А.И. Прохоров, Д.А. Варламов,
Е.С. Амосова, В.Е. Туманов,
П.К. Берзигияров

**Веб-портал интеллектуальной
системы по физической химии
радикальных реакций в жидкой фазе**

Рекомендуемая форма библиографической ссылки

Прохоров А.И., Варламов Д.А., Амосова Е.С., Туманов В.Е., Берзигияров П.К. Веб-портал интеллектуальной системы по физической химии радикальных реакций в жидкой фазе // Научный сервис в сети Интернет: труды XIX Всероссийской научной конференции (18-23 сентября 2017 г., г. Новороссийск). — М.: ИПМ им. М.В.Келдыша, 2017. — С. 400-405. — URL: <http://keldysh.ru/abrau/2017/47.pdf> doi:[10.20948/abrau-2017-47](https://doi.org/10.20948/abrau-2017-47)

Размещена также [презентация к докладу](#)

Веб-портал интеллектуальной системы по физической химии радикальных реакций в жидкой фазе

А.И. Прохоров¹, Д.А. Варламов^{1,2}, Е.С. Амосова¹, В.Е. Туманов³,
П.К. Берзигияров¹

1 Институт проблем химической физики РАН

2 Институт экспериментальной минералогии РАН

3 МБОУ СОШ № 21 г.Ногинск Московская область

Аннотация. Разработка и публикация в Интернет интеллектуальной проблемно-ориентированной системы научной аналитики, реализуемой в настоящее время в ИПХФ РАН, в области жидкофазной радикальной кинетики и термохимии, основанной на использовании онтологических моделей предметных областей, позволит научному сообществу применить возможности интеллектуального анализа накопленных экспериментальных данных для распространения и производства новых знаний в данной области научных исследований.

Ключевые слова: портал, научная интеллектуальная система, физическая химия, радикальная реакция, нечеткая логика, искусственные нейронные сети

Накопленный объем экспериментальных данных по физической химии радикальных реакций к последним десятилетиям XX века и развитие к этому времени информационных технологий привели к созданию первых электронных коллекций научных данных по кинетике и термохимии радикальных реакций. Оцифрованные данные позволили производить автоматизированную обработку и анализ этих фундаментальных знаний, накопленных в различных научно-исследовательских организациях. Это к настоящему времени привело к необходимости развития информационных технологий по накоплению, обработке, извлечению и интеллектуальному анализу предметно-ориентированных профессиональных знаний с использованием различных как универсальных, так и специализированных математических моделей представления таких знаний в электронных ресурсах.

Разработка предметно-ориентированных информационных ресурсов по физической химии радикальных реакций в сети Интернет, как компонентов центров профессиональной компетенции, для хранения, производства новых предметно-ориентированных знаний и предоставление доступа к ним широкого круга пользователей в настоящее время стала актуальной задачей.

Анализ исследований показывает, что разработчики электронных ресурсов по химической кинетике и термохимии последовательно продвигаются от баз данных через технологии хранилищ данных по пути создания интеллектуальных проблемно-ориентированных систем, основанных на знаниях, с применением в этих системах математического моделирования и интеллектуального анализа данных в режиме реального времени с одновременным размещением их в Интернет [1]. Это направление исследований сохраняет свою актуальность, в том числе с применением методов прикладного искусственного интеллекта и вычислительной химии.

В ИПХФ РАН впервые на основе технологии хранилищ данных [2] были созданы базы данных по жидкофазной радикальной кинетике и по энергиям диссоциации связей многоатомных молекул, в рамках выполнения настоящего проекта была выполнена их интеграция в информационный портал.

В портал также были встроены экспертные системы для оценки физико-химических свойств радикальных реакций и реагентов [3-5], разработаны и внедряются специально разработанные предметные онтологии [6-8] по физической химии радикальных реакций. Для портала осуществляется автоматизированный сбор новых экспериментальных данных по тематике радикальных реакций из открытых источников Интернет с помощью специализированного веб-сервиса [9].

К настоящему времени ИПХФ РАН был выполнен цикл поисковых исследований по применению искусственных нейронных сетей и нечеткой логики для предсказания энергии активации, констант скорости радикальных жидкофазных реакций отрыва и энергий диссоциации связей на основе экспериментальных кинетических и термохимических данных, взятых из разработанных баз данных.

Использование технологии хранилищ данных [10] при формировании базы знаний интеллектуальной системы, а именно, киоска данных по константам скорости радикальных жидкофазных реакций [11] и киоска данных по энергиям диссоциации связей органических соединений [12], позволяет строить структурированные выборки экспериментальных фактографических кинетических и термохимических данных для последующего анализа методами искусственного интеллекта [13].

Разработанные эмпирические модели радикальных реакций [14] позволили построить информационное пространство количественных и лингвистических признаков для анализа реакционной способности реагентов в радикальных жидкофазных реакциях методами кластерного анализа и искусственных нейронных сетей.

Следует отметить, что применение искусственных нейронных сетей для прогнозирования реакционной способности химических реакций находится в центре внимания нескольких исследовательских групп в Европе, США, Японии, Корее и России [1]. В этих работах использовалось информационное пространство признаков, отличное от построенного и используемого нами,

поскольку в качестве предметной области была определена только газофазная кинетика. Наш же подход применим и для жидкофазной кинетики.

В процессе проведенного исследования было установлено следующее.

На основе введенного понятия кинетического параметра [14] было введено понятие эмпирического индекса реакционного центра, как его дифференциации на реакционные центры с близким значением энергии активации термонеutralной реакции серии (протекающей в реальности или гипотетической) [13].

Это позволило применить методы кластеризации *k*-средних и *c*-средних для очистки экспериментальных данных в выборке. Используемые методы позволяли получить кластеры с однотипными объектами и исследовать их на предмет надежности полученных в эксперименте данных. Различие между результатами применения *k*-средних и *c*-средних состояло в смещении центра кластеров в информационном пространстве признаков, не изменяя состав его объектов [15].

Была выполнена редукция размерности информационного пространства, использованного в работах [16, 17]. В результате проведенных далее исследований по применению искусственных нейронных сетей было установлено, что построенные сети для аппроксимации классического потенциального барьера радикальных реакций в жидкой фазе [18-21] дают хорошее приближение (в рамках ошибок кинетического эксперимента) при более детальной классификации радикальных реакций на основе использования эмпирического индекса реакционного центра.

Проведено исследование по применению нечетких нейронных сетей для аппроксимации классического потенциального барьера радикальных реакций в жидкой фазе [22, 23], в которых показаны преимущества использования нечеткой логики.

Построенные и обученные нейросети были использованы в экспертной системе, встроенной в портал, для оценки реакционной способности радикальных бимолекулярных жидкофазных реакций и разработанной на основе мультиагентной технологии [5].

По результатам исследований была выдвинута гипотеза о том, что использование свёрточной нейронной сети (*convolutional neural network, CNN*) позволит интегрировать разработанные нами сети прямого распространения в одну нейросеть. Основной проблемой, с которой нам придется столкнуться на этом пути, будет исследование и выбор методов обучения сети.

Таким образом, в ИПХФ РАН были созданы и успешно используются предпосылки как для разработки и создания, так и для развития интеллектуальной проблемно-ориентированной системы научной аналитики в области жидкофазной радикальной кинетики и термохимии, основанной на использовании онтологических моделей этих предметных областей.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект 15-07-08645-а.

Литература

1. Туманов В.Е. От проблемно-ориентированных баз данных к извлечению новых знаний в химической кинетике и термохимии радикальных жидкофазных реакций // Научное обозрение. Реферативный журнал, 2016. — № 2. — С. 81-92.
2. Tumanov V.E. Data warehousing and data mining in thermochemistry of free radical reactions // Fourth Winter Symposium on Chemometrics "Modern Methods of Data Analysis" (15-18 February 2005, Chernogolovka, Russia). — P.28-29.
3. Туманов В.Е., Лазарев Д.Ю., Денисов Е.Т. Экспертная система оценки энергии диссоциации связей органических молекул по кинетическим данным радикальных реакций // Программы для ЭВМ, Базы данных, Топология интегральных микросхем. — М.:ФГУ ФИПС, 2011. — № 2. — Ч. 2. — С. 337.
4. Туманов В.Е., Прохоров А.И., Соловьева М.Е. Программа с элементами искусственного интеллекта для оценки энтальпии образования радикалов по кинетическим данным. // Бутлеровские сообщения, 2013. — Т. 34. — № 5. — С. 67-74.
5. Tumanov V.E., Amosova E.S., Prokhorov A.I. Developing an expert system integrated into the information portal to evaluate reactivity of organic molecules in radical reactions. // MATEC Web of Conferences, 2016. — V. 76. — 04007. — DOI: 10.1051/mateconf/20167604007.
6. Амосова Е.С., Туманов В.Е. Преставление химических реакций, реагентов и их термохимических свойств в интеллектуальной системе по физической химии радикальных реакций в жидкой фазе с использованием онтологической модели предметной области. // Бутлеровские сообщения, 2014. — Т. 39. — № 7. — С. 39-46.
7. Амосова Е.С., Берзигияров П.К. Разработка представления онтологической модели по физической химии радикальных реакций отношениями реляционной базы данных и реализация его в предметно-ориентированной системе научной осведомленности. // Бутлеровские сообщения, 2016. — Т. 45. — № 1. — С. 152-158.
8. Прохоров А.И., Варламов Д.А., Амосова Е.С., Берзигияров П.К., Туманов В.Е. Внедрение предметных онтологий в систему научной аналитики по физической химии радикальных реакций // Научный сервис в сети Интернет: труды XVIII Всероссийской научной конференции (19-24 сентября 2016 г., г. Новороссийск). — М.: ИПМ им. М.В.Келдыша, 2016. — С. 298-302. — doi:10.20948/abrau-2016-26.
9. Прохоров А.И., Варламов Д.А., Амосова Е.С., Соловьева М.Е., Туманов В.Е., Берзигияров П.К. Инфраструктура веб-сервиса интеллектуальной проблемно-ориентированной системы научной аналитики по физической химии радикальных жидкофазных реакций в Интернет // Научный сервис в сети Интернет: труды XVII Всероссийской научной

- конференции (21-26 сентября 2015 г., г. Новороссийск). — М.: ИПМ им. М.В.Келдыша, 2015. — С. 298-302.
10. Туманов В.Е. Проектирование хранилищ данных для систем бизнес - аналитики: Учебное пособие /В.Е. Туманов — М.: Интернет-Университет Информационных Технологий: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. — 615 с.
  11. Туманов В.Е. Киоск данных «Константы скорости радикальных жидкофазных реакций» как компонент хранилища знаний. // Современные информационные технологии в науке, образовании и практике. Материалы VIII всероссийской научно-практической конференции (с международным участием). — Оренбург: ИПК ГОУ ОГУ, 2009. — С. 83-88.
  12. Туманов В.Е., Денисов Е.Т. База данных по энергиям диссоциации связей углеводородов и их производных // Нефтехимия, 2003. — Т. 43. — № 1. — С. 65-67.
  13. Tumanov V.E. Application of the artificial neural networks and fuzzy logic for the prediction of reactivity of molecules in radical reactions // Computational Problems in Engineering. Lecture Notes in Electrical Engineering / Mastorakis N., Mladenov V.(Eds.) — Springer International Publishing Switzerland, 2014. — V. 307. — P. 261-269.
  14. Денисов Е.Т. Новые эмпирические модели радикальных реакций радикального отрыва // Успехи химии, 1997. — Т. 66. — С. 953-971.
  15. Туманов В.Е. Построение групп радикальных реакций отрыва алгоритмом k -средних для предсказания физико-химических характеристик реагентов. // Фундаментальные исследования, 2013. — № 6 (часть 6). — С. 1386-1390.
  16. Туманов В.Е. Применение искусственных нейронных сетей для оценки реакционной способности молекул в радикальных реакциях. // Информационные технологии, 2010. — № 5. — С. 11-15.
  17. Tumanov V., Gaifullin G. Application of the Artificial Neural Networks for the Prediction of Reactivity of Molecules in Radical Reactions // Mathematical Modelling and Simulation in Applied Sciences. Proc. of the 3rd International Conference on Energy, Environment, Devices, Systems, Communications, Computers (INEEE '12). Rovaniemi, Finland. April 18-20, 2012. — P. 62-65.
  18. Tumanov V.E. Hybrid algorithm of application of artificial neuronets for an evaluation of rate constants of radical bimolecular reactions. // Advances in Neural Networks, Fuzzy Systems and Artificial Intelligence. Recent Advances in Computer Engineering Series. Jerzy Balicki (Eds) WSEAS Press. Gdansk, Poland, 15-17 may 2014. — Vol. 21. — P. 58-61.
  19. Tumanov V.E., Gaifullin B. N. Evaluation of the rate constants of reactions of phenyl radicals with hydrocarbons with the use of artificial neural network. // Current Approaches in Applied Artificial Intelligence. Springer International Publishing Switzerland. M. Ali et al. (Eds.): IEA/AIE 2015, LNAI 9101. — P. 394–403.

20. Туманов В.Е., Саранчин В.К. Оценка реакционной способности углеводородов в реакциях с фенильным радикалом с использованием искусственной нейронной сети. // Химические технологии, 2015. — № 9. — С. 570-575.
21. Tumanov V.E. Evaluation of the rate constants reactions of the alkyl, allyl and aryl radicals with hydrocarbons with use the artificial of neural networks. // «Живые и биокосные системы», 2015. — № 13. — URL: <http://www.jbks.ru/archive/issue-13/article-14>
22. Tumanov V.E., Amosova E.S., Prokhorov A.I. Using fuzzy knowledge base to evaluate classical potential barrier of reactions in solutions of hydrogen atoms and hydrocarbons // International Journal of Fuzzy Systems and Advanced Applications, 2016. — V. 3. — P. 43-46.
23. Tumanov V.E., Amosova E.S., Prokhorov A.I. Using fuzzy knowledge base to evaluate a classical potential barrier of liquid phase reactions of tert-Butyloxyl radicals with hydrocarbons // Advances in Intelligent Systems and Computing. Information Systems Architecture and Technology: Proceedings of 37th International Conference on Information Systems Architecture and Technology – ISAT 2016 – Part I. Editors: L. Borzemski, A. Grzech, J. Świątek, Z. Wilimowska. — V. 521. — P. 199-209.