ИПМ им.М.В.Келдыша РАН

Абрау-2017 • Труды конференции

А.О. Еркимбаев, В.Ю. Зицерман,
Е.К. Ключкина, Г.А. Кобзев,
В.А. Серебряков, К.Б. Теймуразов,
Р.И. Хайруллин

**Система хранения и интеграции
численных данных по
теплофизическим свойствам веществ**

Рекомендуемая форма библиографической ссылки

Еркимбаев А.О., Зицерман В.Ю., Ключкина Е.К., Кобзев Г.А., Серебряков В.А., Теймуразов К.Б., Хайруллин Р.И. Система хранения и интеграции численных данных по теплофизическим свойствам веществ // Научный сервис в сети Интернет: труды XIX Всероссийской научной конференции (18-23 сентября 2017 г., г. Новороссийск). — М.: ИПМ им. М.В.Келдыша, 2017. — С. 137-149. — URL: <http://keldysh.ru/abrau/2017/50.pdf>
doi:[10.20948/abrau-2017-50](https://doi.org/10.20948/abrau-2017-50)

Размещена также [презентация к докладу](#)

Система хранения и интеграции численных данных по теплофизическим свойствам веществ

А.О. Еркимбаев¹, В.Ю. Зицерман¹, Е.К. Ключкина², Г.А. Кобзев¹,
В.А. Серебряков², К.Б. Теймуразов², Р.И. Хайруллин²

1 ОИВТ РАН

2 ВЦ РАН

Аннотация. Предложена схема интеграции численных данных по теплофизическим свойствам веществ, изучена специфика предметной области и спроектирована онтология, допускающая использование методов Semantic Web. Показано, как исходные разнородные данные по свойствам индивидуальных веществ могут быть связаны в рамках сетевого пространства Linked Open Data.

Ключевые слова: теплофизика, онтология, базы данных, информационная система

1. Введение

Теплофизика относится к дисциплинам, в которых работа с численными данными занимает центральное место. Теплофизические свойства веществ – набор естественнонаучных данных по физическим, химическим, эксплуатационным свойствам. Такие данные широко представлены в печатных пособиях и мировых БД для широчайшего круга веществ: чистых и растворов, органических и неорганических, наноструктур и материалов, характеризующихся технологией изготовления.

Проявляется повышенное внимание к первичным данным с изучением их достоверности, воспроизводимости, согласованности разнородных свойств. Развитие теплофизики сопровождается нарастающим производством новых данных, публикуемых в десятках журналов различного профиля. Современный этап характеризуется выделением систематизации данных в самостоятельное направление, наряду с экспериментом и теорией, а также повсеместным переходом от печатной формы к базам данных (БД).

Большой проблемой на пути интеграции теплофизических данных является многообразие форматов представления в отсутствие общепринятых рецептур и стандартов записи. В то же время наблюдается резкое расширение видов вновь изученных объектов при множестве факторов, определяющих их свойства. Проблемой является также необходимость удовлетворить нарастающие требования к аттестации неопределенности, представляя целый набор характеристик: стандартная неопределенность, доверительный интервал

и т.п. Наконец, при работе с численными данными приходится учитывать, что в публикациях и БД используют несколько типовых форм, а именно: табличную, графическую и математическую (в виде хранимых формул или программных кодов). Графическая форма иллюстрирует характер зависимостей, рассеяние опытных точек и т.п. Табличная форма наиболее надежна в передаче данных, легко контролируема в отношении пропусков, ошибок в знаке или порядке величин и т.п. Математическая форма, избавляя от интерполяции, требует повышенной тщательности в обнаружении ошибок, легко вылавливаемых в табличной форме. Доминирующей формой в экспериментальных работах и справочниках является именно табличная, а математическая форма дополняет табличную, обеспечивая удобство для пользователя и работу вычислительных приложений.

В данной работе рассматривается подход по систематизации, в первую очередь, численных данных, получаемых в результате расчетов и экспериментов, и при этом сохраняющий возможность дальнейшего расширения и дополнения формальной модели предметной области. Авторы работы также провели ряд попыток интеграции модели данных со сторонними информационными ресурсами, содержащими данные близкой тематики.

2. Примеры существующих систем

Среди большого разнообразия информационных ресурсов, посвященных теплофизике, можно выделить два основных типа систем:

1. Системы, консолидирующие данные об информационных ресурсах по теплофизике на уровне интерфейса. Предоставляют доступ к другим информационным ресурсам (БД, публикации, системы типа 2) на уровне внешних ссылок.

2. Системы, содержащие данные узкого профиля.

- 2.1. Данные, обусловленные специфическими условиями проведения опытов или расчетов.

- 2.2. Данные о константах.

- 2.3. Данные об измерениях некоторых фиксированных свойств.

В качестве примера системы первого типа можно привести сайт национального института стандартов США (www.nist.gov), открывающий доступ к множеству автономных БД по физико-химическим свойствам веществ, различающихся структурой и семантикой. Преимуществом представления данных в таком виде является широкое покрытие тематик исследований, производимых учеными, но, как правило, отсутствует возможность целенаправленного поиска интересующих физических величин или свойств веществ. Детальную информацию приходится искать в каждом отдельно взятом ресурсе.

Примерами систем второго типа служат различного рода справочники и БД. *Пример 1:* справочник по термическим константам веществ (<http://www.chem.msu.ru/cgi-bin/tkv.pl?show=welcome.html>), каждая константа

имеет описание (агрегатное состояние, название, химическая формула), каждому численному измерению присвоена библиографическая ссылка на источник данных. *Пример 2:* база данных ИВТАНТЕРМО (частичная выборка представлена по адресу: <http://www.chem.msu.ru/rus/handbook/ivtan/welcome.html>), данные приводятся для четырех свойств: Ср, F, S, H; в ограниченном диапазоне температур. *Пример 3:* справочник CODATA Fundamental Physical Constants, содержит информацию только о фундаментальных константах. Для одной и той же физической величины (например, atomic mass constant) создано три гиперссылки на отдельные страницы, данные на которых отличаются только единицами измерения.

Вышеперечисленные системы, как правило, имеют специализированную структуру хранения данных, которая позволяет покрыть спектр данных из суженной предметной области, облегчают работу пользователя в неоднородной среде, исключая, однако, возможность построения структурированных запросов. Если для расчетов помимо значений фундаментальных констант требуются еще какие-либо численные значения других физических величин, то необходимо искать ресурс, который их содержит. Например, при попытке найти данные на сайте www.nist.gov по теплоемкости выводится целый список ссылок на публикации или другие информационные ресурсы, в частности на вычислительные программы или, как в случае, с БД ИВТАНТЕРМО, на список страниц с ограниченным набором документов, содержащих ограниченный набор данных по ограниченными наборам свойств.

2. Постановка задачи

В условиях крайнего многообразия тематик и типологий информационных ресурсов при проектировании модели наиболее практичным оказывается подход, сужающий исходные понятия и структуры.

В практических задачах по теплофизике подавляющее большинство данных определяется одним параметром, как правило, температурой, поскольку свойства твердой и жидкой фаз в достаточно широком диапазоне проявляют слабую барическую зависимость. Применительно к газовой фазе, практика работы в химической промышленности показывает, что для учета неидеальности допустимо ограничиться первыми поправками по плотности (или давлению), которые сами являются функциями температуры. Не предполагая универсальность этого тезиса, можно принять, что подавляющее большинство публикуемых теплофизических данных сводится к представлению температурных функций, как, например, теплоемкость, энтальпия, вязкость и т.п., а также численных констант, например, критических постоянных вещества. Если рассматривать чистые вещества, игнорируя барическую зависимость, мы приходим к задаче проектирования модели для описания однотипных данных, представленных константами и функциями одной переменной.

Ограничения на предметную область:

1. Рассматриваем только чистые вещества.
2. Все физические величины делятся на три типа: функции, константы, аргументы.
3. Все рассматриваемые физические величины-функции считаются функциями от двух аргументов — температуры и давления.

Обобщенные требования к модели предметной области:

1. Хранение данных, отвечающих ограничениям предметной области, в рамках единой информационной модели с возможностью поиска по веществам и свойствам.
 - 1.1. Мета-описание теплофизических данных (вещество, агрегатное состояние, физическая величина, источник данных).
 - 1.2. Численные данные (значения физических величин, размерности, типы и значения неопределенностей).
2. Механизм поиска и связывания (интеграции) эквивалентных сущностей в сторонних информационных ресурсах.
3. Механизм проверки закономерностей.

3. Система хранения и интеграции численных данных

Описание принципов хранения данных в схеме БД.

1. Любой документ, содержащий теплофизические данные, характеризуется такими базовыми понятиями как химическое вещество, агрегатное состояние, а также источником данных, перечнем физических величин.
2. Каждой паре химическое вещество и агрегатное состояние соответствуют наборы данных, где приводятся численные значения, которые, в свою очередь, описываются единицами измерения и неопределенностями. Причем следует понимать, что неопределенностей, описывающих каждую точку измерения, может быть больше одной (разные типы неопределенностей), а также источник данных может быть задан в каждой точке.

Реляционная модель данных обладает достаточно обширным набором преимуществ: удобство доступа, хранения, модификации данных, обеспечивает соответствие имеющейся в БД информации ее внутренней логике и структуре (например, можно задавать ограничения уникальности, непустоты значения, ограничения на количество знаков в атрибуте и т.д.). Однако целостность БД не гарантирует достоверности содержащейся в ней информации, хотя и обеспечивает правдоподобность, отвергая заведомо невероятные, невозможные значения. Для проверки соответствия хранящихся в БД фактов реальному миру требуется обладание полными знаниями как о содержимом БД, так и о реальном мире. Для определения целостности БД требуется лишь обладание знаниями о содержимом БД и о заданных для неё правилах. Поэтому СУБД может лишь контролировать целостность БД, но принципиально не в состоянии

контролировать достоверность БД. Следовательно, наличие одной лишь реляционной модели недостаточно для интеграции данных.

4. Интерфейсы доступа к данным

Пользователю предоставляется возможность выбора химического вещества, агрегатного состояния и интересующих физических величин и произвести поиск данных в БД. Соответствующий интерфейс представлен на рис. 1. Результатами поиска будут являться пары вещество-состояние и все теплофизические свойства, которые доступны для поисковой пары. Также можно искать всевозможные тройки вещество-состояние-свойство. На рис. 2 представлен результат поиска для вещества *Iron* в состоянии *Solid* и свойства *Cp*. Система выдала все возможные модификации твердого состояния для железа, в которых свойство *Теплоемкость изобарная* измеримо

Search:

substanceName	chemicalFormula	substanceType
☐ Neon	Ne	chemical element
☐ Iron	Fe	chemical element
☐ Oxygen positive ion	O[2+]	chemical element

Search:

phaseName	phaseType
☐ gas	single phase
☐ ideal gas	single phase
☐ triple point	triple phase
☐ critical point	triple phase
☐ liquid	single phase
☐ solid -> liquid	transition phase
☐ solid -> solid	transition phase
☐ solid	single phase
☐ liquid solid	double phase

Search:

quantityName	quantityDesignation
☐ Temperature	T
☐ Pressure	P
☐ Charge	Z
☐ Pressure of melting	Pmelt
☐ Potential of ionization	I
☐ Enthalpy of formation at 0K	DHF(0)
☐ Enthalpy of transition	DHtrans
☐ Temperature of transition	Ttrans
☐ Isobaric heat capacity	Cp
☐ Second virial coefficient	B
☐ Pressure in critical point	Pc
☐ Temperature in critical point	Tc

Get Data

Рис. 1. Страница для поиска численных данных

Search:

Substance ▲	State ◆	Details		Physical Quantities			
Iron	solid	additional name:	bcc-fm	Cp	J/mol/K ▾		
		magnetic type:	ferromagnetic		quantity range	0	1000
		crystal type:	body-centered cubic				
Iron	solid	additional name:	bcc-pm	Cp	J/mol/K ▾		
		magnetic type:	paramagnetic		quantity range	0	1000
		crystal type:	body-centered cubic				
Iron	solid	additional name:	fcc-pm	Cp	J/mol/K ▾		
		magnetic type:	paramagnetic		quantity range	0	1000
		crystal type:	face-centered cubic				

Get data

Рис. 2. Страница результатов поиска.

5. Интеграция данных

Для обеспечения согласованности структуры и семантики данных необходимо наличие общей информационной модели и общего словаря для определения смысла основных понятий. Удобнее всего для формализации модели использовать онтологии, так как они допускают проектирование семантических связей (аксиом онтологии) между классами, позволяя более детально описать предметную область. Поэтому, в дальнейшем, под информационными ресурсами будем понимать системы, которые в том или ином виде представляют данные в формализованном с помощью онтологии виде. В качестве спецификации языка описания выбран OWL DL.

Свойства спецификации:

1. Полнота вычислений — все логические заключения будут гарантированно вычислимыми;
 2. Разрешаемость — все вычисления завершатся за конечное время.
- Ограничения: класс не может сам быть экземпляром другого класса.

Основной проблемой на пути интеграции данных является отсутствие стандартизации процессов интеграции данных друг с другом. Как следствие,

возникает огромное разнообразие терминов и отсутствие ссылок на структурно и по смыслу связанные объекты.

Поэтому в рамках обзора тематически близких информационных ресурсов необходимо сформулировать список требований, необходимых для эффективного поиска и связывания с найденными понятиями.

Для организации поиска данных в первую очередь требуется наличие в базе ресурса таких понятий, которые по смыслу могут быть сопоставлены с уже имеющимися понятиями модели. Для связывания так же требуется, чтобы объекты с точки зрения онтологии имели один и тот же тип (в рамках OWL DL экземпляр и класс существенно различные объекты). Желательно, чтобы имелись численные данные, относящиеся к эквивалентным понятиям, однако при их отсутствии иерархия, в которую входит эквивалентный концепт, также может представлять интерес с точки зрения возможности расширить имеющуюся модель онтологии.

Следующее требование касается способа извлечения данных из стороннего ресурса. Наиболее предпочтительным является наличие HTTP- или SPARQL-точки доступа. Допустимой является также возможность локальной загрузки данных, однако этот подход связан с дополнительными затратами на хранение локальной копии данных.

Наконец, важное требование состоит в том, что специфика языка описания модели данных стороннего ресурса не должна противоречить специфике языка описания существующей модели (OWL DL), чтобы обеспечить возможность расширения модели онтологии за счёт понятий, описанных в сторонней модели.

Краткое описание источников данных о веществах, с которыми были попытки интегрироваться:

1. ChemAxon [5] – портал по хемоинформатике, предоставляющий приложения и сервисы для работы с химическими величинами. ChemAxon основывается на онтологии ChEBi (Chemical Entities of Biological Interest), в которой приводится классификация химических веществ, выделяются связи между ними, есть классы Substance и Pure Substance [6]. ChemAxon позволяет локально загрузить данные и предлагает использовать приложение JChemBase для управления скачанными данными. Кроме того ChemAxon предоставляет REST API для получения данных в формате JSON, однако требуется лицензия для пользования этим и другими сервисами портала.

2. DBPedia [7] – база знаний, содержащая структурированную информацию из Википедии. Основывается на обширной онтологии, охватывающей самые разнообразные понятия, в том числе понятия химического вещества, химического элемента. DBPedia предоставляет открытую SPARQL-точку доступа, позволяющую отправлять запросы к Википедии и получать данные о веществах (включая численные, например, температуру кипения, температуру плавления, массу и др.).

3. Bioontology [8] – хранилище биомедицинских онтологий. Предоставляет доступ к множеству иерархических структур, упорядочивающих знания в области биологии, медицины, химии. Bioontology имеет API сервисы, позволяющие получать данные из всех (или нескольких выбранных) онтологий портала посредством HTTP-запросов. Особенность онтологий портала заключается в том, что они не содержат экземпляров и каких-либо численных данных, а представляют собой иерархию классов.

4. ChemSpider [9] – база веществ и их свойств, в том числе теплофизических. Основывается на онтологии ChemAxiom, представляющей собой набор онтологий-модулей, каждая из которых описывает отдельную подобласть химии. Главной сущностью ChemAxiom является Вещество. ChemSpider ведёт разработку SPARQL-точки доступа и на текущий момент предоставляет возможность с помощью HTTP-запроса получить данные о веществе по его формуле в формате XML. Данные о некоторых веществах уже предоставляются в формате RDF.

6. Организация поиска в сторонних информационных ресурсах

Кроме рассмотренных и описанных в обзоре различий в модели хранимых данных, способе их представления, разные ресурсы отличаются способом извлечения данных, архитектурой запроса, форматом предоставляемых в ответ данных, кодировкой этих данных, структурой ответа на запрос. В таких условиях нетривиальной становится задача проектирования универсального механизма, позволяющего осуществлять поиск по различным источникам.

В основу механизма поиска было решено положить HTTP-запрос типа GET, так как такой способ извлечения данных поддерживается всеми выбранными информационными ресурсами. Окончательным форматом представления ответа на запрос выбран формат JSON как наиболее практичный как с точки зрения конвертации из других форматов, так и с точки зрения дальнейшей обработки и использования.

Для унификации процесса отправки HTTP-запроса и обеспечения дальнейшей пополняемости списка ресурсов, к которым может быть направлен запрос, в существующую реляционную модель данных добавлена структура, в которой хранятся списки настраиваемых параметров запроса к каждому доступному ресурсу.

Интерфейс поиска в сторонних источниках представлен на рис. 3.

7. Способы связывания со сторонними данными

Как уже было упомянуто, связывание существующих понятий и данных с данными, найденными в сторонних информационных ресурсах, необходимо для поддержания актуальности и пополняемости разрабатываемой системы.

Были рассмотрены различные подходы к интеграции теплофизических данных и описаны их недостатки.

В основе создаваемой системы лежат реляционная и онтологическая модели предметной области, что позволяет рассмотреть возможности интеграции данных на уровне БД или на уровне онтологии.

Связывание на уровне базы данных подразумевает внесение в таблицы БД новых данных, включая численные, полученные в результате поиска в сторонних информационных ресурсах. Такой подход требует гарантированной корректности полученных данных и их однозначного соответствия структуре существующих данных. В условиях большого многообразия форм организации и моделей данных, представленных в открытом доступе, такой подход становится крайне сложным. Для каждого нового ресурса, по которому хотелось бы вести поиск связанных сущностей, необходимо будет индивидуально разрабатывать отображение (вообще говоря, нетривиальное) модели хранимых на стороне данных на существующую модель. Это противоречит идее создания универсального механизма связывания.

Рассмотрим связывание данных на уровне онтологии. При соблюдении требования о непротиворечивости языков описания онтологических моделей становится возможным расширение существующей модели онтологии за счёт понятий, описанных сторонним ресурсом. Это расширение достигается путём включения в описание концепта свойства `owl:sameAs`, устанавливающего соответствие между субъектом и объектом. Тройка вида

Concept-A owl:sameAs Concept-B

указывает, что концепты А и В являются эквивалентными понятиями [10]. При этом все свойства, которыми обладает концепт В, становятся свойствами концепта А и наоборот. Таким образом, можно установить связь между экземпляром нашей онтологии и найденным в стороннем источнике эквивалентным по смыслу экземпляром, переняв при этом все свойства стороннего экземпляра и включив всю его иерархию связей в свою модель данных.

Важно отметить, что свойство `owl:sameAs` определено только для экземпляров (но не для классов онтологии), поэтому предложенный способ связывания эффективен только в том случае, если в результате поиска получены эквивалентные сущности типа `owl:individual`. Это ограничение выполняется, в частности, при поиске по источнику ChemSpider.

В случае если полученные сущности имеют тип `owl:class` (как, например, при поиске по Bioontology), необходим другой подход к связыванию. Для установления связи между классами онтологии в языке OWL определено свойство `owl:equivalentTo`. Оно позволяет задать перечень условий, при которых один класс онтологии эквивалентен другому классу. Например, пусть определены классы `Person` и `Man` и свойство `hasGender`. Тогда утверждение

Man EquivalentTo Person and hasGender value "male"

говорит о том, что любой индивид класса Person, обладающий свойством hasGender со значением “male”, является индивидом класса Man [11].

Таким образом, при нахождении в стороннем источнике класса, эквивалентного по смыслу существующему в онтологии классу, автоматически генерируется DL-query (запрос к онтологии) описанного выше вида. Результатом выполнения такого запроса будет установление свойства owl:equivalentTo и, следовательно, связи между классами.

Если для экземпляра нашей онтологии удалось найти эквивалентный по смыслу объект типа owl:class, то для установления связи нужно сначала создать класс в нашей онтологии, к которому будет привязан найденный объект. Для этого на основании запроса к онтологии генерируется новый класс. Рассмотрим этот процесс на примере.

Пусть Neon является экземпляром класса Chemical Substance, и в одном из сторонних источников найден эквивалентный ему объект Neon-Class типа owl:class. Тогда в онтологии создаётся подкласс NewNeon класса Chemical Substance:

NewNeon owl:SubClassOf ChemicalSubstance

и генерируется запрос, устанавливающий между Neon-Class и NewNeon отношение owl:equivalentTo.

Итак, определены способы установления связи между экземплярами нашей онтологии и экземплярами или классами онтологии стороннего ресурса. Работа сервера по добавлению в онтологию необходимых утверждений описана в контроллере BindController.java. Добавлять в онтологию новые утверждения позволяет библиотека Jena [12].

Дальнейшие рассуждения касаются процесса выбора, с какими объектами из списка найденных связывать имеющиеся объекты. Автоматическое принятие решений было бы возможно при однозначном соответствии имён сущностей в нашей онтологии с именами, используемыми сторонними ресурсами, или наличии другого критерия, определяющего возможность (и необходимость) связывания. Однако несогласованность имён и структур данных в различных источниках не позволяет сформулировать правила автоматического принятия решения.

В такой ситуации было решено возложить ответственность за выбор связываемых сущностей на эксперта-пользователя системы и предоставить ему интерфейс для связывания (рис. 4).

Ontology

chemical substance

Класс описания предметной области, характеризует понятие Химическое Вещество.

Search:

Search:

Object Properties

hasAConstantQuantity

Data Properties

hasChemicalFormula

hasChemicalName

Choose instance and resource to search for related objects

Search:

Instances

☐ iron	info
☐ Neon	info
☐ Oxygen	info
☒ oxygen_positive_ion	info

hasChemicalFormula:
O[2+]

hasChemicalName:
oxygen positive ion

hasAConstantQuantity:
PQ_Charge

Search:

Resources

☐ bioontology
☒ chemspider

sameAs:

Get data

Рис. 3. Интерфейс поиска в сторонних источниках

List of available data			
ChemSpider Id. Link to source	Download ChemSpider Image	ChemSpider Systematic Name	ChemSpider Formula
☐ Link		molecular oxygen	O2
☐ Link		Dioxidanediide	O2

Рис. 4. Страница с результатами поиска. Интерфейс связывания

8. Заключение

В результате проведенной работы были рассмотрены и проанализированы различные информационные ресурсы по смежным с теплофизикой темам. Сформулированы требования к ресурсам, необходимые для организации эффективного поиска и связывания с понятиями существующей модели предметной области. Выделен список источников, удовлетворяющих выдвинутым требованиям. Разработан механизм поиска и извлечения из выбранных источников данных о сущностях, эквивалентных экземплярам существующей онтологии. Поиск и извлечение данных осуществляются единообразно по всем доступным ресурсам с использованием HTTP-запросов. Определен и реализован способ связывания найденных в сторонних источниках объектов с экземплярами существующей онтологии. Для создания связи использовались инструменты библиотеки Jena.

На текущий момент реализованы следующие интерфейсы пользователя:

1. для просмотра терминологических словарей (вещество, состояние, физическая величина);
2. для просмотра численных данных по выбранным веществу, состоянию;
3. для просмотра модели онтологии, свойств её классов и экземпляров;
4. для организации поиска интересующего экземпляра онтологии в любом из доступных источников;
5. для просмотра результатов поиска в форме, не зависящей от источника;
6. для выбора сторонних сущностей, пригодных для связывания с экземплярами онтологии.

На текущий момент ведется работа по внедрению системы логического вывода для анализа данных в онтологии и доработка интерфейсов пользователя.

Литература

1. Еркимбаев А.О, Зицерман В.Ю, Кобзев Г.А, Фокин Л.Р. Логическая структура физико-химических данных. Проблема стандартизации и обмена численными данными. Журнал физической химии, 2008. Т. 82. №1. С. 20 – 31.
2. Еркимбаев А.О, Жижченко А.Б, Зицерман В.Ю, Кобзев Г.А, Сон Э.Е, Сотников А.Н. Интеграция баз данных по свойствам вещества. Подходы и технологии. Научно-техническая информация. Сер.2. Информационные процессы и системы. ВИНТИ РАН, 2012. Т.39, №8. С. 1 – 8.
3. Серебряков В.А., Теймуразов К.Б., Хайруллин Р.И., Еркимбаев А.О., Зицерман В.Ю., Кобзев Г.А., Трахтенгерц М.С. Практическая реализация системы интеграции теплофизических данных на основе онтологической модели предметной области, «Инфраструктура научных информационных ресурсов и систем», сборник избранных научных статей, ВЦ РАН, ИКИ РАН. Т.1, С. 87 – 111.
4. Атаева О.М, Еркимбаев А.О., Зицерман В.Ю., Кобзев Г.А., Серебряков В.А., Теймуразов К.Б., Хайруллин Р.И. Интеграция данных по теплофизическим свойствам веществ методами онтологического моделирования “Электронные библиотеки: перспективные методы и технологии, электронные коллекции” XV Всероссийская научная конференция RDCL’2013. Сборник трудов соответствующей конференции Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова (2013). С.63.
5. ChemAxon – Software for Chemistry and Biology [Электронный ресурс]. – Электрон.дан. – URL: <https://www.chemaxon.com/> (дата обращения 15.10.2016).
6. Chemical Entities of Biological Interest (ChEBI) [Электронный ресурс]. – Электрон.дан. – URL: <https://www.ebi.ac.uk/chebi/> (дата обращения 21.09.2016).
7. DBpedia [Электронный ресурс]. – Электрон.дан. – URL: <http://wiki.dbpedia.org/> (дата обращения 25.11.2016).
8. NCBO BioPortal [Электронный ресурс]. – Электрон.дан. – URL: <https://bioportal.bioontology.org/> (дата обращения 26.11.2016).
9. ChemSpider [Электронный ресурс]. – Электрон.дан. – URL: <http://www.chemspider.com> (дата обращения 10.12.2016).
10. OWL Web Ontology Language Guide [Электронный ресурс]. – Электрон.дан. – URL: <https://www.w3.org/TR/owl-guide/> (дата обращения 20.02.2017).
11. Язык Web-онтологий OWL 2: Начальное руководство (Перевод PhD Щербак Сергея) [Электронный ресурс]. – Электрон.дан. – URL: http://shcherbak.net/translations/ru_owl2primer_shcherbak_net.html (дата обращения 02.03.2017).
12. Apache Jena - Jena Ontology API [Электронный ресурс]. – Электрон.дан. – URL: <https://jena.apache.org/documentation/ontology/> (дата обращения 21.02.2017).