

## ПРОГНОЗИРОВАНИЕ НОВЫХ ГАЛОЭЛЬПАСОЛИТОВ

© 2016 г. Н. Н. Киселева\*, А. В. Столяренко\*, В. В. Рязанов\*\*, О. В. Сенько\*\*, А. А. Докукин\*\*

\*Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова РАН, Москва

\*\*Вычислительный центр им. А.А. Дородницына РАН, Москва

E-mail: kis@imet.ac.ru

Поступила в редакцию 10.09.2014 г.

Проведено прогнозирование еще не полученных эльпасолитов состава  $A_2BCHal_6$  (А и С – разные одновалентные металлы; В – трехвалентные металлы; Hal – F, Cl, Br). При прогнозировании использованы только данные о свойствах элементов и простых галогенидов. Расчеты проведены с применением специальной программной системы компьютерного анализа информации, основанной на методах распознавания образов по прецедентам.

DOI: 10.7868/S0044457X16050093

Поиск и исследование галогенидных соединений состава  $A_2^+B^{3+}C^+Hal_6$  (А и С – одновалентные металлы; В – трехвалентные металлы; Hal – F, Cl, Br, I) с кристаллической структурой типа эльпасолита (пр. гр.  $Fm\bar{3}m$ ) связаны с разработкой новых люминесцентных [1–4], лазерных [5] и магнитных [6, 7] материалов. Согласно базе данных (БД) по свойствам неорганических соединений [8], наиболее изучены эльпасолиты во фторидных и хлоридных системах. Значительно менее исследованы эльпасолиты с бромом и иодом, при этом в последние годы бромозельпасолиты интенсивно изучаются как сцинтилляционные [1, 3] и лазерные материалы [5]. Целью настоящей работы является конструирование новых соединений со структурой эльпасолита в системах А–В–С–Hal (Hal – F, Cl, Br) с использованием теоретических методов.

## ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ

В связи с тем что элементарная ячейка эльпасолита может рассматриваться как искаженная перовскитная с удвоенными параметрами [9], были предприняты попытки [9–14] использовать для прогнозирования новых соединений с этой кристаллической структурой широко известный фактор толерантности Гольдшмидта и его модификации, включающие функции от ионных радиусов компонентов. Наши попытки применить модифицированный в [10–14] фактор толерантности  $t = \sqrt{2}(r_A + r_{Hal}) / (r_B + r_C + 2r_{Hal})$ , где  $r$  – ионные радиусы по Шеннону, показали, что наблюдается значительное пересечение областей устойчивости кубических эльпасолитов с областями соединений с другими типами кристаллических

структур ( $Cs_2NaCrF_6$ , криолита и т.д.). Использование других критериев [9], основанных на размерных факторах, также не привело к полному разделению областей существования соединений

$A_2^+B^{3+}C^+Hal_6$  с разными типами кристаллических структур. Аналогичные выводы сделаны и авторами [15], которые, помимо размерных факторов, предложили использовать электроотрицательности химических элементов. Следует отметить, что на необходимость рассмотрения не только размерных факторов при прогнозировании галогенидных соединений указывали и авторы [16–18]. Однако размеры ионов и/или электроотрицательности являются важным, но далеко не полным набором свойств компонентов, определяющим тип кристаллической структуры соединений состава  $A_2^+B^{3+}C^+Hal_6$ . В [19] нами было предложено использовать для прогнозирования соединений состава  $A_2^+B^{3+}C^+F_6$  со структурой эльпасолита методы поиска закономерностей в данных, основанные на алгоритмах распознавания образов по прецедентам [20–22], которые позволяют найти критерии, включающие широкий набор свойств компонентов, что дает возможность более точно разделить соединения с различными типами кристаллических структур.

## МЕТОДЫ РАСЧЕТА

Расчеты проведены с использованием разработанной нами [22] специальной информационно-аналитической системы (ИАС), которая объединяет комплекс баз данных по свойствам неорганических веществ и материалов с подсистемой анализа данных, включающей программы распо-

знавания образов. Процедуру расчета можно условно разделить на несколько этапов.

**1. Отбор информации о веществах для компьютерного анализа.** На этом этапе в БД по свойствам неорганических соединений [8], включенной в ИАС, проводили поиск информации о соединениях  $A_2^+B^{3+}C^+Na_6$ , а также системах  $ANa_1-BNa_3-CNa_1$ , в которых соединение такого состава не образуется при обычных условиях (комнатной температуре и атмосферном давлении). Перед включением в выборку для расчетов найденную информацию подвергали тщательной экспертной оценке, которая была направлена на анализ противоречивых данных. Учитывая полиморфизм исследуемых соединений, большое значение на этом трудоемком и полностью не формализуемом этапе имеет сравнительный анализ тысяч полных текстов статей, монографий и справочников, включенных в БД.

**2. Выбор свойств компонентов** (химических элементов и/или простых галогенидов). Исходные наборы свойств формировались на основе физико-химических представлений о природе исследуемых классов веществ. Информацию о свойствах элементов брали из разработанной нами БД (<http://phases.imet-db.ru/elements>), а информацию о галогенидах — из БД по свойствам простых галогенидов, включенной в ИАС. С помощью специальных программ ИАС для отбора наиболее важных для классификации свойств проводили поиск параметров компонентов для включения в искомый критерий. На этом этапе возможна автоматическая генерация алгебраических функций от исходных свойств компонентов и отбор наиболее классифицирующих из них, что значительно упрощает формирование искомого критерия.

Результатом первых двух этапов является выборка для компьютерного анализа (обучающая выборка) в виде матрицы, каждая строка которой содержит набор значений свойств компонентов вещества конкретного состава, отобранного на этапе 1, с указанием одного из заранее известных классов (например, типа кристаллической структуры), к которому это вещество относится.

**3. Выбор алгоритмов распознавания образов.** Сформированная выборка подвергается процедуре компьютерного анализа с помощью комплекса программ распознавания образов по прецедентам, включенных в ИАС. Цель такого анализа — поиск критериев, позволяющих разделить на заранее заданные классы не только вещества, данные о которых включены в обучающую выборку, но и еще не исследованные сочетания компонентов. В настоящем исследовании такими классами были химические системы  $ANa_1-BNa_3-CNa_1$  с образованием и отсутствием соединений состава  $A_2^+B^{3+}C^+Na_6$ , а также соединения

указанного состава с различными типами кристаллических структур при обычных условиях. Пятнадцать программ распознавания образов, входящих в настоящее время в ИАС, формировали 15 критериев, точность прогнозирования которых оценивали с помощью широко используемой в прикладной информатике процедуры скользящего контроля, которая подробно описана в [20, 23]. Результатом этого этапа являлся выбор наиболее точных алгоритмов распознавания образов и наиболее информативных подмножеств свойств компонентов.

**4. Формирование критериев.** В силу специфики алгоритмов каждая из отобранных программ распознавания образов взаимно дополняет друг друга, давая точные результаты для разных наборов веществ. Для того чтобы сформировать обобщенный критерий, использующий достоинства различных алгоритмов, используется стратегия принятия коллективного решения с применением специальных программ [20, 22], включенных в ИАС. Однако и эти программы формируют критерии с разной точностью прогнозирования, которую оценивали с помощью экзаменационного распознавания для 100 веществ, данные о которых случайно выбраны из обучающих выборок и не используются при обучении ЭВМ (на завершающем этапе прогнозирования эти контрольные примеры возвращаются в выборку для анализа).

Результатом двух последних этапов является обобщенный критерий образования соединений, относящихся к разным классам веществ, который получен с использованием набора из наиболее точных алгоритмов распознавания образов и алгоритма принятия коллективного решения и включает наиболее информативный набор свойств компонентов.

**5. Прогнозирование.** Найденный критерий включает только свойства компонентов и может иметь различную форму (булевское выражение, система уравнений или неравенств, обученная нейронная или растущая пирамидальная сеть и т.д.). Учитывая тот факт, что полученный критерий часто имеет сложный вид, для автоматизации процедуры прогнозирования в ИАС включена специальная подсистема, которая подставляет в найденный критерий значения свойств компонентов и прогнозирует принадлежность вещества к тому или иному заданному классу.

Задача прогнозирования новых галоэльпасолитов включала решение трех промежуточных задач. В первой из них (задача 1) прогнозировалось образование соединений состава  $A_2^+B^{3+}C^+Na_6$ . Следующая задача включала поиск критериев и прогнозирование образования соединений указанного состава с наиболее распространенными типами кристаллических структур (эльпасолита или  $Cs_2NaCrF_6$  (пр. гр.  $R\bar{3}m$ )). Последняя задача разбивалась на две. При решении первой из них

проводили многоклассовое прогнозирование принадлежности к четырем из классов: эльпасолитам, соединениям со структурой  $\text{Cs}_2\text{NaCrF}_6$ , соединениям со структурой, отличной от приведенных выше, и системам с отсутствием соединений состава  $\text{A}_2\text{V}^{3+}\text{C}^+\text{Hal}_6$  (задача 2), а потом последовательное разделение галогенидных систем на три класса: целевой класс 1 – эльпасолиты, класс 2 – соединения со структурой, отличной от эльпасолита, и класс 3 – отсутствие соединений

состава  $\text{A}_2\text{V}^{3+}\text{C}^+\text{Hal}_6$  в системе  $\text{AHal}-\text{VHal}_3-\text{CHal}$  (задача 3). Все результаты прогнозировали для обычных условий. Окончательное решение о классе веществ, к которому принадлежит прогнозируемое соединение, принимали на основе сравнения прогнозов, полученных при решении всех трех задач. Если результаты противоречили друг другу, то прогноз считался неопределенным и в соответствующей таблице прогнозов оставлялась пустая позиция.

Особенностью настоящего исследования по сравнению с ранее выполненными работами было усложнение состава прогнозируемых соединений. Ранее, даже при прогнозировании четверных соединений [19], фиксировали четвертый компонент. В настоящей работе варьировали все четыре элемента, входящие в состав соединений. Усложнение состава потребовало не только создания БД по свойствам четверных соединений, которая в настоящее время содержит информацию о более чем 31 тысяче соединений, образованных четырьмя элементами [8], но и модификации программ ИАС.

### РАСЧЕТНАЯ ЧАСТЬ

После экспертной оценки в выборку для компьютерного анализа была отобрана информация о 289 соединениях состава  $\text{A}_2\text{V}^{3+}\text{C}^+\text{Hal}_6$  ( $\text{A} \neq \text{C}$ ) со структурой эльпасолита, о 20 соединениях с кристаллической структурой типа  $\text{Cs}_2\text{NaCrF}_6$ , 57 соединениях с кристаллической структурой, отличной от приведенных выше при обычных условиях, и 81 системе  $\text{AHal}-\text{VHal}_3-\text{CHal}$ , в которых не образуются соединения состава  $\text{A}_2\text{V}^{3+}\text{C}^+\text{Hal}_6$ .

В исходный набор параметров компонентов были включены следующие свойства химических элементов А, В, С и Hal (значения свойств см. в БД <http://phases.imet-db.ru/elements>): псевдопотенциальный радиус (по Цангеру), ионный радиус (по Шеннону), расстояния до внутренних и до валентных электронов (по Шуберту), энергии ионизации первого, второго и третьего электронов ( $E5$ ,  $E6$  и  $E7$ ), номера по Менделееву–Петтифору ( $M1-M11$ ), номер группы в Периодической системе, квантовый номер, количество валентных электронов, электроотрицательность (по Полин-

гу), химический потенциал Мидемы, температуры плавления и кипения, теплопроводность, молярная теплоемкость, энтальпия атомизации, стандартная энтропия и т.д., а также термические параметры простых галогенидов одновалентных и трехвалентных элементов (температура плавления (распада), стандартные энтропия ( $S$ ), теплота образования, изобарная теплоемкость и изобарный потенциал образования) – всего 134 значения для каждой системы  $\text{A}-\text{B}-\text{C}-\text{Hal}$ .

### РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Расчеты показали, что наиболее важными для классификации систем  $\text{AHal}-\text{VHal}_3-\text{CHal}$  с образованием и отсутствием соединений состава  $\text{A}_2\text{V}^{3+}\text{C}^+\text{Hal}_6$  алгебраическими функциями являются:  $E6(\text{A})/E7(\text{B})$  и  $S(\text{VHal}_3)/S(\text{AHal})$ . Однако анализ расположения точек, соответствующих этим двум классам химических систем, на проекциях, координатами которых являются отобранные функции, показывает, что полного разделения классов достичь не удалось. Дальнейшие компьютерные эксперименты также показали, что средняя точность экзаменационного прогнозирования различными программами распознавания образов в режиме скользящего контроля с использованием критериев, включающих только две вышеуказанные функции, на 11% ниже, чем в случае использования критериев, в состав которых входят только исходные свойства компонентов. В последнем случае критерий, являющийся результатом работы программ распознавания образов по прецедентам (алгоритмы построения логических закономерностей, обучения нейронной сети, методов  $k$ -ближайших соседей и опорных векторов), обеспечивающих наивысшую точность прогнозирования в режиме скользящего контроля, и программы принятия коллективного решения, основанной на алгоритме обобщенного полиномиального корректора, дал наилучшую оценку точности прогнозирования – 95%.

Критерии, включающие только найденные в результате расчетов функции  $M7(\text{A}) \cdot M11(\text{A})$ ,  $E6(\text{A})/E7(\text{Hal})$  и  $E6(\text{A}) + E6(\text{B})$ , наиболее важные для классификации соединений  $\text{A}_2\text{V}^{3+}\text{C}^+\text{Hal}_6$  по типу кристаллической структуры при обычных условиях, также по результатам экзаменационного распознавания в режиме скользящего контроля не дали результаты, лучшие, чем при использовании исходных параметров компонентов. При решении задачи 2 многоклассового прогнозирования коллектив алгоритмов, включающий методы бинарных решающих деревьев,  $k$ -ближайших соседей и опорных векторов, а также обучение многослойного перцептрона и нейронной сети, и алгоритм выпуклого стабилизатора для принятия коллективного решения обеспечили наилучшую

Таблица 1. Прогнозы типа кристаллической структуры соединений состава  $A_2BCF_6$ 

C	Li				Na			K			Rb			Cs				
	A	Na	K	Rb	Cs	K	Rb	Cs	Na	Rb	Cs	Na	K	Cs	Li	Na	K	Rb
Al		#3	#2	#2	#3	#1	#1	#2	#1	#1	#1	1	1	#1	4		#4	
Sc		4			#4	#1	#1	#1	#4	#1	#1	4	1	1	#4	4	1	1
Ti			#1	#2		#1	#1	2	4	#1	#1	4	1	1	4	4		1
V		1	#1	#2	#3	#1	#1		4	#1	#1	4	1	1	4	4		1
Cr		1	#1	#2	#3	#1	#1	#2	4	#1	#1	4	1	#1	4	4		1
Mn			#1	2	3	#3	#3	#3	#4	#3	#3	4			4	4		
Fe			1	#2	3	#1	#1	#2	4	#1	#1	4	1	1	4	4		1
Co			#1	#2	3	#1	#1	#2	4	#1	#1	4	1	#1	4	4		1
Ga			#1	#2	#3	#1	#1	2		#1	#1		1	1	4	4	1	1
Y		4			#4	#1	#1	#1	#4	#3	#1	4		#1	#4	4	1	
Mo			1		3	#1	#1	1	4	#1	#1	4		1	4	4		1
In			#1	1	3	#1	#1	#1		#1	#1		1	1	4		1	#1
Sb					3	1	1	1		1	1		1	1	4	4	1	1
La		#4	#4	#4	#4	#4	#4	#4	#4	#4	#1	#4	#4	#4	#4	#4		#4
Ce		#4	4				1	#1	4	#1	#1	4	#1	#1	4	4	#1	#1
Pr		4	4			1	1	1	4	1	#1	4	1	#1	4	4	1	1
Nd		4	4			1	1	1	4	1	#1	4	1	#1	4	4	1	1
Pm		4					1	1	4		1	4	1	1	4	4	1	1
Sm		4	4			1	#1	#1	4	1	#1	4	1	#1	4	4	1	1
Eu		4				1	#1	#1	4		#1	4		#1	4	4	1	1
Gd		4					#1	#1	4		#1	4	1	#1	4	4	1	1
Tb		4					#1	#1	4	#3	#1	4	1	#1	4	4	1	1
Dy		4				#3	#1	#3	4	#3	#1	4		#1	4	4	1	
Ho		4					#1	#1	4	#3	#1	4		#1	4	4	1	
Er		4					#1	#1	4		#1	4		#1	4	4	1	
Tm		4	1	1	1	#1	#1	#1	4	#1	#1	4	1	#1	4	4	1	1
Yb		4	1	1	1	1	#1	#1	4	1	#1	4	1	#1	4	4	1	1
Lu		4	1			1	#1	#1	4		#1	4		#1	4	4	1	1
Bi				1	1	1	#1	#1		#3	#1			#1				
U		4	4					1	4	1	1	4	1	1	4	4	1	1
Pu		#4	4				1	1	4	1	1	4	1	1	4	4	1	1

точность экзаменационного прогнозирования – 89% при включении в искомый критерий только свойств компонентов. При формировании критерия, позволяющего отделить эльпасолиты от соединений с другой кристаллической структурой и систем без образования соединений состава  $A_2BCNa_6$  (задача 3), наивысшую точность (80%) дал коллектив алгоритмов, включающий алгоритмы построения логических закономерностей, обучения нейронной сети, методов  $k$ -ближайших соседей и опорных векторов, и алгоритм принятия коллективного решения, основанный на ме-

тоде Байеса, причем в состав критерия входили только свойства компонентов.

Сформированные критерии были использованы для прогнозирования возможности образования и типа кристаллической структуры при обычных условиях еще не полученных соединений. Часть результатов сравнения прогнозов, найденных при решении всех трех классификационных задач, представлена в табл. 1–3. Приняты следующие обозначения: 1 – прогноз соединений с кристаллической структурой эльпасолита, 2 – прогноз соединений с кристаллической структу-

Таблица 2. Прогнозы типа кристаллической структуры соединений состава  $A_2BCl_6$

C	Li					Na					K				Rb				Cs					
	A	Na	K	Rb	Cs	Tl	Li	K	Rb	Cs	Tl	Li	Na	Rb	Cs	Li	Na	K	Cs	Li	Na	K	Rb	
B																								
Al	4	#4		4	1	4	#4		#4	1	#4	#4		4	4	4		4	4	#4			4	
Sc	4	#3	#1	#2	#1	4		#1	#1	#3	4	4	1	#1	4	4		#4	4	4			#4	
Ti	4	3				4	1	1	#1	1	4	4		1	4	4		1	4	4				
V	4		#3	#3		4	#1	#1	1	1	4	4		1	4	4		1	4	4				
Cr	4	3		#3	1	4	#1	#1	1	#1	4	4	#3	#1	4	#4			4	4				
Fe	4	#4	3			4	#4	1	#1	1	#4	#4			4	4		#4	4	4			#4	
Y	4		#1	#1	1	4	#4	#3	#1		4	#4	1	#1	4	4	1	1	4	4	1	1		
In	4		#1	#3		4	1	#1	#3		4	4		#3	4	4			4	4				
La	#4	#4		#1	1	#4	4		#1		#4	4	1	#1	4	4	1	1	4	4	1	1		
Ce	4	#4		#1		4	4		#1		#4	4	1	1	4	4	1	1	4	4	1	1		
Pr	#4	#4	#4	#1	3	#4	#4	#4	#1		#4	#4	1	#1	#4	#4	1	1	4	#4	1	1		
Nd	4	4		#1	3	4	#4		#1		4	#4	1	#1	4	4	1	1	4	4	1	1		
Pm	4	4		1	3	4	4		1		4	4	1	1	4	4	1	1	4	4	1	1		
Sm	4		#3	#1	3	4	#4		#1		4	#4	1	#1	4	4	1	1	4	4	1	1		
Eu	4		#3	#1	3	4	4	#3	#1		4	4	1	#1	4	4	1	1	4	4	1	1		
Gd	4		#3	#1	3	4	4	#3	#1		4	4	1	#1	4	4	1	1	4	4	1	1		
Tb	4		#1	#1	3	4	4	3	#1		4	4	1	#1	4	4	1	1	4	4	1	1		
Dy	4		#1	#1	3	4	#4	#3	#1		4	#4	1	#1	4	4	1	1	4	4	1	1		
Ho	4		#1	#1	3	4	4	#3	#1		4	4	1	#1	4	4	1	1	4	4	1	1		
Er	4		#1	#1	3	4	4	#3	#1		4	4	1	#1	4	4	1	1	4	4	1	1		
Tm	4	#3	#1	#1	#3	4		#3	#1	#3	4	4	1	#1	4	4	1	1	4	4	1	1		
Yb	4		#1	#1	#3	4		#3	#1		4	4	1	#1	4	4	1	1	4	4	1	1		
Lu	4		#1	#3	#3	4		#3	#1		4	4	1	1	4	4	1	1	4	4	1	1		
Tl	4		1			4	1	1	#1		4		1	1	4	4	1	1	4		1	1		
U	#4	#4	1	#1	3	#4		#3	#1	3	#4	4		1	4	4		1	4	4			1	
Pu	4	4		1	3	4	4	3	#1	3	4	4	1	1	4	4		1	4	4			1	

рой типа  $Cs_2NaCrF_6$ , 3 – прогноз соединений с кристаллической структурой, отличной от приведенных выше, 4 – прогноз отсутствия соединения состава  $A_2V^{3+}C^+NaCl_6$  в системе  $ANaCl-BNaCl_3-CNal$ . Здесь и далее значком # обозначены ранее изученные вещества, информация о которых использована для обучения ЭВМ.

Анализ полученных таблиц прогнозов показывает, что наибольшее количество новых эльпасолитов прогнозируется в хлоридных системах. Компьютерные эксперименты по поиску свойств компонентов, наиболее важных для классификации соединений по типу кристаллической структуры или по возможности образования при определенных внешних условиях, дает основание для утверждения, что использование двух-трех параметров элементов или более простых соединений или нескольких алгебраических функций от этих

свойств не позволяет с достаточной точностью разделить вещества разных классов. Только использование широкого набора свойств компонентов может обеспечить приемлемую достоверность прогнозирования, потому что более полно позволяет учесть особенности разных по составу веществ. Поиск таких многомерных критериев может быть автоматизирован с помощью программ анализа данных, основанных на методах распознавания образов по прецедентам.

Как правило, основное возражение разработчиков традиционных критериев, включающих ограниченное количество параметров элементов, связано со сложностью закономерностей, получаемых с применением компьютерных методов анализа. Действительно, набор узлов обучающей растущей пирамидальной сети или система уравнений плохо воспринимается химиком. Один из

Таблица 3. Прогнозы типа кристаллической структуры соединений состава  $A_2BCBr_6$ 

C	Li				Na				K		Rb		Cs				
	A	Na	K	Rb	Cs	Li	K	Rb	Cs	Rb	Cs	K	Cs	Li	Na	K	Rb
Sc			3		#3	4	1	1	#1	1	#1	1	1	4	4	1	1
Y	4	1			#1	4	1	1	#1	1	1	1	1	4	4	1	1
La	4			1	#1	4	3		#3	1	1	1	1	4	4	1	1
Ce	4			1	#1	4	3	1	#1	1	1	1	1	4	4	1	1
Pr	4	4	1		#1	4	3	1	#1	1	1	1	1	4	4	1	1
Nd	4	4	1		#1	4	3	1	#1	1	1	1	1	4	4	1	1
Pm	4			1	1	4		1	1	1	1	1	1	4	4	1	1
Sm	4			1	#1	4	3	1	#1	1	1	1	1	4	4	1	1
Eu	4			1	#1	4		1	#1	1	1	1	1	4	4	1	1
Gd	4				#1	4		1	#1	1	1	1	1	4	4	1	1
Tb	4				#1	4	1	1	#1	1	1	1	1	4	4	1	1
Dy	4				#1	4	1	1	#1	1	1	1	1	4	4	1	1
Ho	4				#1	4	1	1	#1	1	1	1	1	4	4	1	1
Er	4				#1	4	1		#1	1	1	1	1	4	4	1	1
Tm	4				#2	4	1	1	#1	1	#1	1	1	4	4	1	1
Yb	4				#2	4			#1	1	1	1	1	4	4	1	1
Lu	4				#2	4	1		#1	1	1	1	1	4	4	1	1

путей повышения интерпретируемости получаемых многомерных критериев — это визуализация проекций, координатами которых являются наиболее важные параметры компонентов и алгебраические функции от этих свойств. Такая подсистема включена в разработанную нами ИАС и позволяет получать цветные проекции точек, соответствующих веществам разных классов, в любой заданной системе координат. Следует отметить, что процесс прогнозирования в ИАС предельно автоматизирован. Пользователь только отмечает в специальном меню наборы элементов, а подсистема прогнозирования сама формирует выборку для прогноза, подставляет параметры компонентов в найденные критерии и выдает итоговую таблицу прогноза. Многолетний опыт компьютерных расчетов позволяет утверждать, что разработанная ИАС, не только обеспечивает химикам доступ к огромному массиву данных о неорганических веществах, но и дает инструмент для анализа данных с целью поиска эмпирических критериев образования неорганических соединений различных типов.

Важным преимуществом разработанной ИАС является возможность быстрой адаптации к новым экспериментальным данным, которые противоречат имеющейся классифицирующей закономерности. В процессе рассмотрения настоящей статьи были найдены сведения о двух соединениях со структурой эльпасолита, которые

были неправильно предсказаны ИАС. В отличие от трудоемких традиционных методов переработки критериев процесс переобучения компьютерной системы заключался только в добавлении нескольких строчек (информации о двух эльпасолитах и новых веществах, данные о которых были опубликованы недавно) в выборку для анализа и занял менее часа. Таким образом, ИАС представляет удобные средства настройки на новую экспериментальную информацию, ее анализа с целью поиска более точных критериев и прогнозирования.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (проекты 12-07-00142, 15-07-00980 и 14-07-00819).

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kim S., Rooh G., Kim H.J. et al. // J. Cryst. Growth. 2011. V. 317. № 1. P.84.
2. Tanner P.A., Duan C.-K., Jia G., Cheng B.-M. // J. Solid State Chem. 2012. V. 188. P. 105.
3. Samulon E.C., Gundiah G., Gascon M. et al. // J. Luminescence. 2014. V. 153. P. 64.
4. Glodo J., Hawrami R., Shah K.S. // J. Crystal Growth. 2013. V. 379. P. 73.
5. Deren P.J., Strek W., Zych E., Drozdowski J. // Chem. Phys. Lett. 2000. V. 332. № 3-4. P. 308.
6. Sosman L.P., Yokaichiya F., Bordallo H.N. // J. Magn. Mater. 2009. V. 321. № 14. P. 2210.

7. *Malakhovskii A.V., Edelman I.S., Sukhachev A.L. et al.* // *Opt. Mater.* 2009. V. 32. № 1. P. 243.
8. *Киселева Н.Н., Дударев В.А., Земсков В.С.* // *Успехи химии.* 2010. Т. 79. № 2. С. 162. [*Kiselyova N.N., Dudarev V.A., Zemskov V.S.* // *Russ. Chem. Rev.* 2010. V. 79. № 2. P. 145].
9. *Александров К.С., Безносиков Б.В.* Перовскиты. Настоящее и будущее. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2004. 231 с.
10. *Arndt J., Babel D., Haegele R., Rombach N.* // *Z. Anorg. Allgem. Chem.* 1975. V. 418. № 3. P. 193.
11. *Flerov I.N., Gorev M.V., Grannec J., Tressaud A.* // *J. Fluor. Chem.* 2002. V. 116. № 1. P. 9.
12. *Friedrich G., Fink H., Seifert H.J.* // *Z. Anorg. Allgem. Chem.* 1987. V. 548. № 5. P. 141.
13. *Faget-Guengard H., Bobe J.M., Senegas J. et al.* // *J. Alloys Compd.* 1995. V. 219. № 1-2. P. 73.
14. *Graulich J., Drucke S., Babel D.* // *Z. Anorg. Allgem. Chem.* 1998. V. 624. № 9. P. 1460.
15. *Liu L., Lu W., Chen N.* // *J. Phys. Chem. Solids.* 2004. V. 65. № 5. P. 855.
16. *Федоров П.П., Федоров П.И.* // *Журн. неорган. химии.* 1973. Т. 18. № 1. С. 205.
17. *Дударева А.Г., Молодкин А.К., Ловецкая Г.А.* // *Журн. неорган. химии.* 1988. Т. 33. № 6. С. 1613.
18. *Чиканов В.Н.* // *Журн. неорган. химии.* 2009. Т. 54. № 7. С. 1160. [*Chikanov V.N.* // *Russ. J. Inorg. Chem.* 2009. V. 54. № 7. P. 1099].
19. *Kiselyova N.N.* // *Eng. Appl. Artificial Intelligence.* 2000. № 3. P. 533.
20. *Журавлев Ю.И., Рязанов В.В., Сенько О.В.* “РАСПОЗНАВАНИЕ”. Математические методы. Программная система. Практические применения. М.: ФАЗИС, 2006. 176 с.
21. *Гладун В.П.* Процессы формирования новых знаний. София: СД “Педагог 6”, 1995. 192 с.
22. *Kiselyova N.N., Stolyarenko A.V., Ryzanov V.V. et al.* // *Pattern Recognition and Image Analysis.* 2011. V. 21. № 1. P. 88.
23. *Киселева Н.Н.* // *Журн. неорган. химии.* 2014. Т. 59. № 5. С. 665 [*Kiseleva N.N.* // *Russ. J. Inorg. Chem.* 2014. V. 59. № 5. P. 496].