

УДК 549.07+550.89+666.041+666.232

МИНЕРАЛОГИЯ

Р. М. КОНСТАНТИНОВ, Ю. А. БЕЛЯКОВА, С. В. СИРОТИНСКАЯ,  
Л. Н. ХЕТЧИКОВ

## ЛОГИЧЕСКОЕ ПЛАНИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ПО ВЫРАЩИВАНИЮ ОКРАШЕННОГО КВАРЦА

(Представлено академиком Д. С. Коржинским 19 IX 1973)

В кристаллах синтетического кварца, выращенных в гидротермальных условиях методом температурного перепада, была обнаружена так называемая неструктурная примесь (<sup>1</sup>). При введении в рабочую среду специальных примесей-хромофоров формируются разновидности окрашенных кристаллов кварца. Выращивание кристаллов, окрашенных в синий цвет, происходит в присутствии иона  $Co^{2+}$  (<sup>2</sup>), различные оттенки бурого кварца обязаны иону  $Fe^{3+}$ , а зеленого иону  $Fe^{2+}$  (<sup>3</sup>). Интенсивность окраски зависит от количества поглощенной примеси.

Факторы, определяющие результаты синтеза окрашенного кварца, многочисленны и не всегда имеют количественные (цифровые) характеристики. Управление процессами с целью получения определенного, заранее обусловленного качества оказалось задачей, которая не всегда может быть решена при помощи применяемых в химической технологии методов математической статистики (<sup>4</sup>).

Поэтому была сделана попытка планирования результатов экспериментов по окрашиванию искусственного кварца при помощи эвристических методов, используемых для геологических прогнозов и основанных на некоторых средствах математической логики и комбинаторики. Они включают составление по результатам экспериментов вариационного ряда с последующей обработкой информации при помощи смещенного треугольника Паскаля и тестов (<sup>5, 6</sup>).

Задача была сведена к определению степени воздействия различных параметров на окраску кварца путем вычисления их информационных весов. Правильное определение их влияния на окраску по условиям метода должно было позволить по суммам информационных весов параметров находить оптимальный режим синтеза. Величина информационного веса дает возможность определить необходимость изменения соответствующего параметра для достижения требуемых результатов.

При таком подходе результаты экспериментов представляются в виде таблицы, где по вертикали они располагаются в вариационный ряд, т. е. в порядке возрастания варьирующего признака, являющегося объектом исследований (<sup>7</sup>). В рассматриваемом конкретном случае ряд строился в соответствии с изменением окраски кварца. По горизонтали отображаются параметры проведения отдельных опытов (см. табл. 1).

Обработка таблицы сводится к выполнению следующих процедур:

1. Основная таблица (табл. 1) делится на несколько классов, каждый из которых охватывает условия получения кварца с близкими окрасками. Составляются подтаблицы, содержащие по одному объекту каждого класса. Для каждого параметра в подтаблице вычисляется его вес при помощи эвристической процедуры, заключающейся в применении смещенного треугольника Паскаля (<sup>8</sup>). Смещенный треугольник Паскаля состоит из строк, где в строке  $m$  стоят коэффициенты разложения бинома  $(1+x)^{m-1}$ . Кроме

того, в этом треугольнике отсутствуют коэффициенты при нулевой степени  $x$  (см. табл. 2).

При определении веса рассматриваются последовательно столбцы подтаблицы. Порядковому номеру каждой единицы столбца ставится в соот-

Таблица 1

Таблица результатов подсчета информационных весов параметров синтеза окрашенного кварца

№№ п.п.	Интенсивности окраски в эталонных опытах	Концентрации раствора		Температуры кристаллизации		Перепады температур		Скорости роста			Суммы весов по строкам	
		$C_1$	$C_2$	$T_1 - T_2$	$T_2 - T_3$	$\Delta T_1 - \Delta T_2$	$\Delta T_2 - \Delta T_3$	$V_1 - V_2$	$V_2 - V_3$	$V_3 - V_4$		
1	Темно-коричневые		1	1			1				1	0,25
2	»		1	1			1				1	0,25
3	»		1	1			1				1	0,25
4	Коричневые		1	1		1					1	1,25
5	»		1		1	1					1	1,25
6	»		1		1	1				1		1,75
7	Светло-коричневые	1				1				1		2,25
8	»	1				1		1				2,75
9	»	1				1		1				2,75
Вес по смещенному треугольнику Паскаля												
1		6	0	0	6	6	0	4	0	0		
0		0	6	6	0	0	6	0	0	6		
Вес по тупиковым тестам с учетом весов по треугольнику Паскаля												
1		0,25	0	0,250	0,250	0,500	0	0,500	0	0		
0		0	0,250	0	0	0	0,500	0	0	0,500		

Таблица 2

Принципиальная схема подсчета весов признаков по смещенному треугольнику Паскаля

Смещенный треугольник Паскаля				Признаки			
0	0	0	0	1	0	1	0
0	0	0	1	1	0	0	1
0	0	1	2	1	1	1	0
0	1	3	3	0	1	0	1
1	4	6	4	0	1	1	0
Вес по треугольнику							
Вес 1				0	9	5	4
Вес 0				9	0	4	5

ветствие столбец треугольника с таким же порядковым номером, месту же, занимаемому единицей, в столбце ставится в соответствие строка треугольника с номером, соответствующим месту единицы. За вес единицы принимается число, стоящее на пересечении соответствующих строки и столбца треугольника. Такие веса подсчитываются и суммируются в каждом столбце таблицы отдельно для единиц и для нулей. Затем сопоставляются веса одноименных признаков в разных подтаблицах и отмечаются такие при-

знаки, называемые значимыми, для которых сохраняются близкие отношения весов единиц и нулей во всех подтаблицах. На следующем этапе исходная основная таблица (табл. 1) переписывается в новую таблицу (табл. 2), и в ней оставляются только значимые признаки. Для этих признаков уже в масштабах всей таблицы указанным выше способом находят веса по смещенному треугольнику Паскаля (табл. 2).

2. Последующая процедура сводится к подсчету информационных весов значимых признаков при помощи нахождения тупиковых тестов, предложенных ранее для логического контроля электрических схем<sup>(9)</sup>.

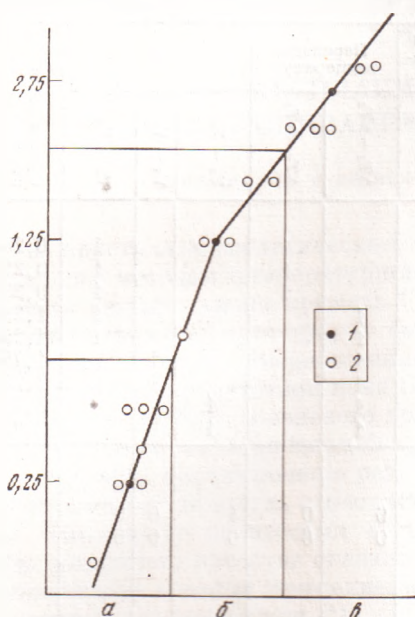


Рис. 1. Суммы информационных весов параметров эталонных (1) и контрольных (2) опытов получения окрашенного кварца (в контрольных опытах полученные окраски соответствуют заданным параметрам). а — темноокрашенные, б — коричневые, в — светло-коричневые

Тупиковые тесты представляют собой такие наборы столбцов основной таблицы, в которых все строки различны и из которых нельзя удалить ни одного столбца, чтобы не вызвать появления одинаковых строк, т. е. они представляют собой как бы минимальные блоки информации, различающие строки основной таблицы. Информационный вес каждого признака равен отношению количества тупиковых тестов, в которые входит столбец, характеризующий признак, к тупиковым тестам всей таблицы.

Применение охарактеризованной процедуры предварительного отбора позволяет свести к минимуму количество информативных признаков, что иногда дает возможность подсчитать количество тупиковых тестов вручную. Обычно же информационные веса могут быть вычислены только на ЭВМ.

Полученные при помощи тупиковых тестов информационные веса делятся для каждого столбца пропорционально весам единиц и весам нулей столбцов таблицы (табл. 2).

Выполненные подсчеты дали информационные веса параметров, которые, как это было подтверждено многочисленными

опытами (рис. 1), позволили регулировать условия для синтеза кварца с любыми заранее обусловленными особенностями окраски.

Было выяснено количественное влияние каждого параметра синтеза на вхождение примесей-хромофоров в кристаллы. Это позволило прогнозировать эксперименты по выращиванию различных разновидностей окрашенного кварца. Например, при выращивании коричневых кристаллов наибольшее влияние на интенсивность окраски оказывают некоторые интервалы перепадов температур и определенные скорости роста; в меньшей степени воздействуют концентрации раствора и температуры кристаллизации (см. табл. 1).

Полученные результаты применены при определении интенсивности окраски кристаллов, выращиваемых в промышленных масштабах. Они позволяют по заранее подобраннным параметрам планировать выпуск определенного сорта сырья. Также и в тех случаях, когда требуемые параметры по тем или иным причинам не могут быть получены, как это иногда имеет место при выращивании кварца на крупногабаритном оборудовании (в результате специфики зарядки автоклавов), вероятная окраска кристаллов может быть определена заранее по имеющимся данным об информационных весах факторов, управляющих процессами синтеза.

Таким образом, логическая обработка информации об условиях синтеза окрашенного кварца при помощи охарактеризованной процедуры позволила решить одну из задач управления процессами перекристаллизации.

Институт геологии рудных месторождений,  
петрографии, минералогии и геохимии  
Академии наук СССР  
Москва

Поступило  
4 VII 1973

Всесоюзный научно-исследовательский институт  
синтеза минерального сырья  
г. Александров

#### ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- <sup>1</sup> В. Е. Хаджи, Тр. ВНИИ пьезоопт. мин. сырья, № 6, 31 (1962). <sup>2</sup> В. Е. Хаджи, В. Г. Лушников, Тр. Всесоюз. н.-и. инст. пьезоопт. мин. сырья, № 5, 87 (1961).  
<sup>3</sup> Л. И. Цинобер, Л. Г. Ченцова, А. А. Штернберг, Сборн. Рост кристаллов, т. 2, Изд. АН СССР, 1960, стр. 61. <sup>4</sup> В. В. Кафаров, В. Н. Ветохин, А. И. Бояринов, Программирование и вычислительные методы в химии и химической технологии, «Наука», 1972. <sup>5</sup> С. В. Сирогинская, Сборн. Основы научного прогноза месторождений рудных и нерудных полезных ископаемых, Л., 1971. <sup>6</sup> Р. М. Константинов, С. В. Сирогинская, Сборн. Эндогенные рудные месторождения, «Наука», 1973. <sup>7</sup> Р. М. Константинов, С. В. Сирогинская, Автореф. ИГЕМ, 1972. <sup>8</sup> В. Ф. Бабкин, Проблемы передачи информации, т. 7, в. 4 (1971). <sup>9</sup> С. В. Яблонский, Н. Г. Демидова и др., Геол. рудн. месторожд., № 2, 13 (1971).