

在线材料数据库进展与 NIMS/MatWeb 案例研究

Recent Progress of Web-enable Material Database and a Case Study of NIMS and MatWeb

高志玉^{1,2}, 刘国权^{1,3}

(1 北京科技大学 新金属材料国家重点实验室, 北京 100083;

2 辽宁工程技术大学 材料科学与工程学院, 辽宁 阜新 123099;

3 北京科技大学 材料科学与工程学院, 北京 100083)

GAO Zhi-yu^{1,2}, LIU Guo-quan^{1,3}

(1 State Key Laboratory for Advanced Metals and Materials, University of
Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China;

2 College of Materials Science and Engineering, Liaoning
Technical University, Fuxin 123099, Liaoning, China;

3 School of Materials Science and Engineering, University of
Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China)

摘要: 在线材料数据库是现代信息技术背景下产生的获取信息的新模式, 在新材料设计、材料选择、决策咨询等方面应用广泛。能够及时掌握在线材料数据库新动态, 准确、高效利用在线材料数据库进行科学研究与工程应用研究尤为重要。本文介绍了在线材料数据库的最新进展, 并以 NIMS 和 MatWeb 国际著名在线材料数据库为例, 从数据服务内容、检索功能、检索结果的处理等方面进行分析与对比, 以期对科研人员准确选择以及高效利用在线材料数据库提供帮助。未来在线材料数据库的发展趋势为: Web 集成一站式服务, 数据类型更多、数据规模更大、数据更规范, 基于数据库的衍生信息服务更完善。

关键词: 材料数据库; 材料信息学; 在线数据库; 发展趋势

doi: 10.3969/j.issn.1001-4381.2013.11.015

中图分类号: TB3; TP274⁺.2 文献标识码: A 文章编号: 1001-4381(2013)11-0089-08

Abstract: Web-enable material database (MDB) is a new model to obtain information based on the development of modern information technology, and is widely used in the fields of new material design; material selection; strategic decision consultation and so on. It is very important to grasp timely the latest tendency of web-enable MDBs and to utilize accurately and efficiently web-enable MDBs for scientific research and engineering application. Consequently the latest developments of web-enable MDBs were introduced in this paper; NIMS and MatWeb, two internationally famous online MDBs, were also studied. The paper expounds it from the following aspects: data service contents; search function; retrieved results processing etc. The aim of this paper is to help researchers select and use web-enable MDBs precisely and efficiently. In the writer's view, the future developments of web-enable MDBs are as follows: one-stop service by web integration; more data types; more data quantities; more standards; as well as more complete information service derived from the database.

Key words: materials database; materials informatics; online database; development trend

伴随材料学科的不断发展和形成并积累了大量科学数据, 如何有效利用这些数据, 获取潜在的有价值信息, 是材料研究学者重点关注的问题。由此形成了材料领域新学科分支——材料信息学^[1]。它是建立在信息学基础之上的, 利用计算机技术、网络技术等, 对材料科学数据进行组织、分析与传播, 以实现材料信息的

提取, 转化与共享的新型交叉学科^[2,3]。材料数据库应用系统是材料信息学的主要研究内容之一。材料数据库在新材料设计^[4]、材料选择^[5]、工艺制定与材料性能预测^[6]、产品设计^[7]以及安全评估^[8]等方面发挥的作用越来越大, 对计算材料学的发展也起到了重要的促进作用^[9]。

材料领域早期的数据库应用系统多为离线或局域网方式使用。目前,Granta 公司开发的“剑桥选材系统 CES”仍是这方面的主流代表^[10,11]。随着计算机软硬件发展以及网络性能的提升,基于 Web 技术的材料在线数据库应用系统大量出现,在各个工程领域得到重要应用。本文主要介绍近年来材料领域新出现的、具有一定影响力的网络材料数据库应用系统,并对著名的在线材料数据库 NIMS 和 MatWeb 从数据内容、检索策略以及检索结果的处理等方面进行分析和比较。旨在为材料科学研究人员提供更多更广的数据资源信息,进一步发挥材料信息在科学研究中的重要作用。

1 国外在线材料数据库进展

国外材料数据库建设起步早,特别是美国、欧洲以及日本等工业发达国家^[12],材料数据库已在科学研究及工程技术领域得到了广泛应用。

美国的 MatWeb 数据库^[13],是提供材料性能信息、生产制造信息的综合材料数据库。美国国家标准与技术局(NIST)建有 WebSCD(Structural Ceramics Database), WebHTS(High Temperature Superconducting Materials Database)数据库,提供在线数据检索以及数据评估功能^[14]。美国佛罗里达国际大学极端材料研究中心构建了含有 2500 多种固态材料热化学性能以及物理性能的数据库,用于研究成分、结构、组元性能对固态材料性能的影响^[15]。该数据库应用系统主要由 SQL 结构化查询语言数据库、Web 客户端数据检索以及基于数据库的数据挖掘、元素分析计算应用程序三部分组成。

欧洲三国(西班牙、意大利、法国)构建了核聚变铅-锂共晶材料数据库专家系统^[16]。荷兰构建了高温核反应堆材料数据库(MatDB)及文献管理数据库(DoMa)^[17,18],数据库提供了核反应堆材料在低温、高温环境下的热力学性能和热物理性能数据。欧洲聚变材料性能在线数据库^[19]具有数据下载、浏览、检索以及提交等多种功能,而且数据内容涵盖原始试验数据、专家认证数据以及相关电子报告等。粉末冶金数据库 PM Database^[20],是一个全球化免费粉末冶金材料性能数据库。英国伦敦大学学院建成了功能陶瓷材料在线数据库^[21],其数据源于科学文献以及相关科学实验,致力于构建一个通用性强、自由访问的陶瓷材料数据库,提供材料基本信息检索,基于数据库的数据挖掘、数据可视化以及辅助新材料设计等功能。

日本国立材料科学研究所 NIMS 材料数据库是

一个多功能可跨库检索的综合性材料数据库^[22]。另外,日本政府资助建立的碳/环氧树脂复合材料环境抗力与持久性数据库已由原来以光盘为传播载体,发展为基于 Web 的在线数据库应用系统^[23]。韩国建立了关于金属材料、化工材料、陶瓷材料的在线数据银行^[24,25]。印度甘地原子研究中心(IGCAR)整合了印度研究院所和高校的材料科学数据,构建在线材料数据库,提供关于材料力学性能、腐蚀性能、无损评估、热、光性能等数据服务^[26,27]。

2011 年 6 月,美国提出了“材料基因组计划”(Materials Genome Initiative, MGI),开发数据共享平台是这项计划中的重要组成部分,这对于整合科学数据,构建在线材料数据库应用系统具有重要促进与导向作用。

2 中国在线材料数据库现状

20 世纪 70 年代,数据库技术传入中国,各科研院所逐步建立了大量不同规模、不同领域的材料数据库^[28]。进入新世纪,材料数据库进一步完善发展,提出了新科技条件下材料数据库体系框架的构建方法^[29],材料数据及其衍生的材料信息在科学研究中起的作用越来越不可替代^[30]。大连交通大学开发了特种异质材料(复合材料、功能梯度材料等)设计数据库,提供了异质材料设计所需组元材料的各种性能数据^[31]。北京科技大学建立了材料服役安全评价数据共享平台^[32],基于该平台,研究人员可以获得最新的材料服役安全准则,工程技术人员可以获得决策支持。而辽宁科技大学与日本埼玉工业大学合作研发的热轧工艺与材料数据库系统,提供热轧材料与工艺性能方面的数据,填补了这一领域的空白^[33]。中国科学院金属研究所建立的材料数据库含有 7 个子库,分别是高温合金、钛合金、纳米材料、精密管材、焊接工艺、材料腐蚀以及材料失效分析^[34],这些数据库可应用于新合金设计、工艺模拟和失效分析等方面。

我国的国家科技基础条件平台“材料科学数据共享网”建设项目于 2005 年论证公示、2010 年正式启动^[35](项目号 2005DKA32800),下设 7 个子项目(材料科学数据共享服务平台、有色金属材料及特种合金数据共享资源结点、黑色金属材料数据共享资源结点、复合材料数据共享资源结点、有机高分子材料数据共享资源结点、材料基础数据共享资源结点、无机非金属及其他材料数据共享资源结点设计与建设),以整合、重构现有的、较为成熟的材料科学数据资源为基础,建立满足国家建设、教育、科研等不同领域需求的跨部门

跨地区、多层次、异构分布、有序共享的材料数据体系,并初步建成了物理上分散、逻辑上统一的材料科学数据管理平台于互联网上试运行(<http://matsec.ustb.edu.cn/>)。“材料科学数据共享网”以北京科技大学为中心,目前已集合了分布在全国各地的 30 余家科研单位的海量数据资源,整合各类材料科学数据已达六十多万项,为国家基础条件建设提供了雄厚的材料科学数据资源共享服务与应用支撑。例如,由北京科技大学创建、中国钢研科技集团有限公司(原钢铁研究总院)合作建设的“黑色金属材料数据共享资源中心”(<http://steeldata.ustb.edu.cn/>),可以提供材料基础数据、成分性能数据、工艺性能数据、粉末冶金数据以及国家标准数据等的浏览、检索、下载以及数据提交等服务,以及材料淬透性的网上计算预测等诸多功能^[36]。复合材料数据共享资源结点则由西北工业大学等单位承建,包含树脂基复合材料性能数据、金属基复合材料性能数据^[37]。中国科学院化学所负责的高分子材料数据共享资源结点正在构建中,该库几乎包含所有的常见聚合物材料类型,如塑料、橡胶、纤维、涂料、黏结剂等等,可以查询相关材料的化学结构、聚合信息、制备工艺以及应用等^[38]。另外,依托北京科技大学建设的“国家材料环境腐蚀野外科学观测研究平台”(内含“国家材料环境腐蚀(老化)科学数据共享服务网”)已于 2011 年 11 月作为首批国家科技基础条件平台通过了科学技术部与财政部的认定。材料数据库及数据共享平台的大力建设,对于改善国内材料科技基础条件、提高材料科技创新能力与竞争能力提供了保障和科学数据支撑。

3 NIMS 和 MatWeb 在线材料数据库

3.1 数据库概况

3.1.1 NIMS 材料数据库

2001 年,日本国立材料科学研究所(NIMS)组建材料信息技术研究所(MITS),将旗下所建的 11 个材料数据库系统进行整合,建立综合检索系统“MatNavi”,于 2003 年 4 月实现 Internet 在线访问。2010 年 7 月再次优化改版。该数据库应用平台具有单账户登录、跨库检索功能^[39]。目前 NIMS 网站注册用户已经超过 80063 个,分别来自于 149 个国家的 21228 个组织机构^[40]。基于 Internet,NIMS 致力于提供研发新材料、材料性能预测与评估、对比选材等所必需的数据信息,努力构建世界最大、最全的材料数据库系统。用户只需在网站注册登记,即可拥有访问数据库所有数据的权利。

3.1.2 MatWeb 在线材料信息资源

MatWeb 创建于 1996 年,致力于建立全球最广泛的在线材料性能数据资源平台^[41]。MatWeb 提供强劲有力的数据检索功能,可以进行材料数据的并列比较。MatWeb 还具有第三方软件特定数据格式的输出功能,提供了单位换算、金属与塑料的硬度转换以及工程材料术语表等在线实用工具。MatWeb 用户分为未注册用户、免费注册用户和付费注册用户。用户类型不同,数据访问权限及数据处理功能将有所差异。

3.2 数据库服务内容

3.2.1 NIMS 数据服务

NIMS 材料数据库内容涵盖聚合物、无机非金属材料、金属材料、超导材料、复合材料以及扩散等内容,是世界最大、最有影响力的专业材料数据库之一。

目前,NIMS 含有数据库及应用系统达 20 个。包括 8 个材料基本性能数据库、3 个工程应用数据库、5 个在线结构材料数据表以及 4 个数据库应用系统(见表 1)。

3.2.2 MatWeb 数据服务

据 MatWeb 官网说明,其数据 90%源于制造商实验测试、10%源于专业手册或专业协会。目前,MatWeb 数据库主要包含 11 大类的材料数据,分别是 ABS 树脂聚合物性能数据、缩醛树脂(POM)工程性能数据、铝合金、复合材料、铜合金、纯元素、聚酰胺、聚碳酸酯、聚酯、钢、钛合金等性能数据。各类材料数据分布如图 2 所示。数据记录数是评价数据库服务质量高低的指标。MatWeb 总数据记录数高达 98000 项,而且还在不断增加中。按材料类别统计,数据分布如图 3 所示。

3.3 检索功能分析

检索功能的好坏是评价数据库质量的重要指标。NIMS 与 MatWeb 数据库的检索功能在检索方式、检索途径、检索策略等方面各有差异,具体见表 2。

3.3.1 NIMS 的检索功能

NIMS 的注册用户可使用跨库检索平台 MatNavi 检索数据,检索方式有关键字检索、树形检索。此外,NIMS 各子库也提供了基于其自身内容而开发的特征检索方式。

MatNavi 的树形检索属于浏览型检索模式,系统根据用户所选择的“树节点(材料类别或性能节点)”,以其为关键字进行便捷检索,缺点是不能进行逻辑检索(见图 4)。

3.3.2 MatWeb 检索功能

MatWeb 数据库涵盖范围广,数据量庞大,为了能够更加高效便捷的检索数据,MatWeb 提供了基于数

表 1 NIMS 数据库服务内容
Table 1 The contents of NIMS materials database

	The type and name of the database	Main data source	Data size	Statistics date
Basic properties database	Polymer database (PolyInfo)	Literature	See fig. 1	2013. 5
	Inorganic material database (AtomWork)	Literature		2010. 7
	Computational electronic structure database (CompES)	First-principles calculations		2010. 8
	Database of promising adsorbents for decontamination of radioactive substances (READS)	Experiment	60 kinds of material, nearly 800 data points	2012. 6
	Neutron transmutation database (NeuTran)	Literature; Experiment; Calculation	Whole radionuclide table	2012. 6
	Interfacial thermal conductance database (ITC)	Calculation; Experiment	More than 1000 items	2012. 6
	Diffusion database (Kakusan)	Literature	Diffusion data 4300, Document 4150	2010. 8
	Superconducting material database (SuperCon)	Literature	see fig. 1	2010. 3
Engineering database	Metallic material database (Kinzoku)	Literature; Experiment	82,700 data points (500 kinds of materials under 3500 different conditions)	2011. 6. 1
	CCT diagram database (CCTD)	Experiment; Calculation; Literature	More than 300 sheets	2012. 6
	Materials risk information platform (MRiP)	—	—	—
NIMS structural materials data sheet online	Creep data sheet (CDS)	Experiment	59 data sheets	2011. 6. 10
	Fatigue data sheet (FDS)	Experiment	115 data sheets	2011. 6. 10
	Corrosion data sheet (CoDS)	Experiment	6 data sheets	2011. 6. 10
	Space use materials strength data sheet (SDS)	Experiment	18 data sheets	2011. 6. 17
	Metallic material microstructure database (Kinso)	Experiment	4 kinds of materials under different service conditions	2012. 6
Applications	Composite design & property prediction system (CompTherm)	—	—	—
	Polymer properties prediction system	—	—	—
	Metal segregation prediction system (SurfSeg)	—	—	—
	Weld thermal history simulator	—	—	—

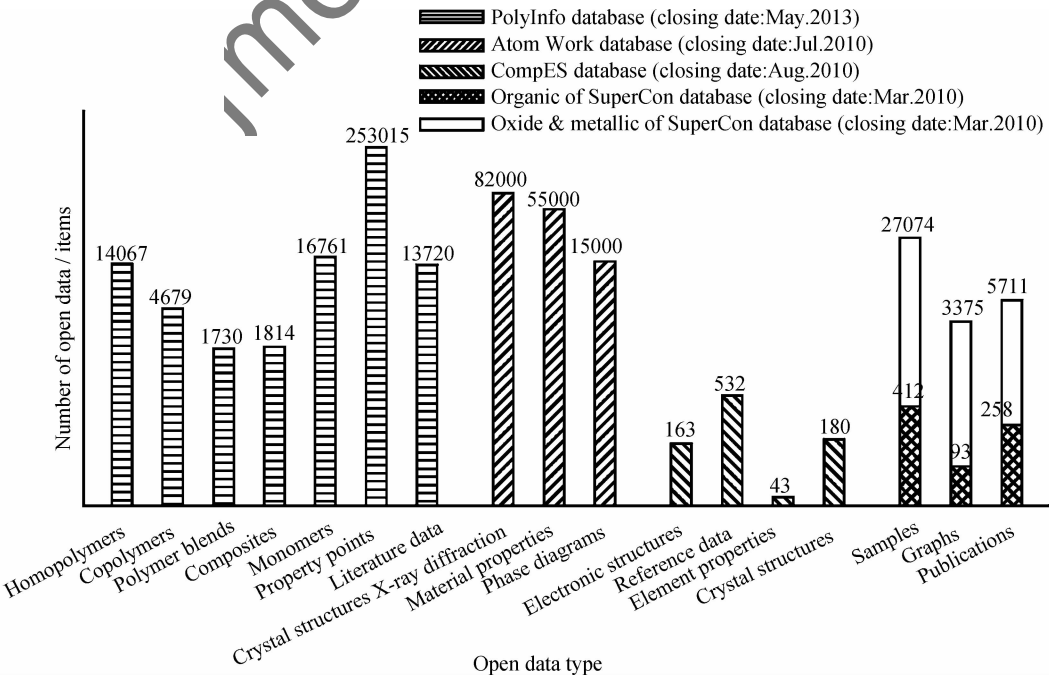


图 1 PolyInfo, AtomWork, CompES 和 SuperCon 数据库数据分布图

Fig. 1 The data distribution map for PolyInfo, AtomWork, CompES and SuperCon

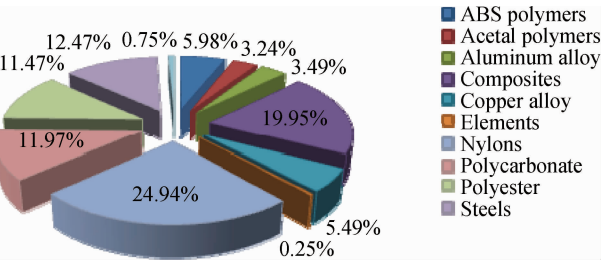


图 2 基于数据类别的 MatWeb 数据分布图

Fig. 2 The distribution map of MatWeb based on the data type

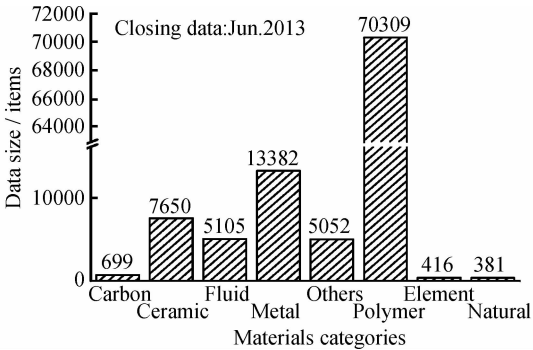


图 3 MatWeb 数据库中数据项分布图

Fig. 3 The distribution map of data items of MatWeb database

值、基于类别和基于内容的三大检索模式,在此基础上又细化为 10 种具体检索方式,如图 5 所示。

表 2 NIMS 和 MatWeb 数据库检索功能比较

Table 2 Comparison of search function of NIMS and MatWeb database

Item	Retrieval methods	Retrieval approach	Retrieval strategy
NIMS	Cross-database search (keyword search, tree search), sub-library feature retrieval	Material name, performance indicators, elements, chemical formula, words, phrases	And, or, not, combined, contain, phrase
MatWeb	Based on numerical retrieval, based on category retrieval, content-based retrieval	Material name, performance indicators, alloy composition, material type, manufacturer, product name, metals UNS number, keyword, keyword group	And, or, wildcard

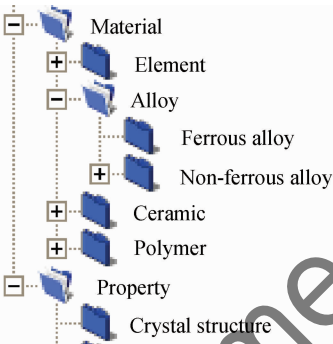


图 4 MatNavi 树形检索界面

Fig. 4 Tree search interface of MatNavi

基于数值的检索模式是指检索的执行过程需要用户选择检索限制指标(最多 3 项)并输入数值约束(如性能指标的最大值、最小值等),系统返回符合约束的材料列表。数值检索模式下的高级检索,是依据用户输入的文本、选定的材料性能以及设定的数值约束、材料的类别等条件进行的综合数据检索。

MatWeb 的依据类别进行检索功能与 MatNavi 树形检索形式相近,同属于浏览型检索。其中,按材料种类进行检索的功能,用户可直接选择希望查看的材料及其详细性能信息。对于按制造商、商品名称和金

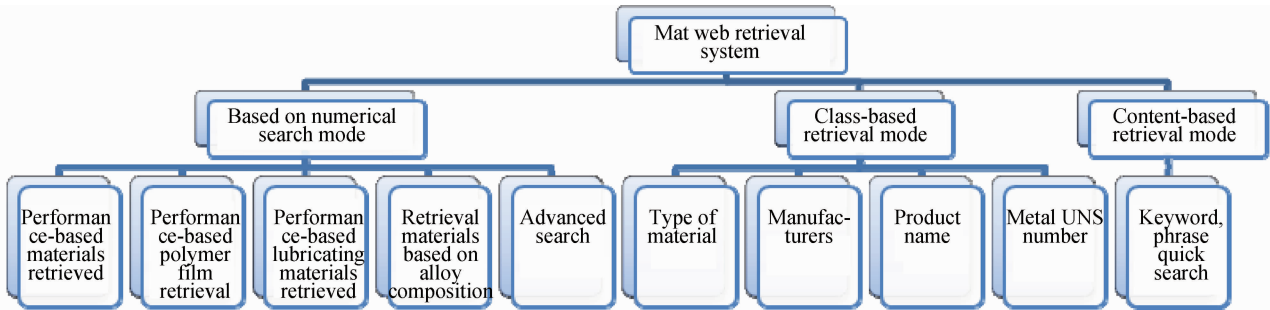


图 5 MatWeb 系统检索模式

Fig. 5 Search mode of MatWeb system

属 UNS 编号(金属与合金统一编号系统)的类别检索,MatWeb 依照英文字母顺序分组列表,保证了检索效率。

快速检索的依据是关键词、短语等文本内容。

检索结果默认返回与输入文本精确匹配的记录。用户也可以扩展检索结果,这是通过系统自动添加连接词“AND”、“OR”以及通配符来完成的。MatWeb 在每个 Web 页面右上方设置了快速检索入口,方便

快捷。

3.3.3 检索结果的输出形式

检索结果的展现形式是衡量数据库质量的另一个重要指标。好的数据库,对检索结果的处理应该是醒目、便捷、简单。

3.3.3.1 NIMS 检索结果处理

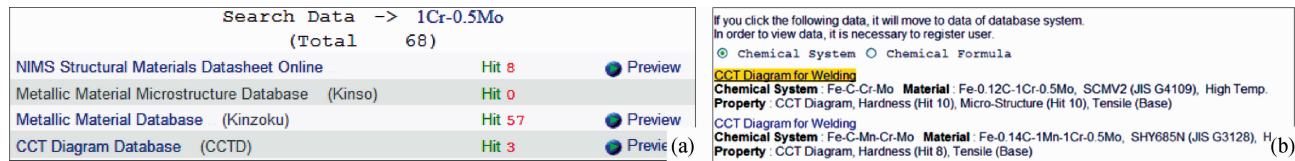


图 6 MatNavi 检索结果界面
Fig. 6 Interface of search results of MatNavi

3.3.3.2 MatWeb 检索结果呈现模式

尽管 MatWeb 提供了多种检索模式,但对检索结果的处理是一致的,从而降低了用户操作难度。图 7 为一检索实例,设定了材料的延伸率和拉伸屈服强度约束。检索结果页面可以划分为 3 个区域:系统功能区、材料列表区和属性显示区。功能操作区提供了检索记录的显示方式和材料对比浏览功能。材料列表区

是符合检索条件的材料列表,点击相应的材料名称,即可浏览关于该材料的物理性能、力学性能、电性能、热性能、化学成分等信息。

检索结果并列展示(图 8)、可视化对比(图 9)、结果排序和数据导出等服务是 MatWeb 提供的独具特色的功能,为材料研究人员、工程师选材提供了有力手段。

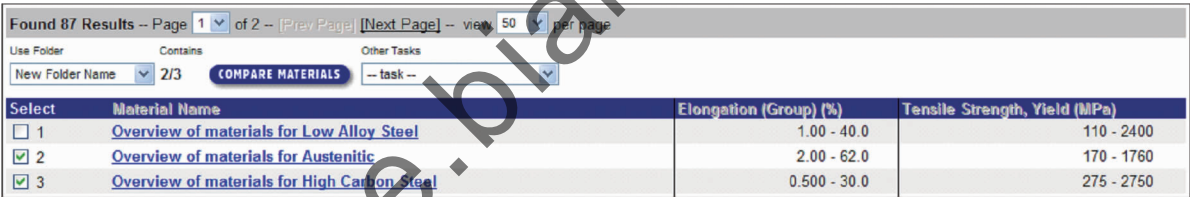


图 7 MatWeb 检索结果实例
Fig. 7 Example of search result of MatWeb

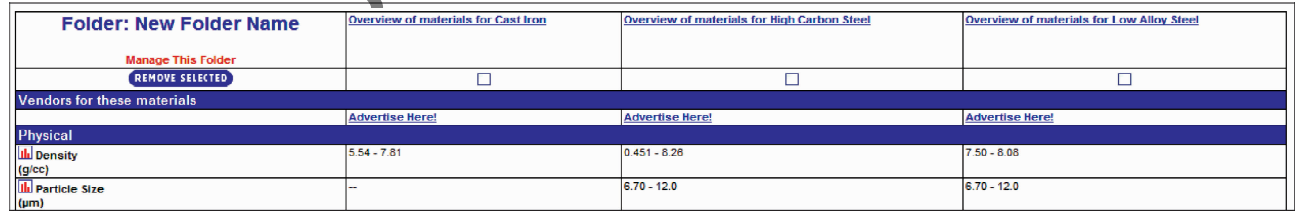


图 8 MatWeb 的材料对比浏览功能
Fig. 8 Comparison browse of materials of MatWeb

3.4 检索功能横向对比

综上所述,NIMS 与 MatWeb 数据结构不同,因此二者检索方式以及对检索结果的处理有较大差异。NIMS 跨库检索功能简单、便捷,但针对性不强,通常需要用户根据检索目标进一步筛选,获得所需数据信息。NIMS 的子库特征检索功能强大,但因为子库内

容不同,子库特征检索功能风格迥异,对用户提出了更高要求。相比之下,MatWeb 虽提供了数 10 种检索方式,但从数据结构来看,具有一定的统一性,因此检索功能易于掌握,检索准确率较高。NIMS 材料数据库内容丰富,从微观组织结构到宏观性能;从科研基础数据到工程应用,决定了其检索结果表现形式的多样性。

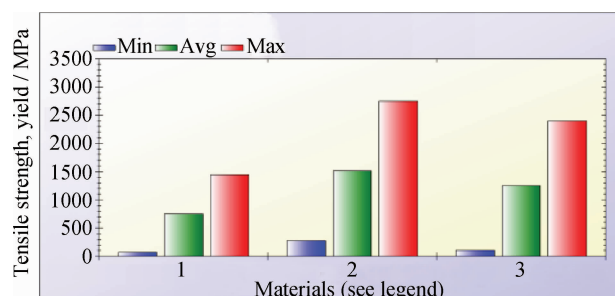


图9 可视化数据对比图表

Fig. 9 Visualization comparison chart of different materials

MatWeb 材料数据库主要收录各类材料性能信息,检索结果一目了然,具有数据可视化以及对比浏览等特色功能。用户需根据使用需求合理选择数据库并选择检索方式,从而达到快速准确获得有价值信息。

4 结束语

NIMS 和 MatWeb 作为当前具有较大影响力的在线材料科技基础信息提供机构,对于开展材料科学研究与工程应用起到了重要基础作用。二者数据内容丰富、数据规模较大,检索系统功能强大,在数据资源特色及数据类型方面,具有互补性。

NIMS, MatWeb 及各大在线材料数据库日益得到各国、各研究机构的高度重视,各个国家、机构正大力完善、发展具有本国特色的在线材料数据库。随着信息科学与技术的发展,为满足材料科学与工程的研究需要,在线材料数据库的发展将呈现下列特征:

(1) 数据类型更丰富、数据规模更大

材料学科分支多、交叉性强。作为科学基础数据平台,必然要求在线材料数据库类网站提供更全更广的数据信息。

(2) 在线数据应用程序种类更多,功能更完善

更多的基于在线数据的数据应用服务(如数据评估、数据预测、数据交换、数据可视化等)与数据浏览、检索集成,功能更强大。

(3) 建立健全规范的数据整合标准

数据库建库标准以及相应的数据采集、评估策略将进一步完善与发展,这是数据资源整合的必然要求。

(4) 一站式服务

充分利用已有数据资源,改善用户体验、基于 Web 集成的一站式在线数据信息服务将是最佳模式。

(5) 在线数据服务模式多样化

材料科学数据共享是一项公益性极强的科技资源共享服务,保持这种服务得以长期有效运行,需要从服务模式、运行机制等方面(如免费服务、商业运行、政策

支持)寻找合适的平衡点,满足不同用户使用需求。

参考文献

- [1] RAJAN K. Materials informatics[J]. Materials Today, 2005, 8(10): 38—45.
- [2] WEI Q, PENG X, LIU X, et al. Materials informatics and study on its further development[J]. Chinese Science Bulletin, 2006, 51: 498—504.
- [3] LIU G Q, WU J B, WANG H, et al. New challenge and opportunities of MSE and the role of materials scientists in materials informatics[A]. Proceedings of the 2nd Asian Materials Database Symposium[C]. Sanya: University of Science and Technology Beijing (USTB), 2010. 50—58.
- [4] Van DER SCHAAF B, DIEGELE E, LAESSER R, et al. Structural materials development and databases[J]. Fusion Engineering and Design, 2006, 81(8—14): 893—900.
- [5] 郭启雯, 才鸿年, 王富耻, 等. 材料数据库系统在选材评价中的综合应用研究[J]. 材料工程, 2012, (1): 1—4.
GUO Qi-wen, CAI Hong-nian, WANG Fu-chi, et al. Comprehensive application of material database system in material selection evaluation[J]. Journal of Materials Engineering, 2012, (1): 1—4.
- [6] 刘华初, 何燕霖, 李麟. 自建数据库在高铝钢组织预测上的应用[J]. 材料热处理学报, 2010, 31(1): 160—163.
LIU Hua-chu, HE Yan-lin, LI Lin. Application of self-built database to phase prediction of high Al steels[J]. Transactions of Materials and Heat Treatment, 2010, 31(1): 160—163.
- [7] LI X, SU H, CHEN X, et al. The development of a materials database in China[J]. Data Science Journal, 2007, 6(S): 467—473.
- [8] NIE Z, GAO F, GONG X, et al. Recent progress and application of materials life cycle assessment in China[J]. Progress in Natural Science: Materials International, 2011, 21(1): 1—11.
- [9] SLUITER M, SIMONOVIC D, TASCI E. Materials databases for the computational materials scientist[J]. International Journal of Minerals Metallurgy and Materials, 2011, 18(3): 303—308.
- [10] ASHBY M F. Materials Selection in Mechanical Design[M]. 4th edition. Oxford: Butterworth-Heinemann, 2011.
- [11] Granta Design Ltd. CES Selector editions and tools[EB/OL]. [2013. 06. 15]. <http://www.grantadesign.com/products/ces/index.htm>.
- [12] 张乐福, 谢长生. 材料科学数据库的发展现状[J]. 材料工程, 1997, (4): 43—46.
ZHANG Le-fu, XIE Chang-sheng. Development of material scientific databases[J]. Journal of Materials Engineering, 1997, (4): 43—46.
- [13] RAMALHETE P S, SENOS A M R, AGUIAR C. Digital tools for material selection in product design[J]. Materials & Design, 2010, 31(5): 2275—2287.
- [14] National Institute of Standards and Technology. Materials Data [DB/OL]. [2013. 06. 15]. <http://www.nist.gov/mml/materials-data.cfm>.
- [15] HRUBIAK R, GEORGE L, SAXENA S, et al. A materials database for exploring material properties[J]. JOM, 2009, 61

- (1): 59—62.
- [16] MAS DE LES VALLS E, SEDANO L A, BATET L, et al. Lead-lithium eutectic material database for nuclear fusion technology[J]. Journal of Nuclear Materials, 2008, 376(3): 353—357.
- [17] OVER H H, HÄHNER P. MatDB online analysis of HTR materials data from European R&D[J]. Nuclear Engineering and Design, 2012, 251: 317—324.
- [18] OVER H H, DIETZ W. The web-enabled database of JRC-EC, a useful tool for managing European Gen IV materials data[J]. Journal of Nuclear Materials, 2008, 376(3): 346—352.
- [19] KARDITSAS P J, LLOYD G, WALTERS M, et al. The European fusion material properties database[J]. Fusion Engineering and Design, 2006, 81(8—14): 1225—1229.
- [20] Trade Associations. Global powder metallurgy property database[DB/OL]. [2013. 06. 15]. <http://www.pmdatabase.com/global/home.htm>.
- [21] SCOTT D J, MANOS S, COVENEY P V, et al. Functional ceramic materials database: an online resource for materials research[J]. Journal of Chemical Information and Modeling, 2008, 48(2): 449—455.
- [22] YAMAZAKI M, XU Y. Current status of NIMS structural materials database[A]. Proceedings of the ASME 2009 Pressure Vessels and Piping Conference[C]. Prague: 2009: 1561—1568.
- [23] BANDO S, NAKAYAMA Y, ASAGUMO R, et al. Establishment of database of carbon/epoxy material properties and design values on durability and environmental resistance[J]. Advanced Composite Materials, 2002, 11(4): 365—374.
- [24] Korea Institute for the Advancement of Technology. Materials Bank DB[DB/OL]. [2013. 06. 15]. <http://www.matbank.org/>.
- [25] SEONGMIN J, TAEUI H, KWANGJIN K. Building of a web-based ceramics database with advanced features[A]. Proceedings of the 2nd Asian Materials Database Symposium[C]. Sanya: University of Science and Technology Beijing (USTB), 2010. 213—222.
- [26] RAJESWARI S, DAYAL R K, SUBBA RAO R, et al. Challenges in designing a database for corrosion and mechanical properties of materials[A]. Proceedings of the 2nd Asian Materials Database Symposium[C]. Sanya: University of Science and Technology Beijing (USTB), 2010. 1—8.
- [27] RAMACHANDRAN S, RAJESWARI S, MURTY S A V S. Dimensional modeling of Indian materials database[J]. International Journal of Computer Applications, 2012, 37(7): 1—8.
- [28] 李霞, 苏航, 陈晓玲, 等. 材料数据库的现状与发展趋势[J]. 中国冶金, 2007, 17(6): 4—8.
- LI Xia, SU Hang, CHEN Xiao-ling, et al. Present status and future of materials database[J]. China Metallurgy, 2007, 17(6): 4—8.
- [29] GUO Q, CAI H, WANG F, et al. Research on technical framework construction of material database system[J]. Rare Metal Materials and Engineering, 2011, 40(S2): 305—308.
- [30] 张大全, 吴崇田, 陆铨俊, 等. 材料科学数据平台的研究及开发状况[J]. 上海电力学院学报, 2011, 27(5): 528—533.
- ZHANG Da-quan, WU Chong-tian, LU Cheng-jun, et al. Research and development of the technical platform for materials database[J]. Journal of Shanghai University of Electric Power, 2011, 27(5): 528—533.
- [31] ZHANG X, CHEN K, FENG X. Material database for the material design of components made of a multiphase perfect material[J]. Materials & Design, 2008, 29(6): 1131—1144.
- [32] PENG S, LIANHONG D. A data sharing platform for materials service safety appraisal[A]. Proceedings of the 9th International Conference for Young Computer Scientists (ICYCS 2008)[C]. Zhangjiajie: Central South University, 2008. 737—741.
- [33] ZHANG Y, JU D. A database system of hot rolling process and materials constructed on Internet[A]. Proceedings of the 2010 3rd International Conference on Intelligent Networks and Intelligent Systems (ICINIS 2010)[C]. Shenyang: IEEE, 2010. 498—501.
- [34] YANG R, YE W J, CUI L N, et al. Materials database and applications to alloy design, process modeling and failure analysis[A]. Proceedings of the 2nd Asian Materials Database Symposium[C]. Sanya: University of Science and Technology Beijing (USTB), 2010. 35.
- [35] 中华人民共和国科学技术部. 中国科学技术发展报告 2010[R]. 北京: 科学技术文献出版社, 2011: 50.
- [36] 北京科技大学, 中国钢研科技集团有限公司. 黑色金属材料数据共享资源中心[DB/OL]. [2013. 06. 15]. <http://steeldata.ustb.edu.cn/>
- [37] 西北工业大学, 北京航空航天大学, 中国科学院金属研究所, 等. 复合材料数据共享资源节点[DB/OL]. [2013. 06. 15]. <http://www.dematers.com/cmdsn/Default.aspx>
- [38] 刘玉峰, 周勇, 李丽娜, 等. 面向共享的高分子材料网络数据库的设计和实现[J]. 化学通报, 2012, 75(6): 572—576.
- LIU Yu-feng, ZHOU Yong, LI Li-na, et al. Design and realization of a sharing oriented web database of polymer materials[J]. Chemistry, 2012, 75(6): 572—576.
- [39] YAMAZAKI M. Development and challenge of materials database—a case study of NIMS materials database[A]. Proceedings of the 2nd Asian Materials Database Symposium[C]. Shanya: University of Science and Technology Beijing (USTB), 2010.
- [40] NIMS Materials Database (MatNavi)[DB/OL]. [2013. 06. 15]. http://mits.nims.go.jp/index_en.html.
- [41] Online Materials Information Resource-MatWeb [DB/OL]. [2013. 06. 15]. <http://www.matweb.com/>.

基金项目: 国家科技基础条件平台建设项目(2005DKA32800); 国家高新技术研究发展计划项目(2013AA031601); 国家自然科学基金项目(51071019)

收稿日期: 2012-09-24; **修订日期:** 2013-08-08

作者简介: 高志玉(1981—), 男, 讲师, 博士研究生, 主要研究方向为计算机辅助材料优化与设计, 相变理论及其应用, 联系地址: 北京科技大学新金属材料国家重点实验室(100083), E-mail: zhiyugao@126.com

通讯作者: 刘国权(1952—), 男, 教授, 联系地址: 北京科技大学材料科学与工程学院(100083), E-mail: g. liu@ustb.edu.cn