

建设材料数据研发数据库的探索

Exploration on the Construction of material data Research and Development Database

吕 缙 张 倩 刘 瑞 英 张 艳 琴 张 王 源

Fei Lv Qian Zhang Ruiying Liu Yanqin Zhang Wangyuan Zhang

中国兵器科学研究院宁波分院
中国·浙江 宁波 315103
Ningbo Branch of the Chinese Academy of
Weapons and Sciences,
Ningbo, Zhejiang, 315103, China

【摘要】论文通过分析中国材料数据库的研究现状,提出研究数据库建设中思考的问题,有针对性地强调需要重点开展的工作,以供参考。

【Abstract】Based on the analysis of the research status of China's material database, this paper puts forward the problems to be considered in the construction of the research database, and puts emphasis on the work that needs to be focused, for reference.

【关键词】材料数据;数据库建设;MGI;入库

【Keywords】material data; database construction; MGI; storage

【DOI】10.36012/etr.v1i2.302

1 引言

材料数据库的建设,是中国材料领域资源的数字化储备,具有包含内容广泛、覆盖面大的显著特点,是一项长期的、具有深远意义的工作,对于中国的重点技术的创新和攻关具有重要的作用,能对推动中国技术专项和国防建设、高新技术领域发展、经济社会转型等方面的问题解决提供参考依据和新的研究思路。

2 中国外材料数据库建设和研究的现状及问题分析

2.1 研究现状

目前,国际上对于材料数据库的研究并没有在全球范围内得到发展,除了中国的中国材料科学数据共享网及日本在2014年开始建设的国家材料数据中心之外,并没有形成其他国家级材料数据库。材料数据库的建设不及其他具体资源数据库的建设具体、易操作,没有好的管理和建设经验可以借鉴^[1]。材料数据库的建设具有专业性又要保证安全性,是要持之以恒进行建设才能看到明显效果的。目前的国际材料数据的主要分类方法是以材料的尺度和材料分类体系为依据划分的。两种分类方法各有特点,而材料科技领域的学科跨度大、存在明显的差异性。因而目前的材料数据研发和分类方法无法按照现有的各种数据库分类体系进行复制,需

要通过组织专业人员(包括在材料数据库建设和其他学科或领域工作和研究的科研人员、专家、高校研究人员、科研团体)进行专业性很强的探讨、综合,进而确立起一套完整的、可行性强的、适用于MGI数据研究与创新的组织体系,同时吸纳更多的科研机构、专业人员、建设单位共同参与、建设专业性材料数据库组织体系。

2.2 问题分析

材料数据库的建设需要来自各个领域的专家、学者参与,运用他们的专业知识和方法研究材料数据库中的部分与专业相关度大的问题。而专业的学者专家很多不会接触到具体的材料数据库建设,不能建立起材料数据库与自身专业研究的关联,对于建设材料数据库的工作起到的助力不大。无法发挥自己的专业在材料数据库建设的贡献,也无法得到材料数据库对自身专业研究的帮助,而如果有了相互的交流、合作,参与各方的研究事业都会因此收益^[2]。

3 材料数据库建设研究的重点

3.1 材料数据的调研与入库

由于近几年中国对科研工作的投资不断增加,中国的科研事业进步显著,各个领域的数据资源也不断增加,需要对来自不同领域的数据资源进行调研、入库评估,再进行系统、专业的整合、管理,加强材料数据库的建设工作。

数据调研要注重的方面有:①所属材料分类及其类型;②数据的完整性和一致性;③与数据源的一致性;④对数据库内容进行及时更新;⑤生产方式;⑥数据的可获取性^[9]。

入库评估的重点在于:①数据来源状况与数据完整性;②数据的成熟度。

数据的挖掘与分析的基本要求是保证数据的完整性、一致性。由于不同时期的科技发展受不同历史条件的限制,很多技术的实验数据只有最终的性能而没有完整的工艺制备的记录。加之实验的一些成分和含量又有一定的波动范围,所以会导致不同来源的同种材料的性能相差很大,如果不能保证数据和数据源的一致性,那么数据的收集和整合便失去了研究的意义和价值。生产方式是指研究中的计算、实验、表征,生产方式及其详细的条件参数(计算机或模拟软件的名称、模拟的各种初始条件、模型的建立和分析、微观组织和国家标准号等)。在对数据的调研和评估入库中应重点关注 2 种数据:一是热门方向、标准化程度低的,此类数据大多是实验得来的数据,只需满足一定的必要条件就可以入库;二是早期研究材料的数据,可能在调研中没办法获取完整的数据,需要视具体的情况(研究的现存数据、现有的相关技术条件)决定舍弃或整理入库。

3.2 材料数据库运行管理机制的建设

运行管理机制的建设和完善是材料数据库发挥其资源作用的重要的保障。运行管理机制包括材料数据资源开放共享机制、专家参与、人才队伍建设、材料数据更新等机制,是资源库良性运行的机制保障,要在中国的产权保护条例和其他法律规定下创新材料数据库的规章建设和产权保护规定,实现二者的双赢。

3.3 关于 MGI 数据完整性的建设和补充

数据库的优势就在于不同来源的数据聚合在一起进行整理、分析,而不是单个领域的数据的简单堆积、分类的存储。研究者可能会受限于自身研究领域的限制,对于自己的研究成果的应用领域并不完全清楚,所以在实际的生产 and 研究过程中出现了很多“无心插柳柳成荫”的佳话,例如,一种新型材料的出现可能对研发者领域有作用,也可能在另一个材料应用领域起到更大作用。因此,开发数据库的未知潜能作为数据库的补充工作可能会促进材料领域的创新和突破,为研究成果的新应用提供有力的理论支撑。结合 MGI 和能源材料、高温超导、结构材料、合金材料的研究,全面、稳步、有序地补充和完善材料数据库。

3.4 数据的整合和计算机模型和模拟软件的嵌入

运用计算机技术和建模的思想方法对数据进行系统、分

层次的整合、处理,实现不同实验研究成果的关联,使零散、破碎的材料实验数据形成一个综合、系统的有机整体。新技术加入无疑会拓展数据整合工作新方向的研究,为材料数据库的建设注入新的动力并保持自身的发展活力。

3.5 数据库的更新

数据库想要保持可持续的长久发展必须要定期更新、补充数据库内的数据,使其一直保证数据的现势性,才能具有研究的价值。更新数据时常用的操作有删除、插入、修改。只有对于由长期、多种实验验证错误的且不具有借鉴意义的数据才予以删除,清除数据库空间,避免这种无意义占用。其他数据一般情况下的更新只是对数据的插入和增加。特别是对从早期不完善的技术条件和制备技术的研究中得来的、具有很高的价值的数据库,要予以保留。

4 材料数据库组织评价体系的建立

建立健全数据库资源的组织和评价体系是一项长期、艰巨的工作,体系的建立过程是逐步的、循序渐进的。建设过程中不可急功近利,一定要对数据进行严格筛选入库,对旧有的数据谨慎考量,避免丧失有价值的数据库,造成不可挽回的损失。

建立材料数据库体系的重点在于建立完善材料数据共享、出版、引用机制,从而使材料数据充分发挥资源的作用,促进材料科学的人才培养和技术水平的进步。

5 结语

材料数据库的建设已经越来越受到中国和社会的重视,对推动材料科学发展具有不可替代的重要性。而随着材料科学的进步,会有更优质、丰富的数据库资源进入数据库,方便数据的共享,从而各个方面的建设都会增加实现重大突破的可能性。

数据库的建设过程中要集思广益,也需要专业研究人员对信息的处理,一定要在建设过程中创造一个既具系统性又具安全性的组织体系,为材料科学工作提供必要的理论支撑和参考依据。

参考文献

- [1]刘芳宁,王越,孙瑞侠.等材料数据库的现状与发展趋势[J].科学创新导报,2018(34):34-35.
- [2]李蓉梅.中文期刊回溯建库的实践与质量控制[J].情报探索,2008(2):45-46.
- [3]戴艳清.公益文化数字资源库建设现状、问题及对策——基于文化共享工程省级分中心特色数据库的调查分析[J].新世纪图书馆,2014(9):21-22.