

Алгоритамски модел хемијских реакција и његова примена у едукативној видео игри

Algorithmic model of chemical reactions and its application in an educational video game

Богдан Давинић, *Факултет техничких наука, Нови Сад*

Студијски програм – РАЧУНАРСТВО И АУТОМАТИКА

Кратак садржај – Овај рад представља развој алгоритамског модела за валидирање хемијских реакција у реалном времену у оквиру едукативне видео-игре. Модел формализује правила комбиновања елемената на основу валентности и електронегативности, уз аутоматизовано генерисање формуле и визуелног приказа једињења. Систем је имплементиран у окружењу Unreal Engine и омогућава интерактивну проверу реакција кроз повратну информацију кориснику. Рад повезује алгоритамску логику са визуелним и педагошким принципима у циљу подршке учењу кроз игру.

Кључне речи (три до пет): алгоритам, хемијске реакције, валидација, едукативна игра, визуелизација

Abstract – This paper presents the development of an algorithmic model for real-time validation of chemical reactions within an educational video game. The model formalizes the rules of element combination based on valence and electronegativity, including automated formula generation and visual compound rendering. Implemented in the Unreal Engine environment, the system enables interactive reaction validation through user feedback. The work integrates algorithmic logic with visual and pedagogical principles to support learning through gameplay.

Keywords: (three to five): algorithm, chemical reactions, validation, educational game, visualization

НАПОМЕНА: Овај рад проистекао је из мастер рада чији ментор је био др Драган Иветић, ред. проф.

1. УВОД

Постојећа дигитална решења за подучавање хемије најчешће су конципирана као квизови, једноставне симулације лабораторијских експеримената или визуелни прикази елемената. Код таквих система изостаје формално дефинисана логика међусобне интеракције хемијских елемената. У тим система правила хемијских реакција често нису формално моделована, већ представљају илустративне или

наративне примере. Услед непостојања адекватног алата јавља се потреба за прецизним дефинисањем хемијских процеса и увођењем јасних правила интеракције у игри, како би корисник кроз игру усвојио логику хемијских реакција.

Основни проблем којим се овај рад бави јесте недостатак формализованог модела за валидацију хемијских реакција у реалном времену унутар едукативне видео-игре. Било је потребно дефинисати начин на који се комбиновањем унетих елемената и њихових валенци, електронегативности и других особина може генерисати резултат који је у складу са хемијским принципима. На визуелном нивоу требало је приказати ток реакције и формирање једињења у облику који је интерактиван и разумљив кориснику.

Са аспекта техничке реализације, проблем обраде подразумева пројектовање структура података и алгоритама који могу да опишу елементе, њихове особине и правила њихових интеракција. Стога је било потребно развити механизам који ће, у складу са хемијским принципима, генерисати исправан резултат реакције и паралелно обезбедити прегледан визуелни приказ тока реакције и формирања једињења.

Овај рад се фокусира на бинарне реакције између два елемента, при чему је развијен модел који омогућава њихову валидацију и визуелизацију унутар окружења „Unreal Engine“. У оквиру тог модела испитује се начин на који се логика хемијске реакције може интегрисати у механику игре, а да се не наруши њена интерактивна или визуелна структура. Резултати рада треба да омогуће основу за проширење система на сложеније типове реакција и повезивање са педагошким приступима учења кроз игру.

Идеја рада није да се створи образовни алат у педагошком смислу, већ да се технички испита могућност алгоритамске валидације хемијских процеса и њиховог обједињавања са визуелним приказом унутар једног интегрисаног система. да се развије и имплементира алгоритамски модел који формално дефинише и проверава исправност хемијских реакција у реалном времену, заснован на валентним правилима и електронегативности елемената, и да се тај модел integriше у интерактивно окружење образовне видео-игре. На тај начин, рад

повезује техничку тачност хемијских процеса са визуелним и интерактивним приказом у едукативном контексту.

2. МЕТОД

Да би се тај циљ остварио, неопходно је формулисати јасне техничке задатке и међуциљеве. Први корак обухвата дефинисање структура података за представљање хемијских елемената и једињења, при чему те структуре морају омогућити једноставно проширење и аутоматизовану проверу односа између елемената. Следећи корак је развој алгоритма за валидацију реакција који проверава комбинације на основу валентних правила, електронегативности и хемијске стабилности. Резултат валидације представља улаз за визуелни модул који генерише приказ формираног једињења и обезбеђује повратну информацију кориснику.

Трећи задатак односи се на интеграцију ових компонената у јединствену архитектуру у оквиру окружења „Unreal Engine“. Тиме се омогућава да систем функционише у реалном времену, при чему свака корисничка интеракција активира логичку проверу и одговарајућу визуелну реакцију. Посебна пажња посвећује се модуларности како би се систем могао проширити додавањем нових типова реакција, сложенијих једињења или различитих механизма визуелизације.

Модел података у систему представља основу техничке архитектуре и дефинише начин на који су хемијски ентитети записани, обрађени и приказани кориснику. Његова функција је да обезбеди конзистентан формат за размену информација између модула задужених за валидацију реакција, генерисање назива и визуелну презентацију резултата. Све структуре имплементирани су као „USTRUCT“ типови у окружењу „Unreal Engine“, чиме се постиже интеграција са „Blueprint“ системом и омогућава проширење функционалности без нарушавања постојећег кода.

„FElement“ је основна јединица модела података и описује појединачне хемијске елементе. Његови атрибути укључују симбол и назив елемента, листу могућих валентних стања, припадност хемијској групи и боју која се користи у визуелном интерфејсу. Ова структура омогућава систему да сваки елемент тумачи као самосталан ентитет са јасно дефинисаним особинама које се могу анализирати, комбиновати и приказивати. Тако се успоставља веза између хемијских својстава и њиховог визуелног приказа, што доприноси транспарентности интеракције.

„FCompound“ моделује резултат комбиновања два или више елемената. Садржи податке о укљученим елементима, њиховом односу, типу везе, формули једињења и визуелним карактеристикама. Однос између елемената изражава се помоћу најмањег заједничког садржалаца њихових валенци, а атрибути као што су тип везе (јонска или ковалентна). Боја добијена пондерисањем компоненти омогућавају повезивање хемијског значења са визуелном

репрезентацијом. „FCompound“ функционише као веза између алгоритма валидације и приказа резултата.

„FReactionResult“ обједињује исход реакције и служи као мост између логичког и интерактивног слоја система. Садржи показатеље успешности, формирано једињење када је реакција валидна, текстуалну поруку и додатне параметре попут енергије или стабилности. Ова структура обезбеђује стандардизован формат за све повратне информације, што омогућава да се сваки исход прецизно забележи и да корисник добије јасну повратну поруку.

Повезаност између ових структура обезбеђује јасан ток података: елементи описани у „FElement“ улазе у процес комбиновања, алгоритам на основу њихових особина креира „FCompound“, а резултат валидације се приказује преко „FReactionResult“. Оваква организација омогућава модуларност, јер сваки део система има дефинисану функцију и може се самостално проширити. Модел података тиме чини језгро техничке архитектуре и обезбеђује стабилну основу за алгоритме валидације, именовања и визуелне презентације.

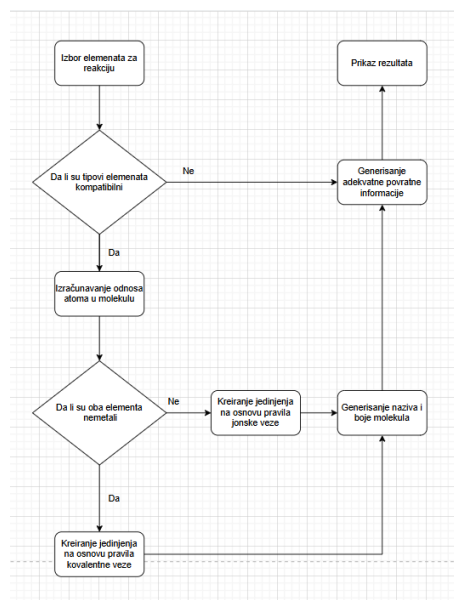
Алгоритам валидације представља функционално језгро система и проверава исправност сваке реакције. На основу параметара елемената, валенци, припадности хемијским групама и електронегативности, он утврђује да ли се може формирати стабилно једињење и како се дефинише однос између атома у формули. Тиме се обезбеђује доследно понашање и усклађеност са хемијским принципима, а корисник добија непосредну повратну информацију.

Валидација започиње преузимањем података из структура „FElement“ које корисник изабере. На основу типа елемената одређује се врста везе: комбинација метала и неметала резултује јонском везом, док комбинација два неметала даје ковалентну везу. Електронегативност се користи за дефинисање редоследа симбола у формули, елемент са мањом електронегативношћу налази се на првом месту. Следећа фаза валидације укључује анализу валентних стања учесника. Алгоритам пореди могуће вредности и рачуна најмањи заједнички садржалац како би одредио однос броја атома у једињењу; овај стехиометријски однос формира нумерички баланс реакције. Када се однос утврди, алгоритам конструише структуру „FCompound“ са свим потребним информацијама о формираном једињењу, укључујући тип везе, хемијску формулу и визуелне параметре.

У случају неуспешне реакције, када комбинација елемената не задовољава услове, систем генерише негативан резултат и поруку која објашњава узрок. Ови исходи се бележе у оквиру структуре „FReactionResult“, која служи као стандардизован излаз за све повратне информације. Тако процес валидације обезбеђује техничку конзистентност и јасну дидактичку структуру, јер сваки исход има функцију информисања и усмеравања корисника.

Алгоритам обухвата и специјалне случајеве: племените гасове и друге елементе без доступних

валентних стања, водоник и амонијак са специфичним везама или нереактивне комбинације. Имплементација алгоритма у „C++“ у унутар окружења „Unreal Engine“ омогућава високу перформансу и јасну интеграцију са интерфејсом. Структуре података из модела обезбеђују ефикасну комуникацију између модула, док модулarna архитектура омогућава додавање нових правила без измене постојећег кода.



Слика 1. Дијаграм тока валидације реакције

Алгоритам именовања пролази кроз неколико фаза. Најпре анализира формулу и тип везе утврђену валидацијом. За јонска једињења примењују се правила по којима је први елемент метал, а други неметал; назив метала остаје непромењен, док назив неметала добија суфикс „-ид“. Ако метал има више валентних стања, његова валенца се приказује римским бројем у загради ради прецизности.

За ковалентна једињења, где учествују два неметална елемента, систем користи префиксе за означавање броја атома. Први елемент добија префикс само ако се појављује више пута, док други увек добија префикс, а завршава се суфиксом „-ид“ (нпр. $\text{CO}_2 \rightarrow$ угљен-диоксид). Редослед елемената у формули одређује се на основу електронегативности; елемент са већом електронегативношћу наводи се на другом месту. Овим приступом генерисани назив одражава хемијску структуру и логику реакције.

Систем такође садржи табелу изузетака за устаљене називе који не прате општа правила, као што су H_2O или NH_3 . Ове вредности се проверавају пре примене алгоритма, чиме се обезбеђује усклађеност са научном праксом, уз задржавање флексибилности за образовни контекст. Формирање назива остварује се путем функција које препознају шаблон у хемијској формули и аутоматски додају одговарајуће префиксе и суфиксе. Функције попут „GetCovalentPrefix“ и „GetCovalentRootName“ обезбеђују стандардизацију и смањују могућност грешке. Резултат ових функција

повезује се са структуром „FCompound“ и приказује кориснику одмах након валидације.

Имплементација је изведена у окружењу „Unreal Engine“ уз комбинацију „C++“ језика и „Blueprint“ скрипти. Такав приступ омогућава баланс између нисконивојске контроле над логиком и високог степена флексибилности у експериментима са визуелним сегментима система. Подаци о елементима и једињењима чувају се у „JSON“ формату, што обезбеђује ефикасно учитавање и једноставно проширивање базе. Радни ток вођен је алатом „Visual Studio“.

3. РЕЗУЛТАТИ

Интеграција визуелног и логичког слоја реализована је кроз систем догађаја „Unreal Engine“-а: свака акција корисника покреће проверу реакције и ажурира визуелни приказ у реалном времену. Функционалност система проверавана је кроз мануелна тестирања и анализу понашања током интерактивног играња. Иако формална евалуација ефикасности система није спроведена, систем је тестиран на стабилност и тачност, а уочене грешке и потешкоће исправљане су итеративно. На основу резултата тестирања дате су препоруке за будућа истраживања.^[7]

Алгоритам валидације повезује основне хемијске параметре у логички ток који одређује исход реакције. Он функционише без спољашњих база и користи једноставне релације како би одржао равнотежу између тачности и брзине обраде. Тиме систем задржава научну конзистентност, а истовремено остаје довољно ефикасан за интерактивни рад. Током тестирања, алгоритам је показао стабилан одзив и тачне резултате при свакој поновљеној валидацији.

Интерфејс користи „event-driven“ приступ, где се елементи освежавају само када дође до промене стања. Овај принцип смањује број операција и обезбеђује одзивност без прекида тока. Време између корисничке акције и приказа резултата остало је у границама које омогућавају континуирану интеракцију. Ефикасно коришћење меморије додатно доприноси стабилности и предвидивом понашању система.

4. ДИСКУСИЈА

Структурна модуларност представља додатну предност. Модел података, алгоритам и визуелни слој функционишу као одвојене, али повезане целине, што омогућава проширење функционалности без нарушавања постојећег система. Ова флексибилност обезбеђује одрживост и олакшава примену система у будућим истраживањима или образовним контекстима.

Технички аспекти оптимизације усмерени су на постепено повећање изражајне моћи алгоритма без губитка детерминистичког понашања. Уместо потпуног редизајна, могу се увести параметарски слојеви који би омогућили реакције са додатним условима (нпр. температура или притисак) кроз ограничене нумеричке опсеге. Такав приступ би задржао стабилност основног модела, а омогућио

приказ ширег спектра хемијских појава. Паралелно с тим, архитектура система већ омогућава модуларно проширење ка вишекомпонентним реакцијама, где би свака нова компонента била засебан модул уместо део монолитне формуле. Тиме би се постигла скалабилност уз контролу перформанси.

Дакле, иако тренутни модел успешно валидира хемијске везе у формалном смислу, његова статичка природа представља ограничење у односу на реалне хемијске процесе. Кроз планирано увођење кинетичких принципа, брзине, енергије активације и каталитичких ефеката, систем би могао да постане динамички едукативни алат који објашњава не само „шта се дешава“, већ и „како и зашто се то дешава“ током хемијске реакције.

5. ЗАКЉУЧАК

Техничка структура система показује да је могуће остварити едукативни модел који у реалном времену спаја прецизност, стабилност и одзивност. Поуздан модел података, ефикасан алгоритам и кохерентан визуелни слој заједно чине основу за даљи развој система и његову педагошку примену, где техничка тачност постаје алат за разумевање, а не препрека учењу.

6. ЛИТЕРАТУРА

- [1] P. Atkins, J. D. Paula, and J. Keeler, *Atkins' Physical Chemistry*, 12th ed. Oxford University Press, 2022. doi: 10.1093/hesc/9780198847816.001.0001.
- [2] C. Ware, *Information visualization: perception for design*. in The Morgan Kaufmann series in interactive technologies. San Francisco, CA: Morgan Kaufman, 2004.
- [3] B. Shneiderman and C. Plaisant, *Designing the user interface: strategies for effective human-computer interaction*, 4. ed. Boston, Mass. Munich: Pearson/Addison-Wesley, 2005.
- [4] D. E. Knuth, "The art of computer programming. 1: Fundamental algorithms," 2. ed., 34. [print.], Reading, Mass: Addison-Wesley, 1995.
- [5] R. C. Martin, J. Grenning, S. Brown, and K. Henney, *Clean Architecture: a craftsman's guide to software structure and design*. in Robert C. Martin series. Boston Columbus Indianapolis New York San Francisco Amsterdam Cape Town Dubai London Madrid Milan Munich Paris Montreal Toronto Delhi Mexico City São Paulo Sydney Hong Kong Seoul Singapore Taipei Tokyo: Prentice Hall, 2018.
- [6] R. E. Mayer, "TABLE I DEFINITIONS OF KEY TERMS Term Definition Example".
- [7] R. K. Yin, *Case study research and applications: design and methods*, Sixth edition. Los Angeles London New Delhi Singapore Washington DC Melbourne: SAGE, 2018.

Кратка биографија:

Богдан Давинић рођен је 2000. године у Крагујевцу. Основне студије завршио је на Факултету техничких наука Универзитета у Новом Саду, на смеру Рачунарство и аутоматика. Мастер студије наставио је на истом факултету, на смеру Мултимедија и развој игара.

Од 2023. године ангажован је као сарадник у настави, где доприноси практичној настави и раду са студентима.

Контакт: davinicbogdan@gmail.com