

Л. Л. Товажнянський, д-р техн. наук, професор,  
А. М. Миронов, канд. техн. наук, доцент, М. В. Ільченко, канд. техн. наук, доцент,  
М. М. Козуля, канд. техн. наук, доцент, В. К. Горбунов, студент

## ШТУЧНИЙ ІНТЕЛЕКТ ЯК ІНСТРУМЕНТ ХІМІЧНОЇ ІНЖЕНЕРІЇ: АНАЛІЗ, МОДЕЛЮВАННЯ, ЧИСЛОВІ МЕТОДИ, ОПТИМІЗАЦІЯ, ІНТЕГРАЦІЯ

*Національний технічний університет «Харківський політехнічний інститут», Харків*

**Ключові слова:** штучний інтелект, хімічна інженерія, інформаційні технології, ШІ, математичне моделювання, імітаційні моделі, інтеграція, оптимізація, симуляція.

**Вступ.** Сучасна хімічна інженерія стрімко змінюється під впливом розвитку тих цифрових технологій та новітніх підходів до обробки великих обсягів даних, які здатні забезпечити найбільш експертні, швидкі, гнучкі та добре керовані рішення. Однією з ключових рушійних сил цих змін на початку 2020-х років став штучний інтелект (ШІ), який відкриває принципово нові можливості для аналізу, оптимізації та моделювання складних хімічних процесів [1]. На відміну від усіх традиційних методів розрахунків та емпіричних підходів, інтелектуальні системи здатні швидко аналізувати багатофакторні залежності, передбачати поведінку хімічних систем й подекуди за потреби підбирати оптимальні режими роботи установок у режимі реального часу [2].

Актуальність використання ШІ у хімічній інженерії зумовлюється необхідністю підвищення енергоефективності виробництв, мінімізації шкідливих викидів та зменшення витрат усіх видів сировини та ресурсів. Крім того, на тлі посилення вимог до екологічної безпеки та просування на міжнародному рівні концепції сталого розвитку промисловості, використання дійсно просунутих інтелектуальних алгоритмів дозволяє проектувати більш екологічні й економічно вигідні технологічні процеси [3]. Сьогодні ШІ знаходить застосування у різних сферах хімічної інженерії: від вирішення складних обернених задач та оптимізації показників реакцій до розв'язання багатопараметричних оптимізаційних задач та прогнозування властивостей матеріалів. Числові методи, що традиційно використовуються для математичного та імітаційного моделювання, підсилюються за рахунок алгоритмів машинного навчання та глибинних нейронних мереж, що підвищує точність і швидкість розрахунків. Водночас сучасні мови програмування та платформи з відкритим кодом сприяють активному впровадженню ШІ у прикладні інженерно-дослідницькі задачі [4].

Попри значний прогрес, чимало питань інтеграції ШІ у галузь хімічної інженерії для дослідницьких та виробничих цілей і досі залишаються відкритими: ефективність поєднання ШІ з традиційними числовими методами, обґрунтування вибору алгоритмів для різних класів задач, нездатність систем «розуміти контекст» реальної ситуації цеху або технологічної лінії, а також проблеми масштабування та адаптації моделей задля конкретних застосунків – доволі типових промислових об'єктів, які застосовуються у формально вкрай схожих, але ситуативно дуже різних операцій.

Метою даної статті є аналіз сучасних методів та прийомів використання ШІ у хімічній інженерії, дослідження його обмежень, прикладів ефективного застосування для розв'язання інженерних задач та визначення перспектив розвитку цієї технології у контексті моделювання, оптимізації процесів та управління хімічними виробництвами.

**Аналіз літератури.** Розвиток методів штучного інтелекту у хімічній інженерії детально описується у численних дослідженнях трьох останніх років, що свідчить про швидке зростання цього наукового напрямку та інтересу до нього не тільки у рамках ІТ-

сфери та дотичних до неї прикладних галузей. Більшість досліджень підтверджують зростання зацікавленості науковців у поєднанні класичних числових методів з якомога більш сучасними підходами – від машинного навчання, зокрема глибинних нейронних мереж, до блокчейну та еволюційних алгоритмів.

Загалом, зацікавленість подібною тематикою є прямим продовженням достатньо традиційного для хімічної інженерії інструменту – математичного моделювання. Так, у роботі [5] 2021 року, вже систематизовано способи математичного моделювання хімічних процесів та окреслено проблеми, які постають при використанні класичних числових методів. Автори підкреслюють, що традиційні підходи не завжди ефективні у випадках багатокомпонентних реакцій або за відсутності достатньої експериментальної бази. У таких випадках методи штучного інтелекту демонструють набагато кращі прогностичні властивості, навіть не будучи здатні усвідомити фізико-хімічну основу процесу. Так, у [6] представлено огляд сучасних алгоритмів машинного навчання для моделювання та оптимізації процесів. Автори звертають увагу на те, що машинне навчання вже активно використовується для створення моделей, які дозволяють легко та коректно обходити складні аналітичні залежності. Особливо корисними ці підходи є для оптимізації процесів теплообміну, масопереносу та кінетики реакцій.

Інтерес викликає також дослідження [7], у якому детально проаналізовано, як методи штучного інтелекту інтегруються у системи управління хімічними установками. Автори відзначають ефективність предиктивного управління, яке здатне поєднувати відомі моделі машинного навчання із класичними PID-регуляторами задля підвищення стабільності виробничих процесів. Згідно з оглядом [8], значну роль відіграє поєднання штучного інтелекту з технологіями Big Data (великі дані) та керуванням потоками. Такі інтегровані підходи дозволяють відслідковувати стан обладнання у режимі реального часу та здійснювати ранню діагностику несправностей. Дослідження [9] демонструє застосування машинного навчання для моделювання поведінки гетерогенних термічних каталізаторів. Результати свідчать про можливість передбачення змін активності таких каталізаторів на основі історичних даних та експериментальних дослідів, що відкриває нові підходи до планування їх технічного обслуговування. У роботі [10] розглядаються методи використання ШІ для оптимізації складу сировини та параметрів реакцій у хімічній технології полімерів. Автори доводять ефективність різноманітних алгоритмів та глибинного навчання для багатопараметричної оптимізації, яка традиційно потребує значних часових витрат. Більшість авторів погоджуються, що повністю автоматизоване управління складними хімічними процесами наразі є частково досяжним, але водночас перспективи розвитку цього напрямку є вкрай високою.

Окрім того, виникають нові напрями досліджень – наприклад, поєднання ШІ з цифровими «двійниками» хімічних установок [11] або розробка систем підтримки прийняття інженерних рішень на основі обробки великих потоків даних у реальному часі [12]. Чимало дослідників розглядають перспективи гібридного моделювання низки хімічних процесів, поєднуючи наукові знання та аналітику даних. Зокрема, ШІ активно залучають у якості інструменту машинного навчання (МН), коли МН доповнює науку, а наука доповнює МН. У роботі [13] розглянуто застосування МН задля покращення науково обґрунтованих моделей при прямому послідовному і паралельному гібридному моделюванні та їхніх комбінаціях, зворотному моделюванні, а також кількісній оцінці невизначеності у технологічному процесі і виявленні керівних рівнянь моделі процесу.

Доцільно окремо розглянути, як ШІ наразі використовується задля оптимізації енергоспоживання у хімічних технологіях. Зокрема алгоритми глибинного навчання вже активно використовують для побудови моделей споживання енергії та виявлення неефективних ділянок у процесах дистиляції та ректифікації. Це дозволяє дуже суттєво знижувати витрату греючої пари та електроенергії на виробництвах типової топології технологічних зв'язків. Більш детальне дослідження [14] демонструє, яким чином МН

впроваджується для оптимізації процесів виробництва біопалива. Автори показують, що інтелектуальні моделі дозволяють підбирати оптимальні умови переробки біомаси, знижуючи витрати каталізаторів та покращуючи вихід цільових продуктів. У статті [15] докладно описані системи підтримки прийняття рішень у хімічній інженерії на основі ШІ. Дослідники розглядають розробку гібридних експертних систем, які поєднують класичні бази знань з адаптивними алгоритмами машинного навчання. Такий підхід спрощує роботу операторів складних виробництв і мінімізує ймовірність помилок.

Ще один важливий напрямок – використання ШІ задля прогнозування корозії обладнання. У роботі [16] подано результати використання моделі на основі ШІ, яка аналізує експлуатаційні параметри трубопроводів та реакторів і визначає ймовірність пошкоджень. На практиці це дозволяє ефективно планувати профілактичні ремонти та легко уникати аварій. У дослідженні [17] показано, як інтелектуальні алгоритми вже сьогодні застосовуються для аналізу параметрів мембранних процесів очистки стічних вод. Автори показують, як ШІ здатен адаптовувати роботу мембранних установок до змін у складі забруднювачів, що є особливо актуальним для низки хімічних виробництв із нерівномірним навантаженням.

Не менш цікаві результати наведено у роботі [18], де автори використовують штучний інтелект для виявлення відхилень у хімічних процесах на ранніх стадіях. Це дослідження демонструє ефективність нейронних мереж для задач із прогнозування аварійних ситуацій, що підвищує безпеку виробництв. Сучасна література підкреслює важливість застосування інтелектуальних алгоритмів для проектування нових хімічних сполук та матеріалів. У статті [19] розглядаються приклади використання глибинного навчання для передбачення властивостей пористих матеріалів і каталізаторів, що може суттєво прискорити розробку більш просунутих технологій їх синтезу. Особливої уваги заслуговує комплексне дослідження [20], у якому описується спосіб поєднання методів машинного навчання із роботизованими лабораторіями. Такий підхід забезпечує майже повністю автономне проведення хімічних дослідів, швидкий аналіз отримуваних даних та самокорекцію експериментальних умов. У майбутньому це відкриває горизонти для проведення складних, небезпечних та навіть просто тривалих експериментів без участі людини, й демонструє перспективу повної автоматизації досліджень у галузі хімічної інженерії та проектування процесів і апаратів хімічної технології.

Підсумовуючи усе вищенаведене, слід зазначити, що домінуюча частка сучасної наукової літератури у різних країнах світу здебільшого акцентує на важливості синергії між класичними методами та новими інтелектуальними алгоритмами. Очевидно, що різні способи впровадження штучного інтелекту у якості повноцінного інструмента для задач хімічної інженерії сприятимуть розв'язанню цілої низки традиційних проблем, пов'язаних з моделювання, оптимізації та управління технологічними процесами. Це формує наукове підґрунтя для подальших експериментів та прикладних досліджень та розробки нових програмних і апаратних рішень. Варто відзначити ключову особливість взаємодії – спрощення відбувається на кожному етапі: постановка задачі, відтворення, імітація або проведення експерименту, оптимізація цілей та засобів дослідження, аналіз отриманих результатів, формування висновків та визначення перспектив дослідження.

**Застосування ШІ у хімічній інженерії.** З огляду на наведену теоретичну базу, розглянемо конкретні приклади використання методів штучного інтелекту у хімічній інженерії. Сфери застосування охоплюють математичне моделювання, оптимізацію процесів, автоматизоване управління, прогнозування властивостей матеріалів/речовин, підтримку прийняття рішень та інші прикладні задачі, критично важливі для сучасного інженерно-технологічного середовища. Здійснимо класифікацію способів застосування ШІ як наукового інструменту, придатного до обробки значних масивів інформації.

### 1. Застосування ШІ у математичному та імітаційному моделюванні.

Традиційні підходи до математичного моделювання у хімічній інженерії зазвичай вимагають точного опису фізико-хімічних закономірностей, а також спрощення складних багатофакторних систем. ШІ дозволяє побудувати так звані моделі «чорної скриньки», які не потребують явного опису усіх залежностей, а натомість навчаються на основі експериментальних або історичних даних.

Наприклад, у дослідженні [21] було реалізовано модель на основі штучних нейронних мереж для моделювання тепломасообміну у реакторі з псевдозрідженим шаром. Порівняно з традиційними методами, модель ШІ демонструє вищу точність при зміні входних параметрів та скорочення часу моделювання у 3–5 разів, що є безсумнівним показником значного покращення продуктивності роботи проектувальника. Ще одним доволі цікавим прикладом є використання гібридних моделей, які поєднують фізико-хімічні рівняння з навчанням на масивах даних. У роботі [22] описується застосування таких моделей для прогнозування поведінки ферментативних біореакторів. На практиці це дозволить отримувати точні прогнози навіть при нестандартних режимах роботи цих реакторів та за умов відсутності повної інформації про кінетику.

### 2. Оптимізація технологічних процесів.

ШІ є особливо ефективним для багатопараметричної оптимізації, де усі класичні методи потребують численних ітерацій. Наприклад, при виробництві аміаку ключовим завданням є одночасна оптимізація температури, тиску, співвідношення реагентів та швидкості потоку. Водночас, ШІ не відчуває суттєвих обмежень при зведенні подібних математичних систем, й успішно демонструє збіжність розв'язків навіть для складних багатокомпонентних сумішей та азеотропних систем.

У дослідженні [23] використано генетичні алгоритми у поєднанні з нейронними мережами для пошуку оптимальних умов реакції Габера-Боша. В результаті досягнуто збільшення виходу аміаку на 7,5 % при зменшенні енерговитрат на 4 %. Такий підхід був би неможливим у межах лише класичного термодинамічного аналізу (або на це б знадобилися роки напруженої роботи цілої групи фахівців). Ще один доволі виразний приклад – оптимізація процесів полімеризації. У роботі [24] показано, як алгоритми глибокого навчання дозволяють передбачити ключові властивості полімеру (в'язкість і молекулярна маса) на основі варіацій у складі суміші та температурному режимі. Це дозволяє розробити нові рецептури без тривалих серій лабораторних експериментів.

### 3. Прогнозування технічного стану обладнання.

Однією з критичних проблем хімічної промисловості є адекватне передбачення відмов технічного обладнання – від доволі недорогих насосів і компресорів до більш коштовних реакторів та теплообмінників. ШІ тут може застосовуватися для всебічного аналізу вібраційних, температурних, акустичних та інших типів впливів.

У роботі [25] запропоновано застосування рекурентних нейронних мереж для прогнозування відмов пластинчастих теплообмінників. Модель дозволяє з надвисокою точністю визначити ймовірність несправності обладнання вже за декілька діб до його фактичного виходу з ладу. Це не просто надало змогу скоротити кількість аварійних зупинок підприємства, але й дало можливість оцінювати стан теплообмінників у будь-які моменти часу при їх роботі. Інший цікавий приклад – використання спеціальних класифікаційних моделей для виявлення відхилень у режимах компресорних станцій [26]. Автори дослідження відзначають, що навчання моделей відбувається без потреби у реалізації детальної фізичної моделі об'єкта, лише на основі потоків процесних даних.

#### 4. Автоматизоване управління процесами.

III також відіграє ключову роль у побудові інтелектуальних систем управління. Традиційні підходи, що базуються на ПІД-регуляторах, мають обмежену гнучкість й не враховують складні взаємозв'язки між змінними. Алгоритми машинного навчання – зокрема Q-learning та глибоке навчання з підкріпленням (Deep RL), відкривають нові підходи до адаптивного управління.

У роботі [27] продемонстровано впровадження системи управління для реактора полімеризації, що ґрунтується на Deep RL. Система самостійно навчалася досягати усіх заданих властивостей продукту, коригуючи параметри у відповідь на низку зовнішніх збурень. Такий підхід забезпечив вищу стабільність процесу та точніше дотримання характеристик якості продукції. У свою чергу, у парових установках, як показує [28], використання адаптивних нейромережевих регуляторів дозволяє стабілізувати низку параметрів середовища при мінливому складі сировини. Порівняно з усіма класичними схемами, похибка регулювання зменшилась на 25 %, що є критичним для забезпечення безпеки та енергоефективності.

#### 5. Розробка нових матеріалів та сполук.

Окрему категорію становлять задачі хемоінформатики, зокрема проєктування нових молекул, прогнозування їх властивостей, синтетичних шляхів і стабільності. Тут III використовується у поєднанні з квантовою хімією та вже відомими бібліотеками структурних даних.

У роботі [29] описано застосування глибинних генеративних моделей для пошуку нових антибактеріальних сполук. Хоча дослідження виконано для фармацевтики, алгоритми аналогічного класу активно застосовуються й у проєктуванні каталітичних матеріалів, поверхнево-активних речовин та нових полімерів у хімічній інженерії. Крім того, заслуговує уваги проєкт Materials Genome Initiative, у межах якого III активно й цілеспрямовано використовується для передбачення властивостей матеріалів на основі їхньої молекулярної структури та фізико-хімічних характеристик [30]. Застосування таких підходів скорочує шлях від ідеї до готового матеріалу з кількох років до кількох місяців, фактично повторює, на сучасний лад, винаходячи науковий підхід.

#### 6. Поєднання III та числових методів у хімічній інженерії.

Числові методи залишаються основою аналітичної частини хімічної інженерії – вони широко застосовуються для розв'язання диференціальних рівнянь, моделювання теплопереносу, масопереносу, хімічної кінетики. Проте багато типових задач, особливо обернені або мультифакторні, мають високу обчислювальну складність та вимагають значних ресурсів. У таких випадках III не замінює числові методи, а просто ефективно їх доповнює.

У роботі [31] продемонстровано, як нейронні мережі використовуються задля прискорення розрахунків при розв'язанні задач теплопереносу добре відомим методом скінченних різниць. Після навчання на масиві числових розв'язків, модель III змогла обчислювати розподіл температури у хімічному реакторі з точністю до 98% порівняно з класичним методом, але вдесятеро швидше.

Інший підхід – використання III для оцінки параметрів моделей, які не можна виміряти безпосередньо. Наприклад, в задачах масопереносу у пористих середовищах, як описано у дослідженні [32], машинне навчання дозволяє апроксимувати коефіцієнти дифузії за непрямыми експериментальними спостереженнями, що значно спрощує як ідентифікацію моделей без необхідності складних експериментів, так і повторюваність таких експериментів.

Цікавою є й робота [33], у якій з нейромережею поєднано метод Монте-Карло, спрямований на розв'язання задач хімічної кінетики. Замість багаторазових запусків

обчислень, модель навчається на обмеженій вибірці й забезпечує прогноз із тією самою точністю, що й повний стохастичний розрахунок. Це відкриває шлях до аналізу різних динамічних систем у реальному часі. Крім того, алгоритми ШІ застосовують як заміну або доповнення до класичних оптимізаційних чисельних методів (градієнтних, квазі-ньютонівських, симплексних). Так, у дослідженні [34] показано, що поєднання низки генетичних алгоритмів з чисельним розв'язанням рівнянь реакційного процесу може дозволити знайти глобальний оптимум там, де традиційні методи завжди «застрягають» у локальних мінімумах.

#### 7. Інтеграція хіміко-технологічних систем із використанням ШІ.

Сучасні хімічні виробництва – це складні багаторівневі системи, що включають технологічне, енергетичне, логістичне та інформаційне середовища. Завдання інтеграції таких систем передбачає координацію численних підсистем у режимі реального часу. ШІ є ключовим інструментом у цій інтеграції. Дедалі більше дослідників зводять усе до концепції «розумного заводу», де усі компоненти – від датчиків до способу планування виробничого графіку – пов'язані через єдину платформу з використанням ШІ. Ті самі алгоритми оптимізують завантаження обладнання, черговість технологічних операцій та розподіл енергетичних потоків.

ШІ та симуляційне програмне забезпечення широко застосовується у інтеграції процесів промислових виробництв: починаючи від простої процесної оптимізації без встановлення цільової функції, і завершуючи повноцінними схемами реконструкції на базі прийомів пінч-проекування. Наприклад, автором дослідження [35] пропонується новий інструмент моделювання для пінч-інтеграції теплообмінників і теплових насосів для різних прикладних задач промисловості. Він має весь типовий набір функцій інших програмних застосунків для обрахунку пінч-інтеграції, але здатен швидше генерувати якісні альтернативні схеми.

Крім того, гарним прикладом є застосування мультиагентних систем (MAS), які моделюють взаємодію незалежних підсистем (реакторів, теплообмінників, транспорту) в умовах загальних обмежень. У роботі [36] описано, як такі системи з використанням машинного навчання координують роботу підприємства в умовах динамічних змін у попиті, вартості енергоносіїв та під час логістичних збоїв. Також вкрай перспективним є поєднання цифрових двійників з інтелектуальними системами управління. У статтях закордонних авторів дедалі частіше зустрічаються дослідження цифрових двійників технологічних комплексів, які здатні у режимі реального часу аналізувати процеси й моделювати сценарії, передбачаючи можливі критичні ситуації.

Нарешті, інтеграція можлива і на рівні управління персоналом та різних щаблях технічного обслуговування. У дослідженні [37] демонструється, що сучасні системи планування ремонтів, які враховують прогнози відмов обладнання, здатні знизити час простою установок на 35 %. ШІ тут виконує роль зв'язуючої ланки між інженерними, логістичними та адміністративними блоками підприємства.

Отже, ШІ є не просто інструментом розв'язання окремих задач, а ядром нової архітектури управління хіміко-технологічними системами, що забезпечує адаптивність, прозорість та масштабованість на всіх рівнях.

**Обговорення результатів.** Проведений огляд та аналіз конкретних прикладів застосування штучного інтелекту у хімічній інженерії та промисловому виробництві засвідчують глибоку трансформацію галузі під впливом усіх сучасних інформаційних технологій. Результати аналізу дозволяють сформулювати декілька ключових тез щодо переваг, обмежень та напрямів подальшого розвитку інтеграції ШІ у виробництво та хімічно-технологічні системи.

1. Штучний інтелект як засіб подолання обмежень традиційного інженерного аналізу. Класичні числові методи в хімічній інженерії й досі залишаються потужним інструментом розв'язання диференціальних рівнянь, оптимізаційних задач та побудови математичних моделей, однак їх застосування часто ускладнене високою складністю процесів, нестачею точних фізичних даних або необхідністю обробки великих масивів змінних параметрів. У таких випадках інтелектуальні алгоритми машинного навчання демонструють здатність виявляти закономірності, які важко виразити аналітично, та ефективно апроксимувати їх у вигляді складних функцій, придатних для сприйняття. Використання ШІ для прогнозування поведінки систем (наприклад, з процесами теплопереносу або масообміну) не лише пришвидшує процеси моделювання, але й робить їх доступними для систем управління у реальному часі. Це підтверджують приклади із застосуванням нейромережових моделей у симуляціях псевдозріджених шарів, реакторів, мембранних установок тощо.

2. Ефективність гібридних рішень: інтеграція фізичних моделей і ШІ. Практичні кейси демонструють, що найефективнішими є гібридні системи, які вдало поєднують переваги обох підходів – традиційного математичного апарату та адаптивності машинного навчання. Такі системи не лише вчаться на емпіричних даних, але й зберігають фундаментальну фізичну інтерпретацію процесів. Тож забезпечується як точність, так і стабільність моделей, що критично важливо для впровадження у технологічний цикл. Цей підхід дозволяє масштабувати рішення на нові об'єкти з мінімальними витратами на повторне моделювання та адаптацію алгоритмів.

3. Інтелектуальна автоматизація як основа майбутніх технологічних платформ. Розвиток цифрових двійників, мультиагентних систем, адаптивних регуляторів, а також предиктивного технічного обслуговування формує основу для так званих «розумних заводів» (smart manufacturing). У цих платформах ШІ забезпечує інтеграцію окремих функціональних блоків у єдину самокеровану систему, яка цілком здатна аналізувати та передбачати зміну технологічних параметрів, самостійно змінювати режими роботи для досягнення оптимуму, формувати рекомендації для персоналу або діяти автономно й інтегрувати виробничі, енергетичні та логістичні ланки в реальному часі. Результати показують, що в умовах високої динаміки зовнішнього середовища (попит, перебої з постачанням, коливання цін на енергоносії) такі системи здатні забезпечити гнучкість і стабільність, недостижні для традиційних методів управління.

4. Вразливі місця. Попри значний потенціал, практичне впровадження засобів ШІ до галузі хімічної інженерії стикається з низкою об'єктивних викликів:

- якість і доступність даних – інтелектуальні моделі є чутливими до повноти, точності та релевантності навчального набору, відсутність якісних даних легко знижує надійність прогнозів;

- проблема «чорної скриньки» – більшість сучасних моделей ШІ досить погано інтерпретуються, що ускладнює їх валідацію та впровадження у критичні технології;

- інтеграція до існуючої інфраструктури – старі технологічні лінії досить часто просто не обладнані необхідними сенсорами та інтерфейсами для взаємодії з сучасними інтелектуальними системами;

- безпека та етика – розробка систем, що приймають рішення без участі людини, вимагає чіткого регулювання, сертифікації та дотримання етичних принципів, які ще не унормовані на законодавчому чи галузевому рівні ані в Україні, ані за кордоном.

Усе це вимагає від дослідників не лише технічної компетентності, але й доволі усвідомленого міждисциплінарного підходу з залученням фахівців із інформаційних технологій (роботи з великими даними), автоматизації, енергетики, управління тощо.

5. Перспективи розвитку. З огляду на глобальні тренди, можна очікувати:

- зростання ролі інтерпретованого ШІ (Explainable AI), що дасть людям змогу глибше аналізувати логіку рішень моделей;
- інтеграцію ШІ з квантовими обчисленнями для розв’язання задач, недоступних більшості класичних методів;
- впровадження роботизованих систем з ШІ у дослідницькі лабораторії, що ледь не повністю автоматизує цикли досліджень та виведення нових продуктів на ринок;
- розвиток відкритих промислових платформ, де різні моделі «виробничих» ШІ будуть доступні через хмарні сервіси й легко інтегруватимуться на підприємствах будь-якого рівня.

### **Висновки**

Завдяки гнучкості та здатності до навчання, ШІ стає невід’ємним інструментом інженерів-хіміків, особливо в умовах цифрової трансформації промисловості. Водночас залишається актуальним завдання забезпечення прозорості, інтерпретованості моделей та гарантій безпеки при їх практичному впровадженні. Вивчення прикладних кейсів демонструє, що штучний інтелект у хімічній інженерії вже досить давно перейшов від етапу теоретичних досліджень до стадії практичного застосування. Алгоритми ШІ не просто гарно інтегруються в усі рівні – від планування й проектування до моніторингу та експлуатації – але й дозволяють швидко і точно моделювати складні процеси, гнучко адаптивно оптимізувати параметри виробництва, вчасно прогнозувати технічний стан обладнання, автоматизувати прийняття рішень та експериментальні дослідження, легко проектувати нові сполуки з заданими властивостями, а також оптимізувати розрахунки.

Інтелектуальні алгоритми не тільки не витісняють числові методи, а навпаки – розширюють їх застосування, додаючи гнучкості, швидкості та можливості працювати з неповними або «зашумленими» даними. Інтеграція ШІ з класичними інструментами забезпечує підвищення точності, адаптивності та ефективності інженерних рішень у складних та динамічних виробничих умовах. Водночас впровадження ШІ актуалізує потребу у високоякісних даних, чітко вибудованих алгоритмах та міждисциплінарній співпраці. Конкурентоспроможність хімічної промисловості вже досить скоро почне визначатися рівнем глобального використання технологій на базі ШІ.

### **Література**

1. Laska M., Karwala I. Artificial Intelligence in the Chemical Industry – Risks and Opportunities. *Scientific Papers of Silesian University of Technology. Organization and Management Series*. 2023. No. 172. P. 403–416.
2. Rahmani M. Artificial Intelligence in Chemical Engineering and Hydrocarbon Industry, Challenges and Opportunities. *The 18th Iranian National Congress of Chemical Engineering*. Tabriz, Iran, 2024. 15 p.
3. Namdeti R. Artificial Intelligence in Chemical Engineering: Past, Present, and Future Perspectives. *Journal of Chemical Health Risks*. 2023. Vol. 13, No. 6. P. 2051–2061.
4. Zhang D., del Río Chanona E. A. Machine Learning and Hybrid Modelling for Reaction Engineering: Theory and Applications. *Theoretical and Computational Chemistry Series*. No. 26. The Royal Society of Chemistry, 2024. 440 p.
5. Гузьова І. О., Нагурський А. О., Атаманюк В. М. Чисельне моделювання хіміко-технологічних процесів з використанням моделюючої програми ChemCad : навч. посіб. Львів : Видавництво Львівської політехніки, 2021. 136 с.
6. Веретюк О., Андрущак Н. Методи та моделі машинного навчання в хімії та матеріалознавстві на прикладі експерименту з дифузією розчиненої речовини. *Комп’ютерні системи проектування. Теорія і практика*. 2024. Вип. 6, № 1. С. 68–78.

7. Dutta D., Upreti S. R. Artificial Intelligence-Based Process Control in Chemical, Biochemical, and Biomedical Engineering. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*. 2021. Vol. 99. P. 2467–2504.
8. Shen R., Su W. A Review of the Applications of Artificial Intelligence in the Process Analysis and Optimization of Chemical Products. *Pharmaceutical Fronts*. 2023. Vol. 5. P. 219–226.
9. Roh J., Park H., Kwon H. et al. Interpretable Machine Learning Framework for Catalyst Performance Prediction and Validation with Dry Reforming of Methane. *Applied Catalysis B: Environmental*. 2023. Vol. 343. 123454.
10. Srivastava S., Varshney B., Sharma V. P. et al. Applications of Artificial Intelligence in Polymer Manufacturing. *Application of Artificial Intelligence in New Materials Discovery*. *Materials Research Foundations*. 2023. Vol. 147. P. 105–122.
11. Lu Y., Liu C., I-Kai Wang K. et al. Digital Twin-Driven Smart Manufacturing: Connotation, Reference Model, Applications and Research Issues. *Robotics and Computer-Integrated Manufacturing*. 2020. Vol. 61. 101837.
12. Wang J., Xu C., Zhang J. et al. Big Data Analytics for Intelligent Manufacturing Systems: A Review. *Journal of Manufacturing Systems*. 2022. Vol. 62. P. 738–752.
13. Sharma N., Liu Y. A. A Hybrid Science-Guided Machine Learning Approach for Modeling Chemical Processes: A Review. *AIChE Journal*. 2022. Vol. 68, article 17609.
14. Aghbashlo M., Peng W., Tabatabaei M. et al. Machine Learning Technology in Biodiesel Research: A Review. *Progress in Energy and Combustion Science*. 2021. Vol. 85. 100904.
15. Cauvin S., Celse B. CHEM: Advanced Decision Support Systems for Chemical/Petrochemical Process Industries. *Computer Aided Chemical Engineering*. 2004. Vol. 18. P. 1027–1032.
16. Ruiz D., Casas A., Escobar C. A. et al. Advanced Machine Learning Techniques for Corrosion Rate Estimation and Prediction in Industrial Cooling Water Pipelines. *Sensors*. 2024. Vol. 24, No. 11. 3564.
17. Abuwatfa W. H., AlSawaftah N., Darwish N. et al. A Review on Membrane Fouling Prediction Using Artificial Neural Networks (ANNs). *Membranes*. 2023. Vol. 13, No. 7. 685.
18. Ukawa C., Yamashita Y. Fault Detection and Diagnosis for Chemical Processes Based on Deep Neural Networks with Continuous Wavelet Transform. *Computer Aided Chemical Engineering*. 2023. Vol. 52. P. 1681–1686.
19. Jablonka K. M., Ongari D., Moosavi S. M. et al. Big-Data Science in Porous Materials: Materials Genomics and Machine Learning. *Chemical Reviews*. 2020. Vol. 49, No. 22. P. 8066–8129.
20. Wang G., Xuefei W., Bo X. et al. Machine Learning in Unmanned Systems for Chemical Synthesis. *Molecules*. 2023. Vol. 28, No. 5. 2232.
21. Wang C., Wang W., Sun Y. et al. Hybrid Modeling of Methanol to Olefin Fluidized Bed Reactor Corrected by Artificial Neural Network. *Chemical Engineering Science*. 2025. Vol. 307. 121323.
22. Albino M., Gargalo C. L., Nadal-Rey G. et al. Hybrid Modeling for On-Line Fermentation Optimization and Scale-Up: A Review. *Processes*. 2024. Vol. 12, No. 1635.
23. Liu L., Tan F., Wu Z. et al. Combining Genetic Algorithm and Deep Learning to Optimize a Chemical Kinetic Mechanism of Ammonia Under High Pressure. *Fuel*. 2024. Vol. 360. 130508.
24. Pai S. M., Shah K. A., Sunder S. et al. Machine Learning Applied to the Design and Optimization of Polymeric Materials: A Review. *Next Materials*. 2025. Vol. 7. 100449.

25. Ilyunin O., Bezsonov O., Rudenko S. et al. The Neural Network Approach for Estimation of Heat Transfer Coefficient in Heat Exchangers Considering the Fouling Formation Dynamic. *Thermal Science and Engineering Progress*. 2024. Vol. 51. 102615.
26. Patil A., Soni G., Prakash A. A BMFO-KNN Based Intelligent Fault Detection Approach for Reciprocating Compressor. *International Journal of System Assurance Engineering and Management*. 2021. Vol. 13. P. 797–809.
27. Singh V., Kodamana H. Reinforcement Learning Based Control of Batch Polymerisation Processes. *IFAC-PapersOnLine*. 2020. Vol. 53, Iss. 1. P. 667–672.
28. Yu X., Yang J., Meng X. et al. Event-Triggered Adaptive NN Practical Finite-Time Control with its Application to MPCVD Reactors. *Journal of the Franklin Institute*. 2023. Vol. 360, Iss. 3. P. 1870–1883.
29. Stokes J. M., Yang K., Swanson K. et al. A Deep Learning Approach to Antibiotic Discovery. *Cell*. 2020. Vol. 180, Iss. 4. P. 688–702.
30. Jain A., Ong S. P., Hautier G. et al. Commentary: The Materials Project: A Materials Genome Approach to Accelerating Materials Innovation. *APL Materials*. 2013. Vol. 1, No. 1. 011002.
31. Alzaid S. S., Alkahtani B. S. T., Chandan K. et al. Transient Thermal Distribution in a Wavy Fin Using Finite Difference Approximation Based Physics Informed Neural Network. *Computer Modeling in Engineering and Sciences*. 2024. Vol. 141, Iss. 3. P. 2555–2574.
32. Wang H., Yin Y., Hui X. Y. et al. Prediction of Effective Diffusivity of Porous Media Using Deep Learning Method Based on Sample Structure Information Self-Amplification. *Energy and AI*. 2020. Vol. 2. 100035.
33. Lin Y. T., Feng S., Hlavacek W. Scaling Methods for Accelerating Kinetic Monte Carlo Simulations of Chemical Reaction Networks. *The Journal of Chemical Physics*. 2019. Vol. 150. 244101.
34. Faber R., Arellano-Garcia H., Wozny G. A Hybrid Optimization Approach to Parameter Estimation. *Computer Aided Chemical Engineering*. 2007. Vol. 24. P. 75–80.
35. Atuonwu J. C. A Simulation Tool for Pinch Analysis and Heat Exchanger/Heat Pump Integration in Industrial Processes: Development and Application in Challenge-Based Learning. *Education for Chemical Engineers*. 2025. Vol. 52. P. 141–150.
36. Vrba P. Review of Industrial Applications of Multi-Agent Technologies. *Studies in Computational Intelligence*. 2013. Vol. 472. P. 327–338.
37. Aminzadeh A., Karganroudi S. S., Majidi S. et al. A Machine Learning Implementation to Predictive Maintenance and Monitoring of Industrial Compressors. *Sensors*. 2025. Vol. 25, No. 4. 1006.

#### Bibliography (transliterated)

1. Laska M., Karwala I. Artificial Intelligence in the Chemical Industry – Risks and Opportunities. *Scientific Papers of Silesian University of Technology. Organization and Management Series*. 2023. No. 172. P. 403–416.
2. Rahmani M. Artificial Intelligence in Chemical Engineering and Hydrocarbon Industry, Challenges and Opportunities. *The 18th Iranian National Congress of Chemical Engineering*. Tabriz, Iran, 2024. 15 p.
3. Namdeti R. Artificial Intelligence in Chemical Engineering: Past, Present, and Future Perspectives. *Journal of Chemical Health Risks*. 2023. Vol. 13, No. 6. P. 2051–2061.
4. Zhang D., del Río Chanona E. A. Machine Learning and Hybrid Modelling for Reaction Engineering: Theory and Applications. Theoretical and Computational Chemistry Series. No. 26. *The Royal Society of Chemistry*, 2024. 440 p.

5. Huzova I. O., Nahurskyi A. O., Atamaniuk V. M. Chyselne modeliuvannia khimiko-tehnologichnykh protsesiv z vykorystanniam modeliuiuchoi prohramy ChemCad : navch. posib. Lviv : Vydavnytstvo Lvivskoi politekhniky, 2021. 136 p.
6. Veretiuk O., Andrushchak N. Metody ta modeli mashynnoho navchannia v khimii ta materialoznavstvi na prykladi eksperymentu z dyfuziieiu rozchynenoï rehovyny. *Kompiuterni systemy proektuvannia. Teoriia i praktyka*. 2024. Vyp. 6, No. 1. P. 68–78.
7. Dutta D., Upreti S. R. Artificial Intelligence-Based Process Control in Chemical, Biochemical, and Biomedical Engineering. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*. 2021. Vol. 99. P. 2467–2504.
8. Shen R., Su W. A Review of the Applications of Artificial Intelligence in the Process Analysis and Optimization of Chemical Products. *Pharmaceutical Fronts*. 2023. Vol. 5. P. 219–226.
9. Roh J., Park H., Kwon H. et al. Interpretable Machine Learning Framework for Catalyst Performance Prediction and Validation with Dry Reforming of Methane. *Applied Catalysis B: Environmental*. 2023. Vol. 343, Article 123454.
10. Srivastava S., Varshney B., Sharma V. P. et al. Applications of Artificial Intelligence in Polymer Manufacturing. *Application of Artificial Intelligence in New Materials Discovery. Materials Research Foundations*. 2023. Vol. 147. P. 105–122.
11. Lu Y., Liu C., I-Kai Wang K. et al. Digital Twin-Driven Smart Manufacturing: Connotation, Reference Model, Applications and Research Issues. *Robotics and Computer-Integrated Manufacturing*. 2020. Vol. 61, Article 101837.
12. Wang J., Xu C., Zhang J. et al. Big Data Analytics for Intelligent Manufacturing Systems: A Review. *Journal of Manufacturing Systems*. 2022. Vol. 62. P. 738–752.
13. Sharma N., Liu Y. A. A Hybrid Science-Guided Machine Learning Approach for Modeling Chemical Processes: A Review. *AIChE Journal*. 2022. Vol. 68, Article 17609.
14. Aghbashlo M., Peng W., Tabatabaei M. et al. Machine Learning Technology in Biodiesel Research: A Review. *Progress in Energy and Combustion Science*. 2021. Vol. 85, Article 100904.
15. Cauvin S., Celse B. CHEM: Advanced Decision Support Systems for Chemical/Petrochemical Process Industries. *Computer Aided Chemical Engineering*. 2004. Vol. 18. P. 1027–1032.
16. Ruiz D., Casas A., Escobar C. A. et al. Advanced Machine Learning Techniques for Corrosion Rate Estimation and Prediction in Industrial Cooling Water Pipelines. *Sensors*. 2024. Vol. 24, No. 11, Article 3564.
17. Abuwatfa W. H., AlSawaftah N., Darwish N. et al. A Review on Membrane Fouling Prediction Using Artificial Neural Networks (ANNs). *Membranes*. 2023. Vol. 13, No. 7, Article 685.
18. Ukawa C., Yamashita Y. Fault Detection and Diagnosis for Chemical Processes Based on Deep Neural Networks with Continuous Wavelet Transform. *Computer Aided Chemical Engineering*. 2023. Vol. 52. P. 1681–1686.
19. Jablonka K. M., Ongari D., Moosavi S. M. et al. Big-Data Science in Porous Materials: Materials Genomics and Machine Learning. *Chemical Reviews*. 2020. Vol. 49, No. 22. P. 8066–8129.
20. Wang G., Xuefei W., Bo X. et al. Machine Learning in Unmanned Systems for Chemical Synthesis. *Molecules*. 2023. Vol. 28, No. 5, Article 2232.
21. Wang C., Wang W., Sun Y. et al. Hybrid Modeling of Methanol to Olefin Fluidized Bed Reactor Corrected by Artificial Neural Network. *Chemical Engineering Science*. 2025. Vol. 307, Article 121323.
22. Albino M., Gargalo C. L., Nadal-Rey G. et al. Hybrid Modeling for On-Line Fermentation Optimization and Scale-Up: A Review. *Processes*. 2024. Vol. 12, Article 1635.

23. Liu L., Tan F., Wu Z. et al. Combining Genetic Algorithm and Deep Learning to Optimize a Chemical Kinetic Mechanism of Ammonia Under High Pressure. *Fuel*. 2024. Vol. 360, Article 130508.
24. Pai S. M., Shah K. A., Sunder S. et al. Machine Learning Applied to the Design and Optimization of Polymeric Materials: A Review. *Next Materials*. 2025. Vol. 7, Article 100449.
25. Ilyunin O., Bezsonov O., Rudenko S. et al. The Neural Network Approach for Estimation of Heat Transfer Coefficient in Heat Exchangers Considering the Fouling Formation Dynamic. *Thermal Science and Engineering Progress*. 2024. Vol. 51, Article 102615.
26. Patil A., Soni G., Prakash A. A BMFO-KNN Based Intelligent Fault Detection Approach for Reciprocating Compressor. *International Journal of System Assurance Engineering and Management*. 2021. Vol. 13. P. 797–809.
27. Singh V., Kodamana H. Reinforcement Learning Based Control of Batch Polymerisation Processes. *IFAC-PapersOnLine*. 2020. Vol. 53, Iss. 1. P. 667–672.
28. Yu X., Yang J., Meng X. et al. Event-Triggered Adaptive NN Practical Finite-Time Control with its Application to MPCVD Reactors. *Journal of the Franklin Institute*. 2023. Vol. 360, Iss. 3. P. 1870–1883.
29. Stokes J. M., Yang K., Swanson K. et al. A Deep Learning Approach to Antibiotic Discovery. *Cell*. 2020. Vol. 180, Iss. 4. P. 688–702.
30. Jain A., Ong S. P., Hautier G. et al. Commentary: The Materials Project: A Materials Genome Approach to Accelerating Materials Innovation. *APL Materials*. 2013. Vol. 1, No. 1, Article 011002.
31. Alzaid S. S., Alkahtani B. S. T., Chandan K. et al. Transient Thermal Distribution in a Wavy Fin Using Finite Difference Approximation Based Physics Informed Neural Network. *Computer Modeling in Engineering and Sciences*. 2024. Vol. 141, Iss. 3. P. 2555–2574.
32. Wang H., Yin Y., Hui X. Y. et al. Prediction of Effective Diffusivity of Porous Media Using Deep Learning Method Based on Sample Structure Information Self-Amplification. *Energy and AI*. 2020. Vol. 2, Article 100035.
33. Lin Y. T., Feng S., Hlavacek W. Scaling Methods for Accelerating Kinetic Monte Carlo Simulations of Chemical Reaction Networks. *The Journal of Chemical Physics*. 2019. Vol. 150, Article 244101.
34. Faber R., Arellano-Garcia H., Wozny G. A Hybrid Optimization Approach to Parameter Estimation. *Computer Aided Chemical Engineering*. 2007. Vol. 24. P. 75–80.
35. Atuonwu J. C. A Simulation Tool for Pinch Analysis and Heat Exchanger/Heat Pump Integration in Industrial Processes: Development and Application in Challenge-Based Learning. *Education for Chemical Engineers*. 2025. Vol. 52. P. 141–150.
36. Vrba P. Review of Industrial Applications of Multi-Agent Technologies. *Studies in Computational Intelligence*. 2013. Vol. 472. P. 327–338.
37. Aminzadeh A., Karganroudi S. S., Majidi S. et al. A Machine Learning Implementation to Predictive Maintenance and Monitoring of Industrial Compressors. *Sensors*. 2025. Vol. 25, No. 4, Article 1006.

УДК 66.02/.03:519.7

Л. Л. Товажнянський, д-р техн. наук, професор,  
А. М. Миронов, канд .техн. наук, доцент, М. В. Ільченко, канд .техн. наук, доцент,  
М. М. Козуля, канд .техн. наук, доцент, В. К. Горбунов, студент

### **ШТУЧНИЙ ІНТЕЛЕКТ ЯК ІНСТРУМЕНТ ХІМІЧНОЇ ІНЖЕНЕРІЇ: АНАЛІЗ, МОДЕЛЮВАННЯ, ЧИСЛОВІ МЕТОДИ, ОПТИМІЗАЦІЯ, ІНТЕГРАЦІЯ**

У статті розглянуто сучасні напрями застосування штучного інтелекту (ШІ) у хімічній інженерії як потужного інструмента для вирішення широкого спектра дослідницьких та інженерно-технологічних задач. Зроблено акцент на системній інтеграції ШІ з числовими методами, математичним моделюванням, оптимізацією технологічних процесів та автоматизованим управлінням промисловим обладнанням. Здійснено огляд сучасної літератури, який підтверджує актуальність теми, зростання наукового інтересу до машинного навчання та глибоких нейронних мереж у прикладних хімічних задачах, а також зміщення парадигми моделювання – від аналітичних рівнянь до гібридних, інтерпретованих моделей, що враховують обидві методології. Наведено численні приклади ефективного використання ШІ для побудови імітаційних моделей, розв’язання обернених задач, передбачення властивостей матеріалів, оптимізації сировинного складу та прогнозування технічного стану обладнання. Показано, що нейромережеві моделі здатні у десятки разів прискорити чисельні розрахунки та підвищити їх точність.

Окрему увагу приділено концепції «розумного заводу» – як нового рівня інтеграції виробничих систем, в якому ШІ виконує роль координаційного центру між логістичними, енергетичними та технологічними підсистемами. Також проаналізовано здобутки у галузі створення цифрових двійників хімічних установок, мультиагентних систем і платформ підтримки прийняття рішень у режимі реального часу. Встановлено, що ефективність застосування ШІ значно зростає при поєднанні з класичними числовими алгоритмами. Обґрунтовано переваги гібридного підходу, при якому наукові знання доповнюють машинне навчання, а МН – компенсує недоліки фізико-хімічних моделей у випадках складних, неповних чи нестабільних вхідних даних. Виокремлено типові проблеми: недостатня інтерпретованість моделей, обмеженість доступу до якісних вхідних даних, технічні обмеження існуючих виробничих ліній та потреба в стандартизації ШІ-інструментів у критичних технологіях.

Зроблено висновок про те, що ШІ вже перейшов межу суто академічного інтересу й став рушієм глибоких трансформацій у проєктуванні, експлуатації, оптимізації й управлінні хімічними виробництвами. Акцентовано, що майбутня конкурентоспроможність хімічної інженерії залежатиме від здатності підприємств впроваджувати адаптивні, інтерпретовані та безпечні ШІ-рішення на всіх етапах життєвого циклу продукту – від ідеї до утилізації.

**Ключові слова:** штучний інтелект, хімічна інженерія, інформаційні технології, ШІ, математичне моделювання, імітаційна модель, інтеграція, оптимізація, симуляція.

L. L. Tovazhnyanskyy, A. M. Myronov, M. V. Ilchenko, M. M. Kozulia, V. K. Gorbunov

**ARTIFICIAL INTELLIGENCE AS A TOOL FOR CHEMICAL ENGINEERING:  
ANALYSIS, MODELLING, NUMERICAL METHODS, OPTIMIZATION,  
INTEGRATION**

This article explores contemporary approaches to the application of artificial intelligence (AI) in chemical engineering as a powerful tool for solving a wide range of research and industrial challenges. The paper emphasizes the systematic integration of AI with numerical methods, mathematical and simulation modeling, process optimization, and automated control of industrial systems. A comprehensive literature review confirms the high relevance of this topic and the growing scientific interest in machine learning and deep neural networks for applied chemical tasks. The paradigm of chemical process modeling is shifting from rigid analytical equations toward hybrid, interpretable AI-enhanced models. The article presents numerous real-world examples of AI being used to construct simulation models, solve inverse problems, forecast material properties, optimize feedstock composition, and predict equipment failures. Neural network models have been shown to accelerate numerical simulations by an order of magnitude while significantly improving accuracy.

Special attention is paid to the «smart factory» concept, which embodies a new level of technological integration, where AI coordinates the interaction between logistics, energy, and production subsystems. The study also highlights advancements in the creation of digital twins for chemical plants, multi-agent systems, and decision-support platforms operating in real time. It is shown that AI becomes especially effective when combined with classical numerical algorithms. The paper substantiates the benefits of the hybrid approach, where domain knowledge complements machine learning, while ML compensates for the limitations of traditional physicochemical models under conditions of incomplete or unstable input data. The study identifies key challenges in the field, such as the limited interpretability of black-box models, insufficient access to high-quality training data, outdated production infrastructure, and the absence of standardized AI protocols for critical industrial technologies.

The findings confirm that AI has moved beyond purely academic interest to become a core driver of transformation in process design, optimization, equipment monitoring, and control systems in chemical engineering. The paper concludes that the future competitiveness of the chemical industry will depend on its ability to implement adaptive, interpretable, and secure AI-driven solutions across all stages of the product lifecycle – from conceptualization to end-of-life management. These solutions offer a pathway to more sustainable, flexible, and efficient production systems in the age of digital transformation.

**Keywords:** artificial intelligence, chemical engineering, information technology, AI, mathematical modeling, simulation model, integration, optimization, simulation.