

ПРИКЛАДНЫЕ ОНТОЛОГИИ ПРОЕКТИРОВАНИЯ

УДК 519.711.3

DOI: 10.18287/2223-9537-2020-10-3-307-326

Особенности применения онтологического подхода в разработке интеллектуальных систем для некоторых задач химии¹**К.А. Гуляева, И.Л. Артемьева***Дальневосточный федеральный университет, Владивосток, Россия***Аннотация**

Описаны особенности применения онтологического подхода, основанного на математическом моделировании предметных областей с помощью прикладных логических теорий, в разработке интеллектуальных систем. Построен базовый тезаурус разработки моделей профессиональной деятельности. Приведены все определения терминов, входящих в тезаурус. На примере эволюционирования некоторых понятий химии («атомная масса» и др.) на протяжении истории развития науки показано, что в наукоёмких областях изменяются не только знания, но и онтология. При разработке интеллектуальных систем необходимо предусматривать возможности изменения знаний и метазнаний для продления жизненного цикла систем и их поддержки в актуальном состоянии. Поэтому создание интеллектуальных систем должно предваряться разработкой спецификации предметной области. Приведено описание алгоритма разработки спецификации предметной области, состоящего из трёх шагов: онтолого-ориентированного анализа предметной области, включая неформальную постановку задачи, анализ понятий, величин, ситуаций; синтеза модели предметной области; проверки адекватности модели предметной области. Показано применение алгоритма к решению конкретной задачи интеллектуальной деятельности, относящейся к задачам классификации. Новым является решение задачи классификации химических элементов для раскраски ячеек таблицы Д.И. Менделеева, отражающей особенности изотопного состава элементов и значений атомных масс. Представлены основные этапы построения модели онтологии рассмотренной предметной области. Приведенная модель включает онтологию знаний и онтологию действительности. Детально описаны ключевые шаги алгоритма разработки спецификации предметной области.

Ключевые слова: онтология, прикладная логическая теория, модель онтологии, изотопный состав, атомная масса, системы понятий.

Цитирование: Гуляева, К.А. Особенности применения онтологического подхода в разработке интеллектуальных систем для некоторых задач химии / К.А. Гуляева, И.Л. Артемьева // Онтология проектирования. – 2020. – Т.10, №3(37). – С.307-326. – DOI: 10.18287/2223-9537-2020-10-3-307-326.

Введение

В сложно-структурированных наукоёмких предметных областях (ПрО) могут меняться не только знания, но и сама онтология, или «явная спецификация концептуализации» [1], что в итоге может повлиять и на изменение классов прикладных задач [2]. Необходимо учитывать этот факт при разработке интеллектуальных систем (ИС).

Изменения в онтологии, требующие изменений её модели, чаще всего связаны с уточнением знаний о мире или с выработкой определённых соглашений, стандартов и практик

¹ Посвящается 80-летию профессора А.С. Клещёва

большим числом представителей научного сообщества. С первого международного съезда химиков, проходившего в г. Карлсруэ (Германия) в 1860 г., на котором были утверждены положения атомно-молекулярной теории, даны определения *атома* и *молекулы*, а также выработаны предпосылки Периодического закона, произошли существенные изменения в знаниях. Для иллюстрации в таблице 1 приводятся оригинальные и современные определения терминов «Атом» и «Молекула». Современные определения – это определения из «Золотой книги» ИЮПАК² [3], оригинальные – это известные определения Канниццаро.

Таблица 1 – Эволюция определений терминов «Атом» и «Молекула»

Термин	Определение Канниццаро (1860 г.)	Современное определение из «Золотой книги» ИЮПАК [3]
<i>Атом</i>	Наименьшая частица элемента в химических соединениях.	Наименьшая частица, которая ещё характеризует химический элемент. Она состоит из положительно заряженного ядра (Z – количество протонов и e – элементарный заряд), несущего почти всю его массу (более 99.9%), и Z электронов, определяющих его размер.
<i>Молекула</i>	Наименьшая частица вещества, обладающая его химическими свойствами.	Электрически нейтральная частица, состоящая из более чем одного атома ($n > 1$). Определяя строго, молекуле, в которой $n > 1$, должно соответствовать углубление на поверхности потенциальной энергии, способное вместить хотя бы одно колебательное состояние.

Современные определения более строгие и учитывают достижения физической и квантовой химии. В связи с тем, что уточнения понятий, названий понятий, их связей с другими понятиями в научных областях происходят постоянно, ИС должны предусматривать возможности изменения как моделей знаний, так и моделей онтологий ПрО для продления жизненных циклов ИС.

Актуальными являются вопросы создания спецификаций ПрО, которые могут использоваться в качестве информационных компонент для ИС. Разработку ИС, в которых предусмотрена возможность изменения как модели знаний, так и модели онтологии, необходимо предварять онтолого-ориентированным анализом, цель которого – найти адекватную концептуализацию ПрО. Далее строится онтология ПрО и система знаний, проверяется адекватность модели объекту моделирования. Ключевая задача – найти наиболее точное описание действительности данной ПрО [4].

В связи с тем, что разработка моделей профессиональной деятельности на основе онтологического подхода сопряжена со специфическим понятийным аппаратом методологии, были разработаны базовый тезаурус ПрО и алгоритм, состоящий из трёх шагов. На первом шаге проводится онтолого-ориентированный анализа ПрО, на втором – синтез модели, на третьем – проверка адекватности модели объекту моделирования.

Для демонстрации работы данного алгоритма решена практическая задача из класса задач интеллектуальной деятельности подкласса задач классификации [5]. Задача состоит в том, чтобы раскрасить 118 ячеек периодической таблицы химических элементов Д.И. Менделеева таким образом, чтобы были учтены особенности изотопного состава элементов и значения атомных масс. Решение данной задачи состоит в определении для каждого химического элемента его класса на основании значений указанных признаков. Цвет ячейки с данным химическим элементом должен совпадать с цветом ячеек класса, которому этот элемент принадлежит. Эта задача может быть рассмотрена как подзадача, решаемая ИС в ПрО химии.

² Международный союз теоретической и прикладной химии - International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC) International Union of Pure and Applied Chemistry Compendium of Chemical Terminology Gold Book Version 2.3.3 2014-02-24. - <http://goldbook.iupac.org/files/pdf/goldbook.pdf>.

1 Базовый тезаурус разработки моделей профессиональной деятельности

Онтологический подход к разработке математических моделей профессиональной деятельности (модели ПрО, модели прикладных задач и др.) был разработан профессором А.С. Клещевым и развит в работах его учеников [4-8]. Разработанный базовый тезаурус снабжён более подробным описанием отдельных терминов, а также некоторыми примерами из практики (большая часть которых относится к ПрО химии). Термины приведены не в алфавитном порядке, а в порядке увеличения смысловой нагрузки (включения одних терминов в состав других).

Информация³ – это идеи, которые существуют в сознании человека (это объект идеального мира).

Сообщение – это адекватная *модель информации* (это объект или процесс материального мира).

Объект моделирования – это любой объект, явление или система, существующие в материальном мире или в сознании человека, данные этому человеку как совокупность идей об этом объекте и обеспечивающие выполнение *критерия моделирования*.

Модель – это любой **другой** объект или система, существующие в материальном мире или в сознании человека, данные этому человеку как совокупность идей об этом объекте и связанные с *объектом моделирования* посредством *критерия моделирования*.

Критерий моделирования – это необходимое и достаточное условие становления *модели* (как объекта или системы) моделью *объекта моделирования*, которое заключается в установлении соответствия между *объектом моделирования* и его *моделью*, удовлетворяющего следующим свойствам:

- для *объекта моделирования* выделены существенные свойства;
- установлено однозначное соответствие между существенными свойствами *объекта моделирования* и некоторыми свойствами его *модели*, которые представляют эти существенные свойства в *модели*;
- определено, в каком случае *модель* является адекватной *объекту моделирования*.

Математическая модель – объект математики. Свойства математических моделей всегда толкуются однозначно.

Программа – алгоритм, записанный на языке программирования.

Компьютерная модель – это программа.

Профессиональная деятельность – деятельность человека, состоящая в решении прикладных задач.

Модель профессиональной деятельности – неформальная или формальная *модель*, которая содержит *модель ПрО*, *модели* прикладных задач и методы решения этих задач.

Предметная область (ПрО) – это часть материального мира, которая характеризуется протекающей в ней специфичной *профессиональной деятельностью*. В *ПрО* может быть выделено множество объектов, связанных с *профессиональной деятельностью*. При решении задач происходит переход от объектов *ПрО* к представлению *информации* о них (к *информационным объектам*).

Информационный объект – это *вербальное представление информации* об объекте *ПрО*.

Термин – это слово или словосочетание, имеющее в *ПрО* специальный смысл.

Терминология – это совокупность *терминов* (главная характеристика *ПрО*).

³ *Информация* – сведения (сообщения, данные) независимо от формы их представления. ФЗ от 27.07.2006 (в ред. 2020 г.) «Об информации, информационных технологиях и о защите информации». *Прим.ред.*

Вербальное представление информации (ВПИ) – это некоторое соответствие (таблица) между конечной совокупностью *терминов* и их значений. ВПИ экономично для профессионалов, так как в нём используется только соответствие между обозначениями (*терминами* и значениями). Смысл этих обозначений для профессионалов известен, а для интерпретации непрофессионалами необходимо явное определение смысла как *терминов*, так и значений.

Вербализуемая информация – это информация, которую можно представить сообщением, которое является ВПИ. Некоторая информация i является вербализуемой, если выполнены условия:

- для этой информации существует набор терминов $T = \{t_1, \dots, t_m\}$, $T \neq \emptyset$, $\text{card}(T) < \aleph_0$ и множество V возможных значений этих терминов ($V \neq \emptyset$);
- информация i может быть представлена сообщением, которое есть отображение множества T в множество V .

Элементы множеств T и V имеют прагматику и семантику – профессионалы используют их в определённых контекстах, вкладывают в них определённый смысл и понимают их в этих контекстах. Смысл значения – элемента множества V – определяется посредством его связи с другими значениями: аргументом каких операций и отношений это значение может быть (возможно с другими значениями) и в результате выполнения каких операций над другими значениями оно может быть получено. Смысл терминов из T неявно определён с помощью концептуализации, использующей терминологию T . Смысл терминов из T явно определён с помощью онтологии, представляющей эту концептуализацию.

Величина – это подмножество $V_i \subseteq V$ множества $V = \bigcup_{i=1}^n V_i$ значений терминов. Любое значение, сопоставленное термину, принадлежит некоторой величине. С подмножеством V_i (конкретной величиной) связываются определённые наборы операций и отношений. Каждая величина V_i характеризуется конечным или бесконечным множеством значений, конечной совокупностью функций и операций, обозначаемых специальными терминами и выполняемых над значениями этой величины, а также конечной совокупностью нефункциональных отношений, в которых значения этой величины могут находиться между собой. Каждое значение, сопоставленное термину (это элемент множества V) принадлежит некоторой величине, которая определяет его смысл. Величины могут быть простыми или сложными. С каждой сложной величиной неявно связан конструктор значений этой величины из элементов величин – её компонентов. Выделяются стандартные величины. Набор используемых величин является важным свойством Про, так как он определяет множество математических терминов, используемых для обозначения значений величин, математических операций, функций, отношений. Компьютерной моделью величины является тип данных. Математической моделью величины и типа данных является алгебраическая система.

Стандартные величины – множество величин, наиболее часто используемых в профессиональной деятельности.

Нестандартные величины – сложные величины, для определения которых необходимо задать способ конструирования элементов этих величин. Для этого требуется определить величины-компоненты, элементы которых используются в представлении элементов нестандартной величины, а также определить операции, функции и отношения, применимые к элементам нестандартной величины. В программах нестандартные величины реализованы с помощью классов в объектно-ориентированных языках, а в математических моделях они представлены с помощью многосортных алгебраических систем.

Действительность Про – часть физического мира, которая связана с определённой профессиональной деятельностью в Про и рассматривается как множество всех возможных отдельных ситуаций Про, которые имели место в прошлом, имеют место в настоящем и будут иметь место в будущем [7]. Действительность Про может быть представлена в ви-

де потенциально бесконечного множества не связанных между собой *ситуаций* (предположение о несвязанности *ситуаций* приемлемо локально на протяжении промежутков времени, пока знания не корректируются и когда зависимостью от прошлых *ситуаций* можно пренебречь). *Действительность ПрО* обладает тем свойством, что она не известна полностью, известно лишь конечное подмножество *ситуаций*, образующих *действительность ПрО* и имевших место в прошлом (*информация*, образующая эти *ситуации*, также может быть известна не полностью). Предполагается, что разделение *действительности ПрО* на отдельные *ситуации* – конкретные задачи – в рамках *ПрО* является приемлемым для любой профессиональной деятельности.

Ситуация (ситуация ПрО) – фрагмент *действительности ПрО*, ограниченный в пространстве и времени. Множества объектов и отношений между ними в любой *ситуации* являются конечными множествами. Отдельная *ситуация* соответствует *информации*, которая рассматривается при решении конкретной задачи. При анализе новой *ситуации* может быть использована *информация* об уже проанализированных прошлых *ситуациях* для следующих целей:

- поиска похожих *ситуаций* (поиска прецедентов);
 - корректировки своих знаний в результате накопления опыта.
- Информация* о *ситуации ПрО* может быть представлена посредством *ВПИ*.

Термины для описания ситуаций – множество TS терминов, используемых для *ВПИ* о *ситуациях*. При описании каждой *ситуации действительности ПрО* одному и тому же термину для описания *ситуаций* $t \in TS$ сопоставляется в разных *ситуациях* одно значение (один элемент) конкретной величины. В программе термина *ситуации* сопоставляется значение, принадлежащее определённому типу данных, а в математической модели термина *ситуации* сопоставляется элемент носителя алгебраической системы.

Концептуализация действительности ПрО – это множество всех подразумеваемых отдельных *ситуаций ПрО*, внешнее по отношению к *действительности ПрО*. *Концептуализация действительности ПрО* – это надмножество *действительности ПрО*, а *действительность ПрО*, подмножество *концептуализации действительности ПрО*. Все наблюдавшиеся *ситуации* в прошлом принадлежат *действительности ПрО* и *концептуализации действительности ПрО* (по транзитивности отношения включения множеств). *Концептуализация действительности ПрО* может быть рассмотрена как множество неформальных правил, ограничивающих структуру *действительности ПрО*.

Концептуализация – это объекты, понятия, другие сущности, отношения, определённые между ними – всё, что предполагается существующим в некоторой *ПрО* [1]. Для явного представления *концептуализации* используется *онтология*.

Концептуализация ПрО – это (как правило) бесконечное множество *ВПИ*, поэтому *концептуализация ПрО* не может быть задана их перечислением. Это происходит по причине того, что величины, которым принадлежат значения терминов в *ВПИ*, являются, как правило, бесконечными величинами. В то же время каждый элемент любой *концептуализации ПрО* является отображением с конечной областью определения и поэтому, как конечный объект, может быть определён полностью. *Концептуализация ПрО* характеризуется множеством названий понятий TS и множеством элементов *концептуализации ПрО*.

Элемент концептуализации ПрО – такие *ВПИ*, которые как сообщения несут некоторую *информацию*.

Спецификация – интенциональное определение некоторого (бесконечного) множества на декларативном языке, позволяющее на основании этого описания определить, является эта сущность элементом этого множества или нет.

Онтология – это явная *спецификация концептуализации*. Это такое определение *концептуализации*, которое для каждого *ВПИ* позволяет установить, является оно *элементом концептуализации* или нет. Для этой цели *онтология* определяет смысл *терминов* явно. В качестве первичных (неопределяемых) названий понятий должны использоваться *термины*, в которых описан декларативный язык *спецификации*, на котором *онтология* представлена. Для удобства в качестве первичных названий понятий выступают *термины*, введённые при определении *стандартных* и *нестандартных величин* (вне *онтологии* и вне описания этих величин). В *онтологиях* в качестве первичных названий понятий используются *термины*, связанные с *величинами*. *Величины* могут быть заменены их математическими *моделями*. *Онтология* определяет названия понятий и связи между ними (могут быть заданы в виде *онтологических соглашений*).

Название понятия – это *термин* $t \in T$, где T – множество *терминов* (из определения *вербализуемой информации*).

Основные понятия – понятия, названия которых $t \in TS$ (из определения *концептуализации ПрО*).

Определение названия основного понятия – это *термин*, обозначающий данное понятие в *онтологии*, и *объём* этого понятия.

Объём (экстенционал) понятия – это множество значений некоторой *величины* или её подмножества (данные значения могут быть значениями основных понятий в *элементах концептуализации*).

Вспомогательные понятия (и их названия) – ряд названий понятий, отсутствующих в *концептуализации*, но позволяющих сделать другие определения и *онтологические соглашения* более понятными.

Определение названия вспомогательного понятия – это *термин*, обозначающий данное понятие в *онтологии*, и либо значение этого понятия (конкретное значение некоторой *величины*), либо способ вычисления значения этого понятия по значениям других понятий *онтологии*.

Онтологическое соглашение – некоторое утверждение, содержащее *термины* системы понятий и *термины*, связанные с *величинами*. *Онтологическое соглашение* постулирует связь между названиями понятий *онтологии*, задавая дополнительные (по сравнению с определениями понятий) ограничения на *объёмы понятий*.

Концептуализация, определяемая онтологией – множество всех *элементов концептуализации*, которые соответствуют *онтологии* [8].

Концептуализация действительности, определяемая онтологией – внешнее по отношению к *концептуализации действительности ПрО* множество *ситуаций* (его надмножество).

Модель онтологии – это модель, объектом моделирования которой является *онтология*.

Математическая модель онтологии – это модель, объектом моделирования которой является *онтология*, в которой *величины* заменены их *математическими моделями* – алгебраическими системами. *Математическая модель онтологии* описана в *математических терминах*.

Компьютерная модель онтологии – это модель, объектом моделирования которой является *онтология*, в которой *величины* заменены их *компьютерными моделями* – типами данных.

Онтология действительности ПрО – *онтология*, которая задаёт явную *спецификацию концептуализации действительности ПрО*. *Онтология действительности ПрО* определяет понятия, используемые для описания действительности ПрО, *термины* для обозначения данных понятий, *объёмы понятий*, которые обозначены *терминами*, и *онтологические со-*

глашения, задающие ограничения целостности *ситуаций действительности ПрО*. *Онтология действительности ПрО* определяет структуру представления информации о *ситуациях действительности ПрО*. *Онтология действительности ПрО* используется в программах для задания входных данных и результатов решения задач при разработке пользовательского интерфейса [2].

Знания ПрО – это знания о *действительности ПрО*. *Знания ПрО* описывают свойства объектов, справедливые для всех *ситуаций ПрО*. *Знания ПрО* традиционно представляются в виде утверждений на некотором языке. В записи этих утверждений используются *термины онтологии действительности ПрО*. По форме (но не по содержанию) утверждения *знаний ПрО* ничем не отличаются от *онтологических соглашений*. *Онтология действительности ПрО* явно представляет *концептуализацию действительности ПрО*, а *знания ПрО* определяют подмножество *концептуализации действительности ПрО*. *Знания ПрО* задают дополнительные (по сравнению с *онтологией действительности ПрО*) ограничения на множество значений *терминов онтологии действительности ПрО*. Все *ситуации ПрО* согласуются со *знаниями ПрО*.

Система знаний ПрО – множество утверждений *знаний ПрО*. В *ПрО* существуют такие и только такие *ситуации*, относительно которых справедливы все утверждения, входящие в *систему знаний ПрО*.

Система знаний называется **системой знаний, адекватной действительности ПрО**, если множество *ситуаций действительности ПрО* является подмножеством *ситуаций*, определяемых данной *системой знаний ПрО*.

Система знаний называется **точной системой знаний**, если множество *ситуаций действительности ПрО* совпадает с множеством *ситуаций*, определяемых *системой знаний ПрО*.

Вербальное представление знаний (ВПЗ) – это ВПИ для *знаний ПрО*. В *ВПЗ* *знания ПрО* представляются в виде отображения конечного множества *терминов* на множество значений [2]. *Термины ВПЗ* задают названия свойств объектов *ПрО* и названия функциональных и нефункциональных отношений между объектами *ПрО*. Если *знания ПрО* представлены вербально, то *знания ПрО* структурированы. Структуру *знаний ПрО* определяет *онтология знаний*.

Например, в *ВПЗ* термину «Химические элементы» соответствует множество названий химических элементов, а *термин* «Реагенты» сопоставляет реакциям множества их реагентов. *ВПЗ* позволяет хранить некоторые *знания* химии в базах данных (например, MOLBASE⁴, Reaxys⁵, PubChem⁶, CAS REGISTRY⁷ и др.).

Концептуализация знаний – это множество всех возможных *ВПЗ*.

Онтология знаний – *онтология*, которая задаёт явную *спецификацию концептуализации знаний*. *Онтология знаний* определяет названия понятий, используемых для представления *знаний ПрО*, и связи между этими понятиями (ограничения целостности *знаний*). *Онтология знаний* используется при разработке редакторов *знаний*.

Онтологические соглашения, задающие связи двух онтологий (*связи между онтологией знаний и онтологией действительности ПрО*) – это *онтологические соглашения*, задающие связи между *терминами онтологии знаний* и *онтологии действительности ПрО*. Эта дополнительная группа *онтологических соглашений* вводится для более точного описания

⁴ MOLBASE. – <http://www.molbase.com/>.

⁵ Reaxys. – <https://www.elsevierscience.ru/products/reaxys/>.

⁶ PubChem. – <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>.

⁷ CAS REGISTRY. – <https://www.cas.org/support/documentation/chemical-substances>.

свойств *ситуаций* (так как *знания ПрО* описывают свойства этих *ситуаций ПрО*) и используется при разработке методов решения классов задач и *программ* для их решения.

Модель знаний – это модель, объектом моделирования которой являются *знания ПрО*. Это конечная совокупность утверждений, записанных на естественном языке и в виде формализованных утверждений с использованием системы математических символов (степень формализации зависит от типа *профессиональной деятельности*).

Онтология ПрО может быть описана следующим образом [2].

- Для *ПрО*, в которых **знания не структурированы**:
 - *Онтология ПрО* совпадает с *онтологией действительности ПрО*;
 - Множество *онтологических соглашений* совпадает с множеством ограничений целостности действительности;
 - *Знания ПрО* представлены множеством утверждений, в *моделях знания ПрО* представлены в виде множества логических формул.
 - *Концептуализация ПрО* совпадает с *концептуализацией действительности ПрО*.
- Для *ПрО*, в которых все **знания структурированы**:
 - *Онтология ПрО* состоит из трёх компонент: *онтологии действительности ПрО*, *онтологии знаний* и описания взаимосвязей между ними;
 - Множество *онтологических соглашений* образует три подмножества: ограничения целостности действительности, ограничения целостности знаний, утверждения для описания взаимосвязей между действительностью и знаниями;
 - *Знания ПрО* представлены множеством значений *терминов* онтологии знаний. В *моделях знания* представлены в виде множества пар <*термин онтологии знаний*, значение термина>;
 - *Концептуализация ПрО* – это отношение между *концептуализацией знаний* и *концептуализацией действительности ПрО*.
- Для *ПрО*, в которых **часть знаний имеет структуру**:
 - *Онтология ПрО* состоит из трёх компонент: *онтологии действительности ПрО*, *онтологии знаний* и описания взаимосвязей между ними;
 - Множество *онтологических соглашений* образуют три подмножества: ограничения целостности действительности, ограничения целостности знаний, утверждения для описания взаимосвязей между действительностью и знаниями;
 - *Знания ПрО* представлены множеством утверждений (в *моделях знания* представлены в виде множества логических формул) и множеством значений *терминов онтологии знаний* (в *моделях знания* представлены в виде множества пар <*термин онтологии знаний*, значение термина>);
 - *Концептуализация ПрО* – это отношение между *концептуализацией знаний* и *концептуализацией действительности ПрО*.

Формулировки некоторых условий, необходимых в разработке моделей профессиональной деятельности на основе онтологического подхода, приведены в [8]:

- условия адекватности: математизации профессиональной деятельности, онтологии исходной концептуализации, концептуализации для совокупности информации, системы знаний для совокупности информации, онтологии *ПрО* концептуализации *ПрО*;
- критерий адекватности модели *ПрО*.

2 Алгоритм разработки спецификации предметной области

Алгоритм разработки спецификации *ПрО* включает в себя три этапа: онтолого-ориентированный анализ *ПрО*, синтез модели *ПрО* и проверку адекватности модели *ПрО*.

2.1 Онтолого-ориентированный анализ ПрО

На данном этапе происходит поиск концептуализации действительности. Как правило, аналитик работает с экспертом ПрО. Формируется полный список терминов для представления действительности и описания ситуаций действительности в данных терминах. Списки терминов, значений и ситуаций могут периодически пополняться. Смысл используемых терминов, их значений и представления ситуаций посредством этих терминов фиксируются аналитиком. Все значения должны быть отнесены к некоторой стандартной или нестандартной величине [8]. Признак завершения этапа анализа – все ситуации из списка выделенных ситуаций представлены как элементы концептуализации, величины выделены, смысл всех терминов предельно понятен аналитику, как и принципы представления ситуаций посредством этих терминов. Адекватная концептуализация считается найденной.

2.2 Синтез модели предметной области

Для найденной на первом этапе концептуализации строится адекватная ей онтология действительности. Итеративным образом формулируются онтологические соглашения.

Система знаний строится в той же форме, что и система онтологических соглашений. Осуществляется проверка, что каждая ситуация, представленная как элемент концептуализации, согласуется с системой знаний. Может быть составлен список ситуаций, которые входят в концептуализацию, но не входят в действительность. Система знаний уточняется.

2.3 Проверка адекватности модели ПрО

Для вывода об адекватности математизации профессиональной деятельности следующие утверждения обращаются в тавтологии (в листинге программы они называются *условиями адекватности математизации профессиональной деятельности*).

- Все утверждения модели онтологии и модели знаний обращаются в истину для всех моделей ситуаций.
- Модель адекватна ПрО, для которой она построена \Leftrightarrow модель действительности ПрО адекватно представляет действительность ПрО, то есть: $(\forall$ ситуации действительности \exists адекватная ей модель ситуации, входящая в модель действительности) & $(\forall$ модель ситуации, входящая в модель действительности, адекватна некоторой ситуации действительности этой ПрО).
- Модель ситуации адекватна некоторой ситуации действительности \Leftrightarrow вербальное представление этой ситуации совпадает с моделью прикладной логической теории, моделирующей эту ПрО.
- При любом нарушении тождественной истинности данных утверждений – вернуться к п. 2.1, иначе делается вывод об адекватной математизации профессиональной деятельности.

2.4 Программа реализации алгоритма на псевдоязыке

//Листинг алгоритма разработки спецификации ПрО

//Типы данных не указаны у аргументов, относящихся к внутреннему миру человека,

//например, информация в сознании эксперта ПрО, концептуализация

//главная функция – разработать Спецификацию ПрО()

//синтаксис подобен разработанному Ершовым А.П. [9].

алг Шаг1(арг инфВСознанЭкспертаПрО, рез таб Т)

| дано

| надо Т = полный список терминов, используемых для представления действительности

```
нач
| Т := Сформировать Т(инфВСознанЭкспертаПрО)
| Т
кон
```

алг Шаг2(арг инфВСознанЭкспертаПрО, арг таб Т, рез таб СитуацД)

```
| дано
| надо СитуацД = представительный список описаний ситуаций действительности в терминах Т
нач
| СитуацД := Сформировать СитуацД(инфВСознанЭкспертаПрО, Т)
| СитуацД
кон
```

алг Шаг3(арг инфВСознанЭкспертаПрО, арг таб Т, арг таб СитуацД, рез таб ИпользЗначения)

```
| дано
| надо ИпользЗначения = список уже использованных значений
нач таб ЧОтобр = множество частичных отображений уже выделенных терминов Т
в множество некоторых значений
| ЧОтобр := Сформировать ЧОтобр(инфВСознанЭкспертаПрО, Т, СитуацД)
| ИпользЗначения := Сформировать ИпользЗначения(ЧОтобр)
| ИпользЗначения
кон
```

алг Шаг4(арг инфВСознанЭкспертаПрО, арг таб ипользЗнач, рез таб ИпользВеличины)

```
| дано
| надо ИпользВеличины = список всех использованных величин
нач таб нестандартВеличины = множество всех нестандартных величин
| ИпользВеличины := Определить список всех использованных
величин(инфВСознанЭкспертаПрО, ипользЗнач)
| ИпользВеличины := ИпользВеличины ∪
нестандартВеличины(инфВСознанЭкспертаПрО, ипользЗнач)
| ИпользВеличины
кон
```

алг Этап1(арг инфВСознанЭкспертаПрО, рез адекватКонцептуализац)

```
| дано
| надо адекватКонцептуализац
нач таб списокТерм1, таб списокСитуацДейств1, таб списокВеличин1
| нц
| | списокТерм1 := Шаг1(инфВСознанЭкспертаПрО)
| | списокСитуацДейств1 := Шаг2(инфВСознанЭкспертаПрО, списокТерм1)
| | списокВеличин1 := Шаг4(инфВСознанЭкспертаПрО,
Шаг3(инфВСознанЭкспертаПрО,
списокТерм1,
списокСитуацДейств1))
| | адекватКонцептуализац := НайтиАдекватКонцептуализац(списокТерм1,
списокСитуацДейств1,
списокВеличин1)
| кц пока НЕ((все идеи из списка списокСитуацДейств1 представлены как
элементы концептуализации)
И (все величины списокВеличин1 выделены)
И (смысл всех терминов из списокТерм1 и принципы представления
с их помощью информации понятны аналитику))
| адекватКонцептуализац
кон
```

алг СформОнтолСогл(арг инфВСознанЭкспертаПрО, арг Концептуал, арг таб Онтол, рез таб ОнтСогл)

```
| дано
```

```

| надо ОнтСогл = список всех возможных онтологических соглашений для
| онтологии ОнтОл, явно специфицирующей концептуализацию Концептуал
нач таб бессмысленСитуац
| нц
| | бессмысленСитуац := Определить список бессмысленных ситуаций(
| | инфВСознанЭкспертаПрО, Концептуал, ОнтОл)
| | ОнтСогл := Определить список онтологических соглашений(
| | инфВСознанЭкспертаПрО, Концептуал, ОнтОл,
| | бессмысленСитуац)
| кц пока НЕ(систематизированы(ОнтСогл))
| ОнтСогл
кон

```

алг Этап2(арг инфВСознанЭкспертаПрО, арг адекватКонцептуализац, рез таб модельПрО)

```

| дано
| надо таб модельПрО = (таб онтолДействит, таб систЗнаний)
нач таб онтСогл, таб онтолДействит, таб систЗнаний
| нц
| | онтолДействит := Построение первоначальной онтологии
| | действительности(инфВСознанЭкспертаПрО, адекватКонцептуализац)
| | онтСогл := СформОнтОлСогл(инфВСознанЭкспертаПрО, адекватКонцептуализац,
| | онтолДействит)
| | онтолДействит := онтолДействит ∪ онтСогл
| | систЗнаний := Построение первоначальной системы знаний в терминах онтологии
| | (инфВСознанЭкспертаПрО, онтолДействит)
| | нц
| | | систЗнаний := Уточнение(инфВСознанЭкспертаПрО, онтолДействит, систЗнаний)
| | кц пока НЕ(систематизирована система знаний)
| кц пока НЕ(систематизирована модель ПрО(инфВСознанЭкспертаПрО, адекватКонцептуализац,
| | онтолДействит, систЗнаний))
| модельПрО := (онтолДействит, систЗнаний)
| модельПрО
кон

```

алг Этап3(арг инфВСознанЭкспертаПрО, рез таб МодельПрОАдекв)

```

| дано условия адекватности математизации профессиональной деятельности
| надо МодельПрОАдекв
нач адеквКонц, таб МодельПрО, лог явлАдекватнойМоделью, таб МодельПрОАдекв
| явлАдекватнойМоделью := ЛОЖЬ
| нц
| | адеквКонц := Этап1(инфВСознанЭкспертаПрО)
| | МодельПрО := Этап2(инфВСознанЭкспертаПрО, адеквКонц)
| | МодельПрОАдекв := МодельПрО
| | если условия адекватности математизации профессиональной
| | деятельности выполнены(адеквКонц, МодельПрО)
| | | то явлАдекватнойМоделью := ИСТИНА
| | всё
| кц пока НЕ(явлАдекватнойМоделью)
| МодельПрОАдекв
кон

```

алг разработатьСпецификациюПрО()

```

| дано условия адекватности математизации профессиональной деятельности
| надо
нач таб МодельПрО
| МодельПрО := Этап3(инфВСознанЭкспертаПрО)
| вывод "Адекватная математизация найдена: ", МодельПрО
кон

```

3 Онтолого-ориентированный анализ ПрО химических элементов

3.1 Неформальная постановка задачи

Таблица Д.И. Менделеева может быть раскрашена в разные наборы цветов в зависимости от того, какие свойства химических элементов надо учитывать при их классификации. В данной задаче необходимо раскрасить таблицу Д.И. Менделеева в четыре цвета (по традиции ИЮПАК): красный, жёлтый, голубой и белый (без краски) [10]. Номер элемента известен. Элементы одного цвета имеют один тип. Тип элемента назначается в зависимости от изотопного состава, а также значений атомной массы. Некоторые значения атомных масс являются универсальными постоянными (константами природы). Необходимо, чтобы цвет раскрашенного элемента соответствовал присвоенному ему цвету ИЮПАК (рисунок 1).

3.2 Анализ понятий

После неформальной постановки задачи необходимо проанализировать термины, упомянутые в формулировке задачи. Важно рассмотреть, как менялось данное понятие за определённый промежуток времени (релевантный задаче), а также установить связи упомянутых в формулировке понятий друг с другом и с другими понятиями ПрО (релевантными задаче).

Понятию «Элементы» соответствует количество протонов в ядре (от 1 до 118). Понятие «Атомная масса» имеет богатую научную историю. Его значение менялось несколько раз⁸. Пришло понимание, что «Атомные массы» не являются универсальными постоянными, как считалось ранее (хотя для моноизотопных элементов «Атомная масса» и должна считаться универсальной постоянной). Необходимо рассмотреть классы, на которые можно классифицировать химические элементы в соответствии с данными об изотопных составах и атомных масс.

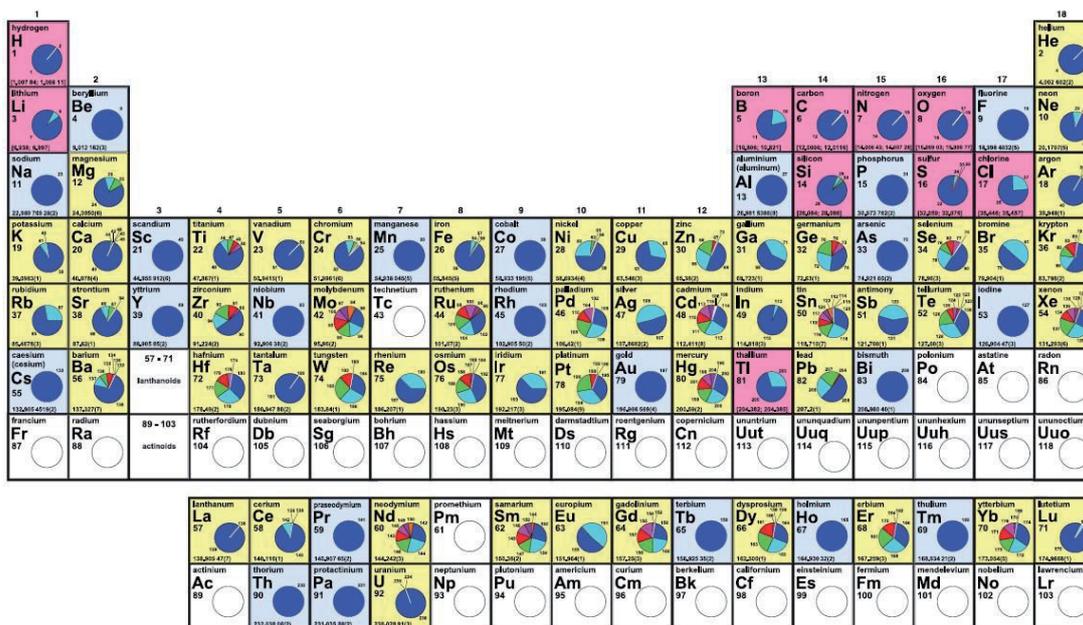


Рисунок 1 – Периодическая таблица изотопов ИЮПАК [10]

⁸ После открытия двух стабильных изотопов неона: ^{20}Ne и ^{22}Ne – Джозефом Джоном Томсоном, Альфред Ньер, разделивший с помощью масс-спектрометра ^{238}U и ^{235}U , в 1939 г. сообщил о 5% расхождении в $^{12}\text{C}^{13}\text{C}$, подтверждая тот факт, что изотопный состав, а, следовательно, и «Атомная масса» некоторых элементов разнятся в природе [14].

3.3 Анализ объемов понятий

В соответствии с проведенным анализом понятия «Атомная масса» далее определены объемы этого понятия для различных типов химических элементов. В соответствии с раскраской ИЮПАК любой элемент Периодической таблицы должен быть отнесен к одному из четырех классов с соответствующей раскраской: *тип 1 (красной)*; *тип 2 (желтой)*; *тип 3 (голубой)*; *тип 4 (белой)*.

Представление объемов понятий «Атомная масса» для элемента каждого типа показано на рисунке 2. Описание синтаксиса и семантики термов, формул и предложений языка прикладной логики для задания прикладных логических теорий приведено в [4].

Единое понятие «Атомная масса» для всех четырех типов элементов будет иметь следующий объем:

сорт Атомная масса (элемент типа 1 – 4):

$$\{(v: \{ \} R) \mu(v) > 1\} \cup \{(v: \{ \} R) \mu(v) = 1\} \cup \{(v: \{ \} R) \mu(v) = 1\} \cup \{\emptyset\}$$

Выполнив элементарные теоретико-множественные операции, можно получить:

сорт Атомная масса: $\{ \} R$.

В процессе установления объемов понятий могут быть найдены пропущенные ранее понятия ПрО, необходимые для решения задачи. Для указанной задачи, помимо основного понятия «Атомная масса», необходимы также следующие понятия: «Количество стабильных изотопов», «Являться константой природы для атомной массы». Их объемы указаны далее в модели.

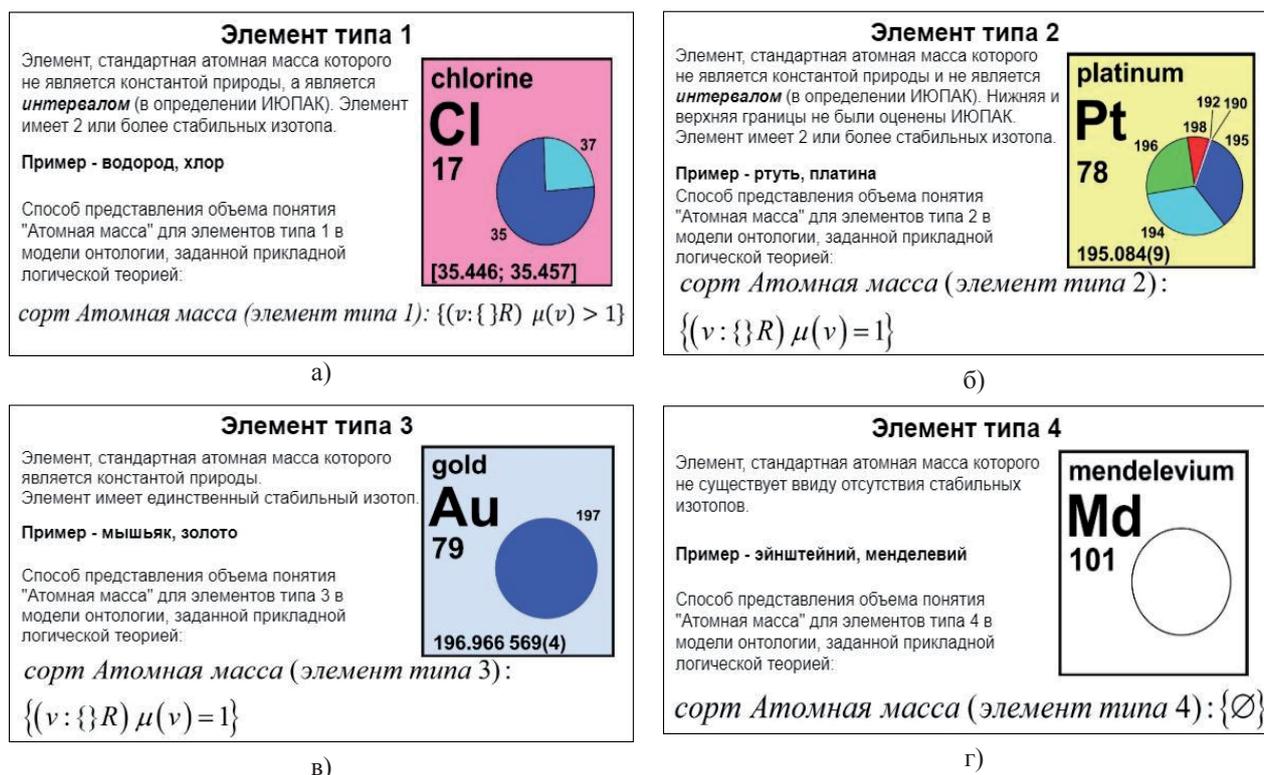


Рисунок 2 – Представление типов элементов в модели онтологии и таблице Д. И. Менделеева:

а) тип 1; б) тип 2; в) тип 3; г) тип 4

3.4 Анализ задач профессиональной деятельности

Проведённый анализ понятий ПрО и анализ объёмов понятий позволяют сделать следующие выводы. Объектом задачи является химический элемент. Результат решения задачи – предполагаемый класс химического элемента.

Классы химических элементов: тип 1; тип 2; тип 3; тип 4. При определении класса химического элемента анализируются значения следующих **признаков**:

- количество стабильных изотопов;
- атомная масса;
- являться константой природы для атомной массы.

Для кодирования значения свойства «количество стабильных изотопов» используется размерное значение с размерностью = 0 [8].

Для кодирования значения свойства «Атомная масса» используется размерное значение а.е.м. (размерность «атомные единицы массы» - отношение массы данного элемента к 1/12 массы изотопа углерода ^{12}C).

Для кодирования значения свойства «являться константой природы для атомной массы» используется логическое значение.

Анализ смысла ситуации. Ситуация – это случай определения специалистом класса элемента в таблице Д.И. Менделеева. В каждой ситуации рассматривается один экземпляр элемента. Определяя класс элемента, специалист определяет значения признаков элементов. Например, «количество стабильных изотопов» = 2.

4 Синтез модели ПрО химических элементов

4.1 Формальная постановка задачи

Спецификация задачи о раскраске таблицы Д.И. Менделеева в соответствии с данными о значениях атомных масс и изотопных составах элементов может иметь следующий вид:

Входные данные \equiv { Раскраска класса }

Выходные данные \equiv { Раскрашенная таблица Д.И. Менделеева }

Элементы \equiv $I[1, 118]$

сорт Раскрашенная таблица Д.И. Менделеева: Элементы \rightarrow Цвет ячейки

Задача о раскраске таблицы Д.И. Менделеева естественным образом может быть декомпозирована на подзадачу определения цвета ячейки, соответствующей химическому элементу с атомным номером Элемент:

Входные данные \equiv { Раскраска класса, Элемент }

Выходные данные \equiv { Цвет ячейки }

Модель онтологии ПрО является нетривиальной моделью онтологии. В нетривиальной модели онтологии система понятий действительности отделена от системы понятий знаний. Прикладная логическая теория построена с использованием языка прикладной логики [4]. Описание подхода к разработке моделей онтологий с помощью прикладных логических теорий приведена в [7].

4.2 Построение модели онтологии

Определения вспомогательных терминов.

Множество значений $\equiv R \cup I \cup N \cup L \cup ((\{\}\{R \cup I \cup N \cup L\}) \setminus \{\emptyset\})$.

Вспомогательный термин «Множество значений» обозначает объединение множеств целых и вещественных чисел, множества обозначений, множества-носителя булевой алгебры, а также всех их возможных подмножеств.

Элементы $\equiv I[1, 118]$.

Вспомогательный термин «Элементы» обозначает множество возможных значений химических элементов. Химический элемент однозначно определяется своим атомным номером – количеством протонов в ядре атома.

Описание сортов терминов для описания знаний.

Сорт Класс элемента: $\{ \}N \setminus \{ \emptyset \}$. Термин «Класс элемента» обозначает конечное множество названий классов, к которым относятся химические элементы.

Сорт Цвет: $\{ \}N \setminus \{ \emptyset \}$. Термин «Цвет» обозначает конечное множество названий цветов для раскраски ячеек химических элементов в таблице Д.И. Менделеева.

Сорт Раскраска класса: *Класс элемента* \rightarrow *Цвет*. Термин «Раскраска класса» обозначает функцию, сопоставляющую каждому названию класса химических элементов название цвета (для раскраски ячеек химических элементов, относящихся к данному классу, в этот цвет в таблице Д.И. Менделеева).

Сорт Признаки: $\{ \}N \setminus \{ \emptyset \}$. Термин «Признаки» обозначает конечное множество названий признаков химического элемента.

Сорт Размерные признаки: $\{ \}N \setminus \{ \emptyset \}$. Термин «Размерные признаки» обозначает конечное множество названий размерных признаков химического элемента.

Сорт Логические признаки: $\{ \}N \setminus \{ \emptyset \}$. Термин «Логические признаки» обозначает конечное множество названий логических признаков химического элемента.

Сорт Скалярные признаки: $\{ \}N \setminus \{ \emptyset \}$. Термин «Скалярные признаки» обозначает конечное множество названий скалярных признаков химического элемента.

Сорт Возможные значения: *Признаки* \rightarrow *Множество значений*. Термин «Возможные значения» обозначает функцию, сопоставляющую каждому признаку объект из множества значений.

Сорт Область возможных значений размерных признаков: *Размерные признаки* \rightarrow $(\{ \} (R \cup I)) \setminus \{ \emptyset \}$. Термин «Область возможных значений размерных признаков» обозначает функцию, сопоставляющую каждому размерному признаку объект из множества $(\{ \} (R \cup I)) \setminus \{ \emptyset \}$.

Сорт Область возможных значений логических признаков: *Логические признаки* \rightarrow $\{ \}L \setminus \{ \emptyset \}$. Термин «Область возможных значений логических признаков» обозначает функцию, сопоставляющую каждому логическому признаку объект из множества $\{ \}L \setminus \{ \emptyset \}$.

Сорт Область возможных значений скалярных признаков: *Скалярные признаки* \rightarrow $\{ \}N \setminus \{ \emptyset \}$. Термин «Область возможных значений скалярных признаков» обозначает функцию, сопоставляющую каждому скалярному признаку объект из множества $\{ \}N \setminus \{ \emptyset \}$.

Сорт Признаковое описание класса элемента: *Класс элемента* \rightarrow $\{ \}$ *Признаки*. Термин «Признаковое описание класса элемента» обозначает функцию, сопоставляющую каждому классу химических элементов подмножество множества признаков, образующих признаковое описание этого класса химических элементов.

Сорт Значение для класса элемента: $\{ (v: \times \text{Класс элемента}, \text{Признаки}) \mid \pi(2, v) \in \text{Признаковое описание класса элемента}(\pi(1, v)) \} \rightarrow$ *Множество значений*. Термин «Значение для класса элемента» обозначает функцию, сопоставляющую каждому классу химических элементов и признаку, входящему в признаковое описание этого класса химических элементов, область значений этого признака.

Ограничения целостности знаний.

- $(v: \text{Класс элемента}) \text{ Признаковое описание класса элемента}(v) \neq \emptyset$. Для любого класса химических элементов множество признаков, принадлежащих признаковому описанию этого класса химических элементов, содержит хотя бы один элемент.

- $(v_1: \text{Класс элемента}) (v_2: \text{Признаковое описание класса элемента}(v_1))$ Значение для класса элемента $(v_1, v_2) \neq \emptyset$. Для любого класса химических элементов, для любого признака, характерного для данного класса химических элементов, множество значений этого признака для этого класса химических элементов содержит хотя бы один элемент.
- $(v_1: \text{Класс элемента}) (v_2: \text{Признаковое описание класса элемента}(v_1))$ Значение для класса элемента $(v_1, v_2) \subseteq \text{Возможные значения}(v_2)$. Для любого класса химических элементов, для любого признака, характерного для данного класса химических элементов, множество значений этого признака для этого класса химических элементов является подмножеством множества возможных значений этого признака.
- $(x_1: \text{Класс элемента}) (x_2: \text{Класс элемента})$
 $\text{Раскраска класса}(x_1) = \text{Раскраска класса}(x_2) \Rightarrow x_1 = x_2$
Раскраска класса – это инъективное отображение.
- $(\forall(y: \text{Цвет}) (\exists(z: \text{Класс элемента}) \text{Раскраска класса}(z) = y))$
Раскраска класса – это сюръективное отображение.
- Из ограничений целостности знаний (4) и (5) следует, что *Раскраска класса – это биективное отображение.*

Определение системы понятий действительности. Описание сортов терминов для описания ситуаций.

- *сорт Элемент: Элементы.* Термин «Элемент» обозначает атомный номер данного экземпляра химического элемента.
- *сорт Класс экземпляра хим. элемента: Класс элемента.* Термин «Класс экземпляра хим. элемента» обозначает класс данного экземпляра химического элемента.
- *сорт Признаковое описание экземпляра хим. элемента: { } Признаки.* Термин «Признаковое описание экземпляра хим. элемента» обозначает подмножество множества признаков химического элемента, которые были определены специалистом.
- *сорт Значение признака экземпляра хим. элемента: Признаковое описание экземпляра хим. элемента \rightarrow Множество значений.* Термин «Значение признака экземпляра хим. элемента» обозначает функцию, сопоставляющую каждому признаку из признакового описания экземпляра химического элемента значение этого признака.
- *сорт Цвет ячейки: Цвет.* Термин «Цвет ячейки» обозначает название цвета для раскраски ячейки химического элемента в таблице Д.И. Менделеева.

Ограничения целостности ситуаций.

Признаковое описание экземпляра хим. элемента $\neq \emptyset$. Признаковое описание экземпляра химического элемента содержит хотя бы один признак.

Связь между знаниями и действительностью.

- $(\forall(v: \text{Признаковое описание экземпляра хим. Элемента})$
 $\text{Значение признака экземпляра хим. элемента}(v) \in \text{Возможные значения}(v))$. Для любого признака экземпляра химического элемента - значение этого признака является элементом множества возможных значений для этого признака.
- $(\forall(v: \text{Признаковое описание экземпляра хим. элемента})$
 $\text{Значение признака экземпляра хим. элемента}(v) \in \text{Значение для класса элемента}(\text{Класс экземпляра хим. элемента}, v))$. Значения признаков из признакового описания экземпляра химического элемента принадлежат множеству значений этих признаков для класса химических элементов, к которому относится данный экземпляр.
- $\text{Раскраска класса}(\text{Класс экземпляра хим. элемента}) = \text{Цвет ячейки}$. Цвет ячейки данного экземпляра химического элемента совпадает с цветом ячеек, определенным функ-

цией «Раскраска класса» для класса химических элементов, к которому относится данный экземпляр.

4.3 Модель знаний Про

Класс элемента $\equiv \{ \text{Тип1}, \text{Тип2}, \text{Тип3}, \text{Тип4} \}$

Цвет $\equiv \{ \text{Красный}, \text{Жёлтый}, \text{Голубой}, \text{Белый} \}$

Раскраска класса $\equiv (\lambda(v: \text{Класс элемента}) / (v = \text{Тип1} \Rightarrow \text{Красный})(v = \text{Тип2} \Rightarrow \text{Жёлтый})(v = \text{Тип3} \Rightarrow \text{Голубой})(v = \text{Тип4} \Rightarrow \text{Белый}) /)$

Признаки $\equiv \{ \text{Количество стабильных изотопов}, \text{Атомная масса}, \text{Являться константой природы для атомной массы} \}$

Размерные признаки $\equiv \{ \text{Количество стабильных изотопов}, \text{Атомная масса} \}$

Логические признаки $\equiv \{ \text{Являться константой природы для атомной массы} \}$

Признаки = *Размерные признаки* \cup *Логические признаки*

Возможные значения $\equiv (\lambda(v: \text{Признаки}) / (v = \text{Количество стабильных изотопов} \Rightarrow I[0, \infty)(v = \text{Атомная масса} \Rightarrow \{ \}R \setminus \{ \emptyset \})(v = \text{Являться константой природы для атомной массы} \Rightarrow L) /)$

Признаковое описание класса элемента $\equiv (\lambda(v: \text{Класс элемента}) / (v \in \{ \text{Тип1}, \text{Тип2}, \text{Тип3} \} \Rightarrow \{ \text{Количество стабильных изотопов}, \text{Атомная масса}, \text{Являться константой природы для атомной массы} \})(v \in \{ \text{Тип4} \} \Rightarrow \{ \text{Количество стабильных изотопов} \}) /)$

Значение для класса элемента $\equiv (\lambda(\text{pair}: \{$

$\langle \text{Тип1}, \text{Количество стабильных изотопов} \rangle, \langle \text{Тип1}, \text{Атомная масса} \rangle,$

$\langle \text{Тип1}, \text{Являться константой природы для атомной массы} \rangle,$

$\langle \text{Тип2}, \text{Количество стабильных изотопов} \rangle, \langle \text{Тип2}, \text{Атомная масса} \rangle,$

$\langle \text{Тип2}, \text{Являться константой природы для атомной массы} \rangle,$

$\langle \text{Тип3}, \text{Количество стабильных изотопов} \rangle, \langle \text{Тип3}, \text{Атомная масса} \rangle,$

$\langle \text{Тип3}, \text{Являться константой природы для атомной массы} \rangle,$

$\langle \text{Тип4}, \text{Количество стабильных изотопов} \rangle \}$

$/$

$(\text{pair} = \langle \text{Тип1}, \text{Количество стабильных изотопов} \rangle \Rightarrow I[2, \infty))$

$(\text{pair} = \langle \text{Тип1}, \text{Атомная масса} \rangle \Rightarrow \{(v: \{ \}R) \mu(v) > 1\})$

$(\text{pair} = \langle \text{Тип1}, \text{Являться константой природы для атомной массы} \rangle \Rightarrow \{ \text{false} \})$

$(\text{pair} = \langle \text{Тип2}, \text{Количество стабильных изотопов} \rangle \Rightarrow I[2, \infty))$

$(\text{pair} = \langle \text{Тип2}, \text{Атомная масса} \rangle \Rightarrow \{(v: \{ \}R) \mu(v) = 1\})$

$(\text{pair} = \langle \text{Тип2}, \text{Являться константой природы для атомной массы} \rangle \Rightarrow \{ \text{false} \})$

$(\text{pair} = \langle \text{Тип3}, \text{Количество стабильных изотопов} \rangle \Rightarrow \{ 1 \})$

$(\text{pair} = \langle \text{Тип3}, \text{Атомная масса} \rangle \Rightarrow \{(v: \{ \}R) \mu(v) = 1\})$

$(\text{pair} = \langle \text{Тип3}, \text{Являться константой природы для атомной массы} \rangle \Rightarrow \{ \text{true} \})$

$(\text{pair} = \langle \text{Тип4}, \text{Количество стабильных изотопов} \rangle \Rightarrow \{ 0 \})$

$/)$

4.4 Пример модели ситуации

Элемент $\equiv 33$

Класс экземпляра хим. элемента $\equiv \text{Тип3}$

Признаковое описание экземпляра хим. элемента $\equiv \{ \text{Количество стабильных изотопов}, \text{Атомная масса}, \text{Являться константой природы для атомной массы} \}$

Значение признака экземпляра хим. элемента $\equiv (\lambda(v: \text{Признаковое описание экземпляра хим. элемента}) / (v = \text{Количество стабильных изотопов} \Rightarrow 1)(v = \text{Атомная масса} \Rightarrow$

$\{ 74.92160(2) \})(v = \text{Являться константой природы для атомной массы} \Rightarrow \text{true}) /)$

Цвет ячейки $\equiv \text{Голубой}$

4.5 Проверка адекватности модели Про

Осуществляется проверка истинности всех утверждений модели онтологии и модели знаний для всех моделей ситуаций:

- все предложения онтологических соглашений обращаются в истину после выполнения всех допустимых подстановок;
- все предложения модели знаний обращаются в истину после выполнения всех допустимых подстановок.

Модель адекватна ПрО. Данная математизация профессиональной деятельности может считаться адекватной ввиду того, что результаты решений прикладных задач этого класса, полученные таким образом, каждый раз соответствуют действительности.

Заключение

В наукоёмких ПрО меняться могут как знания, так и онтология, что неоднократно подтверждалось на протяжении истории науки. Современные понятия химии регулярно уточняются благодаря развитию различных подобластей химии, таких как квантовая и физическая химии. При разработке ИС этот факт должен учитываться с целью продления жизненного цикла ИС. Разработка ИС, в которых предусмотрена возможность изменения как модели знаний, так и модели онтологии должна предваряться онтолого-ориентированным анализом (цель которого – найти адекватную концептуализацию ПрО) и синтезом модели ПрО, а также проверкой адекватности модели объекту моделирования. Новизна работы заключается в разработке алгоритма создания спецификации ПрО и решения задачи классификации химических элементов в соответствии с данными об изотопных составах и значениях атомных масс. Определение класса химического элемента для раскраски таблицы изотопов ИЮПАК (таблицы Д.И. Менделеева) выполнено на основании анализа некоторых признаков, таких как «Атомная масса» и «Изотопный состав».

Благодарности

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-37-90137

Список источников

- [1] **Gruber, T.R.** A translation approach to portable ontology specifications. *Knowledge Acquisition*. 1993; 5 (2): 199-220. DOI: 10.1006/knac.1993.1008.
- [2] **Artemieva, I.L.** Ontology development for domains with complicated structures. *Lecture Notes in Computer Science* (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics), 6581 LNAI. 2011: 184-202. ISBN: 978-364222139-2. DOI: 10.1007/978-3-642-22140-8_12.
- [3] IUPAC. Compendium of Chemical Terminology, 2nd ed. (the «Gold Book»). Compiled by A. D. McNaught and A. Wilkinson. Blackwell Scientific Publications, Oxford (1997). Online version (2019) created by S.J. Chalk. ISBN 0-9678550-9-8. – <https://doi.org/10.1351/goldbook>.
- [4] **Kleshchev, A.S.** A mathematical apparatus for domain ontology simulation. An extendable language of applied logic / A.S. Kleshchev, I.L. Artemjeva // *Int. J. Inf. Theor. Appl.* 2005; 12 (2): 149-157.
- [5] **Клещёв, А.С.** Онтология задач интеллектуальной деятельности / А.С. Клещёв, Е.А. Шалфеева // *Онтология проектирования*. – 2015. – Т.5, № 2(16). С.179-205. DOI: 10.18287/2223-9537-2015-5-2-179-205.
- [6] **Клещёв, А.С.** Парадигма автоматизации интеллектуальной профессиональной деятельности. Часть 1. Особенности интеллектуальной профессиональной деятельности / А.С. Клещёв, М.Ю. Черняховская, Е.А. Шалфеева // *Онтология проектирования*. - 2013. - № 3(9). - С.53-69.
- [7] **Клещёв, А.С.,** Необогатенные системы логических соотношений. Часть 1 / А.С. Клещёв, И.Л. Артемьева // *НТИ*. - 2000. - № 2(7). - С.18-28.
- [8] **Клещёв, А.С.** Основы анализа и формализации информации. Курс лекций / А.С. Клещёв. - ДВГУ. ИАПУ. 2005. - 143 с.
- [9] **Ершов, А.П.** Введение в теоретическое программирование: беседы о методе/ А.П. Ершов. – М.: Наука, 1977. – 288 с.

[10] *Nier, A.O.C.* Variations in the relative abundance of the carbon isotopes / A.O.C. Nier, E.A. Gulbransen // *J. Am. Chem. Soc.* – 1939. -61: 697.

Сведения об авторах



Гуляева Карина Александровна, 1991 г. рождения. Аспирант Дальневосточного федерального университета (ДВФУ). Ассистент кафедры прикладной математики, механики, управления и программного обеспечения ДВФУ. AuthorID (РИНЦ): 1027555. Author ID (Scopus): 57041205000. <http://orcid.org/0000-0003-0226-5072>. kgulyayeva@gmail.com.

Артемьева Ирина Леонидовна, 1956 г. рождения. Профессор, д.т.н., заведующая кафедрой прикладной математики, механики, управления и программного обеспечения ДВФУ. Научные интересы: искусственный интеллект и принятие решений, инструментальные и прикладные интеллектуальные системы, системы, основанные на знаниях, онтологии и их модели, специализированные программные модели и системы. AuthorID (РИНЦ): 7398. Author ID (Scopus): 57216239506. Researcher ID (WoS): D-9649-2014. artemeva.il@dvfu.ru.



Поступила в редакцию 02.09.2020, после рецензирования 14.09.2020. Принята к публикации 25.09.2020.

Special aspects of the ontological approach application in intelligent system development for certain types of problems in chemistry

К.А. Gulyaeva, I.L. Artemieva

Far Eastern Federal University, Vladivostok, Russia

Abstract

The article describes several aspects of the ontological approach application to the intelligent system development. This approach is grounded on the application domain modeling by means of applied logic theories. The basic thesaurus for the development of professional activity models is created (based on the ontological approach). All the definitions from this dictionary are presented. The examination of the “Atomic weight” term and other chemistry term evolution brings to the sharp focus the fact that in the knowledge-intensive application domains not only the knowledge but also the ontology changes over time. Consequently, intelligent system developer should consider the opportunity of knowledge and metaknowledge alteration to prolong the intelligent system lifecycle and intelligent system update. For this purpose, intelligent system development should start after the application domain specification modelling. The created algorithm for the development of the application domain specification, which includes three steps: ontological analysis of the application domain, the major purpose of which consists in the search of the adequate conceptualization, includes the following subtasks: informal problem statement, concept analysis, scope analysis, situation analysis – synthesis of the application domain model and proving the hypothesis of the model adequacy. The steps of the algorithm are supported by the description of the intellectual activity task solution. This problem is the classification problem. The novelty of the article is the solution developed for the classification of the chemical elements in Mendeleev’s Periodic table based on the values of the isotope abundance and atomic weight. Major steps of application domain ontology model development are illustrated with the help of the solution to the stated problem. The model that this article provides includes the knowledge ontology and the situation ontology. The key steps of the application domain specification development: ontological analysis, ontology model synthesis, and adequacy criteria – are discussed the most thoroughly.

Key words: *ontology, applied logic theory, ontology model, isotope abundance, standard atomic weight.*

Citation: *Gulyaeva KA, Artemieva IL.* Special aspects of the ontological approach application in intelligent system development for certain types of problems in chemistry [In Russian]. *Ontology of designing.* 2020; 10(3): 307-326. DOI: 10.18287/2223-9537-2020-10-3-307-326.

Acknowledgment: The reported study was funded by RFBR, project number 19-37-90137.

List of figures and table

Table 1 – Evolution of definitions of the terms "Atom" and "Molecule"

Figure 1 – Periodic table of IUPAC isotopes

Figure 2 – Representation of type elements in the ontology model and D.I. Mendeleev's table

References

- [1] **Gruber TR.** A translation approach to portable ontology specifications. *Knowledge Acquisition*. 1993; 5 (2): 199-220. DOI: 10.1006/knac.1993.1008.
- [2] **Artemieva IL.** Ontology development for domains with complicated structures. *Lecture Notes in Computer Science* (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics), 6581 LNAI. 2011: 184-202. ISBN: 978-364222139-2. DOI: 10.1007/978-3-642-22140-8_12.
- [3] IUPAC. Compendium of Chemical Terminology, 2nd ed. (the «Gold Book»). Compiled by A. D. McNaught and A. Wilkinson. Blackwell Scientific Publications, Oxford (1997). Online version (2019-) created by S. J. Chalk. ISBN 0-9678550-9-8. <https://doi.org/10.1351/goldbook>.
- [4] **Kleshchev AS, Artemjeva IL.** A mathematical apparatus for domain ontology simulation. An extendable language of applied logic. *Int. J. Inf. Theor. Appl.* 2005; 12 (2): 149-157.
- [5] **Kleshchev AS, Shalfeeva EA.** An ontology of intellectual activity tasks [In Russian]. *Ontology of Designing*. 2015; 5: 179-205. DOI: 10.18287/2223-9537-2015-5-2-179-205.
- [6] **Kleshchev AS, Chernyahovskaya MYu, Shalfeeva EA.** The paradigm of automation of intellectual professional activity. Part 1. Special aspects of intellectual activity tasks [In Russian]. *Ontology of Designing*. 2013; 3(9): 53-69.
- [7] **Kleshchev AS, Artemieva, IL.** Unenriched systems of logical relations [In Russian]. Part 1. *NTI*. 2000; 2(7): 18-28.
- [8] **Kleshchev AS.** The basics of information analysis and formalization [In Russian]. Lectures. FEFU. IACP. 2005. 143 p.
- [9] **Ershov AP.** Introduction to Theoretical Programming: Conversations about the Method [In Russian]. Moscow: Nauka, 1977. 288 p.
- [10] **Nier AOC, Gulbransen EA.** Variations in the relative abundance of the carbon isotopes. *J. Am. Chem. Soc.* 1939. - 61: 697.

About the authors

Karina A. Gulyaeva (b. 1991). Student pursuing PhD degree (Far Eastern Federal University). Assistant (Dept. Applied Mathematics, Mechanics, Control and Software Engineering, FEFU). AuthorID (RSCI): 1027555. Author ID (Scopus): 57041205000. <http://orcid.org/0000-0003-0226-5072>. kgulyayeva@gmail.com.

Irina L. Artemieva (b. 1956). Professor, Dr.Tec.Sci., Head of Dept. Applied Mathematics, Mechanics, Control and Software Engineering, FEFU. Scientific interests: Artificial Intelligence and decision making, Instrumental and applied intelligent systems, Knowledge-based systems, Ontologies and ontology models, Specialized program models and systems. AuthorID (RSCI): 7398. Author ID (Scopus): 57216239506. Researcher ID (WoS): D-9649-2014. artemeva.il@dvfu.ru.

Received September 02, 2020. Revised September 14, 2020. Accepted September 25, 2020.
