

BIỂU DIỄN TRI THỨC

Bài tập 2

Nhóm 07

May 29th, 2021

Bài 2

Bài toán điều chế các chất hóa học

Câu a. Tổ chức lưu trữ cho miền tri thức

Tổ chức lưu trữ miền tri thức dưới dạng SQL với các bảng sau:

- Bảng **Chemicals**: mỗi dòng định danh từng chất hóa học (Na , $NaCl$, H_2SO_4 , ...) với `id` là dãy số duy nhất cho từng chất, `name` là tên khoa học của chất đó và `attribute` là tính chất của chất đó (bazo, axit, chất trơ,...)

Chemicals	
PK	<code>id int NOT NULL</code>
	<code>name char(50) NOT NULL</code>
	<code>attribute char(50) NOT NULL</code>

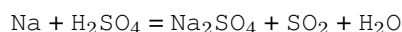
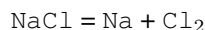
- Bảng **Compounds**: mỗi dòng chứa một dãy các chất hóa học ở vế trái hoặc vế phải từ miền tri thức, ví dụ $S + O_2 = SO_2 \Rightarrow$ 2 dãy/dòng $[S, O_2]$, $[O_2]$ với `id` là dãy số duy nhất cho từng dãy, `list_chemicals` là dãy các chất và `type` là 'input' nếu ở vế trái và 'output' cho vế còn lại.

Compounds	
PK	<code>id int NOT NULL</code>
	<code>list_chemicals char(200) NOT NULL</code>
	<code>type char(50) NOT NULL</code>

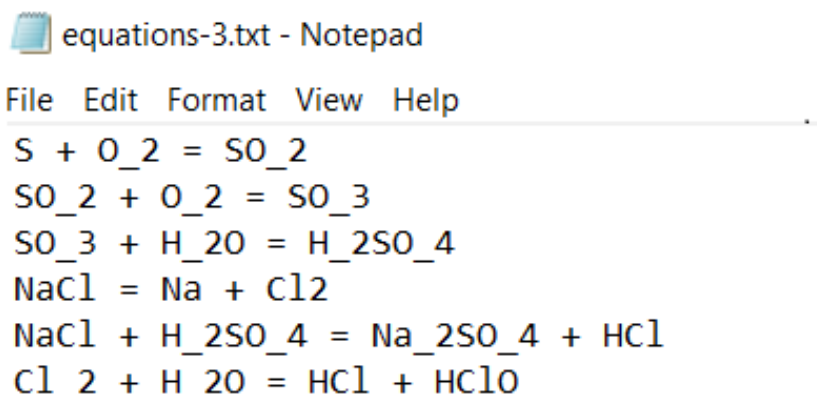
- Bảng **Relations**: mỗi dòng chứa một cặp `id` từ bảng **Compounds**, tương ứng một vế trái 'input_id' và một vế phải 'output_id'.

Relations	
FK1	<code>input_id int NOT NULL</code>
FK2	<code>output_id int NOT NULL</code>

Với phạm vi bài toán, miền tri thức thu thập sẽ nằm trong giới hạn đủ để giải quyết yêu cầu bài toán bao gồm một số những phương trình hóa học cần thiết để điều chế Na_2SO_4 , H_2SO_4 , HCl và Na từ S , H_2O , và NaCl như:



Miền tri thức các phương trình phản ứng hóa học trên được lưu trữ trong tập tin dưới định dạng text (*.txt*) được minh họa trong hình 1.



```
equations-3.txt - Notepad
File Edit Format View Help
S + O_2 = SO_2
SO_2 + O_2 = SO_3
SO_3 + H_2O = H_2SO_4
NaCl = Na + Cl2
NaCl + H_2SO_4 = Na_2SO_4 + HCl
Cl_2 + H_2O = HCl + HClO
```

Hình 1: Minh họa miền tri thức trong tập tin định dạng text

Nhóm em sử dụng kiến thức về Lập trình hướng đối tượng để xử lý tự động các tri thức trên máy tính từ kho tri thức SQL. Lớp đối tượng cơ bản EQUATION biểu diễn phương trình hóa học được định nghĩa như sau:

```
1 class EQUATION:
2     vars_VP = []
3     vars_VT = []
4
5     #Khai báo lớp đối tượng
6     def __init__(self, name, vars_VT, vars_VP):
7         self.name = name
8         self.vars_VT = vars_VT
9         self.vars_VP = vars_VP
10
11     # Tổng số chất đã biết bên vế trái của phương trình hóa học
12     def get_num_vars(self):
13         return len(self.vars_VT)
14
```

Listing 1: Lớp đối tượng EQUATION

Trong đó, các biến có nghĩa:

- name có dạng "công thức i" với i là số thứ tự của công thức đó trong miền tri thức tính từ 1.
- vars_VT là bao gồm các chất bên trái dấu bằng (=) của từng tri thức, gọi là các **chất đã biết**.

- vars_VP là bao gồm các chất bên phải dấu bằng (=) của từng tri thức, gọi là các **chất cần điều chế**.

Câu b. Trình bày thuật giải

```

1  def solve(self):
2      #Đặt cờ truy vết "giải được bài toán"
3      flag = True
4      while flag:
5          flag = False
6
7          #Duyệt từng phương trình
8          for equation in self.equations:
9              #Lấy chất điều chế bên VT phương trình
10             known_var = self.get_known_vars(equation)
11
12             #Nếu nhu 1 node (chất) có thể điều chế được (khác -1)
13             if known_var != -1:
14                 #Kích hoạt node có thể điều chế được
15                 self.active_var(known_var)
16
17             #Tiến thành lưu lại pt có thể điều chế
18             self.add_step(known_var, equation)
19             flag = True
20
21             # Kiểm tra xem đã giải bài toán thành công chưa?
22             if self.is_success():
23                 temp = []
24                 solutions = temp
25                 # Trả về lời giải đến đích
26                 for step in self.steps:
27                     solutions.append(step)
28                 return [True, solutions]
29
30             # Nếu không giải được trả về yêu cầu thêm thông tin, tri thức
31             return [False, "Bài toán không thể giải, hãy bổ sung thêm thông tin hoặc tri thức."]
32

```

Listing 2: Thuật giải mạng ngữ nghĩa điều chế

Câu c. Cài đặt chương trình

i. Thông tin chương trình

1. Tên chương trình: **Chemistry Lab - Nhóm 07**
2. Chương trình thực thi: `chemistry-lab_Nhom07.exe`

3. Video demo: chemistry-lab_Nhom07-Demo.mp4
4. Ngôn ngữ lập trình: *Python*
5. Thiết kế giao diện người dùng: *PyQt5*
6. Các tính năng chính:
 - Trình bày từng bước điều chế các chất hóa học cần thiết.
 - Có thể xử lý trên miền tri thức linh hoạt với các phương trình hóa học có hoặc không có hệ số cân bằng.

ii. Cấu trúc thư mục/tập tin

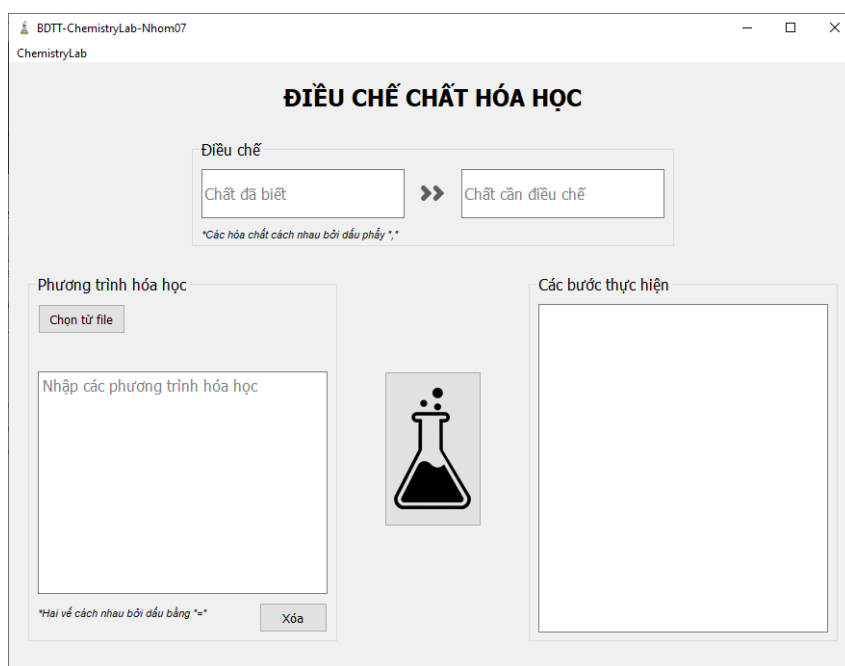
Name	Date	Type	Size	Length
app	27-May-21 7:20 PM	File folder		
input	27-May-21 7:20 PM	File folder		
Cau02.pdf	29-May-21 2:44 AM	Microsoft Edge P...	234 KB	
chemistry-lab_Nhom07.exe	27-May-21 7:20 PM	Application	36,123 KB	
chemistry-lab_Nhom07-Demo.mp4	27-May-21 6:47 PM	MP4 Video File	13,439 KB	00:01:33
README.txt	28-May-21 2:37 AM	Text Document	1 KB	

Hình 2: Cấu trúc thư mục/tập tin

- Thư mục:
 - app: Chứa các tập tin giao diện cần thiết để thực thi chương trình
 - input: Chứa các tập tin phương trình hóa học mẫu
- Tập tin:
 - Cau02.pdf: Câu trả lời cho bài tập + Hướng dẫn sử dụng
 - chemistry-lab_Nhom07.exe: Chương trình thực thi điều chế chất hóa học
 - chemistry-lab_Nhom07-Demo.mp4: Video demo chương trình

iii. Hướng dẫn sử dụng

- Quy ước định dạng phương trình hóa học và hóa chất:
 - Các chất hóa học như Cl_2 , H_2O , SO_2 , ... sẽ được đưa vào dưới dạng Cl_2, H_2O, SO_2, ...
 - Dấu mũi tên trong các phương trình hóa học sẽ được thay bởi dấu bằng "=". Ví dụ: $2\text{Na} + \text{Cl}_2 \rightarrow 2\text{NaCl}$ sẽ được đưa vào dưới dạng $2\text{Na} + \text{Cl}_2 = 2\text{NaCl}$



Hình 3: Màn hình giao diện Chemistry Lab - Nhóm 07

- **Điều chế:** Người dùng nhập các chất hóa học đã có (nguyên liệu điều chế) vào ô **Chất đã biết** (bên trái), và nhập các chất hóa học cần điều chế vào ô **Chất cần điều chế** (bên phải).

Trong quá trình nhập liệu, người dùng sử dụng **dấu phẩy (,)** để ngăn cách các hóa chất.

Ghi chú: chương trình đã mặc định có chất O_2 ở **Chất đã biết**, vì chất này có sẵn trong không khí.

- **Phương trình hóa học:** Người dùng có thể đưa tri thức (các phương trình hóa học) vào chương trình bằng 2 cách:

- Nhập trực tiếp: người dùng nhập các phương trình hóa học, theo đúng định dạng quy ước, vào ô trống. Các phương trình ngăn cách nhau bởi kí hiệu ngắt dòng (<Enter>).

- Nhập từ file: người dùng chọn **Chọn từ file** và chọn tệp tin chứa các phương trình hóa học cần đưa vào, lúc này các phương trình hóa học trong tệp tin sẽ được hiển thị ở ô trống phía dưới.

Lưu ý: chỉ có thể chọn **một** tệp tin (định dạng text **.txt**) và không thể chỉnh sửa trong ô trống.

Người dùng có thể chọn **Xóa** để xóa tất cả các phương trình hóa học vừa nhập.

- Sau khi cung cấp đủ thông tin ở hai phần **Điều chế** và **Phương trình hóa học**, người dùng chọn nút có hình "lọ hóa chất" để chương trình tiến hành điều chế, kết quả sẽ được hiển thị ở phần **Các bước thực hiện**.

iv. Một số hình ảnh

BDTT-ChemistryLab-Nhom07
ChemistryLab

ĐIỀU CHẾ CHẤT HÓA HỌC

Điều chế

S, H₂O

 >>

H₂SO₄

*Các hóa chất cách nhau bởi dấu phẩy *,*


Phương trình hóa học

Chọn từ file equations-3.txt

Bao gồm 6 phương trình.

$$\begin{aligned} S + O_2 &= SO_2 \\ SO_2 + O_2 &= SO_3 \\ SO_3 + H_2O &= H_2SO_4 \\ NaCl &= Na + Cl_2 \\ NaCl + H_2SO_4 &= Na_2SO_4 + HCl \\ Cl_2 + H_2O &= HCl + HClO \end{aligned}$$

*Hai về cách nhau bởi dấu bằng "=", Xóa



Hoàn thành

Các bước thực hiện

Ta cần điều chế H₂SO₄

Điều chế lần 1
Ta điều chế được ['SO₂'] thông qua công thức 1
['S', 'O₂'] => ['SO₂']

Điều chế lần 2
Ta điều chế được ['SO₃'] thông qua công thức 2
['SO₂', 'O₂'] => ['SO₃']

Điều chế lần 3
Ta điều chế được ['H₂SO₄'] thông qua công thức 3
['SO₃', 'H₂O'] => ['H₂SO₄']

Hình 4: Các bước thực hiện để điều chế H₂SO₄ từ S và H₂O

BDTT-ChemistryLab-Nhom07
ChemistryLab

ĐIỀU CHẾ CHẤT HÓA HỌC

Điều chế

Na, Cl₂, H₂O

 >>

NaOH

*Các hóa chất cách nhau bởi dấu phẩy *,*


Phương trình hóa học

Chọn từ file equations-1.txt

Bao gồm 8 phương trình.

$$\begin{aligned} 2Na + Cl_2 &= 2NaCl \\ 2Fe + 3Cl_2 &= 2FeCl_3 \\ Cu + Cl_2 &= CuCl_2 \\ Cl_2 + H_2O &= HCl + HClO \\ MnO_2 + 4HCl &= MnCl_2 + Cl_2 + 2H_2O \\ 16HCl + 2KMnO_4 &= 2KCl + 2MnCl_2 + 8H_2O + 5Cl_2 \\ 2NaCl + 2H_2O &= Cl_2 + H_2 + 2NaOH \\ 2K + Cl_2 &= 2KCl \end{aligned}$$

*Hai về cách nhau bởi dấu bằng "=", Xóa



Hoàn thành

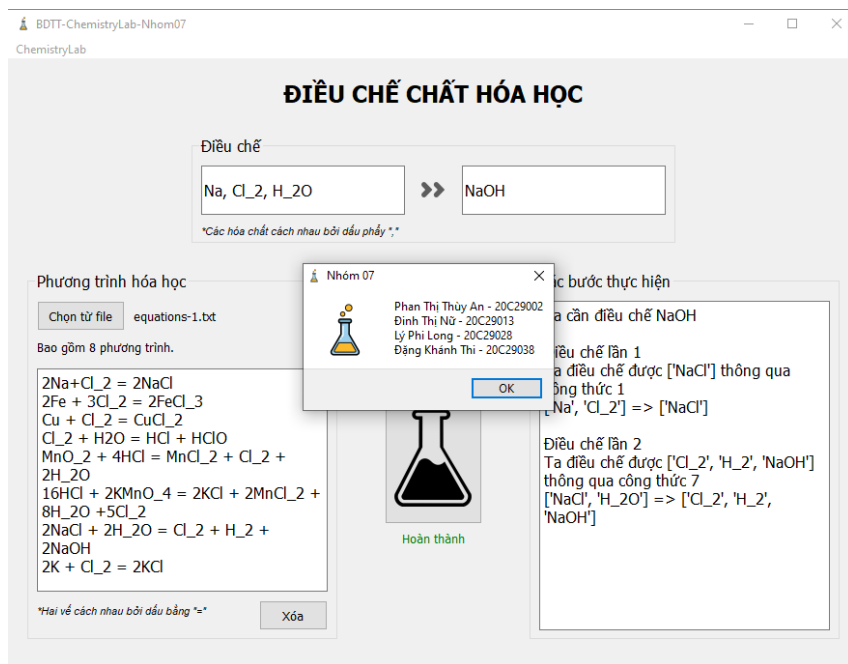
Các bước thực hiện

Ta cần điều chế NaOH

Điều chế lần 1
Ta điều chế được ['NaCl'] thông qua công thức 1
['Na', 'Cl₂'] => ['NaCl']

Điều chế lần 2
Ta điều chế được ['Cl₂', 'H₂', 'NaOH'] thông qua công thức 7
['NaCl', 'H₂O'] => ['Cl₂', 'H₂', 'NaOH']

Hình 5: Minh họa điều chế NaOH với các chất đã cho Na, Cl₂, H₂O



Hình 6: Nhóm học viên thực hiện