

EXPLORATION D'UN ESPACE D'ETATS

Didacticiel de Synthèse en Chimie Organique

Claude R. BESSIRE et Philippe GRANDJEAN

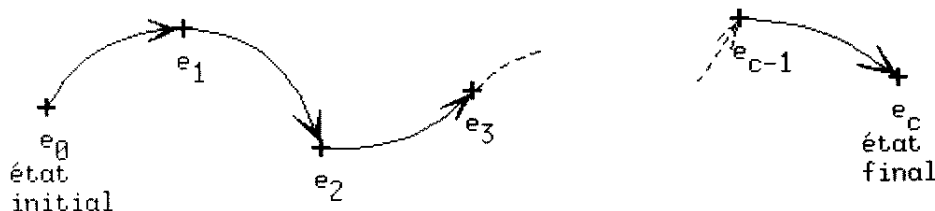
de l'Ecole d'Ingénieurs de Genève

1. Définition de la classe de problèmes

Un grand nombre de problèmes consistent à rechercher une séquence :

$$s_1, s_2, s_3, \dots, s_{c-1}, s_c$$

de transitions entre un état initial e_0 et un état final e_c



Considérons donc un : espace E d'états
 et un : ensemble S de fonctions de transitions s

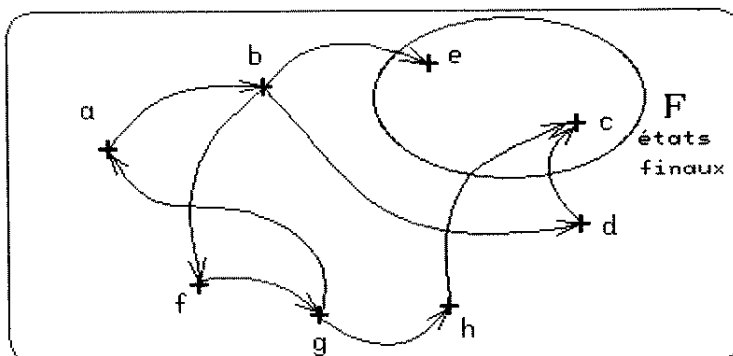
La classe de problèmes à résoudre est donc de rechercher l'image compos

$$s_c(s_{c-1}(\dots s_2(s_1(e_0)) \dots)) = e_c$$

tel que : $e_c \in F$ sous-espace des états finaux

GRAPHES

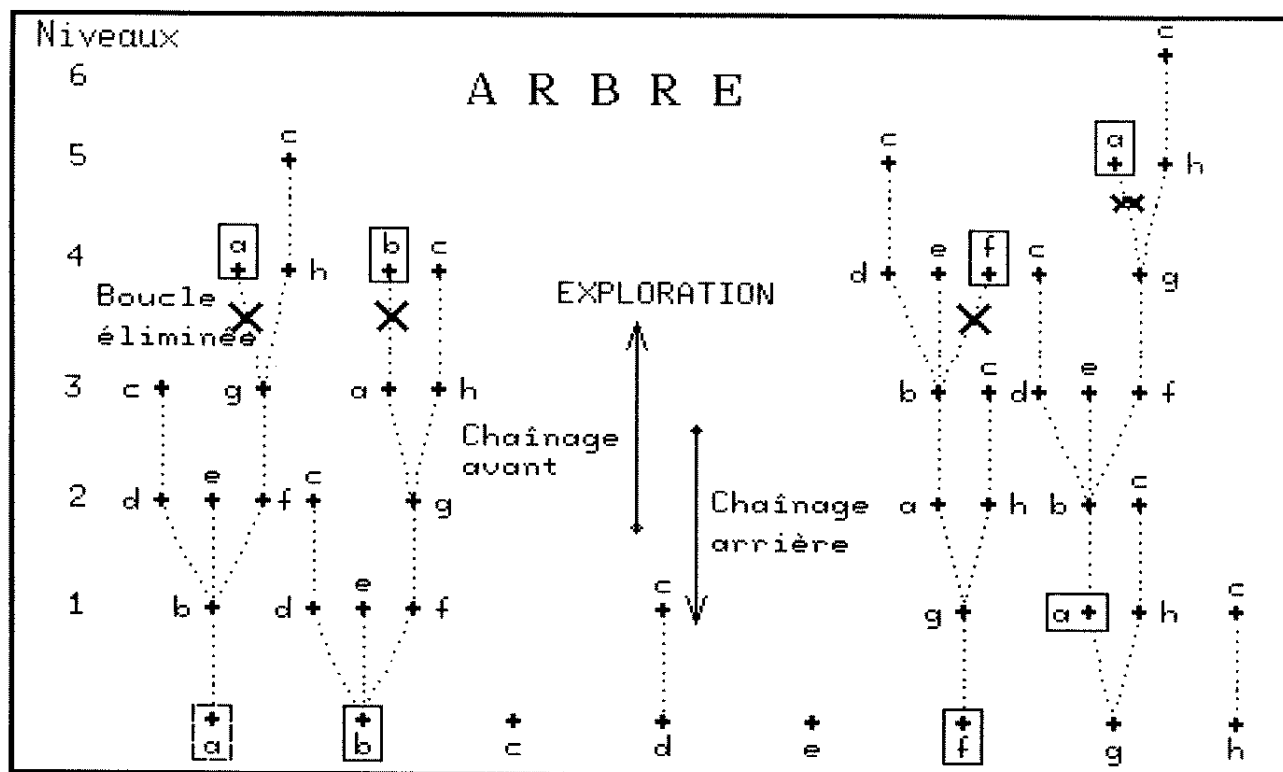
des fonctions
de transitions



E

espace
d'états

Au GRAPHE de S correspond un ARBRE, que l'on peut explorer en **profondeur** et en **largeur**.



2. La synthèse en chimie organique

L'espace des états E choisi est constitué par 49 groupes fonctionnels désignés par des abréviations de la nomenclature [Handbook of Chemistry and Physics (C1) CRC Press]:

ANE	ENE	pour	alcane	alcene
RX	RI		halogénure	iodure d'alcoyle
AL	ONE		aldéhyde	cétone
OIQUE	...		acide carboxylique	...

L'ensemble des fonctions de transitions S regroupe 110 relations de synthèse:

ANE	----	RX
ANE	----	RNO2
...		
CONH2	----	RNH2

auxquelles 3 paramètres ont été associés:

1 - Type de réaction:	ADD	----	addition
	SU		substitution
	...		
2 - Réactif:	E		électrophile
	N		nucléophile
	...		
3 - Conditions:	450 degrés		
	LiAlH4		
	...		

qui permettent à l'utilisateur d'éliminer les séquences non désirées.

3. Listage de la base de données

```

10040 Label_ROUTE
10050 Data "Chainage AVANT", 0
10060 -- Recherche: Chainage AVANT , Niveau
10070 -- Chainage ARRIERE, Niveau
10080 -- Si le Niveau<>1 alors il sera demandé en cours
d'exécution
10090 --
10100 Data "avec ECHO"
10110 -- Affichage de l'exploration: avec ECHO (temps +50%)
10120 -- sans ECHO
10130 --
10140 Data "Composé de DEPART", "Composé d'ARRIVEE"
10150 -- Etats de départ et d'arrivée
10160 --
10170 Data 3
10180 -- Nombre de paramètres (actuellement constant)
10190 --
10200 Data "Type", "Réactif", "Commentaires"
10210 -- Libellés des paramètres
10220 --
10230 Data "Formules semi-développées"
10240 -- Nom synonyme des états
10250 --
10260 Data 1, 18, 36, 86, 111
10270 -- Numeros d'ordre des premières lignes
10280 -- pour chaque degré de difficulté pédagogique
    
```

4. Film de l'exécution

```

11000 -----
11010 Label_ETATS -- ESPACE DES
11020 Data 49 -- Nombre total d'etats
11030 -----
11040 -- NOM, SYNONYME
11050 Data "ANE", "CH3-CH2-CH3" -- 1
11060 Data "ENE", "R-CH=CH2"
11070 Data "YNE", "R-C#CH"
11080 Data "ALI", "(CH2)n"
11090 Data "ARO", "C6H6" -- 5
...
11530 Data "ARNNAR'", "C6H5-N=N-AR'"
11540 -- 50
15005 -- DEGRE DE DIFFICULTE 1
15010 Label_FONCTION -- DE TRANSITION, ET PARAMETRES
15040 Data "ANE", "RX", "SU", "RAD", "UV ou 450 deg." -- 1
15050 Data "ANE", "RNO2", "SU", "RAD", "450 deg"
...
15180 Data "ENE", "RX2", "ADD", "E/N", "" -- 15
15190 Data "ENE", "OHC1", "ADD", "E/N", ""
15200 Data "ENE", "HSO4R", "ADD", "E/N", ""
15210 --
15220 -- DEGRE DE DIFFICULTE 2
15230 -----
15240 Data "HSO4R", "OL", "SU", "N", ""
15250 Data "ENE", "EPO", "ADD", "", "OX"
15260 Data "ENE", "OIQUE", "DEG", "", "OX" -- 20
15270 Data "ENE", "AL", "DEG", "", "OX(ozone), OXO"
...
15400 Data "ARO", "ARSO3H", "SU", "E", ""
15410 Data "ARO", "AROANE", "SU", "E", "RX, FRIEDEL-C." -- 35
15420 Data "ARO", "AROANE", "SU", "E", "ENE, FRIEDEL-C."
15430 --
15440 -- DEGRE DE DIFFICULTE 3
15450 -----
15460 Data "RX", "OL", "SU", "N", ""
15470 Data "ATE", "OL", "DEG", "E/N", ""
15480 Data "AL", "OL1", "RED", "Ni", ""
...
15920 Data "OIQUE", "ONE", "RED", "", "LiAlH4"
15930 Data "COCl", "ONE", "SYN", "", ""
15940 Data "ANHY", "ONE", "SYN", "", "" -- 85
15950 --
15960 -- DEGRE DE DIFFICULTE 4
15970 -----
15980 Data "RX", "RMgX", "ADD", "E", "ETH. ANH."
15990 Data "RMgX", "ANE", "SYN", "", ""
16000 Data "RMgX", "SIL", "SYN", "", ""
16010 Data "RMgX", "OL", "SYN", "", "3 TYPES"
16020 Data "RMgX", "OL1", "SYN", "", "HCHO" -- 90
...
16210 Data "ARNO2", "ARNH2", "RED", "", "Fe/FeCl2"
16220 Data "CONH2", "RNH2", "DEG", "", "HOFFMANN" -- 110
16230 --
16240 -- DEGRE DE DIFFICULTE 5 = FIN
19000 -----
19010 Label_SELECTIO
19020 Data 8 -- Nombre de libelles differents
19030 -- Selection selon un des parametres
19040 -- (prevue, mais pas encore activee)
19050 -----
19060 Data "SU", "ELIM", "DEG", "REA, ELIM"
19070 Data "ADD", "RED", "OX", "SYN"
19080 --
  
```

EIO Chimie Organique
FONCTIONS
orb+pg

ROUTE	Degré de difficulté	1	2	3	4	5	6	7	8	Cheminage RANR
-------	---------------------	---	---	---	---	---	---	---	---	----------------

ROUTE	Recherche	1	2	3	4	5	6	7	8	Cheminage RANR
-------	-----------	---	---	---	---	---	---	---	---	----------------

LISTE DES ETATS

ANE	ENE	YNE	ALI	ARO	RY
ALII	RSO3H	ARCl	ARNO2	ARSO3H	ARONE
R32	OHC1	HSO4R	EPO	POLY	OJOL
ARNH2	OL	OL1	OL2	OL3	AROH
ARATE	RON	ARON	ROR	AROR	RI
COHEN	ALCOL	REN	CONH2	ANHY	AL
ONE	OIQUE	ONH	ATE	RMgX	COCl
SIL	RNH2	ARNH2	C	ARNHCl	ARCU
ARNHAR					

Composé de DEPART : ? ENE --- Composé d'ARRIVEE : ? OL1

ARBRE DE RECHERCHE

Niveaux : ENE --> OL1 R-CH=CH2 --> R-CH2OH

```

graph TD
    ENE --> OL1
    ENE --> RCH[ R-CH=CH2 ]
    RCH --> RCH2OH[ R-CH2OH ]
  
```

4 CHEMINS trouvés

	ENE --> OL1								
	R-CH=CH2								R-CH2OH
1	ENE	-->	ANE	-->	RY	-->	RMgX	-->	OL1
2	ENE	-->	RX	-->	RMgX	-->	OL1		

ROUTE	Eliminer UNDO		Informer HELP	Suivre RETURN	Niveau DO
-------	---------------	--	---------------	---------------	-----------

Lorsque la recherche est terminée, seule une liste des séquences trouvée est affichée

	Niveau		Formules semi-séquentielles		Formulaires
ENE	-->	RX	R-CH=CH2	-->	RY
			ADD		E/N
RX	-->	RMgX	RX	-->	RMgX
			ADD		E
RMgX	-->	OL1	RMgX	-->	R-CH2OH
			SYN		HCHO

ROUTE	Eliminer UNDO		Suivre RETURN	
-------	---------------	--	---------------	--

L'élimination de la séquence courante est encore possible à ce stade.

4 CHEMINS trouvés

	ENE --> OL1								
	R-CH=CH2				R-CH2OH				
1	ENE	-->	ANE	-->	RY	-->	RMgX	-->	OL1
3	ENE	-->	OIQUE	-->	COCl	-->	AL	-->	OL1
4	ENE	-->	AL	-->	OL1				

ROUTE	Eliminer UNDO		Suivre RETURN	
-------	---------------	--	---------------	--

5. Le didacticiel ROUTE

La version actuelle a été écrite en Basic structuré et est composée des fichiers:

ROUTE.CODE		SMA_NRF09.GE
ROUTE.CBAS		SMA_NRF04.GENC
ROUTE.IMAGE	modifiables par	SMA_TRF14.GENC
FCT_DATA.BAS	l'utilisateur	

De plus le FILER est appelé lors du sauvetage des résultats, et le nom des fichiers créés est composé à l'aide des quatre premiers caractères de l'état initial et de l'état final.

Exemple : ENE_OL1.DAT

6. Fichiers résultats

```

ENE_OL1.DAT                                15.01.88      à: 10h40
Chaînage AVANT
ENE ---> OL1                                Type, Réactif, Commentaires
-----
1  ENE      ---> ANE      ---> RX      ---> RMgX      ---> OL1
-----
ENE      ---> ANE      R-CH=CH2      ---> CH3-CH2-CH3
ADD
Ni
ANE      ---> RX      CH3-CH2-CH3      ---> RX
SU      RAD      UV ou 450 deg.
RX      ---> RMgX      RX      ---> RMgX
ADD      E      ETH.ANH.
RMgX     ---> OL1      RMgX      ---> R-CH2OH
SYN      HCHO
3  ENE      ---> OIQUE     ---> COC1      ---> AL      ---> OL1
-----
ENE      ---> OIQUE     R-CH=CH2      ---> R-COOH
DEG      OX
OIQUE     ---> COC1      R-COOH      ---> R-COC1
SU      E/N      SOCL2
COC1     ---> AL      R-COC1      ---> R-CHO
SU      RED
AL      ---> OL1      R-CHO      ---> R-CH2OH
RED      * Ni
4  ENE      ---> AL      ---> OL1
-----
ENE      ---> AL      R-CH=CH2      ---> R-CHO
DEG      OX(ozone),OXO
AL      ---> OL1      R-CHO      ---> R-CH2OH
RED      * Ni

```

7. Développements

Le logiciel ROUTE peut être utilisé pour résoudre d'autres problèmes de la même classe. Il suffit de modifier la base de données FCT_DATA.BAS en prenant garde à la paramétrisation et de ne pas utiliser des chaînes de caractères trop longues. L'image d'en-tête peut également être adaptée.

Une version écrite en Modula 2 sera réalisée prochainement. Elle sera avantageuse pour des espaces d'états et des ensembles de fonctions de transitions plus conséquents; ce qui a une incidence sur le temps d'exécution.