

УДК 54; 002

## ТЕЛЕКОММУНИКАЦИЯ КАК ОСНОВА ЭФФЕКТИВНОЙ РАБОТЫ С НАУЧНОЙ ИНФОРМАЦИЕЙ В ХИМИИ

Б.И. Покровский, В.В. Лунин, М.Я. Мельников, А.И. Лебедев, М.М. Табунов, Э.К. Кочетова, И.В. Петросян

Наука производит и потребляет огромное количество информации. Химия по своему информационному наполнению значительно опережает большинство других естественнонаучных дисциплин и закономерно, что именно химики неоднократно были инициаторами появления новых подходов к проблемам научной информации (к примеру, Бейльштейн, Несмеянов, Гарфильд и др.). Освоению новой информационной технологии на Химическом факультете МГУ посвящена настоящая работа.

### Первый этап освоения телекоммуникации

Наше знакомство с возможностями телекоммуникации произошло в 1985 г., когда один из сотрудников Института высоких температур Академии наук принес простенький модем американского производства и продемонстрировал, как можно по телефону соединиться с удаленным компьютером и получить информацию из хранящейся в нем базы термодинамических данных «ИВТАНТЕРМО». Возможность работы с удаленными компьютерами по телефону сразу привлекла наше внимание. Стало очевидно, что это тот путь, который позволит совершенно по-новому организовать работу с научной информацией.

В СССР к тому времени работы в этом направлении были уже начаты. Прежде всего надо сказать об основанной в 1983 г. в ВИНТИ крупнейшей в нашей стране электронной информационной системе. В ее базах содержалась библиографическая информация практически по всем разделам естественных наук, соответствующая выпускам печатного издания «Реферативного журнала». Система предназначалась для работы в режиме удаленного доступа. Научный сотрудник мог вести поиск научной информации, находясь в месте, удаленном от ее источника, для чего ему было достаточно иметь компьютер, телефон и модем.

Другим важным информационным центром был Международный центр научной и технической информации (МЦНТИ). На компьютерах МЦНТИ был установлен ряд зарубежных и отечественных баз данных, в том числе «INSPEC» (Physics Abstracts), «INIS» (международная база по ядерной науке и технологии) и несколько других.

«Неинформированность сразу означает отставание»

*Джеймс Уотсон, Нобелевский лауреат*

Существовал еще ряд специализированных систем. Так, система «Поиск» содержала материалы международной патентной службы INPADOC, сведения об отчетах и диссертациях хранились в базе ВНИЦентра. Компьютерный центр был создан и в такой крупной научной библиотеке, как ГПНТБ. К сожалению, эти центры располагали несовершенной технологической базой и практического значения не имели.

Доступ к зарубежным информационным системам в то время был возможен через Всесоюзный институт прикладных автоматизированных систем. Однако использовать эту возможность удавалось крайне редко из-за отсутствия валютных средств.

На первом этапе технология работы с удаленными базами данных была еще очень далека от совершенства. Использовали отечественные модемы весом более 20 кг, рассчитанные на скорость 300 бит/с. Сами системы функционировали на машинах типа ЕС, в которых часто происходили сбои, в результате чего сеансы связи порой превращались в весьма нервные мероприятия. Несмотря на это, использование телекоммуникации при работе с базами данных оказалось исключительно эффективным. Так, скорость и полнота поиска в реферативных базах ВИНТИ и МЦНТИ оказалась несравнимо выше, чем позволяли традиционные методы библиотечного поиска.

Таким образом, в середине 80-х годов в России начала формироваться инфраструктура информационного обеспечения, основанная на телекоммуникационной технологии. Все это надо было освоить и ввести в практику научных и образовательных учреждений. Следовало не только обеспечить научным сотрудникам и студентам доступ к таким системам, но и научить их ими пользоваться.

С этой целью на химическом факультете МГУ в 1986 г. создается Информационный центр и организуется работа в режиме удаленного доступа с крупными поставщиками информационных услуг (ВИНТИ, МЦНТИ, ГПНТБ и др.). Издаются два справочных руководства по работе с информационно-поисковыми системами: «Химическая информация» В.М. Потапова и Э.К. Кочетовой [1] и «Поиск химической информации» В.М. Потапова, М.И. Розенмана, Э.К. Кочетовой и Б.И. Покровского [2].

Постепенно работа с компьютерными источниками информации становится все более привычным явлением. В информационном центре работают сотрудники, аспиранты, дипломники; здесь читаются лекции, проводятся семинары и консультации. Опыт начали перенимать коллеги из других химических ВУЗов, в том числе из РХТУ им. Д.И. Менделеева.

Все оборвалось в 1992 г. В информационных центрах не стало средств для эксплуатации ЕС ЭВМ. На этом завершился первый этап использования телекоммуникации в информационном обеспечении науки и образования в России.

Какие же были сделаны выводы? Во-первых, стало очевидно, что реально построить эффективную информационную инфраструктуру можно, только взяв за основу телекоммуникационную технологию. Во-вторых, все проблемы, связанные с химической информацией, химикам должны решать самостоятельно. Никто лучше них самих не сможет учесть в информационно-поисковых системах специфические особенности химических публикаций (номенклатура органических и комплексных соединений, структурные формулы и др.). Так, к примеру, крупнейший реферативный журнал по химии «Chemical Abstracts» создается в США не в недрах некоего информационного монстра. Его издает Американское химическое общество.

### Проект РФФИ

#### *Компьютерная сеть факультета*

Новый этап в создании инфраструктуры информационного обеспечения научных исследований в химии начался в 1994 г., когда соответствующий проект был поддержан Российским фондом фундаментальных исследований. Задача формулировалась просто: «... создание на Химическом факультете МГУ информационной сети, базирующейся на компьютерной технологии и средствах телекоммуникации. Сеть должна обеспечить технические возможности свободного интерактивного доступа как к внешним, так и факультетским информационным источникам...» Проект задумывался с целью образования общероссийской сети химической информации, назначение которой – интеграция информационных ресурсов в области химии и создание условий для их эффективного использования не только в столичных, но и в региональных научных и образовательных центрах.

Мировая информационная инфраструктура состоит из двух главных компонентов. Одним из них является среда передачи информации в виде глобальной сети Internet. Другой представляет собой сеть компьютеров, на которых в форме баз данных размещаются информационные ресурсы. Следовательно, чтобы обеспечить связь сотрудников факультета с удаленными источниками информации, надо было создать локальную компьютерную сеть с выходом в Internet.

На химическом факультете первые компьютеры были подключены к сети Internet в начале 1994 г., а к середине

1996 г. сеть объединяла уже около 200 компьютеров разных учебных и научных лабораторий. Доступ к информации в сети был построен с использованием возможностей WWW-технологии.

#### *Библиотека баз данных Информационного центра факультета*

Организация сети – это лишь малая часть в деле создания информационной инфраструктуры. Гораздо большее значение имеют информационные ресурсы, передача которых эта сеть должна обеспечивать. Задачей второго этапа проекта было «... установить на сервере Информационного центра Химического факультета МГУ блок наиболее актуальных отечественных и зарубежных компьютерных баз данных по химии на CD-ROM и других машиночитаемых носителях, обеспечив к ним доступ через Internet». Другими словами, основные усилия были направлены на создание информационных ресурсов и организацию работы с ними.

Одной из повседневных обязанностей современного химика является работа с научной литературой. Для того чтобы сделать эту работу более эффективной, необходимо было в дополнение к уже имеющимся возможностям обеспечить доступ к компьютерным поисковым системам. С этой целью в читальном зале библиотеки факультета были установлены компьютеры, использование которых позволило читателям работать с базами данных удаленных отечественных и зарубежных информационных систем, а также с базами на CD-ROM. Речь идет, в первую очередь, о возможности обращения к библиографическим базам данных, создающимся в результате непрерывного сканирования общемирового потока научной литературы. При отсутствии доступа к таким базам возрастает опасность того, что важное сообщение не будет вовремя замечено (такая ситуация наиболее вероятна в период информационного бума, связанного с крупным открытием, подобного тому, какой наблюдался в 1986 г. сразу после обнаружения высокотемпературной сверхпроводимости) [3].

Наиболее авторитетным реферативно-библиографическим изданием в области химии, бесспорно, является журнал «Chemical Abstracts», издаваемый Американским химическим обществом с 1907 г. В 70-х годах стала создаваться компьютерная версия «Chemical Abstracts», включающая практически все сведения о публикациях в области химии и химической технологии, начиная с 1967 г. Поиск информации возможен по фамилии автора, названиям журналов и книг, названиям химических соединений, структурным формулам химических соединений, ключевым словам и др. В результате поиска выдается подробная библиографическая информация, включая реферат публикации. В базе содержатся сведения о статьях из более чем 8000 журналов и других источников. В настоящее время в «Chemical Abstracts» зарегистрировано более 18 миллионов химических соединений. Юбилейное 18-миллионное соединение было зарегистрировано 15

июня 1998 г. (<http://www.cas.org>). На Химическом факультете работа с базой «Chemical Abstracts» в режиме удаленного доступа через Internet была налажена в 1994 г., причем МГУ, как и университетам всего мира, был предоставлен льготный режим оплаты информационных услуг. С 1996 г. для читателей библиотеки факультета доступна версия «Chemical Abstracts» на CD-ROM за 1996–1998 гг. Она установлена на компьютере Информационного центра и для работы с ней не требуется дополнительных финансовых затрат.

Другой исключительно полезной для химиков базой данных является «INSPEC», имеющаяся в библиотеке химического факультета. База создается в Англии Обществом инженеров-электриков и является полным аналогом реферативных журналов «Physics Abstracts» и «Computer and Control Abstracts». «INSPEC» является одной из уникальных международных баз, в которой концентрируется информация физико-математического профиля. В ней реферированы свыше 4200 журналов по физике, физической химии и др. Поиск в базе можно проводить по ключевым словам, указателю числовых данных, названию химических соединений, по имени автора и др. В результате поиска выдается документ с полным библиографическим описанием и большим рефератом. Информационный центр имеет полный комплект баз данных «INSPEC», выпущенных на CD-ROM за 1989–1998 гг.

Крупнейшим источником информации по-прежнему остается ВИНТИ [4]. Находясь в библиотеке можно через Internet пользоваться базами «Химия», «Физика», «Обзоры», «Металлургия» и др. База ВИНТИ «Химия» содержит свыше 3.5 млн. документов, а ее ежегодное пополнение составляет примерно 150 тыс. Поиск возможен по ключевым словам, названиям соединений, по именам авторов, названиям журналов, заголовкам публикаций. Результат поиска представляет собой библиографическое описание публикации на русском языке (в последние годы в документе присутствует реферат).

Понимание механизма химических процессов, синтез новых материалов, решение ключевых проблем современной химии невозможны без сведений о химических структурах. Поэтому следующей по значимости и востребованности является информация о структурах органических и неорганических соединений. Она представлена в двух базах на CD-ROM. Одной из них является «Inorganic Crystal Structure Database», выпускаемая Институтом неорганической химии Гмелина. В ней содержатся описания кристаллических структур неорганических веществ, сведения о которых были опубликованы с 1915 г. Из базы можно получить обширную информацию о структурах. Благодаря графическим программам, возможен просмотр структур в различных ракурсах. Вторая база – «Cambridge Structural Database System» (кристаллические структуры органических соединений) – содержит информацию о структурах более чем 160 тыс. органических соединений. Ее дополняет база по структурам белков «Brookhaven Protein Data Bank».

В коллекции баз на CD-ROM есть еще ряд специализированных изданий, в том числе «Stability Constants Database» (константы устойчивости комплексных соединений) и др.

#### *WWW-сервер «Chemnet»*

В настоящее время наиболее часто для работы в Internet используется технология WWW (World Wide Web). WWW-сервер «Chemnet» (<http://www.chem.msu.su/>) был установлен в сети на компьютере Информационного центра в конце 1994 г. На сервере собрана разнообразная информация по химии, как из российских, так и зарубежных источников.

Зарубежным информационным ресурсам посвящен специальный раздел. Из него можно узнать, на каком WWW-сервере в общемировой «паутине» находятся сведения о химических научных центрах и журналах, базах химической информации, международных конференциях, различных электронных изданиях и другие материалы. Каждая ссылка сопровождается небольшим комментарием на русском языке.

Информация на серверах зарубежных научных учреждений чаще всего носит презентационный и рекламный характер. Доступ к полноценной информации, как правило, является коммерческим и достаточно дорогим. Правда, есть ряд некоммерческих серверов, содержащих фундаментальную научную информацию, которой пока нет в российских общедоступных базах данных.

К примеру, на сервере Национального Института Стандартов и Технологий США (NIST) (<http://webbook.nist.gov>) размещена база данных «NIST Chemistry Webbook», в которую включены подвергнутые экспертной оценке данные для многих тысяч индивидуальных органических и неорганических соединений (термодинамические данные, инфракрасные спектры, масс-спектры, электронно-колебательные спектры и др.). Интересующие соединения можно найти по названию, химической формуле и ряду других числовых свойств.

Нельзя не обратить внимание на возможность доступа к информационной системе «Beilstein NetFire» (<http://www.beilstein.com/netfire/netfire.html>), которая создается Институтом Бейльштейна. Она содержит рефераты публикаций по химии из более чем ста научных журналов. В настоящее время доступны рефераты за 1980–1996 гг. Можно проводить гибкий поиск по именам авторов, словам из заголовка статьи и реферата.

Хорошим источником информации для биохимиков является база «Medline» (<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Entrez/medline.html>) Национальной медицинской библиотеки США.

В разделе, посвященном отечественным базам данных, приведены подробные описания каждой из них, даны примеры документов, сообщаются также сведения об авторах этих баз. Это большей частью специализированные базы по конкретным разделам химии (неорганические материалы, пестициды и др.). К ним, как правило, нет до-

ступа по сети, но это не снижает ценности собранной информации.

В этом же разделе находятся несколько установленных на сервере интерактивных баз данных, созданных на факультете. В их число входит постоянно обновляющийся каталог журналов библиотеки химического факультета МГУ. В нем приведены сведения о 255 иностранных и 180 отечественных журналах (указывается наличие экземпляров журналов по годам, по отдельным номерам и выпускам, а также начальная и конечная страницы номера).

#### *Электронная библиотека по химии*

Недавно был оформлен раздел сервера, где размещены полные тексты статей и книг. Началось последовательное формирование электронной библиотеки по химии. В ней представлены журналы «Вестник Московского университета, серия Химия», «Журнал Российского химического общества», избранные разделы общехимических журналов «Химия и Жизнь» и «Химия и Бизнес». Кроме того, в разделе публикуются курсы лекций и другая учебная литература.

#### *Основные итоги и перспективы*

Итак, при поддержке РФФИ в России положено начало формированию эффективной информационной инфраструктуры на принципиально новой технологической основе. Наши ученые получили возможность систематически работать с базами данных общемирового масштаба.

Слабым местом в этой структуре пока остаются российские информационные ресурсы. Большинство отечественных научных баз данных реально могут использоваться только самими авторами. Назрела необходимость перейти от разрозненного набора информации к созданию в российском секторе Internet согласованной системы ресурсов. В перспективе каждая из входящих в эту систему баз данных по своему уровню должна соответствовать определенным критериям качества как по содержанию, так и по набору сервисных показателей. При формировании российских информационных ресурсов по химии следует учитывать первоочередные потребности и реальные материальные возможности. Ряд академических институтов Москвы и Новосибирска вместе с Московским и Санкт-Петербургским университетами уже приступили к работе в этом направлении в рамках общего проекта РФФИ.

Важным информационным источником должны стать электронные справочные издания, содержащие фактографические данные о фундаментальных свойствах веществ (структура, термодинамические параметры и др.). В первую очередь, речь идет о создании электронных версий таких изданий, как, к примеру, «Термодинамические свойства веществ» в 10 томах под редакцией академика В.П. Глушко. Наличие поискового аппарата и набора программных средств для обработки данных позволят использовать их не только в научной работе, но и в учебных целях, значительно расширив при этом диапазон и

сложность учебных задач, перейдя от простых модельных ситуаций к уровню научного исследования.

На виртуальных «полках» академических и университетских библиотек наряду со справочниками обязательно должна присутствовать отечественная и зарубежная научная периодика. Только с помощью электронной библиотеки можно будет полностью обеспечить все научные и образовательные организации России этими информационными материалами. В России есть уже первые успехи. Так, по сети стали доступны электронные копии журналов «Физика твердого тела», «Физика полупроводников», научные редакции которых находятся в Физико-техническом институте им. А.Ф.Иоффе (<http://www.ioffe.rssi.ru/journals>).

Развитие науки, как уже отмечалось, идет стремительными темпами. К примеру, в ряде направлений биохимии сегодня информация годичной давности считается уже устаревшей. Важно не только вовремя получить информацию, но и сообщить научной общественности о результатах своих исследований. Эффективное ускорение срока публикаций можно обеспечить созданием в Internet отечественных электронных химических журналов или соответствующих приложений к печатным изданиям, как это, к примеру, делает в Германии издательство «Springer». Публикации в электронных изданиях должны соответствовать тем же требованиям и правилам, что и в печатных изданиях, как по содержанию, так и соблюдению авторских прав. Только в этом случае статьи в Internet станут обладать в глазах научной общественности равными правами с журнальными аналогами. В качестве удачного примера такой работы в России можно привести выпуск Алтайским университетом электронного журнала «Химия растительного сырья» (<http://www.dcn-asu.ru/journals>).

Перечисленные задачи являются лишь частью той большой работы, которую требуется и далее систематически проводить, чтобы создать эффективную информационную инфраструктуру, способную обеспечить потребности науки и образования в России.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Потапов В.М., Кочетова Э.К.* Химическая информация. Где и как искать химику нужные сведения. М., 1988.
2. *Потапов В.М., Розенман М.И., Кочетова Э.К., Покровский Б.И.* Поиск химической информации. Справочное руководство по использованию традиционных и компьютерных средств. М., 1990.
3. *Покровский Б.И.* // Журнал Всесоюзного химического общества им. Д.И. Менделеева. 1989. **34**. С. 551.
4. *Сюттюренко О.А., Леонтьева Т.А., Шогин А.А.* // Информационные ресурсы России. 1995. № 2. С. 21.