

Г. Б. Загоруйко¹, Ю. И. Молородов², А. М. Федотов^{2,3}

¹ *Институт систем информатики им. А. П. Ершова СО РАН
пр. Акад. Лаврентьева, 6, Новосибирск, 630090, Россия*

² *Институт вычислительных технологий СО РАН
пр. Акад. Лаврентьева, 6, Новосибирск, 630090, Россия*

³ *Новосибирский государственный университет
ул. Пирогова, 2, Новосибирск, 630090, Россия*

gal@iis.nsk.su, yumo@ict.sbras.ru, fedotov@sbras.ru

СИСТЕМАТИЗАЦИЯ ЗНАНИЙ ПО ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИМ СВОЙСТВАМ ВЕЩЕСТВ *

Описывается информационная система, обеспечивающая предоставление данных, систематизацию и интеграцию знаний и информационных ресурсов по изучению теплофизических свойств металлов и сплавов в широком диапазоне температур. Использование онтологии для описания предметной области позволяет семантически структурировать информационное наполнение системы и организовать навигацию и содержательный поиск информации. Технология, заложенная в разработку системы, ориентирована на экспертов предметных областей.

Ключевые слова: знания, неорганические вещества, металлы, сплавы, информационные ресурсы, онтология, содержательный доступ, управляемая онтологией навигация.

Введение

Исследования теплофизических свойств металлов при высоких температурах представляют важную научную проблему, имеющую большую практическую значимость. Они служат не только основой для дальнейшего развития высокотемпературной физики твердого тела, но и позволяют определить области практического использования новых материалов.

Практическая значимость таких работ определяется стремительным развитием техники высоких температур, созданием новых материалов, обладающих уникальными характеристиками.

Развитие теплофизики сопровождается нарастающим производством новых данных, публикуемых в десятках журналов различного профиля. Современный подход к организации работ с данными и материалами связан в первую очередь с мировой тенденцией перевода разнородной информации с бумажных носителей в цифровую форму и с созданием крупномасштабных информационных хранилищ. Представление информации и знаний в электронной (цифрой) форме позволяет принципиально по-иному создавать, хранить, организовывать доступ и использовать информацию [1].

* Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (проекты № 12-07-00472, 13-07-00258, 13-07-00422), президентской программы «Ведущие научные школы РФ» (грант НШ–5006.2014.9).

Систематизация данных, наряду с экспериментом и теорией, становится новым самостоятельным направлением. В связи с этим необходимо обрабатывать и осмысливать огромные массивы данных, полученных при проведении экспериментов, опубликованных в научной литературе и справочниках. Становится актуальной организация эффективного доступа не только к публикациям, описывающим методы и подходы к исследованию свойств неорганических и органических веществ, но и разного рода справочникам, программным компонентам и алгоритмам, обеспечивающим решение различных задач по работе с данными исследований.

Предметная область

Теплофизика – одна из дисциплин, в которых центральное место занимает работа с количественными данными. При работе с ними необходимо учитывать, что в публикациях и цифровых хранилищах используется несколько типовых форм представления данных, а именно: табличная, графическая и «математическая» (в виде хранимых формул или программных кодов). Графическая форма иллюстрирует характер зависимостей, рассеяние опытных точек и т. п. Табличная форма наиболее надежна при передаче данных, легко контролируема в отношении пропусков, ошибок в знаке или порядке величины и т. п. Математическая форма, избавляя от интерполяции, требует повышенной тщательности в обнаружении ошибок, легко вылавливаемых в табличной форме. Доминирующей формой в экспериментальных работах и справочниках является табличная форма.

Разработка информационных систем, оперирующих с количественными теплофизическими данными, в первую очередь предполагает проведение экспертной оценки существующих массивов данных экспериментальных измерений. Это позволяет обосновать выбор базовых значений и оценить их погрешности, провести обработку разнородных данных с помощью физически обоснованных и термодинамически согласованных моделей и, что особенно важно, построить информационно-аналитические системы (ИАС), которые позволят оперативно хранить либо выбирать данные по свойствам веществ при произвольных значениях температур, давлений и составов.

Такая специализированная проблемно-ориентированная информационная система (ИАС) позволит решить проблему хранения эмпирического материала, его обработку и интерпретацию, а также предоставить связи с первоисточниками данных (публикациями, справочниками и т. п.). ИАС дает возможность перевести работу с этими данными на качественно более высокий уровень, открывающий перспективы для постановки и эффективного решения новых научных и практических задач.

Информационную систему по теплофизическим свойствам химических веществ предлагается разрабатывать в виде портала научных знаний с использованием технологии, хорошо зарекомендовавшей себя в ряде гуманитарных дисциплин [2; 3], в которую были добавлены возможности для хранения и обработки специфических для данной области количественных данных.

Чтобы портал знаний мог предоставлять пользователям описанные выше возможности, он должен не только иметь гибкие средства представления разнородной информации и содержательного доступа к ней, но и обеспечивать оперативное управление своим информационным наполнением (контентом). Этим целям служит информационная модель портала знаний [4], которая объединяет модели его предметной и проблемной областей, а также описывает типы представляемой информации.

Построение модели предметной области

Разработка моделей информационных систем и алгоритмов поиска функциональных зависимостей в массивах данных предполагает, прежде всего, построение модели предметной области. Наиболее распространенным способом построения модели предметной области является онтологическое моделирование [5]. Онтология предметной области понимается как описание основных понятий, составляющих содержание информационной системы, и семантических связей между ними [6]. Онтология является ядром, базовым компонентом инфор-

мационной модели портала. Она не только описывает систему знаний портала, но и задает формальные структуры для представления его контента. Онтология содержит понятия моделируемой области, связывающие их отношения, атрибуты понятий и отношений, ограничения на значения атрибутов, а также аксиомы, определяющие семантику понятий и отношений.

Формализм, используемый в технологии построения порталов научных знаний, обеспечивает описание понятий проблемной и предметной областей портала и разнообразных семантических связей между ними, а также выстраивание понятий в иерархию «общее – частное» и поддержку наследования свойств по этой иерархии.

При построении любого портала научных знаний его онтология строится на основе двух базовых технологий: онтологии научного знания и онтологии научной деятельности.

Онтология научного знания, по своей сути, является метаонтологией. Она содержит метапонятия, задающие структуры для описания предметной области (области знаний) портала, такие как *Раздел науки*, *Предмет исследования*, *Объект исследования*, *Метод исследования*, *Научный результат*, позволяющие выделить в данной науке значимые разделы и подразделы, задать типизацию предметов, объектов и методов исследования, описать результаты научной деятельности.

Онтология научной деятельности является онтологией верхнего уровня и включает базовые понятия, относящиеся к организации научно-исследовательской деятельности, такие как *Научный результат*, *Объект исследования*, *Персона*, *Публикация*, используемые для описания результатов научной деятельности, мероприятий, научных программ и проектов, различного типа публикаций. В эту онтологию также включено понятие *Информационный ресурс*, которое служит для описания информационных ресурсов, представленных в сети Интернет.

Свойства каждого понятия описываются с помощью атрибутов и ограничений, наложенных на область их значений. Понятия базовых онтологий связаны между собой ассоциативными отношениями, выбор которых осуществляется не только исходя из полноты представления проблемной и предметной областей портала, но и из удобства навигации по его информационному пространству и поиска информации.

Понятия онтологии подраздела научной дисциплины, изучающего теплофизические свойства веществ (ТСВ), являются реализациями метапонятий онтологии научного знания и организованы в несколько иерархий «общее – частное», каждая из которых соответствует одному из метапонятий, представленных в этой онтологии. Все эти иерархии связаны между собой посредством ассоциативных отношений, часть которых наследуется из базовых онтологий, а часть отражает специфику данной предметной области. На рис. 1 представлена онтология ТСВ.

В качестве базовых *Объектов исследования* данной области рассматриваются химические *Вещества*. Предметом исследования являются такие свойства, как *Теплопроводность*, *Температура*, *Давление* и т. д.

Иерархия *Методов исследования* служит для систематизированного описания инструментов исследования, применяемых при исследовании теплофизических свойств... В этой иерархии выделены следующие подклассы: *Методы измерений теплопроводности (температуропроводности)* – стационарные и нестационарные.

Измерения стационарной группой методов требует много времени на проведение единичного эксперимента, что является еще одним недостатком по сравнению с нестационарными методами. Именно по этим причинам широкую популярность получили нестационарные методы, имеющие практически ту же точность измерений, что и стационарные, и требующие гораздо меньше времени для проведения измерений. Основным их недостатком является более сложная приборная конструкция и методика обработки экспериментальных результатов, которые преодолеваются современными измерительными и вычислительными техниками. Все стационарные методы измерения теплопроводности, согласно [7; 8], можно разделить на две большие группы, в зависимости от того, как нагревается образец. К первой группе относятся методы, использующие наружные электрические нагреватели, и методы, использующие нагрев образца электронным или лазерным пучком. Ко второй группе следует отне-

сти те методы, где образец непосредственно нагревается проходящим через него электрическим током.

Нестационарные методы измерения тепло- и температуропроводности, согласно работам [7–9] принято разделять на две большие группы. К первой группе относятся методы регулярного теплового режима (нестационарного теплового режима), а ко второй – методы стационарного теплового режима. Под регулярными тепловыми режимами понимаются стадии нестационарных тепловых процессов, характеризуемые независимостью пространственно-временного изменения температуры от начальных условий. Методы первой группы позволяют определять температурную зависимость температуропроводности.

В последнее время все большую популярность приобретают импульсные методы измерения коэффициента температуропроводности (a), зная который, можно рассчитать коэффициент теплопроводности (λ) по известным формулам [9], используя более легко получаемые данные о теплоемкости (C_p) и плотности (ρ).

Данный класс методов обладает рядом достоинств:

- нет необходимости измерять непосредственно тепловой поток Q , что позволяет меньше заботиться о тепловых потерях за счет радиационного и конвективного переноса тепла;
- используя такие методы, можно исследовать широкий спектр различных материалов, как в твердом, так и в жидком состояниях;
- малое время проведения единичного измерения (менее 1 с) в комплексе с малым градиентом температур в образце (не более 2...5 К) позволяет измерять молекулярную теплопроводность жидкостей, избавляясь от свободно-конвективных течений.

К нестационарным методам измерения можно отнести: метод температурных волн Ангстрема, метод продольного теплового потока тепла, метод Кольрауша, метод узкой перемычки, сравнительный метод, метод лазерной вспышки и калориметрические методы измерений.

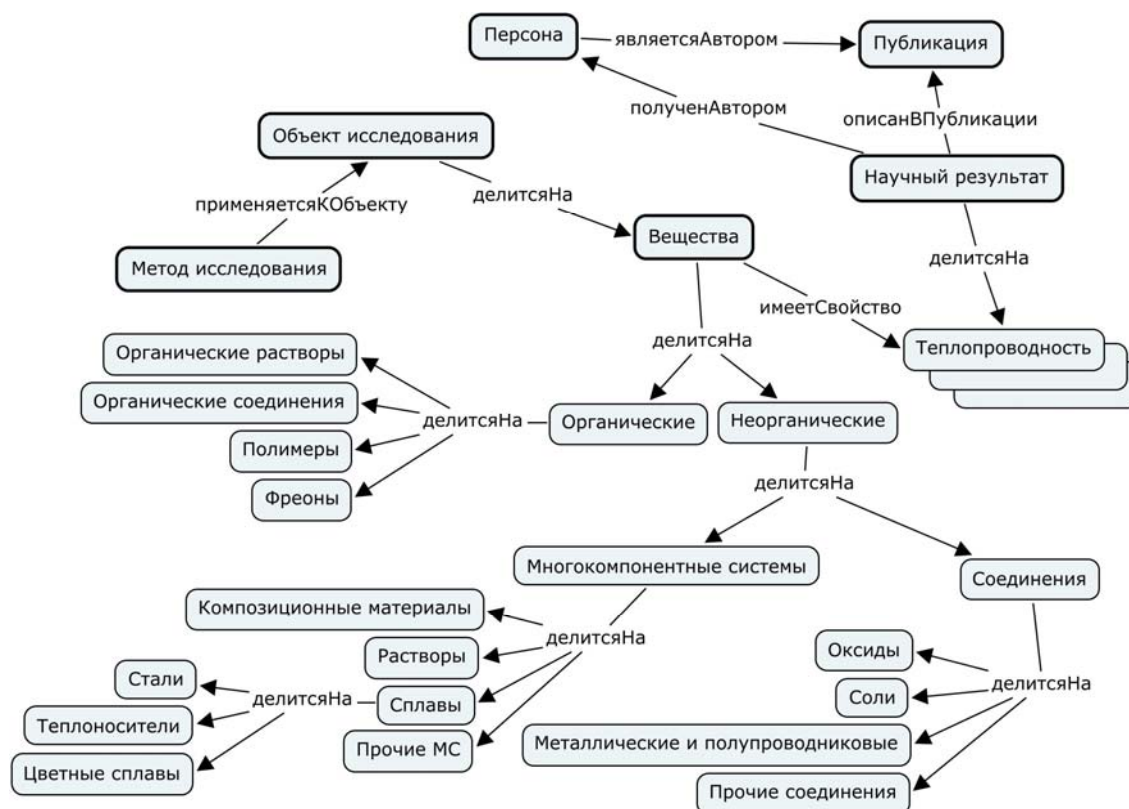


Рис. 1. Онтология портала знаний по теплофизическим свойствам химических веществ

Теплофизические свойства химических веществ

ГЛАВНАЯ | ПОИСК

| О РЕСУРСЕ | СТАТИСТИКА

[Класс] ☰

- ☐ Метод исследования
 - ☐ Метод измерения теплопроводности
 - ☐ Нестационарный
 - ☑ Стационарный
- ☑ Научный результат
 - ☑ Теплопроводность От Температуры
- ☐ Объект исследования
 - ☐ Вещества
 - ☐ Неорганические вещества
 - ☐ Многокомпонентные системы
 - ☐ Композиционные материалы
 - ☐ Прочие многокомпонентные системы
 - ☐ Растворы
 - ☐ Сплавы
 - ☐ Стали
 - ☐ Теплоносители
 - ☐ Цветные сплавы
 - ☐ Соединения
 - ☐ Металлические и полупроводниковые
 - ☐ Оксиды
 - ☐ Прочие соединения
 - ☐ Соли
 - ☐ Органические вещества
 - ☐ Органические растворы
 - ☐ Органические соединения
 - ☐ Полимеры
 - ☐ Фреоны
 - ☐ Персона
 - ☐ Предмет исследования
 - ☐ Публикация
 - ☐ Раздел науки

Фильтрация
Поиск

Теплопроводность От Температуры

Название	получен Автором	описан В Публикации
Теплопроводность свинца (1919)	Konno (S.)	On the variation of thermal conductivity during fusion of metals
Теплопроводность свинца (1940)	Bidwell (C.C.)	Thermal conductivity of metals
Теплопроводность свинца (1953)	Rosental (M. W.)	Measurement of thermal conductivity of molten lead
Теплопроводность свинца (1957)	Powell (R.W.) Iye (R.P.)	Experimental determination of the thermal and electrical conductivities of molten metals
Теплопроводность свинца (1959)	Калакуцкая (Н.А.) Никольский (Н.А.) Пелецкий (И.М.)	Теплофизические свойства некоторых металлов и сплавов в расплавленном состоянии
Теплопроводность свинца (1965)	Филлипов (Л.П.) Юрчак (Р.П.)	Тепловые свойства жидких олова и свинца
Теплопроводность свинца (1966)	Дутчак (Я.И.) Панасюк (П.В.)	Исследование теплопроводности некоторых металлов при переходе из твердого в жидкое состояние
Теплопроводность свинца (1970)	Кржижановский (Р.Е.)	Исследование теплопроводности и электропроводности сплавов и чистых металлов
Теплопроводность свинца (1970 2)	Осипенко (В.П.)	Теплопроводность сплавов олово-свинец и олово-индий в твердом и жидком состояниях
Теплопроводность свинца (1972)	Duggin (M.J.)	The thermal conductivity of liquid Lead and Indium
Теплопроводность свинца (1973)	Банчила (С.Н.) Филлипов (Л.П.)	Новые измерения комплекса тепловых свойств жидких олова и свинца
Теплопроводность свинца (1974)	Смирнов (Б.П.)	Экспериментальное исследование теплопроводности твердых и жидких электронных проводников модифицированным методом Кольрауша
Теплопроводность свинца (2005)	Plevachuk (Yu.) Sklyarchuk (V.)	A modified steady state apparatus for thermal conductivity measurements of liquid metals and semiconductors
Теплопроводность свинца (2011)	Савченко (И.В.)	Экспериментальное исследование теплопроводности и температуропроводности расплавов легкоплавких металлов и сплавов методом лазерной вспышки
Теплопроводность свинца (2003)	Susa (M.) Yamasue (E.)	Deviation from Wideman-Franz law for the thermal conductivity of liquid tin and lead at elevated temperature

Показано объектов: 15 из 15

Фильтрация
Поиск

Рис. 2. Просмотр списка экземпляров одного понятия

Свойства объекта



Теплопроводность От Температуры			
Название	Теплопроводность свинца (1965)	T, К	λ , Вт/(мК)
Значение	Зависимость от температуры >>	605	16,7
Связи объекта			
описан В Публикации			
Публикация	Тепловые свойства жидких олова и свинца	673	16,6
получен Автором			
Персона	Филлипов (Л.П.)	773	16,4
Юрчак (Р.П.)		873	16,3
		973	16,1
		1073	16,0
		1173	15,8
		1273	15,7
		1355	15,6

Обратные связи объекта

имеет Теплопроводность

Вещества
Свинец

Рис. 3. Зависимость теплопроводности свинца от температуры

В основе иерархии *Разделов* науки о ТСВ лежит классификация базовых теоретических и прикладных направлений исследования теплофизических свойств материалов. В качестве основных можно выделить разделы, развивающие следующие направления:

- уравнения состояния, фазовые переходы и критические явления;
- термодинамические свойства, базы данных;
- экстремальные состояния вещества;
- наноматериалы, наножидкости, межфазные явления;
- транспортные, оптические и радиационные свойства;
- техника теплофизических измерений.

В иерархии *Научных результатов* представлены взаимные зависимости теплофизических свойств веществ, например, зависимость теплопроводности от температуры.

Вводя формальные описания понятий области знаний портала в виде классов объектов и отношений между ними, онтология задает структуры для представления реальных объектов и связей между ними. В соответствии с этим данные на портале представлены как множество разнотипных информационных объектов (ИО) и связей между ними, которые в совокупности и образуют контент портала.

Разработка и использование портала знаний по теплофизическим свойствам химических веществ

При разработке порталов научных знаний используется онтологический подход, который предполагает двухэтапную процедуру формирования информационного наполнения портала. На первом этапе инженером знаний совместно с экспертом формируется онтология; на втором этапе эксперт формирует контент в рамках системы понятий и структур, определенных в онтологии.

Технология построения порталов предлагает разработчикам средства, ориентированные на экспертов – специалистов предметных областей. Для описания онтологии и ввода контента предоставляются редакторы с интуитивно понятным веб-интерфейсом.

Пользователям портала предлагается ряд средств и аналитических инструментов, позволяющих получить как общее представление о предметной области портала, так и детальное описание отдельного понятия или объекта, а также провести анализ интересующей пользователя информации.

На рис. 2 показан пользовательский интерфейс портала. В левом верхнем углу представлена онтология ТСВ, а в основном окне – список экземпляров понятия Теплопроводность-ОтТемпературы, т. е. объектов, представляющих зависимости от температуры теплопроводности свинца, полученные в разное время разными авторами. Каждый элемент такого списка является гиперссылкой, позволяющей перейти на страницу с подробным описанием соответствующего объекта.

На рис. 3 представлена зависимость, полученная, как следует из названия, в 1965 г. Атрибут «Значение» имеет табличный тип и по желанию пользователя может быть просмотрен в виде таблицы. На странице данного объекта также представлены связи с другими объектами. Этот научный результат описан в публикации «Тепловые свойства жидких олова и свинца» и получен авторами Филипповым и Юрчаком.

Атрибуты и связи объекта описывают его свойства, образуют контекст или семантическую окрестность данного объекта. Связи, представленные гиперссылками, позволяют перейти к подробному описанию соответствующего объекта, осуществляя, таким образом, навигацию по информационному наполнению портала.

В качестве аналитических инструментов используются средства фильтрации и визуализации объектов и понятий. Фильтрация позволяет из большого списка выбрать объекты, значения атрибутов которых удовлетворяют указанным ограничениям. Визуализация зависимости теплопроводности свинца от температуры в виде графика наглядно отображает гносеологию изучения значений исследуемой величины разными авторами и в разные периоды времени.

Описанная технология позволяет подключить к portalу другие сервисы, помогающие обрабатывать представленную на портале информацию.

Теплопроводность жидкого свинца. Результаты авторов разных лет.

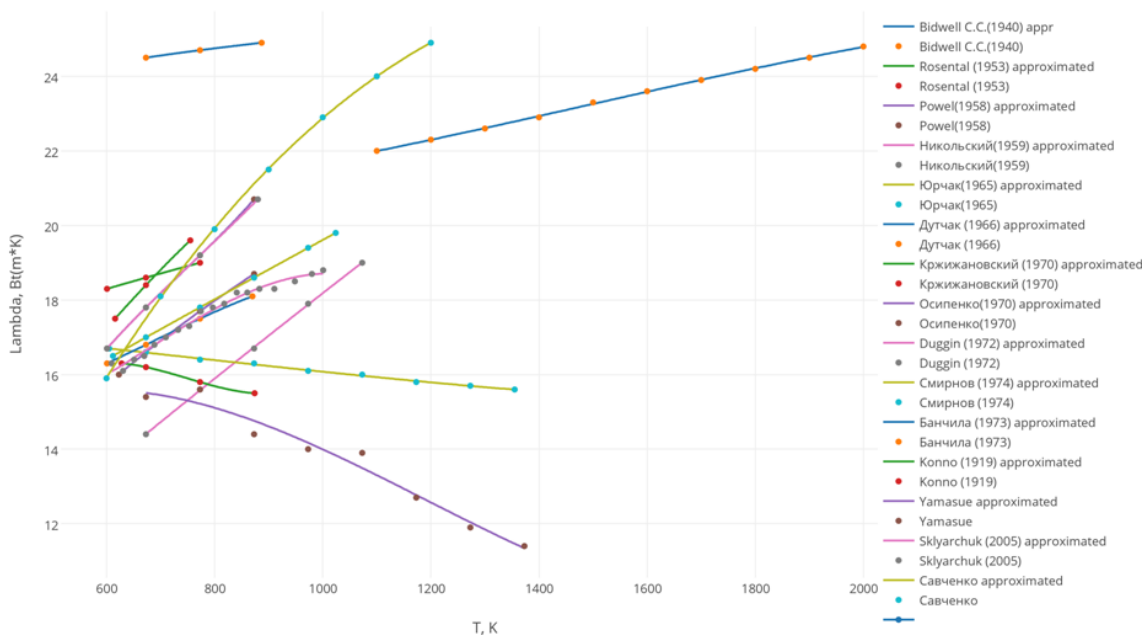


Рис. 4. Графическая зависимость теплопроводности свинца от температуры

Заключение

Рассмотренный в статье портал знаний обеспечивает систематизацию и интеграцию знаний и доступных информационных ресурсов, относящихся к изучению свойств органических и неорганических соединений в единое информационное пространство, и содержательный доступ к ним. Благодаря тому, что систематизация и структуризация таких знаний и информационных ресурсов выполнена на основе онтологии, доступ к ним осуществляется путем навигации по дереву понятий онтологии и контенту портала, а также через средства поиска в терминах его предметной области.

При создании портала использовались программные средства, методология и технология разработки порталов научных знаний, предложенные в [2; 3; 10].

Ближайшие цели авторов – пополнение контента портала новыми результатами и области исследования теплофизических свойств материалов. Планируется подключение к portalу знаний развитых средств графической визуализации, что позволит представлять в виде графа не только иерархии понятий онтологии, но и весь контент.

Список литературы

1. Жижимов О. Л., Мазов Н. А., Федотов А. М. Некоторые заметки об эволюции цифровых репозитариев традиционных библиотек к полнофункциональным электронным библиотекам // Вестн. Владивосток. гос. ун-та экономики и сервиса. Территория новых возможностей. 2010. Т. 7, № 3. С. 55–63.
2. Загоруйко Ю. А. Автоматизация сбора онтологической информации об Интернет-ресурсах для портала научных знаний // Изв. Том. политехн. ун-та. 2008. Т. 312, № 5. С. 114–119.
3. Загоруйко Ю. А., Боровикова О. И. Подход к построению порталов научных знаний // Автометрия. 2008. Т. 44, № 1. С. 100–110.

4. Баракнин В. Б., Молородов Ю. И., Станкус С. В., Федотов А. М. Информационные технологии для задач теплофизических свойств веществ. // Информатика и системы управления. Автоматизированные системы и комплексы. 2013. № 4 (38). С. 149–157.
5. Еркимбаев А. О., Цицерман В. Ю., Кобзев Г. А., Серебряков В. А., Шиолашвили Л. Н. Интеграция данных по свойствам веществ и материалов на основе онтологического моделирования предметной области // Электронные библиотеки. 2013. Т. 16, №. 5. URL: <http://www.elbib.ru/index.phtml?page=elbib/rus/journal/2013/part6/EZKSS>
6. Gruber T. Toward Principles for the Design of Ontologies Used for Knowledge Sharing // International Journal of Human-Computer Studies. 1995. Vol. 43. Iss. 5–6. P. 907–928.
7. Кондратьев Г. М. Регулярный тепловой режим. М.: Гостехиздат, 1954. 408 с.
8. Кондратьев Г. М. Тепловые измерения. М.; Л.: Машгиз, 1957. 244 с.
9. Пономарев С. В. Теоретические и практические основы теплофизических измерений. М.: Физматлит, 2008. 408 с.
10. Загорулько Ю. А., Боровикова О. И. Информационная модель портала научных знаний // Информационные технологии. 2009. № 12. С. 2–7.

Материал поступил в редколлегию 20.05.2014

G. B. Zagorulko, Yu. I. Molorodov, A. M. Fedotov

¹ Institute of Informatics Systems SB RAS
6 Lavrentiev Ave., Novosibirsk, 630090, Russian Federation

² Institute of Computational Technologies SB RAS
6 Lavrentiev Ave., Novosibirsk, 630090, Russian Federation

³ Novosibirsk State University
2 Pirogov Str., Novosibirsk, 630090, Russian Federation

gal@iis.nsk.su, yumo@ict.sbras.ru, fedotov@sbras.ru

SYSTEMATIZATION OF KNOWLEDGE ON THERMOPHYSICAL PROPERTIES OF SUBSTANCES

The paper describes the information system supporting the provision of data systematization and integration of knowledge and information resources for the study of thermophysical properties of metals and alloys in a wide temperature range. The use of ontology for describing domain allows semantically structured content system and organize the navigation and content-based retrieval of information. Technologies incorporated in the design of the system, focused on the domain expert.

Keywords: knowledge, inorganics, metals, alloys, information resources, ontology, meaningful access, ontology-driven navigation.

References

1. Zhizhimov O. L., Mazov N. A., Fedotov A. M. Some notes on the evolution of digital repositories of traditional libraries for a full-featured digital libraries. *Bulletin of Vladivostok State University of Economics and Service. The territory of the new features*, 2010, vol. 7, no. 3, p. 55–63. (in Russ.)
2. Zagorulko Yu. A. Automating the collection of ontological information about Internet resources for scientific knowledge portal. *Bulletin of the Tomsk Polytechnic University*, 2008, vol. 312, no. 5, p. 114–119. (in Russ.)
3. Zagorulko Yu. A., Borovikova O. I. Approach to the construction of scientific knowledge portals. *Avtometriya*, 2008, vol. 44, no. 1, p. 100–110. (in Russ.)

4. Barakhnin V. B., Molorodov Yu. I., Stankus S. V., Fedotov A. M. Information technology for the problems of thermophysical properties of substances. *Informatics and control systems. Automated systems and complexes*, 2013, no. 4 (38), p. 149–157 (in Russ.)
5. Erkimbaev A. O., Zitserman V. Y., Kobzev G. A., Serebryakov V. A., Shiolashvili L. N. Integration of data on the properties of substances and materials based on ontological modeling domain. *Russian Digital Libraries Journal*, 2013, vol. 16, no. 5. URL: <http://www.elbib.ru/index.phtml?page=elbib/rus/journal/2013/part6/EZKSS> (in Russ.)
6. Gruber T. Toward Principles for the Design of Ontologies Used for Knowledge Sharing. *International Journal of Human-Computer Studies*, 1995, vol. 43, iss. 5–6, p. 907–928. (in Russ.)
7. Kondratyev G. M. Regular thermal regime. Moscow, Gostekhizdat, 1954, 408 p. (in Russ.)
8. Kondratyev G. M. Thermal measurements. Moscow, Leningrad, Mashgiz Publ., 1957, 244 p. (in Russ.)
9. Ponomarev S. V. Theoretical and practical bases of thermal measurements. Moscow, Fizmatlit Publ., 2008, 408 p. (in Russ.)
10. Zagorulko Y. A., Borovikova O. I. Information model of scientific knowledge portal. *Information Technology*, 2009, no. 12, p. 2–7. (in Russ.)