



- ток: ИАПУИАПУ ДВО РАН, 2003. (<http://www.iacp.dvo.ru/es/>).
14. *Артемова И.Л., Высоцкий В.И., Реитаненко Н.В.* Модель онтологии предметной области "Органическая химия". Органические реакции: классификация реакционных центров, радикалы, ионы, основные свойства реакций. Препр. Владивосток: ИАПУ ДВО РАН, 2003. (<http://www.iacp.dvo.ru/es/>).
  15. *Клещев А.С., Артемова И.Л.* Математические модели онтологии предметной области. Ч. 2. Компоненты модели // Научно-техническая информация. Сер. 2. 2001. № 3. С.19-28.
  16. *Клещев А.С., Артемова И.Л.* Необогатенные системы логических соотношений. Ч. 1. // Научно-техническая информация. Сер. 2. 2000. №7. С.18-28.
  17. *Клещев А.С., Артемова И.Л.* Необогатенные системы логических соотношений. Ч. 2. // Научно-техническая информация. Сер.2. 2000. №8. С.8-18.
  18. *Майерс Г.* Надежность программного обеспечения. // М.: Мир, 1980.

*Статья представлена к публикации членом редколлегии А.С. Клещевым.*

УДК 519.68:15:54

© 2004 г. **Н.О. Лицис**

(Институт автоматизации и процессов управления ДВО РАН, Владивосток)

## **ПРОТОТИП ИНТЕРНЕТ-СИСТЕМЫ КЛАССИФИКАЦИИ ОРГАНИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ<sup>1</sup>**

Описывается прототип Интернет-системы, решающей задачу классификации органических реакций на основе построенной модели онтологии соответствующего раздела химии. Приведена модель онтологии, а также краткое описание архитектуры программной системы.

### **Введение**

При построения модели онтологии рассматриваемого раздела предметной области использовались источники [1 – 9].

Органическая химия в настоящее время переживает период бурного развития. Использование новейших физико-химических методов исследования приводит к углублению теоретических представлений в органиче-

---

<sup>1</sup> Работа выполнена в рамках программы № 16 фундаментальных исследований Президиума РАН на 2004 г. Проект № 10002-251/П16/021-387/110504-266.

ской химии, выявлению причин протекания химических реакций. Понимание того, каким образом осуществляются реакции и какие факторы определяют их направление, – наиболее важное достижение в органической химии последних лет.

К настоящему времени создано немало программных средств, посвященных разделу «Химические реакции», и основная задача, которую они решают, это задача синтеза, а именно моделирования и прогнозирования хода химической реакции. Среди них выделяются такие системы как EROS, решающая задачу прогнозирования и моделирования органических реакций, WODCA – система для конструирования органического синтеза. Хорошо зарекомендовали себя CAMEO – модульная экспертная система, компьютерная программа, которая прогнозирует продукты органических реакций при заданных исходных материалах, реагентах и условиях; АОСР – программная система, решающая задачу нахождения способа синтеза продукта из заданных начальных веществ, если он существует, и генерации всех продуктов органического синтеза из начальных веществ.

Наконец, особого внимания заслуживает программная система CORA (Classification of Organic Reactions for Applications/Классификация Органических Реакций для Приложений) – программа, решающая задачу группировки отдельных реакций в типы реакций на основе физико-химического описания центра реакции. Однако все эти системы, решающие практические задачи, доступны лишь ученым-химикам тех исследовательских организаций, которые выступали заказчиками таких систем; они не ставят перед собой задачи обучения структуре раздела «Органические реакции», существующим типам органических реакций, систематизации знаний в этой области.

Кроме программных систем, обрабатывающих данные о реакциях, существуют также программы, задачей которых является предоставление необходимой информации об органических реакциях. Примером такой системы может послужить программа WebReactions, осуществляющая поиск реакций и предоставляющая возможность получить все нужные реакции посредством Интернета.

Анализируя созданные программные системы в области химии, нельзя не заметить, что большое их количество разрабатывается для Интернета с использованием особых специализированных технологий для создания химических Интернет-приложений – таких как язык СМL, созданный как расширение HTML специально для представления химических данных; JChem – система, предназначенная для создания химических веб-приложений, сочетающая поиск подструктур с SQL запросами; особый компонент ActiveX, называемый Accord ActiveX Chemistry Control, который «оживляет» информацию, относящуюся к химии, в Веб-браузерах и других средах, поддерживающих технологию ActiveX; Advanced Chemistry Development апплет для изображения химических структур.

Химия, ее достижения становятся неотъемлемой частью Интернета, что вызвано необходимостью обработки больших объемов химических данных и получения самой новой информации. Отсюда возникает стремление создать такую программную систему, способную функционировать в пределах всемирной компьютерной сети, которая, помимо обеспечения информации о том, к каким классам относится заданная реакция, предоставляла бы возможность редактирования базы знаний об органических реакциях и их типах.

Поскольку проблема использования единой терминологии предметной области для достижения взаимопонимания между людьми и между различными приложениями является очень актуальной, то в области химии, как и в других естественно-научных областях, немалое внимание уделяется онтологиям. Созданные в области химии онтологии – такие как CHEMICALS, состоящая из двух больших подразделов CHEMICAL-ELEMENTS и CHEMICAL-CRYSTALS, онтология ВАО большого раздела биохимии, ТаО, охватывающая основные понятия молекулярной биологии и биоинформатики, – успешно используются в различных информационных системах. Так, CHEMICALS послужила основой для информационно-поисковой системы OntoGeneration, ВАО является ядром системы интеграции информации ВАСИС, а ТаО – центральным понятием системы ТАМБИС, которая использует онтологию, чтобы дать возможность биологам формулировать запросы к многочисленным внешним базам данных, используя обычный интерфейс запросов.

Целью данной работы являлось создание прототипа Интернет-системы, решающей задачу классификации органических реакций на основе построенной модели онтологии соответствующего раздела ПО «Химия». Пользователь вводит данные об исходных материалах и продуктах реакции, а программное средство должно выдать результат – класс, к которому относится эта реакция, если таковой существует, а также дополнительную справочную информацию о ней.

Данная система предназначена для того, чтобы обеспечить не просто информацию описательного характера, а структурированное, систематизированное представление о том, как классифицированы органические реакции. Решение задачи классификации лежит в основе решения более сложных практических задач – прогнозирования реакций, синтеза новых веществ, а редактирование базы знаний позволяет накапливать материал для решения данной задачи, так как в сформированную на определенный момент базу знаний, во-первых, входит относительно небольшая часть существующих реакций, а во-вторых, постоянно появляются все новые реакции. При редактировании осуществляется необходимый контроль, который не допускает проникновения некорректной или не имеющей отношения к данной предметной области информации. К тому же редактирование допускает корректировку имеющихся знаний, что также является немало-

важным.

Данная работа является своего рода экспериментом в плане создания специализированного компьютерного банка знаний по химии, доступном широкому кругу пользователей сети Интернет и поддерживающей возможность редактирования базы знаний программной системы также через сеть Интернет. Решая задачу классификации органических реакций и объясняя, почему заданная реакция относится к конкретному классу, программная система, таким образом, помогает лучше понять и освоить принципы классификации реакций. При этом она позволяет пользователям расширять и корректировать базу знаний об органических реакциях, так как обладает возможностью накапливать и обновлять знания данной ПО.

### Онтология классификации органических реакций

Основополагающим понятием данного раздела является *химическая реакция*. Под этим термином понимается взаимодействие нескольких частиц друг с другом или превращение одной частицы в другую. Условной записью химической реакции служит *химическое уравнение*. В нем химическая реакция представляется посредством химических знаков и формул.

В процессе анализа раздела ПО было установлено: для того, чтобы определить тип органической реакции, нужно обязательно знать, какие органические соединения входят во множество реагентов, а какие – во множество результатов. *Реагенты* – это вещества, участвующие в реакции, а *результаты* реакции – новые вещества, которые получились в процессе реакции. Ни одно вещество, входящее во множество реагентов, не может входить во множество результатов, и наоборот, – это обязательное условие того, что реакция действительно имела место.

Из литературы известно несколько видов классификаций химических реакций в зависимости от принципа, заложенного в их основу. Различают четыре группы реакций:

углеродный скелет не изменяется;

углеродный скелет нужного вещества строится из двух или большего числа молекул за счет образования С-С связей;

углеродный скелет образуется в результате частичного разрушения структуры, более богатой углеродом;

углеродный скелет образуется в результате перестройки скелета исходного соединения.

Существует классификация или характеристика химических реакций, обусловленная различиями в электронных структурах исходных веществ, а также различиями в электронном характере процессов, протекающих с образованием и разрывом связей. В таком случае реакции делятся на гетеролитические и гомолитические, при этом первые, в свою очередь, делятся на электрофильные и нуклеофильные.

Тремя главнейшими типами реакций в зависимости от структурных соотношений между исходным и конечным продуктами являются реакции замещения, присоединения, отщепления. В органической химии к ним можно добавить четвертый тип, связанный с изменением структурных соотношений, — реакцию изомеризации, или перегруппировки. Окислительно-восстановительные реакции можно считать пятым типом, который неявно связан с изменением структуры участвующих в реакции веществ. Данную классификацию также еще называют классификацией по характеру химических превращений.

Существует классификация химических реакций по характеру вводимой в углеводородный скелет или удаляемой из него функциональной группы, — например, нитрование, галоидирование, алкилирование и т. д.

Отличительной особенностью задачи классификации органических реакций является то, что каждый тип характеризуется различными признаками. Построенная модель онтологии, приведенная ниже, содержит разделы описания сортов имен, описание значений имен и онтологические соглашения.

### Модель онтологии

Приведем определения основных терминов модели онтологии, определив сорта имен.

1.  $\chi(\text{химические соединения}) = \{ \} N$

Термин «химические соединения» обозначает конечное множество химических соединений; в данной модели предполагается, что любое химическое соединение имеет идентификатор.

2.  $\chi(\text{органические соединения}) = \{ \} \text{химические соединения}$

Термин «органические соединения» обозначает подмножество множества названий всех химических соединений.

3.  $\chi(\text{химические элементы}) = \{ \} N$

Термин «химические элементы» обозначает конечное множество химических элементов.<sup>2</sup>

4.  $\chi(\text{классы соединений}) = \{ \} N$

Термин «классы соединений» обозначает множество идентификаторов классов соединений.

5.  $\chi(\text{класс соединения}) = (\text{химические соединения} \rightarrow \text{классы соединений})$

Термин «класс соединения» обозначает функцию, которая сопоставляет каждому соединению класс, которому оно принадлежит.

6.  $\chi(\text{свойства соединений}) = \{ \} N$

---

<sup>2</sup> Все множество химических элементов определено в модели онтологии физической химии. В данной модели используется лишь его подмножество.

Термин «свойства соединений» обозначает множество названий свойств соединений.

7.  $\chi(\text{значения свойства соединения}) = (\text{свойства соединений} \rightarrow \{\}$   
*возможные значения свойств классов соединений)*

Термин «возможные значений свойств» обозначает функцию, которая свойству сопоставляет множество значений данного свойства.

8.  $\chi(\text{характерные свойства для классов соединений}) = (\text{классы со-}$   
*единений} \rightarrow \{\} *свойства классов соединений)**

Термин «характерные свойства для классов соединений» обозначает функцию, которая сопоставляет каждому классу соединений множество свойств, которые имеет смысл рассматривать для этого класса.

9.  $\chi(\text{формула класса соединений}) = (\text{классы соединений} \rightarrow \text{возмо-}$   
*жные формулы классов соединений)*

Термин «формула класса соединения» обозначает функцию, которая заданному классу соединения сопоставляет его формулу (в общем виде).

10.  $\chi(\text{описание класса соединений}) = (\{v: (\times \text{классы соединений,}$   
*свойства соединений)) \pi(2, v) \in \text{характерные свойства для классов}*  
*соединений}(\pi(1, v))\} \rightarrow \{N)*

Термин «описание класса соединений» обозначает функцию, которая сопоставляет каждому классу и свойству значение этого свойства для дан-ного класса

11.  $\chi(\text{классы реакций по характеру химических превращений}) = \{N$

Термин «классы реакций по характеру химических превращений» обозначает множество идентификаторов классов химических реакций.

12.  $\chi(\text{классы реакций по характеру вводимой или удаляемой функ-}$   
*циональной группы}) = \{N*

Термин «классы реакций по признаку вводимой или удаляемой функциональной группы» обозначает множество идентификаторов классов химических реакций по данному признаку.

13.  $\chi(\text{обозначения}) = \{N$

Термин «обозначения» обозначает конечное множество обозначений, используемых в формулах классов веществ (например, R – обозначение радикала).

14.  $\chi(\text{реакции между представителями классов}) = \{N$

Термин «реакции между представителями классов» обозначает мно-жество идентификаторов реакций между представителями классов (имен множеств реакций, обладающих одинаковым свойством).

15.  $\chi(\text{описание реакции между представителями классов}) = (\text{реак-}$   
*ции между представителями классов} \rightarrow (\times \{\} *классы соединений, \{}*  
*классы соединений)**

Термин «описание реакции между представителями классов» обо-значает функцию, которая сопоставляет реакции между представителями

классов пару множеств; первое множество определяет классы реагентов реакций, а второе — классы результатов реакций.

16.  $\chi$ (описание класса реакции по характеру химических превращений) = (классы реакций по характеру химических превращений  $\rightarrow \{ \} (\times I[1, 5],$  реакции между представителями классов))

Термин «описание класса по характеру химических превращений» обозначает функцию, которая ставит в соответствие данному классу множество пар; первым элементом каждой пары является номер стадии химической реакции, а вторым — реакция, которая может иметь место на этой стадии.

17.  $\chi$ (описание класса реакции по характеру вводимой или удаляемой функциональной группы) = (классы реакций по характеру вводимой или удаляемой функциональной группы  $\rightarrow \{ \}$  реакции между представителями классов))

Термин «описание класса по характеру вводимой или удаляемой функциональной группы» обозначает функцию, которая ставит в соответствие данному классу множество реакций между представителями классов.

18.  $\chi$ (номер стадии исследуемой реакции) =  $I [1, 5]$

Термин «номер стадии исследуемой реакции» обозначает номер стадии рассматриваемой реакции в ситуации.

19.  $\chi$ (описание реагентов исследуемой реакции) =  $\{ \} (\times$  возможные формулы соединений,  $\{ \}$  ( $\times$  свойства соединений, возможные значения свойств классов соединений))

Термин «описание реагентов исследуемой реакции» обозначает подмножество, элементами которого являются пары из возможной формулы соединений и множества свойств и их значений. Так задаются все реагенты исследуемой реакции.

20.  $\chi$ (описание результатов исследуемой реакции) =  $\{ \} (\times$  возможные формулы соединений,  $\{ \}$  ( $\times$  свойства соединений, возможные значения свойств классов соединений))

Термин «описание результатов исследуемой реакции» обозначает множество, элементами которого являются пары из возможной формулы соединений и множества свойств и их значений. Так задаются все результаты исследуемой реакции.

21.  $\chi$ (класс исследуемой реакции по характеру химических превращений) = классы химических реакций по характеру химических превращений

Термин «класс исследуемой реакции по характеру химических превращений» обозначает значение класса по данному признаку в отдельной ситуации.

22.  $\chi$ (класс исследуемой реакции по признаку вводимой или удаляемой функциональной группы) = классы химических реакций по признаку вводи-

*мой или удаляемой функциональной группы*

Термин «класс исследуемой реакции по признаку вводимой или удаляемой функциональной группы» обозначает значение класса по данному признаку в отдельной ситуации.

Теперь опишем вспомогательные термины модели, определив значения имен.

23. *Возможные значения свойств классов соединений*  $\equiv N$

Вспомогательный термин "возможные значения свойств классов соединений" обозначает множество значений всех свойств классов соединений.

24. *Группы элементов*  $\equiv \{Na, Me\}$

Группы элементов представляются как множество существующих групп элементов (галогены, металлы).

25. *Функциональные группы*  $\equiv$  *возможные формулы соединений*

Описание значения имени "функциональные группы" тождественно описанию значения имени "возможные формулы соединений".

26. *Компоненты формул классов соединений*  $\equiv$  *обозначения*  $\cup$  *группы элементов*  $\cup$  *функциональные группы*  $\cup$  *химические элементы*

Компонентами формул классов соединений могут быть обозначения, группы элементов, функциональные группы и химические элементы.

27. *Компоненты формул соединений*  $\equiv$  *функциональные группы*  $\cup$  *химические элементы*

Компонентами формул соединений могут быть только функциональные группы и химические элементы.

28. *Возможные формулы соединений*  $\equiv (\cup (v: I[1, 30]) (\times$  *компоненты формул соединений, I [1, 20]) $\uparrow$  v)*

Термин «возможные формулы соединений» обозначает множество представлений формул; каждая формула представляется последовательностью пар, состоящих из компонентов формул соединений и индекса компонента.

29. *Возможные формулы классов соединений*  $\equiv \{(\cup (v: I[1, 30]) (\times$  *компоненты формул классов соединений, I [1, 20]) $\uparrow$  v)*

Термин «возможные формулы классов соединений» обозначает множество формул класса; каждая формула класса соединений задает множество формул представителей класса, описываемых последовательностью пар, состоящих из компонентов формул классов соединений и их количества.

Связи между значениями терминов модели онтологии задают онтологические соглашения.



30. ( $v$ : реакции между представителями классов)  $\pi(1, \text{ описание реакции между представителями классов } (v)) \cap \pi(2, \text{ описание реакции между представителями классов } (v)) = \emptyset$

Множества реагентов и результатов класса не могут содержать одинаковых химических веществ.

31. Классы реакций по характеру химических превращений  $\cap$  классы реакций по признаку вводимой или удаляемой функциональной группы =  $\emptyset$

Множества классов реакций по двум разным признакам не имеют общих элементов.

32. ( $\vee$  ( $v$ : описание класса реакции по характеру химических превращений (класс исследуемой реакции по характеру химических превращений))) ( $\vee$  ( $v1$ : химические соединения)) (& ( $v2$ : описание реагентов исследуемой реакции)) /( $\pi(1, v) = \text{ номер стадии исследуемой реакции} \Rightarrow (\pi(1, v2) \in \text{ формула класса соединений (класс соединения } (v1)) \& (\& (v3: \pi(2, \text{ описание реагентов исследуемой реакции}))) \text{ описание класса соединений (класс соединения } (v1), \pi(1, v3)) = \pi(2, v3) \& \text{ класс соединения } (v1) \in \pi(1, \text{ описание реакции между представителями классов}(\pi(2, v))))$ )/

Описание каждого реагента исследуемой ситуации, состоящее из формулы и набора значений свойств, соответствует классу этого реагента, который определяется одним из вариантов описания класса реакций по характеру химических превращений, причем классы всех реагентов должны определяться одним и тем же вариантом описания.

33. ( $\vee$  ( $v$ : описание класса реакции по характеру химических превращений (класс исследуемой реакции по характеру химических превращений))) ( $\vee$  ( $v1$ : химические соединения)) (& ( $v2$ : описание результатов исследуемой реакции)) /( $\pi(1, v) = \text{ номер стадии исследуемой реакции} \Rightarrow (\pi(1, v2) \in \text{ формула класса соединений (класс соединения } (v1)) \& (\& (v3: \pi(2, \text{ описание результатов исследуемой реакции}))) \text{ описание класса соединений (класс соединения } (v1), \pi(1, v3)) = \pi(2, v3) \& \text{ класс соединения } (v1) \in \pi(2, \text{ описание реакции между представителями классов}(\pi(2, v))))$ )/

Описание каждого результата исследуемой ситуации, состоящее из формулы и набора значений свойств, соответствует классу этого результата, который определяется одним из вариантов описания класса реакций по характеру химических превращений, причем классы всех результатов должны определяться одним и тем же вариантом описания.

34. ( $\vee$  ( $v$ : описание класса реакции по характеру вводимой или удаляемой функциональной группы (класс исследуемой реакции по характеру вводимой или удаляемой функциональной группы))) ( $\vee$  ( $v1$ : химические соединения)) (& ( $v2$ : описание реагентов исследуемой реакции)) ( $\pi(1, v2) \in \text{ формула класса соединений (класс соединения } (v1)) \& (\& (v3: \pi(2, \text{ описание реагентов исследуемой реакции}))) \text{ описание класса соединений (класс$

*соединения (v1),  $\pi(1, v3) = \pi(2, v3)$  & класс соединения (v1)  $\in \pi(1, \text{описание реакции между представителями классов}(\pi(2, v)))$ )*

Описание каждого реагента исследуемой ситуации, состоящее из формулы и набора значений свойств, соответствует классу этого реагента, который определяется одним из вариантов описания класса реакций по характеру вводимой или удаляемой функциональной группы, причем классы всех реагентов должны определяться одним и тем же вариантом описания.

35. ( $\vee$  (v: описание класса реакции по характеру вводимой или удаляемой функциональной группы (класс исследуемой реакции по характеру вводимой или удаляемой функциональной группы))) ( $\vee$  (v1: химические соединения)) (& (v2: описание результатов исследуемой реакции)) ( $\pi(1, v2) \in \text{формула класса соединений (класс соединения (v1))}$  & (& (v3:  $\pi(2, \text{описание результатов исследуемой реакции})$ ))) описание класса соединений (класс соединения (v1),  $\pi(1, v3) = \pi(2, v3)$  & класс соединения (v1)  $\in \pi(2, \text{описание реакции между представителями классов}(\pi(2, v)))$ )

Описание каждого результата исследуемой ситуации, состоящее из формулы и набора значений свойств, соответствует классу этого результата, который определяется одним из вариантов описания класса реакций по характеру вводимой или удаляемой функциональной группы, причем классы всех результатов должны определяться одним и тем же вариантом описания.

### **Архитектура прототипа Интернет-системы классификации органических реакций**

У пользователей прототипа должен быть запущен Web-браузер, в котором они с помощью мыши и клавиатуры вводят запрос URL (адрес) данного приложения. После загрузки в окно браузера содержимого главной страницы приложения пользователь при помощи упомянутых устройств ввода может вводить входные данные и управлять работой приложения при помощи соответствующих кнопок. Запрос, включающий информацию о входных данных, передается на Web Server, на котором происходит интерпретация и обработка сформированного запроса. Файлы, используемые программной системой, хранятся на этом Web-сервере. Приложение составлено из файлов, в которых находится реализация внешних и внутренних интерфейсов (.asp, .htm, .gif, и др.), файлов, в которых реализована функциональность (бизнес-логика) программного средства (посредством серверных компонентов ActiveX, являющихся компонентами COM), файлов базы данных SQL Server.

Структура используемой базы данных реакций реализована в полном соответствии с моделью онтологии. Те самые сущности, которые содержатся в разделе описания значений имен, содержатся и здесь: таблица химических элементов, с которой связана таблица групп элементов и функ-

циональных элементов и обозначений. Таблица классов соединений использует все эти сущности. Причем для решения задачи классификации, где пользователь вводит конкретные вещества, ему предлагается подмножество компонентов формул соединений (т.е. без обозначений и групп элементов), а в редакторе – соответственно компоненты формул классов соединений.

Интерфейсный модуль отвечает за отображение элементов управления, осуществляет контроль вводимых данных и передачу их модулям бизнес-логики. “Классификатор” реализует бизнес-логику программы, находит классы реакции и предоставляет справочную информацию. Редакторы органических реакций и классов соединений позволяют изменять информацию о реакциях и классах соединений: добавлять новые реакции, изменять и удалять существующие.

На настоящий момент реализованы только редактор органических реакций и классов соединений, как сущностей верхнего уровня, которые базируются на составляющих их атомарных сущностях – химических элементах.

Модуль доступа к данным реализует подключение к базе данных (БД), формирует запросы к БД и при помощи внутренних интерфейсов предоставляет результаты запросов к БД, снабжая модуль “Классификатор” данными, необходимыми для решения задачи классификации.

Программное средство и используемая им БД с целью проведения экспериментов были размещены в пределах одной локальной сети, имеющей постоянный доступ в Интернет. При сравнительно небольшом количестве записей в базе скорость работы приложения в режиме online, а именно скорость отклика приложения соответствует приемлемому уровню. В сравнении со временем загрузки многих других web-сайтов можно считать, что время ответа данного ПС относительно небольшое. При существенном увеличении объема базы данных понадобится некоторая оптимизация алгоритма решения, а также обеспечение фильтрации для более удобного просмотра содержимого базы данных при ее редактировании и т.д.

В дальнейшем опыт и результаты этой разработки предполагается использовать при формировании компьютерного банка знаний.

### **Заключение**

В работе была рассмотрена архитектура разработанной автором Интернет-системы классификации органических реакций, особое внимание было уделено модели онтологии, положенной в основу данной программной системы.

## ЛИТЕРАТУРА

1. *Рештаненко Н.В.* Модель онтологии некоторых разделов предметной области «Органическая химия. Вузовский курс» // Тез. Дальневосточной математической шк.-сем. им. акад. Е.В. Золотова. Владивосток, 2002. С.113-115
2. *Артемьева И.Л., Цветников В.А., Реутов В.А.* Модель онтологии предметной области “Упрощенный физико-химический процесс в неорганической химии”. Владивосток, 1999.
3. *Несмеянов А.Н., Несмеянов Н.А.* Начала органической химии. М.: Изд-во "Химия", 1969. Кн. 1.
4. *Вейганд-Хильгетаг.* Методы эксперимента в органической химии. М.: Изд-во "Химия", 1968.
5. *Крамм Д., Хэммонд Дж.* Органическая химия. М.: Мир, 1964.
6. *Марч Дж.* Органическая химия. Реакции, механизмы и структура. М.: Мир, 1987. Т. 1.
7. *Клещев А.С., Артемьева И.Л.* Необогатенные системы логических соотношений // Науч.-техн. информация. Владивосток. Сер. 2. Ч. 1. 2000. №7. С.18-28.
8. *Клещев А.С., Артемьева И.Л.* Необогатенные системы логических соотношений // Науч.-техн. информация. Владивосток. Сер. 2. Ч. 1. 2000. №7. С.8-18.
9. *Клещев А.С., Артемьева И.Л.* Математические модели онтологий предметных областей // Науч.-техн. информация. Владивосток. Сер. 2. Ч. 2. 2001. №3. С.19-28.

*Статья представлена к публикации членом редколлегии А.С. Клещевым.*