

Braun Tibor

■ ELTE TTK Kémiai Intézet, MTA Könyvtár

Tudományos kutatási adatok és ismeretek vizuális megjelenítése

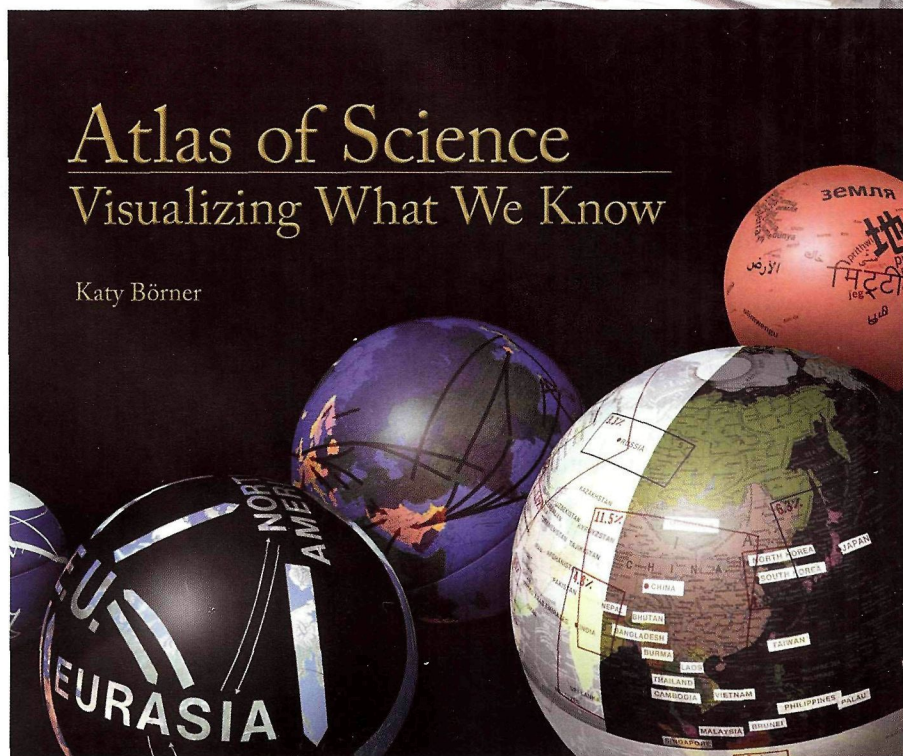
Rendhagyó könyvbemutató*

Előszó

A továbbiak jobb átlátása érdekében etimológiai, illetve fordítási magyarázattal tartozunk. Ugyanis témánkhoz az angol nyelvben használt *visualisation* a kulcsszó. Sajnos, e szónak nincs szótári magyar megfelelője. Elsőre *vizuális láttatásra* gondoltunk, de az nyilvánvalóan pleonazmus, ezért a *vizuális megjelenítést* választottuk annak tudatában, hogy nehezen veheti fel a versenyt angol nyelvű megfelelőjével. Amennyiben a *vizualizálás* ad hoc magyarosításként elfogadhatónak tűnik, úgy talán az is tekintetbe vehető itt. Sajnos, a témához tartozó másik angol szó, a *mapping* is nehézségeket támaszt, mert amennyiben a tudomány, illetve a tudományos kutatás területén használjuk, a szótári fordítása, azaz a *leképzés, térképezés, térképezés* nagyon elterjedt köznapi, geográfiai vonatkozásai miatt némileg hiányosnak, félreértelmezhetőnek tartható.

Bevezetés

Ma már közhelynek is nevezhető, hogy világunk zsúfolásig van tudománnyal kapcsolatos adatokkal és ismeretekkel, sőt ezekből több van, mint eddig valaha [1], és egyre szükségesebbé válik azoknak az utaknak a keresése, amelyek hozzásegítik, illetve hozzásegíthetik a tudományos kutatókat és másokat, hogy átlássák, feldolgozassák, megértsék ezeket az adatokat. El



1. ábra. Alapmű

kell mondanunk, hogy az 1759-ben született mérnök, könyvelő, feltaláló, politikai közgazdász és még számos más elfoglaltságot űző skót *William Playfair* volt az [2], aki a számszerű adatsorok és táblázatok jobb áttekintése érdekében a vizualizálás előfutáraként megalkotta a statisztika grafikai módszereit.

Playfair négyféle diagramot talált fel: 1786-ban a vonalas grafikont és oszlopdigrammot gazdasági adatokhoz, majd 1801-

ben a kördiagramokat (*pie chart, circle graph*). Ezeket 1786-ban és 1801-ben publikált könyveiben [3,4] saját statisztikai adatainak grafikai megjelenítéséhez, illetve értelmezéséhez alkalmazta. Diagramjai vizuális újításokat ihlettek, és az érdeklődők számára az adatok olyan mintázatait tették láthatóvá, amelyek a hosszú számso-
rokkal megtöltött oldalak szemlélésekor rejtve maradtak volna. A kezdeti próbálkozások körvonalazása után nincs szándé-

* Katy Börner: *Atlas of Science*. MIT Press, Cambridge, Massachusetts, London, 2010.



kunkban az adatok grafikai feldolgozásának teljes, különben rendkívül érdekes történetét ismertetni. Ezért fő témánkhoz, az ismeretek vizuális megjelenítéséhez térnénk vissza, idézve a jelen szerző által e téren legrészletesebbnek ítélt, az amerikai *Katy Börner* által nemrég publikált alapművet (1. ábra). Ez a mű bemutatja a tudomány, illetve a tudás szemszögéből nézve mindazt a fejlődést, amit a számítástechnikai lehetőségek el tudtak érni a grafikával. A tudás egészével foglalkozó, illetve annak csaknem minden területet érintő könyv többek között a kutatásra is kitér. Jelen ismertetés célja néhány általános érdeklődésre számot tartó példa bemutatása és a kimondottan kémiai vonatkozásuk kiemelése.

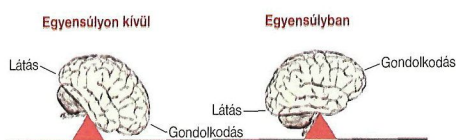
Következzen egy elhatárolódás is: jelen dolgozat és az ismertetett könyv sem érinti az atomok és szerves molekulák számítógépes grafikai modellezését és a képalakítást (*imaging*) sem, amely néha talán megtévesztően átlapolhatja vagy félreértelmezheti jelen ismertetés témáját.

A főleg angol szakirodalom *imaging*-nek, leképezésnek, képalakításnak nevezi azt az eljárást, amely egy adott kémiai minta összetételéről, szerkezetéről és/vagy dinamikájáról nyújt vizuális jelet. A kémiai képalakítás széles körű műszeres technikákat alkalmaz; ezek mindegyike a fény vagy más sugárzás anyaggal való kölcsönhatásán alapul [5].

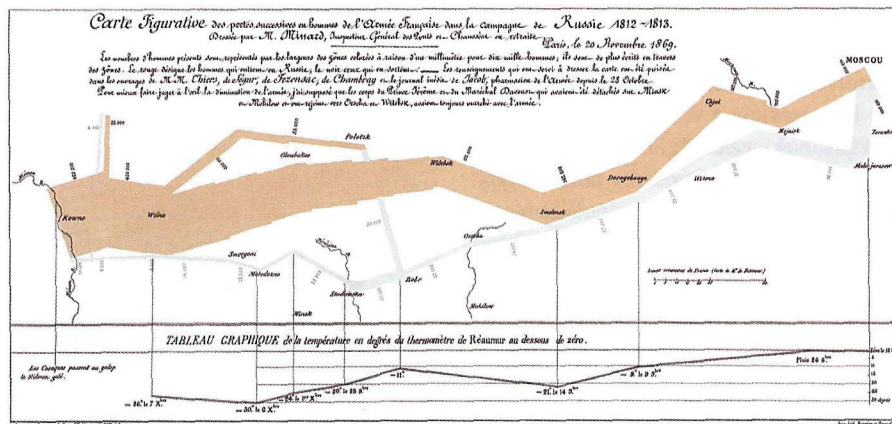
Adatvizualizálás

Az adatok és ismeretek vizualizálása azért hasznos és eredményes, mert az észlelés, érzékelés és megfigyelés közötti egyensúlyt abba az irányba mozgatja el, amelyben az agy képességeit teljes mértékben igénybe veheti. A látás (azaz a vizuális ész-

2. ábra. A látás és a gondolkodás egyensúlya az agyban [6]



lelés), amit az agy hátsó felében elhelyezkedő vizuális kéreg kezel, általában rendkívül gyors és hatékony. Csekély erőfeszítéssel, rögtön (pillanatnyi idő alatt) látunk. Az agykéreg elülső részéhez kötődő gondolkodás sokkal lassabb folyamat. A hagyományos adatértelmezés és -bemutatás átfogó tudatos gondolkodást igényel. Az ada-



3. ábra. Napóleon moszkvai hadjárata

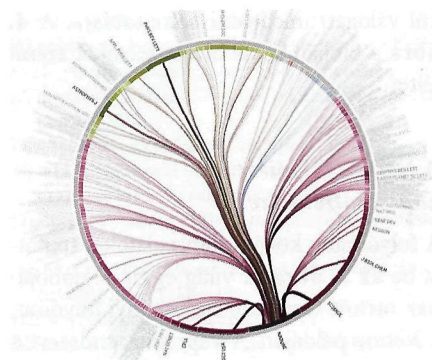
tok és ismeretek vizualizálása viszont eltolja az egyensúlyt a vizuális észlelés irányába: amikor lehetséges, szemünk éles és érzékeny látására épít, amint a 2. ábra jelzi.

Példák a vizualizálásra

Mielőtt a jelzett kémiai témára rátérnénk, be szeretnénk mutatni részben a könyvből, részben az újabb szakirodalomból válogatott néhány meggyőző, általános vizualizációs példát.

Napóleon moszkvai hadjárata

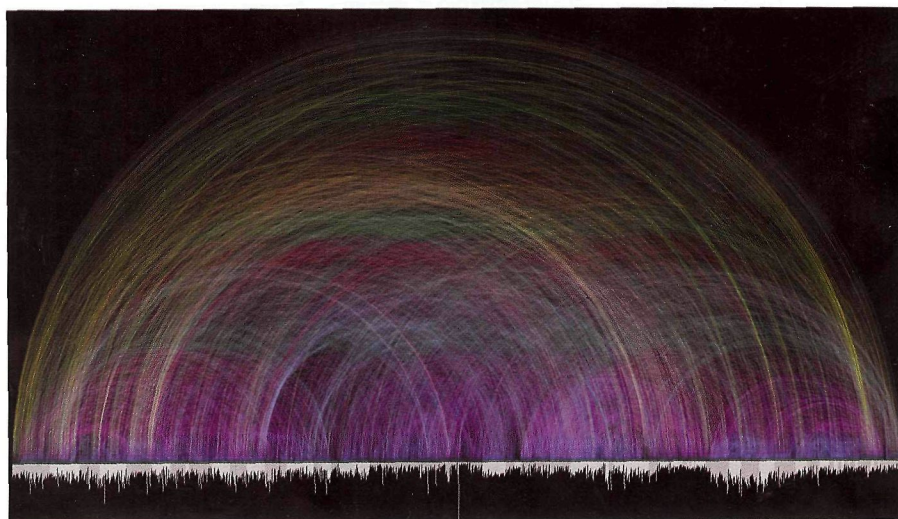
Charles Joseph Minard francia hadmérnök vizualizálását (3. ábra) sokan az ilyen ábrázolások legjobbjának, legkifejezőbbjének vélik, különösen akkor, ha tekintetbe vesszük, hogy a számítástechnika előtti időben készült. Az ábrázolás Napóleon siker-



5. ábra. A Nature folyóirat idézettségi kapcsolatrendszere [9]

telen oroszországi hadviselését, illetve hadseregének elpusztulását szemlélteti 1812-ben. A hadsereg indulásakor 422 000 emberből 100 000 érte el Moszkvát és 10 000-nél kevesebben tértek vissza. Elemzők ki-

4. ábra. Hivatkozások a Bibliában. Az alul látható oszlopgrafikon a Biblia összes fejezetét reprezentálja. A könyveket a váltakozó szürke és fehér színek jelzik. Az oszlopok hossza az egyes fejezetekben levő versek számát jelöli. A kereszt-hivatkozásokat ívek jelentik meg, színük a két fejezet közötti távolságra utal [7]





A Biblia vizualizálása

Nem meglepő, hogy a világ legolvasottabbnak tekinthető könyvének (UNESCO-eredmény) képi megjelenítésére (vizualizálására) számos próbálkozás történt. Ezek közül válogattunk itteni bemutatásra. A **4. ábra** a Biblián belüli hivatkozásokat szemlélteti.

A Nature folyóirat kapcsolatrendszerre

A folyóiratok közötti kapcsolatokat mutatja be az **5. ábra**, a világ egyik legjobbjának tartott természettudományi folyóirat, a *Nature* példáján. A kapcsolatrendszert a folyóirat-folyóirat közti idézettség alapján számszerűsítették.

Válogatott példák a kémia és a kémiai kutatás vizualizálására

A periódusos rendszer

Nem túlzás azt állítani, hogy a *Mengyelejev* nevével összeforrt periódusos rendszerek a kémiai vizualizálás őstípusainak tekinthetők. Nincs a világon tankönyv, tanterem vagy laboratórium, amelyik teljesnek tekinthetné magát az elemek periódusos rendszere nélkül.

A rendszernek számtalan különböző vizualizálási fejlesztést, újítást igénybe vevő változata készült az 1869-es Mengyelejev-

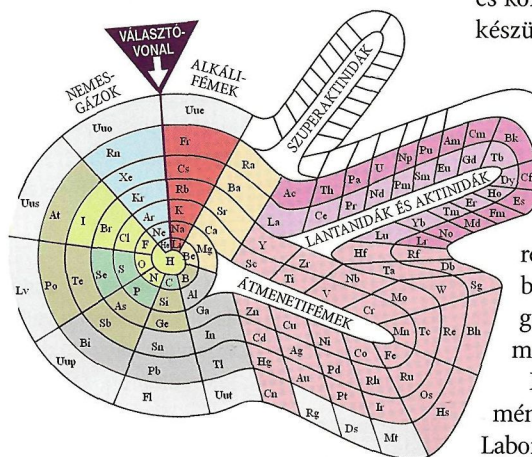
féle táblázat óta (**6. ábra**). Olyannyira, hogy az interneten felkereshető, illetve megtekinthető az elemek periódusos rendszerének több száz változatát feltüntető adatbázis is [11].

Ezek után talán nem tűnik furcsának, hogy a grafikai vizualizálások csaknem végtelen sorának rendezésére is megalkottak egy periódusos rendszert. Ebben persze a kémiai periodicitással való rokonítást nem kell annyira ortodox módon értelmezni, de a rendszerezési kívánalmaknak megfelel. Gutenbergi, azaz nyomtatási felbontásban itt nincs lehetőség a vizualizálási elemek bemutatására, de az itt feltüntetett link alapján bárki betekinthez a részletekbe [14].

Maxwell termodinamikai felülete

Már csak történelmi háttére miatt is említésre méltó az a szoborszerű gipszidom (7. ábra), amelyet 1874-ben *James Clerk Maxwell* készített *Josiah Willard Gibbs* termodinamikai cikkei alapján. A modell egy vízhez hasonló tulajdonságokkal rendelkező, fiktív anyag különböző állapotainak háromdimenziós ábrázolása [15]. Az idom (szo-

6. ábra. Theodor Benfey spirális periódusos rendszere



7. ábra. Maxwell termodinamikai felülete
[15]

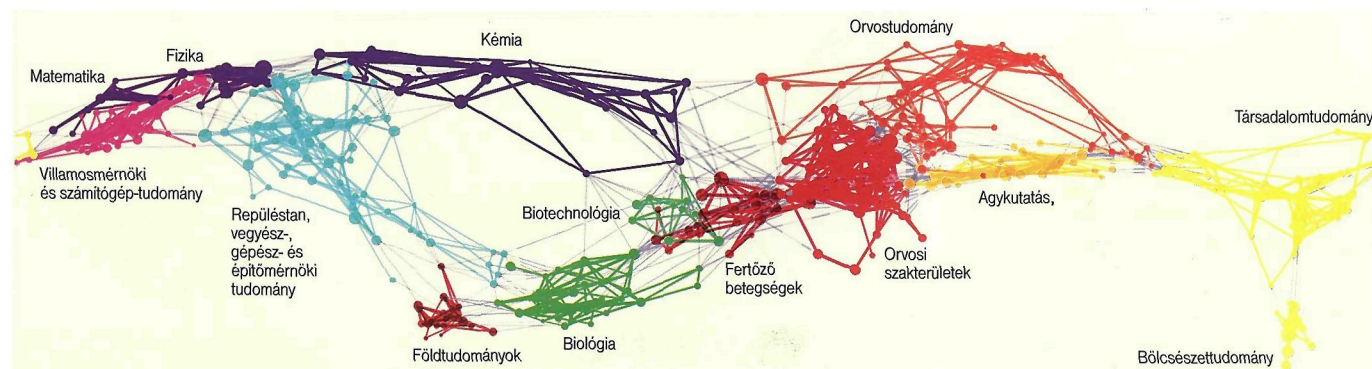
bor) képe egy 1942-ben publikált könyvben jelent meg először [16].

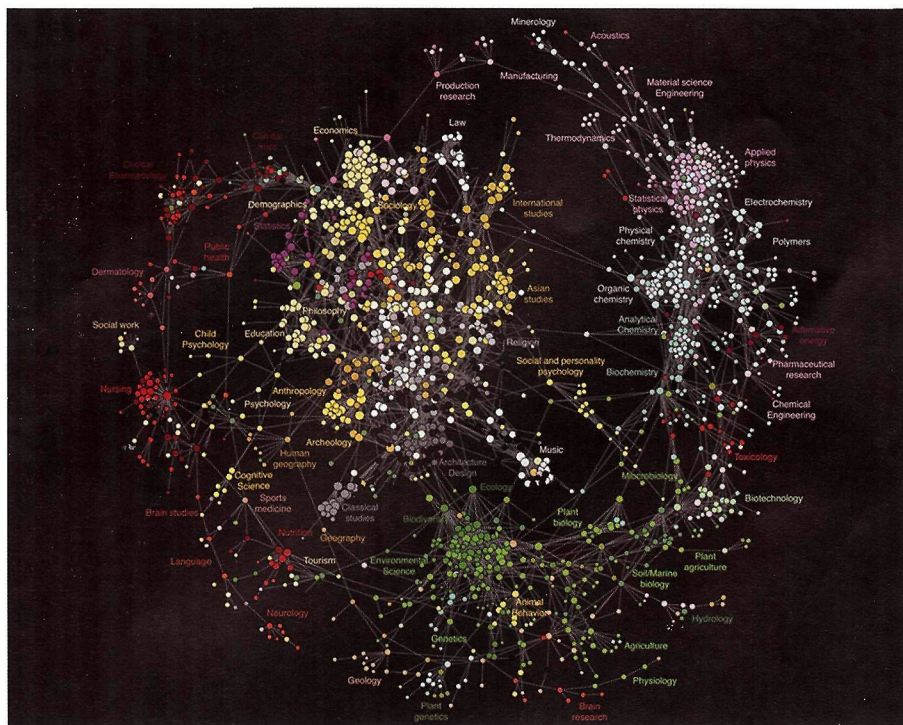
A kémia helye a természettudományok térképén

A természettudományokban manapság a megfigyelhető integrálódási és átlapolási interdiszciplináris törekvések idején hasznosnak tekinthető egy olyan vizualizálási lehetőség, amely rálátást ad a különböző területek elhelyezkedésére, csatlakozási pontjaira, összefonódásaira. A **8. ábrán** bemutatott térkép egy hatalmas folyóiratcikkek és konferenciadolgozat-adatbázis alapján készült. A feldolgozás 2001 és 2005 között 16 000 folyóiratban megjelent 7,2 millió cikket vett számba. Először háromdimenziós ábrázolást alkalmaztak, amely a természettudomány szakterületeit, folyóiratok csoportosítása alapján, egy gömbre helyezte el. A tengeri térképészetben alkalmazott Mercator-vetítéssel a gömbi ábrázolást laposították kétdimenziós térképpé [17].

Egy még nagyobb adatbázis-gyűjteményre építve a Los Alamos-i Nemzeti Laboratórium kutatói elkészítették egy to-

8. ábra. Tudományterületek csatlakozása, összefonódása [17]



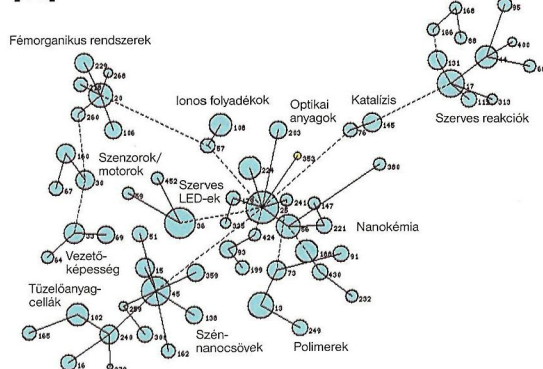


9. ábra. A természettudományok „tejútja” [18]

vábbfejlesztett, szerintük viccesen Tejút-hoz hasonlítható vizualizálást (9. ábra). A térképen a kémia kék színű pontokban jelenkezik [18].

Egy lépéssel közelebb lépve a kémiai kutatáshoz, nemrég az úgynevezett kutatásifront- (*research front*) adatokra támaszkodva is elkészítették a kémiai kutatás vizualizálási térképét a Thomson Reuters cég által publikált *Essential Science Indicators* alapján (10. ábra). A kutatási frontok közötti kapcsolatokat az együttidézésük alapján számolták, azaz szerint, hogy kurrens cikkek milyen mértékben idéznek együtt két kutatási frontot. A kialakult csoportokat klaszterező eljárás fogja össze nagyobb aggregátumokká. A térképen minden kör a kémia egy szélesebb aggregátumába sorolja a kutatási frontokat [19].

10. ábra. A kémiai kutatási frontok térképe [19]



Végszó

E dolgozat célja a figyelemfelhívás volt egy, az univerzális tudás, de a kémia szempontjából is fontos és jelen szerző szerint monumentálisnak mondható műre, ami csaknem monografikusan fogja össze tudományos ismereteink tárházát. A könyv eleve nagyon általános, ezért villantásnyi bemutatása mellett az volt a fő cél, hogy kiemeljük a vizualizálás lehetőségeit és hasznát a tudományos kutatásban, külön hangsúllyal a kémiai kutatásra.

Végül még érdemes megemlíteni, hogy a kémiai kutatás helyzetéről, illetve a bio-

kémiával, a biológiával és a biomérnöki területtel fennálló kölcsönhatásairól szintén az itt ismertetett atlasz szerzője és munkatársai végezték talán a legrészletesebb térképezési-vizualizálási vizsgálatot, 7227 folyóirat cikkeinek klaszterezése alapján (11. ábra) [20].



IRODALOM

- [1] Braun Tibor: Adat-, információ- és ismeret-tárolás az örökkévalóságnak. Remények kvarcban és DNS-ben. Magyar Kémikusok Lapja, 2013. december.
- [2] http://en.wikipedia.org/wiki/William_Playfair
- [3] W. Playfair: The Commercial and Political Atlas
- [4] W. Playfair: Statistical Breviary. Shewing, on a Principle Entirely New, the Resources of Every State and Kingdom in Europe, London, Wallis, 1801.
- [5] Visualizing Chemistry: The Progress and Promise of Advanced Chemical Imaging, National Academics Press, www.nap.edu
- [6] http://www.interaction-design.org/encyclopedia/data_visualization_for_human_perception.html
- [7] <http://www.chrisharrison.net/index.php/Visualizations/BibleViz>
- [8] <http://www.openbible.info/blog/page/2/>
- [9] <http://www.webdesignerdepot.com/2009/06/50-great-examples-of-data-visualization/>
- [10] <http://www.learningfundamentals.com.au/wp-content/uploads/chemistry-map.jpg>
- [11] http://www.meta-synthesis.com/webbook/35_pt/pt_database.php?PT_Id=449
- [12] W.E. Shelan: Ref. Chem. (1976) 49, 17.
- [13] <https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Element-spiral.svg>
- [14] http://www.visual-literacy.org/periodic_table/periodic_table.html
- [15] http://en.wikipedia.org/wiki/Maxwell%27s_thermodynamic_surface
- [16] M. Rukeyser, Willard Gibbs: American Genius, Ok Bow Press, Woodbridge, CT, 1942.
- [17] http://en.wikipedia.org/wiki/Mercator_projection, http://scimaps.org/maps/map/maps_of_science_fore_50
- [18] <http://www.wired.com/wiredscience/2009/03/mapof-science/>
- [19] <http://archive.sciencewatch.com/dt/rfm/mos/09julmosCHE/#36>
- [20] K. W. Boyack, K. Börner, R. Klavans, Mapping the Structure and Evolution of Chemistry Research, Proc. 11th Int. Conf. Scientometrics, Informetrics, Madrid, 2007. 112–123.

11. ábra. A kémia kapcsolatrendszerének és információáramlásának kölcsönhatása a biokémiával, a biológiával és a biomérnöki tudománnyal [20]

