

ПРОИЗВОДСТВО ЗНАНИЙ В ПРЕДМЕТНО-ОРИЕНТИРОВАННОЙ СИСТЕМЕ НАУЧНОЙ ОСВЕДОМЛЕННОСТИ ПО ФИЗИЧЕСКОЙ ХИМИИ РАДИКАЛЬНЫХ РЕАКЦИЙ

Д.А. Варламов, Д.Ю. Лазарев, В.Е. Туманов

В результате научных исследований и компьютерного моделирования химиками накоплены огромные массивы научных данных о химических реакциях (константах скорости, энергиях активации, энтальпиях реакции), о реагентах (молекулах, ионах и радикалах) и их физико-химических характеристиках (энтальпиях образования молекул и радикалов, потенциалах ионизации и т.д.). Эти данные объединяются в электронные коллекции данных, такие как файлы, базы и хранилища данных, и публикуются в Интернет на основе порталных технологий. Часто в такие порталы встраиваются приложения для первичной обработки данных, такие как расчет теплоемкости или аррениусовского хода реакции.

Задачи организации таких данных для интеллектуального анализа и исследования с целью нахождения новых зависимостей приводят к необходимости разработки и создания на основе современных информационных технологий в Интернет центров профессиональной компетенции для сообществ заинтересованных исследователей и пользователей. Такие центры компетенции должны стать местом сбора, хранения, обработки и производства новых профессиональных знаний.

В последнее время интенсивное развитие получили системы деловой осведомленности или бизнес – аналитики (Business Intelligence, BI), в основе которых лежат технологии складирования данных (Data Warehousing) и интеллектуального анализа данных (Data mining).. Одним из подходов представления и анализа научных данных в рамках электронных центров профессиональной научной компетенции является разработка систем научной осведомленности (Science Intelligence) по аналогии с системами деловой осведомленности. Одна из первых попыток дать определение была предпринята R. Hackathorn [1], который определяет систему научной осведомленности, как информационную инфраструктуру для обеспечения принятия решений и организации совместной работы научного сообщества в рамках выделенной предметной области. Общая архитектура такой системы представлена на Рис. 1.

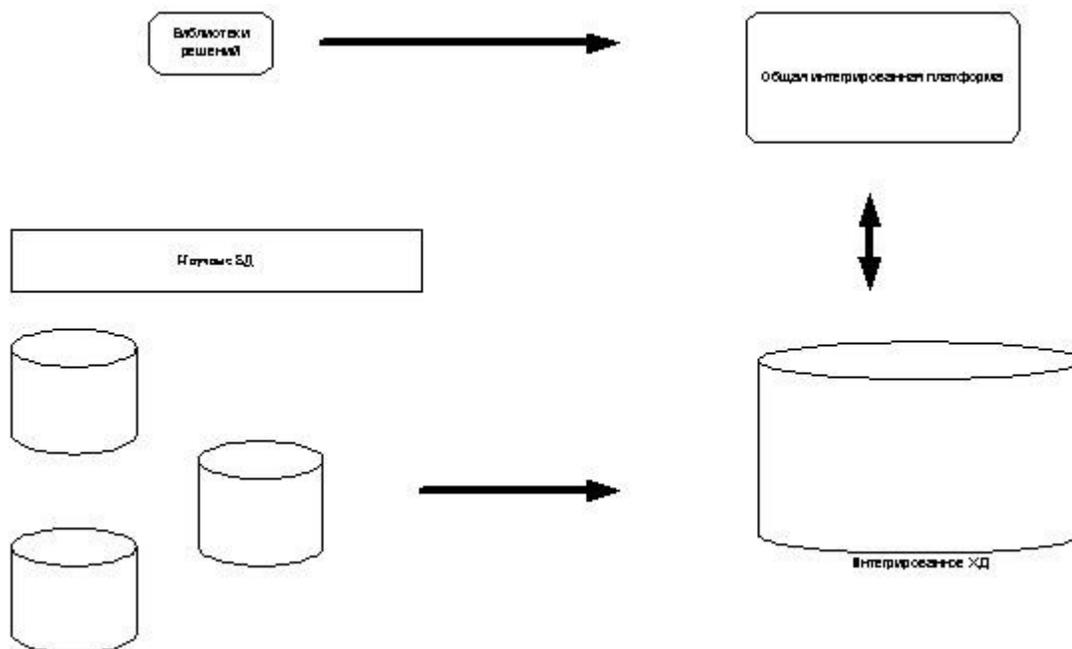


Рисунок 1. Общая архитектура системы научной осведомленности

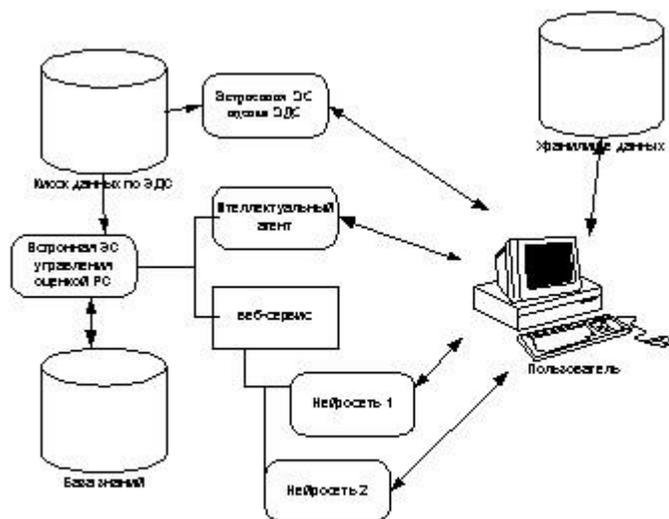


Рисунок 2. Общая архитектура хранилища знаний предметно-ориентированной системы научной осведомленности по физической химии радикальных реакций

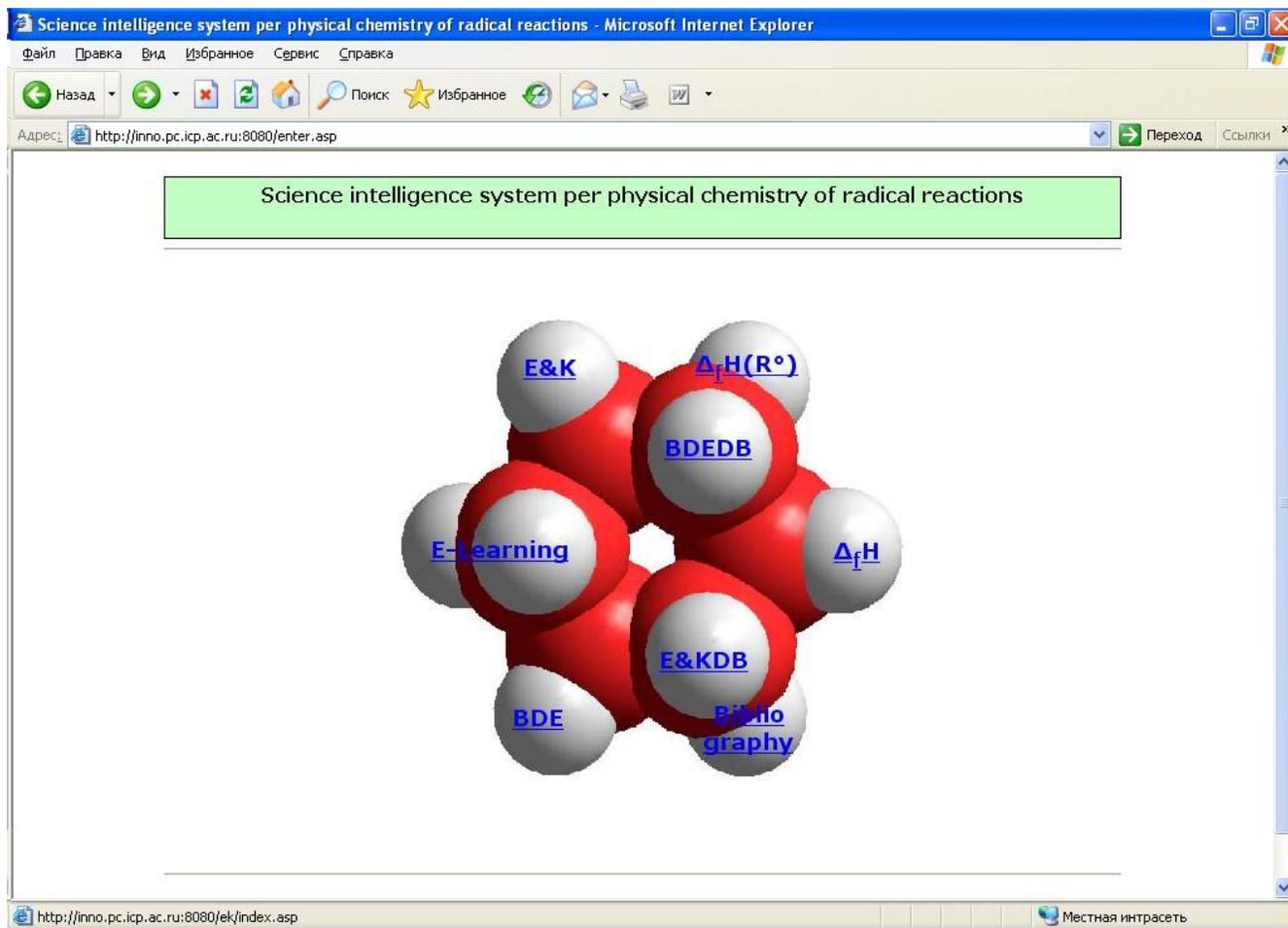


Рисунок 3. Общий интерфейс предметно-ориентированной системы научной осведомленности по физической химии радикальных реакций

В этой же работе отмечается, что создание таких систем является результатом выполнения крупномасштабных проектов, в которых участвуют десятки и сотни научных организаций. Однако в рамках научных проектов в крупных научных организациях могут быть созданы предметно-ориентированные системы научной осведомленности [2,3], которые отличаются более узкоспециализированной предметной областью знаний и более гибкой архитектурой. В частности, включающих активные элементы производства новых знаний – интеллектуальные агенты и встроенные экспертные системы. Такие предметно-ориентированные системы научной осведомленности могли бы рассматриваться, как узлы распределенного центра профессиональной компетенции в сети Интернет.

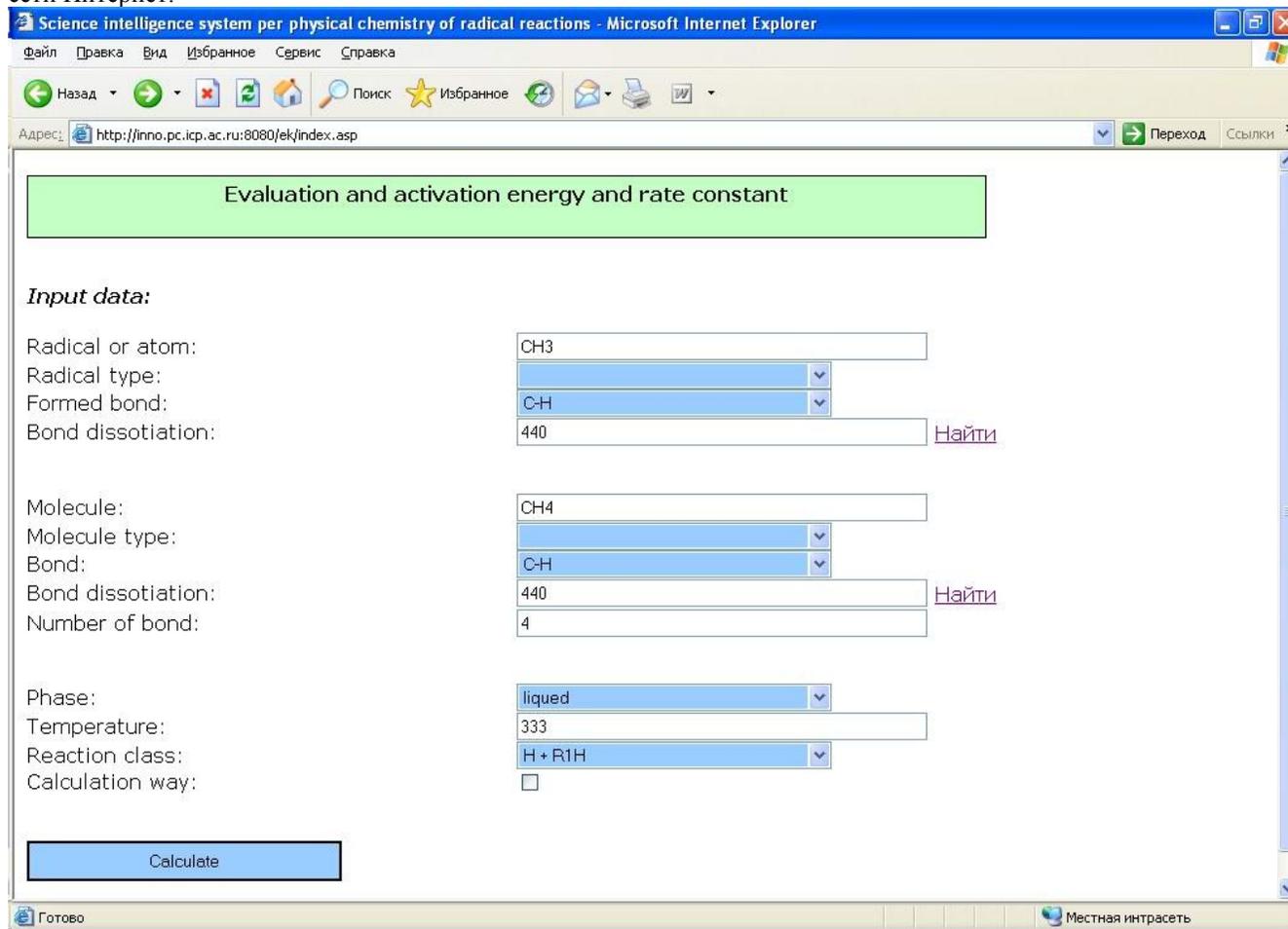


Рисунок 4. Интерфейс встроенной экспертной системы оценки реакционной способности предметно-ориентированной системы научной осведомленности по физической химии радикальных реакций

Предметно-ориентированная система научной осведомленности по физической химии радикальных реакций, разрабатываемая в настоящее время в ИПХФ РАН, включает в себя информационный ресурс и компонент производства новых профессиональных знаний. Информационный ресурс системы включает в себя:

- хранилище данных для исследования (Exploration Data Warehouse), содержащее экспериментальные данные по реакционной способности радикальных реакций в жидкой фазе;
- киоск данных по энергиям диссоциации связей,
- базы данных по энтальпиям молекул и радикалов.

Компонент производства новых профессиональных знаний включает в себя (Рис. 2):

- встроенную экспертную систему для управления оценкой реакционной способности радикальных реакций;
- интеллектуальный агент для оценки константы скорости и энергии активации реакции в жидкой и газовой фазе;

- веб-сервис, посредством которого осуществляется вызов обученных искусственных нейронных сетей для прогнозирования значений констант скорости и энергии активации жидкофазных радикальных реакций определенных классов.
- хранилище данных, содержащее рассчитанные данные по реакционной способности радикальных реакций в жидкой и газовой фазах;
- базу знаний, содержащую производственные правила и факты, которые используются встроенными экспертными системами.

Разработанный компонент производства новых знаний в области физической химии радикальных реакций можно рассматривать как хранилище профессиональных знаний, которое пополняется новыми знаниями в результате работы пользователей системы. Общий интерфейс системы приведен на Рис. 3, а интерфейс экспертной системы оценки реакционной способности на Рис. 4.

В результате публикации в Интернет предметно-ориентированной системы научной осведомленности по физической химии радикальных реакций химики-исследователи, химики-технологи, студенты, аспиранты и преподаватели вузов получают доступ как к справочным данным по реакционной способности радикальных реакций в жидкой фазе, энергиям диссоциации связей и энтальпиям образования органических соединений, так и возможность получать оценки скорости радикальных реакций в жидкой и газовой фазах, энергий диссоциации связей органических молекул по кинетическим данным.

Разработка предметно-ориентированных систем научной осведомленности на основе использования интеллектуальных агентов в Интернет позволит научному сообществу создавать распределенные сети для сбора, хранения, распространения и производства предметно-ориентируемых фундаментальных знаний.

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ 07-07-00343а.

ЛИТЕРАТУРА:

1. R. Hackathorn Science Intelligence. Can a Business Intelligence Approach Enable “Smart” Science?. DM Review. 2005. (<http://www.DMReview.com>)
2. Q. Dong, X. Yan, R.D. Chirico, R.C. Wilhoit, M. Frenkel Database Infrastructure to Support Knowledge Management in Physicochemical Data. // 18-th CODATA Conference. 2002, Sep 29 – 3 Oct., Montreal, Canada, 36 P.
3. V.E. Tumanov Data Warehousing and Data Mining in Thermochemistry of Free Radical Reactions. // Fourth Winter Symposium on Chemometrics "Modern Methods of Data Analysis". Russia. Chernogolovka. February. 15-18. 2005. PP. 28-29.