

ВЪРХУ НЯКОИ АСПЕКТИ НА НАНОИНФОРМАТИКАТА. ОСНОВНИ ИЗИСКВАНИЯ.

Мила Илиева – Обретенова

*МГУ „Св. Иван Рилски“, София
e-mail: milailieva@abv.bg*

Ключови думи: наноинформатика, нанотехнология, наноматериали,

ON SOME NANAINFORMATICS ASPECTS. BASIC REQUIREMENTS.

Mila ILieva-Obretenova

*University of Mining and Geology ‘St. I. Rilski’, Sofia
e-mail: milailieva@abv.bg*

Key words: nanoinformatics, nanotechnology, nanomaterials.

***Abstract:** Nanoinformatics is a mathematical science, which represents preparation for transfer and management of nanotechnology results in big data bases. This newly developed research area consider standardization and structuring of nanotechnology data. The final development of nanoinformation will support the creation of unified register for nanomaterials and legislation for nanotechnologies in EU.*

Въведение

Наноинформатиката е математическа наука, която представлява подготовка за прехвърлянето на резултати от изследвания в областта на нанотехнологиите в големи бази данни.

Крайната цел е да се помогне на изследователите да придобият ново познание в сферата на човешкото здраве и околната среда. В списание по нанотехнология [2] учените дискутират стандартизирането на подреждането и структурирането на данните от областта на нанотехнологиите.

В статията си Кристиян Хендрен и съавтори [3] казват: “Ако ние се стремим да придвижим наноинформатиката напред, трябва да постигнем съгласие какви изследвания ще са необходими, кои свойства ще се измерват и кои данни ще се докладват”. Предложената стратегия използва функционален анализ – с относително прости тестове, които се провеждат в стандартизираната, много добре описана околна среда, за да може да се измери поведението на наноматериала в естествени условия.

В последно време, обществото изследователи в областта на наноматериалите се опитва да използва измерените им свойства, за да прогнозира резултатите. Например, частици с какъв размер и какъв състав най-вероятно биха причинили заболяване от рак? Но, оказва се този въпрос е твърде сложен, за да му се намери понастоящем еднозначен отговор.

Националният научноизследователски съвет (NRC) за проучване на наноматериалите в САЩ и Групата за нанобезопасност към Европейския съюз, концентрират своето внимание относно влиянието им върху околната среда, здравето и риска.

Примери на проекти за специално финансирани хранилища за съхранение на данни включват: Международният регистър за наноматериали в САЩ [4], Националният онкологичен институт (NCI) [5] и Лабораторията за охарактеризиране на наноматериалите.

В Националният онкологичен институт се изпълнява Националната програма за ракова информатика (NCIP) с работна група по нанотехнологии (NanoWG) за научните работници,

проявяващи особен интерес в сферата на наноинформатиката и компютърните подходи. В допълнение на това, групата разработва и публикува стандарти за обмен на данни [6].

Изграждане на ефективни подходи в наноинформатиката

Структурирането на наноданните се определя като активно и текущо управление по време на целия им жизнен цикъл в интерес на науката, обучението, ерудицията. Дейностите по структурирането позволяват откриването и възстановяването на данни, поддържането на качество, прибавянето на стойности и осигуряването на повторната им употреба във времето. Способи като този, посочен по-горе, които се развиват с цел да се организират и анализират данни за наноматериалите, представляват усилия, които могат да се различават в широки граници по отношение на обхвата им, променящи се цели и етапи на развитие. Въпреки тези еднопосочни аспекти, едно сходство е присъщо на всички ресурси на наноинформатиката и това е, че данните трябва да бъдат подложени на структуриране в рамките на тези ресурси.

Тази посока на развитие на наноинформатиката, се очертава особено добре в проекта NDCI – Инициативата за структуриране на данни за наноматериалите в САЩ. Той си поставя задачите: 1. Да представи и даде оценка за състоянието на структурирането на данни за нановеществата в контекста на множеството резултати за тях и 2. Да се обърне внимание на детайлите от интерактивни изисквания и работни потоци за потребителите, създателите и анализаторите на тези данни.

Конкретните цели на проекта NDCI включват:

- Да се покаже моментното състояние на текущите практики и последици от структурирането на данни за наноматериали.
- Да се разработят стандарти за структурирането.
- Да се улесни сътрудничеството между научни работници и практиката, които използват общи набори от данни за трансгранична дейност. Например, при прилагането на данни от една академична институция в разработката на нанотехнологичен продукт от индустрията.

Структурирането на научни данни представлява съществен интерес за изследователската работа върху наноматериалите и свързаните с нея групи по наноинформатика. Методите, протоколите и параметрите, водещи до генерация на данни в тази млада област от науката се развиват паралелно с резултатите, които характеризират новите наноматериали, тяхното действие и потенциални въздействия. Бурното развитие на научните инвестиции в рамките на общността дава възможност да се установи интерактивна обратна връзка между отраслите и секторите, необходима, за да се отговори на по-големи предизвикателства, свързани с комерсиализирането на нанотехнологиите. Общността, работеща в областта на наноинформатиката, може да помогне за намаляване на времето за придвижването на нанопродукта от разработката му до пазара и да намали страничните негативни въздействия на нанотехнологиите, позволяващи образуването на свободни наночастици.

В таблица 1 са показани теми и подтеми, свързани с информационни подходи при структурирането на данни за наноматериали.

Табл. 1. Основни въпроси при структуриране в проекта NDCI

Подтеми	Планирани акценти
1. Работни потоци при структуриране	Разглеждат се аспектите на работните потоци, като например протоколите за структуриране при консумиране на данни от първоначалните литературни източници, а също и при трансфер на данни между хранилищата или между клиенти и потребители. Обсъждат се механизмите за първоначалното структуриране на данните в хранилищата и оперативно съвместимото споделяне на ресурсите. Прякото сравнение на официално документирани и/или неформално институционализирани протоколи на структуриране ще предоставят ясна основа и ще конкретизират дискусиата върху следващите стъпки за стандартизиране на протоколите.
2. Количество и качество на данните.	Количеството на данните е мярка за данните в първоначален вид, опитните данни, обработените и извлечените от хранилищата. Високото качество на данните все още се среща рядко или „ненапълно“. Тази подтема обхваща въпросите: прецизност, грешка, достатъчност на методичните данни за възпроизводство. Могат ли да се сравняват резултатите от базата данни с тези от първичната литература?
3. Междинни данни.	Начинът, по който се борави с междинните данни в рамките на една база данни и в обсега на записите е от решаващо значение за всяка тема при структурирането на нанотехнологичните данни. Например, охарактеризирането на околната среда и по-специално на биологичната среда е от решаващо значение при интерпретацията и сравняването на данните. Временните междинни данни също са ключови.

Тук се поставя въпросът за структуриране на съпътстващите биологични данни, паралелно с тези на наноматериалите. Специално внимание е необходимо да се отдели и на новите нанопродукти и тяхната специфична употреба.

В таблица 2 е направен опит да се разгледа интегрирането на масиви от данни между организации с по-специфични и такива с по-обща сфери на дейност:

Табл. 2. Интегриране на масиви от данни, между организации с различни сфери на дейност

Институция, организация, проект	Обхват на работа за структуриране на данни
1. DANA – данни наноматериали.	DANA е акроним на Данни Наноматериали, но по-често се среща като база данни на Познанието за наноматериалите. Важна е оценката на различните аспекти за безопасността на наноматериалите. Необходимо е да се събират не само случайни данни, но преди всичко – научно доказано знание.
2. Нанотехнологии Потребители Продукти Инвентаризация (CPI)	Програмата за инвентаризация на нанотехнологични продукти за потребление (CPI) е разработена през 2005 г. от Научния център Woodrow Wilson International Center of Scholars и представлява най-подробният и пълен списък на продукти за потребление, които съдържат наноматериали. Дава съвременна и точна информация за потребителските продукти, които спомагат за образуването на наночастици и наноматериалите, които се съдържат в тях.
3. CEINTNIKS Център за екологични последиви от нанотехнологиите. Знания по наноинформатика за общо ползване	Фокусират се върху сложните екологични взаимодействия, трансформациите и въздействията върху биологичния континуум, включващи широкомащабни мерки за запазване на екосистемата. Главните научни цели при интегрирането на данни са: 1. Да се използват взаимодействията между механизмите за свойствата на материал и система и техните комбинирани ефекти върху съдбата на наноматериалите и въздействието им върху околната среда; 2. Така да се организират данните, че да показват насочваща посока за лицата, които оценяват риска. Предлагат да се изгради киберструктура, която улавя данните по начин, който позволява тяхната възпроизводимост и контрол на качеството. Да се разработят подходящи инструменти, за да могат учените да структурират своите данни и да ги сравняват с други бази.

Институция, организация, проект	Обхват на работа за структуриране на данни
4. Nanosifter (наносито) Университет в Юта	Целта на проекта Nanosifter е да създаде средство за обработка на естествен език (естествен лингвистичен продукт NLP), който да извлича данните за наночастиците и свойствата им директно от първичната литература. Понастоящем могат да се извличат данни за хидродинамичния диаметър, диаметъра на частицата, молекулното тегло, зета-потенциала, цитотоксичността, жизнеспособността на клетката, ефективността от капсулиране, зареждане и трансфекция. Планира се разширяване на информацията, като Nanosifter може да извлича данни, като се увеличава прецизността и обновяването на този инструмент.

Казаното до тук за наноинформатиката поставя въпроса за връзката ѝ със законодателството за нанотехнологиите. В редица европейски страни, включително и в България, няма регистър на наноматериалите. В ЕС работи група по нанобезопасност, но не е създадено единно законодателство за нанотехнологиите [1]. Окончателното разработване на наноинформатиката ще подпомогне тези процеси.

Заклучение

В новопоявилата се научна област наноинформатика се разглежда стандартизирането и структурирането на данните от областта на нанотехнологиите. Изследователите, разработващи нови наноматериали се опитват да използват измерените им свойства, за да прогнозира резултатите.

Разгледан е проект на работна група по нанотехнологии към програмата за онкологична информатика в САЩ. Друг проект – Инициатива за структуриране на данните за наноматериалите, разработван от Националния институт за нанотехнологии, разглежда детайлно проблемите при структурирането им.

Разработването на наноинформатиката като нова наука в сферата на човешкото здраве, околната среда и оценка на риска, ще подпомогне създаването на единен регистър за наноматериалите и законодателство за нанотехнологиите в ЕС.

Литература:

1. Коцилков, С. Нанотехнологиите – предизвикателство в европейското законодателство. Сп. Наука, кн.2/2016, т.1.
2. Beilsten Journal of Nanotechnology “The Nanomaterial Data Curation Initiative: A collaborative approach to assessing, evaluating and advancing the state of the field”, 10 August, 2015.
3. Hendren, K, et al., A functional assang-based strategy for nanomaterial risk forecasting”,J, Science of the Total Environment, July 16, 2015.
4. /<http://www.nanomaterialsregistry.org/>
5. /<http://mcl.cancer.gov/>
6. /ISA-TAB-Nano; ASTM International E2909-13/
7. <http://www.nanopartikel.info/fields/methadik/Dana-literature-Criteria-Checklist.Metodology.pdf/>