

## СЕКЦІЯ 11. РІШЕННЯ ПОЛІВАРІАНТНИХ ЗАДАЧ У ХІМІЧНІЙ ТЕХНОЛОГІЇ

### ОПТИМІЗАЦІЯ СКЛАДУ КАТАЛІЗАТОРА $MnCeO_x$ З ВИКОРИСТАННЯМ ШТУЧНИХ НЕЙРОННИХ МЕРЕЖ

Альамі Д.А.М., Булавін В.І.

*Національний технічний університет*

*«Харківський політехнічний інститут», м. Харків*

Каталітичне мокре окиснення є одним з найперспективніших методів знешкодження стічних вод, що містять формальдегід. Змішані оксиди марганцю і церію загальної формули  $MnCeO_x$  виявляють високу каталітичну активність і стабільність у реакції мокрої каталітичної окиснення формальдегіду. У цій роботі методами комп'ютерного експерименту було підбрано склад каталізатора, що забезпечує найбільшу ступінь перетворення формальдегіду. З врахуванням кореляційної залежності каталітичної активності змішаних оксидів від міцності зв'язку кисню в кристалічній решітці, було обрано дескриптори каталізатора. Набір дескрипторів включав ентальпію утворення змішаних оксидів, зведену до 1 моль кисню, відновлюваність оксидів, мольну частку марганцю та площу поверхні БЕТ. Залежною змінною (вихідним параметром) обрано величину відносного зменшення загального органічного карбону в розчині, отриману з літературних експериментальних даних.

Після збору та нормалізації даних для навчання штучної нейронної мережі було розв'язане завдання вибору алгоритму навчання і оптимальної архітектури останньої. Для оптимізації вагових коефіцієнтів штучної нейронної мережі обрали генетичний алгоритм. Для оптимізації складу каталізатора використовували багатошаровий персептрон, що складався з 5 нейронів у вхідному шарі, двох прихованих шарів та одного нейрона в вихідному шарі (5–9–6–1). На входи навченої нейронної мережі подавалися значення каталітичних дескрипторів і часу реакції, за якими отримували ступінь перетворення формальдегіду.

Було встановлено, що за даних умов реакції оптимальному відповідає склад каталізатора  $\frac{n(Mn)}{n(Mn)+n(Ce)} = 0.73 \div 0.77$ . Цей результат є добре узгодженим з літературними даними.