



## (12) 发明专利

(10) 授权公告号 CN 108959845 B

(45) 授权公告日 2020.12.18

(21) 申请号 201810681778.1

(22) 申请日 2018.06.27

(65) 同一申请的已公布的文献号

申请公布号 CN 108959845 A

(43) 申请公布日 2018.12.07

(73) 专利权人 联想(北京)有限公司

地址 100085 北京市海淀区上地信息产业  
基地创业路6号

(72) 发明人 杨帆 匡启帆 金宝宝 张成松

(74) 专利代理机构 北京集佳知识产权代理有限公司 11227

代理人 郑晨芳 王宝筠

(51) Int. Cl.

G16C 20/10 (2019.01)

(56) 对比文件

CN 105528615 A, 2016.04.27

CN 106779251 A, 2017.05.31

CN 102573027 A, 2012.07.11

CN 106156405 A, 2016.11.23

US 7673261 B2, 2010.03.02

Fan Yang 等. Signed Directed Graph  
modeling of industrial processes and  
their validation by data-based methods.  
《2010 Conference on Control and Fault-  
Tolerant Systems (SysTol)》. 2010,Fan Yang 等. Signed directed graph-  
based hierarchical modelling and fault  
propagation analysis for large-scale  
systems. 《IET Control Theory &  
Applications》. 2013,

审查员 武茹茹

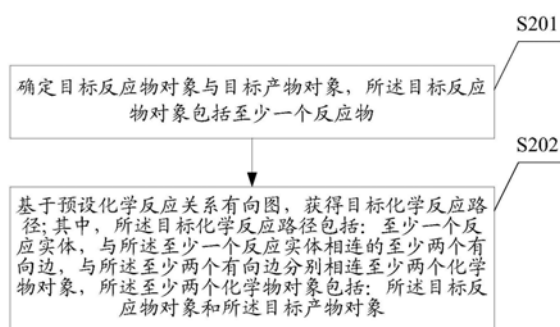
权利要求书2页 说明书10页 附图3页

## (54) 发明名称

化学反应路径获取方法、装置、电子设备及  
存储介质

## (57) 摘要

本发明实施例公开了化学反应路径获取方法、装置、电子设备及存储介质,预先构建化学反应关系有向图,利用化学反应关系有向图建立了多个化学反应的关联关系,即以图的形式将孤立的多个化学反应关联起来;目标反应物对象包括的至少一个反应物对应化学反应关系有向图中相应位置的节点,目标产物对象包括的至少一个产物对应化学反应关系有向图中相应位置的节点。本发明实施例目标化学反应路径的查询转换成化学反应关系有向图中至少两个节点之间路径的查询,即利用该化学反应关系有向图,可以得到目标化学反应路径;即使目标反应物对象与目标产物对象不属于同一化学反应方程,通过化学反应关系有向图,也可以得到目标化学反应路径。



1. 一种化学反应路径获取方法,其特征在于,包括:

确定目标反应物对象与目标产物对象,所述目标反应物对象包括至少一个反应物;

基于预设的建立了多个化学反应的关联关系的化学反应关系有向图,获得目标化学反应路径;

其中,所述预设化学反应关系有向图包括:多个节点,以及,多条连接节点的有向边,一个节点为化学物对象或反应实体,其中,一个反应实体表征至少一个化学物对象能够发生的一种化学反应;一个有向边的一端为反应实体,另一端为参与该有向边对端的反应实体表征的化学反应的化学物对象;所述目标化学反应路径包括:至少一个反应实体,与所述至少一个反应实体相连的至少两个有向边,与所述至少两个有向边分别相连至少两个化学物对象,所述至少两个化学物对象至少包括:所述目标反应物对象和所述目标产物对象。

2. 根据权利要求1所述化学反应路径获取方法,其特征在于,所述有向边中的第一有向边对应一属性信息,和/或,所述反应实体中的第一反应实体对应一属性信息,和/或,所述化学物对象中的第一化学物对象对应一属性信息;

其中,所述第一有向边的属性信息包括:所述第一有向边一端的化学物对象参与对端的反应实体表征的化学反应时的系数;所述第一反应实体的属性信息包括:所述第一反应实体表征的化学反应的转化率和/或所述第一反应实体表征的化学反应的反应条件;所述第一化学物对象的属性信息包括:所述第一化学物对象的单位成本。

3. 根据权利要求2所述化学反应路径获取方法,其特征在于,所述基于预设化学反应关系有向图,获得目标化学反应路径,包括:

基于所述预设化学反应关系有向图,获得至少一条化学反应路径;

基于所述至少一条化学反应路径分别包含的第一化学物对象的属性信息和/或第一反应实体的属性信息和/或第一有向边的属性信息,从所述至少一条化学反应路径中,确定出所述目标化学反应路径。

4. 根据权利要求3所述化学反应路径获取方法,其特征在于,所述基于所述至少一条化学反应路径包含的第一化学物对象的属性信息和/或第一反应实体的属性信息和/或第一有向边的属性信息,从所述至少一条化学反应路径中,确定出所述目标化学反应路径包括:

基于所述至少一条化学反应路径包含的第一化学物对象的属性信息和/或第一反应实体的属性信息和/或第一有向边的属性信息,利用图搜索算法,从所述至少一条化学反应路径中,确定出所述目标化学反应路径。

5. 根据权利要求1至4任一所述化学反应路径获取方法,其特征在于,

所述有向边中第二有向边指向化学物对象,该化学物对象为所述第二有向边对端的反应实体表征的化学反应的产物;

所述有向边中第三有向边指向反应实体,所述第三有向边对端的化学物对象为该反应实体表征的化学反应的反应物。

6. 根据权利要求1或2所述化学反应路径获取方法,其特征在于,所述基于预设化学反应关系有向图,获得目标化学反应路径包括:

基于预设化学反应关系有向图,获得包含的反应实体的数量小于或等于第一预设值,或,包含的反应实体的数量最小的所述目标化学反应路径,或,包含的所述目标反应物对象对应的成本最低的所述目标化学反应路径。

7. 一种化学反应路径获取装置, 其特征在于, 包括:

确定模块, 用于确定目标反应物对象与目标产物对象, 所述目标反应物对象包括至少一个反应物;

获取模块, 用于基于预设的建立了多个化学反应的关联关系的化学反应关系有向图, 获得目标化学反应路径, 所述目标化学反应路径的初始反应物包括部分或全部所述目标反应物对象, 最终产物包括所述目标产物对象;

其中, 所述预设化学反应关系有向图包括: 多个节点, 以及, 多条连接节点的有向边, 一个节点为化学物对象或反应实体, 其中, 一个反应实体表征至少一个化学物对象能够发生的一种化学反应; 一个有向边的一端为反应实体, 另一端为参与该有向边对端的反应实体表征的化学反应的化学物对象; 所述目标化学反应路径包括: 至少一个反应实体, 与所述至少一个反应实体相连的至少一个有向边, 与所述至少一个有向边相连至少两个化学物对象, 所述至少两个化学物对象包括: 所述目标反应物对象和所述目标产物对象。

8. 根据权利要求7所述化学反应路径获取装置, 其特征在于, 所述有向边中的第一有向边对应一属性信息, 和/或, 所述反应实体中的第一反应实体对应一属性信息, 和/或, 所述化学物对象中的第一化学物对象对应一属性信息;

其中, 所述第一有向边的属性信息包括: 所述第一有向边一端的化学物对象参与对端的反应实体表征的化学反应时的系数; 所述第一反应实体的属性信息包括: 所述第一反应实体表征的化学反应的转化率和/或所述第一反应实体表征的化学反应的反应条件; 所述第一化学物对象的属性信息包括: 所述第一化学物对象的单位成本。

9. 一种电子设备, 其特征在于, 包括:

存储器, 用于存储程序;

处理器, 用于执行所述程序, 所述程序具体用于:

确定目标反应物对象与目标产物对象, 所述目标反应物对象包括至少一个反应物;

基于预设的建立了多个化学反应的关联关系的化学反应关系有向图, 获得目标化学反应路径;

其中, 所述预设化学反应关系有向图包括: 多个节点, 以及, 多条连接节点的有向边, 一个节点为化学物对象或反应实体, 其中, 一个反应实体表征至少一个化学物对象能够发生的一种化学反应; 一个有向边的一端为反应实体, 另一端为参与该有向边对端的反应实体表征的化学反应的化学物对象; 所述目标化学反应路径包括: 至少一个反应实体, 与所述至少一个反应实体相连的至少两个有向边, 与所述至少两个有向边分别相连至少两个化学物对象, 所述至少两个化学物对象至少包括: 所述目标反应物对象和所述目标产物对象。

10. 一种可读存储介质, 其上存储有计算机程序, 其特征在于, 所述计算机程序被处理器执行时, 实现上述权利要求1至权利要求6任一所述的化学反应路径获取方法包含的各个步骤。

## 化学反应路径获取方法、装置、电子设备及存储介质

### 技术领域

[0001] 本发明涉及数据库技术领域,更具体的说,是涉及化学反应路径获取方法、装置、电子设备及存储介质。

### 背景技术

[0002] 随着化学领域的快速发展,化学反应的种类越来越多,化学反应是指分子破裂成原子,原子重新排列组合生成新分子的过程。化学反应包括反应物以及产物。

[0003] 目前,用户在研究或有需求基于反应物得到产物时,可以在预先构建的化学反应数据库中输入该反应物和该产物,预先构建的化学反应数据库可以得到以该反应物和该产物对应的化学反应方程。

[0004] 但是该反应物和该产物必须属于同一化学反应,若不属于同一化学反应,则化学反应数据库无法检索到结果。

### 发明内容

[0005] 有鉴于此,本发明提供了一种化学反应路径获取方法、装置、电子设备及存储介质。

[0006] 为实现上述目的,本发明提供如下技术方案:

[0007] 一种化学反应路径获取方法,包括:

[0008] 确定目标反应物对象与目标产物对象,所述目标反应物对象包括至少一个反应物;

[0009] 基于预设化学反应关系有向图,获得目标化学反应路径;

[0010] 其中,所述预设化学反应关系有向图包括:多个节点,以及,多条连接节点的有向边,一个节点为化学物对象或反应实体,其中,一个反应实体表征至少一个化学物对象能够发生的一种化学反应;一个有向边的一端为反应实体,另一端为参与该有向边对端的反应实体表征的化学反应的化学物对象;所述目标化学反应路径包括:至少一个反应实体,与所述至少一个反应实体相连的至少两个有向边,与所述至少两个有向边分别相连至少两个化学物对象,所述至少两个化学物对象至少包括:所述目标反应物对象和所述目标产物对象。

[0011] 其中,所述有向边中的第一有向边对应一属性信息,和/或,所述反应实体中的第一反应实体对应一属性信息,和/或,所述化学物对象中的第一化学物对象对应一属性信息;

[0012] 其中,所述第一有向边的属性信息包括:所述第一有向边一端的化学物对象参与对端的反应实体表征的化学反应时的系数;所述第一反应实体的属性信息包括:所述第一反应实体表征的化学反应的转化率和/或所述第一反应实体表征的化学反应的反应条件;所述第一化学物对象的属性信息包括:所述第一化学物对象的单位成本。

[0013] 其中,所述基于预设化学反应关系有向图,获得目标化学反应路径,包括:

[0014] 基于所述预设化学反应关系有向图,获得至少一条化学反应路径;

[0015] 基于所述至少一条化学反应路径分别包含的第一化学物对象的属性信息和/或第一反应实体的属性信息和/或第一有向边的属性信息,从所述至少一条化学反应路径中,确定出所述目标化学反应路径。

[0016] 其中,所述基于所述至少一条化学反应路径包含的第一化学物对象的属性信息和/或第一反应实体的属性信息和/或第一有向边的属性信息,从所述至少一条化学反应路径中,确定出所述目标化学反应路径包括:

[0017] 基于所述至少一条化学反应路径包含的第一化学物对象的属性信息和/或第一反应实体的属性信息和/或第一有向边的属性信息,利用图搜索算法,从所述至少一条化学反应路径中,确定出所述目标化学反应路径。

[0018] 其中,所述有向边中第二有向边指向化学物对象,该化学物对象为所述第二有向边对端的反应实体表征的化学反应的产物;

[0019] 所述有向边中第三有向边指向反应实体,所述第三有向边对端的化学物对象为该反应实体表征的化学反应的反应物。

[0020] 其中,所述基于预设化学反应关系有向图,获得目标化学反应路径包括:

[0021] 基于预设化学反应关系有向图,获得包含的反应实体的数量小于或等于第一预设值,或,包含的反应实体的数量最小的所述目标化学反应路径,或,包含的所述目标反应物对象对应的成本最低的所述目标化学反应路径。

[0022] 一种化学反应路径获取装置,包括:

[0023] 确定模块,用于确定目标反应物对象与目标产物对象,所述目标反应物对象包括至少一个反应物;

[0024] 获取模块,用于基于预设化学反应关系有向图,获得目标化学反应路径;

[0025] 其中,所述预设化学反应关系有向图包括:多个节点,以及,多条连接节点的有向边,一个节点为化学物对象或反应实体,其中,一个反应实体表征至少一个化学物对象能够发生的一种化学反应;一个有向边的一端为反应实体,另一端为参与该有向边对端的反应实体表征的化学反应的化学物对象;所述目标化学反应路径包括:至少一个反应实体,与所述至少一个反应实体相连的至少两个有向边,与所述至少两个有向边分别相连至少两个化学物对象,所述至少两个化学物对象至少包括:所述目标反应物对象和所述目标产物对象。

[0026] 其中,所述有向边中的第一有向边对应一属性信息,和/或,所述反应实体中的第一反应实体对应一属性信息,和/或,所述化学物对象中的第一化学物对象对应一属性信息;

[0027] 其中,所述第一有向边的属性信息包括:所述第一有向边一端的化学物对象参与对端的反应实体表征的化学反应时的系数;所述第一反应实体的属性信息包括:所述第一反应实体表征的化学反应的转化率和/或所述第一反应实体表征的化学反应的反应条件;所述第一化学物对象的属性信息包括:所述第一化学物对象的单位成本。

[0028] 一种电子设备,包括:

[0029] 存储器,用于存储程序;

[0030] 处理器,用于执行所述程序,所述程序具体用于:

[0031] 确定目标反应物对象与目标产物对象,所述目标反应物对象包括至少一个反应物;

[0032] 基于预设化学反应关系有向图,获得目标化学反应路径;

[0033] 其中,所述预设化学反应关系有向图包括:多个节点,以及,多条连接节点的有向边,一个节点为化学物对象或反应实体,其中,一个反应实体表征至少一个化学物对象能够发生的一种化学反应;一个有向边的一端为反应实体,另一端为参与该有向边对端的反应实体表征的化学反应的化学物对象;所述目标化学反应路径包括:至少一个反应实体,与所述至少一个反应实体相连的至少两个有向边,与所述至少两个有向边分别相连至少两个化学物对象,所述至少两个化学物对象至少包括:所述目标反应物对象和所述目标产物对象。

[0034] 一种可读存储介质,其上存储有计算机程序,所述计算机程序被处理器执行时,实现上述任一所述的化学反应路径获取方法包含的各个步骤。

[0035] 经由上述的技术方案可知,与现有技术相比,本发明公开了一种化学反应路径获取方法,预先构建化学反应关系有向图,利用化学反应关系有向图建立了多个化学反应的关联关系,即以图的形式将孤立的多个化学反应关联起来;目标反应物对象包括的至少一个反应物对应化学反应关系有向图中相应位置的节点,目标产物对象包括的至少一个产物对应化学反应关系有向图中相应位置的节点。本发明实施例目标化学反应路径的查询转换成化学反应关系有向图中至少两个节点之间路径的查询,即利用该化学反应关系有向图,可以得到目标化学反应路径;即使目标反应物对象与目标产物对象不属于同一化学反应方程,通过化学反应关系有向图,也可以得到目标化学反应路径。

## 附图说明

[0036] 为了更清楚地说明本发明实施例或现有技术中的技术方案,下面将对实施例或现有技术描述中所需要使用的附图作简单地介绍,显而易见地,下面描述中的附图仅仅是本发明的实施例,对于本领域普通技术人员来讲,在不付出创造性劳动的前提下,还可以根据提供的附图获得其他的附图。

[0037] 图1为本发明实施例提供的化学反应关系有向图的一种实现方式的示意图;

[0038] 图2为本发明实施例提供的化学反应路径获取方法的一种实现方式的流程图;

[0039] 图3为本发明实施例提供的化学反应关系有向图的另一种实现方式的示意图;

[0040] 图4为本发明实施例提供的化学反应路径获取装置的一种实现方式的结构图;

[0041] 图5为本发明实施例提供的电子设备的一种实现方式的结构图。

## 具体实施方式

[0042] 下面将结合本发明实施例中的附图,对本发明实施例中的技术方案进行清楚、完整地描述,显然,所描述的实施例仅仅是本发明一部分实施例,而不是全部的实施例。基于本发明中的实施例,本领域普通技术人员在没有做出创造性劳动前提下所获得的所有其他实施例,都属于本发明保护的范围。

[0043] 现有技术中化学反应数据库存储的多个化学反应之间没有关联,若用户需要从化学反应数据库中查找化学反应方程,那么用户必须知道同一个化学反应中反应物和产物,然后将反应物和产物输入化学反应数据库中,化学反应数据库会输出相应的化学反应方程。若用户输入的反应物和产物不属于同一化学反应方程,即该反应物经过一个化学反应得不到该产物,则化学反应数据库无法检索到结果。

[0044] 为了解决上述问题,本发明实施例构建了化学反应关系有向图。通过化学反应关系有向图建立多个化学反应之间的关联。若将该化学反应关系有向图应用在化学反应数据库中,若用户在化学反应数据库中输入反应物和产物属于不同化学反应,化学反应数据库也可以得到结果。

[0045] 化学反应关系有向图包括:多个节点,以及,多条连接节点的有向边,一个节点为化学物对象或反应实体,其中,一个反应实体表征至少一个化学物对象能够发生的一种化学反应;一个有向边的一端为反应实体,另一端为参与该有向边对端的反应实体表征的化学反应的化学物对象。

[0046] 为了本领域技术人员更加理解本发明实施例提供的化学反应关系有向图,下面结合具体例子对化学反应关系有向图进行说明。

[0047] 如图1所示,为本发明实施例提供的化学反应关系有向图的一种实现方式的示意图。

[0048] 图1所示的化学反应关系有向图包括4个化学反应,分别为:化学反应1、化学反应2、化学反应3以及化学反应4。

[0049] 其中,化学反应1对应反应实体P1,化学反应2对应反应实体P2,化学反应3对应反应实体P3,化学反应4对应反应实体P4。图1中用填充有网状的菱形表征反应实体。

[0050] 图1所示的化学反应关系有向图包括:7个化学物对象,分别为:化学物A、化学物B、化学物C、化学物D、化学物E、化学物F以及化学物G。图1中用填充有黑色的圆点表征化学物对象。

[0051] 其中,化学物A与化学物B可以进行化学反应1得到化学物C和化学物D;化学物B经过化学反应3得到化学物E;化学物D和化学物F经过化学反应2得到化学物G;化学物E经过化学反应4得到化学物G。

[0052] 图1仅为一种示例,并不对本发明实施例中的化学反应关系有向图包含的反应实体数目、化学物对象数目造成限制。在一可选实施例中,本发明实施例提供的化学反应关系有向图至少包括两个化学反应分别对应的反应实体。

[0053] 图1中化学反应关系有向图包括11个节点,分别为:反应实体P1、反应实体P2、反应实体P3、反应实体P4、化学物A、化学物B、化学物C、化学物D、化学物E、化学物F以及化学物G。

[0054] 化学反应关系有向图包括多条有向边,一个有向边的一端为反应实体,另一端为化学物对象。如图1所示。

[0055] 如图1所示,由于化学物D为反应实体P1表征的化学反应1的产物,同时化学物D为反应实体P2表征的化学反应2的反应物,因此,可以通过化学物D将化学反应1和化学反应2关联起来;化学物B是反应实体P3表征的化学反应3的反应物,也是反应实体P1表征的化学反应1的反应物,因此,通过化学物B将化学反应1和化学反应3关联起来;化学物G是反应实体P2表征的化学反应2的产物,同时也是反应实体P4表征的化学反应4的产物,因此,通过化学物G将化学反应2和化学反应4联系起来。

[0056] 综上,在一可选实施例中,本发明实施例利用“有的化学物对象为一个化学反应的产物,为另一个化学反应的反应物;或,同一化学物对象为不同化学反应的反应物;或,同一化学物对象为不同化学反应的产物”的原理,将多个化学反应相关联,从得到化学反应关系有向图。

[0057] 在一可选实施例中,有向边具有指向(如图1所示的箭头方向为有向边的指向),本发明实施例中,将化学反应关系有向图包含的所有指向化学物对象的有向边称为第二有向边,将化学反应关系有向图包含的所有指向反应实体的有向边称为第三有向边。

[0058] 第二有向边指向的化学物对象,该化学物对象为第二有向边对端的反应实体表征的化学反应的产物,如图1所示,有向边4、有向边5、有向边6、有向边10、有向边11均为第二有向边。例如,有向边4指向化学物C,化学物C为有向边4对端的反应实体P1表征的化学反应1的产物。

[0059] 第三有向边指向反应实体,第三有向边对端的化学物对象为该反应实体表征的化学反应的反应物,如图1所示,有向边1、有向边2、有向边3、有向边7、有向边8、有向边9均为第三有向边。例如,有向边7指向反应实体P2,有向边7对端的化学物D为反应实体P2表征的化学反应2的反应物。

[0060] 构建了上述化学反应关系有向图,就可以实现本发明实施例提供的化学反应路径获取方法,如图2所示,为本发明实施例提供的化学反应路径获取方法的一种实现方式的流程图。该方法包括:

[0061] 步骤S201:确定目标反应物对象与目标产物对象,所述目标反应物对象包括至少一个反应物。

[0062] 本发明实施例中反应物和产物均为化学物对象。

[0063] 在一可选实施例中目标反应物对象与目标产物对象可以属于同一化学反应,或,属于不同的化学反应。

[0064] 在一可选实施例中,目标反应物对象包括的至少一个反应物可以属于同一化学反应的反应物,或,属于不同化学反应的反应物。

[0065] 仍以图1为例,目标反应物对象可以包括:化学物A和化学物B(属于同一化学反应的反应物);或,目标反应物对象可以包括:化学物A、化学物E(属于不同化学反应的反应物)。

[0066] 在一可选实施例中,目标产物对象包括至少一个产物。目标产物对象包括的一个或多个产物可以属于同一化学反应的产物,或,属于不同化学反应的产物。

[0067] 仍以图1为例,目标产物可以包括:化学物D以及化学物C(属于同一化学反应的产物);或,目标产物可以包括:化学物D以及化学物E(属于不同化学反应的产物)。

[0068] 步骤S202:基于预设化学反应关系有向图,获得目标化学反应路径。

[0069] 其中,所述目标化学反应路径包括:至少一个反应实体,与所述至少一个反应实体相连的至少两个有向边,与所述至少两个有向边分别相连至少两个化学物对象,所述至少两个化学物对象包括:所述目标反应物对象和所述目标产物对象。

[0070] 假设,目标反应物对象为化学物B,目标产物对象物化学物G,假设,化学反应关系有向图如图1所示,则得到的目标化学反应路径包括至少以下一个路径:

[0071] 化学反应路径1:化学物B→反应实体P1→化学物D→反应实体P2→化学物G;

[0072] 化学反应路径2:化学物B→反应实体P3→化学物E→反应实体P4→化学物G。

[0073] 上述是一种目标化学反应路径的表现形式,并不对目标化学反应路径的表现形式造成限定,例如,还可以用表格的形式,或,图的形式表示目标化学反应路径。

[0074] 本发明实施例提供的化学反应路径获取方法可以应用于化学反应数据库。目前的



化学反应数据库中,每一个化学反应作为一个整体存储,由于不同的化学反应可能涉及同一化学物对象,因此,存在很大的冗余性。而本发明实施例中,一个化学物对象在化学反应关系有向图中仅出现一次,因此,降低了冗余性。降低了化学反应关系有向图占用的存储空间。

[0075] 本发明实施例提供了一种化学反应路径获取方法,预先构建化学反应关系有向图,利用化学反应关系有向图建立了多个化学反应的关联关系,即以图的形式将孤立的多个化学反应关联起来;目标反应物对象包括的至少一个反应物对应化学反应关系有向图中相应位置的节点,目标产物对象包括的至少一个产物对应化学反应关系有向图中相应位置的节点。本发明实施例目标化学反应路径的查询转换成化学反应关系有向图中至少两个节点之间路径的查询,即利用该化学反应关系有向图,可以得到目标化学反应路径;即使目标反应物对象与目标产物对象不属于同一化学反应方程,通过化学反应关系有向图,也可以得到目标化学反应路径。

[0076] 在一可选实施例中,化学反应关系有向图包括的第一有向边对应一属性信息,和/或,第一反应实体对应一属性信息,和/或,第一化学物对象对应一属性信息。

[0077] 其中,第一有向边的属性信息包括:第一有向边一端的化学物对象参与对端的反应实体表征的化学反应时的系数;第一反应实体的属性信息包括:第一反应实体表征的化学反应的转化率和/或第一反应实体表征的化学反应的反应条件;第一化学物对象的属性信息包括:所述第一化学物对象的单位成本。

[0078] 在一可选实施例中,化学反应关系有向图包含的任一有向边可以称为第一有向边;可选的,化学反应关系有向图包含的任一反应实体可以称为第一反应实体;可选的,化学反应关系有向图包含的任一化学物对象可以称为第一化学物对象。

[0079] 在一可选实施例中,化学反应关系有向图包含的部分有向边中任一有向边可以称为第一有向边;可选的,化学反应关系有向图包含的部分反应实体中任一反应实体可以称为第一反应实体;可选的,化学反应关系有向图包含部分化学物对象中任一化学物对象可以称为第一化学物对象。

[0080] 本发明实施例中,第一有向边对应的属性信息属于有向边类属性信息,第一反应实体对应的属性信息属于反应实体类属性信息;第一化学物对象对应的属性信息属于化学物对象类属性信息。

[0081] 综上,化学反应关系有向图可以包括有向边类属性信息,和/或,反应实体类属性信息,和/或,化学物对象类属性信息等三大类属性信息。

[0082] 如图3所示,为本发明实施例提供的化学反应关系有向图的另一种实现方式的示意图。

[0083] 图3与图1相对应,图1所示的化学反应关系有向图不包括:有向边类属性信息,反应实体类属性信息,和化学物对象类属性信息。

[0084] 图3在图1的基础上增加了有向边类属性信息,反应实体类属性信息,和,化学物对象类属性信息。图3仅为示例,并不对本发明实施例提供的化学反应关系有向图包含的属性信息的类别造成限制。

[0085] 如图3所示,图3示出的化学反应关系有向图涉及以下化学反应。

[0086] 反应实体P1表征的化学反应1: $3A+2B \rightarrow 2C+D$  (化学反应1的转换率为0.5);

[0087] 反应实体P2表征的化学反应2: $D+2F\rightarrow G$  (化学反应2的转换率为0.8) ;

[0088] 反应实体P3表征的化学反应3: $2B\rightarrow E$  (化学反应3的转换率为0.7) ;

[0089] 反应实体P4表征的化学反应4: $2E\rightarrow G$  (化学反应4的转换率为0.4) 。

[0090] 假设化学物X的单位成本用costX表示,则化学物A的单位成本为costA;化学物B的单位成本为costB;化学物C的单位成本为costC;化学物D的单位成本为costD;化学物E的单位成本为costE;化学物F的单位成本为costF;化学物G的单位成本为costG。

[0091] 基于本发明实施例提供的化学反应关系有向图,得到目标化学反应路径的方法有多种,本发明实施例提供但不限于以下几种。

[0092] 第一种,基于不包含各类属性信息的化学反应关系有向图,得到目标化学反应路径。

[0093] 具体方法可以包括:基于所述预设化学反应关系有向图,获得至少一条化学反应路径。

[0094] 从所述至少一条化学反应路径中,获得包含的反应实体的数量小于或等于第一预设值,或,包含的反应实体的数量最小的所述目标化学反应路径,或,随机得到目标化学反应路径,或,用户确定一目标化学反应路径。

[0095] 第二种,基于包含至少一类属性信息的化学反应关系有向图,得到目标化学反应路径。

[0096] 具体方法可以包括:基于所述预设化学反应关系有向图,获得至少一条化学反应路径。

[0097] 基于所述至少一条化学反应路径分别包含的第一化学物对象的属性信息和/或第一反应实体的属性信息和/或第一有向边的属性信息,从所述至少一条化学反应路径中,确定出所述目标化学反应路径。

[0098] 在一可选实施例中,基于所述至少一条化学反应路径包含的第一化学物对象的属性信息和/或第一反应实体的属性信息和/或第一有向边的属性信息,利用图搜索算法,从所述至少一条化学反应路径中,确定出所述目标化学反应路径。

[0099] 图搜索算法是指是从给定的目标反应物对应的节点开始,能够到达的目标产物对象对应的节点的算法。目标化学反应路径为从给定的目标反应物对应的节点开始,能够到达的目标产物对象对应的节点的集合。

[0100] 在一可选实施例中,图搜索算法可以为广度优先搜索算法或深度优先搜索算法或双向广度优先遍历算法。

[0101] 综上,本发明实施例将化学反应路径的查询转换成在化学反应关系有向图上至少两个节点之间的路径查询。例如,基于广度优先搜索算法,遍历至少两个节点之间所有可能路径,得到所述至少一条化学反应路径。

[0102] 然后,基于一定的优化准则,从所述至少一条化学反应路径中,找到最优的目标化学反应路径。

[0103] 在一可选实施例中,目标化学反应路径为所述至少一条化学反应路径中成本最低的化学反应路径。

[0104] 以化学反应路径1和化学反应路径2为例,对化学反应路径的成本的计算方法进行说明。

[0105] 化学反应路径1的成本为： $(3\text{costA}+2\text{costB}+0.5*2*\text{costF})/(0.5*0.8)$ ；

[0106] 化学反应路径2的成本为： $2\text{costB}/(0.7*0.4*0.5)$ 。

[0107] 若化学反应路径1的成本<化学反应路径2的成本，则化学反应路径1为目标化学反应路径。

[0108] 在一可选实施例中，目标化学反应路径为用户从所述至少一条化学反应路径中，确定的一个化学反应路径。

[0109] 在一可选实施例中，第一反应实体对应的属性信息还可以包括：第一反应实体表征的化学反应的反应条件。

[0110] 可以理解的是，有的化学反应条件很难达到，有的时候用户并不计较路径的成本，但是要求路径对应的化学反应的反应条件容易实现。

[0111] 在一可选实施例中，目标化学反应路径为所述至少一条化学反应路径中反应条件较容易的化学反应路径。

[0112] 可选的，反应条件的容易和复杂可以由用户自己进行设置。在一可选实施例中，预先给用户展示包含多个反应条件的页面，用户可以选择自身具备的反应条件和自身不具备的反应条件。对于用户而言，自身具备的反应条件是容易的反应条件，自身不具备的反应条件为复杂的反应条件。

[0113] 综上，本发明实施例提供方法，可以根据用户不同需求，个性化推荐目标化学反应路径。

[0114] 上述本发明公开的实施例中详细描述了方法，对于本发明的方法可采用多种形式的装置实现，因此本发明还公开了一种装置，下面给出具体的实施例进行详细说明。

[0115] 如图4所示，为本发明实施例提供的化学反应路径获取装置的一种实现方式的架构图，该化学反应路径获取装置包括：

[0116] 确定模块41，用于确定目标反应物对象与目标产物对象，所述目标反应物对象包括至少一个反应物；

[0117] 获取模块42，用于基于预设化学反应关系有向图，获得目标化学反应路径；

[0118] 其中，所述预设化学反应关系有向图包括：多个节点，以及，多条连接节点的有向边，一个节点为化学物对象或反应实体，其中，一个反应实体表征至少一个化学物对象能够发生的一种化学反应；一个有向边的一端为反应实体，另一端为参与该有向边对端的反应实体表征的化学反应的化学物对象；所述目标化学反应路径包括：至少一个反应实体，与所述至少一个反应实体相连的至少两个有向边，与所述至少两个有向边分别相连至少两个化学物对象，所述至少两个化学物对象至少包括：所述目标反应物对象和所述目标产物对象。

[0119] 可选的，所述有向边中的第一有向边对应一属性信息，和/或，所述反应实体中的第一反应实体对应一属性信息，和/或，所述化学物对象中的第一化学物对象对应一属性信息；

[0120] 其中，所述第一有向边的属性信息包括：所述第一有向边一端的化学物对象参与对端的反应实体表征的化学反应时的系数；所述第一反应实体的属性信息包括：所述第一反应实体表征的化学反应的转化率和/或所述第一反应实体表征的化学反应的反应条件；所述第一化学物对象的属性信息包括：所述第一化学物对象的单位成本。

[0121] 可选的，获取模块包括：

[0122] 第一获取单元,用于基于所述预设化学反应关系有向图,获得至少一条化学反应路径;

[0123] 第一确定单元,用于基于所述至少一条化学反应路径分别包含的第一化学物对象的属性信息和/或第一反应实体的属性信息和/或第一有向边的属性信息,从所述至少一条化学反应路径中,确定出所述目标化学反应路径。

[0124] 可选的,第一确定单元,包括:

[0125] 第一确定子单元,用于基于所述至少一条化学反应路径包含的第一化学物对象的属性信息和/或第一反应实体的属性信息和/或第一有向边的属性信息,利用图搜索算法,从所述至少一条化学反应路径中,确定出所述目标化学反应路径。

[0126] 可选的,所述有向边中第二有向边指向化学物对象,该化学物对象为所述第二有向边对端的反应实体表征的化学反应的产物;

[0127] 所述有向边中第三有向边指向反应实体,所述第三有向边对端的化学物对象为该反应实体表征的化学反应的反应物。

[0128] 可选的,获取模块包括:

[0129] 第二获取单元,用于基于预设化学反应关系有向图,获得包含的反应实体的数量小于或等于第一预设值,或,包含的反应实体的数量最小的所述目标化学反应路径,或,包含的所述目标反应物对象对应的成本最低的所述目标化学反应路径。

[0130] 如图5所示,为本发明实施例提供的电子设备的一种实现方式的结构图,该电子设备包括:

[0131] 存储器51,用于存储程序;

[0132] 处理器52,用于执行所述程序,所述程序具体用于:

[0133] 确定目标反应物对象与目标产物对象,所述目标反应物对象包括至少一个反应物;

[0134] 基于预设化学反应关系有向图,获得目标化学反应路径,所述目标化学反应路径的初始反应物包括部分或全部所述目标反应物对象,最终产物包括所述目标产物对象;

[0135] 其中,所述预设化学反应关系有向图包括:多个节点,以及,多条连接节点的有向边,一个节点为化学物对象或反应实体,其中,一个反应实体表征至少一个化学物对象能够发生的一种化学反应;一个有向边的一端为反应实体,另一端为参与该有向边对端的反应实体表征的化学反应的化学物对象;所述目标化学反应路径包括:至少一个反应实体,与所述至少一个反应实体相连的至少两个有向边,与所述至少两个有向边分别相连至少两个化学物对象,所述至少两个化学物对象至少包括:所述目标反应物对象和所述目标产物对象。

[0136] 存储器51可能包含高速RAM存储器,也可能还包括非易失性存储器(non-volatile memory),例如至少一个磁盘存储器。

[0137] 处理器52可能是一个中央处理器CPU,或者是特定集成电路ASIC(Application Specific Integrated Circuit),或者是被配置成实施本发明实施例的一个或多个集成电路。

[0138] 可选的,电子设备还可以包括通信总线53以及通信接口54,其中,存储器51、处理器52、通信接口54、通过通信总线53完成相互间的通信;

[0139] 可选的,通信接口54可以为通信模块的接口,如GSM模块的接口。

[0140] 本发明实施例还提供了一种可读存储介质,其上存储有计算机程序,所述计算机程序被处理器执行时,实现上述任一所述的化学反应路径获取方法包含的各个步骤。

[0141] 需要说明的是,本说明书中的各个实施例均采用递进的方式描述,每个实施例重点说明的都是与其他实施例的不同之处,各个实施例之间相同相似的部分互相参见即可。对于装置或系统类实施例而言,由于其与方法实施例基本相似,所以描述的比较简单,相关之处参见方法实施例的部分说明即可。

[0142] 还需要说明的是,在本文中,诸如第一和第二等之类的关系术语仅仅用来将一个实体或者操作与另一个实体或操作区分开来,而不一定要求或者暗示这些实体或操作之间存在任何这种实际的关系或者顺序。而且,术语“包括”、“包含”或者其任何其他变体意在涵盖非排他性的包含,从而使得包括一系列要素的过程、方法、物品或者设备不仅包括那些要素,而且还包括没有明确列出的其他要素,或者是还包括为这种过程、方法、物品或者设备所固有的要素。在没有更多限制的情况下,由语句“包括一个……”限定的要素,并不排除在包括所述要素的过程、方法、物品或者设备中还存在另外的相同要素。

[0143] 结合本文中所公开的实施例描述的方法或算法的步骤可以直接用硬件、处理器执行的软件模块,或者二者的结合来实施。软件模块可以置于随机存储器(RAM)、内存、只读存储器(ROM)、电可编程ROM、电可擦除可编程ROM、寄存器、硬盘、可移动磁盘、CD-ROM、或技术领域内所公知的任意其它形式的存储介质中。

[0144] 对所公开的实施例的上述说明,使本领域专业技术人员能够实现或使用本发明。对这些实施例的多种修改对本领域的专业技术人员来说将是显而易见的,本文中所定义的一般原理可以在不脱离本发明的精神或范围的情况下,在其它实施例中实现。因此,本发明将不会被限制于本文所示的这些实施例,而是要符合与本文所公开的原理和新颖特点相一致的最宽的范围。

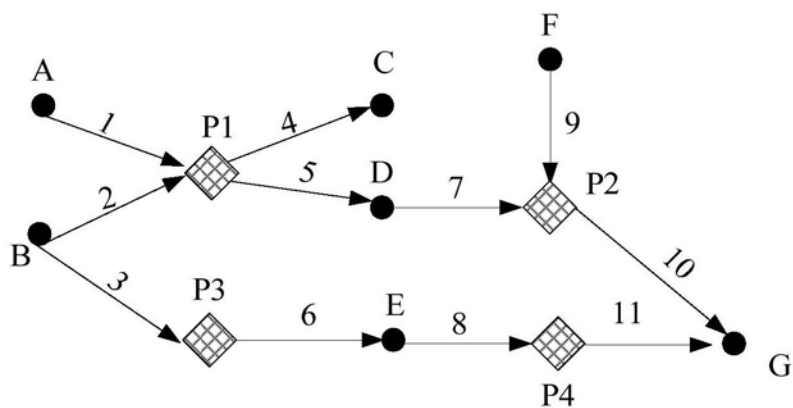


图1

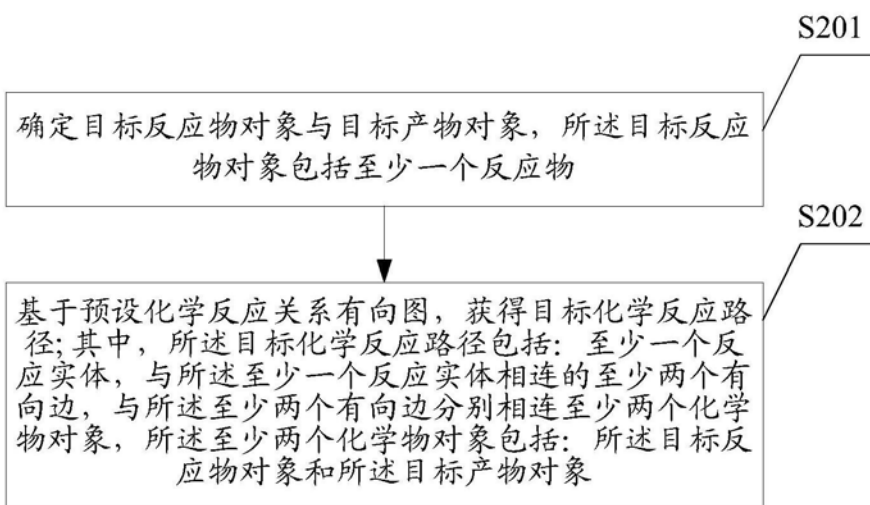


图2

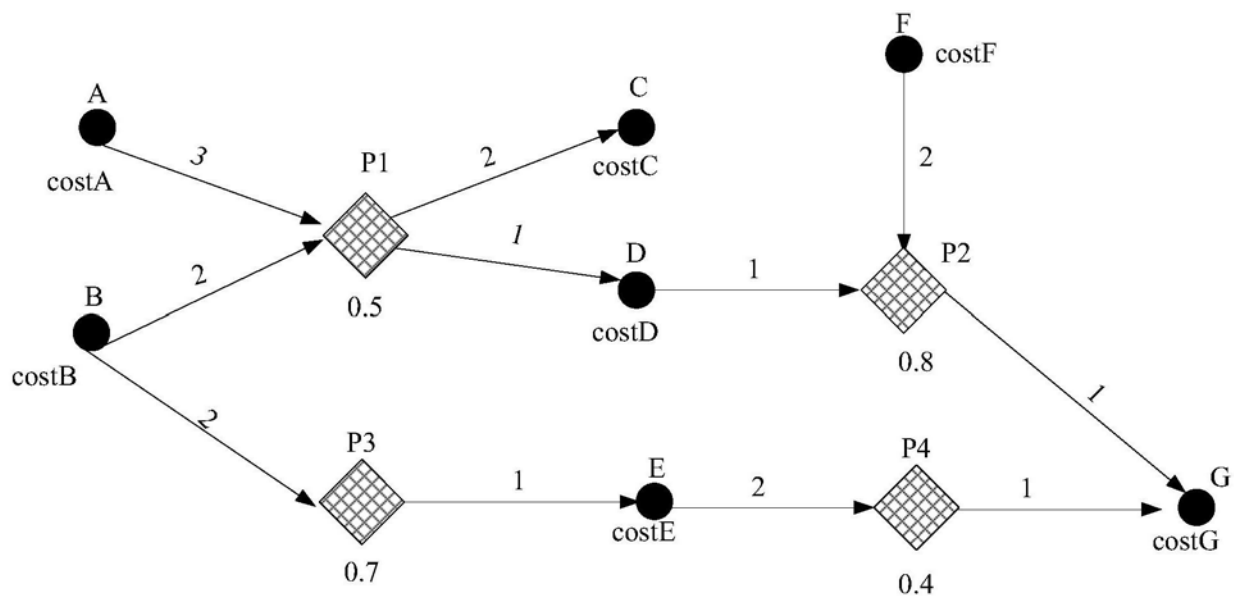


图3

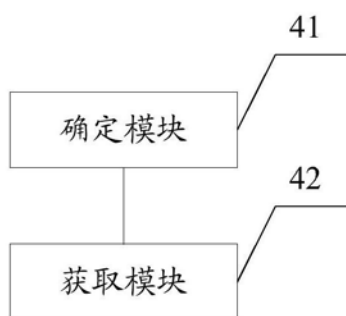


图4

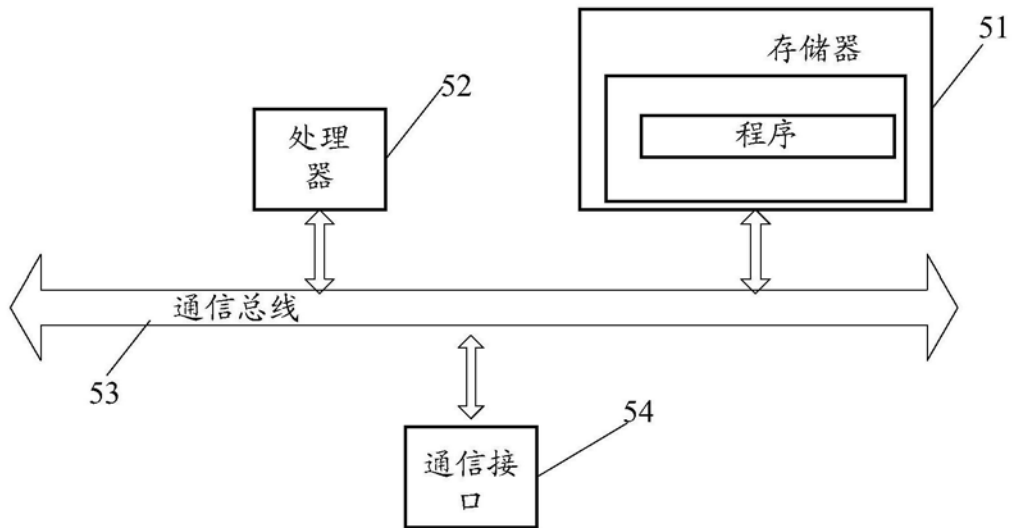


图5