

УДК 541.515+541.571+004.0

**ОТ ПРОБЛЕМНО-ОРИЕНТИРОВАННЫХ БАЗ ДАННЫХ К ИЗВЛЕЧЕНИЮ
НОВЫХ ЗНАНИЙ В ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКЕ И ТЕРМОХИМИИ
РАДИКАЛЬНЫХ ЖИДКОФАЗНЫХ РЕАКЦИЙ
(ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР)****Туманов В.Е.***Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка, e-mail: tve@icp.ac.ru*

Проведен анализ литературных и электронных источников по использованию информационных технологий накопления, обработки, извлечения и интеллектуального анализа предметно-ориентированных профессиональных знаний в области химической кинетики и термохимии в Интернет. Обзор содержит сведения об основных источниках экспериментальных данных по константам скоростей радикальных реакций, об основных источниках экспериментальных данных по термохимии органических веществ (энергиях диссоциации связей многоатомных молекул, энтальпиях образования молекул и радикалов), об электронных информационных ресурсах по химической кинетике и термохимии (аспект свободного доступа в Интернет), о подходах к анализу экспериментальных кинетических и термохимических данных, основанных на методах прикладного искусственного интеллекта.

Ключевые слова: радикальные реакции, константа скорости, энергия активации, энергия диссоциации связи, энтальпия образования соединения, энтальпия образования свободного радикала, база данных, хранилища данных, информационно-аналитические системы, системы научной аналитики, экспертные системы, искусственные нейронные сети, нечеткая логика

**FROM PROBLEM-ORIENTED DATABASES TO EXTRACTION OF NEW
KNOWLEDGE IN CHEMICAL KINETICS AND THERMOCHEMISTRY OF
RADICAL LIQUID-PHASE REACTIONS (THE BIBLIOGRAPHY REVIEW)****Tumanov V.E.***Institute of problems of chemical physics RAS, Chernogolovka, e-mail: tve@icp.ac.ru*

The analysis of literary and electronic sources on use of information technologies of accumulation, processing, extraction and the intellectual analysis of subject-oriented professional knowledge in the field of chemical kinetics and thermochemistry is carried out to the Internet. The review contains data on the main sources of experimental data on constants of speeds of radical reactions, about the main sources of experimental data on thermochemistry of organic substances (the energy of dissociation of communications of polyatomic molecules, enthalpies of formation of molecules and radicals), about electronic information resources on chemical kinetics and thermochemistry (aspect of a free access in the Internet), about approaches to the analysis of the experimental kinetic and thermochemical data based on methods of applied artificial intelligence.

Keywords: radical chemical reaction, rate constant, activation energy, bond dissociation energy, enthalpy of molecule formation, enthalpy of radical formation, data base, data warehouse, information system, data science system, expert system, artificial neural network, fuzzy logic

Развитие информационных технологий привело в конце 20-го века к превращению накопленных на бумажных носителях научных данных в оцифрованный вид и созданию электронных коллекций научных данных в виде баз и хранилищ данных. Представление научных данных в оцифрованном виде поставило задачи автоматизированной обработки и анализа фундаментальных знаний, накопленных в различных исследовательских организациях. Решение этих задач привело к потребности в развитии информационных технологий накопления, обработки, извлечения и интеллектуального анализа предметно-ориентированных профессиональных знаний на основе разработки универсальных 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 не стало исключением.

Целью настоящего обзора является анализ литературных и электронных источников по использованию информационных технологий накопления, обработки, извлечения и интеллектуального анализа предметно-ориентированных профессиональных знаний в области химической кинетики и термохимии в Интернет (константа скорости радикальной реакции, энергии активации, классический потенциальный барьер,

энергия диссоциации связи, энтальпия образования свободного радикала, энтальпия образования органической молекулы).

Настоящий обзор содержит сведения об основных источниках экспериментальных данных по константам скоростей радикальных реакций в жидкой и газовой фазах, об основных источниках экспериментальных данных по термохимии органических веществ, об электронных информационных ресурсах по химической кинетике и термохимии (аспект свободного доступа в Интернет), о подходах к анализу экспериментальных кинетических и термохимических данных, основанных на методах прикладного искусственного интеллекта.

1. Основные библиографические источники по кинетическим и термохимическим данным

Важная работа по сбору, систематизации и публикации кинетических данных была начата в 90-х годах прошлого века. Константы скорости радикальных реакций представлены в справочниках В.Н. Кондратьева [31], Е.Т. Денисова [13], В.И. Веденеева и А.А. Кибкало [10], В.А. Пальма [48] и Landolt-Bornstein [124], Р. J. Robinson и К. А. Holbrook [46].

Константы скорости химических реакций широко представлены в монографиях Е. Т. Денисова [14-16], Е.Т. Денисова и В.В. Азатяна [17, 98], Е.Т. Денисова, О.М. Саркисова, Г.И. Лихтенштейна [18], в справочниках Е.Т. Денисова и Т. Г. Денисовой [99], Е.Т. Денисова, Т.Г. Денисовой, Т.С. Покидовой [100].

Энергия диссоциации индивидуальной связи в молекуле и энтальпия образования радикала – важнейшие энергетические характеристики этих частиц, которые широко используются в науке и технике. Ежегодно публикуются десятки работ с результатами измерения этих величин. Первый обзор со сводкой данных по энергиям диссоциации связей в молекулах появился более семидесяти лет тому назад [139]. В Советском Союзе важная работа по сбору, систематизации и публикации этих данных была начата по инициативе академика В.Н. Кондратьева [9, 11]. Важным научным событием стало издание многотомного справочника по термодинамическим свойствам молекул и атомов [50-56] под реакцией академика В.П. Глушко.

Подробная сводка данных по энергиям диссоциации связей в многоатомных молекулах представлена в монографии Е.Т. Денисова и Л.Б. Афанасьева [101], в работе Е.Т. Денисова и Т.Г. Денисовой [102], в справочниках Е.Т. Денисова и Т.Г. Дени-

совой [99], Е.Т. Денисова, Т.Г. Денисовой, Т.С. Покидовой [100], Y.-R. Luo [126, 127].

До последнего времени при определении энтальпий образования используются эмпирические подходы, из которых наиболее широкое распространение получили аддитивные методы, основанные на классической теории строения молекул [5]. Энтальпии образования молекул и радикалов органических соединений представлены в справочниках Pedley J.B. с соавт. [133], Ю.Д. Орлова с соавт. [43], В.В. Тахистова [49] и в обзорах E.S. Domalski с соавт. [103] и N. Cohen [87], справочнике [97], таблицах JANAF [89].

Таким образом, собранные и систематизированные в перечисленных выше работах экспериментальные данные о константах скорости химических реакций в жидкой и газовой фазах, об экспериментальных значениях энергий диссоциации связей органических молекул, об экспериментальных значениях энтальпий образования молекул и радикалов стали основой для создания предметно-ориентированных электронных коллекций данных в области химической кинетики и термохимии в виде банков данных, баз и хранилищ данных.

2. Проблемно-ориентированные базы данных в химической кинетике и термохимии в Интернет

Разработка и создание научных баз данных является одним из направлений применения информационных технологий для компьютерной поддержки научных исследований. Научными базами данных [29] называют такие базы данных, которые содержат информацию о какой-либо предметной области науки, т.е. информацию, используемую или получаемую в процессе научных исследований, научных экспериментов или компьютерного моделирования. В кратком обзоре невозможно охватить весь комплекс научных баз данных. Так, согласно каталогу [135] уже в середине 80-х годов прошлого века насчитывалось около 7500 научных баз данных, в том числе более половины касалось химии и науки о материалах. Поэтому мы остановимся на основных научных базах данных в области химической кинетики и термохимии, открытых для свободного доступа в Интернет.

Далее внимание будет сконцентрировано на базах данных, содержащих сведения о константах скорости радикальных химических реакций, об энергиях активации, об энергиях диссоциации связей органических соединений, об энтальпиях образования ор-

ганических молекул и энтальпиях образования свободных радикалов.

2.1. Проблемно-ориентированные базы данных для химической кинетики в Интернет

Интенсивное развитие информационных технологий и широкое распространение Интернет поставило перед создателями кинетических и термохимических баз данных новую задачу – публикацию кинетических и термохимических данных во всемирной компьютерной сети и предоставление к ним открытого доступа в режиме он-лайн.

Лидером в реализации таких проектов стал NIST (США). Впервые на информационном портале этой организации была опубликована База по химической газофазной кинетике (NIST Chemical Kinetics Database) [128], которая содержит константы скорости более 38000 химических реакций для 17000 различных пар реагентов более чем из 2000 литературных источников.

Еще одним, реализованном в NIST проектом, была публикация на своем информационном портале базы данных по радикальной химической кинетике углерод-центрированных радикалов и пероксильных радикалов, атома кислорода в водных и иных растворах (NDRL-NIST Solution Kinetics Database) [129]. База данных содержит 23675 записей, 29141 константу скорости в 156 растворителях, данные о 11500 химических соединениях.

В России в результате исследований ученых в Новосибирске под руководством академика Молина Ю.Н. была разработана база данных по кинетической информации о газофазных реакциях [1], содержание которой было продублировано позднее в базе данных [128].

В Институте механики МГУ им. М.В. Ломоносова в результате проведенных исследований [6, 28, 30, 47] под руководством академика Лосева С.А. была создана информационная система физико-химической газодинамики АВОГАДРО [40, 41], содержащая данные в области газофазной химической кинетики при высоких температурах.

В ИПХФ РАН в результате исследований под руководством проф. Денисова Е.Т. [19-21, 58] была создана база данных по константам скорости жидкофазных радикальных реакций [59]. База данных содержит более 32000 констант скоростей жидкофазных радикальных реакций для 5000 органических соединений и 2500 свободных радикалов и атомов.

В Тарту (Эстония) под руководством проф. Пальма В.А. была создана база данных и информационная система по расчету констант скорости и констант равновесия органических реакций [132]. О доступе

в режиме реального времени к этой базе автору не известно.

Базы данных свободного доступа в Интернет [41, 59, 128, 129] являются электронными информационными ресурсами по радикальной химической кинетике в газовой и жидкой фазе. Таким образом, в настоящее время в свободном доступе в Интернет реализованы электронные справочные ресурсы в области радикальной химической кинетики, в рамках которых можно проводить ограниченную статистическую обработку данных.

2.2. Проблемно-ориентированные базы данных для термохимии в Интернет

В настоящее время насчитывается около 1000 источников данных о термодинамических свойствах веществ, в том числе и электронных. Краткий обзор банков данных и информационных систем по теплофизическим свойствам веществ приведен в [8, 57, 140]. Следует отметить, что существует достаточного много электронных ресурсов, как платных, так и бесплатных, по термохимии и химической кинетике. Их описание можно найти в Интернет – каталогах [117] и справочниках [135, 138]. Поэтому мы остановимся на тех из них, которые содержат данные об энтальпиях образования органических веществ, об энтальпиях свободных радикалов, об энергиях диссоциации связей и в рамках которых ведутся работы по созданию инструментов интеллектуального анализа данных.

Одним из значительных проектов, реализованных NIST, была публикация на своем информационном портале политематической базы данных по химии NIST Chemistry WebBook [131]. Эта база данных содержит термохимические данные более чем о 7000 органических и неорганических молекул (энтальпии образования молекул и радикалов, энтропии, теплоемкости и т.д.), термохимические данные о 8000 реакций (энтальпии реакций, свободные энергии, IR спектры для более чем 16000 соединений, масс спектры для более чем 15000 соединений, UV/Vis спектры для более чем 1600 соединений, данные по газовой хроматографии для более чем 27000 соединений и т.д. Этот ресурс был создан в результате исследований [93-96, 106, 130] на основе настольной базы данных [125].

NIST также разработал базу данных по термохимическим свойствам органических и неорганических веществ с одним или двумя атомами углерода (JANAF) [88, 89], которая содержит данные о теплоемкости, теплофизических, термодинамических, химических свойствах веществ, а также энергию Гиббса, энтальпии, энтропии веществ.

База данных TermInfo [140, 141] содержит газофазные стандартные энтальпии образования, предсказывает энтальпии соединений модифицированным методом Лайдлера (Laidler). Поиск по молекулярной структуре или по наименованию соединения.

В ТЕРМОЦЕНТРе им. В.П. Глушко РАН разработана база данных по термодинамическим свойствам индивидуальных веществ в стандартном состоянии ИВТАНТЕРМО [12, 26, 85, 115, 119], охватывающая в настоящее время более 3000 веществ. В их числе представлены основные классы химических соединений практически всех элементов Периодической системы Д.И. Менделеева. Для каждого из неорганических или органических веществ в конденсированной и газовой фазах рекомендованы основные термодинамические характеристики с оценкой их погрешности вплоть до температуры $T = 20000$ К. Все численные данные взаимно согласованы в рамках законов термодинамики.

Принципиальной особенностью ИВТАНТЕРМО является то, что накапливаемые в системе данные не заимствованы из различных справочников или из других банков данных, а вычислены авторами в результате критического анализа и обработки всех первичных данных, имеющихся в литературе, с помощью методов, разработанных в Отделе химической термодинамики указанного выше Центра.

В результате проведенных исследований под руководством проф. В.С. Иориша и проф. В.С. Юнгмана [4, 27] стала публикация на портале МГУ им. М.В. Ломоносова базы данных «Термические константы веществ» [2], которая содержит энтальпии образования, изобарные потенциалы образования, энергии диссоциации молекул, энтропии и теплоемкости, параметры фазовых переходов.

В ИПХФ РАН в результате проведенных исследований под руководством проф. Денисова Е.Т. [60-62] была разработана база данных по энергиям диссоциации связей органических соединений [63] и база данных по энтальпиям образования свободных радикалов [64]. База данных содержит сведения об энергиях диссоциации связей для 1000 многоатомных органических молекул и около 1000 значений энтальпий образования свободных радикалов. Обе базы доступны в Интернет.

Следует отметить цикл работ, проводимым под руководством проф. Орлова Ю.Д. в Тверском государственном университете по созданию базы данных по энтальпиям органических свободных радикалов [45]. Однако эта база пока не доступна в Интернет.

Таким образом, в результате исследований было разработаны Интернет-ресурсы по термохимии органических соединений, которые позволяют ставить и решать задачи интеллектуального анализа кинетических и термохимических данных, а также предсказывать физико-химические свойства органических соединений.

3. Задача извлечения новых знаний из проблемно-ориентированных баз данных по химической кинетике и термохимии

Химическое сообщество внимательно следит за развитием методов искусственного интеллекта и применяет их в своих исследованиях [86, 90-92], в частности, использования прикладных методов искусственного интеллекта для извлечения и производства новых знаний о кинетических термохимических данных из электронных коллекций.

Создание электронных банков и баз кинетических и термохимических данных открыло перед исследователями новые возможности для системного анализа экспериментальных и полученных в результате математического моделирования данных (data discovery и data mining from database¹) с целью получения новых данных о константах скорости радикальных реакций и термохимических характеристик молекул.

Создатели кинетических и термохимических баз данных изначально разрабатывали компьютерные системы для получения новых знаний – ранее неизвестных энергий активации реакций, энтальпий образования или прочностей связи молекул. Использование математического моделирования [47] или элементов искусственного интеллекта (разработка моделей знаний [111], математическая дедукция [112], экспертные системы [44, 122], искусственные нейронные сети [118, 145]), применение методов нечеткого моделирования [145] закладывалось в дальнейшее развитие создаваемых банков и баз данных. Развитие такого подхода и составило суть процесса интеллектуального анализа данных в приложении к органическому синтезу, химической кинетике и термохимии [113, 144, 24].

Таким образом, задача извлечения новых знаний из электронных ресурсов по химической кинетике и термохимии потребовала разработки или использования новых информационных моделей для представления, сохранения, выборки и производства новых знаний на основе интеллектуального анализа данных.

¹Что соответствует русскоязычному термину интеллектуальный анализ данных.

4. Интеграция проблемно-ориентированных баз данных по химической кинетике и термохимии на основе технологии хранилищ и киосков данных

Одним из подходов к представлению знаний предметных областей в электронных ресурсах предназначенных для анализа данных является использование технологии хранилищ данных [142]. Применение технологии хранилищ данных для организации научных баз данных обсуждалось в [66, 136, 137].

Исследования по использованию технологии хранилищ данных в физической химии радикальных реакций были выполнены в рамках развития банка констант скорости радикальных жидкофазных реакций и базы данных по энергии диссоциации связей органических соединений в ИПХФ РАН были начаты в 2001 году. Применение технологии хранилищ данных к представлению данных в электронных коллекциях данных жидкофазной радикальной кинетике и термохимии было предложено в [66, 81, 143]. Многомерные модели были предложены в [67], а их интеграция в аспекте анализа и производства новых знаний в [7, 68].

В отчете NIST 2004 года [83] Allison T.C. упоминает о возможности использования технологии хранилищ данных для базы данных [128]. В 2004 году с участием сотрудников NIST технология хранилищ данных была использована в реализации проекта NIST-PrIME Warehouse [107], там же был поставлен вопрос об интеграции кинетических и термохимических данных в рамках хранилища данных для моделирования процессов горения.

В Институте химии, Будапешт, Венгрия, был выполнен цикл работ по интеграции кинетических, термодинамических и спектрографических данных в одной информационной системе ReSpecTh [150]. Была ли использована технология хранилищ данных автору не известно.

В ИПХФ РАН при создании информационного портала по термохимии органических соединений [143] была использована технология хранилищ данных.

Таким образом, были созданы предпосылки для разработки концепции проблемно-ориентированных систем научной аналитики на основе технологии хранилищ данных в области химической кинетики и термохимии радикальных жидкофазных реакций.

5. Проблемно-ориентированные системы научной аналитики в химической кинетике и термохимии

Концепция системы научной аналитики (в оригинале Science Intelligence System,

SI System) была предложена R. Hackathorn [116], как «информационной инфраструктуры, которая обеспечивает принятие решений и совместную работу научного сообщества в рамках выделенной предметной области знаний». Там же был дан обзор существующих на тот момент систем и приведена их обобщенная программно-технологическая архитектура. Отметим, что реализация всех требований к таким системам в полном масштабе возможна лишь в крупномасштабных, хорошо финансируемых научных проектах.

В докладе [104] был поставлен вопрос об управлении знаниями на основе технологии хранилищ данных в Интернет-системах по физико-химическим данным и использовании методов интеллектуального анализа данных. Там же была предложена программно-технологическая архитектура прототипа проблемно-ориентированных систем научной аналитики.

В Институте катализа СО РАН был выполнен комплекс исследований по разработке и использованию интеллектуальных информационных систем и технологий генерации и анализа знаний для поддержки фундаментальных и прикладных научных исследований в области катализа и химической технологии [42].

Предложенный в [116] подход был адаптирован в [65, 68, 70] к узкоспециализированной предметной области – жидкофазной радикальной кинетике и термохимии, как разработка предметно-ориентированных систем научной аналитики. Под такой системой понималась информационная инфраструктура, которая обеспечивает интеллектуальный анализ данных, принятие решений, производство новых знаний и совместную работу научного сообщества в рамках выделенной узкоспециализированной профессиональной области.

В результате исследований была предложена многоагентная архитектура таких систем и в ИПХФ РАН была создана предметно-ориентированная система научной осведомленности по физической химии радикальных реакций [70, 149].

В Институте механики МГУ им. М.В. Ломоносова также ведутся работы по созданию информационно-аналитических систем в металлургии [25].

Аналогичная по своей архитектуре и целям в Московском государственном институте электроники и математики (техническом университете) была создана интегрированная информационно-аналитическая система для прогнозирования свойств неорганических соединений [120].

Таким образом, в результате проведенных исследований несколькими группами ученых была показана принципиальная возможность создания предметно-ориентированных систем научной аналитики в рамках научной организации.

6. Извлечение новых знаний в проблемно-ориентированных системах научной аналитики Интернет для химической кинетики и термодинамики

Вопросы применения технологии интеллектуального анализа данных в OnLine-ресурсах по физической химии радикальных реакций были рассмотрены в докладе [80].

6.1. Эмпирические модели радикальных реакций

Как показали исследования [22], с большей степенью вероятности зависимость классического потенциального барьера радикальной реакции E от стандартной энтальпии реакции ΔH является нелинейной.

В начале 90-х годов прошлого века Е.Т. Денисов предложил полуэмпирическую модель переходного состояния радикальной реакции [22] и построил корреляционное соотношение между корнем квадратным из классического потенциального барьера радикальной реакции и ее энтальпией. Модель пересекающихся кривых Морзе для переходного состояния реакции радикального отрыва предложена Е.Т. Денисовым и автором в работе [23].

В рамках предложенных эмпирических моделей радикальных реакций [22] можно вычислять энергии диссоциации связей органических молекул энтальпии образования свободных радикалов, классический потенциальный барьер радикальной реакции по экспериментальным кинетическим и термодинамическим данным.

Одним из направлений построения эмпирических моделей радикальных реакций для предсказания энергии диссоциации связей молекул и энергии активации реакций является использование методов кластерного анализа [74], которые позволяют разбить реакцию из базы данных на группы и при определенных предположениях, зная параметры центров кластеров, делать такой прогноз.

Таким образом, построенные нелинейные эмпирические корреляционные соотношения позволяют оценивать энергию диссоциации связи, классический потенциальный барьер и энтальпию образования свободного радикала по экспериментальным кинетическим и термодинамическим данным.

6.2. Экспертные системы

Обзор исследований по разработке экспертных систем в химии приведен в монографии [109].

Разработкой экспертных систем по определению термодинамических свойств органических соединений активно занимаются несколько групп исследователей: в Тверском Государственном университете, под руководством Ю.Д. Орлова [44], в ИПХФ РАН, под руководством автора [32, 37, 75-79]. Работа [44] основывается на использовании основных термодинамических характеристик молекулы (энтальпиях образования молекул и радикалов). Работа [78] основана на использовании нелинейных корреляционных отношений между энтальпией и энергией активации радикальной реакции и технологии продукционных баз знаний. При разработке экспертных систем в Интернет нами были использованы многоагентные технологии [36, 38].

Вопросам использования экспертных систем для предсказания реакционной способности молекул в радикальных реакциях посвящено незначительное число публикаций. Среди этих публикаций отметим работы, выполняемые под руководством проф. J. Gasteiger в рамках проекта разработки экспертной системы EROS [111, 112]. Следует отметить, что эта экспертная система более ориентирована на поддержку органического синтеза, чем на предсказание реакционной способности органических молекул в радикальных реакциях. Используемый нами подход к формированию базы знаний экспертной системы по предсказанию реакционной способности опирается на статистическую обработку экспериментальных кинетических данных, что отчасти характерно и для экспертной системы EROS [112].

Реакционную способность молекул можно оценить в экспертной системе SPARC [116], которая доступна в сети Интернет [117]. Это сложная многофункциональная компьютерная программа, разработанная в технологии облачных вычислений [118]. При вычислении констант скорости реакций, констант равновесия и энтальпий образования молекул эта программа использует методы квантовой химии.

Таким образом, технология экспертных систем была применена к предсказанию энергий диссоциации связей молекул, классического потенциального барьера, энтальпий образования свободных радикалов.

6.3. Искусственные нейронные сети

В настоящее время математический аппарат искусственных нейронных сетей (ИНС) широко используется при решении прикладных задач автоматической обработки научных данных в междисциплинарных исследованиях в химии [3, 110, 114, 152]. Одной из таких актуальных прикладных

задач является предсказание реакционной способности молекул в химических реакциях (энергии активации и констант скорости), энергии диссоциации связи энтальпии образования молекул.

Предсказанием реакционной способности органических молекул в радикальных реакциях занимается ряд научных коллективов, как в России, так и за рубежом. Можно отметить следующие подходы. Использование регрессионных ИНС, квантовых химических дескрипторов, теории функционалов плотности в рамках подхода поиска зависимостей «структура-свойство» [151]. Использование ИНС прямого распространения, химических дескрипторов, экспериментальных данных в рамках подхода поиска зависимостей «структура-свойство» [105]. Использование ИНС прямого распространения, экспериментальных данных, описываемых кинетическими дифференциальными уравнениями [39, 82, 121]. Использование ИНС прямого распространения, экспериментальных данных без привлечения кинетической схемы [84]. Использование ИНС прямого распространения, экспериментальных термохимических и кинетических данных [146].

Исследованию применения ИНС, обученных на экспериментальных выборках из баз данных [149], для оценки констант скорости и энергии активации радикальных процессов посвящен цикл работ автора [69, 134, 145-146].

Использованию технологии ИНС для предсказания энергий диссоциации связей посвящен цикл работ [33, 34, 108] (по экспериментальным данным из баз данных [149]) и [105] (с использованием набора химических дескрипторов).

Определению энтальпий образования молекул для алканов и разветвленных алканов была посвящена работа [118, 153].

Таким образом, была показана возможность использования технологии ИНС для предсказания энергий диссоциации связей молекул, классического потенциального барьера, энтальпий образования молекул.

6.4. Нечеткие базы знаний

Вопросам применения методов нечеткой логики и нечетких баз знаний в химии последнее время уделяется значительное внимание [108]. Однако, работ по использованию нечеткой логики в химической кинетике и термохимии в настоящее время немного [см. обзор в 145].

Отметим несколько работ по определению энергии диссоциации связей с использованием нечеткой базы знаний и нечетких нейронных сетей [35, 123] на выборках полученных из баз данных [70].

Применение нечетких баз знаний для определения энергии активации (классического потенциального барьера) радикальных реакций отрыва было выполнено в [71-73, 145] на выборках полученных из баз данных [70].

Таким образом, можно сделать вывод о том, что использование нечеткой логики для предсказания энергий диссоциации связей молекул, классического потенциального барьера находится на начальной стадии проведения исследований.

Заключение

Литературный обзор показывает, исследователи и разработчики электронных ресурсов по химической кинетике и термохимии последовательно от баз данных через технологии хранилищ данных идут по пути создания интеллектуальных проблемно-ориентированных систем в Интернет, основанных на знаниях, создавая основу для математического моделирования и интеллектуального анализа данных в этих системах в режиме реального времени. Это направление исследований сохраняет свою актуальность, в том числе с развитием методов прикладного искусственного интеллекта и вычислительной химии.

В данном обзоре мы не рассматривали исследования, связанные с внедрением и использованием онтологий предметных областей, что также является актуальным направлением научных исследований.

В ИПХФ РАН впервые на основе технологии хранилищ данных были созданы база данных по жидкофазной радикальной кинетике, база данных по энергиям диссоциации связей многоатомных молекул, выполнена их интеграция в информационный портал. В данный портал были встроены экспертные системы для оценки физико-химических свойств радикальных реакций и реагентов.

В 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 из разработанных баз данных.

Таким образом, в ИПХФ РАН созданы предпосылки для разработки создания интеллектуальной проблемно-ориентированной системы научной аналитики в области жидкофазной радикальной кинетике и термохимии, основанной на использовании онтологических моделей предметных областей.

Список литературы

1. Бабкин В.С., Бабушок Б.И., Дробышев Ю.П., Молин Ю.Н., Новиков Е.А., Скубневская Г.И. Автоматизированный банка кинетической информации (общее описание). – Новосибирск, 1987: Препринт СО АН СССР. – ВЦ: № 704. – 28 с.
2. База данных «Термические константы веществ» [Электронный ресурс] / Иориш В.С., Юнгман В.С. – Режим доступа: <http://www.chem.msu.ru/cgi-bin/tkv.pl?show=welcome.html/welcome.html> (дата обращения 12.05.2015).
3. Баскин И.И., Палюнин В.А., Зефилов Н.С. Применение искусственных нейронных сетей в химических и биохимических исследованиях // Вестник Московского университета. Серия «Химия». – 1999. – Т. 40, № 5. – С. 323-326.
4. Белов Г.В., Бергман Г.А., Иориш В.С., Левашов П.Р., Покровский Б.И., Табунов М.М., Юнгман В.С. Опыт создания электронной коллекции термических констант веществ. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://rcdl.ru/doc/2001/belov.pdf> (дата обращения 12.05.2015).
5. Бенсон С. Термохимическая кинетика. – М.: Мир, 1971. – 308 с.
6. Варакин В.П., Громов В.Г., Лосев С.А., Попов Ю.П., Черный Г.Г. Научно-исследовательская информационная система автоматизированного обеспечения физико-химической газодинамики «АВОГАДРО». Описание проекта. – М.: Институт механики МГУ. ИПН АН СССР, 1985. – 48 с.
7. Варламов Д.А., Лазарев Д.Ю., Туманов В.Е. Производство знаний в предметно-ориентированной системе научной осведомленности по физической химии радикальных реакций. // Научный сервис в сети Интернет: решение больших задач: Труды Всероссийской научной конференции (22-27 сентября 2008 г., г. Новороссийск). – М.: Изд-во МГУ, 2008. – С. 378-281.
8. Вассерман А.А., Мальчевский В.П. Банки данных и автоматизированные информационные системы по теплофизическим свойствам газов и жидкостей // Технические газы. – 2009. – № 5. – С. 59-66.
9. Веденеев В. И., Гурвич Л. В., Кондратьев В. Н., Медведев В. А., Франкевич Е. Л. Энергии разрыва химических связей. Потенциалы ионизации и сродство к электрону. – М.: Издательство АН СССР, 1962. – 214 с.
10. Веденеев В.И., Кибкало А.А. Константы скорости газозных мономолекулярных реакций. – М.: Наука, 1972. – 164 с.
11. Гурвич Л.В. Энергии разрыва химических связей. Потенциалы ионизации и сродство к электрону / Л.В. Гурвич, Г.В. Караченцев, В.Н. Кондратьев, Ю.А. Лебедев, В.А. Медведев, В. К. Потапов, Ю.С. Ходеев. – М.: Наука, 1974. – 351 с.
12. Гурвич Л.В. Банк данных ИВТАНТЕРМО // Вестник АН СССР. – 1983. № 3. – С. 54-58.
13. Денисов Е.Т. Константы скорости гомолитических жидкофазных реакций. – М.: Наука, 1971. – 711 с.
14. Денисов Е.Т. Реакции радикалов ингибиторов и механизм ингибированного окисления углеводородов. – М.: ВИНТИ, 1987. – С. 1-115.
15. Денисов Е.Т. Кинетика гомогенных химических реакций. – М.: Высшая школа, 1988. – 391 с.
16. Денисов Е.Т. Окисление и деструкция карбоцепных полимеров. – Л.: Химия, 1990. – 289 с.
17. Денисов Е.Т., Азатян В.В. Ингибирование цепных реакций. – Черногловка. ИХФЧ РАН, 1996. – 268 с.
18. Денисов Е.Т., Саркисов О.М., Лихтенштейн Г.И. Химическая кинетика. – М.: Химия, 1999. – 566 с.
19. Денисов Е.Т., Денисова Т.Г., Дроздова Т.И. Автоматизированный банк кинетических констант радикальных жидкофазных реакций. Черногловка. – Препринт ОИХФ АН СССР. – 1991. – 46 с.
20. Денисов Е.Т., Денисова Т.Г., Туманов В.Е., Дроздова Т.И., Покидова Т.С. Реализация Банка данных по кинетическим константам скорости радикальных реакций в жидкой фазе. // Тезисы докладов и программа IX Всесоюзной конференции “Химическая информатика”. (Черногловка, 11-15 января 1992 г.) – Часть II. – Черногловка, 1992. – С. 229.
21. Денисов Е.Т., Туманов В.Е., Денисова Т.Г., Дроздова Т.И., Покидова Т.С. Реализация Банка кинетических констант радикальных жидкофазных реакций на IBM PC/AT. – Черногловка. ИХФЧ РАН. Препринт. – 1992. – 58 с.
22. Денисов Е.Т. Новые эмпирические модели радикальных реакций радикального отрыва // Успехи химии. – 1997. Т. 66. – С. 953-971.
23. Денисов Е.Т., Туманов В.Е. Модель переходного состояния как результат пересечения двух термов Морзе в приложении к реакциям атомарного водорода // Журнал физической химии. – 1994. Т. 68, № 4. – С. 719-725.
24. Джурс П., Айзенауэр Т. Распознавание образов в химии. – М.: Мир, 1977. – 230 с.
25. Жмойдин Г., Сергиевская А. От баз данных к базам знаний в металлургии // Известия РАН. Металлы. – 1999. – № 5. – С. 109-120.
26. Ивтантермо: ограниченная выборка соединений из базы данных [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.chem.msu.ru/rus/handbook/ivtan/> (дата обращения 12.05.2015).
27. Иориш В.С., Белов Г.В. О качестве информации в базах данных по термодинамическим свойствам веществ. // Физико-химическая кинетика в газовой динамике. 2007. Т. 5. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: www.chemphys.edu.ru/pdf/2006-12-28-001.pdf (дата обращения 12.05.2015).
28. Ковач Э.А., Лосев С.А., Сергиевская А.Л. Опыт создания автоматизированной системы научных исследований в области физико-химической газодинамики // Известия АН. Металлы. – 1993. – № 4. – С. 70-77.
29. Коголовский М.Р. Статистические базы данных // Программирование. – 1995. – № 2. – С. 37-47.
30. Колесниченко Е.Г., Лосев С.А., Сергиевская А.Л., Варламов В.В., Чесноков В.В. Фактографические базы данных как компоненты научной информационной системы. Электронные библиотеки: перспективные методы и технологии, электронные коллекции // Труды Всероссийской научной конференции. – Изд-во: С.-Пб. Ун-та, 2003. – 263-267.
31. Кондратьев В.Н. Константы скорости газозных реакций. – М.: Наука, 1970. – 351 с.
32. Кромкин Е.А., Туманов В.Е. Разработка базы знаний для оценки энергий диссоциации связей по кинетическим данным радикальных реакций отрыва // Башкирский химический журнал. – 2001. Т. 8, № 2. – С. 32-40.
33. Лазарев Д.Ю., Туманов В.Е. Использование искусственной нейронной сети для оценки энергии диссоциации связи органических молекул // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. – 2014. Т. 80, № 5. – С. 74-76.
34. Лазарев Д.Ю., Туманов В.Е. Оценка энергии диссоциации С-Н-связей углеводородов искусственной нейронной сетью. // На стыке наук. Физико-химическая серия. [Текст]: I Международная научная Интернет-конференция: материалы конф. (Казань, 24-25 января 2013 г.): в 2 т. – Казань: ИП Синяев Д.Н., 2013. – Т. 1. – 202 с. – С. 177-180.
35. Лазарев Д.Ю., Туманов В.Е. Предсказание энергии диссоциации связей органических молекул по кинетическим данным радикальных реакций отрыва с использованием нечеткой базы знаний. // Современные системы искусственного интеллекта и их приложения в науке. [Текст]: Всероссийская научная Интернет-конференция с международным участием: материалы конф. (Казань, 25 июня 2013 г.) – Казань: ИП Синяев Д. Н., 2013. – С. 34-36.
36. Лазарев Д.Ю., Туманов В.Е. Применение мульти-агентных технологий при разработке встроенных в портал экспертных систем // Программные продукты и системы. – 2009. – № 3. – С. 39-42.
37. Лазарев Д.Ю., Туманов В.Е. Экспертная система в Интернет для оценки энергий диссоциации связей орга-

- нических молекул по кинетическим данным // Труды Конгресса по интеллектуальным системам и информационным технологиям «ais-it'09». Том. 1. – Москва. Физматлит, 2009. – С. 272-277.
38. Лазарев Д.Ю., Туманов В.Е. Экспертная система на основе агентных технологий для оценки реакционной способности органических молекул // Новые информационные технологии и системы. Труды VIII Международной научно-практической конференции Ч. 1. (г. Пенза. ПГУ, 25-26 ноября 2008 г.). – 2008. – С. 124-124.
39. Лазарев Д.Ю., Туманов В.Е., Психа Б.Л. Применение нейронных сетей для оценки кинетических параметров жидкофазного окисления // Сборник трудов 14 Международной научной конференции “Математические методы в технике и технологиях” – ММТТ-14. – Смоленск. Том 2. Секции 2,5, 2001. – С. 176-177.
40. Лосев С.А., Сергиевская А.Л., Спичков А.В. Информационное обеспечение моделирования физико-химических процессов в газах с использованием Интернет-технологий // Математическое моделирование. – 2007. – Т. 19, № 12. – С. 13-24.
41. Лосев С.А. Система автоматизированного обеспечения физико-химической газодинамики АВОГАДРО: разработка и наполнение // Химия плазмы. – Вып.17. – М.: Энергоатомиздат, 1993. – С. 288-306.
42. Любушко Е.Э. Разработка и использование интеллектуальных информационных систем и технологий генерации и анализа знаний для поддержки фундаментальных и прикладных научных исследований в области катализа и химической технологии // Educational Technology & Society. – 2006. Т. 9, № 3. – С. 346-355.
43. Орлов Ю.Д., Лебедев Ю.А., Сайфуллин И.Ш. Термохимия органических свободных радикалов. – М.: Наука, 2001. – 304 с.
44. Репин А.А., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. Разработка автоматизированной термодинамической базы с элементами искусственного интеллекта // Программные системы и продукты. – 2002. № 3. – С. 34-37.
45. Репин А.А., Чернова Е.М., Орлов Ю.Д., Туровцев В.В. Создание электронной базы данных по энтальпиям образования свободных радикалов // Вестник Новгородского государственного университета. – 2013. Т. 2, № 73. – С. 107-110.
46. Робинсон П., Хольбрук К. Мономолекулярные реакции. – М.: Мир, 1975. – 384 с.
47. Сергиевская А.Л., Ковач Э.А., Лосев С.А. Опыт информационно-математического моделирования в физико-химической кинетике. – М.: Изд-во Моск. ун-та, 1995. – 311 с.
48. Таблицы констант скорости и равновесия гетеролитических органических реакций. / [под ред. В.А. Пальма]. – М.: ВИНТИ, 1975. – Т. 1. – 299 с.
49. Тахистов В.В. Органическая масс-спектрометрия. Термодинамическое описание изомеризации и фрагментации ионов и радикалов в газовой фазе. – Л.: Наука, 1990. – 230 с.
50. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочное издание в 4-х томах. / Л. И. Гурвич, И.В. Вейц, В.А. Медведев и др. [под ред. В. П. Глушко]. – 3-е изд. – Т. 1. – Кн. 1. – М.: Наука, 1978. – 496 с.
51. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочное издание в 4-х томах. / Л. И. Гурвич, И.В. Вейц, В.А. Медведев и др. [под ред. В. П. Глушко]. – 3-е изд. – Т. 1. – Кн. 2. – М.: Наука, 1978. – 328 с.
52. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочное издание в 4-х томах. / Л. И. Гурвич, И.В. Вейц, В.А. Медведев и др. [под ред. В. П. Глушко]. – 3-е изд. – Т. 2. – Кн. 1. – М.: Наука, 1979. – 440 с.
53. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочное издание в 4-х томах. / Л. И. Гурвич, И.В. Вейц, В.А. Медведев и др. [под ред. В. П. Глушко]. – 3-е изд. – Т. 2. – Кн. 2. – М.: Наука, 1979. – 344 с.
54. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочное издание в 4-х томах. / Л. И. Гурвич, И.В. Вейц, В.А. Медведев и др. [под ред. В. П. Глушко]. – 3-е изд. – Т. 3. – Кн. 1. – М.: Наука, 1981. – 472 с.
55. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочное издание в 4-х томах. / Л. И. Гурвич, И.В. Вейц, В.А. Медведев и др. [под ред. В. П. Глушко]. – 3-е изд. – Т. 3. – Кн. 2. – М.: Наука, 1981. – 400 с.
56. Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Справочное издание в 4-х томах. / Л. И. Гурвич, И.В. Вейц, В.А. Медведев и др. [под ред. В. П. Глушко]. – 3-е изд. – Т. 4. – Кн. 1. – М.: Наука, 1982. – 623 с.
57. Термодинамические свойства веществ: базы данных и справочники. // Химия и Химики. 2010 № 5. С. 77-89. URL: http://chemistry-chemists.com/N5_2010/77-89.pdf (дата обращения: 12.05.2015).
58. Туманов В. Е. Программное обеспечение Банка кинетических констант радикальных жидкофазных реакций. – Черногловка. ИХФЧ РАН. Препринт. – 1993. – 40 с.
59. Туманов В.Е., Денисова Т.Г., Денисов Е.Т., Покидова Т.С., Дроздова Т.И. // Свидетельство о государственной регистрации базы данных № 2011620118 «Банк кинетических констант скорости радикальных жидкофазных реакций». Дата приоритета 22.12.2010 г. Правообладатель: Учреждение Российской академии наук Институт проблем химической физики РАН (ИПХФ РАН).
60. Туманов В.Е. Программное обеспечение базы данных по энергиям диссоциации сложных органических соединений. – Черногловка. ИХФЧ РАН. Препринт. – 1998. – 23 с.
61. Туманов В.Е., Денисов Е.Т. База данных по энергиям диссоциации связей углеводородов и их производных // Нефтехимия. – 2003. Т. 43, № 1. – С. 65-67.
62. Туманов В.Е. База данных по энергиям диссоциации органических молекул // Тезисы докладов XIX симпозиума «Современная химическая физика». (2007, 22 сентября – 3 октября, г. Туапсе). – Черногловка. – С. 264.
63. Туманов В.Е., Денисова Т.Г., Денисов Е.Т. // Свидетельство о государственной регистрации базы данных № 2011620117 «Киоск данных по энергиям диссоциации связи органических соединений». Дата приоритета 22.12.2010 г. Правообладатель: Учреждение Российской академии наук Институт проблем химической физики РАН (ИПХФ РАН).
64. Туманов В.Е., Денисова Т.Г., Денисов Е.Т. // Свидетельство о государственной регистрации базы данных № 2011620116 «База данных по энтальпиям образования радикалов и органических соединений». Дата приоритета 22.12.2010 г. Правообладатель: Учреждение Российской академии наук Институт проблем химической физики РАН (ИПХФ РАН).
65. Туманов В.Е. Предметно-ориентированные системы научной осведомленности // Информационные технологии. – 2009. – № 5. – С. 12-18.
66. Туманов В.Е. Применение технологии Data Warehouses для организации электронных коллекций данных в физической химии радикальных реакций // Тезисы докладов Третьей Всероссийской молодежной школы «Суперкомпьютерные вычислительно-информационные технологии в физических и химических исследованиях». (Черногловка 31 октября 1 ноября 2001). – 2001. – С. 91-97.
67. Туманов В.Е. Использование многомерных моделей данных для организации баз данных в химической кинетике // Башкирский химический журнал. – 2002. Т. 9, № 2. – С. 15-21.
68. Туманов В.Е. Предметно-ориентированные системы научной осведомленности в физической химии радикальных реакций // Сборник трудов пятой международной научно-практической конференции «Исследование, разработка и применение высоких технологий в промышленности». Том. 12. «Высокие технологии, фундаментальные и прикладные исследования, образование». – СПб.: Изд-во Политехнического университета. – 2008. – С. 41-42.

69. Туманов В.Е. Применение искусственных нейронных сетей для оценки реакционной способности молекул в радикальных реакциях // Информационные технологии. – 2010. № 5. – С. 11-15.
70. Туманов В.Е., Прохоров А.И., Лазарев Д.Ю., Соловьева М.Е. Система научной осведомленности по физической химии радикальных реакций // Информационные ресурсы России. – 2010. № 5. – С. 16-21.
71. Туманов В.Е. Нечеткая база знаний для предсказания реакционной способности реакций фенил радикалов с углеводородами // Materiály IX mezinárodní vědecko – praktická konference «Moderní vymoženosti vědy – 2013». – Díl 71. Moderní informační technologie: Praha. Publishing House «Education and Science» s.r.o – 2013. – С. 12-15.
72. Туманов В.Е. Предсказание реакционной способности углеводородов в реакциях с алкильными радикалами нечеткой базой знаний // Современные системы искусственного интеллекта и их приложения в науке. [Текст]: Всероссийская научная Интернет-конференция с международным участием: материалы конф. (Казань, 25 июня 2013 г.) – Казань: ИП Синяев Д. Н., 2013. – С. 148-151.
73. Туманов В.Е., Прохоров А.И., Соловьева М.Е. Технология интеллектуальных агентов в предсказании физико-химических свойств органических молекул // Современные проблемы науки и образования. – 2013. – № 6; URL: <http://www.science-education.ru/113-11073> (дата обращения: 10.12.2013).
74. Туманов В.Е. Построение групп радикальных реакций отрыва алгоритмом к-средних для предсказания физико-химических характеристик реагентов. // Фундаментальные исследования. – 2013. № 6 (часть 6). – С. 1386-1390.
75. Туманов В.Е., Прохоров А.И., Соловьева М.Е. Программа с элементами искусственного интеллекта для оценки энthalпии образования радикалов по кинетическим данным // Бутлеровские сообщения. – 2013. Т. 34, № 5. – С. 67-74.
76. Туманов В.Е., Лазарев Д.Ю., Денисов Е.Т. // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2011611391 «Экспертная система оценки энергии диссоциации связей органических молекул по кинетическим данным радикальных реакций». Дата приоритета 29.11.2010 г. Правообладатель: Учреждение Российской академии наук Институт проблем химической физики РАН (ИПХФ РАН).
77. Туманов В.Е., Прохоров А.И., Денисов Е.Т. // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2011611392 «Программа с элементами искусственного интеллекта для оценки реакционной способности молекул в радикальных реакциях». Дата приоритета 29.11.2010 г. Правообладатель: Учреждение Российской академии наук Институт проблем химической физики РАН (ИПХФ РАН).
78. Туманов В.Е. Экспертная система для оценки энергий диссоциации связей органических молекул // Заводская лаборатория. – 2010. № 5. – С. 66-70.
79. Туманов В.Е. Программа с элементами искусственного интеллекта для оценки реакционной способности радикальных реакций // Программные продукты и системы. – 2008. № 3. – С. 58-60.
80. Туманов В.Е. On-Line ресурсы по физической химии радикальных реакций и интеллектуальный анализ данных // Всероссийская конференция «Информационные технологии в образовании XXI века», Всероссийская молодежная научная конференция «Информационные технологии в образовательном процессе исследовательского университета». Сборник научных трудов. – М.: НИЯУ МИФИ. 2011. – С. 493-495.
81. 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.
82. Ahmadi M., Nekoomanesh M., Arabi H. New Approach in Modeling of Metallocene-Catalyzed Olefin Polymerization Using Artificial Neural Networks // Macromol. Theory Simul. – 2009. Vol. 18. – P. 195–200.
83. Allison T. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.auburn.edu/~stanbmd/Alison27s20report/files/NISTKineticsDB-TomAllison.pdf> (дата обращения: 12.05.2015).
84. Bas D., Dudak F.C., Boyacı I.H. Modeling and optimization III: Reaction rate estimation using artificial neural network (ANN) without a kinetic model // Journal of Food Engineering. – 2007. Vol. 79. – P. 622–628.
85. Belov G.V., Iorish V.S., Yungman V.S. IVTANTHERMO for Windows – database on thermodynamic properties and related software // CALPHAD. – 1999. Vol. 23, № 2. – P. 173-180.
86. Brereton R. G. Applied Chemometrics for Scientists. – John Wiley & Sons Ltd, 2007. – 379 p.
87. Cohen N. Revised Group Additivity Values for Enthalpies of Formation (at 298 K) of Carbon-Hydrogen and Carbon-Hydrogen-Oxygen Compounds // J. Phys. Chem. Ref. Data. – 1996. Vol. 25, № 6. – P. 1411-1481.
88. Chase M. W., Davies C. A., Downey J. R., Frurip D. J., McDonald R. A., Syverud A. N. JANAF thermochemical tables. Third edition // J. Phys. and Chem. Ref. Data. – 1985. Vol. 14, № 1. P. – 1-1856.
89. Chase M.. NIST-JANAF, Thermochemical Tables. – Fourth Edition. // J. of Phys. and Chem. Ref. Data, Monograph. – 1998. – № 9. – P. 1- 1951.
90. Chemical information mining. Facilitating Literature-Based Discovery. (Ed. D.L. Banville). CRC Press, Taylor & Francis Group. – 2009 – 193 p.
91. Chemoinformatics. A Textbook. (Ee. J. Gasteiger, T. Engel). – Wiley-VCH GmbH & co.KGaA. – 2003. – 649 p.
92. Chemical information mining. Facilitating Literature-Based Discovery. (Ed. D.L. Banville). – CRC Press, Taylor & Francis Group, 2009. – 193 p.
93. Chirico R.D., Diky V., Dong Q., Frenkel M., Muzny C., Yan X. ThermoData Engine (TDE): Software Implementation of the Dynamic Data Evaluation Concept // J. Chem. Inf. Model. – 2005. Vol. 45, № 4. – P. 816-838.
94. Chirico R.D., Diky V., Frenkel M., Lemmon E.W., Muzny C. ThermoData Engine (TDE): Software Implementation of the Dynamic Data Evaluation Concept. 2. Equations of State on Demand and Dynamic Updates over the Web // J. Chem. Inf. Model. – 2007. Vol. 47, № 4. – P. 1713-1725.
95. Chirico R.D., Diky V., Frenkel M., Kazakov A.F., Muzny C. ThermoData Engine (TDE): Software Implementation of the Dynamic Data Evaluation Concept. 3. Binary Mixtures // J. Chem. Inf. Model. – 2009. Vol. 49, № 2. – P. 503-517.
96. Chirico R.D., Diky V., Dong Q., Frenkel M., Wilhoit R.C. Windows-Based Guided Data Capture Software for Mass-Scale Thermophysical and Thermochemical Property Data Collection. // J. Chem. Inf. Model. – 2003. Vol. 43, № 1. – P. 15-24.
97. CRC Handbook of Chemistry and Physics. A ready-reference book of chemical and physical data. – 90th edition. / [Ed. D.R. Lide]. – CRC Press, Inc. Boca Ranton, Florida, 2009. – 2804 p.
98. Denisov E.T., Azatian V.V. Inhibition of Chain Reactions. – London. Gordon & Breach, 2000. – 337 p.
99. Denisov E. T., Denisova T. G. Handbook of Antioxidants. – CRC Press, Boca Raton, 2000. – 289 p.
100. Denisov E.T., Denisova T.G., Pokidova T.S. Handbook Free Radical Initiators. – Wiley-Interscience. Hoboken, NJ, 2003. – 879 p.
101. Denisov E.T., Afanas'ev L.B. Oxidation and Antioxidants in Chemistry and Biology. – Taylor and Francis. Boca Raton. 2005. – 981 p.
102. Denisov E. T., Denisova T. G. Dissociation Energies of O-H Bonds of Phenols and Hydroperoxides // In Application

- of Thermodynamics to Biological and Materials Science. [Ed. T. Mizutani]. – nTech, Rijeka, Croatia, 2011. – P. 405-440.
103. Domalski E.S., Hearing E.D. Estimation of the Thermodynamic Properties of C-H-N-O-S-Halogen Compounds at 298,15 K // *J. Phys. Chem. Ref. Data*. – 1993. Vol. 22, № 4. – P. 805-1159.
104. Dong Q., Yan X., Chirico R.D., Wilhoit R.C., Frenkel M. Database Infrastructure to Support Knowledge Management in Physicochemical Data // 18-th CODATA Conference. Montreal, Canada. –2002. – P. 36.
105. Dutot A.-L., Rude J., Aumont B. Neural network method to estimate the aqueous rate constants for the OH reactions with organic compounds // *Atmospheric Environment*. – 2003. Vol. 37. – P. 269–276.
106. Frenkel M. Global Information Systems in Science: Application to the Field of Thermodynamics // *J. Chem. and Eng. Data*. – 2009. – Vol. 54, № 29. – P. 2411-2428.
107. Frenklach M. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://kinetics.nist.gov/RealFuels/maccr/maccr2011/MACCCR_2011_Frenklach.pdf (дата обращения: 12.05.2015).
108. Fuzzy Logic in Chemistry. (Ed. D.H. Rouvray). – ACADEMIC PRESS. 1997. – 364 p.
109. Hemmer M.C. Expert system in chemistry research. – CRC Press, Taylor & Francis Group. –2008. – 393 p.
110. Himmelblau D.M. Applications of Artificial Neural Networks in Chemical Engineering // *Korean J. Chem. Eng.* – 2000. Vol. 17, N. 4. – P. 373-392.
111. Gasteiger J., Marsili M., Hutchings M.G., Saller H., Low P., Rose P., Rafeiner K. Models for Representation of Knowledge about Chemical Reactions // *J. of Chem. and Comput. Sci.* – 1990. Vol. 30, № 4. – P. 467-476.
112. Gasteiger J., Jochum C. EROS – A Compute Programm for Generating Sequences of Reactions // *Topics Curr. Chem.* – 1978. Vol. 74. – P. 93-126.
113. Gasteiger J., Teckentrup A., Terfloth L., Spycher S. Neural Networks as Data Mining Tools in Drug Design // *J. Phys. Org. Chem.* – 2003. Vol. 16. – P. 232-245.
114. Gasteiger J., Zupan J. Neural networks in chemistry // *Angev. Chem. Int. Ed. Engl.* –1993. Vol. 32. – P. 503-527.
115. Gurvich L.V. The reference books and data banks on the thermodynamic properties of substances at high temperatures // *Rev. Int. Hautes Temper. Refract.* – 1991. – Vol. 27. – P.167–179.
116. Hackathorn R. Science Intelligence. Can a Business Intelligence Approach Enable «Smart» Science? DM Review. 2005. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://weblog.ib.hu-berlin.de/?p=2952> (дата обращения 12.05.2015).
117. IIRIC. Chemical Database. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://iric.imet-db.ru/DB.asp> (дата обращения 12.05.2015).
118. Ivanciuc O. The neural network MolNet prediction of alkane enthalpies // *Analytica Chimica Acta*. – 1999. Vol. 384. – P. 271-284.
119. IVTANTHERMO – A Thermodynamic Database and Software System for the Personal Computer. User's Guide. / L.V. Gurvich, V.S. Iorish, D.V. Chekhovskoi, V.S. Yungman. – 1993. – Boca Raton, CRC Press, Inc. – 57 p.
120. Kiselyova N., Stolyarenko A., Ryazanov V., Podbel'skii V. Information-analytical system for design of new inorganic compounds // *Proc. XIII-th International Conference «Knowledge-Dialogue-Solution – KDS-2007»*. (June 18-24, 2007, Varna, Bulgaria). – Sofia, ITHA. – 2007. Vol. 2. – P. 373-378.
121. Kovacs B., Toth J. Estimating Reaction Rate Constants with Neural Networks // *World Academy of Science, Engineering and Technology*. – 2007. Vol. 26. – P. 13-17.
122. Kromkin E. A., Tumanov V. E. Expert system shell for evaluation of bond dissociation energies of organic compounds // *Book of Abstracts 7th Scandinavian Symposium on Chemometrics*. Copenhagen, Denmark, 2001. – P. 78.
123. Lazarev D.Yu., Tumanov V.E. Prediction of bond dissociation energies of organic molecules by kinetic data of the radical reactions using the fuzzy knowledge base. // *BIT's 3rd Annual Conference and EXPO of AnalytiX-2014*. (April 25-28 2014. Dalian, China). 2014. – P. 379.
124. Landolt-Bornstein. Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology. New Series. Group II: Atomic and Molecular Physics. V. 13. Radical Reaction Rates in Liquids. Subvolume a, b, c, d. – Berlin: Springer-Verlag. 1984-1985.
125. Linstrom P.J., Mallard W.G. NIST Chemistry WebBook, NIST Standard Reference Database Number 69. / National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg MD, 20899. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://webbook.nist.gov> (дата обращения 12.05.2015).
126. Luo Y.-R. Handbook of Bond Dissociation Energies in Organic Compounds. – CRC Press, Boca Raton, FL, 2003. – 380 p.
127. Luo Y.-R. Comprehensive Handbook of Chemical Bond Energies. – CRC Press, Boca Raton, London – New York, 2007. – 1655 p.
128. Manion J.A., Huie R.E., Levin R.D., Burgess D.R., Jr., Orkin V.L., Tsang W., McGivern W.S., Hudgens J.W., Knyazev V.D., Atkinson D.B., Chai E., Tereza A.M., Lin C.-Y., Allison T.C., Mallard W.G., Westley F., Herron J.T., Hampson R.F., Frizzell D.H. NIST Chemical Kinetics Database, NIST Standard Reference Database 17, Version 7.0 (Web Version), Release 1.4.3, Data version 2008.12. / National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, Maryland, 20899-8320. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://kinetics.nist.gov/> (дата обращения: 12.05.2015).
129. NDRL/NIST Solution Kinetics Database on the Web. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://kinetics.nist.gov/solution/> (дата обращения: 12.05.2015).
130. Neumann D.B., Wang P.A. Database and Retrieval System for the NBS Tables of Chemical Thermodynamic Properties // *Chem. Inf. and Comput. Sci.* – 1989. – Vol. 29. – P. 31-38.
131. NIST Chemistry WebBook. NIST Standard Reference Database Number 69. [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://webbook.nist.gov/chemistry/> (дата обращения: 12.05.2015).
132. Palm V. Computer-Manager Automatic Data Retrieval and Prognosis System for Rate and Equilibrium Constants of Organic Reactions // *J. of Chem. and Comput. Sci.* – 1990. – Vol. 30, № 4. – P. 409-412.
133. Pedley J.B., Naylor R.D., Kirby S.P. Thermochemical Data of Organic Compounds. – 2nd ed. – Chapman and Hall. London, 1986. – 792 p.
134. Prokhorov A.I., Solov'eva M.E., Tumanov V.E. Evaluation of classical potential barrier of H + RH reactions in an aqueous solution using artificial neural network // *European Science and Technology. Material of the IX International Research and Practice Conference*. – Munich, Germany, 2014. Vol. 1. – P. 86-90.
135. R&D DATABASE HANDBOOK. A Worldwide Guide to Key Scientific and Technical Databases. / [Ed. L. Davidson]. – Technical Insights, Inc, 1984. – 194 p.
136. Reddy S.S.S., Reddy L.S.S., Khanaa V., Lavanya A., Advanced Techniques for Scientific Data Warehouses // *International Conference on Advances in Computing and Communications*. – 2009. – P. 576-580.
137. Sreenivasarao V., Pallamreddy V.S. Advanced Data Warehousing Techniques for Analysis, Interpretation and Decision Support of Scientific Data // *Advances in Computing and Information Technology Communications in Computer and Information Science*. Volume 198. – 2011. – P. 162-174.
138. STN International Databases in Science & Technology. – FIZ Karlsruhe STN Service Center Europe, 1994. – 44 p.

139. Szwarc M. The Estimation of Bond-dissociation Energies by Pyrolytic Methods // *Chem. Rev.* – 1950. – V. 47. – P. 75-173.
140. Teixeira A.L., Santos R.C., Leal J.P., Martinho Simoes J.A., Falcao A.O. ThermInfo: Collecting, Retrieving, and Estimating Reliable Thermochemical Data. [Электронный ресурс] – Режим доступа: <http://arxiv.org/ftp/arxiv/papers/1302/1302.0710.pdf> (дата обращения 12.05.2015).
141. TermInfo: Database of thermochemical and structural information for organic compounds. [Электронный ресурс] – Режим доступа: <http://www.therminfo.com> (дата обращения 12.05.2015).
142. Thierauf R.J. Effective Business Intelligence Systems. – Westport. Quorum Books, 2001. – 392 p.
143. Tumanov V.E., Lazarev D.J., Prokhorov A.I., Solovieva M.E. The Thermochemistry Portal for Organic Compounds // Abstracts of XII International Conference on Chemical Thermodynamics in Russia: In 2 Volumes; Vol. 1. – Kazan. Innovation Publishing House “Butlerov Heritage” Ltd, 2009. – P. 374.
144. Tumanov V.E. Data Warehousing and Data Mining in Thermochemistry of Free Radical Reactions // Fourth Winter Symposium on Chemometrics «Modern Methods of Data Analysis». – Chernogolovka, 2005. – P. 28-29.
145. Tumanov V.E. Application of the Artificial Neural Networks and Fuzzy Logic for the Prediction of Reactivity of Molecules in Radical Reactions // In: Computational Problems in Engineering. Series: Lecture Notes in Electrical Engineering (Ed. N. Mastorakis, V. Mladenov.) – Switzerland: Springer International Publishing, 2014. – Vol. 307. – P. 261-269.
146. 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. (Eds. M. Ali et al.). – 2015. – P. 394–403.
147. 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*. (Eds Jerzy Balieski). – WSEAS Press. Gdansk, Poland, 2014. Vol. 21. – P. 58-61.
148. 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). – 2012. – P. 62-65.
149. Tumanov V., Gaifullin G. Subject-oriented science intelligent system on physical chemistry of radical reactions // *Modern Advances in Intelligent Systems and Tools*. – 2012, Vol. 431. – P. 121-126.
150. Varga T., Turanyi T., Czinki E., Furtenbacher T., Csaszar A.G. ReSpecTh: a joint reaction kinetics, spectroscopy, and thermochemistry information system // *Proceedings of the European Combustion Meeting*. – 2015. – P. 1-5.
151. Xu Y., Yu X., Zhang S. QSAR Models of Reaction Rate Constants of Alkenes with Ozone and Hydroxyl Radical // *J. Braz. Chem. Soc.* – 2013. Vol. 24, № 11. – P. 1781-1788.
152. Zupan J., Gasteiger J. Neural networks in chemistry for drug and design. Second edition. – Wiley-VCH. 1999. – 367 p.
153. Yao X., Zhang X., Zhang R., Liu M., Hu Z., Fan B. Prediction of enthalpy of alkanes by the use of radial basis function neural networks // *Computers & Chemistry*. – 2001. Vol. 25, № 5. – P. 475-482.