EESTI NSV TEADUSTE AKADEEMIA TOIMETISED. KEEMIA
ИЗВЕСТИЯ АКАДЕМИИ НАУК ЭСТОНСКОЙ ССР. ХИМИЯ
PROCEEDINGS OF THE ACADEMY OF SCIENCES OF THE ESTONIAN SSR. CHEMISTRY

1986, 35, 1

УДК 002.513.5+681.3 https://doi.org/10.3176/chem.1986.1.10

Маре ЛИЙК, Илона КЫРГЕМА, М. КОРВ, Г. РАЯЛО

АВТОМАТИЗИРОВАННЫЙ ИНФОБАНК ПО ХИМИИ РЕТРОХИМ

Mare LIIK, Ilona KÕRGEMA, M. KORV, G. RAJALO. AUTOMATISEERITUD KEEMIAALANE INFOPANK *RETROHIM*

Mare LIIK, Ilona KÕRGEMA, M. KORV, G. RAJALO. AUTOMATIC INFORMATION SYSTEM *RETROKHIM*

(Представил О. Эйзен)

Приступая к решению новых производственных, научных или проектных задач, а также оценивая экономичность, перспективность и патентную чистоту предлагаемых технических решений, исполнитель нуждается в быстром получении полной информации по данному вопросу, опубликованной в течение длительного промежутка времени, например в течение десятилетия. Такой т. н. ретроспективный поиск информации без применения ЭВМ трудоемок, неоперативен и занимает значительную часть рабочего времени научного сотрудника или инженера. Несколько лет тому назад автоматизированные системы ретроспективного поиска были еще сравнительно мало распространены, и химики Академии наук СССР, согласно данным соответствующего анкетирования [1], тратили в среднем 22% своего рабочего времени на поиск информации, причем высококвалифицированные научные сотрудники — еще больше. Если бы все научные сотрудники и инженеры нашей страны сумели сократить затраты времени на просмотр литературы на 10%, это было бы равносильно увеличению числа научных работников на 25 тысяч и числа инженеров на 75 тысяч человек [2].

Исходя из вышеизложенного и принимая во внимание достаточно большое количество химических производственных и научных учреждений в республике, представилось целесообразным создать в рамках Эстонской республиканской системы научно-технической информации банк химической библиографической и патентной информации РЕТРОХИМ. Этот автоматизированный инфобанк создали в Институте химии АН ЭССР. В доставке информации и программного обеспечения оказал содействие Эстонский НИИ научно-технической информации и технико-экономических исследований.

РЕТРОХИМ создан на базе малой ЭВМ ЕС 1022 с оперативным запоминающим устройством 512 Кбайт, которая имеет следующее периферийное оборудование:

1. Шесть накопителей на магнитных дисках типа ЕС 5061, каждый по 29 Мбайт.
2. Четыре накопителя на магнитных лентах типа ЕС 5010.
3. Дисплейная станция типа ЕС 7920 с шестью дисплеями.
4. Алфавитно-цифровое печатающее устройство (АЦПУ) типа ЕС 7032.

Программная система накопления и поиска РЕТРОХИМ построена, в основном, на базе пакета прикладных программ АСОД [3], поскольку этот пакет программ предъявляет минимальные требования к ресурсам ЭВМ и количеству обслуживающего персонала, позволяя при этом проводить довольно быстрый поиск как по текстовым элементам (надписи, рефераты, ключевые слова), так и по другим признакам (индекс рубрикатора, международный класс, автор, год издания и пр.). Обычным является комбинированный поиск, например из библиографической информации с помощью ключевых слов в пределах данного индекса рубрикатора. Поиск проводится на основе запроса, составленного в виде логических предложений. Эти предложения могут состоять из одного термина, нескольких терминов или предложений, объединенных логической связью. Максимальное число логических предложений из ключевых слов в одном запросе 50.

Результаты поиска выводятся сначала на экран дисплея, а затем, по желанию пользователя, печатаются с помощью АЦПУ. Система позволяет просмотреть найденные литературные источники документов и отобрать из их множества те, которые удовлетворяют пользователя. С применением диалогового режима пользователь может в ходе сеанса уточнить или исправить свой первоначальный запрос, изменить требования по найденным источникам, перейти на другой режим поиска, изменить состав элементов, выводимых на экран, и т. д., пока получится требуемый результат. Поиск облегчается также возможностью получения информации о структуре баз данных, словарях ключевых слов и пр. При первоначальном просмотре информации обычно целесообразно вывести на экран лишь надпись литературного источника, ключевые слова, индексы классификации. Эти данные позволяют уже с достаточной точностью определить ценность источника с точки зрения пользователя и принять решения по корректированию дальнейшего запроса.

В качестве примера приведем поиск по теме «Синтез и свойства антиагрегативных простагландинов (карбациклины)» за 1982 год. Для просмотра словаря вводились усеченные термины CARB и КАРБ. В ответ на экране дисплея появилось 54 дескриптора по термину CARB и 69 дескрипторов по термину КАРБ. Число найденных документов (литературных источников), содержащих эти дескрипторы, было 169 и 191 соответственно, но большинство из них оказалось ненужным с точки зрения потребителя. Поэтому было проведено дальнейшее ограничение поиска. Интересующими дескрипторами оказались CARBAANALOG и SYNTHESIS. Поиск проводился по запросу, где ключевые слова CARBAANALOG (с маскированным окончанием) и SYNTHESIS связаны логическим оператором & (И), и проходил в пределах рубрикатора с индексом 19.19.10.9. В результате поиска был получен лишь один, но нужный литературный источник, распечатка которого приводится на рисунке.

Химическая информация на магнитных лентах, приемлемая для автоматизированной обработки, доставляется главным образом из двух источников:

1. Библиографически-ключевая (БК) информация из ВИНИТИ — 24 файла в год.

2. Патентная информация из Научно-производственного центра «Поиск» — 52 файла в год.

Оба вида информации записываются на отдельные магнитные диски.

Учитывая технические возможности малой ЭВМ и вышеуказанного периферийного оборудования, пока целесообразно накапливать лишь

```
PARINGI:    OTSING SYSTEEMIS DIASOD          19.06.85    CTP. 2

N OTBETA     1    N ДОКУМЕНТА 5401            БАЗА KEEMIA82
AUTORID:    ARAI, YOSHINOBU, KONNO, MITOSHI, SHIMOJI,
            KATSUICHI, KONISHI, YOSHITAKA, NIWA, HARUKI, TODA,
            MASAAKI, HAYASHI,MASAKI
AVALDKP:    1982XXXX
DOKLAAD:    01
DOKUMENT:   0000005401
KEEL:       АНГЛ. K045
KOIDE:      30
LKNR:       379-382
OSA:        BWП.=1
PEALKIRI:   SYNTHESIS OF ('+-')-CARBA-ANALOGS OF 5-HEPTE AND
            LEUKOTRIENE A(,4), UNSTABLE INTERMEDIATES OF SLOW-
            REACTING SUBSTANCE (SRS), CHEM. AND PHARM. BULL.
RUBRINDX:   19.19.10.9
TEKCT:
  SYNTHESIS OF ('+-')-CARBA-ANALOGS OF 5-HEPTE AND LEUKOTRIENE
A(,4), UNSTABLE INTERMEDIATES OF SLOW-REACTING SUBSTANCE
(SRS), CHEM. AND PHARM. BULL.
  AK  ПРИРОДНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ  AC  5-ГИДРОПЕРОКСИ-
ЭЙКОЗАТЕТРАЕНОВАЯ КИСЛОТА РАЦ-КАРБА-АНАЛОГИ  O  ЛЕЙКОТРИЕН A(,
4)  AH  НЕСТАБИЛЬНЫЕ ПРОМЕЖУТ, "KABЛ"МЕДЛЕННО РЕАГИРУЮЩЕГО В-
ВА"KABП" (SRS), СИНТЕЗ ========= КОНЕЦ ВЫДАЧИ НА ЗАПРОС
==========================================================
```

1/10 годового объема БК и 1/40 годового объема патентной информации и проводить ретроспективный поиск за четыре года.

Информация накапливается по следующим темам.

1. Синтетическая органическая химия:
   ювеноиды и феромоны, терпеновые душистые вещества,
   простагландины, поверхностно-активные вещества.
2. Общая и теоретическая органическая химия:
   реакция присоединения по месту двойной и тройной связи,
   разделение углеводородов,
   новые методы синтеза кетонов и альдегидов.
3. Хроматография и масс-спектрометрия.
4. Переработка твердых горючих ископаемых:
   горючие сланцы, сапропели, битуминозные пески.
5. Физическая химия:
   термодинамика, термохимия, равновесие растворов.
6. Математическое моделирование химико-технологических процессов.

Объем инфобанка РЕТРОХИМ составляет в настоящее время по БК информации 17 000, по патентной — 21 000 наименований. В дальнейшем предусмотрено создание отдельных программно-ориентированных баз данных по тонкому органическому синтезу и по комплексному использованию горючих сланцев.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Черный А. И., Шулов Л. М., Калинина Т. Р., Ермакова И. А., Мищенко Т. Л.* Химики АН СССР и их информационные потребности. — В кн.: Информационные проблемы современной химии. М., 1976, 5—24.
2. *Потапов В. П., Кочетова Э. К.* Химическая информация. М., 1979.
3. Разработка международного центра научной и технической информации. 1978 г. М., 1978.

Институт химии
Академии наук Эстонской ССР

Поступила в редакцию
15/VIII 1985