Chemische Reaktionen zwischen Elementen müssen über Methoden abgebildet werden. Die Anzahl der möglichen, an der Reaktion beteiligten Elemente muss aus Speicherplatz- und Performancegründen begrenzt werden.

public class CChemicalEntity

{

string \_tagName;

}

public class CChemicalReactionRule

{

string \_inputSignature;

string \_outputSignature;

double \_temperatureStart;

double \_temperatureEnd;

double \_pressureStart;

double \_pressureEnd;

}

public class CWorld

{

Dictionary<string,CChemicalEntity> \_chemicalEntities;

Dictionary<string,CChemicalReactionRule> \_chemicalReactionRules;

public void Initialise()

{

chemicalEntities = new Dictionary<string,CChemicalEntity>();

//Define elements

CChemicalEntity ce;

ce = new CChemicalEntity();

ce.tagName=“H“;

ce.displayName=“Wasserstoff“;

\_chemicalEntities.Add(ce.tagName,ce);

ce = new CChemicalEntity();

ce.tagName=“O“;

ce.displayName=“Sauerstoff“;

\_chemicalEntities.Add(ce.tagName,ce);

ce = new CChemicalEntity();

ce.tagName=“H2O“;

ce.displayName=“Wasser“;

\_chemicalEntities.Add(ce.tagName,ce);

//Define reactions

\_chemicalReactionRules = new Dictionary<string,CChemicalReactionRule>();

CChemicalReactionRule cr;

cr = new CChemicalReactionRule();

cr.DefineReaction(„H+H+O“, „H2O“ [, startTemp, endTemp, startPressure, endPressure]);

\_chemicalReactions.Add(cr.formulaInput,cr);

}

}

Es muss eine oder zwei XML-Dateien geben, in denen die Chemical Entities und die Chemical Reactions definiert sind. Man könnte sich dafür auch einen Editor bauen.

Es könnte so aussehen:

<AYCEE\_CHEMICAL\_ENTITIES>

<ENTITY tag=“H“ name=“Wasserstoff“>

</ENTITY>

<ENTITY tag=“O“ name=“Sauerstoff“>

</ENTITY>

<ENTITY tag=“H2O“ name=“Wasser“>

</ENTITY>

<REACTIONRULE in=“H+H+O“ out=“H2O“>

</REACTIONRULE>

</AYCEE\_CHEMICAL\_ENTITIES>

Möglicherweise sind zwei XML-Dateien übersichtlicher, wenn es viele Entities und viele Reaction Rules werden.