

КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ СТРУКТУРЫ, ТОПОЛОГИЯ И ЭКСПЕРТНЫЕ СИСТЕМЫ

А. П. Шевченко, Д. Е. Яблоков и В. А. Блатов

Самарский государственный университет

Экспертные системы (ЭС) – это наиболее типичная реализация искусственного интеллекта. Их используют в различных областях науки и техники [1]. Так, банки применяют системы искусственного интеллекта при принятии решения о выдаче кредита. Страховой бизнес оценивает с их помощью риски и вероятности реализации определенных страховых случаев. На биржах ЭС прогнозируют динамику цен на различные финансовых активов и даже торгуют самостоятельно. Специализированные экспертные системы активно используют при распознавании текста и речи, в медицинской диагностике, а также в системах ПВО.

Широко используются экспертные системы в различных областях химии, таких как аналитическая химия, минералогия, химическая кинетика [2,3]. Совершенно иная ситуация в кристаллографии и кристаллохимии. Здесь накоплен огромный экспериментальный материал о строении кристаллических веществ, но, до сих пор, не существует более или менее полноценной машины вывода для прогнозирования возможности и способов получения новых кристаллических материалов [4-6]. В то же время, давно уже разработаны мощные квантовые пакеты компьютерных программ [7,8], обеспечивающих расчет из первых принципов многих свойств кристаллического состояния. Результаты таких расчетов весьма востребованы при дизайне новых кристаллов и могут быть применены для построения кристаллохимической экспертной системы.

Резкий рост объема кристаллоструктурной информации на настоящее время достиг такого уровня, при котором его систематизация и использование стали высоко значимы, а экспертные системы могут стать важным инструментом для решения этих задач. Стоит отметить и то, что накопленные в области кристаллографии экспериментальные данные содержать неизвестные науке общие законы или конкретные закономерности, которые могли бы быть полезны при дизайне новых кристаллических структур.

Когда человека-эксперта спросят, кристаллы какого состава и строения могут быть получены из данного набора комплексообразующих атомов металла и лигандов, или, какую упаковку в кристалле образуют молекулы данного вида, он сначала выяснит детали, потом использует имеющиеся у него знания и опыт, а также обратится к разнообразной справочной литературе. Только после все этого эксперт даст рекомендации, которые в большинстве случаев не будут строгими, а будут содержать такие фразы, как «я полагаю ...», «скорее всего ...» и т.п.

В 2000-х годах, были изобретены дескрипторы [9-12], характеризующие общую топологию сеток, что сразу же привело к серии обзоров, посвященных классификации координационных сеток [13], упаковок молекул [14] и ионных решеток [15]. Важно отметить, что созданные новые дескрипторы сложно рассчитываются, и поэтому они более приспособлены лишь для компьютерной обработки. Например, такие характеристики топологии сетки как ключ Systre [9] или вершинный символ [16] практически невозможно рассчитывать вручную для любой достаточно сложной структуры.

Основными дескрипторами кристаллической структуры являются топологический тип сетки, координационные последовательности ее атомов, способ координации лигандов, молекулярный тип связывания, координация формула, молекулярное и атомное координационное число, координационная фигура, химический состав сетки или отдельных структурных единиц. Изобретение новых локальных и общих топологических

дескрипторов [9-12] является ключевой проблемой для рассматриваемой задачи. Любой новый достоверный дескриптор позволяет найти ранее неизвестные отношения и закономерности в структуре кристаллических материалов.

Чтобы создать экспертную систему, необходимо сначала накопить знания для нее. С этой целью, мы разрабатываем базы данных образцов топологических типов кристаллических структур и их фрагментов (топологические типы кристаллов или ТТС). На настоящий момент эта база данных для каждого топологического типа или типа молекулярного фрагмента содержит параметры, необходимые для их идентификации, а также наборы референтных кодов кристаллических структур, в которых реализуются данные типы. Нами по данным о строении более 900 тыс. кристаллических веществ в формате PostgreSQL была создана база знаний, содержащая следующую информацию (в скобках указано сокращенное наименование коллекции):

- Коллекция топологических типов кристаллов (TTD);
- Встречаемость топологических типов в структуре кристаллов (ТТО);
- Типы молекул и их встречаемость в структуре кристаллов (ТТМ);
- Типы лигандов и их встречаемость в структуре кристаллов (ТТЛ);
- Типы кластерных фрагментов и их встречаемость в структуре кристаллов (ТТН).

Сейчас мы начинаем использовать эти коллекции для решения прикладных задач кристаллохимии. Так на основании ТТД-коллекции недавно был создан и внедрен сервис определения топологии структуры кристалла. В ближайшее время планируется запустить сервис поиска набора идентификационных кодов кристаллических структур с заданным пользователем топологическим типом.

Наши дальнейшие планы

1. Использование ТТО, ТТЛ, ТТМ, ТТН коллекции для дизайна 1-, 2- и 3- периодических координационных полимеров.
2. Создание базы данных структурных топологических образцов и клиентского приложения для работы с этой базой данных.
3. Поиск набора идентификационных кодов кристаллических структур, которые содержат заданные пользователем невалентно взаимодействующие атомные группировки.
4. Создание базы знаний о характеристиках полиэдров Вороного атомов металла в структуре координационных соединений и полимеров.
5. Реализация машинного поиска в базе знаний корреляций и сохранение их в базе правил. Использование базы правил для дизайна новых кристаллических структур.

Литература

1. P. Jackson, Introduction to Expert Systems, 3rd ed., Addison-Wesley, 1999;
2. M. C. Hemmer. Expert Systems in Chemistry Research, CRC Press; Boca Raton, FL: 2008;
3. P. Judson, Knowledge-Based Expert Systems in Chemistry: Not Counting on Computers, RSC Publishing, Cambridge, UK, 2009.
4. F. H. Allen, Acta Crystallogr., 2002, B58, 380;
5. S.P. Ong, S. Cholia, A. Jain, M. Brafman, D. Gunter, G. Ceder and K.A. Persson, Comp. Mat. Sci., 2015, 97, 209;
6. O. Isayev, D. Fourches, E. N. Muratov, C. Oses, K. Rasch, A. Tropsha and S. Curtarolo, Chem. Mater., 2015, DOI: 10.1021/cm503507h.
7. A. R. Oganov and C. W. Glass, J. Chem. Phys., 2006, 124, 244704;
8. Q. Zhu, V. Sharma, A. R. Oganov and R. Ramprasad, J. Chem. Phys. 2014, 141, 154102;
9. O. Delgado-Friedrichs and M. O'Keeffe, Acta Cryst., 2003, A59, 351;
10. V. A. Blatov, L. Carlucci, G. Ciani and D. M. Proserpio, CrystEngComm, 2004, 6, 377;
11. M. O'Keeffe, M. A. Peskov, S. J. Ramsden and O. M. Yaghi, Acc. Chem. Res., 2008, 41, 1782;
12. E. V. Alexandrov, V. A. Blatov and D. M. Proserpio, Acta Crystallogr., 2012, A68, 484.
13. N. W. Ockwig, O. Delgado-Friedrichs, M. O'Keeffe and O. M. Yaghi, Acc. Chem. Res., 2005, 38, 176.
14. I. A. Baburin and V. A. Blatov, Acta Cryst., 2007, B63, 791.
15. V. A. Blatov, Struct. Bond., 2011, 138, 31.
16. V. A. Blatov, D. M. Proserpio and M. O'Keeffe, CrystEngComm, 2010, 12, 44.