

ПРИМЕНЕНИЕ АЛГОРИТМОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ПОИСКА НОВЫХ СИСТЕМ ГЛУБОКИХ ЭВТЕКТИЧЕСКИХ РАСТВОРИТЕЛЕЙ

Лавриненко А.К., Чернышов И.Ю.

Научный руководитель – к.х.н., проф. Пидько Е.А.

(Национальный исследовательский университет ИТМО, Санкт-Петербург, Российская Федерация)

Аннотация. Глубокие эвтектические растворители являются новым перспективным классом растворителей, получающихся путём смешения двух обычно твёрдых при комнатной температуре веществ. Ключевым свойством таких систем, определяющим возможность их использования, является температура плавления, поскольку для большинства твёрдых органических веществ их смешивание не будет приводить к значительному понижению температуры. На данный момент поиск новых эвтектических систем основан на ресурсозатратном эмпирическом методе подбора. В своем исследовании мы показали возможность поиска новых эвтектических систем путем предсказания их температуры плавления с использованием алгоритмов машинного обучения, основываясь на структурах и температурах плавления исходных компонентов.

Введение. Многочисленные исследования в настоящее время посвящены решению экологических проблем, одна из которых связана с токсическим воздействием химических растворителей на окружающую среду. В последнее десятилетие новый класс экологически безопасных растворителей – глубокие эвтектические растворители – вызывает высокий интерес исследователей в различных областях науки. Такие растворители нашли широкое применение в качестве платформы доставки лекарств и растворителей для проведения органического и неорганического синтеза, для электроосаждения металлов, получения сплавов, очистки нефти, поглощения и разделения газов.

Глубокие эвтектические растворители состоят из двух или более компонентов, способных образовывать водородные связи друг с другом. Образование множественных водородных связей приводит к значительному понижению температуры плавления по сравнению с исходными компонентами. Несмотря на многочисленные исследования в области изучения и предсказания свойств глубоких эвтектических растворителей, создание новых эвтектических систем до сих пор основывается на методе эмпирического подбора. Перспективной альтернативой экспериментальному методу является предсказание эвтектической точки таких растворителей с помощью теоретического моделирования. Насколько нам известно, в литературе отсутствуют примеры универсального предсказательного метода поиска точки эвтектики, успешно применимого для глубоких эвтектических растворителей. Целью нашего исследования является анализ существующих предсказательных методов поиска точки эвтектики и выявление новых возможностей, применимых для глубоких эвтектических растворителей.

Основная часть. Наиболее релевантным методом предсказания точки эвтектики является метод, основанный на использовании модели COSMO-RS. Данная модель широко используется для предсказания фазовых диаграмм двухкомпонентных смесей. К сожалению, данный метод показал низкую предсказательную способность по отношению к глубоким эвтектическим растворителям. Лишь для 30% протестированных систем нам удалось предсказать точку эвтектики с относительной погрешностью менее 10%. Наибольшая погрешность наблюдалась для систем, содержащих в качестве донора водородной связи многоатомные спирты и сахара. Для 40% протестированных систем модель COSMO-RS оказалась непригодна, точка эвтектики не была найдена. Для таких систем в качестве донора водородной связи в основном были представлены карбоновые кислоты.

Анализ уравнения, используемого для предсказания фазовых диаграмм в COSMO-RS, показал, что ошибка может возникать в результате расчета химических потенциалов

компонентов глубоких эвтектических растворителей. Уравнение для расчета химического потенциала включает несколько эмпирических коэффициентов, которые с трудом могут описать взаимодействия множественных водородных связей.

Для увеличения предсказательной способности модели COSMO-RS мы предлагаем использование алгоритмов машинного обучения. Насколько нам известно, в литературе не представлены примеры использования алгоритмов машинного обучения для предсказания температур плавления глубоких эвтектических растворителей на значительном объеме экспериментальных данных. Известно, что температура плавления эвтектической смеси зависит от свойств исходных компонентов (коэффициент активности, энтальпия и температура плавления). Поэтому термодинамические свойства исходных компонентов, а также σ -профиль, рассчитанный в модели COSMO-RS, могут быть использованы в качестве дескрипторов для предсказания температуры плавления эвтектической смеси. Экспериментальный набор данных для 200 систем глубоких эвтектических растворителей используется для обучения модели. Алгоритмы машинного обучения позволят также исключить необходимость наличия экспериментальных энтальпий плавления исходных компонентов, которые для некоторых веществ являются труднодоступными в литературе.

Предварительные результаты, полученные с помощью линейной регрессии, показали хорошую корреляцию между предсказанными и экспериментальными данными температур плавления ($R \sim 0,85$). При этом данные энтальпий плавления исходных компонентов использованы не были. Можно заметить, что значительное влияние на предсказанное значение оказывают данные температур плавления исходных компонентов смеси. Для нахождения наилучшей зависимости и увеличения точности предсказаний планируется применение эволюционных алгоритмов машинного обучения.

Выводы. Температура плавления глубоких эвтектических растворителей имеет значительное влияние на область их применения и, следовательно, имеет решающее значение при выборе растворителя для конкретной задачи или создании новой эвтектической системы. Однако, на данный момент поиск новых эвтектических систем основан на ресурсозатратном эмпирическом методе подбора. Широко используемый метод моделирования фазовых диаграмм – модель COSMO-RS – показал низкую предсказательную способность по отношению к глубоким эвтектическим растворителям. В своей работе для создания предсказательной модели мы предложили использование алгоритмов машинного обучения. В качестве дескрипторов были выбраны термодинамические свойства исходных веществ, а также дескрипторы, рассчитанные с помощью модели COSMO-RS. Для обучения модели были использованы экспериментальные температуры плавления более чем 200 эвтектических систем. Таким образом, мы показали возможность поиска новых эвтектических систем путем предсказания их температуры плавления, основываясь на структурах и температурах плавления исходных компонентов. Модель машинного обучения, использованная при этом, в дальнейшем будет модифицирована для увеличения точности предсказаний путем применения эволюционных алгоритмов.

Лавриненко А.К. (автор)

Чернышов И.Ю.

Пидько Е.А. (научный руководитель)

Подпись

Подпись

Подпись