Информационные технологии в химии

Александр Антонович Рагойша

Кафедра общей химии и методики преподавания химии
к. 501-а

1-й семестр

Поиск химической информации
в онлайновых текстовых базах данных

54 часа, из них аудиторных – **34**

9 недель:

Лекция (2 час.) +

+ **8** занятий х **4** час.

(минилекции + практикум + КСР)

Зачет (2 зач. ед.)

ЛИТЕРАТУРА

- А. А. Рагойша. Поиск химической информации в Интернете. Поисковые системы и тематические каталоги: Учеб. пособие для студентов хим. фак. – Мн.: БГУ, 2003.
- А. А. Рагойша. Поиск химической информации в Интернете: научные публикации : учеб. пособие для студентов хим. фак. спец. 1-31 05 01. – Мн.: БГУ, 2007.
- В. М. Потапов, Э. К. Кочетова. Химическая информация. Где и как искать химику нужные сведения. – М.: Химия, 1988.
- Рагойша, А. А. Текстовый поиск научной химической информации в Интернете] : практикум по курсу "Информационные технологии в химии" для студентов спец. 1-31 05 01 Химия (по направлениям) — Мн.: БГУ, 2012. http://elib.bsu.by/handle/123456789/14599
- А. А. Рагойша. Азбука веб-поиска для химиков. – Минск, БГУ, 1999-2016. http://www.abc.chemistry.bsu.by

http://www.abc.chemistry.bsu.by

ABC ChemistRy

АЗБУКА ВЕБ-ПОИСКА ДЛЯ ХИМИКОВ
Материалы учебного курса
"Информационные технологии в химии"

Презентации к лекциям

1 семестр (н.-пр., н.-пед., охр ОС, лек., фунд., ХВЭ)
Лекции: **1 2 3 4**

1 семестр (фарм.)
Лекции: **1 2 3**

2 семестр
Лекции: **1 2 3**

Практикум

1а. Текстовый поиск информации

1б. Патентные базы данных

2. Структурный поиск

Учебные программы

Справочные материалы

ABC Chemistry : бесплатные научные журналы по химии - каталог постоянно доступных полнотекстовых онлайновых журналов и информация о временно доступных журналах

Хімічныя часопісы праз кампутарную сетку БДУ. Анлайнавыя базы дадзеных у бібліятэках Беларусі

25 стартовых точек поиска химической информации

ABC-Chemistry.org : Directory of Free Full-Text Journals in Chemistry - английская версия нашего каталога

Суперхімікі : Хімічныя алімпіяды школьнікаў Беларусі : ілюстраваная гісторыя

Бюллетень химической информации

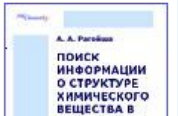
06.05.16. В Центральной научной библиотеке НАНБ открыт доступ к коллекции из 53 полнотекстовых российских журналов, расположенной в научной электронной библиотеке **eLIBRARY.RU**. Доступ к журналам осуществляется только с компьютеров библиотеки.

31.03.16. 100 статей, которые могут изменить мир, опубликованные в 2015 году в журналах издательства *Springer*, - открыты до 15 июля 2016 г.

01.03.16. На неопределенный период времени открыты спецвыпуски журналов:
Bioorganic & Medicinal Chemistry V.23 #11 (2015) (Emerging Approaches for the Design and Synthesis of Innovative Small Molecule Libraries),
Food Chemistry V.193 (2016) (10th International Food Data Conference (IFDC): Joining nutrition, agriculture and food safety through food composition).

23.02.16. Журнал **Chemie in unserer Zeit** по случаю своего 50-летия открыл бесплатный доступ к подборке своих лучших публикаций последних лет. Кроме того, №1 за 2016 г. открыт как *Sample Issue*. Все вместе - это идеальный материал для сдачи "тысяч" по немецкому языку.

Google™ Custom Search | Search



Терминология

WWW

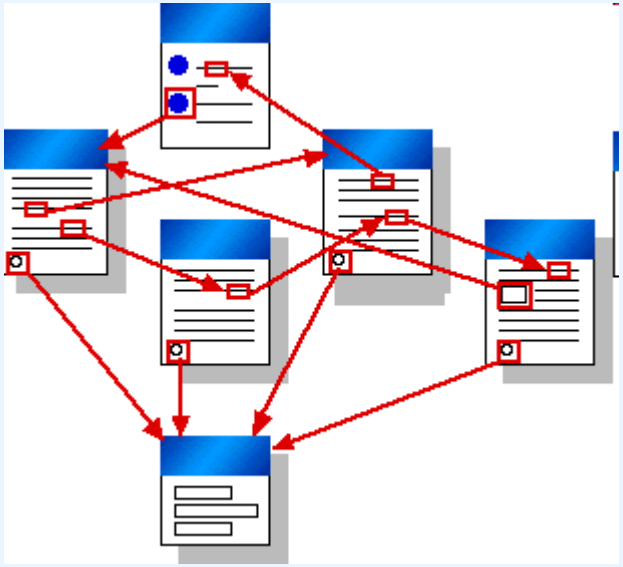
- Интернет
  — (*inter* — меж- + *net* — сеть) —
  сеть, объединяющая много компьютерных сетей.

- World Wide Web
  (WWW, Web, W3, Всемирная паутина, веб) —
  система взаимосвязанных между собой документов, доступных через Интернет.

  Документ — любой целостный автономный информационный массив, не только текстовый, но и, например, видео-, аудио- и т. д.

Гипертекст

- *Протокол* — набор правил.
- HTTP (Hypertext Transfer Protocol) — протокол передачи гипертекста.
- Гипертекст — «текст ветвящийся или выполняющий действия по запросу» (Тед Нельсон, 1965).
- Гиперссылка (ссылка, link) – часть гипертекстового документа, указывающая на другую часть этого документа или на другой документ.



Домен

- IP-адрес — числовой идентификатор компьютера(ов) в сети.

  Пример: **217.21.43.222**

- Доменное имя — буквенно-числовой идентификатор узлов сети и ресурсов, расположенных на узлах.

  Иерархическая структура

  Примеры: **www.abc.chemistry.bsu.by**
  www.cam.ac.uk
  www.google.com

Домен верхнего уровня

- Общий домен верхнего уровня

  без регистрационных ограничений

  com, net, org, info

  с ограничениями («спонсируемые»)

  gov, int, mil, edu, museum, biz, ...

- Национальный домен верхнего уровня

  by, uk, ru, de, ..., eu

  tv

  бел, рф

  тут.бел = tut.by

Структура

- Сайт (веб-сайт, website, …) — информационный массив, находящийся на сервере и доступный внешним пользователям.

  Единый стиль
  Структура может быть иерархичной

- Веб-страница (страница, webpage, page) — документ, который можно получить в ходе одного обращения к серверу.

  Веб-страницы: статические, динамические

Адрес

- Адрес (URL, Uniform Resource Locator) - стандартизированный указатель местонахождения информации и способа ее получения.

  http://www.abc.chemistry.bsu.by/current/bdu.htm

  http://www.bl.uk/eresources/jnls/ejournals.html#free
  http://www.bsu.by/ru/main.aspx?guid=4681

  http://scout-unimib.cilea.it/links/SPT--FullRecord.php?ResourceId=491&PHPSESSID=d666f9f88fe19ef1

  http://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%91%D0%93%D0%A3
  (http://ru.wikipedia.org/wiki/БГУ)

  ftp://ftp.netscape.com/robots.txt

Web 2.0, Web 3.0

- (Web 1.0) — условный термин;
  “автор пишет, читатель читает”
- Web 2.0 — интерактивные сайты, где пользователи изменяют содержание; социальные сети; вики; блоги; онлайновые прикладные программы.
- Web 3.0 — предполагаемая следующая стадия развития, включающая «семантический веб»

Семантический веб будет основан на компьютеризованном распознавании смысла информации в документах.

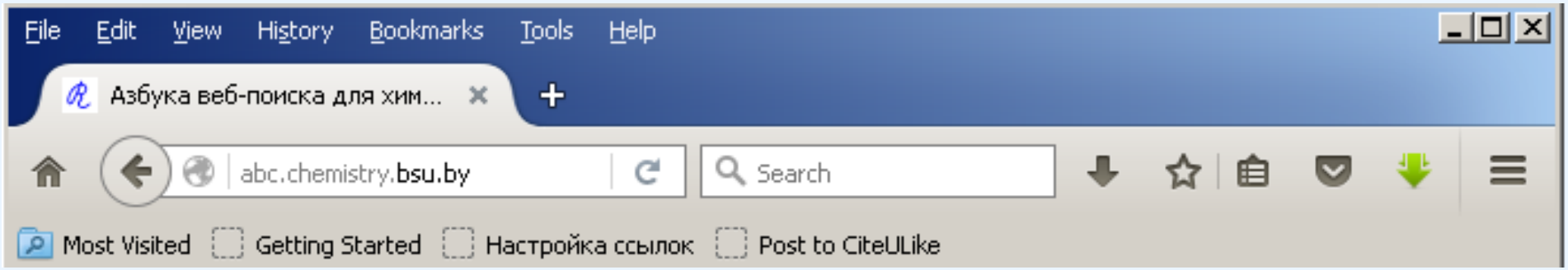
Browse — Search

Два метода работы с онлайновыми ресурсами:

- Browse (перелистывание)
- Search (поиск)

Браузер (browser) — прикладная программа, предназначенная для работы с веб-ресурсами.

Mozilla **Firefox**



Указатели ресурсов

Поисковая система

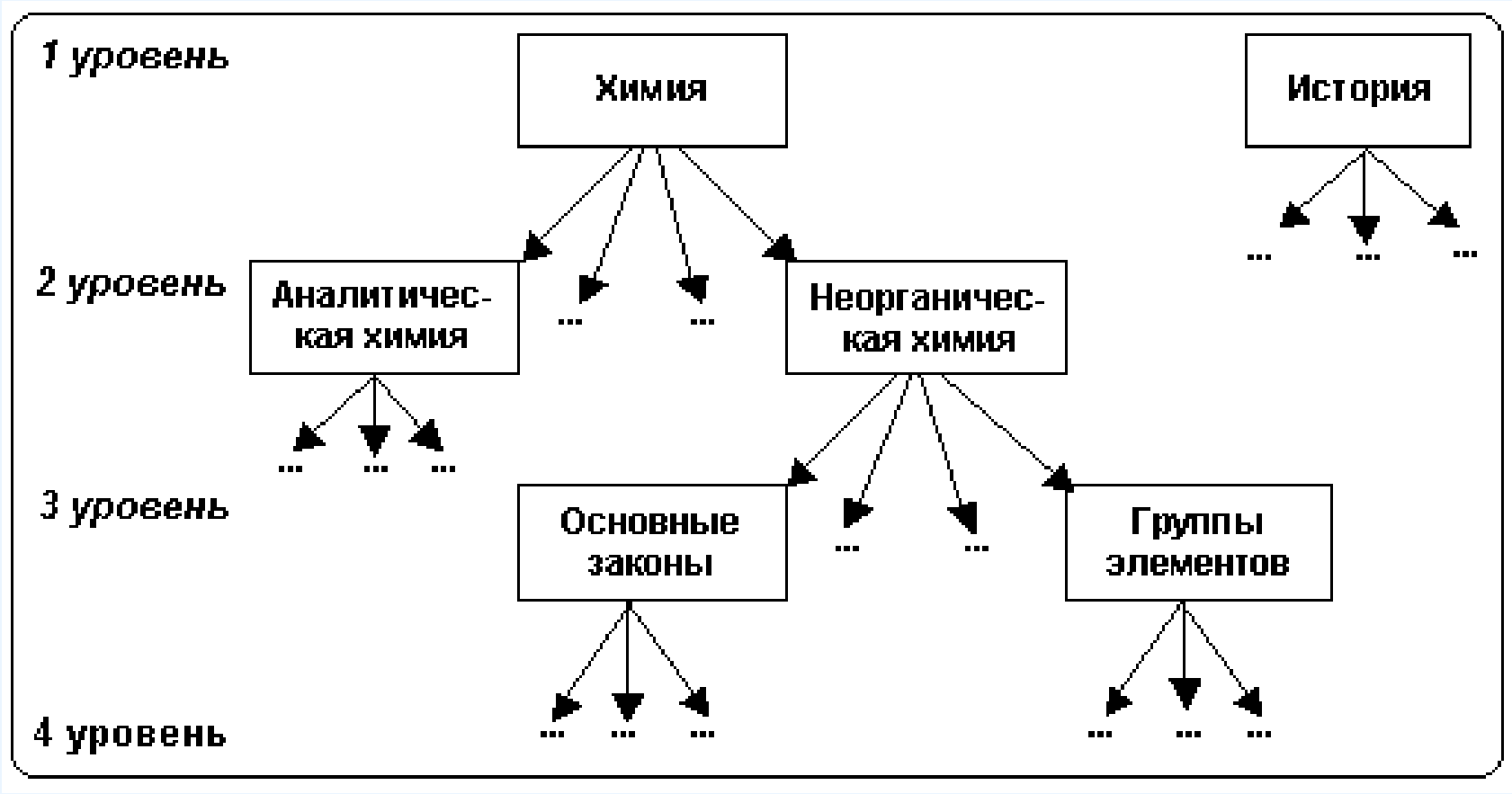
Search engine

- робот (паук)
- индекс (база данных)
- поисковая программа, веб-интерфейс

Универсальные поисковые системы:
Google, Yahoo!, Bing, Яндекс, …

Специализированные (вертикальный поиск)

Тематический каталог



Каталог (Directory)

Раздел (Category)

Еще указатели веб-ресурсов:

- Метапоисковая система
  использует индексы нескольких иных поисковых систем
- Специализированная база данных
  (робот отсутствует)
- Метасайт -
  небольшой по объему сборник ссылок на веб-страницы

Синтаксис запроса в текстовых базах данных

- База данных (database) -

  упорядоченный информационный массив,
  состоящий из стандартных блоков.

  Классификация по типу содержимого:

  текстовые,
  числовые,
  формульные,
  ...

Структура базы данных
(с точки зрения пользователя)

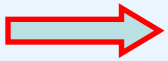
- **Запись (record)** - стандартный блок информации
- **Поле (field)** - смысловой фрагмент записи

  Поля: текстовые, числовые и др.

Поле	Значение
Заглавие	Химия сегодня и завтра
Издано в	Мн. : Университетское, 1987.
Примечания	Библиогр.: с. 126-127 (42 назв.). 9630 экз.
Тематика	ХИМИЯ ХІМІЯ
УДК	54
ГРНТИ	31.01
Автор (лицо/организация)	Свиридов, Вадим Васильевич

Запись в каталоге библиотеки

- Поисковая программа
(search and retrieval software)



имеет страницу с поисковым бланком,
предназначенным для формулирования
запроса

- Запрос (query) -
поисковое задание, содержащее поисковые термины
и инструкцию по их интерпретации программой

Пример запроса:

натрий

Заполняем поисковый бланк:

Поисковая программа ищет в своей базе данных те записи, в которых присутствует слово **натрий**

Список обнаруженных записей выводится на экран

Натрий - [Translate this page]
Натрий - жизненоважный межклеточный и внутриклеточный элемент, участвующий в ...
Потребность в **натрии** минимально составляет около 1 г/сут и в значительной ...
www.sunduk.ru/Encycl/ChemFood/C027.htm - Cached - Similar

НАТРИЙ - [Translate this page]
Натрий-22 с периодом полураспада 2,58 года используют в качестве источника позитронов. **Натрий**-24 (его период полураспада около 15 часов) применяют в ...
www.krugosvet.ru/enc/nauka_i_tehnika/.../NATRI.html - Cached - Similar

Поиск - **не по смыслу**, а **по факту наличия** термина!

Нет стандартного синтаксиса запроса.

У каждой программы свои правила.

Иногда правила совпадают
(но необязательно, что полностью).

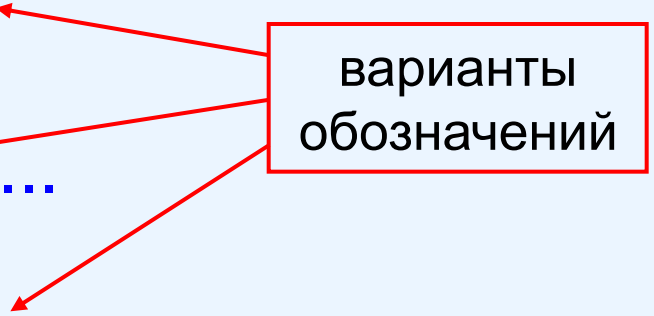
Бывает, что некоторые элементы
разными поисковыми программами
воспринимаются *с точностью до наоборот*.

Логические (Булевы) операторы

- AND
  натрий AND калий
- OR
  натрий OR калий
- NOT
  натрий NOT калий

& , …

| , …



- , (andnot, and not, but not)

Оператор по умолчанию (default operator)

Пример: Обе записи равнозначны, если AND – по умолчанию:

натрий AND калий

натрий калий

Порядок выполнения операций

- Сначала: NOT и AND, затем: OR
- Если нужно, порядок меняют круглыми скобками

Пример:

Найти записи, в которых:
обязательно присутствует **натрий** или **калий** и
обязательно присутствует **фосфат** или **силикат**

Правильно:

(натрий OR калий) AND (фосфат OR силикат)

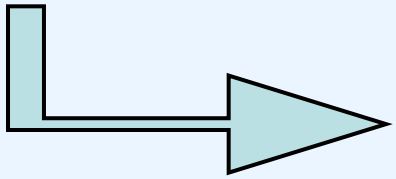
Неправильно:

натрий OR калий AND фосфат OR силикат

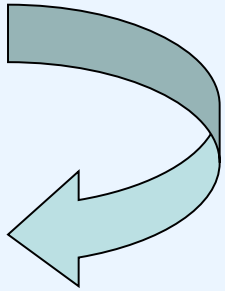
Операторы расстояния - 1

- Кавычки

Пример: "фосфат натрия"



два алгоритма:
фраза из 2 слов *или*
строка из 13 символов



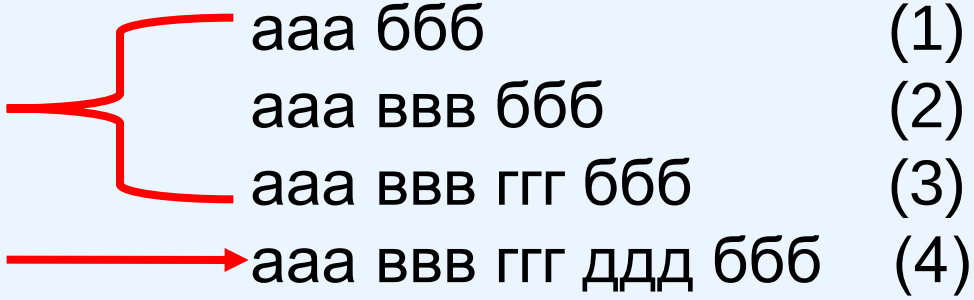
"фосфат_натрия" ≠ "фосфат_ _натрия"

(символом подчеркивания обозначен пробел)

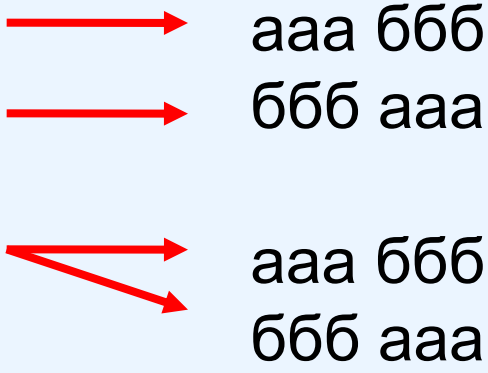
Операторы расстояния - 2

- WITH/n , NEAR/n (W/n, N/n, WITH, ...)

Пример: **ааа WITH/3 ббб**



Пример: **ааа W/1 ббб**



Шаблон - 1

***** ("звездочка")
заменяет любое число символов (в т. ч. нулевое)

Примеры: **фосфат***
фосфат, фосфатами, фосфатирование, ...
хлор*
хлор, хлорид, ... *но*: хлорофилл

***фосфат**
фосфат, дифосфат, полифосфат, ...

Wildcard. Truncation (right-hand, left-hand) - Усечение

Шаблон - 2

? (вопросительный знак), # (решетка)
заменяет один символ

Пример: **бут?н**
бутан, бутен, бутин, бутон

Как правило:

При шаблоне оставлять не менее трех букв.
Не использовать шаблон внутри кавычек.

Шаблон увеличивает количество
информационного мусора в результатах поиска

Stemming

- Stemming –
  режим работы поисковой программы, при котором происходит учет грамматических форм терминов (учет морфологии, учет словоформ)

Пример: **фосфат** 

фосфат, фосфатами, фосфатный, ... (полифосфат - ?)

Пример: **write** 

write, writes, writing, wrote

Не проводить stemming:

"фосфатами"

Стоп- слова

- Стоп-слова (stopwords) -
  слова, которые при поиске не учитываются.

  Это слова, не несущие самостоятельной смысловой нагрузки, но особенно часто встречающиеся в тексте:
  предлоги, союзы, артикли и т. п.

  Пример: **The Analyst**

  Включить стоп-слово в поиск:
  "The Analyst"

Регистр букв

- Абсолютное большинство поисковых программ нечувствительно к регистру букв – для них строчные и заглавные буквы в запросе равнозначны.

Пример:

фосфат AND силикат

фосфат and силикат

фОсФаТ aNd СиЛиКаТ

годится любой вариант

Указание поля поиска

- Поиск можно сделать более эффективным, если проводить его не по записям в целом, а только по избранным полям.

  Для этого в запросе рядом с поисковым термином указывают код соответствующего поля.

  Коды полей в разных базах данных – разные.

  Примеры:

  ttl/фосфат

  ttl/фосфат and натрий

  фосфат filetype:pdf

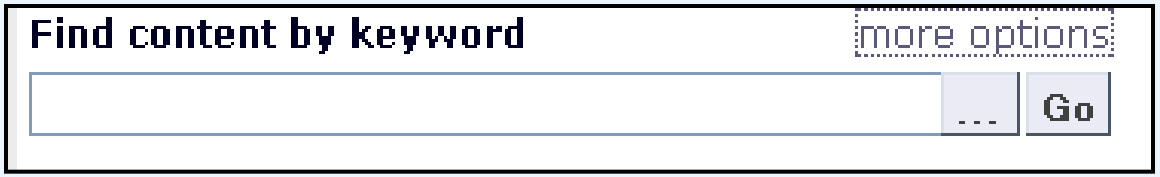
Поисковый бланк и список результатов поиска

Поисковый бланк - 1

- Простейший, Basic, Quick, Simple
- Расширенный, Advanced, Expert

Классификация условна – в рамках определенной базы данных.

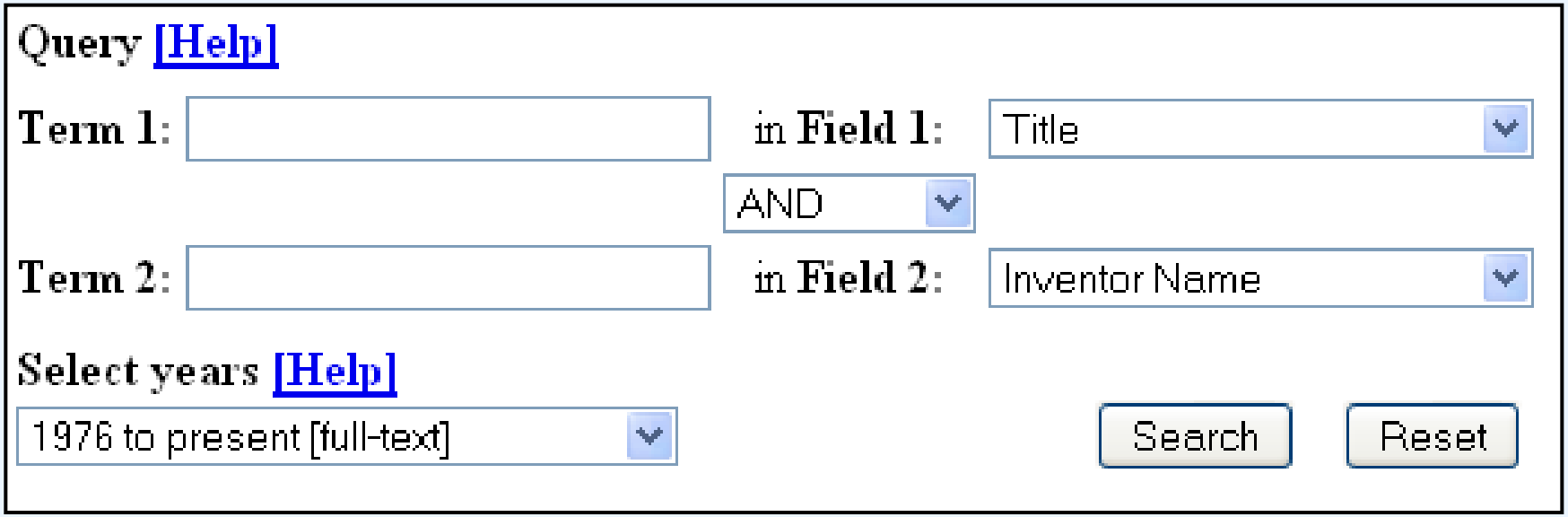
Обычно такие бланки называют Quick Search



Поисковый бланк - 2

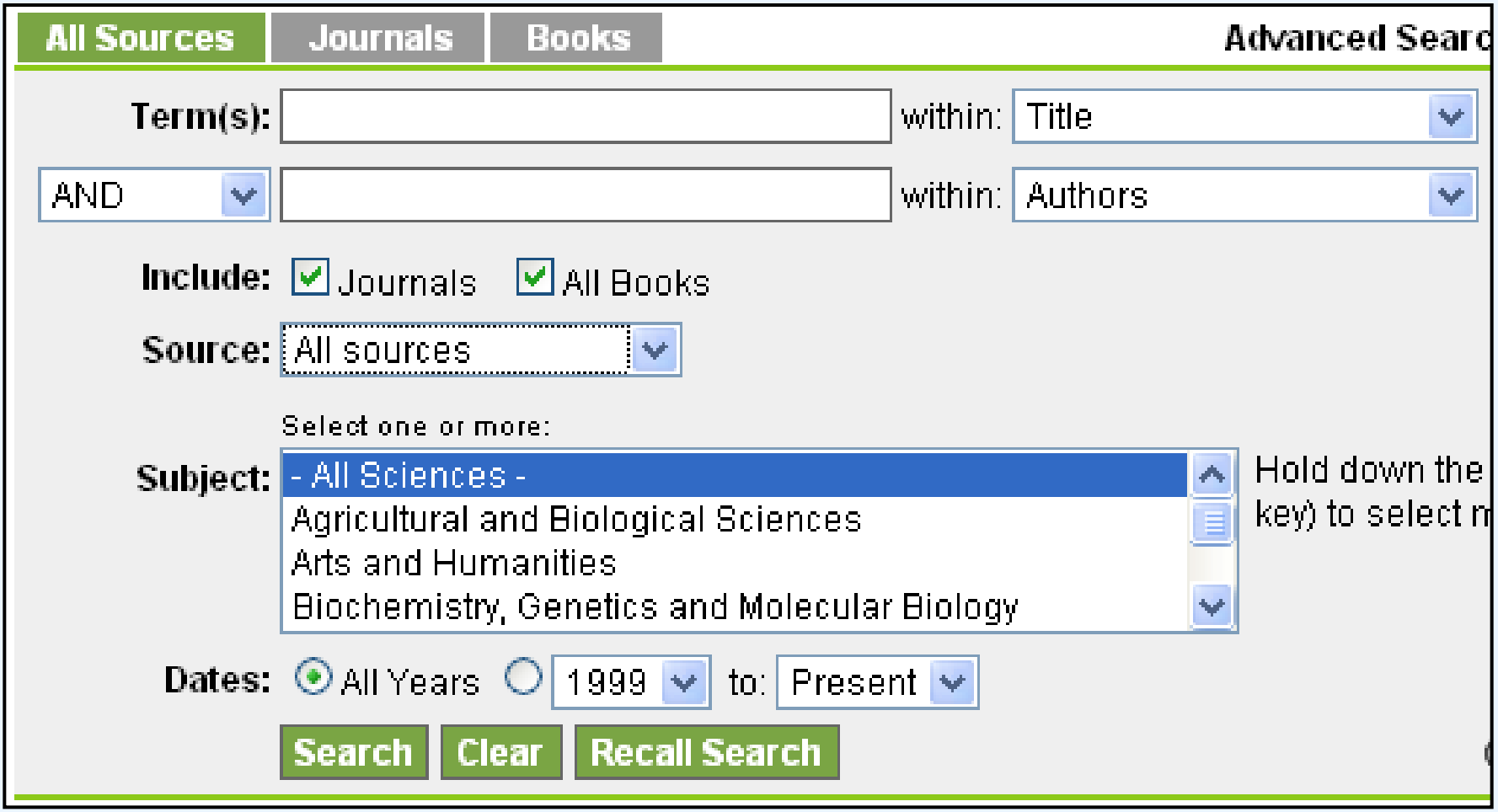
Пример бланка Quick Search:

Поиск по двум разным полям; использование булевых операторов; выбор временного интервала.

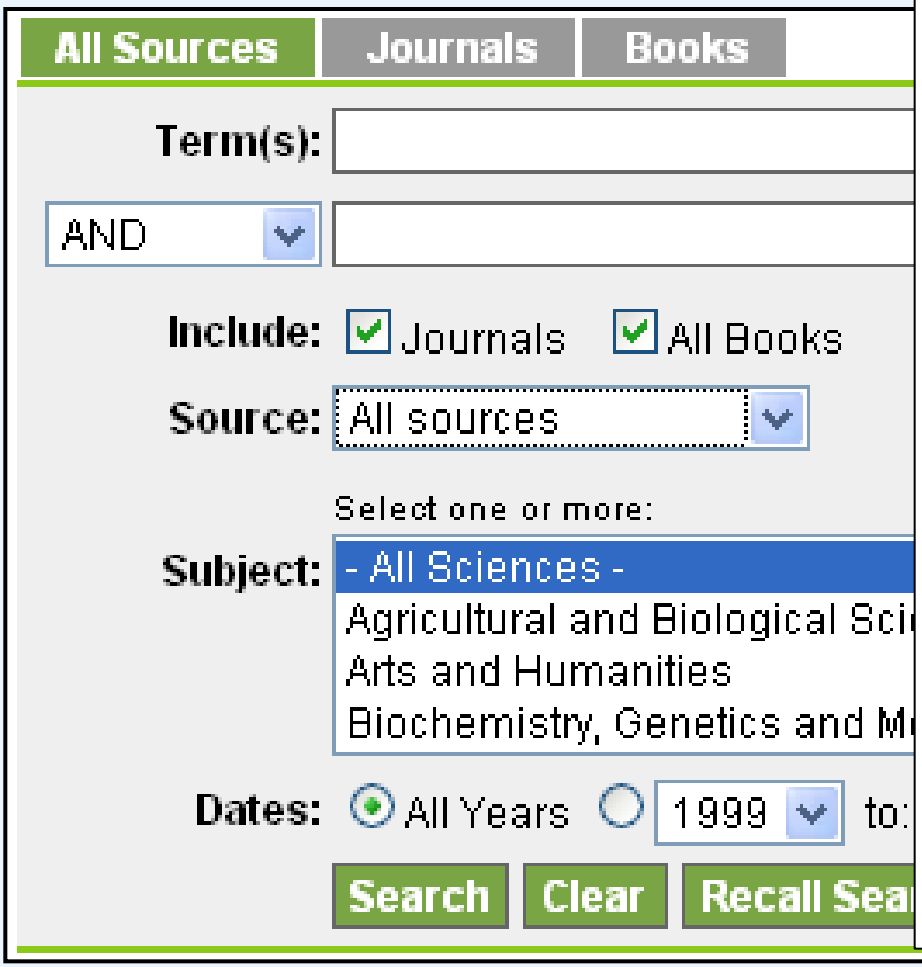


Поисковый бланк - 3

Пример бланка Advanced Search:



Элементы бланка



- Графа бланка (редактируемая графа, редактируемое поле).
- Список.
- Меню (выпадающий список).
- Переключатель.
- Выключатель.

- Текстовые пояснения.
- Ссылка на иной бланк.
- Ссылка на блок инструкций.
- Кнопка начала поиска.

Список результатов поиска

Пользователь получает результаты поиска в форме списка обнаруженных документов.

Список может быть сформирован:

- по алфавиту,
- в хронологическом порядке (прямом или обратном),
- по релевантности.

Релевантность

Релевантность документа –
степень соответствия его поисковому заданию.

При расчете релевантности учитываются:

- количество поисковых терминов в документе,
- расстояние между ними в тексте,
- число упоминаний каждого из них,
- их плотность,
- их порядок расположения,
- их место – в начале записи или в конце,
- и др.

О достоверности информации

Традиционная vs. онлайновая

- Печатная литература
  автор известен
  контроль со стороны издателя

- Научная литература
  система **рецензирования** (peer review)

- Веб-источники
  анонимность, отсутствие контроля – почти норма

Достоверность информации лежит в широких пределах:
от объективной - до субъективной,
от полностью достоверной - до ложной
и до намеренно сфальсифицированной

Оценка ресурса

В основе оценки онлайнового источника лежат известные критерии оценки печатных источников:

Репутация автора;
Контроль качества;
Объективность изложения;
Актуальность.

Плюс веб-специфика:

- *Рекламные* блоки могут казаться частью документа.
- *Отсканированный* и оптически распознанный текстовый материал редко выверяется корректорами.
- Содержание веб-страницы может быть изменено *несанкционированно* (атака хакера, прихоть администратора).

- Проблемы субъективности/достоверности особенно остро проявляются в *форумах* и *блогах*.

Стиль

Лингвистика

Явные признаки низкокачественного ресурса:

- Обилие опечаток и грамматических ошибок.
- Развязный стиль изложения.

Дизайн

Эксперт тщательно оценивает содержание,
а обычный потребитель больше доверяет
внешнему виду страницы.

Формальный анализ URL

Доменное имя

достоверность выше:

.gov .edu .ac.uk . ac.jp

достоверность ниже:

livejournal.com

Папки

повысить бдительность:

~... private, members

Предпочтительны

Сайты:

- университетов,
- научных обществ,
- научных издательств,
- официальных патентных бюро,
- авторитетных коммерческих организаций,
- персональные сайты ученых.

Стремимся работать с первоисточниками и интенсивно используем свой мозг