

## Chemická informatika – reklamní slogan nebo vědecký obor?

Záplava informací je zřejmě nejvýznamnějším znakem naší doby. Pokud ve vyhledávači Google zadáte slovo „information“ a provedete hledání, naleznete 578 000 000 odkazů. Pro porovnání slova láska (love – 118 000 000), přítel (friend – 94 200 000), a dokonce i peníze (money – 124 000 000) a sex (sex – 211 000 000) se krčí v druhé řadě. Slovo informatika (informatics – 3 830 000) si také v této soutěži nevede špatně. Pokud se však pokusíme zjistit, co si lidé pod slovem informatika představují, dospějeme k velmi širokému rozpětí názorů. Velmi početné skupině splývá pojem informatiky s využitím výpočetní techniky, běžně je informatika ztotožňována s programováním. Pokud však slovo informatika považujeme za zkrácený výraz pro informační vědu, tedy vědu zabývající se shromažďováním, organizací a tříděním informací, je toto omezení na oblast počítačů zavádějící. Formálními postupy zpracování a vyhodnocování informací (např. logika) se lidé zabývali tisíce let před objevem počítačů a výsledky této práce jsou nesmírně užitečné i v dnešní době.

Výpočetní technika umožnila uskutečnit řadu myšlenek, které před několika desetiletími hraničily s šílenstvím. Bohužel, stejně jako oheň, i počítače jsou skvělým sluhou, ale špatným pánem. Lidé velmi často podléhají jejich vlivu. Při pohledu na výsledky, které se objevují na obrazovce, zapominají, že hloupost spočítaná nebo nalezená milionkrát rychleji nepřestává být hloupostí.

S tím, jak se s pojmem informatika seznamovali pracovníci v jednotlivých vědních oborech, začala vznikat informatika lékařská, historická a samozřejmě také chemická. Na označení chemické informatiky lze dobře dokumentovat neurčitost pojmosloví ([http://www.indiana.edu/~cheminfo/informatics/cinform\\_what.html](http://www.indiana.edu/~cheminfo/informatics/cinform_what.html)). V anglickém jazyce se objevují vedle pojmu chemical informatics také označení jako chemoinformatics, cheminformatics, cheminformatics, jejichž vysvětlení závisí na profesní kariéře autora a jen zřídka odráží nějaký hlubší sémantický rozdíl.

V oblasti chemie je velký důraz kladen na počítačový aspekt celé problematiky. S trochou ironie lze tvrdit, že každý, kdo použije počítač pro vyhledání bodu tání sloučeniny, spočítá konformace hexanu s pomocí komerčního programu, nebo využije statistických možností programu Excel se již cítí chemickým informatikem.

Chemická informatika by však měla znamenat něco jiného. Schopnost vyhodnotit chemické informace a zpracovat je způsobem, který nabízí nový pohled na danou problematiku je skutečným přínosem, který mohou chemici-informatici přinést chemii a vědě. Počítače jsou významným pomocníkem na této cestě, nikoli však kouzelným proutkem, který splní každé přání. Jelikož po přečtení těchto řádků bychom mohli být obviněni z počítačové fobie, rádi bychom zdůraznili, že sami programujeme v řadě programovacích jazyků a jsme zakladateli počítačového projektu (<http://www.zvon.org/>), který každý rok využívá několik milionů uživatelů z celého světa. Přesto, a nebo právě proto, jsme zastánci mnohem komplexnějšího pohledu na celou problematiku.

Připomeňme si základní činnosti, jimiž se zabývá infor-

mační věda, tedy shromažďování, organizování a třídění informací. Chemie se právem chlubí propracovaným systémem přístupu k informacím, který nám mohou jiné vědní obory závidět. Bylo by však velkou chybou nechat se ukolébat dosaženými výsledky a dále nerozvíjet odkaz předchozích generací.

V oblasti shromažďování informací je velkým problémem roztržitost zápisů chemických struktur a dalších konceptů. Pokud má chemie plně využít možností počítačů, je třeba vyvinout takovou notaci, která umožní automatické zpracování a abstrahování dat.

Pouze v počátcích je formalizace postupů při prohledání chemických databází. Zde bychom se měli inspirovat softwarovým inženýrstvím. Formalizace postupů, která sebou přinesla pojmy jako architektura klient-server, „peer-to-peer“ a podobně, usnadňuje komunikaci v oboru, a tím významně přispívá k pokroku v dané oblasti.

Organizování informací je rovněž výzvou, která doposud nebyla uspokojivě vyřešena. Zejména je důležité neomezit se na počítačový aspekt problematiky, tedy na otázky jak efektivně uložit informace do počítače tak, aby bylo dosaženo úspory místa v paměťových médiích a zároveň maximálně urychleno prohledávání uložených dat. Mnohem větší důraz by měl být kladen na interakci databázových a výpočetních systémů s uživateli, tedy v první řadě s praktickými chemiky. V anglické literatuře se tato oblast nazývá „usability engineering“ a ukazuje se, že uplatňování jejich principů může přinést řádově úspory času a prostředků. V oblasti chemie jsme bohužel na samém počátku. Myslím, že řada čtenářů těchto řádků mnohokrát řešila problém, jak danému software sdělit, co vlastně chce najít a snažila se vyluštit, co program odpověděl. Zatímco programátoři rádi svalují odpovědnost na neschopné uživatele, z hlediska „usability“ je chyba zcela na programu. Software se musí přizpůsobovat uživateli, nikoli uživatel počítači.

Neopominutelná je rovněž pedagogická role chemické informatiky. Problémem současné výuky nejen na vysokoškolské úrovni je nekoordinovaný způsob, s jehož pomocí se studenti seznamují s novými vědeckými poznatky a s jejich aplikací v praxi.

Studenti rovněž vnímají teorie a poznatky, se kterými se během výuky seznamují, jako stálá fakta, která zde od nepaměti jsou a vždy budou platit. Výuka informatiky, zaměřená na vyhledávání a samostatné zpracování informací v komplexní rovině, umožňuje studentovi snazší vstup do praktického života, kde se jeho schopnosti orientace v záplavě informací a samostatného vyhodnocování rozporuplných dat odráží na jeho služebním postupu, a tedy i finančním ohodnocení.

Na závěr bychom se vrátili k názvu tohoto článku. Jsme přesvědčeni, že chemická informatika je skutečný vědní obor, i když ne se zcela jasnými hranicemi. Dokonce se domníváme, že se jedná o naprosto klíčový obor, jehož vývoj bude určující pro řadu odvětví „klasické“ chemie.

Miloslav Nič a Jiří Jiráč