**Bài 2:** Giả sử ta đã biết một số những phản ứng hóa học. Bây giờ giả sử ta phải giải quyết bài toán điều chế như sau: cho rằng ta có các chất hóa học S, H2O, NaCl; hãy tìm các phản ứng điều chế các chất hóa học Na2SO4, H2SO4, HCl, Na.

# **Danh sách các phương trình hóa học (tri thức) cho bài toán**

1. 2Na + Cl2 🡪 2NaCl
2. Cl2 + H2O 🡪 HCl + HclO
3. 2NaCl + 2H2O 🡪 Cl2 + H2 + 2NaOH
4. S + O2 🡪 SO2
5. 2SO2 + O2 🡪 2SO3
6. SO3 + H2O 🡪 H2SO4
7. 2NaCl + H2SO4 🡪 Na2SO4 + 2HCl
8. 4NaOH 🡪 4Na + 2H2O + O2

# **Các định nghĩa**

## Danh sách các nguyên tố hóa học.

public enum Atom

{

    H = 1,

    He = 2,

  Li = 3,

    Be = 4,

    B = 5,

    C = 6,

    N = 7,

    O = 8,

    F = 9,

...

}

Mỗi phần tử tương ứng với một nguyên tố hóa học

Ví dụ: “**H = 1”** thể hiện cho nguyên tố hóa học Hydrotrong đó:

* H: là ký hiệu hóa học của Hydro
* 1: là nguyên tử khối của Hydro

## **Tổ chức lưu trữ**

### Table **chemical.Compounds**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Tên trường | Kiểu dữ liệu | Mô tả | Ví dụ |
| Id | bigint | Mã định danh của một chất, hợp chất |  |
| Name | Varchar(50) | Tên ký hiệu của chất | NaCl |
| IsDeleted | Bit | Cho biết rằng chất đã bị xóa | 1 |

### Table **chemical.FormulaDetails**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Tên trường | Kiểu dữ liệu | Mô tả | Ví dụ |
| CompoundId | bigint | Mã định danh của một chất, hợp chất |  |
| Atom | tinyint | Mã nguyên tố hóa học. See more at **2.1** | H |
| AtomWeight | Tinyint | Trọng số về số lượng nguyên tố trong công thức hóa học | 1 |

Ví du: một công thức hóa học H2O sẽ có 2 record trong table **chemicalFormulaDetails** như sau:

* { Atom: H, AtomWeight: 2}
* {Atom: O, AtomWeight: 1}

### Table **chemical.CompoundProperties**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Tên trường | Kiểu dữ liệu | Mô tả | Ví dụ |
| CompoundId | bigint | Mã định danh của một chất, hợp chất |  |
| Name | Varchar(50) | Tên tính chất (trạng thái, màu, mùi, ..) | State |
| Value | Nvarchar(max) | Giá trị của tính chất | liquid |

### Table **chemical.Rules**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Tên trường | Kiểu dữ liệu | Mô tả | Ví dụ |
| Id | bigint | Mã định danh của một phương trình hóa học |  |
| Name | Varchar(200) | Tên phương trình | 2Na + Cl2 -> 2NaCl |
| IsDeleted | Bit | Cho biết rằng phương trình có được sử dụng |  |

### Table **chemical.RuleItems**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Tên trường | Kiểu dữ liệu | Mô tả | Ví dụ |
| RuleId | bigint | Mã định danh của 1 rule |  |
| CompoundId | bigint | Mã định danh của một chất, hợp chất |  |
| RuleType | Tinyint | Cho biết rằng đây là chất tham gia hay là chất sản phẩm của phương trình phản ứng:   * **Reactant** (0): chất tham gia phản ứng * **Conclusion** (1): chất sản phẩm |  |
| MoleWeight | Tinyint | Hệ số mol cân bằng phương trình hóa hoc của chất |  |

Ví dụ một phương trình hóa học **2Na + Cl2 -> 2NaCl** :

* {CompoundId: xxx(Na), RuleType: 0, MoleWeight: 2}
* {CompoundId: xxx(Cl2), RuleType: 0, MoleWeight: 1}
* {CompoundId: xxx(NaCl), RuleType: 1, MoleWeight: 2}

## **Định nghĩa các lớp**

### Lớp định nghĩa về một chất hóa học

[Table("Compounds", Schema = "chemical")]

public class Chemical\_Compound

{

    public long Id { get; set; }

    public string Name { get; set; } = default!;

    public IList<Chemical\_FormulaDetail> FormulaDetails { get; set; } = default!;

    public IList<Chemical\_CompoundProperty>? Properties { get; set; }

    public bool IsDeleted { get; set; }

}

Trong đó:

* **Id** : mã định danh của một hợp chất hóa học
* **Name:** tên của chất, thường sử dụng công thức hóa học
* **FormulaDetails:** danh sách cấu tạo công thức hóa học của chất
* **Properties:** các tính chất của hợp chất hóa học
* **IsDeleted:** cho biết rằng chất hóa học đã bị xóa

**Lớp định nghĩa**

# Các tri thức cho bài toán tam giác

## A + B + C = π

A screenshot of a computer program

Description automatically generated

Trong đó:

**Input**:

* ***curentElements*:** danh sách về trạng thái hiện tại củacác yếu tố tam giác.

**Output**: yếu tố suy luận ra được khi áp dụng công thức hiện tại, ***None*** nếu không thể áp dụng được công thức hiện tại.

## S = ½ a.hA

A screenshot of a computer program

Description automatically generated

Trong đó:

**Input**:

* ***curentElements*:** danh sách về trạng thái hiện tại củacác yếu tố tam giác.

**Output**: yếu tố suy luận ra được khi áp dụng công thức hiện tại, ***None*** nếu không thể áp dụng được công thức hiện tại.

## S = ½ b.hB

A screenshot of a computer code

Description automatically generated

Trong đó:

**Input**:

* ***curentElements*:** danh sách về trạng thái hiện tại củacác yếu tố tam giác.

**Output**: yếu tố suy luận ra được khi áp dụng công thức hiện tại, ***None*** nếu không thể áp dụng được công thức hiện tại.

## S = ½ c.hC

A screenshot of a computer program

Description automatically generatedTrong đó:

**Input**:

* ***curentElements*:** danh sách về trạng thái hiện tại củacác yếu tố tam giác.

**Output**: yếu tố suy luận ra được khi áp dụng công thức hiện tại, ***None*** nếu không thể áp dụng được công thức hiện tại.

## S = ½ bc.SinA

A screenshot of a computer program

Description automatically generatedTrong đó:

**Input**:

* ***curentElements*:** danh sách về trạng thái hiện tại củacác yếu tố tam giác.

**Output**: yếu tố suy luận ra được khi áp dụng công thức hiện tại, ***None*** nếu không thể áp dụng được công thức hiện tại.

## S = ½ ac.SinB

A screenshot of a computer program

Description automatically generatedTrong đó:

**Input**:

* ***curentElements*:** danh sách về trạng thái hiện tại củacác yếu tố tam giác.

**Output**: yếu tố suy luận ra được khi áp dụng công thức hiện tại, ***None*** nếu không thể áp dụng được công thức hiện tại.

## S = ½ ab.SinC

A screenshot of a computer program

Description automatically generatedTrong đó:

**Input**:

* ***curentElements*:** danh sách về trạng thái hiện tại củacác yếu tố tam giác.

**Output**: yếu tố suy luận ra được khi áp dụng công thức hiện tại, ***None*** nếu không thể áp dụng được công thức hiện tại.

## a/SinA = b/SinB

A screenshot of a computer code

Description automatically generatedTrong đó:

**Input**:

* ***curentElements*:** danh sách về trạng thái hiện tại củacác yếu tố tam giác.

**Output**: yếu tố suy luận ra được khi áp dụng công thức hiện tại, ***None*** nếu không thể áp dụng được công thức hiện tại.

## b/SinB = c/SinC

A screenshot of a computer program

Description automatically generatedTrong đó:

**Input**:

* ***curentElements*:** danh sách về trạng thái hiện tại củacác yếu tố tam giác.

**Output**: yếu tố suy luận ra được khi áp dụng công thức hiện tại, ***None*** nếu không thể áp dụng được công thức hiện tại.

## c/SinC = a/SinA

A screenshot of a computer program

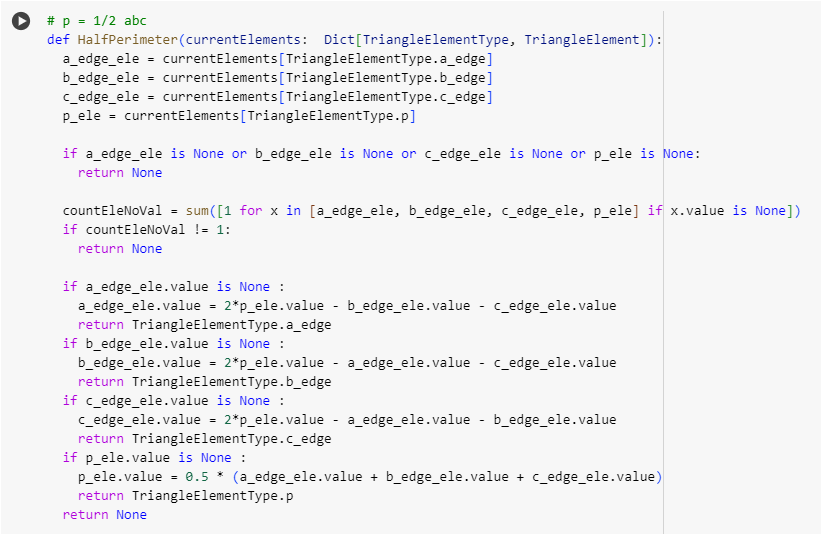
Description automatically generatedTrong đó:

**Input**:

* ***curentElements*:** danh sách về trạng thái hiện tại củacác yếu tố tam giác.

**Output**: yếu tố suy luận ra được khi áp dụng công thức hiện tại, ***None*** nếu không thể áp dụng được công thức hiện tại.

## p = ½ (a +b + c)

Trong đó:

**Input**:

* ***curentElements*:** danh sách về trạng thái hiện tại củacác yếu tố tam giác.

**Output**: yếu tố suy luận ra được khi áp dụng công thức hiện tại, ***None*** nếu không thể áp dụng được công thức hiện tại.

## S2= p (p-a)(p-b)(p-c)

A screenshot of a computer program

Description automatically generatedTrong đó:

**Input**:

* ***curentElements*:** danh sách về trạng thái hiện tại củacác yếu tố tam giác.

**Output**: yếu tố suy luận ra được khi áp dụng công thức hiện tại, ***None*** nếu không thể áp dụng được công thức hiện tại.

# Biểu diễn trạng thái của bài toán

Sử dụng một ma trận có kích thướt **MxN** để biểu diễn trạng thái hiện tại của bài toán trong đó:

* **M**: số hàng của ma trận tương ứng với M yếu tố của tam giác.
* **N:** số cột của ma trận tương ứng với N công thức của tam giác
* Giá trị của mỗi ô thể hiện mối liên hệ giữa yếu tố và công thức cũng như cho biết giá trị hiện tại của tam giác. Với các giá trị như sau:
  + **0**: yếu tố của tam giác và công thức tương ứng không có liên hệ với nhau
  + **-1**: yếu tố của tam giác và công thức tương ứng có liên hệ với nhau và yếu tố hiện tại chưa có giá trị (chưa biết)
  + **1**: yếu tố của tam giác và công thức tương ứng có liên hệ với nhau và yếu tố hiện tại đã có giá trị (đã biết)

Ví dụ: Trạng thái của ma trận khi biết 3 cạnh a, b, c

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | **(1)** | **(2)** | **(3)** | **(4)** | **(5)** | **(6)** | **(7)** | **(8)** | **(9)** | **(10)** | **(11)** | **(12)** |
| A | -1 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | -1 | 0 | -1 | 0 | 0 |
| B | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | -1 | -1 | 0 | 0 | 0 |
| C | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | -1 | -1 | 0 | 0 |
| a | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 1 | 1 | 1 | 0 | 1 | 1 | 1 |
| b | 0 | 0 | 1 | 0 | 1 | 0 | 1 | 1 | 1 | 0 | 1 | 1 |
| c | 0 | 0 | 0 | 1 | 1 | 1 | 0 | 0 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| hA | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| hB | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| hC | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| p | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | -1 |
| S | 0 | -1 | -1 | -1 | -1 | -1 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 |

1. **A+ B+ C = π**
2. **S = ½ a.hA**
3. **S = ½ b.hB**
4. **S = ½ c.hC**
5. **S = ½ bc.SinA**
6. **S = ½ ac.SinB**
7. **S = ½ bc.SinA**
8. **a/SinA = b/SinB**
9. **b/SinB = c/SinC**
10. **c/SinC = a/SinA**
11. **p = ½ (a +b+c)**
12. **S2= p (p - a) (p – b) ( p- c)**

# Thuật giải lan truyền kích hoạt

Khởi tạo matrix trạng thái + kích hoạt các trạng thái đã có

Tồn tại yếu tố chưa kích hoạt? **(1)**

**start**

**End**

Lặp qua tất cả các cột của Matrix (tương ứng với công thức)

No

Yes

Công thức có thể kích hoạt (cột có duy nhất 1 giá trị **-1**)?

Yes

No

Kích hoạt công thức để tính yếu tố chưa biết.

Kích hoạt yếu tố vừa tính được. **(2)**

Có yếu tố mới được kích hoạt?

**End**

No

Yes

1. **Tồn tại yếu tố chưa kích hoạt nếu matrix tồn tại cell có giá trị là -1.**
2. **Trong matrix, đối với row tương ứng với yếu tố, các cell có giá trị khác 0 sẽ được cập hật thành 1.**

# Demo

**Bài toán**: Tìm các yếu tố còn lại của tam giác khi biết 3 cạnh **a=3, b=4, c=5**

B1: Xây dựng mạng tri thức về tam giác.

A close-up of a text

Description automatically generated

B2: Khởi tạo các yếu tố đã biết.

A screenshot of a computer program

Description automatically generated

B3: Hiển thị kết quả

A screenshot of a computer code

Description automatically generated