

УДК 519.95:681.3.06

## СИСТЕМА АНАЛИЗА И ПРОГНОЗА СВОЙСТВ НЕОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

В.И.Котюков, В.П.Тищенко, С.А.Кутолин

В настоящее время вычислительная техника и математические методы моделирования широко используются для решения разнообразных задач анализа и синтеза органических соединений. В области неорганической химии сделаны первые, но уже многообещающие шаги в данном направлении.

Наличие на современном этапе исследований большого экспериментального материала и определенные успехи в области построения математических моделей твердого тела позволяют сформулировать единый "модельно-статистический подход" для решения широкого спектра различных задач в области материаловедения, неорганической и физической химии. Подход базируется на расчете характеристик распределения энергии валентных электронов (в основе лежит упрощенная квантово-механическая модель электронного строения вещества) и на статистическом анализе (методами распознавания, регрессии и другими) уже изученных свойств различных неорганических соединений. Это позволяет строить модели прогноза областей существования соединений и их основных макросвойств в виде функций от электронного строения компонент соединений, их состава и технологии получения.

На основе развитого подхода создана компьютерная система - проблемно-ориентированный пакет прикладных программ для ЕС ЭВМ.

1. Основы модельно-статистического подхода. Существующие методы оценки химического сродства (термодинамические методы, расчеты элементов зонной структуры соединений и другие), с точки зрения задач материаловедения, носят качественный характер, т.е. не позволяют точно количественно оценивать физико-химические свойства

ва материалов на основе каких-либо достоверных и элементарных исходных предпосылок, например, на основе знаний электронного строения компонент соединения. В то же время известно, что именно характер распределения энергии электронов на подуровнях валентного уровня атомов компонент соединений определяет основные физико-химические макросвойства последнего. Это позволяет на основе упрощенной квантово-механической модели электронного строения вещества априорно определить для каждого элемента (компоненты соединения) значения характеристик  $E = \{E_1, \dots, E_n\}$ , достаточно полно отражающих распределение энергии электронов валентного уровня атомов соответствующего вещества [1]. Установить же точные количественные соотношения между прогнозируемыми значениями  $Y = \{Y_1, \dots, Y_n\}$  основных макросвойств соединений (плотность, температура плавления, тип кристаллической решетки, удельное электросопротивление и т.д.) и значениями "модельных" энергетических характеристик  $E$  компонент, а также их составом  $S$  (удельным весом компонент) и технологическими параметрами  $T$  получения (температура, давление, наличие катализаторов и т.д.) позволяют методы многофакторного статистического анализа [2,3].

В настоящее время накоплен богатый экспериментальный материал по различным типам неорганических соединений. Обработка известных данных о возможности и невозможности синтеза конкретных соединений методами дискриминантного анализа (распознавания образов) позволяет построить решающую функцию  $Y_0 = g(E, S, T; \alpha_0)$  прогноза возможности ( $y_0 = 1$ ) или невозможности ( $y_0 = 0$ ) образования любого фиксированного соединения в исследуемом классе. Здесь  $\alpha_0$  - вектор параметров преобразования  $g(\cdot)$ .

Обработка экспериментальных данных по изучению свойств различных соединений методами регрессионного анализа позволяет строить модели прогноза  $\{Y_j = g(E, S, T; \alpha_j); j = \overline{1, n}\}$  значений макросвойств  $\{Y_j\}$  также для любых фиксированных соединений в исследуемом классе.

Использование указанного подхода позволило решить ряд важных задач для двойных и тройных неорганических соединений [4-6]:

- прогноз областей существования различных соединений;
- прогноз механизма и направления твердофазных реакций;
- анализ дистектики, перетектики, областей гомогенности и расслаивания;

- прогноз основных физико-химических макросвойств соединений (плотность, температура плавления, теплота образования, диэлектрическая проницаемость и т.д.);

- описание кинетики окисления и другие задачи.

При этом используемые линейные и кусочно-линейные многофакторные модели прогноза  $\{g(\cdot)\}$  обладали достаточно высокой точностью - приблизительно 10%.

2. Пакет прикладных программ. На основе развитого подхода создан для ЕС ЭВМ пакет прикладных программ (ППП) ПРОГНОЗ, позволяющий решать весь комплекс рассмотренных выше задач [7]. Пакет реализован на языке ФОРТРАН-IV и работает под управлением ОС ЕС.

В структуре ППП можно выделить:

- банк данных;
- библиотеку обрабатывающих модулей (управляющие, вычислительные и сервисные программы);
- информатор системы **INFORM**.

Последний позволяет получать сведения о возможностях пакета, особенностях работы с ним, языке входных сообщений и правилах подготовки данных.

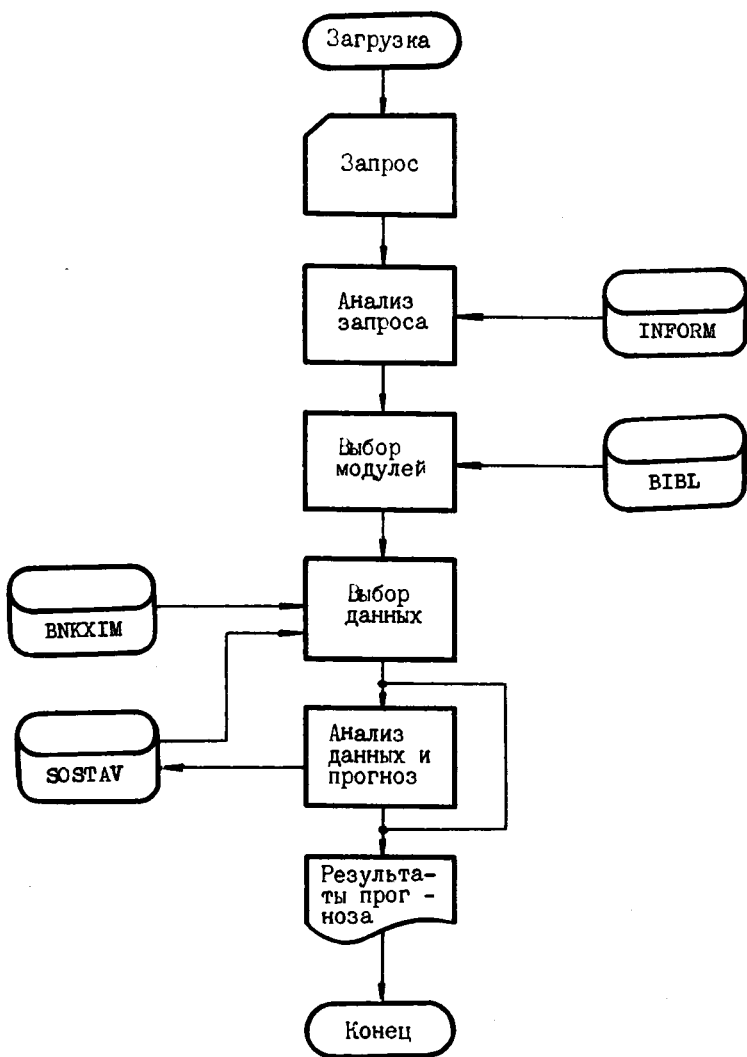
Основу библиотеки обрабатывающих модулей **VIBL** составляют исходные и загрузочные модули многофакторного статистического анализа и прогноза, а также программы, реализующие выбор необходимой информации из банка данных и формирование таблиц данных для последующей их обработки.

Общий банк данных состоит из банка электронных и иных характеристик элементов таблицы Менделеева, совокупности физико-химических свойств элементов и соединений - **ВМКХИМ**, а также банка спрогнозированных свойств соединений - **СОСТАВ**.

На рисунке приведена укрупненная блок-схема взаимодействия задач и справочников при выполнении одного запроса пользователя.

Банк данных имеет фиксированную структуру размещения информации в записях и требует первичной настройки на тип вводимой информации, имена свойств и размеры полей под информацию о свойствах. Одному соединению в банке данных соответствует одна запись, номер которой приписывается имени соединения. Поиск ведется по двум ключам - имя соединения и имя свойства.

Режимы работы банка данных реализуют все необходимые функции по его обслуживанию и поддержке. Язык управления банком данных достаточно прост и удобен для пользователя.



Блок-схема взаимодействия задач и справочников.

В настоящее время в банке данных имеется информация пример - но о 500 различных элементах таблицы Менделеева и соединениях. Каждое соединение или элемент может иметь до 40 различных физико-химических свойств и других характеристик. Банк данных может использоваться и самостоятельно, вне методологии модельно-статистического подхода.

Задание на решение той или иной задачи есть последовательность запросов, написанных на языке входных сообщений. Язык запросов доступен химику и может быть легко освоен. Каждый запрос обрабатывается управляющим модулем, который выбирает из банка данных необходимую информацию и вызывает нужную вычислительную программу. По окончании вычисления сервисная программа выдает на печать результаты расчета, после чего управляющий модуль приступает к обработке следующего запроса.

ППП размещен на пакете магнитных дисков, занимает объем ~10 Мбайт и может работать под управлением любой версии ОС ЕС, начиная с ОС МРТ 4.1. Пакет ПРОГНОЗ является удобным инструментом в руках исследователя.

#### Л и т е р а т у р а

1. КУТОЛИН С.А. Физико-химические элементы надежности систем. Вып. 7. -М.: ЦНИИ Электроника, 1972. -125 с.
2. КЕНДАЛЛ М.Дж., СТЬЮАРТ А. Многомерный статистический анализ и временные ряды. -М.: Наука, 1976. -736 с.
3. ЗАГОРУЙКО Н.Г. Методы распознавания и их применение. -М.: Сов.радио, 1972. - 206 с.
4. КУТОЛИН С.А., ВАШУКОВ И.А., КОТЮКОВ В.И. Прогнозирование бинарных соединений редкоземельных элементов и их свойств с помощью ЭВМ. -Изв. АН СССР. Неорганические материалы, 1978, т. 14, № 2, с. 215-218.
5. КУТОЛИН С.А., КОТЮКОВ В.И. Прогнозирование на ЭВМ составов соединений в тройных системах и их свойств как функции электронного строения компонентов. -Изв. АН СССР. Неорганические материалы, 1979, т. 15, № 8, с. 1389-1392.
6. КУТОЛИН С.А., КОТЮКОВ В.И., КОМАРОВА С.Н. Прогнозирование на ЭВМ направления реакции синтеза и механизма твердофазных процессов как функции электронного строения компонентов и их состава. -Журнал физической химии, 1981, т. LV, № 9, с. 2417-2420.
7. КОТЮКОВ В.И., ТИЩЕНКО В.П., КУТОЛИН С.А. База данных и система прогнозирования свойств неорганических соединений. -В кн.: Использование вычислительных машин в спектроскопии молекул и химических исследованиях. Новосибирск, 1983, с. 138-139.

Поступила в ред.-изд.отд.  
21 марта 1984 года