



УДК: 519.68:15:54

© 2008 г. **И.Л. Артемьева**, канд. техн. наук,
Н.В. Рештаненко, канд. техн. наук,
В.А. Цветников, канд. техн. наук
(Институт автоматизации и процессов управления ДВО РАН, Владивосток)

ОПИСАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ В МОДЕЛИ ОНТОЛОГИИ ХИМИИ¹

Рассматривается возможность имитационного моделирования диэлектрических спектров ряда промышленных образцов композиционных электрокерамик, имеющих место в области установления упругой электронной поляризации частиц. В первой части работы описываются математические модели поляризационных процессов, происходящих в отдельно взятых композитах.

Введение

Ядром любой системы, основанной на знаниях, является система для решения прикладных задач. Исходные данные задачи формулируются в терминах онтологии действительности предметной области [1]. Для предметной области "Химия" термины данной онтологии описывают свойства физико-химических процессов [2]. Химический процесс может рассматриваться на разных уровнях детализации:

в виде последовательности множеств химических веществ;

в виде последовательности множеств веществ и реакций, имеющих место на каждом шаге процесса;

в виде последовательности множеств веществ и реакций, имеющих место на каждом шаге процесса и фаз системы, причем фазы системы меняются в ходе процесса, как и их ингредиенты;

в виде множества фаз, причем химические реакции протекают в некоторой фазе, а в результате химических реакций меняются ингредиенты фазы.

Целью данной работы является описание модулей модели онтологии химии, определяющих систему понятий, используемую при задании свойств физико-химических процессов с требуемым уровнем детализации. Модель онтологии построена в классе небогатых систем логических соотношений с параметрами [3].

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

Модуль "Основы термодинамики"

Определим вспомогательные термины данного модуля.

1. *типы параметров* $\circ \{ \text{экстенсивные параметры, интенсивные параметры, удельные параметры, молярные параметры, дольные параметры} \}$
 Данный вспомогательный термин определяет пять типов параметров.
2. *экстенсивные параметры* $\circ \{ \text{масса, количество, объем, изохорная теплоемкость, изобарная теплоемкость, теплоемкость, внутренняя энергия, энтальпия, энтропия, энергия Гиббса, энергия Гельмгольца} \}$
 Данный вспомогательный термин определяет названия экстенсивных параметров.
3. *интенсивные параметры* $\circ \{ \text{температура, давление, плотность, химический потенциал} \}$
 Данный вспомогательный термин определяет названия интенсивных параметров.
4. *удельные параметры* $\circ \{ (v: \text{экстенсивные параметры} \setminus \{ \text{масса} \}) \text{ уд.} \mid v \}$
 Данный вспомогательный термин обозначает множество названий удельных параметров. Эти названия формируются из названий экстенсивных параметров (кроме параметра "масса") добавлением префикса "уд."
5. *молярные параметры* $\circ \{ (v: \text{экстенсивные параметры} \setminus \{ \text{количество} \}) \text{ мол.} \mid v \}$
 Данный вспомогательный термин обозначает множество названий молярных параметров. Эти названия формируются из названий экстенсивных параметров (кроме параметра "количество") добавлением префикса "мол."
6. *долные параметры* $\circ \{ (v: \text{экстенсивные параметры}) \text{ дол.} \mid v \}$
 Данный вспомогательный термин обозначает множество названий дольных параметров. Эти названия формируются из названий экстенсивных параметров добавлением префикса "дол."
7. *собственные свойства системы* $\circ (I (v: \{ \{ (L \hat{E} R \hat{E} I \hat{E} N) \} (I[1, \text{число шагов процесса}] \otimes v))$
 Термин *собственные свойства системы* определяет функцию, аргументом которой является некоторое подмножество множества вещественных или целых чисел, множества обозначений, а результатом – функция, у которой аргументом является номер шага физико-химического процесса, а результатом – элемент множества, задаваемого значением аргумента функции *собственные свойства системы*. Данный термин является термином онтологии третьего уровня [4].
8. *общие свойства системы* $\circ (I (v: \{ \{ (R \hat{E} I \hat{E} N) \} (I[1, \text{число шагов процесса}] \hat{E} (\{ (v1: (\times I[1, \text{число шагов процесса}], \text{химические вещества})) p(2, v1) \hat{I} \text{ингредиенты системы}(p(1, v1))) \} \hat{E} (\{ (v1: (\times I[1, \text{число моментов}], \text{фазы})) p(2, v1) \hat{I} \text{фазы системы}(p(1, v1))) \} \hat{E} (\{ (v1: (\times I[1, \text{число шагов процесса}], \text{фазы, химические вещества})) p(2, v1) \hat{I} \text{фазы системы}(p(1, v1)) \} \& p(3, v1) \hat{I}$

² Знак || обозначает операцию конкатенации имен.

ингредиенты фазы($p(1, v1), p(2, v1)$)} $\textcircled{R} v$)

Термин *общие свойства системы* определяет функцию, аргументом которой является некоторое подмножество множества вещественных или целых чисел, множества обозначений, а результатом – функция, имеющая от одного до трех аргументов (номер шага процесса; номер шага процесса и химическое вещество этого шага; номер шага процесса и фаза этого шага; номер шага процесса, фаза этого шага и химическое вещество этой фазы), результатом которой является значение, принадлежащее множеству, задаваемому значением аргумента функции *общие свойства системы*. Т.е. под общими свойствами понимаются свойства, которые одновременно могут быть свойствами термодинамической системы, свойствами ее фаз, свойствами ее составляющих, свойствами составляющих в пределах фаз. Данный термин принадлежит онтологии третьего уровня [4].

9. *свойства составляющих* $\equiv (I (v: \{R \hat{E} I \hat{E} N\}) (\{v1: (\times I[1, \text{число шагов процесса}], \text{химические вещества})) p(2, v1) \hat{I} \text{ ингредиенты системы}(p(1, v1))\} \textcircled{R} v)$

Термин *свойства составляющих* определяет функцию, аргументом которой является некоторое подмножество множества вещественных или целых чисел, множества обозначений, множества подмножеств множества обозначений, а результатом – функция, у которой аргументами являются номер шага процесса и вещество данного шага, а результатом – значение, принадлежащее множеству, задаваемому аргументом функции *свойства составляющих*. Данный термин является термином онтологии третьего уровня [4].

Определим основные термины данного модуля.

1. $c(\text{число шагов процесса}) = I[1, \text{¥}]$
Данный термин обозначает общее число шагов физико-химического процесса.
2. $c(\text{фазы}) = \{N\}$
Термин фазы обозначает множество идентификаторов фаз.
3. $c(\text{ингредиенты системы}) = \text{собственные свойства системы}(\{\{\text{химические вещества}\})$
Термин *ингредиенты системы* обозначает функцию, аргументом которой является номер шага физико-химического процесса, а результатом – множество химических веществ этого шага.
4. $c(\text{компоненты системы}) = \text{собственные свойства системы}(\{\{\text{химические вещества}\})$
Термин *компоненты системы* обозначает функцию, аргументом которой является номер шага физико-химического процесса, а результатом – набор химических веществ данного шага.
5. $c(\text{фазы системы}) = \text{собственные свойства системы}(\{\{\text{фазы}\})$
Термин *фазы системы* обозначает функцию, аргументом которой является номер шага физико-химического процесса, а результатом – множество фаз этого шага.
6. $c(\text{ингредиенты фазы}) = ((\{v: (\times I[1, \text{число шагов процесса}], \text{фазы})) p(2, v1)$

\hat{I} фазы системы $(p(1, v1)) \} \textcircled{R} \{ \text{химические вещества} \}$

Термин *ингредиенты фазы* обозначает функцию, которая сопоставляет фазе на определенном шаге физико-химического процесса множество ее ингредиентов – химических веществ.

7. $(v: \{ \text{масса, мол. масса, количество, объем, уд. объем, мол. объем, изохорная теплоемкость, уд. изохорная теплоемкость, мол. изохорная теплоемкость, изобарная теплоемкость, уд. изобарная теплоемкость, мол. изобарная теплоемкость, теплоемкость, уд. теплоемкость, мол. теплоемкость, плотность} \}) c(v) = \text{общие свойства системы}(R[0, \text{¥}])$

Указанные общие свойства системы имеют область допустимых значений множество неотрицательных действительных чисел.

8. $(v: \{ \text{большой термодинамический потенциал, работа, теплообмен} \}) c(v) = (I[1, \text{число шагов процесса}] \hat{E} (\{ (v1: (\times I[1, \text{число шагов процесса}], \text{фазы})) p(2, v1) \hat{I} \text{ фазы системы}(p(1, v1)) \} \textcircled{R} R[0, \text{¥}])$

Термины *большой термодинамический потенциал, работа и теплообмен* являются функциями, сопоставляющими фазе некоторого шага физико-химического процесса значение свойства системы, определяемого термином.

9. $c(\text{температура}) = \text{общие свойства системы}(R[0, \text{максимальная температура}])$

Термин *температура* обозначает функцию, результатом которой является допустимое значение температуры. Вид аргументов данной функции определяется функцией *общие свойства системы*.

10. $c(\text{давление}) = \text{общие свойства системы}(R[0, \text{максимальное давление}])$

Термин *давление* обозначает функцию, результатом которой является допустимое значение давления. Вид аргументов данной функции определяется функцией *общие свойства системы*.

11. $(v: \{ \text{внутренняя энергия, уд. внутренняя энергия, мол. внутренняя энергия, энтальпия, уд. энтальпия, мол. энтальпия, энтропия, уд. энтропия, мол. энтропия, энергия Гиббса, уд. энергия Гиббса, мол. энергия Гиббса, энергия Гельмгольца, уд. энергия Гельмгольца, мол. энергия Гельмгольца, химический потенциал} \}) c(v) = \text{общие свойства системы}(R[-\text{¥}, \text{¥}])$

Указанные термины обозначают функции, областью значений которых является множество действительных чисел. Вид аргументов данных функций определяется функцией *общие свойства системы*.

12. $c(\text{вариантность}) = \{ \text{интенсивные параметры} \}$

Термин *вариантность* обозначает подмножество множества интенсивных параметров.

13. $(v: \text{дольные параметры}) c(v) = \text{свойства составляющих}(R[0, 1])$

Множество свойств составляющих включает дольные параметры; их областью допустимых значений являются значения в действительном интервале от 0 до 1.

Теперь приведем онтологическое соглашение данного модуля.

1. $(t: I[1, \text{число шагов процесса}]) (v: \text{экстенсивные параметры} \setminus \{ \text{масса} \}) v(t)$

$$/ \text{масса}(t) = \text{уд.} \parallel v(t)$$

Значение удельного параметра системы для некоторого шага процесса есть значение соответствующего экстенсивного параметра для этого шага, поделенного на значение, задаваемое функцией "масса" для данного шага (в этом случае масса задает массу всей системы).

2. ($t: I[1, \text{число шагов процесса}]$) (v : экстенсивные параметры \ {масса}) (s : ингредиенты системы(t)) $v(t, s) / \text{масса}(t, s) = \text{уд.} \parallel v(t, s)$

Значение удельного параметра составляющих системы на некотором шаге процесса есть значение соответствующего экстенсивного параметра для данного составляющего на данном шаге процесса, поделенного на значение, задаваемое функцией "масса" для данного составляющего (в этом случае масса задает массу этого составляющего).

3. ($t: I[1, \text{число шагов процесса}]$) (v : экстенсивные параметры \ {количество}) $v(t) / \text{количество}(t) = \text{мол.} \parallel v(t)$

Значение молярного параметра системы для некоторого шага процесса есть значение соответствующего экстенсивного параметра системы для данного шага, поделенного на значение, задаваемое функцией "количество" для данного шага (в этом случае количество относится ко всей системе).

4. ($t: I[1, \text{число моментов}]$) (v : экстенсивные параметры \ {количество}) (s : ингредиенты системы(t)) $v(t, s) / \text{количество}(t, s) = \text{мол.} \parallel v(t, s)$

Значение молярного параметра составляющего системы для некоторого шага процесса есть значение соответствующего экстенсивного параметра этого составляющего для данного шага, поделенного на значение, задаваемое функцией "количество" для данного составляющего (в этом случае количество относится к составляющему системы).

5. ($t: I[1, \text{число моментов}]$) (i : ингредиенты системы(t)) (v : экстенсивные параметры) $\text{дол.} \parallel v(t, i) = v(t, i) / v(t)$

Значение дольного параметра системы для некоторого шага процесса есть значение соответствующего экстенсивного параметра системы для данного шага, поделенного на значение этого параметра.

6. ($t: I[1, \text{число шагов процесса}]$) (v : экстенсивные параметры) $v(t) = (\dot{a} (i: \text{ингредиенты системы}(t)) v(t, i))$

Значение экстенсивного параметра системы есть сумма его значений по всем ее ингредиентам.

7. ($t: I[1, \text{число шагов процесса}]$) $\text{плотность}(t) = \text{масса}(t) / \text{объем}(t)$

Плотность системы в определенный момент времени есть отношение массы системы в этот момент к ее объему.

8. ($t: I[1, \text{число шагов процесса}]$) (i : ингредиенты системы(t)) $\text{плотность}(t, i) = \text{масса}(t, i) / \text{объем}(t, i)$

Плотность составляющих системы в определенный момент времени есть отношение массы составляющих системы в этот момент к объему составляющих.

9. ($t: I[1, \text{число шагов процесса}]$) $\text{внутренняя энергия}(t + 1) - \text{внутренняя}$

$$\text{энергия}(t) = \text{теплообмен}(t + 1) + \text{работа}(t + 1)$$

Первое начало термодинамики вводит понятие внутренней энергии системы как функции состояния.

10. $(t: I[1, \text{число шагов процесса}])$ $\text{энтальпия}(t) = \text{внутренняя энергия}(t) + \text{давление}(t) * \text{объем}(t)$
Энтальпия системы в конкретный момент времени вычисляется как сумма внутренней энергии в момент времени и произведения давления на объем в заданный момент.
11. $(t: I[1, \text{число шагов процесса}])$ $\text{энергия Гельмгольца}(t) = \text{внутренняя энергия}(t) - \text{температура}(t) * \text{энтропия}(t)$
Энергия Гельмгольца системы в конкретный момент времени вычисляется как разность внутренней энергии к произведению температуры в заданный момент на энтропию в этот момент.
12. $(t: I[1, \text{число шагов процесса}])$ $\text{энергия Гиббса}(t) = \text{внутренняя энергия}(t) - \text{температура}(t) * \text{энтропия}(t) + \text{давление}(t) * \text{объем}(t)$
Энергия Гиббса системы в конкретный момент времени вычисляется как сумма разности внутренней энергии в заданный момент к произведению температуры на энтропию и произведения давления на объем в заданный момент времени.
13. $(t: I[1, \text{число шагов процесса}])$ $(i: \text{ингредиенты системы}(t))$ $\text{мол. масса}(t, i) = \text{молярная масса}(i)$
Молярная масса ингредиента системы совпадает с молярной массой соединения.
14. $(t: I[1, \text{число шагов процесса}])$ $\text{компоненты системы}(t) \hat{I}$ $\text{ингредиенты системы}(t)$
В любой момент наблюдения компоненты системы – это подмножество ингредиентов системы.

Модуль "Термодинамика. Физические свойства"

Определим вспомогательные термины данного модуля.

1. $\text{свойства ингредиента в фазе } \circ (I (v: \{(R \hat{E} I \hat{E} N)\} \{v1: (\times I[1, \text{число шагов процесса}], \text{фазы, химические вещества})\} p(2, v1) \hat{I} \text{ фазы системы}(p(1, v1)) \& p(3, v1) \hat{I} \text{ ингредиенты фазы}(p(1, v1), p(2, v1))\} \textcircled{R} v)$
Термин *свойства ингредиента в фазе* обозначает функцию, аргументом которой является некоторое подмножество множества вещественных или целых чисел, множества обозначений, а результатом – функция, аргументами которой является номер шага процесса, фаза системы, имеющая место на этом шаге, и ингредиент фазы, а результатом – значение, принадлежащее множеству, задаваемому значением аргумента функции *свойства ингредиента в фазе*. Данный термин принадлежит онтологии третьего уровня [4].
2. $\text{свойства фазы} \equiv (I (v: \{(R \hat{E} I \hat{E} N)\} \{v1: (\times I[1, \text{число шагов процесса}], \text{фазы})\} p(2, v1) \hat{I} \text{ фазы системы}(p(1, v1))\} \textcircled{R} v)$
Термин *свойства фазы* обозначает функцию, аргументом которой является

некоторое подмножество множества вещественных или целых чисел, множества обозначений, а результатом – функция, аргументами которой является номер шага процесса и фаза системы, имеющая место на этом шаге, а результатом – значение, принадлежащее множеству, задаваемому значением аргумента функции *свойства фазы*. Данный термин принадлежит онтологии третьего уровня [4].

Определим основные термины данного модуля.

1. $c(\text{фазовое равновесие}) = \text{собственные свойства системы } (L)$
Термин *фазовое равновесие* обозначает функцию, аргументом которой является номер шага процесса, а результатом – логическое значение, указывающее наличие или отсутствие фазового равновесия на данном шаге процесса.
2. $c(\text{фазы системы}) = \text{собственные свойства системы}(\{\text{фазы}\})$
Термин *фазы системы* обозначает функцию, аргументом которой является номер шага процесса, а результатом – множество фаз данного шага.
3. $c(\text{реакции системы}) = \text{собственные свойства системы}(\{\text{химические реакции}\})$
Термин *реакции системы* обозначает функцию, аргументом которой является номер шага процесса, а результатом – множество химических реакций, имеющих место на данном шаге.
4. $c(\text{ингредиенты фазы}) = \text{свойства фазы}(\{\text{химические вещества}\})$
Термин *ингредиенты фазы* обозначает функцию, аргументами которой является номер шага процесса и фаза этого шага, а результатом – множество химических веществ, выступающих в качестве ингредиентов этой фазы.
5. $(v: \{\text{плотность, темп замерзания, темп замерзания теоретический, темп кипения, темп кипения теоретический, осмотическое давление, осмотическое давление теоретическое, давление насыщенного пара, давление насыщенного пара теоретическое, изотонический коэффициент, молярная концентрация, молярная концентрация, разбавление, ионная сила, активность, коэффициент активности, температура плавления, температура плавления теоретическая}\})$ $c(v) = \text{свойства фазы}(R[0, \infty])$
Областью значений перечисленных свойств фазы является область неотрицательных действительных чисел.
6. $c(\text{идеальность}) = \text{свойства фазы}(\{\text{идеальный, реальный}\})$
Термин *идеальность* обозначает функцию – свойство фазы, – результатом которой является обозначение идеальности раствора (фазы).
7. $c(\text{насыщенность}) = \text{свойства фазы}(\{\text{ненасыщенный, насыщенный, пересыщенный}\})$
Термин *насыщенность* обозначает функцию (задающую свойство фазы), результатом которой является обозначение насыщенности раствора (фазы).
8. $c(\text{состояние фазы}) = \text{свойства фазы}(\{\text{жидкое, газ, твердое}\})$
Термин *состояние фазы* обозначает функцию (задающую свойство фазы), результатом которой является агрегатное состояние фазы в конкретный момент времени.
9. $(v: \{\text{парциальное давление, степень диссоциации, константа диссоциации,}$

массовая растворимость, молярная растворимость, молярная концентрация, моляльная концентрация} $c(v)$ = свойства ингредиента в фазе($R[0, \mathbb{Y}]$)
 Указанные функции (задающие совместные свойства ингредиента в фазе) имеют областью значений множество неотрицательных действительных чисел.

10. $c(\text{состояние ингредиента})$ = свойства ингредиента в фазе(возможные состояния веществ)

Термин *состояние ингредиента* обозначает функцию (задающую свойство ингредиента в фазе), результатом которой является конкретное состояние вещества (ингредиента).

Теперь приведем онтологическое соглашение данного модуля.

1. $(t: I[1, \text{число шагов процесса}])$ (ϕ : фазы системы(t)) (i : ингредиенты системы(t)) $i \hat{I}$ ингредиенты фазы(t, ϕ) \hat{U} количество(t, ϕ, i) > 0

Ингредиент системы является ингредиентом фазы тогда и только тогда, когда его количество в этой фазе больше нуля.

2. $(t: I[1, \text{число шагов процесса}])$ ($t: I[1, \text{число моментов}])$ (ϕ : фазы системы(t)) m (ингредиенты фазы(t, ϕ)) ≥ 1

Каждая фаза содержит как минимум один ингредиент.

3. $(t: I[1, \text{число шагов процесса}])$ (ϕ : фазы системы(t)) (i : ингредиенты системы(t)) (v : экстенсивные параметры) $\text{дол.} || v(t, \phi, i) = v(t, \phi, i) / v(t, \phi, i)$

Доля по экстенсивному параметру ингредиента в фазе есть отношение значения этого параметра ингредиента к значению этого параметра фазы.

4. $(t: I[1, \text{число шагов процесса}])$ (i : ингредиенты системы(t)) (v : экстенсивные параметры) $v(t, i) = (\hat{a} (\phi$: фазы системы(t)) $v(t, \phi, i))$

Значение экстенсивного параметра ингредиента равно сумме его значений для каждой из фаз системы.

5. $(t: I[1, \text{число шагов процесса}])$ (ϕ : фазы системы(t)) (v : экстенсивные параметры) $v(t, \phi) = (\hat{a} (i$: ингредиенты системы(t)) $v(t, \phi, i))$

Значение экстенсивного параметра фазы равно сумме значений этого параметра для всех ингредиентов системы в этой фазе.

6. $(t: I[1, \text{число шагов процесса}])$ (ϕ : фазы системы(t)) (v : экстенсивные параметры) $\text{дол.} || v(t, \phi) = v(t, \phi) / v(t)$

Доля по экстенсивному параметру фазы в системе есть отношение значения этого параметра для фазы к значению этого параметра для системы.

7. $(t: I[1, \text{число шагов процесса}])$ (ϕ : фазы системы(t)) энергия Гиббса(t, ϕ) = $(\hat{a} (i$: ингредиенты системы(t)) количество(t, ϕ, i) * химический потенциал(t, ϕ, i))

Энергия Гиббса для фазы системы любой момент времени равна соотношению количества ингредиента фазы системы на химический потенциал этого ингредиента.

8. $(t: I[1, \text{число шагов процесса}])$ (ϕ : фазы системы(t)) энтальпия(t, ϕ) = внутренняя энергия(t, ϕ) + давление(t, ϕ) * объем(t, ϕ)

Энтальпия фазы системы определяется как сумма внутренней энергии фазы и

произведения давления на объем фазы.

9. $(t: I[1, \text{число шагов процесса}]) (f: \text{фазы системы}(t))$ энергия Гельмгольца $(t, f) = \text{внутренняя энергия}(t, f) - \text{температура}(t, f) * \text{энтропия}(t, f)$
Энергия Гельмгольца фазы системы определяется как разность внутренней энергии фазы и произведения температуры на энтропию фазы.
10. $(t: I[1, \text{число шагов процесса}]) (f: \text{фазы системы}(t))$ энергия Гиббса $(t, f) = \text{внутренняя энергия}(t, f) - \text{температура}(t, f) * \text{энтропия}(t, f) + \text{давление}(t, f) * \text{объем}(t, f)$
Энергия Гиббса фазы системы вычисляется как сумма разности внутренней энергии фазы и произведения температуры на энтропию фазы с произведением давления фазы на ее объем.
11. $(t: I[1, \text{число шагов процесса}]) (f: \text{фазы системы}(t))$ большой термодинамический потенциал $(t, f) = \text{внутренняя энергия}(t, f) - \text{температура}(t, f) * \text{энтропия}(t, f) - (\dot{a} (i: \text{ингредиенты системы}(t)) \text{химический потенциал}(t, f, i) * \text{количество}(t, f, i))$
Большой термодинамический потенциал фазы вычисляется как разность внутренней энергии фазы к разности произведения температуры фазы на ее энтропию к сумме произведения химического потенциала всех ингредиентов фазы на количество каждого ингредиента.

Модуль "Термодинамика. Химические свойства"

Определим вспомогательные термины данного модуля.

1. $\text{свойства реакции} \equiv (I (v: \{(R \dot{E} I \dot{E} N)\} (\{v1: (\times I[1, \text{число шагов процесса}], \text{химические реакции})\} p(2, v1) \hat{I} \text{реакции системы}(p(1, v1))\} \textcircled{R} v)$
Термин *свойства реакции* обозначает функцию, аргументом которой является некоторое подмножество множества вещественных или целых чисел, множества обозначений, а результатом – функция, аргументами которой являются номер шага процесса и реакция, имеющая место на этом шаге, а результатом – значение, принадлежащее множеству, задаваемому значением аргумента функции *свойства реакции*.
2. $\text{свойства ингредиента в реакции} \circ (I (v: \{(R \dot{E} I \dot{E} N)\} (\{v1: (\times I[1, \text{число шагов процесса}], \text{химические реакции}, \text{химические вещества})\} p(2, v1) \hat{I} \text{реакции системы}(p(1, v1)) \& p(3, v1) \hat{I} \text{реагенты}(p(2, v1)) \dot{E} \text{результаты}(p(2, v1))\} \textcircled{R} v)$
Термин *свойства ингредиента в реакции* обозначает функцию, аргументом которой является некоторое подмножество множества вещественных или целых чисел, множества обозначений, а результатом – функция, аргументами которой являются номер шага процесса, реакция, имеющая место на этом шаге, и химическое вещество – участник реакции, а результатом – значение, принадлежащее множеству, задаваемому значением аргумента функции *свойства ингредиента в реакции*.

Определим основные термины данного модуля.

1. $s(\text{энергия активации}) = \text{зависящие от пути свойства реакций}(R[0, \text{границы}])$

ца(энергия активации))

Термин *энергия активации* обозначает функцию (задающую зависящее от пути свойство реакции), результатом которой является числовое значение энергии, необходимой для преодоления энергетического барьера.

2. $c(\text{химическое равновесие}) = \text{собственные свойства системы}(L)$
Термин *химическое равновесие* обозначает функцию (задающую собственное свойство системы), результатом которой является логическое значение, обозначающее присутствие или отсутствие химического равновесия на шаге процесса.
3. $c(\text{произведение растворимости}) = \text{собственные свойства реакций}(R[0, \mathbb{Y}])$
Термин *произведение растворимости* обозначает функцию (задающую свойство реакции), результатом которой является допустимое значение произведения растворимости.
4. $(v: \{\text{изменение энергии Гиббса, изменение энтальпии, изменение энтропии}\})$
 $c(v) = \text{свойства реакции}(R[-\mathbb{Y}, \mathbb{Y}])$
Указанные свойства реакции имеют областью допустимых значений множество всех действительных чисел.
5. $c(\text{возможные пути}) = \text{свойства реакции}(\{\}\{\}\text{химические реакции})$
Термин *возможные пути* обозначает функцию, сопоставляющую множество возможных путей протекания реакции, которые могут иметь место в термодинамической системе.
6. $c(\text{путь}) = \text{свойства реакции системы}(\{\}\{\}\text{химические реакции})$
Термин *путь* обозначает функцию, которая сопоставляет реакции некоторого шага процесса единственный путь из множества возможных, имеющих место при текущих условиях в термодинамической системе.
7. $c(\text{полученное количество}) = \text{свойства ингредиента в реакции}(R[-\mathbb{Y}, \mathbb{Y}]) \hat{E} ((\times I[1, \text{число шагов процесса}], \text{фазы, химические реакции, химические вещества})) \otimes R[-\mathbb{Y}, \mathbb{Y}] \hat{E} ((\times I[1, \text{число шагов процесса}], \text{фазы, химические вещества})) \otimes R[-\mathbb{Y}, \mathbb{Y}]$
Термин *полученное количество* обозначает функцию (задающую свойство ингредиента в реакции), результатом которой является числовое значение полученного или израсходованного количества вещества ингредиента в реакции.

Теперь приведем онтологическое соглашение данного модуля.

1. $(t: [1, \text{число шагов процесса}]) (v: \text{реакции системы}(t)) \text{возможные пути}(t, v) \hat{I} \text{возможные пути протекания}(v)$
Значение функции *возможные пути реакции* является подмножеством множества всех возможных путей прохождения данной химической реакции.
2. $(t: [1, \text{число шагов процесса}]) (v: \text{реакции системы}(t)) \text{путь}(t, v) \hat{I} \text{возможные пути}(t, v)$
В качестве значения свойства *путь* для некоторого шага процесса и заданной химической реакции могут выступать только возможные пути протекания данной реакции.



Заключение

В работе были рассмотрены модули онтологии и модели онтологии предметной области *Химия*, в которых определены термины, используемые при описании свойств физико-химических процессов. Данные термины используются при определении входных данных и результатов решения прикладных задач в интеллектуальной системе по химии [5].

ЛИТЕРАТУРА

1. Клещев А.С., Артемьева И.Л. Математические модели онтологий предметных областей. Ч.2. Компоненты модели // НТИ. Сер. 2. – 2001. – № 3. – С.19-29.
2. Артемьева И.Л., Рештаненко Н.В. Модульная модель онтологии органической химии // Информатика и системы управления. – 2004. – № 2. – С.98-108.
3. Клещев А.С., Артемьева И.Л. Необогатенные системы логических соотношений. В 2-х частях // НТИ. Сер. 2. – 2000. – № 7-8.
4. Артемьева И.Л., Рештаненко Н.В., Цветников В.А. Многоуровневая онтология химии // Тр. Всероссийской конф. с межд. участием "Знания-Онтологии-Теория" / Институт математики. Новосибирск, 2007. – Т.1. – С. 138-146.
5. Артемьева И.Л., Рештаненко Н.В. Разработка интеллектуальных Интернет-систем на основе многоуровневых онтологий // Системный анализ и информационные технологии: Тр. конф. – В 2 т. – М.: Изд-во ЛКИ, 2007. – Т.1. – С.96-99.

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

УДК 004.89

© 2008 г. **М.С. Маевский**

(Институт автоматизации и процессов управления ДВО РАН, Владивосток)

ЯЗЫК ОПИСАНИЯ ПРЕОБРАЗОВАНИЙ ПРОГРАММ¹

В статье представлен язык описания преобразований программ. Данный язык предназначен для формализации формул контекстных условий и формул трансформаций с целью их последующего хранения и автоматической обработки.

Введение

Методы преобразований программ широко используются при создании инструментальных средств поддержки программирования.

К преобразованиям программ относятся трансляция программ, их оптимизация и распараллеливание, реинжиниринг программ при их переносе в новое

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке ДВО РАН (инициативный научный проект "Интернет-система управления информацией о преобразованиях программ").