

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ НОВЫХ СОЕДИНЕНИЙ СОСТАВА  $A^{3+}B^{3+}C^{2+}O_4$ © 2017 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,  
Россия, 119334 Москва, Ленинский пр-т, 49\*\*Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» РАН,  
Россия, 119333 Москва, ул. Вавилова, 40

E-mail: kis@imet.ac.ru

Поступила в редакцию 29.06.2016 г.

Проведено прогнозирование еще не полученных соединений состава  $ABCO_4$  (А и В – трехвалентные металлы ( $r_A \geq r_B$ ), С – двухвалентный металл). Найдены критерии, позволяющие прогнозировать возможность кристаллизации этих соединений в одном из типов структуры ( $K_2NiF_4$ ,  $CaFe_2O_4$ ,  $YbFe_2O_4$  или шпинели) при комнатной температуре и атмосферном давлении. При прогнозировании использованы только данные о свойствах элементов и простых оксидов. Для расчетов применена специальная программная система компьютерного анализа информации, основанная на методах распознавания образов по прецедентам.

**Ключевые слова:** оксиды,  $K_2NiF_4$ ,  $CaFe_2O_4$ ,  $YbFe_2O_4$ , шпинель, распознавание образов по прецедентам

DOI: 10.7868/S0044457X17080086

Оксидные соединения состава  $A^{3+}B^{3+}C^{2+}O_4$  ( $r_A \geq r_B$ ) перспективны для поиска новых магнитных [1–3], диэлектрических [4], сверхпроводящих [5] и других функциональных материалов [6, 7]. Эти соединения достаточно хорошо изучены [8–13]. Опубликован ряд обзоров методов их получения и свойств [14–20]. В базе данных (БД) «Фазы» [21] собрана информация о ~800 соединениях такого состава, причем большинство из них (281 соединение) имеют кристаллическую структуру типа  $K_2NiF_4$  (пр. гр.  $I4/mmm$ ,  $Z = 2$ ) (рисунок), 102 соединения – структуру шпинели (пр. гр.  $Fd\bar{3}m$ ,  $Z = 8$ ), 89 соединений – структуру  $YbFe_2O_4$  (пр. гр.  $R\bar{3}m$ ,  $Z = 3$ ), 57 соединений – структуру  $CaFe_2O_4$  (пр. гр.  $Pnam$ ,  $Z = 4$ ). Количество соединений состава  $A^{3+}B^{3+}C^{2+}O_4$  с другими кристаллическими структурами (например, оливина или гаусманиита) намного меньше. Однако количество возможных соединений вышеуказанного состава на несколько порядков больше числа уже исследованных, поэтому целью настоящей работы является прогнозирование еще не полученных соединений состава  $ABCO_4$  в системах  $A_2O_3$ – $B_2O_3$ – $CO$ .

## ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ

Многочисленные попытки найти критерий, позволяющий предсказать возможность образования соединений состава  $A^{3+}B^{3+}C^{2+}O_4$  с определенными типами кристаллических структур, которые

включали бы только данные о параметрах элементов, были основаны на использовании информации об ионных радиусах катионов двухвалентных и трехвалентных элементов, входящих в их состав, или отношений этих радиусов. В [16, 22] пытались найти зависимость типа кристаллической структуры соединений с  $A = Sc, In, Y$  или  $Ln$  и  $B = Fe, Ga, Cr$  или  $Al$  от величины радиуса двухвалентного катиона. В [15, 20] для прогноза соединений с кристаллическими структурами типа  $K_2NiF_4$  и  $\beta$ - $K_2SO_4$  были использованы отношения радиусов катионов. В [23–25] для прогнозирования типа кристаллической структуры соединений состава  $ABX_4$  были предложены радиусы катионов и анионов и их отношения. Авторы [11] применили для прогноза соединений со структурой типа  $K_2NiF_4$  известный фактор толерантности Гольдшмидта. На недостаточность последнего критерия для предсказания типа структуры оксидов указано в статье [18], авторы которой предложили учитывать при формировании критерия термодимические параметры соединения  $A^{3+}B^{3+}C^{2+}O_4$ , такие как энтальпия образования. В [26] для прогнозирования ромбоэдрической структуры соединений был предложен критерий  $\frac{1}{2}(r_{A(3+)} + r_{C(2+)}) + r_{O(2-)}$ , на ограниченность которого было указано в [16]. Проведенные нами расчеты с использованием всех вышеуказанных критериев (за исключением критерия, включающего данные об энтальпии образования соединения

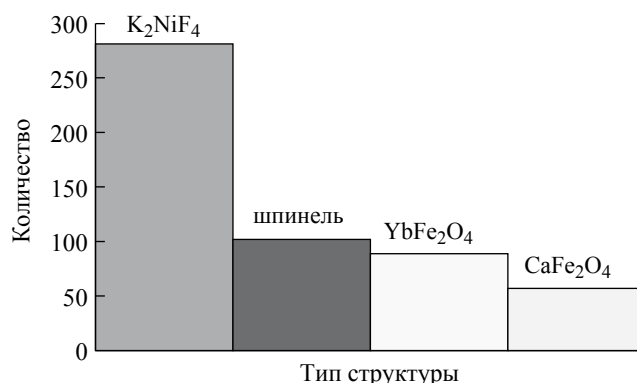
ABCO<sub>4</sub> [18]) и визуальный анализ расположения точек в пространствах ионных радиусов (по Шеннону) и их отношений, а также информация о типе кристаллической структуры около 800 соединений  $A^{3+}B^{3+}C^{2+}O_4$  из БД «Фазы» [21] показывают, что ни один из предложенных критериев, основанных только на учете размеров ионов, не обеспечивает достаточно хорошего разделения имеющихся соединений по типу структуры. Стало ясно, что для повышения точности прогнозирования необходимо включать в критерии не только размерные параметры, но и другие свойства химических элементов и простых оксидов. Однако поиск таких многомерных критериев крайне сложен, поэтому в [27] для прогнозирования новых соединений состава  $Ln^{3+}Cu^{3+}C^{2+}O_4$  и возможности их кристаллизации в структуре типа K<sub>2</sub>NiF<sub>4</sub> были применены методы обнаружения сложных закономерностей, основанные на распознавании образов по прецедентам.

### МЕТОДЫ РАСЧЕТА

В настоящей работе для расчетов была использована разработанная нами информационно-аналитическая система (ИАС) [28]. В ее состав входят базы данных по свойствам неорганических веществ и материалов и подсистема анализа информации, основанная на методах распознавания образов по прецедентам. Процедура работы ИАС подробно описана в [29].

Исходная информация для компьютерного анализа была найдена в БД «Фазы» [21], входящей в состав ИАС. Перед включением в выборку для обучения ЭВМ полученная информация подвергалась тщательной экспертной оценке. Цель последней — исключение ошибочных данных, которые могли бы в дальнейшем снизить достоверность прогнозирования. Этот этап наиболее трудоемкий и длительный. При выполнении настоящей работы нами была предпринята попытка частичной автоматизации процедуры поиска ошибочных данных. Под ошибкой здесь понимается неправильная классификация химической системы (например, исследователи указали, что существует соединение определенного состава при заданных условиях, а на самом деле при этом соотношении компонентов образуется твердый раствор).

Выборка для компьютерного анализа (обучающая выборка) представляет собой матрицу, каждая строка которой содержит набор значений отобранных экспертом свойств компонентов вещества конкретного состава с указанием одного из заранее известных классов (например, класса химических систем с образованием соединения определенного состава или класса соединений с определенным типом кристаллической структуры и т.д.), к которому это вещество относится. В этом случае ошибочным



Гистограмма распространённости различных типов кристаллической структуры соединений состава  $A^{3+}B^{3+}C^{2+}O_4$ .

можно условно считать вещество, относящееся к определенному классу, значения свойств компонентов которого существенно отличаются от значений свойств компонентов веществ этого же класса. Разработанная нами программная система выявляет вещества, попадающие в «чужой» класс, и предоставляет химику данные для экспертной оценки информации об этом веществе и для принятия решения о его статусе. Принципиальная возможность поиска таких экспериментальных ошибок связана с периодичностью изменения свойств неорганических соединений в зависимости от атомных номеров элементов — компонентов химических систем. Хотя эти зависимости крайне сложные и пока не могут быть описаны аналитически, однако следствием такой периодичности в изменении свойств являются наблюдаемые нами «компактные» наборы веществ определенного класса, значения свойств компонентов в которых различаются незначительно.

Программная система выявления ошибок была основана на использовании трех известных статистических критериев, позволяющих найти «выпадающие» значения: «правило трех сигм» [30], критериях Граббса [31] и Диксона [32]. Поиск «ошибочных» веществ проводился отдельно для каждого класса. Отнесение вещества к заданному классу считалось ошибочным, если хотя бы два статистических критерия для определенного свойства компонента относили его к таковому. Учитывалось также количество свойств компонентов, по которым вещество относилось к ошибочным (чем больше это количество, тем большая вероятность ошибки). Результатом работы программной системы был список веществ, значения свойств компонентов которых наиболее отличались от свойств компонентов большинства веществ данного класса. Как правило, количество таких веществ было на порядок меньше исходного набора, полученного

из базы данных, что значительно сокращало время последующей экспертной оценки.

Далее эксперт тщательно анализировал полученный список веществ с использованием информации из полных текстов статей, монографий и справочников, включенных в БД «Фазы», а также мнений других специалистов. Задача такого анализа была связана с определением, является ли выявленное «ошибочное» вещество (1) уникальным (например, представителем нового класса веществ, которые только начали изучаться, или класса веществ, которые по тем или иным причинам (сложная технология получения, дорогостоящие и редкие компоненты и т.д.) плохо изучены); (2) ошибка связана с неверным значением свойств компонентов (следствием, например, некорректной интерполяции или расчета свойств элемента или простого соединения); или (3) реальной ошибкой отнесения вещества к определенному классу. Результатом вышеописанного анализа было исключение информации о ~10% экспериментально исследованных веществ из выборки для обучения ЭВМ.

Важным этапом при подготовке данных для компьютерного анализа является отбор свойств компонентов (химических элементов и простых оксидов). Исходные наборы свойств формировались на основе физико-химических представлений о природе исследуемых классов веществ. Информация о свойствах элементов была получена из разработанной нами БД «Elements» (<http://phases.imet-db.ru/elements>), а информация об оксидах — из БД по свойствам простых оксидов, включенных в ИАС. Для отбора наиболее важных для классификации свойств компонентов использовалась специальная программа, входящая в состав ИАС [33]. Оценивались не только свойства компонентов, но и автоматически сгенерированные алгебраические функции от этих свойств, что значительно упрощает последующее формирование искоемых критериев. Результатом работы этих программ было нахождение наиболее «информативных» для классификации параметров компонентов.

Для поиска критериев образования соединений состава  $ABCO_4$  в системах  $A_2O_3-B_2O_3-CO$  и критериев, позволяющих прогнозировать тип их кристаллической структуры при нормальных условиях, был использован комплекс из 15 программ распознавания образов по прецедентам, включенный в ИАС [28]. Для оценки точности прогнозирования сформированных критериев была использована широко применяемая для этих целей процедура скользящего контроля, которая подробно описана в [34, 35]. В результате были отобраны наиболее точные алгоритмы распознавания образов.

В силу специфики алгоритмов каждая из отобранных программ распознавания образов взаимно

дополняет друг друга, давая точные результаты для разных наборов веществ. Поэтому для формирования обобщенного критерия, использующего достоинства различных алгоритмов, применяется процедура принятия коллективного решения на основе специальных программ [28, 34] ИАС. Для оценки точности критериев, полученных с использованием этих программ, применялось экзаменационное распознавание информации о 100 веществах, данные о которых были случайно выбраны из обучающих выборок и не использованы при обучении ЭВМ (на завершающем этапе прогнозирования эти контрольные примеры возвращались в выборку для анализа). В результате были сформированы обобщенные критерии образования соединений  $ABCO_4$ , относящихся к разным классам веществ. Найденные критерии включают только свойства компонентов и могут иметь различную форму (булевы выражения, система уравнений или неравенств, обученная нейронная или растущая пирамидальная сеть и т.д.). Для автоматизации процедуры прогнозирования была использована специальная подсистема ИАС, которая подставляет в найденные критерии значения свойств компонентов и прогнозирует принадлежность вещества к тому или иному заданному классу, а также выдает результаты в привычной для химиков табличной форме.

Задача прогнозирования новых соединений состава  $ABCO_4$  в системах  $A_2O_3-B_2O_3-CO$  включала решение трех промежуточных задач. В первой из них (задача 1) прогнозировалось образование соединений состава  $ABCO_4$ . Следующая задача включала поиск критериев и прогнозирование образования соединений указанного состава с наиболее распространенными типами кристаллических структур ( $K_2NiF_4$ ,  $YbFe_2O_4$ , шпинели или  $CaFe_2O_4$ ). Последняя задача разбивалась на две. При решении первой из них проводили многоклассовое прогнозирование принадлежности к шести из классов: соединениям со структурой (1)  $K_2NiF_4$ , (2)  $YbFe_2O_4$ , (3) шпинели или (4)  $CaFe_2O_4$ , (5) соединениям со структурой, отличной от приведенных выше, и (6) системам с отсутствием соединений состава  $A^{3+}B^{3+}C^{2+}O_4$  (задача 2), а потом решались четыре задачи (для целевых классов  $K_2NiF_4$ ,  $YbFe_2O_4$ , шпинели или  $CaFe_2O_4$ ) последовательного разделения оксидных систем на три класса: например, целевой класс 1 —  $K_2NiF_4$ ; класс 2 — соединения со структурой, отличной от  $K_2NiF_4$ , и класс 3 — отсутствие соединений состава  $A^{3+}B^{3+}C^{2+}O_4$  в системе  $A_2O_3-B_2O_3-CO$  (четыре задачи 3). Все прогнозы были для атмосферного давления и комнатной температуры. Окончательное решение о классе веществ, к которому принадлежит прогнозируемое соединение, принималось на основе сравнения прогнозов, полученных при решении всех

задач. Если результаты противоречили друг другу, то прогноз считался неопределенным и в соответствующей таблице прогнозов оставлялась пустая позиция.

### РАСЧЕТНАЯ ЧАСТЬ

После экспертной оценки в выборку для компьютерного анализа была включена информация о 255 соединениях состава  $A^{3+}B^{3+}C^{2+}O_4$  со структурой  $K_2NiF_4$ , о 102 соединениях со структурой шпинели, 82 соединениях со структурой  $YbFe_2O_4$ , 56 соединениях со структурой  $CaFe_2O_4$ , 124 соединениях с кристаллической структурой, отличной от приведенных выше при обычных условиях, и 63 системах  $A_2O_3-B_2O_3-CO$ , в которых не образуются соединения состава  $ABCO_4$ .

В исходный набор параметров компонентов были включены следующие свойства химических элементов А, В и С (значения свойств см. в БД «Elements» — <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–E7**), номера по Менделееву–Петтифору (**M1–M11**), номер группы в Периодической системе, квантовый номер (**A5**), количество валентных электронов, электроотрицательность (по Полингу) (**E2**), химический потенциал Мидеми, температура плавления и кипения, стандартные энтропия, энтальпия атомизации, теплопроводность, молярная теплоемкость и т.д., а также термические параметры простых оксидов двухвалентных и трехвалентных элементов (температура плавления (распада), стандартные энтропия (**S**), теплота образования, изобарная теплоемкость и изобарный потенциал образования) — всего 134 значения для каждой системы  $A-B-C-O$ .

### РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Сначала была проверена гипотеза о том, что набор ограниченного числа даже наиболее «информативных», найденных с помощью программы [33] параметров компонентов и алгебраических функций от этих параметров не обеспечивает достаточно хорошего разделения систем  $A_2O_3-B_2O_3-CO$  с образованием и без образования соединений состава  $ABCO_4$ , а также разделения последних по типу кристаллической структуры. Выводы делали на основе сравнения результатов экзаменационного распознавания и анализа проекций точек в пространствах наиболее «информативных» параметров компонентов.

Расчеты показали, что алгебраическими функциями, наиболее важными для классификации систем  $A_2O_3-B_2O_3-CO$  с образованием и отсутствием

соединений состава  $ABCO_4$ , являются:  $S(B)/S(C)$  и  $M9(O)/M6(B)$ . Наивысшая точность экзаменационного прогнозирования в режиме скользящего контроля (94.5%) была достигнута в случае критерия, полученного с применением алгоритма линейной машины. На проекции, координатами которой являлись эти параметры, больше половины точек, соответствующих системам  $A_2O_3-B_2O_3-CO$  с отсутствием соединений  $ABCO_4$ , располагались в области больших значений параметров  $S(B)/S(C)$  и  $M9(O)/M6(B)$ . Тем не менее достаточно полного разделения классов систем с образованием и отсутствием соединений указанного состава достичь не удалось, поэтому были проведены компьютерные эксперименты по поиску более классифицирующих наборов компонентов. Было найдено, что критерии, включающие только свойства химических элементов и сформированные в результате работы программ распознавания образов (алгоритмы обучения нейронной сети, методов  $k$ -ближайших соседей и опорных векторов), обеспечили наивысшую точность прогнозирования в режиме скользящего контроля (95.4, 96.7 и 96.9% соответственно). Дальнейшее применение программы принятия коллективного решения для трех вышеуказанных алгоритмов, основанной на методе Байеса, дало наилучшую оценку точности прогнозирования — 98%.

Попытка применить для разделения соединений  $ABCO_4$  с различными типами кристаллических структур только наиболее классифицирующие функции ( $E2(A)/E2(B)$ ,  $M10(A)/M5(B)$ ,  $S(A)-S(B)$  и  $E7(A)/E7(B)$ ), найденные в результате расчетов, также не привела к удовлетворительному разделению соединений с разными типами структур. Наиболее высокая точность (64.5%) при оценке в режиме скользящего контроля была получена для алгоритма  $k$ -ближайших соседей. Визуальный анализ всех построенных проекций также свидетельствовал о значительном перекрытии областей соединений с разными типами кристаллических структур. При включении в искомый критерий только свойств элементов и использовании при формировании критерия алгоритмов, основанных на методах построения логических закономерностей,  $k$ -ближайших соседей и опорных векторов, а также обучения нейронной сети, появилась возможность получения значительно более точных результатов (достоверность по результатам скользящего контроля была равна 83.7, 85.8, 84.7 и 87.1% соответственно). Применение набора вышеуказанных алгоритмов и обобщенного полиномиального корректора для принятия коллективного решения увеличило точность прогнозирования до 91%.

Аналогичные результаты были получены при решении задач 3. Использование только найденных «информативных» свойств не позволяло достичь высокой точности прогнозирования. При поиске

**Таблица 1.** Прогнозы типа кристаллической структуры соединений состава  $ABCO_4$  ( $C = Mg, Mn, Ca$ )

| ABMgO <sub>4</sub>                             |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |
|------------------------------------------------|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|
| $\begin{smallmatrix} A \\ B \end{smallmatrix}$ | Sc | V  | Mn | Fe | Ga | Y  | Rh | In | La | Ce | Pr | Nd | Pm | Sm | Eu | Gd | Tb | Dy | Ho | Er | Tm | Yb | Lu | Am |
| Al                                             | #Y |    | S  |    | S  | Y  |    | #Y |    |    |    |    | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |
| Sc                                             | #C |    |    |    |    |    |    | S  |    |    |    |    |    |    |    |    | N  | N  |    |    | N  |    |    |    |
| V                                              |    | #S | S  | #S |    |    | S  | S  |    |    |    |    |    |    | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |
| Cr                                             |    | S  | S  |    | S  |    | S  | #S |    |    |    |    | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |
| Mn                                             | Y  |    | #A | S  |    |    | S  |    |    | A  |    | A  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |
| Fe                                             |    |    | S  | #S |    |    | S  | #S | #A |    |    |    | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | #Y | #Y | #Y | #Y |    |
| Ga                                             | #Y | S  | #S | S  |    | #Y |    | #Y | #N |    |    |    | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | #Y | #Y | #Y | #Y | #Y | Y  |
| Y                                              |    |    |    |    |    |    |    |    | N  | N  | N  | N  |    | N  | N  |    | N  | N  | N  |    |    |    |    |    |
| Rh                                             |    |    |    |    |    |    | #S | S  |    |    |    |    |    |    | Y  |    | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |
| In                                             |    |    |    |    |    |    |    | #S |    |    |    | N  |    |    |    | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |

| ABMnO <sub>4</sub>                             |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |
|------------------------------------------------|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|
| $\begin{smallmatrix} A \\ B \end{smallmatrix}$ | Sc | V  | Cr | Mn | Fe | Y  | Rh | In | La | Ce | Pr | Nd | Pm | Sm | Eu | Gd | Tb | Dy | Ho | Er | Tm | Yb | Lu | Am |
| Al                                             | Y  | S  | S  | S  | #S | #Y | S  | #Y | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | #Y | #Y | #Y | #Y | #Y | Y  |
| Sc                                             | A  |    |    | A  |    |    |    | A  |    |    |    |    |    | A  |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |
| V                                              | Y  | #S |    | S  | S  | Y  | S  |    | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |
| Cr                                             | Y  | S  | #S | A  | S  | Y  | S  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |
| Fe                                             |    |    |    | A  | #S | #Y | S  | #Y | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | #Y | #Y | #Y | #Y | Y  |
| Ga                                             | Y  | S  |    | S  | #S | #Y | S  | #Y | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | #Y | #Y | #Y | #Y | #Y | Y  |
| Y                                              |    |    |    |    |    |    |    |    | K  | K  | K  | K  |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |
| Rh                                             | Y  |    |    |    |    | Y  | #S |    |    | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |
| In                                             |    |    |    |    |    | Y  |    | #S | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |    |    |    |    |    | Y  |

| ABCaO <sub>4</sub>                             |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |
|------------------------------------------------|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|
| <div><div><div>A</div><div>B</div></div></div> | Sc | V  | Mn | Fe | Y  | La | Ce | Pr | Nd | Pm | Sm | Eu | Gd | Tb | Dy | Ho | Er | Tm | Yb | Lu | Am |
| Al                                             | K  |    |    |    | #K | #K | #K | #K | #K | K  | #K | #K | #K | #K | #K | #K | #K | #K | #K | #K | K  |
| Sc                                             | #C |    |    |    | C  | A  |    |    |    |    | A  |    |    |    |    |    |    |    |    |    | A  |
| V                                              | C  | #C |    |    | A  | K  |    |    | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  |
| Cr                                             |    | C  | C  | C  | #A | #A | #A | #A | #A | A  | #A | #A | #A | #A | #A | #A | #A | A  | A  | A  | K  |
| Mn                                             | C  |    | #C | C  | K  | #K | #K | #K | #K | K  | #K | #K | #K | #K | #K | #K | #K | K  | K  | K  | K  |
| Fe                                             | #C |    | C  | #C |    | #K | #K | #K | #K | K  | #K | #K | #K | #K | #K | #K | #K | K  | K  | K  | K  |
| Ga                                             | A  | A  | A  |    | #A | #A | #A | #A | #A | A  | #A | #A | #A | #A | #A | #A | #A | #A | #A | A  | A  |
| Y                                              |    |    |    |    |    | N  |    |    |    | N  |    |    | N  | N  | N  | N  |    |    |    |    |    |
| Rh                                             | C  |    |    |    |    | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  |
| In                                             |    |    |    |    |    | A  | A  | A  | A  | A  | A  | A  |    |    |    |    |    |    | C  |    | A  |

Таблица 2. Прогнозы типа кристаллической структуры соединений состава  $ABCO_4$  ( $C = Fe, Co, Ni$ )

| ABFeO <sub>4</sub>                  |    |    |    |    |    |    |   |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |  |
|-------------------------------------|----|----|----|----|----|----|---|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|--|
| <div><div>A</div><div>B</div></div> | Sc | V  | Cr | Mn | Fe | Ga | Y | Rh | In | La | Ce | Pr | Nd | Pm | Sm | Eu | Gd | Tb | Dy | Ho | Er | Tm | Yb | Lu | Am |  |
| Al                                  | #Y | S  | S  | S  | S  |    | Y | S  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |  |
| Sc                                  |    |    |    |    |    |    |   |    |    |    |    | A  | A  |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |  |
| V                                   | Y  | #S |    | S  | S  |    | Y | S  |    | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |  |
| Cr                                  | Y  | S  | #S | S  | S  | S  | Y | S  | S  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |  |
| Mn                                  |    |    |    | #A | S  |    | Y | S  | #Y | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |  |
| Ga                                  | Y  | S  |    | #S | S  | #S | Y | S  | #Y | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | #Y | #Y | #Y | Y  |  |
| Y                                   |    |    |    |    |    |    | Y |    |    |    | K  | K  |    |    |    |    | N  | N  | N  | N  |    |    |    |    |    |  |
| Rh                                  | Y  |    |    |    |    |    | Y | S  | S  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |  |
| In                                  |    |    |    |    |    |    | Y |    | S  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |  |

| ABCoO <sub>4</sub>                  |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |  |
|-------------------------------------|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|--|
| <div><div>A</div><div>B</div></div> | Sc | V  | Cr | Mn | Fe | Ga | Y  | Rh | In | La | Ce | Pr | Nd | Pm | Sm | Eu | Gd | Tb | Dy | Ho | Er | Tm | Yb | Lu | Am |  |
| Al                                  | #Y | S  | S  | S  | S  |    | Y  | S  | #Y | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |  |
| Sc                                  |    |    |    |    |    |    |    |    |    | A  | A  | A  |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |  |
| V                                   | Y  | #S |    | S  | S  |    | Y  | S  | S  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |  |
| Cr                                  | Y  | S  | #S | #S | #S | S  | Y  | S  |    | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |  |
| Mn                                  | Y  |    |    | #A | S  |    | Y  | S  | Y  |    | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |  |
| Fe                                  | Y  |    |    | S  | #S |    | #Y | #S | #S | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | #Y | #Y | #Y | #Y | Y  |  |
| Ga                                  | Y  | S  |    | #S | S  | #S | #Y | S  | #Y | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | #Y | #Y | #Y | #Y | #Y | Y  |  |
| Y                                   |    |    |    |    |    |    |    |    |    | K  | K  | K  |    |    |    |    | N  | N  | N  | N  |    |    |    |    |    |  |
| Rh                                  | Y  |    |    |    |    |    | Y  | #S | S  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |  |
| In                                  |    |    |    |    |    |    | Y  |    | #S | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |  |

| ABNiO <sub>4</sub>                  |    |   |    |    |    |    |   |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |  |
|-------------------------------------|----|---|----|----|----|----|---|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|--|
| <div><div>A</div><div>B</div></div> | Sc | V | Cr | Mn | Fe | Ga | Y | Rh | In | La | Ce | Pr | Nd | Pm | Sm | Eu | Gd | Tb | Dy | Ho | Er | Tm | Yb | Lu | Am |  |
| Al                                  |    | S | S  | S  | S  | S  |   | S  | #S |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    | Y  |  |
| Sc                                  |    |   |    |    |    |    |   |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    | N  | N  |    |    |  |
| V                                   | Y  | S |    | #S | #S |    | Y | S  | S  |    | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |    |    |    |  |
| Cr                                  | Y  |   | #A | #S | #S | S  | Y | S  | #S |    | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |  |
| Mn                                  | Y  |   |    | #S | #S |    | Y |    | S  |    | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |  |
| Fe                                  |    |   |    | #S | #S |    | Y |    | #S |    | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |  |
| Ga                                  | Y  | S |    | S  | S  | #S | Y | S  | #S | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |  |
| Y                                   |    |   |    |    |    |    |   |    |    | K  |    |    |    |    |    |    |    | N  | N  | N  |    |    |    |    |    |  |
| Rh                                  | Y  |   |    |    |    |    | Y | #A | S  |    |    |    |    | Y  |    | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |    |  |
| In                                  |    |   |    |    |    |    | Y |    | #N |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    | Y  |  |

**Таблица 3.** Прогнозы типа кристаллической структуры соединений состава  $ABCO_4$  ( $C = Cu, Zn, Sr$ )

| ABCuO <sub>4</sub> |    |    |    |    |    |   |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |   |   |
|--------------------|----|----|----|----|----|---|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|---|---|
| B \ A              | Sc | V  | Cr | Mn | Fe | Y | Rh | In | La | Ce | Pr | Nd | Pm | Sm | Eu | Gd | Tb | Dy | Ho | Er | Tm | Yb | Lu | Am |    |    |    |    |   |   |
| Al                 | #Y | S  | S  | S  | S  | Y | S  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |    |    |    |    |   |   |
| Sc                 | #N | A  | #A | #S | S  | Y | S  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | K  |    |    |    |    |   |   |
| V                  | Y  |    |    |    |    | S | Y  |    | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |    |   |   |
| Cr                 | Y  |    |    |    |    | Y | Y  |    | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |   |   |
| Mn                 | Y  |    |    |    |    | Y | Y  |    | Y  | Y  | #S | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |   |   |
| Fe                 | #Y |    |    |    |    | S | #S |    | S  | #A | Y  | #Y | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | #Y | #Y | #Y | Y |   |
| Ga                 |    | Y  | S  | #Y | Y  |   |    | Y  |    |    | Y  | Y  |    |    |    | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |    | #Y | #Y | #Y | #Y | #Y | Y  |    |   |   |
| Y                  |    | #N | Y  | #A | Y  |   |    | Y  |    |    | Y  | Y  |    |    |    | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |    | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y | Y |
| Rh                 |    |    |    |    |    |   |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |   |   |
| In                 |    |    |    |    |    |   |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |   |   |

|       |    | $ABZnO_4$ |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |
|-------|----|-----------|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|
| B \ A | Sc | V         | Cr | Mn | Fe | Ga | Y  | Rh | In | La | Ce | Pr | Nd | Pm | Sm | Eu | Gd | Tb | Dy | Ho | Er | Tm | Yb | Lu | Am |
| Al    | #Y | S         | S  | S  |    | S  | Y  | S  | #Y | Y  |    |    |    |    |    |    | Y  | Y  | Y  | Y  |    | Y  |    | Y  | Y  |
| Sc    | #A |           |    |    |    |    | A  |    | A  | A  | A  | A  | A  | A  |    | S  | A  | A  | A  | A  | A  | A  |    | A  | S  |
| V     | Y  | #S        |    |    | #S |    | Y  | S  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |
| Cr    | Y  | S         | #S | #A | S  | S  | Y  | S  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |
| Mn    | Y  |           |    | #A | #A |    | Y  | S  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |
| Fe    | Y  |           |    | #A | #S |    | #Y | S  | #Y | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | #Y | Y  | #Y | #Y | #Y | Y  |
| Ga    | #Y | S         |    | S  | S  | #S | #Y | S  | #Y | Y  |    |    |    | Y  |    | Y  | Y  | Y  | Y  | #Y | #Y | #Y | #Y | #Y | Y  |
| Y     |    |           |    |    |    |    |    |    |    | A  | A  | S  |    | S  | S  |    |    |    |    |    |    |    |    |    | S  |
| Rh    |    |           |    |    |    |    | Y  | #S | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |
| In    |    |           |    |    |    |    | Y  |    | #A |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    | Y  | Y  | Y  |    |

| ABSrO <sub>4</sub>                             |    |   |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |  |
|------------------------------------------------|----|---|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|--|
| <div><div><div>B</div><div>A</div></div></div> | Sc | V | Mn | Fe | Ga | Y  | Rh | In | La | Ce | Pr | Nd | Pm | Sm | Eu | Gd | Tb | Dy | Ho | Er | Tm | Yb | Lu | Am |  |
| Al                                             | K  |   |    |    | A  | #K |    |    | #K | #K | #K | #K | K  | #K | #K | #K | #K | #K | #K | #K | #K | #K | K  | K  |  |
| Sc                                             | #C |   |    |    |    | C  |    | A  | #A | #A | #A | #A | A  | #A | #A |    |    |    |    |    |    |    | C  | A  |  |
| V                                              | A  | A | A  | A  |    | K  | A  |    | #K | #K | #K | #K | K  | #K | #K | #K | #K | #K | #K | #K | #K | #K | #K | K  |  |
| Cr                                             |    | A | A  | A  | A  | A  | A  |    | #K | #K | #K | #K | K  | #K | #K | #K | #K | #K | #K | #K | #K | K  | K  | K  |  |
| Mn                                             |    |   | #C | A  |    | K  | A  |    | #N | #K | #K | #K | K  | #K | #K | #K | #K | #K | #K | #K | #K | K  | K  | K  |  |
| Fe                                             |    |   | A  | #A |    | K  | A  |    | #K | #K | #K | #K | K  | #K | #K | #K | #K | #K | #K | #K | #K | K  | K  | K  |  |
| Ga                                             | K  |   |    |    | #A | #K |    | A  | #K | #K | #K | #K | K  | #K | #K | #K | #K | #K | #K | #K | #K | #K | K  | K  |  |
| Y                                              |    |   |    |    |    | #C |    |    |    |    |    |    |    |    |    | C  | C  | C  | C  |    |    |    |    |    |  |
| Rh                                             | A  |   |    |    |    | K  | #A | A  | #K | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  |  |
| In                                             |    |   |    |    |    | A  |    | #C | #A | A  | #A | A  | A  | A  | A  | A  | A  | A  | A  | A  |    | A  |    | A  |  |

**Таблица 4.** Прогнозы типа кристаллической структуры соединений состава  $ABCO_4$  ( $C = Cd, Ba$ )

| ABCdO <sub>4</sub>                  |    |    |    |    |   |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |  |
|-------------------------------------|----|----|----|----|---|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|--|
| <div><div>A</div><div>B</div></div> | Sc | V  | Fe | Ga | Y | Rh | La | Ce | Pr | Nd | Pm | Sm | Eu | Gd | Tb | Dy | Ho | Er | Tm | Yb | Lu | Am |  |
| Al                                  | Y  |    | S  | S  | Y | S  | Y  |    |    |    | Y  |    | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |    | Y  |    |  |
| Sc                                  | #S |    |    |    |   |    |    |    |    |    |    |    |    | S  | S  | S  | S  | S  |    |    | S  | S  |  |
| V                                   | Y  | #S | S  |    | Y | S  |    |    |    |    | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |    |  |
| Cr                                  | Y  | S  | S  | S  | Y | S  |    | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |  |
| Mn                                  | Y  |    |    |    | Y | S  |    | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |  |
| Fe                                  | Y  |    | #S |    | Y | S  |    | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |  |
| Ga                                  | Y  | S  | S  | #S | Y | S  | Y  |    |    | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |  |
| Y                                   |    |    |    |    |   |    | A  | A  | A  | A  |    |    |    | A  | A  | A  |    |    |    |    |    |    |  |
| Rh                                  | Y  |    |    |    | Y | #S |    |    |    |    | Y  |    |    | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |  |
| In                                  |    |    |    |    | Y |    |    |    |    |    | Y  | Y  |    | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  | Y  |    |    |  |

| ABBaO <sub>4</sub>                  |    |   |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |    |
|-------------------------------------|----|---|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|----|
| <div><div>A</div><div>B</div></div> | Sc | V | Mn | Fe | Ga | Y  | Rh | In | La | Ce | Pr | Nd | Pm | Sm | Eu | Gd | Tb | Dy | Ho | Er | Tm | Yb | Lu | Am |
| Al                                  | K  |   |    | #N | #A | K  |    |    | #K | #K | #K | #K | K  | #K | #K | #K | #K | #K | #K | #K | K  | K  | K  | K  |
| Sc                                  | A  |   |    |    |    | C  |    |    | A  | A  | A  | A  |    | A  |    |    |    |    |    |    | A  |    |    | A  |
| V                                   |    | A | A  | A  |    | K  | A  | A  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  |
| Cr                                  | K  | A | A  | A  | A  | K  | A  | A  | #K | #K | #K | #K | K  | #K | #K | #K | #K | #K | #K | #K | K  | K  | K  | K  |
| Mn                                  | K  |   | #A | A  |    | K  | A  | A  | #K | #K | #K | #K | K  | #K | #K | #K | #K | #K | #K | #K | K  | K  | K  | K  |
| Fe                                  |    |   | A  | #A |    | #K | A  | A  | #K | #K | #K | #K | K  | #K | #K | #K | #K | #K | #K | #K | K  | K  | K  | K  |
| Ga                                  |    |   |    | #A | #A | K  |    | A  | #A |    |    | #A |    |    |    |    |    |    | K  | K  | K  | K  |    |    |
| Y                                   |    |   |    |    |    | #C |    |    | C  |    |    |    | C  |    |    | C  | C  | C  | C  |    |    |    |    |    |
| Rh                                  |    |   |    |    |    | K  | #A | A  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  | K  |
| In                                  |    |   |    |    |    | A  |    | #A | #A | A  | A  | #A | A  | A  |    | A  | A  | A  | A  | A  |    |    | A  | A  |

критерия, позволяющего разделить соединения  $ABCO_4$  с кристаллической структурой типа  $K_2NiF_4$  от соединений с другими структурами и систем  $A_2O_3-B_2O_3-CO$  с отсутствием соединений  $ABCO_4$ , наивысшую точность прогнозирования (95%) удалось получить при использовании коллектива алгоритмов, объединяющего обучение нейронной сети, методы  $k$ -ближайших соседей и опорных векторов, а также комитетный метод (усреднение) для принятия коллективного решения. Критерий включал только свойства элементов. Для целевого класса соединений с кристаллической структурой типа  $CaFe_2O_4$  наиболее классифицирующий критерий (точность 99%) также включал только свойства

элементов и был получен в результате применения коллектива алгоритмов (обучение нейронной сети, методы линейной машины,  $k$ -ближайших соседей и опорных векторов) и метода шаблонов для принятия коллективного решения. Для отделения шпинелей состава  $ABCO_4$  от соединений с другими структурами и систем, в которых соединения заданного состава не образуются, потребовалось дополнительно включить в критерий свойства простых оксидов. Точность критерия, полученного в результате применения коллектива алгоритмов распознавания образов (обучение нейронной сети, методы  $k$ -ближайших соседей и опорных векторов) с использованием метода Байеса для принятия

коллективного решения, достигала 95%. Только при решении задачи 3 для разделения соединений со структурой  $\text{YbFe}_2\text{O}_4$  и соединений с другими кристаллическими структурами наиболее классифицирующий критерий включал помимо свойств элементов и простых оксидов найденные наиболее «информативные» параметры M5(3)/M6(1) и A5(2)/A5(3). Коллектив алгоритмов, основанных на обучении нейронной сети, методах линейной машины,  $k$ -ближайших соседей и опорных векторов, с использованием комитетного метода голосования по большинству для принятия коллективного решения позволил в этом случае добиться 95%-ной точности прогнозирования.

Сформированные критерии были использованы для прогноза возможности образования и типа кристаллической структуры при обычных условиях еще не синтезированных соединений. Часть результатов сравнения прогнозов, полученных при решении всех трех классификационных задач, представлена в табл. 1–4. Приняты следующие обозначения: К – прогноз соединений с кристаллической структурой  $\text{K}_2\text{NiF}_4$ ; С – прогноз соединений с кристаллической структурой типа  $\text{CaFe}_2\text{O}_4$ ; S – прогноз соединений с кристаллической структурой шпинели; Y – прогноз соединений с кристаллической структурой типа  $\text{YbFe}_2\text{O}_4$ ; A – прогноз соединений с кристаллической структурой, отличной от приведенных выше; N – прогноз отсутствия соединения состава  $\text{ABCO}_4$  в системе  $\text{A}_2\text{O}_3\text{--B}_2\text{O}_3\text{--CO}$ . Значком # обозначены ранее изученные системы, информация о которых использована для обучения ЭВМ.

Анализ полученных таблиц прогнозов показывает, что наибольшее количество новых соединений состава  $\text{ABCO}_4$  с кристаллическими структурами типа  $\text{K}_2\text{NiF}_4$  и  $\text{CaFe}_2\text{O}_4$  прогнозируется в системах с щелочноземельными металлами (за исключением систем с магнием). Для этих систем не характерно образование шпинелей и соединений  $\text{ABCO}_4$  со структурой типа  $\text{YbFe}_2\text{O}_4$ . Эти соединения чаще всего прогнозируются в системах с C = Mg, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn или Cd.

Анализ результатов расчетов по оценке важности параметров компонентов для классификации оксидных соединений по типу кристаллической структуры или по возможности их образования при определенных внешних условиях показывает, что включение в классификационные критерии только двух-трех параметров элементов или простых оксидов (или алгебраических функций от этих свойств) не обеспечивает приемлемую точность разделения разных классов веществ по сравнению с использованием широкого набора свойств компонентов. Возможное объяснение этого эффекта связано с тем, что в последнем случае удается учесть особенности разных по составу веществ, в том числе и с уникальным набором компонентов.

Использование методов распознавания образов по прецедентам автоматизирует процессы поиска таких многомерных критериев, прогнозирования еще не полученных соединений и оценки их свойств.

Существенный вклад в снижение точности прогнозирования вносят экспериментальные ошибки в отнесении веществ к прогнозируемым классам. В настоящем исследовании впервые предпринята попытка частично автоматизировать процедуру поиска таких ошибок на основе использования идей распознавания образов. Однако окончательное решение о том, является ли экспериментальная информация, обнаруженная программой искусственного интеллекта, ошибочной, принимается химиком, обучающим компьютерную систему.

## БЛАГОДАРНОСТЬ

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ, проекты 16-07-01028, 14-07-00819 и 15-07-00980.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Cava R.J., Ramirez A.P., Huang Q., Krajewski J.J. // J. Solid State Chem. 1998. V. 140. № 2. P. 337. DOI: 10.1016/j.ssc.1998.7898
2. Dabkowska H.A., Dabkowski A., Luke G.M., Gaulin B.D. // J. Cryst. Growth. 2002. V. 234. № 2–3. P. 411. DOI: 10.1016/S0022-0248(01)01671-2
3. De Paz J.R., Martinez J.L., Saez Puche R. // J. Alloys Compd. 2000. V. 303–304. № 1–2. P. 293. DOI: 10.1016/S0925-8388(00)00588-0
4. Fan X.C., Chen X.M., Liu X.Q. // Chem. Mater. 2008. V. 20. № 12. P. 4092. DOI: 10.1021/cm703273z
5. Malozemoff A.P. // Mater. Res. Bull. 1987. V. 22. № 5. P. 701. DOI: 10.1016/0025-5408(88)90120-6
6. Du H., Luan J. // Solid State Sci. 2012. V. 14. № 9. P. 1295. doi: 10.1016/j.solidstatesciences.2012.07.001
7. Fujii K., Esaki Y., Omoto K. et al. // Chem. Mater. 2014. V. 26. № 8. P. 2488. DOI: 10.1021/cm500776x
8. Недилько С.А. // Журн. неорганической химии. 1982. Т. 27. № 5. С. 1130.
9. Ковба Л.М., Лыкова Л.Н., Антипов Е.В., Розова М.Г. // Журн. неорганической химии. 1984. Т. 29. № 12. С. 3137.
10. Важнов А.К., Петров К.И. // Журн. неорганической химии. 1990. Т. 35. № 8. С. 2078.
11. Patel R., Simon C., Weller M.T. // J. Solid State Chem. 2007. V. 180. № 1. P. 349. DOI: 10.1016/j.ssc.2006.10.023
12. Taguchi H., Nakade K., Hirota K. // Mater. Res. Bull. 2007. V. 42. № 4. P. 649. DOI: 10.1016/j.materresbull.2006.08.004

13. *Тітов Ю.О., Білявіна Н.М., Марків В.Я. и др.* // Доп. Нац. АН України. 2009. № 10. С. 160.
14. *Müller O., Roy R.* The major ternary structural families. Berlin—Heidelberg—N.Y.: Springer, 1974. 487 p.
15. *Ganguly D.* // J. Solid State Chem. 1979. V. 30. № 3. P. 353. DOI: 10/1016/0022-4596(79)90247-0
16. *Kimizuka N., Takayama-Muromachi E., Siratori K.* Handbook on the Physics and Chemistry of Rare Earths. Amsterdam—Boston—Heidelberg—London—N.Y. — Oxford—Paris—San Diego—San Francisco—Singapore—Sydney—Tokyo: Elsevier, 1990. V. 13. P. 283.
17. *Смирнов Ю.Е., Зверева И.А.* // Журн. общ. химии. 2001. Т. 71. № 6. С. 901 [Smirnov Yu.E., Zvereva I.A. // Russ. J. Gen. Chem. 2001. V. 71. № 6. P. 845. DOI: 10.1023/A:1012310930254].
18. *Зверева И.А., Резницкий Л.А., Филиппова С.Е.* // Журн. общ. химии. 2004. Т. 74. № 5. С. 721 [Zvereva I.A., Reznitskii L.A., Filippova S.E. // Russ. J. Gen. Chem. 2004. V. 74. № 5. P. 659. DOI: 10.1023/B:RUGC.0000039073.05872.36].
19. *Grajczyk R., Subramanian M.A.* // Progr. Solid State Chem. 2015. V. 43. № 1–2. P. 37. DOI: 10.1016/j.progsolidstchem.2014.09.001
20. *Pajczkowska A., Gloubokov A.* // Prog. Cryst. Growth Charact. 1998. V. 36. № 1–2. P. 123. DOI: 10/1016/S0960-8974(98)00006-0
21. *Киселева Н., Мурат Д., Столяренко А. и др.* // Информ. ресурсы России. 2006. № 4. С. 21.
22. *Kimizuka N., Mohri T.* // J. Solid State Chem. 1989. V. 78. № 1. P. 98. DOI: 10/1016/0022-4596(89)90132-1
23. *Безносиков Б.В., Александров К.С.* Закономерности образования структур  $ABCX_4$ . I. Границы существования основных структурных семейств. Препринт № 463Ф. Красноярск: Ин-т физики им. Л.В. Киренского СО АН СССР, 1987. 36 с.
24. *Безносиков Б.В.* Закономерности образования структур  $ABCX_4$ . III. Кристаллы типов  $K_2MgF_4$  и  $K_2PtCl_4$ . Препринт № 655Ф. Красноярск: Ин-т физики им. Л.В. Киренского СО АН СССР, 1990. 32 с.
25. *Безносиков Б.В., Александров К.С.* Кристаллы типов  $YbFe_2O_4$  и  $Yb_2Fe_3O_7$  (Кристаллохимия, прогноз новых соединений). Препринт № 834Ф. Красноярск: Ин-т физики им. Л.В. Киренского СО РАН, 2006. 24 с.
26. *Gerardin R., Alebouyeh A., Jeannot F. et al.* // Mater. Res. Bull. 1980. V. 15. № 5. P. 647. DOI: 10/1016/0025-5408(80)90146-4
27. *Савицкий Е.М., Грибуля В.Б., Киселева Н.Н. и др.* Прогнозирование в материаловедении с применением ЭВМ. М.: Наука, 1990. 86 с.
28. *Kiselyova N.N., Stolyarenko A.V., Ryzanov V.V. et al.* // Pattern Recogn. Image Analysis. 2011. V. 21. № 1. P. 88. DOI: 10.1134/S1054661811010081
29. *Киселева Н.Н., Столяренко А.В., Рязанов В.В. и др.* // Журн. неорганической химии. 2016. Т. 61. № 5. С. 633. DOI: 10.7868/S0044457X16050093 [Kiselyova N.N., Stolyarenko A.V., Ryzanov V.V. et al. // Russ. J. Inorg. Chem. 2016. V. 61. № 5. P. 604. DOI: 10.1134/S0036023616050090].
30. *Кузнецова О.С.* Краткий курс по теории вероятностей и математической статистике. М.: Окей-книга, 2013. 191 с.
31. *Grubbs F.E.* // Ann. Math. Stat. 1950. V. 21. № 1. P. 27. DOI: 10.1214/aoms/1177729885
32. *Dixon W.J.* // Biometrics. 1953. V. 9. № 1. P. 74. DOI: 10.2307/3001634
33. *Senko O.V.* // Pattern Recogn. Image Analysis. 2009. V. 19. № 3. P. 465. DOI: 10.1134/S1054661809030110
34. *Журавлев Ю.И., Рязанов В.В., Сенько О.В.* «Распознавание». Математические методы. Программная система. Практические применения. М.: ФАЗИС, 2006. 176 с.
35. *Киселева Н.Н.* // Журн. неорганической химии. 2014. Т. 59. № 5. С. 665. DOI: 10.7868/S0044457X14050110 [Kiseleva N.N. // Russ. J. Inorg. Chem. 2014. V. 59. № 5. P. 496. DOI: 10.1134/S0036023614050106].