



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".

Введение

При исследовании свойств химических процессов на компьютере должны учитываться различные условия, которые влияют на прохождение этих процессов, а также способ прохождения реакций на каждом шаге этого процесса. Способ прохождения реакции называется механизмом реакции. Механизм реакции описывает стадии прохождения реакции и представляется последовательностью веществ. Знания предметной области содержат описания свойств механизмов различных реакций. Целью данной работы является определение фрагмента онтологии химии, в котором описана система понятий, используемая для задания знаний о механизмах реакций.

При определении фрагмента онтологии используется система понятий, предназначенная для задания свойств реакций [1]. При построении данного фрагмента онтологии и построении модели использовались источники [2 – 10]. Модель онтологии построена в классе небогатых систем логических соотношений с параметрами [11].

Термины онтологии для описания механизмов реакции

Существуют три различных уровня представления механизмов реакций:

когда рассматриваются ионы и свободные радикалы соединений, участвующих в реакциях;

когда рассматриваются химические элементы, входящие в состав соединений, участвующих в реакциях, и связи между ними;

когда рассматривается электронное взаимодействие атомов химических элементов в молекуле соединения, участвующего в реакции.

Механизм реакции описывает стадии прохождения реакции и представляется последовательностью химических веществ. Вещества на каждом следующем шаге могут не быть различными, но отличаются (для каждого уровня):

хотя бы одним ионом, входящим в состав соединения;

расположением молекулы в пространстве и длиной хотя бы одной связи;

электронной конфигурацией хотя бы одного атома химического элемента, входящего в состав молекулы соединения.

При этом химические вещества на первом шаге – это реагенты реакции, а на последнем – ее результаты.

При описании механизмов реакций используется термин *возможные типы механизмов реакций*, который обозначает множество представлений всех возможных механизмов реакций, а также термин *механизм*, который обозначает механизм реакции, реализующийся в ходе химического процесса. Термин *механизм реакции* обозначает функцию, которая сопостав-

ляет реакции стадии ее прохождения.

Для каждой реакции может существовать множество стимуляторов, причем элементы этого множества могут рассматриваться стимуляторами для стадий реакции.

Термин *дополнительное воздействие* обозначает функцию, которая сопоставляет множество методов стимуляции реакции на каждой стадии.

Три основных типа механизма реакции имеют названия: ионный, радикальный и перициклический. Термины *возможные типы механизмов реакций* и *тип механизма* используются для определения типа механизма реакции.

Связи между терминами приведены на рис. 1. Обозначения к рис. 1 даны на рис. 2.

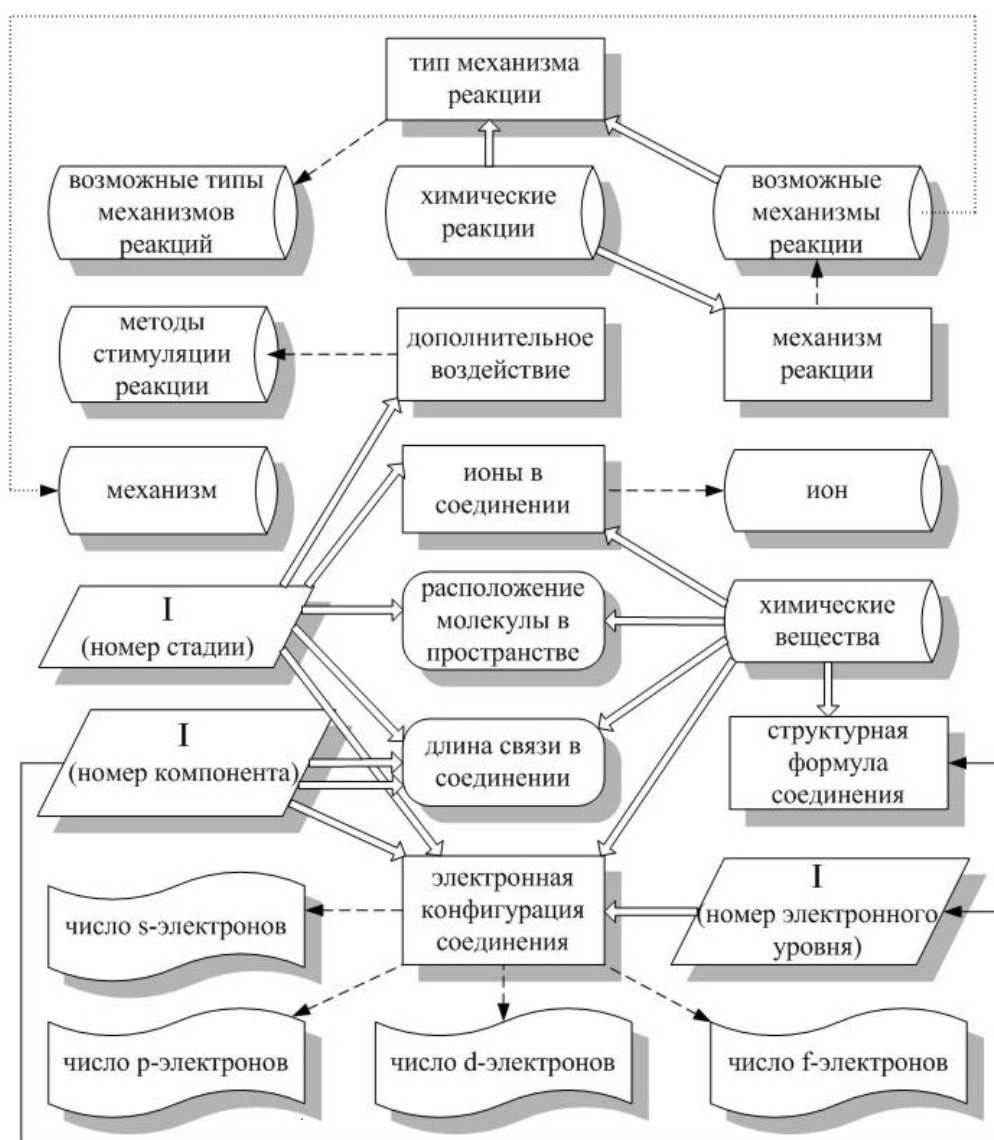


Рис. 1. Термины модуля Механизмы реакции.



Рис. 2. Обозначения.

Модель онтологии. Основные термины

Для описания механизмов определим модуль модели онтологии с именем *Механизмы реакции* как одноименную прикладную логическую теорию. При построении этой теории используется модуль *Основные свойства реакций* [1], а также модули *Пространственное расположение*, *Ионы*, *Электронная конфигурация соединений*. Модель представлена средствами языка прикладной логики [11]. Используется стандартное расширение этого языка.

Механизмы реакции (ST) = $\langle (\{\text{Основные свойства реакций, Пространственное расположение, Ионы, Электронная конфигурация соединений}\}), SS \rangle$, где SS – предложения, описанные ниже.

Определим вспомогательные термины данного модуля.

1. *возможные типы механизмов реакций* $\circ \{\text{радикальный, ионный, перicyклический}\}$.

Вспомогательный термин *возможные типы механизмов реакций* обозначает множество идентификаторов возможных типов механизмов реакций.

2. *возможные механизмы реакции* $\circ (\vec{E} (n: I[2, \mathbb{Y}]) (\{\text{химические вещества}\}) \vec{Y}n)$.

Вспомогательный термин *возможные типы механизмов реакций* обозначает множество представлений всех возможных механизмов реакций; механизм реакции представляет собой последовательность (имеющую длину, не меньшую 2) множеств химических веществ. На каждой стадии реакции множество веществ этой стадии отличается от

множеств веществ предыдущей стадии расположением молекул и длинной связи хотя бы одного химического элемента хотя бы одного химического вещества.

Определим основные термины данного модуля.

1. $s(\text{механизм реакции}) = \text{собственные свойства реакций (возможные механизмы реакции)}$.

Термин *механизм реакции* обозначает функцию, которая сопоставляет реакции ее механизм.

2. $s(\text{тип механизма реакции}) = ((\text{химические реакции, возможные механизмы реакции}) \textcircled{R} \text{ возможные типы механизмов реакций})$.

Термин *тип механизма реакции* обозначает функцию, которая сопоставляет реакции и механизму этой реакции тип этого механизма.

3. $s(\text{механизм}) = \text{возможные механизмы реакции}$.

Термин *механизм* обозначает механизм реакции, реализующийся в ходе химического процесса.

4. $s(\text{дополнительное воздействие}) = (I[1, \text{length}(\text{механизм}) - 1] \textcircled{R} \{ \} \text{ методы стимуляции реакции})$.

Термин *дополнительное воздействие* обозначает функцию, которая каждой стадии реакции (кроме последней) сопоставляет множество методов стимуляции реакции на этом шаге.

Теперь приведем онтологические соглашения данного модуля.

1. $(v: \text{химические реакции}) p(1, \text{механизм реакции}(v)) \textcircled{C} p(\text{length}(\text{механизм реакции}(v)), \text{механизм реакции}(v)) = \text{A}$.

Вещества, рассматриваемые на первой и последней стадии реакции, различны.

2. $(v: \text{химические реакции}) \text{реагенты}(v) \textcircled{I} p(1, \text{механизм реакции}(v)) \& \text{результаты}(v) \textcircled{I} p(\text{length}(\text{механизм реакции}(v)), \text{механизм реакции}(v))$.

При рассмотрении механизма реакции реагентами являются вещества на первом шаге рассмотрения механизма, а результатами – вещества на последнем шаге.

3. $(v: \text{химические реакции}) \text{стимулятор реакции}(v) = \{(i: I[1, \text{length}(\text{механизм реакции}(v)) - 1]) \text{дополнительное воздействие}(i)\}$.

При описании механизма реакции рассматриваются все методы стимуляции реакции для заданной реакции, т.е. множество стимуляторов реакции есть объединение множеств стимуляторов каждой стадии.

Далее рассмотрим различные уровни представления механизма реакции.

Пространственное представление механизма реакций

Рассмотрим термины, используемые при описании пространственного представления механизма реакции. При пространственном представлении рассматриваются химические элементы, входящие в состав соединений,

участвующих в реакциях, связи между ними и расположение этих элементов в пространстве.

1. $s(\text{длина связи в соединении}) = (\{(v: (\hat{\sim} I[1, \text{length}(\text{механизм}) - 1], \text{химические вещества}, I[1, \text{Y}], I[1, \text{Y}])) p(2, v) \hat{I} p(p(1, v), \text{механизм}) \& p(3, v) \notin I[1, \text{length}(\text{структурная формула соединения}(p(1, v)))] \& p(4, v) \notin I[1, \text{length}(\text{структурная формула соединения}(p(1, v)))]\} \textcircled{R} R[0, 0.5))$.

Термин *длина связи в соединении* обозначает функцию, которая сопоставляет стадии реакции химическому соединению, принадлежащему множеству соединений механизма на этой стадии, и двум химическим элементам длину связи между этими химическими элементами в соединении, т.е. расстояние от центра атома одного элемента до центра атома другого элемента. Длина связи измеряется в нанометрах.

2. $s(\text{расположение молекулы в пространстве}) = (\{(v: (\hat{\sim} I[1, \text{length}(\text{механизм}) - 1], \text{химические вещества})) p(2, v) \hat{I} p(p(1, v), \text{механизм})\} \textcircled{R} \{(\hat{\sim} I[1, \text{Y}], I(-\text{Y}, \text{Y}), I(-\text{Y}, \text{Y}), I(-\text{Y}, \text{Y}))\}$.

Термин *расположение молекулы в пространстве* обозначает функцию, которая сопоставляет стадии реакции химическому соединению, принадлежащему множеству соединений на этой стадии, множество четверок: номер химического элемента, входящего в состав заданного химического соединения, и координаты этого элемента в пространстве.

Теперь приведем связи между терминами 1, 2 и терминами модуля. *Механизмы реакции.*

1. $(v: \text{химические реакции}) (i: I[1, \text{length}(\text{механизм реакции}(v) - 1]) (v1: \{(v2: \text{химические вещества}) v2 \hat{I} p(i, \text{механизм реакции}(v)) \& v2 \hat{I} p(i - 1, \text{механизм реакции}(v))\}) \text{расположение молекулы в пространстве}(i, v1) \hat{=} \text{расположение молекулы в пространстве}(i - 1, v1)$.

Пространственное расположение молекул веществ при рассмотрении механизма реакции различно на каждом шаге.

2. $(v: \text{химические реакции}) (i: I[1, \text{length}(\text{механизм реакции}(v) - 1]) (v1: \{(v2: \text{химические вещества}) v2 \hat{I} p(i, \text{механизм реакции}(v)) \& v2 \hat{I} p(i - 1, \text{механизм реакции}(v))\}) (j: I[1, \text{length}(\text{структурная формула соединения}(v1))]) (k: I[1, \text{length}(\text{структурная формула соединения}(v1))]) \text{длина связи в соединении}(i, v1, j, k) \hat{=} \text{длина связи в соединении}(i - 1, v1, j, k)$.

Одни и те же соединения на различных стадиях различаются длиной хотя бы одной связи.

3. $(v: \text{химические реакции}) (i: I[1, \text{length}(\text{механизм реакции}(v))] (v1: p(i, \text{механизм реакции}(v))) \text{число атомов в молекуле}(v1) = \text{число атомов в молекуле}(v1)$.

Пространственное расположение включает расположение всех атомов химических элементов в молекуле.

4. $(v: \text{химические реакции}) (v1: p(1, \text{механизм реакции}(v))) (i: I[1, \text{length}(v1)]) (j: \{(j \notin I[1, \text{length}(v1)]) j \notin j \& j \hat{I} \text{связи элемента в компо}$

длина структурной формулы(структурная формула соединения($v1$, i)) длина связи в соединении($v1$, i , j) = длина связи(компонента структурной формулы(структурная формула соединения($v1$, i), компонента структурной формулы(структурная формула соединения($v1$, j)).

При рассмотрении механизма реакции на первой стадии длина связи всех связанных химических элементов соответствует обычной длине между этими химическими элементами.

Ионное представление механизма реакций

Теперь рассмотрим термин, описывающий ионное представление механизма реакции и зададим его связи с терминами модуля *Механизм реакции*. При ионном представлении рассматриваются ионы соединений, участвующих в реакциях.

$C(\text{ионы в соединении}) = (\{(v: (I[1, \text{length}(\text{механизм})], \text{химические вещества})) p(1, v) \hat{I} p(p(1, v), \text{механизм})\} \otimes \{\text{ион}\})$.

Термин *ионы в соединении* обозначает функцию, которая каждой стадии реакции и веществу на этой стадии сопоставляет множество ионов этого соединения.

Теперь приведем связи с терминами модуля *Механизмы реакции*.

1. $(v: \text{химические реакции}) \text{ ионы в соединении}(1, p(1, \text{механизм реакции}(v))) = \text{ионы соединения}(p(1, \text{механизм})) = \mathcal{A} \ \& \ \text{ионы в соединении}(\text{length}(\text{механизм реакции}(v)), p(1, \text{механизм реакции}(v))) = \text{ионы соединения}(\text{length}(\text{механизм реакции}(v)), p(1, \text{механизм реакции}(v))) = \mathcal{A}$.
Вещества, рассматриваемые на первой и последней стадии реакции, нейтральны (не имеют ионов).
2. $(v: \text{химические реакции}) (i: I[1, \text{length}(\text{механизм реакции}(v))] (v1: \{(v2: \text{химические вещества}) v2 \hat{I} p(i, \text{механизм реакции}(v)) \ \& \ v2 \hat{I} p(i-1, \text{механизм реакции}(v))\}) \text{ ионы соединения}(v1) \ \wedge \ \text{ионы соединения}(v1)$.

Если на соседних стадиях рассматриваются одинаковые соединения, то ионы этих соединений различны.

Электронное представление механизма реакций

Теперь рассмотрим термин, описывающий электронное представление механизма реакции и зададим его связи с терминами модуля *Механизм реакции*. При электронном представлении рассматривается электронное взаимодействие атомов химических элементов в молекуле соединения, участвующего в реакции.

$C(\text{электронная конфигурация соединения}) = (\{(v: (I[1, \text{length}(\text{механизм})], \text{химические вещества}, I[1, \mathcal{Y}], I[1, 8]) p(1, v) \hat{I} p(p(1, v), \text{механизм}) \ \& \ p(3, v) \ \mathcal{E} \ \text{length}(\text{структурная формула соединения}(p(2, v))) \ \& \ p(4, v) \ \mathcal{E} \ \text{число электронных уровней}(\text{компонента структурной$

формулы(структурная формула соединения(v), $p(2, v)$))} \otimes (число s -электронов, число p -электронов, число d -электронов, число f -электронов).

Термин *электронная конфигурация соединения* обозначает функцию, которая каждой стадии механизма реакции, веществу на этой стадии, химическому элементу, входящему в состав этого соединения, и электронному уровню сопоставляет четверку: число s -электронов, число p -электронов, число d -электронов, число f -электронов на данном электронном уровне данного химического элемента заданного соединения.

Теперь приведем связи с терминами модуля *Механизмы реакции*.

1. (v : химические реакции) (i : $I[1, \text{length}(\text{механизм реакции}(v)) - 1]$) ($v1$: $\{(v2$: химические вещества) $v2 \hat{I} p(i, \text{механизм реакции}(v)) \& v2 \hat{I} p(i - 1, \text{механизм реакции}(v))\}$) (j : $I[1, \text{length}(\text{структурная формула соединения}(v))]$) (k : число электронных уровней(компонента структурной формулы(структурная формула соединения(v), j))) электронная конфигурация соединения($i, v1, j, k$) \hat{I} электронная конфигурация соединения($i - 1, v1, j, k$).

Одно и то же вещество для двух соседних стадий реакции различается электронной конфигурацией хотя бы одного атома, входящего в его состав.

2. (v : химические реакции) ($v1$: $\{(v2$: химические вещества) $v2 \hat{I} p(1, \text{механизм реакции}(v)) \}$) (j : $I[1, \text{length}(\text{структурная формула соединения}(v1))]$) (k : $I[1, \text{число электронных уровней(компонента структурной формулы(структурная формула соединения}(v)), j]$)) электронная конфигурация соединения($1, v1, j, k$) = электронная конфигурация элемента в соединении($v2, j$) & электронная конфигурация соединения($\text{length}(\text{механизм реакции}(v)), v1, j, k$) = электронная конфигурация элемента в соединении($v2, j$).

Вещества, рассматриваемые в механизме реакции на первой и последней стадии, имеют обычную электронную конфигурацию.

3. (v : химические реакции) (i : $I[2, \text{length}(\text{механизм реакции}(v))]$) ($v1$: $\{(v2$: химические вещества) $v2 \hat{I} p(i, \text{механизм реакции}(v))\}$) (j : $I[1, \text{length}(\text{структурная формула соединения}(v1))]$) (k : $I[1, \text{число электронных уровней(компонента структурной формулы(структурная формула соединения}(v)), j]$)) $v2 = v \hat{P}$ электронная конфигурация элемента в соединении(v, j) \hat{C} электронная конфигурация элемента в соединении($v2, j$) \hat{I} \hat{A} .

Вещества, рассматриваемые в механизме реакции на любой стадии, кроме первой и последней, имеют отличную от обычной электронную конфигурацию.

4. (v : химические реакции) (i : $I[2, \text{length}(\text{механизм реакции}(v)) - 1]$) ($v1$: $\{(v2$: химические вещества) $v2 \hat{I} p(i, \text{механизм реакции}(v))\}$) ($S(j$: эле-

менты с неспаренным электроном($v1$) \dot{E} элементы со свободными местами для электронов($v1$)) (k : $I[1$, число электронных уровней(компонента структурной формулы(структурная формула соединения($v1$)), j)])) электронная конфигурация соединения(v , $v1$, j , k) ¹ электронная конфигурация элемента в соединении($v2$, j)).

У веществ, рассматриваемых в механизме реакции, на любой стадии, кроме первой и последней, изменение электронной конфигурации происходит у химических элементов с неспаренным электроном или у элементов со свободными местами для электронов.

Заключение

В работе был определен модуль *Механизмы реакции* онтологии и модели онтологии предметной области *Химия*. Модуль описывает термины, необходимые для описания механизма химических реакций, а также различных уровней его рассмотрения. Определенные в модуле термины используются в интеллектуальной системе по химии для представления знаний области.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Артемьева И.Л., Реиштаненко Н.В., Цветников В.А.* Описание свойств реакций в модели онтологии химии // Информатика и системы управления. – 2006. – № 1. – С.132-143.
2. *Ахметов Н.С.* Общая и неорганическая химия. – М.: Высшая школа, 1998.
3. *Зайцев О.С.* Общая химия. Состояния веществ и химические реакции. – М.: Химия, 1990.
4. *Кнунянц И.Л.* Химическая энциклопедия: в 5 т. – М.: Большая Российская энциклопедия, 1992.
5. *Потапов В.М., Хомченко Г.Н.* Химия. – М.: Высшая школа, 1982.
6. *Березин Б.Д., Березин Д.Б.* Курс современной органической химии. – М.: Высшая школа, 1999.
7. *Нейланд О. Я.* Органическая химия. – М.: Высшая школа, 1990.
8. *Шабаров Ю.С.* Органическая химия. – Т. 1. Нециклические соединения. – М.: Химия, 1996.
9. *Шабаров Ю.С.* Органическая химия. – Т. 2. Циклические соединения. – М.: Химия, 1996.
10. *Бусев А.И., Ефимов И.П.* Определения, понятия, термины в химии. – М.: Просвещение, 1981.
11. *Клещев А.С., Артемьева И.Л.* Необогатенные системы логических соотношений: в 2 частях // НТИ. Сер. 2. – 2000. – № 7-8.

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