

ХИМИЧЕСКИЕ ТЕХНОЛОГИИ

УДК 004.032.26:37:66

DOI 10.52928/2070-1616-2026-53-1-83-88

ПРАКТИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ПРИМЕНЕНИЯ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ И ГЕНЕРАТИВНЫХ МОДЕЛЕЙ
В ОБУЧЕНИИ СТУДЕНТОВ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОГО ПРОФИЛЯ
(НА ПРИМЕРЕ MICROSOFT COPILOT)

д-р хим. наук, проф. М.А. ЗИЛЬБЕРГЛЕЙТ, Г.А. МОРОЗОВ
(Белорусский государственный технологический университет, Минск)

В связи с расширением использования нейронных сетей в различных отраслях промышленности возникают проблемы по подготовке студентов к использованию искусственного интеллекта в учебном процессе. В статье рассматриваются перспективы и практические аспекты применения искусственных нейронных сетей и больших языковых моделей (на примере Microsoft Copilot) в процессе обучения студентов химико-технологического профиля. Приведены конкретные примеры решения задач по курсам «Процессы и аппараты химических производств», «Общая химическая технология» и кинетике химических реакций. Продемонстрировано, как использование искусственного интеллекта позволяет автоматизировать рутинные вычисления, визуализировать результаты (материальные балансы, кинетические кривые) и моделировать работу химических реакторов. Показано, что внедрение нейросетевых технологий в учебный процесс существенно сокращает время расчетов и позволяет сместить фокус внимания студентов с математических выкладок на физико-химический анализ процессов.

Ключевые слова: нейронные сети, искусственный интеллект, химическая технология, образование, кинетика реакций, материальный баланс, моделирование реакторов, Copilot.

Введение. Нейронная сеть – это математическая модель, имитирующая работу мозга человека, состоящая из взаимосвязанных узлов – «нейронов». Основное назначение таких систем заключается в воспроизведении процессов обучения и принятия решений, что позволяет выявлять скрытые закономерности в данных, выполнять прогнозы.

Структурно нейронная сеть включает три основных уровня: входной слой – принимает исходные данные; скрытые слои – преобразуют информацию с использованием весовых коэффициентов и активационных функций; выходной слой – формирует итоговое решение или прогноз (рисунок 1).

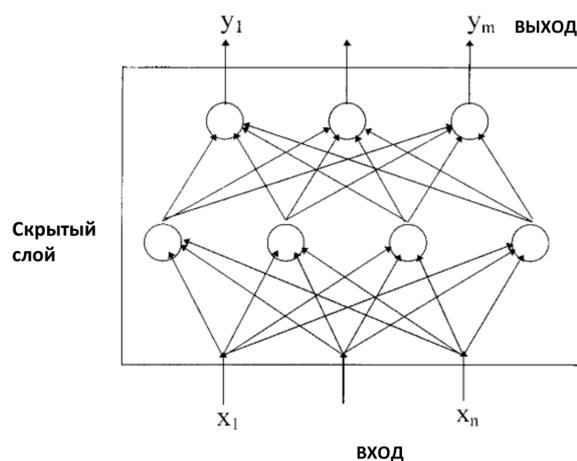


Рисунок 1. – Структура многослойной искусственной нейронной сети с прямыми связями

Каждая связь между нейронами характеризуется весом, отражающим силу влияния одного узла на другой. В процессе обработки данные проходят через последовательность преобразований, а результатом может быть число, классификация, рекомендация или иное решение. Обучение нейронной сети осуществляется методом обратного распространения ошибки (backpropagation), при котором веса корректируются до тех пор, пока прогнозы модели не достигают требуемой точности [1].

Современные исследования показывают, что методы машинного обучения и искусственного интеллекта (ИИ) находят все более широкое применение в химической технологии. Они используются для моделирования, автоматизации и оптимизации процессов, контроля качества и безопасности, а также для поиска новых катали-

заторов [2]. В химической промышленности нейросети применяются для оптимизации производственных процессов, разработки новых материалов и обеспечения экологической безопасности [3].

Особое внимание уделяется задачам прогнозирования свойств веществ. Так, нейросетевые модели позволяют предсказывать токсичность химических соединений, что имеет ключевое значение для экологии и промышленной безопасности [4]. В металлургии нейросети демонстрируют высокую эффективность при прогнозировании характеристик пластичности сталей, превосходя традиционные регрессионные методы [5].

Кроме того, в последние годы активно развивается направление интеллектуальных технологий, включающих нейронные сети и нечеткую логику, которые применяются для управления технологическими процессами, диагностики неисправностей и построения прогнозирующих моделей [6].

Наряду с промышленными приложениями, все большее внимание уделяется образовательному потенциалу нейросетевых технологий. В исследованиях подчеркивается, что генеративные модели и интеллектуальные системы могут использоваться для автоматизации рутинных расчетов, формирования учебных материалов и предоставления студентам персонализированной обратной связи [7–9]. К примеру, отмечается, что использование ChatGPT и аналогичных языковых моделей позволяет преподавателям создавать тестовые задания, конспекты лекций и даже интерактивные упражнения, что значительно экономит время и обеспечивает единый стандарт качества учебных материалов [7]. В других работах показано, что ИИ способен персонализировать образовательные траектории, выявляя пробелы в знаниях студентов и предлагая индивидуальные задания для их устранения [8].

Цель работы: оценка возможностей применения нейронных сетей при обучении студентов химико-технологического профиля в курсах: «Процессы и аппараты химических производств», «Общая химическая технология», «Оборудование химических технологий».

Основная часть. Ниже мы показываем основные пути использования нейронных сетей, которые, по нашему мнению, могут быть пригодны в обучении студентов химико-технологического профиля.

Пример 1. Расчет расхода щелока для выщелачивания хлорида калия из сильвинитовой руды является повседневной задачей, с которой регулярно сталкиваются технологи на производстве. Обычно ее решают через составление системы материальных балансов по основным компонентам и последующее определение неизвестных величин аналитическими или численными методами. Такой способ дает надежный результат, но требует значительных вычислений и внимательной проверки исходных данных. На практике это нередко превращается в трудоемкий процесс, особенно если состав руды или условия выщелачивания меняются.

На этом примере мы бы хотели продемонстрировать ход процесса расчета при возможности быстрого изменения исходных данных. Для этого мы воспользовались искусственным интеллектом Microsoft Copilot в режиме Smart (GPT-5). К Copilot был направлен запрос со следующей постановкой задачи: рассчитать расход щелока P , содержащего (масс. доли, %) 12,8% KCl, и 13,9% NaCl, необходимого для выщелачивания KCl из 1000 кг сильвинитовой руды C состава: 27% KCl, 73% NaCl, с получением крепкого щелока K с содержанием: 19,7% KCl, 17% NaCl, остальное – вода и галитовый остаток (хвосты) G с содержанием: 1,24% KCl и 94,76% NaCl.

Традиционный способ расчета заключается в составлении материального баланса по KCl, NaCl и общей массе потоков. Формируются три линейных уравнения, которые после решения тем или иным методом такой системы дают искомый результат. Время, которое затрачивает преподаватель на решение этой задачи, обычно составляет около 25 минут.

При реализации решения при помощи ИИ требуется ввести условие задачи в диалоговое окно, само вычисление не превышает одной секунды, нейронная сеть предоставляет также подробное решение задачи. Например, в результате расчета при помощи ИИ было установлено, что для переработки 1000 кг руды требуется около 2726 кг щелока. При этом формируется порядка 3114 кг крепкого раствора и 612 кг хвостов. Проверка материальных балансов по компонентам показала совпадение с результатами, полученными традиционным методом, расхождения находятся в пределах округления. Таким образом, использование Microsoft Copilot позволило не только воспроизвести корректное решение, но и существенно сократить время вычислений, обеспечив возможность оперативного изменения исходных данных при варьировании состава сырья или условий процесса.

Пример 2. В рамках преподавания курсов химико-технологического профиля одной из фундаментальных задач классической теории кинетики является последовательное необратимое превращение веществ ($A \rightarrow B \rightarrow C$), где A – исходное вещество, B – промежуточный продукт, а C – конечный продукт. Традиционное решение этой задачи предполагает составление системы дифференциальных уравнений первого порядка, описывающих скорости изменения концентраций компонентов A и B , а также обязательное привлечение уравнения материального баланса для концентрации C . Это требует от студентов выполнения аналитических расчетов, включая интегрирование системы уравнений, что является достаточно трудоемким процессом. Для демонстрации эффективности использования ИИ в учебном процессе данная задача была смоделирована с помощью Copilot. Запрос (промпт) был структурирован в три этапа для получения комплексного решения. Первая часть промпта была посвящена формализации кинетики процесса: было указано, что компонент A превращается в B с константой k_1 , а B превращается в C с константой k_2 , при этом оба превращения имеют первый порядок. Также были заданы начальные условия: исходная концентрация компонента A составляет C_{0A} , а концентрации остальных компонентов равны нулю. От ИИ требовалось вывести систему дифференциальных уравнений и предоставить аналитическое решение для концентрации промежуточного компонента B . Вторая часть запроса предусматривала нахождение критиче-

ского параметра – времени, при котором количество компонента B достигает максимума. Третья часть задачи заключалась в визуализации результатов, а именно в построении графика изменения концентрации всех трех компонентов A , B , C во времени. При выполнении подобного комплексного запроса ИИ обычно генерирует программный код, чаще всего на языке Python, который требует подключения специализированных библиотек для визуализации данных. Однако, чтобы упростить выполнение третьей части задачи и избежать необходимости установки дополнительных библиотек, было введено требование выполнить программную часть в HTML-формате. На рисунке 2 представлен фрагмент кода, который был выполнен нейросетью.

```
<script>
function derivs(y, k1, k2) {
  const [A, B, C] = y;
  return [
    -k1 * A,
    k1 * A - k2 * B,
    k2 * B
  ];
}

function rk4(y, dt, k1, k2) {
  const f = (y) => derivs(y, k1, k2);
  const k1v = f(y);
  const k2v = f(y.map((v, i) => v + dt * k1v[i] / 2));
  const k3v = f(y.map((v, i) => v + dt * k2v[i] / 2));
  const k4v = f(y.map((v, i) => v + dt * k3v[i]));
  return y.map((v, i) => v + dt / 6 * (k1v[i] + 2 * k2v[i] + 2 * k3v[i] + k4v[i]));
}

function simulate() {
  const k1 = parseFloat(document.getElementById("k1").value);
  const k2 = parseFloat(document.getElementById("k2").value);
  const A0 = parseFloat(document.getElementById("A0").value);
  const B0 = parseFloat(document.getElementById("B0").value);
  const C0 = parseFloat(document.getElementById("C0").value);

  const dt = 0.05;
  const tmax = 10;
  const steps = Math.floor(tmax / dt);
  const t = [], A = [], B = [], C = [];
  let y = [A0, B0, C0];
```

Рисунок 2. – Фрагмент программного кода, сгенерированный нейронной сетью

Такой подход позволяет исполнителю просто скопировать сгенерированный код, сохранить его как файл с расширением .html и получить график. Выполнение всего промпта заняло у нейронной сети менее одной секунды, что многократно сократило время, необходимое для традиционного ручного решения. В результате ИИ предоставил как подробное аналитическое решение задачи, так и готовый к запуску код для построения графика изменения концентраций. Этот результат (рисунок 3) наглядно демонстрирует динамику процесса: экспоненциальное убывание концентрации A , кривую с максимумом для B и S -образный рост концентрации C до ее предельного значения.

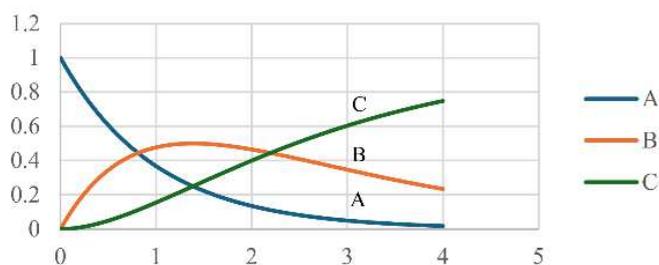


Рисунок 3. – График изменения концентраций реагентов A , B , C

Таким образом, использование ИИ позволяет преподавателю и студенту не тратить время на громоздкие математические выкладки, а немедленно перейти к анализу кинетического поведения системы, интерпретации влияния констант скоростей и изучению времени максимального выхода продукта.

Пример 3. Еще более сложной задачей, решение которой традиционными методами занимает значительное учебное время, является расчет кинетики обратимой реакции, протекающей в две ступени с одним исходным веществом. Схема такого процесса может быть представлена как последовательное превращение вещества A в промежуточный продукт B , который затем переходит в конечный продукт C , причем обе стадии являются обратимыми.

Классическое решение этой задачи требует от студента глубоких знаний в области высшей математики. Необходимо составить систему дифференциальных уравнений скоростей реакции на основе закона действующих масс, дополнить ее уравнением материального баланса и решить полученную систему. Процесс решения сводится к сведению системы к линейному дифференциальному уравнению второго порядка, составлению характеристического квадратного уравнения и поиску его корней. Итоговые формулы для концентраций представляют собой громоздкие выражения, включающие суммы экспоненциальных функций, зависящих от констант скоростей прямых и обратных реакций. Практика показывает, что ручной вывод этих уравнений занимает у студентов значительное время и сопряжен с высокой вероятностью ошибок в алгебраических преобразованиях. Для оптимизации этого этапа обучения был использован ИИ. В промпт была заложена формулировка задачи: «Вывести уравнения зависимости концентраций от времени для последовательной обратимой реакции первого порядка $A \rightleftharpoons B \rightleftharpoons C$ с константами прямых скоростей k_1, k_2 и обратных β_1, β_2 ». Нейросеть корректно составила систему дифференциальных уравнений и использовала уравнение материального баланса для замкнутой системы. Был продемонстрирован метод решения через характеристическое уравнение. ИИ вывел корни этого уравнения (собственные числа системы), имеющие физический смысл констант затухания процесса. Были получены итоговые аналитические выражения для концентраций всех трех компонентов смеси в любой момент времени. Для оценки точности работы нейросети полученное решение было сопоставлено с классическим выводом, приведенным в учебной литературе по химической кинетике [10]. Сравнение показало, что, несмотря на возможные различия в обозначениях переменных (например, использование λ вместо γ для корней характеристического уравнения), математическая структура и физический смысл полученных формул полностью совпадают с данными, приведенными в литературе [10].

Пример 4. В теории химических реакторов обычно рассматривают два идеальных реактора: реактор идеального (полного) смешения и реактор идеального (полного) вытеснения. Для идеального смешения характерно абсолютно полное выравнивание всех параметров реакции по объему реактора. Идеальное вытеснение предполагает, что любое количество реагентов и продуктов через реактор перемещается как твердый поршень, и в соответствии с особенностями реакции устанавливается определенное распределение ее параметров по длине реактора (в пространстве). Реальные реакторы в той или иной степени приближаются к моделям идеального смешения или идеального вытеснения. В то же время реальный реактор совмещает свойства реактора идеального смешения и реактора идеального вытеснения. Традиционная схема расчета обычно предполагает разделение реакторного пространства на два параллельных потока: реактор идеального смешения и реактор идеального вытеснения, и последующее суммирование полученного результата. Поставленную задачу можно решить проще, если предположить, что в одном реакторе протекает процесс, в котором кинетика процесса подчиняется кинетике как в реакторе идеального смешения, так и в реакторе идеального вытеснения. Классическая схема расчета предполагает решение системы нелинейных уравнений.

Идеальный реактор вытеснения: для реакций первого порядка закон изменения концентрации описывается экспоненциальным уравнением

$$C_{\text{вытеснения}}(t) = C_0 e^{-kt},$$

где C_0 – начальная концентрация реагента; k – константа скорости химической реакции первого порядка, характеризующая интенсивность химического превращения; t – время пребывания реагентов в реакторе.

Идеальный реактор смешения: при условии первого порядка кинетики динамика концентрации часто аппроксимируется зависимостью вида

$$C_{\text{смешения}}(t) = \frac{C_0}{1+kt}.$$

Реальный реактор, в котором наблюдаются эффекты как вытеснения, так и смешения, можно смоделировать с использованием взвешенной суммы приведенных выше выражений. Для этого вводится параметр α (от 0 до 1), который характеризует степень приближения реакционной системы к режиму идеального вытеснения. Тогда результирующая зависимость концентрации задается формулой

$$C(t) = \alpha C_0 e^{-kt} + (1 - \alpha) \frac{C_0}{1 + kt}.$$

В качестве экспериментальной модели реального реактора был разработан Python-скрипт, сгенерированный искусственным интеллектом Copilot. Данная модель описывает динамику изменения концентрации реагента в реакторе, объединяющем два режима: идеальное вытеснение и идеальное смешение. Для более реалистичного воспроизведения экспериментальных условий к теоретическим значениям концентрации добавляется регулируемый гауссовский шум. Это позволяет учесть погрешности измерений и другие случайные факторы, обусловленные реальными лабораторными условиями. Сгенерированные данные сохраняются в CSV-файл.

Для решения задачи, связанной с нахождением коэффициентов k и α , был сформирован промпт, обращенный к искусственному интеллекту Copilot. В промпте была сформулирована задача найти решение, которое позволит определить оптимальные значения параметров k и α модели реального реактора на основании входных данных концентрации от времени $C(t)$. В качестве результата был сгенерирован код на языке Python. Для подбора оптимальных параметров ИИ использовал численный метод минимизации, предоставляемый библиотекой SciPy. Для верификации разработанной нейросетью модели был проведен численный эксперимент, в ходе которого сравнивались заданные параметры реактора и значения, восстановленные алгоритмом на основе зашумленных данных. Итоги сопоставления представлены в таблице.

Таблица. – Моделирование процесса кинетики работы реактора

$k_{\text{модели}}$	$\alpha_{\text{модели}}$	t , мин	n , кол-во точек	$k_{\text{найденное}}$	$\alpha_{\text{найденное}}$	Разбегка α , %	Разбегка k , %
1	0,05	10	30	0,9940	0,0573	14,6	0,6
1,5	0,01	20	60	1,4925	0,0164	64	0,5
2	0,35	5	20	1,9906	0,3547	1,34	0,47
0,27	0,83	15	15	0,2689	0,8355	0,66	0,4
3	0,1	25	100	2,9910	0,1178	17,8	0,3

Заключение. Результаты проведенного исследования подтверждают целесообразность интеграции инструментов ИИ в методику преподавания химико-технологических дисциплин. На примере решения задач расчета материального баланса процесса выщелачивания показано, что использование нейросетевых моделей позволяет сократить время выполнения расчетов с характерных для традиционного метода 25 минут до нескольких секунд при сохранении точности результатов в пределах правил округления. Применение генеративных моделей также продемонстрировало высокую эффективность при анализе кинетики сложных реакций и моделировании гидродинамики реальных реакторов, где нейросеть успешно справилась с идентификацией параметров процесса с погрешностью менее 0,5%.

Вместе с тем следует отметить ряд ограничений и потенциальных рисков использования подобных технологий, не рассмотренных детально в рамках данной работы, но имеющих принципиальное значение. Вероятностный характер работы больших языковых моделей создает предпосылки для возникновения фактических ошибок, что диктует необходимость обязательной критической верификации получаемых данных традиционными методами. Кроме того, чрезмерное доверие к автоматизированным решениям без глубокого понимания физико-химической сущности процессов может привести к снижению уровня фундаментальной подготовки студентов и утрате навыков самостоятельного анализа. Эффективность применения ИИ также находится в прямой зависимости от корректности формулирования запросов, что требует формирования у обучающихся соответствующих компетенций.

Таким образом, внедрение рассмотренных технологий обеспечивает оптимизацию учебного времени, однако требует взвешенного подхода, при котором нейросети выступают не заменой, а вспомогательным инструментом, позволяющим сосредоточить внимание на интерпретации закономерностей и принятии обоснованных технологических решений.

ЛИТЕРАТУРА

1. Хайкин С. Нейронные сети. Полный курс. – М.: И.Д. Вильямс, 2006. – С. 31–63
2. Нигматуллин В.Р., Руднев Н.А. Использование методов машинного обучения и искусственного интеллекта в химической технологии. Ч. II // Нефтегазовое дело. – 2019. – № 5. – С. 202–238.
3. Подольный В.А. Применение машинного обучения и нейросетей в химической промышленности // Вестник науки. – 2025. – № 3(84). – Т. 5. – С. 445–449.
4. Егорова А.Р., Зиннатуллина Г.Н., Зарипова Р.С. Прогнозирование токсичности химических веществ с использованием нейронных сетей // Известия ТулГУ. Технические науки. – 2024. – Вып. 5. – С. 252–253.
5. Шкатов В.В., Шкатов В.В. Применение нейронных сетей для прогнозирования характеристик пластичности горячекатаных листовых сталей // Современные материалы, техника и технологии. – 2018. – № 3(18). – С. 42–46.
6. Сабитов М.А., Сенкевич Л.Б. Использование интеллектуальных технологий в химической промышленности // Современные наукоемкие технологии. – 2021. – № 11. – С. 63–66.
7. Паскова А.А. Практические аспекты применения ChatGPT в высшем образовании // Вестник Майкопского государственного технологического университета. – 2023. – Т. 15. – № 3. – С. 67–74.

8. Шобонов Н.А., Булаева М.Н., Зиновьева С.А. Искусственный интеллект в образовании // Педагогика. – 2022. – С. 285–290.
9. Использование нейронных сетей в образовании / О.М. Бакунова, И.Л. Калименя, А.М. Бакунов и др. // Web of Scholar. – 2018. – Т. 1. – № 19. – С. 8–10.
10. Родигин Н.М., Родигина Э.Н. Последовательные химические реакции: Математический анализ и расчет. – М.: Изд-во АН СССР, 1960. – С. 46–47.

Поступила 09.1.2025

**PRACTICAL ASPECTS OF APPLYING NEURAL NETWORKS AND GENERATIVE MODELS
IN TRAINING CHEMICAL ENGINEERING STUDENTS
(USING MICROSOFT COPILOT AS AN EXAMPLE)**

M. ZILBERGLEIT, G. MOROZOV
(Belarusian State Technological University, Minsk)

Due to the expanding use of neural networks in various industries, challenges arise in preparing students to apply artificial intelligence in the educational process. The article examines the prospects and practical aspects of employing artificial neural networks and large language models (using Microsoft Copilot as an example) in the training of students specializing in chemical engineering. Specific examples are provided of solving problems in courses such as Processes and Equipment of Chemical Production, General Chemical Technology, and Chemical Reaction Kinetics. It is demonstrated how the use of artificial intelligence enables the automation of routine calculations, visualization of results (material balances, kinetic curves), and modeling of chemical reactor operation. The introduction of neural network technologies into the educational process is shown to significantly reduce calculation time and shift students' focus from mathematical derivations to the physico-chemical analysis of processes.

Keywords: neural networks, artificial intelligence, chemical technology, education, reaction kinetics, material balance, reactor modeling, Copilot.