

# ORGANIC SYNTHESIS

# CONTEÚDO

**01**

ENTENDENDO O PROBLEMA

**02**

DOMÍNIO E PROBLEMA

**03**

VERSÃO SPLITTED

**04**

EXECUÇÃO E RESULTADOS

# ENTENDENDO O PROBLEMA

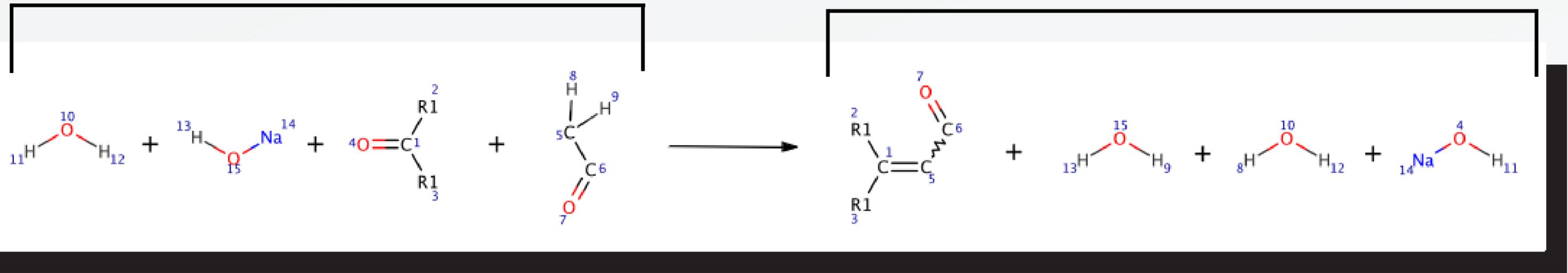
- Estudo e automações na química orgânica
- Grande quantidade de reações genéricas
- Combinação correta para síntese
  - Problemas simples (2 a 3 reações)
  - Problemas complexos (10 a 12 reações)
- Solução para validação de respostas propostas pelos alunos
- Grafos And-Or vs Planejamento
- Exploring Organic Synthesis with State-of-the-Art Planning Techniques (2016)



# REPRESENTAÇÃO DO PROBLEMA

(:init ...)

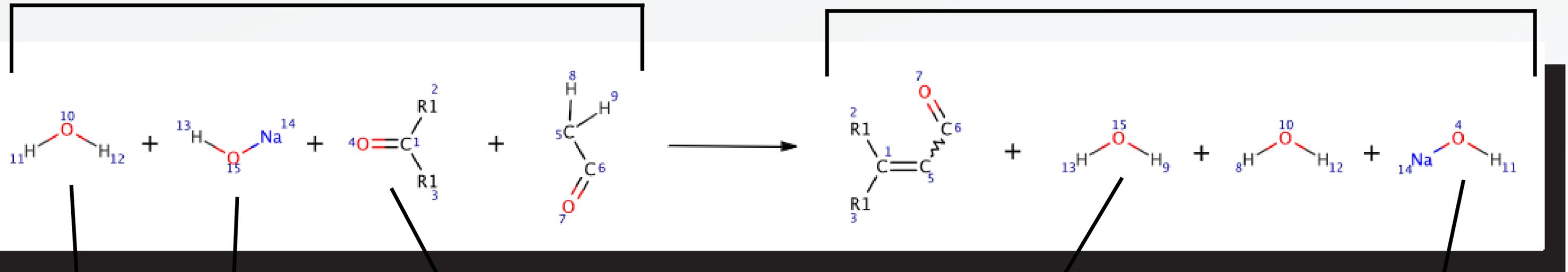
(:goal ...)



# REPRESENTAÇÃO DO PROBLEMA

(:init ...)

(:goal ...)



(bond h11 o10)  
(bond o10 h11)  
(bond o10 h12)  
(bond h12 o10)

(bond h13 o15)  
(bond o15 h13)  
(bond o15 na14)  
(bond na14 o15)

(doublebond o4 c1)  
(doublebond c1 o4)  
(bond c1 r12)  
(bond r12 c1)  
(bond c1 r13)  
(bond r13 c1)

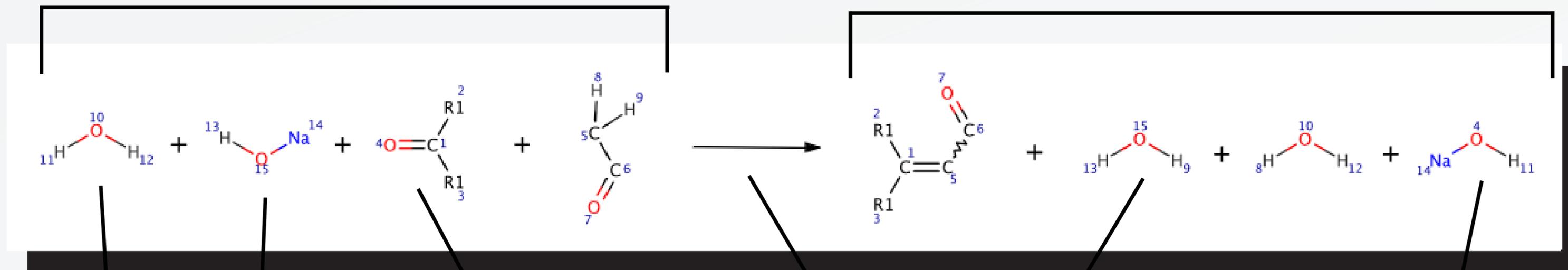
(bond h13 o15)  
(bond o15 h13)  
(bond o15 h9)  
(bond h9 o15)

(bond na14 o4)  
(bond o4 na14)  
(bond o4 h11)  
(bond h11 o4)

# REPRESENTAÇÃO DO DOMÍNIO

(:init ...)

(:goal ...)



(bond h11 o10)  
(bond o10 h11)  
(bond o10 h12)  
(bond h12 o10)

(bond h13 o15)  
(bond o15 h13)  
(bond o15 na14)  
(bond na14 o15)

(doublebond o4 c1)  
(doublebond c1 o4)  
(bond c1 r12)  
(bond r12 c1)  
(bond c1 r13)  
(bond r13 c1)

(bond h13 o15)  
(bond o15 h13)  
(bond o15 h9)  
(bond h9 o15)

(bond na14 o4)  
(bond o4 na14)  
(bond o4 h11)  
(bond h11 o4)

```
(:action aldolCondensation
:parameters (?h11 - hydrogen ?o10 - oxygen ...)
:precondition (and (bond h11 o10) ...)
:effect (not (bond h11 o10) ...))
```

# VERSÃO SPLIT

- Alta quantidade de variáveis e cláusulas
- Uso de memória (128GB)
- Simplificação das equações
- Separação das equações
- Domínio normal vs split
  - ~3250 vs 1700000000
- Redução das ações na inicialização
- Tempo e Memória
- *Fast Downward* e vantagens

Problema	NoV (Número de Variáveis)	NoC (Número de cláusulas)
P2-Full	10079	782197
P4-Full	9784	742043
P5-Full-Hydrogen missing	460189	101711688
P6-Full	3148	95580
P10-1Step	132	340
P14-Full	2856	121267
P17-Full	out of memory	out of memory
P20-Full	15331	121267

# ALGUNS RESULTADOS DA COMPETIÇÃO

Track	Tempo	Memória	Problemas mais resolvidos
SAT (23)	> 30m	~3GB	p01 - p04, p06, p07 (6)
OPT (18)	< 500s > 30m	~3GB	p01 - p07, p10 - p12 (10)



# **ANALISANDO OS DOMÍNIOS**