



УДК: 519.68:15:54

© 2007 г. **И.Л. Артемьева**, канд. техн. наук,
В.И. Высоцкий, д-р хим. наук,
Н.В. Рештаненко

(Институт автоматизации и процессов управления ДВО РАН, Владивосток)

ОПИСАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАСПОЛОЖЕНИЯ АТОМОВ, ИОННОГО И ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ СОЕДИНЕНИЙ В МОДЕЛИ ОНТОЛОГИИ ХИМИИ¹

В работе приведены модули модели онтологии химии, в которых описаны понятия, используемые при описании пространственного расположения атомов в молекулах соединений, ионного и электронного строения соединений. Эти свойства должны быть представлены в базах знаний интеллектуальных систем по химии.

Введение

При исследовании свойств химических соединений важными их свойствами являются пространственное расположение атомов в молекулах соединений, ионное и электронное строение соединений. Эти свойства должны быть представлены в базах знаний интеллектуальных систем по химии. Целью данной работы является определение фрагмента онтологии химии, в котором описана система понятий, используемая для задания знаний об указанных свойствах соединений.

При построении данного фрагмента онтологии и построении модели использовались источники [1 – 9]. Модель онтологии построена в классе небогатых систем логических соотношений с параметрами [10].

Модуль Пространственное расположение

В модуле *Пространственное расположение* определяются термины, при помощи которых описывается пространственное расположение атомов элементов в молекулах органических соединений.

Связи между терминами модуля приведены на рис. 1. На рис. 2 при-

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке ДВО РАН, проект 06-П-СО-01-003 "Разработка интеллектуальных информационных технологий генерации и анализа знаний для поддержки фундаментальных научных исследований в области естественных наук".

введены обозначения, используемые на рис. 1 и всех следующих рисунках.

Данный модуль модели онтологии представляет собой прикладную логическую теорию с именем *Пространственное расположение*, при ее определении используется модуль *Тип гибридизации* [11]; при построении прикладной логической теории используются стандартное расширение языка прикладной логики, а также специализированные расширения с названиями *Математические кванторы* и *Интервалы* [10].

Пространственное расположение(*ST*, *Математические кванторы*, *Интервалы*) = $\langle (\{ \text{Тип гибридизации} \}), SS \rangle$, где *SS* предложения, описанные ниже.

Определим вспомогательные термины данного модуля.

1. *свойства двух элементов* \circ *совместные свойства сущностей* (*химические элементы*, *химические элементы*).

Термин *свойства двух элементов* обозначает функцию, аргументом которой является некоторое подмножество множества вещественных или целых чисел, множества обозначений, или множества множеств обозначений, а результатом – множество функций, аргументами каждой из которых являются два химических элемента, а результатом – элемент множества, задаваемого значением аргумента функции *свойства двух элементов*. Данный термин является термином онтологии второго уровня [12], он определен с использованием термина *совместные свойства сущностей* онтологии третьего уровня.

2. *форма гибридного облака* \circ (*I* (v : *возможный тип гибридизации*) / (v = *sp-гибридизация* *P* *линейная*), (v = *sp2-гибридизация* *P* *треугольная*, (v = *sp3-гибридизация* *P* *тетраэдрическая*)/).

Вспомогательный термин *форма гибридного облака* обозначает функцию, которая сопоставляет типу гибридизации форму гибридного электронного облака при данном типе гибридизации.

3. *форма электронного облака* \circ (*I* (v : {*s-электроны*, *p-электроны*, *d-электроны*}) / (v = *s-электроны* *P* *шар*), (v = *p-электроны* *P* *восьмерка*), (v = *d-электроны* *P* *четырёхлистный клевер*)/).

Вспомогательный термин *форма электронного облака* обозначает функцию, которая сопоставляет виду электрона форму его электронных облаков.

Определим основные термины данного модуля.

1. *с(угол связей в соединении)* = *свойства сущности, зависящие от значений ее свойств*(*вещество* \circledast *химические вещества*, *кортеж значений* \circledast (\sim $I[1, \text{length}(\text{структурная формула соединения}(\text{вещество}))]$, $I[1, \text{length}(\text{структурная формула соединения}(\text{вещество}))]$, $I[1, \text{length}(\text{структурная формула соединения}(\text{вещество}))]$)) ($R[0, 360]$).

Термин *угол связей в соединении* обозначает функцию, которая сопоставляет структурной формуле и номерам трех химических элементов в

этой структурной формуле, один из которых связан с двумя другими, угол между связями этих двух элементов в структурной формуле этого соединения.

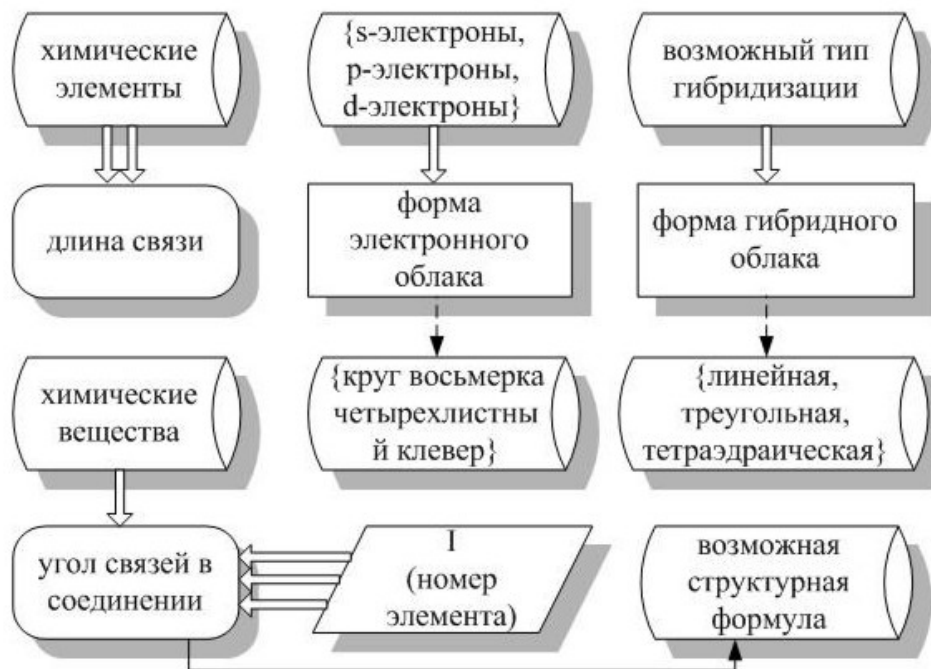


Рис. 1. Термины модуля «Пространственное расположение».

2. $s(\text{длина связи}) = \text{свойства двух элементов}(R[0, \mathbb{Y}])$.

Термин *длина связи* обозначает функцию, которая сопоставляет двум химическим элементам длину связи между атомами этих химических элементов, т.е. расстояние от центра атома одного элемента до центра атома другого элемента.

Теперь приведем онтологическое соглашение данного модуля:

$(v: \text{органические соединения}) (i: \{(i1: I[1, \text{length}(\text{структурная формула соединения}(v))]) \text{ компонента структурной формулы}(\text{структурная формула соединения}(v), i1) \hat{I} \{C, N, S, P, O\}\}) (j: \{(j1: I[1, \text{length}(\text{структурная формула соединения}(v))]) j1 \neq i \ \& \ j \hat{I} p(2, \text{связи элемента в компоненте структурной формулы}(\text{структурная формула соединения}(v), i))\}) (k: \{(k1: I[1, \text{length}(\text{структурная формула соединения}(v))]) j1 \neq k \ \& \ k \neq i \ \& \ k \hat{I} p(2, \text{связи элемента в компоненте структурной формулы}(\text{структурная формула соединения}(v), i))\}) \text{ угол связей в соединении}(\text{структурная формула соединения}(v), i, j, k) - \text{валентный угол связей для типа гибридизации}(\text{тип гибридизации атомов в соединении}(\text{структурная формула соединения}(v), i)) \hat{I} [-24, 24]$

Угол связи между атомами, связанными с атомом химического элемента, способного вступать в гибридизацию, равен валентному углу типа гибридизации этого атома с учетом погрешности на 24 градуса.

- a \longrightarrow b – a является аргументом функции, обозначенной b
- a \dashrightarrow b – элемент множества b является результатом функции, обозначенной a
- a \rightarrow b – при вычислении значения функции, обозначенной a, используется термин, обозначенный b
- a \dashrightarrow b – множество b является декартовым произведением множеств, перечисленных в a
- a \dashrightarrow b – b является подмножеством множества, обозначенного a



Рис. 2. Обозначения.

Модуль *Ионы*

В модуле *Ионы* определяются термины, используемые при описании свойств ионов.

Связи между терминами модуля приведены на рис. 3.

Данный модуль модели онтологии представляет собой прикладную логическую теорию с именем *Ионы*, при ее определении используются модули *Структурная формула соединения* [11] и *Константы онтологии* [13]; при построении прикладной логической теории используются стандартное расширение языка прикладной логики, а также специализированное расширение с названием *Интервалы* [10].

$Ионы(ST, Интервалы) = \langle \{Структурная формула соединения, Константы онтологии\}, SS \rangle$, где *SS* – предложения, описанные ниже.

Определим вспомогательные термины данного модуля.

1. *ион* $^{\circ}$ ($\hat{\cdot}$ возможная формула вещества, заряд иона).
Термин *ион* обозначает множество пар. Первым элементом пары является формула иона, а вторым – заряд иона.
2. *заряд иона* $^{\circ} I[-7,0) \hat{\cup} I(0,7]$.
Термин *заряд иона* обозначает диапазон возможных значений заряда иона.
3. *простые ионы* $^{\circ} \{(v: ион) length(p(I, v)) = 1 \ \& \ p(I, v) \hat{\in} \hat{I} \text{ химические элементы}\}$.
Термин *простые ионы* обозначает множество ионов, состоящих из одного химического элемента.

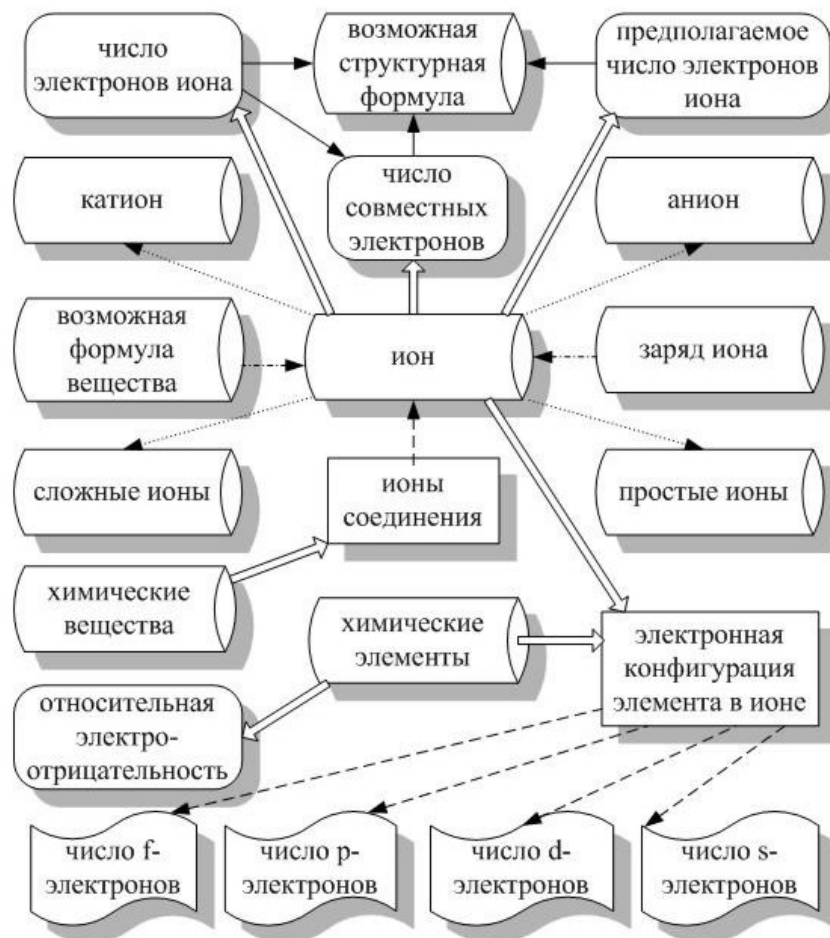


Рис. 3. Термины модуля «Ионы».

4. *сложные ионы* \circ *ион* \ *простые ионы*.
Термин *сложные ионы* обозначает множество ионов, состоящих более чем из одного химического элемента.
5. *катион* \circ $\{(v: \text{ион}) p(2, v) > 0\}$.
Термин *катион* обозначает множество ионов, имеющих положительный заряд.
6. *анион* \circ $\{(v: \text{ион}) p(2, v) < 0\}$.
Термин *анион* обозначает множество ионов, имеющих отрицательный заряд.
7. *предполагаемое число электронов иона* \circ $(I(v: \text{ион}) (\hat{a}(i: I[1, \text{length}(\text{структурная формула}(p(1, v)))] \text{число электронов элемента}(\text{компонента структурной формулы}(\text{структурная формула}(p(1, v)), i))))$.
Вспомогательный термин *предполагаемое число электронов иона* обозначает функцию, сопоставляющую иону сумму числа электронов всех химических элементов, входящих в его состав.

8. *число электронов иона* $\circ (I(v: \text{ион}) (\hat{a} (i: I[1, \text{length}(\text{структурная формула}(p(I, v)))] (\hat{a} (j: I[1, 4]) p(j, \text{электронная конфигурация элемента в ионе}(v, \text{компонента структурной формулы}(\text{структурная формула}(p(I, v)), i)))))) - \text{число совместных электронов}(v))$.

Вспомогательный термин *число электронов иона* обозначает функцию, которая сопоставляет иону число электронов всех химических элементов, входящих в его состав, с учетом электронной конфигурации, равное сумме электронов в электронной конфигурации всех химических элементов, входящих в состав иона без повторного учета совместных электронных пар.

9. *число совместных электронов* $\circ (I(v: \text{ион}) (/ (v \hat{I} \text{ сложные ионы } P (\hat{a}(i: I[1, \text{length}(\text{структурная формула}(p(I, v)))])) \text{ валентность элемента} (\text{структурная формула}(p(I, v)), i)), (v \hat{I} \text{ простые ионы } P 0) /)$.

Вспомогательный термин *число совместных электронов* обозначает функцию, которая сопоставляет иону удвоенное число связей внутри иона.

10. *собственные свойства элементов* $\circ \text{ собственные свойства сущностей}(\text{химические элементы})$. Термин *собственные свойства элементов* обозначает функцию (термин онтологии второго уровня), аргументом которой является некоторое подмножество множества вещественных или целых чисел, множества обозначений, или множества множеств обозначений, а результатом – множество функций, аргументом каждой из которых является химический элемент, а результатом – элемент множества, задаваемого значением аргумента функции *собственные свойства элементов*.

11. *свойства элементов в ионе* $\circ (I(v: \{\} (R \hat{E} I \hat{E} N \hat{E} \{\} N)) (\{(vI: (\hat{ } \text{ ионы, химические элементы}) p(2, vI) \hat{I} \text{ элементы иона}(p(I, vI))\} \text{ @ } v))$.

Термин *свойства элементов в ионе* определяет функцию (термин онтологии второго уровня), аргументом которой является некоторое подмножество множества вещественных или целых чисел, множества обозначений, множества подмножеств множества обозначений, а результатом – множество функций, каждая из которых сопоставляет иону и химическому элементу, входящему в ион, элемент множества, задаваемого значением аргумента функции *свойства элементов в ионе*.

Определим основные термины данного модуля.

1. *с(ионы соединения) = собственные свойства веществ* ($\{\}$ ион). Термин *ионы соединения* обозначает функцию, которая сопоставляет химическому соединению множество ионов этого химического соединения.
2. *с(относительная электроотрицательность) = собственные свойства элементов* ($R[0, \text{максимальное значение электроотрицательности}]$). Термин *относительная электроотрицательность* обозначает функ-

цию, аргументом которой является химический элемент, а результатом – число, обозначающее относительную электроотрицательность данного химического элемента.

3. *с(электронная конфигурация элемента в ионе) = свойства элементов в ионе* ($\{ \hat{\cdot}$ число *s*-электронов, число *p*-электронов, число *d*-электронов, число *f*-электронов).

Термин электронная конфигурация иона обозначает функцию, которая сопоставляет иону и химическому элементу, входящему в его состав, электронную конфигурацию этого элемента в ионе.

Теперь приведем онтологические соглашения данного модуля.

1. *(v: химические вещества) $\mathfrak{M}\{(v2: \text{ионы соединения}(v)) \vee 2 \hat{I} \text{ катион}\} = \mathfrak{M}\{(v4: \text{ионы соединения}(v)) \vee 4 \hat{I} \text{ анион}\}$.*

В соединении число различных отрицательно заряженных и положительно заряженных ионов одинаково.

2. *(v: химические вещества) $(\hat{a}(v1: \{(v2: \text{ионы соединения}(v)) \vee 2 \hat{I} \text{ катион}\}) \text{ индекс}(p(1, v1)) * p(2, v1))) + (\hat{a}(v3: \{(v4: \text{ионы соединения}(v)) \vee 4 \hat{I} \text{ анион}\}) \text{ индекс}(p(1, v3)) * p(2, v3))) = 0$.*

Заряды отрицательно и положительно заряженных ионов компенсируют друг друга в молекуле, т.е. молекула нейтральна.

3. *(v: химические вещества) (v1: $\{(v2: \text{химические элементы}) \text{ принадлежит соединению(формула}(v), v2)\}$) (v3: $\{(v4: \text{химические элементы}) \text{ принадлежит соединению(формула}(v), v4)\}$) $\text{sup(относительная электроотрицательность}(v1), \text{ относительная электроотрицательность}(v3)) - \text{inf(относительная электроотрицательность}(v1), \text{ относительная электроотрицательность}(v3)) > 1 \hat{P}$ ионы соединения}(v) $^1 \hat{E}$.*

Ионы есть только у тех соединений, которые содержат химические элементы, резко различающиеся по полярности.

4. *(v: химические вещества) (v1: ионы соединения}(v)) $p(2, v1) = \text{предполагаемое число электронов иона}(v1) - \text{число электронов иона}(v1)$.*

Заряд иона равен числу электронов, присоединённых или отданных этим ионом.

5. *(v: органические соединения) (v1: ионы соединения}(v)) $(\hat{U}(v2: \text{функциональные группы соединения}(v)) \text{ формула функциональной группы}(v2) = p(1, v1))$.*

Ионы, входящие в состав органического соединения, являются функциональными группами этого соединения.

Модуль Электронная конфигурация соединения

Модуль Электронная конфигурация соединения определяет понятия, используемые при описании электронной конфигурации органических соединений.

Связи между терминами приведены на рис. 4.

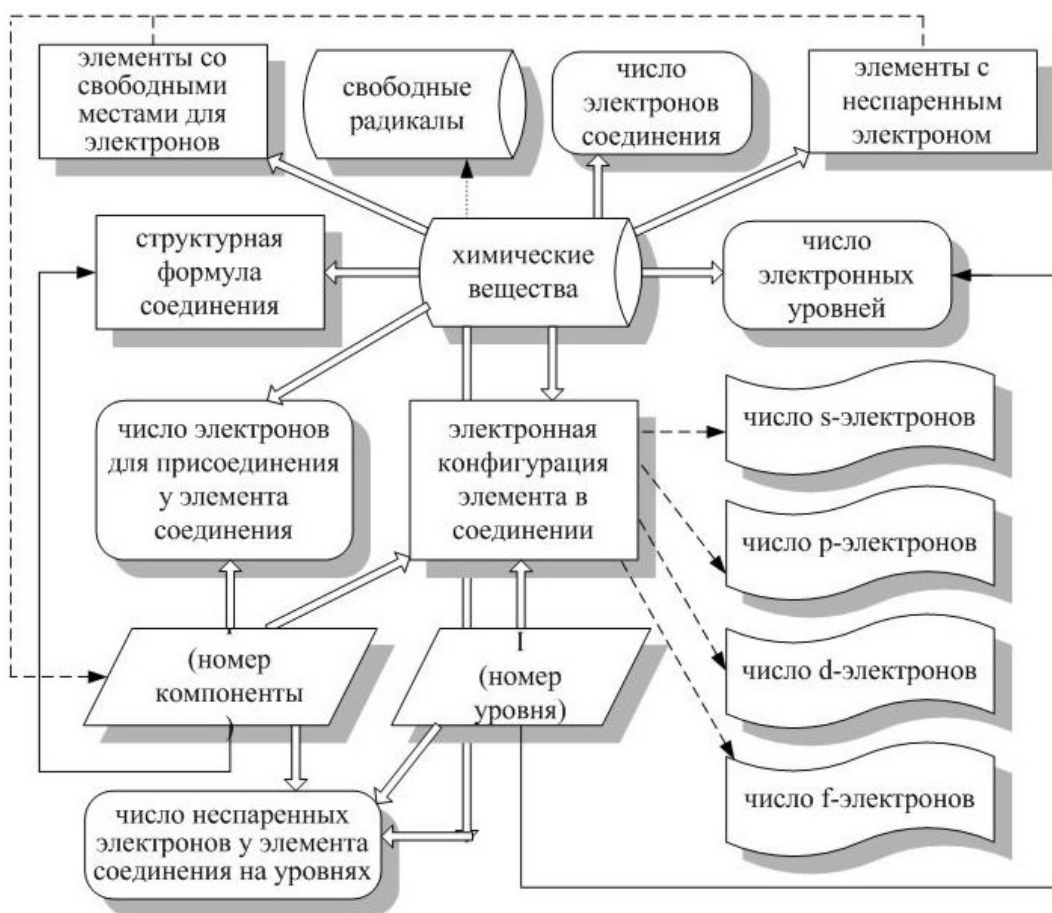


Рис. 4. Термины модуля «Электронная конфигурация соединения».

Данный модуль модели онтологии представляет собой прикладную логическую теорию с именем *Электронная конфигурация соединения*, при ее определении используется модуль *Структурная формула соединения* [11]; при построении прикладной логической теории используются стандартное расширение языка прикладной логики.

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

Определим вспомогательные термины данного модуля.

1. *число неспаренных электронов у элемента соединения* $^{\circ} (I(\{v: (\text{химические соединения}, I[1, \text{¥}]) p(2, v) \text{ length}(\text{структурная формула соединения}(p(1, v)))\} \text{ число неспаренных электронов у элемента соединения на уровнях}(p(1, v), p(2, v), \text{ число электронных уровней}(\text{компонента структурной формулы}(\text{структурная формула соединения}(p(1, v)), p(2, v))) + \text{ число неспаренных электронов у элемента соединения на уровнях}(p(1, v), p(2, v), \text{ число электронных уровней}(\text{компонента структурной формулы}(\text{структурная формула соеди-$

нения($p(1, v), p(2, v) - 1$)).

Вспомогательный термин *число неспаренных электронов у элемента соединения* обозначает функцию, которая сопоставляет химическому соединению и номеру химического элемента в структурной формуле этого соединения число, равное сумме неспаренных электронов на последнем и предпоследнем энергетических уровнях этого химического элемента.

2. *число электронов соединения* $^{\circ}(I(v: \text{химические соединения}) (\dot{a} (i: I[1, \text{length}(\text{структурная формула соединения}(v))]) \text{ число электронов элемента}(\text{компонента структурной формулы}(\text{структурная формула соединения}(v), i))))$.

Вспомогательный термин *число электронов соединения* обозначает функцию, которая сопоставляет химическому соединению число электронов этого соединения, равное сумме чисел электронов всех химических элементов, составляющих соединение.

3. *свойства энергетических уровней элемента соединения* $^{\circ}(I(\text{Область возможных значений: } \{\}(\text{Множества значений } \dot{E} \{\})\text{Кортежи значений})) ((\text{Вещество } \textcircled{R} \text{Химические вещества, Номер компоненты } \textcircled{R} I[1, \text{length}(\text{структурная формула соединения}(\text{Вещество}))], \text{Номер энергетического уровня } \textcircled{R} I[1, \text{число электронных уровней}(\text{компонента структурной формулы}(\text{структурная формула соединения}(\text{Вещество}), \text{Номер компоненты})) \textcircled{R} \text{Область возможных значений}))$.

Термин *свойства энергетических уровней элемента соединения* (термин онтологии второго уровня) обозначает функцию, аргументом которой является множество значений или кортежей значений m , а результатом – множество функций, аргументами каждой из которых являются химическое вещество, номер его элемента и номер энергетического уровня этого элемента, а результатом – элемент множества m .

Определим основные термины данного модуля.

1. *s(электронная конфигурация элемента в соединении) = свойства энергетических уровней элемента соединения* ($\dot{\prime}$ число s-электронов, число p-электронов, число d-электронов, число f-электронов)).

Термин *электронная конфигурация элемента в соединении* обозначает функцию, аргументами которой являются химическое соединение, номер химического элемента в структурной формуле этого соединения и номер электронного уровня этого химического элемента, а результатом – число s-электронов, число p-электронов, число d-электронов, число f-электронов на данном электронном уровне данного химического элемента.

2. *s(число неспаренных электронов у элемента соединения на уровнях) = свойства энергетических уровней элемента соединения* ($I[0, 18]$).

Термин *число неспаренных электронов у элемента соединения на уров-*

нях обозначает функцию, аргументами которой являются химическое соединение, номер химического элемента в структурной формуле этого соединения и номер энергетического уровня этого химического элемента, а результатом – число неспаренных электронов данного химического элемента в заданном соединении.

3. $s(\text{элементы с неспаренным электроном}) = \text{собственные свойства веществ}(\{I[1, \text{Y}])$.

Термин *элементы с неспаренным электроном* обозначает функцию, которая сопоставляет химическому соединению множество номеров химических элементов в структурной формуле заданного химического соединения, имеющих неспаренный электрон.

4. $s(\text{элементы со свободными местами для электронов}) = \text{собственные свойства веществ}(\{I[1, \text{Y}])$.

Термин *элементы со свободными местами для электронов* обозначает функцию, которая сопоставляет химическому соединению множество номеров химических элементов в структурной формуле заданного химического соединения, имеющих свободные места для электронов.

5. $s(\text{свободные радикалы}) = \{ \}$ химические вещества.

Термин *свободные радикалы* обозначает подмножество химических веществ.

Теперь приведем онтологическое соглашение данного модуля.

1. $(v: \text{химические соединения}) (i: I[1, \text{length}(\text{структурная формула соединения}(v))]) (j: I[1, \text{число электронных уровней}(\text{компонента структурной формулы}(\text{структурная формула соединения}(v), i)) - 2]) \text{электронная конфигурация элемента в соединении}(v, i, j) \hat{I} \text{электронная конфигурация уровня} (\text{электронная конфигурация элемента}(\text{компонента структурной формулы}(\text{структурная формула соединения}(v), i)), j)$.

Электронная конфигурация элемента в соединении на всех уровнях, кроме последнего и предпоследнего такая же, как и электронная конфигурация элемента вне соединения.

2. $(v: \text{химические соединения}) (i: I[1, \text{length}(\text{структурная формула соединения}(v))]) (\text{let}(\text{последний уровень} = \text{число электронных уровней}(\text{компонента структурной формулы}(\text{структурная формула соединения}(v), i))) \text{электронная конфигурация элемента в соединении}(v, i, \text{последний уровень}) \hat{I} \text{электронная конфигурация уровня} (\text{электронная конфигурация элемента}(\text{компонента структурной формулы}(\text{структурная формула соединения}(v), i)), \text{последний уровень}))$.

Электронная конфигурация элемента в соединении на последнем уровне отличается от электронной конфигурации элемента вне соединения.

3. $(v: \text{химические соединения}) (i: I[1, \text{length}(\text{структурная формула соединения}(v))]) (\text{let}(\text{предпоследний уровень} = \text{число электронных уровней}(\text{компонента структурной формулы}(\text{структурная формула соеди-$

нения(v, i)) - 1) число неспаренных электронов на уровнях(компонента структурной формулы(структурная формула соединения(v, i), предпоследний уровень)) – число неспаренных электронов у элемента соединения на уровнях(v, i , предпоследний уровень) > 0 \hat{P} электронная конфигурация элемента в соединении(v, i , предпоследний уровень) \hat{I} электронная конфигурация уровня(электронная конфигурация элемента(компонента структурной формулы(структурная формула соединения(v, i)), предпоследний уровень)).

Если число неспаренных электронов на предпоследнем уровне у элемента соединения отличается от числа неспаренных электронов на предпоследнем уровне элемента вне соединения, то электронная конфигурация на предпоследнем уровне химического элемента в соединении отличается от электронной конфигурации на предпоследнем уровне химического элемента вне этого соединения.

4. (v : свободные радикалы) число неспаренных электронов у элемента соединения(v, vI) > 0 .

Свободными радикалами называются химические соединения, имеющие неспаренный электрон.

5. (v : химические вещества) (i : $[1, \text{length}(\text{структурная формула соединения}(v))]$) число неспаренных электронов у элемента соединения(v, i) > 0 \hat{P} $i \hat{I}$ элементы с неспаренным электроном(v).

К элементам соединения с неспаренным электроном относятся все химические элементы соединения, имеющие хотя бы один неспаренный электрон.

6. (v : химические вещества) число электронов соединения(v)/ $2 \cdot 2^{-1}$ число электронов соединения(v) \hat{P} $v \hat{I}$ свободные радикалы.

Если у соединения нечетное число электронов, то это соединение является свободным радикалом.

Заключение

В работе были рассмотрены четыре модуля онтологии и модели онтологии предметной области *Химия*. Модули определяют термины, используемые при описании пространственного расположения атомов молекулы соединения, а также ионного и электронного представления химических соединений.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ахметов Н.С. Общая и неорганическая химия. – М.: Высшая школа, 1998.
2. Зайцев О.С. Общая химия. Состояния веществ и химические реакции. – М.: Химия, 1990.
3. Кнунянц И.Л. Химическая энциклопедия: в 5 т. – М.: Большая Российская энциклопедия, 1992.
4. Потапов В.М., Хомченко Г.Н. Химия. – М.: Высшая школа, 1982.



5. Березин Б.Д., Березин Д.Б. Курс современной органической химии. – М.: Высшая школа, 1999.
6. Нейланд О. Я. Органическая химия. – М.: Высшая школа, 1990.
7. Шабаров Ю.С. Органическая химия. – Т. 1. Нециклические соединения. – М.: Химия, 1996.
8. Шабаров Ю.С. Органическая химия. – Т. 2. Циклические соединения. – М.: Химия, 1996.
9. Бусев А.И., Ефимов И.П. Определения, понятия, термины в химии. – М.: Просвещение, 1981.
10. Клещев А.С., Артемьева И.Л. Необогатенные системы логических соотношений: в 2 частях // НТИ. Сер. 2. – 2000. – № 7-8.
11. Артемьева И.Л., Высоцкий В.И., Рештаненко Н.В. Описание структурного строения органических соединений в модели онтологии органической химии // НТИ. Сер. 2. – 2006. – № 2. – С. 11-19.
12. Артемьева И.Л., Высоцкий В.И., Рештаненко Н.В. Модульная модель онтологии органической химии. Свойства органических соединений // Информатика и системы управления. – 2006. – № 1. – С.121-132.
13. Артемьева И.Л., Высоцкий В.И., Рештаненко Н.В. Модель онтологии предметной области (на примере органической химии) // НТИ. Сер. 2. – 2005. – № 8. – С. 19-27.

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

УДК: 519.68:15:54

© 2007 г. **И.Л. Артемьева**, канд. техн. наук,
В.И. Высоцкий, д-р хим. наук,
Н.В. Рештаненко

(Институт автоматизации и процессов управления ДВО РАН, Владивосток)

ОПИСАНИЕ МЕХАНИЗМОВ РЕАКЦИЙ В МОДЕЛИ ОНТОЛОГИИ ХИМИИ¹

В работе приведен модуль модели онтологии химии, в котором описана система понятий, предназначенная для определения механизмов реакций. Эта система понятий используется в интеллектуальной системе по химии при задании знаний.

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке ДВО РАН, проект 06-П-СО-01-003 "Разработка интеллектуальных информационных технологий генерации и анализа знаний для поддержки фундаментальных научных исследований в области естественных наук".