

# 材料科学数据库的发展现状

## Development of Material Scientific Databases

张乐福 谢长生 (华中理工大学)

Zhang Lefu Xie Changsheng (Huazhong University of Science & Technology)

[摘要] 介绍了国外材料科学数据库及其发展方向与数据标准,提出我国应在吸收国外先进技术基础上采取引进与开发并行的方法,建立自己的数据库系统并与国际信息网接轨,以适应国内外用户的实际需求和降低使用费用。

关键词: 科学数据库 材料 信息标准

[Abstract] Material scientific database is the foundation of modern manufacturing technologies and concepts, as well as the efficient method for learning material knowledge and using proper material products to reduce cost in making high quality products. In this article, material scientific databases and the material information standard are introduced.

**Keywords:** scientific database material information standard

### 1 前言

材料科学是社会的三大支柱之一,材料的合理选择和直接处理影响着产品的质量和成本,材料信息系统将对材料的研究、开发、生产、推广、使用以及材料科学知识的普及教育起着重要的作用<sup>[1]</sup>。发达国家不断提出信息战略目标,公共数据库建设每年都在飞速发展。其中,材料数据库占有重要的一部分。我国在这方面起步较晚,到目前为止,很少见到完善的材料数据库服务,而且水平较低,主要表现在:数据库规模小、服务质量差、标准化的工作不及时、投入少产值低、学科发展不平衡、商业化程度不高、低水平重复现象严重等<sup>[2~7]</sup>。因此,加快材料科学数据库建设已是摆在材料科学工作者面前的重要任务。

### 2 国外材料数据库系统

国外材料科学数据库系统已经成为现代产品设计和先进制造技术的支柱,其种类较多,可分为文献型和数值型,也可分为在线型和离线型。文献数据库主要以在线方式服务,而数值型材料数据库则主要在离线方式下使用。信息传播媒体有数据网、计算机网络和电子出版物,服务范围包括文献索引、性能实验数据、生产标准、商业信息、用于CAD/CAE的各种数据信息等。

根据主题,文献型材料数据库可分四类<sup>[8]</sup>:通用技

术、专业技术、工业应用、商业信息。

(1) 通用技术数据库:包括长期积累的大量材料工程技术文件,信息主要来自相关的核心刊物以及物理学和化学领域的技术报告;

(2) 专业材料数据库:涉及材料专业信息,来源包括核心刊物、主要会议以及其它类型的专业文献如专刊和各种图表、报告等,信息一般由专家收集和整理,其实用性非常强;

(3) 工业应用数据库:主要针对工业和技术领域的应用,结合工业界的特殊需要和特点组建而成,信息涉及一些其它数据库没有包括的文件;

(4) 商业信息数据库:包括为贸易、研究、工程设计服务的与商业有关的技术信息文件,如新产品及其生产和研究进程、销售、市场动向、标准等。

在线数据检索服务由专业信息机构如STN, DIALOG等提供,其信息丰富、更新及时、使用方便,非常适合大型机构和专家使用,但代价昂贵,不适合多数普通用户。离线型材料数据库系统,因其成本低和可在PC机上运行而占领了广大的市场。目前,比较流行的各种离线型选材系统示于表1<sup>[9]</sup>。

### 3 材料数据库系统的标准化

#### 3.1 标准化需求

优质廉价材料的选择、一致性材料信息的获得、对

各种复杂的材料性能数据的需求和群体“并行工程”设计方法对公共的材料信息数据库系统提出了全面的需求<sup>[10~19]</sup>。由于多数材料数据库系统采用不同的数据标准和数据库结构,不同系统之间不能直接进行数据交换,信息共享到了一定的限制。为了让用户在最大程

度上以最合理、最方便的方式受益于材料信息系统,减少重复性劳动和降低使用成本,ASTM E49 委员会在材料数据的标准化方面做了大量的工作<sup>[12]</sup>。图 1 为结构合理的材料数据系统联结和功能示意图<sup>[10]</sup>。特点有:

① 数据库结构适合多媒体数据,如表格、数据、文

表 1 选材数据库系统

名 称	开 发	说 明
PLASCAMS	Rapra	用于选择塑料,可以根据性能要求推荐材料和供应商
CHEM RES	Rapra	根据耐化学腐蚀性选择塑料
dataPLAS	Polydata	以散点图的形式,根据材料的力学与物理等性能要求选择塑料
CAPS 和 CAMPUS	Polydata	可提供热塑料的各种技术和商业数据
Rubber Consultant	Polydata	建立在智能平台上,可以按照超文本方式查询天然橡胶索引
PAL	Permabond	粘结剂和密封剂选择咨询系统
软盘金属材料数据库	Engineering Information Inc. 和 DTI 等联合开发	用于金属材料产品的推广和普及
软盘金属材料断裂韧性数据库	DWI	金属结构材料的实验数据
软盘金属材料表面粗糙度数据库	DWI	文献型表面行为信息数据库
NIST 陶瓷数据库	NIST (USA)	结构陶瓷热、机、耐腐蚀等性能数据库系统
M/ VISION	PDA	采用国际标准的多材料系统,提供与 CAD/CAE 的接口
剑桥选材系统 CMS	Granta	CAD 软件包,包含多种人工或天然材料,用于优化选材
Mat. DB	ASM International	包含多种材料,数据库可以单独使用

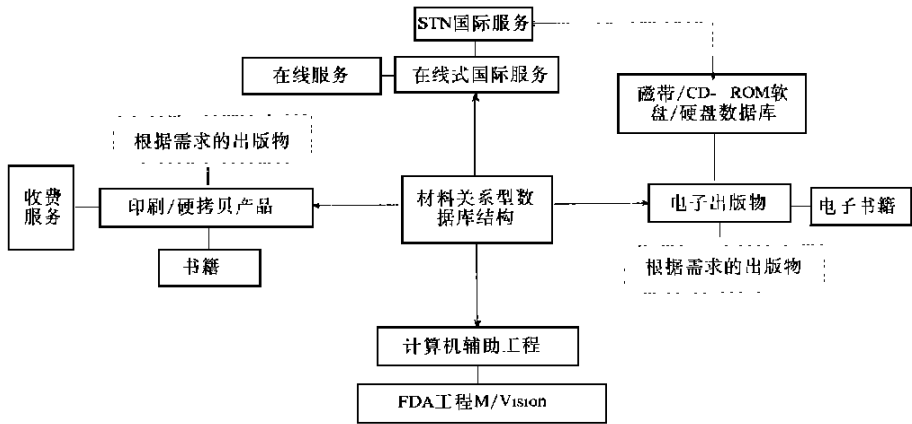


图 1 材料信息系统联结和功能示意图

字说明、超文本、图形、图象、音像等;

- ② 可通过各种不同方式、方法或传播媒体获得所需信息;
- ③ 数据录入简单,并且得到良好的一致性控制;
- ④ 独立于软件和硬件平台,数据库可以在任何关系

型数据库平台上运行;

- ⑤ 每一条信息只存贮一次,节约时间和空间,保证数据的准确性和一致性;
- ⑥ 数据结构的完整性可以得到保证;
- ⑦ 同义词词典可以帮助在标准化的数据库中查找

任何同类的信息。

### 3.2 材料数据标准

产品数据交换标准 STEP-ISO 10303 (Standard for Exchange of Product Data), 提供材料数据表示和交换机制<sup>[18]</sup>。没有产品数据交换标准时, 每一个应用程序都要将其数据格式转换为其它程序能够使用的数据格式。而在利用数据交换标准时, 每一个应用程序只要将其数据转换成标准的数据格式输出, 使用该标准的其它应用程序就全部可以共享这些数据<sup>[19]</sup>, 如图 2 所示。

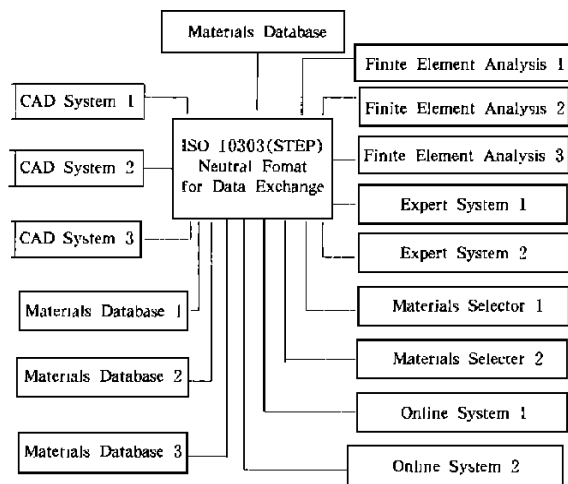


图 2 利用数据交换标准的材料数据共享

#### 3.2.1 材料数据

材料信息分为描述性信息、性能数据、性能数据有效条件三类。STEP 使用一种被称为 Express 的计算机语言来定义材料信息的实体、描述实体之间的关系。这种语言也用于定义规则、约束条件和组成函数。目前, 材料信息被分为材料产品、性能集、数据环境和支撑资源四部分。

在 STEP 中, 制造产品所用的材料本身也被看成是产品, 一个材料产品由标识、成分、来源、说明、处理历史、物理状态、形状等七类数据描述。

在一定条件下, 一种材料产品具有一个性能集, 每个性能都有性能名称 (Property Name)、性能指标数值 (Data Value)、度量单位 (Measurement Unit)、数据来源 (Data Source)、资格 (Qualifier)、资格来源 (Qualifier Source) 等属性, 并用资格属性描述数据的数值类型, 以“测量结果” (Measured)、 “平均结果” (Average) 和 “可用于设计” (Design Allowable) 等词描述取值情况。资格属性分组聚集, 可以定义一个数据环境。

#### 3.2.2 材料研究、生产、使用之间的联系

标准的材料科学数据库系统建立之后, 材料的研究、开发、生产、销售、使用和改进等工作, 将在一个高效的环境里通过计算进行, 缩短了材料开发周期, 为现代化的产品设计和生产提供强有力的支持, 如图 3 所示。

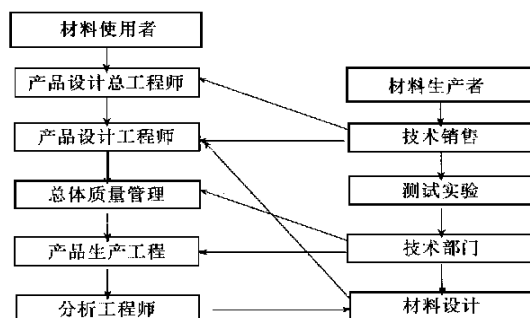


图 3 材料使用和和生产者之间通过标准材料数据库的数据交换

#### 3.2.3 材料性能实验数据进入数据库的流程

材料数据并非一成不变, 而材料性能测试结果又与实验条件、方法、试样标准、材料本身的批次、实验单位、操作人员等很多因素有关, 为保证进入数据库数据的准确性就成为材料信息系统中的一个重要前提。

性能实验, 应采用不同批次材料制成的大量试样由几个不同的权威测试机构, 按照一致的实验标准进行。实验结果先经测试机构筛选, 然后由审核专家小组进行分析、组织、提炼, 方可将按照概率统计形式生成的满足设计需要的可靠数据, 连同材料的各种历史记录, 一起送入设计材料参数数据库, 以供选材系统、有限元分析软件、CAD/CAE 调用。

## 4 发展我国材料数据库系统

我国已经建立了少数的材料数据库系统, 但目前能够投入实际使用的还不多, 其原因主要表现在数据库标准化工作不完善、数据量小、功能差、服务不周到、不能形成规模等方面, 最根本的原因是人才素质和资金, 这与社会对信息服务的认识有关。

国外材料科学数据库已很发达, 如将这些成熟系统引进, 可以迅速提高我国的数据库服务水平。但是, 我国的语言和材料标准与国外不同, 材料的研制、生产和使用单位的实际条件也与国外相距较远, 数据库完全依靠从国外引进是不现实的, 完全等待国内的研究进展也不可能, 应该采取引进与开发并行的方式, 消化吸收国外先进技术和经验, 完善标准化工作, 与国际信息服务接轨, 加大投入, 鼓励高素质科技队伍的参与, 在一个

高起点上开发适合国情的材料科学数据库系统。

5 结语

材料科学数据库系统是 CAD/CAE/CAM/CIMS 的一个主要支柱，是提高制造业设计水平的重要途径之一。为了让我国产品与发达国家竞争，加快设计速度、提高产品质量、降低成本的要求已经非常迫切，正确的选材是产品生产的基础。因此建立完整的材料科学数据库系统、提供良好的信息服务，是材料科学领域面临的紧迫任务。

参考文献

1 Aaron. Blicblaw. Developing materials education with modern technology. Metals and Materials, 1990, 6 (4): 216

2 罗百昌. 促进科技发展的现代化信息系统. 科学数据库与信息技术论文集, 中国科学技术出版社, 1993, 3

3 乌家培. 重在开发贵在利用. 计算机世界, 1995, (38): 147

4 刘鹤. 对“九五”我国信息产业发展的几点看法. 计算机世界, 1995, (38): 147

5 陈通宝. 再谈我国数据库业的现状问题与对策. 计算机世界, 1995, (38): 163

6 宁家骏. 中国数据库产业的现状与前瞻. 计算机世界, 1995, (38): 167

7 张建中. 科学数据库在我国的开发和服务. 计算机世界, 1995, (38): 171

8 J. Feldt. Material Science and Technology Databases. Ad-

\* \* \* \* \*

(上接第 29 页)

Senior Heat Treatment Ltd	英国
Severn Furnaces Ltd	英国
Severn Science Ltd	英国
上海电炉厂	中国
Site Heat Treatment Services Ltd	英国
Solo Industrieofenbau AG	瑞士
Special Metals Fabrications Ltd	英
Surface Combustion Inc	美国
T. A. V. SpA High Vacuum Technologies	意大利
Taylormade Induction Ltd	英国
Tempress BV	荷兰
Tetronics Limited	英国
Thermal Technology GmbH	德国
Thermal Technology Inc	美国
Thermatec Engineering	英国
Thermax Sa Argentina Ci	阿根廷
TM Vacuum Products Inc	美国
T V T Kordt GmbH	法国
Ugin dentaire/G F Electronic	法国

vanced Material & Progress, 1994, 145 (4): 41

9 D. Price. A Guide to Material Databases. Materials, 1993, 1 (7): 418

10 William Woishnis, Sasha Gurke. Unlocking The World's Materials Knowledge, Advanced Materials & Progress, 1994, (6): 33

11 R. Bamkin, A. Pickard. Product Development: Managing The Flow of Information. Materials World, 1994, 1 (1): 17

12 N. Swindells and R. J. Swindells. Taking STEPs Towards Information System. Materials World, 1994, 2 (2): 71

13 T. Clementson. The Impact of Modern Materials Communications. Materials World, 1994, 2 (5): 202

14 G. L. Selman. Technical Information and Business Decisions. Materials World, 1994, 2 (7): 373

15 G. M oney. ... and You Need This Information Tonight. Materials World, 1994, 2 (9): 447

16 Diran Aplian. Knowledge based control of materials processing. Metals and Materials, 1990, 6 (10): 642

17 Martin Stammers. Materials Knowledge for engineers. Metals and Materials, 1990, 6 (4): 224

18 John Rumble Jr, Joseph Carpenter. Materials "STEP" Into the Future. Advanced Materials & Processes, 1992, 142 (4): 23

19 J. E. Lee, D. E. Marinaro, M. E. Funkhouser, et al. Creating a Common Materials Database, Advanced Materials & Processes, 1992, 142 (5): 27

\* \* \* \* \*

Vac-Aero International Inc	加拿大
Vacufurn	英国
Vacua-Therm Sales Ltd	英国
Vacuum Furnace Engineering	英国
Vacuum Furnace Systems Corporation	美国
Vacuum Generators	英国
Wellman Furnaces Inc	美国
西安电炉研究所	中国

(王庆媛)

\* \* \* \* \*

铍铝合金

美国核金属公司研制出一种 Be-Al 合金，该合金比重小；刚性高；强度、韧性、延展性极好，尤其热膨胀系数很低，是制造宇航零件、电子光学元件和机器人的理想材料。该合金可进行无余量精密铸造，零件形状不限。抗拉强度 26kgf/mm<sup>2</sup>，25 的 CTE 为 12.7×10<sup>-6</sup> -<sup>1</sup>。