

ПРАКТИКА ПРИМЕНЕНИЯ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ РАСЧЁТА РАВНОВЕСНЫХ СВОЙСТВ ДВУХ И БОЛЕЕ КОМПОНЕНТНЫХ СМЕСЕЙ

Васильев А.С., Гартман Т.Н.

*Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,
125047 Москва Миусская площадь 9,
e-mail: alexandr.s.vasilyev@gmail.com*

С использованием результатов экспериментальных исследований¹ фазового равновесия двухкомпонентных смесей, состоящих из органических веществ и воды, а также критических свойств индивидуальных компонентов², были разработаны модели искусственных нейронных сетей для предсказания равновесных свойств двух и более компонентных смесей. Для обучения использовался набор из 87169 равновесных точек для 2859 двухкомпонентных смесей, состоящих из 397 различных индивидуальных компонентов. Для построения моделей использовалась библиотека Keras³ которая предоставляет высокоуровневый интерфейс взаимодействия с низкоуровневой библиотекой для машинного обучения TensorFlow⁴.

Адекватность разработанных моделей проверялась на части экспериментальных данных для двух и более компонентных смесей которая не участвовала в процессе обучения. Так же было проведено сравнение предсказательной способности классических уравнений состояния таких как SRK и PR с разработанными моделями.

Полученные нейронные сети могут использоваться для предсказания равновесных свойств, таких как мольные доли компонентов в жидкой и паровой (газовой) фазах, температуры и давления в широком интервале значений (от 40 до 600 К и от 3e-5 до 65 бар) двух компонентных смесей. Также модели применимы для получения псевдо-экспериментальных данных с их последующим использованием при моделировании процессов абсорбции, дистилляции и ректификации совместно с классическими уравнениями состояния.

Литература

1. Kehiaian H.V. Binary Liquid Systems of Nonelectrolytes. Part 1. Landolt Börnstein. 2007.
2. Yaws CL, Gabbula C. Yaws' Handbook of Thermodynamic and Physical Properties of Chemical Compounds. Knovel; 2003.
3. Chollet, François. Keras. 2015.
4. Abadi M, Agarwal A, Barham P, Brevdo E, Chen Z, Citro C, Corrado GS, Davis A, Dean J, Devin M, Ghemawat S. TensorFlow: Large-scale machine learning on heterogeneous systems, 2015. Software available from tensorflow.org. 2015;1(2).