

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ИСКУССТВЕННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ДЛЯ РАЗРАБОТКИ КАТАЛИЗАТОРОВ

**Введение.** Катализ играет важную роль практически во всех отраслях промышленности. Часто это ключ к созданию совершенно новой технологии или же повышение эффективности уже разработанных технологий. Поскольку большая часть всех промышленных процессов имеют каталитическую природу, введение инноваций в области катализа является важным для увеличения рентабельности производства в целом [1]. В настоящее время существуют методы автоматизированного высокопроизводительного эксперимента, которые дают возможность синтезировать сотни катализаторов в день. Это приводит к огромному количеству экспериментальных результатов [2], также как и при использовании литературных данных и методов планирования эксперимента [3].

Таким образом, необходимы методы для ускорения подбора и оптимизации каталитических систем и процессов, связанные с компьютерными вычислениями. Эти вычисления основаны на методах теоретической химии (квантовая химия, молекулярная динамика, моделирование по методу Монте-Карло). Они позволяют «наблюдать» каталитические явления на поверхности катализатора или в пористых телах, и приводят ко всестороннему пониманию катализаторов и катализа в атомном масштабе. Другая группа компьютерных методов – применение информатики к разработке катализаторов, которая выделяет использование ИНС и экспертно-системный подход. Последний требует больших экономических затрат и длительного времени для его создания. При использовании ИНС подобные затраты существенно уменьшаются [4].

**Общие аспекты применения ИНС к каталитическим системам.** Искусственная нейронная сеть представляет собой устройство параллельных вычислений, состоящее из множества простых процессоров (нейронов), которое моделирует простые биологические процессы, ассоциируемые с функционированием человеческого мозга. Каждый нейрон характеризуется своим текущим состоянием – он может быть возбужден или заторможен. Нейрон обладает группой синапсов – однонаправленных входных связей, соединенных с выходами других нейронов, а также имеет аксон – выходную связь данного нейрона, с которой сигнал (возбуждения или торможения) поступает на синапсы следующих нейронов [5]. Общий вид нейрона приведен на рисунке 1. Каждый синапс характеризуется величиной синаптической связи или ее весом  $w_i$ .

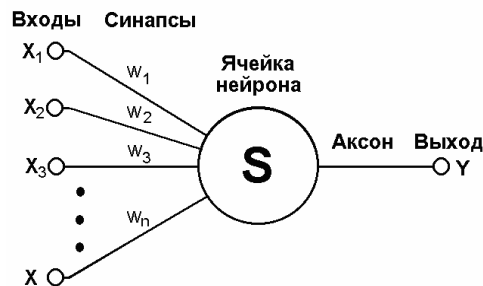


Рисунок 1 – Искусственный нейрон

Текущее состояние нейрона определяется, как взвешенная сумма его входов:

$$s = \sum_{i=1}^n x_i \cdot w_i . \quad (1)$$

Выход нейрона есть функция его состояния:

$$y = f(s), \quad (2)$$

где функция  $f(s)$  называется функцией активации и может иметь различный вид. Одной из наиболее широко применяемых является логистическая функция активации (сигмоида):

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-\alpha x}} . \quad (3)$$

ИНС – адаптируемые и обучаемые системы; это свойство используется, чтобы изучить зависимость между рядом факторов и результатами, даже если отношение между ними теоретически не определено и нелинейно [6].

Как известно, в катализе исследователей интересует зависимость выхода продуктов, активности катализатора, степени превращения реагентов и селективности от дескрипторов катализатора. Последние пропорциональны отдельным компонентам катализатора, но они могут включать в себя также различные физико-химические свойства катализатора и условия реакции. Для получения нейронной сети, которая вычисляет приближение этой функциональной зависимости, требуется два этапа [7]:

1. Выбор соответствующей архитектуры, что в случае многослойного персептрона значит выбрать соответствующее количество скрытых слоев плюс соответствующее количество нейронов в каждом из них.

2. Произвести процесс обучения сети посредством интерактивного процесса корректировки синаптических весов и порогов. Величина, на которую должен измениться синаптический вес в ходе обучения, вычисляется с помощью соответствующего набора правил, называемого алгоритмом обучения.

Одна из самых известных структур нейронных сетей для контролируемого обучения – многослойный персептрон [7], который используется для классификации и прогнозирования. В многослойном персептроне нейроны сгруппированы в слои, как показано на рис. 2.

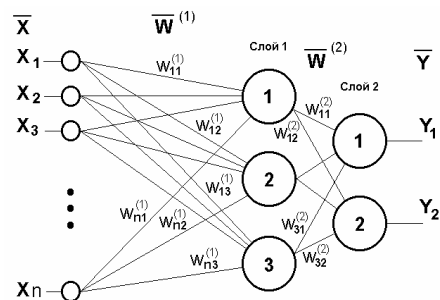


Рисунок 2 – Двухслойный персептрон

Не существует единого алгоритма обучения, подходящего для всех архитектур нейронных сетей [8]. Алгоритмы обучения отличаются друг от друга способом настройки синаптических весов нейронов. Для оценки качества обучения чаще всего используется среднеквадратичная ошибка, т.е. среднее квадратов расстояний между выходными значениями, которые сеть вычисляет для данной последовательности входных значений, и выходными значениями, которые были экспериментально определены для измеренных входных значений. После выбора соответствующего количества обучающих примеров и способа вычисления функции ошибки, обучение ИНС сводится (в общем случае) к задаче многоэкстремальной невыпуклой оптимизации [8].

Для решения этой задачи используют различные итерационные алгоритмы. В первые десятилетия после возникновения ИНС, применяли версию градиентного алгоритма, называемую алгоритмом обратного распространения. Этот алгоритм используется для обучения многослойных нейронных сетей с последовательными связями с целью минимизации среднеквадратичного отклонения текущего выхода от желаемого. В настоящее время с алгоритмом обратного распространения успешно конкурирует метод Левенберга-Марквардта [1], который сочетает методы градиентного спуска и квадратичной оптимизации Гаусса-Ньютона с оценкой вторых производных с помощью Якобиана. По сравнению с алгоритмом обратного распространения, метод Левенберга-Марквардта предъявляет более высокие требования к памяти ЭВМ и существенно сложнее в реализации. Однако его скорость сходимости увеличивается с линейной на квадратичную вблизи минимума, тогда как алгоритм обратного распространения сходится лишь линейно [1, 9].

После завершения обучения, ИНС способна обобщать результаты на новые наблюдения. Но наилучшая подгонка данных, используемых для обучения, не обязательно влечет за собой лучшее обобщение для неизвестной зависимости [9]. Оценка качества искомого приближения требует независимый набор тестовых данных, которые невидимы для сети во время обучения. Главной проблемой при этом явлении переобучения, то есть хорошая подгонка на обучающих данных сопровождается плохим соответствием для тестовой выборки. Для уменьшения этого явления был разработан наиболее эффективный метод ранней остановки или байесовской регуляризации [9]. Контроль процесса обучения производится в соответствии с механизмом кросс-проверки, при котором часть обучающих наблюдений резервируется и в обучении не используется. Вместо этого, по мере работы алгоритма, они используются для независимого контроля результата. По мере обучения ИНС ошибка убывает, в противном случае обучение останавливают [9].

Архитектура обученной нейронной сети и отображение, вычисленное сетью, представляют собой знания о закономерностях, которые содержались в используемых для обучения сети данных: о соотно-

шениях между входными и выходными переменными, например, между составом катализатора и выходом вещества. Однако, за исключением соотношений малой размерности, которые могут быть визуализированы, такое представление не легко понятно человеку, так как это очень далеко от символического и блочного способов человеческого перцептрона. Поэтому были разработаны различные методы извлечения знаний, пытаюсь превратить архитектуру сети и отображения вычислений в понятное для человека представление [3].

В катализе наиболее важной является следующая информация [3, 7]:

- об оптимумах аппроксимируемой зависимости, например, о составе катализатора, соответствующего максимальному выходу продукта в сети реакций.
- о логических правилах для зависимостей выходных переменных от входных переменных, т. е. последствия общего вида, если входные переменные выполняют некоторые особые входные условия, то выходные переменные могут подобно выполнять некоторые особые выходные условия.

Методы извлечения знаний из данных с помощью ИНС являются подклассом группы методов «data mining» – разведки данных с целью извлечения логических правил из них. К ним обычно относят следующие методы извлечения [3]:

- ассоциативных правил из эмпирических распределений;
- правил, основанных на проверке статистических гипотез;
- правил классификации из различных видов деревьев классификации.

Однако, в то время как остальные методы извлечения правил являются прямыми методами, т.е. они извлекают правила непосредственно из данных, все различные существующие методы, основанные на ИНС, извлекают их не прямо из данных, а из приближения, рассчитанного нейронной сетью, обученной на данных [9].

**Применение ИНС в комбинаторном катализе.** Комбинаторный катализ (КК) – это систематическое приготовление, обработка и тестирование большого разнообразия библиотек химически и физически различных материалов методами высокопроизводительного эксперимента. При использовании комбинаторного катализа для открытия качественных каталитических материалов требуются считанные часы по сравнению с месяцами и годами при традиционных методах разработки [2]. Важнейшими проблемами в КК являются высокопроизводительные экспериментальные средства и обработка данных. Большое количество переменных в исследуемой задаче и применение сложных алгоритмов оптимизации для высокопроизводительного эксперимента делают сложной прямую человеческую интерпретацию данных. Для решения этой проблемы наиболее широкое применение имеют ИНС [5].

Если вначале методы искусственного интеллекта в КК использовались для разработки твердых катализаторов [4], то в настоящее время ИНС применяются для [1]:

- моделирования трёхфазной фильтрации с учетом состава катализатора, коррелирующие переменные состава с каталитической производительностью;
- разработки кинетических моделей, соотносящие условия реакции с каталитической производительностью;
- разработки реактора с оптимальным размещением катализатора и конструкцией реактора.

Последнее применение относится к моделированию экспериментальных кинетических данных для быстрого получения моделей «черного ящика». Эти модели на основе ИНС позволяют определить, какие условия реакции необходимы для оптимальной каталитической производительности каждого материала [10].

ИНС также широко используются в катализе для моделирования взаимосвязи между составом катализатора и каталитической активностью [11]. Искусственные нейронные сети, не требующие предварительных знаний о математической функции, описывающей эти соотношения, хорошо подходят для многопараметрического моделирования в комбинаторном катализе, для разработки новых активных и селективных материалов. Для этого используют ИНС различных архитектур, и прошедшую лучше всего обучение сеть используют для прогнозирования состава материала, который, как ожидается, дает высокие выходы продукта реакции. Экспериментальное подтверждение предсказанных результатов показывает, что ИНС очень хорошо подходят для прогнозирования производительности катализатора, состав которого не содержался в наборе данных, на которых было основано обучение.

Способность ИНС для оценки деактивации катализаторов была рассмотрена Kito с соавторами [12] на примере реакции конверсии метанола на dealюминированных морденитах. ИНС была успешно применена для оценки зависимости константы скорости деактивации от возможных факторов, контролирующей деактивацию катализатора. Входной слой содержал 4 элемента, которые представляют входные данные: соотношение Si/Al, степень ионного обмена Ba, степень ионного обмена La и доля сильнокислотных участков. Выходной слой состоял из одного элемента, представляющего значения константы скорости деактивации.

Hattori і Kito [4] використовували ІНС для оцінки кислотності смешаних оксидів металів. Дескриптори входного шару первісно вибирались для кожного двоїного оксиду, і представляли собою валентність, координаційне число, іонний радіус, електроотрицательність катіона металу і парціальний заряд іона кисню. Навчання, проходивше за  $10^4 - 10^6$  ітерацій, було проведено на даних о силі кислотності для родини з 19 комбінацій бінарних оксидів. Надійність прогнозу була покращена, коли умови гарячого формування бінарних оксидів були додані в набір дескрипторів.

ІНС для вибору і розробки каталізатора обезврежування автомобільних вихлопних газів використовували Miranda і Ramani [13]. Свіще 100 наборів літературних даних були використані для розробки ІНС. Входний шар 45 дескрипторів (матеріал підложки каталізатора, промотор, концентрації перетворюваних речовин, склад передшественних каталізаторів і др.). Вихідний шар відповідав робочим характеристикам передшественних каталізаторів (конверсія CO, вуглеводородів, і NO<sub>x</sub>). Було розглянуто різне кількість елементів в двох прихованих шарах, і вибрана найбільш оптимальна архітектура ІНС: 45-24-24-3, де 24 елементів знаходяться в кожному прихованому шарі, 45 в входному і 3 в вихідному шарі. В результаті був розроблений ефективний каталізатор обезврежування автомобільних вихлопних газів.

Holena і Vaerns [7] застосовували ІНС для розробки каталізатора окислювального дегідрювання пропану до пропену. Кожен багатошаровий перцептрон, який апроксимує залежність виходу пропену від співвідношення масових часток металів в каталізаторі, мав сім входних нейронів, відповідних часткам В, Fe, Ga, La, Mg, Mn, Mo, і один вихідний нейрон, відповідний виходу продукту. Вони використовували перцептрони з одним прихованим шаром. Для знаходження найбільш підходящого числа нейронів в прихованому шарі були навчені перцептрони з 1–20 нейронами. Їх здатність до обобщення, вимірювана як середнькватрична похибка даних випробувань, була порівняна за допомогою 22-разової перехрестної перевірки, використовуючої 216 каталізаторів навчальної вибірки і 10 каталізаторів тестового набору. Для навчання ІНС використовувався метод Левенберга-Марквардта як для ранньої зупинки, так і Байєсовської регуляризації для нивелювання переобучення. В результаті виявилось, що залежність виходу пропену від складу каталізатора була апроксимована ІНС, а також із навченої нейронної мережі в заданій послідовності були вивчені логічні правила.

Omata з соавторами [14] використовували ІНС для розробки каталізатора одностадійного синтезу диметилевого ефіру. Гібридний каталізатор складався з оксиду Cu-Zn-X і  $\gamma - Al_2O_3$ , де X – ефективна добавка. Для навчання мережі були обрані наступні елементи (X): В, К, Nb, Re, Cd, Ce, Sm і Тl. Зміна активності гібридного каталізатора з часом була апроксимована обобщеною степенною функцією. Отримані параметри степенною функції і фізико-хімічні властивості X-елементів використовувались як навчальні дані для ІНС. Навчена мережа використовувалась, щоб передбачити активність гібридного каталізатора, що містить різний елемент X. Елементи Al, Ti, V, і Nb були передбачені як підходящі, і склад оксидного каталізатора був оптимізований. Каталізатор з оптимізованим складом показав стійкі і високі робочі характеристики.

**Розробка бібліотек каталізаторів з використанням ІНС.** Основною метою створення каталітичної бібліотеки є створення смешаних каталізаторів. Основні параметри в розрахунок гетерогенних каталітичних бібліотек наступні [15]:

1. число змінних елементів;
2. максимальне число компонентів в одному складі;
3. кількісне співвідношення компонентів;
4. загальна сума елементів.

Необхідною умовою для створення вищезазначеної бібліотеки є велике експериментальне простір, що містить різні за складом каталізатори. Для вивчення закономірностей із цих масивів даних активно використовують ІНС в комбінації з генетичними алгоритмами (ГА) або голографічною стратегією дослідження (ГСІ).

ГА представляють собою методи глобальної оптимізації, які дозволяють знайти глобальний мінімум багатозмінної цільової функції. В основу ідеї покладено імітація оптимізаційних процесів, що відбуваються при еволюції живих організмів. ГА, призначені для оптимізації вагових коефіцієнтів ІНС, реалізують наступним чином [16]:

1. створюється початкова популяція особин, кожна з яких має свою власну «хромосому» – вектор вагових коефіцієнтів нейронної мережі  $\mathbf{w} = [w_1, w_2, \dots, w_n]^T$ ;
2. для кожної особи обчислюється функція пристосованості  $\varepsilon(\mathbf{w})$ , що є мірою пристосованості особи до існування;
3. формується цикл (покоління) по стадіям:

- a) скрещивание;
- b) мутация;
- c) вычисление значения целевой функции для всех особей;
- d) селекция.

При комбинировании методов ИНС с ГА для разработки каталитических библиотек, вначале проводят «виртуальный» предварительный скрининг, используя прогнозы ИНС, что позволяет избежать испытание предположительно непригодных каталитических материалов. Такой подход использовали для разработки катализаторы окислительной димеризации метана, аммоксидирования пропана, окислительной дегидрогенизации пропана и эпоксидирования олефинов [17–21].

Cundari T. с соавторами [17] определили оптимальный состав катализатора аммоксидирования пропана. Мольные доли компонентов катализатора (P, K, Cr, Mo, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> и SiO<sub>2</sub>) использовались как входные данные, а активность и селективность акрилонитрила – выходные данные. ИНС представляла собой оптимальную линейную комбинацию нейронной сети, которая использовалась для оценки выхода нового каталитического состава, полученного оптимизацией по ГА. Новый катализатор давал выход акрилонитрила 79 %, что выше, чем ранее достигнутый – 64 % [17].

Катализатор окислительной димеризации метана до этилена разработали Huang K. с соавторами [18]. Моделирование зависимости между составом катализатора и его активностью проводилось с помощью ИНС. Для увеличения эффективности оптимизации состава катализатора был предложен новый гибридный ГА для глобальной оптимизации. В этой работе также показано, что новый метод оптимизации катализатора очень эффективен и универсален.

Rodemerck U. с соавторами [19] разработали новый оптимальный состав катализатора окислительной дегидрогенизации пропана. Комбинируя обучаемую ИНС с ГА, фактически был проведен компьютерный эксперимент, целью которого было регулирование параметров контроля алгоритма оптимизации к специфическим требованиям по разработке катализатора.

В работе Corina A. с соавторами [20, 21] использовалась техника «мягких» вычислений для обработки результатов высокопроизводительного эксперимента, включающего получение материалов, постсинтетическую обработку и тестирование катализатора. В итоге был оптимизирован каталитический материал на основе титана для эпоксидирования олефинов. Техника «мягких» вычислений использовалась и для улучшения планирования эксперимента.

Новый подход для разработки катализаторов, использующий специфические ГА, основанные на дескрипторах описан в работе Holena M. с соавторами [22]. Этот подход сохраняет преимущества ГА и избавляет от необходимости повторного осуществления алгоритма при изменении набора оптимизируемых материалов.

В обзоре [23] описан новый детерминистический алгоритм оптимизации для разработки библиотек катализаторов – голографическая стратегия исследования (ГСИ). ИНС определяют количественные зависимости в многомерном экспериментальном пространстве. Вследствие отсутствия надлежащих методов визуализации, эти зависимости качественно остаются скрытыми от исследователей. Однако, эта проблема может быть решена при использовании ГСИ. Голографическая визуализация экспериментальных точек в двух измерениях качественно показывает зависимости активность-состав. Принцип ГСИ основан на специальном двумерном представлении непрерывного многомерного экспериментального пространства. Исходным допущением является непрерывность большинства вариантов экспериментального пространства. Как следствие, у двух близких экспериментальных точек в данном многомерном пространстве должны быть сходные свойства. С помощью специального двумерного преобразования, применяющегося в этом подходе, сохраняется непрерывность многомерного экспериментального пространства. Голографическое расположение экспериментальных точек обеспечивает четкую визуализацию экспериментального пространства в целом.

По сравнению с ГА, ГСИ приводит к более высокой скорости оптимизации. Анализ модельных голограмм показал, что главный недостаток ГА – неструктурное расположение проверенных составов в данном экспериментальном пространстве, представленном модельной голограммой. После использования ГСИ могут быть распознаны качественные соотношения между составом и активностью, тогда как в каталитических библиотеках, полученных с помощью ГА, экспериментальные точки располагаются более беспорядочно. Поэтому применение ГА не позволяет сделать какие-либо выводы относительно зависимости активность-состав визуальным анализом голограмм. Использование ГА при большом композиционном разнообразии катализаторов приводит к испытанию многочисленных каталитически непригодных материалов [24].

Totpros с соавторами [25] использовали комбинацию ИНС с ГСИ для визуализации большого массива экспериментальных данных. Объект исследования – реакция взаимодействия монооксида углерода с водяным паром, для которой и разрабатывался оптимальный состав многокомпонентного катализатора

на основе  $ZrO_2$ . Объединяя стратегии голографического поиска и ИНС, они провели «виртуальные» каталитические эксперименты для нахождения «виртуально» оптимальных составов и построения карты полной экспериментальной области в двух измерениях. Применение ИНС в качестве модели «черного ящика» для виртуальных каталитических тестов предполагает процесс обучения, который вовлекает нелинейную регрессию. Последняя использует каталитические результаты, полученные ранее во время оптимизации по ГСИ. Было показано, что Pt, Eu и Fe – основные компонентами катализатора, V – промотор, а добавки Ru, Sb, Co и Ge оказывают отрицательное воздействие на каталитическую активность.

При комбинировании методов ИНС с ГСИ авторами [26] разработана каталитическая библиотека для полного окисления метана при 350 °С. В первом поколении катализаторов наибольшим было значение 44 % конверсии метана, в то время как в 5-м наблюдалась практически полная конверсия. Для достижения этого результата сначала находили «виртуальные» оптимальные составы катализатора, после чего создавали карту экспериментального пространства в двух измерениях [26].

ГСИ является очень мощным инструментом, как в разработке каталитических библиотек, так и визуализации экспериментального пространства. Кроме того, сочетание ГСИ с ИНС является отличным способом для извлечения знаний. Таким образом может быть получена дополнительная информация об исследуемой каталитической системе [27].

**Заключение.** Применение ИНС для моделирования и прогнозирования в области экспериментального катализа – новый мощный инструмент, который может ускорить разработку и оптимизацию новых катализаторов.

ИНС хорошо подходят для моделирования зависимости между составом катализатора и реакционной способностью в комбинаторном катализе. Важная особенность этих моделей – это то, что они не требуют никакого теоретического знания или человеческого опыта во время процесса их обучения. Фундаментальные знания используются только для правильного структурирования данных (параметры, входные и выходные данные).

Даже если ничего не известно о математических функциях, описывающих зависимости параметров, ИНС может использоваться, чтобы извлечь знание из набора данных, полученных в высокопроизводительном эксперименте. Кроме того, из правильно обученной ИНС могут быть извлечены знания в виде правил. На более фундаментальном уровне ожидается, что исследователь сможет создавать гипотезы о функциях индивидуальных компонентов в механизме реакции, используя ИНС.

Модели, использующие предварительно обученную ИНС могут использоваться для дальнейшего расширения массива катализаторов, оптимизации и управления производственными процессами.

### Литература

1. Diaconescu R., Dumitriu E. Applications of artificial neural networks in environmental catalysis // *Env. Eng. and Managment J.* – 2005. – Vol.4.– P. 473–498.
2. Senkan S. Combinatorial Heterogeneous Catalysis – A New Path in an Old Field // *Angew. Chem. Int. Ed.*– 2001. – Vol. 40.– P. 312–329.
3. Rothenberg G. Data mining in catalysis: Separating knowledge from garbage // *Cat. Today.*– 2008.– Vol.137.– P. 2–10.
4. Hattori T., Kito S. Neural network as a tool for catalyst development // *Cat. Today.*– 1995. – Vol. 23.– P. 347–355.
5. Serra J., Corma A., Chica A. et al Can artificial neural networks help the experimentation in catalysis? // *Cat. Today.*– 2003.– Vol. 81.– P. 393–403.
6. Баскин И.И., Палютин В.А., Зефилов Н.С. Применение искусственных нейронных сетей в химических и биохимических исследованиях // *Вестн. Моск. Ун-та., сер.2 химия.*–1999. – Т.40, №5.– С. 323–326.
7. Holena M., Vaerns M. Feedforward neural networks in catalysis A tool for the approximation of the dependency of yield on catalyst composition, and for knowledge extraction // *Cat. Today.*– 2003.– Vol. 81.– P. 485–494.
8. Sha W., Edwards K. The use of artificial neural networks in materials science based research // *Materials and Design.*– 2007.– Vol. 28.– P. 1747–1752.
9. Jain A., Mao J., Mohiuddin K. Artificial Neural Networks: A Tutorial // *In Proceedings of IEEE Computer.*– 1996.– P. 31–44.
10. Serra J., Corma A., Argente E. et al Neural networks for modelling of kinetic reaction data applicable to catalyst scale up and process control and optimisation in the frame of combinatorial catalysis // *Appl. Cat. A:General.*– 2003.– Vol. 254.– P. 133–145.
11. Hattori T., Kito S. Analysis of factors controlling catalytic activity by neural network // *Cat. Today.*– 2006. – Vol. 111.– P. 328–332.

12. Kito S., Satsuma A., Ishikura T. Application of neural network to estimation of catalyst deactivation in methanol conversion // *Cat. Today.*– 2004.– Vol. 97.– P. 41–47.
13. Ramani S., Miranda R. Neural network–aided design of automobile exhaust catalysis // *Chem. Eng. Comm.*– 1996.– Vol. 156, P. 147–160.
14. Omata K., Hashimoto M., Ishiguro G. Design and Development of Cu–Zn Oxide Catalyst for Direct Dimethyl Ether Synthesis Using an Artificial Neural Network and Physicochemical Properties of Elements // *Ind. Eng. Chem. Res.*– 2006.– Vol. 45, P. 4905–4910.
15. Margitfalvi J., Tompos A., Gibölös S. et al Catalyst library design for fine chemistry applications // *Chemical Industries.*– 2007.– Vol. 115.– P. 303–314.
16. Clerc F., Lengiz M., Farrusseng D., Mirodatos C. Library design using genetic algorithms for catalyst discovery and optimization // *Rev. Sci. Instrum.*– 2005.– Vol. 76, 062208.
17. Cundari T., Deng J., Zhao Y. Design of a Propane Ammoxidation Catalyst Using Artificial Neural Networks and Genetic Algorithms // *Ind. Eng. Chem. Res.* – 2001.– Vol.40.– P. 5475–5480.
18. Huang K., Zhan X., Chen F. et al Catalyst design for methane oxidative coupling by using artificial neural network and hybrid genetic algorithm // *Chem. Eng. Sci.* – 2003.– Vol. 58.– P. 81–87.
19. Rodemerck U., Baerns M., Holena M. et al Application of a genetic algorithm and a neural network for the discovery and optimization of new solid catalytic materials // *Appl. Surf. Sci.*– 2004.– Vol.223.– P. 168–174.
20. Serra J., Corma A., Valero S. et al Soft Computing Techniques Applied to Combinatorial Catalysis: A New Approach for the Discovery and Optimization of Catalytic Materials // *QSAR Comb. Sci.*– 2007.– Vol. 26, No.1.– P. 11–26.
21. Corma A., Serra J., Serna P. et al Optimisation of olefin epoxidation catalysts with the application of high-throughput and genetic algorithms assisted by artificial neural networks (soft computing techniques) // *J. of Cat.*– 2005.– Vol. 229.– P. 513–524.
22. Martin Holena, Tatjana Cukic, Uwe Rodemerck, and David Linke Optimization of Catalysts Using Specific, Description–Based Genetic Algorithms // *J. Chem. Inf. Model.*– 2008.– Vol. 48.– P. 274–282.
23. Végvári L., Tompos A., Gibölös S. et al Holographic research strategy for catalyst library design Description of a new powerful optimisation method // *Cat. Today.*– 2003.– Vol. 81.– P. 517–527.
24. Tompos A., Margitfalvi J., Tfirst E. et al Evaluation of catalyst library optimization algorithms: Comparison of the Holographic Research Strategy and the Genetic Algorithm in virtual catalytic experiments // *Appl. Cat. A:General.*– 2006.– Vol. 303.– P. 72–80.
25. Tompos A., Margitfalvi J., Végvári L. et al Visualization of Large Experimental Space Using Holographic Mapping and Artificial Neural Networks. Benchmark Analysis of Multicomponent Catalysts for the Water Gas Shift Reaction // *Top. Catal.*– 2010.– Vol. 53.– P. 100–107.
26. Tompos A., Margitfalvi J., Tfirst E. et al Development of catalyst libraries for total oxidation of methane A case study for combined application of “holographic research strategy and artificial neural networks” in catalyst library design // *Appl. Cat. A:General.*– 2005.– Vol. 285.– P. 65–78.
27. Tompos A., József L., Margitfalvi A. et al Information mining using artificial neural networks and “holographic research strategy” // *Applied Catalysis A: General.*– 2003.– Vol. 254.– P. 161–168.

УДК 544.4

Альамі Д.А.М., Булавін В.І.

### ВИКОРИСТАННЯ ШТУЧНИХ НЕЙРОННИХ МЕРЕЖ ДЛЯ РОЗРОБКИ КАТАЛІЗАТОРІВ

Використання штучних нейронних мереж (ШНМ) для розробки каталізаторів у галузі каталізу є важливим як з теоретичної, так і з практичної точок зору. Метою цієї оглядової статті є оцінка можливостей ШНМ для розробки промислових каталізаторів та підбору оптимальних умов експлуатації каталітичних систем. Показані переваги використання ШНМ для оптимізації складу каталізаторів у порівнянні з існуючими традиційними методами.

Alami D.A.M., Bulavin V.I.

### CATALYST DEVELOPMENT USING ARTIFICIAL NEURAL NETWORKS

Application of artificial neural networks (ANN) using in the field of catalysis is important both from theoretical and practical points of view. The purpose of this review is the estimation of ANN possibilities for industrial catalysts development and selection of optimum conditions for catalytic systems. Advantages of the ANN using for catalysts composition optimization in comparison with existing traditional methods are shown.