АВТОМАТИЗИРОВАННЫЕ МЕТОДЫ ОБРАБОТКИ И АНАЛИЗА ДАННЫХ ПО СВОЙСТВАМ ВЕЩЕСТВ В БАЗЕ ДАННЫХ ОРГАНИКА

Богомольный А.М., Круковская Н.В.
Институт органической химии им. Н.Д.Зелинского РАН, г.Москва

Богомольный А.М.
Круковская Н.В.
ИОХ РАН

В Институте органической химии им. Н.Д.Зелинского РАН имеется крупнейшая в России база данных ОРГАНИКА, которая содержит численные значения физико-химических, пожаровзрывоопасных и токсикологических свойств органических соединений и их смесей, а также ряда неорганических соединений, наиболее часто применяемых в химических производствах. Численные значения свойств соединений и их смесей (фактографическая информация) отбираются из мировой научно-технической литературы. Это около 300 журналов, издающиеся в 20 странах на 19 языках, а также справочники, монографии, энциклопедии, диссертации, материалы различных конференций, симпозиумов, семинаров и ряд других литературных источников. Создание фактографических баз данных является сложной и трудоёмкой научно-технической задачей. Специалисты, проектирующие химические процессы, знают, насколько жизненно необходима информация, содержащаяся в подобных базах данных, примерами которых являются базы данных DETHERM, DIPPR, производимые в Германии и США. База данных ОРГАНИКА помимо предоставления данных, почерпнутых из мировой литературы, имеет ряд дополнительных функциональных возможностей, которых нет в зарубежных аналогах. В полном тексте доклада подробно рассмотрены научные проблемы, связанные с разработкой автоматизированных методов математического, термодинамического и химического анализа найденных в литературе значений, с согласованием данных различных авторов, с выбором рекомендуемых значений, отличающихся повышенной надёжностью, с прогнозированием отсутствующих в литературе данных, с разработкой новых методов прогнозирования свойств веществ с повышенной точностью на основе современных информационных технологий.

Литература

1. *Богомольный А.М., Хуторецкий В.М.* О полноте информации по физико-химическим свойствам органических соединений и их смесей // НТИ, сер.1, 1999, №6, С.33-35.
2. *Богомольный А.М., Сировский Ф.С., Круковская Н.В.* Новые возможности фактографических баз данных по свойствам веществ // Материалы 6-ой международной конференции НТИ-2002, Москва, 16-18 октября 2002 г., С.60-61.
3. *Sirovski F.*S., *Bogomolny A.M., Krukovskaya N.V.* // Russian Thermophysical Properties Database “Organika” // 15-th Symposium on thermophysical properties, June 22-27, 2003, Boulder, Colorado, USA, P.94.