

О ВАЖНОСТИ МНОГОУРОВНЕВОГО ОПИСАНИЯ ХИМИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ В ОНТОЛОГИЯХ ДЛЯ ИНТЕГРАЦИИ ИНФОРМАЦИОННЫХ СИСТЕМ В НЕОРГАНИЧЕСКОМ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ

Дударев В.А., Киселева Н.Н.*

ИМЕТ РАН, Москва, Россия

**vic_dudarev@mail.ru*

В последние годы популярным становится использование онтологий (на OWL) для описания предметных областей и создания фундамента для интеграции тематических информационных систем (ИС). Например, в неорганическом материаловедении известны несколько онтологий, использующихся для консолидации информации [1, 2]. Одним из их существенных недостатков является неоправданное упрощение описания самого рассматриваемого вещества (или материала).

Важность многоуровневого описания химического объекта показывается на примере разработанных в ИМЕТ РАН ИС. ИС «Диаграмма» (<http://diag.imet-db.ru>) описывает фазовые диаграммы двойных и тройных химических систем. В другой ИС «Кристалл» свойства описываются на других уровнях детализации химических объектов: температура плавления описывается на уровне вещества (или соединения), а твердость — на уровне информации о его кристаллической структуре [3].

Таким образом, разрабатывая онтологию предметной области для интеграции ИС по свойствам неорганических веществ, необходимо учесть возможность определения свойств на различных уровнях описания химических объектов и обеспечить автоматическое сопоставление свойств, указанных на верхних уровнях иерархии, с текущим химическим объектом.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ, проекты 17-07-01362, 18-07-00080. Работа выполнялась по государственному заданию № 007-00129-18-00.

1. Ashino T. Materials ontology: an infrastructure for exchange materials information and knowledge // Data Science Journal. Volume 9. 8 July 2010. P. 54-61.
2. Еркимбаев А.О., Зицерман В.Ю., Кобзев Г.А., Серебряков В.А., Шиолашвили Л.Н. Интеграция данных по свойствам веществ и материалов на основе онтологического моделирования предметной области // Труды XV Всероссийской объединенной конференции «Интернет и современное общество» (IMS-2012). Санкт-Петербург, 2012. С. 38-47.
3. Дударев В.А. Интеграция информационных систем в области неорганической химии и материаловедения. М.: URSS, 2016. 314 с.