**Bài 2:** Giả sử ta đã biết một số những phản ứng hóa học. Bây giờ giả sử ta phải giải quyết bài toán điều chế như sau: cho rằng ta có các chất hóa học S, H2O, NaCl; hãy tìm các phản ứng điều chế các chất hóa học Na2SO4, H2SO4, HCl, Na.

# **Danh sách các phương trình hóa học (tri thức) cho bài toán**

1. 2Na + Cl2 🡪 2NaCl
2. Cl2 + H2O 🡪 HCl + HclO
3. 2NaCl + 2H2O 🡪 Cl2 + H2 + 2NaOH
4. S + O2 🡪 SO2
5. 2SO2 + O2 🡪 2SO3
6. SO3 + H2O 🡪 H2SO4
7. 2NaCl + H2SO4 🡪 Na2SO4 + 2HCl
8. 4NaOH 🡪 4Na + 2H2O + O2

# **Các định nghĩa**

## Danh sách các nguyên tố hóa học.

public enum Atom

{

    H = 1,

    He = 2,

  Li = 3,

    Be = 4,

    B = 5,

    C = 6,

    N = 7,

    O = 8,

    F = 9,

...

}

Mỗi phần tử tương ứng với một nguyên tố hóa học

Ví dụ: “**H = 1”** thể hiện cho nguyên tố hóa học Hydrotrong đó:

* H: là ký hiệu hóa học của Hydro
* 1: là nguyên tử khối của Hydro

## **Tổ chức lưu trữ**

### Table **chemical.Compounds**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Tên trường | Kiểu dữ liệu | Mô tả | Ví dụ |
| Id | bigint | Mã định danh của một chất, hợp chất |  |
| Name | Varchar(50) | Tên ký hiệu của chất | NaCl |
| IsDeleted | Bit | Cho biết rằng chất đã bị xóa | 1 |

### Table **chemical.FormulaDetails**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Tên trường | Kiểu dữ liệu | Mô tả | Ví dụ |
| CompoundId | bigint | Mã định danh của một chất, hợp chất |  |
| Atom | tinyint | Mã nguyên tố hóa học. See more at **2.1** | H |
| AtomWeight | Tinyint | Trọng số về số lượng nguyên tố trong công thức hóa học | 1 |

Ví du: một công thức hóa học H2O sẽ có 2 record trong table **chemicalFormulaDetails** như sau:

* { Atom: H, AtomWeight: 2}
* {Atom: O, AtomWeight: 1}

### Table **chemical.CompoundProperties**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Tên trường | Kiểu dữ liệu | Mô tả | Ví dụ |
| CompoundId | bigint | Mã định danh của một chất, hợp chất |  |
| Name | Varchar(50) | Tên tính chất (trạng thái, màu, mùi, ..) | State |
| Value | Nvarchar(max) | Giá trị của tính chất | liquid |

### Table **chemical.Rules**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Tên trường | Kiểu dữ liệu | Mô tả | Ví dụ |
| Id | bigint | Mã định danh của một phương trình hóa học |  |
| Name | Varchar(200) | Tên phương trình | 2Na + Cl2 -> 2NaCl |
| IsDeleted | Bit | Cho biết rằng phương trình có được sử dụng |  |

### Table **chemical.RuleItems**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Tên trường | Kiểu dữ liệu | Mô tả | Ví dụ |
| RuleId | bigint | Mã định danh của 1 rule |  |
| CompoundId | bigint | Mã định danh của một chất, hợp chất |  |
| RuleType | Tinyint | Cho biết rằng đây là chất tham gia hay là chất sản phẩm của phương trình phản ứng:   * **Reactant** (0): chất tham gia phản ứng * **Conclusion** (1): chất sản phẩm |  |
| MoleWeight | Tinyint | Hệ số mol cân bằng phương trình hóa hoc của chất |  |

Ví dụ một phương trình hóa học **2Na + Cl2 -> 2NaCl** :

* {CompoundId: xxx(Na), RuleType: 0, MoleWeight: 2}
* {CompoundId: xxx(Cl2), RuleType: 0, MoleWeight: 1}
* {CompoundId: xxx(NaCl), RuleType: 1, MoleWeight: 2}

## **Định nghĩa các lớp**

### Lớp định nghĩa về một chất hóa học

[Table("Compounds", Schema = "chemical")]

public class Chemical\_Compound

{

    public long Id { get; set; }

    public string Name { get; set; } = default!;

    public IList<Chemical\_FormulaDetail> FormulaDetails { get; set; } = default!;

    public IList<Chemical\_CompoundProperty>? Properties { get; set; }

    public bool IsDeleted { get; set; }

}

Trong đó:

* **Id**: mã định danh của một hợp chất hóa học
* **Name:** tên của chất, thường sử dụng công thức hóa học
* **FormulaDetails:** danh sách cấu tạo công thức hóa học của chất
* **Properties:** các tính chất của hợp chất hóa học
* **IsDeleted:** cho biết rằng chất hóa học đã bị xóa

### Lớp định nghĩa về thành phần của công thức hóa học

public class Chemical\_FormulaDetail

{

    public long CompoundId { get; set; }

    public Atom Atom { get; set; }

    public int AtomWeight { get; set; } = default!;

}

Trong đó:

* **CompoundId:** mã định danh của hợp chất hóa học mà thành phần này liên kết đến
* **Atom:** Nguyên tố hóa học
* **AtomWeight:** Trọng số về số lượng nguyên tố trong công thức hóa học.

### Lớp định nghĩa về tính chất của hợp chất hóa học

public class Chemical\_CompoundProperty

{

    public long CompoundId { get; set; }

    public string Name { get; set; } = default!;

    public string Value { get; set; } = default!;

}

Trong đó:

* **CompoundId:** mã định danh của hợp chất hóa học mà thành phần này liên kết đến
* **Name:** tên tính chất . Ví dụ: State
* **Value:** giá trị của tính chất: Ví dụ: liquid

### Lớp định nghĩa về phương trình phản ứng hóa học

public class Chemical\_Rule

{

    public long Id { get; set; }

    public string Name { get; set; } = default!;

    public IList<Chemical\_RuleItem> Items { get; set; } = default!;

    public bool IsDeleted { get; set; }

}

Trong đó:

* **Id**: mã định danh của một phương trình phản ứng hóa học
* **Name**: tên của phương trình phản ứng hóa học. (tên này thường là duy nhất cho mỗi phương trình). Ví dụ: “2Na + Cl2 -> 2NaCl”
* **Items:** danh sách các thành phần của phương trình bao gồm cả chất tham gia phản ứng và chất sản phầm
* **IsDeleted**: cho biết rằng phương trình đã bị xóa

### Lớp định nghĩa về thành phần của một phương trình phản ứng hóa học

public class Chemical\_RuleItem

{

    public long RuleId { get; set; }

    public long CompoundId { get; set; }

    public RuleType RuleType { get; set; }

    public int MoleWeight { get; set; }

}

public enum RuleType

{

    Reactant = 1,

    Conclusion = 2

}

Trong đó:

* **RuleId:** mã định danh của phương trình phản ứng hóa học mà thành phần này.
* **CompoundId:** mã định danh hợp chất hóa học.
* **RuleType:** cho biết vai trò của hợp chất trong phương trình phản ứng là chất tham gia phản ứng hoặc sản phẩm.
* **MoleWeight:** hệ số mol cân bằng phương trình hóa học.

# **Thuật giải suy diễn**

Phương pháp dựa trên thuật giải suy diễn tiến:

**Input**: danh sách các hợp chất hóa học đã có ban đầu, danh sách các hợp chất mục tiêu cần điều chế.

**Output**: danh sách các phương trình hóa học cần thiết để điều chế các hợp chất mục tiêu từ các hợp chất đã biết

Minh họa Thuật giải:

**Step 1**: Khởi tạo:

* Danh sách các hợp chất đã tồn tại bằng các hợp chất ban đầu:

*exitingCompounds* = {*initCompounds*}

* Danh sách các phương trình (rule) đã áp dụng:

*usedRules* = {}

* Mảng danh sách tập hợp các phương trình đã tìm được:

*Paths* = []

**Step 2**: ***SearchRules***: Lặp các danh sách các phương trình (*rule*) chưa áp dụng:

**Step 2.1**: Nếu danh sách các chất tham gia phản ứng của rule tồn tại trong danh sách các chất đã biết *exitingComounds*:

* *newExistingCompounds*: *exitingCompounds* +các chất sản phẩm của phản ứng.
* *newUsedRules*: *usedRules* + phương trình phản ứng hóa học (*rule*) đang xét.

**Step 2.2**: Nếu tất cả các chất mục tiêu đều tồn tại trong danh sách các chất đã biết *newExistingCompounds*. Thêm danh sách các *newUsedRules* vào mảng danh sách tập hợp các rule tìm được *Paths*.

**Step 2**.**3**: Tiếp tục thực hiện tìm danh sách các luật áp dụng ***SearchRules*** với *newExistingCompounds, newExistingCompounds.*

**Step 3:** Sau khi thực hiện xong bước 2 ta có được danh sách tập hợp các rules kết quả.

* Nếu *Paths* không có bất kỳ tập hợp rules nào => không tìm thấy kết quả.
* Nếu *Paths* có nhiều hơn một rules => Kết quả là *Path* có độ dài ngắn nhất.

existingCompounds = {initCompounds}

usedRules = []

paths = []

**start**

paths = **SearchRules** (existingCompounds, usedRules)

Nếu tìm được **paths**?

Yes

No

Kích hoạt công thức để tính yếu tố chưa biết.

**End**

Không tìm được lời giải.

Lời giải là **path** ngắn nhất trong tập hợp lời giải **paths**.

* **SearchRules** (existingCompounds, usedRules)

Lặp qua tất cả các **rules**

Nếu các chất tham gia phản ứng của Rule tồn tại trong *existingCompounds* ?

No

***foundPaths*** = []

* newExistingCompounds = existingComponent + các chất sản phẩm.
* newUsedRules = usedRules + rule đang xử lý

Nếu tất cả các chất mục tại trong *extsingCompounds* ?

No

Yes

**End**

Yes



***path*** = **SearchRules (**newExistingCompounds, newUsedRules)

Thêm ***path***vào **foundPaths**

Tìm thấy path (**foundPaths có ít nhất 1 item**)?

Không tìm thấy danh sách Rules

Kết quả là danh sách rules có độ dài ngắn nhất.

Yes

No

# **Demo**

Xem thêm Video demo: “Demo\_Bai2”