

غنی سازی و پالایش روابط معنایی در هستان شناسی علوم پایه: با تمرکز بر رشته شیمی

مجری طرح:

دکتر ملوک السادات حسینی بهشتی

همکاران طرح:

فاطمه اژه ای، کارشناس ارشد مهندسی کامپیوتر - نرم افزار

تقی رجبی، کارشناس ارشد شیمی فیزیک

زینب اژه ای، دانشجوی دکتری شیمی معدنی

هستان شناسی (Ontology)

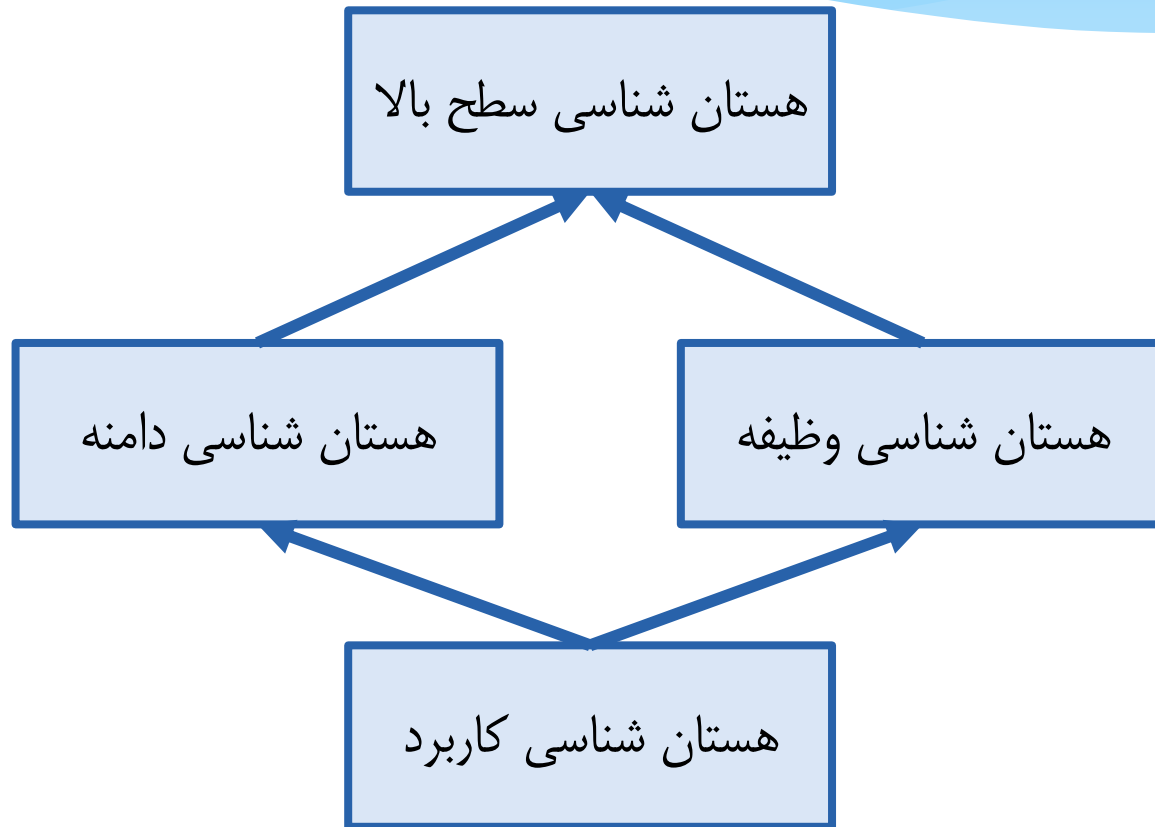
❖ فلسفه

- مطالعه درباره اینکه چه چیز موجود است و موجودیت ها چه ماهیتی دارند.

❖ علم کامپیوتر

- تعریف صوری از موجودیت ها
 - ✓ بازنمایی دانش در سیستم های هوشمند
 - ✓ واژگان مشترک برای ارتباط عامل ها

انواع هستان شناسی و وابستگی های آنها (Guarino, 1997)



ایجاد هستان شناسی بر مبنای اصطلاحنامه

* اصطلاحنامه یک منبع دانش سازماندهی شده توسط متخصصان موضوعی است.

* روابط سلسله مراتبی (اعم/اخص) که در اصطلاحنامه موجود است می تواند برای ایجاد ساختار سلسله مراتبی مورد نیاز برای هستان شناسی مورد استفاده قرار بگیرد.

* روابط وابسته در اصطلاحنامه وجود روابط معنایی بین مفاهیم را نشان می دهد.

ساخت هستان شناسی علوم پایه

- * استفاده از اصطلاحنامه های تدوین شده در حوزه های شیمی، فیزیک، زیست شناسی، زمین شناسی و ریاضی
- * همسان سازی مفاهیم مشترک در حوزه های مختلف در اصطلاحنامه ها به صورت نیمه خودکار
- * تلفیق اصطلاحنامه ها و تولید اصطلاحنامه جامع
- * تبدیل اصطلاحنامه از حالت واژه-بنیان به مفهوم-بنیان با انتقال آن به استاندارد ۲۵۹۶۴

ساخت هستان شناسی علوم پایه (ادامه)

❖ تبدیل نحوی

- مفاهیم اصطلاحنامه ⇨ مفاهیم هستان شناسی
 - اصطلاحات مرجح و نامرجح ⇨ برچسب مفاهیم
 - روابط اعم/اخص ⇨ روابط سلسله مراتبی
 - روابط وابسته ⇨ بخشی از توصیف صوری مفاهیم
- ❖ پیاده سازی خودکار هستان شناسی بر اساس تبدیل نحوی در قالب زبان OWL

بخشی از هستان شناسی تولید شده

The screenshot displays a software interface with three main panels:

- Class hierarchy: واکنش استخلافی**
 - واکنش شیمیایی
 - واکنش استخلافی
 - واکنش استخلافی دمولکولی
 - واکنش استخلافی هشت وجهی
 - واکنش استخلافی چهار وجهی
 - واکنش افزایش-حذفی
 - واکنش الکترویدی
 - واکنش الکترو شیمیایی
 - واکنش انتقال-تبدیل
 - واکنش اکسایشی
 - واکنش اکسایش-کاهش
 - واکنش تراکم کلازین
 - واکنش نگ مولکولی
 - واکنش جانبی
 - واکنش دینر
 - واکنش دمولکولی
 - واکنش دیگمان
 - واکنش رفرمانسکی
 - واکنش ریمز-نیمان
 - واکنش زنجیره ای
 - واکنش سریع
 - واکنش سندمایر
 - واکنش سامولکولی
 - واکنش سوختن
 - واکنش شاپمن

- Annotations: واکنش استخلافی**
- RelatedTerm** (diamond icon): (هالون دار شدن) کردن
- RelatedTerm** (diamond icon): کمپلکس استخلافی
- RelatedTerm** (diamond icon): گروه ترک کننده
- RelatedTerm** (diamond icon): گروه وارد شونده
- RelatedTerm** (diamond icon): گونه واسطه
- Status**: "Approved"^^string
- Translation** (diamond icon): 'substitution reaction'
- label**: "واکنش استخلافی"^^string
- Description: واکنش استخلافی**
- Equivalent classes** (+):
- Superclasses** (+):
 - واکنش شیمیایی
- Inherited anonymous classes**

پالایش و غنی سازی روابط معنایی هستان شناسی

❖ انتخاب حوزه شیمی برای شروع فرآیند پالایش و غنی سازی روابط معنایی

❖ پالایش روابط سلسله مراتبی

❖ غنی سازی روابط معنایی

■ دسته بندی مفاهیم

■ استفاده از الگوهای روابط معنایی

پالایش روابط سلسله مراتبی

❖ تفکیک روابط سلسله مراتبی به روابط:

■ جنس و گونه یا نوعی (isa)

■ کل - جزء

■ مصداقی یا موردی

❖ مثال

■ رابطه نوعی: پیوند کووالانسی و پیوند شیمیایی

■ رابطه کل-جزء: اتم با الکترون و هسته

■ رابطه کل-جزء: جدول تناوبی با گروه های اصلی و گروه های فرعی

غنی سازی روابط معنایی

- * انطباق هستان شناسی تولید شده به یک هستان شناسی سطح بالا
- * استفاده از یک هستان شناسی فوق دامنه (ChemTop)



دسته بندی مفاهیم

* تعیین نوع مفاهیم قرار گرفته در اولین سطح هستان شناسی تولید شده، بر اساس انواع تعریف شده در هستان شناسی سطح بالا

- موجودیت مادی
- موجودیت غیر مادی
- موجودیت اطلاعاتی
- فرآیند
- خصوصیت
- نقش
- ...

* نوع مفاهیم در سطح های بعدی مطابق با نوع بالاترین مفهوم در سلسله مراتب در نظر گرفته می شود

الگوهای روابط معنایی

❖ استخراج الگوهای روابط معنایی از هستان شناسی سطح بالا

❖ هر الگو شامل:

- نام رابطه: نوع رابطه معنایی مفهوم اول با مفهوم دوم
- دامنه: مطابق با نوع مفهوم اول
- برد: مطابق با نوع مفهوم دوم
- معکوس رابطه: نوع رابطه معنایی مفهوم دوم با مفهوم اول

نمونه هایی از الگوهای روابط معنایی

رابطه معنایی	دامنه	بود	معکوس رابطه
دارای جزء سازنده	موجودیت مادی یا غیرمادی	موجودیت مادی یا غیرمادی	جزء سازنده برای
دارای جزء انتزاعی	موجودیت اطلاعاتی	موجودیت اطلاعاتی	جزء انتزاعی برای
دارای جزء ریزدانه	موجودیت مادی یا غیرمادی	موجودیت مادی یا غیرمادی	جزء ریزدانه برای
دارای جزء فرآیندی	فرآیند	فرآیند	جزء فرآیندی برای
دارای مشخصه فرآیندی	فرآیند	خصوصیت	مشخصه فرآیندی برای
دارای نقش فرآیندی	فرآیند	نقش	نقش فرآیندی برای
دارای حاصل	فرآیند	موجودیت مادی	حاصل برای
دارای حاصل	فرآیند	موجودیت غیرمادی	حاصل برای
دارای حاصل	فرآیند	موجودیت اطلاعاتی	حاصل برای
دارای عامل	فرآیند	موجودیت مادی	عامل در
دارای عامل	فرآیند	موجودیت غیرمادی	عامل در
دارای عامل	فرآیند	موجودیت اطلاعاتی	عامل در

استفاده از الگوهای روابط معنایی

❖ مشخص کردن نوع روابط کل-جزء

■ رابطه اتم و الکترون از نوع کل-جزء

■ اتم : موجودیت مادی

■ الکترون: موجودیت مادی

■ الگوهای روابط معنایی تطبیق داده شده:

✓ موجودیت مادی <دارای جزء سازنده> موجودیت مادی

✓ موجودیت مادی <دارای جزء ریزدانه> موجودیت مادی

■ انتخاب الگوی مناسب توسط متخصص موضوعی

✓ اتم <دارای جزء سازنده> الکترون

استفاده از الگوهای روابط معنایی (ادامه)

❖ تبدیل روابط وابسته به روابط معنایی

- وجود وابستگی بین «واکنش استخلافی» و «گروه های ترک کننده»
- واکنش استخلافی : فرآیند
- گروه های ترک کننده: نقش
- الگوهای روابط معنایی تطبیق داده شده:
- ✓ فرآیند <دارای نقش فرآیندی> نقش
- تایید الگوی تطبیق داده شده توسط متخصص موضوعی
- ✓ واکنش استخلافی <دارای نقش فرآیندی> گروه های ترک کننده
- ✓ گروه های ترک کننده <نقش فرآیندی برای> واکنش استخلافی

استفاده از الگوهای روابط معنایی (ادامه)

❖ تبدیل روابط وابسته به روابط معنایی

- وجود وابستگی بین دو مفهوم « ترکیب خطی اوربیتال های اتمی » و « اوربیتال مولکولی »
- ترکیب خطی اوربیتال های اتمی : فرآیند
- اوربیتال مولکولی : موجودیت غیرمادی
- الگوهای روابط معنایی تطبیق داده شده:
- ✓ فرآیند <دارای عامل> موجودیت غیرمادی
- ✓ فرآیند <دارای حاصل> موجودیت غیرمادی
- انتخاب الگوی مناسب توسط متخصص موضوعی
- ✓ ترکیب خطی اوربیتال های اتمی <دارای حاصل> اوربیتال مولکولی

جمع بندی

❖ پالایش روابط سلسله مراتبی

■ تفکیک انواع روابط سلسله مراتبی

❖ غنی سازی روابط معنایی

■ مشخص نمودن نوع دقیق روابط کل-جزء

■ افزودن روابط معنایی بر مبنای روابط وابسته

با تشکر از توجه شما