

МОДЕЛЬ РЕШАТЕЛЯ КЛАССА ЗАДАЧ ПОИСКА ПУТИ СИНТЕЗА ХИМИЧЕСКОГО СОЕДИНЕНИЯ

Трофимов М. В.

ГОУВПО «Владивостокский государственный университет экономики и сервиса»,
г. Владивосток

E-mail: zapalm@rfpro.ru

Проблема. В работе химика существует актуальная задача, заключающаяся в поиске пути синтеза химического соединения. Необходима система, позволяющая автоматизировать решение данной задачи. Система должна быть интеллектуальной и развиваемой.

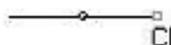
В данной работе предоставлена модель решателя класса задач поиска пути синтеза химического соединения на основе интеллектуальных агентов.

Метод решения. Определение пути синтеза химического соединения производится с помощью рекурсивной процедуры. На каждом шаге синтеза соединения производится поиск соответствующей реакции в базе данных. Условия поиска задаются во входных параметрах интеллектуальной системы. При решении задачи формируется множество путей синтеза. Каждый путь синтеза представляется последовательностью веществ, участвующих в синтезе на каждом шаге. В объяснении приводится список реакций, имевших место на каждом шаге синтеза. Каждое вещество представляется своей краткой структурной формулой, а каждая реакция записывается с помощью принятых в предметной области графических обозначений.

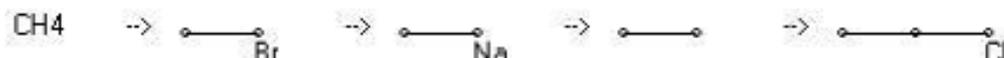
Пример синтеза химического соединения.

Начальное соединение: CH₄.

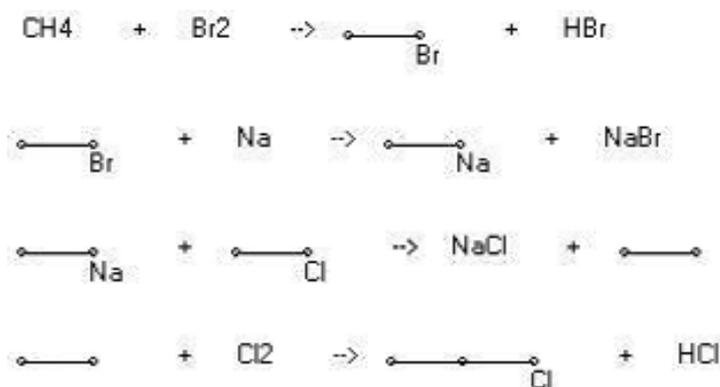
Соединение, которое необходимо синтезировать:



Найденное решение:



Описание реакций, входящих в путь синтеза:



Модель решателя класса задач поиска пути синтеза химического соединения (рисунок 2):

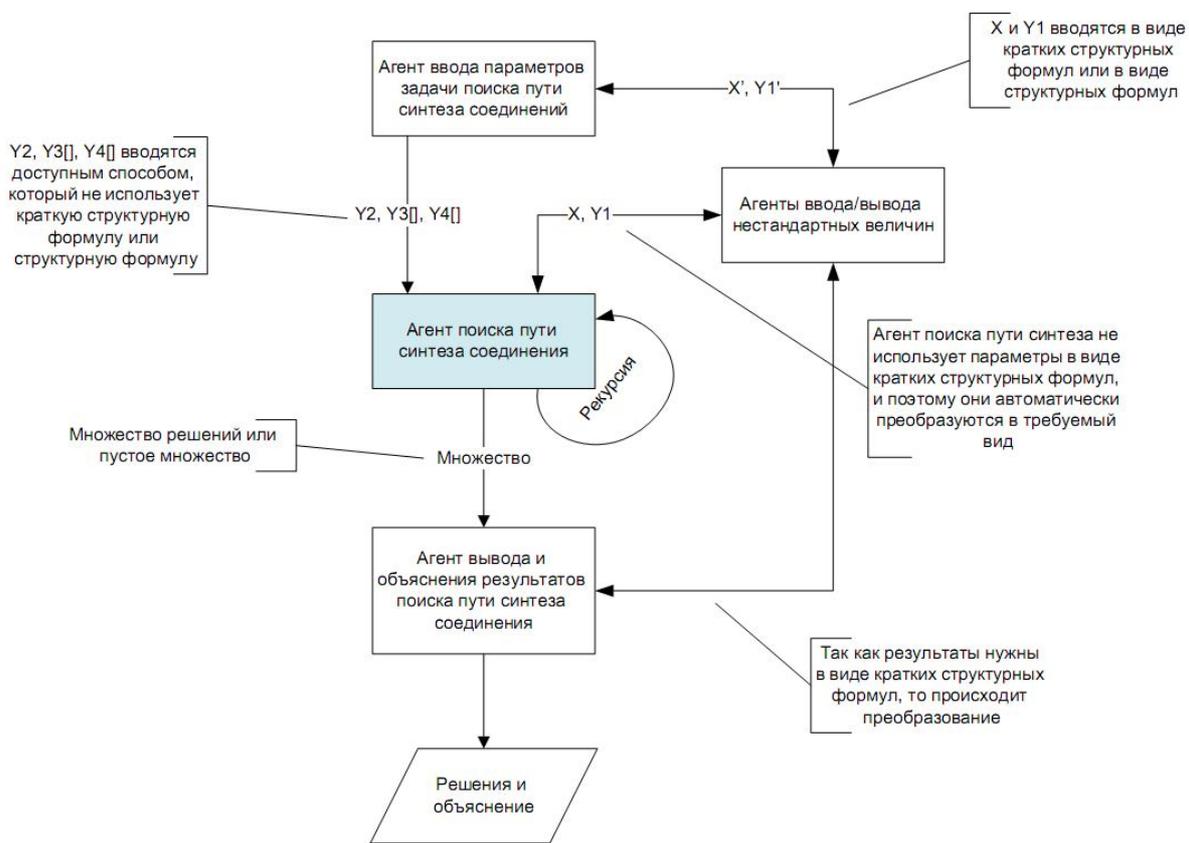


Рисунок 2 – Модель решателя класса задач поиска пути синтеза

Заключение. Модель решателя класса задач поиска пути синтеза химического соединения может быть применена для создания на ее основе развиваемой интеллектуальной системы. Модель и система на ее основе актуальны для применения в прикладных и исследовательских задачах в области химии.