

А. А. ЗЕНКИН, Ю. А. УСТЫНЮК, Л. А. ЕМЕЛЬЯНОВА, Ю. И. ТОРГОВ

СПЕЦИАЛИЗИРОВАННАЯ ДИАЛоговая СИСТЕМА ДЛЯ ХИМИЧЕСКИХ НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

(Представлено академиком А. В. Дородницким 20 V 1974)

Важным аспектом проблемы автоматизации химических научных исследований является изучение возможностей использования ЭВМ в режиме диалога. Такой режим не только обеспечивает оперативную и удобную связь с ЭВМ в процесс проведения научного исследования, но и благоприятствует наиболее полному проявлению творческих способностей химика-исследователя, его профессионального опыта и научной интуиции.

Одно из важнейших условий эффективной реализации диалогового режима — разработка естественного (профессионального) языка связи исследователя с ЭВМ. Естественный язык химических исследований — это язык структурных формул. Для того, чтобы использование ЭВМ в диалоговом режиме могло сыграть роль существенного фактора в прогрессе химических исследований, необходимо, сохранив традиционные «химические» достоинства этого языка, сделать его понятным для ЭВМ.

Строго говоря, классический язык структурных формул отражает лишь «топологию» строения молекул, является существенно двумерным и потому при построении диалоговых систем может быть использован для решения лишь ограниченного круга химических задач, в основном качественного характера (¹).

Адекватной и универсальной формой представления количественной информации о геометрии молекулярной системы (м.с.) является ее трехмерная математическая модель, т. е. набор координат атомов м.с. в произвольном образом фиксированной декартовой системе координат. Вывод такой информации на экран дисплея в виде объемной, — этот эффект достигается благодаря вращению, — модели (трехмерной структурной формулы) соответствующей м.с. не составляет трудностей (²⁻⁴), так что математическая модель м.с. сочетает в себе наглядность представления со строгой количественной адекватностью пространственной структуре реальной м.с.

На базе АСУ моделями м.с. (^{3, 5}) и системы «Экран» ВЦ АН СССР (⁶) разработана специализированная диалоговая система ДИАХИМ для химических научных исследований. Система ДИАХИМ использует сервисный набор терминальных устройств (телетайп, графическое устройство ввода, телевизор со световым пером, графопостроитель и др.), что обеспечивает наиболее эффективную форму организации работы химика-исследователя в процессе построения моделей м.с., управления изменениями их геометрии и изучения физико-химических свойств м.с. Ниже, — на примере телевизионного терминала со световым пером, — описаны организация диалога, некоторые основные алгоритмы и режимы работы, которые позволяют химику с помощью средств языка, близкого к традиционному языку химических исследований, строить непосредственно на экране дисплея изображения м.с. с одновременным построением их трехмерных математических моделей в памяти ЭВМ, произвольным образом менять их геометрию, а также рассчитывать и выводить на экран в удобной графической форме динамические зависимости физико-химических свойств м.с. от их строения.

Основной процедурой, реализующей построение математических моделей м.с. в режиме диалога, является процедура ШАГ7 (МНА, ТО, ПП), формальные параметры которой имеют следующий смысл: МНА — массив номеров атомов, координаты которых подвергаются преобразованию; ТО — тип операции (ТО=1 — сдвиг вдоль оси Y ; ТО=2 — поворот около оси Z ; ТО=3 — поворот около оси Y); ПП — параметр преобразования. Как показано в (3), возможности процедуры ШАГ7 обеспечиваются построение модели любой м.с., если известны ее естественные координаты; в противном случае, неизвестным параметрам приписываются разумные априорные значения (или подбираются визуально непосредственно по изображению м.с. на экране дисплея) с последующим поиском их оптимальных значений с помощью АСУ моделями м.с., так что задача построения математических моделей м.с. с помощью процедуры ШАГ7 всегда является определенной в математическом смысле.

Идея алгоритма построения трехмерных математических моделей м.с. заключается в следующем. Пусть некоторый атом A химически связан с атомами A_1, A_2, \dots, A_k ($k \geq 2$). Назовем атом A — узловым, а совокупность атомов A, A_1, A_2, \dots, A_k — узлом степени k . Любая м.с. однозначно представима в виде множества M ее узлов. На множестве M задаем некоторый маршрут — связанную последовательность узлов (более строго понятия узла и маршрута на M определены в (3)). В начальный момент все атомы м.с. (в надлежащем количестве и ассортименте) находятся на «складе», которым служит начало координат, затем строим первый узел, сдвигаем его вдоль оси Y так, чтобы Y — координата узлового атома первого узла была равна расстоянию между узловыми атомами первого и второго узлов и соответствующим образом (путем последовательного вращения около осей Z и Y) ориентируем его относительно второго узла. Аналогично строим второй узел, и т. д. до тех пор, пока не будет построен последний. Визуально эта процедура напоминает последовательное «продавливание» м.с. через начало координат.

Работа химика-исследователя с системой ДИАХИМ в режиме диалога осуществляется с помощью двух телевизионных терминалов I и II и организована следующим образом. На терминал I выводится «химическая» информация: изображение м.с., численные значения свойств и графики их зависимости от соответствующих параметров. На терминал II выводятся световые (управляющие) кнопки, информационные фразы и вспомогательная информация.

Система располагает набором различных режимов работы. Последовательность операций при конкретных режимах работы, в общем случае, фиксирована, что позволяет в каждый момент времени «держат» на экране II минимум необходимой информации: лишь набор указаний (в виде информационных фраз) для выполнения очередной операции и соответствующее этому набору «меню» приказов.

Условимся, что везде ниже информационные фразы заключаются в скобки «...», а световые кнопки — в угловые скобки <...>. Содержимое этих скобок буквально, хотя и не обязательно в линейном формате, высвечивается на экране II. Опишем теперь некоторые основные структурные элементы диалога.

«передать управление <машине> <человеку>». Нажатие кнопок <машине> или <человеку> осуществляет соответствующую безусловную передачу управления.

«режимы работы <1> <2> <3> <4> <5> <6> <7>». Нажатие любой цифры означает переход к соответствующему режиму работы. Имеющиеся в настоящее время режимы работы имеют следующую структуру.

1. Режим построения модели м.с. «укажите, сколько атомов содержит Ваша м.с. <0 1 2 3 4 5 6 7 8 9> <конец числа>». С помощью цифровой шкалы химик набирает соответствующее целое число, нажимает кнопку <конец числа> и получает ответ машины: «Ваша м.с. содержит... ато-

мов», где вместо многоточия высвечивается набранное число. После проверки, нажатием кнопки передачи управления «машине» осуществляется засылка в память ЭВМ этого числа и появляется фраза «укажите, какие типы атомов содержит Ваша м.с.». Одновременно с этой фразой высвечиваются символы всех атомов в виде таблицы Менделеева. Нажатием (в любой последовательности) кнопок соответствующих символов атомов осуществляется засылка в память ЭВМ информации о качественном составе м.с. и одновременно строится последовательность «нажатых» символов C_1, C_2, \dots, C_k (k — количество различных типов атомов, C_i — символ i -го типа атома), которая сохраняется на экране до полного построения модели м.с. Собственно процесс построения модели м.с. программно сводится к многократному обращению к процедуре ШАГ 7 и тем самым к многократному вводу информации, задающей фактические значения параметров м.н.а., т.о. и п.п. этой процедуры. При задании фактических значений параметров м.н.а. могут встретиться различные случаи: один атом, появляющийся впервые, группа атомов или весь построенный фрагмент м.с. С помощью соответствующих информационных фраз машина помогает химику проанализировать ситуацию и с помощью указания атомов на экране I построить массив м.н.а. (Если атом «появляется» впервые, то нажатием соответствующей кнопки $\langle C_i \rangle$ он визуализируется на экране I в виде символа C_i). После того, как массив м.н.а. построен, на экране II высвечивается фраза «укажите, какие операции над очередной группой атомов необходимо произвести: тип операции \langle сдвиг вдоль оси $Y \rangle$ \langle вращение около оси $Z \rangle$ \langle вращение около оси $Y \rangle$ ». После нажатия кнопки соответствующего типа операции, например, \langle вращение около оси $Z \rangle$, появляется фраза «повернуть около оси Z на... градусов $\langle -0\ 1\ 2\ 3\ 4\ 5\ 6\ 7\ 8\ 9 \rangle$ \langle целых \rangle \langle конец числа \rangle ». Для набора на этой шкале, например, числа $-109,471$ нажимается следующая последовательность кнопок $\langle - \rangle$ $\langle 1 \rangle$ $\langle 0 \rangle$ $\langle 9 \rangle$ \langle целых \rangle $\langle 4 \rangle$ $\langle 7 \rangle$ $\langle 1 \rangle$ \langle конец числа \rangle и в предыдущей фразе вместо многоточия появляется число $-109,471$. После проверки и нажатия кнопки «машине» реализуется соответствующее движение рассматриваемой на данном этапе группы атомов. Нажимая (в необходимом количестве и последовательности) кнопки типа операции мы можем поместить эту группу атомов в заданную область пространства. Кнопка «конец этапа» осуществляет переход к «построению» новой группы атомов. Наконец, нажатие кнопки «модель построена» формирует машину с завершением режима построения модели и сопровождается фразой «построение модели Вашей м.с. закончено. Укажите следующий режим работы».

2. Режим просмотра. В этом режиме осуществляется вращение модели на экране I для получения наглядного представления о пространственной структуре модели. Управляющие кнопки «стандартное вращение», «вращение около оси X (Y или Z)», «стоп», «возврат», «запомнить» обеспечивают общий просмотр структуры, фиксацию угла зрения и запись координат текущего положения модели вместо координат ее исходного положения.

3. Режим «микроскоп». Интересующий химика фрагмент м.с. обводится световым пером, затем на экране I задается прямоугольное смотровое окно, на которое и выводится в увеличенном до размеров окна виде этот фрагмент. Рекурсивное воспроизведение этой процедуры позволяет изучить детали структуры м.с. любой сложности. Использование на этом этапе режима просмотра (вращения) позволяет воспроизвести объемную структуру фрагмента.

4. Режим выдачи информации о геометрии м.с. С помощью кнопок «межъядерные расстояния», «плоские углы», «двугранные углы» и указания световым пером на экране I соответствующих пар, троек и шестерок атомов можно вывести ⁽³⁾ на экран точные значения любых геометрических параметров модели м.с.

5. Режим управления. Этот режим основан на использовании

универсальной процедуры ШАГ⁽³⁾, которая позволяет произвольным образом менять любые геометрические параметры модели. При этом вся информация о такого рода преобразованиях задается путем указания с помощью светового пера соответствующих атомов непосредственно на изображении модели. Значения самих параметров преобразования набираются на шкале цифровых кнопок. Этот режим обеспечивает весьма эффективный визуальный поиск «хорошего» начального приближения при решении задачи оптимального управления⁽³⁾.

6. Режим изучения физико-химических свойств модели. В а.с.у. моделями м.с. имеется библиотека стандартных процедур для решения различного рода химических задач. При последовательном высвечивании на экране каталога библиотеки химик, используя в качестве управляющей кнопки порядковый номер соответствующей процедуры, информирует машину о том, какая задача его интересует. В ответ машина с помощью специфического для каждой задачи набора информационных фраз организует ввод дополнительной информации. Имеется два варианта рассматриваемого режима работы: ручной и автоматический. В первом случае химик «вручную» с помощью режима управления меняет геометрию модели, и получает на экране в наглядной графической форме информацию о характере изменения соответствующего свойства, т. е. на каждом шаге принимает решение о направлении дальнейшего поиска. Во втором случае автоматически решается некоторая задача оптимального управления, однако, имея возможность визуального наблюдения за динамикой процесса, химик с помощью кнопки передачи управления «человеку» может в любой момент вмешаться в ход решения задачи и, если сочтет необходимым, изменить направление поиска.

Следует отметить, что поскольку м.с. с формальной точки зрения представляет собой дискретное точечное множество, физическая природа элементов которого определяется исключительно природой выбранного функционала, возможности системы ДИАХИМ выходят за рамки решения только химических задач.

Московский государственный университет
им. М. В. Ломоносова

Поступило
20 V 1974

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ E. Corey et al., J. Am. Chem. Soc., v. 94, 421 (1972). ² Сборн. Информация, М., 1969. ³ А. А. Зенкин, Кандидатская диссертация, химфак МГУ, 1974. ⁴ L. D. Portigal, W. P. Minicozzi, Chem. Educ., v. 48, 790 (1971). ⁵ А. А. Зенкин, Ю. А. Устылюк, Тез. докл., Конфер. по автоматизации научных исследований на основе применения ЭВМ, Новосибирск, 1972, стр. 77. ⁶ И. А. Артамонов, Л. А. Емельянова, Ю. И. Торгов, В сборн. Обработка информации в системе «человек-машина», М., 1973.