Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева»

Факультет цифровых технологий и химического инжиниринга

Кафедра информационных компьютерных технологий

**ОТЧЕТ ПО ПРАКТИЧЕСКОЙ РАБОТЕ № 14**

**ПО КУРСУ**

**«ЦИФРОВОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СИСТЕМ»:**

**«Предсказание свойств материалов с помощью ML»**

Ведущий преподаватель

Ст. преподаватель Скичко Е.А.

**СТУДЕНТ группы КС-20** Мелехин А.А.

**Москва**

**2024**

# **Задание**

Разработать ML-модель для предсказания плотности воздуха. Число параметров в модели определить из правила. Построить графики зависимости Свойства от Температуры [K] для различных значений P=const [бар], на графиках отметить точками экспериментальные значения из БД, линиями – результаты предсказания модели. Предсказать свойство для указанных значений давления и температуры и отметить на тех же графиках цветными точками. Модель сдается в виде кода и сохраняется в файле keras.

**Теоретическое обоснование решения**

В теоретическом обосновании необходимо привести все формулы, которые используются при решении задачи с пояснением и расшифровкой величин, входящих в формулу, например:

где - стандартная энтальпия при заданной температуре, Дж/моль,

- стандартная энтальпия образования при 298 К, Дж/моль,

*-* стандартная теплоёмкость при постоянном давлении, Дж/моль К.

Здесь же описывается алгоритм решения задачи (последовательность действий, расчетов).

Код

Следует приложить к отчету файл с программой. Допустимо привести код в отчете, но не скриншотом, а строго текстом.

Также в этом разделе необходимо привести все входные данные, используемые для расчета (например, справочные данные).

Результаты расчетов

Здесь приводится результат работы программы – ответ задачи, строятся необходимые графики и даются пояснения к результатам. При необходимости, если указано в задании, даются ответы на вопросы задания и делаются выводы.

Отчет оформляется по данному образцу с полями, отступом красной строки, выравнивание по ширине, 14 пт шрифт.