

**ИНФОРМАЦИОННО-АНАЛИТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ПО ФАЗОВЫМ
ДИАГРАММАМ И СВОЙСТВАМ ТУГОПЛАВКИХ ОКСИДОВ КАК ЭЛЕМЕНТ
БУДУЩЕЙ ЕДИНОЙ ИНФОРМАЦИОННОЙ СИСТЕМЫ ДЛЯ МАТЕРИАЛОВЕДОВ**

Альмяшев В.И., Гусаров В.В., Мазурин О.В.

Институт химии силикатов имени И.В.Гребенщикова РАН

Новая научная и техническая информация – один из наиболее ценных возобновляемых ресурсов человечества, потенциально определяющий перспективы его существования и дальнейшего развития. На сегодняшний день скорость роста производства научной и технической информации сильно замедляется, что связано с сокращением объемов финансирования науки при одновременном расширении сферы научных исследований. Данная ситуация делает особенно своевременной заботу о максимально эффективном использовании уже накопленных человечеством научных знаний.

Во второй половине двадцатого века было принято за правило, что разработка нового для компании материала и технологии его получения, в большинстве случаев, обходится дешевле поиска имеющихся в литературе сведений о способах получения данного продукта. Сегодня система поиска информации, имеющейся в научной литературе, несколько улучшилась, но и объем имеющейся информации с тех пор очень сильно возрос. Так что проблема как минимум не стала менее острой. Таким образом, колоссальные объемы знаний, накопленные человечеством и собранные в гигантских библиотеках, используются совершенно недостаточно, и 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 качество новых измерений иной раз может уступать качеству старых, результаты которых оказываются незаслуженно забытыми.

К счастью, человечество сейчас располагает возможностями для коренного изменения ситуации, а именно необходимо перевести всю потенциально полезную информацию с бумажных носителей на электронные, 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 вычислительной 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, скорее 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.

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 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. [1], а (пока что) последний, десятый – в 1997 г. [2]. Следует подчеркнуть очень важную 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 [3], в отношении указанных выше особенностей подачи материала справочник Института химии силикатов остался до сих пор единственным в мире. 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 баз данных.

Само собой разумеется, что в последние десятилетия значительное число специалистов понимало перспективность создания электронных баз данных по свойствам веществ и материалов и предпринимало в этой области конкретные и достаточно успешные действия. Так, одна из первых баз данных по металлургии и термохимии (MTDATA) была создана в Англии при активном участии Национальной физической лаборатории еще в 1971 г. Впоследствии в этой же области появился ряд конкурирующих баз данных, таких как CSIRO (Австралия), THERDAS (ФРГ), THERMOCALC (Швеция), THERMODATA (Франция), MANLABS (США), F*A*C*T* (Канада), HSC (Финляндия), IVTANTHERMO (СССР). Такое разнообразие различных баз данных 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). Безусловно, создание специальных баз данных по определенным группам свойств, в которых охватывались бы сведения об этих свойствах применительно к самым различным классам веществ, имеет очень большое значение, и такие базы данных имеют хорошие перспективы развития. Однако, на наш взгляд, решающую роль в будущем должны будут играть базы данных 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 базы данных по термодинамическим свойствам веществ оказались на достаточно высоком уровне, то базы данных, 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 базе данных THERMOSALT содержатся данные о фазовых диаграммах только некоторых солевых систем, в базе данных CALPHAD включены фазовые диаграммы ограниченного числа оксидов и нитридов, опубликованные в одноименном журнале, база данных SLAG из комплекса THERMOCALC содержит данные о фазовых диаграммах на основе семи оксидов. Для всех перечисленных баз данных 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 базы данных 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 [1, 2], инициировали начало работ в Институте по созданию собственной версии базы данных 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 (см. рис. 1), тройных (см. рис. 2) и многокомпонентных систем (см. рис. 3), 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. (см. рис. 1-3).

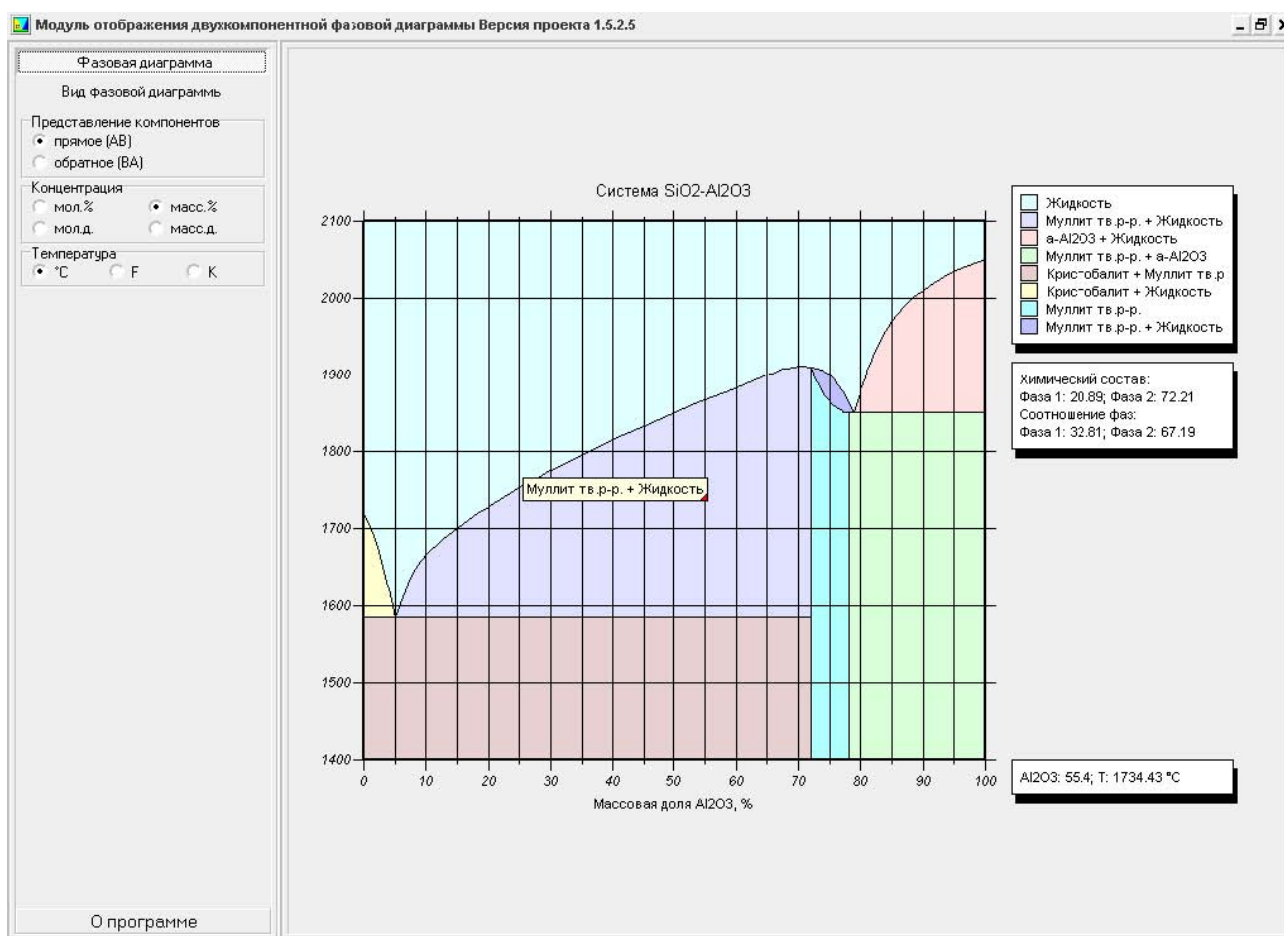


Рис. 1. Интерфейс динамической визуализации оцифрованной двухкомпонентной фазовой диаграммы

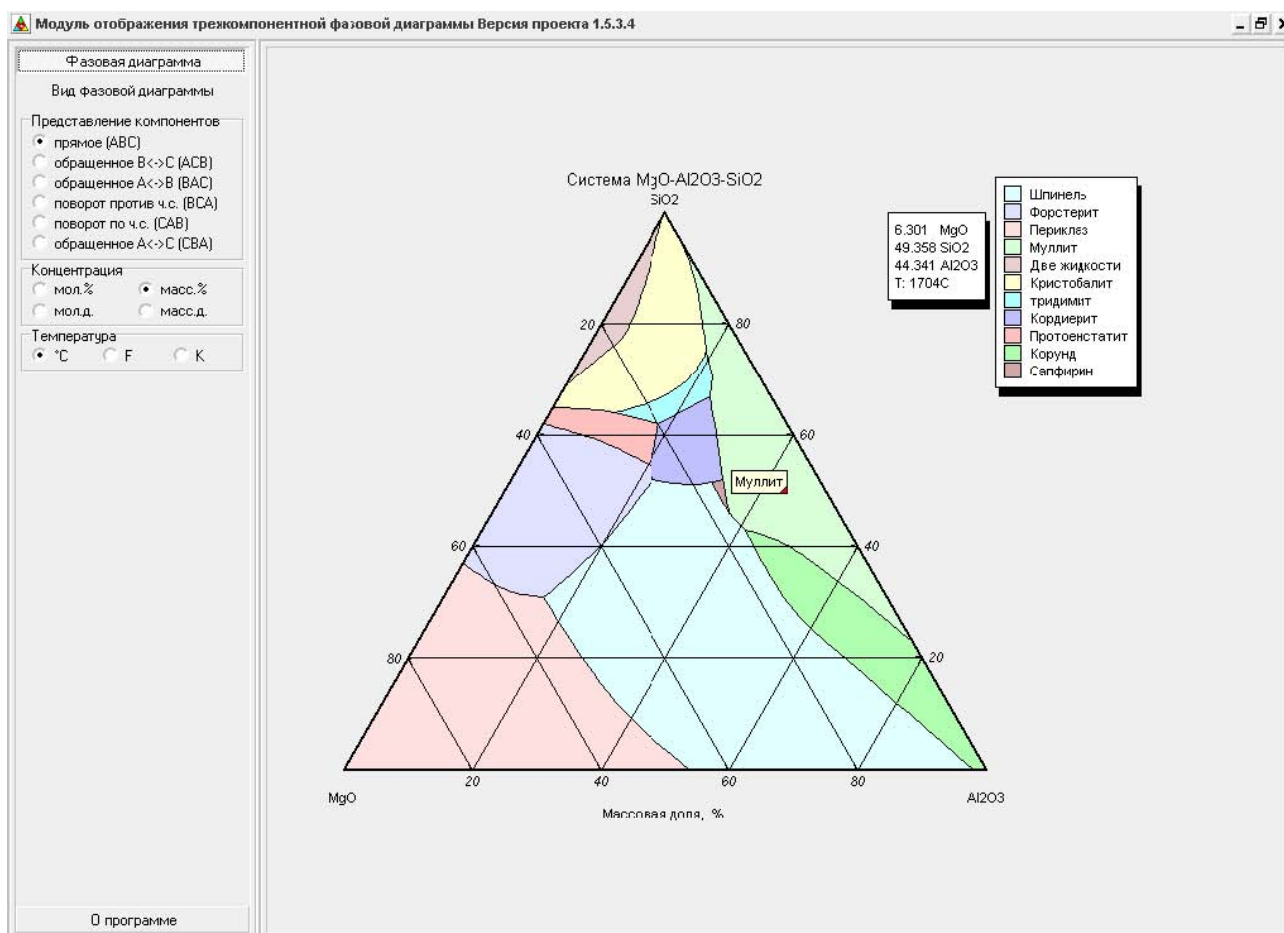


Рис. 2. Компонент динамической визуализации оцифрованной трехкомпонентной фазовой диаграммы

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 (см. рис. 3). К сожалению, авторы не смогли создать такую базу данных, которая смогла бы охватить весь спектр имеющихся сведений о фазовых диаграммах. Создание подобной базы данных возможно только при наличии соответствующего финансового обеспечения, а также заинтересованности мировой научной общественности в таком универсальном инструменте.

Кроме того, база данных по диаграммам состояния будет неполной без базы данных по структуре кристаллов. Эти два источника являются в некотором смысле базовыми при решении проблем, связанных с проектированием новых материалов и технологий их получения. Значение баз данных и интерес к ним многократно возрастут, если наряду с самими базами данных в соответствующие программные продукты будут встроены дополнительные программы, позволяющие пользователям в максимальной степени использовать собранные в базе данных 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.

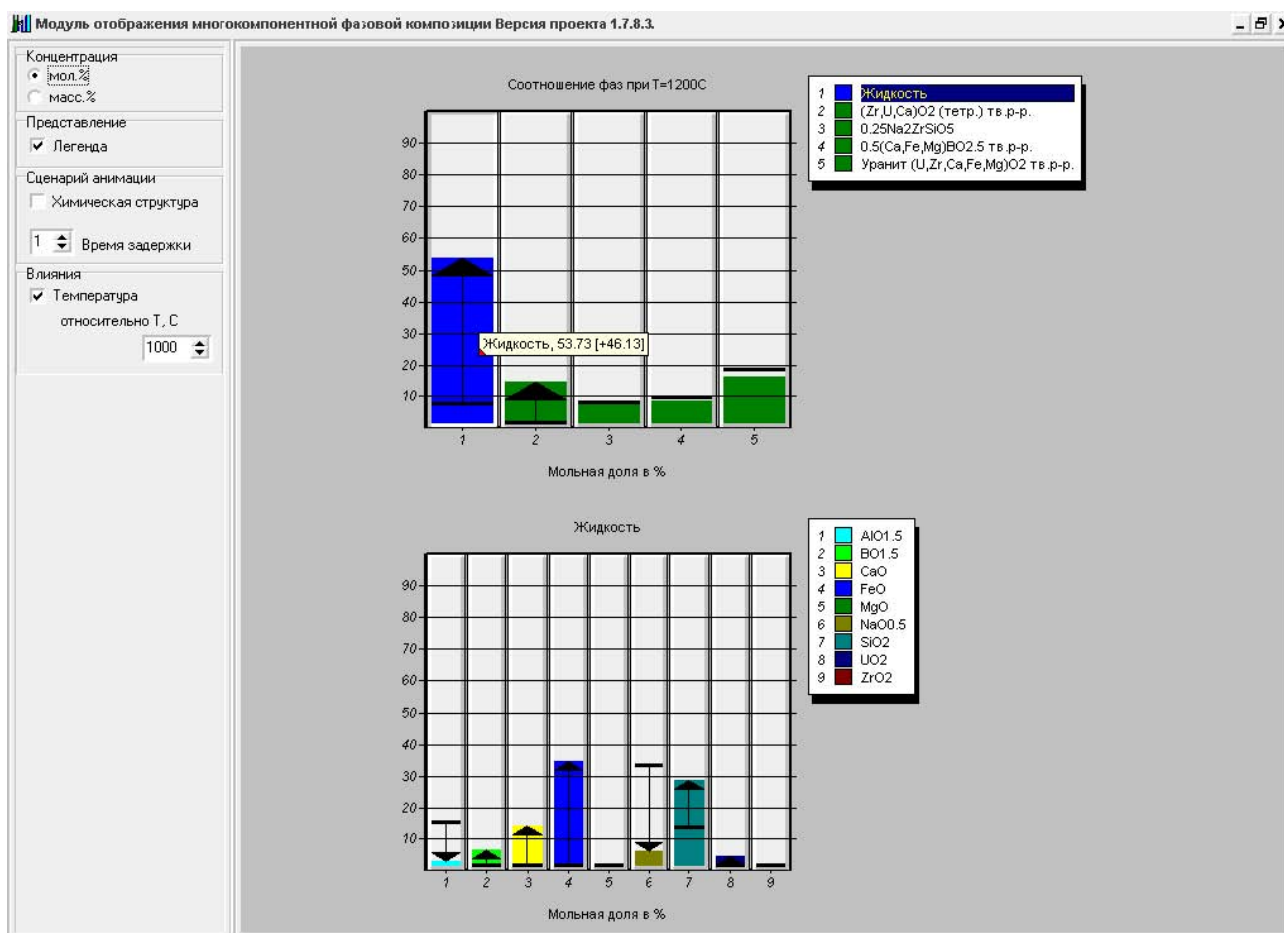


Рис. 3. Экспериментальный интерфейс динамической визуализации данных по многокомпонентной системе

Первыми, помимо самих баз данных, совершенно очевидными элементами информационных систем по свойствам материалов являются различные приемы обработки экспериментальных данных, приводимых в базе данных. 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 информационной системы должен стать калькулятор, включающий в себя программы расчета тех свойств веществ и материалов, экспериментальные данные по которым собраны в базе данных. 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 информационную систему 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 информационных систем должно стать использование сведений о свойствах веществ и материалов, содержащихся в базе данных, для практических расчетов.

Наконец, любая база данных, в частности и информационная система, в целом будет являться превосходным иллюстративным материалом для любых учебников или монографий,

которые полностью или частично будут затрагивать проблемы, относящиеся к сфере знаний, охватываемых этими программными продуктами.

На следующей стадии совершенствования информационных систем 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 единой системы баз данных 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 баз данных 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 прогнозирующую свойства материалов, иметь представление о потребностях практических материаловедов и технологов в определенном виде прогнозов. Подготовка таких специалистов (материаловедов-системщиков) должна стать, по-видимому, в ближайшем будущем одним из важнейших направлений высшего образования в области материаловедения. Создание баз данных 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.

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

Список литературы

1. 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.
2. 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.
3. Levin E.M., Robbins C.R., McMurdie H.F. Phase Diagrams for Ceramists. Columbus: Amer. Ceram. Soc., 1964.