

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ИНСТИТУТ ФИЗИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ

IX ВСЕСОЮЗНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
ХИМИЧЕСКАЯ ИНФОРМАТИКА

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ И ПРОГРАММА КОНФЕРЕНЦИИ

Часть I

11—15 января 1992 г.
Черноголовка

"ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНАЯ БАЗА ДАННЫХ" ПО ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИМ СВОЙСТВАМ ЦИАНИНОВЫХ КРАСИТЕЛЕЙ.

Баскин И. И., Палюлин В. А., Зефирова Н. С.
Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

Разработанный нами прототип "интеллектуальной базы данных" представляет собой самообучающуюся систему с "творческими способностями", содержащую базу данных по некоторым физико-химическим свойствам цианиновых красителей, базу данных по параметрам заместителей, базу знаний, содержащую взятые из литературы и найденные в процессе самообучения корреляции "структура-свойство".

При работе "интеллектуальной базы данных" в "прямом" направлении для задаваемой структуры осуществляется поиск нужного свойства в базе данных. Если этого свойства нет, по базе знаний автоматически ищется возможность вычислить заданное свойство, пользуясь известными корреляциями. Если это оказывается невозможно, то по базе данных ищутся ряды сходных по структурам соединений и статистический блок старается обнаружить еще неизвестную корреляцию, которая, в случае успешной проверки на статистическую значимость используется для вычисления неизвестного свойства. Поскольку все это происходит полностью автоматически, то у пользователя создается впечатление, что найденное свойство содержится в базе данных. В процессе работы программы происходит ее самообучение.

При работе "интеллектуальной базы данных" в "обратном" направлении по заданному набору свойств осуществляется поиск структур в базе данных. Если нужных структур там нет, то осуществляется конструирование молекул для заданного значения свойства, пользуясь либо корреляциями из базы знаний, либо полученными в процессе самообучения.