

Прогнозирование интерметаллических соединений

Г.С.Бурханов, Н.Н.Киселева

Институт металлургии и материаловедения им. А.А.Байкова Российской академии наук
119991 Москва, Ленинский просп., 49, факс (499) 135 – 8680

Обсуждены проблемы прогнозирования еще не синтезированных интерметаллических соединений. Отмечено, что применение классического физико-химического анализа при исследовании многокомпонентных металлических систем сопряжено со сложностью представления многомерных фазовых диаграмм. Одним из путей прогнозирования новых интерметаллидов с заданными свойствами является использование современных информационных технологий с применением методов обучения ЭВМ распознаванию образов. Кратко рассмотрены алгоритмы, наиболее часто используемые в этих методах, и показана эффективность их применения для прогнозирования новых соединений.

Библиография — 144 ссылки.

Оглавление

I. Введение	615
II. Методы прогнозирования <i>a priori</i> новых интерметаллических фаз	618
III. Методы и алгоритмы прогнозирования интерметаллидов, основанные на обучении ЭВМ распознаванию образов	619
IV. Результаты прогнозирования новых интерметаллических фаз	621
V. Заключение	627

I. Введение

В настоящее время основным научным методом разработки и исследования конструкционных и функциональных неорганических материалов остается физико-химический анализ, основоположником которого был академик Н.С.Курнаков.¹ Развитие физико-химического анализа происходит за счет привлечения методов и подходов, развитых в таких областях, как теоретическая физика, квантовая химия, кристаллохимия, а также применения современных информационных технологий. Одним из эффективных направлений может стать разработка теоретических методов прогнозирования новых фаз с заданными свойствами с последующим синтезом этих фаз и экспериментальным подтверждением прогноза.

В данном обзоре на конкретных примерах рассмотрены возможности такого подхода и результаты эксперименталь-

ной проверки прогнозов для интерметаллических соединений. Последние выбраны в качестве объектов изучения как перспективная основа функциональных материалов нового поколения.

В комплексе методов, используемых в металловедении, физико-химический анализ металлических систем занимает ведущее место.² Опираясь на результаты даже сравнительно простых физических измерений, с помощью физико-химического анализа можно сделать важные выводы и определенные обобщения. Геометрический анализ диаграмм состояния химических систем дает обширную информацию о природе металлических фаз и условиях их образования. С помощью физико-химического анализа изучают природу и состав образующихся в системе фаз, не прибегая к их выделению (в отличие от препаративных методов). В его основе лежит исследование функциональных зависимостей между свойствами химической равновесной системы и факторами, определяющими ее равновесное состояние.³

К настоящему времени изучены тысячи диаграмм состояния двойных и тройных металлических систем, данные о которых содержатся в справочниках отечественных[†] и зарубежных авторов,^{4–10} а также хранятся в базах данных по фазовым диаграммам.^{11–13} Новым и перспективным направлением в области сбора, анализа и оперативного предоставления специалистам информации о фазовых диаграммах и свойствах образующихся фаз является разработка и эксплуатация компьютерных баз данных по свойствам неорганиче-

Г.С.Бурханов. Член-корреспондент РАН, доктор технических наук, заведующий лабораторией физикохимии тугоплавких и редких металлов ИМЕТ РАН. Телефон: (499) 135 – 7385, e-mail: genburkh@imet.ac.ru

Область научных интересов: химия и металловедение тугоплавких и редких металлов, физико-химический анализ, высокочистые металлы и сплавы.

Н.Н.Киселева. Доктор химических наук, заведующая лабораторией полупроводниковых материалов того же института. Телефон: (499) 135 – 2591, e-mail: kis@imet.ac.ru

Область научных интересов: компьютерное конструирование неорганических соединений, базы данных по свойствам неорганических веществ и материалов, материалы для электроники.

Дата поступления 2 февраля 2009 г.

[†] Среди последних публикаций следует отметить многотомный справочник «Диаграммы состояния двойных металлических веществ» под редакцией академика Н.П.Лякишева (Москва, 1996–2000).

ских веществ и материалов. В них хранится огромный массив информации, без которого невозможно создание новых материалов конструкционного и функционального назначения. В табл. 1 приведен список некоторых баз данных по свойствам неорганических веществ.

При исследовании многокомпонентных систем возникают определенные трудности. Геометрические способы представления диаграмм состояния становятся неудобными:

уже в случае трехкомпонентных систем приходится прибегать к политермическим и изотермическим разрезам, что позволяет получать точные данные только для определенных температур и составов. Еще большие трудности возникают при переходе к четверным и более сложным системам. Попытки применить идеи и методы многомерной геометрии полностью не решили проблему изучения и представления многокомпонентных диаграмм. Кроме того, при исследова-

Таблица 1. Базы данных по свойствам неорганических веществ и материалов.

Название и предметная область	Организация	Страна	Ссылки
<i>Базы данных по фазовым диаграммам неорганических систем</i>			
«Диаграмма» — база данных по фазовым диаграммам систем с полупроводниковыми свойствами	Институт металлургии и материаловедения им. А.А.Байкова РАН	Россия	11 – 16
«Pauling File on Binary Systems» — база данных по фазовым диаграммам двойных систем и кристаллической структуре двойных соединений	Японская научно-техническая корпорация; Национальный институт материаловедения; Токийский университет (Japan Science and Technology Corporation; National Institute of Materials Science; The University of Tokyo) фирма «Система данных о фазах» (Material Phases Data System);	Япония Швейцария	17, 18
<i>Базы данных по термическим и термодинамическим свойствам неорганических веществ и материалов</i>			
«ИВТАНТЕРМО» — база данных по термодинамическим свойствам индивидуальных веществ	Институт теплофизики экстремальных состояний Объединенного института высоких температур РАН	Россия	19, 20
«NISTTHERMO» — база данных по термодинамическим свойствам веществ	Национальный институт стандартов и технологии (National Institute of Standards and Technology)	США	21
«NIST/TRC Ideal Gas DB» — база данных по идеальным газам	»	»	22 – 25
«JANAF» — база данных по термохимическим свойствам веществ с одним или двумя атомами углерода	»	»	26
«THERMODATA» — база данных по термодинамическим свойствам неорганических веществ	Фирма «THERMODATA»	Франция	27
«MTDATA» — база данных и пакет программ для расчета фазовых равновесий и термодинамических свойств многокомпонентных систем	Национальная физическая лаборатория (National Physical Laboratory)	Англия	28, 29
«JICST TH» — база данных по теплофизическим и термохимическим свойствам соединений	Японский центр научно-технической информации (Japan Information Center of Science and Technology)	Япония	30
«TPRC/TPMD» — база данных по теплофизическим свойствам соединений	Аналитический информационный центр численных данных Университета Пердью (Center for Information and Numerical Data Analysis and Synthesis of Purdue University)	США	31
«SGTE» — базы данных по термодинамическим свойствам неорганических веществ	Европейская научная группа по термодинамическим данным (Scientific Group Thermodata Europe)	ЕС	32, 33
«THERMO-CALC» — термодинамическая база данных и программы для термодинамических расчетов	Фирма «Thermo-Calc Software Inc.»	Швеция	34 – 36
«THERSYST» — база данных по теплофизическим свойствам сплавов	Институт ядерной энергетики и энергетических систем Университета Штутггарта (Institute for Nuclear Energy and Energy Systems of University of Stuttgart)	Германия	37
«NEA-TDB» — база данных по теплофизическим свойствам соединений актинидов и других веществ для ядерной энергетики	Агентство по ядерной энергии (Nuclear Energy Agency)	Франция	38

Таблица 1 (продолжение).

Название и предметная область	Организация	Страна	Ссылки
<i>Базы данных по термическим и термодинамическим свойствам неорганических веществ и материалов</i>			
«F*A*C*T» — база данных по термодинамическим свойствам неорганических веществ	Политехническая школа Монреаля; Университет Мак Жиль; Центр исследований в вычислительной термохимии (Ecole Polytechnic de Montréal; McGill University; Centre for Research in Computational Thermochemistry)	Канада	39
«CompoTherm» — база данных и система прогноза теплофизических свойств композитов	Национальный институт материаловедения (National Institute of Materials Science)	Япония	40
<i>Кристаллохимические и кристаллоструктурные базы данных</i>			
«ICSD» — база данных по кристаллической структуре неорганических веществ	Специализированный информационный центр (Fachinformationszentrum Karlsruhe); Национальный институт стандартов и технологий (National Institute of Standards and Technology)	Германия США	41–46
«EDD» — база данных по электронной дифракции	Национальный институт стандартов и технологий » (National Institute of Standards and Technology); Национальная лаборатория Сэндия (Sandia National Laboratory)	»	47–50
«CRYSTMET» — база данных по кристаллическим структурам интерметаллических соединений	Фирма «TOTH Information Systems, Inc.»	Канада	51–53
«Минкрист» — кристаллографическая и кристаллохимическая база данных для минералов и их структурных аналогов	Институт экспериментальной минералогии РАН	Россия	54
«PDF» — база данных по порошковым дифрактограммам неорганических и органических веществ	Международный центр по дифракционным данным (International Center for Diffraction Data)	США	55–57
<i>Базы данных по физическим свойствам неорганических веществ и материалов</i>			
База данных по свойствам неорганических соединений «Фазы»	Институт металлургии и материаловедения им. А.А.Байкова РАН	Россия	11, 14, 15, 58
«Кристалл» — база данных по веществам с особыми акустооптическими, электрооптическими и нелинейнооптическими свойствами	»	»	11, 14–16, 59, 60
«Bandgap» — база данных по величине ширины запрещенной зоны неорганических веществ	»	»	14, 15
«Elements» — база данных по свойствам химических элементов	»	»	15
«СМЭТ» — база данных по свойствам материалов электронной техники	Институт неорганической химии им. А.В.Николаева СО РАН	Россия	16, 61
«SSD» — база данных по структуре поверхности химических веществ	Национальный институт стандартов и технологий (National Institute of Standards and Technology)	США	62
База данных по физико-химическим свойствам высокочистых веществ	Институт химии высокочистых веществ РАН	Россия	16, 63
«DIPPR» — база данных по свойствам промышленных веществ, зависящих от температуры	Проектный институт по физическим свойствам Американского института инженеров (Design Institute for Physical Property Data)	США	64–68
«SUPERCON» — база данных по свойствам сверхпроводников	Национальный исследовательский институт металлов (National Research Institute for Metals)	Япония	69
«ADAMIS» — база данных по свойствам сплавов для микропайки	Университет Тохоку (University of Tohoku)	»	70–72
База данных по свойствам редкоземельных металлов	Институт прикладной химии (Changchun Institute of Applied Chemistry of Academia Sinica)	Китай	73

Таблица 1 (окончание).

Название и предметная область	Организация	Страна	Ссылки
<i>Базы данных по физическим свойствам неорганических веществ и материалов</i>			
«HYDROGENE DATA» — база данных по свойствам материалов с водородом	Национальный центр научных исследований; Центр химико-металлургических исследований (Centre National de la Recherche Scientifique; Centre d'Etudes de Chimie Metallurgique)	Франция	74
База данных по свойствам люминофоров	Научно-производственное объединение «Люминофор»	Россия	75
«ЭПИДИФ» — база данных по коэффициентам взаимной диффузии компонентов газовой фазы эпитаксии полупроводниковых материалов	Объединенный институт высоких температур РАН	»	76
«MAT-DB» — база данных по механическим и физическим свойствам промышленных сплавов	Объединенный исследовательский центр европейской комиссии Института энергии (Joint Research Centre of the European Commission Institute Energy)	Нидерланды	77
«SPTD1» — база данных по структурным фазовым переходам	Институт низких температур и структурных исследований Польской академии наук (Institute of Low Temperature and Structural Research of PAN)	Польша	78
«JMPD» — база данных по материалам для ядерной энергетики	Японский исследовательский институт атомной энергии (Japan Atomic Energy Research Institute) ^a	Япония	79
«Data-Free-Way» — система баз данных по ядерным материалам	Японский исследовательский институт атомной энергии (Japan Atomic Energy Research Institute); ^a Национальный институт материаловедения (National Institute for Materials Science); Японский институт по переработке ядерного топлива (Japan Nuclear Cycle Development Institute) ^a	»	80, 81
База данных по функциональным керамическим материалам	Университетский колледж (University College); Королевский колледж (Imperial College); Лондонский университет (University of London); Региональная исследовательская лаборатория (Regional Research Laboratory)	Англия, Индия,	82
База данных по несоответствующим фазам	Католический университет (Universite Catholique de Louvain)	Бельгия	83

^a В 2005 г. организация вошла в Японское агентство по атомной энергии (Japan Atomic Energy Agency).

нии многокомпонентных систем существенно возрастают объемы экспериментальных работ и расход материалов, в том числе и дорогостоящих. Предложены пути решения проблемы сокращения затрат при исследовании многокомпонентных систем.^{84, 85} Один из них — прогнозирование *a priori* новых неорганических фаз с заданными свойствами¹¹ с использованием современных компьютерных технологий.

II. Методы прогнозирования *a priori* новых интерметаллических фаз

Задача прогнозирования *a priori* еще не полученных интерметаллических соединений может быть сформулирована следующим образом:¹¹ найти совокупность химических элементов и их соотношение (т.е. установить качественный и количественный составы) для создания (при заданных внешних условиях) определенной кристаллической структуры соединения, позволяющей реализовать необходимые функциональные свойства. При прогнозировании интерметаллических соединений исходной информацией являются только данные о свойствах химических элементов и сведения об уже

изученных соединениях. Задача конструирования новых интерметаллических соединений может быть сведена к обнаружению зависимостей между свойствами металлических систем (в том числе свойствами соединений) и свойствами элементов, образующих данные системы. Рассмотрим возможные методы прогнозирования интерметаллических соединений.

Следует напомнить, что металлические системы — одни из первых объектов физико-химического анализа.¹ В современном варианте физико-химического анализа удачно сочетаются идеи топологии, метрики диаграмм химических систем, термодинамических расчетов с экспериментальными исследованиями, поэтому он считается основным инструментом при изучении фазовых диаграмм. Однако с помощью только теоретических методов физико-химического анализа в большинстве случаев (за исключением тех, что являются следствием правила фаз) *a priori* нельзя предсказать возможность образования интерметаллических соединений. Особые надежды возлагались на квантовомеханические методы расчета, которые предоставляют принципиальную возможность прогнозирования новых интерметаллидов. Однако вслед-

ствии математических трудностей, возникающих при использовании методов расчета таких сложных систем, как интерметаллические соединения в твердом состоянии, можно получить только приближенные решения.

К настоящему времени накоплена огромная информация о свойствах металлических и других (неметаллических) неорганических веществ. Очевидно, что существуют периодические зависимости между свойствами соединений и свойствами элементов, входящих в их состав. Более того, уже известные соединения должны подчиняться этим закономерностям. Следовательно, реален поиск закономерностей образования соединений определенных типов на основе анализа информации об уже полученных веществах. Найденные зависимости могут быть применены для предсказания неизвестных соединений, причем могут быть использованы только данные о свойствах компонентов прогнозируемых соединений. Именно эта идея положена в основу компьютерного конструирования еще не полученных неорганических соединений.¹¹

Ниже рассмотрены методы прогнозирования интерметаллидов, основанные на использовании специальных компьютерных программ распознавания образов для обнаружения закономерностей в информации, хранящейся в базах данных по свойствам неорганических веществ и материалов, и результаты их применения.

III. Методы и алгоритмы прогнозирования интерметаллидов, основанные на обучении ЭВМ распознаванию образов

Первые исследования по применению методов распознавания образов для прогнозирования интерметаллидов были выполнены под руководством Савицкого в середине 1960-х годов.⁸⁶ Результаты прогноза относительно простых двойных фаз оказались превосходными: их сравнение с полученными экспериментальными данными показало, что достоверность предсказания двойных соединений превышает 90%.^{87, 88}

При использовании методов обучения ЭВМ распознаванию образов для прогнозирования интерметаллических и других неорганических соединений задача может быть сформулирована следующим образом. Пусть задано пространство свойств элементов — компонентов химических систем (так называемое пространство признаков). Это пространство содержит фиксированное число областей, соответствующих различным классам таких систем. Границы областей не определены, и нет правил определения принадлежности точек (объектов), соответствующих химическим системам, к той или иной области. В ходе обучения компьютерной программе предъявляются точки из этих областей[‡] и сообщается информация о том, к какой области принадлежат данные точки. Цель обучения — построить поверхности (классифицирующие правила), которые разделяют не только известные, но и все остальные точки, принадлежащие этим областям. В процессе прогнозирования в компьютер вводят только координаты (набор значений свойств химических элементов) точки, соответствующей еще не исследованной системе, и программа определяет, к какому классу химических систем относится прогнозируемая.

[‡] Эти данные называют обучающей выборкой. Такая выборка включает примеры уже исследованных систем, представленных в памяти ЭВМ в виде набора значений свойств химических элементов — компонентов системы.

Какие классы химических систем обычно рассматривают? Это могут быть системы с образованием и без образования соединений (эвтектики, твердые растворы и т.д.), системы с образованием и без образования соединений с заданным соотношением компонентов и/или с заданным типом кристаллической структуры при определенных внешних условиях, системы с образованием и без образования соединений с заданными функциональными свойствами (температурой плавления, температурой перехода в сверхпроводящее состояние и т.д. выше или ниже определенного значения).

Существует множество алгоритмов обучения ЭВМ распознаванию образов. На заре внедрения методов распознавания образов в металловедении применяли простые алгоритмы, не требующие выполнения ресурсоемких операций, что было связано с малой мощностью ЭВМ. Например, в пионерских исследованиях по конструированию двойных интерметаллидов^{86–88} применяли программы, разработанные Девингталем,^{89, 90} в которых для решения экстремальных задач распознавания образов использовали линейное программирование. В более поздних работах Воздвиженского и Фалевица^{91, 92} при прогнозировании двойных металлических систем по типу взаимодействия компонентов в жидком состоянии использовали один из алгоритмов потенциальных функций.⁹³ Алгоритм вычисления оценок⁹⁴ был использован⁹⁵ для поиска оптимальных количеств добавок различных химических элементов к стали для получения экстремальных механических свойств. Линейный алгоритм метода обучения ЭВМ был применен⁹⁶ для поиска легирующих добавок к сплавам. Механические свойства сталей прогнозировали⁹⁷ с использованием алгоритма бинарных решающих деревьев (см.⁹⁸). Дискриминантный анализ широко применялся для прогнозирования возможности образования двойных соединений с лантанидами,^{99, 100} типа кристаллической структуры тугоплавких двойных соединений разного состава,¹⁰¹ типа дефектов, их концентрации и энергетики дефектообразования в несовершенных кристаллах тугоплавких соединений.¹⁰²

Одними из наиболее часто используемых являются алгоритмы, основанные на ассоциативной организации памяти ЭВМ в виде искусственных нейронных^{103–106} или растущих пирамидальных сетей.¹⁰⁷ С их помощью решены многочисленные задачи прогнозирования возможности образования, типа кристаллической структуры и свойств интерметаллических и других неорганических соединений.^{11, 88, 108–126} Искомое классифицирующее правило, формируемое этими алгоритмами, имеет форму «обученной» сети.^{103–107} Возможная причина успешного применения сетевых алгоритмов для решения сложных задач прогнозирования неорганических веществ состоит в том, что в сетях запоминаются не границы между классами или отдельные эталонные точки разных классов, а целиком области, соответствующие определенному классу систем, причем форма этих областей в многомерном пространстве свойств элементов может быть достаточно сложной. Эффективному применению алгоритмов этого типа способствовало и значительное увеличение производительности компьютеров: существенно сократилось время обучения сетей. Помимо этого, разработаны стандартные пакеты программ, например, BrainMaker (фирма Loral Space), OWL (фирма HyperLogic), The All Trilogy (фирма Ward Systems Group), Neural Connection (фирма SPSS Inc.), Statistica: Neural Networks (фирма StatSoft Inc.) и т.д., в которых реализованы нейросетевые алгоритмы.¹⁰⁶ Существенными проблемами при использовании таких алгоритмов являются необходимость наличия больших массивов информации для обучения нейронной сети, а

также часто возникающий эффект «переобучивания» нейронной сети, когда она хорошо настраивается на обучающую выборку, но плохо прогнозирует новые объекты. Такие же проблемы возникают, если применяют алгоритмы, основанные на методе опорных векторов, широко распространенном в химических приложениях.^{127–129}

Тенденцией последнего времени является разработка специальных информационно-аналитических систем для компьютерного конструирования химических соединений, которые включают базы данных по свойствам веществ и материалов, а также программы поиска закономерностей в массивах данных и прогнозирования. В качестве примера рассмотрим структуру информационно-аналитической системы, созданной в ИМЕТ РАН (рис. 1),¹³⁰ которая широко используется для конструирования еще не полученных неорганических соединений. Она включает интегрированную систему баз данных по свойствам неорганических веществ и материалов,^{11–16, 58–60} и комплекс программ распознавания образов.^{107, 131}

Система периодически обновляемых баз данных по свойствам неорганических веществ и материалов в настоя-

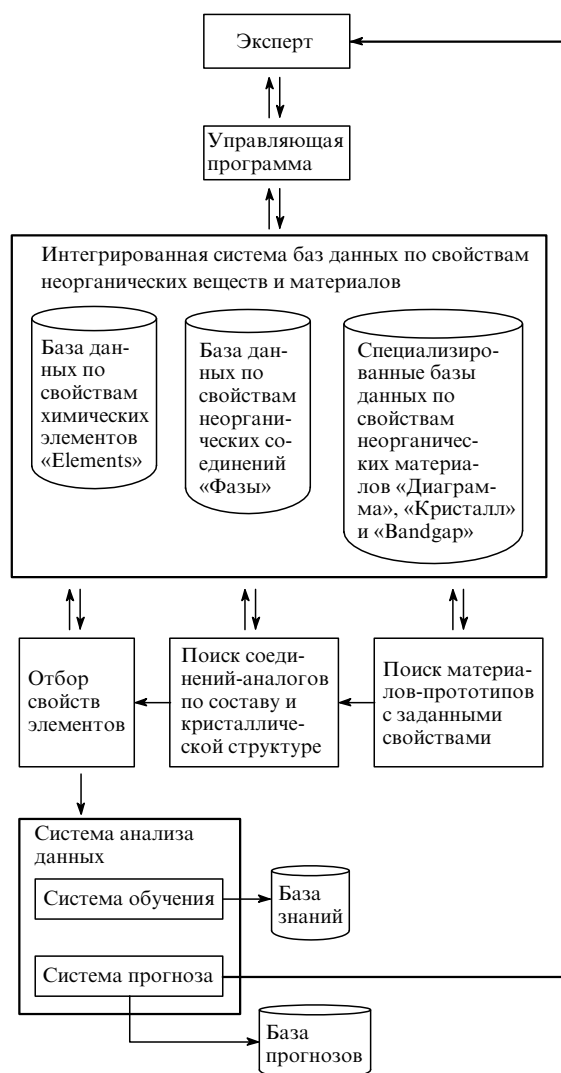


Рис. 1. Блок-схема информационно-аналитической системы конструирования неорганических соединений.

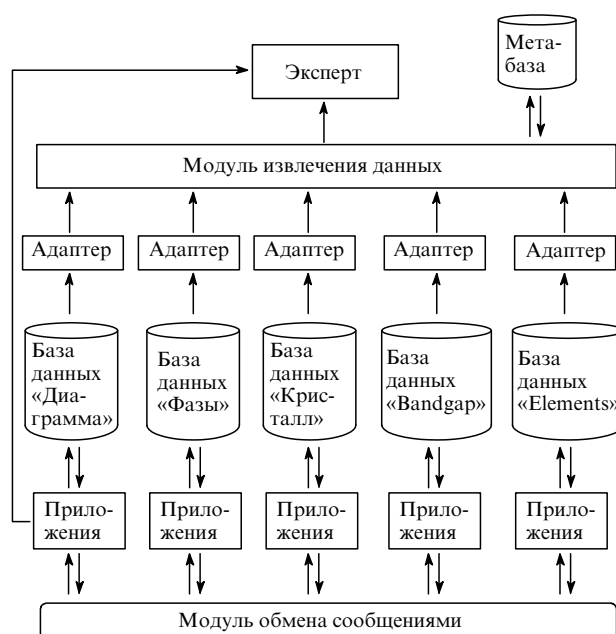


Рис. 2. Блок-схема интегрированной системы баз данных по свойствам неорганических веществ и материалов ИМЕТ РАН.

щее время объединяет следующие информационные подсистемы (рис. 2):

- базы данных, содержащие краткую информацию о наиболее распространенных свойствах неорганических соединений и химических элементов: 1) база данных по свойствам неорганических соединений «Фазы»,^{11, 58} которая содержит информацию о свойствах ~45 000 тройных и более 15 000 четверных соединений, взятую из ~23 000 литературных источников; 2) база данных по свойствам химических элементов «Elements»,¹⁵ включающая данные о более 90 параметрах каждого элемента;

- специализированные базы данных, содержащие детальную информацию о свойствах важных для применений веществ и материалов: 1) база данных по фазовым диаграммам полупроводниковых систем «Диаграмма»^{11–14} с информацией, собранной и оцененной высококвалифицированными экспертами, по фазовым диаграммам полупроводниковых систем и по физико-химическим свойствам образующихся в них фаз; в этой базе данных собрана детальная информация о нескольких десятках систем, важных для полупроводниковой электроники; 2) база данных по акустооптическим, электрооптическим и нелинейнооптическим свойствам веществ «Кристалл»,^{11, 14, 60} включающая информацию о параметрах свыше 100 материалов; 3) база данных по величине ширины запрещенной зоны неорганических веществ «Bandgap»,¹⁴ которая в настоящее время содержит данные для > 3 000 веществ.

Общий объем информации, содержащейся в интегрированной системе баз данных в информационно-аналитической системе ИМЕТ РАН, составляет ~8 Гбайт.[§] Интегрированная система баз данных позволяет специалистам получать информацию о свойствах веществ и материалов сразу из разных баз данных.

§ Система доступна зарегистрированным пользователям в сети Интернет (<http://www.imet-db.ru>).

В подсистему анализа данных информационно-аналитической системы включены следующие программные средства обучения ЭВМ распознаванию образов.

1. Широкий класс алгоритмов системы «Распознавание», разработанной в Вычислительном центре РАН.¹³¹ В этой многофункциональной системе распознавания образов помимо широко известных алгоритмов линейной машины, линейного дискриминанта Фишера, k ближайших соседей, опорных векторов, нейросетевых и генетических алгоритмов используются алгоритм распознавания, основанный на вычислении оценок, алгоритм голосования по тупиковым тестам, алгоритмы голосования по логическим закономерностям, алгоритм статистического взвешенного голосования и др.

2. Система обучения ЭВМ процессу формирования понятий ConFor,¹⁰⁷ которая основана на организации данных в памяти ЭВМ в виде растущих пирамидальных сетей.

Информационно-аналитическая система ИМЕТ РАН позволяет решить две важные задачи. При использовании этой системы, во-первых, возможна частичная автоматиза-

ция анализа огромного массива экспериментальной химической информации при поиске в нем закономерностей, необходимых для последующего конструирования новых соединений с заданными свойствами; во-вторых, расширяются возможности традиционных баз данных по свойствам веществ и материалов, так как пользователю предоставляются не только информация об уже исследованных веществах, но и прогнозы еще не изученных соединений и оценки их свойств из базы более ранних прогнозов. Достоинством разработанной информационно-аналитической системы является и то, что к ней имеется доступ из сети Интернет (<http://ias.imet-db.ru>). В этом случае пользователь получает оперативный доступ к «живым» данным и закономерностям.

IV. Результаты прогнозирования новых интерметаллических фаз

Для того чтобы проиллюстрировать возможности методов обучения ЭВМ распознаванию образов при компьютерном конструировании интерметаллидов, сравнивают результаты

Таблица 2. Примеры прогноза соединений состава AB_2Si_2 с кристаллической структурой типа $ThCr_2Si_2$.¹²³

Элемент	Элемент В														
A	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ru	Rh	Pd	Ag	Os	Ir	Pt	Au
Ca	+	⊕	↔	⊕	⊕	⊕	⊕	+	+	⊙	⊕	+	+	+	⊕
Sr		⊕		⊕	⊕	⊕	⊕	—	—		⊕			⊙	⊕
Y	⊕	⊕	⊕	⊕	⊕		—				—	+	⊙	+	⊙
Zr	+	+	⊕	⊕	⊕						—	+	+		
Ba	+	⊕	+	⊕	⊕	⊕	⊕	+	⊗	⊗	⊕	+	⊗	+	⊕
La	+	⊕	⊕	⊕	⊕	⊕	⊕	⊕	⊙	⊙	⊕	+	⊙	⊕	⊕
Ce	↔	⊕	⊕	⊕	⊕	⊕	⊕	⊕	⊙	⊕	⊕	⊙	⊙	⊕	⊕
Pr	+	⊕	⊕	⊕	⊕	⊙	⊕	⊙	+	⊙	⊕	⊙	⊙	+	⊕
Nd	⊙	⊕	⊕	⊕	⊕	⊙	⊕	⊕	⊙	⊙	⊕	+	⊙	⊕	⊕
Pm	+	+	+	+	⊕	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
Sm	⊙	⊕	⊕	⊕	⊕	⊙	+	⊕	+	⊙	⊕	+	⊙	⊗	⊕
Eu	+	+	⊕	⊕	⊕	⊕	⊙	+	⊙	⊙	⊕	+	⊙	⊕	⊕
Gd	⊙	⊕	⊕	⊕	⊕	⊙	+	⊙	⊙	⊕	⊕	⊙	⊕	⊕	⊕
Tb	⊙	⊕	⊕	⊕	⊕	⊙	+	⊕	⊙	⊙	⊕	⊙	⊙	+	⊕
Dy	⊙	⊕	⊕	⊕	⊕	⊙	+	⊕	⊙	⊙	+	+	+	⊕	⊕
Ho	⊙	⊕	⊕	⊕	⊕	⊙	+	⊙	+	⊙	+	⊙	+	⊗	⊕
Er	⊙	⊕	⊕	⊕	⊕	⊙	+	⊕	⊙	⊙	+	⊙	⊙	⊕	⊕
Tm	⊙	⊙	⊕	⊕	⊕	⊙	+	⊙	+	⊙	+	+	+	⊕	+
Yb	⊙	⊕	⊕	⊕	⊕	⊙	+	⊕	⊕	⊕	⊕	+	+	⊕	⊕
Lu	⊙	⊙	⊕	⊕	⊕	⊙	+	⊙	⊙	⊙	+	+	+	⊕	+
Hf	+	+	↔	⊕	⊕										
Ac	+	+	+	+	+	+		+	+	+	+	+	+	+	+
Th	⊕	⊕	⊕	⊕	⊕	⊕		⊙	⊙	⊙	+	⊙	⊙	⊙	⊙
Pa	+	+		+	+	+		+	+	+	+	+	+	+	+
U	⊙	⊙		⊙	⊕	⊙		⊙	⊙	⊙	+	⊙	⊕	⊙	⊙
Np	⊕	⊕	⊕	⊕	⊕			+	+	+	+	+	+	+	+
Pu	+	+		+	+	+		+	+	+	+	+	+	+	+
Am	+	+		+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
Cm	+	+		+	+	+		+	+	+	+	+	+	+	+

Примечание. Приняты следующие обозначения: + — прогноз структуры типа $ThCr_2Si_2$ у соединения состава AB_2Si_2 ; — — прогноз отсутствия соединения состава AB_2Si_2 со структурой типа $ThCr_2Si_2$ в системе $A-B-Si$; ⊕ — соединение состава AB_2Si_2 имеет структуру типа $ThCr_2Si_2$ и этот факт использован для обучения ЭВМ; ↔ — в системе $A-B-Si$ не обнаружено соединения состава AB_2Si_2 или оно существует, но имеет структуру, отличную от $ThCr_2Si_2$, и этот факт использован для обучения ЭВМ; ⊙ — прогноз структуры типа $ThCr_2Si_2$ подтвержден экспериментом; ⊗ — прогноз структуры типа $ThCr_2Si_2$ у соединения состава AB_2Si_2 не подтвержден экспериментом; ⊕ — прогноз структуры, отличной от $ThCr_2Si_2$, не подтвержден экспериментом. Здесь и в других таблицах: пустые места соответствуют несовпадению прогнозов с использованием разных наборов свойств элементов; все данные и прогнозы приведены для соединений при нормальных условиях.

прогноза^{119–124} с новыми экспериментальными данными. Ошибку прогноза подсчитывают как отношение неправильно спрогнозированных объектов к общему числу проверенных результатов.

1. Соединения состава AB_2X_2 ($X = Al, Si, Ge, P, As, Sb$) с кристаллической структурой типа $ThCr_2Si_2$

Авторами работ^{120–123} осуществлено прогнозирование еще не полученных соединений состава AB_2X_2 (здесь и далее A и B — разные химические элементы; $X = Al, Si, Ge, P, As, Sb$) с тетрагональной структурой типа $ThCr_2Si_2$. Такие соединения перспективны для поиска новых магнитных материалов.^{132–135}

Массивы данных для обучения ЭВМ по программе ConFor¹⁰⁷ включали несколько сотен примеров образования фаз с кристаллической структурой типа $ThCr_2Si_2$ при нормальных условиях и сотни примеров отсутствия соединений с такой кристаллической структурой в системах $A-B-X$. Обучение и прогнозирование проводили отдельно для каждой группы соединений. Для систем с $X = Al, P, As, Sb$ помимо фаз со структурой типа $ThCr_2Si_2$ были спрогнозированы новые соединения со структурой типа $CaAl_2Si_2$.^{120, 121}

Для представления систем $A-B-X$ в памяти компьютера были использованы следующие наборы свойств (пространства) элементов A и B :

I — распределение электронов по энергетическим оболочкам изолированных атомов;

II — первые три потенциала ионизации, металлические радиусы, стандартные энтропии индивидуальных веществ, температуры плавления, количество заполненных электронных оболочек, числа электронов на незавершенных s -, p -, d - и f -оболочках атомов.

Для каждого набора свойств элементов и для каждой группы систем $A-B-X$ с разными компонентами X проводили обучение ЭВМ и прогнозирование. Вследствие статистической корреляции свойств элементов прогнозы на основе двух наборов свойств для соединений определенной системы должны совпадать. Результаты прогнозов с использованием обоих наборов свойств элементов для каждой группы соединений с $X = Al, Si, Ge, P, As, Sb$ сравнивали и принимали решение о принадлежности соединения к классу фаз с кристаллической структурой типа $ThCr_2Si_2$ (или $CaAl_2Si_2$), если прогнозы не противоречили друг другу.

Результаты опытной проверки прогнозов для составов AB_2Si_2 и AB_2Ge_2 , полученные с использованием двух указанных выше наборов свойств элементов, представлены в табл. 2 и 3.

Таблица 3. Примеры прогноза соединений состава AB_2Ge_2 с кристаллической структурой типа $ThCr_2Si_2$.¹²²

Элемент В	Элемент А													
	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Ru	Rh	Pd	Ag	Os	Ir	Pt	Au
Ca						⊕			+	⊕				⊕
Sr	+					⊕			+	⊕				⊕
Y		⊕		⊕	⊕	⊕				—				
Ba	+					+	+	+	+	⊕			+	
La	+	⊕	⊕	⊕	⊕	⊕	⊙	⊙	⊕	⊙	+	⊗	⊕	+
Ce	+	⊕	⊕	⊕	⊕	⊕	⊙	⊙	⊕	⊙			⊕	
Pr	+	⊕	⊕	⊕	⊕	⊕	⊙	⊙	+	⊙			⊗	
Nd	+	⊕	⊕	⊕	⊕	⊕	⊙	⊙	⊕	⊙			⊕	
Pm	+	+				+	+	⊙	+	+			+	
Sm	+	⊕		⊕	⊕	⊕	⊙	⊙	+	+			⊗	
Eu	+	⊙			⊕	⊙	⊙	⊙	⊙	⊙			⊗	
Gd	+	⊕	⊕	⊕	⊕	⊕	⊙	⊕	⊙	+	+	⊗	⊕	+
Tb	+	⊕	⊕	+	⊕	⊕	⊙	⊙	+	+	+	+	⊗	+
Dy	+	⊕	⊕		⊕	⊕	⊙	⊙	⊕	+			⊕	
Ho	+	⊕		⊕	⊕	⊕	⊙	⊙	⊙	+			+	
Er	+	⊕	⊕	⊕	⊕	⊕	⊙	⊙	+	+			+	
Tm	+	⊙		⊕	⊕	⊕	⊙	⊙	+	+			+	
Yb	+	⊕	⊕	⊕	⊕	⊕	⊙	⊙	⊕	+			+	
Lu	+	⊙	+	⊕	⊕	+	⊙	+	+	+	+	+	+	+
Ra				+		+								+
Ac	+		+	+	+	+	+	+		+	+	+	+	+
Th	⊕	⊕	⊕	⊕	⊕	⊕	⊙	⊕	⊕	+	⊙	⊙	⊕	⊕
Pa	+		+	+	+	+	+	+	+		+	+	+	+
U	⊕	⊕	⊕	⊕	⊕	⊕	+	⊕	⊕		+	⊕	⊕	+
Np	+		⊙	+	+	+	+	+	+		+	+	+	+
Pu	+		+	+	+	+	+	+	+		+	+	+	+
Am	+		+	+	+	+	+	+	+		+	+	+	+
Cm	+		+	+	+	+	+	+	+		+	+	+	+

Примечание. Приняты следующие обозначения: + — прогноз структуры типа $ThCr_2Si_2$ у соединения состава AB_2Ge_2 ; — — прогноз отсутствия соединения состава AB_2Ge_2 со структурой типа $ThCr_2Si_2$ в системе $A-B-Ge$; ⊕ — соединение состава AB_2Ge_2 имеет структуру типа $ThCr_2Si_2$ и этот факт использован для обучения ЭВМ; ⊙ — прогноз структуры типа $ThCr_2Si_2$ подтвержден экспериментом; ⊗ — прогноз структуры типа $ThCr_2Si_2$ у соединения состава AB_2Ge_2 не подтвержден экспериментом.

Таблица 4. Примеры прогноза типа кристаллической структуры соединений состава AB_2P_2 .¹²⁰

Элемент A	Элемент B												
	Li	Be	Mg	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ru	Rh	Pd	Cd
K					(T)	(T)		T	T	(T)	(T)		
Ca	C	(C)		(C)	(T)	(T)	(T)	(T)	(C)			(T)	(C)
Sr	C	C	C	(C)	(T)	(T)	(T)	(T)	(C)			(T)	(C)
Y	C				T	T	(T)	T	C			(T)	
Zr	C	C	C	C				(C)	C				
Cs					T								
Ba	C	C	(C)		(T)	(T)	(T)	(T)	(T)			(T)	(C)
La	(C)				T⊙	(T)	(T)	T	T	T⊙	T⊘	(T)	
Ce	(C)	C	C		T⊙	(T)	(T)	T	T			(T)	C
Pr	(C)				T⊙	(T)	(T)	T	T			(T)	
Nd	(C)				T	(T)	(T)	T				(T)	
Pm	C				T	T	T	T				T	
Sm	C	C	C		T	(T)	(T)	T	T			(T)	C
Eu	C	C	C⊙	(C)	T⊙	(T)	(T)	(T)	(C)			(T)	(C)
Gd	C	C	C	C	(T)	T	(T)	(T)	C	T⊙	T	(T)	C
Tb	(C)	C	C		T		(T)	T	T			(T)	C
Dy	C	C	C		T		(T)	T	TC			(T)	C
Ho	C				T		(T)	T	T			(T)	
Er	C				T		(T)	T	T			(T)	
Tm	C				T	T	(T)	T	T				
Yb	C	C	C⊙	C	T		(T)	(C)	(C)			(T)	(C)
Lu	C				T	T	T		C	T⊙	T	T	
Ac	C								C				
Th	C	C	C	C				(C)	C				C
Pa	C								C				
U	C								C				

Примечание. Приняты следующие обозначения: T — прогноз структуры типа $ThCr_2Si_2$ у соединения состава AB_2P_2 ; C — прогноз структуры типа $CaAl_2Si_2$ у соединения состава AB_2P_2 ; в скобках — информация о соединениях, использованная для обучения ЭВМ; ⊙ — прогноз подтвержден экспериментом; ⊘ — прогноз не подтвержден экспериментом.

В табл. 4 приведены результаты сравнения прогнозов для соединений состава AB_2P_2 с новыми экспериментальными данными.

Для силицидов были экспериментально проверены 89 составов и только в шести случаях результаты оказались неверными, т.е. ошибка прогноза была $\sim 7\%$. Для германидов проверены 49 составов и также в шести случаях прогнозы не совпали с экспериментом, т.е. ошибка прогноза равна 12%. Для фосфидов синтезированы 10 соединений и только один прогноз оказался неправильным (ошибка прогноза — 10%). Средняя ошибка прогноза типа кристаллической структуры соединений состава AB_2X_2 ($X = Al, Si, Ge, P, As, Sb$) составила 8%.

2. Соединения состава ABX ($X = Al, Si, P, Ga, Ge, As, Pd, Sb, Bi$)

Проведено прогнозирование типа кристаллической структуры эквиатомных соединений ABX ($X = Al, Si, P, Ga, Ge, As, Pd, Sb, Bi$) при нормальных условиях.^{119–121} Для соединений с алюминием, германием и мышьяком прогнозировались фазы с гексагональной структурой типа $ZrNiAl$ и ромбической типа $TiNiSi$.^{119–121} Для соединений с кремнием и фосфором прогнозировали структуры типа $ZrNiAl$, $PbFCl$ или $TiNiSi$.^{119, 120} Для соединений с галлием и палладием был осуществлен прогноз возможности кристаллизации в структуре типа $ZrNiAl$.^{119, 121} Для соединений состава $ABSb$ прогнозировались фазы со структурами $PbFCl$ и $MgAgAs$.¹²⁰ Для

эквиатомных соединений с висмутом прогнозировалась кристаллическая структура типа $MgAgAs$.¹²⁰

При поиске критериев устойчивости кристаллических структур использовали алгоритм, основанный на обучении растущих пирамидальных сетей.¹⁰⁷ Формирование критериев устойчивости определенных кристаллических структур для каждого из девяти составов ($ABAl, ABSi$ и т.д.) проводилось в двух пространствах свойств элементов A и B, рассмотренных в предыдущем разделе. В задачах прогнозирования рассматривалась возможность кристаллизации в одном из нескольких структурных типов и использовалась процедура последовательной дихотомии. Например, сначала проводили поиск критериев классификации химических систем, в которых образуются или не образуются фазы со структурой типа $ZrNiAl$, затем системы классифицировали по признаку образования и отсутствия образования эквиатомных соединений со структурой типа $TiNiSi$ и т.д.

Примеры прогнозов, полученных путем сопоставления результатов для каждой пары найденных в процессе обучения ЭВМ критериев устойчивости кристаллических фаз, включающих в качестве параметров один из двух приведенных выше наборов свойств элементов, представлены в табл. 5–7.

Сравнение результатов прогноза¹²¹ с новыми экспериментальными данными показало, что ошибка прогнозирования для соединений $ABAl$ ниже 13%, для соединений $ABIn$ — 22%, а для соединений $ABBi$ все 22 проверенных прогноза совпали с экспериментом.¹²⁰ Средняя ошибка прогноза типа кристаллической структуры эквиатомных фаз состава ABX ($X = Al, Si, P, Ga, Ge, As, Pd, Sb, Bi$) равна 34%.

Таблица 5. Примеры прогноза соединений состава ABAl с кристаллической структурой типа TiNiSi.¹²¹

Эле- мент B	Элемент A														
	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
Ru	—	O	—	—	—	+	—	+	+	+	+	+	+	—	—
Rh	—	O	⊙	⊙	—	+	—	⊙	+	+	⊙	+	⊙	⊙	—
Os	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+
Ir	⊙	⊙	⊙	⊙	+	⊙	+	⊙	⊙	⊙	⊙	⊙	⊙	+	⊙
Pt	+	⊙	⊙	⊙	+	⊕	+	⊕	⊕	⊕	⊕	⊕	⊕	⊙	

Примечание. Приняты следующие обозначения: + — прогноз структуры типа TiNiSi у соединения состава ABAl; — — прогноз отсутствия соединения состава ABAl со структурой типа TiNiSi в системе A — B — Al; ⊕ — соединение состава ABAl имеет структуру типа TiNiSi, и этот факт использован для обучения ЭВМ; ⊙ — прогноз структуры типа TiNiSi подтвержден экспериментом; O — прогноз структуры, отличной от TiNiSi, подтвержден экспериментом; ⊙ — прогноз структуры, отличной от TiNiSi, не подтвержден экспериментом.

Таблица 6. Примеры прогноза соединений состава ABIn с кристаллической структурой типа ZrNiAl.¹²¹

Эле- мент	Элемент А															
	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	Pa	U	
Ni	⊕	⊕	+	⊕		⊕	⊕	⊕	⊕	⊕	⊕		⊙	+		
Ru	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	⊙	
Rh	⊙	⊕	+	⊙	⊗	⊕	⊙	⊕	⊙	⊕	⊙	⊗	⊗	+	+	
Pd	⊕	⊕		⊕	⊕	⊕	⊕	⊕	⊕	⊕	⊕	⊕	⊕	+	⊙	
Ag	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	
Os	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	
Ir	+	+	+	⊙	+	⊙	⊙	⊙	⊙	+	+	+	+	+	+	
Pt	⊙	⊕	+	⊙	⊗	⊕	⊙	⊕	⊙	⊕	⊕	⊙	⊕	+	⊕	
Au	⊕	⊕	+	⊕	⊗	⊕	⊕	⊕	⊕	⊕	+	⊕	+	+	+	

Примечание. Приняты следующие обозначения: + — прогноз структуры типа ZrNiAl у соединения состава ABIn; ⊕ — соединение состава ABIn имеет структуру типа ZrNiAl, и этот факт использован для обучения ЭВМ; ⊙ — прогноз структуры типа ZrNiAl у соединения состава ABIn подтвержден экспериментом; ⊗ — прогноз структуры типа ZrNiAl у соединения состава ABIn не подтвержден экспериментом.

Таблица 7. Примеры прогноза соединений состава ABVi с кристаллической структурой типа MgAgAs.¹²⁰

Эле- мент B	Элемент A				Эле- мент B	Элемент A			
	Ca	Ni	Pd	Pt		Ca	Ni	Pd	Pt
Ni	+				Gd		⊕	⊕	⊕
Ba	+	+			Tb		⊙	⊙	⊙
La		+	⊙	⊙	Dy		⊕	⊕	⊕
Ce		+	⊕	⊕	Ho		⊙	⊕	⊕
Pr		⊙	⊙	⊙	Er		⊙	⊙	⊕
Nd		⊙	⊙	⊙	Tm		⊕	⊙	⊙
Pm		+	+	+	Yb		+	⊕	⊕
Sm		⊙	⊙	⊙	Lu		⊙	⊙	⊙
Eu		+	+	+					

Примечание. Приняты следующие обозначения: + — прогноз структуры типа MgAgAs у соединения состава ABVi; ⊕ — соединение состава ABVi имеет структуру типа MgAgAs, и этот факт использован для обучения ЭВМ; ⊙ — прогноз структуры типа MgAgAs подтвержден экспериментом.

3. Фазы Гейслера состава ABX₂

Среди соединений с кристаллической структурой фаз Гейслера обнаружены вещества, обладающие уникальными ферромагнитными свойствами, а также гигантским магнито-сопротивлением, магнитокалорическим эффектом, гигантской деформацией, сверхпластичностью и другими свойствами.^{136–140} В связи с этим нами было проведено конструирование еще не полученных фаз Гейслера составов ABX₂ (X = Co, Ni, Cu, Pd) и AB₂X (X = Al, Ga, In), имеющих кубическую структуру типа MnCu₂Al.^{121, 124}

С использованием алгоритма ConFor¹⁰⁷ для каждого из семи указанных выше составов были построены классифицирующие правила, которые разделяли химические системы на два класса: системы с образованием соединения состава ABX₂ (или AB₂X) со структурой MnCu₂Al; системы без образования такого соединения при нормальных условиях. Обучающие выборки были крайне невелики — менее 50 примеров. Для описания химических систем были использованы два набора свойств элементов A и B, указанные в разделе IV.1.

Результаты опытной проверки прогнозов, полученных путем сравнения прогнозов с использованием двух наборов

Таблица 8. Примеры прогноза фаз Гейслера состава AB_2In .¹²¹

Элемент B	Элемент A							
	Ru	Rh	Pd	Ag	Os	Ir	Pt	Au
Ti			⊕	+			⊕	⊕
Sr				+				
Y			⊕	⊙				⊕
Zr	+	+	⊕	+	+	+	⊕	⊕
Nb	+	+	+	+	+	+	+	+
Tc	+	+	+	+	+	+	+	+
La	+	+	⊗	⊙	+	+	+	⊕
Ce				⊙				
Pr	+	+	+	⊙	+	+	+	⊕
Nd	+	+	+	⊙	+	+	+	⊕
Pm	+	+	+	+	+	+	+	+
Sm	+	+	+	⊙	+	+	+	⊕
Eu	+	+	+	+	+	+	+	+
Gd	+	+	⊙	⊙	+	+	⊗	⊙
Tb	+	+	+	⊙	+	+	⊗	⊕
Dy	+	+	⊙	⊙	+	+	+	⊕
Ho	+	+	+	⊙	+	+	⊗	⊕
Er	+	+	⊙	⊙	+	+	+	⊕
Tm	+	+	⊙	⊙	+	+	+	⊙
Yb	+	+	+	+	+	+	+	⊕
Lu	+	+	⊙	+	+	+	+	⊙
Hf	+	+	⊕	+	+	+	⊕	⊕
Ta				+				
Re	—			+				

Примечание. Приняты следующие обозначения: + — прогноз структуры типа $MnCu_2Al$ у соединения состава AB_2In ; — — прогноз отсутствия соединения состава AB_2In со структурой типа $MnCu_2Al$; ⊕ — соединение состава AB_2In имеет структуру типа $MnCu_2Al$, и этот факт использован для обучения ЭВМ; ⊙ — прогноз образования соединения состава AB_2In со структурой типа $MnCu_2Al$ подтвержден экспериментом.

свойств элементов, для составов AB_2In и $ABCu_2$ представлены в табл. 8 и 9.

Проверка 24 составов AB_2In показала, что четыре прогноза не совпали с экспериментом, т.е. ошибка прогнозирования ~17%. Для соединений состава $ABCu_2$ были экспериментально проверены 13 прогнозов. Только в одном случае результаты расчетов не совпали с опытными данными (ошибка прогноза ~8%). Средняя ошибка прогноза типа кристаллической структуры соединений составов ABX_2 ($X = Co, Ni, Cu, Pd$) и AB_2X ($X = Al, Ga, In$) равна 30%.

Достоинством методов компьютерного конструирования интерметаллидов является возможность быстрой коррекции классифицирующих закономерностей при появлении новых соединений, экспериментальная информация о которых противоречит полученным прогнозам. Для этого нужно лишь добавить новые примеры к ранее использованным в компьютерном анализе и провести дообучение информационно-аналитической системы. Такая способность к адаптации является отличительной особенностью методов искусственного интеллекта, идеи которых лежат в основе рассмотренной выше компьютерной системы конструирования неорганических соединений.¹³⁰ Учитывая то, что средняя ошибка компьютерного прогноза фаз Гейслера достаточно велика (~30%), а также то, что в последние годы синтезировано ~100 новых соединений с этой структурой, было решено провести обучение ЭВМ с использованием новых данных, более широкой совокупности свойств элементов и набора современных программ распознавания образов.

Для обучения ЭВМ использовали информацию о 278 фазах Гейслера, 70 соединениях со структурой $MgCuAl_2$, 38 соединениях со структурой $GdSnPt_2$, 37 соединениях со структурой $YSiPd_2$, 20 соединениях со структурой $NaTi$, 11 соединениях со структурой $PrGaGo_2$, 10 соединениях со структурой $YSiRh_2$, 16 соединениях со структурой, отличной от приведенных выше, и 486 примерах отсутствия соединений состава ABX_2 ($X = Mg, Al, Fe, Co, Ni, Cu, Ru, Rh, Pd, Ag, Ir, Pt$ или Au), извлеченную из БД по свойствам неорганических соединений «Фазы» (<http://phases.imet-db.ru>).⁵⁸

Таблица 9. Примеры прогноза фаз Гейслера состава $ABCu_2$.¹²⁴

Эле- мент B	Элемент A																			
	Li	Be	Al	K	Sc	V	Cr	Fe	Co	Ni	Ga	Ge	Y	Nb	Mo	Ru	Rh	Pd	Ag	In
Zn			Ⓒ									—	—	—	—	—	—	—	O	
Ga	+	+		+	⊕	+	+	+	+	+		O							—	+
In	+	+		+	Ⓒ	+	+	+	+	+	+	+	Ⓒ	+	+	+	+	+	⊗	
Sn	O	—	O	—	—	—		⊕	⊕	⊕	—	—	—	↔	—	—	—	—	↔	Ⓒ
Lu	—	—		—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	Ⓒ
Ta		—			—	—	—	—	—	↔		—	—	↔	—	—	—	—	—	+
Au	—	—		—	—	—	—	—	—	O		—	—	—	—	—	—	↔	↔	+
Tl												—							—	+
Pb	—	—	O	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	—	O	+

Примечание. Приняты следующие обозначения: + — прогноз структуры типа $MnCu_2Al$ у соединения состава $ABCu_2$; — — прогноз отсутствия соединения состава $ABCu_2$ со структурой типа $MnCu_2Al$; ⊕ — соединение состава $ABCu_2$ имеет структуру типа $MnCu_2Al$, и этот факт использован для обучения ЭВМ; ↔ — в системе $A-B-Cu$ не обнаружено соединения состава AB_2Cu или оно существует, но имеет структуру, отличную от $MnCu_2Al$, и этот факт использован для обучения ЭВМ; ⊙ — прогноз образования соединения состава $ABCu_2$ со структурой типа $MnCu_2Al$ подтвержден экспериментом; O — прогноз соединения состава $ABCu_2$ со структурой, отличной от $MnCu_2Al$, подтвержден экспериментом.

Информацию о металлических системах представляли в памяти ЭВМ в виде набора значений свойств химических элементов А, В и Х, таких как псевдопотенциальный радиус (по Цангеру), температуры плавления, кипения и Дебая, первые три потенциала ионизации, расстояния до внутренних и до валентных электронов (по Шуберту), регулярный номер (по Менделееву–Петтифору), электроотрицательность (по Полингу), химический потенциал Мидемы, квантовый номер, теплопроводность, номер группы в Периодической системе, молярная теплоемкость, энтальпии плавления, испарения и атомизации, энтропия твердого тела, атомная масса, плотность, линейный коэффициент термического расширения, металлический радиус (по Веберу) и т.д. (всего 108 значений для каждой системы). Данные о значениях свойств элементов были взяты из базы данных «Elements» (<http://phases.imet-db.ru/elements>).

Для обучения ЭВМ использовали следующие алгоритмы и методы, на которых базируются программы распознавания образов, входящие в информационно-аналитическую систему: алгоритм вычисления оценок,^{94, 131} линейная машина, линейный дискриминант Фишера, логические закономерности, многослойный перцептрон (метод обратного распространения ошибки), k ближайших соседей,^{131, 141} метод опорных векторов,^{127, 131} статистически взвешенные синдромы,^{131, 142} метод бинарных решающих деревьев,⁹⁸ метод двумерных линейных разделителей,¹⁴³ а также метод индуктивного формирования понятий ConFor, базирующийся на использовании растущих пирамидальных сетей.¹⁰⁷

Процедура компьютерного конструирования интерметаллических соединений включала три этапа:

- прогнозирование химических систем $A-B-X$ с образованием и без образования соединений состава ABX_2 ;
- многоклассовое прогнозирование типа кристаллической структуры: фазы Гейслера, соединения со структурами типов NaTi, YSiRh₂, MgCuAl₂, GdSnPt₂, YSiPd₂, PrGaCo₂, соединения со структурой, отличной от приведенных выше, отсутствие соединений состава ABX_2 (всего 9 классов);
- последовательное разделение систем на три класса, например фазы Гейслера, соединения со структурой, отличной от структуры фаз Гейслера, отсутствие соединений состава ABX_2 в системе $A-B-X$.

На любом этапе каждая программа распознавания образов строила классифицирующую закономерность, переменными которой были свойства химических элементов — компонентов химических систем $A-B-X$. Для выбора наиболее точной программы для прогнозирования еще не полученных соединений использовали процедуру скользящего контроля. Она заключается в том, что заданная часть (f) объектов — описаний систем $A-B-X$ — изымается из обучающей выборки, проводится обучение ЭВМ на оставшихся объектах, а изъятые объекты предъявляются для экзаменационного распознавания. Фиксируется число ошибок. Затем «контрольные» объекты возвращаются в обучающую выборку и из нее изымаются другие f объектов. Такую последовательность повторяют до тех пор, пока все объекты обучающей выборки не побывают в роли контрольных. Это позволяет более объективно оценить точность алгоритмов обучения ЭВМ для конкретной обучающей выборки, а при использовании методов распознавания образов избежать нежелательной процедуры «переобучивания» (см. выше). По завершении обучения со скользящим контролем рассчитывается средняя ошибка экзаменационного распознавания, которую далее используют для выбора наилучших алгоритмов при принятии коллективного решения.

Цель применения стратегии коллективных решений — повышение точности прогнозирования. Идея этого подхода заключается в следующем. Сначала для прогнозирования новых соединений последовательно применяют разные алгоритмы обучения ЭВМ. Затем специальным образом обрабатывают¹³¹ результаты работы отдельных алгоритмов и формируют окончательное коллективное решение об отнесении соединений к тому или иному классу. Чаще всего такое использование «коллективного интеллекта» позволяет взаимно компенсировать ошибки прогнозов, полученных с применением отдельных алгоритмов, поэтому в большинстве случаев удается получить более точный результат.

Простейшим коллективным методом является голосование прогнозов, в котором выбирается результат, наиболее часто выдаваемый различными алгоритмами. Однако голосование прогнозов не всегда позволяет улучшить достоверность прогнозирования, особенно в случаях слабого выполнения основной гипотезы распознавания образов — гипотезы компактности объектов в пространстве признаков.¹³¹ Более сложные алгоритмы принятия коллективных решений, такие как динамический метод Вудса, метод Байеса, логическая коррекция множеств распознающих алгоритмов, области компетенции, шаблоны принятия решений и т.д.,¹³¹ предназначены для решения очень сложных задач прогнозирования.

Наилучший алгоритм принятия коллективного решения выбирали на основе результатов распознавания 100 объектов, номера которых были взяты из таблицы случайных чисел (равномерное распределение), и которые исключались из обучающей выборки и в процессе обучения, и в процессе принятия коллективного решения. На последнем этапе конструирования соединений объекты, использованные для оценки качества распознавания, добавляли в обучающую выборку и заново инициировали процесс построения коллективного решения с использованием выбранного лучшего алгоритма. Для прогнозирования применяли наиболее «точные» алгоритмы обучения и принятия коллективного решения. Принадлежность еще не изученной химической системы к тому или иному заданному классу прогнозировалась путем подстановки в найденные закономерности только значений свойств элементов, входящих в состав этой системы. Окончательный результат прогнозирования формировался на основе сравнения прогнозов для всех трех этапов.

Результаты экзаменационного распознавания со скользящим контролем представлены в табл. 10. Лучшие алгоритмы (выделены курсивом) были использованы при принятии коллективного решения, результаты которого приведены в табл. 11 (курсивом отмечен метод, который был далее применен для прогнозирования новых соединений). Следует отметить, что с использованием «коллективов алгоритмов» значительно повысилась достоверность прогнозирования.

Часть результатов прогнозирования типа кристаллической структуры интерметаллических соединений составов $ABRu_2$, $ABRh_2$ и $ABPd_2$ приведена в табл. 12–14.

Прогнозы фаз Гейслера с благородными металлами представляют особый интерес для поиска новых магнитных наноматериалов. Дело в том, что в последние годы сплавы Гейслера на основе кобальта, железа или никеля стали применять для производства жестких дисков компьютеров. С целью повышения плотности записи на дисках предложено использовать нанопорошки фаз Гейслера. Однако одной из проблем в этом случае является особенно высокая реакционная способность нанопорошков кобальта, железа или никеля, поэтому начат экспериментальный поиск новых, более хими-

Таблица 10. Достоверность экзаменационного распознавания (в %) со скользящим контролем при прогнозировании возможности образования и типа кристаллической структуры интерметаллидов состава ABX₂.

Алгоритм	Возможность образования соединения	Многоклассовое прогнозирование	Прогнозируемый класс (последовательное разделение)						
			фазы Гейслера	NaTi	YSiRh ₂	MgCuAl ₂	GdSnPt ₂	YSiPd ₂	PrGaCo ₂
Алгоритм вычисления оценок	80.0	60.4	71.9	81.6	79.5	67.6	—	53.9	58.0
Двумерные линейные разделители	80.0	—	71.6	81.3	74.2	42.7	37.2	51.1	49.1
Метод бинарных решающих деревьев	56.9	63.1	47.5	50.6	53.2	57.7	40.8	40.7	48.4
Линейный дискриминант Фишера	81.3	76.5	70.6	80.9	79.3	65.2	58.9	62.9	66.5
Линейная машина	88.0	84.1	83.8	86.6	87.5	58.9	44.7	59.9	61.8
Логические закономерности	86.0	76.8	82.6	86.9	85.4	64.3	52.0	57.3	60.2
Нейронные сети	82.9	68.5	70.2	79.3	82.2	—	—	—	56.7
Метод <i>k</i> ближайших соседей	92.3	89.6	89.4	93.5	94.1	63.4	44.7	40.7	39.7
Метод опорных векторов	59.3	59.0	60.2	73.7	94.5	48.0	51.2	49.5	54.7
Статистически взвешенные синдромы	—	28.8	75.2	—	76.9	—	20.6	43.2	45.4
ConFor	97.0	95.2	91.3	91.8	90.0	86.7	82.4	81.4	83.5

Таблица 11. Достоверность экзаменационного распознавания (в %) со скользящим контролем с использованием различных процедур принятия коллективного решения при прогнозировании возможности образования и типа кристаллической структуры интерметаллидов состава ABX₂.

Алгоритм	Возможность образования соединения	Многоклассовое прогнозирование	Прогнозируемый класс (последовательное разделение)						
			фазы Гейслера	NaTi	YSiRh ₂	MgCuAl ₂	GdSnPt ₂	YSiPd ₂	PrGaCo ₂
Метод Байеса	100.0	99.2	99.7	100.0	98.6	94.7	92.1	97.0	96.5
Области компетенции	100.0	100.0	100.0	100.0	96.2	94.5	91.3	93.4	93.8
Шаблоны принятия решений	100.0	100.0	100.0	100.0	98.8	96.8	93.9	96.4	96.6
Динамический метод Вудса	77.9	76.2	98.9	81.2	86.7	87.1	94.4	81.4	79.7
Комплексный комитетный метод (голосование по большинству)	96.5	92.3	95.8	97.4	97.2	86.3	62.5	92.4	92.5
Комплексный комитетный метод (усреднение)	96.5	100.0	100.0	100.0	98.6	96.9	95.1	94.7	95.1
Логическая коррекция	—	99.8	99.9	100.0	98.7	90.6	95.6	92.1	92.2

чески стойких, ферромагнитных фаз Гейслера с благородными металлами. Полученные прогнозы позволят сократить время и затраты на поиск таких соединений.

V. Заключение

Любая область научных исследований проходит исторический путь развития: от сбора и обработки исходных эмпирических данных до обобщения опытных фактов и построения на этой основе научных теорий, отображающих фундаментальные отношения и связи исследуемых процессов и явлений. Такой путь развития характерен и для металловедения — от рецептов древних металлургов до науки о металлах третьего тысячелетия, которая изучает строение и свойства металлов и сплавов, устанавливает связи между их

химическим составом, структурой и свойствами, а также закономерности изменения последних под воздействием внешних факторов. Несмотря на достижения современного металловедения в познании химических и физических процессов, происходящих в металлических системах, эта наука остается в большей степени экспериментальной. Методологической основой металловедения является физико-химический анализ металлических систем, т.е. систематическое исследование физических свойств сплавов в зависимости от изменения их химического и фазового состава.²

Успехи теоретической физики (развитие зонной теории, теории функционала электронной плотности, молекулярной динамики и т.п.), разработка многочисленных программ для квантовомеханических расчетов и появление мощных компьютеров — факторы, определяющие прогресс в совре-

Таблица 12. Прогноз типа кристаллической структуры соединений состава $ABRu_2$.

Эле- мент B	Элемент A																												
	Li	Be	Mg	Al	Si	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	Y	Zr	Nb	Pd	Ag	In	Sn	Sb	Hf	Ta	Tl	
Mg		9																											
Si	1																												
V			9				9																						
Cr			9				9	9																					
Mn				1	#1	9	9	9	9																				
Fe		9	9		#1	9	9	9	9	9																			
Co	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	#9																		
Ni	9	9	9	#9		3	#9	9	9	9	9	9																	
Cu		9					9	9	9	9	9	9	9																
Zn		9					9	9	9	9	9	9	9	9															
Ga							1	1		1				9															
Ge	1									#1			9	9	9														
Y					3				5	3		9						3											
Zr							9	9			9	9	9	9															
Nb				9	9	#9	9	9	9	9	9	9	9	9	9		9		#9										
Pd		9	9		9		9	9	9	9	9	9	9	9	9		9			9									
Ag		9			9		9	9	9	9	9	9	9	9	9				9	9	#9								
In				9						1	9	9	9	9															
Sn		9	9							#1					9					9	9								
Sb										#1	9	9		9	9	9		3		9	9								
La		3		3							9	9		3												3			
Ce											9									7		3							
Pr				3		7	7							3			3												
Nd				3			7							3	3		3		7		3								
Pm				3			7				9				3		3		7						3				
Sm		3		3		7	7										3				3	3							
Eu				3		7	7								3		3				3								
Gd				3							9						3												
Tb				3			7				9	9		3							3								
Dy				3							9			3															
Ho				3										3															
Er				3										3															
Tm				3										3		5				8									
Yb				3										3		5													
Lu				3			7							3							9								
Hf							9	9	9	9	9	9	9	9	9				#9	9	9		1	9					
Ta		9					9	9	9	9	9	9	9	9	9				9	#9	9	9		9	9				
Pt		9	9		9	9	9	9	#9	9	9	9	9	9	9		9		9	9	9	9		9	9	9			
Tl				9					9		9	9	9	9													1		
Pb		9	9								9	9								9	9			9			9		
Bi		9		9				9			9	9					9				9			9			9	9	
Th											9	9		3															
U											9																9		

Примечание. Приняты следующие обозначения: 1 — прогноз соединений $ABRu_2$ со структурой фаз Гейслера; 3 — прогноз соединения $ABRu_2$ со структурой $YSiRh_2$; 5 — прогноз соединения $ABRu_2$ со структурой $GdSnPt_2$; 7 — прогноз соединения $ABRu_2$ со структурой $PrGaCo_2$; 8 — прогноз соединения $ABRu_2$ со структурой, отличной от приведенных выше; 9 — прогноз отсутствия соединения состава $ABRu_2$. Здесь и в табл. 13, 14 # — обозначение систем, информация о которых использована для обучения ЭВМ.

Таблица 13. Прогноз типа кристаллической структуры соединений состава $ABRh_2$.

Эле- мент B	Элемент A																																					
	Li	Be	Mg	Al	Si	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	Y	Zr	Nb	Ru	Pd	Ag	In	Sn	Sb	Pm	Eu	Gd	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	Pt	Pb	
Sc	1	1																																				
Ti	1			1	1	1																																
V	1			1	1																																	
Mn	1			#1		1																																
Ga						1	1	1		1																												
Ge	#1									1			1																									
Y					#3	3			3					3			#3																					
Zr				1							9																											
Nb				1					9		9	9	9						9	9	9																	
Ru		9	9	9		#9	9	9	9	9	9	9	9	9	9	9		9	9	9																		
Pd			9	9	9	9		9	9	9	9	9	9	9	9		9			9	9																	
Ag			9		9		9	9	9	9	9	9	9	9	9					9	9	#9																
In							1	1	1		9	9	9						1	1																		
Sn										1		9	9		9						9	9	9															
Sb				9							9	9		9	9						9				9	9												
La					3											5	3																					
Ce												9					3											3										
Pr					3		3		3								3											3										
Nd					3				3								3											3										
Pm					3												3											3										
Sm					3												#3											3										
Eu					3												3											3										
Gd					3				3								3																					
Tb					3												3																					
Dy					3											5	3																					
Ho					3											5	3																					
Er					#3												5	#3																				
Tm					3	3											5	3																				
Yb					3			1								#5	3		8																			
Lu						3		8									3		8		9																	
Hf											9		9							9	9			1			8	8	8	8	8	8	8	8				
Ta							9	9	9	9	9	9	9	9	9				9	9	9	9	9	8														
Pt		9	9				9	9	9	9	9	9	9	9	9		9		9	9	9	9	9			9									9	9		
Tl					1	1				1	9	9							1		9														1			
Pb										1	9	9	9								9		9		9											1		
Bi									9		9	9									9		9		9											9	9	
U					3																9						3											

Примечание. Приняты следующие обозначения: 1 — прогноз соединений $ABRh_2$ со структурой фаз Гейслера; 3 — прогноз соединения $ABRh_2$ со структурой $YSiRh_2$; 7 — прогноз соединения $ABRh_2$ со структурой $PrGaCo_2$; 8 — прогноз соединения $ABRh_2$ со структурой, отличной от приведенных выше; 9 — прогноз отсутствия соединения состава $ABRh_2$.

Таблица 14. Прогноз типа кристаллической структуры соединений состава ABPd₂.

Эле- мент	Элемент А																																																
	Li	Be	Mg	Al	Si	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	Y	Zr	Nb	Ru	Ag	In	Sn	Sb	La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	Hf	Ta	Pt	Tl	Pb	Bi			
Al	1		1																																														
Sc	1			#1																																													
Ti	1			#1																																													
V	1			1																																													
Cr				1																																													
Mn	1			#1	1																																												
Ga			1			#1	1	1		1					8																																		
Zr	1			#1	6											1	1																																
Nb				1												9																																	
Ru			9			1				9	9	9	9	9	9			6																															
Ag			9	#9	#9				#9	9	9	#9	#9	#9	9	9	9				#9																												
In			1			#1	#1	1	1	#1						1		#1	#1	1																													
Sn					9	#1	1	1		#1					9		9	#1	1	1		9	#9																										
Sb		1				1	1	1		#1					9			#1				9																											
La					6				6			6	6	6	6	6	#6				6		#5		1																								
Ce		6		6	#6			6	6		6	6	6	6	6	#6	#6	6		6	6		#5	6		6																							
Pr					#6												#6	6					1			6	6																						
Nd					#6												#6						1		1	6		6																					
Pm					6																6			1	1	6	6																						
Sm					#6																		1	1	1																								
Eu					6																		1	1	1		6																						
Gd					#6					1													#1	1	#1																								
Tb					#6					1													1	#1	1	6	6																						
Dy					#6					1													#1	#1	#1		6																						
Ho					#6					1													1	#1	#1		6																						
Er					#6					1													#1	#1	#1																								
Tm					#6																		#1	#1	1																								
Yb					1	6		1			1											6	1	#1	#1																								
Lu					#6																		#1	#1	1		6																						
Hf	1			#1												1	1						#1	1																									
Ta	1				6							9	9	9				6				9	1	1																									
Pt			9	9					9	9	9	9	#9	9	9	9		6		9	9	#9	9	9	9	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	6	9		
Tl	#8	1	1	1		1	1	1	1	1						1		#1	1	1						1		1	1	1	#1	1	#1	1	#1	1	#1	1	#1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	
Pb						1				1			9	9	9			#1	1			9	9	#9		1	1	#1	1	1	#1	1	#1	1	#1	1	#1	1	#1	1	1	1	1	1	1	1	1	9	
Bi	1				9	1	1	1		1				9	9		9	#1				9	9	9	9	1	1	#1	1	1	#1	1	1	#1	1	#1	1	#1	1	#1	1	1	1	1	1	1	1	9	
Th					6							6	6					6				6		1	1	6	6	6																		1	1	1	
U					6				6					6			6	6		6			1	#6					8	#9			6	6							6				1				

Примечание. Приняты следующие обозначения: 1 — прогноз соединений ABPd₂ со структурой фаз Гейслера; 5 — прогноз соединения ABPd₂ со структурой GdSnPt₂; 6 — прогноз соединения ABPd₂ со структурой YSiPd₂; 8 — прогноз соединения ABPd₂ со структурой, отличной от приведенных выше; 9 — прогноз отсутствия соединения состава ABPd₂.

менном металловедении. Исследователи пытаются применить методы квантовой механики для разработки новых металлов и сплавов. Однако следует отметить, что пока с помощью теоретической физики можно лишь объяснить уже изученные факты, но нельзя прогнозировать еще не полученные сплавы и интерметаллические соединения с заданными свойствами. Такая ситуация в значительной мере объясняется сложностью конденсированных металлических систем.

С учетом перечисленных выше фактов понятно, почему вместо точных математических моделей металловеды используют эмпирические и полумэмпирические закономерности, в большей или меньшей степени позволяющие предсказывать структуру и свойства металлов и сплавов. Этим закономерностям соответствует некоторый критерий классификации, найденный на основе анализа экспериментальных данных. Примерами таких классифицирующих закономерностей являются широко известные правила Даркена – Гурри и Юм – Розери для прогноза взаимной растворимости металлов, критерий Матиаса для прогноза новых сверхпроводников с кристаллической структурой типа A15, правило Лавеса для предсказания кристаллической структуры некоторых интерметаллических соединений и т.д. Даже в основе метода физико-химического анализа лежит классификация диаграмм состояния.

Следует отметить, что замена моделей функциональных взаимосвязей, базирующихся на физических теориях и точном математическом аппарате, эмпирическими классификационными схемами характерна для большинства естественных наук. При этом классификация имеет два аспекта:¹⁴⁴ с одной стороны, это процесс познания, включающий построение классификационной схемы, т.е. упорядочение экспериментальных данных, разбиение множества наблюдений на классы, формулировка различий между ними, формирование понятий; с другой — это процесс распознавания — определение статуса нового объекта или явления в уже построенной классификационной схеме.

Прогресс в разработке эмпирических классификационных критериев был достигнут при использовании методов распознавания образов.¹¹ Применение компьютерных программ поиска многомерных классифицирующих закономерностей в больших массивах обновляемой экспериментальной информации позволил резко сократить время и затраты на разработку новых и реконструкцию старых критериев. В отличие от простейших эмпирических критериев, разработанных на основе анализа ограниченного числа свойств химических элементов или аналитических функций этих свойств, критерии, сформированные компьютерной программой, позволяют отобрать любое число свойств компонентов для включения в многомерную классифицирующую закономерность. Форма представления найденных компьютерной программой классификационных правил самая разнообразная; это могут быть аналитические функции, нейронные или растущие пирамидальные сети, логические выражения и т.д. Во многих случаях восприятие, полная физическая интерпретация и анализ классифицирующих закономерностей, полученных с использованием ЭВМ, представляют большие трудности для человека.

Задача анализа и прогнозирования еще не исследованных систем обычно решается компьютером, а человек, введя набор обозначений компонентов химических систем, получает готовый результат. Естественно, что найденные классифицирующие закономерности не являются фундаментальными законами природы. Они лишь указывают области

существования различных классов химических систем в многомерном пространстве свойств компонентов, а прогнозирование в таком случае сводится к поиску аналогов еще не исследованной системы среди уже изученных.

Можно ли с помощью программ поиска многомерных критериев классификации открыть новое явление? Конечно, нет. Классифицирующие закономерности жестко связаны с понятиями и теоретическими представлениями, которые используют в настоящее время в химии и материаловедении. Это обстоятельство определяет как постановку задач классификации химических систем, выбор свойств компонентов для их описания, интерпретацию полученных результатов, так и неоднозначность и неточность прогнозов, основанных на уже существующих понятиях и представлениях. Например, такое ключевое понятие химии, как «соединение», является нечетким, как и большинство понятий, сформулированных человеком. С помощью классификации соединений на дальтониды и бертоллиды, которую используют в физико-химическом анализе, не всегда удастся провести четкую границу, например, между упорядоченными твердыми растворами и разупорядоченными соединениями. К тому же условие термодинамического равновесия при построении диаграмм состояния крайне редко соблюдается при исследовании металлических систем, что ведет к недостоверным результатам.

Вследствие нечеткости (размытости) основных понятий химии и наличия экспериментальных ошибок в обучающих выборках правила классификации, получаемые как человеком, так и компьютером, всегда будут неполными, поэтому прогноз на их основе не может быть абсолютно достоверным. Однако с помощью компьютера гораздо проще и быстрее заново сформировать критерии классификации, включив в обучение ЭВМ информацию о тех химических системах, информация о которых противоречит старым классификационным правилам.

Таким образом, при прогнозировании интерметаллических соединений с помощью программ обучения ЭВМ распознаванию образов удастся найти сложные многомерные классифицирующие закономерности в больших массивах экспериментальной информации об уже изученных металлических системах и с их использованием провести прогнозирование систем с образованием или без образования соединений, получить прогнозы интерметаллидов заданного состава и с определенным типом кристаллической структуры при заданных условиях, а также приблизительно оценить их физические свойства (температуру плавления, температуру перехода в сверхпроводящее состояние и т.д.). При прогнозировании используется информация только о свойствах компонентов не исследованных систем. В результате было предсказано существование сотен новых интерметаллических соединений. Сравнение прогнозов с экспериментальными данными показало, что средняя достоверность прогнозирования металлических и других неорганических соединений превышает 80%.¹¹ Основными условиями успешного применения методов компьютерного конструирования интерметаллидов являются необходимость существования в пространстве свойств компонентов компактных областей, соответствующих разным классам металлических систем, и наличие достаточного количества экспериментального материала для обучения ЭВМ.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 09-07-00194).

Литература

1. Н.С.Курнаков. *Избранные труды. Т. 1.* Изд-во АН СССР, Москва, 1963
2. Е.М.Савицкий, Г.С.Бурханов. *Редкие металлы и сплавы. Физико-химический анализ и металловедение.* Наука, Москва, 1980
3. Н.И.Степанов. *Концепции элементарности в научном познании.* Наука, Москва, 1976
4. М.Хансен, К.Андерко. *Структуры двойных сплавов.* Металлургия, Москва, 1962
5. Р.П.Эллиот. *Структуры двойных сплавов.* Изд-во иностр. лит-ры, Москва, 1970
6. Ф.Шанк. *Структуры двойных сплавов.* Металлургия, Москва, 1973
7. *Binary Alloy Phase Diagrams. Vols 1, 2.* (Ed. Т.В.Massalski). ASM Int.; Materials Park, Ohio, 1990
8. А.Е.Вол, И.К.Каган. *Строение и свойства двойных металлических систем. Т. 3.* Наука, Москва, 1976
9. В.Predel. *Landolt-Bornstein. Numerical Data and Functional Relationship in Science and Technology. New Series. Group IV: Physical Chemistry. V. 5a-j. Phase Equilibria, Crystallographic and Thermodynamic Data of Binary Alloys.* Springer-Verlag, Berlin; Heidelberg, 1991 – 2006
10. *Landolt-Bornstein. Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology. New Series. Group IV: Physical Chemistry. Ternary Alloy Systems Phase Diagrams.* Springer-Verlag, Berlin; Heidelberg, 2004 – 2009
11. Н.Н.Киселева. *Компьютерное конструирование неорганических соединений. Использование баз данных и методов искусственного интеллекта.* Наука, Москва, 2005
12. В.С.Земсков, Н.Н.Киселева, Н.Н.Киселев, В.В.Петухов, Е.А.Черемушкин, Л.Е.Шелимова, Н.В.Кравченко, И.Н.Белокурова. *Неорг. матер.,* **31**, 1198 (1995)
13. Ю.И.Христофоров, В.В.Хорбенко, Н.Н.Киселева, В.В.Подбельский, И.Н.Белокурова, В.С.Земсков. *Изв. ВУЗов. Матер. электр. техн.,* (3), 50 (2001)
14. В.А.Дударев, Н.Н.Киселева, В.С.Земсков. *Персп. матер.,* (5), 20 (2006)
15. N.Kiselyova, S.Iwata, V.Dudarev, I.Prokoshev, V.Khorbenko, V.Zemskov. *Int. J. Inf. Technol. Knowledge,* **2**, 366 (2008)
16. В.С.Земсков, Ф.А.Кузнецов, В.Б.Уфимцев. *Изв. ВУЗов. Матер. электр. техн.,* (3), 13 (1998)
17. P.Villars, N.Onodera, S.Iwata. *J. Alloys Compd.,* **279**, 1 (1998)
18. P.Villars, M.Berndt, K.Brandenburg, K.Cenzual, J.Daams, F.Hulliger, T.Massalski, H.Okamoto, K.Osaki, A.Prince, H.Putz, S.Iwata. *J. Alloys Compd.,* **367**, 293 (2004)
19. Л.В.Гурвич. *Вестн. АН СССР,* (3), 54 (1983)
20. G.V.Belov, V.S.Iorish, V.S.Yungman. *CALPHAD,* **23**, 173 (1999)
21. P.Wang, D.B.Neumann. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.,* **29**, 31 (1989)
22. M.Frenkel, R.D.Chirico, V.Diky, X.Yan, Q.Dong, C.Muzny. *J. Chem. Inf. Model.,* **45**, 816 (2005)
23. V.Diky, C.D.Muzny, E.W.Lemmon, R.D.Chirico, M.Frenkel. *J. Chem. Inf. Model.,* **47**, 1713 (2007)
24. V.Diky, R.D.Chirico, A.F.Kazakov, C.D.Muzny, M.Frenkel. *J. Chem. Inf. Model.,* **49**, 503 (2009)
25. V.V.Diky, R.D.Chirico, R.C.Wilhoit, Q.Dong, M.Frenkel. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.,* **43**, 154 (2003)
26. M.W.Chase, C.A.Davies, J.R.Downey, D.J.Frurip, R.A.McDonald, A.N.Syverud. *J. Phys. Chem. Ref. Data,* **14** (Suppl. 1), 1 (1985)
27. B.Cheyne. *CODATA Bull.,* (58), 18 (1985)
28. R.H.Davies, A.T.Dinsdale, J.A.Gisby, J.A.J.Robinson, S.M.Martin. *CALPHAD,* **26**, 229 (2002)
29. Z.Huang, P.P.Conway, R.C.Thomson, A.T.Dinsdale, J.A.J.Robinson. *CALPHAD,* **32**, 129 (2008)
30. K.Eriguchi, K.Shimura. *ISIJ Int.,* **30**, 409 (1990)
31. C.Y.Ho, H.H.Li. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.,* **33**, 36 (1993)
32. P.J.Spencer. *Z. Metallkd.,* **87**, 535 (1996)
33. A.T.Dinsdale. *CALPHAD,* **15**, 317 (1991)
34. J.-O.Andersson, B.Jansson, B.Sundman. *CODATA Bull.,* (58), 31 (1985)
35. J.-O.Andersson, T.Helander, L.Hoglund, P.Shi, B.Sundman. *CALPHAD,* **26**, 273 (2002)
36. B.Sundman, B.Jansson, J.-O.Andersson. *CALPHAD,* **9**, 153 (1985)
37. A.M.Zahra, C.Y.Zahra, R.Castanet, G.Jaroma-Weiland, G.Neuer. *J. Therm. Anal.,* **38**, 781 (1992)
38. E.Östholts, H.Wanner. *The NEA Thermochemical Data Base Project.* OECD Nuclear Energy Agency, 2000. P. 21
39. C.W.Bale, P.Chartrand, S.A.Degterov, G.Eriksson, K.Hack, R.Ben Mahfoud, J.Melanqon, A.D.Pelton, S.Petersen. *CALPHAD,* **26**, 189 (2002)
40. Y.Xu, M.Yamazaki, H.Wang, K.Yagi. *Mater. Trans.,* **47**, 1882 (2006)
41. A.Belsky, M.Hellenbrandt, V.L.Karen, P.Luksch. *Acta Crystallogr., Sect. B,* **58**, 364 (2002)
42. R.Allmann, R.Hinek. *Acta Crystallogr., Sect. A,* **63**, 412 (2007)
43. G.Bergerhoff, R.Hundt, R.Sievers, I.D.Brown. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.,* **23**, 66 (1983)
44. G.Bergerhoff. *Comput. Phys. Commun.,* **79**, 33 (1984)
45. M.Hellenbrandt. *Crystallogr. Rev.,* **10**, 17 (2004)
46. E.Fluck. *J. Res. NIST,* **101**, 217 (1996)
47. M.J.Carr, W.F.Chambers, D.Melgaard, V.L.Himes, J.Stalick, A.D.Mighell. *J. Res. NIST,* **94**, 15 (1989)
48. A.D.Mighell, V.L.Karen. *J. Res. NIST,* **101**, 273 (1996)
49. H.V.Hart. *J. Appl. Crystallogr.,* **35**, 546 (2002)
50. D.R.Denley, H.V.Hart. *J. Appl. Crystallogr.,* **35**, 552 (2002)
51. G.H.Wood, J.R.Rodgers, S.R.Gough. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.,* **33**, 31 (1993)
52. G.H.Wood, J.R.Rodgers, S.R.Gough, P.Villars. *J. Res. NIST,* **101**, 205 (1996)
53. P.S.White, J.R.Rodgers, Y.Le Page. *Acta Crystallogr., Sect. B,* **58**, 343 (2002)
54. А.В.Чичагов, А.Б.Белоножко, А.Л.Лопатин, Т.Н.Докина, О.Л.Самохвалова, Т.В.Ушаковская, З.В.Шилова. *Кристаллография,* **35**, 610 (1990)
55. J.Faber, T.Fawcett. *Acta Crystallogr., Sect. B,* **58**, 325 (2002)
56. S.N.Kabekkodu, J.Faber, T.Fawcett. *Acta Crystallogr., Sect. B,* **58**, 333 (2002)
57. W.Wong-Ng, H.F.McMurdie, C.R.Hubbard, A.D.Mighell. *J. Res. NIST,* **106**, 1013 (2001)
58. Н.Киселева, Д.Мурат, А.Столяренко, В.Дударев, В.Подбельский, В.Земсков. *Информационные ресурсы России,* (4), 21 (2006)
59. Ю.И.Дегтярев, В.В.Подбельский, Н.Н.Киселева, В.В.Петухов, О.В.Шеханова, А.А.Буш, И.Н.Белокурова, В.А.Пушко. *Изв. ВУЗов. Матер. электр. техн.,* (3), 35 (1999)
60. Н.Н.Киселева, И.В.Прокошев, В.А.Дударев, В.В.Хорбенко, И.Н.Белокурова, В.В.Подбельский, В.С.Земсков. *Неорг. матер.,* **42**, 380 (2004)
61. С.А.Магарилл, С.В.Борисов, Н.В.Подберезская, Е.Н.Ипатова, В.А.Титов, Ф.А.Кузнецов. *Журн. структ. химии,* **36**, 559 (1995)
62. M.A.Van Hove, K.Hermann, P.R.Watson. *Acta Crystallogr., Sect. B,* **58**, 338 (2002)
63. Г.Г.Девярых, И.Д.Ковалев, В.А.Крылов, К.К.Мальшев, Л.И.Осипова. *Изв. ВУЗов. Матер. электр. техн.,* (3), 44 (1999)
64. E.Buck, E.M.Frankl. *Chem. Eng. Progr.,* **80**, 82 (1984)
65. D.A.Palmer. *AIChE Symp. Ser.,* **86**, 1 (1990)
66. Q.Dong, A.K.R.Dewan, K.N.Marsh. *Int. J. Thermophys.,* **20**, 237 (1999)
67. G.H.Thomson, A.H.Larsen. *J. Chem. Eng. Data,* **41**, 930 (1996)
68. W.V.Wilding, R.L.Rowley, J.L.Oscarson. *Fluid Phase Equil.,* **150–151**, 413 (1998)

69. Y.Asada, E.Nakada, T.Yokokawa, Y.Kurihara, A.Yoshikawa. *J. Mater. Sci. Soc. Jpn.*, **24**, 199 (1988)
70. I.Ohnuma, X.J.Liu, H.Ohtani, K.Ishida. *J. Electron. Mater.*, **28**, 1164 (1999)
71. X.J.Liu, I.Ohnuma, C.P.Wang, R.Kainuma, K.Ishida, M.Ode, T.Koyama, H.Onodera, T.Suzuki. *J. Electron. Mater.*, **32**, 1265 (2003)
72. X.J.Liu, K.Oikawa, I.Ohnuma, R.Kainuma, K.Ishida. *JOM*, **55**, 53 (2003)
73. L.Xu, G.Li, S.Wang, H.Lu, H.Wang, C.Hu, X.Jiang, Y.Xiao, Y.Xiao, X.Lu. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, **31**, 375 (1991)
74. S.Talbot-Besnard, M.Rubinstein, C.Droniou. *Ann. Chim. (France)*, **13**, 611 (1988)
75. Е.Г.Морозов, И.М.Ратнер, В.М.Авербух, Д.Р.Бернштейн, И.И.Марцоха. *Неорг. матер.*, **29**, 1332 (1993)
76. L.Fokin, V.Popov, A.Kalashnikov, L.Zarkova, P.Pirgov, I.Petkov. *Int. J. Thermophys.*, **11**, 1497 (2001)
77. M.Nagy, H.H.Over, E.Wollfart. *Data Sci. J.*, **4**, 151 (2005)
78. V.Janovec, P.E.Tomaszewski, L.Richterova, J.Fabry, Z.Kluiber. *Ferroelectrics*, **301**, 169 (2004)
79. Y.Kaji, Y.Miwa, T.Tsukada, H.Tsuji, H.Nakajima. *J. Nucl. Sci. Technol.*, **37**, 949 (2000)
80. H.Tsuji, N.Yokoyama, M.Fujita, Y.Kurihara, S.Kano, Y.Tachi, K.Shimura, R.Nakajima, S.Iwata. *J. Nucl. Mater.*, **271–272**, 486 (1999)
81. Y.Kaji, H.Tsuji, M.Fujita, Y.Xu, K.Yoshida, S.Mashiko, K.Shimura, S.Miyakawa, T.Ashino. *Data Sci. J.*, **3**, 88 (2004)
82. D.J.Scott, S.Manos, P.V.Coveney, J.C.H.Rossiny, S.Fearn, J.A.Kilner, R.C.Pullar, N.McN.Alford, A.-K.Axelsson, Y.Zhang, L.Chen, S.Yang, J.R.G.Evans, M.T.Sebastian. *J. Chem. Inf. Model.*, **42**, 449 (2008)
83. R.Caracas. *J. Appl. Crystallogr.*, **35**, 120 (2002)
84. А.М.Зырянов, В.И.Луцык. *Вестн. Бурят. гос. ун-та*, (1), 134 (2004)
85. Y.A.Chang, Y.Yang. In *Methods for Phase Diagram Determination*. (Ed. J.-C.Zhao). Elsevier, Oxford, 2007. P. 273
86. Е.М.Савицкий, Ю.В.Девингталь, В.Б.Грибуля. *Докл. АН СССР*, **178**, 79 (1968)
87. Е.М.Савицкий, В.Б.Грибуля. *Прогнозирование неорганических соединений с помощью ЭВМ*. Наука, Москва, 1977
88. Е.М.Савицкий, В.Б.Грибуля, Н.Н.Киселева, М.Ристич, З.Николич, З.Стойилькович, М.Живкович, И.П.Арсентьева. *Прогнозирование в материаловедении с применением ЭВМ*. Наука, Москва, 1990
89. Ю.В.Девингталь. *Изв. АН СССР. Техн. киберн.*, **3**, 139 (1971)
90. Ю.В.Девингталь. *Изв. АН СССР. Техн. киберн.*, **1**, 162 (1968)
91. В.М.Воздвиженский, В.Я.Фалевич. В кн. *Общие закономерности в строении диаграмм состояния металлических систем*. Наука, Москва, 1973. С. 119
92. В.М.Воздвиженский. *Прогноз двойных диаграмм состояния*. Металлургия, Москва, 1974
93. М.А.Айзерман, Э.М.Браверман, Л.И.Розоноэр. *Метод потенциальных функций в теории обучения машин*. Наука, Москва, 1970
94. Ю.И.Журавлев, В.В.Никифоров. *Кибернетика*, (3), 1 (1971)
95. А.С.Ленович. *Кибернетика*, (3), 142 (1974)
96. Б.Б.Гуляев, Л.Ф.Павленко. *Автоматика и телемеханика*, 131 (1973)
97. Y.Li. *Mater. Sci. Eng. A*, **433**, 261 (2006)
98. L.Breiman, J.Friedman, R.Olshen, C.Stone. *Classification and Regression Trees*. Chapman and Hall, New York, 1984
99. С.А.Кутолин, И.А.Вашуков, В.И.Котюков. *Изв. АН СССР. Неорг. матер.*, **14**, 215 (1978)
100. С.А.Кутолин, В.И.Котюков. *Журн. физ. химии*, **52**, 918 (1978)
101. С.А.Кутолин, В.И.Котюков. *Журн. физ. химии*, **53**, 2446 (1979)
102. С.А.Кутолин, С.Н.Комарова, Ю.А.Фролов. *Журн. физ. химии*, **56**, 996 (1982)
103. D.O.Hebb. *The Organization of Behavior*. Wiley, New York, 1949
104. Т.Кохонон. *Ассоциативная память*. Мир, Москва, 1980
105. J.J.Hopfield. *Proc. Nat. Acad. Sci. USA*, **79**, 2554 (1982)
106. В.В.Корнеев, А.Ф.Гареев, С.В.Васютин, В.В.Райх. *Базы данных. Интеллектуальная обработка информации*. Издатель Молгачева С.В., Москва, 2001
107. В.П.Гладун. *Процессы формирования новых знаний*. Педагог-6, София, 1995
108. P.Villars, K.Brandenburg, M.Berndt, S.LeClair, A.Jackson, Y.-H.Pao, B.Igel'nik, M.Oxley, B.Bakshi, P.Chen, S.Iwata. *J. Alloys Compd.*, **317–318**, 26 (2001)
109. J.Guo. *Acta Met. Sin.*, **35**, 427 (1999)
110. L.-M.Yan, Q.-B.Zhan, P.Qin, N.-Y.Chen. *J. Rare Earths*, **12**, 102 (1994)
111. N.Chen, C.Li, S.Yao, X.Wang. *J. Alloys Compd.*, **234**, 130 (1996)
112. C.Li, M.Li, B.Tang, S.Huang, W.Zhang, N.Chen. *Trans. Nonferrous Met. Soc. China*, **4**, 37 (1994)
113. S.L.Thaler. *J. Alloys Compd.*, **279**, 47 (1998)
114. S.Mohorianu, M.Lozaan. *Rom. J. Phys.*, **52**, 361 (2007)
115. S.Serajzadeh. *Mater. Sci. Eng.*, **A472**, 140 (2008)
116. J.Kusiak, M.Pietrzyk. In *Proceeding of the 2nd International Conference on Intelligent Processing and Manufacturing of Materials (IPMM 99)*. Vol. 2. West Coats Reproduction Center, Vancouver, 1999. P. 773
117. A.Bahrami, S.H.Mousavi Anijdan, A.Ekrami. *J. Alloys Compd.*, **392**, 177 (2005)
118. C.L.P.Chen, Y.Cao, S.R.LeClair. *J. Alloys Compd.*, **279**, 30 (1998)
119. Е.М.Савицкий, Н.Н.Киселева. *Изв. АН СССР. Металлы*, (5), 182 (1985)
120. Н.Н.Киселева, Г.С.Бурханов. *Изв. АН СССР. Неорг. матер.*, **23**, 2006 (1987)
121. Н.Н.Киселева, Г.С.Бурханов. *Изв. АН СССР. Металлы*, (1), 218 (1989)
122. Е.М.Савицкий, Н.Н.Киселева. *Изв. АН СССР. Металлы*, (1), 191 (1984)
123. Н.Н.Киселева, Е.М.Савицкий. *Изв. АН СССР. Неорг. матер.*, **19**, 489 (1983)
124. Н.Н.Киселева. *Изв. АН СССР. Металлы*, (2), 213 (1987)
125. N.N.Kiselyova. In *Intermetallic Compounds. Vol. 3. Principles and Practice* (Eds J.H.Westbrook, R.L.Fleischer). Wiley, New York, 2002. P. 811
126. N.N.Kiselyova. *J. Alloys Compd.*, **197**, 159 (1993)
127. N.Y.Chen, W.C.Lu, J.Yang, G.Z.Li. *Support Vector Machine in Chemistry*. World Scientific Publishing, Singapore, 2004
128. T.Gu, W.Lu, X.Bao, N.Chen. *Solid State. Sci.*, **8**, 129 (2006)
129. X.Liu, W.Lu, S.Jin, Y.Li, N.Chen. *Chemometr. Intell. Labor. Syst.*, **82**, 8 (2006)
130. N.Kiselyova, A.Stolyarenko, V.Ryazanov, V.Podbel'skii. *Int. J. Inform. Theor. Appl.*, **15**, 345 (2008)
131. Ю.И.Журавлев, В.В.Рязанов, О.В.Сенько. *Распознавание. Математические методы. Программная система. Практические применения*. ФАЗИС, Москва, 2006
132. J.H.V.J.Brabers, K.H.J.Buschow, F.R.de Boer. *Phys. Rev. B*, **59**, 9314 (1999)
133. A.K.Nigam, S.B.Roy, P.Chaddah. *Phys. Rev. B*, **60**, 3002 (1999)
134. H.Winkelmann, M.M.Abd-Elmeguid, H.Micklitz, J.P.Sanchez, P.Vulliet, K.Alami-Yadri, D.Jaccard. *Phys. Rev. B*, **60**, 3324 (1999)
135. L.Omejec, Z.Ban. *Z. Anorg. Allg. Chem.*, **380**, 111 (1971)
136. K.-U.Neumann, J.Crangle, M.J.Parsons, W.Taylor, B.Ouladdiaf, T.Kanomata, H.Mitamura, F.Ishikawa, T.Goto, B.Dennis, K.R.A.Ziebeck. *J. Magn. Magn. Mater.*, **251**, 186 (2002)
137. A.W.Carbonari, R.N.Saxena, W.Pendl, J.Mestnik Filho, R.N.Attili, M.Olzon-Dionysio, S.D.de Souza. *J. Magn. Magn. Mater.*, **163**, 313 (1996)

138. Y.Ijiri, F.J.DiSalvo, H.Yamane. *J. Solid State Chem.*, **122**, 143 (1996)
139. R.Tickle, R.D.James. *J. Magn. Magn. Mater.*, **195**, 627 (1999)
140. R.Weht, W.E.Pickett. *Phys. Rev. B*, **60**, 13006 (1999)
141. L.Devroye, L.Gyorfi, A.Krzyzak, G.Lugosi. *Ann. Statist.*, **22**, 1371 (1994)
142. О.В.Сенько. *Журн. вычисл. матем. матем. физ.*, **35**, 1552 (1995)
143. A.Dokukin, O.Senko. *Int. J. Inform. Theor. Appl.*, **11**, 371 (2004)
144. *Математические методы в экономике и международных отношениях. Вып. 2. Изд-во ИМЭМО АН СССР, Москва, 1973*

PREDICTION OF INTERMETALLIC COMPOUNDS

G.S.Burkhanov, N.N.Kiselyova

*A.A.Baikov Institute of Metallurgy and Materials Science, Russian Academy of Sciences
49, Leninsky prosp., 119991 Moscow, Russian Federation, Fax +7(499)135–8680*

The problems of predicting not yet synthesized intermetallic compounds are discussed. It is noted that the use of classical physicochemical analysis in the study of multicomponent metallic systems is faced with the complexity of presenting multidimensional phase diagrams. One way of predicting new intermetallics with specified properties is the use of modern processing technology with application of teaching of image recognition by the computer. The algorithms used most often in these methods are briefly considered and the efficiency of their use for predicting new compounds is demonstrated.

Bibliography — 144 references.

Received 2nd February 2009