

© Мазурин О.В, Гусаров В.В.

БУДУЩЕЕ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ В МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ

Институт химии силикатов имени И.В.Гребенщикова РАН

Рассмотрены вопросы развития информационных технологий в области материаловедения. Показана перспективность создания единой информационной системы, описывающей структуру, фазовое состояние и свойства различных классов материалов – стекол, керамики, полимеров, композиционных материалов и т.п. Сделан прогноз развития информационных систем в области материаловедения на электронных носителях информации.

Введение. Среди появившихся на рубеже столетий многочисленных работ, прогнозирующих возможные пути развития науки и техники (см., например [1-3]), почему-то сравнительно мало внимания уделяется общей проблеме всемерной экономии ресурсов, которыми располагает человечество. В то же время именно успешное решение этой задачи является главным условием не только дальнейшего развития человеческой цивилизации, но и вообще выживания человечества в условиях интенсивно продолжающегося демографического роста. При этом важно подчеркнуть, что в равной мере следует заботиться об экономном использовании как невозпроизводимых ресурсов (полезные ископаемые), так и воспроизводимых. Дело в том, что ежегодный прирост любых воспроизводимых ресурсов ограничен, рано или поздно человечество подойдет к естественному пределу возможностей их использования.

К одному из важнейших воспроизводимых ресурсов, интенсивно используемых человеческим обществом, относится новая научная и техническая информация. Интенсивность

получения этой информации безусловно сильно зависит от технического прогресса. Но она в не меньшей степени зависит и от таких экстенсивных факторов, как ассигнования на фундаментальную и прикладную науку. В середине двадцатого века эти ассигнования быстро возрастали практически во всех странах мира. Сейчас они неуклонно снижаются, соответственно, снижается во всех развитых в техническом отношении странах мира и число научных работников. В то же время сфера исследований непрерывно расширяется. Это приводит к тому, что в целом скорость роста производства научной и технической информации замедляется. В ряде отраслей наблюдаются уже признаки реального спада информационной активности.

Эта ситуация делает особенно своевременной заботу о максимально эффективном использовании уже накопленных знаний. В семидесятые годы двадцатого века специалисты в области информатики любили ссылаться на заключение одной из ведущих американских химических компаний, из которого следовало: если компании необходимо начать производство нового для нее химического продукта и соответствующая технология компании неизвестна, то в том случае, если по предварительной оценке разработка такой технологии обойдется менее чем в \$100 000, более выгодно начать разработку с нуля, чем заниматься поиском в литературе возможно уже имеющихся там сведений о способах получения данного продукта. Сейчас система поиска информации, имеющейся в научной литературе, несколько (отнюдь не кардинально!) улучшилась, но и объем имеющейся информации с тех пор очень сильно возрос. Так что проблема как минимум не стала менее острой.

Итак, колоссальные объемы знаний, накопленные человечеством и собранные в гигантских библиотеках (например, самое большое хранилище знаний – Библиотека конгресса США содержит около 112 000 000 книг и документов, которые расположены на полках общей протяженностью 857 км), используются совершенно недостаточно, а новые поколения исследователей иной раз снова исследуют уже изученные ранее закономерности вместо того,

чтобы направить все усилия на работу в новых, еще не изученных областях. При этом заметим, что в материаловедении качество новых измерений иной раз может уступать качеству старых [4], результаты которых оказываются незаслуженно забытыми.

По счастью, человечество сейчас располагает возможностями для коренного изменения ситуации. Для этого необходимо перевести всю потенциально полезную информацию с бумажных на электронные носители, причем перевести в такой форме, которая бы обеспечивала быстрый и совершенно надежный поиск, сравнение данных из разных работ, их обобщение, обработку, составление на этой основе прогнозов, а также использование найденных данных для автоматизированного решения самых разнообразных практических задач. Будущий прогресс в развитии компьютерной техники еще более расширит такие возможности, но и того, чем человечество в этом плане располагает в настоящее время, уже более чем достаточно. В то же время осуществление перевода научной и научно-технической информации на электронные носители (в той форме, как это описано выше) пока происходит сравнительно медленно. Причины здесь, на наш взгляд, совсем не технические, а социальные и психологические. Перевод научной информации с бумажных носителей на электронные должен привести к коренному изменению многих особенностей труда специалистов, к коренному изменению менталитета руководителей научных и учебных учреждений и промышленных компаний. С приходом на руководящие должности нового поколения специалистов, привыкших к повседневному общению с электронной техникой, произойдет резкое ускорение этих процессов. А в настоящее время специалисты, которые понимают важность и абсолютную неизбежность грядущей компьютерной революции в информационном обеспечении науки и техники, должны по мере сил и возможностей готовить идейные основы для такой революции. Необходимо будет решать (и когда придет время – решать быстро) большое число сложных проблем, от чего в большой степени будет зависеть эффективность работы создаваемой глобаль-

ной системы электронной научно-технической информации. В этой ситуации любой предварительный опыт работы в данном направлении может оказаться очень и очень ценным.

Опыт развития материаловедческих информационных технологий в Институте химии силикатов РАН

Работы, определившие успехи Института химии силикатов в области информационных технологий применительно к неорганическим неметаллическим материалам начались около сорока лет тому назад, когда Институт начал создавать справочники. Дело в том, что одним из важнейших условий оптимального формирования материаловедческих баз данных (БД) является умение объединять в единой, рационально структурированной системе хранения данных информацию, взятую из самых различных источников и, соответственно, представленную самым различным образом. На этой стадии работы не так уж важно, используется ли для представления результатов бумажный или электронный носитель информации.

Большое значение справочников в области материаловедения было понято директором Института химии силикатов (1953 – 1968) Н.А.Тороповым еще в начале шестидесятых годов. Он явился инициатором создания справочника «*Диаграммы состояния силикатных систем*», первый том которого вышел в 1965 г. [5], а (пока что) последний, десятый – в 1997 г. [6]. Следует подчеркнуть очень важную, с нашей точки зрения, особенность этого справочника. Кроме диаграмм состояния в нем приводятся и некоторые наиболее важные свойства кристаллических фаз соответствующей системы, основные направления практического применения материалов на основе описываемых систем, а также даются сведения о методах исследования представленных в справочнике диаграмм. Несмотря на то, что многотомный справочник по диаграммам состояния начал издаваться также и Американским керамическим обществом [7], в отношении указанных выше особенностей подачи материала справочник

Института химии силикатов остался до сих пор единственным в мире. Значение этого подхода будет рассмотрено в следующем разделе.

Через несколько лет после опубликования первого тома справочника по диаграммам состояния [8] в Институте химии силикатов было предпринято и другое издание такого же рода – «Справочник по свойствам стекол и стеклообразующих расплавов» [8], который вышел в свет только в 1999 г. Следует подчеркнуть, что идея выпуска этого справочника была в свое время активно поддержана Н.А.Тороповым, что, несомненно, сыграло значительную роль в принятии решения о начале этого издания. Затем было предпринято издание версии того же справочника на английском языке [9], завершенное в 1994 г. Главной особенностью этого справочника явилось опять-таки включение в него достаточно подробной информации об условиях синтеза и методах измерения свойств соответствующих составов стекол. Даже в лучшем из появившихся после этого справочников по свойствам стекол [10] такая информация отсутствовала.

Насколько нам известно, ни в одном из других материаловедческих справочников по любым другим материалам (полимерам, металлам, полупроводникам и т.д.) подробных сведений о выполнении экспериментов (позволяющих квалифицированному читателю оценить надежность представленных результатов) не приводились. Таким образом, Институт химии силикатов оказался единственным учреждением, в котором были созданы справочники нового поколения, в наибольшей степени подходящие в качестве основы для создания высококачественных электронных БД.

Итак, вполне закономерно, что авторы справочников [8, 9] оказались в ряду тех, кто был готов участвовать в создании прототипов электронных информационных систем двадцать первого века в сфере материаловедения. Однако, для создания высококачественной электронной информационной системы требовались весьма значительные финансовые вло-

жения. И здесь возникла очень серьезная проблема: рынок сбыта БД по стеклам и расплавам оказывался весьма узким (в отличие от рынков сбыта, например, баз данных по свойствам керамических изделий, полимеров или металлов). К тому же этот рынок уже был занят японской базой данных по свойствам стекла [11], хотя и имевшей принципиальные недостатки, но зато уже привычной для потенциальных покупателей. В результате не только не было ясности в вероятности получения прибыли, но вложения в разработку информационной системы по стеклам и расплавам и вообще могли бы не окупиться. По счастью, Американская компания SciVision решилась пойти на серьезный финансовый риск ради приобретения, можно сказать, бесценного опыта создания электронных материаловедческих информационных систем нового поколения.

В результате появилась информационная система SciGlass [12], при создании которой был объединен опыт специалистов Института химии силикатов в области материаловедения и опыт программистов компании SciVision в области разработки программных продуктов для научных исследований. При разработке системы SciGlass было принято много принципиально важных решений [13], что подтверждается высокими оценками данного программного продукта, сделанными ведущими специалистами в области стекла [14-16].

Само собой разумеется, что в последние десятилетия значительное число специалистов понимало перспективность создания электронных БД по свойствам веществ и материалов и предпринимало в этой области конкретные и достаточно успешные действия. Так, одна из первых БД по металлургии и термохимии (MTDATA) была создана в Англии при активном участии Национальной физической лаборатории еще в 1971г. Впоследствии в этой же области появился ряд конкурирующих БД, таких как CSIRO (Австралия), THERDAS (ФРГ), THERMOCALC (Швеция), THERMODATA (Франция), MANLABS (США), F*A*C*T* (Канада), HSC (Финляндия), IVTANTHERMO (СССР) [17-20]. Такое разнообразие различных БД

по термохимии не могло оставаться длительным. Были начаты работы по созданию Интегрированной базы термохимических данных (ITD), для чего был образован международный консорциум SGTE (Scientific Group Thermodata Europe) [20]. Безусловно, создание специальных БД по определенным группам свойств, в которых охватывались бы сведения об этих свойствах применительно к самым различным классам веществ, имеет очень большое значение, и такие БД имеют хорошие перспективы развития. Однако, на наш взгляд, решающую роль в будущем должны будут играть БД по свойствам определенных больших классов материалов, в которых бы объединялись на единой основе данные о всех имеющих практическое значение свойствах определенного класса материалов и/или веществ.

Следует отметить, что, если по объему и качеству информации БД по термодинамическим свойствам веществ оказались на достаточно высоком уровне, то БД, содержащие информацию по фазовым диаграммам систем, были представлены в значительно менее удачной форме и были существенно ограничены по количеству включенных в них систем. Например, в БД THERMOSALT содержатся данные о фазовых диаграммах только некоторых солевых систем, в БД CALPHAD включены фазовые диаграммы ограниченного числа оксидов и нитридов, опубликованные в одноименном журнале, БД SLAG из комплекса БД THERMOCALC содержит данные о фазовых диаграммах на основе семи оксидов. Для всех перечисленных БД характерны неудачная форма представления данных о фазовых диаграммах (отсутствие расширенных комментариев о способах исследования фазовых равновесий, свойствах и структуре фаз, возможных аспектах применения и т.п.), неудобный интерфейс, ограниченность БД по числу систем и ряд других недостатков. Эти обстоятельства, а также большой опыт сотрудников Института химии силикатов по сбору и анализу информации о фазовых диаграммах, полученный при создании упоминавшегося выше справочника [5,6], инициировали начало работ в Институте по созданию собственной версии БД и информационной системы по

фазовым диаграммам и свойствам керамических материалов. Эти работы развивались в направлении перевода справочника по фазовым диаграммам силикатных и тугоплавких оксидных систем в электронную форму. Несмотря на то что работы по данной теме ведутся крайне медленно из-за ограниченности финансовых ресурсов, удалось показать, что у подобной разработки имеются большие перспективы. Например, отдельные элементы Информационной системы по фазовым диаграммам двойных, тройных и многокомпонентных систем [21], как показал опыт работы с ними ученых-материаловедов, инженеров, студентов, значительно интенсифицируют процесс проектирования новых материалов, анализа изменений в материале и т.п. Они позволяют также ликвидировать возможность чисто расчетных ошибок, связанных с пересчетами концентраций компонентов из одних единиц в другие, расчетами по правилу рычага, определениями температур на поверхности ликвидуса в тройных системах и др. Кроме перечисленных преимуществ, электронная форма представления данных о фазовых состояниях позволила разработать принципиально новый – анимационный – дизайн фазовых диаграмм многокомпонентных систем, который невозможен при традиционных способах представления информации [16]. К сожалению, авторы не смогли создать такую БД, которая смогла бы охватить весь спектр имеющихся сведений о фазовых диаграммах. Создание подобной БД возможно только при наличии соответствующего финансового обеспечения.

Общие перспективы развития материаловедческих информационных технологий.

Вводные замечания. Как уже отмечалось выше, объем научной информации в мире непрерывно возрастает, этот процесс будет продолжаться и в будущем. Это, конечно, касается и такой крупной отрасли знаний как материаловедение. Но можно достаточно уверенно прогнозировать, что главные направления в материаловедении, в которых будут создаваться наиболее крупные БД, будут, прежде всего, определяться потребностями практики. Дело в

том, что работа по созданию БД, охватывающих с должной степенью полноты и надежности колоссальные массивы информации, требует больших капиталовложений, а, следовательно, она может быть предпринята только в расчете на широкий платежеспособный спрос.

Представляется очевидной важность для практики формирования БД по свойствам металлов, керамики и огнеупоров, вяжущих веществ, полимеров, композиционных материалов, различных химических соединений, расплавов и стекол, биологически активных веществ и некоторым другим направлениям. Кроме того, в сфере материаловедения потребуется наличие еще как минимум двух специфических БД: по структуре кристаллов и по диаграммам состояния, являющихся в некотором смысле базовыми при решении проблем, связанных с проектированием новых материалов и технологий их получения. Перспективы создания такого рода БД и будут рассмотрены в настоящем разделе.

Создание баз данных по свойствам веществ и материалов. В перспективе электронные БД по свойствам материалов (далее БДСМ) должны будут содержать всю без исключения накопленную человечеством и представляющую интерес для практического использования информацию о влиянии состава, методов получения и структуры на свойства веществ и материалов. Все данные по свойствам материалов должны сопровождаться достаточно подробным описанием методов измерений этих свойств. Перед создателями БДСМ должна стоять следующая задача: освободить подавляющее большинство пользователей от необходимости тратить время на поиск и знакомство с оригинальной литературой. При этом поиск большей части литературы, содержащей сведения о свойствах веществ и материалов в недалеком будущем также будет значительно упрощен. Однако, можно полагать, что материалы из диссертаций, отчетов, многих изданий первой половины двадцатого и тем более девятнадцатого века будут и тогда не столь уж легко доступны. Но самое главное, что должна дать БДСМ, –

это обеспечить возможность обходиться без чтения литературы на разных языках (задача точного перевода научно-технических терминов и понятий, специфических для каждой конкретной области науки и техники, будет еще долго оставаться камнем преткновения для электронных переводчиков), анализа приводимых данных, их извлечения путем сканирования, сопоставления с другими данными и т.д. Кроме того, резко сократится время, необходимое для получения требуемой информации. В результате в очень многих случаях специалист сможет полностью освободиться от необходимости работы с оригиналами статей. Это, однако, приведет к требованию обеспечения высокой степени надежности БДСМ. Полностью исключить возможность ошибки при переносе данных из оригинала статьи в электронную форму нереально. Но довести процент ошибок до минимума можно и необходимо. Это означает, что процент ошибок в БД должен быть значительно ниже процента ошибок в оригинальной литературе, большую часть которых обязаны обнаруживать и исправлять те специалисты высокого класса, которым будет доверено составление БДСМ. Как показывает уже накопленный опыт, достижение указанной цели представляет собой вполне реальную задачу. И, следовательно, сопоставление надежностей БДСМ и оригиналов статей будет явно в пользу БДСМ.

Итак, БДСМ двадцать первого века должны будут отвечать трем неперенным условиям: гарантировать полноту поиска оригиналов с информацией по свойствам веществ и материалов, полноту извлечения информации, необходимой для практического использования, и надежность ее представления. Возникает естественный вопрос: когда можно ожидать создания таких БД?

Наиболее близким является завершение работы по созданию всеобъемлющей базы по неорганическим неметаллическим расплавам и стеклам. База SciGlass (не включающая данных по халькогенидным стеклам и по солевым расплавам) содержит в настоящее время дан-

ные для более чем 200 000 стекол и расплавов. Общее число составов, для которых изучены те или иные свойства, в пределах охватываемой в настоящее время SciGlass области веществ ориентировочно оценивается в 250 000÷280 000. При благоприятных обстоятельствах эта БД (с упомянутыми выше ограничениями) через несколько лет может быть почти полностью сформирована. Следует учесть, что работа над поиском и сбором информации велась в данной области начиная с конца шестидесятых годов. Работа по всем неорганическим расплавам и стеклам (т.е. с включением халькогенидных стекол и солевых расплавов) могла бы при благоприятных обстоятельствах быть закончена к 2010 г. Что касается других перечисленных выше основных классов веществ и материалов, то следует иметь в виду, что информации в литературе по каждому из них содержится как минимум на порядок больше, чем по расплавам и стеклам. К тому же структурирование имеющейся информации, достижение сопоставимости данных разных исследований, поиск оптимальных форм представления информации об условиях получения материалов и веществ оказывается намного более сложным, чем в случае расплавов и стекол, а опыта в проведении такого рода работы гораздо меньше. Следовательно, можно полагать, что на начальных стадиях работы на этих направлениях поиск будет вестись в некоторых ограниченных областях, представляющих в данный период времени наибольший практический интерес. Первые программные обобщения такого рода, вероятно, появятся в продаже уже в ближайшие годы. Что касается изготовления полномасштабных БД, то сроки будут определяться психологическими, социологическими и экономическими факторами и их оценку можно дать лишь весьма приблизительно – от 20 до 50 лет.

К трем перечисленным выше требованиям к БДСМ следует добавить четвертое: оперативность ввода новой информации в любую из баз. Вероятно, следует стремиться к тому, чтобы результаты любых новых исследований вводились бы в базу данных сразу по их получении в той или иной исследовательской организации. Иначе говоря, БДСМ должна пред-

ставлять собой нечто вроде депозитария, в который помещались бы все новые экспериментальные данные вместе с определенным объемом информации об условиях эксперимента. Статус передачи информации в БДСМ должен будет соответствовать статусу высококвалифицированной публикации. Следовательно, и требования к качеству представляемого материала должны стать достаточно жесткими. Отметим, что в настоящее время уже имеется подобный опыт формирования баз данных, например, таких как БД по порошковым дифрактограммам веществ (PDF). Естественно, что массовый переход на передачу исследователями экспериментальных данных непосредственно в БДСМ будет процессом достаточно длительным. Сначала же основным источником информации для БДСМ будут публикации в журналах, диссертации, патенты и т.д.

Следует отметить, что описанная процедура вовсе не должна нанести значительного ущерба обычной системе научных журналов. В хороших научных журналах наибольшее внимание уделяется интерпретации результатов исследований, использованию этих результатов для выяснения «природы вещей». Эти вопросы, скорее всего, полностью окажутся за пределами той информации, которая будет собираться в БДСМ. Вместе с тем, с развитием электронных версий журналов, распространяемых через Интернет, будут развиваться и возможности автоматизации пополнения БДСМ. Для этого форма представления материала в журналах должна претерпеть некоторые изменения. Например, цифровая и описательная информация, иллюстративный материал, представляющие интерес для включения в БДСМ, должны форматироваться по определенному стандарту и группироваться в некоторый единый блок, как это делается, например, при написании аннотации к статьям. Тем не менее рассчитывать на полную автоматизацию указанной процедуры не приходится. На основе наблюдений за динамикой качества описания экспериментальных данных в лучших журналах по стеклу за последние пятьдесят лет есть основания сделать неутешительный прогноз – в бли-

жайшие десятилетия исследователи не станут обрабатывать результаты своих измерений тщательнее, чем сейчас. Поэтому высокое качество БДСМ сможет быть обеспечено лишь за счет контроля высококлассным специалистом каждой поступающей в базу работы.

Представляется очевидным, что основным способом оперативного получения пользователями необходимой информации станет Интернет. Пользователи по подписке смогут получать доступ к любой интересующей их БДСМ.

В организации описанной выше схемы, пожалуй, самым сложным для разрешения будет вопрос о монополиях. Дело в том, что создание БДСМ по каждому из крупных классов веществ и материалов (причем каждая БДСМ должна полностью удовлетворять всем перечисленным выше требованиям) потребует использования значительных человеческих ресурсов. Только специалисты самой высокой квалификации, обладающие такими качествами, как высокое чувство ответственности и способность к постоянной концентрации внимания на выполняемой работе, смогут обеспечить создание БДСМ, способных успешно заменить в рассматриваемой области все существующие сейчас средства научной информации. Должна быть разработана единая для каждого класса веществ и материалов система представления данных, к которой привыкнет научное сообщество. Только тогда все потенциальные преимущества, заложенные в описываемой здесь системе, будут действительно реализованы. Но это означает, что в мире должны будут определиться некоторые конкретные компании, каждая из которых будет владеть одной или даже несколькими БДСМ по определенным классам веществ и материалов, что естественно будет таить в себе немало опасностей. Как конкретно мировое научное сообщество найдет выход из этой проблемы, сегодня предсказать невозможно. Но мы убеждены, что при любых обстоятельствах большую роль в формировании системы БДСМ должны будут играть международные научные организации типа ИЮПАК, МАГАТЭ, Международной академии керамики, Международной комиссии по стеклу, уже

упоминавшегося ранее консорциума SGTE (Scientific Group Thermodata Europe) и т.д. Каждая из таких организаций должна будет не только выбрать на конкурсной основе наиболее подходящую компанию для осуществления соответствующего проекта, но и заключить с этой компанией соглашение, предусматривающее права и ее обязанности. Вероятно, в соглашении обязательно должен присутствовать пункт, по которому в случае нарушения условий соглашения компания обязана будет передать международной организации все права на дальнейшее использование накопленной БДСМ (т.е. на привлечение для продолжения этой работы какой-либо новой компании). Мы полагаем, что опасаться отказа каких бы то ни было компаний работать на таких условиях не придется. Поддержка международной организации должна будет гарантировать широкий и устойчивый спрос на соответствующий программный продукт, а следовательно, гарантировать высокий и устойчивый доход компании.

Вместе с тем, как следует из выше сказанного, создание единых баз данных по тем или иным отраслям научного знания вызовет целый ряд проблем, далеких от науки, причем, не только экономического, но и правового характера. Встанет вопрос о правах на владение всем комплексом научного знания, тогда как раньше рассматривались только права авторов на материалы, опубликованные в отдельных статьях, патентах на изобретения, монографиях.

Следует отметить, что помимо тех БДСМ, о которых речь шла выше, и которые можно назвать глобальными, сейчас существуют и, вероятно, будут существовать всегда некие локальные БД по свойствам веществ и материалов, принадлежащие крупным компаниям, университетам и иным организациям. Вероятно, значительная часть их является закрытой, поскольку содержит конфиденциальную информацию. Это было, есть и будет всегда и к настоящему прогнозу не имеет отношения. Но имеются локальные базы, которые не содержат секретной информации и владельцы которых могут предоставить права на их использование любому желающему за определенную плату. В настоящее время таких баз имеется довольно

много, в первую очередь это базы по свойствам промышленных полимеров, а также лекарственных и токсических веществ. Можно полагать, что по мере развития глобальных БДСМ значение и популярность локальных баз будет неуклонно снижаться. Единственно, чем они еще некоторое время будут оставаться интересными, так это имеющейся в них той информацией о свойствах веществ и материалов, которая по тем или иным причинам (в частности, связанным с охраной авторских прав) не попала в глобальную БДСМ.

Важным социальным последствием появления глобальных БДСМ и доступа к ним через систему Интернет станет вырождение понятий рабочего дня и рабочего места ученого. Работать с любой научной информацией можно будет в любое время суток, находясь в любом месте земного шара, включая и любые транспортные средства. Это приведет к принципиальным изменениям в управлении и организации научных исследований.

Об информационных системах, базирующихся на БДСМ. Значение БДСМ и интерес к ним многократно возрастут, если наряду с самими БДСМ в соответствующие программные продукты будут встроены дополнительные программы, позволяющие пользователям в максимальной степени использовать собранные в БДСМ экспериментальные данные. Некоторые из этих вариантов уже успешно опробованы в существующих программных продуктах такого рода, но большинство из них еще ждут будущих разработок. Такие программные продукты правильнее называть не базами данных, а информационными системами.

Первыми, помимо самих БД, совершенно очевидными элементами информационных систем по свойствам материалов (ИССМ) являются различные приемы обработки экспериментальных данных, приводимых в БДСМ. К этим приемам относятся объединение в обобщающих таблицах и графиках результатов самых различных публикаций, их разнообразная

математическая обработка, преобразование единиц, преобразование координат графиков и т.д. и т.п.

Вторым крупным элементом ИССМ должен стать калькулятор, включающий в себя программы расчета тех свойств веществ и материалов, экспериментальные данные по которым собраны в БДСМ. Естественно, что в калькуляторе должны быть собраны вместе все имеющие практическую ценность методы расчета свойств. Очень важным условием успешного использования этого элемента информационной системы должно быть встраивание в ИССМ подпрограммы, которая позволяла бы сравнивать результаты расчета с экспериментом для всех включенных в систему методов расчета для любой выбранной пользователем области исследования.

Следующим шагом в развитии ИССМ должно стать использование сведений о свойствах веществ и материалов, содержащихся в БДСМ, для практических расчетов. Например, для Информационной системы по свойствам расплавов и стекол сюда следовало бы отнести расчеты передачи тепла и распределения температур в материале любой геометрической формы от волокна до ванной печи, расчеты оптимальных режимов отжига и закалки стеклоизделий, расчеты диффузионных профилей, возникающих в результате ионного обмена между стеклом и расплавленной солью и т.д. Для Информационной системы по свойствам огнеупорных материалов это могли бы быть расчеты температурных полей, термических напряжений в условиях эксплуатации огнеупоров в зависимости от их формы и размеров, прогностические расчеты стойкости огнеупоров к механическим, термическим и химическим воздействиям среды. Для Информационной системы по свойствам керамики к перечисленному набору расчетных процедур следует добавить расчеты на прочность конструкций различной формы и размеров и расчеты соответствующих функциональных характеристик, например таких, как электрическое сопротивление.

БД Информационных систем будут включать в себя также информацию по всем имеющимся в мире патентам.

Наконец, любая БДСМ, в частности и ИССМ, в целом будут являться превосходным иллюстративным материалом для любых учебников или монографий, которые полностью или частично будут затрагивать проблемы, относящиеся к сфере знаний, охватываемых этими программными продуктами. Сейчас трудно представить себе даже ориентировочно, когда книги на бумажных носителях информации будут полностью вытеснены книгами на электронных носителях. Но то, что уже в ближайшее десятилетие наряду с бумажными версиями учебников и монографий начнут появляться их электронные версии, сомнений не вызывает. При этом мы имеем в виду не переведенные на CDR тексты и рисунки из обычных бумажных книг – это уже делается сейчас и приобретает все более широкое распространение, а настоящие электронные версии монографий и учебников. В таких версиях должны достаточно эффективно использоваться обеспечиваемые современной электронной техникой возможности поиска нужного материала, представления иллюстративного материала (в том числе анимированного), выдачи тренировочных заданий и контроля за их выполнением, а также системы интерактивных ссылок на статьи, монографии, учебники или другие материалы, имеющиеся на электронных носителях. В перспективе лучшие электронные версии таких монографий и учебников должны стать естественным компонентом ИССМ.

На какой-то следующей стадии совершенствования ИССМ неизбежно их объединение в единую суперсистему по свойствам материалов, которая будет позволять пользователю находить или проектировать материал, в наибольшей степени отвечающий комплексу требований к нему, независимо от того, к какому классу этот материал принадлежит.

Создание баз данных и информационных систем по диаграммам состояния, структуре и свойствам кристаллов и материалов на их основе. Создание единой системы БД по фазовым диаграммам всех классов веществ—металлов, оксидных и бескислородных высокотемпературных соединений, водных и неводных растворов солей, органических соединений—выведет материаловедение и технологию материалов на новый уровень решения задач, на котором проектирование новых материалов будет базироваться на существенно большем варианте комбинаций исходных составляющих материала. Успешное интегрирование знаний о фазовых диаграммах разнородных классов веществ для целенаправленного проектирования принципиально новых композиционных материалов возможно только в том случае, если система БД по фазовым диаграммам будет сопровождена информационно-расчетной системой, позволяющей на основе данных о фазовых состояниях прогнозировать (рассчитывать) свойства материалов. Основы для подобной информационной системы заложены в многочисленных материаловедческих работах. Объединение различных теоретических, эмпирических и полуэмпирических зависимостей свойств материалов от их химического и фазового состава, микроструктурных параметров в виде информационно-расчетной системы наряду с несомненными положительными для ученых-материаловедов и технологов моментами, поставит новые проблемы, связанные с корректностью выбора тех или иных моделей и, следовательно, с достоверностью прогноза. Важная роль в решении таких вопросов будет отводиться разработчикам информационно-расчетных систем, на которых будет лежать практически вся ответственность за достоверность результатов прогнозов. Эти специалисты должны обладать широчайшей эрудицией в области теории материалов, достаточным набором знаний в сфере экспериментальных исследований. Для того чтобы оценить адекватность эмпирически полученных модельных выражений и пределы их применимости, они должны быть способны связать разнородные по виду и своему генезису модельные выражения в единую систему про-

гнозирующую свойства материалов, иметь представление о потребностях практических материаловедов и технологов в определенном виде прогнозах. Подготовка таких специалистов (материаловедов-системщиков) должна стать, по-видимому, в ближайшем будущем одним из важнейших направлений высшего образования в области материаловедения. Создание перечисленных БД и информационно-расчетных систем будет полезно не только ученым-практикам, занимающимся разработкой новых материалов и технологий, но и ученым-исследователям, так как, с одной стороны, избавит их от многих рутинных операций, а с другой, позволит лучше представить себе наиболее перспективные в прикладном плане направления фундаментальных исследований.

Данные о некоторых структурных параметрах кристаллов уже к настоящему времени являются составной частью ряда БД. Вместе с тем отрывочность структурных сведений в указанных БД не позволяет в настоящее время использовать их в должной мере. Будущее направление развития электронных информационных систем связано с созданием единой системы БД по структурным свойствам веществ, в которые бы входили все сведения от типа структуры и параметров элементарной ячейки до полного описания распределения атомов и электронной плотности в пространстве, как в цифровом виде, так и в форме изображений. Информационно-расчетные системы в этом случае будут развиваться в двух направлениях: должны создаваться системы, позволяющие прогнозировать возможность замены в структуре одних атомов или целых атомных групп на другие и возникающие в результате этого смещения атомов из своих положений, а также системы, на базе которых может быть осуществлен расчет и сделана визуализация формирования тех или иных точечных, линейных (дислокации) или двумерных дефектов. Создание подобных систем облегчит прогнозирование возможности синтеза новых химических соединений, образования новых структурных состояний соединений и даст представление о возможной реальной структуре кристаллических тел.

Важным этапом станет интегрирование всех перечисленных баз данных и информационно-аналитических систем по свойствам материалов, фазовым диаграммам систем и структурам химических соединений в единый комплекс. Иерархическое блочное строение такого комплекса даст возможность при относительно независимых процедурах пополнения баз данных и совершенствовании или даже замене отдельных информационно-расчетных систем сохранить постоянную работоспособность всего комплекса. При этом в качестве первоочередных встанут вопросы глобальной унификации всех его составляющих.

Важным следствием создания рассматриваемой глобальной информационной системы по материалам станет появление большого количества виртуальных химических соединений, структур, веществ, материалов, технологий, которые образуют обширный «рынок идей» для ученых-экспериментаторов и инженеров.

Достижения в области создания искусственного интеллекта найдут применение и в развитии описанного в настоящей статье материаловедческого комплекса информационно-расчетных систем и БД, так как такой комплекс может стать той средой, над которой будут производиться аналитические и синтетические операции, осуществляемые алгоритмами, базирующимися на системах искусственного интеллекта. При этом исследователям останется только проверять полученные выводы.

Заключение. Всемерное развитие в ближайшем будущем крупных баз данных (БД) по всем направлениям знаний, представляющих значительный практический интерес, настолько очевидно, что в этом плане вероятность прогнозирования такого развития можно уверенно оценить как стопроцентную. Предсказание целого ряда особенностей создаваемых БД, равно как и создаваемых на их основе информационных систем тоже, скорее всего, «обречено на успех». Вряд ли по этому поводу могут возникнуть активные дискуссии. Только одно прин-

ципиальное положение нашего прогноза может вызвать серьезные сомнения у специалистов, а именно наша убежденность в неизбежности создания единых и единственных по каждому классу веществ и материалов глобальных баз данных по свойствам материалов. Мы понимаем, как в принципе опасны монополии, тем более монополии (пусть даже и в сравнительно ограниченной сфере каждая), охватывающие все без исключения государства мира. Контроль за деятельностью любой компании, которая будет держать в своих руках систему, обеспечивающую жизненно важной информацией (когда у специалистов будет выработана устойчивая привычка пользоваться чрезвычайно удобной и чрезвычайно надежной информационной системой, при любых сбоях такой системы они будут чувствовать себя очень неудобно), может оказаться для соответствующей международной организации не столь уж простым делом. И, тем не менее, с нашей точки зрения, такое развитие событий по существу неизбежно.

Скорее всего, на начальном этапе развития информационных систем по свойствам веществ и материалов на рынке может появиться несколько конкурирующих между собой БД и информационных систем. Но на какой-то стадии этого развития одна из систем окажется заведомо лучше других, получит поддержку международной общественности и займет лидирующее положение в сфере продаж. Тогда разрабатывающая такую систему компания сможет резко увеличить интенсивность работ в данном направлении и еще сильнее оторвется от своих конкурентов. И во многих отношениях это будет благом для данной отрасли. Форматы представления данных, стандарты получения новых результатов в исследовательских работах станут универсальными и, следовательно, привычными как для производителей, так и для потребителей продукции. Важно только, чтобы при опоре на тщательно составленное соглашение соответствующая международная организация не теряла контроля за деятельностью соответствующей компании.

Несмотря на естественное стремление, как отдельных стран, так и групп к обретению политической и экономической самостоятельности, в области организации научной и технической информации мир становится все более универсальным. Английский язык стал по существу единственным языком международного общения в сфере науки и техники, и это очень эффективно экономически и очень удобно практически. Международная система единиц СИ медленно, но неуклонно закрепляет свои позиции в мире и когда нынешнее поколение ученых и технологов уйдет на покой, она станет совершенно универсальной. Система Интернет переворачивает мир только по той причине, что сейчас средства общения с помощью Интернета, которыми пользуются, по последним данным, 250 000000 человек, используют во всем мире совместимые друг с другом программные средства.

Социальные последствия развития единой, доступной всему научному сообществу системы БД и информационно-расчетных систем огромны. Во-первых, само развитие такой глобальной информационной системы потребует привлечения большого числа специалистов различного профиля и квалификации, а, следовательно, приведет к появлению большого числа новых рабочих мест. Во-вторых, создание мощных и широко доступных информационных систем поставит малые и средние предприятия, ориентированные на разработку и производство новых материалов и технологий, практически в равные условия с большими компаниями, по крайней мере, на стадии научно-технологической проработки решения. Если учесть, что большинство экономистов видят решение многих социальных проблем в индивидуализации труда и развитии широкой сети малых и средних предприятий, то нетрудно заметить, что в появлении рассматриваемой информационной структуры будут заинтересованы не только большие компании, но в не меньшей, а может быть, даже в большей степени государственные и общественные структуры. Поэтому, на наш взгляд, важное место в организации разработки глобальной информационной системы по материалам должны занять такие государст-

венные и общественные организации, как Национальные академии наук и их ассоциации, Международная академия керамики, Американское и Европейское керамические общества и многие другие организации такого же характера.

В заключение мы хотели бы подчеркнуть, что человечество не так уж богато, не так благополучно, оно имеет не такие уж радужные перспективы своего развития, чтобы разбивать важнейшее дело информационного обеспечения производства материалов на многие локальные системы, предлагающие собственные способы сбора и представления данных и отчаянно конкурирующие между собой. Но если мировое сообщество придет к заключению о необходимости в будущем ориентироваться на единые информационные системы по свойствам веществ и материалов, оно должно начинать искать средства защиты интересов пользователей от издержек монополизма в этой области.

Работа частично поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 01-07-90291).

Список литературы

1. Стекло и керамика – XXI. Перспективы развития / Материалы книги подготовлены сотрудниками ИХС РАН по концепции акад. В.Я.Шевченко. СПб.: Янус, 2001. 300с.
2. Фаворский О.Н. Энергообеспечение России в ближайшие 20 лет // Вестн. РАН. 2001. Т.71. № 1. С.3-12.
3. Русанов А.И. Коллоидная химия на рубеже столетий // Журн. Российского химич. общества. 2001. Т.46. №1. С.66-69.
4. Мазурин О.В., Стрельцина М.В., Швайко-Швайковская Т.П. Проблемы исследования свойств стекол и расплавов: некоторые итоги и перспективы на пороге нового века // Физ. и хим. стекла, 2000. Т. 26. (В печати).
5. Торопов Н.А., Барзаковский В.П., Лапин В.В., Курцева Н.Н. Диаграммы состояния силикатных систем. Справочник. Вып. 1. Двойные системы. М., Л.: Наука, 1965. 546 с.
6. Григорьева Л.Ф., Косулина Г.И., Петрова М.А., Сечной А.И. Диаграммы состояния систем тугоплавких оксидов. Справочник. Вып. 6. Системы керамических высокотемпературных сверхпроводников / Под. ред. Р.Г.Гребенщикова. СПб.: Наука, 1997. 336 с.
7. Levin E.M., Robbins C.R., McMurdie H.F. Phase Diagrams for Ceramists. Columbus: Amer. Ceram. Soc., 1964.
8. Мазурин О.В., Стрельцина М.В., Швайко-Швайковская Т.П. Свойства стекол и стеклообразующих расплавов. Справочник. Т. 1-6.СПб: Наука, 1973-1999.
9. Mazurin O.V., Streltsina M.V., Shvaiko-Shvaikovskaya T.P. Handbook of glass data. Parts A–E. Amsterdam: Elsevier, , 1983-1994.
10. Bansal N.P., Doremus R.H. Handbook of glass properties. New York; London: Academic Press Inc., 1986.
11. International Glass Data Base INTERGLAD. Version 1. New Glass Forum, Tokio, 1991.

12. SciGlass (Glass property information system). Version 3.5. Lexington: SciVision, 1998.
13. Мазурин О.В. О принципах разработки информационных систем по свойствам стекол и других материалов // Физ. и хим. стекла. 1997. Т. 23. № 3. С. 249-266.
14. Parker J.M. Reviews SciGlass // Glass Technol. 1997. V.38. N2. P.60.
15. Varshneya A.K. Review of "SciGlass" Data Base // Amer.Ceram.Soc.Bul. 1997. V.76. N5 P. 82.
16. Müller-Simon H. Neue Version (3,5 der Glasdatenbank) SciGlass erschienen // Glastechn. Ber.Glass.Sci.Technol. 1999. V.71. N6. P.78.
17. Жмойдин Г.И. От баз данных к базам знаний в металлургии – индустрия информации // Металлы. 1981. №1. С.60-69.
18. Kaufman L., Bernstein H. Computing calculating of phase diagram. N.Y.: Acad. Press, 1970. 420p.
19. Thompson W.T., Pelton A.D., Bale Ch. W. F*A*C*T facility for the analysis of chemical thermodynamics guide to operations. Montreal: McGill Univ. Compt. Centre, 1985. 240 p.
20. Bale Ch.W., Eriksson G. Metallurgical thermochemical database – a review // Canad. Metal. Quart. 1990. V. 29. N2. P.105-132.
21. Гусаров В.В., Собакин С.В., Удалов Ю.П. Информационно-аналитическая система по фазовым диаграммам многокомпонентных систем // Компьютерные методы в управлении электротехнологическими режимами руднотермических печей. СПб.: Изд. ГТИ, 1998. С.10-16.
22. Гусаров В.В. Фазовые диаграммы: Новые аспекты теории и применения // Тез. докл. VII Междунар. конф. «Высокотемпературная химия силикатов и оксидов». СПб. 1998. С.8.