

*В. А. Дударев, канд. техн. наук, доцент Московского государственного университета тонких химических технологий им. М. В. Ломоносова*

*О. А. Филоретова, канд. техн. наук, Московский государственный университет тонких химических технологий им. М. В. Ломоносова*

## Подход к интеграции баз данных по свойствам неорганических веществ на основе метабазы

*Обеспечение химиков достоверной информацией о свойствах современных веществ представляется необходимым условием развития инновационной промышленности. На текущем этапе качественная информационная поддержка специалистов осуществляется с использованием специализированных баз данных (БД), основным преимуществом использования которых по сравнению с печатными публикациями является существенное сокращение времени поиска требуемой информации.*

### Введение

Разработка информационных систем (ИС) по свойствам неорганических веществ ведется во многих странах [1]. При этом наибольшего прогресса в этом вопросе добились США и Япония, которые на базе *NIST (National Institute of Standards and Technology* — Национальный институт стандартов и технологий, США) и *NIMS (National Institute for Materials Science Technology* — Национальный институт материаловедения, Япония) предлагают обширные комплексы материаловедческих баз данных. Россия также обладает неплохим потенциалом и все еще находится в лидирующей группе, однако в последние годы можно отметить определенный застой в этой области, связанный с недостаточным финансированием. В результате в нашей стране существует ряд специализированных баз данных, разработанных различными организациями и никак не связанных друг с другом.

Ни одна из разработанных БД по свойствам неорганических веществ и материалов (БД СНВМ) не способна предоставить исчерпывающую информацию о совокупно-

сти свойств конкретного вещества или материала. Очень часто специалисты вынуждены просматривать десятки БД СНВМ, чтобы найти необходимые им значения параметров заданного вещества. Одним из путей решения проблемы является интеграция информационных источников с целью предоставления пользователям полной совокупности данных о неорганических веществах.

### Иерархия химических сущностей

Ключевой проблемой при интеграции является стандартизация понятий предметной области. Описание химических сущностей и их свойств в различных БД СНВМ происходит с разной степенью детализации. Значения свойств, хранимые в информационных источниках, определяются, в первую очередь, составом неорганических веществ (набором образующих их химических элементов и соотношением их друг с другом). В свою очередь, физические свойства веществ во многом зависят от кристаллической структуры.

Таким образом, может быть построена иерархия понятий, используемая при описании свойств химических сущностей (рис. 1).