требуют нескольких десятилетий напряженной работы. Однако эти программы используются в коммерческих целях, предназначены для узкого круга специалистов, работающих в научно-исследовательских организациях, и поэтому можно обнаружить лишь общие описания этих программных средств.

Существует достаточно много средств и языков для представления онтологий, достаточно много, что объясняется стремлением к наилучшему представлению, порождающему варианты средств реализации онтологий, а также определенную специфику, различные принципы устройства предметных областей и их многочисленных разделов. Существуют также средства представления онтологий, предусматривающие их внедрение и использование в Интернет. Практически для каждого языка представления онтологий существует соответствующая среда, в которой предусмотрены средства их представления.

Из проведённого анализа литературы, описывающей существующие онтологии в области химии, программные системы для создания метаонтологий и онтологий на их основе, программные средства для решения задач, имеющих отношение к предметной области «Химия» можно заключить, что создание онтологии для предметной области «Химия», разработка программной системы, которая позволяет создавать любые онтологии в области химии и решать основные задачи в области химии, основываясь на знаниях предметной области, является актуально сферой разработки программного обеспечения.

# Глава 2. Метаонтология и онтология предметой области «Физическая химия»

В данной главе представлены метаонтология для физической химии и онтология, основанная на ней.

Представленные метаонтология и онтология были разработаны в рамках диссертационной работы д.т.н., профессора кафедры ПО ЭВМ ДВФУ – Артемьевой Ирины Леонидовны «Многоуровневые модели сложно-структурированных предметных областей и их использования при разработке систем, основанных на знаниях».

# 2.1. Модель метаонтологии для физической химии

Модель метаонтологии для физической химии представляет собой не обогащенную систему логических соотношений без параметров Оф = <*Метаонтология для физической химии* (ST, Интервалы, Категории), ∅, Определение конструкторов для физической химии>.

Определим значения параметров для физической химии.

1. Типы сущностей ≡ {Химические элементы, Химические вещества, Химические реакции, Табличные значения температуры, Табличные значения давления, Фазы}

В метаонтологии физичской химии сущностями являются химические элементы, вещества и реакции, табличные значения температуры и давления и фазы.

1. Типы компонентов сущности ≡ (λ (Тип: {Химичеcкие элементы, Химические вещества, Химические реакции, Табличные значения температуры, Табличные значения давления, Фазы}) (Тип∈ {Химические элементы, Табличные значения температуры, Табличные значения давления} ⇒ ∅), (Тип = Химические вещества⇒{Химические элементы}), (Тип = Химические реакции⇒ {Химические вещества}), (Тип = Фазы ⇒ {Химические вещества, Химические реакции})/)

В качестве компонентов для химических веществ рассматриваются химические элементы, для реакций - вещества, компонентами фазы являются химические вещества. Сущности остальных типов компонентов не имеют.

1. Подмножества компонентов сущности ≡ (λ (пара: {<Химические вещества, Химические элементы>, <Химические реакции, Химические вещества>, <Фазы, Химические вещества>}) / (пара = <Химические реакции, Химические вещества> ⇒{Реагенты, Результаты}, (пара ≠ <Химические реакции, Химические вещества> ⇒ ∅)/)

Все множество веществ, рассматриваемых как компоненты реакций, разбивается на два подмножества - реагенты и результаты реакций

1. Типы компонентов сущности, задаваемых количеством ≡ (λ (Тип: {Химические элементы, Химические вещества, Химические реакции, Табличные значения температуры, Табличные значения давления, Фазы}) (Тип ≠Химические элементы ⇒∅), (Тип ≡ Химические элементы ⇒{Число электронов})/)

Для химических элементов задается число электронов. Сущности остальных типов компонентов, задаваемых количеством, не имеют.

1. Типы сущностей процесса ≡ {Химические вещества, Химические реакции, Фазы}

Сущностями процесса являются химически вещества, реакции и фазы.

Определим сорта имен метаонтологии для физической химии.

1. Сорт Участники реакции: Компоненты сущности(Химические реакции, Химические вещества)

Термин "Участники реакции" обозначает функцию, аргументом которой является реакция, а результатом - непусто множество химических веществ

1. Сорт Вещества процесса: Сущности процесса(Химические вещества)

Термин "Вещества процесса" обозначает функцию, аргументом которой является номер шага процесса, а результатом - множество химических веществ этого шага

1. Сорт Фазы процесса: Сущности процесса(Фазы)

Термин "Фазы процесса" обозначает функцию, аргументом которой является номер шага процесса, а результатом - множество фаз этого шага

1. Сорт Реакции процесса: Сущности процесса(Химические реакции)

Термин "Реакции процесса" обозначает функцию, аргументом которой является номер шага процесса, а результатом - множество химических ракций этого шага

1. Сорт Вещества фазы процесса: Состав сущности процесса(Фазы, Химически вещества)

Термин "Вещества фазы процесса" обозначает функцию, аргументами которой являются номер шага процесса и название фазы, а результатом - множество химических веществ данной фазы

1. Сорт Участники реакции процесса: Состав сущности процесса(Химические реакции, Химические вещества)

Термин "Участники реакции процесса" обозначает функцию, аргументами которой являются номер шага процесса и реакция этого шага, а результатом - множество химических веществ - участников реакции

1. Сорт Реакции фазы процесса: Состав сущности процесса (Фазы, Химические реакции)

Термин "Реакции фазы процесса" обозначает функцию, аргументами которой являются номер шага процесса и фаза этого шага, а результатом - множество химических реакций, идущих в данной фазе

Определим онтологические соглашения для физической химии.

1. Химические элементы ∈{}N \ ∅

Сущности типа "Химические элементы" представляются своими обозначениями

1. Химические вещества ∈ {}N \ ∅

Сущности типа "Химические вещества" представляются своими обозначениями

1. Табличные значения температуры ∈ {} R[Минимальное значение температуры, Максимальное значение температуры] \ ∅

Сущности типа "Табличные значения температуры" представляются вещественными числами, не меньшими минимального значения температуры и не превышающими максимальное значение температуры

1. Нормальная температура ∈ Табличные значения температуры

Нормальная температура всегда является элементом множества табличных значений температуры

1. Табличные значения давления: ∈ {} R[Минимальное значение давления, Максимально значение давления] \ ∅

Сущности типа "Табличные значения давления" представляются вещественными числами, не меньшими минимального значения давления и не преевышающих максимальное значение давления

1. Нормально давление ∈ Табличные значения давления

Нормальное давление всегда является элементом множества табличных значений давления

1. Химические реакции: ∈ {}N \ ∅

Сущности типа "Химические реакции" представляются своими обозначениями

1. Фазы ∈ {}N \ ∅

Сущности типа "Фазы" представляются своими обозначениями

1. (Номер шага: I[1, Число шагов процесса]) (Реакция шага: Реакции процесса(Номер шага)) Участники реакции процесса(Номер шага, Реакция шага) ≡ Участники реакции(Реакция шага)

Участниками реакции на любом шаге процесса являются те химические вещества, которые могут участвовать в этой реакции

1. (Номер шага: I[1, Число шагов процесса]) Вещества процесса(Номер шага) ≠∅

Множество химических веществ на всех шагах процесса не пусто

1. Реакции процесса(Число шагов процесса) ≡∅

Множество реакций последнего шага процесса пусто

Определим конструкторы для физической химии.

1. Собственные свойства элементов ≡ Собственные свойства сущностей(Химические элементы)

Термин "Собственные свойства элементов" обозначает функцию, у которой область определения есть множество значений или множество кортежей значений m, а область значений - множество функций, аргументом каждой из которых является химический элемент, а результатом - элемент множества m

1. Зависящие от температуры свойства простых веществ ≡ Совместные свойства сущностей((× Химические элементы, Табличные значения температуры))

Термин "Зависящие от температуры свойства простых веществ" обозначает функцию, областью определения которой является множество значений или кортежей значений m, а областью значений - множество функций, аргум нтами каждой из которых являются химический элемент (обозначение простого вещества) и табличное значение температуры, а результатом - элемент множества m

1. Собственные свойства веществ ≡ Собственные свойства сущностей(Химические вещества)

Термин "Собственные 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 - элемент множества m

1. Зависящие от температуры свойства веществ ≡ Совместные свойства сущностей((× Химические вещества, Табличные значения температуры))

Термин "Зависящие от температуры свойства веществ" обозначает функцию, областью опреедления которой является множество значений или кортежей значений m, а областью значений - множество функций, аргументами каждой из которых являются химическое вещество и табличное значение температуры, а результатом - элемент множества m

1. Зависящие от давления свойства веществ ≡ Совместные свойства сущностей((× Химические вещества, Табличные значения давления))

Термин "Зависящие от давления свойства веществ" обозначает функцию, областью определения которой является множсетво значений или кортежей значений m, а областью значений - множество функций, аргументами каждой из которых являются химическое вещество и табличное значение давления, а результатом - элемент множества m

1. Зависящие от температуры и давления свойства веществ ≡ Совместные свойства сущностей((× Химические вещества, Табличные значения температуры, Табличные значения давления))

Термин "Зависящие от температуры и давления свойства веществ" 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 результатом - элемент множества m

1. Собственные свойства реакций ≡ Собственные свойства сущностей(Химические реакции)

Термин "Собственные свойства реакций" обозначает функцию, у которой область определения есть множество значений или множество кортежей знач ний m, а область значений - множество функций, аргументом каждой из которых является химическая реакция, а результатом - элемент множества m

1. Зависящие от пути свойства реакций ≡ Совместные свойства сущностей((× Химические реакции, {}{} Химические реакции))

Термин "Зависящие от пути свойства реакций" обозначает функцию, областью определения которой является множество значений или кортежей значений m, а областью значений - множество функций, аргументами каждой из которых являются химиче ская реакция и ее путь (множество реакций), а результатом - элемент множества m

1. Свойства электронов элемента ≡ Свойства компонентов сущности, задаваемых количеством(Химические элементы, Число электронов элемента)

Термин "Свойства электронов элемента" обозначает функцию, областью определения которой является множество значений или кортежей значений m, а областью значений - множество функций, аргументами каждой из которых являются химический элемент и его электрон, а результатом - элемент множества m

1. Свойства участников реакций ≡ Свойства компонентов указанного типа(Химические реакции, Химические вещества)

Термин "Свойства участников реакций" обозначает функцию, областью определения которой является множество значений или кортежей значений m, а областью значений - множество функций, аргументами каждой из которых являются реакция и химическое вещество, а результатом - элемент множества m

1. Зависящие от температуры свойства реакций ≡ Совместные свойства сущностей((× Химические вещества, Табличные значения температуры))

Термин "Зависящие от температуры свойства реакций" обозначает функцию, областью опрделения которой является множество значений или кортежей значений m, а областью значений - множество функций, аргументами каждой из которых являются химическая реакция и табличное значение температуры, а результатом - элемент множества m

1. Зависящие от давления свойства реакций ≡ Совместные свойства сущностй((× Химические реакции, Табличны значения давления))

Термин "Зависящие от давления свойства реакций" обозначает функцию, областью определения которой является множество значений или кортежей значений m, а областью значений - множество функций, аргументами каждой из которых являются химическая реакция и табличное значение давления, а р езультатом - элемент множества m

1. Зависящие от температуры и давления свойства реакций ≡ Совместные свойства сущностей((× Химические реакции, Табличные значения температуры, Табличные значения давления))

Термин "Зависящие от температуры и давления свойства реакций" обозначает функцию, областью определения которой является множество значений или кортежей значений m, а областью значений - множество функций, аргументами каждой из которых являются химическая реакция, табличное значение температуры и табличное значение давления, а результатом - элемент множества m

1. Свойства вещества процесса ≡ Свойства сущностей процесса(Химические вещества)

Термин "Свойства вещества процесса" обозначает функцию, областью определения которой является множество значений или кортежей значений m, а областью значений - множество функций, аргументами каждой из которой являются номер шага процесса и химическое вещество, а результатом - элемент множества m

1. Свойства фазы процесса ≡ Свойства сущностей процесса(Фазы)

Термин "Свойства фазы процесса" обозначает функцию, областью опрделения которой является множество значений или кортежей значений m, а областью значений - множество функций, аргументами каждой из которых являются номер шага процесса и фаза этого шага, а результатом - элемент множества m

1. Свойства процесса и фазы ≡ Общие свойства процесса и его сущности(Фазы)

Термин "Свойства процесса и фазы" обозначает функцию, у которой область определения есть множество значений или множество кортежей m, а область значений - множество функций, у каждой из которых либо один аргумент (номер шага процесса), либо два аргумента (номер шага процесса и фаза этого шага), а результатом является элемент множества m

1. Свойства веществ фазы процесса ≡ Свойства компонента сущности процесса(Фазы, Химические вещества)

Термин "Свойства веществ фазы процесса" обозначает функцию, областью определения которой является множество значений или кортежей значений m, а областью значений - множество функций, аргументами каждой из которых являются номер шага процесса, название фазы и химическое вещество, а результатом - элемент множества m

1. Свойства реакций фазы процесса ≡ Свойства компонента сущности процесса(Фазы, Химические вещества)

Термин "Свойства веществ фазы процесса" обозначает функцию, областью определения которой является множество значений или кортежей значений m, а областью значений - множество функций, аргументами каждой из которых являются номер шага процесса, название фазы и химическое вещество, а результатом - элемент множества m

1. Общие свойства системы ≡ Общие свойства процесса, участвующей в нем сущности и компонента(Фазы, Химические вещества)

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 аргумент (номер шага процесса), либо два аргумента (номер шага процесса и название фазы), либо три аргумента (номер шага процесса, названи фазы и химический элемент этой фазы), а результатом является элемент множества m

1. Свойства реакции процесса ≡ Свойства сущностей процесса(Химические реакции)

Термин "Свойства реакции процесса" обозначает функцию, областью определения которой является множество значений или кортежей значений m, а областью значений - множество функций, аргументами каждой из которых являются номер шага процесса и реакция этого шага, а результатом - элемент множества m

1. Свойства участника реакции процесса ≡ Свойства компонента сущности процесса(Химические реакции, Химические вещества)

Термин "Свойства участника реакции процесса" обозначает функцию, областью определения которой являтеся множество значений 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 множества m

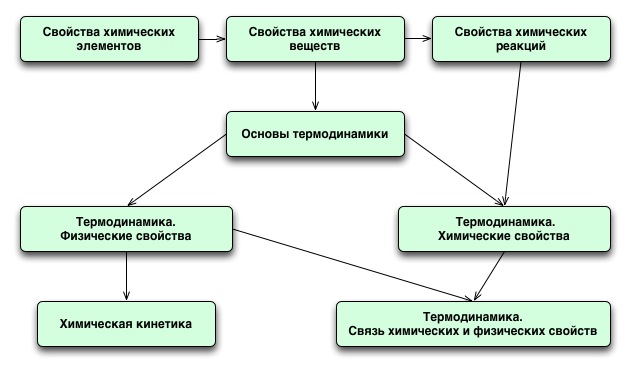
# 2.2 Онтология, основанная на метаонтологии для физической химии.

# 2.2.1 Структура онтологии

В разработке онтологий для физической химии принимал участи е к.х.н., доцент Реутов В. А. Онтология для физической химии и ее модель состоят из 8 связанных друг с другом модулей. Модулями онтологии являются (рис. 2.1):

1. «Свойства химических элементов»,
2. «Свойства химических веществ»,
3. «Свойства химических реакций»,
4. «Основы термодинамики»,
5. «Термодинамика. Химические свойства»,
6. «Термодинамика. Физические свойства»,
7. «Термодинамика. Связь физических и химических свойств»,
8. «Химическая кинетика».

Конец стрелки на рисунке задает модуль, при определении которого используются термины модуля (или модулей), из которого выходит стрелка. Все модули используют вспомогательный модуль «Константы онтологии физической химии». Модули 1-3 определяют термины, используемые при описании свойств элементов, веществ и реакций. В модуле 4 определяются термины, используемые при описании общих свойств термодинамических систем и их компонентов. Состояния термодинамической системы могут изменяться в ходе физико-химического процеесса. Состояния процесса задаются в дискретные моменты наблюдения. В модуле 5 определены термины, используемые при описании фазовых превращений веществ в ходе процесса, без учета химических превращений. В модуле 6 определены термины, используемые при описании химических 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 прохождения процессов.

Рисунок 2.1. Структура модульной онтологии для физической химии.

# 2.2.2 Описание модулей онтологии.

# 2.2.2.1 Модуль «Свойства элементо»

Прикладная логическая теория «Свойства элементов»(SТ, Интервалы) = <{ Метаонтология для физической химии, Константы онтологии физической химии}, SS>, где SS - это множество предложений прикладной логической теории, определяемое ниже. Данная прикладная логическая теория использует предложения прикладной логической теории, определяющей модель онтологии для физической химии. Все неоднозначно интерпретируемые символы данной логической теории являются терминами для описания знаний.

1. Сорт Атомный номер: Собственные свойства элементов(1[0, 108])

Атомный номер элемента соответствует его числу протонов; безразмерная величина

1. Сорт Атомный вес: Собственные свойства элементов(R[0, Максимальное значение атомного веса])

Атомный вес элемента - это отношение массы данного элемента к 1/12 массы 12-го изотопа углерода; измеряется в атомных единицах массы

1. Названия химических групп = {aIb, aIIb, aIIIb, aIVb, aVb, VIII, b}
2. Cорт Химическая группа: Собственные свойства элементов(Названия химических групп)

Химическая группа - это название колонки в таблице Менделеева данного элемента

1. Сорт Химический период: Собственные свойства элементов (I[ 1,7])

Химический период - это номер строки в таблице Менделеева данного элемента; безразмерная величина

1. Сорт Электроотрицательность : Собственные свойства элементов(R[0, граница(Электроотрицательность)])

Электроотрицательность - это способность элемента приобретать электроны; безразмерная величина

1. Сорт Электронное сходство: Собственны е свойства элементов(R[0,

Граница(Электронное сходство)])

Электронное сходство - это энергия, которая освобождается, когда газообразный нейтральный атом элемента захватывает электрон с образованием аниона; измеряется в электрон-вольтах, где 1э.в.=1.6\*10-19 Дж

1. Cорт Полужизнь: Собственные свойства элементов(R[0, Граница(Полужизнь)])

Полужизнь - это время, необходимо для распада половины всех атомов радиоактивного элемента из всех имеющихся; измеряется в годах

1. Сорт Энергия ионизации: Свойства электронов элемента (R[0, ∞))

Энергия ионизации - энергия, необходимая для отрыва электрона, самого отдаленного от ядра газообразного атома элемента, и превращения атома в газообразный катион; различают энергию ионизации, необходимую для отрыва самого первого электрона, за ним второго, третьего и т.д.; измеряется в электрон-вольтах, где 1 э.в. = 1.6 \* 10-19 Дж

1. Сорт Степень окисления: Собственные свойства элементов({}I[-

Граница(Степень окисления), Граница(Степень окисления)])

Степень окисления - это множество возможных значений, как положительных так и отрицательных; безразмерная величина

1. Константа радиоактивности = (λ (e: Химические элементы) 1 / Полужизнь(e))

Вспомогательный термин "Константа радиоактивности" - это вероятность того, что атом распадется в единицу времени; обратная по отношению к полужизни величина; измеряется в 1/год

1. Сорт Атомный объем: Зависящие от температуры свойства простых веществ(R[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 химический элемент и табличное значение температуры

1. Сорт Сопротивление: Зависящие от температуры свойства простых веществ(R[0, Граница(Сопротивление)])

Cопротивление - электрическое сопротивление куба со стороной 1 см; измеряется в мкОм \* см; сопротивление - это функция, аргументами которой являются химический элемент и таблично значение температуры

1. Атомная плотность = (λ (e: Химические элементы) (t: Табличные значения температуры) Атомный вес(е) / Атомный объем(e, t))

Атомная плотность элемента - это величина, производная от атомного веса и атомного объема

1. Сорт Удельная теплоемкость: Зависящие от температуры свойства простых веществ(R[0, Граница(Удельная теплоемкость)])

Удельная теплоемкость - это способность вещества аккумулировать тепло на единицу вещества; измеряется в К/(Дж \* моль); удельная теплоемкость - это функция, аргументами которой являются химический элемент и табличное значение температуры

1. Сорт Теплопроводность: Зависящие от температуры свойства простых веществ (R[0, Граница(Теплопроводность)])

Теплопроводность - это способность вещества проводить тепло; измеряется в Дж / (m \* c); теплопроводность - это функция, аргументами которой являются химический элемент и табличное значение температуры

# 2.2.2.2 Модуль «Свойства веществ»

Прикладная логическая теория «Свойства веществ»(SТ, Интервалы, Математические кванторы) = <{“Свойства элементов”}, SSв>, где SSв есть множество предложений прикладной логической теории, описанное ниже. Данная прикладная логическая теория использует предложения прикладной логической теории «Свойства элементов». Все неоднозначно интерпретируемые символы данной логической теории являются терминами для описания знаний.

1. Возможные формулы ≡ (∪ (n: I[1, Максимальное число составляющих]) {(v: ((х Химиче ски е элем енты, Ц-Максимальная степень окисления, Максимальная степень окисления], I[1, Максимальный коэффициент]) ⇑n)) (&(i: I[1, length(v)]) (&(j: I[1, length(v)] \ {i}) π (i, v) ≠ π (j, v)))}) ∪ (∪ (n: I[1, Максимально число составляющих]) {(v: ((х Возможные формулы ∪ Химические элементы, I[-Максимальная степень окисления, Максимальная степень окисления], I[1, Максимальный коэффициент])⇑n)) (&(i: I[1, length(v)]) (&(j: I[1, length(v)] \ {i}) π(i, v) ≠ π(j, v)))})

Вспомогательный термин "Возможные формулы" обозначает множество представлений формул химических веществ.

1. число атомов ≡ (λ (v: возможные формулы) (k: Химические элементы) (∑(i: I[1, length(v)]) / (π(1, π(i, v)) ∈ Химические элементы & (π(1, π(i, v)) = k ⇒ π(3, π(i, v))), (π(1, π(i, v)) ∈ Химические элементы & (π(1, π(i, v)) ≠k ⇒0), (π(1, π(i, v)) ∉ Химические элементы ⇒число атомов(π(i, v), k) \* π(3, π(i, v)))/))

Вспомогательный термин "число атомов" есть функция, которая по формуле вещества и идентификатору элемента возвращает суммарное число атомов этого элемента во всех компонентах и подкомпонентах формулы данного вещества

1. заряд ≡ (λ (v: возможные формулы) (∑ (i: I[1, length(v)]) π(2, π(i, v)) \* π(3, π(i, v))))

Вспомогательный термин "заряд" есть функция, которая по формуле возвращает суммарный заряд как сумму зарядов по всем компонентам формулы с учетом коэффициентов

1. Простые вещества ≡ {(v: Химические вещества) length(Формула(v)) = 1 & π(1, π(1, Формула(v))) ∈ Химические элементы} простое вещество - это вещество, молекулу которого образуют атомы одного химического элемента
2. Сорт Формула: Собственные свойства веществ(Возможные формулы) Собственным свойством вещества является его формула
3. (v: {Эбулиоскопическая константа, Криоскопическая константа, Молярная теплота плавления, Молярная теплота парообразования, Коэффицинт теплового расширения, Молярная масса}) сорт v: Собственные свойства веществ(R[0, Граница(v)])

Cобственными свойствами вещества являются следующие свойства:

* эбулиоскопическая константа; измеряется в К2/(моль \* г)
* криоскопическая константа; измеряется в К2/(моль \* г)
* молярная теплота плавения; измеряется в Дж/(моль \* г)
* молярная теплота парообразования; измеряется в Дж/(моль \* кг)
* коэффициент теплового расширения; измеряется в Дж/см3
* молярная масса - это масса одного моля вещества; измеряется в г/моль

1. Сорт Давление насыщенного пара: Зависящие от температуры свойства веществ(R[0, Максимальное давление ])

Давление насыщенного пара; измеряется в Па; давление насыщенного зависит от температуры

1. Сорт Изобарный потенциал: Зависящие от температуры свойства веществ(R[ - Граница(Изобарный потенциал), Граница(Изобарный потенциал)])

Изобарный потенциал; измеряется в Дж/моль; значение изобарного потенциала зависит от температуры

1. (v: {Температура замерзания, Температура кипения}) сорт v: Зависящие от давления свойства веществ(R[-Граница(Температура),

Граница(Температура)])

Зависящими от давления свойствами веществ являются температура замерзания и температура кипения; измеряются в К

1. (v: {Молярная энтальпия образования, Молярная энтропия, Молярная энергия Гиббса образования, Плотность, Молярный объем}) сорт v: Зависящие от температуры и давления свойства вещееств (R[-Граница(v), Граница(v)])

Зависящие от температуры и давления свойства вещества:

* молярная энтальпия образования; измеряется в Дж/моль
* молярная энтропия; измеряется в Дж/(К \* моль)
* молярная энергия Гиббса образования; измеряется в Дж/моль
* плотность; измеряется в г/см3
* молярный объем; измеряется в см3

1. сорт Устойчиво: Зависящие от температуры и давления свойства веществ(L)

Устойчиво - предикат, истинный, если при данных давлении и температуре вещство устойчиво

*Онтологические соглашения.*

1. (i: Химические вещества) (t: Табличные значения температуры) (p: Табличные значения давления) Плотность(i, t, p) = Молярная масса(i) / Молярный объем(i, t, p)

Плотность вещества при любых температуре и давлении равна частному от деления его молярной массы на молярный объем

1. (i: Химические вещества) (t: Табличные значения температуры) (p: Табличные значения давления) Молярная энергия Гиббса образования(i, t, p) = Молярная энтальпия образования(i, t, p) - Молярная энтропия (i,t,p)\*t молярная энергия Гиббса образования вещества при данных температур и давлении - это разность молярной энтальпии образования вещества и произведения молярной энтропии вещества на температуру
2. (t: Табличные значения температуры) (p: Табличные значения давления) (i: {(i’: Простые вещества) Устойчиво(i’, t, p)}) Молярная энтальпия образования(i, t, p) = 0

Если простое вещество устойчиво при некоторых температуре и давлении, то принимаем значение его молярной энтальпии образования при этих температуре и давлении равным нулю

# 2.2.2.3 Модуль «Свойства реакций»

Прикладная логическая теория «Реакции» (ST, Интервалы, Математические кванторы) = <{«Вещества»}, SSр использует предложения прикладной логической теории «Вещества». Все неоднозначно интерпретируемые символы данной логической теории являются терминами для описания знаний.

1. постоянная Фарадея = 96485

Вспомогательный термин "постоянная Фарадея" - константа предметной области; измеряется в Кл/Дж

1. возможные состояния веществ = { жидкое, растворенное, газовое, твердое}

Вспомогательный термин возможные состояния веществ обозначает множество возможных состояний веществ

1. сорт Элементарная: Собственные свойства реакций(L)

Cобственным свойством реакции является свойство ее элементарности

1. сорт Окислительная: Собственные свойства реакций (L)

Cобственным свойством реакции является ее свойство быть окислительной ракций

1. сорт Восстановительная: Собственные свойства реакций (L) собственным Свойством реакции является ее свойство быть восстановительной реакций
2. сорт Сложная: Собственные свойства реакций (L)

Собственным свойством реакции является ее свойство быть сложной реакцией

1. сорт Обратимая: Собственные свойства реакций (L)

Собственным свойством реакции является ее свойство быть обратимой реакцией

1. сорт Необратимая: Собственные свойства реакций (L)

Собственным свойством реакции является ее свойство быть необратимой реакцией

1. сорт Восстановительная: Собственные свойства реакций (L)

Собственным свойством реакции является ее свойство быть восстановительной реакцией

1. (v: {Верхняя температурная реакции, Нижняя температура реакции}) сорт v: Собственные свойства реакций(R[0, Максимальная температура])

Свойствами реакции являются верхняя и нижняя температуры реакции - это максимальное и минимальное значения температуры, при которых реакция имеет место

1. (v: {Верхнее давление реакции, Нижнее давление реакции}) сорт v: Собственные свойства реакций(R[0, Максимальное давление ]) свойствами реакции являются верхнее и нижнее давление реакции - это максимальное и минимальное значения давления, при которых реакция имеет место
2. Сорт Возможные пути протекания: Собственные свойства реакций({}{}Химические реакции)

Термин "Возможные пути протекания" обозначает функцию, аргументом которой является химическая реакция, а результатом - множество путей протекания (каждый путь преедставляется множеством реакций)

1. Сорт Катализаторы: Зависящие от пути свойства реакций({}Химические вещества)

Зависящим от пути свойством реакции является свойство "катализаторы" - это вещества, ускоряющие или делающие возможным тот или иной путь химической реакции

1. Сорт Стехиометрический коэффициент: Свойства участников реакций(I[0, Г раница(Стехиометрический коэффициент)])

Cвойством участника реакции является стехиометрический коэффициент - это целое значение , обозначающее минимальное число молекул реагента или результата принимающее участие в одном акте химической реакции вместе с другими участниками

1. Сорт Мольная доля: Свойства участников реакций(R[0, 1])

Cвойством участника реакции является мольная доля - это отношение количества вещества участника к общему количеству вещества участников реакции, при котором реакция имеет место

1. Сорт Состояние участника: Свойства участников реакций(возможные состояния веществ)

Свойством участника реакции является состояни участника - это то состояние участвующего в реакции вещества, при котором эта реакция имеет место

1. (v: {Изменение молярной энтальпии, Изменение молярной энтропии, Изменение молярной энергии Гиббса, КР, Электродный потенциал, Вольт эквивалент}) сорт v: Зависящие от температуры и давления свойства реакций(R[- Г раница(v),Г раница(v)])

Зависящие от температуры и давления свойства реакций:

* изменение молярной энтальпии реакции; измеряется в Дж/моль
* изменение молярной энтропии реакции; измеряется в Дж/(моль \* К)
* изменение молярной энергии Гиббса; измеряется в Дж/моль
* константа равновесия химической реакции по парциальным давлениям, общепринятое химическое обозначение “КР”; безразмерная величина
* электродный потенциал окислительно-восстановительной реакции; измеряется в Дж/Кл
* вольт эквивалент окислительно-восстановительной реакции; измеряется в Дж/Кл

1. Сорт KC: Собственные свойства реакций(R[- Граница(КС),Граница(КС)]) константа равновесия химической реакции по равновесным концентрациям, общепринято химическое обозначение “КС”; безразмерная величина
2. Сорт Уравнение диссоциации: Собственные свойства веществ({} Химические реакции)

Собственным свойством химического вещества является уравнение диссоциации в водном растворе

1. Сорт Неэлектролит: Собственные свойства веществ(L)

Cобственным свойством вещества является его свойство быть неэлектролитом

1. Cорт Электролит: Собственные свойства веществ(L)

Cобственным свойством вещества является его свойство быть электролитом

1. Cорт Слабый электролит: Собственные свойства веществ(L)

Cобственным свойством вещества является его свойство быть слабым электролитом

*Онтологические соглашения.*

1. (i: Химические вещества) Электролит(i) ⇔ Уравне ние диссоциации(i)≠∅ Электролит - это химическое вещество, которое способно диссоциировать
2. (i: Химические вещества) Неэлектролит(i) ⇔ Уравнение диссоциации(i)=∅ Неэлектролит - это химическое вещество, которое неспособно диссоциировать
3. (f: Химические реакции) (∑ (r: Реагенты(f) ∪ Результаты(f)) Мольная доля(r)) ≤1

Сумма мольных долей реагентов и результатов химических реакций всегда не больше диницы

1. (f: {(f: Химические реакции) Элементарная(f)}) Возможные пути протекания(f) = ∅

У элементарных реакций нет возможных путей протекания

1. (f: {(f: Химические реакции) Сложная(f)}) Возможные пути протекания(f)≠∅

У сложных реакций есть возможные пути протекания

1. (f: Химические реакции) (ff: Возможные пути протекания(f)) f∉ff

Реакция не может принадлежать ни одному из своих путей протекания

1. (f: Химические реакции) (ff: Возможные пути протекания(f)) μ(ff) ≥ 2 Каждый возможный путь протекания некоторой реакции содержит не менее двух реакций, элементарных по отношению к данной
2. (f1: Химические реакции) (ff: Возможные пути протекания(f1)) (f2: ff) Реагенты(f2) ⊆ (∪ (f’: {(f”: ff) f’’ ≠ f2}) Pезультаты(f’)) ∪ Pеагенты(f1) ∪ Катализаторы(f1, ff)

Все реагенты любой элементарной реакции любого пути протекания входят во множество результатов всех других элементарных реакций этого пути, объединенно с множеством реагентов исходной реакции и с множеством катализаторов исходной реакции этого пути;

Иными словами, параллельно или последовательно идущие реакции одного пути могут использовать реагенты и результаты друг друга

1. (f: Химические реакции) (ff: {(ff’: Возможные пути протекания(f)) Катализаторы(f, ff’) ≠∅}) Катализаторы(f, ff) ⊆ (∪(f”: ff) Реагенты(f’)))

Если для некоторого пути протекания химической реакции множество катализаторов непусто, то для этого пути у реакции есть реакции, объединенному множеству реагентов которых принадлежат эти катализаторы

1. (f: Химические реакции) (ff: Возможные пути протекания(f)) Результаты(f) ⊆ (∪(f’: ff) Результаты(f'))

Результаты химической реакции принадлежат множеству результатов всех элементарных реакций на любом пути протекания;

Иными словами, результатами исходной реакции являются результаты составляющих реакций

1. (f: Химические реакции) (ff: Возможные пути протекания(f)) (f’: ff) Верхняя температура реакции(f') ≤ Верхняя температура реакции(f) & Нижняя температура реакции(f') ≥ Нижняя температура реакции(f) & Верхнее давление реакции(f’) ≤ Верхнее давление реакции(f) & Нижнее давление реакции(f') ≥ Нижнее давление реакции(f)

Условия протекания элементарных реакций соответствуют условиям протекания исходной реакции

1. (v: {(v':Химические вещества) Уравнение диссоциации(v) ≠∅}) (v1: Уравнение диссоциации(v)) (μ(Реагенты(v1)) = 1) & v ∈ Реагенты(v1) & (μ(Результаты(v1)) = 2) & (& (r’: Результаты(v1)) заряд(Формула(r’)) ≠∅) &( &(r’’: Реагенты (v1) ∪ Результаты(v1)) Стехиометрический коэффициент(r’’) = 1)

Уравнение диссоциации химического вещества описывает процесс его диссоциации в водном растворе по текущей ступени. Единственным реагентом является само вещество, оба результата являются ионами, стехиометрические коэффициенты реагентов и результатов равны 1

1. (v: Химические вещества) μ(Уравнение диссоциации(v)) ≤ 1

Для любого химического вещества может быть задано не более одного уравнения диссоциации

1. (f: Химические реакции) (i: Химические элементы) (∑ (r1: Реагенты(f)) Стехиометрический коэффициент(f, r1) \* число атомов(Формула(r1), i)) = (∑ (r2: Результаты(f)) Стехиометрический коэффициент(f, r2) \* число атомов(Формула(r2), i))

Закон сохранения вещества для реакций: число атомов любого элемента для реагентов реакции равно числу атомов этого элемента для результатов реакции

1. (f: Химические реакции) (t: Табличные значения температуры) (p: Табличные

значения давления) (∑ (r2: Результаты(f)) Молярная энтальпия образования(r2, t, p) \* Стехиометрический коэффициент(f, r2)) - (∑ (r1: Реагенты (f)) Молярная энтальпия образования(r1, t, p) \* Стехиометрический коэффициент(f, r1)) = Изменение молярной энтальпии(f, t, p)

Изменение молярной энтальпии химической реакции - это разность сумм молярных энтальпий образования результатов и реагентов, помноженных на стехиометрические коэффициенты

1. (f: Химические реакции) (t: Табличные значения температуры) (p: Табличные значения давления) (∑ (r2: Результаты(f) Молярная энтропия(r2, t, p) \* Стехиометрический коэффициент(f, r2)) - (∑(r1: Реrагенты(f)) Молярная энтропия(г1, t, p) \* Стехиометрический коэффициент(f, r1)) = Изменение молярной энтропии(f, t, p)

Изменение молярной энтропии химической реакции - это разность сумм молярных энтропий образования результатов и реагентов, помноженных на стехиометрические коэффициенты

1. (f: Химические реакции) (t: Табличные значения температуры) (p: Табличные значения давления) Изменение молярной энергии Гиббса(f, t, p)= Изменение молярной энтальпии(f, t, p) - Изменение молярной энтропии(f, t, p) \* t

Изменение молярной энергии Гиббса химической реакции при данных температуре и давлении - это разность изменения молярной энтальпии реакции и произведения изменения молярной энтропии реакции на температуру

1. (f: Химические реакции) (t: Табличные значения температуры) (p: Табличные значения давления) Изменение молярной энергии Гиббса(f, t, p)= Изменение молярной энтальпии(f, t, p) - Изменение молярной энтропии(f, t, p) \* t

Cумма зарядов всех реагентов химической реакции, помноженных на стехиометрические коэффициенты, равна сумме зарядов всех ее результатов, помноженных на стехиометрические коэффициенты

1. (f: Химические реакции) Реагенты(f) ⋂ Результаты(f) = ∅ & Катализаторы(f) ⋂ Результаты(f) = ∅ & Реагенты(f) ⋂ Катализаторы(f)= ∅

Реагенты, результаты и катализаторы химических реакций попарно не пересекаются, т.е. из рассмотрения исключаются автокаталитические реакции

# 2.2.2.4 Модуль «Основы термодинамики»

Введем специальное расширение «Конкатенация имен», состоящее из одного терма: t1 || t2, причем Jλθ(t1) ∈ N, Jλθ(t2) ∈ N, Jλθ(t1 || t2)∈N, Jλθ(t1 || t2)

есть имя, являющееся конкатенацией имен Jλθ(t1) и Jλθ(t2).

Прикладная логическая теория «Основы термодинамики»(«Конкатенация имен») = <{«Свойства веще тв»}, SS>, где SS - множество предложений языка прикладной логики, приведенное ниже.

1. Типы параметров ≡ {экстенсивные параметры, интенсивные параметры, удельные параметры, молярные параметры, дольные параметры}

Определим пять типов параметров, которые будут использоваться в дальнейшем: экстенсивные и интенсивные параметры - 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

1. экстенсивные параметры ≡ {масса, количество, объем, изохорная теплоемкость, изобарная теплоемкость, теплоемкость, внутренняя энергия, энтальпия, энтропия, энергия Гиббса, энергия Гельмгольца}

Определим названия экстенсивных параметров состояния

1. интенсивные параметры ≡ {температура, давление, плотность, химический потенциал}

Определим названия интенсивных параметров состояния

1. удельные параметры ≡ {(v: экстенсивные параметры \ {масса }) уд.||v} Названия удельных параметров состояния формируются из названий экстенсивных параметров (кроме параметра “масса”) добавлением префикса “уд.”
2. молярные параметры ≡ {(v: экстенсивные параметры \ {количество}) мол.||v} Названия молярных параметров состояния формируются из названий экстенсивных параметров (кроме параметра “количество”) добавлением префикса “мол.”
3. дольные параметры ≡ {(v: экстенсивные\_параметры) дол.||v}

Названия дольных параметров формируются из названий экстенсивных параметров добавлением пре фикса “дол.”

1. (v: {масса, мол.масса, количество, объем, уд.объем, мол.объем, 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(R(0, ∞))

Указанные общие свойства системы имеют областью допустимых значений множество неотрицательных действительных чисел

1. сорт тип системы: собственные свойства процесса({ изолированная, открытая, закрытая})
2. (v: { большой термодинамической потенциал, работа, теплообмен}) сорт v: свойства процесса и фазы(R[0, ∞))

Большой термодинамический потенциал, работа и теплообмен являются свойствами процесса и фазы

1. сорт температура: общие свойства системы(R[0, Максимальная температура])

Cвойством термодинамической системы является температура

1. сорт давление: общие свойства системы(R[0, Максимальное давление]) Cвойством термодинамической системы является давление
2. (v: {внутренняя энергия, уд.внутренняя энергия, мол.внутренняя энергия, 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, химический потенциал}) сорт v: общие свойства системы(R(-∞,∞))

Указанные общие свойства системы имеют областью допустимых значений всю ось действительных чисел

1. (v: дольные параметры) сорт v: свойства вещества процесса(R[0, 1]) Множество свойств веществ процесса включает дольные параметры; их областью допустимых значений являются значения в действительном интервале от 0 до 1

*Онтологические соглашения.*

1. (τ: I[1, число шагов процесса]) (v: экстенсивные параметры \ {масса}) v(τ) / масса(τ) = уд.||v(τ)

Отнесение экстенсивного параметра системы к единице ее массы придает ему свойство интенсивного параметра, называемого удельной величиной

1. (τ: I[1, число шагов процесса]) (v: экстенсивные параметры \ {масса}) (s: вещества процесса(τ)) v(τ,s) / масса(τ,s) = уд.||v(τ,s)

Отнесение экстенсивного параметра ингредиента системы кединицеее массы придаетему свойство интенсивного параметра, называемого удельной величиной

1. (τ: I[1, число шагов проце сса]) (v: экстенсивные параметры \ {количество}) v(τ) / количество(τ) = мол.||v(τ)

Отнесение экстенсивного параметра системы к единице количества придает ему свойство интенсивного параметра, называемого молярной величиной

1. (τ: I[1, число шагов процесса]) (v: экстенсивные параметры \ {количество}) (s: вещества процесса(τ)) v(τ,s) / количество(τ, s) = мол.||v(τ,s)

Отнесение экстенсивного параметра составляющего системы к единице количества придаетему свойство интенсивного параметра, называемого молярной величиной

1. (τ: I[1, число шагов процесса]) (i: вещества процесса(τ)) (v: экстенсивные параметры) дол.||v(τ, i) = v(τ, i) / v(τ)

Доля по экстенсивному параметру вещества на некотором шаге процесса - это отношение значения этого параметра для вещества к значению этого параметра для системы на данном шаге процесса

1. (τ: I[1, число шагов процесса]) (v: экстенсивные параметры) v(τ) = (∑ (i: веще ства проце сса(τ)) v(r, i))

Значение экстенсивного параметра для каждого шага процесса есть сумма его значений по всем веществам этого шага

1. (τ: I[1, число шагов процесса]) плотность(τ) = масса(τ) / объем(τ) Связь массы, объема и плотности на каждом шаге процесса
2. (τ: I[1, число шагов процесса]) (i: вещества процесса(τ)) плотность(τ,i) = масса(τ,i) / объем(τ,i)

Cвязь массы, объема и плотности для веществ каждого шага процесса

1. (τ: I[1, число шагов процесса]) внутренняя энергия(τ +1) - внутренняя энергия(τ) = теплообмен(τ +1) + работа(τ +1)

Первое начало термодинамики вводит понятие внутренней энергии системы как функции состояния на каждом шаге процесса

1. (τ: I[1, число шагов процесса]) (энтальпия(τ) = внутренняя энергия(τ) + давление (τ) \* объем(τ))

Энтальпия системы как функция состояния для каждого шага процесса

1. (τ: I[1, число шагов процесса]) энергия Гельмгольца(τ) = внутренняя энергия(τ) - температура(τ) \* энтропия(τ)

Энергия Гельмгольца системы как функция состояния для каждого шага процесса

1. (τ: I[1, число шагов процесса]) энергия Гиббса(τ) = внутренняя энергия (τ) - температура(τ) \* энтропия(τ) + давление (τ) \* объем(τ)

Энергия Гиббса системы как функция состояния для каждого шага процесса

1. (τ: I[1, число шагов процесса]) (i: вещества процесса(τ)) мол. масса(τ, i) = Молярная масса(i)

Mолярная масса вещества на каждом шаге процесса совпадает с молярной массой этого вещества

# 2.2.2.5 Модуль «Термодинамика. Физические свойства»

Прикладная логическая теория «Термодинамика. Физические свойства» = <{«Основы термодинамики»}, SS>, где SS - множество предложений языка прикладной логики, приведенное ниже.

1. сорт фазовое равновесие: собственные свойства процесса (L)

В зависимости от того, присутствуют или отсутствуют на некотором шаге процесса переносы вещества между фазами процесса, в термодинамической системе отсутствует или присутствует фазовое равновесие на этом шаге

1. (v: {плотность, темп замерзания, темп замерзания теоретическая, темп кипения, темп кипения теоретическая, осмотическое давление, осмотическое давление теоретическое, давление насыщенного пара, давление насыщенного пара теоретическое, изотонический коэффициент, молярная концентрация, моляльная концентрация, разбавление, ионная сила, активность, коэффициент активности, температура плавления, температура плавления теоретическая}) сорт v: свойства фазы процесса(R[0, ∞]) ∪ свойства веществ фазы процесса(R[0, ∞])

Областью значений следующих общих свойств фазы и веществ является область не отрицательных действительных чисел

1. сорт идеальность: свойства фазы процесса({идеальный, реальный})

Любая фаза является раствором, который может быть идеальным или реальным

1. сорт насыщенность: свойства фазы процесса({ ненасыщенный, насыщенный, пересыщенный})

Любая фаза как раствор может быть ненасыщенной, насыщенной или пересыщенной

1. все возможные состояния фаз ≡ {жидкая, газовая, твердая}

данный вспомогательный термин обозначает множество возможных состояний фаз

1. сорт состояние фазы: свойства фазы процесса(все возможные состояния фаз) на каждом шаге процесса фаза может быть в одном из трех состояний
2. (v: {парциально давление, степень диссоциации, константа диссоциации, массовая растворимость, молярная растворимость, молярная концентрация, моляльная концентрация}) сорт v: свойства веществ фазы процесса(R[0, ∞)) Указанные свойства веществ фазы имеют область допустимых значений множество неотрицательных действительных чисел
3. сорт перенос вещества: свойства веществ фазы процесса((×фазы, R[0, ∞)) Перенос вещества - функция, сопоставляющая номеру шага процесса, фазе этого шага и веществу данной фазы название фазы, куда выполняется перенос данного вещества, и количество перенесенного вещества
4. сорт состояние вещества фазы: свойства веществ фазы процесса(возможные состояния веществ)

Свойством вещества фазы является его состояние

*Онтологические соглашения.*

1. (τ: I[1, число шагов процесса]) (ф: фазы процесса(τ)) (i: вещества процесса(τ)) i ∈ вещества фазы процесса(τ, ф) ⇔ количество(τ, ф, i) > 0 Вещество некоторого шага процесса принадлежит некоторой фазе тогда и только тогда, когда его количество в этой фазе больше нуля
2. (τ: I[1, число шагов процесса]) (ф: фазы процесса(τ)) μ(вещества фазы процесса(τ, ф)) ≥1

Каждая фаза содержит как минимум одно вещество

1. (τ: I[1, число шагов процесса]) ф: фазы процесса(τ)) (i: вещества процесса(τ)) (v: экстенсивные параметры) (дол.||v(τ,ф,i) = v(τ,ф,i) / v(τ, ф, i))

Доля по экстенсивному параметру вещества фазы процесса - это отношение значения этого параметра вещества к значению этого параметра для фазы

1. (τ: I[1, число шагов процесса]) (i: вещества процесса(τ)) (v: экстенсивные параметры) (v(τ, i) = (∑(ф: фазы процесса(τ)) v(τ, ф, i)))

Значение экстенсивного параметра вещества процесса равно сумме его значений для каждой из фаз процесса

1. (τ: I[1, число шагов процесса]) (ф: фазы процесса(τ)) (v: экстенсивные параметры) (v(r, ф) = (∑ (i: вещества фазы процесса(τ,ф)) v(τ, ф, i)))

Значение экстенсивного параметра фазы процесса равно сумме значений этого параметра для всех веществ этой фазы

1. (τ: I[1, число шагов процесса]) (ф: фазы процесса(τ)) (v: экстенсивные параметры) дол.||v(τ, ф) = v(τ, ф) / v(τ)

Доля по экстенсивному параметру фазы процесса есть отношение значения этого параметра для фазы к значению этого параметра для всей системы

1. (τ: I[1, число шагов процесса]) (ф: фазы процесса(τ)) (энергия Гиббса(τ, ф) = (∑(i: вещества процесса(τ)) количество(τ,ф,i) \* химический потенциал(τ,ф,i)))

Утверждение задает связь значений энергии Гиббса фазы, количества вещества фазы и химического потенциала вещества фазы для каждого шага процесса

1. (τ: I[1, число шагов процесса]) (ф: фазы процесса(τ)) энтальпия(τ, ф) = внутренняя энергия(τ, ф) + давление (τ, ф) \* объем(τ, ф)

Утверждение задает связь значений энтальпии, внутренней энергии, давления и объема фазы для каждого шага процесса

1. (τ: I[1, число шагов процесса]) (ф: фазы процесса(τ)) энергия Гельмгольца(τ,ф) = внутренняя энергия(τ, ф) - температура(τ, ф) \* энтропия(τ, ф)

Утверждение задает связь значений энергии Гельмгольца, внутренней энергии, температуры и энтропии фазы для каждого шага процесса

1. (τ: I[1, число шагов процесса]) (ф: фазы процесса(τ)) энергия Гиббса(τ, ф) = внутренняя энергия(τ, ф) - температура(τ, ф) \* энтропия(τ, ф) + давление(τ, ф) \* объем(τ, ф)

Утверждение задает связь значений энергии Гиббса, внутренней энергии, температуры, энтропии, давления и объема фазы для каждого шага процесса

1. (τ: I[1, число шагов процесса]) (ф: фазы процесса(τ)) большой термодинамической потенциал(τ, ф) = внутренняя энергия(τ, ф) - температура(τ, ф) \* энтропия(τ, ф) - ( ∑ (i: вещества процесса(τ)) химический потенциал(τ, ф, i) \* количество(τ, ф, i))

Больтой термодинамический потенциал вычисляется для каждого шага процесса по заданной в утверждении формуле

# 2.2.2.6 Модуль «Термодинамика. Химические свойства»

Прикладная логическая теория «Термодинмика. Химические свойства» = T(∅) = <{«Реакции», «Основы термодинамики»}, SS>, где SS - множество предложений языка прикладной логики, приведенное ниже, использует предложения модулей «Реакции», «Основы термодинамики».

1. сорт Энергия активации: Собственные свойства реакций(R[0, Граница(Энергия активации)])

Энергия активации реакции - это та энергия, которая необходима для преодоления энергетического барьера

1. сорт Границы температуры для пути реакции: Зависящие от пути свойства реакций((×R[ -Граница(Температура), Граница(Температура)], R[-Граница(Температура), Граница(Температура)]))

Термин определяет границы температуры для некоторого пути реакции

1. сорт Границы давления для пути реакции: Зависящие от пути свойства реакций((×R[-Граница(Давление), Граница(Давление)], R[-Граница(Давление), Граница(Давление)]))

Термин определяет границы давления для некоторого пути реакции

1. сорт химическое равновесие: собственные свойства процесса(L)

В зависимости от того, наступили или нет в момент наблюдения термодинамической системы равновесия всех химических превращений ингредиентов, в термодинамической системе присутствует или отсутствует химическое равновесие

1. сорт произведение растворимости: собственные свойства реакций(R[0, ∞)) Свойство реакции “произведение растворимости” имеют область допустимых значений множе ство не отрицательных действительных чисел
2. (v: {изменение энергии Гиббса, изменение энтальпии, изменение энтропии}) сорт v: свойства реакции процесса (R(-∞, ∞))

Свойства реакции “изменение энергии Гиббса”, “изменение энтальпии” и “изменение энтропии” имеют область допустимых значений множество всех действительных чисел

1. сорт путь: свойства реакции процесса({ }Химические реакции)

Свойство “путь” определяет тотединственный путь из множества возможных, который имеет место при текущих условиях в термодинамической системе для реакции на этом шаге

1. сорт Полученное количество: Свойства участников реакции процесса(R[0,∞)) свойством участника реакции является его количество, полученное в результате реакции на некотором шаге процесса

*Онтологические соглашения.*

1. (τ: [1, число моментов]) (f: реакции проце сса(τ)) путь(τ, f) ∈ возможные пути протекания(f)

В качестве значения свойства “путь” для данного момента наблюдения и данной химической реакции знаний могут выступать только возможные пути

# 2.2.2.7 Модуль «Химическая кинетика»

Прикладная логическая теория «Химическая кинетика» = <{«Термодинамика. Химические свойства»}, SS>, где SS - множество предложений языка прикладной логики, приведенное ниже, использует предложения модуля «Термодинамика. Химические свойства».

1. сорт Температурно-зависимая константа скорости: Собственные свойства реакций(L)

С кинетической точки зрения скорость реакции может быть температурно- зависимая или температурно- независимая

1. (v: {Константа скорости реакции, А-фактор, Температурная экспонента}) сорт v: Собственные свойства ре акций(R[0, ∞])

Свойства реакций "константа скорости реакции", “а-фактор” и “температурная экспонента” имеют область допустимых значений множество неотрицательных действительных чисел

1. сорт Порядок: Свойства участников реакций(I[0, ∞))

Cвойства “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 чисел

1. сорт время: собственные свойства процесса(R[0, ∞))

Свойство “время” указывает значение временного интервала с начала химического эксперимента по настоящий момент наблюдения

1. (v: {константа скорости, скорость прямой, скорость обратной}) сорт v: Свойства реакции процесса(R[0, ∞))

У реакций термодинамической системы есть три собственных кинетических свойства: “константа скорости”, “скорость прямой” и “скорость обратной” реакций; их областью допустимых значений является положительная полуось действительных чисел

*Онтологические соглашения.*

1. время(0) = 0

Для нулевого момента наблюдения значение времение есть 0

1. (τ: I[1, число моментов]) (τ’: {(τ’’: I[1, число моментов]) τ’’ > τ }) время(τ’) > время(τ)

Время - строго возрастающая функция

# 2.2.2.8 Модуль «Термодинамика. Физические и химические свойства»

Прикладная логическая теория «Термодинамика. Физические и химические свойства» = <{«Термодинамика. Физические свойства», «Термодинамика. Химиче ские свойства»}, SS>, где SS - множе ство предложений языка прикладной логики, приведенное ниже, использует предложения модулей «Термодинамика. Физические свойства», «Термодинамика. Химические свойства».

1. сорт термодинамическое равновесие: собственные свойства процесса({}L) Термодинамическое равновесие - это одновременное присутствие нескольких равновесий в термодинамической системе
2. фазы реакции ≡ (λ (τ: I[1, число шагов процесса]) (f: реакции процесса(τ)) {(ф: фазы процесса(τ)) (& (i: Реагенты(f)∪Результаты(f)∪ Катализаторы(f) i∈ вещества фазы процесса(τ, ф) & Состояние участника(f, i) = состояние вещества фазы(τ, 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. реакции фазы ≡ (λ (τ: I[1, число шагов процесса]) (ф: фазы процесса(τ)) {(f: реакции процесса(τ)) ф ∈ фазы реакции(τ, f)})

Вспомогательный термин "реакции фазы" обозначает функцию, которая по номеру шага процесса и идентификатору фазы возвращает множество реакций, затрагивающих эту фазу

# Глава 3. Техническая документация

В данной главе представлены: требования к системе (функциональные требования, требования к входным данным, требования к выходным данным, требования к интерфейсу, требования к интерфейсу, требования к надежности, требования к среде), архитектурно-контекстная диаграмма, внешние спецификации (спецификация входных и выходных данных, сценарий диалога с пользователем, спецификация функций), архитектура программной системы (проектное решение), внутренние спецификации.

# 3.1 Характеристики пользователей

В данном разделе описываются характеристики всех групп пользователей программной системы.

# 3.1.1 Характеристика эксперта

* Знает русский язык.
* Понимает сообщения на русском языке.
* Умеет работать на компьютере в операционных системах семейства Windows, MacOS, Linux, Unix (умеет работать с контроллером типа “Мышь” и клавиатурой, включать и выключать компьютер, запускать приложения и завершать работу с ними).
* Умеет работать с хотя бы с одним из следующих интернет-браузеров Internet-Explorer, Mozilla Firefox, Google Chrome, Safari, Opera (запуск браузера, переход по заданному web-адресу).
* Является экспертом в том разделе химии, онтология которого доступна и для которой он может задать знания.

# 3.1.2 Характеристика инженера знаний

* Знает русский язык.
* Понимает сообщения на русском языке.
* Умеет работать на компьютере в операционных системах семейства Windows, MacOS, Linux, Unix (умеет работать с контроллером типа “Мышь” и клавиатурой, включать и выключать компьютер, запускать приложения и завершать работу с ними).
* Умеет работать с хотя бы с одним из следующих интернет-браузеров Internet-Explorer, Mozilla Firefox, Google Chrome, Safari, Opera (запуск браузера, переход по заданному web-адресу).
* Знает, что такое метаонтология предметных областей.
* Умеет задавайть метаонтологии в области химии (умеет выделить сущности метаонтологии, определить компоненты сущностей, задать общие свойства сущностей и их компонентов, собственные свойства сущностей, свойства указанных типов, совместные свойства сущностей, совместные свойства сущностей, свойства компонентов нескольких типов, общие свойства процесса иего компонентов, свойства компонентов сущночти процесса и общие свойства процесса).
* Умеет определять взаимосвязи между метаонтологиями и онтологиями предметных областей в области химии.
* Знает, что такое онтологии предметных областей.
* Умеет задавать онтологии в области химии на основе метаонтологий в этой области (задавать термины-функции, определять их аргументы, результаты и диапазоны значений результатов и аргументов).
* Умеет определять вспомогательные термины для онтологий (если это необходимо).
* Знает , что такое кортеж значений.
* Умеет задать кортеж значений.

# 3.2 Требования к программной системе

# 3.2.1 Требования к редактору метаонтологий

# 3.2.1.1 Функциональные требования

Редактор метаонтологии должен:

3.2.1.1.1 обеспечить поэтапное создание метаонтологии;

3.2.1.1.2 позволять задавать сущности метаонтологии и их типы в процессе создания;

3.2.1.1.3 позволять использовать сущности других метаонтологий, изменять его в процессе создания и запоминать эту связь;

3.2.1.1.4 позволять редактировать список сущностей в процессе добавления метаонтологии и учитывать все измененния на всех этапах создания метаонтологии;

3.2.1.1.5 позволять изменять название метаонтологии в процессе ее создания;

3.2.1.1.6 позволять задавать компоненты сущности, редактировать их в процессе создания метаонтологии и учитывать все изменения на каждом из этапов создания;

3.2.1.1.7 позволять удалять общие свойства сущностей и изменять их формулировки в процессе создания;

3.2.1.1.8 позволять удалять собственные свойства сущностей и изменять их формулировки в процессе создания;

3.2.1.1.9 позволять удалять свойства указанных типов и изменять их формулировки в процессе создания;

3.2.1.1.10 позволять задавать совместные свойства сущностей и удалять их в процессе создания;

3.2.1.1.11 позволять задавать свойства компонентов нескольких типов и удалять их в процессе создания;

3.2.1.1.12 позволять определять уровень рассмотрения химического процесса (сущности процесса и их типы, состав компонентов процесса) и изменять его в процессе создания;

3.2.1.1.13 позволять определять общие свойства процесса и его компонент, удалять их и изменять формулировки в процессе создания;

3.2.1.1.14 позволять определятья общие свойства компонентов сущностей процесса и изменять их в процессе создания;

3.2.1.1.15 позволять определятья общие свойства процесса и его схему, а также удалять их в процессе создания;

3.2.1.1.16 позволять редактировать созданные метаонтологии;

3.2.1.1.17 позволять изменять название метаонтологии и учитывать это в созданных онтологиях и метаонтологиях при редактировании метаонтологии;

3.2.1.1.18 позволять изменять список используемых метаонтологий и учитывать это во всех свойствах редактируемой метаонтологии, во всех свойствах метаонтологий и онтологий, которые использовали редактируемую метаонтологию при их создании при редактировании метаонтологии;

3.2.1.1.19 позволять изменять список сущностей метаонтологии и учитывать эти изменения во всех свойствах редактируемой метаонтологии, во всех свойствах метаонтологий и онтологий, которые использовалиредактируемую метаонтологию при их создании при редактировании метаонтологии;

3.2.1.1.20 позволять изменять компоненты сущностей метаонтологии и учитывать эти изменения во всех свойствах редактируемой метаонтологии, во всех свойствах метаонтологиий и онтологий, которые использовали редактируемую метаонтологию при их создании при редактировании метаонтологии;

3.2.1.1.21 позволять удалять общие свойства сущностей и их компонентов и изменять их формулировки при редактировании метаонтологии, а также учитывать внесенные изменения в онтологиях, созданных на основе редактируемой метаонтологии;

3.2.1.1.22 позволять удалять собственные свойства сущностей и изменять их формулировки при редактировании метаонтологии, а также учитывать внесенные изменения в онтологиях, сощданных на основе редактируемой метаонтолоогии;

3.2.1.1.23 позволять удалять свойства указанных типов и изменять их формулировки при редактировании метаонтологии, а также учитывать внесенные измененния в онтологиях, созданных на основе редактируемой метаонтологии;

3.2.1.1.24 позволять изменять список совместных свойств сущностей при редактировании метаонтологии, а также учитывать внесенные изменения в онтологиях, созданных на основе редактируемой метаонтологии;

3.2.1.1.25 позволять изменять список свойств компонентов нескольких типов при редактировании метаонтологии, а также учитывать внесенные изменения в онтологиях, созданных на основе редактируемой метаонтологии;

3.2.1.1.26 позволять изменять уровень рассмотрения химического процесса (сущности процесса и их типы, состав компонентов процесса) при редактировании метаонтологии, а также учитывать внесенные изменения в онтологиях, созданных на основе редактируемой метаонтологии;

3.2.1.1.27 позволять изменять формулировки свойств компонентов сущностей процесса при редактировании метаонтологии, а также учитывать внесенные изменения в онтологиях, созданных на основе редактируемой метаонтологии;

3.2.1.1.28 позволять изменять список общих свойств процесса при редактировании метаонтологии, а также учитывать внесенные измененния в онтологиях, созданных на основе редактируемой метаонтологии;

3.2.1.1.29 позволять удалять метаонтологии и автоматически удалять созданные на их основе онтологии;

3.2.1.1.30 ввод всех данных должен осуществляться с помощью мыши или и клавиатуры;

3.2.1.1.31 осуществлять контроль ввода входных данных и выдавать диагностические сообщение в случае их неверного ввода, позволяя их отредактировать;

3.2.1.1.32 отображать введенные входные данные на дисплее;

3.2.1.1.33 предупреждать пользователя об опасных действиях.

# 3.2.1.2 Требования к входным данным

3.2.1.2.1 Название метаонтологии – должно вводиться в текстовое поле только на русском языке и длина не должна превышать 50 символов.

3.2.1.2.2 Используемые метаонтологии – должны выбираться в списке доступных.

3.2.1.2.3 Название сущности – должно вводиться в текстовое поле только на русском языке и длина не должна превышать 50 символов или выбираться из списка, содержащего список сущностей используемых в метаонтологии.

3.2.1.2.4 Тип сущности должен выбираться из списка, содержащего элементы {}N, {}R, {}I,{}L.

3.2.1.2.5 Компоненты сущностей – должны выбираться из списка доступных для каждой сущности.

3.2.1.2.6 Общее свойство сущности и ее компонента – должно формироваться автоматически. Если требуется его изменить, то название должно воодиться в текстовое поле, только на русском языке и не превышать 250 символовв длину.

3.2.1.2.7 Собственное свойство сущности – должно формироваться автоматически. Если тербуется его изменить, то название должно вводиться в текстовое поле, только на русском языке и не превышать 250 символов в длину.

3.2.1.2.8 Свойство указанного типа – должно формироваться автоматически.

Если требуется его изменить, то название должно вводиться в текстовое поле, только на русском языке и не превышать 250 символовв длину.

3.2.1.2.9 Совместное свойство сущностей – название свойства должно вводиться в текстовое поле, только на русском языке и не превышать 50 символов в длину. Компоненты свойства должны выбираться из списка доступных сущностей.

3.2.1.2.10 Свойство компонентов нескольких типов – название свойства должно вводиться в текстовое поле, только на русском языке и не превышать 50 символов в длину. Сущность для свойства должна выбираться из списка доступных сущностей. Комноненты сущности должны выбираться из списка допустимы компонентов сущностей.

3.2.1.2.11 Уровень рассмотрения химического процеса (сущности процесса и их типа) – должны выбираться в списке.

3.2.1.2.12 Общее свойство процесса и его компонент – должно формироваться автоматически. Если требуется его изменить, то название должно вводиться в текстовое поле, только на русском языке и не превышать 250 символов в длину.

3.2.1.2.13 Уровень рассмотрения химического процесса (состав компонентов процесса) – должны выбираться в списке.

3.2.1.2.14 Свойство компонента сущности процесса – должно формироваться автоматически. Если требуется его изменить, то название должно вводиться в текстовое поле, только на русском языке и не превышать 250 символов в длину.

3.2.1.2.15 Общее свойства процесса – Название свойства должно вводиться в текстовое поле, только на русском языке и не превышать 50 символов в длину. Сушность процесса должна выбираться из списка доступных. Компоненты сущности процесса должны выбираться из списков, причем для каждоого компонента должна быть возможность выбора доступных для него компонентов.

# 3.2.1.3 Требования к выходным данным

3.2.1.3.1 Каждая созданная метаонтология должна формироваться в базу данных с названием созданной метаонтологии в отдельной папке, предназначенных для хранения структур метаонтологий.

3.2.1.3.2 Список используемых метаонтологий должен записываться в отдельную таблицу бзы данных.

3.2.1.3.3 Список сущностей должен записываться в отдельную таблицу базы данных.

3.2.1.3.4 Список компонентов сущностей должен записываться в отдельную таблицу базы данных.

3.2.1.3.5 Список общих свойств сущностей и их компонентов должен записываться в отдельную таблицу базы данных.

3.2.1.3.6 Список собственных свойств сущностей должен записываться в отдельную таблицу базы данных.

3.2.1.3.7 Список свойств указанных типов должен записываться в отдельную таблицу базы данных.

3.2.1.3.8 Список совместных свойств сущностей должен записываться в отдельную таблицу базы данных.

3.2.1.3.9 Список свойств компонентов нескольких типов должен записываться в отдельную таблицу базы данных.

3.2.1.3.10 Список сущностей процесса и их типы должны записываться в отдельную таблицу базы данных.

3.2.1.3.11 Список компонентов процесса должен записываться в отдельную таблицу базы данных.

3.2.1.3.12 Список компонентов процесса должен записываться в отдельную таблицу базы данных.

3.2.1.3.13 Список свойств компонентов сущностей процесса должен записываться в отдельную таблицу базы данных.

3.2.1.3.14 Список общих свойств процесса должен записываться в отдельную таблицу базы данных.

3.2.1.3.15 При завершении создания метаонтологии должна формироваться база даных с названием этой метаонтологии в отдельной папке. База данных должна содержать аблицы с названиями сущностей метаонтологии имеющих тип отличный от {}L.

# 3.2.2 Требования к редактору онтологий

# 3.2.2.1 Функциональные требования

Редактор онтологий должен:

3.2.2.1.1 обеспечить поэтапное создание онтологии;

3.2.2.1.2 позволять создавать онтологии на основе метаонтологий;

3.2.2.1.3 позволять использовать онтологии, созданные на основе выбранной метаонтологии и сохранять эту связь;

3.2.2.1.4 позволять использовать термины-функции онтологий, которые выбраны качестве используемых;

3.2.2.1.5 позволять задавать термины-функции для создаваемой онтологии;

3.2.2.1.6 позволять создавать кортежи значений с именем и использовать в дальнейшем в качестве результатов терминов функций;

3.2.2.1.7 позволять задавать термины-функции, результатами которых является кортеж значений;

3.2.2.1.8 позволять создавать вспомогательные термины и использовать в дальнейшем в качестве результатов терминов функций;

3.2.2.1.9 позволять использовать кортежи значений и вспомогательные термины используемых онтологий;

3.2.2.1.10 позволять изменять список терминов-функций в процессе создания онтологии;

3.2.2.1.11 позволять изменять список используемых онтологий в процессе создания онтологии и учитывать это на всех этапах при создании онтологии;

3.2.2.1.12 позволять изменять метаонтологию, на которой основывается создаваемая онтология, и учитывать эти изменения на всех этапах создания онтологии;

3.2.2.1.13 формировать структуру базы знаний при завершении создания онтологии;

3.2.2.1.14 позволять изменять название онтологии в процессе создания;

3.2.2.1.15 позволять редактировать созданные онтологии;

3.2.2.1.16 позволять изменять название созданных онтологий и учитывать это во всех онтологиях, в которых она используется при редактировании онтологии;

3.2.2.1.17 позволять изменять список используемых онтологий и учитывать эти изменения во всех свойствах онтологий и онтологиях, использующих редактируемую онтологию при редактировании онтологии;

3.2.2.1.18 позволять изменять список функций-терминов и учитывать эти изменения во всех онтологиях, использующих редактируемую онтологию при редактировании онтологии;

3.2.2.1.19 позволять создавать новые кортежи с именем и вспомогательные термины и добавлять их в онтологии которые используют редактируемую онтологию при редактировании онтологии.

# 3.2.2.2 Требования к входным данным

3.2.2.2.1 Название онтологии – должно вводиться в текстовое поле только на русском языке и длина не должна превышать 50 символов.

3.2.2.2.2 Используемые онтологии – должны выбираться в списке доступных.

3.2.2.2.3 Используемая метаонтология – должна выбираться из созданных метаонтологий.

3.2.2.2.4 Название термина-функции – должно вводиться в текстовое поле только на русском языке и длина не должна превышать 50 символов в длину.

3.2.2.2.5 Результат функции - должен выбираться из списка содержащего элементы R, I, L, N, {}R, {}I, {}L, {}N, а также сущности используемой метаонтологии и сущности используемой используемой метаонтологии со значком «{}», обозначающим подмножество.

3.2.2.2.6 Минимальное значение для результата типа I – целые числа от -1 000 000 до 1 000 000. Должно вводиться в текстовое поле.

3.2.2.2.7 Максимальное значение для результата типа I – целые числа от -1 000 000 до 1 000 000. Должно вводиться в текстовое поле.

3.2.2.2.8 Минимальное значение для результата типа R – вещественные числа от -1 000 000 до 1 000 000. Должно вводиться в текстовое поле.

3.2.2.2.9 Максимальное значение для результата типа R – вещественные числа от -1 000 000 до 1 000 000. Должно вводиться в текстовое поле.

3.2.2.2.10 Метатермин – должен выбираться из списка доступных метатерминов.

3.2.2.2.11 Имя кортежа значений – должно вводиться в текстовое поле только на русском языке и длина не должна превышать 50 символов.

3.2.2.2.12 Элемент кортежа – должен выбираться из списка доступных элементов.

3.2.2.2.13 Название вспомогательного термина-множества – должно вводиться в текстовое поле только на русском языке и длина не должна превышать 50 символов.

3.2.2.2.14 Название элемента вспомогательного термина-множества – должно вводиться в текстовое поле только на русском языке и длина не должна превышать 50 символов.

# 3.2.2.3 Требования к выходным данным

3.2.2.3.1 Каждая созданная онтология должна формироваться в базу данных с названием созданной онтологии в отдельной папке, предназначенной для хранения структур онтологий.

3.2.2.3.2 Название метаонтологии, должно записываться в отдельную таблицу базы данных.

3.2.2.3.3 Список использованных онтологий должен записываться в отдельную таблицу базы данных.

3.2.2.3.4 Список созданных терминов-функций должен записываться в отдельную таблицу базы данных.

3.2.2.3.5 Список кортежей должен записываться в отдельную таблицу базы данных.

3.2.2.3.6 Список вспомогательных терминов-множеств должен записываться в отдельную таблицу базы данных.

3.2.2.3.7 Для каждой онтологии должна формироваться база знаний, имеющая такое же название, как и созданная онтология. Каждая таблица этой базы должна называться именами терминов-функций онтологий.

# 3.2.3 Требования к редактору знаний

# 3.2.3.1 Функциональные требования

Редактор знаний должен:

3.2.3.1.1 позволять задавать возможные значения терминов для любой созданной метаонтологии;

3.2.3.1.2 позволять задавать значения аргументов и результатов терминов-функций онтологий, формирующих базу знаний для любой созданной онтологии;

3.2.3.1.3 позволять изменять значения аргументов и результатов терминов-функций онтологий, формирующих базу знаний для любой созданной онтологии;

3.2.3.1.4 позволять изменять возможные значения терминов для любой созданной метаонтологии.

# 3.2.3.2 Требования к входным данным

3.2.3.2.1 Онтология – должна выбираться из списка созданных онтологий.

3.2.3.2.2 Термин онтологии – должен выбираться в списке доступны терминов.

3.2.3.2.3 Значение термина типа I – от – 1 000 000 до 1 000 000. Должно вводиться в текстовом поле при заполнении возможных значений терминов метаонтологии. Должно выбираться из списка возможных значений при заполнении базы знаний онтологии.

3.2.3.2.4 Значение термина типа R – от – 1 000 000 до 1 000 000. Должно вводиться в текстовом поле при заполнении возможных значений терминов метаонтологии. Должно выбираться из списка возможных значений при заполнении базы знаний онтологии.

3.2.3.2.5 Значение термина типа N – должно вводиться в текстовое поле только на русском языке и длина не должна превышать 50 символов при заполнении возможных значений терминов метаонтологии. Должно выбираться из списка возможных значений при заполнении базы знаний онтологии.

3.2.3.2.6 Значение термина типа L – должно выбираться из двух возможных значений «Ложь» и «Истина».

3.2.3.2.7 Значение термина типа {}I – должно создаваться в виде списка значений типа I и каждое значение в этом списке должно выбираться из списка возможных значений.

3.2.3.2.8 Значение термина типа {}R – должно создаваться в виде списка значений типа R и каждое значение в этом списке должно выбираться из списка возможных значений.

3.2.3.2.9 Значение термина типа {}L – должно создаваться в виде списка значений типа L и каждое значение в этом списе должно быть либо «Ложь», либо «Истина».

3.2.3.2.10 Значение термина типа {}N – должно создаваться в виде списка значений типа N и каждое значение в этом списке должно выбираться из списка возможных значений.

# 3.2.3.3 Требования к выходным данным

3.2.3.3.1 Введенные возможные значения любого типа терминов метаонтологий должны сохраняться в базе данных с названием этой метаонтологии и таблице с названием термина, чьи возможные значения были сформированы.

3.2.3.3.2 Введенные значения термина онтологии должны сохраняться в базе данных с названием этой онтологии в таблице с названием термина, чьи значения были сформированы.

# 3.2.4 Требования к интерфейсу системы

3.2.4.1 Интерфейс системы должен обеспечивать удобный ввод данных.

3.2.4.2 Все вводимые сообщения должны быть написаны на русском языке.

3.2.4.3 Интерфейс системы должен быть интуитивно понятным. В любой момент работы с программой пользователю должно быть понятно, что делать дальше.

3.2.4.4 Все сообщения, выводимые пользователю должны быть граммотными.

3.2.4.5 Общение с пользователем должно осуществялться посредством диалоговых окон.

3.2.4.6 Интерфейс должен быть дружелюбным.

3.2.4.7 Все выводимые сообщения должны быть диагностическими, т.е. указывать пользователю на совершенную им ошибку.

3.2.4.8 Процесс создания метаонтологии и онтологии должен осуществляться в режиме мастера.

# 3.2.5 Требования к архитектурной среде

# 3.2.6 Требования к надежности

# 3.3 Проект базы данных

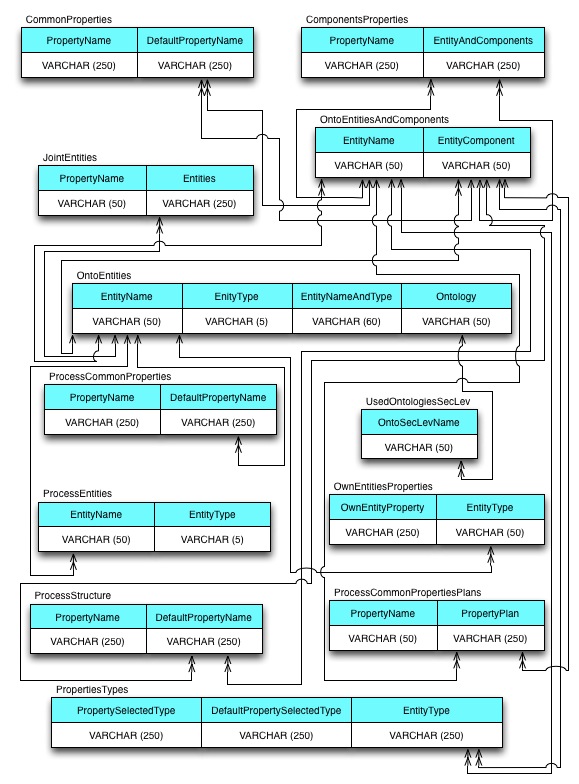


Рисунок 3.1. Проект базы данных, содержащей структуру метаонтологии.

***Описание структуры базы данных***

Таблица CommonProperties предназначена для хранения общих свойств сущностей и их компонентов.

Таблица 3.1. CommonProperties.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Поле | Тип | Описание |
| PropertyName | VARCHAR (250) | Хранит имя общего свойства сущности и ее компоненты. |
| DefaultPropertyName | VARCHAR (250) | Хранит имя общего свойства сущности и ее компоненты, заданного по умолчанию. |

Таблица ComponentProperties предназначена для хранения свойств компонентов нескольких типов.

Таблица 3.2. ComponentsProperties.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Поле | Тип | Описание |
| PropertyName | VARCHAR (250) | Хранит имя свойства компонентов нескольких типов. |
| EntityAndComponents | VARCHAR (250) | Хранит имена сущности и ее компонентов. |

Таблица JointEntitiesPropertios предназначена для хранения совместных свойств сущностей.

Таблица 3.3. JointEntitiesProperties.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Поле | Тип | Описание |
| PropertyName | VARCHAR (50) | Хранит имя совместного свойства сущностей. |
| DefaultPropertyName | VARCHAR (250) | Хранит имена сущностей. |

Таблица OntoEntitiesAndComponents предназначена для хранения компонентов сущностей.

Таблица 3.4. OntoEntitiesAndComponents.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Поле | Тип | Описание |
| EntityName | VARCHAR (50) | Хранит имя сущности. |
| EntityComponent | VARCHAR (50) | Хранит компонент сущности. |

Таблица OntoEntities предназначена для хранения сущностей и их типов.

Таблица 3.5. OntoEntites.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Поле | Тип | Описание |
| EntityName | VARCHAR (250) | Хранит имя сущности. |
| EntityType | VARCHAR (5) | Хранит тип сущности. |
| EntityNameAndType | VARCHAR (60) | Хранит имя и тип сущности. |
| Ontology | VARCHAR (50) | Хранит название онтологии, к которой относится. |

Таблица UsedOntologiesSecLev предназначена для хранения названий используемых метаонтологий.

Таблица 3.6. UsedOntologiesSecLev.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Поле | Тип | Описание |
| OntoLevName | VARCHAR (50) | Хранит название метаонтологии. |

Таблица OwnEntitiesProperties предназначена для хранения собственных свойств сущностей.

Таблица 3.7. OwnEntitiesProperties.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Поле | Тип | Описание |
| OwnEntityProperty | VARCHAR (250) | Хранит названия собственных свойств сущностей. |
| EntityType | VARCHAR (50) | Хранит имя сущности. |

Таблица ProcessCommonProperties предназначена для хранения общих свойств процесса и их компонентов.

Таблица 3.8. ProcessCommonProperties.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Поле | Тип | Описание |
| PropertyName | VARCHAR (250) | Хранит названия общих свойств процесса и его компонентов. |
| DefaultPropertyName | VARCHAR (250) | Хранит названия общих свойств процессов и его компонентов, заданных по умолчанию. |

Таблица ProcessCommonPropertiesPlans предназначена для хранения общих свойств процесса и их схем.

Таблица 3.9. ProcessCommonPropertiesPlans.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Поле | Тип | Описание |
| PropertyName | VARCHAR (50) | Хранит названия общих свойств процесса. |
| PropertyPlan | VARCHAR (250) | Хранит схемы общих свойств процесса. |

Таблица PropertiesEntities предназначена для хранения сущностей процесса.

Таблица 3.10. PropertiesEntities.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Поле | Тип | Описание |
| EntityName | VARCHAR (50) | Хранит имена сущностей. |
| EntityType | VARCHAR (5) | Хранит типы сущностей. |

Таблица ProcessStructure предназначена для хранения свойств компонентов сущностей процесса.

Таблица 3.11. ProcessStructure.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Поле | Тип | Описание |
| PropertyName | VARCHAR (250) | Хранит имена свойств. |
| DefaultPropertyName | VARCHAR (250) | Хранит имена свойств, заданных по умолчанию. |

Таблица PropertiesTypes предназначена для хранения свойств указанных типов.

Таблица 3.12. PropertiesTypes.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Поле | Тип | Описание |
| PropertySelectedType | VARCHAR (250) | Хранит имена свойств. |
| DefaultPropertySelectedType | VARCHAR (250) | Хранит имена свойств, заданных по умолчанию. |
| EntityType | VARCHAR (250) | Хранит имена сущностей. |

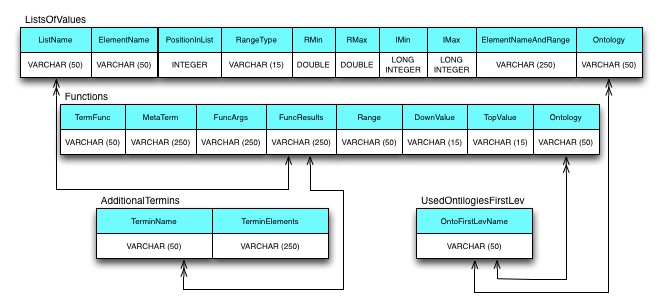


Рисунок 3.2. Проект базы данных, содержащей структуру онтологии.

***Описание структуры базы данных***

Таблица AdditionalTermins предназначена для хранения вспомогательных терминов онтологии.

Таблица 3.13. AdditionalTermins.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Поле | Тип | Описание |
| TerminName | VARCHAR (50) | Хранит имена вспомогательных терминов. |
| TerminElements | VARCHAR (250) | Хранит имена элементов вспомогательных терминов. |

Таблица UsedOntologiesFirstLev предназначена для хранения названий используемых онтологий.

Таблица 3.14. UsedOntologiesFirstLev.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Поле | Тип | Описание |
| OntoFirstLevName | VARCHAR (50) | Хранит имена используемых онтологий. |

Таблица Functions предназначена для хранения терминов-функций.

Таблица 3.15. Functions.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Поле | Тип | Описание |
| TermFunc | VARCHAR (50) | Хранит имена терминов-функций. |
| MetaTerm | VARCHAR (250) | Хранит имена метатерминов, используемых функциями. |
| FuncArgs | VARCHAR (250) | Хранит аргументы терминов-функций. |
| FuncResults | VARCHAR (250) | Хранит результаты терминов-функций. |
| Range | VARCHAR (50) | Хранит диапазон значений терминов-функций. |
| DownValue | VARCHAR (15) | Хранит нижнюю границу значений. |
| TopValue | VARCHAR (15) | Хранит верхнюю границу значений. |
| Ontology | VARCHAR (50) | Хранит имя онтологии, к которой относится термин-функция. |

Таблица ListOfValues предназначена для хранения кортежей значений.

Таблица 3.16. ListOfValues.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Поле | Тип | Описание |
| ListName | VARCHAR (50) | Хранит имена кортежей. |
| ElementName | VARCHAR (50) | Хранит имена элементов кортежей. |
| PositionInList | INTEGER | Хранит позиции элементов кортежей. |
| RangeType | VARCHAR (15) | Хранит тип диапазона значений. |
| RMin | DOUBLE | Хранит нижнюю границу значений типа R. |
| RMax | DOUBLE | Хранит верхнюю границу значений типа R. |
| IMin | LONG INTEGER | Хранит нижнюю границу значений типа I. |
| IMax | LONG INTEGER | Хранит верхнюю границу значений типа I. |
| ElementNameAndRange | VARCHAR (250) | Хранит имя элемента и его диапазон значений. |
| Ontology | VARCHAR (50) | Хранит онтологию, к которой относится кортеж. |

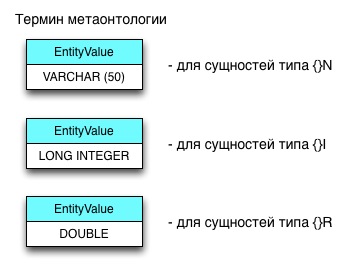


Рисунок 3.3. Проект базы данных, содержащей структуру знаний метаонтологии.

Таблица с именем сущности метаонтологии предназначена для хранения значений терминов метаонтологий. Каждая таблица имеет только одно поле EntityValue, тип которого зависит от типа сущности метаонтологии. Каждая таблица соответствует сущности метаонтологии.

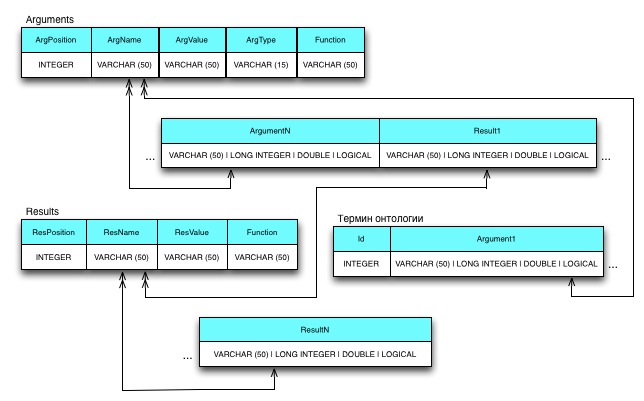


Рисунок 3.4. Проект базы данных, содержащей структуру знаний онтологии.

Таблица Arguments предназначена для хранения списка аргументов каждого термина-функции онтологии.

Таблица 3.17. Arguments.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Поле | Тип | Описание |
| ArgPosition | INTEGER | Хранит номер аргумента в списке аргументов термина-функции. |
| ArgName | VARCHAR (50) | Хранит имя аргумента. |
| ArgValue | VARCHAR (50) | Хранит временное значение аргумента. |
| ArgType | VARCHAR (15) | Хранит тип аргумента. |
| Function | VARCHAR (50) | Хранит функцию, к которой относится аргумент. |

Таблица Results предназначена для хранения списка результатов каждого термина-функции онтологии.

Таблица 3.18. Results.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Поле | Тип | Описание |
| ResPosition | INTEGER | Хранит номер результата в списке результатов термина-функции. |
| ResName | VARCHAR (50) | Хранит тип результата. |
| ResValue | VARCHAR (50) | Хранит временное значение результата. |
| Function | VARCHAR (50) | Хранит функцию, к которой относится результат. |

Таблица с именем термина-функции онтологии предназначена для хранения значений терминов-функций онтологии. Каждая таблица формируется с учетом аргументов и результатов каждой функции и их типов.

Таблица 3.19. Таблица с именем термина-функции онтологии.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Поле | Тип | Описание |
| Id | INTEGER | Хранит записи. |
| Argument1 | VARCHAR (50) | LONG INTEGER | DOUBLE | LOGICAL | Хранит значение аргумента1. |
| … | | |
| ArgumentN | VARCHAR (50) | LONG INTEGER | DOUBLE | LOGICAL | Хранит значение аргументаN. |
| Result1 | VARCHAR (50) | LONG INTEGER | DOUBLE | LOGICAL | Хранит значение результата1. |
| … |  |  |
| ResultN | VARCHAR (50) | LONG INTEGER | DOUBLE | LOGICAL | Хранит значение результатаN. |

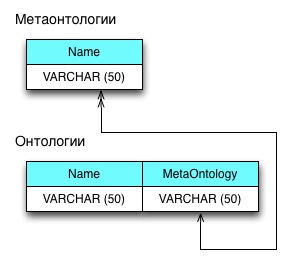


Рисунок 3.5. Проект базы данных, описывающей связи онтологий и метаонтологий.

Таблица Метаонтологии предназначена для хранения названий созданных метаонтологий.

Таблица 3.20. Метаонтологии.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Поле | Тип | Описание |
| Name | VARCHAR (50) | Хранит имена метаонтологий. |

Таблица Онтологии предназначена для хранения названий созданных онтологий и метаонтологий, на которых основывается каждая из созданных онтологий.

Таблица 3.21. Онтологии.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Поле | Тип | Описание |
| Name | VARCHAR (50) | Хранит имена онтологий. |
| MetaOntology | VARCHAR (50) | Хранит имена метаонтологий. |

# 3.4 Архитектурно-контекстная диаграмма

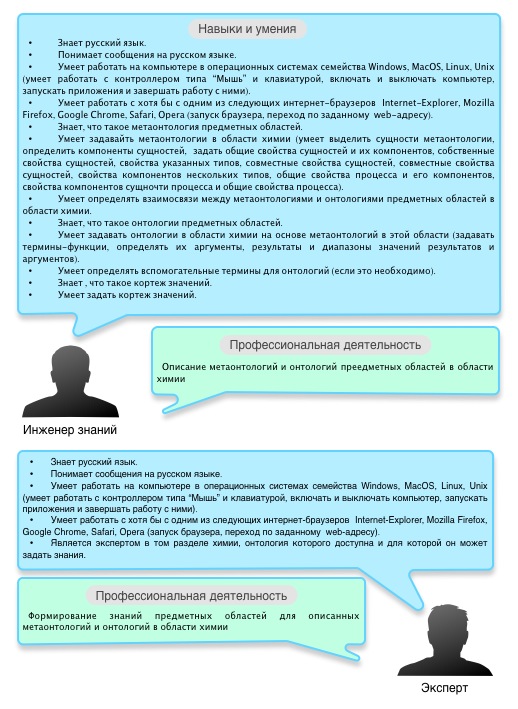
****

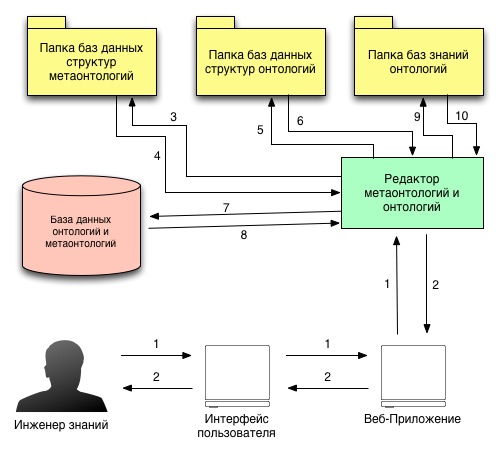
Рисунок 3.6. Профессиональная деятельность, навыки и умения пользователей.

Рисунок 3.7. АКД пользователя – Инженер знаний.

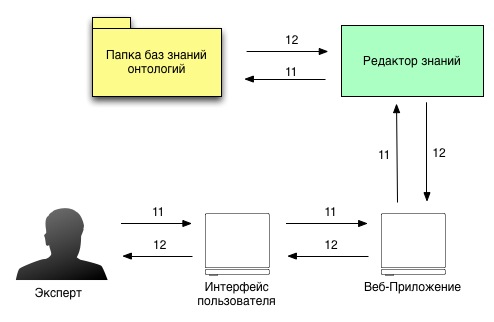


Рисунок 3.8. АКД пользователя – Эксперт

Описание рисунков 3.7 и 3.8:

1. Передача структур метаонтологий и онтологий.
2. Передача результата добавления, редактирования или удаления метаонтологий и онтологий.
3. Передача структур метаонтологий в базы данных метаонтологий.
4. Передача структур метаонтологий из баз метаонтологий.
5. Передача структур онтологий в базы данных онтологий.
6. Передача структур онтологий из баз данных онтологий.
7. Передача названий онтологий и метаонтологий и связей между ними.
8. Передача названий онтологий и метаонтологий и связей между ними.
9. Передача структуры знаний для метаонтолоний.
10. Передача структуры знаний метаонтологий созданных метаонтологий и онтологий.
11. Передача знаний метаонтологий и онтологий.
12. Передача результатов редактирования знаний метаонтологий и онтологий.
13. Передача знаний метаонтологий и онтологий.
14. Передача заданных знаний метаонтологий и онтологий.



# 3.5 Внешние спецификации

# 3.5.1 Сценарий диалога с пользователем

# 3.5.1.1 Редактор метаонтологий и онтологий, редактор базы знаний

# 3.5.2 Спецификация входных данных

# 3.5.3 Спецификация выходных данных

# 3.5.4 Спецификация функций

Редактор метаонтологий и онтологий выполняет следующие функции:

3.5.4.1 Позволяет создавать и редактировать метаонтологии, а именно - использовать сущности уже созданных метаонтологий, задавать сущности метаонтологий, определять компоненты сущностей, формировать общие свойства сущностей и их компонентов, собственные свойства сущностей, свойства указанных типов, совместные свойства сущностей, свойства компонентов нескольких типов, определять сущности процесса, общие свойства процесса и их компоненты, состав компонентов процесса, свойства компонентов сущностей процесса и общие свойства процесса.

3.5.4.2 Позволяет удалять метаонтологии.

3.5.4.3 Позволяет создавать и редактировать онтологии, а именно - использовать термины-функции уже созданных онтологий, задавать термины-функции, задавать кортежи значений и вспомогательные термины- множества для терминов-функций.

3.5.4.4 Позволяет удалять онтологии.

3.5.4.5 Позволяет создавать базы знаний для новых онтологий и метаонтологий.

Редактор знаний метаонтологий и онтологий выполняет следующие функции:

3.5.4.7 Позволяет задавать значения для сущностей метаонтологий.

3.5.4.7 Позволяет задавать значения для терминов-функций онтологий.

# Список литературы