中国有色金属学报
中国有色金属学报(英文版)
中国科学技术协会 主管
中国有色金属学会 主办

论文摘要

中国有色金属学报
ZHONGGUO YOUSEJINSHUXUEBAO XUEBAO
第8卷 第4期 (总第29期) 1998年12月

[PDF全文下载] [全文在线阅读]

文章编号：(1998)04-678-3

# Me-Me'-X系三元化合物形成规律的人工神经网络

李重河 荔建锋 王世华* 陈念贻

(中国科学院上海冶金研究所， 上海 200050;
*北京师范大学， 北京 100081)

摘 要： 用$r_{Me}$，$r_{Me'}$，$r_X$，$x_{Me}$和$x_{Me'}$等原子参数作为人工神经网络的输入， 203个可信的Me-Me'-X体系的三元化合物的形成情况作为输出，研究了Me-Me'-X系三元化合物的形成规律，这里r是离子半径，x是电负性， Me代表一价金属， Me'代表二价金属，X代表卤族元素。利用所得规律预报了M-Eu-I（M=Li，Na， K， Rb和Cs）系三元碘化物的形成情况， 应用差热分析和粉末X射线法测定了它们的相图，预报结果和实验测定结果的对比是令人满意的。

关键字： 三元化合物 相图 计算机预报 人工神经网络

# ARTIFICIAL NEURAL NETWORK APPLIED TO REGULARITY OF FORMATION OF TERNARY COMPOUNDS IN Me-Me'-X SYSTEMS

**Li Chonghe, Li Jianfeng, Wang Shihua* and Chen Nianyi**

（Shanghai Institute of Metallurgy, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200050, P. R. China;
* Beijing Normal University, Beijing 100081, P. R. China）

**Abstract:** Using the atomic parameters of $r_{Me}$, $r_{Me'}$, $r_X$, $x_{Me}$ and $x_{Me}$ as the inputs, the regularity of formation of ternary complex halides of MeMe'-X halides systems has been investigated by artificial neural networks（ANNs）. Where, r is the radius of the ion, x is the electronegativity of element, Me is the mono-valent metal, Me' is di-valent metal, X represents the F, Cl, Br or I. The regularity was found by training the ANNs with 203 known samples (such as Ag-Ca-Cl system and K-Mg-Cl system etc.). The formation of ternary complex iodides in M-Eu-I systems (where M represents Li, Na, K, Rb or Cs) was predicted by this trained ANNs. The predicted results are completely in agreement with the experimental facts.

**Key words:** ternary compound phase diagram computer prediction artificial neural network

地 址：湖南省长沙市岳麓山中南大学内 邮编： 410083

电 话： 0731-88876765，88877197, 88830410 传真： 0731-88877197

电子邮箱： f-ysxb@mail.csu.edu.cn