

У статті розглядаються кінетичні закономірності модифікування епоксидних олігомерів замісниками на основі функціоналізованих похідних каркасних вуглеводнів. Було показано, що такі функціоналізовані фрагменти здатні утворювати комплексні сполуки з солями різних металів, які можуть грати роль молекулярних за масштабом (нанометричних) демпфуючих елементів при роботі інструменту.

Ключові слова: полімерні композити, адамантан, комплекси металів

Paper focus on kinetic laws of modifying epoxy oligomers with substituents based on functionalized cage hydrocarbons. It has been shown that such functionalized fragments capable to forming complexes with various metal salts that can act as molecular scale (nanometer) as a damping elements of tools in abrasive machining.

Keywords: polymer composites, adamantane, metal complexes

Литература

1. Гибридные органо-неорганические полимеры, как новый класс инструментальных материалов. Синтез и физико-механические свойства/ Савченко Д.А., Пашенко Е.А., Нековаль Н.Н., Лажевская О.В., Черненко А.Н.// Сверхтвердые, композиционные материалы и покрытия: получение, свойства, применение: Тезисы докладов Седьмой конференции молодых ученых и специалистов, 27–31 мая 2013 г., пос. Морское. - К: ИСМ НАН Украины, 2013. – С. 90–91.
2. Савченко Д. А. Гибридные органо-неорганические полимеры как новый класс инструментальных материалов. Оптимизация синтеза и механизм реакции // Породоразрушающий и металлообрабатывающий инструмент – техника и технология его изготовления и применения. - Киев: ИСМ им. В. Н. Бакуля, НАН Украины. 2013. – вып. 16. – С. 381–389.

Поступила 02.06.14

УДК 004.65:621.921.34

А. А. Лебедева, К. З. Гордашник, кандидаты технических наук, **В. Н. Колодницкий**, канд. физ.-мат. наук; **Е. М. Чистяков, В. Н. Кулаковский**, кандидаты технических наук; **Т. А. Сороченко, И. В. Скворцов, В. В. Цегельнюк, М. В. Дубенко**

Институт сверхтвердых материалов им. В. Н. Бакуля НАН Украины, г. Киев

ПРЕДСТАВЛЕНИЕ И АНАЛИТИЧЕСКАЯ ОБРАБОТКА ДАННЫХ В ПРЕДМЕТНОЙ ОБЛАСТИ «СТМ» НА ОСНОВЕ ОНТОЛОГО-ТЕЗАУРУСНОГО АНАЛИЗА

Изложен подход к программной реализации визуального представления информации в базе знаний предметной области «Сверхтвердые материалы» на основе онтолого-тезаурусного анализа.

Ключевые слова: онтология, тезаурус, интеллектуальный анализ, информационная система, база знаний.

Использование информационных технологий в области создания перспективных сверхтвердых материалов включает решение сложной задачи эффективного и оперативного анализа огромного массива несистематизированных данных. Это требует внедрения

автоматизированных процедур сбора, обработки, анализа и хранения как текстовой, так и количественной информации, а также применения технологий интеллектуального анализа данных, что позволяет выявлять «скрытые» знания с последующей адекватной оценкой их достоверности.

База знаний предметной области «Сверхтвердые материалы» (БЗ ПрО «СТМ»), разработанная в Институте сверхтвердых материалов им. В. Н. Бакуля НАН Украины (ИСМ) [1], основана на модели ПрО «СТМ» [2], которая является объединением тезауруса и онтологии. Тематический электронный информационно-поисковый тезаурус [3] и онтология [1] спроектированы на основе фиксирования парадигматических соотношений лексических единиц (терминов). Для поиска, выбора и анализа информации разработана компьютерная программа объединения электронного тезауруса и онтологии с материаловедческими базами данных ИСМ.

Проведенные ранее исследования [4] показали, что оптимальным представлением данных является такое, которое, выявляя семантические взаимосвязи объектов, позволяет находить в БЗ семантически близкие метаданные. Под термином «семантически близкие метаданные» понимаем метаданные, описывающие с помощью понятий ПрО контекст объекта в информационной системе.

Решением приведенных проблем стала разработка программных средств, позволяющих на основе семантического (контекстного) представления данных реализовать поиск информации как в корпоративных базах данных, так и в сети Интернет. Для организации процедуры поиска и кластеризации (автоматического выявления групп семантически похожих данных) текстовых документов в БЗ ПрО «СТМ» реализована методика латентно-семантического анализа [5], основанная на применении классической векторной модели информационного поиска. Поисковая программа использует запрос в качестве исходных данных для получения выборки из коллекции документов. В результате семантического поиска пользователю предлагается список найденных объектов, упорядоченных по уровню семантической близости.

Однако в БЗ ПрО «СТМ» не отражена взаимосвязь свойств материалов, способа их получения и назначения. Однако подобные взаимосвязи существуют, и их определение и поиск закономерностей в них важны как при создании новых материалов, так и использовании старых; важны при патентном поиске и поиске направлений будущих исследований, а также для понимания новых тенденций исследований в этой области.

Для решения этой задачи в ИСМ была построена автоматизированная онтолого-тезаурусная система ПрО «СТМ» в виде совокупности подсистем. При таком подходе в каждой подсистеме устанавливается взаимосвязь информации чисто справочной (марки, характеристики материала), технической (способы получения материалов, оборудование, оснастка, исходные материалы) и научной (физико-механические и физико-химические свойства, патенты и научно-технические публикации) [6].

В качестве примера разработки онтолого-тезаурусной подсистемы автоматизированной онтолого-тезаурусной системы управления знаниями в ПрО «СТМ» рассмотрим подсистему «Порошки наноалмазные» (рис. 1, 2).

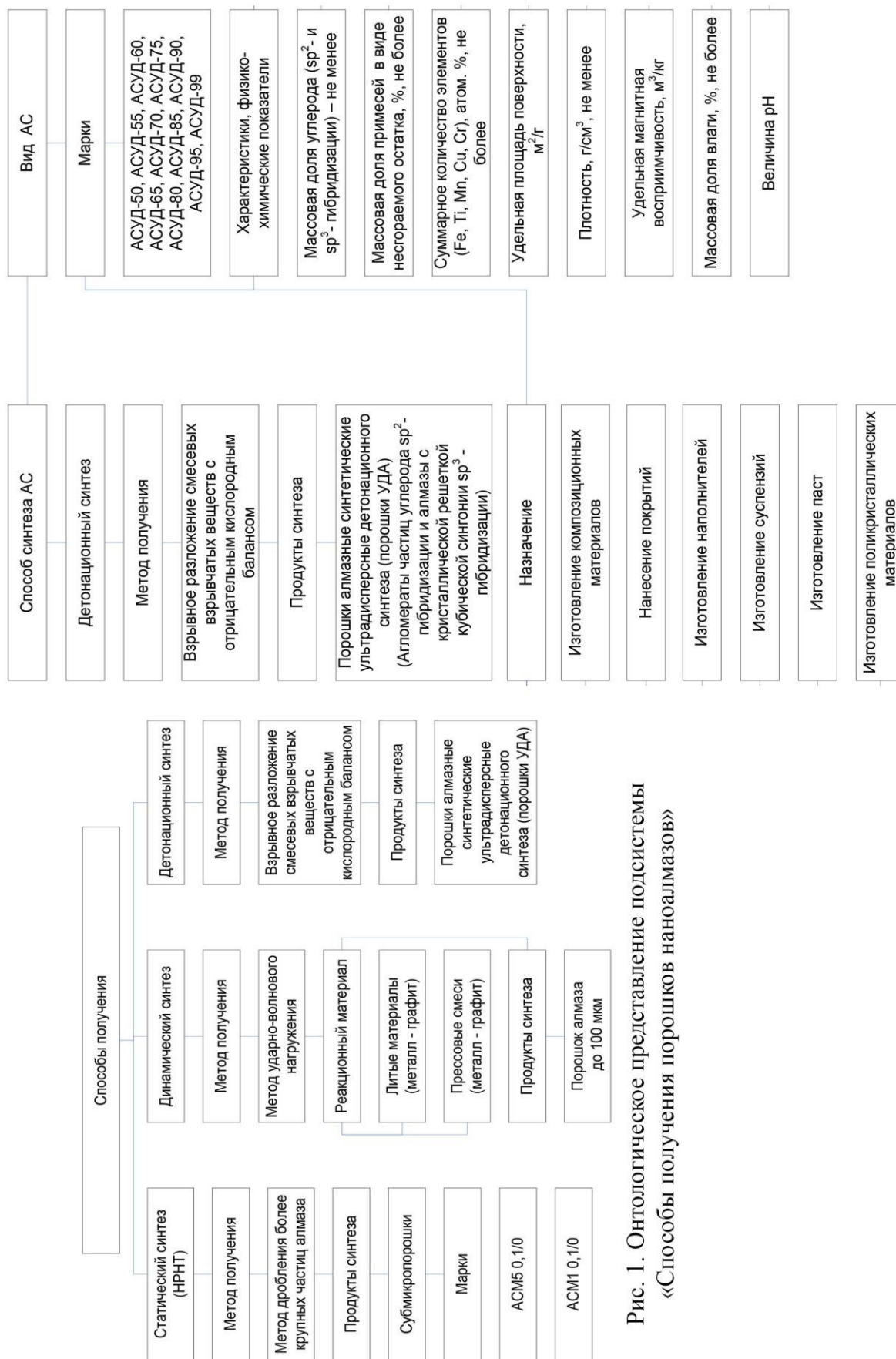


Рис. 1. Онтологическое представление подсистемы «Способы получения порошков наноалмазов»

Рис. 2. Онтологическое представление подсистемы «Порошки алмазные ультрадисперсные»

Тезаурусное представление подсистемы «Способы получения порошков наноалмазов»

–В–

**ВЗРЫВНОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ СМЕСЕВЫХ ВЗРЫВЧАТЫХ ВЕЩЕСТВ
С ОТРИЦАТЕЛЬНЫМ КИСЛОРОДНЫМ БАЛАНСОМ**

- В Метод получения
- Н Продукты синтеза

–Д–

ДИНАМИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ

- В Способы получения
- Н Метод получения

ДЕТОНАЦИОННЫЙ СИНТЕЗ

- В Способы получения
- Н Метод получения

–С–

СПОСОБЫ ПОЛУЧЕНИЯ

- Н Статический синтез (НРНТ)
- Н Динамический синтез
- Н Детонационный синтез

СТАТИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ (НРНТ)

- В Способы получения
- Н Метод получения

–М–

МАРКИ

- В Субмикropорошки
- Н АСМ5 0.1/0
- Н АСМ1 0.1/0

МЕТОД ПОЛУЧЕНИЯ

- В Статический синтез (НРНТ)
- В Динамический синтез
- В Детонационный синтез
- Н Метод дробления более крупных частиц алмаза
- Н Метод ударно-волнового нагружения
- Н Взрывное разложение смесевых взрывчатых веществ с отрицательным

кислородным балансом

МЕТОД ДРОБЛЕНИЯ БОЛЕЕ КРУПНЫХ ЧАСТИЦ АЛМАЗА

- В Метод получения
- Н Продукты синтеза

МЕТОД УДАРНО-ВОЛНОВОГО НАГРУЖЕНИЯ

- В Метод получения
- Н Реакционный материал

–П–

ПОРОШОК АЛМАЗА ДО 100 мкм

- В Продукты синтеза

**ПОРОШКИ АЛМАЗНЫЕ СИНТЕТИЧЕСКИЕ УЛЬТРАДИСПЕРСНЫЕ
ДЕТОНАЦИОННОГО СИНТЕЗА (УДА)**

- В Продукты синтеза

ПРОДУКТЫ СИНТЕЗА

- В Метод дробления более крупных частиц алмаза

В Взрывное разложение смесевых взрывчатых веществ с отрицательным кислородным балансом

Н Субмикропорошки

Н Порошок алмаза до 100 мкм

Н Порошки алмазные синтетические
ультрадисперсные детонационного синтеза (УДА)

–Р–

РЕАКЦИОННЫЙ МАТЕРИАЛ

В Метод ударно-волнового нагружения

Н Литые материалы (металл–графит)

Н Прессовые смеси (металл–графит)

Н Продукты синтеза

–С–

СУБМИКРОПОРОШКИ

В Продукты синтеза

Н Марки

Тезаурусное представление подсистемы «Порошки алмазные ультрадисперсные»

–А–

АСУД-50, АСУД-55, АСУД-60, АСУД-65, АСУД-70, АСУД-75, АСУД-80, АСУД-85, АСУД-90, АСУД-95, АСУД-99

В Марки

–В–

ВЗРЫВНОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ СМЕСЕВЫХ ВЗРЫВЧАТЫХ ВЕЩЕСТВ С ОТРИЦАТЕЛЬНЫМ КИСЛОРОДНЫМ БАЛАНСОМ

В Метод получения

Н Продукты синтеза

ВИД АС

В Способ синтеза АС

Н Порошки алмазные синтетические ультрадисперсные детонационного синтеза
(порошки УДА)

ВЕЛИЧИНА pH

В Характеристики, физико-химические показатели

–Д–

ДЕТОНАЦИОННЫЙ СИНТЕЗ

В Способ синтеза АС

Н Метод получения

–И–

ИЗГОТОВЛЕНИЕ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

В Назначение

ИЗГОТОВЛЕНИЕ НАПОЛНИТЕЛЕЙ

В Назначение

ИЗГОТОВЛЕНИЕ СУСПЕНЗИЙ

В Назначение

ИЗГОТОВЛЕНИЕ ПАСТ

В Назначение

ИЗГОТОВЛЕНИЕ ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ

В Назначение

–С–

СПОСОБ СИНТЕЗА АС

- Н Вид АС
- Н Детонационный синтез

–М–

МАРКИ

В Порошки алмазные синтетические ультрадисперсные детонационного синтеза (порошки УДА)

- Н Назначение
- Н Характеристики, физико-химические показатели
- Н АСУД-50, АСУД-55, АСУД-60, АСУД-65, АСУД-70, АСУД-75, АСУД-80, АСУД-85, АСУД-90, АСУД-95, АСУД-99

МЕТОД ПОЛУЧЕНИЯ

- В Детонационный синтез
- Н Взрывное разложение смесевых взрывчатых веществ с отрицательным кислородным балансом

МАССОВАЯ ДОЛЯ УГЛЕРОДА (sp^2 - И sp^3 -ГИБРИДИЗАЦИИ), НЕ МЕНЕЕ

- В Характеристики, физико-химические показатели

МАССОВАЯ ДОЛЯ ПРИМЕСЕЙ В ВИДЕ НЕСГОРАЕМОГО ОСТАТКА, %, НЕ БОЛЕЕ

- В Характеристики, физико-химические показатели

МАССОВАЯ ДОЛЯ ВЛАГИ, %, НЕ БОЛЕЕ

- В Характеристики, физико-химические показатели

–Н–

НАЗНАЧЕНИЕ

- В Марки
- Н Изготовление композиционных материалов
- Н Нанесение покрытий
- Н Изготовление наполнителей
- Н Изготовление суспензий
- Н Изготовление паст
- Н Изготовление поликристаллических материалов

НАНЕСЕНИЕ ПОКРЫТИЙ

- В Назначение

–П–

ПОРОШКИ АЛМАЗНЫЕ СИНТЕТИЧЕСКИЕ УЛЬТРАДИСПЕРСНЫЕ
ДЕТОНАЦИОННОГО СИНТЕЗА (ПОРОШКИ УДА)

- В Вид АС
- Н Марки

ПОРОШКИ АЛМАЗНЫЕ СИНТЕТИЧЕСКИЕ УЛЬТРАДИСПЕРСНЫЕ
ДЕТОНАЦИОННОГО СИНТЕЗА (ПОРОШКИ УДА) (АГЛОМЕРАТЫ ЧАСТИЦ
УГЛЕРОДА sp^2 -ГИБРИДИЗАЦИИ И АЛМАЗЫ С КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКОЙ
КУБИЧЕСКОЙ СИНГОНИИ sp^3 -ГИБРИДИЗАЦИИ))

- В Продукты синтеза

ПРОДУКТЫ СИНТЕЗА

В Взрывное разложение смесевых взрывчатых веществ с отрицательным кислородным балансом

Н Порошки алмазные синтетические ультрадисперсные детонационного синтеза (порошки УДА) (агломераты частиц углерода sp^2 -гибридизации и алмазы с кристаллической

решеткой кубической сингонии sp^3 -гибридизации)

ПЛОТНОСТЬ, г/м³, НЕ МЕНЕЕ

В Характеристики, физико-химические показатели

–С–

СУММАРНОЕ КОЛИЧЕСТВО ЭЛЕМЕНТОВ (Fe, Ti, Mn, Cu, O₂), ат. %, НЕ БОЛЕЕ

В Характеристики, физико-химические показатели

–У–

УДЕЛЬНАЯ ПЛОЩАДЬ ПОВЕРХНОСТИ, м²/г

В Характеристики, физико-химические показатели

–Х–

ХАРАКТЕРИСТИКИ, ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ПОКАЗАТЕЛИ

В Марки

Н Массовая доля углерода (sp^2 - и sp^3 -гибридизации), не менее

Н Массовая доля примесей в виде несгораемого остатка, %, не более

Н Суммарное количество элементов (Fe, Ti, Mn, Cu, O₂), ат. %, не более

Н Удельная площадь поверхности, м²/г

Н Плотность, г/м³, не менее

Н Удельная магнитная восприимчивость, $1 \cdot 10^{-8}$, м³/кг

Н Массовая доля влаги, %, не более

Н Величина pH

В целях графического представления онтолого-тезауральной системы «СТМ» использована разработанная Институтом кибернетики им. В. М. Глушкова НАН Украины компьютерная программа «GraphEditor», которая представляет собой среду накопления и графического отображения информационных массивов в виде онтологий на основе электронных тезаурусов и баз знаний позволяет создавать новые и анализировать существующие сети понятий и закономерностей [7].

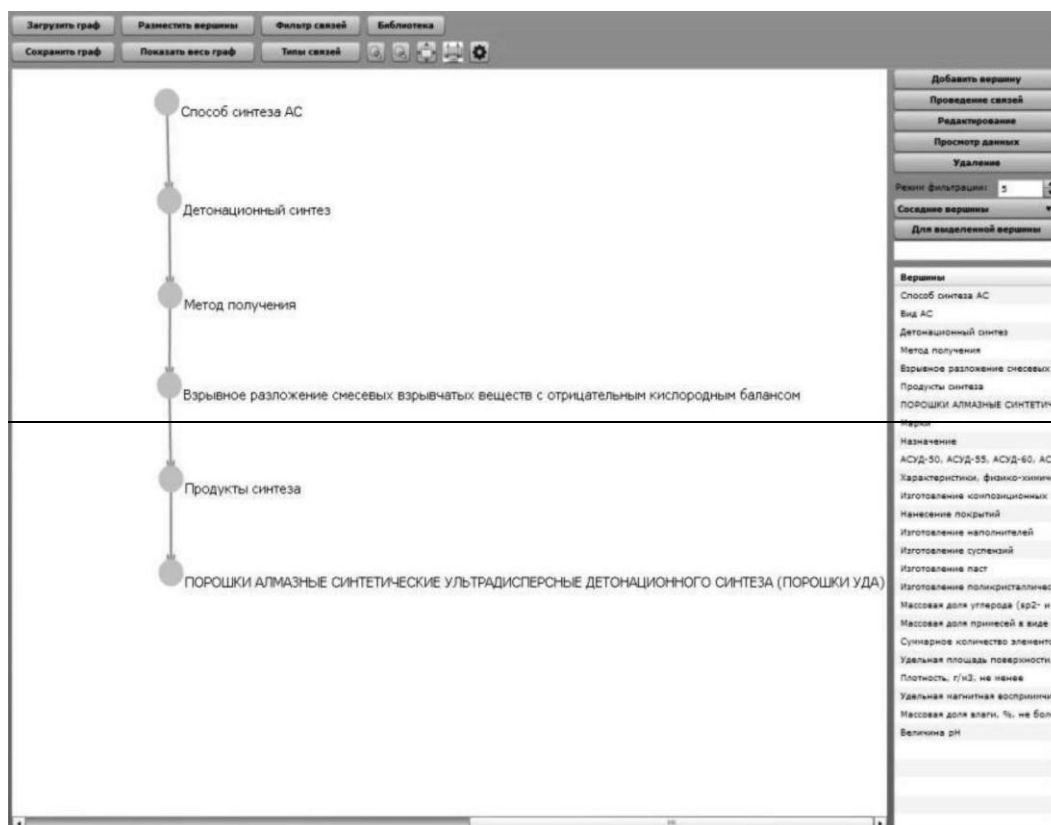
Для примера на рис. 3 показаны отдельные графы объектов приведенной онтолого-тезауральной подсистемы «Наноалмазные порошки»: «Способ синтеза», «Марки, назначение» и «Марки, характеристики, физико-химические показатели», сформированные системой «GraphEditor». В экранной форме выводится термин, для которого строится дерево ассоциированных с ним понятий (дочерних элементов).

Выводы

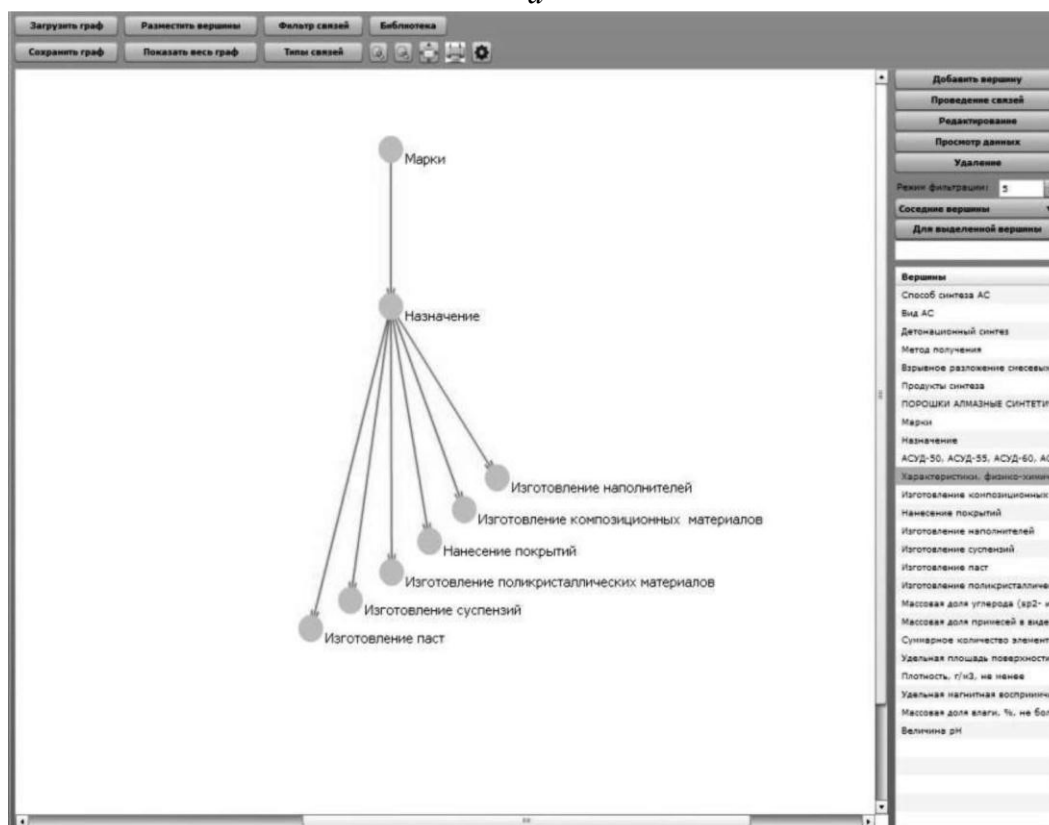
Разработанные программные продукты позволяют объединить электронный тезаурус, онтологию и корпоративные базы данных в единую систему их управления, упростить поиск и восприятие информации пользователем, а также повысить эффективность анализа данных как в материаловедческих (числовых), так и полнотекстовых базах данных (отчетов по научно-исследовательским работам, патентов, архивных файлов, информации в сети Интернет и др.).

Использование программы визуализации позволяет оптимизировать поиск, выборку и классификацию документов.

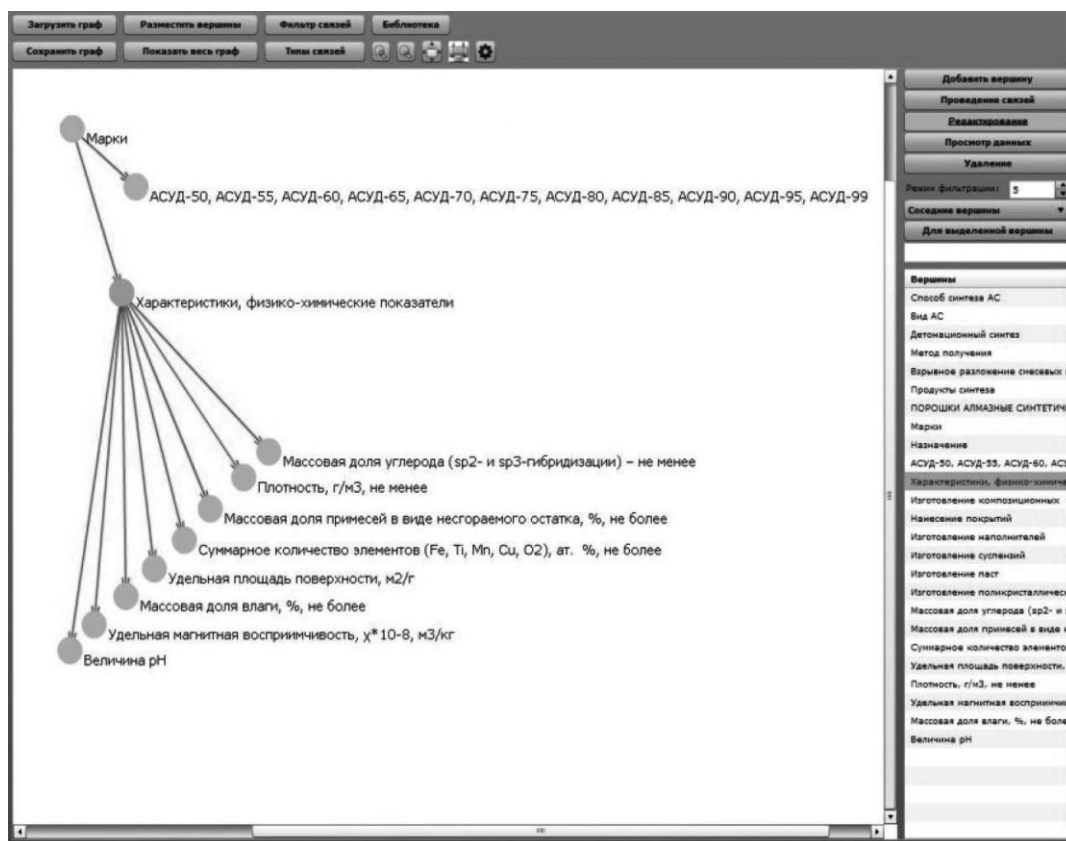
Создаваемые в ИСМ программные продукты для интеллектуального поиска и анализа информации позволяют организовать единое информационное пространство ИСМ, систематизировать и оптимизировать работу с большими массивами электронных информационных ресурсов, осуществлять интерактивный поиск и интеллектуальный анализ накопленных и новых данных в Про «СТМ».



а



б



6

Рис. 3. Представление графов для объектов «Способ синтеза» (а), «Марки, назначение» (б) и «Марки, характеристики, физико-химические показатели» (в)

Presents software application for visual presentation for the subject area “Superhard Materials” based on ontology and thesaurus approach.

Key words: *ontology, thesaurus, intelligent analysis, information system, knowledge base.*

Викладено підхід до програмної реалізації візуального подання інформації в базі знань предметної області «Надтверді матеріали» на базі онтолого-тезаурусного аналізу.

Ключові слова: *онтологія, тезаурус, інтелектуальний аналіз, інформаційна система, база знань.*

Литература

1. Онтологический подход к построению базы знаний «Сверхтвердые материалы» / В. Н. Кулаковский, А. А. Лебедева, К. З. Гордашник и др. // Штучний інтелект. – 2008. – № 4. – С. 91–102.
2. Интегрированная модель предметной области «Сверхтвердые материалы» / В. Н. Кулаковский, А. А. Лебедева, И. В. Скворцов и др. // Сверхтвердые материалы. – 2009. – № 5. – С. 90–91.
3. Электронный информационно-поисковый тезаурус предметной области «Сверхтвердые материалы» как формальная система знаний / В. Н. Колодницкий, В. Н. Кулаковский, А. А. Лебедева и др. // Породоразрушающий и металлообрабатывающий инструмент – техника и технология его изготовления и применения: сб. науч. тр. – К.: ИСМ НАН Украины, 2010. – Вып. 13. – С. 362–366.

4. Интеллектуальный анализ текстовой информации в системе управления базами знаний в области создания и применения сверхтвердых материалов / А. А. Лебедева, В. В. Цегельнюк, В. Н. Кулаковский и др. // Синтез, спекание и свойства сверхтвердых материалов: сб. науч. тр. / Н. В. Новиков (глав. ред.) и др. – К.: Логос, 2010. – С. 169–178.
5. Лебедева А. А., Гордашник К. З., Чистяков Е. М. Анализ информации в области создания и применения сверхтвердых материалов с использованием программного комплекса системы управления базами знаний // Интеллектуальные системы принятия решений и проблемы вычислительного интеллекта: материалы междунар. конф. – Херсон: ХНТУ, 2011. – Т. 2. – С. 50–53.
6. Построение автоматизированной онтолого-тезаурусной системы управления знаниями в предметной области «Сверхтвердые материалы»: отчет по теме 2204 / ИСМ им. В. Н. Бакуля НАН Украины. – № ГР 0111U000634. – К., 2013. – 207 с.
7. Величко Ю. В., Приходнюк В. В. Технологическое средство графического проектирования компьютерных онтологий // Междунар. науч.-практ. конф. «Актуальные проблемы подготовки специалистов ИКТ» (АППСИКТ-2013), 15–19 мая 2013 год, г. Хмельницкий. – Сумы: Сумск. гос. ун-т, 2013. – Ч. 2. – С. 38–43.

Поступила 03.06.14

УДК 621.921:547.639

Е. А. Пашенко, д-р техн. наук, **О. В. Лажевская**, канд. техн. наук,
А. Н. Черненко, **Д. А. Савченко**, **А. Г. Довгань**

Институт сверхтвердых материалов им. В.Н. Бакуля НАН Украины, г. Киев

СИНТЕЗ МОДИФИЦИРОВАННЫХ ЭПОКСИДНЫХ ОЛИГОМЕРОВ С ЗАМЕСТИТЕЛЯМИ НА ОСНОВЕ КАРКАСНЫХ СОЕДИНЕНИЙ И ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ИХ ОТВЕРЖДЕНИЯ

ЧАСТЬ 2. ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ОТВЕРЖДЕНИЯ МОДИФИЦИРОВАННЫХ ОЛИГОМЕРОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИОННЫХ ИНИЦИАТОРОВ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ. ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО- МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ МОДИФИЦИРОВАННЫХ ЭПОКСИДНЫХ ОЛИГОМЕРОВ И ПОРОШКОВ СТМ

В статье рассматриваются кинетические закономерности отверждения модифицированных эпоксидных олигомеров метакрилатом цинка. Показано образование в процессе отверждения мицеллоподобных группировок из 6–10 молекул метакрилата цинка. Исследованы физико-механические свойства отвержденных композитов. Показана их высокая теплостойкость, подтверждено непосредственное вхождение металлов (меди, марганца) в полимер в виде ионов, а также кластеров размером до 10 нм.

Ключевые слова: полимерные композиты, адамантан, комплексы металлов

Введение

Было показано, что массивные функционализированные фрагменты, введенные в полимерную сетку эпоксидных олигомеров, способны образовывать комплексные соединения с солями различных металлов. В подобных системах переходы, связанные с