СОРТИРОВКА ВЕЩЕСТВ ПО ПРИЗНАКАМ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПРИ ПОСТРОЕНИИ ПРОФИЛИРОВАННОЙ БАЗЫ ДАННЫХ

Александрина А.Ю., Дербишер Е.В.,
Радченко А.В., Дербишер В.Е., Веденина Н.В.
Волгоградский государственный технический университет
Волгоград, Россия

В процессе решения современных задач прогнозирования свойств малоизученных веществ с применением профилированных баз знаний, в нашей работе возникла необходимость сортировки кластеризации известных химических соединений в рамках количественной оценки зависимости «структура - свойство». Для этого нами использовался алгоритм «голосования» [1], адаптированный применительно к анализу технологической активности ингредиентов полимерных композиций (ПК) следующим образом.

Каждому веществу (соединению) информация о котором вносится в базу данных (БД) сопоставлялся вектор Y_i , компоненты которого являются числовыми измерениями (значениями) физико-химических, технологических, экологических, экономических показателей эффективности использования химического соединения (вещества) в качестве добавки в ПК, выполняющий соответствующую техническую функцию. В случае отсутствия количественных данных по i- му параметру ($i = 1\mathbf{K}$ p, p-число показателей эффективности) $y_j^i = 0$. Далее определялось количество показателей эффективности добавки, характеризующих ее как высокоактивное / умеренноактивное / неактивное (по принадлежности к соответствующему интервалу значений как это показано табл. 1 вещество.

Ранг активности определялся по большинству «голосов», при этом равное количество «голосов» трактовалось в пользу группы большей активности (табл. 2). Фрагмент алгоритма реализующий методику сортировки информации о веществах в профилированной БД приведен на рис. 1. Примеры реализации указанного подхода даны в отношении термостабилизаторов полипропилена.
Данная методика использовалась при построении БД функциональных добавок к ПП

Таблица 1. Соответствие интервалов значений выборочных показателей эффективности ТС группам активности

Показатель эффективности добавки	Группа активности		
	Высокоактивные	Умеренноактивные	Неактивные
Содержание, %	Менее 1,0	1,0÷5,0	Более 5,0
Индукционный период термоокислительного распада композиции при ≈ 200˚С, мин	Более 350	100÷350	Менее 100

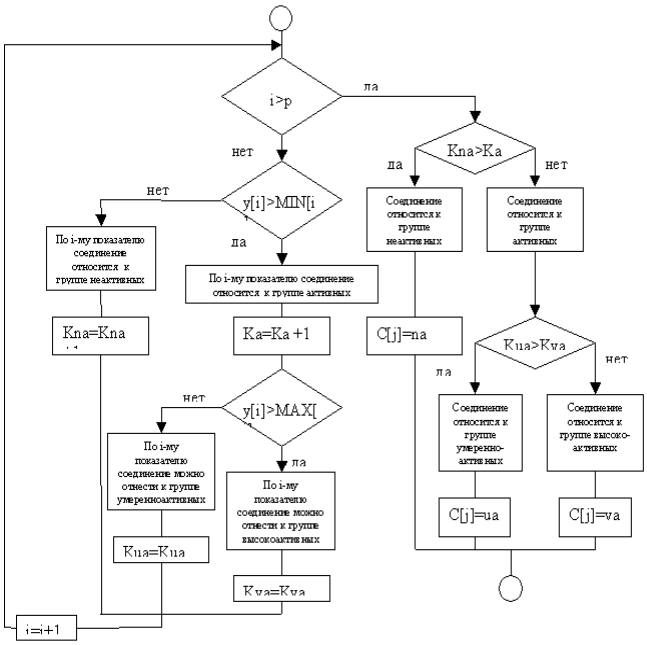

Рис.1. Алгоритм определения группы активности j-го соединения

Таблица 2. Группы активности выборки термостабилизаторов

№	Соединение	Оценка эффективности		
		Показатели эффективности		Ранг активности
		Содержание в ПП, %	Индукционный период термоокислительного распада композиции при 200˚С, мин	
1	N,N'-Ди - β- нафтил –n-фенилендиамин	0,2- 0,5	200- 400	Высокоактивные
2	Бис-(2-окси-5-метил-3-*трет*-бутилфенил)-сульфид	0,1- 1,0	200-230	Умеренноактивные
3	Бис-[(2-окси-5-метил-3-α-метилбензил)-фенил]-сульфид	0,1- 0,5	300-360	Умеренноактивные