

ПРИМЕНЕНИЕ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ В ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

На сегодняшний день наблюдается стремительное развитие нейронных сетей. Под нейронными сетями понимаются алгоритмы и системы, способные извлекать закономерности из больших объёмов данных, адаптироваться к новым условиям и принимать обоснованные решения. Эти технологии находят применение в различных научных областях, способствуя повышению точности расчётов и оптимизации сложных процессов.

В химической технологии, где важно точно предсказывать ход реакций, рассчитывать свойства материалов и находить оптимальные условия для синтеза, применение нейронных сетей становится особенно полезным. Они помогают быстрее обрабатывать большие объёмы данных, что позволяет сэкономить время и средства по сравнению с традиционными подходами.

Цель нашей работы – сравнить сервисы на базе нейронных сетей и оценить их потенциал использования в химической технологии, а также продемонстрировать эффективность их применения для математического моделирования и оптимизации параметров работы химических реакторов.

Были рассмотрены три сервиса на базе нейронных сетей: DeepSeek, Julius и StudyMonkey. Сервис Julius обрабатывает запросы на русском языке и использует алгоритмы машинного обучения для решения широкого круга задач — от выполнения стехиометрических расчётов и прогноза продуктов химических реакций до определения типов химических связей и решения задач электрохимии. В ходе тестирования StudyMonkey показал наименьшую эффективность среди рассмотренных платформ, что связано с ограниченным функционалом и ошибками в расчётах. Наиболее перспективным в области химических технологий оказался DeepSeek.

С помощью сервиса DeepSeek было разработано приложение, которое моделирует кинетику реального реактора. Данные модели сохраняются в отдельный файл формата CSV. Далее было создано приложение, оптимизирующее параметры реального реактора на основе полученных данных из файла. Разбегка между подобранными параметрами и параметрами модели на основе десяти запусков приложений составила менее 2%.