

Beszámolók, szemlék, közlemények



KÖNYVISMERTETÉS

A kémiai információs rendszerek automatizálásáról

VLEDUC, G.E., GEJVANDOV, E.A.:

Avtomatizovannije informacionnije szisztemü dlja himii.

/Automatizált információs rendszerek a keniában./

Moszkva, 1974. Nauka, 312 p.

Korunk információáradatainak ismeretében nem szükséges külön hangsúlyozni a tudományos-műszaki információs rendszerek jelentőségét, szerepét. Különösképpen áll ez a kémia területére. Kézbe véve a két kiváló szovjet információs szakember összefoglaló jellegű könyvét, sokoldalú képet kapunk a kémiai információs rendszerek létrejöttéről, fejlődéséről, jövőbeni utjairól és automatizálási lehetőségeiről.

A kémia - becslések szerint - ma 4-6 millió szervetlen és szerves, valamint fémorganikus vegyületet tart számon. Szakirodalmi adatok szerint ez a szám évente a mintegy 200 ezer vegyület szintetizálása miatt erőteljes ütemben gyarapodik. Másrészt számos új reakció-típus, jelenség, körülmény is ismertté válik, tisztázódik és ezek száma is gyarapodik. Kézenfekvő e nagyszámú vegyület és reakció valamilyen elv szerinti rendezésének és így a kémiai információk valamilyen rendszerezett tárolásának szükségessége. Sok speciális kérdéssel találkozunk, mint ez a kémiai információs rendszereknél várható.

Alapvető fontossága, hogy egy jól definiált vegyületnek - tehát amelynek összetételét és szerkezetét ismerjük - csak egy neve lehessen és e névből a vegyület összeg és szerkezeti képletét megalkotni lehessen. Ez olyan alap, amelynek megléte nélkül ésszerű kémiai információs rendszert lehetetlen felépíteni. A könyv első fejezeteiben a szerzők elsősorban ilyen alapvető kérdésekkel foglalkoznak.

A kémiai információs rendszerek automatizálásának kérdése - és ez szinte magától értetődőnek hat - csak akkor kerülhetett előtérbe és gyakorlati alkalmazása csak akkor válhatott valóra, amikor erre a célra megjelentek a meglehetősen bonyolult számítógépi programok. A számítógépben tárolt kémiai információhalmaz egyik legegyszerűbb felhasználási módja pl. a következő lehet: egy vegyület kémiai, fizikai tulajdonságairól kérünk összefoglalót. Persze egy effajta "egyszerű" kérdés megválaszolásához szükséges számítógépi program bonyolultsága rögtön megítélhető, hacsak arra gondolunk, hogy egy adott összegképű szerves vegyületnek hány izomerje lehet! Így is érzékelhető, hogy a kémiai információs rendszerek automatizálása igen sok programozástechnikai kérdést vet fel. E problémák megoldására számos jól használható megoldást dolgoztak ki, amelyek kritikai értékelését a könyv szerzői megadják. Külön fejezetek foglalkoznak - sulyukban megfelelő részletességgel - a vegyületek szerkezetének, térbeli elrendezésének grafikus, ill. képernyőn való megjelenítési problémáival, az erre szolgáló programokkal, a biológiailag aktív vegyületek információs problémáival.

A szerves kémiában szokásos, hogy egyes reakciótipusokat felfedezőikről, első leíróikról neveznek el. Az ilyen névvel jelölt reakciótipusok száma - hacsak a kémiai értelemben vett legfontosabbakat vesszük is - kb. ezer körül van. Természetesen ezen kívül az ismert, de névvel nem jelölt reakciótipusok száma is igen nagy. A könyv külön fejezetet szentel ennek a kérdésterületnek. Mint a szerzők is megemlítik, a kémiai reakciótipusok információs rendszerének automatizálásával foglalkoztunk eddig a legkevesebbet, és ezért szükségesszerű, hogy a jövőben az egy intenzívebben fejlődő speciális kémiai-információs terület legyen.

A kémiai automatikus információs rendszerek jövőbeni feladatainak - a könyvben is idézett - példája álljon itt befejezésül. A feladat egy nem túl bonyolult, de mindeddig még nem szintetizált szerves vegyület előállítására volt. A számítógép memóriája tárolta a sok szerves vegyület adatait, reakcióit, szintézisét. Ezekre az alapadatokra építve sikerült olyan programot alkotni, amely a számítógépen állította elő a kívánt vegyületet az alapadatok kombinációjával, amit természetesen a gyakorlatban is sikerrel ellenőriztek. Sőt, mivel alternatív reakcióutakat is megad a módszer, így elképzelhető egy adott vegyület szintézise több uton is, és ebből kiválasztható a legmegfelelőbb.

A könyvnek talán egyetlen negatívumát abban jelölhetjük meg, hogy csak szerves vegyületek információs rendszereivel foglalkozik, a szervetlen, a fémorganikus és komplex vegyületekkel nem. Ennek oka bizonyára az, hogy a bevezetőben említett ma nyilvántartott 4-6 millió kémiai vegyület túlnyomó többsége szerves vegyület. Így a könyvben a szerzők sajnos csak a szerves kémiából vett példákra és információs rendszerek bemutatására szorítkoznak.

A könyvet gazdag ábra és illusztráció-anyag, példák és a témába vágó bő bibliográfiai hivatkozás teszi érthetővé, szemléletesé és értékessé.

Müller Tibor