

Использование этих форматов является целесообразным еще и потому, что они используются в качестве основы функционирования веб-сервисов.

Для разрешения семантических и структурных конфликтов необходимо стандартизировать форматы представления описанных химических сущностей и свойств в рамках интегрированной ИС на языках XML и JSON, т. е. необходимо разработать форматы соответствующих документов для представления химических сущностей, их свойств и другой информации. Это позволит обмениваться информацией между звеньями интегрированной ИС.

7 Заключение

Проблема интеграции ИС вообще и ИС СНВМ, в частности, чрезвычайно актуальна, поскольку доступ ко всей совокупности данных о веществах позволяет рассматривать такой консолидированный информационный источник в качестве объекта для всестороннего анализа и извлечения новых знаний.

В неорганическом материаловедении на первом этапе наиболее реалистичными являются попытки интеграции, основанные на учете специфики предметной области. Предложенное выше формальное описание предметной области – неорганического материаловедения – ни в коем случае не претендует на глубину проработки, которая бы удовлетворила материаловеда. В каждой из многочисленных областей материаловедения существует множество своих особенностей, учесть которые в большей или меньшей степени возможно при построении онтологий этих областей, основанных на сложных таксономиях.

Важно понимать, что сложность реализации ИС напрямую зависит от сложности формального описания предметной области. В этом смысле предложенная формальная модель (система →

вещество → модификация), на наш взгляд, является приемлемым компромиссом между сложностью реализации интегрированной ИС и детальностью описания информации, представленной в отдельных интегрируемых ИС СНВМ.

Поддержка

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ, проекты 16-07-01028, 17-07-01362 и 15-07-00980.

Литература

- [1] Киселева, Н.Н.: Компьютерное конструирование неорганических соединений. Использование баз данных и методов искусственного интеллекта. М.: Наука (2005)
- [2] Киселева, Н.Н., Дударев, В.А.: Информационная система по ресурсам неорганической химии и материаловедения. Вестник Казанского технологического университета, 17 (19), сс. 356-358 (2014)
- [3] Христофоров, Ю.И., Хорбенко, В.В., Киселева, Н.Н. и др.: База данных по фазовым диаграммам полупроводниковых систем с доступом из Интернет. Изв. вузов. Материалы электронной техники, (4), сс. 50-55 (2001)
- [4] Киселева, Н.Н., Прокошев, И.В., Дударев, В.А. и др.: Система баз данных по материалам для электроники в сети Интернет. Неорган. материалы, 42 (3), сс. 380-384 (2004)
- [5] Christophides, I., Koffina, G., Serfiotis, V, Tannen, A.: Integrating XML Data Sources using RDF/S Schemas: The ICS-FORTH Semantic Web Integration Middleware (SWIM), Deutsch Dagstuhl Seminar: Semantic Interoperability and Integration (2004)