

Нанотехнологическая информатика – направление развития информационных технологий¹

В.А. Шахнов, Л.А. Зинченко

Аннотация. Переход к новой парадигме научных исследований, базирующейся на сборе, обработке и анализе данных, требует проведения комплекса взаимосвязанных работ в области нанотехнологической информатики – новом направлении в науке. Обсуждается ряд проектов, выполненных в области нанотехнологической информатики в мире и в Российской Федерации. Приведены критические области, требующие проведения первоочередных исследований в области нанотехнологической информатики.

Ключевые слова: нанотехнологии, нанотехнологическая информатика, анализ данных.

Введение

Повышение эффективности научных исследований и переход к инновационной экономике в современном информационном обществе возможны при переходе к новой парадигме научных исследований, базирующейся на широком использовании последних достижений в области информационных технологий.

Наука как вид познавательной деятельности зародилась на основе исследований природных явлений. Первоначальная парадигма научных исследований, базирующаяся на дедуктивном подходе, была сформулирована в сочинении «Organum» («Органон») Аристотеля [1] более 2-х тысяч лет назад. Однако на основе этой парадигмы открытия делались на основе случайного поиска и многолетних наблюдений.

Научная революция XVII века, связанная, в первую очередь, с именами Ньютона и Декарта, базировалась на новой научной парадигме. Фрэнсис Бэкон теоретически ее обосновал в «Novum Organum» («Новом Органоне») [2]. Основной идеей предложенной парадигмы был переход от традиционного дедуктивного под-

хода (от общего к частному) к подходу индуктивному (от частного к общему).

Появление вычислительных машин и сложности получения аналитических решений для множества практически важных задач привели к необходимости перехода к использованию новой, третьей парадигмы научных исследований, связанной с моделированием различных сложных явлений и широким применением численных методов.

Дальнейшее развитие информационных технологий в XXI веке и потребности инновационной экономики требуют перехода на новую научную парадигму, базирующуюся на эффективном использовании множества различных данных, имеющих в том числе различную физико-химическую природу. В настоящее время проведение научных исследований базируется на гетерогенных источниках информации, получаемых как экспериментально, так и на основе вычислительных экспериментов. Накопление этой информации за последние десятилетия потребовало специальных подходов, позволяющих быстро выполнить поиск и анализ данных, их визуализацию, а также обеспечить

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Президента РФ по государственной поддержке ведущих научных школ (грант НШ-1152.2012.9).

механизмы эффективного поиска и обмена информацией и ее распространения.

Этот этап, получивший название четвертой парадигмы научных исследований [3], позволяет значительно ускорить научные исследования. Доступные вычислительные ресурсы дают возможность эффективно работать с базами данных и знаний, обеспечивать визуализацию данных. Использование распределенных вычислений позволяет решать сложные задачи исследования объектов с меньшими временными затратами. Интернет перестал быть только источником информации. Компьютеры, помимо предоставления вычислительной мощности, могут быть полезны для хранения и анализа данных. Переход к новым методам представления информации позволяет обратиться к новым формам научного познания, базирующимся на управлении данными и статистике.

В настоящее время ускорение научно-технического прогресса наиболее эффективно достигается за счет конвергенции различных областей науки – нанотехнологий, биотехнологий, информационных технологий и когнитивной науки (НБИК) [4]. Необходимо отметить, что НБИК-технологии преимущественно наследуют рационалистическую постановку вопросов теории познания, развитую Декартом, Лейбницем и Кантом, продолжая развивать идеи научной революции XVII века. Эволюционное значение взаимного влияния и взаимного проникновения НБИК-технологий оказывает все большую роль на технологическое развитие мировой индустрии.

Нанотехнологии относятся к одному из перспективных направлений развития инновационной экономики. Результаты исследований в области нанотехнологий оказывают значительное влияние на различные отрасли промышленности. Эти исследования требуют привлечения экспертов в области физики, химии и биологии, в частности, в квантовой теории, описывающей возможные варианты поведения и взаимодействия элементов наноструктур в нанометровом диапазоне; в физическом материаловедении, в особенности в разделе, изучающем свойства наноматериалов; в химическом синтезе, биохимии и молекулярной биологии, описывающих объекты биологического

происхождения и химические процессы синтеза наноструктур и протекающие в самих наноструктурах. Нанотехнологии относятся к областям научных исследований, требующим использования значительных объемов экспериментальных данных, моделирующих комплексов и взаимодействия специалистов в различных, зачастую несмежных областях. Несмотря на полученные за последние годы различные результаты, отсутствуют подходы к унификации и верификации данных.

Основной целью запланированного с 2012 по 2015 год второго этапа «Стратегии развития nanoиндустрии», сформулированной Президентом РФ в 2007 г., является переход к увеличению объема производства нанотехнологической продукции [5]. Однако накопление информации, полученной в ходе выполнения Федеральной целевой программы, организация взаимодействия с производством требуют реализации новой, четвертой парадигмы проведения научных исследований, базирующейся на широком использовании современных информационных систем. Эта задача может быть успешно решена с применением современных подходов для организации, доступа, хранения и пополнения информации в области nanoиндустрии.

Потребности дальнейшего эффективного развития нанотехнологий и, в частности, nanoинженерии, привели к формированию нового направления в области информационных технологий - нанотехнологической информатики [6]. Нанотехнологическая информатика (англ. *Nanoinformatics*) – область знаний, связанная с применением информационных подходов на основе классических компьютеров в нанотехнологиях. Она включает накопление информации, связанной с нанотехнологиями, и разработку средств, позволяющих использовать эту информацию эффективно.

Нанотехнологическая информатика входит как один из составных компонентов в НБИК-технологии. Информационные технологии создают методологическую основу для развития такого междисциплинарного научного исследования, как исследования в области нанотехнологий. Конвергенция, взаимопроникновение наук приводит к синергетическому эффекту и созданию и развитию принципиально новых

методологий, базирующихся на эффективных методах обработки и анализа данных.

Целью данной статьи является обзор выполняемых проектов в области нанотехнологической информатики и выявление областей в нанотехнологической информатике, требующих дальнейшего развития. В данной статье обобщается также опыт, накопленный в ходе выполнения ряда проектов в области развития наноиндустрии в Российской Федерации, выполненных в МГТУ им. Н. Э. Баумана.

Необходимо отметить, что в настоящее время в литературе отмечаются два варианта термина «нанотехнологическая информатика». Часть авторов использует этот термин для исследований в области применения наноразмерных эффектов для построения вычислительных систем на новых принципах. Авторы статьи склоняются к мнению, что для исследований в указанной выше области более корректным является термин «квантовая информатика». В дальнейшем изложении авторы ограничивают область нанотехнологической информатики случаем применения классических компьютеров для хранения и обработки информации, полученной в ходе исследований в области нанотехнологий.

К основным обсуждаемым проблемам следует отнести:

- методики накопления корректных данных в области нанотехнологий и их регулярного обновления;
- программное обеспечение, необходимое для моделирования исследуемых наноприборов, наноматериалов и наносистем;
- вопросы доступности данных и возможность их использования различными пользователями Национальной Нанотехнологической Сети.

1. Нанотехнологическая информатика как основа дальнейшего эффективного развития нанотехнологий

Дальнейшее эффективное развитие нанотехнологий зависит от возможностей эффективно накопления, обработки и обмена информацией, полученной в области нанотехнологий [7]. Нанотехнологическая информатика позво-

ляет использовать потенциал, накопленный в современных информационных технологиях, для проведения научных исследований, организации эффективного производства наносистем, а также обеспечения безопасности нанотехнологий для окружающей среды и потребителя. Нанотехнологическая информатика позволяет повысить эффективность работы во всех областях нанотехнологий за счет использования возможностей современных информационных технологий.

Нанотехнологическая информатика объединяет два научных направления: информатику и нанотехнологии (Рис. 1). Необходимо отметить, что нанотехнологическая информатика не является простой частью информационных технологий или нанотехнологий. Взаимное влияние информатики и нанотехнологий привело к формированию нового направления, включающего в себя элементы информатики и нанотехнологий и стимулирующему дальнейшее развитие, как информатики, так и нанотехнологий. В настоящее время нанотехнологическая информатика включает в себя четыре основных раздела:

- хранение, обработка и управление данными, полученными в области нанотехнологий;
- моделирование наноструктур, наноприборов и наносистем;
- проектирование наносистем;
- обмен данными между различными пользователями, проводящими исследования в области нанотехнологий.

Одной из важнейших задач, относящихся к области нанотехнологической информатики, является разработка информационных систем, позволяющих производить извлечение информации, проверку на корректность включения в указанную информационную систему, хранение, доступ различных пользователей к этой информации, а также анализ имеющейся информации с целью ее практического использования. К области нанотехнологической информатики следует также отнести системы, в том числе интеллектуальные, для разработки и описания параметров наноматериалов, системы проектирования наносистем, разработку усовершенствованных процессов производства наноприборов и наносистем, позволяющих обеспечить охрану окружающей среды и здо-

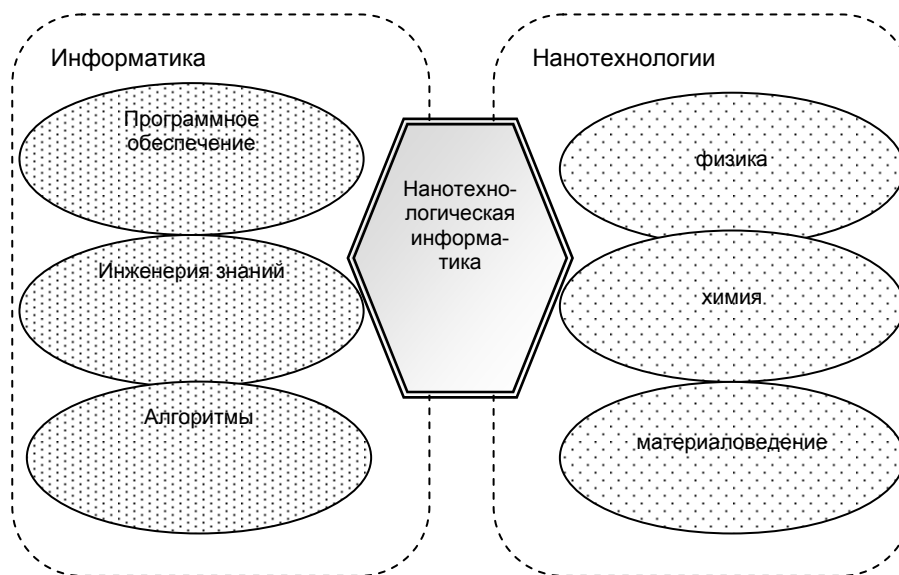


Рис. 1. Связь нанотехнологической информатики с нанотехнологиями и информатикой

ровья потребителей. Эффективные исследования в области нанотехнологий на текущем этапе невозможны без применения инструментов анализа данных (data mining) [8] и машинного обучения (machine learning) [9]. Семантический поиск [10] и онтологии [11] являются одними из мощных инструментов для поиска и многократного использования данных.

Вычислительные системы в наноинженерии [12-14] являются одной из составных частей наноинформатики, ориентированных на решение задач моделирования и проектирования наноматериалов, наноприборов и наносистем и технологических процессов их производства.

Визуализация и анализ полученных экспериментальных данных в области нанотехнологий позволяет выделить перспективные области для дальнейших исследований. Использование моделирующих систем позволяет дополнить экспериментальные данные и скорректировать области дальнейших исследований. Переход к упорядоченным данным позволяет использовать механизмы анализа данных с целью нахождения новых законов и определения областей, требующих дальнейшего исследования. На важность проведения исследований в этой области обращается внимание в отчете по развитию «Национальной нанотехнологической инициативы в США» [15]. Одна из 10 рекоменда-

ций была сформулирована следующим образом: «Широкая поддержка распространения и доступности новой информации о свойствах наноматериалов, доступной для общего использования». Эта задача является одной из важнейших для дальнейшего развития нанотехнологической информатики [6].

Каждая из перечисленных выше проблем включает в себя необходимость проведения работ достаточно большого объема. В частности, необходима систематизация данных по наноматериалам и определение областей неполной или отсутствующей информации. Разработка стандартов для документирования накопленных данных необходима для дальнейшего эффективного развития нанотехнологий в Российской Федерации. Также необходимы исследования в области метаонтологии применительно к области нанотехнологий.

Нанотехнологическая информатика позволяет повысить эффективность взаимодействия исследовательских центров и промышленности. В частности, поставки наноматериалов могут дополняться сертификатами, содержащими информацию об их структуре и характеристиках. Использование систем моделирования позволит предсказать особенности процесса производства и учесть эти особенности при проектировании и разработке технологических процессов.

2. Нанотехнологическая информатика в мире

В настоящее время в мире накоплен первоначальный опыт в области нанотехнологической информатики. Выполняются различные проекты по этой тематике. Ниже рассматриваются отличительные особенности некоторых проектов, представляющих, на взгляд авторов, наибольший интерес с точки зрения развития нанотехнологической информатики как самостоятельного научного направления.

2.1 Проект Nanohub

Одним из наиболее развитых проектов в области нанотехнологической информатики является проект Nanohub [16]. Работы по этому проекту были начаты в 2002 при поддержке Национального научного фонда США с целью создания национального ресурса для моделирования в области нанотехнологий. Также среди задач было создание сети пользователей в области нанотехнологий. Для создания облачных вычислений в качестве базового программного обеспечения было использовано HUBzero [17]. В основном в проекте используются программы с открытым исходным кодом за исключением ряда лицензионных программ. Предусмотрены также средства визуализации и хранения данных. В настоящее время этим сервисом пользуется свыше 195 тысяч пользователей.

Свыше 230 программ, доступных для использования, включают моделирование наноструктур, МЭМС/НЭМС и т.д. Необходимо отметить, что ресурсами этого визуального исследовательского центра на базе Web возможно пользоваться без установки дополнительного программного обеспечения на компьютер пользователя. На Рис. 2 приведен общий вид ресурса Nanohub. Помимо предоставления пользователям вычислительных ресурсов им доступны также учебно-методические материалы по курсам в области нанотехнологий, с целью последующего обмена материалами и их обсуждения с заинтересованными коллегами.

2.2 Проект ACTION-Grid

Проект ACTION-Grid [18] являлся одним из первых проектов в области нанотехнологической информатики, который был поддержан Европейской Комиссией в рамках 7-й Рамочной программы. Проект выполнялся с 2008 г. по 2010 г. Основное внимание проекта было сосредоточено на анализе новой области – нанотехнологической информатики и установления связей с биоинформатикой и распределенными вычислениями. Был предложен ряд рекомендаций по дальнейшему развитию нанотехнологической информатики в Европе. Дальнейшее развитие проект получил в ряде других проектов, поддержанных Европейским сообществом.

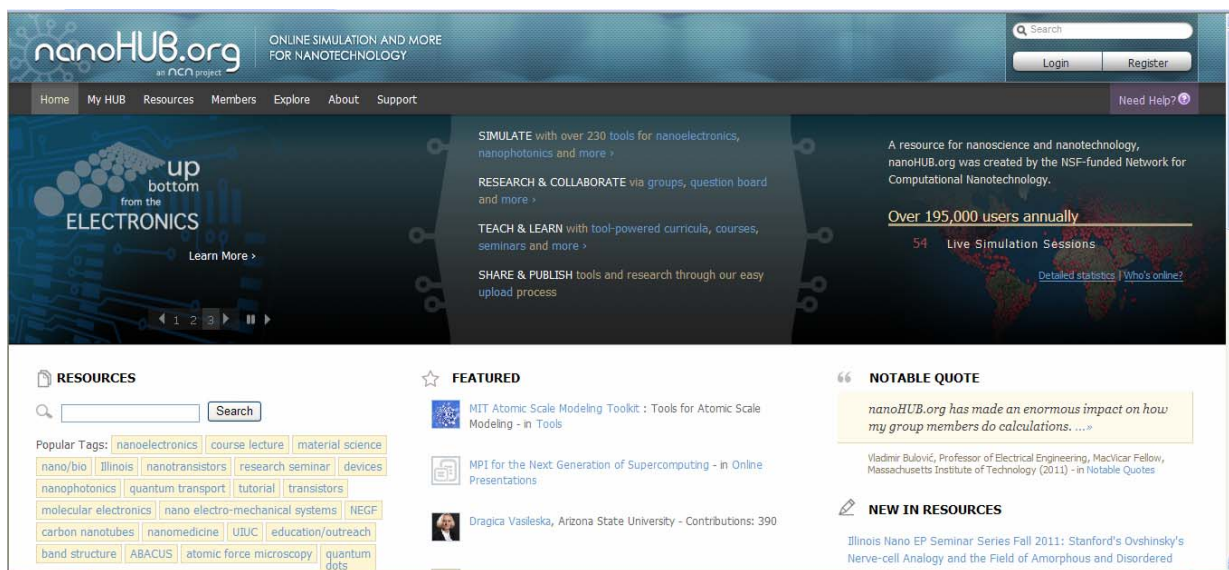


Рис. 2. Общий вид ресурса Nanohub

2.3. Программа CoSMIC

Программа CoSMIC [19] является программой международного сотрудничества в области материаловедения. Ее цель заключается в разработке новых методов применения вычислительных систем и проведения экспериментальных исследований для получения новых материалов. Одним из важных компонентов программы является применение нанотехнологической информатики для понимания механизмов поведения материалов на наноуровне. Еще одной отличительной особенностью этой программы является комбинация методов моделирования и экспериментальных исследований для получения новых знаний о материалах.

2. 4. Проект Nanoparticle Information Library

Проект Nanoparticle Information Library [20] был начат в 2004 г. В настоящее время в базе данных по наночастицам содержится информация по различным наноструктурам, включающая описание метода получения, размера, сканы исследованных структур, области применения этого материала, включая потенциальные, возможность коммерческого применения, список публикаций, контактные данные и др. Пример работы с библиотекой приведен на Рис. 3.

2. 5. Проект InterNano

Проект InterNano [21] был начат в 2008 г. Его целью является информационная поддержка промышленности, работающей в области нанотехнологий. В состав этого ресурса включены сведения о технологических процессах, приборах, метрологические сведения и данные о материалах, которые представляют коммерческий интерес. Необходимо отметить, что база данных включает как технологические процессы, которые могут быть использованы бесплатно, так и патентованные технологические процессы, требующие покупки лицензии. Предложена также классификация наночастиц по различным отраслям научных исследований – биологии, химии, медицины и т.д. На Рис. 4 приведен пример классификации нанотрубок.

В проекте также систематизированы сведения о различных исследовательских центрах в области наноиндустрии.

2.6. База данных по взаимодействию наноматериалов и биологических объектов

Отличительной особенностью этого проекта [22] является разработка экспертной системы по анализу и визуализации данных по взаимодействию наноматериалов с биологическими

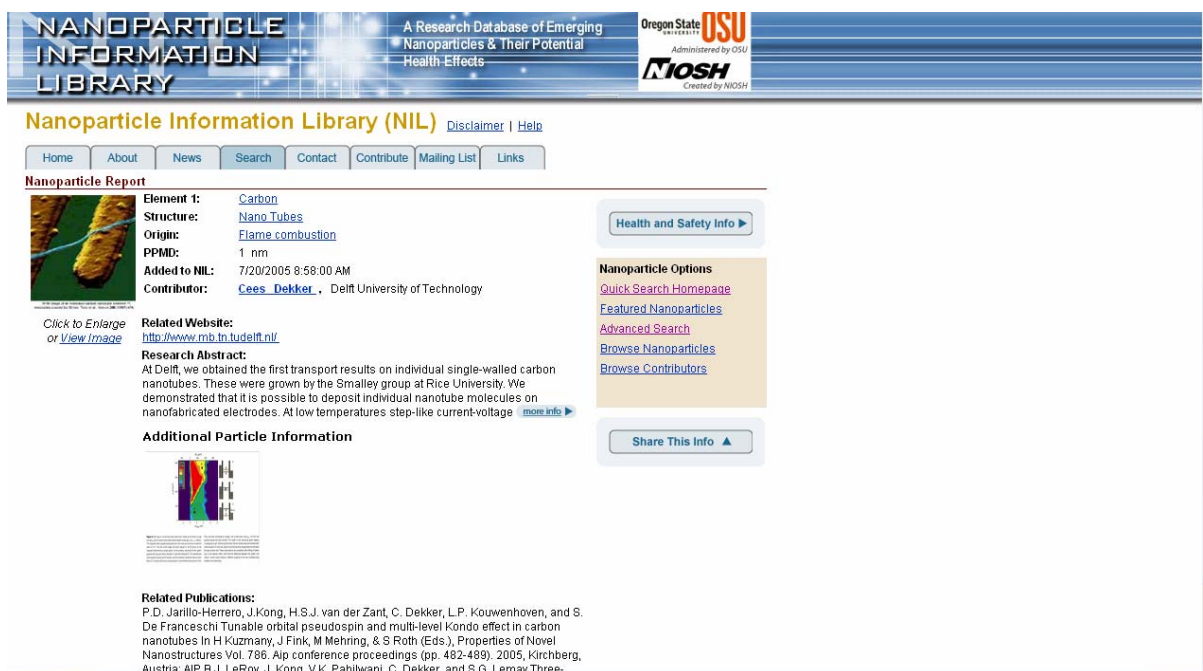


Рис. 3. Пример результата поиска нанотрубки (Проект Nanoparticle information library)

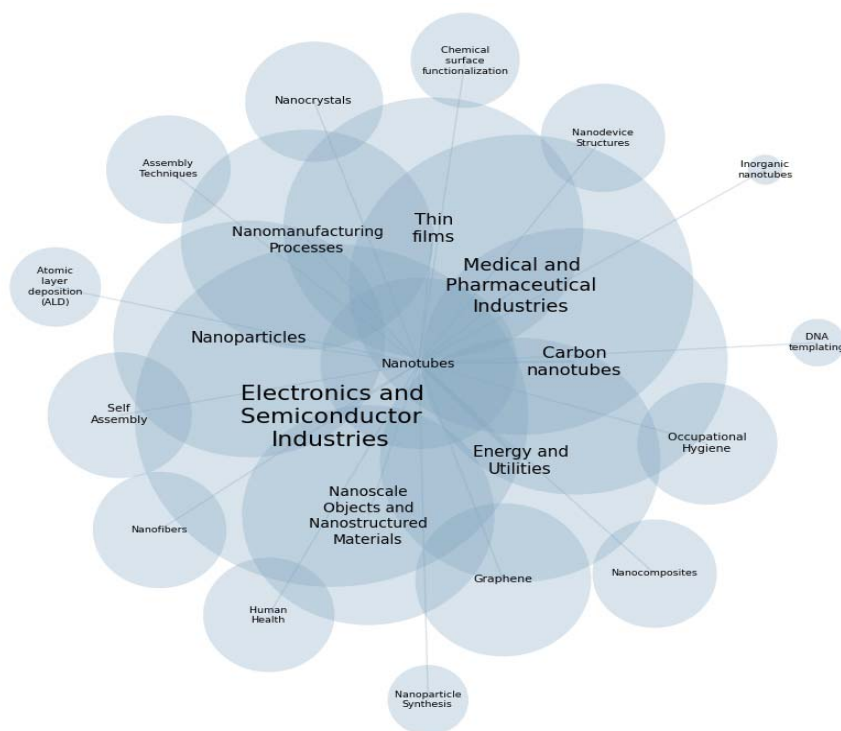


Рис. 4. Пример классификации нанотрубок (проект InterNano)

объектами. В экспертную систему включены библиотека по наноматериалам и программное обеспечение для анализа свойств материалов.

2.7. NPO - онтология наночастиц

Примером использования методов семантической паутины в нанотехнологической информатике является проект по онтологии наночастиц [23]. Использование унифицированных идентификаторов ресурсов URI позволяет построить семантическую сеть, в которой узлы и дуги имеют URI. Для реализации онтологии был выбран язык дескриптивной логики – язык описания онтологий для семантической паутины (OWL). К достоинствам дескриптивной логики следует отнести компактность в представлении данных и разрешимость онтологических задач. Такой подход позволяет учитывать семантику запросов при поиске необходимой информации.

В онтологию наночастиц (NPO) входит 1564 OWL класса, 45 OWL свойств объектов для спецификации связей между классами и 5 OWL аннотационных свойств для аннотации классов и свойств объектов.

На Рис. 5 приведен пример онтологии NPO в редакторе Protege.

Необходимо отметить, что онтологии являются ключевым компонентом в решении проблемы семантизации Web-контента и разработка онтологии наночастиц NPO является одним из примеров применения семантических подходов в нанотехнологической информатике. К недостаткам проекта следует отнести слабую визуализацию разработанной онтологии.

3. Нанотехнологическая информатика в России

В ходе выполнения Федеральной целевой программы «Развитие инфраструктуры наноиндустрии в РФ на 2008–2011 годы» и Федеральной целевой программы «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007-2012 г.г.» был создан ряд ресурсов в области нанотехнологической информатики. Ниже рассматриваются некоторые из созданных ресурсов.

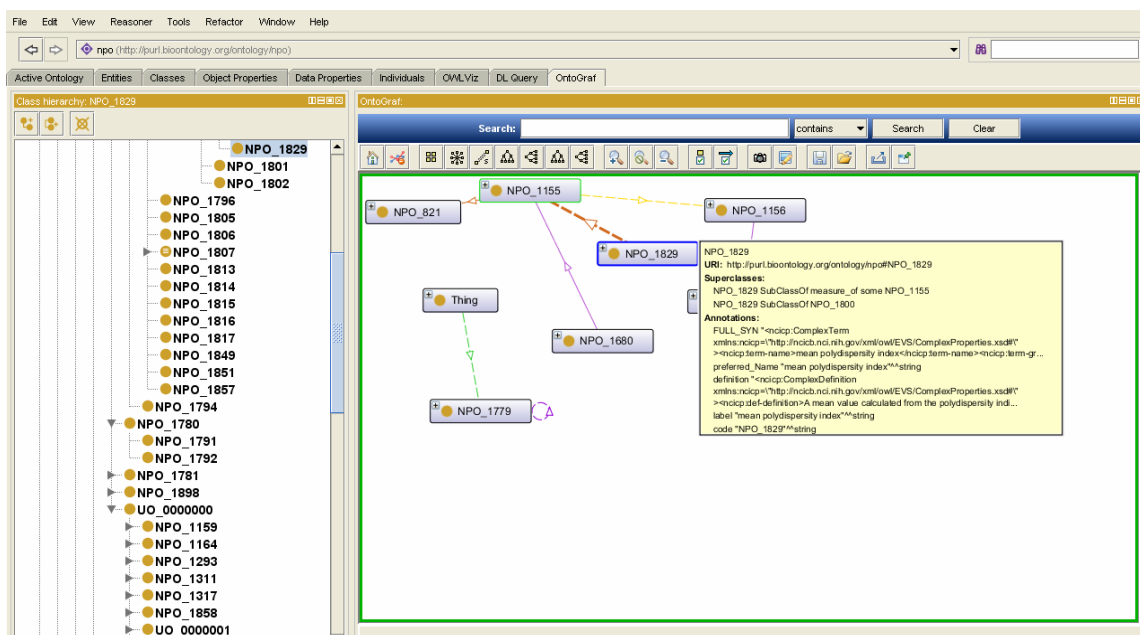


Рис. 5. Пример онтологии по наночастицам

3.1 NanoCloud

Комплекс NanoCloud [24] предназначен для виртуализации и динамического управления вычислительными ресурсами и данными Национальной нанотехнологической сети. Он базируется на технологии облачных вычислений, подборка виртуальных машин, хранилище данных, веб-приложения, веб-сервисы и грид-сервисы. Для создания облачных вычислений в качестве базового программного обеспечения использовано OpenStack [25].

Одним из важных компонентов комплекса NanoCloud является ГридННС [26]. Целью создания ГридННС является обеспечение коллективов - участников Национальной нанотехнологической сети возможностью эффективного удаленного использования вычислительной инфраструктуры Национальной нанотехнологической сети.

В настоящее время созданы четыре виртуальные исследовательские организации, занимающиеся исследованиями в следующих областях:

- квантово-механические расчеты атомных систем;
- молекулярно-динамическое моделирование нано- и биоструктур;

- расчет электронного состояния, строения и физико-химических свойств наноструктур и высокомолекулярных соединений с использованием квантово-химического программного обеспечения;

- расчет свойств наноматериалов для космических аппаратов.

В настоящее время ресурсными центрами являются Объединенный институт ядерных исследований, НИЦ “Курчатовский Институт”, Петербургский институт ядерной физики, Институт проблем химической физики и другие исследовательские центры.

3. 2. Мультисервисный информационно-образовательный комплекс

Проект мультисервисного информационно-образовательного комплекса [27] направлен на поддержку образовательного сегмента Национальной нанотехнологической сети. Комплекс позволяет выполнять вычислительные задачи на Грид-системе, сервисы для организации личного кабинета и виртуальных классов. В состав комплекса включено программное обеспечение, поддерживающее моделирование с использованием квантово-химических, молекулярно-динамических и электродинамических моделей. При этом масштабирование выполня-

ется на число ядер не менее 1000. В настоящее время комплекс включает различные модули в области бионанотехнологий, наноинженерии и наноэлектроники.

3.3. База знаний по технологиям микро- и наносистем

В проекте [28] для структурирования знаний в области технологии микро- и наносистем были применены методы инженерии знаний [11] – отрасли информатики, изучающей модели и методы извлечения, структурирования и представления знаний с целью последующей обработки в информационных системах.

Отличительной особенностью проекта по созданию базы знаний по технологиям микро- и наносистем [28] по сравнению с известными аналогичными системами в области нанотехнологической информатики, например, [23] является использование когнитивных технологий для хранения существующих знаний и генерации новых знаний в области технологий микро- и наносистем. Предложенная новая форма представления знаний в области технологий микро- и наносистем включает в себя визуальные образы понятий, метафору и инверсию понятия. Известно [29], что механизмы познания базируются на таких понятиях, как визуальный

образ, метафора (аналогия) и инверсия понятия. У пользователя комплекса по технологиям микро- и наносистем в процессе работы формируется индивидуальный ментальный опыт, который имеет определенную структурную организацию. Благодаря такой когнитивной структуре возможно дальнейшее познание в области технологий микро- и наносистем, получение новых знаний, понимание, оценка и интерпретация известных результатов.

При описании различных понятий в предложенной в проекте [28] форме представления знаний также указываются семантические свойства понятия и иерархическая декомпозиция понятия. Подобное представление затем позволяет сформировать ментальные модели на основе различных хорошо известных инструментов (интеллектуальных карт, концепт-карт и т. п.) [11].

На Рис. 6 приведен пример описания понятия «Маршруты проектирования микро- и наносистем».

В проекте [28] для построения ментальных моделей выбраны концептуальные карты. Это объясняется тем, что концептуальные карты позволяют более глубоко представить предметную область. Концептуальные карты были разработаны с использованием специализированного программного комплекса ИМС Стар

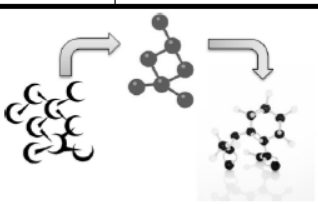
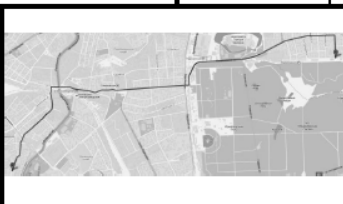
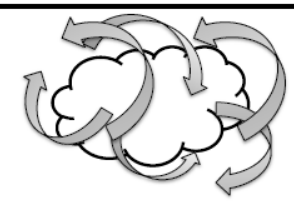
Понятие	Маршруты проектирования микро- и наносистем (Design Routes)		Условное обозначение	МП (DR)
Трактовка понятия	Это последовательность этапов и процедур для описания процесса проектирования микро- и наносистем		Класс по МКИ	В82У
				
Визуальный образ понятия - маршрут проектирования		Метафора (аналогия) понятия - маршрут следования		Инверсия понятия - разупорядоченность
Семантические свойства понятия				
Наименование свойства	Описание свойства	Диапазон возможных значений	Составная часть	Иерархическая декомпозиция понятия
				Свойства
Тип процесса	Что описывает маршрут проектирования	Разработка Моделирование Проектирование	Математическое обеспечение	Результат операции
Размерность	Размерность проектируемых систем	Микро Нано	Алгоритмическое обеспечение	Результат операции Кол-во итераций
Способ описания	Способ описания проектируемой системы	Модель Документ Программная оболочка	Лингвистическое обеспечение	Результат операции Язык программирования
			Информационное обеспечение	Результат операции Носитель информации
			Программное обеспечение	Результат операции Способ распространения Класс
			Программное обеспечение	Результат операции
			Аппаратное обеспечение	Результат операции
			Методическое обеспечение	Результат операции

Рис. 6. Пример описания понятия «маршруты проектирования микро- и наносистем»

Tools [30], предназначенного для создания баз знаний на основе концептуальных карт.

В программный комплекс [28] включено более 600 понятий, в том числе в составе понятий модуля «Компоненты микро- и наносистем» приводятся 77 понятий, в составе модуля «Маршруты проектирования микро- и наносистем» – 58 понятий, в составе модуля «Маршруты производства микро- и наносистем» – 109 понятий, в составе модуля «Методы измерения параметров микро- и наносистем» – 75 понятий и т.д. К недостаткам предложенного подхода следует отнести то, что в текущей версии не поддерживается сохранение построенных карт в формате OWL.

Разработанный комплекс по технологиям микро- и наносистем может быть использован для поддержки интеллектуальной инженерной деятельности в области нанотехнологий, а также при подготовке специалистов в области наноинженерии. При этом использование при разработке информационной системы когнитивных технологий позволяет обеспечить конвергенцию нанотехнологий, информационных технологий и когнитивных методов в едином комплексе.

3. 4. Нанотехнологический образовательный портал Nanohub.ru

Проект «Нанотехнологический образовательный портал Nanohub.ru» [31] включает в себя учебно-методический комплекс «Многомасштабное моделирование в нанотехнологиях» и «Виртуальные приборы и метрология. Микроскопия». В проекте также предусмотрен сервис обработки изображения на основе технологии Simagis Live.

В комплекс «Многомасштабное моделирование в нанотехнологиях» включено программное обеспечение, позволяющее выполнить моделирование на нано-, микро- и макроуровнях. Ядром учебно-методического комплекса является виртуальный лабораторный практикум NanoModel 2.3, включающий одну из самых популярных программ GAMESS для квантово-химических расчетов [14]. Для визуализации результатов расчета используется пакет JMOL [12].

В учебно-методический комплекс «Виртуальные приборы и метрология. Микроскопия» включены лабораторные работы, позволяющие изучить принцип работы атомно-силового мик-

роскопа, растрового электронного микроскопа и просвечивающего электронного микроскопа.

Разработанные методики анализа изображений позволяют изучить работу с реальными изображениями и изображениями, полученными в ходе вычислительных экспериментов.

Заключение

Проведенный в статье краткий анализ тенденций в области нанотехнологической информатики позволяет сделать вывод, что в ходе первого этапа выполнения Федеральной целевой программы «Развитие инфраструктуры наноиндустрии в РФ на 2008–2011 годы» в Российской Федерации разработан ряд ресурсов в области нанотехнологической информатики. Созданные учебно-методические комплексы могут быть использованы как в учебном процессе, так и при повышении квалификации сотрудников предприятий. Однако сравнение с проектами, выполненными в мире, позволяет выработать рекомендации по первоочередным направлениям, требующим пристального внимания в ходе выполнения второго этапа Федеральной целевой программы «Развитие инфраструктуры наноиндустрии в РФ на 2008–2011 годы».

Потребности второго этапа требуют разработки информационных ресурсов, ориентированных на запросы промышленности. Отсутствие сведений о возможных технологических процессах, их особенностях могут затруднить развитие наноиндустрии в Российской Федерации. Выполненные коллективом ученых и специалистов в МГТУ им. Н. Э. Баумана работы в области создания информационного ресурса по технологиям микро- и наносистем требуют дальнейшего развития и расширения предложенной методики информационной поддержки для области технологии производства наносистем. Использование современных средств поиска и извлечения данных позволяет повысить эффективность исследований в области нанотехнологий, перейдя от случайного поиска и блуждания к упорядоченным сериям экспериментов и моделирования. Проектирование наносистем также становится более эффективным при использовании методик анализа данных, машинного обучения, семантического поиска и онтологий. Переход от разрозненных знаний к

их структурированию (на основе ментальных, концептуальных карт и т.д.) и последующая их формализация на основе моделей представления знаний (семантические сети, фреймы и т.д.) позволит в области нанотехнологий значительно ускорить процесс познания, а также упростит установление связей между исследовательскими центрами и промышленностью.

Наличие каталога реальных изображений наноструктур и наносистем позволит обеспечить более эффективное вовлечение промышленности в область нанотехнологий за счет обеспечения простого и наглядного доступа к научным результатам, полученным в области нанотехнологий.

В настоящее время необходима единая информационная система, объединяющая в единое целое данные, средства и инфраструктуру, созданные в ходе выполнения Федеральной целевой программы «Развитие инфраструктуры нанопромышленности в Российской Федерации на 2008—2011 годы» и которые будут созданы на втором этапе этой программы.

В заключение необходимо отметить, что выбор перечисленных выше проблем, требующих, на взгляд авторов, проведения первоочередных исследований в ближайшей перспективе, является субъективным. Другие исследователи могут обратить внимание на другие проблемы. Однако у авторов есть твердое убеждение, что выделенные в статье темы для исследований в области нанотехнологической информатики являются наиболее актуальными.

Литература

1. Аристотель. Сочинения. В 4 т. М.: Мысль, 1975—1983.
2. Бэкон Ф. Сочинения. В 2 т. М.: Мысль, 1977.
3. Hey T, et. al. eds. (2009) The Fourth Paradigm: Data-Intensive Scientific Discovery. Microsoft Research. 284 pp.
4. Ковальчук М. В. Конвергенция наук и технологий – прорыв в будущее. Российские нанотехнологии, 2011, №1-2, с. 13 -23.
5. Постановление Правительства Российской Федерации от 2 августа 2007 г. № 498 «О федеральной целевой программе «Развитие инфраструктуры нанопромышленности в Российской Федерации на 2008—2010 годы».
6. Nanoinformatics 2020 Roadmap.
7. Энциклопедия ЮНЕСКО «Нанонаука и нанотехнологии»// Шахнов В.А., Зинченко Л.А. и др. Изд-во ЮНЕСКО, 2011.
8. Han J.,Kamber M. Data Mining: Concepts and Techniques. Morgan Kaufmann Publishers, 2000. 550 p.
9. Bishop C. M. Pattern Recognition and Machine Learning. Springer, 2006. 738 p.
10. Daconta, M. C., et al. The Semantic Web : A Guide to the Future of XML, Web Services, and Knowledge Management . John Wiley, 2003. 312 p.
11. Гаврилова Т. А., Хорошевский В. Ф. Базы знаний интеллектуальных систем. - С-Пб.: Питер, 2000. - 384 с.
12. Библиотека наноинженерии. Под ред. Шахнова В.А. Москва, 2008.
13. Шахнов В.А., Зинченко Л.А. Особенности применения вычислительных систем в САПР наноинженерии. Вестник МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2010, спец. Выпуск «Наноинженерия», с. 100-109.
14. Шахнов В.А., Зинченко Л.А. Особенности математического моделирования в задачах проектирования наносистем. Информационные технологии и вычислительные системы, №4, 2009. с. 84-92.
15. Report to the President and Congress on the Third Assessment of the National Nanotechnology Initiative, March 12, 2010. (доступен по адресу www.whitehouse.gov/sites/default/files/microsites/ostp/pcast-nni-report.pdf)
16. <http://nanohub.org/>
17. <http://hubzero.org/>
18. <http://www.action-grid.eu>
19. <http://cosmic.mse.iastate.edu>
20. <http://nanoparticlelibrary.net>
21. <http://www.internano.org>
22. <http://nbi.oregonstate.edu/>
23. <http://www.nano-ontology.org>
24. <http://www.nanocloud.su/>
25. <http://www.openstack.com/>
26. <http://www.ngrid.ru>
27. <http://miok.nanogrid.kiae.ru/>
28. <http://cluster.iu4.bmstu.ru>
29. Величковский Б.М. Когнитивная наука. Основы психологии познания. М. Смысл: Издательский центр «Академия». 2006. 448 с.
30. <http://cmap.ihmc.us>
31. <http://nanohub.ru>

Шахнов Вадим Анатольевич. Заведующий кафедрой в МГТУ им. Н.Э. Баумана. Окончил Московское высшее техническое училище им. Н.Э. Баумана в 1966 году. Доктор технических наук, профессор, член-корреспондент РАН. Автор более 180 печатных работ из них 7 монографий и 14 учебников и учебных пособий. Область научных интересов: информационные технологии, наноинженерия, микро- и нанозлектроника. E-mail: shakhnov@mail.ru

Зинченко Людмила Анатольевна. Профессор МГТУ им. Н.Э. Баумана. Окончила Таганрогский радиотехнический институт в 1987 году. Доктор технических наук, профессор. Автор более 200 печатных работ из них 12 монографий и учебных пособий. Область научных интересов: информационные технологии, САПР, моделирование. E-mail: lzinchenko@bmstu.ru