

п р и к л а г н а я

ИНФОРМАТИК@

научно-практический журнал

№ 2(50) 2014

Март-апрель

ISSN 1993-8314

Московский финансово-промышленный университет «Синергия»

С 19 февраля 2010 года журнал включен в Перечень ведущих периодических изданий, рекомендованных ВАК для публикации результатов диссертационных исследований.

Уважаемые коллеги!

От имени Редакционного совета поздравляю вас с выпуском юбилейного, 50-го номера журнала, который уже девятый год издается при активной поддержке нашей авторской аудитории, представляющей вниманию читателей актуальные материалы по вопросам разработки и использования современных компьютерных технологий в различных предметных областях.

Подготовка юбилейного выпуска ознаменовалась знаковым событием в научной среде — в подмосковном наукограде Дубна была принята резолюция XVI конференции «Наука. Философия. Религия», цель которой состояла в рассмотрении новых возможностей, а также вызовов, проблем и угроз, возникающих перед человечеством в связи с возрастанием роли информации, знаний, а также информационных и коммуникативных технологий в жизни современного общества. Текст резолюции опубликован в нашей дискуссионной рубрике «Точка зрения».

В резолюции, в частности, отмечается, что процесс интенсивного развития средств ИКТ имеет амбивалентный характер — приносимые ими польза и удобства сочетаются с существенными рисками, которые необходимо учитывать при внедрении средств ИТ-поддержки в различных сферах жизнедеятельности. В связи с этим следует особо отметить материалы данного выпуска, включенные в разделы «ИТ-бизнес», «ИТ-менеджмент» и «Методология науки», посвященные концептуальным подходам к разработке и внедрению инструментария программной поддержки. Остальные публикации нашего юбилейного номера посвящены вопросам алгоритмизации и математического обеспечения, лежащих в основе построения современных систем компьютерного моделирования.

Главный редактор
А. А. Емельянов

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ

Главный редактор

Емельянов А. А., докт. экон. н., проф., Национальный исследовательский университет «МЭИ»; Национальное общество имитационного моделирования, Санкт-Петербург

Сопредседатели редакционного совета

Рубин Ю. Б., докт. экон. н., проф., чл.-корр. РАО, Ректор МФПУ «Синергия», зав. кафедрой Теории и практики конкуренции

Мешалкин В. П., докт. техн. н., проф., чл.-корр. РАН, Директор Института логистики ресурсосбережения и технологической инноватики, РХТУ им. Д. И. Менделеева

Члены редакционного совета

Амбросов Н. В., докт. экон. н., проф., зав. кафедрой Информатики и кибернетики, БГУЭФ (Иркутск)

Багриновский К. А., докт. экон. н., проф., зав. лабораторией Имитационного моделирования, ЦЭМИ РАН

Бендиков М. А., докт. экон. н., проф., зав. кафедрой ИУиМ МФПУ «Синергия», вед. научн. сотр. ЦЭМИ РАН

Брекис Эд., Dr. Oes., доцент, зав. кафедрой Эконометрики и бизнес-информатики, Факультет Экономики и Управления, Латвийский Университет, Рига, Латвия

Бугорский В. Н., канд. экон. н., проф., кафедра ВТИП, СПбГЭУ

Волкова В. Н., докт. экон. н., проф., кафедра Информационных систем в экономике и менеджменте, СПбГПУ

Дик В. В., докт. экон. н., проф., зав. кафедрой ИМиЭК МФПУ «Синергия»

Диго С. М., канд. экон. н., проф., отв. за работу с авторизованными учебными центрами и образовательными учреждениями, Компания «1С», Москва

Дли М. И., докт. техн. н., проф., зав. кафедрой МИТЭ, Зам. директора Филиала НИУ «МЭИ» в Смоленске

Дови'В., Dr of Physics, Полный профессор теории развития процессов, Университет Генуи, Италия

Клемеш Йржи, Dr, проф., Факультет IT Исследовательского института химии и инженерии процессов, Паннония Университет, Веспрем, Венгрия

Козлов В. Н., докт. техн. н., проф., зав. кафедрой Системного анализа и управления, СПбГПУ

Коршунов С. В., канд. техн. н., проф., проректор МГТУ им. Н. Э. Баумана

Милош М., PhD, проф., Зам. директора Института компьютерных наук, Люблинский Технологический Университет, Люблин, Польша

Мэйпл К., Dr, Профессор компьютерных вычислений, Бэдфордширский Университет, Зам. вице-канцлера по исследованиям предприятий, Лутон — Бэдфордшир, Великобритания

Павловский Ю. Н., докт. физ.-мат. н., проф., чл.-корр. РАН, зав. отделом Имитационных систем, ВЦ им. А. А. Дородницына РАН

Потёмкин А. И., докт. техн. н., зав. кафедрой Корпоративного управления и электронного бизнеса, РГУТиС, Московская обл. (п. Черкизово)

Праузелло Фр., PhD, Полный профессор международной экономики, Директор Департамента Экономики и Финансов, Университет Генуи, Италия

Пузанков Д. В., докт. техн. н., проф., зав. кафедрой Вычислительной техники, СПбГЭУ «ЛЭТИ» им. В. И. Ульянова

Пуйджанер Л., Dr, проф., Директор Центра процессов и технологий воздействия на окружающую среду, Политехнический Университет Каталонии, Барселона, Испания

Росс Г. В., докт. экон. н., докт. техн. н., проф., Зам. директора ВНИИ ПВТИ

Салмин С. П., докт. экон. н., проф., кафедра ИСИИМ НКИ, ННГУ им. Н. И. Лобачевского (Нижний Новгород)

Сухомлин В. А., докт. техн. н., проф., зав. лабораторией Открытых информационных технологий, факультет ВМК, МГУ им. М. В. Ломоносова

Халин В. Г., докт. экон. н., проф., зав. кафедрой Информационных систем в экономике, Экономический факультет СПбГУ

Хубаев Г. Н., докт. экон. н., проф., зав. кафедрой Экономической информатики и автоматизации управления РГЭУ (РИНХ, Ростов-на-Дону)

Чистов Д. В., докт. экон. н., проф., зав. кафедрой Информационных технологий, Финансовый университет при Правительстве РФ

Шориков А. Ф., докт. физ.-мат. н., проф., главн. научн. сотр. Центра экономической безопасности Института экономики Уральского отделения РАН (Екатеринбург)

Штельцер Д., Dr, проф., Департамент информации и управления знаниями, Факультет Экономики, Технологический Университет Ильменау, Тюрингия, Германия

Заместители главного редактора

Власова Е. А., научная редакция МФПУ «Синергия»;

Прокимов Н. Н., канд. техн. н., доцент, кафедра Информационных систем, МФПУ «Синергия»

EDITORIAL BOARD

Editor in Chief

A. Emelyanov, Dr of Economics, Professor, National Research University MPEI; Executive board member of NC «National Society for Simulation Modelling», St. Petersburg

Co-Chairs of the Editorial Board

Yu. Rubin, Dr of Economics, Professor, Corresponding Member of the Russian Education Academy, Head of the Theory and Practice of Competition Chair, Rector of the Moscow University of Finance and Industry (MUI) «Sinergy»

V. Meshalkin, Dr of Technique, Professor, Corresponding Member of Russian Academy of Sciences (RAS), Director of the Institute of Logistics and Resource Technology Innovation, D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow

Members of the Editorial Board

N. Ambrosov, Dr of Economics, Professor, Head of the Informatics and Cybernetics Chair, Baikal State University of Economics and Law (Irkutsk)

K. Bagrinovsky, Dr of Economics, Professor, Head of The simulation and economic objects interaction Laboratory, CEMI RAS

M. Bendikov, Dr of Economics, Professor, Head of The Innovation Management and Modeling Chair, MUI «Sinergy»; Leading researcher of the CEMI RAS

Edgars Brēķis, Dr. oec., Asoc. professor, Head of the Econometrics and Business Informatics Department, Faculty of Economics and Management, University of Latvia

V. Bugorsky, PhD in Economics, Professor, The Computers and Programming Chair, St. Petersburg State Economic University

D. Chistov, Dr of Economics, Professor, Head of The IT Chair, Finance University under the Government of Russia

V. Dick, Dr of Economics, Professor, Head of The Information Management and Electronic Commerce Chair, MUI «Sinergy»

S. Digo, PhD in Economics, Professor, Account Manager, Authorized Training Centers and Educational Institutions, «1C» Company, Moscow

M. Dli, Dr of Technique, Professor, Head of The MITE Chair, Deputy Director of the National Research University MPEI Branch in Smolensk

Vincenzo Dovi, Dr of Physics, Full Professor of Process's Development Theory, University of Genoa, Italy

V. Hulin, Dr of Economics, Professor, Head of The Economic Information Systems Department, St. Petersburg State University

G. Khubayev, Dr of Economics, Professor, Head of the EI&AC Chair, Rostov State Economic University (Rostov-on-Don)

Jiří Klemeš, Dr, Professor, Faculty of IT in Research Institute of Chemical and Process Engineering, University of Pannonia, Veszprem, Hungary

S. Korshunov, PhD in Technique, Professor, Bauman Moscow State Technical University, Vice-rector

Deputy Chief Editors

E. Vlasova, Scientific Edition Department, MUI «Sinergy»

N. Prokimmov, PhD, Associate Professor, the Information Systems Chair, MUI «Sinergy»

V. Kozlov, Dr of Technique, Professor, Head of the SA&C Chair, St. Petersburg State Polytechnical University

Carsten Maple, Dr, Professor of Computing, Pro Vice Chancellor for Research & Enterprise, University of Bedfordshire, United Kingdom

Marek Miłosz, PhD, Professor, Lublin University of Technology, The Institute of Computer Science, Vice-director, Lublin, Poland

Yu. Pavlovsky, Dr of Physics & Mathematics, Professor, Corresponding Member of RAS, Head of The Simulation Department, Dorodnitsyn Computing Centre of RAS

A. Potyomkin, Dr of Technique, Professor, Head of The CG&E-Business Chair, Russian State University of Tourism and Service, Moscow region (Cherkizovo town)

Franco Praussello, PhD, Full professor of International Economics, Director of The Economic and Financial Sciences Department, University of Genoa, Italy

Luis Puigjaner, Dr, Profecor, Universitat Politècnica de Catalunya, The Centre for Process & Environmental Engineering, Director, Barcelona, Spain

Dm. Puzankov, Dr of Technique, Professor, Head of The Computer Engineering Chair, St. Petersburg Electrotechnical University «LETI»

G. Ross, Dr of Economics, Doctor of Technique, Professor, Deputy Director of The All-Russian Institute for Computer Facilities and Informatization

S. Salmin, Dr of Economics, Professor, The IS&IM Chair NNCI, Lobachevsky State University of Nizhni Novgorod

A. Shorikov, Dr of Physics & Mathematics, Professor, Senior Researcher, Economic Security Center, Institute of Economy RAS (Ekaterinburg)

V. Sukhomlin, Dr of Technique, Professor, Faculty of Computational Mathematics and Cybernetics, Lomonosov Moscow State University

Dirk Stelzer, Dr, Professor, The Faculty of Economics, Department of Information and Knowledge Management, Ilmenau University of Technology (TU Ilmenau), Germany

V. Volkova, Dr of Economics, Professor, The Information Systems in Economics and Management Chair, St. Petersburg State Polytechnical University

IT-бизнес

Информационные системы бизнеса

А. И. Волков

Методологические и программно-технологические аспекты внедрения процессного управления в ИТ-компаниях 6

О. А. Жданович, В. Ф. Корнюшко, И. С. Иванчук, А. В. Костров

Степень готовности системы управления бизнес-процессами к внедрению информационных технологий (методика оценки) 14

IT-менеджмент

Управление эффективностью

В. В. Артюхин, Ю. К. Чясновичус

Планирование аналитического исследования при помощи методов анализа качественных данных 23

Управление проектами

А. Г. Михеев

Применение процессного подхода к управлению финансовыми ресурсами кредитной организации 49

Инструментальные средства

Эффективные алгоритмы

Е. Р. Мошев, М. А. Ромашкин

Модели и алгоритмы расчета устройств для гашения пульсаций газообразной среды в трубопроводных системах 56

Модели и методики

И. О. Атовмян, Е. Ф. Березкин, С. С. Ковалевский, В. Б. Шувалов

Оптимизация тестирования сложных цифровых устройств 76

В. А. Дударев, О. А. Филоретова, Г. В. Брыкина

Методы распознавания образов в компьютерном конструировании неорганических соединений 82

Simulation

Акторное моделирование

А. А. Емельянов, Н. З. Емельянова

Выявление принадлежности точек к объектам территорий в имитационных моделях Actor Pilgrim 88

Теория и практика

М. В. Федотов, В. В. Девятков, М. А. Долматов, В. А. Коренько, А. М. Плотников

Применение системы GPSS World при проектировании и модернизации судосборочных комплексов в составе современных судостроительных верфей 103

Лаборатория

Системы поддержки принятия решений

Е. Д. Стрельцова, И. В. Богомягова, В. С. Стрельцов

Управление бюджетом на основе нечеткой алгебры 109

В преподавательский портфель

Экономико-математические модели

Е. Попова

Социальная модель как детерминант человеческого капитала 115

Точка зрения

Методология науки

Л. С. Болотова, А. Н. Данчул, А. П. Новиков, А. А. Никишина

Организация многонаправленности иерархического подъема (спуска) и локация по структуре неоднородных знаний (часть 2) 124

Информационно-коммуникационные технологии

Пресс-релиз

Резолюция XVI конференции «Наука. Философия. Религия» 138

Правила оформления рукописей 141

IT business

Business information systems

A. Volkov

Methodological and program-technological aspects of the implementation of process management in the IT company6

O. Zhdanovich, V. Korniyushko, I. Ivanchuk, A. Kostrov

The estimate methodics of business process management system readiness level to information technology introduction14

IT management

Performance management

V. Artukhin, J. Chiasnavichius

Application of qualitative data analysis methods for analytical research planning, specification of its goals and tasks23

Project management

A. Mikheev

Process approach application to financial institution management of financial resources49

Tools

Algorithmic efficiency

E. Moshev, M. Romashkin

Models and algorithms of calculation of devices for damping pulsations of gaseous medium in pipeline systems56

Models and methods

I. Atovmyan, E. Berezkin, S. Kovalevskiy, V. Shuvalov

Building optimal test sets for checking complex digital devices76

V. Dudarev, O. Filoretova, G. Brykina,

Pattern recognition methods usage to computer-aided design of inorganic compounds...82

Simulation

Actor modeling

A. Emelyanov, N. Emelyanova

Identify points to belong to objects in simulations territories by means of Actor Pilgrim88

Theory and practice

M. Fedotov, V. Deviatkov, M. Dolmatov, V. Koren'ko, A. Plotnikov

Application of GPSS World simulation system at designing ship-assembly complexes in structure of modern ship-building shipyards103

Laboratory

Decision support systems

E. Streltsova, I. Bogomyagcova, V. Streltsov,

Budget management based on fuzzy algebra109

Teacher's portfolio

Mathematical models in economy

Ye. Popova

Social model type as a determinant of human capital115

Point of view

Methodology of science

L. Bolotova, A. Danchul, A. Novikov, A. Nikishina

The organization of the multiorientation of hierarchical lifting (descent) and location on structure of non-uniform knowledge (part 2)124

Information and communications technology

Press-release

Resolution of XVI conference «Science. Philosophy. Religion»138

Guidelines for authors141

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-

нительно к синтезу сложных органических соединений с помощью компьютера. Соблюдение правил валентности для углерода и водорода упрощает решение задачи компьютерного конструирования органических соединений в отличие от неорганических соединений, где правило валентности соблюдается не для всех видов химических связей между атомами.

Термин «компьютерное конструирование неорганических соединений», появившийся в 90-е годы прошлого века, обозначает поиск совокупности химических элементов и их соотношения для создания определенной молекулярной или кристаллической пространственной структуры соединения, позволяющей реализовать необходимые функциональные свойства.

С помощью методов компьютерного конструирования неорганических соединений в данное время решаются следующие типы задач:

- образование (отсутствие образования) соединений в химической системе;
- образование (отсутствие образования) соединений заданного количественного состава в химической системе;
- прогнозирование типа кристаллической структуры;
- интервальное прогнозирование значений свойств неорганических соединений.

Для компьютерного конструирования неорганических соединений обязательным является выполнение двух условий: 1) наличие больших объемов достоверной информации о свойствах неорганических веществ и материалов; 2) использование алгоритмов для анализа накопленных химических данных и поиска в них взаимосвязей, позволяющих осуществлять прогнозирование различных свойств неорганических веществ.

Базы данных по свойствам неорганических веществ

Интегрированная система баз данных по свойствам неорганических веществ и материалов (БД СНВМ), разработанная в Ин-

ституте металлургии и материаловедения им. А. А. Байкова РАН (ИМЕТ РАН), является источником информации для компьютерного анализа. В настоящее время она объединяет следующие базы данных (БД) [1]:

1) по свойствам неорганических соединений «Фазы», содержащую информацию о свойствах более 46 тыс. тройных соединений (т.е. соединений, образованных тремя химическими элементами) и более 17 тыс. четверных соединений;

2) фазовым диаграммам полупроводниковых систем «Диаграмма», содержащую оцененную высококвалифицированными экспертами информацию о фазовых диаграммах полупроводниковых систем. В настоящее время в этой БД собрана детальная информация о нескольких десятках наиболее важных для полупроводниковой электроники систем;

3) свойствам акустооптических, электрооптических и нелинейнооптических веществ «Кристалл», которая сейчас включает информацию о параметрах более 120 материалов;

4) ширине запрещенной зоны неорганических веществ «Bandgap», которая в настоящее время содержит данные о более 3 тыс. веществ;

5) свойствам химических элементов «Elements», включающую данные о более 90 параметрах химических элементов.

Общий объем БД около 9 Гбайт. Интегрированная информационная система позволяет специалистам получать совокупную информацию о свойствах веществ и материалов сразу же из разных БД. Система доступна зарегистрированным пользователям из сети Интернет (<http://www.imet-db.ru>).

Постановка задачи

Формальная постановка задачи компьютерного конструирования неорганических соединений может быть дана следующим образом. Пусть каждое неорганическое соединение описано вектором

$$\bar{x} = (x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, \dots, x_M^{(1)}, x_1^{(2)}, x_2^{(2)}, \dots, \dots, x_M^{(L)}, \dots, x_1^{(L)}, x_2^{(L)}, \dots, x_M^{(L)}),$$

где L — количество химических элементов в соединении, а M — количество параметров химических элементов, выбранных для описания. Каждое соединение, a , также характеризуется принадлежностью к определенному классу: $a(x) \in \{1, 2, \dots, K\}$, где K — количество классов. Обучающая выборка состоит из N объектов: $S = \{x_1, \dots, x_N\}$.

Обозначим подмножество объектов обучающей выборки из класса $a_j, j = 1, \dots, K$ как $S_{aj} = \{x \mid a(x) = a_j\}$. Цель обучения — построить классифицирующие правила, которые позволяют не только отличить объекты разных классов в обучающей выборке, но и обладают прогностической способностью образовывать новые комбинации химических элементов, которые не использовались для обучения, и относить их к одному из K классов. Таким образом осуществляется переход к классической задаче распознавания образов по прецедентам. Особенностью предметной области является только формирование признаков описания, имеющего составную структуру: набор свойств элементов (компонентов неорганического вещества) повторяется L раз. Часто для улучшения признаков описания добавляются алгебраические функции от свойств элементов или свойств простых двухкомпонентных соединений.

Количество классов K зависит от конкретной задачи. Например, при прогнозировании возможности образования соединений заданного состава $A_x B_y C_z$ экспериментально исследованные химические системы разбиваются на два класса: с образованием соединения состава $A_x B_y C_z$ и без образования соединения этого состава при обычных условиях. При прогнозе типа кристаллической структуры известные соединения разбиваются на несколько классов, соответствующих разным кристаллическим структурам при нормальных условиях.

Методика прогнозирования

Для компьютерного анализа данных используются методы обучения ЭВМ распознавания образов по прецедентам [3]: алгоритм вычисления оценок (АВО); метод бинарных решающих деревьев (МБРД); линейный дискриминант Фишера (ЛДФ); логические закономерности (LoReg); поиск логических закономерностей (ПЛЗ); поиск двумерных линейных разделителей (ПДЛР); алгоритм линейной машины (АЛМ); обучение нейронных сетей (ОНС); метод k ближайших соседей (KNN); голосование по типовым тестам (ГТТ); генетический алгоритм (ГА); статистическое взвешенное голосование (СВГ); метод опорных векторов (SVM); формирование понятий с использованием растущих пирамидальных сетей (ConFor) — разработка ИК им. В. М. Глушкова НАН Украины [4].

В результате компьютерного анализа каждый алгоритм распознавания образов строит классифицирующую закономерность, переменными которой являются свойства химических элементов, включенные в описание химических систем. С помощью процедуры скользящего контроля выбираются наилучшие алгоритмы распознавания образов, которые далее используются для принятия коллективного решения с использованием следующих подходов [5]: метод Байеса (МБ); области компетенции (ОК); шаблоны принятия решений (ШР); динамический метод Вудса (МВ); комплексный комитетный метод — голосование по большинству (КГ); комплексный комитетный метод — усреднение (КС); логическая коррекция (ЛК); выпуклый стабилизатор (ВС).

Наилучший алгоритм принятия коллективного решения выбирается на основе распознавания объектов, выбранных по таблице случайных чисел (равномерное распределение), которые исключаются из обучающей выборки и в процессе обучения, и в процессе принятия коллективного решения. На последнем этапе конструирования

ния неорганических соединений объекты, использованные для оценки качества распознавания, добавляются в обучающую выборку, и заново иницируется процесс построения коллективного решения с использованием выбранного наилучшего алгоритма. Наиболее точные алгоритмы обучения и принятия коллективного решения используются далее для прогнозирования [2]. Принадлежность еще не изученной химической системы к тому или иному заданному классу прогнозируется путем подстановки в найденные закономерности только значений свойств элементов, входящих в состав не исследованной системы.

Конструирование соединений типа $AlMnCu_2$

Приведем пример использования методов распознавания образов в неорганической химии для решения задачи поиска новых перспективных магнитных материалов. Неорганические соединения состава ABX_2 со структурой $AlMnCu_2$ (фазы Гейслера) привлекают внимание в качестве перспективных магнитных материалов для создания запоминающих устройств большой емкости.

В качестве исходных данных анализировались данные о 278 известных фазах Гейслера состава ABX_2 , 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 (A и B — металлы или полуметаллы; X—Mg, Al, Fe, Co, Ni, Cu, Ru, Rh, Pd, Ag, Ir, Pt или Au), извлеченные из БД CHVM.

Данные о системах представлялись в виде набора значений свойств химических элементов A, B и X, в который входили следующие параметры: псевдопотенциальный радиус (по Цангеру), энтальпия ис-

парения, 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, атомный вес, плотность, линейный коэффициент термического расширения, металлический радиус (по Веберу) и т. д. (всего 108 значений для каждой системы).

В таблице 1 даны результаты экзаменационного распознавания со скользящим контролем. По четыре лучших алгоритма для каждого распознаваемого класса (выделены серым фоном) были использованы при принятии коллективного решения, результаты которого приведены в табл. 2 (серым фоном отмечены методы, которые были далее использованы при прогнозировании новых соединений для каждого класса). Следует отметить, что использование коллективов алгоритмов позволило значительно повысить достоверность прогнозирования.

Заключение

Благодаря большим массивам накопленной материаловедческой информации появляется возможность использования хранимых данных для получения новых знаний. В данной работе показывается эффективность применения алгоритмов распознавания образов и методов коллективного принятия решения для получения высококачественных прогнозов при оценке образования неорганических соединений. Результаты этого подхода иллюстрируются на задаче прогнозирования новых фаз Гейслера с благородными металлами. Дело в том, что в последние годы сплавы Гейслера с Co, Fe или Ni стали применяться для производства жестких дисков большой

Таблица 1

Прогнозирование возможности образования и типа кристаллической структуры интерметаллидов состава ABX_2 разными алгоритмами

Алгоритм	Достоверность экзаменационного распознавания, %								
	Прогнозируемый класс								
	Возможность образования соединения	Многоклассовое прогнозирование	Фазы Гейслера	NaTi	YSiRh ₂	MgCuAl ₂	GdSnPt ₂	YSiPd ₂	PrGaCo ₂
ABO	80	60,4	71,9	81,6	79,5	67,6	—	53,9	58,0
ПДЛР	80	—	71,6	81,3	74,2	42,7	37,2	51,1	49,1
МБРД	56,9	63,1	47,5	50,6	53,2	57,7	40,8	40,7	48,4
ЛДФ	81,3	76,5	70,6	80,9	79,3	65,2	53,9	62,9	66,5
АЛМ	88	84,1	83,8	86,6	87,5	58,9	44,7	59,9	61,8
LoReg	86	76,8	82,6	86,9	85,4	64,3	52,0	57,3	60,2
ОНС	82,9	68,5	70,2	79,3	82,2	—	—	—	56,7
KNN	92,3	89,6	89,4	93,5	94,1	63,4	44,7	40,7	39,7
ConFor	97,0	95,2	91,3	91,8	90,0	86,7	82,4	81,4	83,5
SVM	59,3	59,0	60,2	73,7	94,5	48,0	51,2	49,5	54,7
СВГ	—	28,8	75,2	—	76,9	—	20,6	43,2	45,4

Таблица 2

Прогнозирование возможности образования и типа кристаллической структуры интерметаллидов состава ABX_2 разными методами принятия коллективного решения

Метод	Достоверность экзаменационного распознавания, %								
	Прогнозируемый класс								
	Возможность образования соединения	Многоклассовое прогнозирование	Фазы Гейслера	NaTi	YSiRh ₂	MgCuAl ₂	GdSnPt ₂	YSiPd ₂	PrGaCo ₂
МБ	100	99,2	99,7	100	98,6	94,7	92,1	97,0	96,5
ОК	100	100	100	100	96,2	94,5	91,3	93,4	93,8
ШР	100	100	100	100	98,8	96,8	93,9	96,4	96,6
МВ	77,9	76,2	98,9	81,2	86,7	87,1	94,4	81,4	79,7
КГ	96,5	92,3	95,8	97,4	97,2	86,3	62,5	92,4	92,5
КС	96,5	100	100	100	98,6	96,9	95,1	94,7	95,1
ЛК	—	99,8	99,9	100	98,7	90,6	95,6	92,1	92,2

Методы распознавания образов в компьютерном конструировании неорганических соединений

емкости, однако проблемой в этом случае является высокая реакционноспособность нанопорошков на основе Co, Fe или Ni. Поэтому для повышения плотности записи было предложено начать экспериментальный поиск новых более химически стойких ферромагнитных фаз Гейслера с благородными металлами. Полученные теоретические прогнозы позволят сократить время и затраты на поиск химически стойких новых фаз Гейслера.

Список литературы

1. Дударев В. А., Киселева Н. Н., Земсков В. С. Интегрированная система баз данных по свойствам материалов для электроники // Перспективные материалы. №5. 2006. С. 20–25.
2. Поляков Е. А., Масютин В. В., Дударев В. А. Компьютерное конструирование неорганических соединений на основе интегрированной информационной системы // Прикладная информатика. №4 (40). 2012. С. 38–43.
3. Журавлев Ю. И., Рязанов В. В., Сенько О. В. «РАСПОЗНАВАНИЕ». Математические методы. Программная система. Практические применения. М.: ФАЗИС, 2006. — 176 с.
4. Гладун В. П., Величко В. Ю., Киселева Н. Н., Москалькова Н. М. Вывод гипотез о составе и свойствах объектов на основе аналогии // Искусственный интеллект. 2000. №1. С. 44–52.
5. Ветров Д. П., Кропотов Д. А. Алгоритмы выбора моделей и построения коллективных решений в задачах классификации, основанные на принципе устойчивости. М.: URSS, 2006. — 112 с.

V. Dudarev, Ph. D. (Eng.), Associate Professor of Information Technology Department, Moscow Lomonosov State Academy of Fine Chemical Technology, vic@imet.ac.ru

O. Filoretova, Ph. D. (Eng.), Assistant of Information Technology Department, Moscow Lomonosov State Academy of Fine Chemical Technology, ugolek84@gmail.com

G. Brykina, Ph. D. (Eng.), Associate Professor of Information Technology Department, Moscow Lomonosov State Academy of Fine Chemical Technology, 2464650@mail.ru

Pattern recognition methods usage to computer-aided design of inorganic compounds

Currently an enormous number of databases on inorganic substances and materials properties exist that contains multidirectional information. The article is devoted to questions of accumulated data usage to find out regularities by means of pattern recognition methods that allow predicting formation of not synthesized substances and estimating its properties.

Keywords: pattern recognition, inorganic compound design, ferromagnetic materials.

Правила оформления рукописей для представления в редакцию журнала «Прикладная информатика»

Тематика публикаций журнала связана с теоретическими и прикладными аспектами применения компьютерного моделирования и информационных технологий в различных областях профессиональной деятельности.

Редакционный совет журнала заинтересован в опубликовании достаточно масштабных (не менее 15–20 страниц рукописи в установленном формате) работ научного и практического характера, в которых представлены новые результаты или разработки в области компьютерного моделирования, программных средств и информационных технологий.

Условия опубликования статьи

1. Научно-практические статьи, представляемые в «Прикладную информатику», независимо от их объема **публикуются бесплатно**. Статьи рекламного содержания, рекламные модули или вставки помещаются в журнал на платной основе согласно утвержденным расценкам или на компенсационных условиях. Общий объем рекламы в одном номере журнала не должен превышать 5 полос.

2. Статья должна соответствовать данным Правилам.

3. Материалы публикуются только после положительной рецензии. Рецензент назначается главным редактором или его заместителем. Отрицательная рецензия может быть предоставлена автору. Рецензирование является для автора анонимным.

4. Сроки опубликования статей зависят от величины очереди, которая образуется в связи с интенсивностью поступления статей в редакцию с учетом тематической компоновки редакционного портфеля.

Статьи предоставляются в электронном виде на e-mail редакции.

Структура рукописи

1. Статья должна начинаться с вводной части (введения), которая включает в себя содержательную постановку рассматриваемого вопроса, краткие сведения из его истории, разъяснения относительно того, где и когда изучаемый вопрос возникает. Должен быть ясен мотив, побудивший автора написать статью.

2. В основной части текста дается подробная постановка задачи, в том числе с позиций прикладной информатики. Если вопрос сводится к анализу некоторой модели, то должно быть пояснено, как эта модель вытекает из содержательной постановки задачи. Приводимые утверждения и результаты должны быть изложены и обстоятельно разъяснены.

При написании статьи следует придерживаться специальной терминологии, характерной для той области знаний, тематике которой посвящена статья.

Используемые в основном тексте редко встречающиеся специальные термины и обозначения необходимо разъяснять.

Не рекомендуется чрезмерное употребление аббревиатур, кроме общепринятых (за исключением тех редких случаев, когда автор претендует на открытие нового научного направления). Все аббревиатуры должны быть расшифрованы по мере их появления в тексте.

В статьях значительного объема рекомендуется использовать подзаголовки (2 уровня).

3. Заключительная часть статьи (заключение) должна содержать выводы, обсуждение полученных результатов и, если возможно, пример, иллюстрирующий их эффективность, способы применения и практическую направленность.

4. Основной текст сопровождается рисунками (с подрисуночными подписями), формулами и таблицами, списком литературы.

Редакция не принимает к публикации заметки, тезисы и доклады от первого лица.

Материалы статьи формируются в текстовом редакторе MS Word (версий 6.0 и более поздних) и предоставляются в стандартном формате DOC или кросс-формате RTF. Формат листа А4, размеры полей: левого, правого, верхнего, нижнего — по 2 см. Шрифт Times New Roman размером 14 pt. Межстрочный интервал — полторный (1,5). Нумерация страниц обязательна.

К статье прилагаются:

- заглавие на русском и английском языках;
- аннотация объемом 300–500 знаков на русском и английском языках;
- сведения об авторах на русском и английском языках: ФИО, должность, наименование организации, почтовый адрес (включая индекс).

Таблицы

Названия строк и столбцов таблицы и ее заголовок должны быть краткими, но без сокращений. Таблицы анонсируются автором по тексту статьи.

Все данные, представленные в таблице, набираются в формате: одно значение — одна ячейка, одна строка (количество ячеек равно количеству столбцов).

Пример оформления таблицы:

Таблица 1

Бесплатные аналоги наиболее популярных приложений

№	Назначение	Платные программы	Бесплатные аналоги
1			
2			
3			

Формулы

Создаются средствами встроенного в MS Word (до версии 2007) формульного редактора Equation или внешнего MathType с использованием стандартных настроек.

Формулы, набранные **во встроенном редакторе MS Word 2007**, в работу **не принимаются**.

Пример 1. Сложная, но правильно записанная формула с помощью Equation:

$$D_{B_{x \in G_p}} = D_q \delta T_x \left[\sum_{i=1}^N (k_{xi} H_i) + H_{xM} \right]. \quad (1)$$

Номера формул указываются справа в круглых скобках.

Недопустимо в отдельной строке создавать формулы или их части другими редакторами или с помощью печатных символов.

Не допускается создание формульных выражений с помощью составных символов в строке (или строках) или при помощи векторных редакторов.

Пример 2. Некорректная запись формульного выражения:

$$N = \sum_{i=1}^m \frac{k_i}{d_i}. \quad (1)$$

Пример 3. Корректная запись этого же формульного выражения:

$$N = \sum_{i=1}^m \frac{k_i}{d_i}. \quad (1)$$

Допускается набор специальных знаков и символов греческого алфавита при помощи системного символьного шрифта Symbol.

Стиль формул и переменных в тексте:

- цифры и греческие буквы, скобки в формулах, стандартные обозначения типов: sin, cos, log, e (основание натурального логарифма) пишутся прямо;
- латинские буквы (английский алфавит) набираются светлым курсивом;
- греческие буквы в формулах — прямым начертанием.

Рисунки

Графики и диаграммы предоставляются в файлах Excel.

Векторные изображения. В том числе для создания *векторных иллюстраций* (блок-схем, графиков, рисунков) — рекомендуется использовать пакеты Adobe Illustrator (до версии CS5), Corel Draw (до версии X5). Допускается также выполнение схем средствами редакторов MS Word или Visio.

Если иллюстрации представлены в стандартном графическом редакторе MS Word, они должны быть сгруппированы; если в форма-

те внешнего редактора — каждую векторную иллюстрацию нужно сохранить в отдельном файле и предоставить в исходном формате того графического средства, в котором иллюстрация была изначально выполнена. В названии файла следует отразить имя автора и порядковый номер рисунка (например, **Петров_Рис_1**).

Экранные формы, отсканированные изображения и снимки с цифровых фотоаппаратов прилагаются к тексту статьи как растровые jpg-файлы с разрешением не ниже 300 dpi.

Иллюстрации, заимствованные автором из других источников, должны иметь соответствующие ссылки.

Список литературы

Оформляется по принятому в журнале стандарту. Работы в библиографическом списке нумеруются по алфавиту, причем сначала перечисляются российские источники, а затем — иностранные либо в порядке следования ссылок. Номера ссылок в тексте заключаются в квадратные скобки.

Примеры оформления списка литературы:

а) книга:

Гиленсон П. Г. Справочник технического редактора. М.: Книга, 1972;

б) книга коллектива авторов:

Емельянов А. А., Власова Е. А., Дума Р. В. Имитационное моделирование экономических процессов / Под ред. А. А. Емельянова. М.: Финансы и статистика, 2004;

в) статья в книге типа «сборник трудов» или «сборник статей»:

Иванов А. А., Петров И. С. Электронная коммерция. В кн.: Современный бизнес. М.: МАКС Пресс, 2004;

г) статья в журнале:

Земляков С. Д., Рутковский В. Ю. Функциональная управляемость и настраиваемость систем координатно-параметрического управления // Автоматика и телемеханика. 1986. № 2;

д) доклад в сборнике трудов конференции:

Desai M., Ray A. A fault detection and isolation methodology // Proc. 20-th IEEE / Conf. On Decision and Control. San Diego, 1981.

Возможны также ссылки на электронные носители. Если материал представляет собой электронную публикацию (имеет заголовок и авторов), он помещается в составе списка литературы с указанием ссылки на сайт-источник. Если же в статье используются какие-либо данные, предоставляемые электронным ресурсом, то предпочтительнее оформить ссылку на этот ресурс в виде концевой сноски по тексту статьи.

Доработка статьи

При необходимости доработки дата готовности статьи в редакции меняется, и, следовательно, отодвигается срок ее опубликования. Если автор согласен внести изменения в статью, то при представлении в редакцию нового варианта необходимо приложить и первоначальный вариант.

Принятие к публикации

В адрес автора направляется электронный экземпляр рукописи статьи с замечаниями научного редактора. Исправленный автором вариант возвращается на e-mail редакции и считается окончательным с содержательной точки зрения.

В случае значительных изменений автором отредактированного текста статья будет снята с рассмотрения на предмет ближайшей публикации и перенесена на последующую.

Замечания рецензентов

В случае отрицательной рецензии на рукопись статьи редколлегия вправе отказать автору в опубликовании этой статьи, а также имеет право оставить у себя электронный экземпляр рукописи (или один экземпляр статьи в бумажном варианте).

Уважаемые авторы!

Коллектив редакции надеется на вашу аккуратность в выполнении изложенных требований.

При возникновении вопросов или сомнений просим оперативно связаться с редакцией (в противном случае возможны потери времени на переделку, переписывание или перерисовку материалов статьи).

E-mail: evlasova@s-university.ru.

Телефон: (495) 663-93-88 доб. 1839.

Подписка-2014

Журнал «Прикладная информатика» выходит 6 раз в год:
Февраль Апрель Июнь Август Октябрь Декабрь

Подписка через редакцию

Стоимость подписки на 2014 год:

1 номер	3 номера	6 номеров
1080 руб.	3240 руб.	6480 руб.

Подписку можно оформить с любого месяца.

Тел./факс: (495) 663-93-88 (доб. 1839)

Руководитель службы маркетинга: *Я. И. Орлов*

E-mail: yorlov@s-university.ru

Подписка на почте

По каталогу агентства «Роспечать» индекс 20497

По объединенному каталогу «Пресса России» индекс 88059

По каталогу российской прессы «Почта России» индекс 14241

Доставка осуществляется заказной бандеролью с уведомлением.

Электронный выпуск, а также отдельные статьи журнала можно приобрести на сайтах www.appliedinformatics.ru, www.elibrary.ru и www.dilib.ru.

К оплате принимаются все виды электронных платежей, банковские карты.

Возможна также оплата с помощью SMS.

Учредитель и издатель НОУ ВПО «МФПУ «Синергия»

Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-56775 от 29.01.2014 г.

Выдано Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций (Роскомнадзор)

Литературный редактор *О. А. Михайлова*

Верстка, дизайн макета *Б. В. Зилунов*

Адрес редакции и издателя

129090, Москва, ул. Мещанская, д. 9/14, стр.1 (юрид.)
125190, Москва, Ленинградский просп., д. 80, корп. Г, офис 612(4)

Тел.: (495) 663-93-88 (доб. 1839)

e-mail: edit@s-university.ru; www.appliedinformatics.ru

Наши реквизиты

НОУ ВПО «МФПУ «Синергия»

ИНН 7729152149

КПП 770201001

ОГРН 1037700232558

Р/с 40703810338180120073

Сбербанк России (ОАО) Вернадское ОСБ

к/с 30101810400000000225

БИК 044525225

При перепечатке и цитировании материалов ссылка на журнал «Прикладная информатика» обязательна.
Редакция не несет ответственности за достоверность информации, опубликованной в рекламных объявлениях.
Мнения авторов и редакции могут не совпадать.

© НОУ ВПО «МФПУ «Синергия»

Подписано в печать: 17.04.2014

Тираж 3000 экз.

Отпечатано в ООО «Галлея-Принт»
111024, Москва, ул. 5-я Кабельная, д. 2Б
Заказ № 363