

## СРЕДСТВА ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ХИМИЧЕСКИХ РЕАКЦИЙ В БАЗЕ ЗНАНИЙ

Рассматриваются средства описания химических реакций в базе знаний интеллектуальной системы с использованием технологии OSTIS.

### ВВЕДЕНИЕ

Проблема представления химических реакций в интеллектуальных системах по химии является весьма актуальной. Представление химических реакций в базе знаний[1] системы является важной задачей, так как химические реакции отражают различные свойства веществ, проявляющиеся во взаимодействии с другими веществами. Однако, большинство современных компьютерных систем по химии не обладают средствами для представления химических реакций, что сказывается на полноте базы знаний проектируемой системы.

Для представления информации современных системы используют списочные структуры, которые трудно связать между собой.

### I. ПОДХОД К РЕШЕНИЮ ПРОБЛЕМЫ

В рамках данной статьи предлагается ввести теоретико-множественное отношение между множеством исходных веществ и множеством веществ, которые являются продуктами реакции. Данный подход реализуется при помощи средств технологии OSTIS[2], в основе которой лежит представление знаний в виде унифицированных семантических сетей с теоретико-множественной интерпретацией.

С помощью средств технологии OSTIS легко можно установить взаимосвязь между некоторым множеством исходных веществ и результирующим множеством веществ, которая и будет отражать химическую реакцию.

### II. РЕШЕНИЕ ПРОБЛЕМЫ

Для решения проблемы предлагается ввести отношение, отражающее взаимосвязь между исходным набором химических веществ и результатом их взаимодействия с дополнительным указанием роли каждого вещества (рисунок 1)

Якутин Александр Ильич, студент 2 курса кафедры ИИТ, ФИТыУ, БГУИР, yakutinaleksandr@gmail.com.

Научный руководитель: Шункевич Даниил Вячеславович, ассистент кафедры ИИТ БГУИР, shunkevichdv@gmail.com.

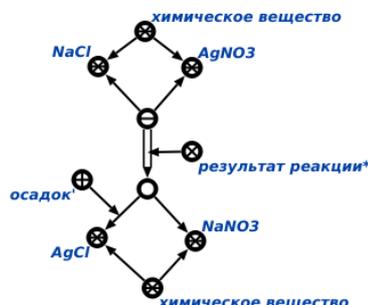


Рис. 1 – Формализованная реакция с указанием роли

Для указания условий протекания реакции предлагается ввести метаотношение, которое отражает взаимосвязь между химической реакцией и множеством физических параметров, необходимых для ее протекания (рисунок 2)

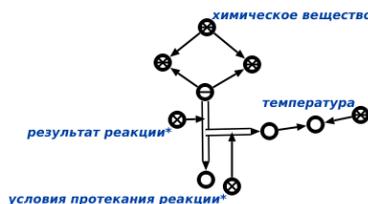


Рис. 2 – Формализованная реакция с указанием условия протекания

### III. ВЫВОДЫ

Предлагаемый способ представления позволяет формализовать любую химическую реакцию, что делает возможным всестороннее пополнение базы знаний интеллектуальной справочной системы по химии.

1. Гулякина, Н. А., Давыденко, И. Т. Комплексный подход к разработке баз знаний интеллектуальных систем на основе семантических сетей / Гулякина Н. А. , Давыденко И. Т. – Материалы междунар. науч.-техн. конф. ITS-2017.
2. Голенков В. В. , Гулякина Н. А. . Семантическая технология компонентного проектирования систем, управляемых знаниями / Голенков В. В. Гулякина, Н. А. – Материалы V междунар. науч.-техн. конф. OSTIS-2015.