**Управление знаниями для задач моделирования наноразмерных атомно-молекулярных структур на основе онтологий**

В данной работе затрагивается научная область квантовой химии для моделирования атомно-молекулярных структур. В настоящее время существует несколько программных пакетов алгоритмов для квантово-химических вычислений. Одни из них имеют свои недостатки и преимущества перед другими: реализация алгоритмов, точность и набор выходных данных, быстродействие, использование оперативной памяти, хорошее распараллеливание. Одни быстро работают для структур, состоящих из малого количества атомов, но на больших структурах существенно уступают алгоритмам из других пакетов.

Данная работа является продолжением моей бакалаврской работы “Построение системы управления научными данными для задач моделирования наноразмерных атомно-молекулярных структур.

Если в бакалаврской работе работа в основном велась над унификацией научных входных данных, а также унификации визуализации выходных данных. То в магистерской работе, работа ведется над организацией данных о том, что же на самом деле каждый пакет делает, какие задачи позволяет решать, знания о времени работы на малых и больших атомно-молекулярных структурах, о точности расчетов алгоритмов и входных параметров.

Главная идея – это организовать все данные в виде онтологий, а именно в виде owl+xml описаний. Далее по этим онтологиям можно делать различные запросы на специальном языке SPARQL (который немного напоминает SQL для баз данных). Сейчас существует несколько программных решений, которые позволяют парсить такие описания онтологий, а также исполнять запросы на SPARQL. Одним из таких решений является программа с открытым кодом pellet, написанная на Java. Сейчас pellet позволяет работать только через командную строку, таким образом на каждый запрос к онтологии производится репарсинг всей онтологии из owl файла, что занимает примерно 30 секунд.

Основными идеями в работе является взять за основу уже готовый парсер из pellet, в качестве frontend-а использовать web-сервис со стандартными транспортными протоколами SOAP+WSDL. Таким образом доступ к знаниям можно осуществлять из других языков (основная часть системы написана на C#).

Кроме этого, основной фичей является организовать сессионную работу с этим сервисом, и самое главное возможность дополнять базовую онтологию пользовательскими знаниями. Идея такая: пользователь системы, который зашел в систему с целью расчета каких-то квантово-химических и физических характеристик своей атомно-молекулярной структуры, с помощью вопросов системы взаимодействия с пользователем генерирует свое представление (иногда очень смутное) о том, что ему нужно рассчитать в виде онтологий. Далее он свое представление в виде owl передает в этот сервис, там берется уже загруженная базовая онтология, она дополняется пользовательским расширением. Далее, система делает SPARQL запросы к получившейся онтологии с помощью которых понимает, что именно и как вычислять.