

ИНФОРМАЦИОННЫЕ СИСТЕМЫ ДЛЯ НЕОРГАНИЧЕСКОГО МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ

Киселева Н.Н., Дударев В.А., Столяренко А.В.*

ИМЕТ РАН, Москва, Россия

**kis-japan@mail.ru*

В последние годы в развитых странах были выдвинуты и поддержаны правительствами инициативы, направленные на организацию инфраструктуры доступа к данным о материалах. В 2011 г. в США была начата разработка проекта, названного Materials Genome Initiative [1]. В 2014 г. National Data Service объявил о проекте разработки репозитория для хранения экспериментальных и расчетных данных [2]. В 2015 г. ЕС начал работы по программе Novel Materials Discovery Laboratory [3]. В Японии [4], Китае [5] и Индии [6] были разработаны аналогичные программы. На выполнение вышеуказанных проектов выделены сотни миллионов долларов. Однако ожидается, что экономический эффект от использования разрабатываемых информационных систем намного превысит вложенные средства.

Предпосылкой для создания собственной информационной инфраструктуры для материаловедения в России является опыт ИМЕТ РАН в разработке и интеграции БД по свойствам неорганических веществ и материалов, доступных из сети Интернет [7], также методов и программ для компьютерного конструирования новых веществ и материалов, основанных на использовании технологий data mining [8].

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

-
1. Materials Genome Initiative. <https://www.mgi.gov> — (visited on 23.03.2018).
 2. The Materials Data Facility. <https://materialsdatafacility.org> — (visited on 23.03.2018).
 3. The Novel Materials Discovery Laboratory. <http://nomad-lab.eu> — (visited on 23.03.2018).
 4. Center for Materials Research by Information Integration. <http://www.nims.go.jp/eng/research/MII-I/index.html> - (visited on 23.03.2018).
 5. Lu X.-G. // Sci. Bull. 2015. V. 60. N. 22. P.1966.
 6. First National Conference on Mapping the Materials Genome. Ed. V. Kumar, G. Roy, V.K. Jayaraman, S. Sukumar and N. Sukumar. New Delhi: Group Excel India, 2013.
 7. Киселева Н.Н., Дударев В.А., Столяренко А.В. // Теплофизика высоких температур. 2016. Т.54. N.2. С. 228.
 8. Базы данных ИМЕТ РАН. <http://www.imet-db.ru> - (дата обращения: 23.03.2018).