

Онтология предметной области «Наноматериалы и их применение»

А.О. Еркимбаев¹, В.Ю. Зицерман¹, Г.А. Кобзев¹,
В.А. Серебряков², К.Б. Теймуразов²,

¹Объединенный институт высоких температур РАН
adilbek@ihed.ras.ru, vz1941@mail.ru, gkbz@mail.ru

²Вычислительный Центр им. Дородницына РАН
serebr@ccas.ru, kbt@intrin.ru

Аннотация

Для создания новой онтологии по наноматериалам предложено использовать информационную модель “Uniform Description System for nanomaterials”, недавно разработанную международной группой экспертов. Ее главные достоинства – универсальность и возможность расширения при появлении новых объектов и свойств. В статье намечен путь построения онтологии, базирующейся на этой модели, с формированием иерархии классов и свойств. Предложены возможные расширения модели применительно к объемным наноматериалам путем ее интеграции с ранее разработанными онтологиями в области материаловедения, в том числе с российской онтологией по нанокompозитам.

Ключевые слова: онтология; наноматериалы; нано-объекты; иерархия классов; информационная модель.

1. Введение и постановка задачи

В последние годы разработка и использование онтологий заняли заметное место в инфраструктуре научных данных. Онтологии обеспечивают базис для формальной спецификации понятий и отношений, которые характеризуют определенную область знаний, а их формальная структура обеспечивает представление знаний для машинной обработки. По известному определению Грубера [1], «онтология это спецификация концептуализации», то есть формализованная и написанная на специальном языке OWL терминологическая структура, используя которую можно проектировать различные информационные ресурсы. Среди возможных применений онтологии можно указать: стандартизацию терминов, исключаящую их неоднозначность и ошибочную интерпретацию; связывание документов родственной тематики методами Semantic Web; проектирование и интеграция баз данных (БД).

Осознание огромного потенциала, заложенного в онтологиях для

систематизации и распространения научного знания стимулировало активную деятельность по разработке предметно-ориентированных онтологий для различных естественных наук: биологии, химии, наук о Земле и др.

Естественно, что эта тенденция не обошла стороной относительно молодую междисциплинарную область нанотехнологий с характерным для нее беспрецедентным ростом числа публикаций, патентов, устройств, наряду с непрерывным появлением новых журналов, БД, Web-сайтов и т. д. Ориентируясь на опыт других дисциплин, можно предположить, что именно онтологии могли бы стать идеальным средством для концептуализации предметной области. И действительно, уже разработано несколько онтологий и классификаторов по наноматериалам и нанотехнологиям. Среди них “Nanoparticle ontology for cancer nanotechnology research” [2], онтология, включенная в состав химической БД ChEBI [3], междисциплинарный классификатор, разработанный Танака [4] и названный им онтологией метауровня, и ряд других.

Детальный обзор проблем систематизации данных для сферы нанотехнологий представлен в работах авторов [5, 6]. Сложность их решения связана с целой совокупностью факторов, специфичных для этой области, включая: ее междисциплинарный характер; отсутствие сложившегося понятийного аппарата и терминологических стандартов; неустойчивый характер номенклатуры свойств и характеристик – их привязка к виду материала или устройства; перманентное рождение качественно новых материалов, технологий и устройств. Суть проблемы была отражена в ходе дискуссии по проблеме систематизации [7]: “...чтобы рубрикатор служил общепризнанным средством интеграции знаний в области нанотехнологий, он должен точно отражать представления ученых об этой области знаний. А такого общего представления до сих пор нет...ни в нашей стране, ни за границей”.

Тем не менее, решение проблемы не выглядит невозможным, тем более, что она возникала и при систематизации традиционных материалов (металлов, керамики, полимеров и т. п.), что не помешало созданию онтологий с широким охватом понятий и свойств [8, 9]. В данной работе предложен общий подход к построению онтологии по наноматериалам, базирующийся на недавней разработке международной комиссии по численным данным (CODATA), в которой предложена уникальная по широте охвата система описания под названием Uniform Description System (UDS) [10]. Созданная система представляет собой стандартизованное описание произвольного нанообъекта и всей связанной с ним информации, как то: состав, физические свойства, технологии производства, методы характеристики и сертификации, производственная документация и др. Ее главное достоинство – сочетание универсальности описания с возможностью его подстройки к появлению новых материалов и/или возникновению новых концепций. В то же время, если следовать определению [10], UDS обеспечивает лишь концептуализацию области, то есть запись понятий и связей на естественном языке, но без того уровня формализации, который требуется в онтологиях с выделением классов, их свойств, связей между понятиями и кодированием структуры на языке OWL. Это и определяет цель данной работы – обеспечить «спецификацию концептуализации», то есть формализовать структуру UDS в соответствии с

требованиями проектирования онтологий. При этом, помимо должной формализации, предложены некоторые расширения UDS, в частности для представления данных по объемным (макроскопическим) наноструктурированным материалам.

2. Построение онтологии наноматериалов

2.1. Концептуализация предметной области в описании UDS

Отмеченные выше проблемы систематизации данных по наноразмерным объектам инициировали международную активность в этом направлении как по линии ISO [11], так и в рамках специальной рабочей группы, функционирующей под эгидой Международного научного союза (ICSU) и его Комитета по данным для науки и технологии (CODATA) [10]. Объединяющим моментом было осознание того, что, нано-объект, в отличие от индивидуальных молекул или веществ, нельзя идентифицировать одним признаком, например, брутто или структурной формулой; любая классификационная схема в этом случае является недостаточной, требуя детализации, учитывающей многообразие названий, свойств, путей создания или практического использования.

Авторы документа [10], предложив некоторую универсальную систему описания, в качестве ее основных принципов объявили: однозначность описания (надежное выделение определенного наноматериала из всего многообразия); эквивалентность двух материалов, подтверждение которой обеспечивается совокупностью признаков, предусмотренных UDS. При этом особенностью информационной модели UDS в том, что она вместо многоуровневой иерархии (как, например, в указанных выше онтологиях [2-4]), предлагает для идентификации множество дескрипторов, уточняющих размер, форму, химический состав и т.п.

В целом UDS состоит из четырех базовых блоков, каждый из которых содержит определенное число информационных категорий, рис. 1. В качестве базовых приняты блоки: (1) общих определений; (2) характеристики наноматериала; (3) описания его жизненного цикла, включая стадию производства; (4) спецификации, включающий сведения о производственной документации при поставке на рынок. Как видно из рис. 1, наибольший объем информации приходится на блок характеристики наноматериала, охватывающий три потенциально возможных типа. Заметим, что стандарт ISO [11] весь мир наноматериалов разбивает на два гиперкласса: нано-объекты и наноструктурированные материалы, относя к первому те, которые имеют хотя бы одно измерение в наномасштабе (кластеры, фуллерены, нанотрубки и т.п.), а ко второму объемные материалы, обладающие внутренней или поверхностной наноструктурой. В системе UDS добавлен третий гиперкласс, включающий ансамбли индивидуальных нано-объектов, называемых также нано-продуктами, учитывая их синтез для определенных целей. В качестве примера можно назвать «стручки» (reapods) [12], получаемые внедрением молекул фуллерена в углеродную нанотрубку (УНТ), или гибридные наноструктуры, образованные за счет ковалентного связывания УНТ с лентой графена [13], см. раздел 2.3.

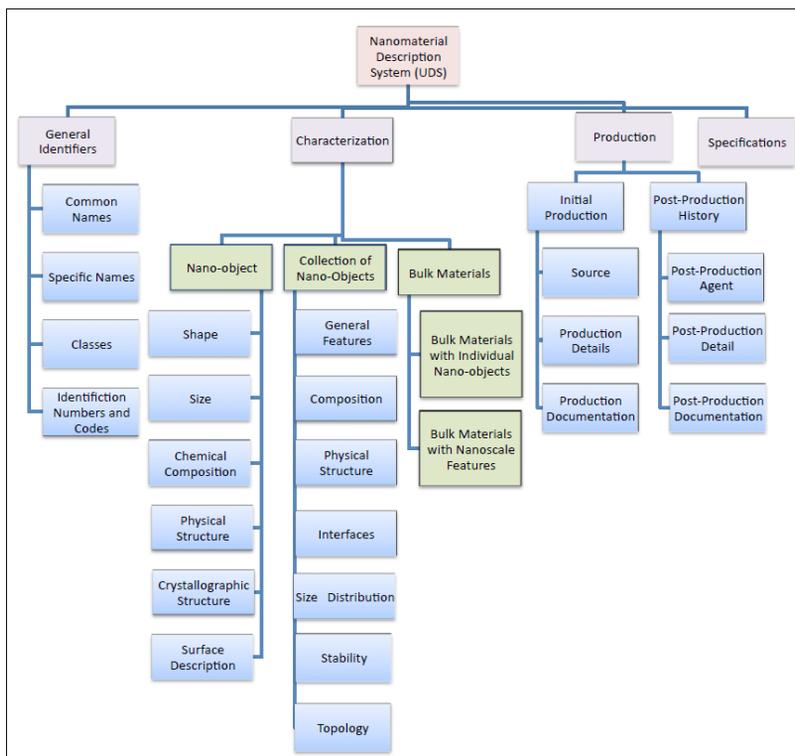


Рис. 1. Общая схема информационной модели UDS

Соответственно в блоке характеристики наноматериала выделяются три линии, причем для первых двух (нано-объекты и их ансамбли) предусмотрена детализация по множеству физических факторов (размер, форма, физическая структура, поверхность и проч.). Что касается объемных (макроскопических) материалов, предусмотрено лишь их разделение на два подмножества, но столь же детального описания не предусмотрено. Способы детализации для таких материалов рассмотрены в разделе 3

Каждый из блоков нижнего уровня (субкатегорий по терминологии [10]) предусматривает ответы на четко поставленные вопросы, включенные в дескрипторы. При этом сами ответы могут быть в достаточно свободной форме, что конечно далеко от стандартов построения онтологии. По замыслу авторов [10], совокупность таких ответов (раскрытие всех субкатегорий) обеспечивает исчерпывающее и однозначное определение любого наноматериала. Первый шаг к такому определению дает заполнение блока General Identifiers (рис. 1), что предусматривает присвоение наноматериалу определенного названия, и «встраивание» в некоторую классификационную схему. Предусмотрено два типа названий: типовое, то есть, заимствованное из литературы (common name), и формальное (specific name), принятое в одной из авторитетных классификационных систем. Подобное разделение принято в химии, где почти

для всех соединений можно, наряду с несколькими типовыми названиями, предложены идентификаторы, например Chemical Abstract Service (CAS) register number или химические нотации типа SMILES или InChI для однозначного определения состава и структуры молекулы. Подобные идентификаторы для нано-объектов применимы лишь тогда, когда их можно отождествить с молекулами, например, с молекулами фуллерена C₆₀ и C₇₀, которые включены в химические классификаторы. В качестве альтернативы для нано-объектов можно использовать упомянутую в разделе 1 онтологию ChEBI, которая каждый из объектов (как молекулы, так и наноструктуры) определяет 5-значным индексом. Так, все экземпляры класса нанотрубок определены индексом CHEBI:50796. Индекс CHEBI:50594 сужает это множество, выделяя УНТ, а индексы CHEBI:50595 и CHEBI:50596 разделяют УНТ на одностенные или многостенные. Наличие формального имени резко упрощает компьютерную обработку документа, позволяя исключить произвол в записи обычных названий. При переходе к онтологии формальное имя в сочетании с множеством других формализованных признаков позволит реализовать основную цель – однозначный выбор наноматериала.

Аналогичное разделение на формальные и неформальные предусмотрено и для классификационных схем, к одной из которых предполагается отнесение данного наноматериала. При неформальной классификации, по умолчанию принятой в литературе, выделение определенных групп производится по одному из определяющих признаков: размер, форма, состав, применение и т.п. Так, при отнесении объекта можно использовать такие группы как нанотрубки (разделяя их далее по элементному составу – углеродные, кремниевые и т.п.), химической природе (металлические, оксидные и т.п.), квантовые точки и проч. Очевидно, однако, что подобная классификация будет крайне неустойчивой, подверженной изменениям при появлении новых объектов, и допускать неоднозначную трактовку. Относительно устойчивую таксономию наноматериалов, получившую название NanoTree, удалось разработать в проекте ISO [11], которая основана, прежде всего, на топологическом признаке. Именно она принята в разделе 2.3 за основу при переходе от свободно сформулированной системы описания к формализованной онтологии.

2.2. Принципы перехода от UDS к онтологии

Один из основных принципов построения онтологии – максимальная формализация описания путем использования в качестве данных классификаторов и численных идентификаторов при сокращении сферы использования текстового формата, используемого только при обработке экспертом, но не при машинной обработке. Для более полной идентификации массивных наноструктур предполагается также возможность использования, так называемого, MolFile, который включает информацию о типе каждого атома, его координатах, и характере химических связей. Другой важный принцип – использование многофакторного описания, учитывающего наряду с геометрией, множество физико-химических характеристик, номенклатура которых напрямую связана с типом наноматериала. При этом онтология должна отражать взаимосвязь каждой из характеристик с тем или иным видом нано-объекта, с возможностью охвата вновь созданных типов.

Построение онтологии, формализующей UDS, облегчается тем, что базовые категории этой системы (категории и дескрипторы) по своим функциям напоминают классы и их атрибуты/свойства. Три главных класса в проектируемой онтологии – «nanomaterials», «characterization_of_nano-objects», «characterization_of_nano-products» покрывают, по сути, основную часть предметной области. На данном этапе целесообразно не включать в онтологию два других сегмента, отраженных в UDS: производство и спецификация. Они охватывают очень широкий круг понятий и связей, как правило, адекватно представленных в рамках инженерных онтологий, например стандарте ISO 10303-235: “Engineering properties for product design and verification” [14]. С другой стороны, онтология, принятая в ChEBI, подсказывает простой способ отразить вопросы производства и применения. Так же, как и в ChEBI, можно ввести такие классы, как “Application”, “CharacterizationTechniques”, “ManufacturingProcesses”, etc., приняв в качестве экземпляров понятия из соответствующих разделов одной из таксономий, например, InterNano. По аналогии с химией, где объектное свойство “has_role” позволяет выбрать для вещества его возможное применение (окислитель, топливо, хладагент и т.п.), таким же образом и для нано-объектов можно отразить способ производства, метод измерения характеристик, возможные применения. Подобная стратегия позволит упростить проектирование онтологии, сосредоточив все внимание на адекватном отражении физических характеристик, что и составляет главную проблему в задаче систематизации наноматериалов и их свойств.

2.3. Иерархия классов и свойств

Основу онтологии образует иерархия классов и свойств, формализующая принятые в UDS концепции. За основу приняты первые два блока на рис. 1 (**General Identifiers** и **Characterization**), на основе чего предложены классификации наноматериалов и их характеристик, рис. 2 и 3.

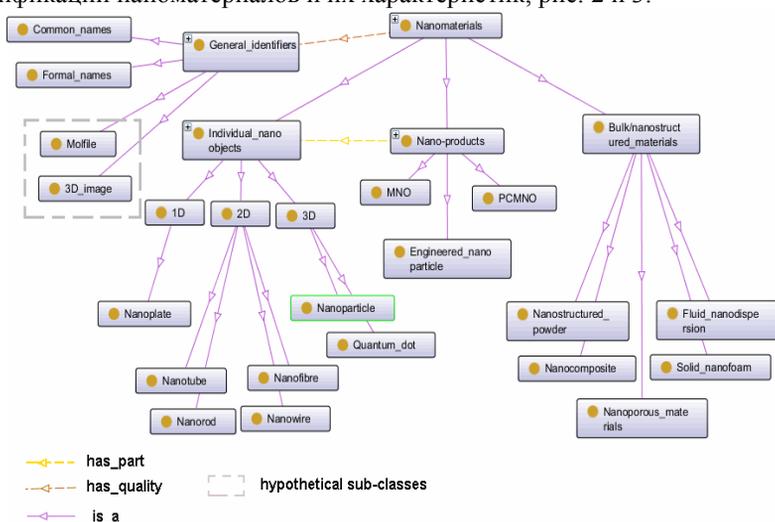


Рис. 2. Систематика объектов в соответствии с UDS [10].

Таксономия наноматериалов (рис. 2) следует стандарту ISO и принципам, заложенным в UDS. Класс верхнего уровня “Nanomaterials” имеет три суб-класса “Individual_nanoobjects”, “Nano-products”, “Bulk/nanostructured_materials”. Первый из них на следующем уровне иерархии имеет три суб-класса (1D, 2D, 3D), определяемых по числу измерений в нанoshкале, где характерный размер менее 100 нм. При таком определении класс 3D включает все виды наночастиц (кластеры, фуллерены, квантовые точки и проч.), класс 2D объекты цилиндрической или конической формы, сечение которых относится к нанoshкале (нанотрубки, нановолокна и т.п.) и наконец, нанопленки или графен относятся к классу 1D, поскольку у них лишь одно измерение (толщина) попадает в нанoshкалу¹. Далее в качестве суб-классов представлено 7 разновидностей нано-объектов, отмеченных в UDS: Nanoplate как суб-класс класса 1D, “Nanotube”, “Nanofibre”, “Nanorod”, “Nanowire” как суб-классы класса 2D, “Nanoparticle”, “Quantum_dot” как экземпляры класса 3D. Достаточно ограниченный перечень суб-классов может быть всегда расширен, а кроме того, детализирован указанием на размеры, форму химическую природу и проч. посредством классов, объединяющих соответствующие понятия, рис. 3.

Второй из классов верхнего уровня “Nano-products”, согласно UDS, имеет три суб-класса, определения которых в исходной редакции приведены в подписи к рис. 2. Различия между ними носят достаточно зыбкий характер и связаны не столько с физической природой объекта, сколько с производственной целью. Например, MNO это произведенный для коммерческих целей объект со специальными свойствами, а PCMNO определяется намеренными добавками нано-объектов. Наконец, третий из классов “Bulk/nanostructured_materials” содержит в качестве суб-классов всего 5 типичных объектов – “nanostructured_powder”, “nanocomposite” и др – см. рис. 2. Хотя принятый здесь список наноматериалов макроскопического масштаба весьма ограничен, главная проблема состоит в том, что в UDS не прописаны правила их детальной характеристики (подробнее см. раздел 3).

На верхнем уровне иерархии введен также класс “Gen_Identifiers”, включающий дочерние классы “Common_names” и “FormalNames” для выделения нано-объекта конкретного вида. Для более надежной идентификации резервируются два гипотетических класса, назначение которых обсуждается в конце раздела.

Второй аспект, характерные свойства наноматериала, отражаемые в UDS категорией “characterization”, потребовал в онтологии ввести два класса “characterization_of_nanoobject” и “characterization_of_nano-product” (рис. 3), для многофакторного описания, учитывающего максимальное число признаков,

¹ Заметим, что подобная классификация не является общепринятой. Напротив, в большинстве источников за основу принимается другой топологический признак – число измерений в макроскопическом масштабе. Тогда, наночастицы будут относиться к классу 0D, нанотрубки – 1D, пленки и графен - 2D, и, наконец, объемные (наноструктурированные) материалы к классу 3D. В работах авторов [] подобная систематика использована при построении топологической формулы, определяющей число макроскопических измерений как для самого нано-объекта, так и для составляющих его элементов, что особенно уместно при идентификации композитных структур типа графен-нанотрубки.

определяющих геометрию, состав, физические свойства и т.п. Их имена повторяют названия соответствующих категорий из UDS, однако система атрибутов/свойств существенно отличается от принятых в UDS дескрипторов. Если те играли роль рубрик, заполняемых текстовым комментарием, то в онтологии набор свойств атрибутов предельно формализован так, чтобы обеспечить возможность машинной обработки при поиске или логических построениях. Для этой цели используются два вида свойств, ObjectProperties (которые связывают экземпляры классов) и DataProperties (которые связывают экземпляры классов с данными, которые вводит пользователь).

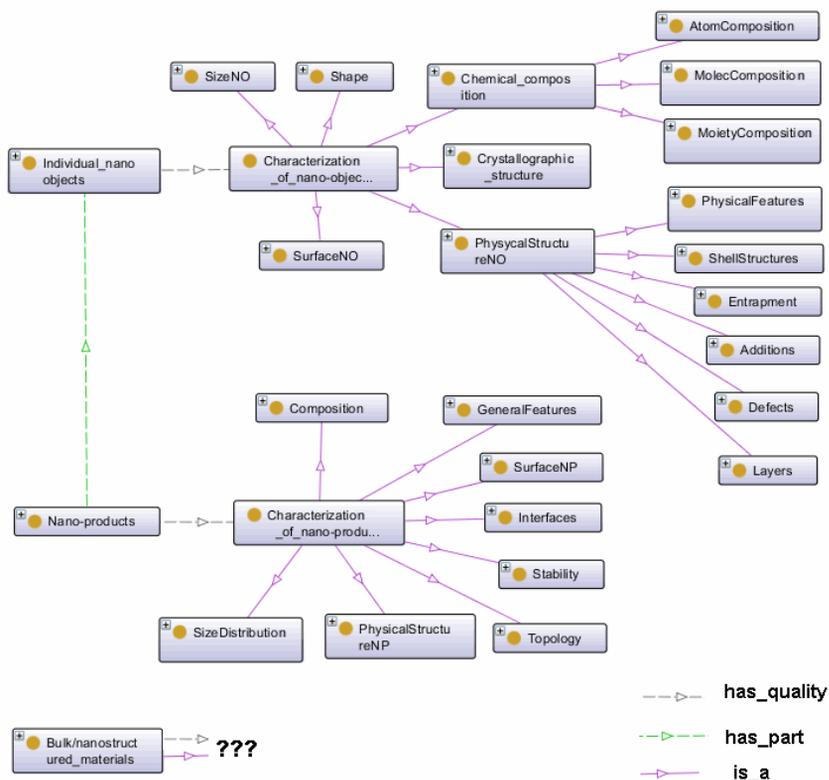


Рис. 3. Иерархия классов для характеристики нано-объектов. Для простоты схемы дочерние классы показаны только для классов “Chemical_composition” и “PhysicalStructureNO”

Их возможности при раскрытии физических особенностей нано-объекта, дает таблица 1 на примере класса, определяющего его форму. Так первые три свойства в классе “shape” позволяют конкретизировать форму выбором понятия из априори заготовленных классификаторов. Остальные свойства определяет пользователь вводом целочисленных параметров (числа измерений в

наношкале, слоев, особенностей). Только одно из свойств, кающееся деталей, не формализуемо и вводится в текстовом формате.

Этот же принцип мы старались выдержать при проектировании других классов, например, “Chemical_Composition” и “PhysicalStructureNO”, таблица 2. В первом случае дочерние классы определяют те субъединицы, которые входят в состав нано-объекта (атом, молекула, функциональная группа), а свойства конкретизируют их химическую природу, концентрацию (атомную или весовую), метод измерения. Сложнее дело обстоит с детализацией физических свойств, учитывая многообразие нано-объектов. В предварительной версии [15] авторы вообще не детализировали эту категорию, сославшись на то, что “at present no system exists for describing the physical structure of nano-objects...” Однако, в итоговой версии 2015 [10] они предложили достаточно детализированное описание, которое в нашей работе сведено в иерархию классов. Многообразие объектов и нечеткость трактовки многих понятий потребовали неоднократного обращения к текстовому формату. Согласно [10], выделено 5 возможных особенностей (peculiarities): layer, shell, defect etc., см. рис. 3 и таблицу 2. Отдельная группа структурных аномалий (holes, protuberance, appendage, end cap) выделена в класс “PhysicalFeatures”. В то же время их детализация (Location, Geometry etc.) едва ли формализуема, и может быть представлена лишь текстовым форматом. Это же справедливо для детализации других классов: дефектов, ловушек, примесей. Подобная же процедура неполной формализации может быть реализована и в отношении других категорий, характеризующих нано-объект, рис. 3.

Таблица 1. Свойства и типы данных для класса “Shape”, используемого при характеристике нано-объектов

Class	Properties	Types
Shape	GenShape	ObjectType
	ISOshapeName	ObjectType
	TypeFeatures	ObjectType
	NumberNanoDimensions	Integer
	NumberLayers	Integer
	NumberFeatures	Integer
	ShapeDetails	String
	ValueDimensions	Float
	DimensionsType	ObjectType
	MeasurementMethod	ObjectType
	FeatureName	ObjectType
	FeatureValue	Float
	MeasurementTypeFeature	ObjectType
	MeasurementMethodFuture	ObjectType
	AspectRatioValue	Float

Таблица 2. Свойства и типы данных классов, характеризующих нано-объекты.
Классы Chemical_Composition и PhysicalStructureNO

Classes	Sub-classes	Properties	Types
Chemical_Composition	AtomComposition	Formula	String
		CAS number	Integer
		PercentType	ObjectType
		PercentValue	Float
		MeasurementMethod	ObjectType
	MolecComposition	Formula	String
		CAS number	Integer
		PercentageType	ObjectType
		PercentageValue	Float
		MeasurementMethod	ObjectType
	MoietyComposition	Formula	String
		CAS number	Integer
		PercentType	ObjectType
		PercentValue	Float
		MeasurementMethod	ObjectType
PhysicalStructureNO	Layers	LayersNumber	Integer
		LayersOrder	Integer
		LayersExtent	Float
		LayersThickness	Float
	ShellStructures	ShellsNumber	Integer
		ShellsOrder	Integer
		ShellsThickness	Float
		ShellsUniformity	String
	PhysicalFeatures	FeatureType	ObjectType
		FeatureLocation	String
		FeatureGeometry	String
		FeatureRegularity	String
	Defects	DefectType	ObjectType
		DefectGeometry	String
		DefectRegularity	String
	Entrapment	EntrappedSpecies	String
		EntrapmentType	String
	Additions	AdditionType	String
AdditionGeometry		String	

Особые проблемы возникают при характеристике нано-продуктов, то есть ансамблей нано-объектов. В качестве названия может быть использовано лишь одно из неформальных имен (common name). Например, для эндодральной структуры, полученной внедрением молекул фуллерена в УНТ приходится использовать неформальное название «стручок» или англоязычный термин “pearod” [12]. Предложенная в UDS классификация также весьма ограничена, включая всего три вида объектов, различающихся не столько физическими особенностями, сколько производственной задачей. Главную роль здесь играет класс “Characterization_of nano-products”, включающий 8 дочерних классов (рис. 3), причем основным при идентификации является класс “composition”.

Если для нанообъекта состав определяют химические коды (формула и CAS number), то для ансамбля нано-объектов должны быть указаны типы элементарных блоков, как для упомянутых выше «стручков» (фуллерен и УНТ). Для этих целей можно использовать ранее предложенную нами [5] топологическую формулу, которая определяет как сам ансамбль, так и его компоненты указанием на один признак - размерность (1D, 2D...).

Дескрипторы, предложенные UDS для определения состава, предполагают полную идентификацию каждого члена ансамбля при ограниченной характеристике его самого; в основном, это список типов элементарных блоков с указанием на их число в ансамбле – полная аналогия с химической формулой, определяющей символ и число каждого из атомов.

Идентификацию ансамбля хорошо иллюстрирует пример с нанокompозитной структурой типа графен-нанотрубки (GNP/CNT), рис. 4 [13]. Индексы хиральности позволяют идентифицировать тип и размеры нанотрубки (кресло, зигзаг, хиральная), причем тип можно выделить формальным индентификатором ChEBI ID [3]. Такие же индексы есть и для графеновых пластин, определяющие структуру и ширину ее края. В итоге для идентификации графеновой наноленты типа зигзаг можно использовать формальное имя в виде формулы 8ZGNR/2SWCNT(12, 0) [13], из которой следует, что ансамбль включает 2 типа объектов (нанолента и две одностенные УНТ) при их общем числе равном 3. Как видно из рис. 4, подобные формулы оставляют большую свободу в выборе топологии, то есть идентифицируют наноструктуру весьма ограничено.

В химии для точной идентификации состава и структуры разработаны специальные форматы файлов, содержащие информацию об атомах, их координатах, и связях, в частности формат MDL (Molecular Design Limited) MolFile [16]. Существенно, что в популярных БД, например упомянутой выше ChEBI или БД NIST для большинства молекул предусмотрена возможность выдачи MolFile, наряду со списком параметров. Очевидно, что виртуальный наноматериал всегда может быть охарактеризован MolFile как наиболее полным идентификатором. Например, можно надежно различать структуры типа GR/CNT (рис. 4), поскольку их существование предсказано при совместном использовании квантово-химического расчета и молекулярной динамики.

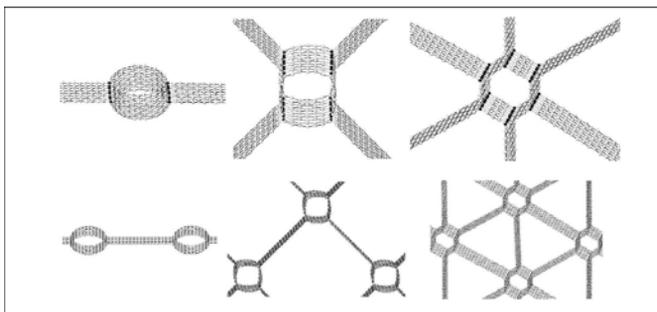


Рис. 4. Композитная структура «графен-нанотрубки» [13]

Для физических наноматериалов возможен альтернативный путь детальной характеристики – 2D или 3D imaging of surface, в результате использования различных методов микроскопии: сканирующей электронной микроскопии, просвечивающей электронной микроскопии и т.п.. Имеется опыт создания онтологий на базе графических документов (image data), например металлографических снимков [17]. Для встраивания снимков в онтологию наноструктур можно использовать коммерческий soft, например, предлагаемый отечественной компанией SIAMS, которая предлагает комплекс решений для многомасштабного анализа изображений [www.siams.com/].

3. Интеграция с онтологиями в области материаловедения

В отношении объемных наноматериалов в UDS лишь обсуждается возможность их адекватной характеристики. В частности, предложено различать материалы, включающие идентифицируемые нано-объекты (наночастицы, нанотрубки и т.п.), и обычные конструкционные материалы, проявляющие наноразмерные особенности. Пример материала первого типа дает нанокompозит в виде полимера с наноразмерными включениями, пример второго – наноструктурированные стали или керамики. Возможный путь их включения в онтологию, наравне с нано-объектами и нано-продуктами – интеграция с уже существующими онтологиями в области наук о материалах. В качестве таких можно предложить три онтологии, каждая из которых ориентирована на определенные типы наноматериалов. Первая из них разработана в Химико-технологическом ун-те им. Д.И. Менделеева и посвящена нанокompозитным материалам [18]. Ее основу составляет таксономия классов и экземпляров, включающая такие классы как “MaterialType”, “NanoObject”, “Nanocomposite”, а также классы, включающие химические характеристики: “ChemicalIdentity”, “ChainComposition”, “Structure” и т.п. Класс “MaterialType” включает 5 дочерних классов, соответствующих выбору матрицы (углерод, металл, керамика, полимер, кремний), что в сочетании с довольно простой таксономией нанообъектов (“NanoFiber”, “NanoFilm”, “NanoLayer”, “NanoPowder”, “NanoSurface”) позволяет отразить формирование разных типов нанокompозита, определяемого выбором матрицы и наполнителя.

Кроме нанокompозитов, есть другая обширная категория материалов, содержащих идентифицируемые нано-объекты, но без выделения матрицы и наполнителя. Примером могут служить фуллериты, полученные за счет Ван-дер ваальсовой связи молекул C_{60} или C_{70} , причем они могут существовать в виде полимеров различной размерности [19]. Другой пример - многообразные пленки, волокна, нано-пряжа или нано-бумага, синтезированные из ковалентно связанных УНТ [20].

По сути, все такие материалы могут быть отнесены к классу “Nano_products” (рис. 2 и 3) при условии, что он будет расширен включением макроскопических объектов. Для этого перечни классов и свойств, используемых при характеристике, должны быть расширены так, чтобы можно было представить типичные макроскопические свойства, как например плотность, модуль Юнга, теплоемкость и т.п.

Наконец, те объемные наноматериалы, которые согласно UDS, не имеют индивидуально идентифицируемых нано-объектов, относятся к традиционным конструкционным материалам. Эти материалы могут проявлять наномасштабные особенности, то есть заметное проявление зависимости макроскопических свойств от размера структурной единицы. Таким образом, возникает новый параметр наряду с обычными параметрами состояния (температурой, давлением и др.). Во многих случаях тонкие детали, например распределение по размерами кристаллита, объемная доля, занимаемая пространством между гранями и др. могут также заметно влиять на физические свойства. Для характеристики подобных материалов, включая их механические, тепловые и эксплуатационные свойства, может быть привлечена одна из онтологий, развитых в рамках науки о материалах, например [8, 9]. Однако, привлекая онтологию по конструкционным материалам, необходимо предусмотреть необходимость расширения набора параметров состояния.

Таким образом, интеграция онтологии, развитой для двух классов “Individual_nanoobjects” and “Nano_products” с ранее разработанными онтологиями для нанокompозитов [18] и конструкционных материалов [8, 9] принципиально решает задачу адекватной характеристики почти всех видов объемных наноматериалов. Однако, как отмечено авторами UDS ([10], section IV “Background”), “...in the future a numbering system will evolve that traces back to specific values of the descriptors included in the information categories of the UDS.” Поэтому, следуя ранее предложенным принципам систематизации данных для наноматериалов [5, 6], следует предусмотреть возможность расширения перечней классов и свойств.

4. Заключение

В работе показано, как впервые созданную универсальную систему описания наноматериалов [10] можно трансформировать в онтологию, обеспечивающую единую структуру для распространения данных и знаний, а также возможность интеграции документов в пространстве связанных данных. В сравнении с распространенными онтологиями для давно сложившихся дисциплин, таких как химия или материаловедение, предполагается, что онтология для наноматериалов должна быть наделена рядом новых признаков: многофакторное описание объекта, зависимость номенклатуры свойств от вида материала, непрерывное расширение классов и свойств. На данном этапе сформулированы базовые требования к проектируемой онтологии. Существенное расширение потенциала UDS, как было показано, состоит в максимальной формализации схемы при сокращении роли свободного текстового формата и активном включении концептов и свойств, применяемых в уже существующих онтологиях в области наук о материалах.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, гранты №№ 13-07-00218 и 13-08-00404.

Литература

- [1] Gruber T. A translation approach to portable ontology specifications// Knowl. Acquis. 1993. Vol. 5. P. 199–220.

- [2] Thomas D. G. , Pappu R.V., Baker N.A. et al. NanoParticle Ontology for cancer nanotechnology research//Journal of Biomedical Informatics. 2011. V. 44. P. 59–74.
- [3] Degtyarenko K., de Matos P., Ennis M. et al. ChEBI: a database and ontology for chemical entities of biological interest//Nucleic Acids Research. 2008. V. 36. Database issue. D344–D350.
- [4] Tanaka M. Toward a Proposed Ontology for Nanoscience // URL: http://www.caais-acsi.ca/proceedings/2005/tanaka_2005.pdf (дата обращения: 25.03.2015)
- [5] Eletsii A.V., Erkimbaev A.O., Kobzev G.A. et al. Properties of nanostructures: data acquisition, categorization, and evaluation // Data Science Journal. 2012. V. 11. P. 126-139.
- [6] Буйлова Н.М., Елецкий А.В., Зицерман В.Ю., Кобзев Г.А. Систематизация источников и данных по нанотехнологиям // Научно-техническая информация. Серия 1. 2013. 2013. №11. С. 31-42.
- [7] Вариации на тему рубрикации // Российские нанотехнологии. 2010. Т. 5. №1-2. С. 35-38.
- [8] Ashino T., Fujita M. Definition of a Web ontology for design –oriented material selection//Data Science Journal. 2006. V. 5. P. 52-63.
- [9] Ashino T. Materials ontology: an infrastructure for exchange materials information and knowledge // Data Science Journal. 2010. V. 9.
- [10] Uniform Description System for Materials On the Nanoscale Prepared by the CODATA-VAMAS Working Group On the Description of Nanomaterials. Version 1.0, 1 February 2015. URL: www.codata.org/nanomaterials (дата обращения: 25.03.2015)
- [11] ISO/TR 11360:2010. Nanotechnologies- Methodology for the classification and categorization of nanomaterials.
- [12] Елецкий А.В. Эндоедральные структуры // УФН. 2000. Т. 170. №2. С. 114-142.
- [13] Чернозатонский Л.А., Шека Е.Ф., Артюх А.А. Графен-нанотрубные структуры: строение и энергетика образования // Письма в ЖЭТФ. 2009. Т. 89. №7. С. 412-417.
- [14] Swindells N. The representation and exchange of material and other engineering properties // Data Science Journal. 2009. V. 8. P. 190-200.
- [15] Draft Framework for a Uniform Description System for Nanomaterials 17 September 2013. URL: www.codata.org/nanomaterials (дата обращения: 25.03.2015)
- [16] Open Babel: The Open Source Chemistry Toolbox. URL: http://openbabel.org/wiki/Main_Page (дата обращения: 25.03.2015)
- [17] Changjun Hu, Chunping Ouyang, Jinbin Wu et al. Non-structured materials science data sharing based on semantic annotation // Data Science Journal. 2009. V. 8. P. 52-61.
- [18] Карпова И., Порысева Е., Казаков Г., Кольцова Э. Разработка онтологии в области наноконпозиционных материалов // Информационные ресурсы России. 2012. №2. С. 5-9.
- [19] Marques L., Hodeau J.-L., Nunez-Reguero M., Perroux M. Pressure and temperature diagram of polymerized fullerite. Phys. Rev. B. 1996. V. 54. No

18. R 12633-12636.

- [20] Елецкий А.В. Механические свойства углеродных наноструктур и материалов на их основе // УФН. 2007. Т. 177. №3. С. 233-274

Ontology of subject area “Nanomaterials ant their applications”

A. Erkimbaev¹, V. Zitserman¹, G. Kobzev¹, V. Serebtjakov², K. Teimurazov².

¹Joint Institute for High Temperatures of RAS,

²Dorodnicyn Computing Centre of RAS

It is proposed to use the model “Uniform Description System for nanomaterials”, prepared by international expert group for development of new ontology. Its main advantages – universality and the potentialities of the expansion when new object or concepts are emerging. We point the way to build the ontology based on the UDS model by creating the hierarchy of classes and properties. It is proposed the widening the scope of model with the aid of integration with material science ontpologies, including the Russian ontology on nanocomposites.

Keywords: ontology; nanomaterials; nano-object; hierarchy of classes; information model.