

## **ЭВРИСТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В ОРГАНИЧЕСКОМ СИНТЕЗЕ**

Фирстова О.А., Даниленко Н.В.

Научный руководитель: Карпова А.Ю., доцент, к.с.н.

Томский политехнический университет, Россия, г.Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: oaf@tpu.ru

## **HEURISTIC METHODS IN ORGANIC SYNTHESIS**

Firstova O.A., Danilenko N.V.

Scientific Supervisor: Associate Professor, PhD, Karpova A.J.

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin Ave., 30, 634050

E-mail: oaf@tpu.ru

Как известно, наука не стоит на месте, в том числе органическая химия. Вместе с теоретической базой знаний развивается и экспериментальный сектор. С течением времени разрабатываются новые подходы к изучению химических явлений, появляются новые методы обработки и анализа данных. Из-за большого многообразия типов данных, необходимых для решения одной задачи, требуется их классификация, так же как и классификация методов решения. Для облегчения и ускорения поиска решения можно представить эвристический метод, как один из оптимальных.

### **Подходы к химическому эксперименту**

Для химического эксперимента, в зависимости от его особенностей, приемлемы различные подходы. Так, если перед исследователем стоит типовая задача, решить ее можно дедуктивным методом. Иными словами, можно воспользоваться готовой методикой и получить хороший результат с большой долей вероятности. В случае воспроизведения опыта например, для наработки химической субстанции, достаточно следовать готовому алгоритму.

Однако гораздо менее однозначным выглядит решение масштабного, составного эксперимента, когда дополнительной задачей является выбор подхода к нахождению решения.

«Томас Эдисон провел около 50 тысяч опытов, пока разрабатывал устройство щелочного аккумулятора» [1]. Очевидно, что в данном случае использовался метод индукции.

Проблема индукции остается дискуссионной в химии [2]. Это касается, прежде всего, фундаментальных исследований, когда проводится ряд однотипных экспериментов при каком-либо меняющемся параметре. Такой принцип исследования принадлежит индукции, ведь при недостатке информации о химической реакции, физико - химическом процессе или другом явлении не всегда представляется возможным применить дедукцию по аналогии с другим, типовым, экспериментом. Дело в том, что в настоящее время границы и возможности химии стремительно расширяются. Как следствие, не все грани химического эксперимента можно обсудить дедуктивно.

### **Суть эвристического подхода**

Эвристический алгоритм (эвристика) — алгоритм, который позволяет получить в большинстве случаев приемлемое, адекватное решение задачи. Данный метод не имеет четкого обоснования, но применяется как значительно более быстрый, но недостаточно обоснованный теоретически алгоритм вместо полного перебора вариантов, занимающего существенное время, а иногда технически невозможного [3, 4].

Из сказанного можно сделать вывод, что эвристика подходит для фундаментального

исследования с большим массивом данных и несколькими параметрами эксперимента, иначе метод неоправдан.

Такой вывод подтверждается источником [3], который предполагает использование эвристик для решения каждой конкретной задачи. Целесообразность выражается соотношением затрат на решение задачи точным и эвристическим методами, ценой ошибки и статистическими параметрами эвристики. Несмотря на наличие алгоритмов для каждого типа задач, всегда необходимо сначала оценить задачу со здравым смыслом, без привлечения техники и расчетов.

Существует формула, которая помогает оценить целесообразность использования эвристического метода вместо расчетов или проведения комплекса опытов.

$$(T/1000 + 0.05 \cdot E) = (19.98 \cdot T - E)/20$$

T – цена точного решения, E – цена ошибки [5].

Данное уравнение показывает, что когда двадцатикратная цена точного решения меньше цены ошибки, лучше прибегнуть к точному решению. Такое соотношение доказывает выгоду эвристик.

К достоинствам эвристических методов можно отнести тот факт, что они способны приводить к цели в условиях неполноты исходной информации в отсутствие четкой программы управления процессом решения задачи [6]. Можно заметить, что метод связан с научной интуицией, которая основана на знаниях и научном прогнозировании.

#### Эвристический подход в органическом синтезе



Схема 1. Эвристические методы для классического органического синтеза

При постановке синтеза очень важную роль играет подбор условий, при которых будет достигаться поставленная цель. Необходимо сразу выявить возможные конфликты в условиях, взаимоисключающие методики. Стадии синтеза продумывают от конца к началу, дробя целевой продукт на более простые составляющие. После того, как будет получена полная картина синтеза, включающая в себя все условия, нужно приступить к планированию стратегии по реализации.



Схема 2. Эвристические методы для оптимизации в фундаментальном исследовании

Для оптимизации химического процесса с несколькими меняющимися параметрами

необходимо четко представлять все задачи для их комплексного решения. В процессе формирования решений при помощи критики каждого можно избежать принятия неверного решения.

Найденное наилучшее решение проблемы должно быть рассмотрено более детально, чтобы окончательно устранить нерациональные действия. Далее следует продумать стратегию по реализации идеи.



Схема 3. Эвристические методы при анализе данных

Одной из самых важных задач в органической химии является анализ полученных данных. Обычно такими данными являются результаты физико-химических исследований продукта. При интерпретации данные рассматриваются с различных сторон, сравниваются с ранее полученными данными и с литературными. Необходимо помнить про условия проведения синтеза, так как несоответствия могут быть обусловлены спецификой условий. В затруднительных ситуациях стоит обратиться за помощью к человеку более квалифицированному в данном вопросе. Реализовывается стратегия использования информации.



Схема 4. Эвристические методы в масштабировании до производства

При масштабировании синтеза и переносе его на уровень производства возникают различные задачи и проблемы, требующие всестороннего рассмотрения и четкой формулировки. Когда задача сформулирована, необходимо сопоставить её с реальной ситуацией для выбора наиболее оптимальной стратегии достижения цели.

Вывод. В данной работе были рассмотрены эвристические методы, применимые в органическом синтезе, а так же подобраны оптимальные методы для некоторых задач в химии.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Буш Г. Я. Стратегии эврилогии. – Рига: Общество «Знание» ЛатвССР, 1986. – 64 с.
2. Caldin E.F. The structure of chemistry in relation to the philosophy of science // HYLE: Intern. j. for philosophy of chemistry. – Karlsruhe, 2002. – Vol.8, N2. – P.103–121.
3. Гудман С., Хидетниemi С., Введение в разработку и анализ алгоритмов. М.: «Мир», 1981.
4. Князева Е. Н., Курдюмов С. П. Антропный принцип в синергетике // Вопр. философии. – 1997. – № 3.
5. Саак А.Э. Принцип эвристики в многоцелевой оптимизации // Известия ЮФУ. – 2001. Т. 1. № 2. – С. 62-64.
6. Кондаков Н. И. Логический словарь-справочник. – 2-е изд. – М.: Наука, 1975. – 674 с.