

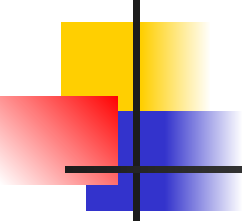
Использование онтологий при создании интеллектуальных систем

И.Л. Артемьева
Дальневосточный государственный
университет



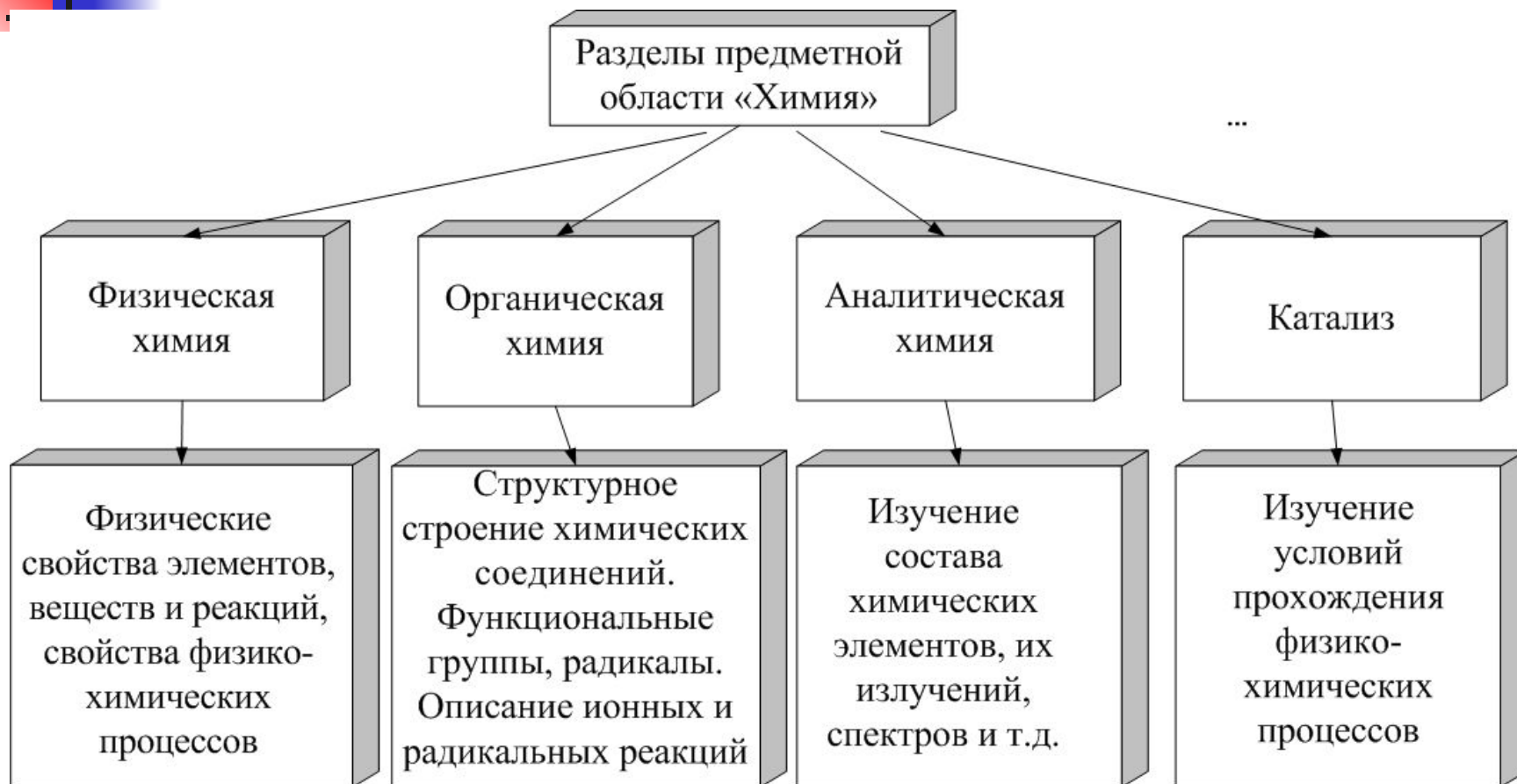
Содержание доклада

1. Структура предметной области
2. Структура онтологии раздела.
Многоуровневые онтологии
3. Информационные компоненты интеллектуальной системы
4. «Неструктурированные» знания
5. Управление информационными ресурсами
6. Решатели прикладных задач и их разработка на основе онтологии

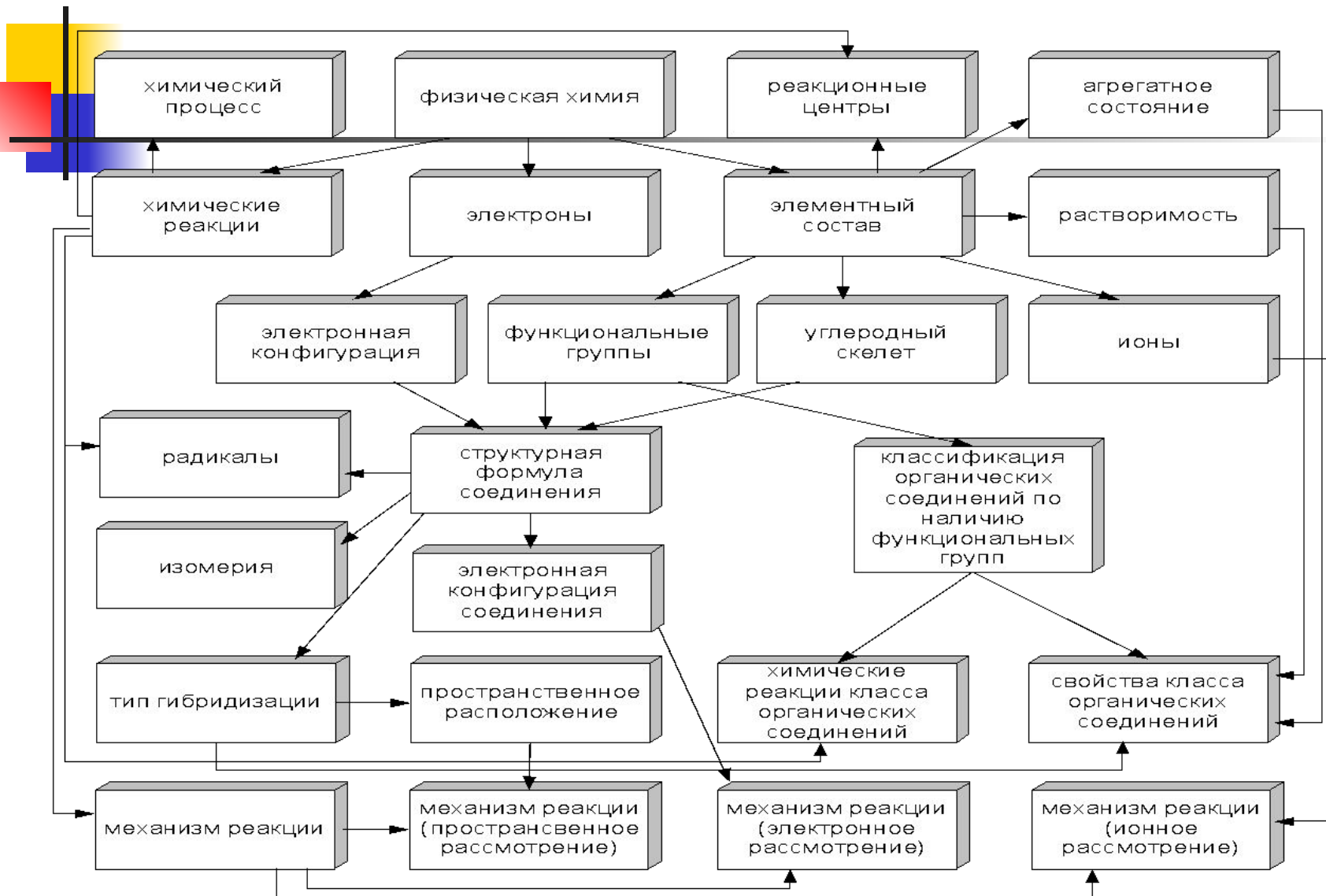


1. Структура предметной области

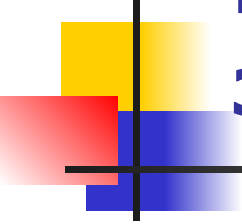
Примеры разделов предметной области



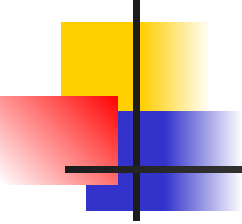
Модули онтологии для органической химии



Структура представления информации об онтологии (и знаниях) области



- Названия разделов
- Модули онтологии разделов
- Связи между разделами
- Связи между модулями



2. Структура онтологии раздела. Многоуровневые ОНТОЛОГИИ

Состав онтологии раздела химии

ОНТОЛОГИЯ РАЗДЕЛА ХИМИИ

Названия типов объектов раздела химии и свойств объектов разных типов

Имена отношений между объектами разных типов и свойств этих отношений

Иерархии классов объектов разных типов, условия принадлежности классам

Определение типов объектов-участников физико-химических процессов и их свойств

Примеры классов органических соединений



- *Первый принцип классификации: строение углеродного скелета*
- *Второй принцип классификации: наличие функциональных групп.*

Две части онтологии раздела

Описание конкретных физико-химических процессов

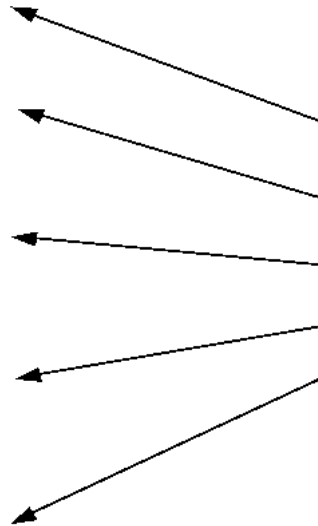
Знания о законах образования химических соединений из элементов

Знания о свойствах химических соединений

Знания о законах прохождения химических реакций

Знания об условиях прохождения реакций

Общие законы прохождения химических реакций для класса соединений



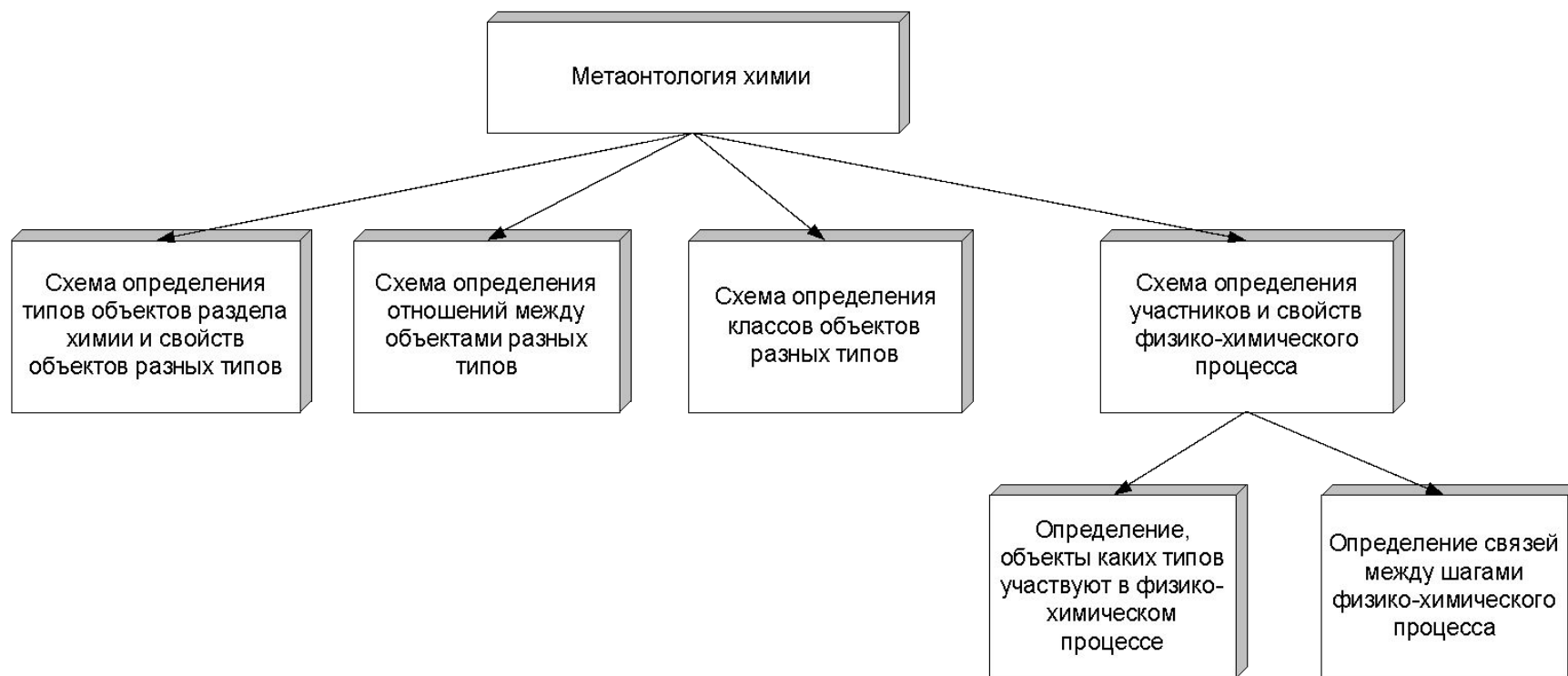
Физико-химический процесс
шаг 1: химические соединения (исходные соединения), классы химических соединений, реакции, имевшие место на шаге, условия
...
шаг i: химические соединения, классы химических соединений, реакции, имевшие место на шаге, условия прохождения процесса для шага i
...
шаг n: химические соединения (среди которых содержатся продукты процесса), классы химических соединений



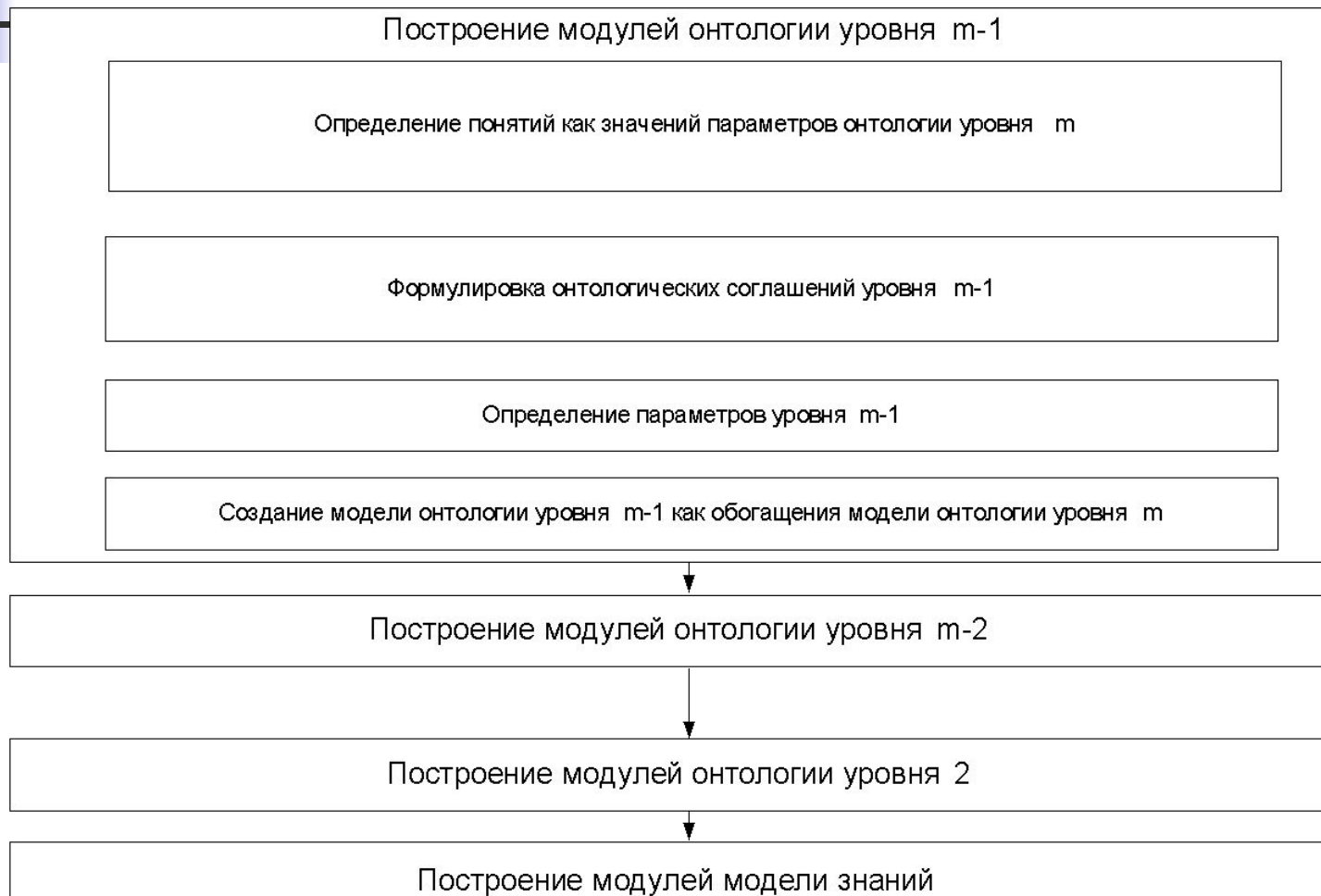
Примеры уровней рассмотрения физико-химических процессов

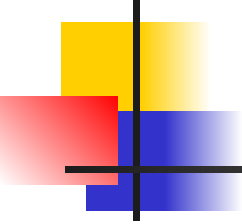
- в виде последовательности множеств химических веществ;
- в виде последовательности множеств веществ и реакций, имеющих место на каждом шаге процесса;
- в виде последовательности множеств веществ и реакций, имеющих место на каждом шаге процесса и фаз системы, причем фазы системы меняются в ходе процесса, также как и их ингредиенты;
- в виде множества фаз с учетом прохождения химической реакции в некоторой фазе и с учетом механизма прохождения каждой реакции на ионном или радикальном уровне;
- в виде множества фаз с учетом прохождения химической реакции в некоторой фазе и с учетом механизма прохождения каждой реакции на электронном уровне взаимодействия веществ.

Состав метаонтологии химии

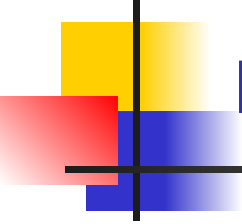


Использование онтологий более высокого уровня при построении онтологий более низкого уровня





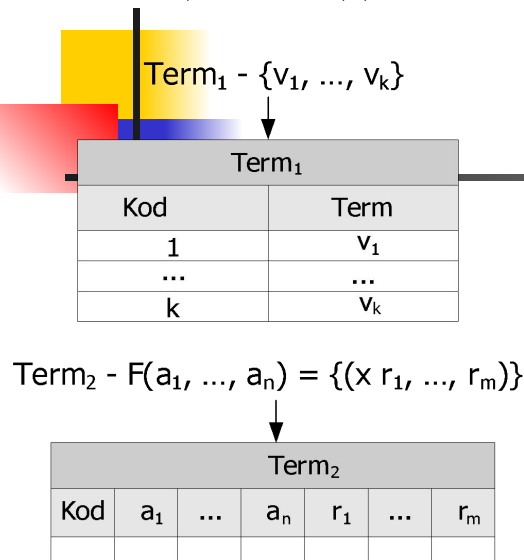
3. Информационные компоненты интеллектуальной системы и управление ими



Состав информационных компонентов и управление ими

- Описание структуры области и связей между ее разделами
- Описание модулей онтологии и связей между ними
- Метаонтологии
- Онтологии и знания разделов
- Архивы данных

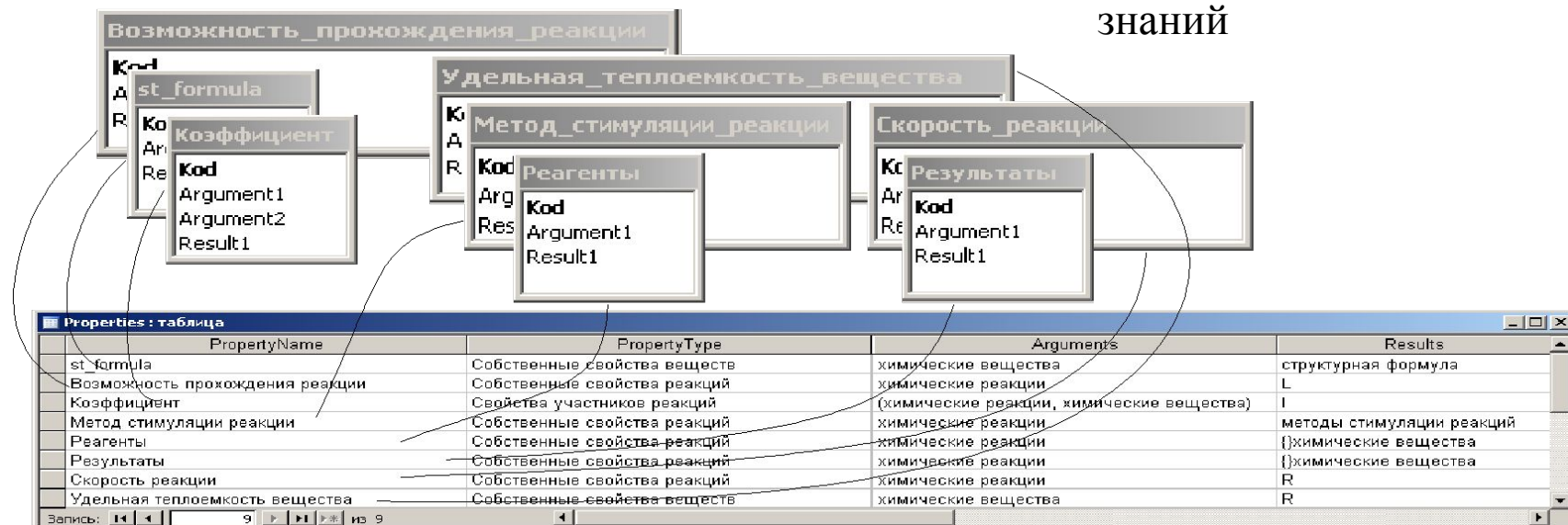
Соответствия определения термина и таблицы базы данных



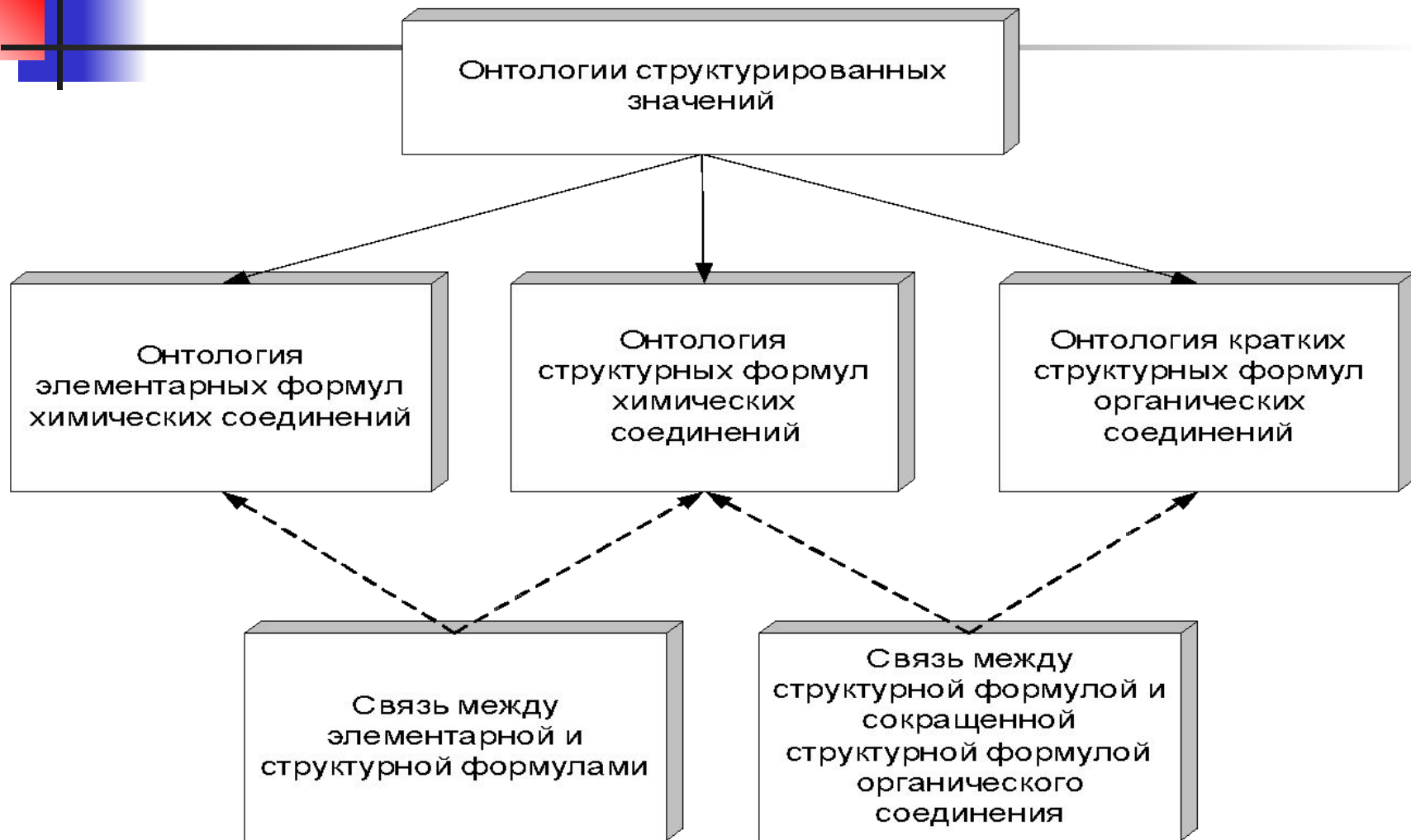
Фрагмент онтологии раздела



Пример определения схемы базы данных для хранения структурированной части базы знаний



Примеры связанных структурированных значений



Примеры специализированных редакторов

Редактор кратких структурных формул

Файл Редактировать Настройки Выполнить Помощь

Сложные функциональные группы

OH	NH	SH	NO
NO ₂	NH ₂	SO ₂ OH	SO ₃

Выберите название соединения, структурную формулу которого необходимо задать

Периодическая таблица элементов Менделеева

период	a I b	a II b	a III b	a IV b	a V b	a VI b	a VII b	a	VIII	b
1	H									He
2	Li	Be	B	C	N	O	F			Ne
3	Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl			Ar
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni
	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br			Kr
	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	
	Cd	In	Sn	Sb	Te	I				Xe
	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	
	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At				Rn
7	Fr	Ra	Ac	Db	Lr	Rf	Bh	Hn	Mt	
	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Th	Dy	Ho
	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es

Группировка: невозможно поставить элемент. Валентность превышена

Принять Отмена

FrmAddOrgSub

Введите название органического соединения

Проверить

Определите класс органического соединения, выбрав его из списка

Введите элементарную формулу соединения для этого нажмите на кнопку "Задать формулу"

Очистить формулу H:O

Задать формулу

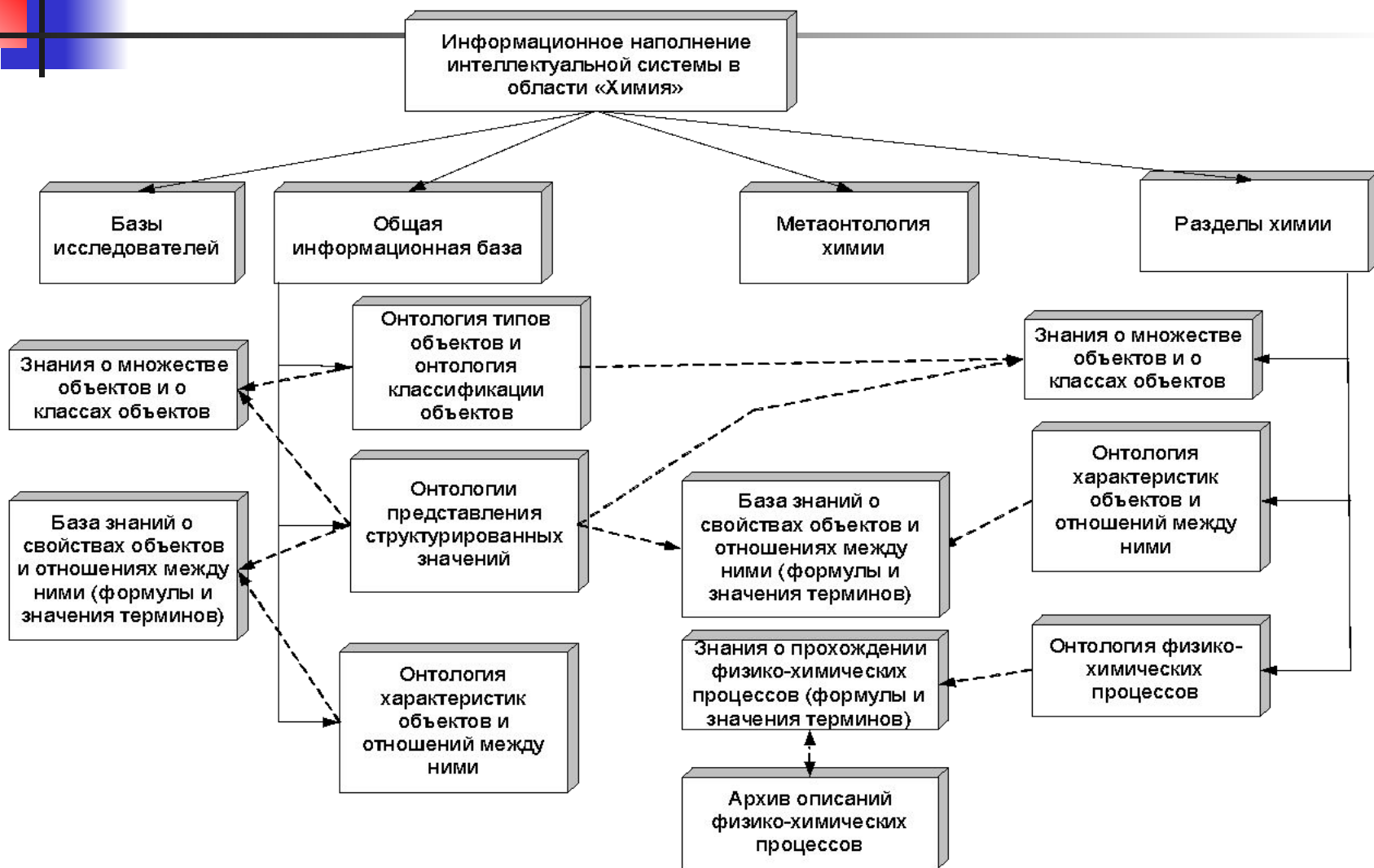
Введите сокращённую структурную формулу соединения для этого нажмите на кнопку "Задать структурную формулу"

Задать структурную формулу

Периодическая таблица элементов Менделеева

период	a I b	a II b	a III b	a IV b	a V b	a VI b	a VII b	a	VIII	b
1	H									He
2	Li	Be	B	C	N	O	F			Ne
3	Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl			Ar
4	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni
	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br			Kr
5	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd
	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I			Xe
6	Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt
	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At			Rn
7	Fr	Ra	Ac	Db	Lr	Rf	Bh	Hn	Mt	
	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Th	Dy	Ho
	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es

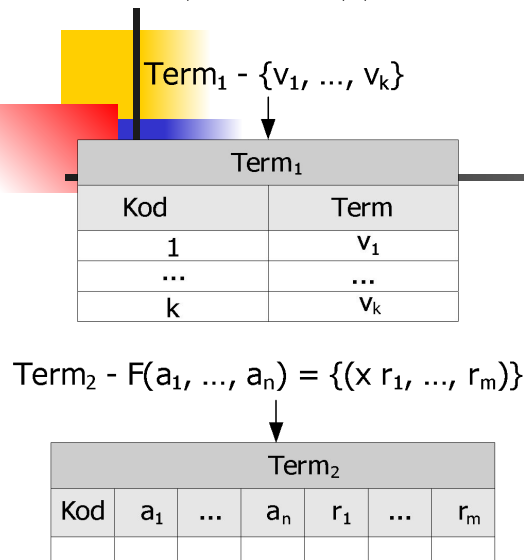
Структура информационного наполнения



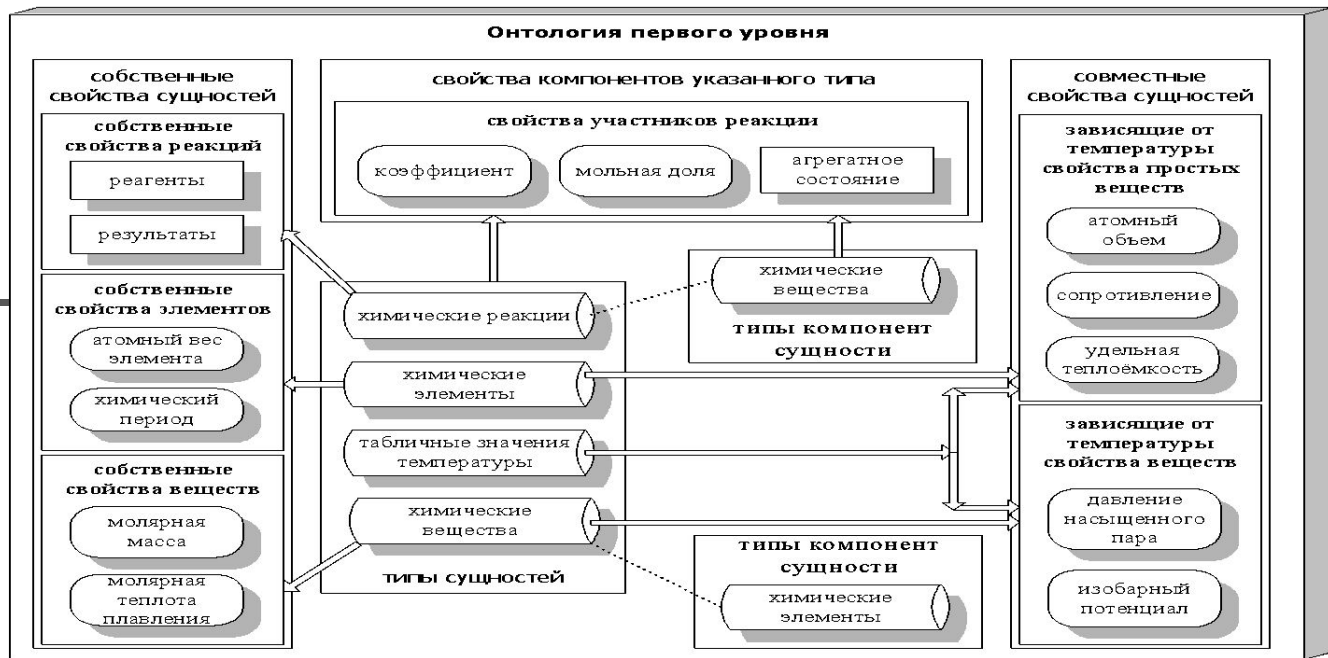


4. «Неструктурированные» знания

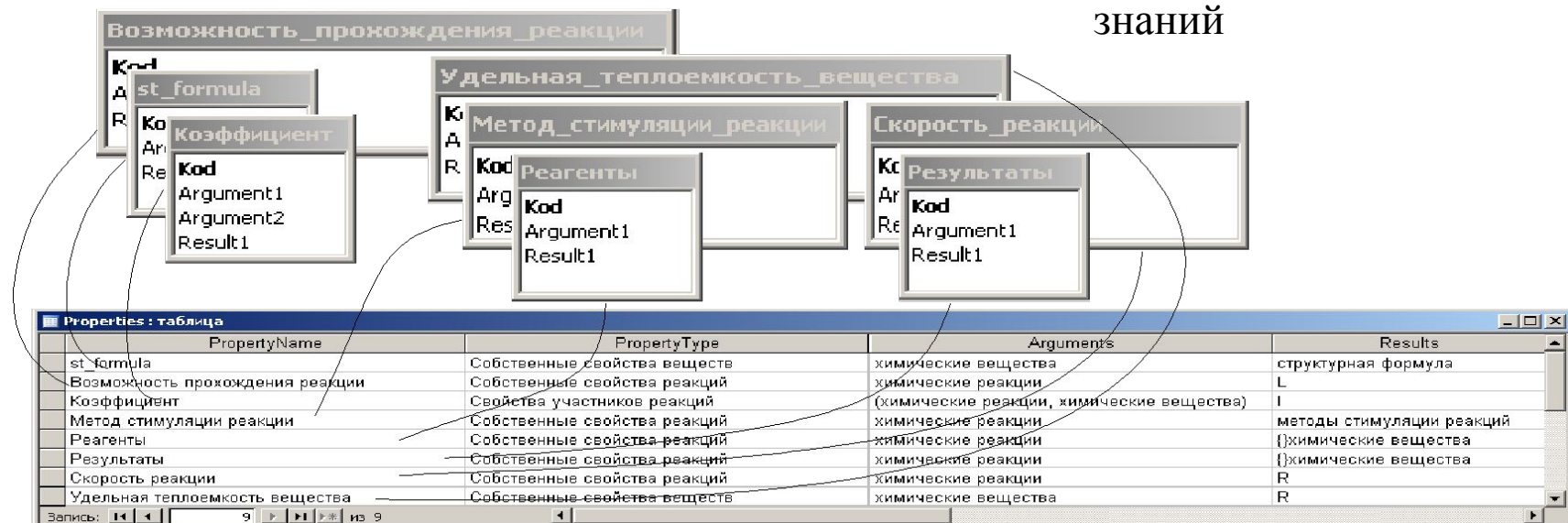
Соответствия определения термина и таблицы базы данных



Фрагмент онтологии раздела



Пример определения схемы базы данных для хранения структурированной части базы знаний



Знания предметной области,

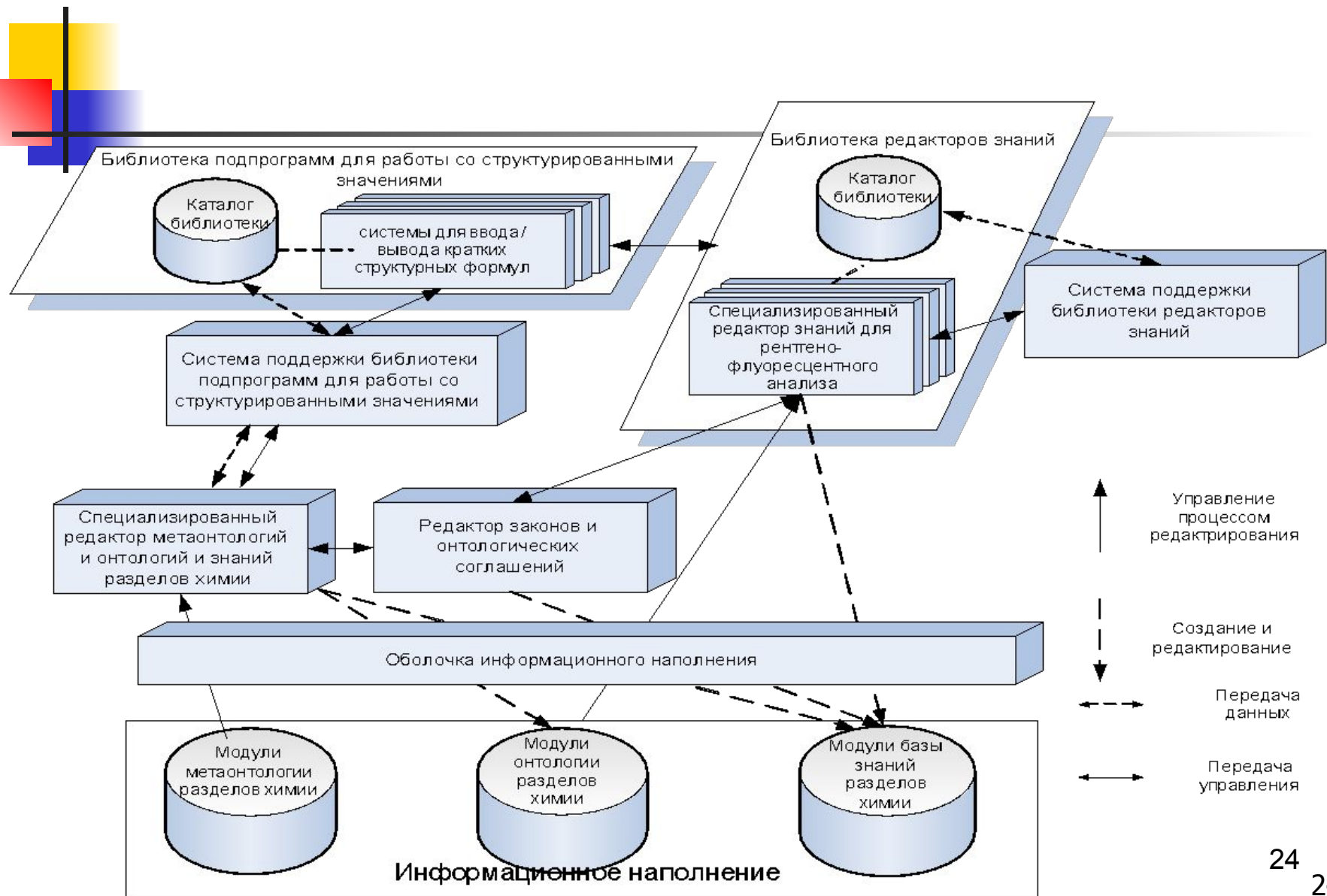
представленные в виде утверждений

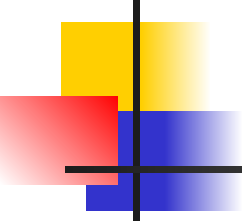
изменения количеств веществ двух участников реакции процесса (реагентов и результатов) связаны через стехиометрические коэффициенты уравнения химической реакции. Они имеют один знак, если оба участника принадлежат одной стороне уравнения, и разные знаки, если принадлежат противоположным сторонам уравнения

(τ : [1, число шагов процесса]) (f : реакции процесса(τ)) (i : Реагенты(f) \cup Результаты(f)) (j : {(j' : Реагенты(f) \cup Результаты(f)) $j' \neq i$ }) полученное количество(τ, f, i) / Стехиометрический коэффициент(f, i) = полученное количество(τ, f, j) / Стехиометрический коэффициент(f, j) * / ($i \in \text{Реагенты}(f) \ \& \ i \in \text{Реагенты}(f) \ \vee \ i \in \text{Результаты}(f) \ \& \ i \in \text{Результаты}(f) \Rightarrow 1$), ($i \in \text{Реагенты}(f) \ \& \ i \in \text{Результаты}(f) \ \vee \ i \in \text{Результаты}(f) \ \& \ i \in \text{Реагенты}(f) \Rightarrow -1$) /)

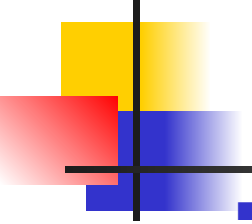
- изменение энтальпии системы происходит за счет реакций (τ : [1, число шагов процесса]) изменение энтальпии(τ) = (\sum (f : реакции процесса(τ)) изменение энтальпии(τ, f))
- изменение энтропии системы происходит за счет реакций (τ : [1, число шагов процесса]) изменение энтропии(τ) = (\sum (f : реакции процесса(τ)) изменение энтропии(τ, f))

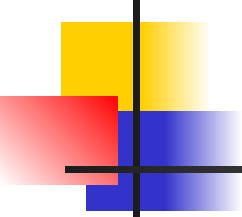
Состав редакторов информационного наполнения

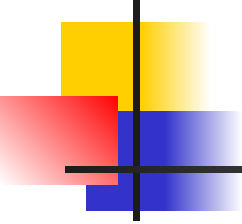


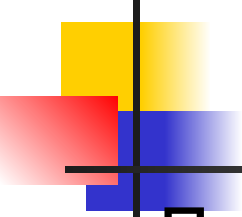


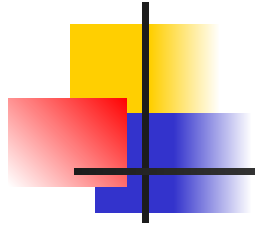
5. Управление информационными ресурсами

- 
- При создании новой онтологии представления структурированных значений определяются также онтологические соглашения, которым должны удовлетворять вводимые значения
 - Для пары связанных структурированных значений определяются онтологические соглашения, задающие связи между ними
 - Мониторинг декларативной части интеллектуальных систем (на основании описания структурных свойств и их дефектов)
 - Все знания, записанные в виде формул, не должны противоречить описанию свойств физико-химических процессов, хранящихся в архивах, и наоборот

- 
-
- Каждой онтологии представления структурированных значений соответствует свой специализированный редактор, который должен поддерживать принятый в предметной области способ представления информации

- 
-
- Вычисление значений одних терминов с использованием других; вычисление должно производиться при задании значений свойств объектов и отношений между ними, имена которых используются в соглашениях

- 
-
- Перенос информации из базы исследователя в общую базу. Переносимая информация должна согласовываться с тем что уже хранится в общем ресурсе
 - Коллективное формирование общих информационных ресурсов



6. Решатели прикладных задач и их разработка на основе ОНТОЛОГИИ

Классы задач определения путей синтеза соединений

определение пути
синтеза соединения

входные
параметры

выходные
параметры

название
органического
соединения
(Name_Compound)

сокращённая
структурная
формула
органического
соединения
(Short_Structural_Formula)

путь синтеза
(Process)

дополнительные
параметры

соединение
первого
шага синтеза
(First Sub)

соединения,
которые
должны
принимать
участие в
процессе
синтеза
(SubsWill)

класс
соединения
первого шага
синтеза
(FirstClass)

соединения,
которые могут
принимать
участие в
процессе
синтеза
(SubsCould)

классы
соединений,
представители
которых могут
принимать
участие в
процессе синтеза
(ClassCould)

классы
соединений,
представители
которых должны
принимать
участие в
процессе синтеза
(ClassWill)

Термины, используемые при постановках задач

Сорт Name Compound: органические соединения

~~Сорт FirstSub: органические соединения~~

Сорт Short Structural Formula: возможные структурные формулы

Сорт SubsCould: {} органические соединения

Сорт Process: $\{(v: (\times I[1, \infty), \text{seq химические реакции}))$

$$\text{length}(\pi(2, v)) = \pi(1, v) - 1\}$$

Сорт SubsWill: {} органические соединения

Сорт FirstClass: классы веществ по функциональным группам

Сорт ClassCould: {} классы веществ по функциональным группам

Сорт ClassWill: {} классы веществ по функциональным группам

Связь терминов, используемых при постановках задач, с терминами онтологии предметной области

Name Compound \in вещества процесса(число шагов процесса)

$(\exists (v: \text{вещества процесса(число шагов процесса)}) \text{Short_Structural_Formula} = \text{сокращенная структурная формула}(v))$

$\pi(1, \text{Process}) = \text{число шагов процесса}; (v: I[1, \text{число шагов процесса}-1]) \pi(v, \pi(2, \text{Process})) = \text{реакции процесса}(v)$

FirstSub \in вещества процесса(1); FirstClass $\in \{(v: \text{органические соединения} \cap \text{вещества процесса}(1)) \text{класс вещества по функциональной группе}(v)\}$;

$\text{вещества процесса}(1) \cap \text{органические соединения} \neq \emptyset \Rightarrow (\{(v: (\text{вещества процесса}(1) \cap \text{органические соединения})) \text{класс вещества по функциональной группе}(v)\} \cap \text{ClassCould} \neq \emptyset); (v: I[2, \text{число шагов процесса}-1]) \{(v1: \text{дополнительные вещества}(v) \cap \text{органические соединения}) \text{класс вещества по функциональной группе}(v1)\} \cap \text{ClassCould} \neq \emptyset)$

$\text{вещества процесса}(1) \cap \text{органические соединения} \neq \emptyset \Rightarrow (\text{вещества процесса}(1) \cap \text{органические соединения}) \subseteq \text{SubsCould}; (v: I[2, \text{число шагов процесса}-1]) \text{дополнительные вещества}(v) \cap \text{органические соединения} \subseteq \text{SubsCould}$

$\text{вещества процесса}(1) \cap \text{органические соединения} \neq \emptyset \Rightarrow \text{SubsWill} \cap \text{вещества процесса}(1) \neq \emptyset; (v: I[2, \text{число шагов процесса}-1]) \text{органические соединения} \cap \text{дополнительные вещества}(v) \subseteq \text{SubsWill}; \text{SubsWill} = (\text{вещества процесса}(1) \cap \text{органические соединения}) \cup (\cup (v: I[2, \text{число шагов процесса}-1]) (\text{дополнительные вещества}(v) \cap \text{органические соединения}))$

$\{(v: \text{вещества процесса}(1) \cap \text{органические соединения}) \text{класс вещества по функциональной группе}(v)\} \cap \text{ClassWill} \neq \emptyset; (v: I[2, \text{число шагов процесса}-1]) \{(v1: \text{органические соединения} \cap \text{дополнительные вещества}(v)) \text{класс вещества по функциональной группе}(v)\} \cap \text{ClassWill} \neq \emptyset); \text{ClassWill} \subseteq \{(v: (\text{вещества процесса}(1) \cap \text{органические соединения}) \text{класс вещества по функциональной группе}(v)) \cup (\cup (v: I[2, \text{число шагов процесса}-1]) \{(v1: (\text{дополнительные вещества}(v) \cap \text{органические соединения}) \text{класс вещества по функциональной группе}(v1)\})\}$

Пример метода определения пути синтеза соединения

Начальное состояние вывода

реакции процесса(1) $\in \{(v: \text{химические реакции}) \text{ FirstSub} \in \text{реагенты}(v) \ \& \ \{(v1: \text{органические соединения} \cap \text{реагенты}(v) \text{ класс вещества по функциональной группе}(v1)) \cap \text{ClassWill} \neq \emptyset\}$

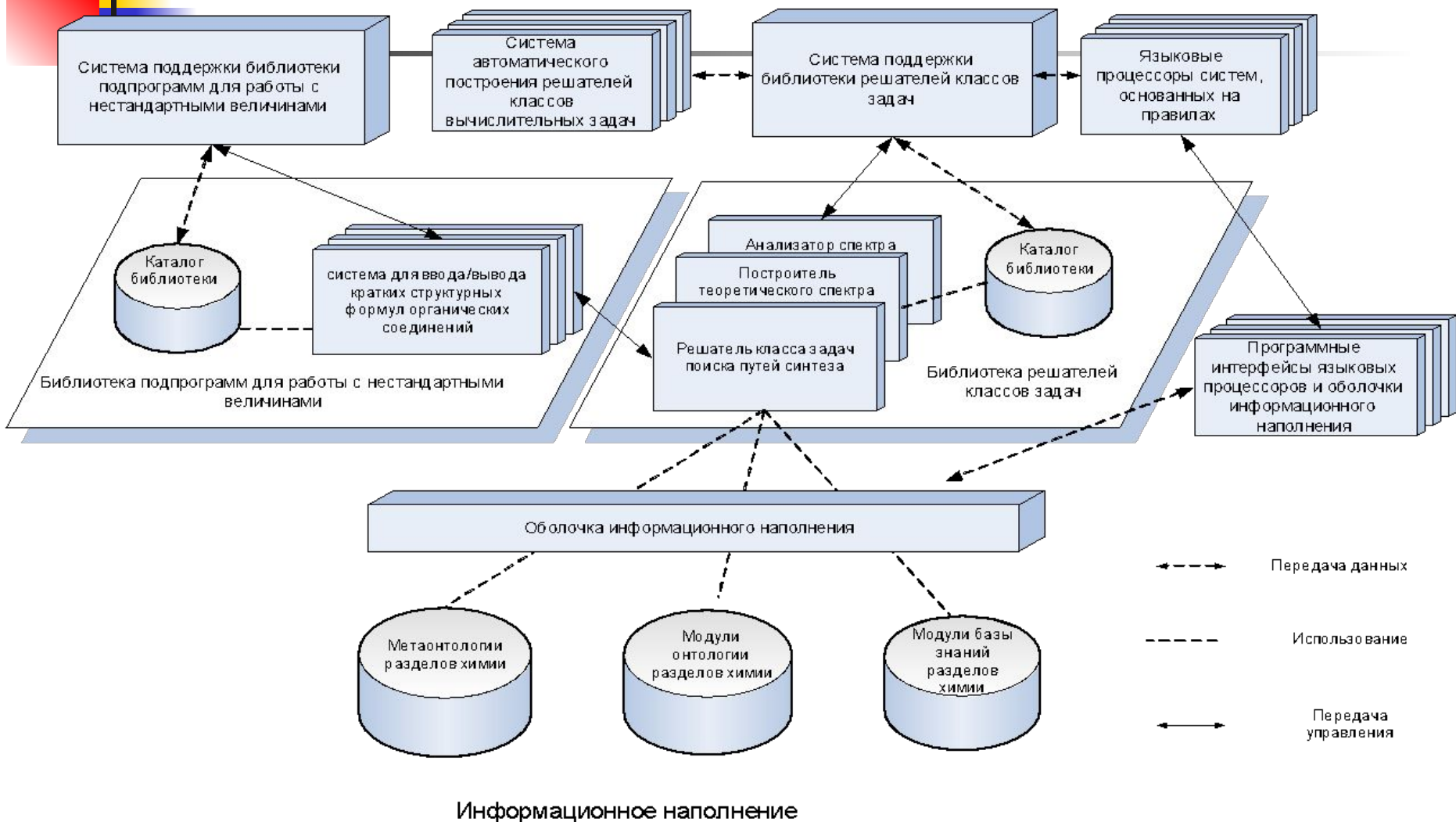
Правило завершения вывода

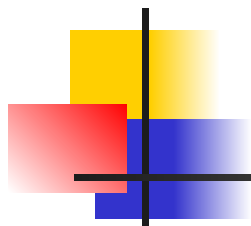
реакции процесса(число шагов процесса-1) $\in \{(v: \text{химические реакции}) \text{ Name_Compound} \in \text{результаты}(v)\}$

Правила формирования очередного состояния процесса

- $\{(v1: \text{дополнительные вещества(число шагов процесса-1)} \cap \text{органические соединения}) \text{ класс вещества по функциональной группе}(v1)\} \cap \text{ClassWill} = (\text{ClassWill} \setminus (\cup(v2: I[2, \text{число шагов процесса-2}]) \{(v3: \text{дополнительные вещества}(v2)) \text{ класс вещества по функциональной группе}(v3)\})) \setminus \{(v4: \text{вещества процесса}(1)) \text{ класс вещества по функциональной группе}(v4)\}) \ \&$*
- $\{(v1: \text{дополнительные вещества}(2) \cap \text{органические соединения}) \text{ класс вещества по функциональной группе}(v1)\} \supseteq (\text{ClassWill} \setminus \{(v2: \text{вещества процесса}(1) \text{ класс вещества по функциональной группе}(v2)\}) \cap \{(v3: \text{реагенты(реакции процесса}(2)) \text{ класс вещества по функциональной группе}(v3)\}) \ \&$*
- $(\ \& \ (v1: I[2, \text{число шагов процесса-2}]) \text{ реакции процесса}(v1) \in \{(v: \text{химические реакции}) \text{ реагенты}(v) \subseteq \text{результаты(реакции процесса}(v1-1)) \cup \text{дополнительные вещества}(v1)) \ \&$*
- $\{(v2: \text{дополнительные вещества}(v1) \cap \text{органические соединения} \text{ класс вещества по функциональной группе}(v2)\} = (\text{ClassWill} \setminus \{(v3: \text{дополнительные вещества}(v1-1)) \text{ класс вещества по функциональной группе}(v2)\}) \cap \{(v4: \text{реагенты(реакции процесса}(v1)) \text{ класс вещества по функциональной группе}(v2)\})$*

Программные компоненты интеллектуальной системы в области химии





Спасибо за внимание

iartemeva@mail.ru