

Всероссийский институт научной и технической информации РАН (ВИНИТИ РАН)
г. Москва, Россия

***Аннотация.** Рассматриваются программные и технические средства, предназначенные для обучения работе с системами поиска структурной химической информации в Базе структурных данных по химии ВИНИТИ РАН. Приведен перечень поисковых сервисов, доступных пользователям в процессе обучения.*

Ключевые слова: компьютерное обучение; базы данных по химии; структурный поиск

База структурных данных по химии, создаваемая в ВИНИТИ РАН (База СД), является одним из крупнейших в мире хранилищ данных структурной химической информации. База СД содержит информацию о химических структурах (более 5,8 млн. записей) и о химических реакциях (более 1,7 млн. записей), полученную в результате обработки российской и зарубежной научно-технической литературы по химии и химической технологии. За годы формирования и эксплуатации Базы СД было создано обширное программно-лингвистическое обеспечение, включающее средства графического и текстового ввода и редактирования данных, а также экспорта данных в общепринятых обменных форматах. Заметную долю программного обеспечения составляют системы поиска химической информации, в режимах on-line и off-line, ориентированные на различные категории пользователей.

Обучение пользователей эксплуатации программ, связанных с обработкой структурной химической информацией, необходимо, поскольку соответствующее программное обеспечение постоянно развивается. В 2018г. были созданы программные средства для обучения работе с представлениями химических структур [1].

Созданный недавно комплекс программных и технических средств для обучения поиску структурной химической информации (далее – Комплекс) включает в себя набор персональных компьютеров, объединенных в локальную сеть и программные средства, находящиеся на сервере ВИНИТИ РАН (далее – Сервер).

К поисковым сервисам Комплекса относятся:

1. Адаптированная для обучения автономная система структурного поиска химической информации (версия от 21.05.2021). Она позволяет вести поиск информации о химических структурах и реакциях в режиме off-line по в текстовым запросам или по рисункам структур, формируемым в графическом редакторе [2]. Имеется возможность вспомогательного поиска в базах данных с открытым доступом посредством сети Интернет.

2. Адаптированная для обучения автономная система поиска информации о химических реакциях из Базы СД [3] с дополнительным просмотром библиографии источников.

Программное обеспечение Комплекса находится на Сервере, к которому имеется доступ по локальной сети рабочих станций.

Интерфейс для взаимодействия пользователя с функциями системы обеспечивает специальная программа, позволяющая выполнять следующие операции:

- обращаться к автономным системам поиска химических структур и реакций;
- обращаться к удаленным системам поиска химических структур в режиме on-line (<http://chem.viniti.ru/> [4], <http://sd.viniti.ru/>).
- выходить в Интернет для связи с базами данных химических соединений с открытым доступом;
- получать справочные данные в виде инструкций ВИНТИ РАН, НТП, и других документов;
- фиксировать заметки в личном журнале обучаемого;
- хранить и обновлять данные о процессе обучения всех пользователей в журнале администратора комплекса.

Программное обеспечение Комплекса включает средства, обеспечивающие возможность гибридного обучения таким образом, что удаленный пользователь может оперативно взаимодействовать Сервером со своего домашнего компьютера.

Список литературы:

1. Ю.Е. Бессонов, С.В. Трепалин, Б.С.Фельдман, Н.И. Чуракова. Программно-аппаратный комплекс для обучения работе с представлениями химических структур Система поиска реакций. Тезисы XIV Международной Научно-методической конференции "Современное образование: Содержание, технологии, качество", Санкт-Петербург, 18 апреля 2018 г. т.2, с.29-31.

2. S.V. Trepalin, Yu.E. Bessonov, B.S. Fel'dman, E.V. Kochetova, N.I. Churakova, L.M.Koroleva, The Structural Chemical Database of the All-Russian Institute for Scientific and Technical Information, Russian Academy of Sciences. An Autonomous System for Structural Searches. Automatic Documentation and Mathematical Linguistics, 52(6), 297-305 (2019), DOI: 10.3103/S0005105518060055.

3. Ю.Е. Бессонов, Б.С. Фельдман, Н.И. Чуракова, Е.В. Кочетова. Поиск и отображение информации о химических реакциях в базе структурных данных по химии ВИНТИ РАН / Научно-техническая информация. Сер. 2. – 2022. – № 3. – С. 10-22. DOI: 10.36535/0548-0027-2022-03-2.

4. О.М. Нефедов, С.В. Трепалин, Л.М. Королева, Ю.Е. Бессонов. Быстрый поиск точных химических структур в больших базах данных с использованием InChI Key кодировки структур. "Научно-техническая информация", Сер. 2. Информ. процессы и системы. 2013. №12, С. 27–33.

Yu. E. Bessonov, B. S. Feldman, N. I. Churakova

Software and hardware complex for teaching the search for structural chemical information

Russian Institute for Scientific and Technical Information (VINITI RAS), Russia

Abstract. The paper considers software and hardware tools designed to teach how to work with structural chemical information retrieval systems in the Structural Chemistry Database of VINITI RAS. A list of search services available to users in the learning process is given.

Keywords: computer learning; chemistry databases; structural search