

**ВИКОРИСТАННЯ ІНФОРМАЦІЙНИХ ТЕХНОЛОГІЙ ПРИ
ВИВЧЕННІ ФАЗОВИХ ПЕРЕТВОРЕНЬ В
ТЕРМОДИНАМІЧНИХ СИСТЕМАХ РІЗНОЇ ПРИРОДИ**

С.О. Заїка, А.Т. Лобурець

Полтавський національний технічний університет
імені Юрія Кондратюка, Україна

Швидкий ріст величезного об'єму наукових знань, що накопичується в електронній формі, супроводжується складнощами в доступі користувачів. Це пов'язано з різномірністю типів інформації, обробкою та інтерпретацією експериментальних результатів. Тому існує необхідність створення спеціальних інформаційних ресурсів. Нас цікавить проведення досліджень теплофізичних властивостей термодинамічних систем, що є важливою фундаментальною проблемою сучасних фізики і хімії. Вирішення таких задач стає можливим лише за наявності надійних експериментальних даних. Це дає можливість здійснювати побудову таких моделей, які дозволяють адекватно описувати поведінку систем в широкому інтервалі параметрів стану. Ця обставина породжує проблему достовірності та узгодженості результатів, що стосуються однакових систем або цілих класів систем, одержаних різними авторами. Часто такі дані носять досить обмежений характер або ж вони відносяться до різних діапазонів термодинамічних параметрів. Тому існує проблема розвитку методик здійснення достовірної оцінки на основі обмеженого об'єму експериментальної інформації. При реалізації таких задач стає необхідним виконання експертної оцінки існуючого масиву експериментальних результатів з добре обґрунтованим вибором рекомендованих значень і оцінки погрешностей, опрацювання різномірних даних з використанням моделей. Тут виникає потреба використання таких інформаційно-аналітичних систем, які здатні надати можливість оперативної і з достатньою точністю одержувати дані при довільних значеннях температур, тисків і складів.

Важливою проблемою природничих і технічних наук залишається створення фізично точної моделі системи «рідина – газ», яка однаково добре працювала б у всьому температурному діапазоні існування паро-рідинної рівноваги індивідуальних речовин чи їх сумішей. Методи термодинаміки не дозволяють вирішити цю проблему без використання результатів відповідних експериментальних досліджень термодинамічних властивостей реальних речовин. До цього часу залишаються не вивченими критичні

характеристики переважної більшості металів, за винятком лужних і ртуті. Значення критичних характеристик металів різними авторами було одержано лише теоретично на основі ідеалізованих модельних уявлень. Ця інформація часто є лише оціночною, адже результати залежать від вибору авторами моделей та гіпотез. Можна стверджувати, що повної відповіді на питання про природу критичних явищ все ще немає. Існують незаперечні експериментальні факти, які погано вписуються у сучасну теорію. Окрім фундаментального інтересу до наукових знань, що приводять до розуміння механізмів виникнення явищ, характерних для металевих рідких фаз, не менш важливим є безпосереднє практичне значення цих знань. Як впливає зі сказаного, на заваді вирішення сформульованих вище проблем стоїть в тому числі й інформаційний голод. Хоча останнім часом у світі розробляються і використовуються спеціалізовані комерційні пакети програм, що дозволяють отримувати інформацію про теплофізичні властивості деяких класів речовин і матеріалів, але, як відмічають автори [1], досвід їхнього використання свідчить про наявність істотних недоліків. Вони не дають доступу до таблиць первинних експериментальних даних, не дозволяють вибирати моделі для їхньої обробки, а використані моделі часто є недостатньо фізично обґрунтованими [1]. Не зважаючи на попередні зауваження, немає сумнівів у тому, що інтеграція інформаційних ресурсів у єдине інформаційне середовище та організація доступу до обчислювальних ресурсів є одним із найважливіших напрямів розвитку сучасних інформаційних технологій. Важливою проблемою є обмін інформацією між розробниками і споживачами наукової інформації. Традиційна система публікації результатів наукових напрацювань (статті, монографії, довідники) не забезпечують високі темпи розвитку високотехнологічних галузей [1]. З метою вирішення проблеми розробляються та використовуються спеціальні інформаційні системи. Вважається, що найбільшого прогресу в питаннях інформаційного обміну досягнуто в Японії та США [2, 3]. В різних країнах здійснюються кроки в напрямі міжнародної інтеграції інформаційних ресурсів [4]. На жаль, як правило, всі ці бази даних локалізуються в лабораторіях чи наукових центрах і є недоступними для зовнішніх користувачів. Таким користувачам доводиться самостійно створювати під свої конкретні задачі відповідні бази даних. В епоху комерціалізації наукової інформації такий підхід має свої недоліки і переваги. В першу чергу, це велика затрата часу на створення бази та недоступність багатьох ресурсів. З іншого боку, це зобов'язує до дуже серйозної роботи з науковою літературою (її детальне вивчення і

критичне осмислення перед занесенням до бази даних). Таким чином, користувач змушений сам проводити експертизу публікацій на власний розсуд і очевидно, що результат буде залежати від його кваліфікації. При цьому він не буде в своїй роботі скованим ніякими шаблонами. Далі можна скористатися навчальним посібником для зберігання даних ETL [4].

Література

1. Барахнин В.Б. Информационные технологии для задач теплофизических свойств веществ / В.Б. Барахнин, Ю.И. Молородов, С.В. Станкус, А.М. Федотов / Информационные технологии и высокопроизводительные вычисления: материалы Всероссийской научно-практической конференции. – Хабаровск: Тихоокеанский государственный университет, 2013. – С. 24–32.
2. NMS Materials Database. – Режим доступа: http://mits.nims.go.jp/db_top_eng.htm.
3. NIST Materials Database. – Режим доступа: <http://www.mst.gov/chemistry-portai.cfm>.
4. Dudarev V.A. Virtual integration of the Russian and Japanese databases on properties of inorganic substances and materials / V.A. Dudarev, N.N. Kiselyova, Y. Xu, M. Yamazaki / Proc. MITS-2009. Symposium on Materials Database (NIMS). – 2009. – P. 37–48.
5. Kimball R. The Data Warehouse ETL Toolkit: Practical Techniques for Extracting, Cleaning, Conforming, and Delivering Data / R. Kimball, J. Caserta. – Wiley: Wiley Publishing, 2004. – 491 p.