РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

ВСЕРОССИЙСКИЙ ИНСТИТУТ НАУЧНОЙ И ТЕХНИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИИ
(ВИНИТИ)

НАУЧНО • ТЕХНИЧЕСКАЯ
ИНФОРМАЦИЯ

Серия 2. ИНФОРМАЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ И СИСТЕМЫ

ЕЖЕМЕСЯЧНЫЙ НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ СБОРНИК

Издается с 1961 г. № 7 Москва 2012

ИНФОРМАЦИОННЫЙ АНАЛИЗ

УДК 004.932.72 : 54

А. Л. Осипов, Л. К. Бобров

Об использовании моделей статистического распознавания в системе виртуального скрининга химических веществ

Описываются математические модели, основанные на применении методов математической статистики и машинного обучения, предназначенные для решения задачи виртуального скрининга химических веществ. Проводится оценка эффективности моделей на большом экспериментальном материале.

Ключевые слова: *математические модели, информационные системы, распознавание образов, анализ данных, виртуальный скрининг*

ВВЕДЕНИЕ

Огромный объем существующих и вновь синтезируемых коллекций химических соединений создает ситуацию, в которой становится невозможным их тотальный традиционный скрининг, что заставляет искать новые эффективные методы прогнозирования их биологической активности. Поэтому в последние годы активно развиваются технологии виртуального скрининга, основанного на компьютерном моделировании активности соединений и предназначенного для предварительного отбора тех соединений, к которым впоследствии будут применяться дорогостоящие методы реального скрининга. При этом особенно важную роль играет предсказание профиля активности, когда для сокращения объема выборки соединений, обладающих требуемыми свойствами, используются специальные вычислительные процедуры рационального отбора соединений-кандидатов для их последующих испытаний.

В настоящее время известно большое количество алгоритмов и программ для проведения виртуального скрининга, однако проблема еще не решена, поскольку для процедур виртуального скрининга, как и для традиционного, очень важное значение имеют эффективность, стоимость и время, затраченное на операцию. Исходя из этого, следует отметить, что для получения необходимого результата далеко не всегда требуется использование сложных вычислительных процедур. В настоящей статье описываются модели статистического распознавания образов, положенные в основу системы автоматизированного управления массовыми испытаниями химических веществ на биологическую активность, и показывается эффективность их использования в задачах виртуального скрининга.

ЭТАП 1. ПРОГНОЗИРОВАНИЕ КЛАССА АКТИВНОСТИ ХИМИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ

На начальном этапе виртуального скрининга определяется предполагаемый класс активности химических веществ. Для решения этой задачи предлагается использовать байесовские алгоритмы принятия решений, а также различного рода марковские зависимости [1 – 4].

Для проверки эффективности этого подхода была выбрана база данных по мировому ассортименту пестицидов, которая содержала информацию о 2500 веществ трех типов биологической активности: гербицидной, инсектицидной и фунгицидной. В качестве неактивных веществ был взят структурный файл 2800 соединений из атласа спектров $ЯМР^{13}С$, а признаками являлись следующие типы дескрипторов:

- микрофрагмент – связь – микрофрагмент с учетом первого окружения с отметкой кратности повторения дескрипторов в структурной формуле;
- те же дескрипторы с указанием нахождения микрофрагмента в цепи или кольце;
- микрофрагмент с указанием валентности, кратности нахождения в структуре, размещения в цепи или кольце;
- микрофрагмент с указанием валентности, кратности нахождения в структуре, а также метками, показывающими, в цепи или кольце находятся он и его связи.

Задача выявления критериев распределения соединений по классам «активные – неактивные» (а внутри класса активных по трем типам активности) решалась с использованием вышеназванных множеств дескрипторов и байесовских решающих правил. Результаты решения задачи показали, что при применении минимаксного правила условные вероятности ошибок составляют от 10 до 15% в зависимости от типа используемых дескрипторов, полученных по достаточно большой выборке. Кривые ошибок на обучении и экзамене практически не различаются, что свидетельствует об устойчивости полученных оценок процента ошибок при использовании соответствующих решающих правил.

Для выработки критериев определения типа активности соединения, если оно признано активным, выборка активных соединений была разбита на три группы активности: гербицидную, фунгицидную и инсектицидную. Решения принимались по байесовскому решающему правилу для многих классов и дескрипторам первого типа. Результаты, характеризующие число правильных ответов и ошибки, приведены в табл. 1.

Таблица 1

Число правильных ответов и ошибки при прогнозе активности

Предъявлено	Прогнозируемый класс активности			Процент ошибок
	гербицид	фунгицид	инсектицид	
Гербициды	1024	34	28	6
Фунгициды	29	600	25	9
Инсектициды	33	32	876	7,4

Испытание на больших массивах данных показало, что использование алгоритмов статистического распознавания позволяет, в зависимости от вида биологической активности (порог в решающих правилах выбирается исходя из того, чтобы не пропустить активное соединение), отсеивать от 40 до 60% заведомо неактивных химических веществ [1 – 4].

ЭТАП 2. ТОКСИКОЛОГИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА ХИМИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ

В силу того что значительное место в проблеме поиска новых высокоэффективных и безопасных для человека и окружающей среды химических веществ занимает задача прогноза параметров токсичности органических соединений (LD_{50}, CK_{50} и др.), критерием отсеивания на втором этапе виртуального скрининга являлась токсикологическая оценка химических веществ [5 – 7], прошедших первый этап. Необходимость практического решения этой задачи диктуется следующими обстоятельствами. В ходе разработки и эксплуатации технологических процессов наблюдается отставание во времени и неполнота обоснования санитарно-гигиенических нормативов на используемое сырье, полупродукты, продукты и отходы, поскольку при использовании традиционных методов нормирования и существующих мощностях токсикологических лабораторий необходимой токсикологической оценке и гигиеническому регламентированию подвергается не более 10% новых химических веществ. При проведении поисковых исследований (синтеза и биологических испытаний) существует острая необходимость возможно более ранней оценки токсичности новых химикатов с целью дополнительной фильтрации токсичных целевых соединений и полупродуктов. К тому же применение химических веществ требует тщательной проверки их безопасности для людей и окружающей среды и связано с использованием большого числа дорогостоящих тестов.

Альтернативным решением является математическое моделирование характера процесса взаимодействия химического вещества и живых организмов с

использованием фактографических банков данных по показателям токсичности. На стадии синтеза новых соединений и композиций токсикометрия позволяет осуществлять целенаправленный отбор менее токсичных и опасных соединений, используя для этого целый набор качественных и количественных критериев. Широкое использование при таком отборе математических методов, компьютерных технологий и фактографических банков данных позволяет отсеивать заведомо неактивные или высокотоксичные вещества, тем самым значительно сокращая сроки создания физиологически активных соединений с заданными токсикологическими свойствами.

Теоретической базой для построения математических моделей прогноза и развития расчетных методов определения токсичности является объективно существующая связь между токсическим действием вещества, его физическими свойствами и химической структурой. В данной статье исследуются эмпирические обобщения в форме современных методов и моделей многомерной регрессии, а также теории распознавания образов. В качестве информационной поддержки моделей использовался фактографический банк данных по токсичности органических молекул объемом в 4624 соединения различных структурно-химических классов.

Предсказание LD_{50} осуществлялось в два этапа. На первом этапе создавался качественный прогноз, позволяющий определить класс токсичности или опасности вещества, что является весьма актуальной задачей, так как во многих химических исследованиях нет необходимости строгой оценки параметров токсичности и достаточно знать классы опасности веществ. На втором этапе в каждом из классов токсичности строились оптимальные регрессионные зависимости и по ним осуществлялся количественный прогноз.

Модель качественного прогноза

Прогноз класса токсичности строился на основе моделей и алгоритмов распознавания образов и теории статистических решений. Задача распознавания образов рассматривалась применительно к случаю двух классов. Это весьма распространенный случай, так как при любом другом числе классов последовательным разбиением на два класса можно построить разделение на произвольное число k классов. Для этого достаточно провести k разбиений по принципу: отделить элементы первого класса от смеси остальных, затем элементы второго класса от остальных и т. д.

Обозначим через H_1 соответствующий класс токсичности. Будем рассматривать объекты обучающей выборки, входящие в H_1, как положительные примеры класса H_1, а объекты, не входящие в H_1, – как контрпримеры, или отрицательные объекты класса H_1, множество которых обозначим через H_2.

Запишем бинарный вектор наблюдений X в виде $(d_1, d_2, \ldots, d_n)$, где d_1=1 или 0 в зависимости от того, присутствует или отсутствует i-й фрагмент структуры в описании соединения. Обозначим через $p_i = P(d_i = 1/H_1)$ и $q_i = P(d_i = 1/H_2)$ вероятности появления i-го дескриптора в классах H_1 и H_2 соответственно.

Предположив условную независимость, можно записать условные плотности распределения вероятностей в каждом классе в виде произведения вероятностей для компонент вектора наблюдений:

$$P(X/H_1) = \prod_{i=1}^{n} p_i^{d_i}(1-p_i)^{1-d_i},$$

$$P(X/H_2) = \prod_{i=1}^{n} q_i^{d_i}(1-q_i)^{1-d_i}.$$

При этом отношение правдоподобия определяется выражением:

$$\frac{P(X/H_1)}{P(X/H_2)} = \prod_{i=1}^{n}\left(\frac{p_i}{q_i}\right)^{d_i}\left(\frac{1-p_i}{1-q_i}\right)^{1-d_i}.$$

Прологарифмировав данное отношение правдоподобия и приведя подобные члены, получим байесовскую решающую функцию:

$$l(X) = \sum_{k=1}^{n} d_k l_k + l_0,$$

где $l_k = \log\dfrac{p_k(1-q_k)}{q_k(1-p_k)}$ – информационный вес k-го дескриптора,

а $l_0 = \sum_{k=1}^{n}\log\dfrac{1-p_k}{1-q_k}$ – константа.

Байесовское решающее правило, минимизирующее среднюю вероятность ошибки, запишется следующим образом:

если $l(X) > \log\dfrac{p(H_2)}{p(H_1)}$, то $X \in H_1$, иначе $X \in H_2$.

При выводе решающего правила мы исходили из того, что потери при правильной классификации равны нулю, а при ошибочной – единице.

При построении систем распознавания возможны такие ситуации, когда априорные вероятности появления объектов соответствующих классов $p(H_1)$ и $p(H_2)$ неизвестны. В этом случае рационально использовать минимаксный критерий, который минимизирует максимально возможное значение среднего риска. Тогда решающая граница выбирается так, чтобы обеспечить равенство ошибок первого и второго рода, которые соответственно равны:

$$\varepsilon_1 = \int_{H_2} P(X/H_1)dX,$$

$$\varepsilon_2 = \int_{H_1} P(X/H_2)dX.$$

Оценка величин p_i и q_i осуществляется по конечному числу выборочных представителей образов в соответствующих классах:

$$p_i = \frac{h_{i1}+1}{N_1+2},\ q_i = \frac{h_{i2}+1}{N_2+2},$$

где h_{i1}, h_{i2} – числа встречаемости i=го дескриптора в первом и втором классах, а N_1, N_{i2}– объемы обучающих выборок в этих классах.

Проверка работоспособности и эффективности решающего правила проводилась на обучающих выборках по определению класса токсичности, указание которых вместе с выбором информативных подструк-

турных фрагментов осуществлялось автоматически при помощи оригинальной СУБД и системы запросов к базе данных. Вся выборка разбивалась на четыре класса опасности. Первый класс содержал 479 соединений, показатель токсичности которых лежал в интервале $0<LD_{50}\le 50$, второй – 654 соединения и $50<LD_{50}\le 200$, третий – 1402 соединения и $200<LD_{50}\le 1000$, а четвертый – 2809 соединений и $LD_{50}>1000$.

В качестве признакового пространства использовались подструктурные дескрипторы, порождаемые автоматически и описанные на весьма простом языке, а именно на языке описания атомов и функциональных групп с учетом их валентного состояния, а также их цепочки произвольной длины с указанием атома или группы в цепи, кольце или мостике. Информативность дескрипторов оценивалась по критерию дивергенции Кульбака:

$$D_i = \frac{N_1 N_2}{N_1 + N_2}(p_i - q_i)l_i \ ,$$

который является мерой различимости двух выборок по i-му признаку (выбирались те из них, у которых значения критерия превышали пороговое значение).

Отнесение химического соединения к соответствующему классу токсичности производилось по значениям $1-\varepsilon_2^k$, где ε_2^k – ошибка второго рода для k-го класса в зависимости от отношения правдоподобия l, а значение k, на котором достигается $\max_u(1-\varepsilon_2^u)$, и является номером класса опасности.

При проведении вычислительных экспериментов точность предсказания (процент правильных решений) при скользящем контроле по выбранным классам токсичности колебалась в пределах от 89 до 95%.

Модель количественного прогноза

Количественный прогноз осуществлялся на основе неаддитивных моделей с использованием понятия о парциальных вкладах структурных элементов. Используемые параметры структурно-неаддитивных моделей имеют вид:

$$f = f_0 + \sum_{k=1}^{m} f_k d_k ,$$

где f_k – парциальный вклад k-х структурных элементов в параметр f,

d_k – доля k-х структурных элементов в молекуле,

$$d_k = \frac{n_k}{\sum_{i=1}^{m} n_i}.$$

В нашем случае в качестве параметра f использовался нормированный показатель токсичности $\ln\frac{LD_{50}}{M}$, где M – молекулярная масса. В каждом классе опасности строились оптимальные регрессионные уравнения, в которых величины f_k определялись исходя из экспериментальных данных с использованием устойчивого метода наименьших квадратов.

В качестве подструктурных элементов использовались следующие типы подграфов:

- атомы (фрагменты) с валентным состоянием (например: –*O*–);
- атомы (фрагменты) с учетом первого окружения (например: *CH* = *C* = *O*);
- цепочки атомов (фрагментов) произвольной длины без указания промежуточных вершин, но с указанием промежуточных связей (например: $CH---CH_2$).

Результаты одного из вычислительных экспериментов с применением скользящего контроля и дисперсионного анализа приведены в табл. 2.

Известно, что основной параметр токсичности $\lg LD_{50}$ определяется в экспериментах на животных, причем обычно стандартное отклонение, связанное с погрешностью эксперимента, находится в пределах 0.3–0.5 [8]. В статье [8] также отмечено, что естественная биологическая вариабельность этой величины еще больше, поскольку она зависит от возраста животных, времени года и еще многих факторов, определяющих ее резистентность.

Анализ ошибок наблюдателя для соединений, неправильно классифицированных по байесовскому алгоритму, показал, что при прогнозе количественных значений LD_{50} относительные ошибки их предсказания не превосходят 94%. Приведенные в табл. 2 результаты вычислительного эксперимента подтверждают высокую эффективность предложенного подхода к компьютерному расчету параметра токсичности LD_{50}, сравнимую с экспериментальным определением этой величины.

Таблица 2

Результаты вычислительного эксперимента

Показатели	Классы токсичности			
	I	II	III	IV
Остаточная сумма квадратов	86,32	74,79	160,33	364,42
Сумма квадратов регрессии	1814,52	568,60	1275,80	11760,44
Полная сумма квадратов	1899,84	643,39	1436,13	12124,86
Средний квадрат регрессии	36,29	11,37	25,52	235,21
Дисперсия ошибок	0,289	0,164	0,163	0,251
Стандартная ошибка	0,538	0,405	0,404	0,501
Коэффициент детерминации	0,955	0,884	0,888	0,970
Коэффициент корреляции	0,977	0,940	0,943	0,985
Критерий Фишера	126	70	157	936
Процент необъясненного стандартного отклонения LD_{50}	21,2%	34,1%	33,4%	17,3%
Средняя относительная ошибка	23%	20%	19%	17%

Пример прогноза

В качестве примера приведем машинный прогноз параметра токсичности LD_{50} для соединения с химическим названием o-chlorobenzylidene malononitrile, которое ранее в исследуемую выборку не входило и имеет экспериментальное значение токсичности 178 мг/кг. При качественном прогнозе система отнесла данное соединение ко второму классу опасности. Результаты количественных прогнозов по моделям, описанным выше, и по программе TopKat [9] приведены в табл. 3.

Таблица 3

Сравнительные результаты количественных прогнозов

Модель прогноза	Прогноз, мг/кг	Абсолютная ошибка	Относительная ошибка, %
Авторская модель	146,9	31,1	17,5
Модель пакета TopKat	285	107,0	60,1

Следует отметить, что коммерческий пакет программ TopKat имеет стандартное отклонение, связанное с погрешностью прогнозирования, равное 0,62 и коэффициент корреляции 0,721. Таким образом, прогноз по разработанным моделям дает более высокую точность, чем пакет TopKat, а созданная компьютерная система позволяет повысить достоверность получаемых научных результатов и существенно снизить трудоемкость исследовательских работ за счет качественно нового их уровня.

ЭТАП 3. ПРОГНОЗ ЛИПОФИЛЬНОСТИ

На предыдущем этапе отсеивается от 25 до 40% химических веществ. Оставшиеся соединения отправляются на третий этап, критерием прохождения которого является показатель липофильности химических веществ, характеризующий их подвижность в биологических системах. Для оценок этого параметра используются данные о коэффициентах распределения молекул между органической и водной фазами.

В нашем случае применялись модели, которые уточняют структурно-аддитивные схемы посредством учета влияния окружения исходных структурных фрагментов (в качестве которых были взяты атомы с учетом валентного состояния) через локальные физико-химические свойства, в первую очередь электронные и стерические.

В качестве исходных факторов при конструировании моделей неаддитивных вкладов использовались спектры плотностей физических свойств (локальных зарядов и ван-дер-ваальсовых радиусов) по отношению к вершинам молекулярной структуры [10].

Применяемые модели позволяют получить высокую точность при расчете параметра липофильности на основе дескрипторов графов структурных формул органических молекул и других дескрипторов, связанных с физико-химическими свойствами. Достигнутая в рамках этого подхода погрешность расчета липофильности составляет 0,1 – 0,2 в зависимости от химического класса, а на разнородных классах (экспериментальная выборка содержала 3500 соединений) ошибка на контрольной выборке составляет 0,31 [5, 11].

Пример прогноза

В табл. 4 приведен прогноз липофильности для соединения 9, 10-dihydroanthracene, которое не входило в обучающие выборки и имеет экспериментальное значение, равное 4,25 [12].

Таблица 4

Пример прогноза липофильности

Метод	Значение	Остаток
Прогноз по [12]	4,55	-0,3
Прогноз по программе Med-Chem	4,67	-0,42
Прогноз по модели настоящей статьи	4,2	-0,05

В ходе проведенного вычислительного эксперимента было показано, что при применении минимаксного правила условные вероятности ошибок разделения на два класса (слаболипофильные и сильнолипофильные соединения) составляют 9% и этот этап позволяет отсеивать от 20 до 30% неперспективных химических соединений.

СИСТЕМА КОМПЬЮТЕРНОЙ ПОДДЕРЖКИ

На сегодняшний день нами разработана автоматизированная информационно-поисковая система, оснащенная математическими процедурами статистического моделирования токсикологических свойств химических веществ и состоящая из подсистемы поддержки профессиональных структурно-химических баз данных и знаний и подсистемы прогнозирования токсикологических свойств органических молекул с учетом или без учета их физико-химических параметров.

Данная система позволяет:

- создавать обучающие и экзаменационные выборки из баз данных;
- задавать или выбирать из меню различные описания химической структуры или иных признаков;
- выбирать различные модели статистической обработки данных для построения решений о принадлежности к тому или иному классу токсичности, а также структурно-аддитивные и неаддитивные математические модели, которые используются для нахождения количественных корреляций «структура – свойства» [13].

Прогноз токсикологических параметров веществ осуществляется с использованием моделей теории распознавания образов и кусочно-линейных регрессионных моделей, где интервалами линейности являются классы опасности химических соединений.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Модели и методы математической статистики и теории игр, несмотря на их относительную простоту, давно и успешно используются в решении различного рода практических задач, связанных с обработкой документальных баз данных, выбором стратегий в условиях неопределенности, созданием информационно-аналитических систем и др. [14 – 17]. В настоящей работе показано, что несмотря на развитие

более сложных подходов классические модели статистического распознавания образов могут успешно применяться в задачах виртуального скрининга химических веществ, показывая при этом результаты, не уступающие существующим промышленным системам виртуального скрининга, а в ряде случаев и превосходящие последние.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Осипов А. Л., Нигматуллин Р. С., Пузаткин А. П., Коптюг В. А. Статистический метод предсказания биологической активности многоатомных молекул на основе дескрипторов графов структурных формул // Хим.-фарм. журнал. – 1985. – №2. – С. 179 – 185.
2. Осипов А. Л. Система компьютерного анализа химико-биологических данных // Материалы 9-й Всерос. науч.-техн. конф. «Теоретические и прикладные вопросы современных информационных технологий». – 2008. – С. 65 – 68.
3. Осипов А. Л. Система компьютерного моделирования радиопротекторных свойств органических веществ // Материалы ежегодной всероссийской научной школы-семинара «Методы компьютерной диагностики в биологии и медицине». – 2008. – С. 171 – 175.
4. Осипов А. Л. Система поддержки принятия решений в химии и биологии // Материалы 21-й Междунар. науч. конф. «Математические методы в технике и технологиях (ММЕЕ-21)». – 2008. – С. 120 – 124.
5. Зацепин В. М., Осипов А. Л., Семенов Р. Д. Система компьютерного предсказания физико-химических и биологических свойств веществ // Автометрия. – 1995. – №5. – С. 86 – 91.
6. Осипов А. Л., Семенов Р. Д. Модели прогнозирования токсикологических свойств химических веществ // Автометрия. – 1995. – №6. – С. 101 – 106.
7. Осипов А. Л. Математические методы прогнозирования токсикологических характеристик химических веществ // Математические методы в прикладных исследованиях : сб. науч. трудов. – Новосибирск : НГУЭУ, 2010. – Вып. 4. – С. 87 – 94.
8. Павленко Ю. С., Никонов А. М. Прогнозирование распространения загрязнений в приземном слое атмосферы // Гигиена и санитария. – 1993. – № 6. – С. 34 – 37.
9. Meyer D. E., Warr W. A., Love R. A. Chemical Structure Software for Personal Computers // Amer. Chem. Society. – Washington, 1988. – P. 176.
10. Осипов А. Л., Зацепин В. М. Математическая параметризация химических соединений как распределений физических свойств на молекулярных структурах // Математические методы в прикладных исследованиях : сб. науч. трудов. – Новосибирск : НГУЭУ, 2003. – С. 48 – 58.
11. Осипов А. Л. Модель расчета липофильности органических соединений на основе нейронных сетей // Математические методы в прикладных исследованиях : сб. науч. трудов. – Новосибирск : НГУЭУ, 2010. – Вып. 4. – С. 79 – 81.
12. Camilleri P., Watts S. A., Boraston J. A. A surface area approach to determination of partition coefficients // J. Chem. Soc. Perkin Trans. II. – 1988. – №9. – P. 1699.
13. Осипов А. Л. Компьютерные методы решения задачи скрининга химических веществ с заданными свойствами // Математические методы в прикладных исследованиях : сб. науч. трудов. – Новосибирск : НГУЭУ, 2010. – Вып. 4. – С. 81 – 87.
14. Осипов А. Л., Башелханов А. А., Борисов М. В. Система моделирования параметров, представляющих эффекты биологической среды // Автометрия. – 1998. – №3. – С. 54 – 61.
15. Баженов С. Р., Бобров Л. К., Елепов Б. С., Нигматуллин Р. С. Автоматическая классификация документов на основе применения методов распознавания образов / препринт 89-5. – Новосибирск : ГПНТБ СО РАН, 1989. – 46 с.
16. Бобров Л. К., Щеглов Ю. А. Учет рисков при выборе стратегий управления информационными продуктами и услугами // Вестник НГУЭУ. – 2012. – №2. – С. 233 – 243.
17. Стариченко В. Ф., Морозов С. В., Бобров Л. К. Создание автоматизированной информационно-аналитической системы в области охраны окружающей среды // Окружающая среда и экологическая обстановка в Новосибирском научном центре СО РАН : сб. науч. трудов. – Новосибирск : Изд-во СО РАН, 1995. – С. 244 – 245.

Материал поступил в редакцию 02.05.12.

Сведения об авторах

ОСИПОВ Александр Леонидович – кандидат технических наук, доцент, зав. кафедрой прикладных информационных технологий Новосибирского государственного университета экономики и управления «НИНХ»

E-mail: osipov@nsuem.ru

БОБРОВ Леонид Куприянович – доктор технических наук, профессор кафедры экономической информатики, первый проректор Новосибирского государственного университета экономики и управления «НИНХ»

E-mail: bobrov@nsuem.ru

УДК 004.896-022.532

А. М. Петрина

Наноробототехника: моделирование и эксперименты

Анализируются теоретические разработки в области нанороботов, методы построения нанороботов на микроскопическом и молекулярном уровне. Рассматриваются вопросы моделирования нанороботов и их компонентов, вопросы управления и источники энергии. Приводятся экспериментальные результаты и примеры применения.

Ключевые слова: *наноробототехника, нанороботы, нанотехнология, компьютеры, молекулярное производство, углеродные нанотрубки, квантовая механика, квантовые точки, квантовые компьютеры, информационные системы*

ВВЕДЕНИЕ

Наноробототехника – одна из самых молодых технических наук XXI века, которая является составной частью нанотехнологий, занимающихся созданием и модификацией производственных процессов, материалов и систем на основе контролируемого манипулирования отдельными атомами, молекулами и наночастицами. Типичный атом имеет диаметр в несколько ангстрем (1Å = 0,1 нм = 10^{-10} м), размер молекулы – несколько нанометров, наночастицы формируются из миллионов атомов, взаимодействующих с объектами атомного и молекулярного размера. Научно-техническая революция, связанная со становлением и бурным развитием нанотехнологий, коснулась практически всех сфер научно-исследовательской деятельности. Она породила целый ряд так называемых нанонаук, являющихся новыми и наиболее динамично развивающимися специальными разделами соответствующих традиционных наук, ориентированными на изучение нанообъектов: нанофизику (включая наномеханику и наноэлектронику), нанохимию, нанобиологию, наноинформатику (именуемую также квантовой информатикой) [1 – 2]. Наноробототехника является результатом конвергенции этих наук: она занимается исследованием, проектированием и созданием нанороботов и манипулированием объектов нанометрового диапазона.

Человек всегда стремился не просто повторить изобретения природы, но и превзойти их. До сих пор ему это не удавалось, но с созданием нанороботов он может получить реальные шансы на воплощение своей давней «бредовой мечты» – присвоение функции Творца Вселенной, связанной с возможностью по своей воле создавать новый мир на основе биоорганической химии, соединившей физику и молекулярную биологию. Действительно, все объекты на Земле, включая природные материалы и системы, состоят из молекул, и, следовательно, природа «программирует» основные характеристики веществ и явлений на молекулярном, наномасштабном уровне. Именно в связи с этим нанотехнологии сулят человечеству поистине фантастические перспективы «входа в новый мир», призванного обеспечить управляемое построение принципиально новой материи (как «мертвой», так и «живой») с любыми наперед заданными свойствами, причем из самого простого материала, без отходов и с минимальными энергетическими затратами. Поднявшаяся волна интереса к нанотехнологиям существенно обогатила приставку «нано», придав ей магическую силу: «нано» a priori стала подразумевать имидж наукоемкого, передового продукта, причем с гарантированно высокими показателями эффективности и качества.

Наноробототехника находится на начальном этапе своего развития и вызывает у одних людей недоверие, у других эйфорию, у третьих реальное осмысление. Следует отметить, что в некоторых публикациях будущие нанороботы представляются наподобие маленьких человечков, которые способны делать за нас всё и бесплатно. Очевидно, что эти прогнозы и рассуждения основываются на аналогиях, а не на каких-либо строгих расчетах. Поскольку нанотехнологии пришли из мира будущего в мир настоящий, можно надеяться, что наноробототехника – это не миф, а красивая мечта, которая в недалеком будущем станет явью, и нанороботы прочно войдут в нашу жизнь.

В данной статье предпринимается попытка рассмотреть специфические особенности наноробототехники, обсудить некоторые теоретические разработки, проанализировать методы построения нанороботов и представить некоторые экспериментальные результаты.

ОСОБЕННОСТИ ПРОЕКТИРОВАНИЯ НАНОРОБОТОВ И НАНОУСТРОЙСТВ

Идея создания наномехатронных систем, или молекулярных машин, или нанороботов, основанная на атомно-молекулярной сборке, именуемой наномехатронным подходом или молекулярным производством, предложена Р. Ф. Фейнманом [3] и Э. К. Дрекслером [4]. Благодаря их исследованиям появились наномашины, которые теоретически способны собрать себя и самореплицироваться, ис-

пользуя методы механического синтеза, самореплликации и «саморемонта».

Поскольку наномашины представляют собой атомно-молекулярные образования, они обладают определенной спецификой, обусловленной особенностями наномасштабной физики. Эта специфика включает в себя:

1) сверхсложность, обусловленную астрономическим числом элементов (1 г наносистемы может содержать 10^{19} штук деталей, которые могут совершать более 10^{12} циклических перемещений в секунду);

2) функционирование посредством химических реакций, которые подразумевают электронные и/или ядерные перестановки;

3) подверженность тепловым колебаниям, а также воздействиям физических полей и излучений;

4) возможность изменять положение своих элементов относительно друг друга в результате воздействия внешних факторов;

5) информационную неопределенность состояния вследствие корпускулярно-волнового дуализма в наномире;

6) потребность в энергии для функционирования и в каналах информационной связи с внешним миром.

Наномехатронные системы наиболее полно реализуют замкнутую через внешнюю среду триаду «сенсоры – процессоры – приводы», сочетая в себе максимально возможные степень интеграции и уровень интеллектуализации задач обработки информации и управления.

ТЕХНОЛОГИЯ ИЗГОТОВЛЕНИЯ НАНОРОБОТОВ И НАНОУСТРОЙСТВ

Технология изготовления нанороботов и наноустройств связана с постижением предельно возможного «молекулярного» масштаба, который настолько мал, что человеческое воображение практически не способно сколько-нибудь адекватно его представить. В отличие от традиционных технологий нанотехнологии характеризуются повышенной наукоемкостью, затратностью, а также междисциплинарностью и неэффективностью решения задач методом «проб и ошибок», который, как правило, и используется в сложных прикладных разработках. В связи с этим использование традиционного стиля мышления и общепринятой методологии при проектировании нанороботов оказывается чрезвычайно сложным. Это сопряжено с проведением большого объема фундаментальных и прикладных научных и технологических исследований, направленных на разработку способов изготовления необходимых комплектующих элементов и создание технологических инструментов и установок для осуществления соответствующих сборочных процессов. Рассмотрим некоторые принципиальные теоретические и прикладные проблемы современной наноробототехники.

Основной теоретической проблемой наноробототехники, как и наномехатроники, является отсутствие удовлетворительного научного фундамента [6]. Имеются лишь некоторые инструменты эмпирического исследования и накоплено большое число феноменальных опытов. В частности, до сих пор отсутствует теория молекулярного синтеза. Более того, отсутствуют параметрические модели атомов и молекул, отражающие их размеры, энергию связи и энергию парных взаимодействий, на основе которых должен проводиться расчет синтезируемых молекулярных структур.

Принципиальная трудность создания нанороботов заключается в их проектировании, которое основывается на методах компьютерного моделирования. Расчет конструкции системы настолько трудоемок и сложен, что для его осуществления не хватает мощности даже современных суперкомпьютеров. На молекулярном уровне вместо макроскопических законов классической механики, используемых для расчета обычных макросистем, вступают в действие законы квантовой механики. При проектировании приходится учитывать силы поверхностного натяжения, сухого трения, вязкости, электростатические и магнитные силы, а также собственные колебания, диффузию атомов, броуновское движение, ядерный распад, «горячие» частицы и т. п. Кроме того, любая молекулярная структура может иметь несколько энергетически выгодных состояний, а поскольку ее образование в реальных условиях протекает вдали от равновесия, на нее оказывают существенное влияние даже незначительные возмущающие воздействия. В связи с этим при синтезе молекулярных систем необходимо учитывать их неустойчивость и высокую реакционную способность, которые могут привести к изменению структуры и потере необходимых свойств, при взаимодействии с окружающей средой.

Для ускорения процесса молекулярного синтеза природа использует массовый параллелизм, реализуемый самосборкой на основе самоорганизации, самовосстановления и эволюционного отбора хорошего решения. Однако в существующих нанотехнологиях подобные способы параллельной атомно-молекулярной сборки пока не найдены. Для реализации массовой молекулярной сборки, по-видимому, в наибольшей степени подходит так называемое гибридное производство, которое комбинирует литографию, наноманипулирование и электронную микроскопию.

Основными функционально необходимыми элементами нанороботов являются:

– интеллектуальная информационно-управляющая система со встроенным в нее нанокомпьютером и исполнительная система для выполнения технологических операций;

– система связи для приема и передачи информации;

– сенсорная система для навигации и управления технологическими операциями;

– система энергопитания для получения и/или аккумуляции энергии.

Эти элементы должны уместиться в пределах одного нанороботa примерно в одном миллиарде атомов. Ясно, что реализация каждого из этих элементов представляет собой огромную проблему не только прикладного, но и фундаментального характера. Например, при обмене информацией нанороботa с макроскопической системой (человеком) встает вопрос о достоверности этой информации, поскольку, в силу

принципа неопределенности, она может быть либо неопределенной, либо искаженной в результате действия «эффекта наблюдения». Далее, наноробот при движении будет испытывать на себе воздействие броуновского движения, т. е. принимать на себя толчки хаотически перемещающихся молекул и постоянно сбиваться с заданного курса, поэтому встает вопрос о направленности его движения.

Производство нанороботов – это производство наноразмерных объектов с заданной атомарно-молекулярной структурой, которое может строиться на двух стратегиях, известных как технологии *сверху-вниз* (top-down) и *снизу-вверх* (bottom-up). Технология *сверху-вниз* является «прямой» и основана на последовательном многократном уменьшении размеров макро- и микрообъектов путем механической или иной обработки до требуемых нанометровых размеров. Технология *снизу-вверх* является «обратной» и основана на построении наноструктур из отдельных атомов и молекул путем их группировки. Нанопроизводство, реализующее технологию *сверху-вниз*, именуется нисходящим, а реализующее технологию *снизу-вверх* – восходящим.

При реализации нисходящего нанопроизводства в неявной форме предполагается, что уменьшение размеров структур не влияет на их фундаментальные свойства и принципы функционирования. Считается, что свойства вещества при миниатюризации не изменяются, так что проблема для них формально сводится к уменьшению размеров ранее созданных устройств. Если используемая стратегия миниатюризации не противоречит понятным и известным законам природы, то можно придерживаться прежних концепций дизайна. Для производства компонентов наноробототехники это означает, что возможно изготовление новых, более миниатюрных изделий того же типа (но с повышенными характеристиками) путем, например, совершенствования литографических технологий и стандартных материалов на основе ранее существовавших принципов функционирования. Но даже для литографии проблема не является простой, поскольку ее возможности (размеры получаемых структурных элементов) ограничены. В данном случае, помимо сохраняемых теоретических принципов конструирования, необходимо решить весьма непростые технические задачи, связанные с физикой квантовомеханических процессов. При проектировании наносистем мы имеем дело с квантовомеханической реальностью и многие представления и подходы к проектированию, хорошо зарекомендовавшие себя при создании макро- и микроустройств, в области нанотехники могут оказаться неэффективными или даже невыполнимыми. И хотя элементы для нанороботов производятся с применением хорошо отработанных на микросхемах литографических методов, собрать какой-либо объемный автономный объект (наноробот), изолированный от подложки, по этой технологии затруднительно. Тем не менее некоторые функциональные элементы нанороботов уже технологически реализуются. По создаваемой технологии на данный момент наноустройства представляют собой достаточно простые конструкции, не имеющие самостоятельных приспособлений для передвижения и выполняющие специфически простые задачи. По примеру цикловых систем макродиапазона они представляют состояния типа «положение А» / «положение В» или «включено» / «выключено».

Поскольку свойства наноструктур определяются не только природой входящих в них атомов и молекул, но и архитектурой их группировки, в рамках восходящего нанопроизводства возможны две концепции построения нанообъектов: 1) перестройка имеющихся наноструктур, 2) сборка большей наноструктуры из меньшей. Технология *снизу-вверх* представляет наноробот в виде крупной молекулы. Для этого изучаются механизмы, действующие в клетке, выясняется циркуляция информации внутри клетки, работа внутриклеточных регуляторов, взаимодействие между собой генов и белков, общение клетки с соседями и окружающим пространством и т. п. с тем, чтобы потом воспроизвести познанный механизм. Используя новейшие методы квантовой химии, молекулярной динамики и генных технологий, сейчас синтезируют структуры величиной в нанометры. Для реализации этой технологии необходимо иметь проект наносборки, наноматериалы и нанооборудование.

Проект наносборки – это поатомное описание производимого нанообъекта, включающее описание как взаимного расположения атомов, так и химических связей между ними.

Наноматериалы (наносырье) – это исходные «мелкие» (атомы и молекулы) и «крупные» (нанокластеры) сборочные единицы.

Атомы – наименьшие частицы химического элемента, являющиеся носителями его свойств. Всего существует немногим более 100 атомов, причем самый легкий – атом водорода с одним электроном, а самый тяжелый элемент, встречающийся в природе, – атом урана с 92 электронами. Размер атомов приблизительно одинаков и колеблется в диапазоне 0,1 … 0,22 нм.

Молекулы – наименьшие устойчивые частицы вещества, обладающие всеми его химическими свойствами. Они состоят из атомов, скрепляемых в особом порядке химическими связями. Самые простые молекулы содержат всего два или три атома, самые крупные неорганические молекулы могут содержать тысячи атомов, а органические молекулы – миллионы атомов. Размер молекулы, состоящей из более чем 30 атомов, превышает 1 нм.

Нанокластеры – это разновидность частиц упорядоченного строения, состоящая из сотен и тысяч атомов. Нанокластеры имеют размеры порядка десятков нанометров. В качестве строительных блоков наиболее распространены углеродные нанокластеры с каркасной структурой – фуллерены и нанотрубки [7 – 9].

Углеродные нанотрубки обладают уникальными механическими, термическими, электрическими и оптическими характеристиками и в настоящее время рассматриваются как один из наиболее перспективных вариантов развития базовых технологий, на которых по оценкам многих экспертов будет строиться развитие промышленности XXI века. Углеродные нанотрубки являются идеальными кандидатами для применения в наноманипулировании не только из-за подходящих химических характеристик и физиче-

ской структуры, малой массы, исключительной направленной жесткости и удовлетворительной воспроизводимости, но также из-за их уникальных измерительных характеристик, которые позволяют наноразмерным структурам быть реализованными.

Нанотрубки могут быть однослойными и многослойными, вложенными друг в друга, как русские матрешки, закрытыми с обоих концов, открытыми с одного конца или с обоих концов. В предельном случае короткие нанотрубки могут быть наносферами или фуллеренами. В многослойных нанотрубках отдельные слои могут скользить друг относительно друга практически без трения. Благодаря таким уникальным свойствам нанотрубки могут служить основой для построения множества разновидностей функциональных блоков наномеханических систем. На основе нанотрубок можно создавать такие устройства, как наноманипуляторы, зажимы, нанодвигатели со встроенными датчиками положения, наноподшипники, телескопические наноконструкции, нанодиоды, нанотранзисторы, электронные переключатели и т. п.

Однослойная углеродная нанотрубка в идеальном случае представляет собой гигантскую, прочную и упругую молекулу из атомов углерода – длинный (порядка микрона и более) и тонкий (диаметром порядка нанометра) однородный цилиндр, образованный атомами углерода, расположенными в вершинах гексагональной решетки. Такой цилиндр можно рассматривать как свернутую в трубку ленту, вырезанную из слоя графита, причем ориентация ленты относительно поверхности слоя определяет так называемую хиральность нанотрубки, устанавливаемую способами геометрического скручивания слоев трубки. В зависимости от хиральности нанотрубка может обладать как металлическими, так и полупроводниковыми свойствами, причем любое изменение геометрии нанотрубки меняет ее электронные характеристики. Так, скручивание или сгибание металлических цилиндров может менять проводимость трубки, превращая металлическую трубку в полупроводник. Сопряжение полупроводниковой трубки с металлической трубкой (имеющей другой вид хиральности) эквивалентно созданию перехода «полупроводник – металл», который используется для производства элементов в микроэлектронике.

Поскольку длина нанотрубки намного (в тысячи раз) превышает ее диаметр и электронов в трубке находится достаточно много, электрический ток в ней циркулирует по всем классическим правилам – выполняется закон Ома. Однако не так обстоят дела в сечении трубки, ведь в ее диаметр уложится всего лишь несколько длин электронных волн. Значит, чтобы понять электронные качества углеродной нанотрубки, надо в одно и то же время учитывать как классические свойства, так и квантовые эффекты электронов проводимости, т. е. тех электронов, которые находятся в трубке. Этим уникальным свойством углеродные нанотрубки отличаются от других проводников.

Нанооборудование – это нанотехнологические системы, именуемые наноассемблерами или сборочными системами (Atomic Assembler), предназначенные для реализации наносборочных процессов на атомно-молекулярном уровне. Различают атомные и молекулярные наноассемблеры, отвечающие, соответственно, «физической» (атомарной) и «химической» (молекулярной) парадигмам восходящего нанопроизводства. Для наносборки молекулярные наноассемблеры оказываются более предпочтительными, поскольку молекулы являются более стабильными образованиями, обладают четкими формами, имеют необходимые для манипулирования свойства, они могут быть соединены извне или собираться самостоятельно для образования наноструктур. Нанопроизводство и нанотехнологии, основанные на молекулярных ассемблерах, часто именуют соответственно молекулярным производством и молекулярными технологиями.

В развитии восходящего нанопроизводства выделяют два возможных направления, различающихся используемыми типами наноассемблеров для управляемого механического синтеза: 1) химический синтез атомно-молекулярных структур и 2) управляемое механическим путем позиционирование реагирующих веществ, продолжающееся до тех пор, пока не вступят в действие соответствующие химические связи. Первое направление основано на использовании в качестве наноассемблеров сканирующих зондов, второе – нанороботов.

Для организации сборки нанообъектов нанопроизводство должно быть автоматизировано и поставлено на поток. Существуют следующие парадигмы автоматизации восходящего нанопроизводства:

1. Автоматизированная наносборка на основе управляемого оператором-технологом механического синтеза с использованием сканирующих зондов.
2. Автоматизированная наносборка на основе управляемого оператором-технологом механического синтеза с использованием нанороботов.
3. Комбинация первого и второго методов.

АВТОМАТИЗИРОВАННАЯ НАНОСБОРКА НА ОСНОВЕ СКАНИРУЮЩИХ ЗОНДОВ

Первое поколение наносборочных систем появилось в конце 1980-х гг. в виде сканирующих зондовых микроскопов, позволяющих на основе законов квантовой физики измерять, «видеть» и манипулировать нанообъектами, т. е. проводить нанотехнологические операции на атомарном уровне [10]. Различают туннельные, атомно-силовые, магнитно-силовые, электронно-силовые и оптические ближнего поля сканирующие зондовые микроскопы. Широкое использование сканирующих зондовых микроскопов объясняется тем, что с помощью зонда этих приборов можно «потрогать» атомы, определить энергию связи, электронную плотность, при этом измерения можно производить в глубоком вакууме, на воздухе, а также на границе «твердое тело – жидкость».

В настоящее время в наноробототехнике наиболее распространены сканирующие туннельные микроскопы (STM) и атомно-силовые микроскопы (AFM), различающиеся типами взаимодействия зонда с поверхностью обрабатываемого образца. В процессе сканирования в туннельном микроскопе измеряется туннельный ток, а в атомно-силовом микроскопе –

сила взаимодействия между зондом и образцом. На основе данных измерений компьютер микроскопа строит трехмерное изображение, воспроизводящее рельеф поверхности образца со сверхточным вертикальным (0,01 …0,5 нм) и горизонтальным (0,1 нм) разрешением. В отличие от атомно-силового микроскопа в туннельном микроскопе используются проводящие образцы.

Методы зондовой микроскопии позволяют реализовать основные функции наносборки – манипулирование отдельными атомами и молекулами. При этом используются два способа манипулирования атомами с помощью зонда – горизонтальный и вертикальный. В процессе вертикального манипулирования, в отличие от горизонтального, после захвата иглой зонда нужный атом отрывается от поверхности, поднимается на несколько десятых долей нанометра, переносится в нужную позицию и «сбрасывается». Данный процесс требует бóльших усилий, чем «перекатывание» атома по поверхности, но зато он не зависит от встречающихся на ней препятствий в виде ступеней, ям, адсорбированных атомов и т. п. Управление процессом сканирования, а также визуализация и интерпретация результатов осуществляются с помощью персонального компьютера. На рис. 1 представлено полученное с помощью туннельного микроскопа изображение 51 атома золота (и еще одного атома, химическую природу которого авторам выяснить не удалось) на поверхности кристалла золота [11]. Атомы выглядят бугорками высотой 0,15 нм. Каждый из этих атомов был перемещен иглой микроскопа так, чтобы образовалась надпись «NANO». При точности позиционирования порядка 0,05 нм наименьшее расстояние между соседними атомами разных букв равно 1,2 нм. Размеры изображения: 10 х 30 нм. Сегодня подобные структуры стали разнообразнее и уже изготавливаются многими исследователями.

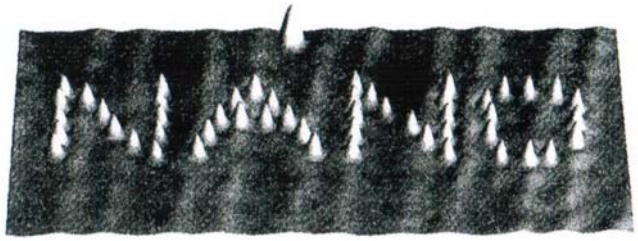


Рис. 1

Следует отметить, что в настоящее время сканирующая зондовая микроскопия по точности обнаружения и контроля нанообъектов среди других сборочных технологий не имеет себе равных. Однако с ее помощью практически невозможно создать даже самые простейшие трехмерные наноструктуры, состоящие из десятков атомов, которые создаются с неизбежно низкой производительностью и высокой дефектностью. Методы сканирующей зондовой микроскопии являются методами индивидуальной обработки. Поэтому зондовая нанотехнология демонстрирует лишь принципиальную возможность манипулирования нанообъектами и не может считаться технологией, пригодной для массового производства наноструктур. В работе [12] подчеркивается, что «к текущему моменту ни один из подходов сканирующего зондирования не достиг уровня, достаточного для его практического применения».

АВТОМАТИЗИРОВАННАЯ НАНОСБОРКА НА ОСНОВЕ НАНОРОБОТОВ

Сборочные нанороботы, способные самостоятельно или по приказам «свыше» (с использованием акустических, электромагнитных, световых сигналов) целенаправленно манипулировать отдельными атомами или молекулами, были предложены в работе Э. К. Дрекслера [4]. Такие нанороботы призваны собирать по заданной программе из произвольного подручного сырья любые нанообъекты, причем из-за сверхмалых размеров они могут работать с частотой до миллиона операций в секунду. За счет этой скорости и параллельной работы миллиона нанороботов практически любой материальный объект можно будет собрать быстро и недорого в неограниченных количествах. Сборочные нанороботы могут работать совместно с другими нанороботами, способными по заданной программе разбирать любые объекты на атомы и молекулы (совершать демонтаж) для получения необходимого наносырья. Эти нанороботы являются основным звеном восходящего автоматизированного нанопроизводства.

Самой важной особенностью сборочных нанороботов является реализованная в них функция самосборки, т. е. возможность запрограммировать их как репликатор – систему, способную к «размножению» (самовоспроизведению, самокопированию). Природа использует репликаторы как при создании клетки, так и при репликации живых организмов. Например, бактерии целенаправленно пытаются «разбирать все вокруг себя на атомы» и создавать из этого свои копии, используя репликативные свойства ДНК, способны размножаться за считанные часы от нескольких особей до миллионов.

Фундамент теории реплицирующихся структур был заложен в теории самовоспроизводящихся автоматов фон Неймана [13]. Опираясь на эту модель, можно сделать вывод, как получаются самореплицирующиеся структуры. Если представить себе репликатор как «конструктор», то при изготовлении третьего репликатора двумя другими процесс репликации будет проходить в два раза быстрее. Увеличивая число репликаторов и специализируя их по какому-либо признаку, можно получать сложную систему, скорость репликации которой будет расти по экспоненциальному закону.

Итак, для обеспечения управляемого механического синтеза необходимо создание универсального сборочного нанороботa, управляемого макрокомпьютером либо встроенным нанокомпьютером. Именно с момента создания сборочного нанороботa нанотехнологию можно будет считать окончательно получившей прикладную основу. В принципе самый первый нанороботa можно будет собрать с помощью сканирующего туннельного микроскопа, и если в него загрузить программу самовоспроизводства, то он сможет создавать подобных себе нанороботов. Такие исследования ведутся в американском Институте мо-

лекулярного производства (IMM), где разработаны модели ряда подобных сборочных систем [14].

С помощью нанороботов предполагается строить различные нанофабрики. Нанофабрика – это сложная производственная наносистема, предназначенная для создания по заданной программе различных макрообъектов. Основой работы нанофабрики является множество управляемых наноустройств – фабрикаторов, способных комбинировать атомы, создавая между ними химические связи. Построенная нанофабрика состоит из триллионов отдельных фабрикаторов разных уровней. Сначала фабрикаторы первого уровня создают из атомов элементарные блоки, затем фабрикаторы второго уровня соединяют их друг с другом в более крупные блоки, которые, в свою очередь, соединят между собой фабрикаторы третьего уровня и т. д. Этот процесс повторяется до тех пор, пока необходимый макрообъект не будет собран полностью. Модель виртуальной автоматизированной молекулярной нанофабрики будущего тысячелетия рассмотрена в работе [14].

Описанное восходящее нанопроизводство на основе нанороботов выглядит очень привлекательно и перспективно. Основные его положения представлены в работе Э. К. Дрекслера [15]. Однако все это далекое будущее, всего лишь демонстрация предельных теоретических возможностей атомно-молекулярной сборки. В ближайшем же будущем нанопроизводство должно опираться на природные принципы самосборки и самоорганизации, связанные с явлением образования тех или иных наноструктур. Принцип самосборки заключается в том, что молекулы всегда самопроизвольно стремятся перейти на самые нижние доступные для них уровни энергии. Следуя этому принципу, для обеспечения управляемого механического синтеза достаточно создать искусственные условия, при которых атомы и молекулы в процессе самоорганизации будут группироваться в определенные заранее наноструктуры.

ДОСТИЖЕНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ НАНОРОБОТОТЕХНИКИ

Нанопроцессы характеризуются огромным быстродействием, поскольку скорость работы механических компонентов обратно пропорциональна их линейному размеру. Например, в наноразмерных системах частоты могут достигать 10 ГГц, а амплитуда колебаний лежать в диапазоне пикометров (10^{-12} м). Если движение механической руки макроскопического робота занимает секунды при затратах энергии в киловатты, то «ручки» нанороботa способны выполнять те же движения за миллиардные доли секунды, затрачивая лишь миллиардные доли ватт.

Сегодня за терминами «наномашины» и «нанороботы» стоят лишь теоретические выкладки и экзотические лабораторные исследования. Единственное, о чем можно говорить с практической точки зрения, это некоторые, созданные на основе технологий наносборки, компоненты и примитивные прототипы наносистем. Здесь следует отметить направление, занимающееся разработкой механических элементов, узлов и модулей будущих наномехатронных систем с применением многослойных углеродных нанотрубок и электрических контактов из наноэлектромеханических систем (НЭМС).

Среди этих устройств можно отметить **нанопоршни**, **валы**, **подшипники** и **зубчатые передачи**, которые являются важными составными частями нанороботов. Пример потенциально возможных наноразмерных механических элементов приведен на рис. 2 [16]. В конструкции, состоящей из шестерней и вала, имеющих характерную частоту вращения несколько десятков гигагерц, валами являются углеродные нанотрубки, а зубцами – молекулы бензола. Зубцы передают вращающий момент от ведущей шестерни к ведомой; диаметр каждой шестерни составляет 1,1 нм. Передача преобразует вращательное движение шестерни в поступательное движение вала. Ведущая шестерня приводится в движение лазерным «мотором». При частоте колебаний поля лазера, приблизительно равной частоте собственных колебаний шестерни, и надлежащем выборе сдвига фаз возникает однонаправленное вращение шестерни. Передача может работать в вакууме с частотой до ~100 ГГц. Важно отметить, что данные наномеханизмы чрезвычайно прочны, быстры и малы – по своим размерам значительно меньше биологических клеток.

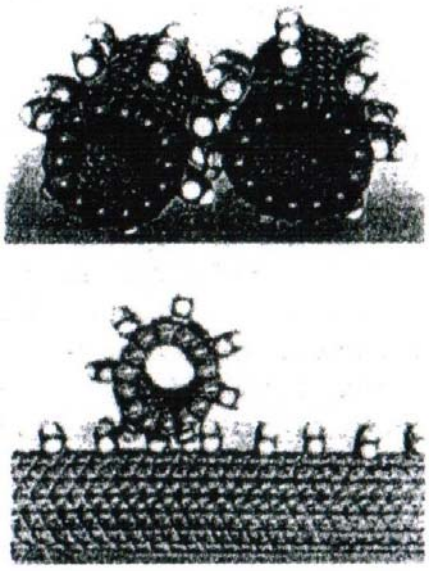


Рис. 2

Другим примером является изготовление **наносхвата**, полученного методом литографии с помощью операции травления [17]. Конструкция состоит из двух углеродных нанотрубок и трех электродов. Нанотрубки предназначены для захвата объекта путем управления механическими движениями. Эти механические движения осуществляются электростатическими силами с помощью возникающей разности потенциалов между положительными и отрицательными зарядами, расположенными на наностержнях и создающими электрическое напряжение между ними. Как показано в этой работе, структуры из нанотрубок могут строиться посредством измерения и управления молекулярными свойствами и силами поверхностного натяжения. Изменение свойств многослойной нанотрубки происходит путем регулирования количества имеющихся слоев и геометрии. Модификация гео-

метрии осуществляется через изменение длины трубки путем механического вытягивания ее слоев. Регулирование длины трубки происходит методом расчета пластической деформации. Разработка молекулярного двигателя на базе генной технологии приводится в работе [18]. Интересной разработкой является также наноактюатор [19], способный обратимо раздвигать две углеродные нанотрубки на расстояние 0 … 300 нм.

Следует отметить созданный авторами работы [20] **наноавтомобиль** шириной 4 нм, который катится по атомам золотой микроскопической «трассы» с помощью световой энергии. Автомобиль содержит раму в виде большой молекулы из трехсот атомов, две оси из углеродных нанотрубок, четыре фуллереновых шарообразных колеса и автономный нереверсивный мотор. Последний представляет собой установленную в центре рамы крестообразную лопасть, которая, вращаясь, отталкивает ее от трассы. При движении здесь используется эффект преобразования поглощенной энергии кванта света в энергию механического движения. Следует заметить, что на создание данного наноавтомобиля ушло почти восемь лет.

Несмотря на первые успехи в области наносборки молекулярных машин говорить о создании нанороботов еще рано, поскольку они пребывают на стадиях компьютерного моделирования. В настоящее время с помощью компьютерных программ моделируются наноэлементы, содержащие десятки тысяч атомов. Наиболее интересные проекты компьютерных моделей молекулярных механических элементов разрабатываются в упомянутом выше американском Институте молекулярного производства [14]. В этих проектах главное внимание уделяется наномеханизмам, которые создаются по типу обычных машин. Сейчас имеются различные 3D-редакторы, которые позволяют проектировать трехмерные молекулярные структуры и даже делать некоторые расчеты этих структур. Например, компаниями «Nanotitan» и «Nanorex» разработаны программы Nanoexplorer [21] и NanoEngineer [22], позволяющие быстро и легко проектировать молекулярные системы размером до 100 тыс. атомов на основе квантово-механических расчетов. Таким образом, уже реализуются первые шаги, направленные на разработку, создание и внедрение наносистем, обладающих сенсорными, процессорными и актюаторными функциями.

Важным направлением является использование биологических компонентов и молекул для построения нанороботов. Особый интерес представляют функциональные гибридные структуры и биоматериалы разного типа, которые можно использовать при создании и внедрении линейных и роторных двигателей, приводов и переключателей, работающих на биологических принципах и предназначенных для регулирования микроскопических потоков жидких материалов в медицине. Очень важную роль биологические материалы играют в развитии и широком внедрении новых типов биодатчиков для роботизированной медицинской диагностики. Для общей стратегии развития наноробототехники большой интерес представляет тщательное изучение биологических принципов, систем и механизмов развития, особенно для процессов самоорганизации и «саморемонта» нанороботов.

В работе [23] сообщается, что разработано наноустройство, которое может стать основой для строительства сложных машин молекулярного масштаба, что приведет к созданию нанороботов на основе синтетических молекул ДНК. В перспективе наноробот сможет передвигаться по кровеносной системе человека и очищать его от микробов и раковых клеток. На рис. 3 представлено виртуальное изображение модели наноробота, который будет способен перемещаться в кровеносных сосудах и органах человека.

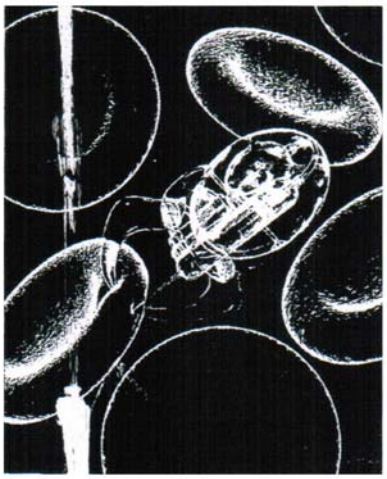


Рис. 3

Исследователи работают над тем, чтобы управлять несколькими парами молекул автономно, без воздействия на другие, так, чтобы они могли в заданном порядке самоорганизовываться и объединяться с другими молекулами в более крупные структуры.

К ВОПРОСУ ОБ УПРАВЛЕНИИ НАНОРОБОТАМИ

Для того чтобы выполнить реальное взаимодействие между макро- и микромиром, необходимы совершенные интеллектуальные информационные системы, которые должны быть оснащены быстродействующими мощными компьютерами, ассоциативным программным обеспечением и высокоскоростной сетью связи. Сейчас на микроуровне микророботом программно и алгоритмически управляют компьютерные чипы. Однако размеры нанороботов таковы, что соответствующих им компьютерных чипов просто нет. Проектирование устройств управления на наноуровне ведется по нескольким направлениям. Одним из них является создание квантовых компьютеров на базе квантовой модели атома. По аналогии с обычной информатикой за элементарную единицу информации в квантовых компьютерах принимается кубит. Квантовый кубит является квантовой величиной, которая может принимать два состояния – 0 и 1. Это могут быть, например, два электрона с противоположно направленными спинами. Один кубит может передать только один бит информации. Несколько связанных между собой кубитов образуют элементарную вычислительную ячейку, называемую регистром. Преимущество кван-

товых вычислительных систем заключается в том, что, изменяя состояние одного кубита в регистре, можно без дополнительных затрат энергии и тактов процессора изменить состояние всех других кубитов в регистре и тем самым получить возможность выполнения параллельных операций в вычислениях.

Допустим, имеется квантовая система из N двухуровневых квантовых кубитов. Такая система может иметь 2^N независимых состояний и, таким образом, за счет квантового параллелизма выполнять параллельно 2^N операций. Так как все состояния являются квантово-механически связанными, состояния всех кубитов в регистре меняются одновременно. Теоретически такой компьютер будет работать в экспоненциальное число раз производительнее, чем классический.

Квантовая модель атома представляется в виде пространственной и энергетической моделей. Пространственная модель атома отображает его трехмерную объемную структуру и то, как в пределах этой структуры распределены плотности вероятности нахождения электронов атома. Совокупность электронов вокруг ядра образует электронное облако. А поскольку расчет распределения вероятности нахождения электронов в облаке является довольно сложным, пользуются планетарной моделью, отражающей квантовую природу атома. Согласно этой модели электрон в атоме может двигаться по особым стационарным орбитам, которые характеризуются квантовым числом n = 1, 2, …, а также квантованной энергией. Переход электрона с одной стационарной орбиты на другую сопровождается испусканием (или поглощением) электромагнитной энергии в виде кванта.

Энергетическая модель атома включает представление потенциальной энергии электрона в атоме как функции координат и систему энергетических уровней стационарных квантовых состояний атома. В стационарном состоянии (n = 1) электрон может находиться бесконечно долго, совершая незатухающие колебания (в отсутствие трения), и самопроизвольно выйти из этого состояния не может. Однако если ему сообщить дополнительную энергию, то электрон способен перейти в возбужденное состояние, в котором атом способен находиться в среднем в течение 10^{-8} секунд, а затем самопроизвольно (спонтанно) переходить в стационарное состояние.

Для квантовой модели атома существуют понятия потенциальной ямы и потенциального барьера, которые играют существенную роль в поведении частиц, подчиняющихся законам квантовой механики. Тело, подчиняющееся законам классической физики, двигаясь в потенциальной яме, имеет непрерывный энергетический спектр, т. е. его энергия изменяется непрерывным образом. Энергетический же спектр частицы в потенциальной яме нано- и атомарных размеров дискретен. Этот квантовый эффект лежит в основе функционирования многих наноэлектронных структур. Тело, подчиняющееся законам классической механики, способно преодолеть потенциальный барьер, если его полная энергия превышает потенциальную энергию на вершине барьера. Совершенно иначе ведет себя тело, подчиняющееся законам квантовой механики. Для него имеется отличная от нуля вероятность проникнуть за барьер и при условии, что полная энергия тела меньше высоты потенциального барьера. Такой квантово-механический эффект называется туннельным. Туннельный эффект в наномире достаточно распространен. Он лежит в основе действия наноэлектроники, сканирующих туннельных микроскопов и квантовых точек. Квантовые точки предполагается использовать для проектирования компьютеров и в качестве одного из источников энергии.

Физическая реализация квантовых точек в качестве наноструктур рассмотрена в работах [24 – 27]. Квантовая точка представляет собой наноструктуру, движение электронов в которой ограничено в трех измерениях – x, y, z (наноразмерный кристаллик). На рис. 4 показано: (а) схематическое представление одномерного нанообъекта и (б) изображение германиевой квантовой точки на поверхности кремния [27].

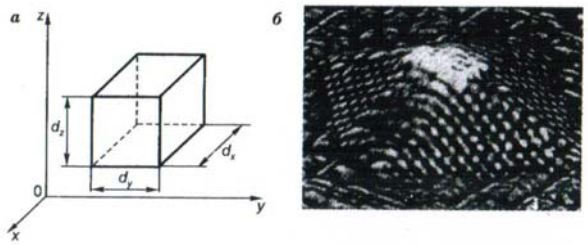


Рис. 4

В течение долгого времени предпринимались попытки изготовления квантовых точек и приборов на их основе традиционными методами, например, литографией. На этом пути отрабатывалась литография с предельно высоким разрешением, но квантовых точек с дискретным атомоподобным спектром получить не удалось.

«Настоящие» квантовые точки были получены после смены технологии типа *сверху-вниз* на технологию *снизу-вверх*, когда стали использовать эффекты самоорганизации при эпитаксиальном наращивании гетероструктур. При определенных условиях в эпитаксиальном слое, наращиваемом на кристаллическую подложку другого вещества, образуются упорядоченные массивы квантовых точек. На квантовых точках, полученных посредством самоорганизации, были впервые продемонстрированы физические свойства, предсказанные теоретически.

Подбирая размеры квантовых точек и количество атомов в них, можно добиться состояния, когда квантовая точка содержит всего один свободный электрон. Если располагать на подложке такие квантовые точки достаточно близко друг к другу, то можно добиться того, что электроны в них начнут взаимодействовать своими спинами и окажутся квантово-механически связанными. Тогда, меняя с помощью лазерного импульса состояние одного из электронов, можно влиять на состояние спина электронов всех остальных квантовых точек в квантовом регистре.

Существуют различные варианты этой технологии [25]. В работе [28] предложены квантовые ал-

горитмы вычислений для некоторых простых задач и созданы компьютеры с небольшими регистрами из нескольких кубитов. Несмотря на крайне заманчивые перспективы реализации квантовых компьютеров их практическая реализация остается труднодостижимой. Это происходит главным образом из-за неустойчивости квантовых состояний и технологических трудностей.

Помимо компьютеров в наноробототехнике предполагается использовать квантовые точки в качестве источников энергии. Принцип действия нанодинамической системы с питанием от квантовой точки рассмотрен в работе [26]. Модель нанодинамической системы состоит из наноманипулятора, передаточного звена и квантовой точки. Под воздействием внешнего излучения происходит возбуждение квантовой точки и перевод ее электронов на более высокие энергетические уровни. Обычно после этого электроны возвращаются на более низкие уровни с излучением кванта, однако в этой конструкции возбужденные электроны подхватываются передаточным звеном и могут быть в дальнейшем использованы для перераспределения электронной плотности, а следовательно, энергии в наноманипуляторе и, как следствие – изменения его молекулярной конфигурации, т. е. наноманипулятор будет перемещаться, совершая какую-либо работу.

Однако если говорить о практическом применении квантовых точек, можно отметить, что существуют принципиальные трудности, которые сильно ограничивают практические разработки. Сложности технологического характера заключаются в подборе состава материалов и параметров роста квантовых точек, который в значительной степени остается эмпирическим. Не удается с надежностью наладить производство упорядоченных массивов квантовых точек на подложках. Эти и многие другие технологические вопросы все еще ждут своего окончательного решения. Квантовые точки в качестве источников энергии предназначены для нанороботов, существующих вне биологической среды. Для нанороботов, функционирующих в потоках биологических жидкостей и предназначенных для медицинского использования, вопрос обеспечения энергией может решаться за счет выбора биологических носителей энергии.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Наноробототехника занимается исследованием, проектированием и созданием нанороботов и манипулированием объектов нанометрового диапазона. Сегодня она находится на начальном этапе своего развития и является результатом конвергенции таких наук, как наномехатроника, нанобиология, наноинформатика, нанохимия.

Технология изготовления нанороботов и наноустройств связана с постижением предельно возможного «молекулярного» масштаба, который настолько мал, что человеческое воображение практически не способно сколько-нибудь адекватно его представить. В отличие от традиционных технологий нанотехнологии характеризуются повышенной наукоемкостью, затратностью, а также междисциплинарностью и неэффективностью решения задач методом «проб и ошибок», который, как правило, и используется в сложных прикладных разработках. В связи с этим использование традиционного стиля мышления и общепринятой методологии при проектировании нанороботов оказывается чрезвычайно сложным. Это сопряжено с проведением большого объема фундаментальных и прикладных научных и технологических исследований.

Основной теоретической проблемой наноробототехники является отсутствие удовлетворительного научного фундамента. Имеются лишь некоторые инструменты эмпирического исследования и накоплено большое число феноменальных опытов. В частности, до сих пор отсутствует теория молекулярного синтеза. Более того, отсутствуют параметрические модели атомов и молекул, отражающие их размеры, энергию связи и энергию парных взаимодействий, на основе которых должен проводиться расчет синтезируемых молекулярных структур.

Принципиальная трудность создания нанороботов заключается в их проектировании, которое основывается на методах компьютерного моделирования. Расчет конструкции системы настолько трудоемок и сложен, что для его осуществления не хватает мощности даже современных суперкомпьютеров. На молекулярном уровне вместо макроскопических законов классической механики, используемых для расчета обычных макросистем, вступают в действие законы квантовой механики.

Для ускорения процесса молекулярного синтеза природа использует массовый параллелизм, реализуемый самосборкой на основе самоорганизации и самовосстановления. Однако в существующих нанотехнологиях подобные способы параллельной атомно-молекулярной сборки пока не найдены.

Производство нанороботов может строиться на двух стратегиях, известных как технологии *сверху-вниз* (top-down) и *снизу-вверх* (bottom-up).

При реализации технологии *сверху-вниз* предполагается, что уменьшение размеров структур не влияет на их фундаментальные свойства и принципы функционирования.

Технология *снизу-вверх* представляет наноробот в виде крупной молекулы. Для этого изучаются механизмы, действующие в клетке, выясняется циркуляция информации внутри клетки, работа внутриклеточных регуляторов, взаимодействие между собой генов и белков, общение клетки с соседями и окружающим пространством и т. п. с тем, чтобы потом воспроизвести познанный механизм. Используя новейшие методы квантовой химии, молекулярной динамики и генных технологий, исследователи пытаются синтезировать структуры величиной в нанометры. Для реализации технологии *снизу-вверх* необходимо иметь проект наносборки, наноматериалы и нанооборудование.

Самыми перспективными материалами, которые используются в молекулярной технологии, являются **углеродные нанотрубки**. На основе нанотрубок можно создавать такие устройства, как наноманипу-

ляторы, зажимы, нанодвигатели со встроенными датчиками положения, наноподшипники, телескопические наноконструкции, нанодиоды, нанотранзисторы, электронные переключатели и т. п. Однако вплоть до настоящего времени не представляется возможным производить их в массовом количестве, т. е. создавать в пробирке большое число одинаковых наноразмерных объектов, обладающих одинаковой точно заданной функциональностью.

Существуют **три парадигмы автоматизации молекулярного нанопроизводства:**

1. Автоматизированная наносборка с использованием сканирующих зондов.

2. Автоматизированная наносборка с использованием нанороботов.

3. Комбинация первого и второго методов.

В настоящее время сканирующая зондовая микроскопия по точности обнаружения и контроля нанообъектов среди других сборочных технологий не имеет себе равных. Однако с ее помощью практически невозможно создать даже самые простейшие трехмерные наноструктуры, состоящие из десятков атомов, которые создаются с неизбежно низкой производительностью и высокой дефектностью. Методы сканирующей зондовой микроскопии являются методами индивидуальной обработки, поэтому зондовая нанотехнология демонстрирует лишь принципиальную возможность манипулирования нанообъектами и не может считаться технологией, пригодной для массового производства наноструктур.

Сборочные нанороботы являются основным звеном нанопроизводства *снизу-вверх*. Самой важной особенностью сборочных нанороботов является реализованная в них функция самосборки, т. е. возможность запрограммировать их как репликатор – систему, способную к «размножению» (самовоспроизведению, самокопированию). С помощью нанороботов предполагается строить различные нанофабрики. Однако все это далекое будущее, всего лишь демонстрация предельных теоретических возможностей атомно-молекулярной сборки.

Продолжаются **исследования по разработке систем управления и программного обеспечения на наноуровне**. Наиболее многообещающим направлением исследования является создание квантовых компьютеров на базе квантовой модели атома. Ключевым вопросом является также разработка источников энергии. В качестве одного из возможных источников энергии для нанороботов, существующих вне биологической среды, предлагаются квантовые точки. Для нанороботов, функционирующих в потоках биологических жидкостей, вопрос обеспечения энергией может решаться за счет выбора биологических носителей энергии.

Для общей стратегии развития наноробототехники большой интерес представляет изучение биологических принципов, систем и механизмов развития, особенно для процессов самоорганизации и «саморемонта» нанороботов. Биологические молекулы и компоненты смогут найти прямое применение в медицинской наноробототехнике.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Rieth M., Schommers W. Handbook of Theoretical and Computational Nanotechnology. – American Scientific Publishers, 2006.
2. Singh-Nalwa N. Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology. – American Scientific Publishers, 2004.
3. Фейнман Р. Ф. Внизу полным-полно места: приглашение в новый мир физики // Рос. хим. журнал. – 2002. – Т. 46, №5.
4. Drexler E. Nanosystems: Molecular Machinery, Manufacturing, and Computation. – New York : John Wiley & Sons Inc., 1992.
5. Новаковская Ю. В. Молекулярные системы. Теория строения и взаимодействия с излучением : в 3 ч. – М. : Эдиториал УРСС, 2004 – 2005. – Ч. 1: Общие основы квантовой механики и теории симметрии. – 2004; Ч. 2: Квантовые состояния молекул. – 2004; Ч. 3: Полуклассическая теория взаимодействия молекул с излучением. – 2005.
6. Теряев Е. Д., Филимонов Н. Б. Наномехатроника: состояние, проблемы, перспективы // Мехатроника, автоматизация, управление. – 2010. – № 1. – С. 2 – 14.
7. Кац Е. А. Фуллерены, углеродные нанотрубки и нанокластеры: Родословная форм и идей. – М. : Изд-во ЛКИ, 2008.
8. Petrina A. M. Advances in Robotics (Review) // Automatic Documentation and Mathematical Linguistics. – 2011. – Vol. 45, №2. – P. 43 – 57.
9. Fukuda T., Arai F., Dong X. Assembly of nanodevices with carbon nanotubes through nanorobotic manipulations // Proc. IEEE. – 2003. – Vol. 91, № 11. – P. 1803 – 1818.
10. Fatikow S., Wich T., Hulsen H., Sievers T., Jahnisch M. Microrobot system for automatic nanohandling inside a scanning electron microscope // IEEE/ASME Trans. on Mechatronics. – 2007. – Vol. 12, №3. – P. 244 – 252.
11. Жоаким К., Плевер Л. Нанонауки. Невидимая революция / пер. с фр. А. Кавтаскина. – М. : КоЛибри, 2009. – 240 с.
12. Производственные наносистемы. Обзор технологических перспектив [Электрон. ресурс]. – URL: http://www.nanometer.ru/2008/03/24/.../наносистемы1.pdf
13. Фон Нейман Дж. Теория самовоспроизводящихся автоматов. – М. : Мир, 1971.
14. Phoenix Ch. Design of a Primitive Nanofactory // J. of Evolution and Technology. – 2003. – Vol. 13, № 10.
15. Drexler E. K. Engines of Creation: The Coming Era of Nanotechnology. – New York : Doubleday, 1986; Дрекслер Э. К. Машины создания. Грядущая эра нанотехнологии [Электрон. ресурс] / пер. М. Свердлова. – URL: http://filosof.historic.ru/books/item/f00/s00/z0000328

16. Chiaravalloti F., Gross L., Rieder K.-H., Stojkovic S. M., Gourdon A., Joachim Ch., Moresco F. A Rack-and-Pinion Device at the Molecular Scale // Nature Materials. – 2007. – №6. – P. 30 – 33.
17. Jang J. E., Cha S. N., Choi Y., Kang D. J., Hasko D. G., Jung J. E., Kim J. M., Amaratunga Gehan A. J. A Nanogripper Employing Aligned Multiwall Carbon Nanotubes // IEEE Transactions on Nanotechnology. – 2008. – Vol. 7, № 4. – P. 389 – 393.
18. См.: http://www.nanometer.ru/2008/04/30/dnk/51785.htm
19. Regan B. C., Aloni S., Jensen K., Ritchie R. O., Zettl A. Nanocrystal-Povered Nanomotor // Nano Letters. – 2005. – №5. – P. 1730 – 1733.
20. Shirai Y., Morin J. F., Sasaki T., Guerrero J. M., Tour J. M. Recent Progress on Nanovehicles // Chem. Sos. Rev. – 2006. – Vol. 11, № 35. – P. 1043 – 1055.
21. См.: http://popnano.ru.studies/index.php?task=view&id=63
22. См.: http://www.nanoenjineer-1.com/content/index.php?option=com_content&task=view&id=34&Itemid=35
23. См.: http://my.kzn.ru
24. См.: http://nanotech.invur.ru/index.php?id=1053
25. Schrader D., Dotsenko I., Khudaverdyan M., Miroshnichenko Y., Rauschenbeutel A., Meschede D. Neutral Atom Quantum Register // Phys. Rev. Lett. – 2004. – Vol. 93. – P. 150501 – 150517.
26. Грибачев В. П. Методы получения и применения квантовых точек // Компоненты и технологии. – 2009. – №9. – С. 127 – 130.
27. Лозовский В. Н., Константинова Г. С., Лозовский С. В. Нанотехнология в электронике. Введение в специальность : учеб. пособие. – 2-е изд. – СПб. : Лань, 2008. – 336 с.
28. Мартинес-Дуарт Д. М. Нанотехнология для микро- и оптоэлектроники. – М. : Техносфера, 2007. – 368 с.
29. Bainbridge W. S. Nanoconvergence: The Unity of Nanoscience, Biotechnology, Information Technology and Cognitive Science. – 2007.

Материал поступил в редакцию 22.03.12.

Сведения об авторе

ПЕТРИНА Алла Макаровна – кандидат технических наук, зав. Сектором ВИНИТИ РАН, Москва
Тел.: (499) 155 43 46

ИНФОРМАЦИОННЫЙ ПОИСК

УДК 004.77 : 002

А. Ю. Сергеев, В. М. Тютюнник

Методика оценки и повышения эффективности тематико-ориентированного интернет-поиска с помощью минимизации объёма поисковой выборки, обеспечивающей тематическую полноту поиска

Экспериментально показана необъективность стандартной методики оценки эффективности поиска в случае использования поисковых машин Интернета. В результате анализа большого объёма статистических данных по оценке основных показателей эффективности интернет-поиска определено «узкое место» в методике оценки его эффективности. Теоретически и экспериментально обоснованы особенности поведения пользователей поисковых машин. Предложены более объективные показатели эффективности тематико-ориентированного интернет-поиска – коэффициент семантического охвата и минимальный объём поисковой выборки, обеспечивающий тематическую полноту поиска. Разработана и протестирована методика повышения эффективности поиска.

Ключевые слова: *информационный поиск, поисковая машина, эффективность поиска, оптимизация, точность, полнота, семантический потенциал, поисковая выборка, коэффициент семантического охвата, минимальный объём поисковой выборки*

ВВЕДЕНИЕ

В области исследований методов и алгоритмов информационного поиска в распределённых информационных системах отчётливо прослеживаются два самостоятельных направления. *Первое* включает в себя ряд мощных элегантных алгоритмов, предназначенных для реализации высокоэффективного информационного поиска, и методику оценки его эффективности в пределах искусственных массивов документов. Такими массивами могут быть как специально подготовленные и организованные коллекции документов, так и псевдослучайные выборки из веб-массива, например, экспериментальная коллекция HTML-документов, представляющая собой часть домена Narod.ru. Эти коллекции документов обладают свойствами стандартных массивов информации. Предложено много разнообразных моделей «интеллектуального» поиска, оперирующих аппаратом нейронных сетей, редукционных правил, энтропийным методом, латентно-семантическим анализом, приёмами автоматического индексирования и аннотирования текстов на основе тезауруса и т. д. [1 – 5].

Второе направление информационного поиска в распределенных информационных системах связано с решением реальных поисковых задач в веб-массиве документов глобальной сети Интернет. Ряд особенностей информационного массива Интернета (стремящийся к бесконечности объём, неструктурированность, разнородность, избыточность, неявное дублирование данных) обусловили значительное повышение сложности задачи интернет-поиска. Терминология и методология оценки эффективности информационного поиска в массивах конечного объёма с развитием инфраструктуры глобальной сети автоматически были спроецированы на интернет-поиск. Подавляющее большинство технологических приемов, математический и лингвистический аппарат, применяемые для моделирования, оценки и оптимизации поиска, не нашли применения в области веб-поиска по причине невозможности или чрезвычайной трудоёмкости адаптации к веб-массиву информации [2, 6].

В настоящее время в основе функционирования поисковых машин Интернета (ПМ) лежит *бинарный поиск*. Реализован комплекс мощнейших алгоритмов ранжирования, анализирующих статистические данные, форму и метаданные документа и веб-ресурса в целом, включая внутренние и внешние гиперсвязи, поведение пользователей, «авторитетность» и т. д. [7, 8]. Ключевыми понятиями оценки эффективности интернет-поиска являются релевантность и точность.

Обозначим описанные выше направления информационного поиска как кортежи вида *(поисковый массив; методы поиска; методы оценки эффективности поиска)*:

1. Теоретические поисковые системы *(стандартный информационный массив; интеллектуальные методы поиска; расчёт точности и полноты поиска).*

2. Реальные ПМ *(уникальный веб-массив документов; бинарный поиск и мощные алгоритмы анализа статистических и метаданных документа; расчёт точности поиска*).

Оценка эффективности поиска базируется на следующих основных показателях: точность поиска *(precision)*, в том числе средняя точность (*average precision*), точность на уровне *n* документов (*precision(n)*), полнота (*recall*), – а также на второстепенных: аккуратность (*accuracy*), ошибка (*error*) и т. д. [14]. Объективные значения полноты поиска, аккуратности и ошибки получить невозможно, так как количество документов в массиве стремится к бесконечности [5]. В связи с этим оценка эффективности интернет-поиска, в первую очередь, сводится к расчёту точности. Оптимальным алгоритмом оценки, очевидно, является тот, для которого выводы согласуются с мнением оценивающих экспертов.

Настоящее исследование показало необъективность применения показателя точности поиска для расчёта эффективности и несостоятельность стандартной методики оценки интернет-поиска.

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

В литературе большое внимание уделяется задаче построения эффективного поискового образа запроса (ПОЗ) для повышения эффективности поиска с помощью ПМ сети Интернет [9 – 13]. В качестве метода формирования ПОЗ рассматривается, прежде всего, расширение (модификация) запроса на основе семантической модели предметной области (тезауруса).

Авторами статьи была проведена сравнительная оценка эффективности решения реальных поисковых задач с использованием ПМ Яндекс с целью сравнения эффективности поиска по простому среднестатистическому запросу [11, 15] и методов поиска с использованием модификации (расширения запросов) [9, 10, 16].

Первоначально необходимо было провести экспериментальную оценку и сравнение эффективности традиционных методов расширения запросов для решения реальных поисковых задач в Интернете. В качестве *терминологической модели* для расширения запросов использовалась универсальная десятичная классификация (УДК). Решением *поисковой задачи* считалось получение комплекта документов, содержащих информацию по тематике запроса из класса «Информационные системы» (тематико-ориентированный интернет-поиск) [17]. *Пертинентным* считался документ, содержащий полезную информацию по тематике запроса. Решение о пертинентности принималось методом экспертной оценки. Был проведён анализ пертинентности первых 20 документов, найденных по каждому запросу. В качестве показателя эффективности поиска была принята точность на уровне 20 документов (*precision(20)*) [14].

При расширении запроса по традиционной методике терминами нижестоящего уровня терминологической модели предметной области и поиске по простому запросу среднее значение точности поиска составило соответственно 0,45 и 0,5. Реализация различных вариаций алгоритма расширения запроса [9] показала аналогичные значения точности, а также высокую степень корреляции зависимости точности поиска от тематической составляющей поисковых терминов при использовании как простых, так и расширенных запросов (рис. 1). Исключением стало включение в запрос оператора «ИЛИ». В большинстве случаев при средней точности 0,5 одна или несколько тематик, отражённых поисковым термином и связанных оператором «ИЛИ», не были представлены на уровне в 20 документов. Огромная размерность поискового массива и неравномерное распределение документов, пертинентных одному из поисковых терминов, объединённых оператором «ИЛИ», *минимизирует эффективность его применения в контексте решения поставленной задачи*. Этот вывод является исключением для варианта, когда достаточным является получение документов, пертинентных только одному из поисковых терминов, связанных оператором «ИЛИ».

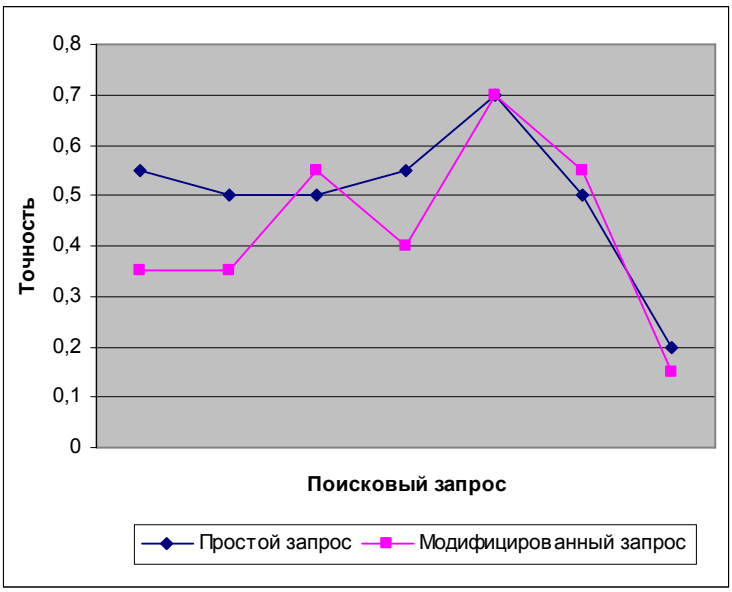


Рис. 1. Зависимость точности поиска с использованием простых и расширенных запросов от поискового запроса

Таким образом, **анализ эмпирических данных, полученных с целью выявления наиболее эффективных алгоритмов расширения запроса, показал аналогичные значения основного показателя эффективности – точности поиска – вне зависимости от реализованного метода**. Точность поиска 0,5 в массивах конечного объёма считается высокой, однако эффективность интернет-поиска в большинстве случаев оценивается неудовлетворительно как исследователями, так и пользователями [9, 12, 18]. Анализ экспериментальных данных позволил сделать заключение о том, что **в контексте поставленной задачи показатель точности поиска не информативен**.

Перекрытие результатов поиска по простому и расширенному запросу составило в среднем 16%. Несмотря на схожие значения точности, полученные при поиске по простым и расширенным поисковым запросам, очевидны качественные различия найденных в результате параллельных поисковых сессий документов. Приведём в качестве примера тенденцию к увеличению объёма найденных документов при объединении оператором «И» терминов, связанных с исходным связью «НИЖЕ». При использовании расширенного запроса (РПОЗ) вида

$$T_n \text{AND} T1_{n+1} \text{AND} T2_{n+1} \text{AND} ... \text{AND} Tk_{n+1} \qquad (1)$$

(где T_n – термин тезауруса уровня n, Tk_{n+1} – совокупность терминов, связанных с T_n связью «ниже», т.е. совокупность терминов нижнего уровня, k – их количество) среди найденных документов около 40% составляют *объёмные* документы – монографии, статьи, сборники статей, лекций, сборники методических материалов и т. д. (рис. 2). Вероятность нахождения файла (.pdf, .doc), а также документа под авторством увеличивается в 2,5 и 3 раза соответственно. Более того, часть документов большого объёма, найденных с использованием РПОЗ вида (1), в том числе в форматах .doc, .pdf, не удалось отыскать, используя более простые запросы без привязки к нужному формату.

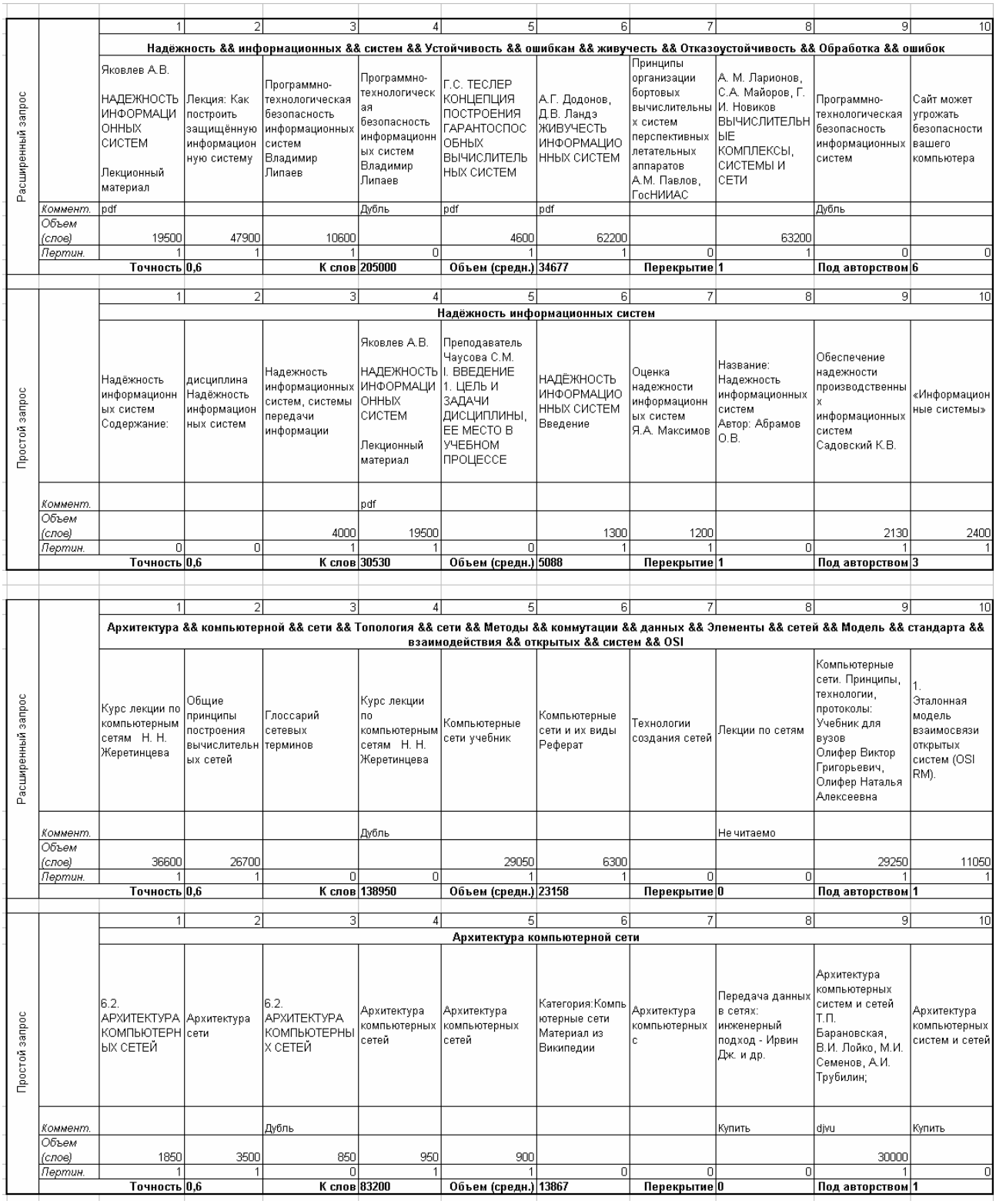
Обработка эмпирических данных позволила установить отдельные закономерности в качественном различии документов, найденных с использованием различных приёмов модификации запроса. В то же время эксперимент показал равную эффективность большинства методов. Учитывая 1) качественные различия между найденными по различным запросам документами, 2) низкий процент перекрытия результатов поиска при равной эффективности поиска по различным запросам и с использованием различных поисковых машин [19], 3) схожие значения точности поиска, мы утверждаем, что **показатель точности поиска не объективен и его применение не имеет смысла для оценки эффективности интернет-поиска.**

В традиционных документальных системах (с конечным и не меняющимся в момент поиска массивом документов) точность поиска является базовым показателем его эффективности. В то же время оценка точности не даёт информации об эффективности выполнения реальных поисковых задач с помощью ПМ. Исключением являются поисковые сессии в пределах автономных веб-массивов документов, таких, как тестовые веб-коллекции Narod.Ru, KM.ru [20, 21], структура которых резко отличается от структуры веб-массива. Поскольку повышение эффективности интернет-поиска связывается с показателями, приведёнными в [14], и прежде всего с точностью, результаты испытаний поисковых алгоритмов, полученные на тестовых коллекциях, не всегда объективны с точки зрения реализации на вебмассиве. Таким образом, **краеугольная проблема современного интернет-поиска заключается в отсутствии объективных показателей эффективности и, как следствие, отсутствии объективных методов оценки эффективности**.

Ситуация с отсутствием объективных методов оценки эффективности интернет-поиска не уникальна. Методы поиска можно разделить на интеллектуальные, предложенные и проверенные для специальных тестовых коллекций, и простые, основанные на манипуляции ключевыми словами, формой и метаданными документа, реализованные на высоком уровне в функционирующих ПМ [8]. Методы объективной оценки эффективности интернет-поиска и разработка более эффективных поисковых алгоритмов, бесспорно, должны строиться на анализе качественных, семантических характеристик документов. При расчёте эффективности интернет-поиска недостаточно оперировать только различными алгоритмами расчёта степени релевантности документа и количественными характеристиками документов [22, 23]. Данные методы, нацеленные на повышение точности поиска, реализованы на высоком уровне в современных ПМ.

Очевидно, что в поисковой выборке избыточно представлена основная тематика запроса (или один из её аспектов). Приёмы поиска и алгоритмы ранжирования ПМ, эффективно отслеживая дубликаты (дублирование составляет около 20%) [24], не ориентированы на определение семантических различий в документах и предоставление пользователю компактного комплекса документов, всесторонне освещающих тематику поиска. Поисковый шум в выборке относительно невелик и составляет около 30% [24]. Показатели точности поиска, поискового шума, коэффициента дублирования и т. п. находятся на высоком уровне. Противоречащая экспериментальным данным невысокая субъективная эффективность интернет-поиска объясняется освещением в поисковой выборке преимущественно одного или нескольких аспектов тематики запроса. Другими словами, ПМ не обеспечивают приемлемого уровня *полноты поиска*.

Под полнотой традиционно понимается степень охвата информационных источников, которые могут содержать интересующую пользователя информацию [25]. Предлагается повышать полноту поиска путём привлечения методов метапоиска [26]. ПМ указывают количество найденных документов, исчисляемое в десятках и сотнях тысяч, реальный объём выборки составляет около одной тысячи документов [19]. Количество документов в поисковом массиве и объёмы поисковых выборок позволяют пренебрегать полнотой поиска в ее традиционном значении. На первый план выходит *полнота, всесторонность освещения тематики поиска, причём на уровне доступной для анализа величины поисковой выборки.*



Расширенный запрос		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
		Надёжность && информационных && систем && Устойчивость && ошибкам && живучесть && Отказоустойчивость && Обработка && ошибок									
		Яковлев А.В. НАДЕЖНОСТЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ СИСТЕМ Лекционный материал	Лекция: Как построить защищённую информационную систему	Программно-технологическая безопасность информационных систем Владимир Липаев	Программно-технологическая безопасность информационных систем Владимир Липаев	Г.С. ТЕСЛЕР КОНЦЕПЦИЯ ПОСТРОЕНИЯ ГАРАНТОСПОСОБНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ	А.Г. Додонов, Д.В. Ландэ ЖИВУЧЕСТЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ СИСТЕМ	Принципы организации бортовых вычислительных систем перспективных летательных аппаратов А.М. Павлов, ГосНИИАС	А. М. Ларионов, С.А. Майоров, Г. И. Новиков ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ КОМПЛЕКСЫ, СИСТЕМЫ И СЕТИ	Программно-технологическая безопасность информационных систем	Сайт может угрожать безопасности вашего компьютера
	Коммент.	pdf			Дубль	pdf	pdf			Дубль	
	Объем (слов)	19500	47900	10600		4600	62200		63200		
	Пертин.	1	1	1	0	1	1	0	1	0	0
		Точность	**0,6**	**К слов**	**205000**	**Объем (средн.)**	**34677**	**Перекрытие**	**1**	**Под авторством**	**6**

Простой запрос		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
		Надёжность информационных систем									
		Надёжность информационных систем Содержание:	дисциплина Надёжность информационных систем	Надежность информационных систем, системы передачи информации	Яковлев А.В. НАДЕЖНОСТЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ СИСТЕМ Лекционный материал	Преподаватель Чаусова С.М. I. ВВЕДЕНИЕ 1. ЦЕЛЬ И ЗАДАЧИ ДИСЦИПЛИНЫ, ЕЕ МЕСТО В УЧЕБНОМ ПРОЦЕССЕ	НАДЁЖНОСТЬ ИНФОРМАЦИОННЫХ СИСТЕМ Введение	Оценка надежности информационных систем Я.А. Максимов	Название: Надежность информационных систем Автор: Абрамов О.В.	Обеспечение надежности производственных информационных систем Садовский К.В.	«Информационные системы»
	Коммент.				pdf						
	Объем (слов)			4000	19500		1300	1200		2130	2400
	Пертин.	0	0	1	1	0	1	1	0	1	1
		Точность	**0,6**	**К слов**	**30530**	**Объем (средн.)**	**5088**	**Перекрытие**	**1**	**Под авторством**	**3**

Расширенный запрос		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
		Архитектура && компьютерной && сети && Топология && сети && Методы && коммутации && данных && Элементы && сетей && Модель && стандарта && взаимодействия && открытых && систем && OSI									
		Курс лекции по компьютерным сетям Н. Н. Жеретинцева	Общие принципы построения вычислительных сетей	Глоссарий сетевых терминов	Курс лекции по компьютерным сетям Н. Н. Жеретинцева	Компьютерные сети учебник	Компьютерные сети и их виды Реферат	Технологии создания сетей	Лекции по сетям	Компьютерные сети. Принципы, технологии, протоколы: Учебник для вузов Олифер Виктор Григорьевич, Олифер Наталья Алексеевна	1. Эталонная модель взаимосвязи открытых систем (OSI RM).
	Коммент.				Дубль				Не читаемо		
	Объем (слов)	36600	26700			29050	6300			29250	11050
	Пертин.	1	1	0	0	1	1	0	0	1	1
		Точность	**0,6**	**К слов**	**138950**	**Объем (средн.)**	**23158**	**Перекрытие**	**0**	**Под авторством**	**1**

Простой запрос		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
		Архитектура компьютерной сети									
		6.2. АРХИТЕКТУРА КОМПЬЮТЕРНЫХ СЕТЕЙ	Архитектура сети	6.2. АРХИТЕКТУРА КОМПЬЮТЕРНЫХ СЕТЕЙ	Архитектура компьютерных сетей	Архитектура компьютерных сетей	Категория:Компьютерные сети Материал из Википедии	Архитектура компьютерных с	Передача данных в сетях: инженерный подход - Ирвин Дж. и др.	Архитектура компьютерных систем и сетей Т.П. Барановская, В.И. Лойко, М.И. Семенов, А.И. Трубилин;	Архитектура компьютерных систем и сетей
	Коммент.			Дубль					Купить	djvu	Купить
	Объем (слов)	1850	3500	850	950	900				30000	
	Пертин.	1	1	0	1	1	0	0	0	1	0
		Точность	**0,6**	**К слов**	**83200**	**Объем (средн.)**	**13867**	**Перекрытие**	**0**	**Под авторством**	**1**

Рис. 2. Влияние расширения запроса по схеме (1) на объём найденных документов

Таким образом, определение характеристик тематической полноты поиска позволит оценивать эффективность тематического интернет-поиска более объективно. **Основной характеристикой становится объём поисковой выборки, необходимый для обеспечения тематической полноты поиска.**

Для определения зависимости значения объёма поисковой выборки, обеспечивающего тематическую полноту поиска, от тематической сложности поискового термина было предпринято масштабное экспериментальное исследование. Изначально в качестве возможных показателей эффективности тематико-

ориентированного интернет-поиска нами были предложены коэффициент тематического охвата и глубина тематического охвата.

Коэффициент тематического охвата (*thematic coverage factor, TCF*) – показатель, характеризующий полноту освещения искомой тематики в поисковой выборке заданного объёма. Очевидно, что более эффективным будет поиск, при котором пользователь получает более полную информацию по всем аспектам тематики поиска при условии оптимального объёма поисковой выборки. В настоящее время в ряде работ рассматривается подход к анализу тематико-ориентированных методов поиска [27, 28], однако основной задачей является определение тематического подобия документов. Применение данных методов для обеспечения высоких значений TCF представляется одним из возможных путей повышения эффективности интернет-поиска. Гипотетически, сложность процесса получения полной информации по тематике поиска, и, следовательно, значение коэффициента тематического охвата зависит от тематической сложности поискового термина.

В качестве показателя, характеризующего скорость процесса получения пользователем ПМ полной информации по теме поиска, планировалось использовать *глубину тематического охвата* (*thematic coverage level, TCL*). TCL показывает зависимость тематической полноты найденной информации от количества просмотренных документов. Однако данный показатель оказался сложным в восприятии, а также не универсальным для расчёта эффективности поиска по различным (по коэффициенту семантического потенциала) поисковым терминам.

Технология оценки TCF и TCL. Очевидный метод работы с тематической составляющей документов основан на использовании семантической (терминологической) модели предметной области. Предлагаемый метод оценки эффективности интернет-поиска, в отличие от традиционных, не является автономным и требует применения тезауруса или, например, УДК в качестве семантической модели предметной области. Чем выше полнота представления терминологии, тем более объективной будет оценка предлагаемых показателей.

Тематика поиска раскрывается следующим образом. Запрос приводится к наиболее близкому дескриптору (термину) семантической модели T_n, оценивается релевантность документа каждому из нижестоящих дескрипторов $T[k]_{n+1}$ (k – их количество). Свойство поискового термина, приведённого к дескриптору тезауруса T_n, иметь определённое количество нижестоящих дескрипторов (связанных с исходным связью «ВЫШЕ») $T[k]_{n+1}$ отражает его лексический и семантический потенциал. Определим *коэффициент семантического потенциала поискового термина k* как количество тематических аспектов наиболее близкого дескриптора семантической модели предметной области, отражённых нижестоящими дескрипторами.

Таким образом, коэффициент тематического охвата (TCF) задаётся нижестоящими дескрипторами по отношению к тематике поискового запроса:

$$TCF_S = \frac{\sum_1^k T[k]_{n+1}}{k \cdot (s-k+1)}, s \geq \sum_1^k T[k]_{n+1}, \qquad (2)$$

где $\sum_1^k T[k]_{n+1}$ – количество присутствующих в выборке новых поисковых терминов, отражающих семантический потенциал вышестоящего термина. Параметр $s = [k;\infty]$ задаётся вручную и характеризует объём обрабатываемой поисковой выборки. В случае максимальной эффективности поиска объём поисковой выборки равен количеству нижестоящих дескрипторов.

Глубина тематического охвата (TCL) рассчитывается как минимальный объём поисковой выборки, в котором раскрыт семантический потенциал поискового термина $V_{\min}$, т.е. представлена информация по комплексу $T[k]_{n+1}$

$$TCL = \frac{k}{V_{\min}} \text{ при } \sum_1^k T[k]_{n+1} = k \qquad (3)$$

Сложность задачи нахождения комплекса $T[k]_{n+1}$ при равном отношении $\frac{k}{V_{\min}}$ увеличивается с увеличением k. В таком случае необходимо ввести в формулу (3) коэффициент усложнения задачи.

Для того чтобы определить зависимость TCL от значения показателя семантического потенциала поискового термина, а также получить данные о распределении пертинентных документов в поисковой выборке и ряд других сведений, нами было проведено объёмное экспериментальное исследование.

Описание эксперимента. В качестве терминологической модели использовалась УДК. В качестве поискового термина случайным методом выбирался дескриптор T_n с необходимым значением показателя семантического потенциала $k = [1…9]$. Для каждого уровня проводилось семь операций поиска по различным поисковым запросам с помощью ПМ Яндекс для обеспечения надёжности эмпирических данных. Прагматически реальным ограничением объёма исследуемой поисковой выборки были приняты 100 первых найденных документов. Для каждого дескриптора $T[k]_{n+1}$ в поисковой выборке методом экспертной оценки выявлялся первый пертинентный документ и фиксировался его порядковый номер. В случае отсутствия пертинентного документа в поисковой выборке в качестве порядкового номера принималось прагматически реальное значение объёма обрабатываемой поисковой выборки. Статистическая достоверность данных обеспечивалась семью точками (значениями s) для каждого количества подуровней. Эксперимент проводился итерационным методом, было проведено более 300 операций поиска, проанализировано на предмет пертинентности (отражения одного или нескольких аспектов поиско-

вого термина) более 10 тыс. найденных документов. Последовательность операций изображена на рис. 3.

В результате были получены данные о вариации объёма поисковой выборки для комплекса дескрипторов с показателем семантического потенциала $k = [1…9]$. Фрагмент полученных экспериментальным путём данных представлен в таблице.

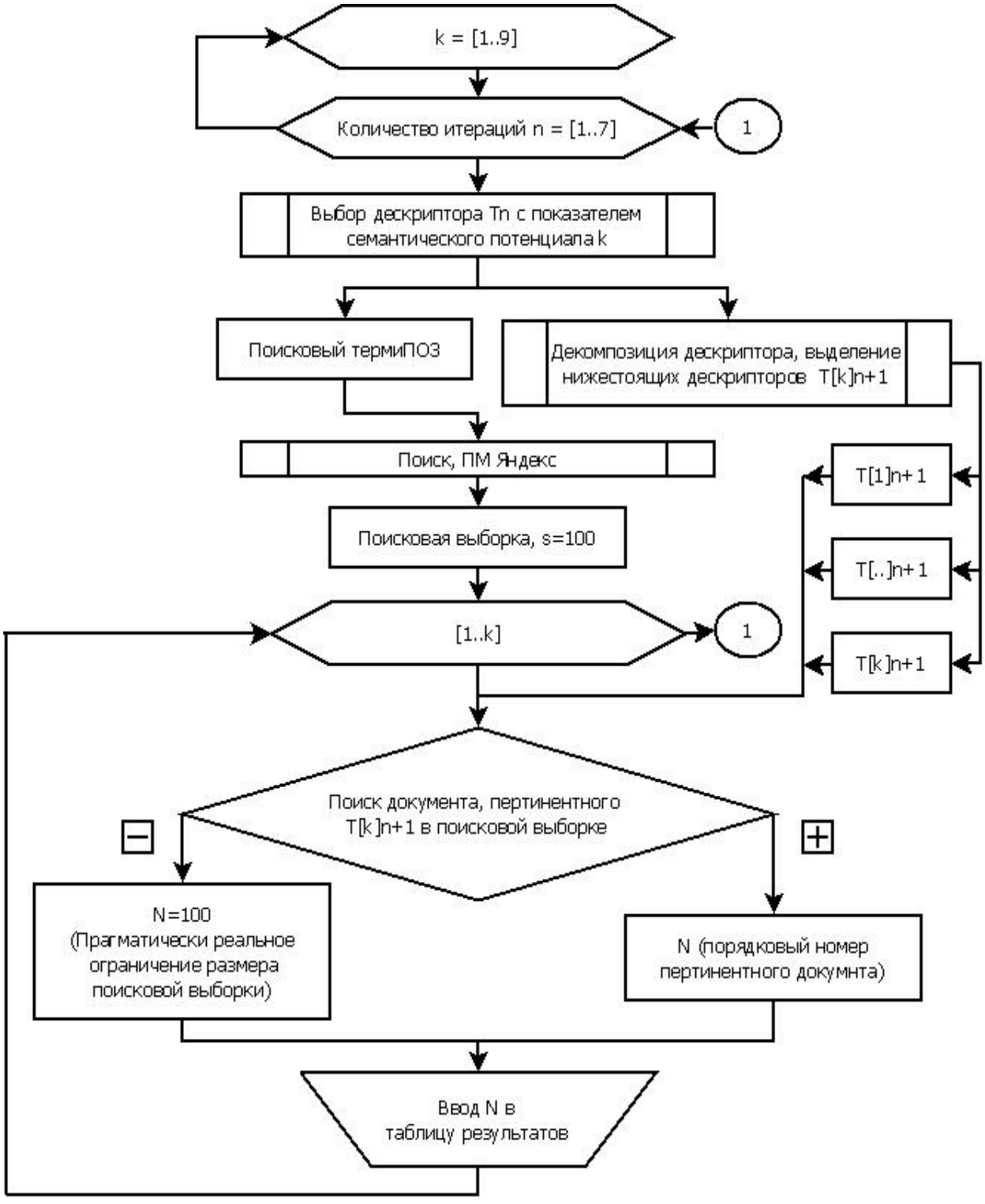


Рис. 3. Алгоритм получения эмпирических данных

Фрагмент представления экспериментальных данных

Поисковый термин $T[k]_{n+1}$				**Объем поисковой выборки**				**Порядковый номер пертинентного документа**
5 подуровней								
Абстрактные типы данных								
		s	**86**					
Списки								1
Стеки								1
Очереди								1
Деки, Двухсторонние очереди								86
Таблицы								2
Синтаксис программ								
		s	**34**					
Конкретный синтаксис								22
Абстрактный синтаксис								32
Регулярное выражение								34
Бесконтекстная (контекстно-свободная) грамматика (Смотри также:)								9
Атрибутивная грамматика (Смотри также:)								24
Искусственный интеллект								
		s	**38**					
Модели когнитивных процессов								20
Представление знаний								2
Рассуждение								2
Обучение								18
Прикладные системы искусственного интеллекта. Интеллектуальные системы, основанные на использовании знаний								38
Регистры процессоров								
		s	**9**					
Регистры общего назначения								1
Аккумуляторы. Накапливающие регистры								9
Сдвиговые регистры								1
Регистры чисел с плавающей запятой								5
Стековые регистры								2
Арифметические устройства								
		s	**69**					
Сумматоры. Полусумматоры								7
Схемы образования дополнения								7
Множительные устройства. Делительные устройства								58
Векторные арифметические устройства								69
Сдвигающие устройства. Сравнивающие устройства								67

Поисковый термин $T[k]_{n+1}$					**Объем поисковой выборки**				**Порядковый номер пертинентного документа**
Функционирование компьютерной памяти									
				s	**6**				
Чтение									2
Запись									2
Доступ									6
Адресация									4
Поблочная передача									52
Компьютеры общего назначения. Универсальные вычислительные машины									
				s	**19**				
Суперкомпьютеры. Супер-ЭВМ									2
Большие вычислительные машины. Универсальные ЭВМ. Мэйнфреймы									14
Миникомпьютеры. Мини-ЭВМ									2
Рабочие станции									19
Персональные компьютеры. ПЭВМ. Микрокомпьютеры. Микро-ЭВМ									19
		s ср =	**37,29**						-
		Стандартное отклонение =	**20,31**						-
		Стандартное отклонение (s) =	**30,29**						
		s > 100, % =	0,00						
6 подуровней									
Компьютерная графика									
				s	**74**				
Элементы и объекты компьютерной графики									2
Координаты в компьютерной графике. Преобразование изображений. Преобразование для просмотра									3
Стереоскопическая визуализация									74
Методы ввода графики (Смотри также:)									20
Методы компьютерной графики									1
Анимация. Мультипликация^									5
Структурированные данные. Структуры данных									
				s	**33**				
Массивы. Матрицы									33
Записи									4
Множества									11
Динамические структуры данных									21
Абстрактные типы данных									11
Другие типы данных									23
Сети ЭВМ. Вычислительные сети									
				s	**26**				
Сетевая аппаратура (Телекоммуникационное оборудование - Смотри:)									1
Архитектура сетей (Сетевые протоколы - Смотри:)									3
Виды сетей в зависимости от охватываемой территории									3

Поисковый термин $T[k]_{n+1}$				**Объем поисковой выборки**				**Порядковый номер пертинентного документа**
Распределенные системы обработки данных (Смотри также:)								1
Применения компьютерных сетей в целом. Применение Интернета								3
Диалоговые вычислительные системы для специальных целей								26
Устройства ввода координат. Координатно-указательные устройства. Устройства ввода графики								
		s		**100**				
Световое перо								3
Сенсорные экраны								3
Графические планшеты. Кодирующие планшеты. Дигитайзеры. Устройства для оцифровки чертежей и рисунков								12
Мышь								4
Шары трассировки								100
Рычажные указатели. Джойстики								8
Проектирование программного обеспечения и вычислительных систем								
		s		**100**				
Абстракция								12
Разбиение на модули. Модуляризация								35
Упрятывание информации								100
Программирование отдельных компонентов системы								100
Языки проектирования программ. Псевдокод. Символический код								32
Спецификация проекта программного обеспечения								24
Сетевая аппаратура								
		s		**100**				
Сетевые адаптеры. Сетевые платы								1
Коммутаторы данных								1
Концентраторы. Хабы. Активные концентраторы, пассивные концентраторы								1
Маршрутизаторы								1
Устройства сетевой связи. Мосты, шлюзы, реле								1
Фронтальные процессоры. Связные процессоры. Фронтальные вычислительные машины. Связные компьютеры								100
Представление знаний								
		s		**100**				
Сети знаний. Семантические сети								2
Фреймовые системы. Фреймы. Схемы. Сценарии								2
Множественные миры								4
Порождающие системы. Системы правил вывода								2
Модель черной доски								100
Представление неоднозначности. Неопределенность. Пробелы знаний								6
	s ср =	**76,14**						-
	Стандартное отклонение =	**32,38**						-
	Стандартное отклонение (s) =	**33,31**						
	s > 100, % =	57,00						

Анализ экспериментальных данных. Распределение комплекса пертинентных документов (рис. 4), содержащих новую информацию по теме поиска в поисковой выборке, соответствует данным глобальной поисковой статистики [29].

Эмпирические данные объясняют поведение большинства пользователей ПМ, ограничивающихся, вопреки рекомендациям, просмотром первой страницы поисковой выборки. В то же время статистические данные, согласующиеся с результатами эксперимента, подтверждают правильное направление в определении методики оценки эффективности поиска. Противоположная ситуация складывается при использовании стандартной методики оценки, основанной, прежде всего, на показателе точности поиска. Динамика точности поиска, полученная в результате исследования, проведённого и описанного в [19], представлена на рис. 5. Постоянная в процессе просмотра поисковой выборки эффективность поиска, основанная на показателе точности, противоречит статистическим данным.

Вероятность присутствия пертинентного документа, содержащего новую информацию (информацию по тематическому аспекту поискового термина, не освещённому в просмотренной выборке), после первых пятнадцати позиций снижается более чем в 5 раз. Таким образом, **несмотря на высокую постоянную точность поиска** [19] **большинство пользователей ограничивается просмотром лишь первых позиций выборки вследствие снижения вероятности получить новую информацию по теме поиска.**

В ходе анализа данных эксперимента была выявлена эмпирическая зависимость между значением объёма поисковой выборки и значением коэффициента семантического охвата поискового термина (рис. 6). Найденная зависимость показывает быстрое снижение тематической полноты поиска и увеличение объёма поисковой выборки с увеличением значения коэффициента семантического потенциала. Эмпирические данные аппроксимируются как степенной (4), так и линейной (5) функциями со сходной достоверностью аппроксимации:

$$V_{\min} = 1{,}6k^2 \qquad (4)$$

$$V_{\min} = 12{,}8k - 17{,}4 \qquad (5)$$

На основе полученных эмпирических закономерностей включим в формулу расчёта *TCL* коэффициент усложнения задачи нахождения комплекса $T[k]_{n+1}$ при равном отношении $\frac{k}{V_{\min}}$ с увеличением k. В этом случае формула (3) для стандартной методики поиска примет вид:

$$TCL = \frac{12{,}8k - 17{,}4}{V_{\min}}, k > 1, \quad TCL = 1{,}6\frac{k^2}{V_{\min}}.$$

На данном этапе исследования стало очевидным неудобство восприятия и расчёта показателя тематической глубины поиска, сравнения эффективности поиска при использовании терминов с различным значением коэффициента семантического потенциала. Логически выглядит правильнее оценивать *минимальный объём поисковой выборки, в котором раскрыт семантический потенциал поискового термина* $V_{\min}$.

Как показал эксперимент, тематическая полнота не обеспечивается объёмом поисковой выборки в 100 документов при значении коэффициента тематического потенциала поискового термина $k > 5$ (рис. 6). Здесь мы видим линейную зависимость, которая свидетельствует о повышении доли поисковых сессий, при которых не полностью освещена тематика поиска, при повышении коэффициента тематического потенциала поискового термина. Учитывая разброс пертинентных документов, содержащих новую информацию по тематике поиска и высокое процентное соотношение поисковых сессий, при которых тематика поиска не освещена полностью (рис. 7), экспериментальное исследование показало, что **интернет-поиск с использованием тематически сложных поисковых терминов является неэффективным.**

Эксперимент показал, что эффективность поиска зависит от тематической сложности поискового термина, оцениваемой с помощью коэффициента семантического потенциала. **Повышение тематической сложности поискового термина ведёт к снижению эффективности поиска при постоянном значении точности.** Другими словами, в процессе движения вглубь поисковой выборки, при неизменной точности поиска, снижается доля новой информации. Именно с этим фактом снижения эффективности поиска связано нежелание пользователей ПМ просматривать всю поисковую выборку, даже если в начале выборки искомая информация не найдена. В таком случае пользователь прибегает к модификации запроса, что оказывается более эффективным, чем продолжать просматривать результаты поиска.

Метод повышения эффективности поиска. Очевидно, что минимальный объем выборки, необходимый для обеспечения тематической полноты поиска $V_{\min}$, при использовании поисковых терминов с показателем семантического потенциала $k = [1\ldots3]$, является удовлетворительным (рис. 6). Как показано выше, работа с поисковой выборкой объёмом свыше пятнадцати документов не оправдана по причине резко снижающейся вероятности встретить новую информацию по теме поиска. Таким образом, тематико-ориентированный интернет-поиск с использованием поисковых терминов с показателем семантического потенциала $k > 3$ является низкоэффективным. Кроме того, в среднем в 40% поисковых сессий при $k = [4\ldots9]$ тематическая полнота не обеспечивалась в пределах поисковой выборки объёмом в 100 документов.

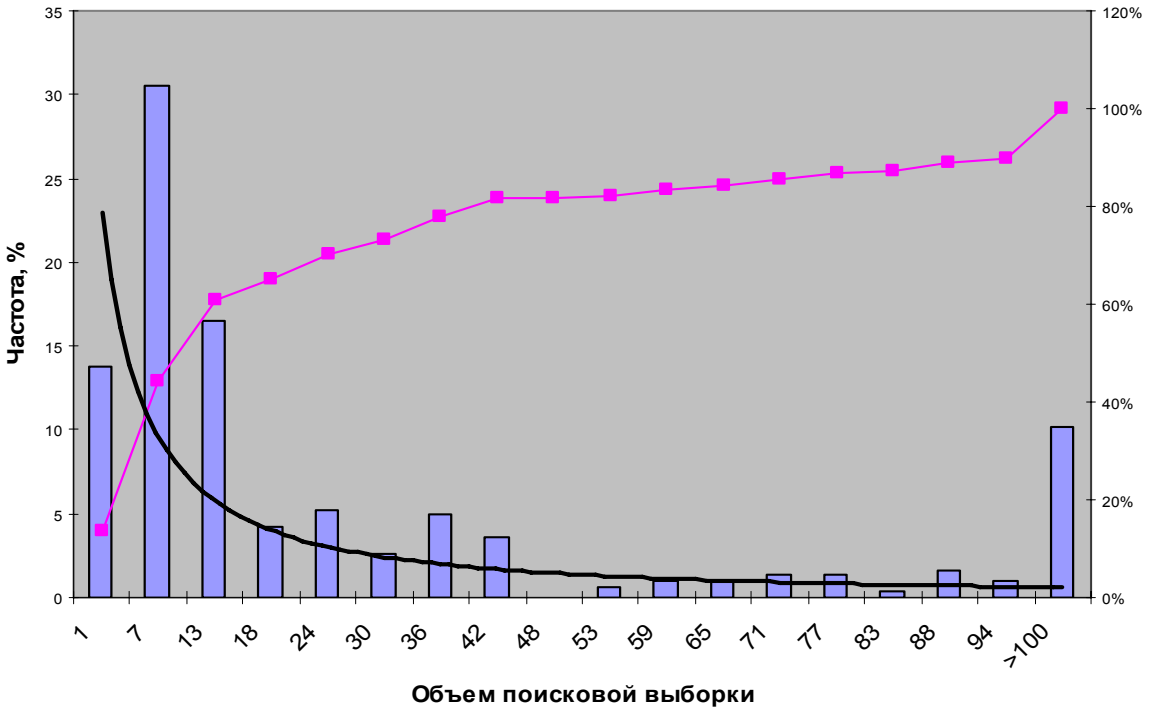


Рис. 4. Зависимость частоты распределения пертинентных документов, содержащих новую информацию, от объёма поисковой выборки

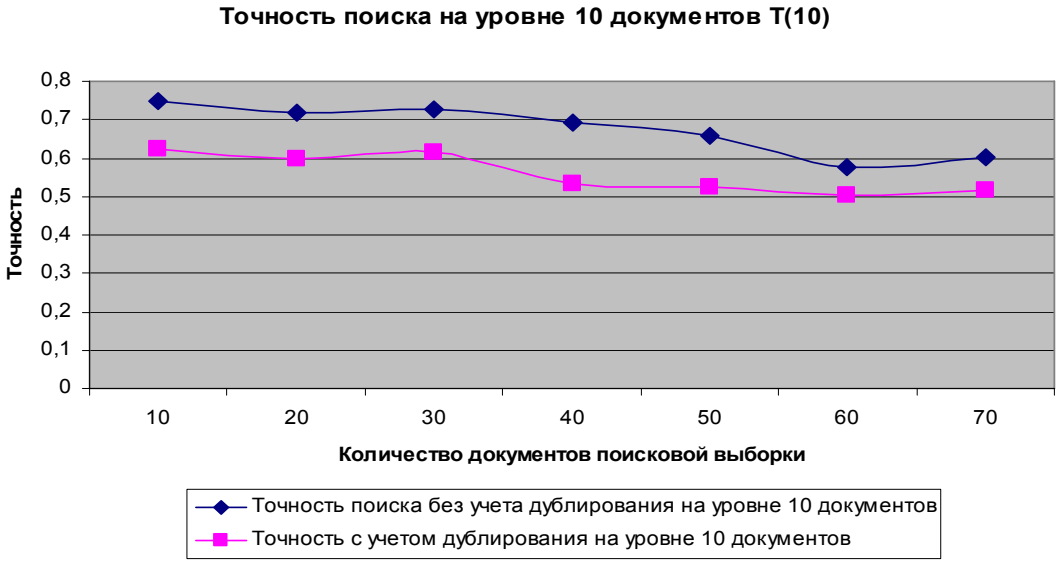


Рис. 5. Зависимость показателя точности поиска от количества документов в поисковой выборке

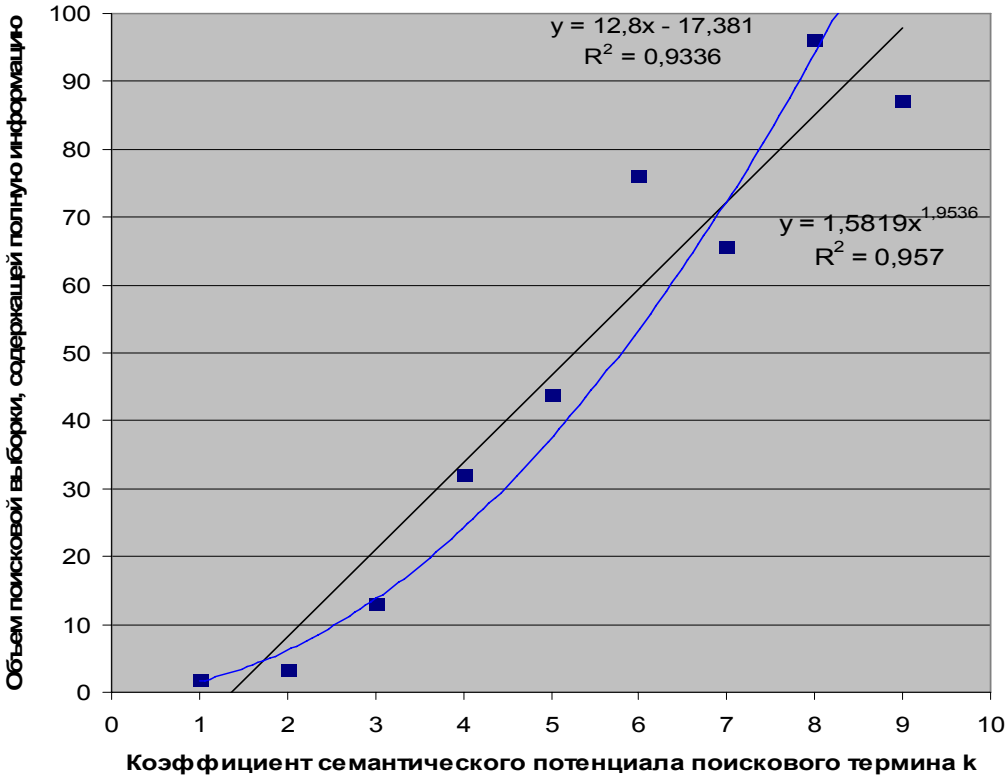


Рис. 6. Зависимость глубины поискового охвата от значения коэффициента семантического потенциала поискового термина

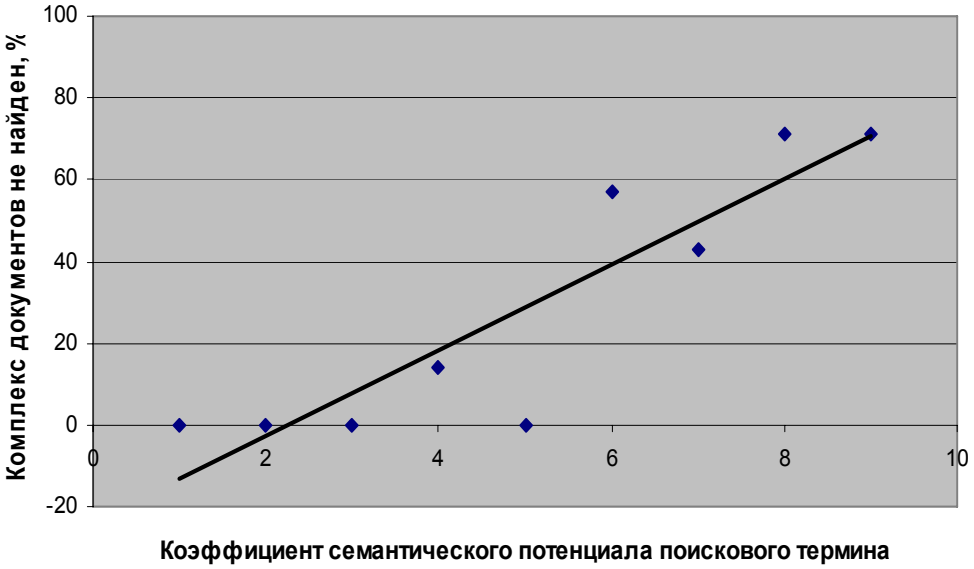


Рис. 7. Зависимость количества поисковых сессий, при которых тематика поиска не освещена полностью, от значения коэффициента семантического потенциала поискового термина

Разработка метода повышения эффективности поиска основывалась на следующих положениях:

1) новая информация по теме поиска сконцентрирована среди первых пятнадцати позиций поисковой выборки;

2) среднее значение оптимального объёма поисковой выборки представляет собой пятнадцать документов $s_{optim} = 15$;

3) объём поисковой выборки для обеспечения тематической полноты поиска при использовании поисковых терминов с показателем семантического потенциала $k > 3$ превышает оптимальный;

4) при использовании поисковых терминов с показателем семантического потенциала $k > 5$ вероятность получить полную информацию по теме составляет 40%;

5) точность интернет-поиска представляет собой чаще всего константу $T \cong 0{,}56$ [5, 19];

6) включение оператора «ИЛИ» в запрос не имеет смысла при тематико-ориентированном поиске.

Задача оптимизации поиска сформулирована следующим образом: обеспечить такую тематическую полноту информации, получаемой в результате поисковой сессии (ПС) посредством уменьшения объёма поисковой выборки, чтобы семантический потенциал поискового термина был раскрыт максимально полно. Поэтому предлагаемый метод основывается на гипотезе о более высокой эффективности поиска при субституции поисковой сессии, содержащей поисковый термин T_n с показателем семантического потенциала $k > 3$ на k поисковых сессий по комплексу запросов $\sum_1^k T[k]_{n+1}$. Необходимость выделения отдельных поисковых сессий связана с положением 5.

Методика (см. алгоритм на рис. 8) основывается на выделении k нижестоящих дескрипторов $T[k]_{n+1}$ по отношению к поисковому термину T_n, субституции исходной ПС на комплекс ПС по каждому из запросов $T[k]_{n+1}$ вида $ПС_0(T_n) \to \sum_1^k ПС_1(T_n ANDT[k]_{n+1})$, проведении отдельных поисковых сессий по каждому полученному ПОЗ и интеграции результатов поисковых сессий для последовательного или параллельного просмотра в отношении поиска документов, пертинентных комплексу ПОЗ $\sum T[k]_{n+1}$. Параметр i, определяющий объём поисковой выборки для $ПС_1(T_n ANDT[k]_{n+1})$, установлен эмпирическим путём, его значение приведено ниже.

Для определения эффективности метода был реализован эксперимент на комплексе исследованных ранее запросов (см. таблицу) с $k = [4\ldots9]$. Фрагмент эмпирических данных отражён на рис. 9а.

Эксперимент показал, что с использованием предложенного нами преобразования поисковой сессии при условии получения полной информации по теме поиска **среднее значение минимального объёма поисковой выборки, обеспечивающего тематическую полноту поиска $V_{\min}$, составило 18 документов** (рис. 9б), что в 3,7 раза меньше, чем значение, полученное при стандартном поиске (68 документов).

Анализ эмпирических данных показал, что объём поисковой выборки лишь незначительно увеличивается с повышением значения коэффициента семантического потенциала поискового термина. Этот факт говорит об универсальности объёма поисковой выборки в 18 документов, т.е. *предложенная методика раскрывает семантический потенциал поискового термина в среднем в объёме поисковой выборки, равном 18 документам* (рис. 10). Представленные данные получены без учёта перекрытия пертинентных документов среди промежуточных ПС. Фактически, документ, отражающий один семантический аспект исходного поискового термина T_n, может содержать также информацию о других аспектах искомой тематики. Другими словами, процесс получения комплекса искомой информации в реальности будет происходить быстрее. Для семи случайных ПС мы фиксировали количество просмотров документов, необходимое для получения тематически полной информации. Его среднее значение составило 12 документов.

Из распределения пертинентных страниц в поисковой выборке по каждому из запросов $T[k]_{n+1}$ (рис. 11) видно, что 97% пертинентных документов расположены в пределах первых семи позиций, 88% – в пределах первых четырёх.

Параметр i, определяющий объём промежуточной поисковой выборки для $ПС_1(T_n ANDT[k]_{n+1})$, примем равным 7. Вероятность присутствия пертинентного документа в промежуточной поисковой выборке составит 97%.

Организация результирующей выборки. При анализе результирующей поисковой выборки основными затратами пользователя, определяющими степень доступности результатов поиска и одновременно уровень их надёжности, являются: время просмотра; количество документов в результирующей выборке; количество поисковых терминов, которые необходимо держать в памяти; простой и логически понятный интерфейс. Приведём четыре варианта максимально полного предоставления результатов оптимизированного поиска пользователю, расположенные по снижению вероятных затрат среднестатистического пользователя:

А. Основные варианты:

1. Последовательный просмотр поисковых выборок по каждому аспекту тематики поискового термина. Просмотр выборки продолжается до тех пор, пока не будет найден документ, содержащий информацию по данному аспекту тематики. Документы, отражающие другие аспекты тематики поиска, игнорируются. Пользователь оперирует одним поисковым термином. Объём поисковой выборки не ограничен. Среднее значение минимального объёма, обеспечивающего тематическую полноту $V_{\min}$ поиска, в данном случае составит 18 документов.

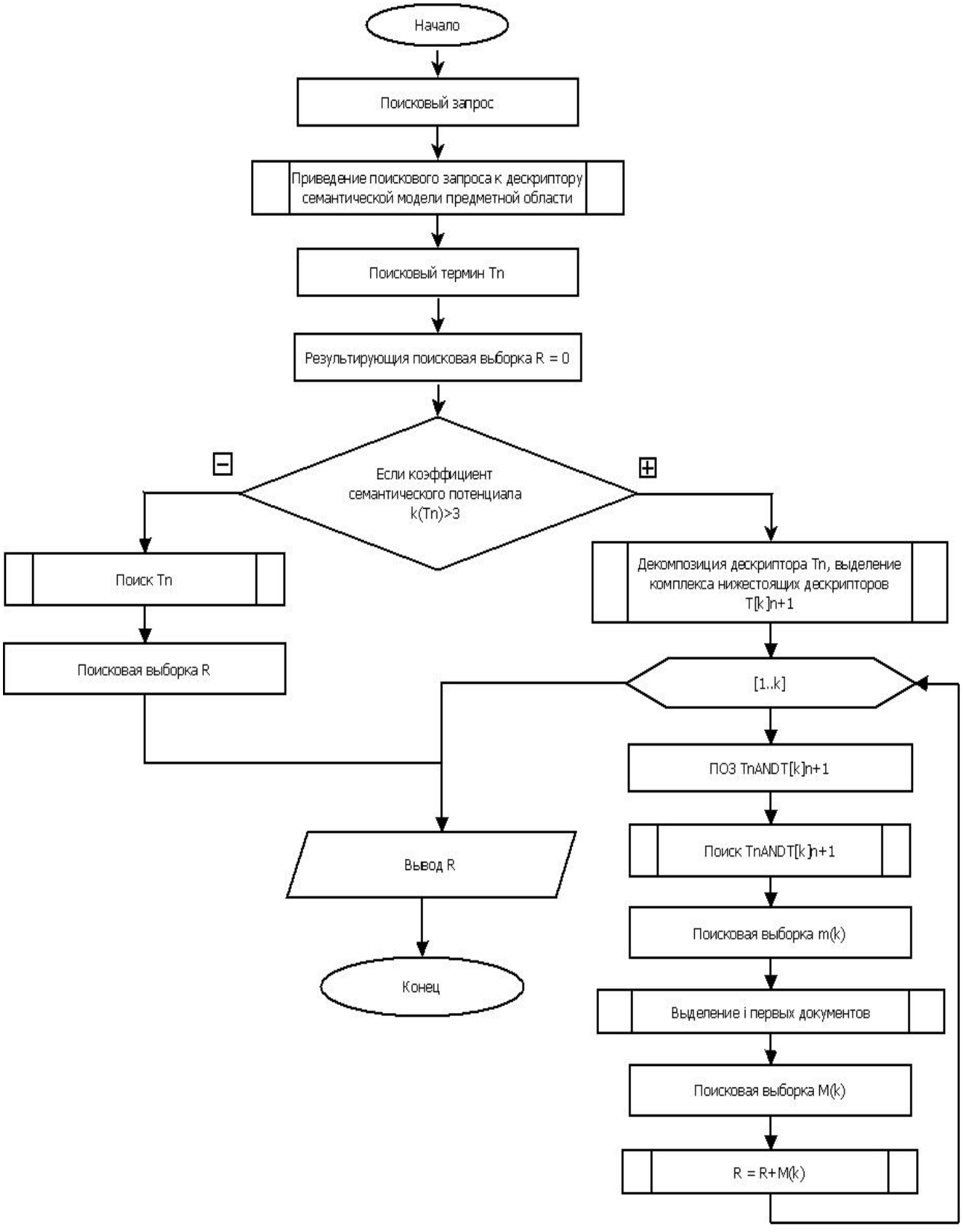


Рис. 8. Алгоритм оптимизации объёма поисковой выборки
согласно описанной методике

Коэффициент семантического потенциала 5

Абстрактные типы данных

Объем поисковой выборки S(norm) = 86 ***Объем поисковой выборки (поиск оптимизирован) S(opt) = 14***

Списки	Абстрактные типы данных Списки	3
Стеки	Абстрактные типы данных Стеки	1
Очереди	Абстрактные типы данных Очереди	2
Деки, Двухсторонние очереди	Абстрактные типы данных Деки, Двухсторонние очереди	1
Таблицы	Абстрактные типы данных Таблицы	7

Синтаксис программ

Объем поисковой выборки S(norm) = 34 ***Объем поисковой выборки (поиск оптимизирован) S(opt) = 7***

Конкретный синтаксис	Синтаксис программ Конкретный синтаксис	2
Абстрактный синтаксис	Синтаксис программ Абстрактный синтаксис	2
Регулярное выражение	Синтаксис программ Регулярное выражение	1
Бесконтекстная (контекстно-свободная) грамматика	Синтаксис программ Бесконтекстная (контекстно-свободная) грамматика	1
Атрибутивная грамматика	Синтаксис программ Атрибутивная грамматика	1

Искусственный интеллект

Объем поисковой выборки S(norm) = 38 ***Объем поисковой выборки (поиск оптимизирован) S(opt) = 13***

Модели когнитивных процессов	Искусственный интеллект Модели когнитивных процессов	2
Представление знаний	Искусственный интеллект Представление знаний	2
Рассуждение	Искусственный интеллект Рассуждение	5
Обучение	Искусственный интеллект Обучение	1
Прикладные системы искусственного интеллекта. Интеллектуали	Искусственный интеллект Прикладные системы искусственного интеллекта. Интеллектуальн	3

Регистры процессоров

Объем поисковой выборки S(norm) = 9 ***Объем поисковой выборки (поиск оптимизирован) S(opt) = 13***

Регистры общего назначения	Регистры процессоров Регистры общего назначения	1
Аккумуляторы. Накапливающие регистры	Регистры процессоров Аккумуляторы. Накапливающие регистры	2
Сдвиговые регистры	Регистры процессоров Сдвиговые регистры	1
Регистры чисел с плавающей запятой	Регистры процессоров Регистры чисел с плавающей запятой	5
Стековые регистры	Регистры процессоров Стековые регистры	4

Арифметические устройства

Объем поисковой выборки S(norm) = 69 ***Объем поисковой выборки (поиск оптимизирован) S(opt) = 11***

Сумматоры. Полусумматоры	Арифметические устройства Сумматоры. Полусумматоры	1
Схемы образования дополнения	Арифметические устройства Схемы образования дополнения	1
Множительные устройства. Делительные устройства	Арифметические устройства Множительные устройства. Делительные устройства	4
Векторные арифметические устройства	Арифметические устройства Векторные арифметические устройства	2
Сдвигающие устройства. Сравнивающие устройства	Арифметические устройства Сдвигающие устройства. Сравнивающие устройства	3

Функционирование компьютерной памяти

Объем поисковой выборки S(norm) = 52 ***Объем поисковой выборки (поиск оптимизирован) S(opt) = 12***

Чтение	Функционирование компьютерной памяти Чтение	1
Запись	Функционирование компьютерной памяти Запись	1
Доступ	Функционирование компьютерной памяти Доступ	1
Адресация	Функционирование компьютерной памяти Адресация	2
Поблочная передача	Функционирование компьютерной памяти Поблочная передача	7

Компьютеры общего назначения. Универсальные вычислительные машины

Объем поисковой выборки S(norm) = 19 ***Объем поисковой выборки (поиск оптимизирован) S(opt) = 11***

Суперкомпьютеры. Супер-ЭВМ	Компьютеры общего назначения. Универсальные вычислительные машины Суперкомпьютер	1
Большие вычислительные машины. Универсальные ЭВМ. Мэйнф	Компьютеры общего назначения. Универсальные вычислительные машины Большие вычисл	1
Миникомпьютеры. Мини-ЭВМ	Компьютеры общего назначения. Универсальные вычислительные машины Миникомпьютер	1
Рабочие станции	Компьютеры общего назначения. Универсальные вычислительные машины Рабочие станции	7
Персональные компьютеры. ПЭВМ. Микрокомпьютеры. Микро-Э	Компьютеры общего назначения. Универсальные вычислительные машины Персональные к	1

S(norm)ср = 43,86 **S(opt)ср = 11,57**

артное отклонение (S(norm)) = 27,20 **Стандартное отклонение (S(norm)) = 2,30**

S(norm) > 100, % = 0,00 **S(norm) > 100, % = 0,00**

Рис. 9а. Фрагмент эмпирических данных по различным запросам

2. Последовательный просмотр поисковых выборок по каждому аспекту тематики поискового термина. Просмотр выборки продолжается до тех пор, пока не будет найден документ, содержащий информацию по данному аспекту тематики. Документы, отражающие другие аспекты тематики поиска, *фиксируются*. Пользователь оперирует совокупностью поисковых терминов, раскрывающих семантический потенциал поискового термина. Объём поисковой выборки не ограничен. $V_{\min} = 12$.

Б. Дополнительные варианты, реализуемые с целью минимизации объёма результирующей выборки:

3. Интеграция результатов $ПС_1$, $\boldsymbol{i = 7}$. Вероятность полного освещения тематики поиска 97%. Объём поисковой выборки равен $7\boldsymbol{k}$. Интерфейс подобен интерфейсу ПМ.

4. Интеграция результатов $ПС_1$, $i = 4$. Вероятность полного освещения тематики поиска 88%. Объём поисковой выборки равен $4k$.

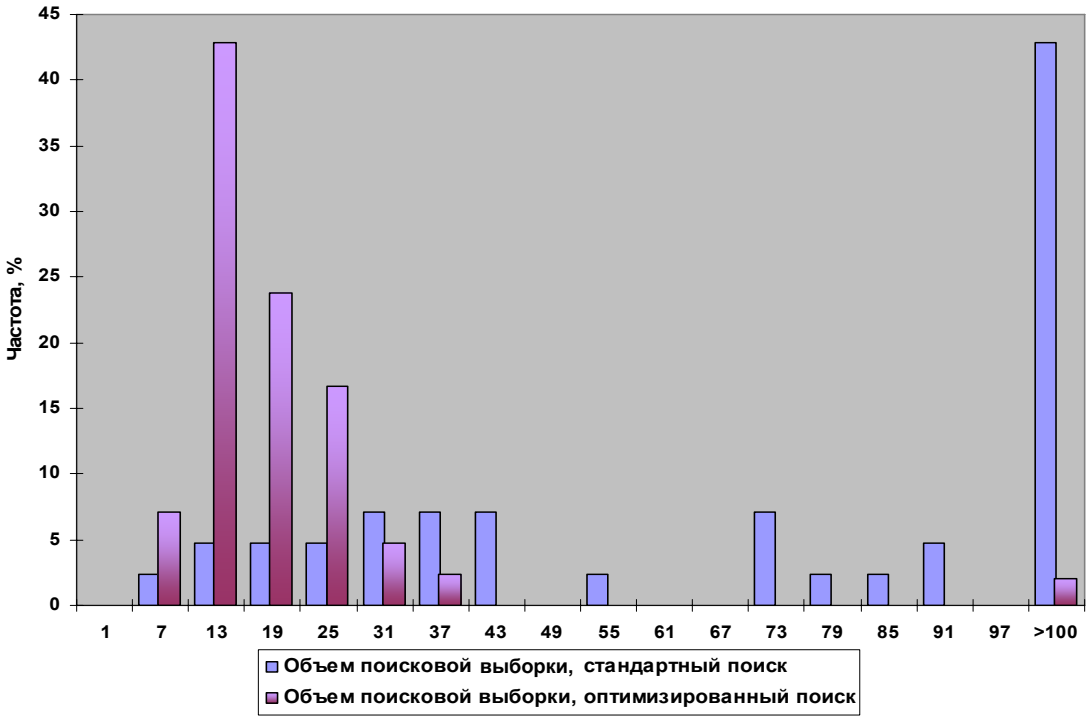


Рис. 9б. Объём поисковой выборки,
раскрывающей семантический потенциал поискового термина,
для простого и оптимизированного поиска

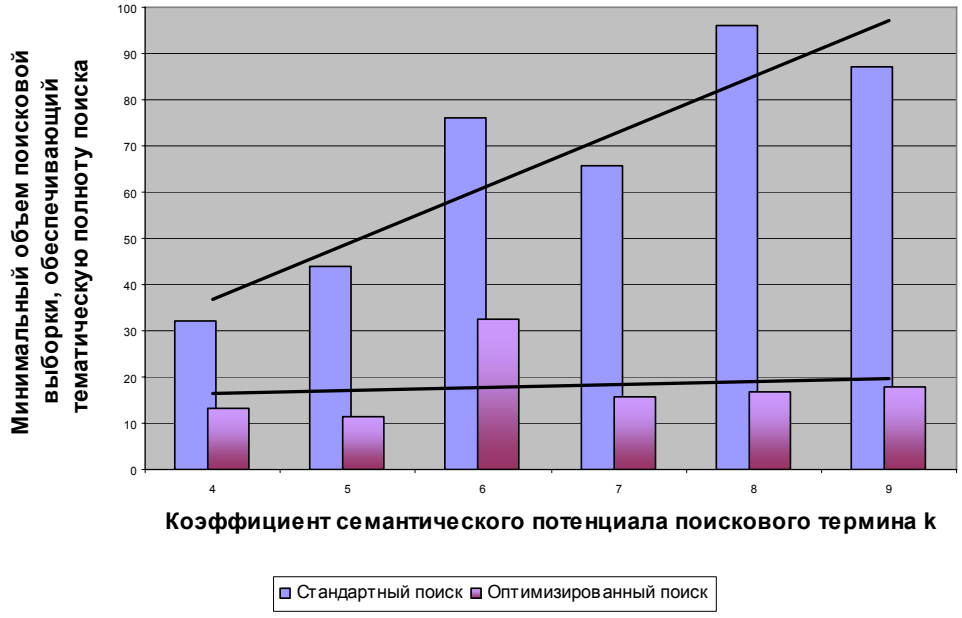


Рис. 10. Зависимость минимального объёма поисковой выборки от коэффициента
семантического потенциала поискового термина

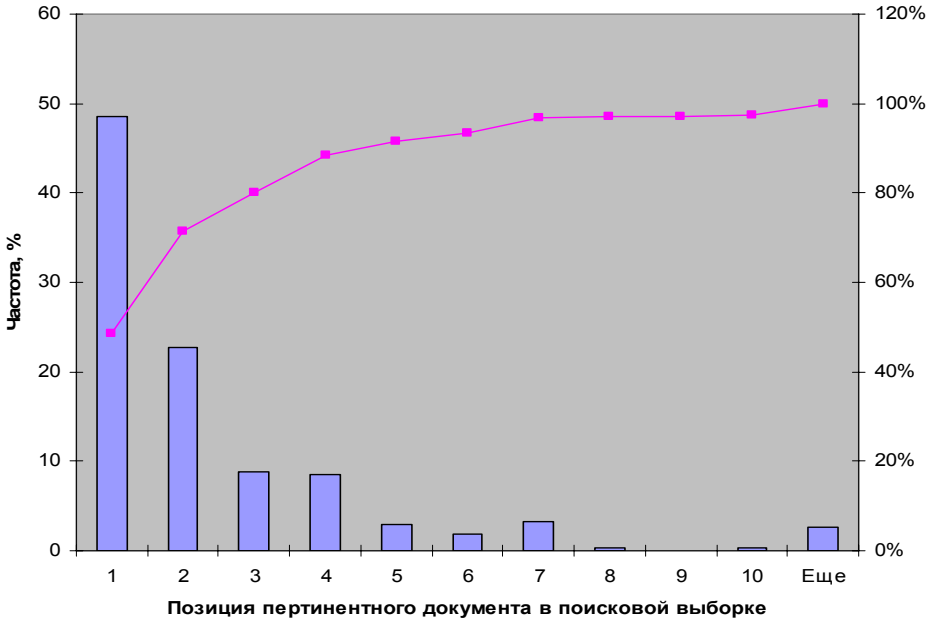


Рис. 11. Распределение пертинентных страниц в промежуточных поисковых выборках

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результаты исследования можно обобщить следующим образом:

1. Получен комплекс эмпирических данных с применением совокупности расширенных ПОЗ, использованных в начальном эксперименте. Анализ результатов эксперимента позволил сделать вывод о необъективности общепринятого показателя точности для оценки эффективности тематико-ориентированного интернет-поиска.

2. Установлено «узкое место» в стандартной методике оценки эффективности и направление оптимизации интернет-поиска, связанное с минимизацией объёма поисковой выборки, обеспечивающего тематическую полноту поиска.

3. Предложен новый показатель эффективности интернет-поиска – минимальный объём поисковой выборки, раскрывающий семантический потенциал поискового термина (обеспечивающий тематическую полноту поиска).

4. Предложена новая методика оценки эффективности интернет-поиска, оперирующая семантической составляющей результатов поиска на основе коэффициента семантического потенциала поискового термина.

5. Получен комплекс эмпирических данных по оценке эффективности интернет-поиска с использованием предложенной методики.

6. Экспериментально доказано существенное повышение значения минимального объёма поисковой выборки, обеспечивающего тематическую полноту поиска, при увеличении значения коэффициента семантического потенциала поискового термина. Результаты эксперимента подтверждаются статистикой поведения пользователей ПМ, теоретически «неправильного» с точки зрения общепринятого подхода.

7. Показано, что тематико-ориентированный интернет-поиск с использованием поисковых терминов с показателем семантического потенциала $k > 3$ является низкоэффективным.

8. Описана методика повышения эффективности поиска, разработанная в соответствии с обозначенными выше положениями.

9. Экспериментально показано уменьшение минимального объёма поисковой выборки, в котором раскрыт семантический потенциал поискового термина, при использовании предложенной методики оптимизации. Его среднее значение составило 18 документов, что в 3,7 раза меньше, чем значение, полученное для стандартного поиска (68 документов);

10. Объём поисковой выборки остаётся стабильным при повышении значения коэффициента семантического потенциала поискового термина (в противоположность п. 6).

11. Описаны четыре способа организации результирующей выборки. При использовании одного из них среднее значение минимального объёма поисковой выборки, обеспечивающего тематическую полноту поиска, составило 12 документов, что в пять с лишним раз меньше аналогичного значения для стандартного поиска.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Berger A. L., Delia Pietra St. A., Delia Pietra V. J. A Maximum Entropy Approach to Natural Language Processing // Computational Linguistics. – 1996. – Vol. 22, №1. – P. 39 – 71.

2. Manning D., Sehutzc H. Foundations of statistical natural language processing. – New York : The MIT Press, 2003. – 219 p.

3. Браславский П. И. Тезаурус для расширения запросов к машинам поиска Интернета: структура

и функции // Компьютерная лингвистика и интеллектуальные технологии: 3-я Междунар. конф. «Диалог'2003» (Протвино, 11 – 16 июня 2003 г.). – М. : Наука, 2003. – С. 95 – 100.

4. Пескова О. В. Методы автоматической классификации электронных текстовых документов без обучения // НТИ. Сер. 2. – 2006. – №12. – С. 21 – 32.

5. Сергеев А. Ю., Тютюнник В. М. Разработка и тестирование методики оценки показателей эффективности сетевого информационного поиска // Формирование специалиста в условиях региона: Новые подходы : материалы 7-й Всерос. межвузов. науч. конф. / под ред. В. М. Тютюнника, В. А. Сысоева. – Тамбов ; М. ; СПб. ; Баку ; Вена : Изд-во «Нобелистика», 2008. – С. 80 – 87.

6. Salton G. Developments in Automatic Text Retrieval // Science. – 1991. – Vol. 253. – P. 974 – 979.

7. Brandt C., Joachims T., Yue Y., Bank J. Dynamic Ranked Retrieval [Электрон. ресурс]. – URL: http://www.cs.cornell.edu/people/tj/publications/brandt_etal_11a.pdf

8. Rogers I. The Google Page Rank Algorithm and How It Works [Электрон. ресурс]. – URL: http://www.iprcom.com/papers/pagerank/

9. Альшанский Г. А., Браславский П. И., Титов П. В. Формирование информационных запросов к машинам поиска интернета на основе тезауруса: семантико-ориентированный подход // Труды 8-й Междунар. конф. по электрон. публикациям «EL-Pub2003» (Новосибирск, 8 – 10 октября 2003 г.) [Электрон. ресурс]. – URL: http://www.ict.nsc.ru/ws/elpub2003/5964/

10. Браславский П. И. Автоматические операции с запросами к машинам поиска интернета на основе тезауруса: подходы и оценки // Диалог-2004 [Электрон. ресурс]. – URL: http://www.dialog-21.ru/Archive/2004/Braslavskij.pdf

11. Браславский П. И. Анализ поисковых запросов [Электрон. ресурс]. – URL: http://logic.pdmi.ras.ru/csclub/sites/default/files/slides/20101127_search_query_analysis_braslavski_lecture01.pdf

12. Браславский П. И. Построение запросов к машине поиска Internet с помощью тезауруса // Электронные библиотеки: перспективные методы и технологии, электронные коллекции : труды 3-й Всерос. конф. (Петрозаводск, 11 – 13 сентября 2001 г.) [Электрон. ресурс]. – URL: http://rcdl.ru/doc/2001/Braslavsky.pdf

13. Трусов В. А. Построение тезаурусов, тематических классификаций и рубрикаторов для поиска информации в распределённых информационных системах // Информационные ресурсы России. – 2011. – №3. – С. 9 – 12.

14. Агеев М., Кураленок И., Некрестьянов И. Приложение А. Официальные метрики РОМИП 2010 // Труды РОМИП'2010. – СПб. : Изд-во НУ ЦСИ, 2010. – С. 172 – 187.

15. Яндекс: Поиск в интернете: что и как ищут пользователи [Электрон. ресурс]. – URL: http://download.yandex.ru/company/yandex_search_mini_report_autumn_2009.pdf

16. Alemayehu N. Analysis of Performance Variation Using Query Expansion // J. Amer. Soc. Inform. Sci. and Technol. – 2003. – Vol. 54, №5. – P. 379 – 391.

17. Голицына О. Л., Максимов Н. В. Модели информационного поиска в контексте поисковых задач // НТИ. Сер. 2. – 2011. – №2. – С. 1 – 12.

18. Козлов Д. Д., Смелянский Р. Л. Использование интеллектуальных агентов для поиска информации в Интернет [Электрон. ресурс]. – URL: http://www.iai.dn.ua/public/JournalAI_2000_2/2/378-382_KOZLOV1.pdf

19. Сергеев А. Ю., Тютюнник В. М. Экспериментальная оценка показателей эффективности сетевого информационного проблемно-ориентированного поиска (на примере нобелистики) // Информатика: проблемы, методология, технологии : материалы 7-й Междунар. науч.-методолог. конф. – Воронеж : Изд-во ВГУ, 2007. – С. 430 – 434.

20. Татевосян С., Брызгалова Н. KM.RU на РОМИП-2009. Получение стабильных результатов на разных коллекциях [Электрон. ресурс]. – URL: http://www.romip.ru/romip2009/02_km.pdf

21. Тестовые коллекции РОМИП [Электрон. Ресурс]. – URL: http://romip.ru/ru/collections/index.html

22. Гладун А. Я., Рогушина Ю. В. Применение тезауруса предметной области для повышения релевантности поиска в Интернете // Искусственный интеллект. – 2005. – №4. – С. 742 – 752; см. также: http://www.iai.dn.ua/public/JournalAI_2005_4/.../02_Gladun,_Rogushina.pdf

23. Гулин А., Маслов М., Сегалович И. Алгоритм текстового ранжирования Яндекса на РОМИП-2006 // Труды РОМИП-2006: труды 4-го Рос. семинара по оценке методов информ. поиска / под ред. И. С. Некрестьянова. – СПб. : НИИ Химии СПбГУ, 2006. – С. 40 – 51.

24. Цыганов Н. Л., Циканин М. А. Исследование методов поиска дубликатов веб-документов с учетом запроса пользователя // Интернет-математика-2007 : сб. работ участников конкурса. – Екатеринбург : Изд-во Уральского ун-та, 2007. – С. 211 – 222.

25. Осипов Г. С., Тихомиров И. А., Смирнов И. В. Интеллектуальный поиск в глобальных и локальных вычислительных сетях и базах данных // Программные системы: теория и приложения. – Переславль-Залесский, 2004. – С. 21 – 30.

26. Куршев Е. П., Осипов Г. С., Рябков О. В., Самбу Е. И., Соловьёва Н. В., Трофимов И. В. Интеллектуальная метапоисковая система // Компьютерная лингвистика и интеллектуальные технологии : труды Междунар. семинара «Диалог'2002». – М. : Наука, 2002. – С. 320 – 330.

27. Buntine W., Lofstrom J., Perttu S., Valtonen K. Topic-Specific Scoring of Documents for Relevant

Retrieval // ICML'2005 Workshop 4: Learning in Web Search [Электрон. ресурс]. – Bonn, 2005. – URL: http://eprints.pascal-network.org/archive/00001247/01/buntineLWS.pdf

28. Chakrabarti S., van den Berg M., Dom B. Focused crawling: A new approach to topic-specific web resource discovery // Proc. of the WWW-8 [Электрон. ресурс]. – 1999. – URL: http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.43.1111&rep=rep1&type= pdf
29. Исследование модели поведения пользователей при работе с поисковыми системами [Электрон. ресурс]. – URL: http://optimization.ru/articles/traffic2007
30. Wiener E. D., Pedersen J. O., Weigend A. S. A neural network approach to topic spotting // Proceedings of SDAIR-95: 4th Annual Sympos. on Document Analysis and Inform. Retrieval. – 1995. – P. 317 – 332.
31. ГОСТ 7.25–2001. СИБИД. Тезаурус информационно-поисковый одноязычный. Правила разработки, структура, состав и форма представления [Электрон. ресурс]. – URL: http://www.ifap.ru/library/gost/7252001.pdf
32. Трусов В. А. Модель построения поискового образа запроса в распределённых информационных системах сети Интернет // НТИ. Сер. 2. – 2011. – №5. – С. 18 – 22.

Материал поступил в редакцию 04.04.12.

Сведения об авторах

СЕРГЕЕВ Анатолий Юрьевич – преподаватель кафедры прикладной информатики Тамбовского филиала Московского государственного университета культуры и искусств

E-mail: vmt@tmb.ru

ТЮТЮННИК Вячеслав Михайлович – доктор технических наук, профессор, директор Тамбовского филиала Московского государственного университета культуры и искусств

E-mail: vmt@tmb.ru