

Д. Т. Н. Б. Б. Зобнин, О. А. Горбенко (✉), С. А. Сорокин

ФГБОУ ВПО «Уральский государственный горный университет», г. Екатеринбург, Россия

УДК 004.14:621.763].004.822

## ПРОЕКТИРОВАНИЕ ОНТОЛОГИИ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ТЕХНОГЕННЫХ ПЫЛЕЙ В НАНОКОМПОЗИТЫ

Рассмотрен онтологический подход к компьютерному моделированию технологии преобразования различных исходных материалов в композиционные наноматериалы. Такой подход позволяет избежать противоречий при определении типа иерархии классов, а также определить базовый словарь (тезаурус) для описания объектов предметной области.

**Ключевые слова:** компьютерное моделирование наноматериалов, интеграция информационных ресурсов, онтология, взаимодействие программных агентов.

### Актуальность работы и основные проблемы

**Ц**ель работы — развитие онтологического подхода при компьютерном наномоделировании материалов и структур с заданными свойствами. При этом обеспечивается единое стандартизированное представление данных для всех приложений. Такое представление позволяет точно извлекать необходимую информацию и без проблем осуществлять ее интеграцию, поскольку бизнес-процессы и различные источники данных могут быть связаны друг с другом с помощью общей метамодели.

Одна из основных задач, стоящих перед разработчиками наноконкомпозитов, — получить программное обеспечение, которое позволит создавать реальные структурные модели материалов и сплавов для изучения их физических свойств. Разработка позволит исследовать свойства материалов в виртуальной среде еще до того, как они будут получены на практике. Она значительно упростит научные исследования в области материаловедения, а также найдет свое применение в реальном секторе экономики. Например, к техногенной пыли относится глиноземная пыль печей кальциниции гидроксида алюминия, которую можно использовать для получения композиционных наноматериалов конструкционного, инструментального и триботехнического назначения, а также в производстве вяжущих, цементов и огнеупорной продукции.

Большой интерес представляет возможность использования наноматериалов в составе композиционных материалов. Существует

ряд подходов к улучшению комплекса свойств и оптимизации состава композиционного материала, технологии его переработки и др. Использование высокодисперсных материалов в композициях теоретически обосновано, поскольку, обладая высоким энергетическим потенциалом и огромной удельной поверхностью, они способны изменять уровень взаимодействия на межфазной границе полимер – наполнитель, что дает весьма эффективный результат по регулированию комплекса свойств композиций. Основным препятствием использования высокодисперсных наносодержащих материалов как компонентов композиций является самопроизвольное стремление наноструктуры агрегироваться, выходя за границы наноразмерности, уже на этапе синтеза. Это снижает эффект действия добавки и их основных преимуществ перед традиционными и требует поиска эффективных путей предотвращения агрегации и агломерации наноматериалов, а также необходимости крайне сложного диспергирования их в полимерных композициях. Требуется разработать методические основы когнитивного моделирования порового пространства (моделирование структуры порового пространства дает возможность получить одновременно данные по распределению пор и связывающих их каналов).

В настоящее время накоплено достаточно много теоретических данных, аналитических зависимостей, характерных особенностей, полученных при изготовлении наноматериалов. Тем не менее очевидно, что всех этих знаний недостаточно для быстрого и эффективного реагирования на постоянно растущие запросы реального производства. Зачастую либо не существует методик анализа зависимостей параметров готовых изделий от технологических особенностей их изготовления и отклонений



О. А. Горбенко

E-mail: gorbenko.it@gmail.com

от устоявшегося технологического процесса, либо они не дают результата, соответствующего действительности. Из-за этого приходится при изготовлении нанокompозитов под конкретные требования заказчика либо опираться на аналитические зависимости, либо изготавливать опытные партии. Однако изготовление опытных партий приводит к существенному увеличению срока поставки готовых изделий, и в ряде случаев это оказывается невозможным. Использование каких-либо аналитических зависимостей при решении этого вопроса может приводить к неожиданным результатам. При налаживании гибкого производства, адаптированного под конкретные требования заказчика, эти факторы должны быть полностью исключены.

Как известно, высокие целевые свойства нанокompозитов достигаются путем формирования определенных структур из нанопорошков. Разработка и реализация таких способов являются собственно предметом технологических исследований в порошковых нанотехнологиях. В цепочке технологий синтез нанопорошков – формование – спекание конечный продукт, материал, оказывается весьма чувствителен ко всем этапам своей предыстории, начиная с параметра качества нанопорошков. Таким образом, высокие целевые свойства достигаются путем формирования определенных структур материалов из нанопорошков.

Свойства композиционных материалов определяются в значительной степени природой и дисперсностью наполнителя, формой частиц, их концентрацией, характером упаковки. В таких системах существенную роль играют коллоидно-химические характеристики межфазной поверхности, процессы взаимодействия частиц наполнителя друг с другом и с дисперсионной средой. Направленное регулирование коллоидно-химических свойств наполненных систем позволяет получать композиционные материалы с заданным комплексом эксплуатационных параметров. Сведения в сети Интернет по этому вопросу хаотично распределены по каталогам и электронным архивам, что затрудняет их поиск и использование.

#### **Задача интеграции информационных ресурсов при компьютерном моделировании наноматериалов**

Решение проблем интеграции информационных ресурсов осложнено большим многообразием используемых технологий и типов информационных ресурсов. В библиотечной среде применяются форматы семейства MARC, для описания образовательных ресурсов получил распространение стандарт

LearningObjectMetadatastandard (LOM). Большую популярность в последнее время приобретает стандарт DublinCore [1], претендующий на универсальную систему метаданных и ориентированный в основном на Интернет-пространство.

Долгое время не существовало подходящих решений для внедрения семантики в HTML-документы<sup>\*1</sup>. Хотя для описания метаданных в HTML-страницах в стандарте языка определен элемент meta, но его возможности не позволяют полноценно внедрить семантику в HTML-документ. Лишь в последнее время поисковые системы (например, Yandex и Google) заявили о начале поддержки использования в разметке HTML-страниц структурированной информации: микроформатов и стандарта RDF. Структура данных RDF-хранилища является структурой с иерархическими связями, поскольку в RDF-хранилище не только содержатся данные, но и формально описаны всевозможные отношения между данными и понятиями. Для построения поисковых запросов к RDF-данным комитетом W3C Консорциумом Всемирной паутины<sup>\*2</sup> предложен язык SPARQL. Извлеченные из различных информационных ресурсов RDF-данные не являются полностью пригодными для помещения их в RDF-репозиторий, поскольку они не всегда могут удовлетворять необходимым условиям синтаксической и семантической интероперабельности. Следует отдавать отчет в том, что в процессе приведения более сложного набора данных в более простой DublinCore будет неизбежно происходить потеря некоторых полезных, хотя и специфичных для данного стандарта, данных. Очевидно, что какой-либо единый стандарт метаданных не может удовлетворить все потребности и решить все возникающие задачи.

Главная идея, на которой основан процесс интеграции разнородных данных, заключается в приведении форматов метаданных информационных ресурсов к единому стандарту на базе DublinCore. Одним из наиболее перспективных подходов к повышению эффективности поиска и использования информации является построение онтологии предметной области, способствующей интеграции разнородных информационных ресурсов на концептуальном уровне. Под онтологией понимается структура в виде графа или сети, состоящая из набора концеп-

<sup>\*1</sup> HTML — Hyper Text Markup Language, язык разметки гипертекста. Стандартный язык описания страниц для использования во Всемирной сети.

<sup>\*2</sup> WorldWideWebConsortium, или W3C, — организация, разрабатывающая и внедряющая технологические стандарты для Всемирной паутины.

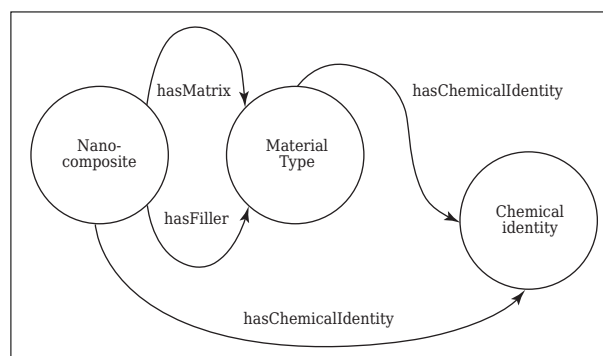
тов (классов), набора бинарных связей между концептами и набора экземпляров классов — записей, соответствующих классам или отношениям. Благодаря онтологии пользователь будет получать ресурсы, семантически релевантные запросам.

Использование онтологий, несмотря на довольно большие затраты на их составление, дает целый ряд преимуществ, таких как, например, структурированность и ясность в организации контента и интероперабельность<sup>\*3</sup>. Визуализация онтологии позволяет посетителю Web-ресурса видеть связь между различными материалами на нем и облегчает навигацию по portalу. Использование онтологии верхнего уровня в качестве основы для онтологии предметной области позволяет избежать противоречий при определении типа иерархии классов, а также определить базовый словарь (тезаурус) для описания объектов предметной области.

Для моделирования преобразования технологических пылей в нанокомпозиты предлагается модель представления знаний, являющаяся расширением существующей в когнитивном моделировании модели в виде знакового орграфа и основывающаяся на концептуальной модели представления знаний в виде поля знаний, используемой в инженерии знаний для создания интеллектуальных систем [2]. Поле знаний определяется тройкой  $(X, Y, M)$ , где  $X$  — входные данные задач, решаемых интеллектуальной системой;  $Y$  — выходные данные — результат решения задач;  $M$  — операциональная модель, на основании которой происходит преобразование  $X$  в  $Y$ . Операциональная модель  $M = (K_d, K_f)$  включает понятийную систему  $K_d$ , отражающую понятийную структуру ситуации, и функциональную систему  $K_f$ , моделирующую законы и закономерности проблемной области, определяющие динамику развития ситуации.

При создании онтологии в области наноконпозиционных материалов в качестве языка представления выбран OWL (WebOntologyLanguage). Онтология OWL — это последовательность аксиом, фактов и ссылок на другие онтологии. В OWL отдельно выделяются три типа аксиом: задание эквивалентного класса, задание класса и задание класса с непересекающимися экстенционалами. Бинарное отношение предстает в виде свойства (см. рисунок). OWL рекомендован консорциумом Всемирной паутины для разработки онтологий, имеет строгий XML-синтаксис, а следовательно

<sup>\*3</sup> Интероперабельность — это способность системы взаимодействовать с другими системами без каких-либо ограничений доступа и реализации.



Задание бинарных отношений

но, способность определять настраиваемые схемы разметки. С использованием методологии METHONTOLOGY выполнена интеграция онтологии наноконпозитов в онтологию верхнего уровня с интеграцией онтологий: Периодическая Таблица (PeriodicTable) на языке OWL и онтологии ChemAxiomPolyClass, описывающих основные классы полимерных материалов [3]. После того, как завершена концептуализация — создан тезаурус и заданы бинарные отношения — выполняется формализация с использованием редактора Protégé OWL, разработанного в Стэнфордском университете для построения онтологий и баз знаний. Непротиворечивость онтологии проверяется с использованием ризонера Pellet.

Для описания и изучения динамики функционирования технологического комплекса синтез нанопорошков – формование – спекание используется многоагентное моделирование [4]. Преимуществом многоагентного моделирования является возможность естественного описания сложных систем в терминах поведения компонент и их взаимодействий. Агентно-ориентированный подход позволяет подняться на новый уровень концептуализации и интеллектуализации современных информационно-коммуникационных систем. Для решения задач управления развитием сложных природных и технологических комплексов предложено использовать совместную обработку результатов натурных и вычислительных экспериментов. Наибольший вклад в получение синергетического эффекта вносят информационные процессы, реализующие межэлементные и межсистемные связи. Для оптимизации информационных процессов необходим комплекс универсальных моделей информационной инфраструктуры системы.

Информационные системы предоставляют пользователям качественно новые информационные услуги: прозрачный компетентный доступ к территориально распределенным ин-

формационным ресурсам; новые возможности в поиске, анализе, сортировке и группировке информации; новые возможности в распространении и обмене информационными ресурсами; компактные и удобные формы хранения информационных ресурсов [5].

В результате совместной обработки удается обнаружить внутреннюю структуру исследуемого объекта и выявить его локальные свойства (фрактальные функции Вейерштрасса, мультифрактальные вероятностные меры канторовских рядов, сходство энергетического каскадного процесса со структурой мультифрактальных неоднородных канторовских рядов); определить признаки стационарного режима работы объекта; организовать накопление информации о нештатных и экстремальных ситуациях методами имитацион-

ного моделирования; использовать модели обработки информации, основанные на конкурирующих вычислительных технологиях, включающих как традиционные методы, так и нечеткую логику и искусственные нейронные сети (ИНС).

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложена мультиагентная технология информационной поддержки технологии преобразования различных исходных материалов в композиционные наноматериалы. В рамках этой технологии осуществляются интеграция и автоматизированная децентрализованная обработка распределенных информационных ресурсов на базе взаимодействия программных агентов, имеющих гибридную архитектуру.

## Библиографический список

1. **ГОСТ Р 7.0.10–2010 (ИСО 15836:2003).** Национальный стандарт Российской Федерации. Система стандартов по информации, библиотечному и издательскому делу. Набор элементов метаданных «Дублинское ядро».
2. **Зобнин, Б. Б.** Проектирование подсистемы когнитивного моделирования / Б. Б. Зобнин, С. В. Ендияров // Актуальные проблемы современной науки, техники, образования : сб. науч. тр. конф. Т. 2. — Магнитогорск : МГТУ, 2011. — С. 14–16.
3. **Карпова, И.** Разработка онтологий в области наноконпозиционных материалов / И. Карпова, Е. Поряева, Г. Казаков, Э. Кольцова // Информационные ресурсы России. — 2012. — № 2. — С. 5–9.
4. **Зобнин, Б. Б.** Мультиагентные системы. Управление сложными технологическими комплексами / Б. Б. Зобнин, А. В. Вожегов. — [Б. М.] : Lambert Academic Publishing, 2014. — 148 с.
5. **Zobnin, B.** Expert system for sintering process control based on the information about solid-fuel flow composition / B. Zobnin, S. Yendiyarov, S. Petrushenko // Proceedings of World Academy of Science, Engineering and Technology, France. — 2012. — Issue 68. — P. 861–868 (SCOPUS). ■

Получено 06.11.2014

© Б. Б. Зобнин, О. А. Горбенко, С. А. Сорокин,  
2015 г.

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКАЯ ИНФОРМАЦИЯ

### 10th EUROPEAN CONFERENCE

### ON INDUSTRIAL FURNACES & BOILERS

GAIA (PORTO) – HOTEL HOLIDAY INN PORTO GAIA – PORTUGAL – 7-10 APRIL 2015






## 10-я Европейская конференция по промышленным печам и бойлерам

7–10 апреля 2015 г.

г. Вила-Нова-ди-Гая, Португалия