

УДК 628.063

¹ **Н.Г. Антонюк**

Канд. хім. наук, доцент, доцент

² **А.О. Антонюк**

Канд. фіз.-мат. наук, доцент, доцент

¹ *Національний університет «Києво-Могилянська академія», м. Київ*

² *Національний університет державної фіскальної служби України, м. Ірпінь Київської області*

ДО ПОБУДОВИ ОНТОЛОГІЇ ХІМІЇ МЕМЕБРАН

Вступ. В останні роки розробка онтологій – формальних явних описів термінів предметної області та відносин між ними – переходить зі світу лабораторій зі штучного інтелекту на робочі столи експертів по предметних областях.

У багатьох дисциплінах зараз розробляються стандартні онтології, які можуть використовуватися експертами по предметних областях для спільного використання і анування інформації в своїй області. Наприклад, в області медицини створені великі стандартні, структуровані словники, такі як *snomed* (Price and Spackman 2000) і семантична мережа Системи Уніфікованої Медичної Мови (the Unified Medical Language System) (Humphreys and Lindberg 1993).

На сьогодні розроблено величезну кількість самих різноманітних онтологій в самих різноманітних сферах. Зокрема, в хімії відома ціла низка онтологій в багатьох розділах хімії. Однією з сучасних хімічних онтологій є *ChEBI* (хімічні об'єкти біологічного впливу) – це легкодоступний словник молекулярних структур, орієнтований на невеликі хімічні об'єкти. *ChEBI* надає стандартні описи молекулярних структур, які дозволяють іншим базам даних на *EMBL-EBI* і в усьому світі коментувати їх записи послідовним способом.

Ще одним прикладом онтології, предметною областю якої є хімія і інші суміжні галузі, є *OntoChem*. Вона може бути використана для вирішення різних задач, таких як автоматичне індексування, витяг неявної, невідомої і корисної інформації, текстовий і інтелектуальний аналіз, пошук внутрішніх і зовнішніх масивів даних і підтримка розвитку нових продуктів за допомогою транзитивного виявлення знань.

До проблем хімії має пряме відношення такий важливий напрям як мембрани та мембранні технології, який останнім часом інтенсивно розвивається [1]. Мембрани мають безпосередній зв'язок і з нанотехнологіями, розділенням речовин [4], очисткою води і т.д. [2,3]. Як сказав Ейдзі Канаї, керівник фірми «Асахи Касэй» – «Той, хто буде панувати над мембранами, займе командні висоти в хімії завтрашнього дня». Отже створення онтології мембран є актуальною проблемою.

В даному дослідженні зроблено спробу побудови одного із варіантів онтології мембран. Як виявилось, створення онтології мембран наштовхнулося

на цілу низку проблем, пов'язаних як із обсягом термінологічного матеріалу, так і з складнощами при визначенні зв'язків зі сферами застосування мембран. Проте, спроба створення даної онтології була зроблена із здійснювалася за описом наступних пунктів:

- кому дана онтологія призначена, її необхідність для спільного використання людьми будь-якої інформації про мембрани, її корисність для фахівців з мембран та мембранних технологій;

- цілком можливо, що якась онтологія мембран вже існує, але її поліпшення, розширення та розвиток завжди буде корисним;

- як виявилось, скласти список найбільш важливих термінів із мембран виявилось дуже складно – одних класифікацій мембран виявилось декілька десятків, також має місце зв'язок мембран з практично всіма відомими напрямками науки та технології;

- також надзвичайно складними виявилась розробка ієрархії класів самих мембран та визначення властивостей понять (або слотів).

Звичайно, запропонований варіант онтології мембран не є остаточним. Слід зауважити, що в подальшому необхідно вдосконалення даної онтології, оскільки розробка онтології – це обов'язково ітеративний і творчий процес, а також завжди існують життєздатні альтернативи.

Список використаних джерел

1. Брик М.Т. Енциклопедія мембран. К.: ВД «КМ Академія». Т 1, 2005.- 665 с., Т 2, 2006.- 684 с.
2. Трековые мембраны нового поколения. В мире науки. 2005. № 12. С. 35. (<http://www.sciam.ru/2005/12/Sciencerf1.shtml>).
3. Мулдер М. Введение в мембранную технологию. М.: Мир, 1999. 514 с.
4. Шапошник В.А. Мембранные методы разделения смесей веществ // Соросовский Образовательный Журнал. 1999. № 9. С. 27–32.