



- 1996.
9. Дьюар М., Догерти Р. Теория возмущений молекулярных орбиталей в органической химии. – М.: Мир, 1977.
 10. Бусев А.И., Ефимов И.П. Определения, понятия, термины в химии. – М.: Просвещение, 1981.
 11. Стрейтвизер Э. Теория молекулярных орбит для химиков-органиков. – М.: Мир, 1965.
 12. Клецев А.С., Артемьева И.Л. Необогатенные системы логических соотношений. В 2-х частях. // Научно-техническая информация. Сер. 2. – 2000. – №7 – 8.
 13. Артемьева И.Л., Высоцкий В.И., Рештаненко Н.В. Модель онтологии предметной области (на примере органической химии) // Научно-техническая информация. Сер. 2. – 2005. – № 8. – С.19-27.

Статья представлена к публикации членом редколлегии А.С. Клецевым.

УДК: 519.68:15:54

© 2006 г. **И.Л. Артемьева**, канд. техн. наук,

Н.В. Рештаненко,

В.А. Цветников, канд. техн. наук

(Институт автоматизации и процессов управления ДВО РАН, Владивосток)

ОПИСАНИЕ СВОЙСТВ РЕАКЦИЙ В МОДЕЛИ ОНТОЛОГИИ ХИМИИ¹

В работе приведены модули модели онтологии химии, в которых описаны понятия, используемые при определении свойств реакций. Эти модули разработаны в результате анализа двух разделов данной предметной области: физической и органической химии. Определен фрагмент модели метаонтологии, используемой при определении модели онтологии химии.

Введение

При решении задачи нахождения пути синтеза химических соединений используются знания о прохождении химических реакций. Эти знания содержат информацию о том, какие вещества являются реагентами и результатами реакций, каковы механизмы прохождения реакций, какими

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке ДВО РАН, проект "Разработка интеллектуальных информационных технологий генерации и анализа знаний для поддержки фундаментальных научных исследований в области естественных наук".

должны быть условия, чтобы реакция имела место и т.д. В разных разделах химии описаны эти законы. Структура и представление химических реакций одинаковы в различных разделах химии, изменяется только фокус рассмотрения. Например, в физической химии рассматриваются физические свойства реакций, в органической химии большое значение уделяется механизмам реакций, раздел катализа изучает различные условия прохождения реакций и т.д.

При создании системы, основанной на знаниях, которая была бы полезна различным специалистам данной предметной области [1], необходимо формально представить все знания о прохождении реакций, а для этого следует определить онтологию, в терминах которой представляются знания. Поскольку предметная область развивается, программная система должна позволять легко модифицировать онтологию и знания, добавляя онтологию и знания новых разделов этой области. Для достижения такой цели используется метатермины, т.е. понятия более высокого уровня абстракции, используемые при определении онтологии.

В данной работе представлен фрагмент определения метатерминов, а также фрагмент модели онтологии химии, в котором определяются понятия, используемые для описания основных свойств реакций, их реакционных центров и радикалов. Устанавливается способ использования метатерминов при описании новых свойств реакций. Для представления моделей используются средства языка прикладной логики [2, 3].

Определение метатерминов

Метатермины представляют собой термины, обозначающие понятия более высокого уровня абстракции, используемые при определении онтологии предметной области. Метатермины определяются в онтологии второго уровня (метаонтологии).

Метаонтология химии определяет представление сущностей, которые изучает данная область, а также свойств этих сущностей. В рассматриваемом фрагменте такими сущностями являются химические соединения, реакции, радикалы, реакционные центры. Среди свойств можно выделить свойства, с помощью которых описываются компоненты сущности (например, реагенты и результаты реакций), собственные свойства этих сущностей, а также свойства компонент.

Каждый метатермин фиксирует схему определения множества терминов онтологии. Каждый метатермин представляет собой метафункцию. В модели онтологии определяются термины, задающие названия свойств сущностей и свойства их компонент. Определение этих терминов производится с использованием метатерминов и представляет собой применение метафункции к некоторому значению ее аргумента, причем аргумент метафункции задает область значения конкретного свойства. Модель онтологии также задает ограничения на множество значений свойств (онтологи-

ческие соглашения предметной области).

1. $S(\text{химические вещества}) = \{N\}$.

Термин *химические вещества* обозначает множество названий химических веществ.

2. $S(\text{химические реакции}) = \{N\}$.

Термин *химические реакции* обозначает множество названий химических реакций.

3. $S(\text{радикалы}) = \{N\}$.

Термин *радикалы* обозначает множество названий радикалов.

4. *Собственные свойства веществ* $\circ (I (v: \{(R \dot{E} I \dot{E} N \dot{E} \{N\})\}))$ (*химические вещества* $\otimes v$)).

Термин *собственные свойства веществ* обозначает метафункцию, аргументом которой является некоторое подмножество множества вещественных или целых чисел, множества обозначений, множества множеств обозначений, а результатом – множество функций, аргументом каждой из которых является химическое вещество, а результатом – элемент множества, задаваемого значением аргумента метафункции.

5. *Собственные свойства реакций* $\circ (I (v: \{(R \dot{E} I \dot{E} N \dot{E} \{N\})\}))$ (*химические реакции* $\otimes v$)).

Термин *собственные свойства реакций* обозначает метафункцию, аргументом которой является некоторое подмножество множества вещественных или целых чисел, множества обозначений, множества множеств обозначений, а результатом – множество функций, аргументом каждой из которых является химическая реакция, а результатом – элемент множества, задаваемого значением аргумента метафункции.

6. *Собственные свойства радикалов* $\circ (I (v: \{(R \dot{E} I \dot{E} N \dot{E} \{N\})\}))$ (*радикалы* $\otimes v$)).

Термин *собственные свойства радикалов* обозначает метафункцию, аргументом которой является некоторое подмножество множества вещественных или целых чисел, множества обозначений, множества множеств обозначений, а результатом – множество функций, аргументом каждой из которых является химическое вещество, а результатом – элемент множества, задаваемого значением аргумента метафункции.

7. $S(\text{реагенты}) = \text{свойства реакции, определяющие ее компоненты}$ ($\{(\text{химические вещества})\}$)).

Собственным свойством реакции является множество ее реагентов – химических веществ, участвующих в химической реакции. Термин *реагенты* обозначает функцию, сопоставляющую химической реакции множество его реагентов.

8. $S(\text{результаты}) = \text{собственные свойства реакций}$ ($\{(\text{химические вещества})\}$)).

Собственным свойством реакции является множество ее результатов

– химических веществ, получающихся в результате реакции. Термин *результаты* обозначает функцию, сопоставляющую химической реакции множество его результатов.

9. *Свойства участников реакции* $\circ (I (v: \{ \{ (R \hat{E} I \hat{E} N \hat{E} \} N) \} (v1: (\hat{ } \text{химические реакции, химические вещества}) p(2, v1) \hat{I} \text{реагенты}(p(1, v1)) \hat{E} \text{результаты}(p(1, v1)) \} \textcircled{R} v))$.

Свойствами участников реакции будем называть свойства веществ, участвующих в реакции; термин свойств участников реакции определяет метафункцию, аргументом которой является некоторое подмножество множества вещественных или целых чисел, множества обозначений, множества подмножеств множества обозначений, а результатом – множество функций, каждая из которых сопоставляет химической реакции и ее реагенту или результату элемент множества, задаваемого значением аргумента метафункции.

10. *Свойства реагентов реакции* $\circ (I (v: \{ \{ (R \hat{E} I \hat{E} N \hat{E} \} N) \} (v1: (\hat{ } \text{химические реакции, химические вещества}) p(2, v1) \hat{I} \text{реагенты}(p(1, v1)) \} \textcircled{R} v))$.

Термин *свойства реагентов реакции* определяет метафункцию, аргументом которой является некоторое подмножество множества вещественных или целых чисел, множества обозначений, множества подмножеств множества обозначений, а результатом – множество функций, каждая из которых сопоставляет химической реакции и ее реагенту элемент множества, задаваемого значением аргумента метафункции.

11. *С(возможные радикалы соединения) = собственные свойства веществ(\{радикалы\})*.

Термин *возможные радикалы соединения* обозначает функцию, которая сопоставляет химическому соединению множество радикалов этого соединения.

12. *Свойства радикалов соединения* $\circ (I (v: \{ \{ (R \hat{E} I \hat{E} N \hat{E} \} N) \} (v1: (\hat{ } \text{химические вещества, радикалы}) p(2, v1) \hat{I} \text{возможные радикалы соединения}(p(1, v1)) \} \textcircled{R} v))$.

Термин *свойств радикалов соединения* определяет метафункцию, аргументом которой является некоторое подмножество множества вещественных или целых чисел, множества обозначений, множества подмножеств множества обозначений, а результатом – множество функций, каждая из которых сопоставляет химическому веществу и его радикалу элемент множества, задаваемого значением аргумента метафункции.

13. *С(табличные значения температуры) = \{ \}R*.

Термин *табличные значения температуры* обозначает множество названий значений температуры, при которых задаются в знаниях значения свойств реакций и веществ.

14. *С(табличные значения давления) = \{ \}R*.

Термин *табличные значения давления* обозначает множество названий значений температуры, при которых задаются в знаниях значения свойств реакций и веществ.

15. *Зависящие от температуры и давления свойства реакций* $\circ (I (v: \{(R \hat{E} I \hat{E} N \hat{E} \} N)) ((\hat{\cdot} \text{химические реакции, табличные значения температуры, табличные значения давления}) \textcircled{R} v))$.

Зависящими от температуры и давления свойствами реакций будем называть свойства реакций, значения которых в данной работе принимаются зависящими как от температуры, так и от давления; термин *зависящие от температуры и давления свойства реакций* определяет метафункцию, аргументом которой является некоторое подмножество множества вещественных или целых чисел, множества обозначений, множества подмножеств множества обозначений, а результатом – множество функций, у каждой из которых аргументами являются химическая реакция, табличное значение температуры и табличное значение давления, а результатом – элемент множества, задаваемого значением аргумента метафункции.

16. *Реакционные центры* $\circ I[1, \text{Y})$.

Вспомогательный термин *реакционные центры* обозначает множество реакционных центров, представляемых номерами.

17. *С(возможные реакционные центры соединения) = собственные свойства веществ(\{ \} реакционные центры.)*

Термин *возможные реакционные центры соединения* обозначает функцию, которая сопоставляет химическому соединению множество возможных реакционных центров данного химического соединения.

18. *Свойства реакционных центров соединения* $\circ (I (v: \{(R \hat{E} I \hat{E} N \hat{E} \} N)) (\{(v1: (\hat{\cdot} \text{химические вещества, реакционные центры})\} p(2, v1) \hat{I} \text{возможные реакционные центры соединения}(p(1, v1))\} \textcircled{R} v))$.

Термин *свойства реакционных центров соединения* определяет метафункцию, аргументом которой является некоторое подмножество множества вещественных или целых чисел, множества обозначений, множества подмножеств множества обозначений, а результатом – множество функций, каждая из которых сопоставляет химическому веществу и его реакционному центру элемент множества, задаваемого значением аргумента метафункции.

Приведем онтологические соглашения для онтологии второго уровня.

1. $(v: \text{химические реакции}) \text{реагенты}(v) \hat{1} \text{A}$

У любой реакции есть хотя бы один реагент.

2. $(v: \text{химические реакции}) \text{результаты}(v) \hat{1} \text{A}$

У любой реакции есть хотя бы один результат.

3. $(v: \text{химические реакции}) \text{реагенты}(v) \text{C} \text{результаты}(v) = \text{A}$

Реагенты и результаты любой реакции должны быть различны.

Основные свойства реакций

Данный модуль модели онтологии представляет собой прикладную логическую теорию с именем *Основные свойства реакций*, при ее определении используются модули *Вещества* [4] и *Константы онтологии* [5]. Прикладная логическая теория записана средствами языка прикладной логики со специализированными расширениями *Математические кванторы* и *Интервалы* [2, 3]:

Основные свойства реакций (ST, Интервалы, Математические кванторы) = $\langle \{ \text{Вещества, Константы онтологии} \}, SS \rangle$, где SS – предложения, описанные ниже.

Определим вспомогательные термины данного модуля.

1. *Возможные состояния веществ* $\circ \{ \text{жидкое, растворенное, газовое, твердое} \}$.

Вспомогательный термин *возможные состояния веществ* обозначает множество возможных агрегатных состояний веществ.

2. *Термодинамический потенциал* $\circ (I (v: \text{химические реакции}) \text{ изменение энтальпии}(v) - \text{изменение энтропии}(v) * \text{абсолютная температура})$.

Термин *термодинамический потенциал* обозначает функцию, аргументом которой является химическая реакция, а результатом – численная характеристика, относящаяся к термодинамическому потенциалу этой реакции.

3. *Изменение энтропии* $\circ (I (v: \text{химические реакции}) S(\text{коэффициент}(v, \text{результаты}(v))) - S(\text{коэффициент}(v, \text{реагенты}(v))))$.

Термин *изменение энтропии* обозначает функцию, аргументом которой является химическая реакция, а результатом – разность суммы коэффициентов результатов к сумме коэффициентов реагентов этой реакции.

4. *Изменение энтальпии* $\circ (I (v: \text{химические реакции}) S(\text{теплоемкость вещества}(\text{результаты}(v))) - S(\text{теплоемкость вещества}(v, \text{реагенты}(v))))$.

Термин *изменение энтальпии* обозначает функцию, аргументом которой является химическая реакция, а результатом – разность суммы удельной теплоемкости результатов к сумме удельной теплоемкости реагентов этой реакции.

5. *Допустимая скорость реакции* $\circ R[0, \text{максимально возможная скорость реакции}]$.

Термин *допустимая скорость реакции* обозначает значение скорости реакции, которая является допустимой (скорость реакции измеряется в количестве вещества в единицу времени).

6. *Абсолютная температура* $\circ R[-270, \text{максимальное значение температуры}]$.

Термин *абсолютная температура* обозначает значение абсолютной температуры, единицей измерения температуры является К.

Определим основные термины данного модуля.

1. $c(\text{методы стимуляции реакций}) = \{N\}$.

Термин *методы стимуляции реакций* обозначает множество идентификаторов методов стимуляции реакций.

2. $c(\text{стимулятор реакции}) = \text{собственные свойства реакций}(\{\text{методы стимуляции реакций}\})$.

Собственным свойством реакции является множество стимуляторов этой реакции – средств, ускоряющих прохождение реакции или делающих возможным прохождение сложной реакции (например, катализаторы).

Термин *стимулятор реакции* обозначает функцию, которая сопоставляет реакции множество методов стимуляции этой реакции. Стимуляторов реакции может не быть, т.е. множество стимуляторов может быть пустым.

3. $c(\text{скорость реакции}) = \text{собственные свойства реакций}(R[0, \text{максимально возможная скорость реакции}])$.

Собственным свойством реакции является скорость прохождения этой реакции. Термин *скорость реакции* обозначает функцию, аргументом которой является реакция, а результатом – скорость протекания реакции (скорость реакции измеряется в количестве вещества в единицу времени).

4. $c(\text{возможность прохождения реакции}) = \text{собственные свойства реакций}(L)$.

Термин *возможность прохождения реакции* обозначает предикат, задающий условие прохождения реакции.

5. $c(\text{катализаторы}) = \text{собственные свойства реакций}(\{\text{химические вещества}\})$.

Собственным свойством реакции является свойство катализаторы.

6. ($v: \{\text{верхняя температурная реакции, нижняя температура реакции}\}$) $c(v) = \text{собственные свойства реакций}(R[0, \text{максимальная температура}])$.

Собственными свойствами реакции являются верхняя и нижняя температуры – это максимальное и минимальное значения температуры, определяющих диапазон температур, при которых реакция имеет место.

7. ($v: \{\text{верхнее давление реакции, нижнее давление реакции}\}$) $c(v) = \text{собственные свойства реакций}(R[0, \text{максимальное давление}])$.

Собственными свойствами реакции являются верхнее и нижнее давление – это максимальное и минимальное значения давления, определяющих диапазон давлений, при которых реакция имеет место.

8. $c(\text{стехиометрический коэффициент}) = \text{свойства участников реакций}(I[0, \text{граница(стехиометрический коэффициент)}])$.

Свойством 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.

9. $c(\text{мольная доля}) = \text{свойства участников реакций}(R[0, 1])$.

Свойством участника реакции является мольная доля – это отношение количества вещества участника к общему количеству вещества участников реакции, при котором реакция имеет место.

10. $c(\text{состояние участника}) = \text{свойства участников реакций}(\text{возможные состояния веществ})$.

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

11. (v : {изменение молярной энтальпии, изменение молярной энтропии, изменение молярной энергии Гиббса, k_c , k_p , электродный потенциал, вольт эквивалент}) $c(v) = \text{зависящие от температуры и давления свойства реакций}(R[- \text{граница}(v), \text{граница}(v)])$.

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 равновесным концентрациям, общепринятое химическое обозначение «КС», безразмерная величина;

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.

Теперь приведем онтологические соглашения данного модуля.

1. (v : химические реакции) (\dot{a} ($v1$: реагенты(v) \dot{E} результаты(v)) мольная доля($v1$)) $\neq 1$.

Сумма мольных долей реагентов и результатов химических реакций всегда не больше единицы.

2. (v : химические реакции) ($v1$: химические элементы) (\dot{a} ($v2$: реагенты(v)) стехиометрический коэффициент(v , $v2$) * число атомов(формула($r1$), $v1$)) = (\dot{a} ($v3$: результаты(v)) стехиометрический коэффициент(v , $v3$) * число атомов(формула($v3$), $v1$)).

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

3. (v : химические реакции) (t : табличные значения температуры) (p :

табличные значения давления) (\dot{a} ($v1$: результаты(v)) молярная энтальпия образования($v1, t, p$)) * стехиометрический коэффициент($v, v1$)) – (\dot{a} ($v2$: реагенты (v)) молярная энтальпия образования($v2, t, p$)) * стехиометрический коэффициент($v, v2$)) = изменение молярной энтальпии(v, t, p)).

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

4. (v : химические реакции) (t : табличные значения температуры) (p : табличные значения давления) (\dot{a} ($v1$: результаты(v)) молярная энтропия($v1, t, p$)) * стехиометрический коэффициент($v, v1$)) – (\dot{a} ($v2$: реагенты (v)) молярная энтропия($v2, t, p$)) * стехиометрический коэффициент($v, v2$)) = изменение молярной энтропии(v, t, p)).

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

5. (v : химические реакции) (t : табличные значения температуры) (p : табличные значения давления) изменение молярной энергии Гиббса(v, t, p) = изменение молярной энтальпии(v, t, p) – изменение молярной энтропии(v, 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.

6. (v : {($v1$: химические реакции) термодинамический потенциал($v1$)<0 & скорость реакции(v) > допустимая скорость реакции}) стимулятор реакции(v) = \mathcal{E} .

Если термодинамический потенциал меньше нуля и скорость прохождения реакции является допустимой, то у реакции нет стимуляторов.

Модуль «Реакционные центры»

При определении прикладной логической теории «Реакционные центры» используются модули *Элементный состав* [5], *Структурная формула* [6] и *Основные свойства реакций*. Прикладная логическая теория записана средствами языка прикладной логики со специализированным расширением *Интервалы* [2, 3]:

Реакционные центры (ST, Интервалы) = <({Элементный состав, Структурная формула, Основные свойства реакций}), SS>, где SS предложения, описанные ниже.

Определим вспомогательный термин данного модуля.

1. *Возможные формулы реакционных центров* \circ *возможная формула вещества*

Вспомогательный термин *возможные формулы реакционных цен-*

тров обозначает возможное представление реакционного центра в качестве компоненты формулы.

2. *Реакционные центры с максимальным приоритетом в реакции* \circ (I ($v1$: химические реакции) ($v2$: реагенты($v1$)) $\{(v3$: возможные реакционные центры соединения($v1$)) приоритет реакционного центра соединения($v1$, $v3$) = $\sup(\{(v4$: возможные реакционные центры соединения($v1$)) приоритет реакционного центра соединения($v4$) $\}$).

Вспомогательный термин *реакционные центры с максимальным приоритетом в реакции* обозначает функцию, которая сопоставляет реакции и ее реагенту множество реакционных центров этого соединения, имеющих наивысший приоритет.

Определим основные термины данного модуля.

1. \hat{C} (*приоритет реакционного центра соединения*) = свойства реакционных центров соединения($R[0, 1]$).

Термин *приоритет реакционного центра соединения* обозначает функцию, которая сопоставляет химическому соединению и реакционному центру этого соединения числовое значение приоритета этого реакционного центра.

2. \hat{C} (*реакционный центр*) = свойства реагентов реакции(*реакционные центры*)

Термин *реакционный центр* обозначает функцию, которая сопоставляет реакции и химическому соединению, являющемуся реагентом в этой реакции реакционный центр этого соединения, который вступает во взаимодействие в данной реакции.

Теперь приведем онтологическое соглашение данного модуля.

(v : химические реакции) ($v1$: реагенты(v)) *реакционный центр*(v , $v1$) \hat{I} *реакционные центры с максимальным приоритетом в реакции*(v , $v1$).

Во взаимодействие при химической реакции всегда вступает реакционный центр с наивысшим приоритетом.

Модуль «Радикалы»

При определении прикладной логической теории «Радикалы» используются модули *Структурная формула соединения* [5] и *Основные свойства реакций*; а при построении прикладной логической теории – стандартное расширение языка прикладной логики:

Радикалы(ST) = $\langle \{$ Структурная формула соединения, Реакции $\}, SS \rangle$, где SS предложения, описанные ниже.

Определим вспомогательный термин данного модуля.

Возможные формулы радикалов \circ *возможная формула вещества*.

Вспомогательный термин *возможные формулы радикалов* обозначает возможное представление радикала в качестве компоненты формулы.

Определим основные термины данного модуля.

1. *с(реакционный центр радикала) = собственные свойства радикалов(реакционные центры).*

Термин *реакционные центры радикала* обозначает функцию, которая сопоставляет радикалу единственный реакционный центр, имеющийся у данного радикала.

2. *с(формула радикала) = собственные свойства радикалов(возможные формулы радикалов).*

Термин *формула радикала* обозначает функцию, аргументом которой является радикал, а результатом – формула этого радикала.

3. *с(структурная формула радикала) = собственные свойства радикалов(возможная структурная формула).*

Термин *структурная формула радикала* обозначает функцию, аргументом которой является радикал, а результатом – структурная формула этого радикала.

4. *с(радикалы соединения в реакции) = свойства реагентов ({}радикалы).*

Термин *радикалы соединения в реакции* обозначает функцию, которая сопоставляет реакции и ее реагенту множество радикалов. Множество радикалов может быть пустым.

Теперь приведем онтологические соглашения данного модуля.

1. *(v1: химические реакции) (v2: реагенты(v1)) (v3: {(v3': возможные радикалы соединения(v2)) принадлежит соединению(формула(v2), формула радикала(v3'))}) (U (v4: результаты(v1)) принадлежит соединению(формула(v4), формула радикала(v3)).*

Если в формуле некоторого реагента химической реакции выделен радикал, то такой же радикал будет присутствовать в формуле одного из результатов этой реакции.

2. *(v: химические реакции) {(v1: реагенты(v)) возможные радикалы соединения(v1)} = E P {(v1: результаты(v)) возможные радикалы соединения(v1)} = E.*

Если в формулах всех реагентов реакции не выделены радикалы, то и в формулах результатов реакции радикалы не выделены.

3. *(v: химические реакции) (v1: реагенты(v)) радикалы соединения в реакции(v, v1) I возможные радикалы соединения(v1).*

Множество радикалов соединений в реакции есть подмножество радикалов этого соединения.

4. *(v: простые вещества) III(возможные радикалы соединения(v1)) = 0.*

У простых веществ не может быть радикалов.

Заключение

В работе приведен фрагмент определения метаонтологии химии, в котором заданы метатермины, используемые при построении модулей мо-

дели онтологии химии, содержащих определение системы понятий для описания свойств реакций, реакционных центров и радикалов. Каждый метатермин фиксирует схему определения множества терминов онтологии. Каждый метатермин представляет собой метафункцию. Определение термина онтологии представляет собой применение этой метафункции к некоторому значению ее аргумента. Аргумент метафункции в приведенном фрагменте задает область значения конкретного свойства реакции, ее реагента либо результата и т.д.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Артемяева И.Л., Рештаненко Н.В.* Специализированный компьютерный банк знаний предметной области "Химия" // Искусственный интеллект, 2004. – Т. 1. – С. 235-244.
2. *Клещев А.С., Артемяева И.Л.* Необогатенные системы логических соотношений. Ч. 2. // Научно-техническая информация. Сер. 2. – 2000. – №8. – С. 8-18.
3. *Клещев А.С., Артемяева И.Л.* Необогатенные системы логических соотношений. Ч. 1. // Научно-техническая информация. Сер. 2. – 2000. – №7. – С. 18-28.
4. *Артемяева И.Л., Цветников В.А., Реутов В.А.* Иерархическая модель онтологии физической химии. Ч. 2. Модели систем понятий "Вещества" и "Реакции". – Владивосток: ИАПУ ДВО РАН, 2001. <http://www.iacp.dvo.ru/es/>.
5. *Артемяева И.Л., Высоцкий В.И., Рештаненко Н.В.* Модель онтологии предметной области (на примере органической химии) // Научно-техническая информация. Сер. 2. – 2005. – №8. – С. 19-27.
6. *Артемяева И.Л., Высоцкий В.И., Рештаненко Н.В.* Модель онтологии предметной области «Органическая химия». Органические соединения: структурная формула, классификация по расположению атомов углерода, типы связи между химическими элементами, пространственное расположение, изомерия. – Владивосток: ИАПУ ДВО РАН, 2001. <http://www.iacp.dvo.ru/es/>.

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