

# Реферат

магістерської атестаційної роботи

на тему:

“Семантичний Грід для молекулярних досліджень”

Османової Тетяни Мунірівни

## **Мета роботи**

Метою даною роботи є дослідження та аналіз існуючих моделей семантичного Грід для молекулярних досліджень.

## **Актуальність проведених досліджень**

Вчені багатьох дисциплін використовують молекулярні моделювання для отримання інформації про властивості молекул. Дослідження молекулярних структур є однією з головних задач сучасної науки. Їх характеристики і властивості широко застосовують у фізиці, хімії, медицині, біології, генетиці, палеонтології, інженерії та інших науках.

На даний час відомо більше ніж 30 мільйонів складних хімічних структур, що є важливими для медицини, біологічних наук та створення нових матеріалів. Надзвичайно важливим є розуміння властивостей цих структур. Для їх дослідження визначають поведінку молекул використовуючи відомі фізичні закони, часом ці характеристики можуть бути виміряні, проте у більшості випадків вони повинні бути розраховані. Більшість необхідних характеристик може бути розраховано використовуючи рівняння Шрьодінгера, але кількість обчислень при цьому надзвичайно велика. При цьому обчислення власне рівняння не є основною складністю, набагато складнішим є аналіз отриманих результатів: дані та коди – дуже неоднорідні без впорядкованої структури. Тому останнім часом науково - дослідні ініціативи широко застосовують Грід – обчислення для простоти та прискорення обчислення. Але все ж таки залишається проблема зберігання даних, оскільки кожна науково - дослідна лабораторія, результати

своїх обчислень зберігає локально, що стримує прогрес знаходження необхідної інформації у декілька разів.

Так як в хімічній спільноті основне джерело даних це індивідуальні наукові роботи в традиційних хімічних лабораторіях, доповнені сьогодні приходом автоматизованих високопродуктивних синтезованих та аналітичних технологій (особливо в промисловому секторі). Дані генеруються в лабораторіях і розповсюджуються по всьому світовому товаристві, кожна лабораторія сприяє значним відкриттям, що консолідовані через світову літературу. Необхідно створити систему яка б змогла зібрати світові винаходи в молекулярних дослідженнях, тим самим полегшити доступ до них та пошук. Таким інструментом і може стати розроблення семантичної Грід - інфраструктури.

### **Розв'язувані в роботі задачі**

У роботі представлені теоретичні відомості про існуючі моделі семантичного Грід для молекулярних досліджень, розглянуті різні типи онтологій за допомогою яких описуються метадані хімічних структур в цих моделях, розглянуті способи виявлення ресурсів в семантичному Грід, а саме процесу пошуку ресурсів, що задовольняють запитам користувачів.

Проведено аналіз існуючих систем семантично Грід для молекулярних досліджень, враховуючи призначення кожної та перелік завдань, які вони виконують з урахуванням сучасних вимог семантичного Грід. Ці вимоги включають в себе сумісність, масштабованість, децентралізацію і динамізм.

### **Досягнуті результати**

Результатом проведених досліджень є визначення вимог до семантичного Грід в області обчислювальної хімії, з урахуванням потреб молекулярних досліджень в Україні та відповідності її світовим стандартам та вже існуючим моделям, таким як: Molecular GRID (World Wide Molecular Matrix (WWMM)), проект CombeChem та проект Collaboratory for Multi-scale Chemical Science (CMCS).

## **Наукова новизна**

Наукова новизна даної роботи полягає в аналізі та викладенні основних вимог, щодо застосування семантичного Грід для молекулярних досліджень. Зараз у світі дуже широко застосовується та розвивається технологія семантичного Грід у багатьох областях наук, але на жаль не має такого стрімкого застосування в області молекулярних наук. Тому дана робота може слугувати початковою точкою у дослідженні розробки семантичного Грід для молекулярних досліджень в Україні.

## **Практична цінність**

Практична цінність роботи полягає в одержанні систематизованої, теоретичної, інформаційної бази для побудови інфраструктури семантичного Грід для роботи в молекулярних дослідженнях. Результати роботи можуть бути використані як рекомендації та пропозиції до побудови української Грід- інфраструктури в молекулярних науках, а також як посібник щодо використання існуючих.

## **Висновки та рекомендації**

В даній роботі були розглянуті основні вимоги, що ставляться при побудові інфраструктури семантичного Грід. Оцінений стан молекулярних наук у світі та показано проблеми які виникають під час молекулярних досліджень, тим самим показано доцільність та актуальність використання даної інфраструктури в молекулярних науках.

В роботі наведений детальний опис моделей представлення семантичного Грід у світі, а саме: Molecular GRID (World Wide Molecular Matrix (WWMM)), проект CombeChem та проект Collaboratory for Multi-scale Chemical Science (CMCS).

На основі детального аналізу цих систем виявлені певні недоліки, а саме, всі системи націлені на те, щоб вирішувати питання пошуку та зберігання даних, в жодній з них не реалізований агентний підхід пошуку. З точки зору сумісності, дані моделі охоплюють дуже вузьку прикладну

область, таку як опис молекул, але в проєкті CombeChem через застосування дуже детальної онтології є можливість розширити цю область.

Дана робота не може вважатися цільною для розробки та застосування семантичного Грід в молекулярних дослідженнях, оскільки кожна окрема група вчених займається певним колом досліджень і проаналізовані моделі є лише прикладом застосування технології семантичного Грід для певного кола задач та проблем, що виникають під час молекулярних досліджень.

Також в роботі проведений аналіз наукових досліджень в Україні та виявлено, що велика чисельність наукових інститутів використовує молекулярні дослідження. Саме тому в роботі запропоновані шляхи використання семантичного Грід в національній Грід – інфраструктурі. Є два шляхи для цього: створити свою власну модель або використовувати вже існуючу, щодо кожного варіанту наведенні певні рекомендації.

*Робота на 112 аркушах містить 22 ілюстрації. При підготовці роботи використовувалася література з 27 різних джерел.*

Перелік ключових слів:

*семантичний Грід, семантичний Веб, онтологія, молекулярна динаміка, метадані, CML, XML- схема, Protein Data Bank, World Wide Molecular Matrix (WWMM), CombeChem, Collaboratory for Multi-scale Chemical Science (CMCS), Dublin Core, InChI, молекулярні структури, фолдинг білків.*