

В. А. Дударев, канд. техн. наук, доцент кафедры Информационных технологий Московского государственного университета тонких химических технологий им. М. В. Ломоносова, vic@imet.ac.ru

О. А. Филоретова, канд. техн. наук, ассистент кафедры Информационных технологий Московского государственного университета тонких химических технологий им. М. В. Ломоносова, ugolek84@gmail.com

Г. В. Брыкина, канд. техн. наук, доцент кафедры Информационных технологий Московского государственного университета тонких химических технологий им. М. В. Ломоносова, 2464650@mail.ru

Методы распознавания образов в компьютерном конструировании неорганических соединений

По свойствам неорганических веществ и материалов существует огромное количество баз данных, содержащих разнонаправленную информацию. Статья посвящена вопросам использования накопленных данных для поиска методами распознавания образов закономерностей, позволяющих осуществлять прогнозирование образования еще не синтезированных веществ и оценку их свойств.

Ключевые слова: распознавание образов, компьютерное конструирование неорганических соединений, ферромагнитные материалы.

Введение

Прогнозирование возможности образования и свойств неорганических соединений исключительно на основе информации о параметрах химических элементов, входящих в их состав, является одной из сложнейших химических задач. Для ее решения известны следующие подходы:

- квантово-механический, основанный на решении уравнения Шредингера или его обобщений (уравнения Клейна—Гордона, Паули, Дирака и т. п.);
- простейшие эмпирические двух- и трехмерные критерии образования соединений с заданными свойствами (например, фактор толерантности Гольдшмидта, правило Лавеса);
- многомерные эмпирические классифицирующие закономерности, получаемые с помощью методов компьютерного распо-

знавания образов в N-мерном пространстве признаков.

Решение уравнения Шредингера очень объемно даже для самых несложных химических систем. Поэтому химикам пришлось разрабатывать простейшие эмпирические критерии для классификации химических объектов. Как правило, подобные классификации являлись приближенными, грубыми оценками, для более сложных химических систем их точность была недостаточна, поэтому были разработаны многомерные критерии. Переход к большому числу критериев возможен только при использовании компьютеров и специальных систем поиска взаимосвязей в больших объемах данных. Так сформировалась предметная область «компьютерное конструирование соединений».

Термин «компьютерное конструирование» (computer-assisted design) в химии впервые появился в семидесятых годах прошлого века в работах Corey и Wipke приме-