

# Описание структуры базы данных

Ivan Borisovich Kurpishev / Курпишев Иван Борисович  
Independent Researcher, Kaliningrad / Калининград, me@kurpishev.ru  
2026-05-12

## 1. Общая архитектура

База данных построена как типизированный RBD-граф. Основные сущности: источник, химический объект, состояние, формула, реакция, материал, метод измерения, Evidence-D, gap-node, CGI/lambda check, публикационный маршрут.

## 2. Логическая модель

1. Source -> Evidence-D: источник прикрепляется к достаточному основанию.
2. Chemical object -> Reper: объект получает R,I,U;D-разложение.
3. Reaction -> Balance check: реакция проходит массу, заряд, среду и условие.
4. Material -> Degradation: материал связывается с pH, влажностью, температурой и кинетикой.
5. Measurement -> Substance ID: аналитический признак привязывается к доказательному статусу.
6. Gap -> Rebuild: при отсутствующем domain/D создаётся gap-node и действие пересборки.

## 3. Табличная схема

Слой	Описание	Обработка ЭВМ
chem_sources	Источники и основания данных	ID источника, тип, ссылка/описание, роль в D-основании
chem_elements	Химические элементы	Атомный номер, символ, период/группа, блок, масса seed-слоя
chem_atoms	Атомные Reper-узлы	Ядро, электронная конфигурация, заряд, состояние
chem_bonds	Химические связи	Тип связи, участники, валентность, условия устойчивости
chem_molecules	Молекулы и вещества	Формула, состав, класс, состояние, связи
chem_reactions	Реакции	Реактанты, продукты, условия, баланс, тип реакции
chem_ionic_redox	Ионные/OBP переходы	Complete ionic, net ionic, spectator ions, half-reactions
chem_solubility_acidbase	Растворимость и кислотно-основной слой	pH, пары кислота/основание, precipitate, amphoteric logic
chem_materials	Материалы и деградация	Минералы, цементные фазы, коррозия, материал-условие
chem_thermo_kinetic	Термодинамика и кинетика	DeltaG, K, rate-law seed, температурные окна
chem_spectroscopy_evidence	Спектроскопия и Evidence-D	Методы анализа, признаки, неопределенность, привязка к Reper
chem_repers	Reper-четверки	R, I, U, D; domain; truth status; lambda/CGI
chem_edges	Графовые связи	source, target, relation_type, evidence, status
chem_gaps	Gap-узлы	Тип разрыва: domain, foundation, balance, charge, method, source

chem_cgi_lambda	Проверки связности	lambda, delta_truth, CGI, rebuild action
-----------------	--------------------	------------------------------------------

## 4. Первичные ключи

Идентификаторы строятся в виде: CHM-<DOMAIN>-<OBJECT>-<NNNN>, REG-FIPS-<TYPE>-<NNNN>, SRC-<TYPE>-<NNNN>. Схема обеспечивает машинный поиск, сортировку и обратную трассировку до источника и версии.

## 5. Контроль версий

Версия	Модуль	Роль в v1.3
v0.1	STRUCTURE	Первичный RBD-слой химии: C@C_chem, Rep_chem, домены, первые Reper-узлы.
v0.2	STRUCTURE+QUANT	Элементы, сбалансированные реакции, ионные уравнения, растворимость, safety-D.
v0.3	REACTION_ENGINE	Парсер формул, баланс массы/заряда, redox half-reactions, CGI rebuild.
v0.4	IONIC_REDOX_GRAPH	Ионные графы, spectator-ion reduction, oxidation numbers, half-reaction pairing.
v0.5	PERIODIC_STRUCTURE_GRAPH	Периодический граф элементов, группы, периоды, блоки, валентности, ионы.
v0.6	COMPOUND_MATERIALS_GRAPH	Соединения, соли, оксиды, кислоты, основания, минералы, материалы.
v0.7	SOLUBILITY_ACIDBASE_MATERIALS_ENGINE	Растворимость, pH, precipitate-check, амфотерность, коррозия.
v0.8	THERMO_KINETIC_MATERIALS_ENGINE	Термодинамика, кинетика, равновесия, температурные окна, material coupling.
v0.9	SPECTROSCOPY_ANALYTICS_EVIDENCE_ENGINE	Спектроскопия, аналитика, Evidence-D, uncertainty, substance identification.
v1.0	INTEGRATED_LAB_KNOWLEDGE_GRAPH	Единый лабораторный граф: вещество -> формула -> реакция -> Evidence-D.
v1.1	PUBLICATION_ATLAS	Публикационный атлас, схемы, таблицы, маршруты публикации.
v1.2	SITE_MONOGRAPH_PUBLICATION_BUNDLE	Пакет сайта и монографии: HTML, DOCX/PDF, download-map, table index.
v1.3	REGISTRY_FIPS_DEPOSIT_BUNDLE	Регистрационный депозит для Роспатента/ФИПС: заявление, реферат, депонируемые материалы, согласия, опись.