

---

УДК 544.351.3

## ВОЗМОЖНОСТИ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ В ЗАДАЧАХ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ РАСТВОРИМОСТИ ВЕЩЕСТВ В СВЕРХКРИТИЧЕСКОМ ДИОКСИДЕ УГЛЕРОДА

**Д.А. Лаврухина** — Казанский национальный исследовательский технический университет им. А.Н. Туполева — КАИ, Казань, Россия. ORCID: 0009-0001-9184-4051. Эл. почта: dayanakalibar05@gmail.com

**А.Д. Павлов** — Казанский национальный исследовательский технический университет им. А.Н. Туполева — КАИ, Казань, Россия. Эл. почта: adpavlov@kai.ru

**М.П. Шлеймович** — Казанский национальный исследовательский технический университет им. А.Н. Туполева — КАИ, Казань, Россия. ORCID: 0000-0002-3021-5139. Эл. почта: hlch@mail.ru

**Т.Р. Биалов** — Казанский национальный исследовательский технический университет им. А.Н. Туполева — КАИ, Казань, Россия; Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия. ORCID: 0000-0001-6970-4717. Эл. почта: t.bilalov@yandex.ru (*для переписки*)

Поступила в редакцию 14.05.2024 г. Прошла рецензирование 30.05.2024 г.

Принята к публикации 30.05.2024 г.

---

Представлен обзор работ, посвященных применению методов машинного обучения и нейросетевых технологий в задаче прогнозирования растворимости различных веществ в сверхкритических флюидах. На примере имеющегося массива данных по растворимости ароматических углеводородов в сверхкритическом диоксиде углерода был разработан прототип системы предсказания растворимости с использованием простой нейросети из трех слоев. Показана его эффективность, определены дальнейшие направления исследований в этой области.

**Ключевые слова:** сверхкритический флюид, растворимость, прогнозирование, машинное обучение.

---

### ВВЕДЕНИЕ

Растворимость веществ — одно из ключевых свойств для сверхкритических флюидных (СКФ) технологий, поскольку если обрабатываемое вещество не растворяется в СКФ-растворителе, то о дальнейшем развитии работы в рамках СКФ-направления речи быть не может. Именно корректные данные по растворимости веществ в СКФ-растворителе позволяют правильно установить оптимальные условия осуществления процесса. К основным факторам, определяющим величину растворимости того или иного вещества в СКФ-растворителе, следует отнести: природу растворяемого вещества, его агрегатное состояние и термодинамические условия осуществления процесса растворения. Каждый из этих перечисленных факторов требует к себе особого внимания.

В настоящее время определение растворимости веществ в сверхкритических (СК) флюидах, проводится исключительно экспериментальными методами, в то время как имеющиеся математические модели только описывают имеющийся массив данных, и не всегда способны качественно спрогнозировать

то или иное свойство за пределами исследованных границ. Проведение же экспериментальных исследований не всегда возможно в силу различных факторов, связанных как с природой исследуемого вещества (его химическая стойкость, температура вспышки или разложения, и т. д.), так и с тем, что зачастую вещества с требуемой чистотой недоступны или слишком дороги. Результаты экспериментальных исследований растворимости описывают с использованием различных математических моделей [1—18], в основе которых лежат либо эмпирические зависимости, либо различные уравнения состояния в сочетании с правилами комбинирования. Методика расчета предполагает «подгон» модели под конкретные экспериментальные данные. После этого можно применить модель для расчета растворимости в пределах описываемого диапазона. К недостаткам подхода стоит в первую очередь отнести необходимость использования экспериментальных данных, в которые будет «вписана» модель, низкую точность прогноза растворимости за пределами обобщаемого диапазона, а также невозможность перенести результаты расчета с одной системы на другую.

В то же время, широкое распространение в настоящее время получили методы, основанные на информационных технологиях, в частности — с применением машинного обучения. Эти методы позволяют на основе имеющегося массива данных обучить систему, которая будет способна прогнозировать свойства с высокой точностью, что существенно снизит потребность в экспериментальных исследованиях, оставляя необходимый минимум для проверки работоспособности модели и подтверждения сделанных с ее помощью прогнозов.

Методы машинного обучения могут использоваться в СКФ-технологиях для оптимизации процессов и прогнозирования свойств СК-флюидов, которые обладают уникальными свойствами и широко применяются в химической промышленности, фармацевтике, пищевой промышленности и других областях. Использование методов машинного обучения может значительно улучшить эффективность и точность процессов работы с этими объектами. Они могут быть применены для решения многих задач в данной области:

- предсказания физических и химических свойств СК-флюидов, таких как плотность, вязкость, диффузия и растворимость; это поможет исследователям и инженерам лучше определять и контролировать свойства этих флюидов;
- оптимизации процессов разделения с использованием СК-флюидов, таких как экстракция и СКФ-хроматография; нейросетевые и другие модели машинного обучения могут помочь оптимизировать условия работы, улучшая эффективность разделения и уменьшая затраты;
- мониторинга и управления в реальном времени; они могут предсказывать изменения в параметрах процесса и помогать в поддержании стабильных условий работы;
- создания новых СК-сред с желаемыми свойствами; это может быть полезно в фармацевтике, например для разработки новых процессов СКФ-экстракции для извлечения активных веществ из растений;
- оптимизации конструкции и работы оборудования, используемого в СКФ-процессах.

Важно отметить, что точность прогнозирования растворимости вещества в СК-флюидах может зависеть от качества входных данных и выбранной архитектуры нейронной сети. Поэтому для достижения надежных результатов может потребоваться дополнительное исследование и оптимизация модели. Несмотря на возможности, которые открывают перед нами нейронные сети, по

мнению авторов обзора [19], посвященного данной проблематике, их применение в сверхкритических флюидных технологиях в настоящее время находится в зачаточном состоянии.

Однако, несмотря на это, авторы выделили 29 работ [20—48], опубликованных за последние 12 лет, в которых используются те или иные нейронные сети для обработки экспериментальных данных по растворимости различных классов веществ в СК-флюидах. Анализ этих работ показал, что практически во всех случаях речь идет об описании растворимости, определенной в рамках эксперимента. В качестве входных параметров авторы этих работ используют в различных комбинациях следующие свойства: давление, температуру, растворимость вещества во флюиде, константу равновесия, молярный объем, ацентрический коэффициент, молекулярную массу, температуру плавления, критическую температуру и давление растворителя и растворяемого вещества, дипольный момент, углеродное число, водородное число, число двойных связей, энергию высшей занятой молекулярной орбитали. Ограниченное число свойств растворяемого вещества в данном случае свидетельствует о том, что нейронные сети фактически используются для описания растворимости в широком диапазоне температур и давлений.

Более интересным подходом является, по нашему мнению, и по мнению авторов обзора [19], использование различных методов машинного обучения, в том числе и на основе нейронных сетей, для изучения и прогнозирования растворимости семейств соединений в СК-растворителях с использованием физических свойств растворенного вещества в качестве входных данных для модели. Такие исследования потенциально могут привести к созданию моделей с широкой обобщаемостью, применимые к широкому спектру растворяемых веществ только на основе их свойств. Однако большая часть имеющихся в литературе примеров этого не демонстрируют [19, 47, 48].

Ранее в работе [49] нами были представлены результаты обобщения массива данных по растворимости ароматических углеводородов в сверхкритическом диоксиде углерода (СК- $\text{CO}_2$ ), которое проводилось на основе представлений энтропийного метода теории подобия. Эта модель использует для описания и обобщения растворимости термодинамические параметры СК- $\text{CO}_2$  и одно значение растворимости исследуемого вещества в крайней точке на изотерме. Было показано, что среднеквадратичное отклонение результатов описания модели в интервале температур от 300 до 350 К в большинстве случаев не превышает 16 %, а среднее значение этой величины составляет 11,1 %, что сопоставимо с возможностями альтернативных моделей, а также с экспериментальными методами определения растворимости.

В то же время, этой модели требуется одно значение растворимости в качестве входного параметра, что накладывает некоторые ограничения на ее применимость. Кроме того, данное условие делает невозможным прогнозирование растворимости для веществ, растворимость которых не изучена.

Таким образом, перед нашей научной группой стоит задача по созданию системы на основе методов машинного обучения, способной прогнозировать растворимость веществ в СК-флюидах. В настоящей работе будут представлены результаты предварительного обобщения имеющегося массива данных по растворимости ароматических углеводородов в СК- $\text{CO}_2$ , определен минимальный набор свойств веществ, необходимый для прогнозирования их растворимости в СК- $\text{CO}_2$ , а также намечены дальнейшие направления развития исследований.

## МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ

Исходными данными для модели является массив по растворимости ароматических углеводородов, сформированный ранее в работах [49, 50] и дополненный впоследствии новыми экспериментальными точками. На текущий момент массив содержит более 800 экспериментальных точек, полученных разными авторами, в диапазоне температур от 308 до 523 К и давлениях от 7 до 50 МПа, в том числе более 700 точек в диапазоне температур от 308 до 338 К и давлениях от 9 до 35 МПа. Перечень веществ, включенных в массив, представлен в таблице. В дополнение к ним в качестве входных данных для построения модели также используются параметры их критических точек и ряды индивидуальных свойств, таких как молярная масса, количество бензольных колец, атомов водорода и углерода. Данный перечень является предварительным и при необходимости будет расширен в дальнейших работах.

Алгоритм обобщения и прогнозирования растворимости веществ в СК-СО<sub>2</sub> с использованием нейросети может быть представлен следующим образом:

— подготовка исходной выборки; на этом этапе собираются данные по растворимости различных веществ в СК-СО<sub>2</sub>; они включают в себя различные физико-химические свойства веществ, такие как молекулярная масса, температура кипения, давление пара при определенной температуре и другие параметры, которые могут влиять на растворимость;

— предобработка и нормализация данных; на этапе предобработки из исходного массива данных исключаются явные и неявные дубликаты, заполняются

Таблица

Исходные данные для модели

Вещество	$T_{\text{кип}}$ , К	$T_{\text{кр}}$ , К	$P_{\text{кр}}$ , МПа	$\omega$	Источники данных
Антрацен	613	869,30	2,870	0,501	[51—53]
Аценафтен	552	810,87	3,409	0,475	[54]
1,12-Бензоперилен	773	1027,90	1,841	1,170	[55]
Бифенил	528	728,28	2,679	0,596	[56, 57]
Нафталин	491	748,40	4,050	0,304	[58—61]
Перилен	776	921,43	2,470	0,821	[51]
Пирен	675	936,00	2,570	0,509	[51]
Трифенилен	984	1013,60	2,890	0,492	[54, 62]
Трифенилметан	632	816,65	1,673	0,783	[61]
Фенантрен	613	869,00	2,870	0,479	[63—65]
Флуорантен	655	874,81	2,972	0,616	[54]
Флуорен	568	784,96	2,935	0,674	[66]
Хризен	721	986,60	2,670	0,475	[61]

$T_{\text{кип}}$  — температура кипения, К;  $T_{\text{кр}}$  — критическая температура, К;  $P_{\text{кр}}$  — критическое давление, МПа;  $\omega$  — ацентрический фактор.

либо удаляются пропуски; нормализация данных необходима для устранения выбросов и обеспечения сопоставимости данных; Z-нормализация [19] применяется к каждому параметру, чтобы стандартизировать их распределение вокруг нуля со стандартным отклонением, равным единице; это помогает уменьшить влияние экстремальных значений и делает данные более подходящими для анализа;

— разделение выборки на обучающую и проверочную (тестовую); обучающая выборка используется для обучения модели, а проверочная — для оценки ее эффективности; обычно это делается путем случайного разделения данных, но возможны и другие методы, такие как использование временных рядов или k-fold кросс-валидация [19, 34];

— обучение, проверка и применение нейронной сети; после того, как определяются параметры модели на основе имеющихся примеров, она применяется к проверочной выборке для оценки ее точности; система использует алгоритмы, которые имитируют работу человеческого мозга и заключается в последовательной обработке входных данных с помощью объединенных в слои искусственных нейронов; в процессе функционирования система обеспечивает предсказание искомым результатов по произвольным входным значениям;

— оценка результатов; после применения нейросетевой модели к проверочной выборке оценивается ее эффективность; это может быть сделано с помощью различных метрик, таких как средняя абсолютная ошибка (MAE), средняя квадратическая ошибка (MSE) или коэффициент детерминации ( $R^2$ ) [31, 34, 37, 42]; выбор оптимального метода зависит от конкретных требований задачи и характеристик данных.

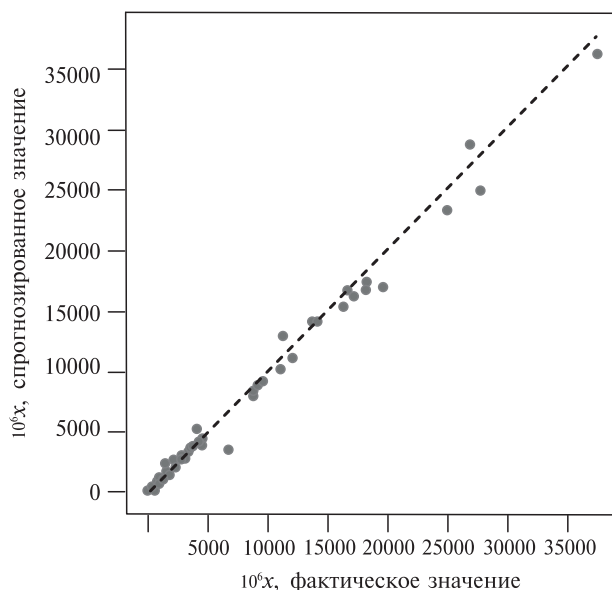
## РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

В прототипе системы была использована простая нейросеть из трех слоев; исходная выборка была поделена в соотношении 80/20 (80 % входных данных — обучающая выборка, 20 % — тестовая); для оценки результатов применялась среднеквадратичная ошибка. Возможно также использование и проверка эффективности как более простых методов прогнозирования (например, линейной регрессии), так и изошренных (использование более сложных нейронных сетей с более строгими требованиями к точности по сравнению с прототипом); тем не менее, уже на данном этапе прототип показывает довольно точные результаты при прогнозировании целевых значений растворимости (см. рисунок).

В дальнейшем планируется поэтапная работа по выделению значимых признаков и обучению по ним многослойной модели нейросети с получением приемлемого уровня точности путем итеративного улучшения полученного прототипа:

— анализ результатов; оценка эффективности примененных методов (нейронной сети, линейной регрессии и т.п.) на основе выбранных метрик; это поможет определить, какой из методов работает лучше и какие параметры следует оптимизировать;

— выделение значимых признаков; изучение данных и выделение тех признаков, которые оказывают наибольшее влияние на растворимость веществ в СК- $\text{CO}_2$ ; это может быть сделано с помощью методов корреляционного или регрессионного анализа;



**Рисунок.** Результат прогнозирования прототипом нейросетевой системы растворимости (мольной доли растворенного вещества в насыщенном растворе  $x$ ) ароматических углеводородов в СК- $\text{CO}_2$

— обучение новой многослойной модели нейросети; на основе выделенных значимых признаков строится новая многослойная нейронная сеть; обучение сети может быть выполнено с использованием различных алгоритмов, таких как обратное распространение ошибки или градиентный спуск; после обучения модели она тестируется на новой выборке данных; оценивается точность прогнозирования модели и сравнивается с результатами, полученными ранее; при неудовлетворительных результатах тестирования проводится оптимизация параметров модели (например, количество слоев, количество нейронов в каждом слое, скорость обучения и т. д.) до достижения приемлемого уровня точности;

— интерпретация результатов; после получения удовлетворительных результатов проводится оценка полученных данных и формулируются выводы о взаимосвязи между физико-химическими свойствами веществ и их растворимостью в СК- $\text{CO}_2$ .

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе проведен анализ методов прогнозирования растворимости веществ в сверхкритическом диоксиде углерода с использованием различных математических моделей, а также методов машинного обучения. Показано, что модели, основанные на физических принципах и различных уравнениях состояния, хорошо описывают растворимость, однако их возможности в прогнозировании растворимости крайне ограничены. Альтернативой в данном вопросе могут выступать методы машинного обучения, в том числе нейронные сети. Прототип нейросети, состоящей из трех слоев, обученный на исходной выборке, поделенной в соотношении 80 : 20 (80 % входных данных — обучающая выборка, 20 % — тестовая), показывает удовлетворительные результаты

при прогнозировании растворимости. На основе полученных результатов были определены последующие этапы проведения исследований.

## БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания на оказание государственных услуг (выполнение работ), тема № 123030600044-3, FZSU-2023-0004.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Mendez-Santiago J., Teja A.S.* // Fluid Phase Equilib. 1999. Vol. 158—160. P. 501. DOI: 10.1016/S0378-3812(99)00154-5
2. *Chrastil J.* // J. Phys. Chem. 1982. Vol. 86. No 15. P. 3016.
3. *Narayan R.C., Dev J.V., Madras G.* // J. Supercrit. Fluids. 2015. Vol. 101. P. 87.
4. *Sparks D.L., Hernandez R., Estévez L.A.* // Chem. Engineering Science. 2008. Vol. 63. No 17. P. 4292. DOI: 10.1016/j.ces. 2008.05.031
5. *del Valle J.M., Aguilera J.M.* // Ind. and Engin. Chemistry Research. 1988. Vol. 27. P. 1551.
6. *Adachi Y., Lu B.C.Y.* // Fluid Phase Equilibria. 1983. Vol. 14. P. 147.
7. *Rathnam V.M., Lamba N., Madras G.* // J. Supercrit. Fluids. 2017. Vol. 130. P. 357.
8. *Tomberli B., Goldman S., Gray B.* // Fluid Phase Equilibria. 2001. Vol. 187. P. 111.
9. *Nasri L., Bensetiti Z., Bensaad S.* // Energy Procedia. 2012. Vol. 18. P. 1261. DOI: 10.1016/j.egypro.2012.05.142
10. *Li H., Jia D., Li Sh., Liu R.* // Fluid Phase Equilibria. 2013. Vol. 350. P. 13. DOI: 10.1016/j.fluid.2013.04.010.
11. *Nasri L., Bensaad S., Bensetiti Z.* // Advances in Chemical Engineering and Science. 2013. Vol. 3. No 4. P. 255. DOI: 10.4236/aces.2013.34033.
12. *Trabelsi F., Abaroudi K., Recasens F.* // J. Supercrit. Fluids. 1999. Vol. 14. No 2. P. 151.
13. *Vázquez da Silva M., Barbosa D.* // J. Supercrit. Fluids. 2004. Vol. 31. No 1. P. 9.
14. *Hartono R., Mansoori G.A., Suwono A.* // Chem. Eng. Sci. 2001. Vol. 56. P. 6949.
15. *Manohar B., Sankar K.U.* // Theor Foun Chem Eng. 2011. Vol. 45. P. 409.
16. *Ajcharyapagorn A., Douglas P.L., Douglas S., Pongamphai S., Teppaitoon W.* // Am. J. Food Technology. 2008. Vol. 3. P. 275.
17. *Madras G., Kulkarni C., Modak J.* // Fluid Phase Equilib. 2003. Vol. 209. P. 207.
18. *Coimbra P., Duarte C.M.M., de Sousa H.C.* // Fluid Phase Equilib. 2006. Vol. 239. P. 188. DOI: 10.1016/j.fluid.2005.11.028
19. *Roach L., Rignanese G.-M., Erriguible A., Aymonier C.* // J. Supercrit. Fluids. 2023. Vol. 202. P. 106051. DOI: 10.1016/j.supflu.2023.106051
20. *Kamali M.J., Mousavi M.* // J. Supercrit. Fluids. 2008. Vol. 47. P. 168. DOI: 10.1016/j.supflu.2008.08.005
21. *Alzhrani R.M., Almalki A.H., Alaql S.I., Alshehri S.* // Arab. J. Chem. 2022. Vol. 15. P. 104180. DOI: 10.1016/j.arabjc.2022.104180
22. *Chinh Nguyen H., Alamray F., Kamal M., Diana T., Mohamed A., Algarni M.* // J. Mol. Liq. 2022. Vol. 354. P. 118888. DOI: 10.1016/j.molliq.2022.118888
23. *Huwaimel B., Alobaida A.* // Molecules. 2022. Vol. 27. P. 5140, DOI: 10.3390/molecules27165140
24. *Sadeghi A., Su C.-H., Khan A., Lutfor Rahman M., Sani Sarjadi M., Sarkar S.M.* // Arab. J. Chem. 2022. Vol. 15. P. 103502. DOI: 10.1016/j.arabjc.2021.103502
25. *An F., Sayed B.T., Parra R.M.R., Hamad M.H., Sivaraman R., Zanjani Founani Z., Rushchite A.A., El-Maghawry E., Alzhrani R.M., Alshehri S., AboRas K.M.* // J. Mol. Liq. 2022. Vol. 363. P. 119901. DOI: 10.1016/j.molliq.2022.119901
26. *Cao Y., Khan A., Zabihi S., Albadarin A.B.* // J. Mol. Liq. 2021. Vol. 333. P. 115942. DOI: 10.1016/j.molliq.2021.115942

27. *hu H., Zhu L., Sun Z., Khan A.* // J. Mol. Liq. 2021. Vol. 338. P. 116731. DOI: 10.1016/j.molliq.2021.116731
28. *Liu W., Zhao R., Su X., Mohamed A., Diana T.* // J. Mol. Liq. 2022. Vol. 358. P. 119208. DOI: 10.1016/j.molliq.2022.119208
29. *Kostyrin E.V., Ponkratov V.V., Salah Al-Shati A.* // Arab. J. Chem. 2022. Vol. 15. P. 104346. DOI: 10.1016/j.arabjc.2022.104346
30. *Alshahrani S.M., Saqr A.A., Alfadhel M.M., Alshetaili A.S., Almutairy B.K., Alsubaiyel A.M., Almari A.H., Alamoudi J.A., Abourehab M.A.S.* // Molecules. 2022. Vol. 27. P. 5762. DOI: 10.3390/molecules27185762
31. *Mengshan L., Liang L., Xingyuan H., Hesheng L., Bingsheng C., Lixin G., Yan W.* // RSC ADV. 2017. Vol. 7. P. 49817. DOI: 10.1039/C7RA09531G
32. *Bakhabkhi Y.* // Expert Syst. Appl. 2011. Vol. 38. P. 11355. DOI: 10.1016/j.eswa.2011.03.003
33. *Khazaie Poul A., Soleimani M., Salahi S.* // Chin. J. Chem. Eng. 2016. Vol. 24. P. 491. DOI: 10.1016/j.cjche.2015.11.027
34. *Najmi M., Ayari M.A., Sadeghsalehi H., Vaferi B., Khandakar A., Chowdhury M.E.H., Rahman T., Jawhar Z.H.* // Pharmaceutics. 2022. Vol. 14. P. 1632. DOI: 10.3390/pharmaceutics14081632
35. *Fujii T., Kobune M.* // J. Supercrit. Fluids. 2021. Vol. 179. P. 1. DOI: 10.1016/j.supflu.2021.105421
36. *Khayamian T., Esteki M.* // J. Supercrit. Fluids. 2004. Vol. 32. P. 73. DOI: 10.1016/j.supflu.2004.02.003
37. *Vaferi B., Karimi M., Azizi M., Esmaeili H.* // J. Supercrit. Fluids. 2023. Vol. 77. P. 44. DOI: 10.1016/j.supflu.2013.02.027
38. *Aminian A.* // J. Supercrit. Fluids. 2017. Vol. 125. P. 79. DOI: 10.1016/j.supflu.2017.02.007
39. *Dadkhah M.R., Tatar A., Mohebbi A., Barati-Harooni A., Najafi-Marghmaleki A., Ghiasi M.M., Mohammadi A.H., Pourfayaz F.* // J. Supercrit. Fluids. 2017. Vol. 120. P. 181. DOI: 10.1016/j.supflu.2016.06.006.
40. *Wang X.* // Energy Sources Part A. 2021. Vol. 43. P. 1. DOI: 10.1080/15567036.2020.1871445
41. *Zhang Y., Xu X.* // Chem. Phys. 2021. Vol. 550. P. 111299. DOI: 10.1016/j.chemphys.2021.111299
42. *Rezaei T., Nazarpour V., Shahini N., Bahmani S., Shahkar A., Abdihaji M., Ahmadi S., Shahdost F.T.* // Sci. Rep. 2022. Vol. 12. P. 1043. DOI: 10.1038/s41598-022-04942-4
43. *Lashkarbolooki M., Vaferi B., Rahimpour M.R.* // Fluid Phase Equilib. 2011. Vol. 308. P. 35. DOI: 10.1016/j.fluid.2011.06.002
44. *Bahmaninia H., Shateri M., Atashrouz S., Jabbour K., Hemmati-Sarapardeh A., Mohaddespour A.* // Fluid Phase Equilib. 2023. Vol. 567. P. 113712. DOI: 10.1016/j.fluid.2022.113712
45. *Baghban A., Ahmadi M.A., Hashemi Shahraki B.* // J. Supercrit. Fluids. 2015. Vol. 98. P. 50. DOI: 10.1016/j.supflu.2015.01.002
46. *Mesbah M., Shahsavari S., Soroush E., Rahaei N., Rezakazemi M.* // J. CO<sub>2</sub> Util. 2018. Vol. 25. P. 99. DOI: 10.1016/j.jcou.2018.03.004.
47. *Aminian A., Zare Nezhad B.* // Fuel. 2020. Vol. 282. P. 118823. DOI: 10.1016/j.fuel.2020.118823
48. *Osada M., Tamura K., Shimada I.* // J. Supercrit. Fluids. 2022. Vol. 190. P. 105733. DOI: 10.1016/j.supflu.2022.105733
49. *Bilalov T.R., Gumerov F.M.* // Theor Found Chem Eng. 2019. Vol. 53. P. 487. DOI: 10.1134/S004057951904016X
50. *Bilalov T.R., Gumerov F.M.* // Russ. J. Phys. Chem. B. 2019. Vol. 13. P. 1290. DOI: 10.1134/S1990793119080025
51. *Anitescu G., Tavlarides L.L.* // J. Supercrit. Fluids. 1997. Vol. 10. P. 175. DOI: 10.1016/S0896-8446(97)00024-7
52. *Li Q., Zhang Z., Zhong C., et al.* // Fluid Phase Equilibria. 2003. Vol. 207. No 1–2, P. 183. DOI: 10.1016/s0378-3812(03)00022-0
53. *Ngo T.T., Bush D., Eckert C.A., Liotta C.L.* // AIChE J. 2001. Vol. 47. No 11. P. 2566. DOI: 10.1002/aic.690471119
54. *Yamini Y., Bahramifar N.* // J. Chem. Eng. Data. 2000. Vol. 41. No 1. P. 53. DOI: 10.1021/je990129s
55. *Miller D.J., Hawthorne S.B., Clifford A.A., Zhu S.* // J. Chemical & Engineering Data. 1996. Vol. 41. No 4. P. 779. DOI: 10.1021/je960022u
56. *Chung S.T., Shing K.S.* // Fluid Phase Equil. 1992. Vol. 81. P. 321. DOI: 10.1016/0378-3812(92)85160-A

57. *McHugh M., Paulaitis M.E.* // J. Chem. Eng. Data. 1980. Vol. 25. No 4. P. 326. DOI: 10.1021/je60087a018
  58. *Diefenbacher A., Turk M.* // J. Supercrit. Fluids. 2002. Vol. 22. No 3. P. 175. DOI: 10.1016/S0896-8446(01)00123-1
  59. *Kalaga A., Trebble M.* // J. Chem. Eng. Data. 1999. Vol. 44. No 5. P. 1063. DOI: 10.1021/je990029m
  60. *Sauceau M., Fages J., Letoumeau J.J., Richon D.* // Ind. Eng. Chem. Res. 2000. Vol. 39. No 12. P. 4609. DOI: 10.1021/ie000181d
  61. *Pauchon V., Cisse Z., Chavret M., Jose J.* // J. Supercrit. Fluids. 2004. Vol. 32. No 1–3. P. 115. DOI: 10.1016/j.supflu.2004.03.003
  62. *Barna L., Blanchard J.-M., Rauzy E., Berro C.* // J. Chemical & Engineering Data. 1996. Vol. 41. No 6. P. 1466. DOI: 10.1021/je960189n
  63. *Goodarznia I., Esmailzadeh F.* // J. Chem. Eng. Data. 2002. Vol. 47. No 2. P. 333. DOI: 10.1021/je010093f
  64. *Lee L.-S., Huang J.-F., Zhu O.-X.* // J. Chem. Eng. Data. 2001. Vol. 46. No 5. P. 1156. DOI: 10.1021/je0100140
  65. *Sane A., Taylor S., Sun Y.-P., Thies M. C.* // J. Supercrit. Fluids. 2004. Vol. 28. No 2-3. P. 277. DOI: 10.1016/S0896-8446(03)00046-9
  66. *Bartle K.D., Clifford A.A., Jafar S.A.* // J. Chem. Eng. Data. 1990. Vol. 35. No 3. P. 355. DOI: 10.1021/je00061a037
- 
- 

## CAPABILITIES OF MACHINE LEARNING METHODS IN PREDICTION OF SOLUBILITY OF SUBSTANCES IN SUPERCRITICAL CARBON DIOXIDE

**D.A. Lavrukina** — A.N. Tupolev Kazan National Research Technical University — KAI, Kazan, Russia. ORCID: 0009-0001-9184-4051. E-mail: dayanakalibar05@gmail.com

**A.D. Pavlov** — A.N. Tupolev Kazan National Research Technical University — KAI, Kazan, Russia. E-mail: adpavlov@kai.ru

**M.P. Shleimovich** — A.N. Tupolev Kazan National Research Technical University — KAI, Kazan, Russia. ORCID: 0000-0002-3021-5139. E-mail: hlch@mail.ru

**T.R. Bilalov** — A.N. Tupolev Kazan National Research Technical University — KAI, Kazan, Russia; Kazan National Research Technological University, Kazan, Russia. ORCID: 0000-0001-6970-4717. E-mail: t.bilalov@yandex.ru (*for correspondence*)

---

---

A review of researches devoted to the application of machine learning methods and neural network technologies in the prediction of solubility of various substances in supercritical (SC) fluids. Using a simple neural network of three layers a prototype of a solubility prediction system was developed based on the example of an existing data set on the solubility of aromatic hydrocarbons in SC carbon dioxide. Its efficiency has been shown and further directions of research in this field have been identified.

**Key words:** supercritical fluid, solubility, prediction, machine learning.

---

---

## ACKNOWLEDGEMENT

This work was financially supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation within the framework of the state assignment for the provision of public services (performance of work), topic No. 123030600044-3, FZSU-2023-0004.

---

---