

**НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ
імені ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО»**

ХІМІКО - ТЕХНОЛОГІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ

**Кафедра технології неорганічних речовин, водоочищення
та загальної хімічної технології**

«На правах рукопису»
УДК _____

До захисту допущено:
В.о. Завідувача кафедри
_____ Наталія ТОЛСТОПАЛОВА
«__» грудень 2020 р.

**Магістерська дисертація
на здобуття ступеня магістра
за освітньо-професійною програмою «Хімічні технології неорганічних
речовин та водоочищення»
зі спеціальності 161 «Хімічні технології та інженерія»
на тему: «Дослідження механізмів хімічних реакцій у середовищі
Python»**

Виконав (-ла):

студент (-ка) 2 курсу, групи ХН-91мп

Осьмук Марія Петрівна _____

Керівник:

Доцент, канд..техн. наук, доцент,

Концевой Андрій Леонідович _____

Консультант з економіко-організаційних рішень:

Доцент, к.т.н., доцент

Підлісна Олена Анатоліївна _____

Консультант з охорони праці:

Доцент, к.т.н., доцент,

Полукаров Юрій Олексійович _____

Консультант з наукової частини:

Доцент, канд..техн. наук, доцент,

Концевой Сергій Андрійович _____

Рецензент:

Засвідчую, що у цій магістерській
дисертації немає запозичень з праць інших
авторів без відповідних посилань.
Студент (-ка) _____

Київ – 2020 року

Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»

ХІМІКО - ТЕХНОЛОГІЧНИЙ ФАКУЛЬТЕТ
 Кафедра технології неорганічних речовин, водоочищення
 та загальної хімічної технології

Рівень вищої освіти – другий (магістерський)

Спеціальність – 161 «Хімічні технології та інженерія»

Освітньо-професійна програма «Хімічні технології неорганічних речовин та водоочищення»

ЗАТВЕРДЖУЮ

В.о.завідувача кафедри

_____ Наталія
 ТОЛСТОПАЛОВА

«__» _____ 20__ р.

ЗАВДАННЯ
на магістерську дисертацію студенту
Осьмук Марії Петрівні

1. Тема дисертації «Дослідження механізмів хімічних реакцій у середовищі Python», науковий керівник дисертації Концевой Андрій Леонідович, канд.. техн.. наук, доцент, затверджені наказом по університету від «17» листопада 2020 р. №3332-с
2. Термін подання студентом дисертації 10 грудня 2020р.
3. Об'єкт дослідження механізм реакцій синтезу аміаку
4. Вихідні дані програмний код розроблений в середовищі Python
5. Перелік завдань, які потрібно розробити: пошук механізму хімічної реакції синтезу аміаку, застосування програмного коду для пошуку констант швидкості реакції син тезу аміаку встановлення правильності обраного механізму
6. Орієнтовний перелік графічного (ілюстративного) матеріалу
презентація, до якої входять : об'єкт і предмет дослідження, методики експерименту, результати експерименту та їх математична обробка, фрагменти програмного коду, висновки.

7. Консультанти розділів дисертації

Розділ	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		завдання видав	завдання прийняв
Економіко-організаційні рішення	Підлісна О.А., доцент		
Охорона праці	Полукаров Ю.О., доцент		
Наукова частина	Концевой С.А., доцент		

9. Дата видачі завдання «01» вересня 2020 року

Календарний план

№ з/п	Назва етапів виконання магістерської дисертації	Термін виконання етапів магістерської дисертації	Примітка
1	Вивчення літературних даних щодо механізмів хімічних реакцій та їх проектування у програмних середовищах	01.09.20 – 30.09.20	
2	Розробка програмного коду	01.10.20 – 15.10.20	
3	Вибір механізму реакції синтезу аміаку, початок проведення розрахунків	16.10.20 – 31.10.20	
4	Завершення розрахунків, оцінка адекватності отриманих результатів	01.11.20 – 15.11.20	
5	Оформлення результатів	16.11.20 – 30.11.20	
6	Підготовка до захисту	01.12.20 – 17.12.20	

Студент

Марія ОСЬМУК

Науковий керівник

Андрій КОНЦЕВОЙ

РЕФЕРАТ

Пояснювальна записка: 80 стор., 47 рис., 10 табл., 16 посилань.

Об'єкт дослідження – механізми хімічних реакцій.

Предмет дослідження – розрахунок констант швидкостей процесу синтезу аміаку, генерація даних для «навчання» нейронних мереж.

Метою роботи є дослідження та викорисання методів машинного навчання для визначення механізмів хімічних реакцій на прикладі реакції синтезу аміаку.

На основі кафедрального програмного продукту, що дає змогу ґрунтуючись на експериментальних даних щодо зміни концентрацій реагентів протягом хімічного процесу та ряду додаткових даних отримати значення констант швидкостей хімічних реакцій, було проведено пошук констант швидкостей хімічних реакцій та аналіз правильності припущеного механізму.

Програмний продукт створено для обробки експериментальних даних з використанням алгоритмів машинного навчання.

Пропозиції щодо подальших досліджень - застосування нових алгоритмів, вдосконалення інтерфейсу користувача, прискорення та систематизація даних.

КОНСТАНТИ ШВИДКОСТЕЙ ХІМІЧНИХ РЕАКЦІЙ, МАШИННЕ НАВЧАННЯ, ГЕТЕРОГЕННІ РЕАКЦІЇ, АМІАК, ШТУЧНИЙ ІНТЕЛЕКТ

ABSTRACT

Explanatory note: 80 pages, 47 figures, 10 tables, 16 references.

The object of research is the mechanism of industrial synthesis of ammonia.

The subject of research - the calculation of rate constants of chemical processes, data generation for "learning" neural networks.

The aim of the work is to study and use machine learning methods to determine the mechanism of heterogeneous chemical reactions on the example of ammonia synthesis reaction.

Based on the cathedral software, which allows based on experimental data on changes in reagent concentrations during the chemical process and a number of additional data to obtain values of rate constants of chemical reactions, the rate constants of chemical reactions and analysis of the correct mechanism of ammonia synthesis.

The software product is designed to process experimental data using machine learning algorithms.

Suggestions for further research - the use of new algorithms, improving the user interface, acceleration and systematization of data.

CONSTANTS OF SPEEDS OF CHEMICAL REACTIONS, MACHINE LEARNING, HETEROGENEOUS REACTIONS, AMMONIA, ARTIFICIAL INTELLIGENCE

Зміст	стор.
ВСТУП.....	9
1 АНАЛІЗ ТЕХНОЛОГІЧНОГО ПРОЦЕСУ СИНТЕЗУ АМІАКУ СЕРЕДНЬОГО ТИСКУ	10
1.1 Властивості аміаку.....	10
1.2 Сфери застосування аміаку.....	11
1.3 Хімічна та принципова схеми виробництва аміаку.....	11
1.4 Фізико-хімічні основи процесу синтезу аміаку	12
1.4.1 Рівновага в процесі синтезу аміаку	15
1.4.2 Кінетика синтезу аміаку	18
2 ПРОГРАМУВАННЯ ЯК СПОСІБ ДОСЛІДЖЕННЯ МЕХАНІЗМІВ ХІМІЧНИХ РЕАКЦІЙ .	23
2.1 Середовище Python	23
2.2 Поняття «штучні нейронні мережі».....	23
2.3 Використання штучних нейронних мереж для прогнозування хімічних процесів	27
2.4 Основні принципи застосування штучних нейронних мереж для прогнозування властивостей хімічних сполук	28
3 ОПИС ПРОГРАМИ ДЛЯ АНАЛІЗУ МЕХАНІЗМІВ ХІМІЧНИХ РЕАКЦІЙ.....	30
3.1 Детальний опис етапів роботи програми.....	31
3.1.1 Ввід хімічних реакцій досліджуваного процесу	32
3.1.2 Отримання системи диференціальних рівнянь.....	32
3.1.3 Введення даних	35
3.1.4 Визначення інтервалу інтеграції	36
3.1.5 Розділення експериментальних даних на проміжки за часовим інтервалом	36
3.1.6 Генерація множини варіацій наборів констант для кожного часового проміжку та розв'язків системи диф. рівнянь	38
3.1.7 «Навчання» нейронних мереж.....	40
3.1.8 Отримання шуканих констант	42
3.1.9 Розрахунок відносної похибки у результатах	42
4 РЕЗУЛЬТАТИ ЕКСПЕРИМЕНТУ	44
Визначення константи швидкості реакції синтезу NH_3 на залізному каталізаторі	Ошибка!
Закладка не определена.	
4.1 Можливі варіанти удосконалення продукту.....	45
5 ОЦІНКА РИНКОВИХ ПЕРСПЕКТИВ РЕАЛІЗАЦІЇ РОЗРОБКИ.....	46
5.1 Загальна характеристика розробки	46
5.2 Аналіз зовнішнього та внутрішнього середовища стартапу.....	51
5.3 Визначення ключових факторів успіху проекту.....	56

5.4 Розрахунок ціни інноваційної пропозиції на ринку	58
5.5 Оцінка ризику впровадження нової технології.....	63
6 ОХОРОНА ПРАЦІ ТА БЕЗПЕКА В НАДЗВИЧАЙНИХ СИТУАЦІЯХ.....	67
6.1 Охорона праці.....	67
6.1.1 Виявлення та аналіз шкідливих та небезпечних виробничих факторів на об'єкті.....	67
6.1.1.1 Повітря робочої зони	67
6.1.1.2 Виробниче освітлення	68
6.1.1.3 Виробничий шум і вібрація.....	69
6.1.1.4 Електробезпека.....	70
6.2 Безпека в надзвичайних ситуаціях	71
6.2.1 Атестація робочого місця.....	71
6.2.2 Безпека експериментальної частини	72
6.2.3 Пожежна безпека	72
6.2.4 Аналіз небезпеки об'єкта, який проектується.....	74
ВИСНОВКИ	76
ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ.....	77

ВСТУП

Для встановлення механізмів складних хімічних процесів використовуються кінетичні криві, тобто експериментальні дані зміни концентрацій компонентів системи від часу. Припускається можливий механізм проходження процесу, на основі якого формується система диференціальних рівнянь. В отриманій системі невідомими лишаються константи швидкості реакцій, що проходять відповідно до запропонованого механізму. Дані константи швидкості встановлюються методом підбору. Проте даний метод дослідження механізмів реакцій є малоефективним при дослідженні більш складних механізмів реакцій.

На сьогодні одним з пріоритетних напрямків досліджень в області хімічної кінетики та каталізу є пошук нових шляхів та методів вивчення механізмів реакцій на атомному та молекулярному рівнях. Для вивчення та дослідження будь-яких хімічних процесів, що сприяє одержанню та впровадженню у виробництва нових та більш ефективних каталізаторів для хімічної, газо- та нафтопереробної промисловостей, є актуальним питання застосування новітніх методів в ході моделювання хіміко-технологічних процесів. Сучасні технології дозволяють обробляти за короткі проміжки часу великі об'єми інформації, що сприяє полегшенню встановлення кінетичних параметрів і механізмів хімічних реакцій.

Метою даної роботи є дослідження механізмів хімічних реакцій в середовищі Python.

На основі попередньо проведених на кафедрі ТНР, В та ЗХТ досліджень, запропоновано рішення даної проблеми у вигляді програмного коду в середовищі Python з використанням методів машинного навчання. Було проведено дослідження механізму на прикладі процесу синтезу аміаку.

1 АНАЛІЗ ТЕХНОЛОГІЧНОГО ПРОЦЕСУ СИНТЕЗУ АМІАКУ СЕРЕДНЬОГО ТИСКУ

Сполуки азоту мають виняткове значення для різних галузей промисловості і сільського господарства. Їх споживають виробництва азотної кислоти, різноманітних мінеральних добрив, полімерних матеріалів, вибухових речовин і ракетного палива, барвників, фармацевтичних препаратів.

Аміак, в свою чергу, є найважливішим і практично єдиним з'єднанням азоту, що виробляється в промислових масштабах з азоту атмосфери. Таким чином, його слід розглядати як напівпродукт для отримання всіх інших сполук азоту.

1.1 Властивості аміаку

Аміак NH_3 - безбарвний газ з різким запахом з температурою кипіння - $33,35^\circ\text{C}$ і температурою плавлення $-77,75^\circ\text{C}$. Аномально високі температури кипіння і плавлення аміаку пояснюються асоціацією його молекул внаслідок їх високої полярності і утворення водневих зв'язків. Аміак добре розчинний у воді (750 літрів в літрі води), обмежено розчинний в органічних розчинниках.

У водних розчинах аміаку містяться його гідрати, що утворюють евтектики, а також незначна кількість іонізованих молекул.

При температурах вище 13000°C аміак дисоціює на азот і водень:

Сухий аміак утворює з повітрям вибухові суміші, межі вибуховості яких залежать від температури і при 18°C обмежені інтервалом вмісту аміаку в газовій суміші від 0,155 до 0,270 об. частин. Ця особливість системи «аміак-повітря» враховується при виробництві азотної кислоти окисненням аміаку, в якому сировиною є аміачно-повітряна суміш.

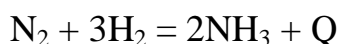
1.2 Сфери застосування аміаку

Аміак - ключовий продукт для отримання численних азотовмісних речовин, які застосовуються в промисловості, сільському господарстві і побуті. На основі аміаку в даний час виробляються практично всі сполуки азоту, які використовуються в якості цільових продуктів і напівпродуктів неорганічної та органічної технології. Основними напрямками використання аміаку в промисловості і сільському господарстві є:

1. Виробництво карбаміду
2. Виробництво рідких мінеральних добрив
3. Виробництво нітрату, сульфату, карбонату амонію
4. Виробництво уротропіну
5. Виробництво поліамідів, поліуретанів, поліакрилонітрилу
6. Виробництво нітратної кислоти
7. Виробництво гідразину
8. Виробництво гербіцидів
9. Виробництво амофосу

1.3 Хімічна та принципова схеми виробництва аміаку

Основна стадія процесу синтезу аміаку з азотоводородної суміші описується рівнянням:



Так як переважаючим методом отримання АВС є конверсія метану повітрям і водяною парою, хімічна схема виробництва аміаку включає крім цієї реакції кілька реакцій повітряної і парової конверсії, а також реакції подальшого перетворення оксиду вуглецю (II) в оксид вуглецю (IV).

Після видалення оксиду вуглецю (IV) з газової суміші і корекції її складу отримують АВС з вмістом азоту і водню в співвідношенні 1: 3.

Таким чином, сучасне виробництво аміаку складається з двох стадій: приготування АВС і перетворення її в аміак, представляючи єдину енерготехнологічну схему, в якій поєднуються операції отримання АВС, її очищення та синтезу аміаку і ефективно використовуються теплові ефекти всіх стадій процесу, що дозволяє в кілька разів знизити витрати електроенергії. На рисунку 1.1 приведена принципова схема виробництва аміаку, що відповідає розглянутим вище хімічної схемою.

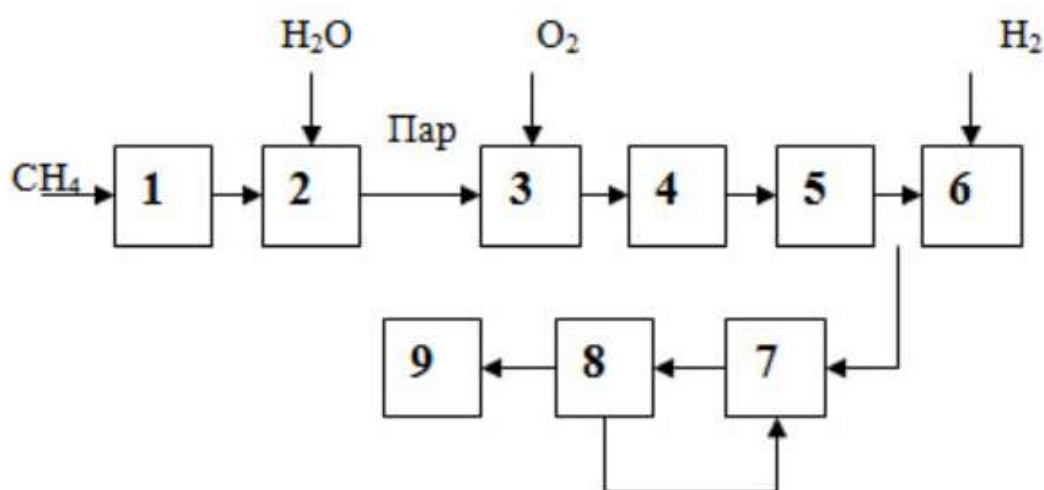


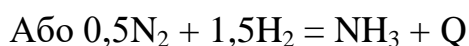
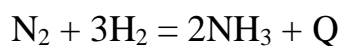
Рисунок 1.1 – Принципова схема виробництва аміаку:

1 – очистка природного газу від сполук сірки; 2 – парова конверсія метану; 3- повітряна конверсія метану; 4 – конверсія оксиду вуглецю (II); 5 – хемосорбційна очистка АВС; 6 – метанування; 7 – синтез аміаку; 8 – абсорбція аміаку; 9 – стиснення аміаку.

1.4 Фізико-хімічні основи процесу синтезу аміаку

В практиці за відсутності каталізатора реакція між азотом і воднем протікає з дуже низькою швидкістю.

Синтез аміаку проводиться за рівнянням:



Реакція оборотна, екзотермічна, характеризується великим негативним ентальпійного ефектом ($\Delta H_{298} = -91,96$ кДж / моль) і при високих температурах стає ще більш екзотермічної ($\Delta H_{725} = -112,86$ кДж / моль).

Реакція синтезу аміаку протікає зі зменшенням обсягу. Максимального виходу аміаку можна досягти, проводячи процес при високому тиску і низьких температурах. Синтез аміаку протікає з помітною швидкістю лише в присутності каталізатора, причому каталізаторами даної реакції служать тверді речовини.

Гетерогенно-каталітичний процес синтезу аміаку має складний механізм, який може бути описаний наступними стадіями:

- 1) дифузія молекул азоту і водню до поверхні каталізатора;
- 2) хемосорбція молекул реагентів (адсорбатов) на поверхні каталізатора;
- 3) поверхнева хімічна реакція з утворенням нестійких проміжних комплексів і взаємодія між ними;
- 4) десорбція продукту;
- 5) дифузія продукту реакції (аміаку) від поверхні каталізатора в газову фазу.

Дослідження кінетики та механізму реакції синтезу дозволило зробити висновок, що лімітує стадією процесу є хемосорбція азоту.

Швидкість реакції синтезу аміаку залежить від температури, тиску і складу реакційної суміші. Оптимальними вважають такі значення зазначених параметрів, при яких швидкість процесу максимальна. Зі збільшенням вмісту в циркуляційному газі аміаку і зменшенням вмісту азотоводородной суміші оптимальна температура падає.

Термодинамічні та кінетичні фактори свідчать на користь проведення процесу при високому тиску (збільшується рівноважний вихід, підвищується швидкість синтезу). Конденсація аміаку також поліпшується при високому тиску. Разом з тим зростання тиску збільшує витрату електроенергії на компресію, підвищує вимоги до машин та апаратів. При зниженні тиску спрощується апаратурне оформлення процесу, знижується витрата енергії, але при цьому збільшуються розміри апаратів, зростають енерговитрати на циркуляцію газу і виділення аміаку, підвищуються вимоги до чистоти синтез-газу.

Розрахунки показали, що питомі енергоматеріальні і капітальні витрати з підвищенням тиску зменшуються.

На підставі проведеного аналізу визначено, що для сучасних схем найбільш ефективним є тиск приблизно 30 МПа.

Реакція синтезу аміаку оборотна, тому повного перетворення азоту і водню в аміак за час їх одноразового проходження через апарат не відбувається. Умови рівноваги процесу і кінетичні закономірності його протікання на залізних каталізаторах обумовлюють можливість перетворення в аміак тільки 20-40% вихідної реакційної суміші. Всі сучасні схеми синтезу аміаку є циркуляційними, які передбачають виділення і повернення не прореагувала азотоводородной суміші в цикл синтезу.

Щоб виділити аміак, азотоводородной суміш разом з аміаком охолоджують до температури зрідження аміаку. Досягти повної конденсації аміаку не вдається. Непрореагировавшего азотоводородная суміш із залишковим аміаком знову повертається на синтез аміаку, при цьому в системі будуть накопичуватися інертні домішки.

Оскільки присутність інертних домішок в реакційній суміші рівносильно зниженню загального тиску, то зі збільшенням вмісту метану, аргону і гелію в суміші швидкість реакції синтезу зменшується.

1.4.1 Рівновага в процесі синтезу аміаку

Отже, як було зазначено вище, процес синтезу аміаку описується рівнянням [1]:



Реакція синтезу аміаку – оборотна, екзотермічна.

Для кількісного визначення впливу температури і тиску на рівноважний ступінь перетворення, а також склад рівноважної газової суміші необхідно встановити значення константи рівноваги реакції

$$K_p = \frac{P_{\text{N}_2} P_{\text{H}_2}^3}{P_{\text{NH}_3}^2}.$$

Вихідні дані для розрахунку рівноважного ступеня перетворення: склад вихідної газової суміші - чистий азот і чистий водень; співвідношення N_2 : H_2 = 1: 3; концентрація, % об: азоту - 25, водню - 75. Концентрації компонентів рівноважної газової суміші - C_{NH_3} , C_{N_2} , C_{H_2} . Розрахунок проведено на одиницю об'єму. Сумарна концентрація речовин приймається 100%. Тоді парціальні тиску компонентів складають:

$$P_{\text{N}_2} = \frac{C_{\text{N}_2}}{100} P_{\text{общ}}; P_{\text{H}_2} = \frac{C_{\text{H}_2}}{100} P_{\text{общ}}; P_{\text{NH}_3} = \frac{C_{\text{NH}_3}}{100} P_{\text{общ}}.$$

$$K_p = \frac{C_{\text{N}_2} C_{\text{H}_2}^3 P^2}{C_{\text{NH}_3}^2 \cdot 10^4}.$$

Константа рівноваги може бути записана:

Рівноважні концентрації компонентів в газовій суміші розраховуються з використанням додаткових рівнянь:

$$C_{\text{N}_2} + C_{\text{H}_2} + C_{\text{NH}_3} = 100\%;$$

$$C_{\text{N}_2} + C_{\text{H}_2} = 100 - C_{\text{NH}_3};$$

$$\frac{C_{\text{H}_2}}{C_{\text{N}_2}} = \frac{3}{1}.$$

Концентрації компонентів виражені через C_{NH_3} :

$$C_{\text{N}_2} = \frac{1}{4}(100 - C_{\text{NH}_3});$$

$$C_{\text{H}_2} = \frac{3}{4}(100 - C_{\text{NH}_3}).$$

Формула для розрахунку константи рівноваги приймає вигляд:

$$K_p = \frac{\frac{1}{4}(100 - C_{\text{NH}_3}) \left[\frac{3}{4}(100 - C_{\text{NH}_3}) \right]^3 P^2}{C_{\text{NH}_3}^2 \cdot 10^4}$$

$$K_p C_{\text{NH}_3}^2 \cdot 10^4 = \frac{1}{4} \left(\frac{3}{4} \right)^3 (100 - C_{\text{NH}_3})^4 P^2.$$

Спростуємо:

$$\sqrt{K_p} C_{\text{NH}_3} \cdot 10^2 = \sqrt{\frac{1}{4} \left(\frac{3}{4} \right)^3} (100 - C_{\text{NH}_3})^2 P.$$

Отримаємо рівняння:

$$C_{\text{NH}_3}^2 - 200 C_{\text{NH}_3} - \frac{308 \sqrt{K_p}}{P} C_{\text{NH}_3} + 10^4 = 0.$$

Залежність константи рівноваги процесу від температури і тиску описується рівнянням:

$$\lg \sqrt{K_p} = -\frac{2074,8}{T} + 2,4943 \lg T + \beta T - 1,864 \cdot 10^{-7} T^2 + I.$$

Залежність коефіцієнтів β і I залежать від тиску наведено в таблиці 1.1.

Отже, з використанням всіх вище наведених даних можна розрахувати константу рівноваги реакції при будь-яких значеннях температури і тиску, та відповідно за відомим значенням константи

рівноваги визначити рівноважну концентрацію аміаку в газовій суміші. Результати розрахунків наведено в таблиці 1.2.

Таблиця 1.1 - Залежність коефіцієнтів β і I від тиску

Тиск, МПа	β	I
1	0	-1,993
10	$1,256 \cdot 10^{-4}$	-2,113
30	$1,256 \cdot 10^{-4}$	-2,206
60	$1,0856 \cdot 10^{-3}$	-3,059
100	$2,6833 \cdot 10^{-3}$	-4,273

Таблиця 1.2 - Залежність рівноважної концентрації аміаку в газовій суміші від температури і тиску

Температура, °C	Рівноважна концентрація NH_3 при тиску, МПа					
	0,1	1,0	10,0	30	60	100
200	8,6	50,66	81,54	89,94	95,37	98,26
300	2,18	14,73	52,04	70,96	84,21	92,55
400	0,415	3,85	25,12	47,0	65,2	79,82
500	0,124	1,21	10,61	26,44	42,15	57,47
600	0,049	0,49	4,52	13,77	23,1	31,43
700	0,022	0,23	2,18	7,28	12,6	15,87

Можна зробити висновок, що для досягнення високого ступеня перетворення азотоводородної суміші процес синтезу аміаку необхідно проводити при температурі 200 ° C і тиску ~ 100 МПа.

1.4.2 Кінетика синтезу аміаку

Дослідження кінетики синтезу аміаку проводять вже багато років, однак внаслідок складності механізму процесу і природи активних центрів тривають і в даний час в багатьох країнах світу.

Найбільшого поширення набуло рівняння синтезу аміаку, запропоноване Тьомкіним і Пижевим. Вони виходили з уявлення про неоднорідну поверхню і про те, що лімітуючою стадією є адсорбція азоту, причому на поверхні знаходиться тільки азот, а лімітуючою стадією розкладання аміаку – десорбція азоту. При цьому кількість атомів азоту на поверхні каталізаторів більше, ніж будь-яких адсорбованих азотовмісних сполук; ні водень, ні аміак не впливають на швидкість адсорбції азоту, а енергії активації адсорбції ЕА і десорбції Ед лінійно зменшуються зі збільшенням ступеню заповнення поверхні.

$$w = K_1 \cdot P_N \left(\frac{\rho_{H_2}^3}{\rho_{NH_3}^2} \right)^\alpha - K_2 \left(\frac{\rho_{NH_3}^2}{\rho_{H_2}^3} \right)^{1-\alpha}$$

w-загальна швидкість процесу; K_1 , K_2 – константи швидкостей прямої та оборотної реакції; парціальні тиски азоту, водню і аміаку.

Значення α характеризує ступінь покриття поверхні каталізатора азотом в умовах процесу синтезу аміаку. Для залізних каталізаторів приймають 0,5.

Рівняння застосовно лише в області не надто далекою від рівноваги. Кінетика і механізм реакції синтезу аміаку при видаленні системи від стану рівноваги були розглянуті Тьомкіним, Морозовим та Шанатіной.

$$w = K' \cdot P_{H_2}^{m'} \cdot P_{N_2}^{1-m'}$$

Виявилось, що значення α та m' співпадають, тобто незалежно від того, здійснюється синтез далеко від рівноваги або в області, близької до рівноважної, залишається величиною постійною.

Кінетику синтезу аміаку з урахуванням оборотного отруєння каталізатора кисневими отрутами можна описати рівнянням Тьомкіна - Смирнова.

$$w = \frac{K_1 \cdot P_{N_2} - K_2 \cdot P_{NH_3}^2 / P_{H_2}^3}{\left(\frac{P_{NH_3}^2}{P_{H_2}^3} + A \cdot \frac{P_{H_2O}}{P_{H_2}} \right)}$$

P_i - парціальні тиски аміаку, азоту і водню; P_{H_2O} парціальні тиски водяної пари, оксиду та діоксиду вуглецю.; A -константа отруєння.

При $P_{H_2O}=0$ рівняння переходить в рівняння Тьомкіна - Смирнова.

З рівняння Тьомкіна-Пижева випливає, що максимальна швидкість реакції не відповідає еквівалентному складу газової суміші. У початковій стадії процесу, коли вміст NH_3 значно менше рівноважного і реакція розкладання аміаку може не враховуватися, максимальна швидкість визначається максимумом.

Звідси випливає, що максимальна швидкість в початковій стадії

процесу відповідає складу $\frac{P_{H_2}}{P_{N_2}} = 1.5$. Хоча різниця на виході складає лише 6 %. По мірі приближення виходу до рівноважного оптимальний склад

наближається до складу $\frac{P_{H_2}}{P_{N_2}} = 3$, так як по закону діючих мас рівноважний вихід досягає максимуму при еквівалентному складі.

Реакція синтезу аміаку - оборотна екзотермічна реакція. Для реакції такого типу оптимальною є спадна послідовність температур. На початку зони каталізу висока температура забезпечує найбільшу швидкість реакції,

а по мірі збільшення вмісту до стану рівноваги слід знижувати температуру в зоні каталізу.

Для збільшення продуктивності процесу синтезу аміаку вдаються до багаторазового циркуляції газів через каталізатор. Вміст аміаку збільшується зі зростанням температури до деякого максимального значення, званого оптимальною температурою. При подальшому підвищенні температури вміст аміаку зменшується, так як рівноважна концентрація аміаку знижується і наближається до його дійсного вмісту в газовій фазі, тому швидкість реакції знижується.

Для кожного виду каталізатора є свої залежності виходу аміаку від температури та об'ємної швидкості. Чим активніше каталізатор, тим нижче температура, при якій на ньому з достатньою швидкістю можна проводити реакцію. Синтез аміаку складається з наступних стадій: дифузія водню і азоту на поверхню каталізатора; хімічна адсорбція їх на поверхні; утворення молекул аміаку; десорбція NH_3 та його оборотна дифузія в газовий об'єм.

Згідно з механізмом каталізу, що протікає по окисно-відновному типу, між молекулами реагують гази (H_2 та N_2) і каталізатором виникають хімічні зв'язки, близькі до іонних. Атоми водню віддають свої електрони каталізатору, тобто виконують роль донорів електронів. Адсорбовані атоми азоту сприймають електрони з поверхні каталізатора. Отже, азот є акцептором електронів. Сприймаючи їх, він набуває підвищеної активності. Іони азоту і водню, з'єднуючись, утворюють молекули аміаку. Ці електронні процеси протікають в декілька стадій. Найбільш повільною є акцепторна стадія переходу електронів від каталізатора до атомів азоту. Вона і визначає швидкість всього процесу синтезу.

Для забезпечення максимальної продуктивності реактора необхідно реалізувати оптимальні температури по довжині каталітичної зони для

кожного поперечного перерізу, що забезпечує максимальну швидкість процесу в даному перетині.

Вважаючи, що температурна залежність констант прямої і зворотної реакцій відповідає рівнянню Ареніуса, можна вивести рівняння для розрахунку оптимальної температури.

$$T_{\text{оп}} = \frac{T_{\text{равы}}}{1 + \frac{RT_{\text{равы}}}{E_2 - E_1} \lg \frac{E_2}{E_1}}$$

E_1 та E_2 енергії активації реакцій синтезу і розпаду аміаку, при чому $E_1 + E_2 = 2H$, де $2H$ - тепловий ефект реакції, кДж/моль.

К'єр запропонував рівняння для розрахунку оптимальної температури:

$$T_{\text{оп}} = \frac{T_{\text{равы}}}{1 + \frac{RT_{\text{равы}}}{E_2 - E_1} \lg \frac{E_2 - RT_{\text{опт}}}{E_1 - RT_{\text{опт}}}}$$

Воротіна та Соколинський вивели рівняння:

$$t_{\text{опт}} = \frac{\delta}{\lg \left(\frac{E_2 / R}{E_2 / R - \delta} \cdot \frac{Z^2}{n \cdot v^3 \cdot F} \right)}$$

n , v , Z – мольні частки азоту, водню та аміаку; F і δ – константи, що залежать від рівняння. Так, при $P=300$ кг/см², $F=3,1604 \cdot 10^{-3}$, $\delta=1402$.

Для забезпечення максимальної продуктивності на початку зони каталізу теоретично більш вигідні відносно високі температури (550-650°C), які практично неприйнятні через посилену рекристалізацію

каталізатора, що призводить до спаду його активності, а також через посилену газову корозію конструкційних матеріалів насадки і термічних напружень, що обумовлюють аварійні ситуації та зупинку агрегатів.

Оптимальна послідовність температур в промисловому каталітичному реакторі синтезу аміаку на початку зони каталізу обмежується швидкістю відводу тепла, а в кінці каталітичної зони великий вплив надає аміак, що утворюється в процесі. Основною причиною зниження активності каталізатора є зменшення робочої поверхні каталізатора адсорбованим азотом, що знаходиться в рівновазі з утвореним аміаком і воднем газової фази. Зворотною реакцією при високому тиску і більш низьких температурах можна знехтувати у зв'язку з великим віддаленням від стану рівноваги. Тому швидкість процесу можна описати наступним кінетичним рівнянням:

$$w = K \cdot P_{N_2} (1 - \theta_N)^n$$

θ - ступінь заповнення поверхні азотом, що знаходиться в адсорбційно-хімічній рівновазі.

2 ПРОГРАМУВАННЯ ЯК СПОСІБ ДОСЛІДЖЕННЯ МЕХАНІЗМІВ ХІМІЧНИХ РЕАКЦІЙ

2.1 Середовище Python

Python - це скриптова мова програмування. Він універсальний, тому підходить для вирішення різноманітних завдань і багатьох платформ, починаючи з iOS і Android і закінчуючи серверними ОС.

Це інтерпретована мова - він не компілюється, тобто до запуску вдає із себе звичайний текстовий файл. Програмувати можна практично на всіх платформах, мова добре спроектований і логічний.

Наукові дослідження. В Python є кілька бібліотек, які стануть в нагоді для проведення досліджень і обчислень:

SciPy - бібліотека з науковими інструментами;

NumPy - розширення, яке додає підтримку матриць і багатовимірних масивів, а також математичні функції для роботи з ними;

Matplotlib - бібліотека для роботи з 2D- і 3D-графікою.

Завдяки бібліотекам і простоті освоєння мови багато вчених вибирають Python - особливо він популярний у математиків і фізиків.

Data Science. Python - один з найбільш використовуваних в Data Science мов. На ньому пишуть алгоритми програм з машинним навчанням і аналітичні програми. За допомогою нього обслуговують сховища даних і хмарні сервіси.

2.2 Поняття «штучні нейронні мережі»

Останнім часом з'являється багато новин про нові розробки технології штучних нейронних мереж. На їх основі створюються комп'ютерні програми штучного інтелекту, які вже зараз здатні обігрувати

найкращих гравців в покер та діагностувати рак шкіри краще за професійних медиків.

Штучні нейронні мережі з'явилися на слуху зовсім нещодавно, а вже застосовуються майже не у всіх сферах життя людини: при розпізнаванні текстів і створенні контекстної реклами в інтернеті, в машинному перекладі та навіть на біржі і системах відеонагляду.

Історія нейронних мереж

З появою сучасної електроніки, почалися перші спроби апаратного відтворення процесу мислення людини. Перший крок був зроблений у 1943 році з виходом статті нейрофізіолога Уоррена Маккалоха та математика Уолтера Піттса про роботу штучних нейронів і представлення моделі нейронної мережі на електричних схемах. Паралельно з прогресом в нейроанатомії і нейрофізіології психологами було створено моделі людського навчання. У 1950-ті — 1960-ті роки група дослідників, об'єднавши ці біологічні та психофізіологічні підходи, створила перші штучні нейронні мережі за керівництва Натаніеля Рочестера.

Перші успіхи викликали вибух активності й оптимізму. Мінські, Розенблат, Відроу та інші вчені розробили мережі, що склалися з одного прошарку штучних нейронів, які назвали перцептронами. Ці мережі застосовували для розв'язання широкого класу задач: прогноз погоди, аналіз електрокардіограм, штучний зір. Протягом деякого часу здавалося, що ключ до інтелекту знайдено, і відтворення людського мозку є лише питанням конструювання досить великої мережі. Але ця ілюзія скоро розсіялася. Мережі не могли розв'язувати всі задачі, що підвласні людському вирішенню. З цих невдач почався період інтенсивного аналізу.

У період з 1980-х років інтерес до штучних нейронних мереж швидко зріс. Фахівці з таких далеких областей, як технічне конструювання, філософія, фізіологія і психологія, були заінтриговані можливостями, що надає ця технологія, і проводили активний пошук застосування її всередині

своїх дисциплін. В 2007 році Джефрі Хінтоном в університеті Торонто створені алгоритми глибокого навчання багат шарових нейронних мереж. Це ознаменувало початок активного застосування штучних нейронних мереж в різних сферах людської діяльності та дало поштовх розробкам технології штучного інтелекту.

Як влаштовані штучні нейронні мережі?

Наш мозок не здатний швидко здійснювати великий об'єм математичних операцій. Навіть найпростіші апарати, типу калькулятора мають перевагу над людиною. Але, на відміну від комп'ютера, людина може швидко адаптуватися до нових умов. Наприклад, ми можемо розпізнавати мову співрозмовника, навіть якщо знаходимось в шумному приміщенні, або надзвичайно швидко впізнавати знайоме обличчя в натовпі. Комп'ютеру ж навпаки такі операції даються нелегко.

Наше мислення – результат роботи мережі нейронів в мозку. Нейрони передають одне одному хімічні сигнали за допомогою електричних імпульсів. Внаслідок такої активності з'являються наші відчуття та мислення. Штучний інтелект і когнітивне моделювання намагаються імітувати деякі властивості біологічних нейронних мереж. ШНМ є системою з'єднаних і взаємодіючих між собою простих процесорів (штучних нейронів). Такі процесори зазвичай досить прості (особливо в порівнянні з процесорами, використовуваними в персональних комп'ютерах). Кожен процесор подібної мережі має справу тільки з сигналами, які він періодично отримує, і сигналами, які він періодично посилає іншим процесорам. І, тим не менше, будучи з'єднаними в досить велику мережу з керованим взаємодією, такі окремо прості процесори разом здатні виконувати досить складні завдання.

Працює штучна нейронна мережа наступним чином: на входи нейронів надходять сигнали, які сумуються. При цьому враховується синаптична маса, тобто значимість кожного з входів. Далі, вхідні сигнали

одних нейронів надходять на входи інших нейронів. Маса кожного такого зв'язку може бути позитивною(збуджуючі зв'язки) або негативною(гальмівні зв'язки). Вони визначають обчислення нейронної мережі, а значить її пам'ять та поведінку. Принцип дуже схожий на роботу нашого власного процесору – мозку.

Але для того, щоб штучна нейронна мережа виконувала складні завдання, її необхідно навчити.

Навчання штучної нейронної мережі

Штучні нейронні мережі не програмуються в звичайному розумінні цього слова, вони **навчаються**. Можливість навчання — одна з головних переваг нейронних мереж перед традиційними алгоритмами. Технічно, навчання полягає в знаходженні коефіцієнтів зв'язків між нейронами. В процесі навчання нейронна мережа здатна виявляти складні залежності між вхідними даними й вихідними, а також здійснювати узагальнення.

Для процесу навчання необхідно мати модель зовнішнього середовища, у якій функціонує нейронна мережа – потрібну для вирішення задачі інформацію. По-друге, необхідно визначити, як модифікувати вагові параметри мережі.

Існують три загальні парадигми навчання: “з вчителем”, “без вчителя” (самонавчання) та змішана. У першому випадку нейромережа має у своєму розпорядженні правильні відповіді (виходи мережі) на кожен вхідний приклад. Ваги налаштовуються так, щоб мережа виробляла відповіді найбільш близькі до відомих правильних відповідей. Навчання без вчителя не вимагає знання правильних відповідей на кожен приклад навчальної вибірки. У цьому випадку розкривається внутрішня структура даних та кореляція між зразками в навчальній множині, що дозволяє розподілити зразки по категоріях. При змішаному навчанні частина ваг визначається за допомогою навчання зі вчителем, у той час як інша визначається за допомогою самонавчання.

2.3 Використання штучних нейронних мереж для прогнозування хімічних процесів

Перші дослідження, присвячені застосуванню нейронних мереж для вирішення хімічних завдань, були здійснені ще на початку 70-х років в СРСР, але ці піонерні роботи не були належним чином оцінені і виявилися практично забутими. Лише в кінці 80-х років відродився інтерес хіміків до подібного підходу, і він почав стрімко зростати.

Нейронні мережі (часто звані штучними нейронними мережами, обчислювальними нейронними мережами або просто нейросетями) представляють собою спрощену математичну модель обробки інформації головним мозком людини. Однак більшість сучасних архітектур нейронних мереж не відтворюють в точності біологічну модель мозку, скоріше, вони можуть розглядатися в рамках класу алгоритмів статистичного аналізу даних, об'єднаних під загальною назвою нейроінформатики.

Крім того, нейронні мережі часто розглядають як високо-паралельні методи вирішення завдань обчислювальної математики в «нейромережевому базисі» (що становить предмет особливої області обчислювальної математики - нейроматематики), на базі яких працюють засновані на пороговій логікою високопродуктивні високо-паралельні обчислювальні пристрої - нейрокомп'ютери.

Завдяки своїй здатності навчатися і узагальнювати дані, нейромережі почали успішно застосовуватися в хімії, особливо в тих випадках, коли невідомий аналітичний вид залежності між структурою і властивостями сполук.

2.4 Основні принципи застосування штучних нейронних мереж для прогнозування властивостей хімічних сполук

У більшості робіт по застосуванню нейромереж зворотного поширення для пошуку залежностей структура-властивість використовується наступна методологія. Перш за все, готується база даних, яка містить структури хімічних сполук і відомі значення тих властивостей, які в подальшому передбачається за допомогою навченої нейромережі прогнозувати. Як правило, ця база розбивається на дві частини, за першою з яких, званої навчальної вибіркою, шляхом багаторазового її пред'явлення нейромережі проводиться навчання останньої, а по другий, званої контрольної вибіркою, проводиться контроль прогнозуючої здатності навченої нейромережі. Як варіанти іноді використовуються дві контрольні вибірки, а також процедура змінного контролю, при якій кожне із з'єднань при одній з разбивок потрапляє в контрольну вибірку. На наступному етапі для всіх хімічних сполук з вибірок проводиться розрахунок дескрипторів, тобто чисел, що описують структуру хімічної сполуки. Як правило, ці числа інваріантні до перенумерації вершин молекулярного графа, яким може бути описана структура хімічної сполуки, тобто є інваріантами графів. Дескриптори можуть бути фрагментного (підструктурні), топологічними індексами, фізико-хімічними, квантово-хімічними, характеристиками просторових структур і т.д. Досить повний набір дескрипторів, які використовуються в сучасних дослідженнях структура-властивість.

Далі, після обов'язковою стадії попереднього відбору або перетворення дескрипторів слід етап побудови нейронної мережі. Число нейронів вхідного шару зазвичай береться рівним числу дескрипторів, і рівень вихідного сигналу кожного з них встановлюється рівним значенню відповідного дескриптора після його нормалізації або масштабування). Число вихідних нейронів дорівнює числу одночасно прогнозованих

властивостей, причому в якості прогнозованого значення кожного з властивостей береться вихідне значення відповідного вихідного нейрона (зазвичай після денормалізації або демасштабування). Приховані нейрони служать для проміжних обчислень, і їх число часто підбирається, виходячи з критерію максимізації прогнозуючої здатності нейромережі, а псевдонейрони зміщення виконують службові функції і мають постійним вихідним значенням, рівним одиниці.

В процесі навчання нейромережі навчальна вибірка пред'являється їй певне число раз (зазвичай досить велика). У процесі пред'явлення вибірки значення дескрипторів кожного із з'єднань послідовно вводяться (зазвичай після нормалізації або масштабування) в якості активності відповідних вхідних нейронів. Далі запускається нейросеть на рахунок, і з вихідних нейронів знімаються прогнозовані значення властивостей, які (після денормалізації або демасштабування) порівнюються з експериментальними. На підставі знайденої різниці за певними алгоритмами виробляється підстроювання ваг зв'язків між нейронами з метою зменшення цієї різниці. Таким чином, в процесі навчання відбувається поступове зменшення помилок прогнозування властивостей хімічних сполук, що входять в навчальну вибірку.

3 ОПИС ПРОГРАМИ ДЛЯ АНАЛІЗУ МЕХАНІЗМІВ ХІМІЧНИХ РЕАКЦІЙ

Завданням даної роботи полягає у пошуку кінетичних констант швидкості реакції для оптимізації хіміко-технологічних процесів на прикладі процесу синтезу аміаку.

На сьогодні не існує методики вирішення зворотної кінетичної задачі у єдиному середовищі. За допомогою єдиного середовища можна спростити та прискорити встановлення механізму складного хімічного процесу шляхом визначення констант швидкостей окремих оборотних та необоротних реакцій.

Програма вирішує дану задачу наступним шляхом:

1. Користувач припускає можливий механізм перебігу реакції.
2. Введення користувачем хімічних рівнянь в певній формі, що відповідають обраному механізму.
3. Програма генерує систему диференціальних рівнянь
4. Введення користувачем експериментальних даних (залежність концентрацій реагентів від часу реакції).
5. Користувач задає декілька конфігураційні параметри: • часовий інтервал; • інтеграційний інтервал; • для кожної з констант швидкостей реакцій – межі, в яких вона може знаходитись; • початкові концентрації реагентів.
5. Генерація програмою набору констант, які відповідають константам у системі диференційних рівнянь.
6. Вирішення програмою системи диференціальних рівнянь та формування масиву рішень системи
7. Масив згенерованих даних ділиться на підмасиви за часовим інтервалом, кожен з яких передається як данні для тренування нейронних мереж.

8. Отримання тренованої за певним часовим інтервалом групи нейронних мереж

9. Кожна нейронна мережа отримує відповідні за часовими інтервалами експериментальні данні. Отримуються групи констант рівнянь реакцій для експериментальних даних на певному часовому інтервалі.

10. Вираховується відносне відхилення констант швидкості реакцій, які мають залишатись постійними на кожному часовому інтервалі.

Якщо відхилення не перевищує певне задане значення відносної похибки, то вважається, що система диференціальних рівнянь підібрана вірна, що свідчить про правильність обраного механізму.

3.1 Детальний опис етапів роботи програми

Перелік етапів роботи програми:

1. Введення хімічних рівнянь
2. Отримання системи диференціальних рівнянь
3. Введення даних
4. Визначення інтервалу ітерацій
5. Розділення експериментальних даних на проміжки за часовим інтервалом
6. Генерація множини варіацій наборів констант для кожного з часових проміжків та розв'язків системи диференціальних рівнянь для варіацій констант у кожному інтервалі
7. «Навчання» нейронних мереж
8. Отримання шуканих констант для кожного часового інтервалу
9. Порівняння отриманих констант, виведення результатів роботи програми

3.1.1 Ввід хімічних реакцій досліджуваного процесу

На першому етапі проводиться введення стехіометричних рівнянь, що відповідають обраному механізму. Введені рівняння повинні відповідати наступним вимогам:

- рівняння має включати «->» або «=», які представляють необоротні і оборотні реакції
- позначення реагентів мають бути замінені великими літерами латинського алфавіту.

Перед введенням безпосередньо рівнянь реакцій необхідно задати їх кількість.

Введення хімічних рівнянь процесу

```
In [1]: equamount=input('equations ammount: ')
        ea=equamount
        rea = []
        num=1
        for num in (1,ea):
            ea=input('type equation ')
            rea.append(ea)

        equations ammount: 2
        type equation 3A=2B
        type equation B+2C->D
```

Рисунок 3.1 – Частина програмного коду, що відповідає за введення рівнянь реакцій.

3.1.2 Отримання системи диференціальних рівнянь

Далі програмний код проводить переведення хімічних рівнянь в систему диференціальних.

На Рисунках 3.2-3.4 приведено програмний код, що відповідає за формування системи диференціальних рівнянь.


```

def getEquations(rea):
    n = len(rea)

    if not all(rea): # удаляем пустые элементы списка
        k = 0
        flag = 0
        while k < n - flag:
            if rea[k] == "":
                del rea[k]
                flag += 1
                k -= 1
            k += 1

    rea2 = []
    direct = re.compile(" *-> *")
    reversible = re.compile(" *~= *")
    for s in rea: # разбиваем элементы списка на подписки по знакам "=" и "->"
        if "->" in s:
            rea2.append(direct.split(s))
        elif "~=" in s:
            k = reversible.split(s)
            rea2.append(k)
            rea2.append(k[::-1])
        else:
            log(
                'Как минимум одно уравнение не содержит знака "=" или "->". \'
            )

    for s in rea2: # разбиваем элементы подписков на подподписки по знаку "+"
        j = 0
        for t in s:
            s[j] = re.split(" *\+ *", t)
            j += 1
    i = 0

    agg = set() # множество со списком реагентов
    for s in rea2: # разбиваем ещё и коэффициенты с реагентами
        j = 0
        for t in s:
            k = 0
            for u in t:
                d = re.match("[0-9]+[A-Z]", u)

```

Рисунок 3.2 – Частина програмного коду, що формує систему диференціальних рівнянь

```

        d = re.match("[0-9]+[A-Z]", u)
        if d == None:
            agg.add(rea2[i][j][k])
            rea2[i][j][k] = ["1", rea2[i][j][k]]

        else:
            d = d.end(0)
            agg.add(rea2[i][j][k][d - 1:])
            rea2[i][j][k] = [rea2[i][j][k]
                             [: d - 1], rea2[i][j][k][d - 1:]]

            k += 1
        j += 1
    i += 1
equa = [] # список со слагаемыми уравнений

concentrationsSigns = []
i = 0
for s in rea2: # собираем эти слагаемые
    k = "k" + str((i + 1)) + "*"

    for t in s[0]:
        if t[0] == "1":
            # the one for python operations
            k = k + "C_{}".format(t[1])

        else:
            # the one for python operations
            k = k + "C_{}**{}".format(t[1], t[0])

    # remove the last '*' if it exists
    kf = k.rfind("*")
    if(kf != -1 and (len(k)-1)==kf):
        new_string = k[:kf] + k[kf+1:]
        equa.append(new_string)
    else:
        equa.append(k)

    i += 1

equations = []
reagentsList = []
equationDataArray = []
for s in agg: # собираем конечные уравнения
    equationData = {}

```

Рисунок 3.3 – Продолження програмного коду, що формує систему диференціальних рівнянь

```

for s in agg: # собираем конечные уравнения
    equationData = {}
    k = "dC_{}/dt = ".format(s)

    equationData['reagent'] = s
    i = -1
    flag = True
    for t in rea2:
        i += 1
        j = -1
        for u in t:
            j += 1
            for v in u:
                for w in v:
                    if w == s:
                        if j == 0:
                            l = "-"
                        else:
                            l = "+"
                        if v[0] == "1":
                            n = ""
                        else:
                            n = v[0]
                        if flag:
                            k = k + "{}{}*{}".format(
                                l if l == "-" else "",
                                "1" if n == "" else n,
                                equa[i],
                            )

                            flag = False
                        else:
                            k = k + " {} {}*{}".format(
                                l, "1" if n == "" else n, equa[i]
                            )

    equationData['equation'] = k

    equationDataArray.append(equationData)

return equationDataArray

```

Рисунок 3.4 – Продовження програмного коду, що формує систему диференціальних рівнянь

3.1.3 Введення даних

На даному етапі роботи програми користувач повинен ввести наступні данні:

1. Початкові концентрації реагентів
2. Часовий інтервал
3. Кількість частин для поділу часового інтервалу
4. Встановити межі, в яких знаходяться значення констант швидкості реакцій

Масив експериментальних даних знаходиться в окремому файлі, з якого зчитується програмою.

3.1.4 Визначення інтервалу інтеграції

Інтервал інтеграції - це число, що показує кількість точок (тобто значень концентрації), обчислених за певний часовий інтервал (вказаний користувачем). Отримане значення використовується для отримання даних для "навчання" нейронної мережі.

3.1.5 Розділення експериментальних даних на проміжки за часовим інтервалом

Для того, щоб оцінити адекватність та обчислити похибку отриманих констант швидкості реакції, константи обчислюються на експериментальних даних, розподілених за певними часовими проміжками.

На Рисунках 3.5-3.6 наведено програмний код, який проводить розділення експериментальних даних за часовими інтервалами.

```

equationData = [list(l) for l in zip(*df.values)]
for i in range(len(equationData[1])):
    equationData[1][i] = ''.join(equationData[1][i].split())
size = len(equationData[1])
i = 0
while i < size:
    if i != size - 1:
        if(equationData[1][i] == equationData[1][i+1]):
            a = equationData[0][i+1].split("=")
            if(a[1][1] == "-"):
                equationData[0][i] += " - " + a[1][2:]
            else:
                equationData[0][i] += " + " + a[1]
            del equationData[0][i+1]
            del equationData[1][i+1]
            size -= 1
            i -= 1
        i+=1
size = len(equationData[1])
i = 0
while i < size:
    if i != size - 2 and i != size - 1:
        if(equationData[1][i] == equationData[1][i+2]):
            a = equationData[0][i+2].split("=")
            if(a[1][1] == "-"):
                equationData[0][i] += " - " + a[1][2:]
            else:
                equationData[0][i] += " + " + a[1]
            del equationData[0][i+2]
            del equationData[1][i+2]
            size -= 1
            i -= 1
        i+=1
size = len(equationData[1])
i = 0

```

Рисунок 3.5 – Програмний код, що проводить поділ експериментальних даних

```

while i < size:
    if i != size - 3 and i != size - 2 and i != size - 1:
        if(equationData[1][i] == equationData[1][i+3]):
            a = equationData[0][i+3].split("=")
            if(a[1][1] == "-"):
                equationData[0][i] += " - " + a[1][2:]
            else:
                equationData[0][i] += " + " + a[1]
            del equationData[0][i+3]
            del equationData[1][i+3]
            size -= 1
            i -= 1
        i+=1
i = 0
while i < size:
    if i != size - 4 and i != size - 3 and i != size - 2 and i != size - 1:
        if(equationData[1][i] == equationData[1][i+4]):
            a = equationData[0][i+4].split("=")
            if(a[1][1] == "-"):
                equationData[0][i] += " - " + a[1][2:]
            else:
                equationData[0][i] += " + " + a[1]
            del equationData[0][i+4]
            del equationData[1][i+4]
            size -= 1
            i -= 1
        i+=1
df = pd.DataFrame(list(zip(equationData[1], equationData[0])),
                    columns=['reagent', 'equation'])
equationData = df.to_dict('records')

```

Рисунок 3.6 – Продовження програмного коду, що проводить поділ експериментальних даних

3.1.6 Генерація множини варіацій наборів констант для кожного часового проміжку та розв'язків системи диф. рівнянь

Далі відбувається формування наборів констант відповідно до діапазонів, введених користувачем. Проводиться рішення системи диференціальних рівнянь, тобто будуються концентраційні криві.

```

def getCalculationsSetByVariants(equationData, constantsPopulation, integrationInterval, timeInterval, partsToDivide, initialCo
timeIntervalDivisionStep = int(timeInterval[1] / partsToDivide)
result = []

for timeValue in range(timeInterval[0], timeInterval[1], timeIntervalDivisionStep):
    result.append({'timeInterval': [
        timeValue,
        timeValue + timeIntervalDivisionStep], "data": []})

    for constantsSet in constantsPopulation:
        concentrations = getConcentrationsLines(
            equationData, constantsSet, timeInterval, integrationInterval, initialConcentrations).tolist()
        splittedConcentrations = splitConcentrationsByTimeInterval(concentrations, partsToDivide)

        # collect in object
        for i in range(0, len(splittedConcentrations)):
            obj = {"constantsSet": constantsSet,
                "concentrationLine": splittedConcentrations[i]}
            result[i]['data'].append(obj)

return result

```

Рисунок 3.7 – Фрагмент програмного коду, що відповідає за генерацію наборів констант

Система диференціальних рівнянь вирішується за допомогою функції Odeint, бібліотеки SkyPy.

На Рисунку 3.8 наведено програмний код, який відповідає за вирішення системи диф. рівнянь.

```

def getConcentrationsLines(equationdataArray, constants, timeInterval, integrationInterval, initialConcentrations):
    """
    Calculates and return concentration lines(concentration of reagent vs. time)

    Parameters:
    equationdataArray (Array): Array of objects each containing sign of reagent(A,B,...), function to get the value of dc(A,B)
    constants (array): 2d-array. Each item contains a unique set of speed constants for the chemical process
    timeInterval (array): start and finish of a chemical process takes place. Arbitrary units
    integrationInterval: amount of points on concentration axis
    """

    def pend(y, tAxis, equationdataArray, constants):
        args = {}
        # assign k1,k2...kn to values from constants array
        for i in range(0, len(constants)):
            args["k" + str(i + 1)] = constants[i]

        for i in range(0, len(equationdataArray)):
            # assign C_A,C_B ... C_n to values from initial concentrations array
            concentrationSign = "C_{}".format(equationdataArray[i]['reagent'])
            args[concentrationSign] = y[i]

        equationsValues = []
        for equationData in equationdataArray:
            # get function value and convert to <float>
            equationsValues.append(initialConcentrations(args).item())
        return equationsValues

    initialConcentrationsValues = []
    for equationData in equationdataArray:
        configVal = initialConcentrations[equationData['equation']]
        initialConcentrationsValues.append(configVal)

    tAxis = np.linspace(
        timeInterval[0], timeInterval[1], integrationInterval)
    sol = odeint(
        pend,
        initialConcentrationsValues,
        tAxis,
        args=(equationdataArray, constants))

    return sol

```

Рисунок 3.8 – Програмний код для вирішення системи диф. Рівнянь

3.1.7 «Навчання» нейронних мереж

Найважливішим етапом роботи програми є «навчання» нейронної мережі. Часовий інтервал, вибраний користувачем при введенні даних, ділиться на кількість інтервалів, визначених користувачем. Після цього отримують набір концентрацій для набору констант швидкості для певного інтервалу часу. Ці дані становлять модель для «навчання» нейронних мереж. Як завдання нейронної мережі визначено ряд концентрацій, як рішення - набір констант. Кожен ряд концентрацій відповідає певному набору констант, який являє собою концепцію зміни концентрації реагенту, за умови, що хімічна реакція, яка представляє досліджуваний процес, має такі константи.

Таким чином, дані задачі та рішення є двовимірними; Як алгоритм машинного навчання був обраний Random Forest. Random Forest - це комплексний метод класифікації, регресії та інших завдань. Ще працює, будуючи багато дерев рішень під час "навчання" та створюючи клас в режимі класифікації або регресії для окремих дерев. [10] [11]

У програмному коді наведеному на рисунку 3.9 було використано алгоритм Random decision forests. У представлений частині коду загальна «навчальна» була поділена на тренувальну та вибірку для перевірки, тобто після проведення «навчання» мережі отримують ряди концентрацій з валідаційної та порівняти їх з початковими даними. Тобто отримують уявлення, на скільки добре нейронна мережа була «навчена». В цьому ж фрагменті записуються певні дані щодо загальної точності та точності за конкретними константами з вибірки.

```
networks = []
# generate network for each time interval
for timeIntervalData in data:

    constantsSetArray = []
    concentrationVsTimeArray = []

    # arrange constants vs concentration lines in different arrays
    for constantsVsConcentration in timeIntervalData['data']:

        constantsSetArray.append(constantsVsConcentration['constantsSet'])
        concentrationVsTimeArray.append(
            constantsVsConcentration['concentrationLine'])

    # split-out validation dataset
    validation_size = 0.03
    seed = 7
    constantsSetArray_train, constantsSetArray_validation, concentrationVsTimeArray_train, concentrationVsTimeArray_validation = \
        train_test_split(constantsSetArray, concentrationVsTimeArray, test_size=validation_size, random_state=seed)

    concentrationVsTimeArray_train_2d = get2dData(concentrationVsTimeArray_train)
    concentrationVsTimeArray_validation_2d = get2dData(concentrationVsTimeArray_validation)

    max_depth = 50
    regr_multirf = RandomForestRegressor(n_estimators=100,
                                       max_depth=max_depth,
                                       random_state=0)

    regr_multirf.fit(concentrationVsTimeArray_train_2d, constantsSetArray_train)

    predictedForValidation = regr_multirf.predict(concentrationVsTimeArray_validation_2d)
    accuracyBreakBy = explained_variance_score(constantsSetArray_validation, predictedForValidation, multioutput='raw_values')
    avarage = explained_variance_score(constantsSetArray_validation, predictedForValidation, multioutput='uniform_average')

    print('neural network for ' + " ".join(map(str, timeIntervalData['timeInterval'])) + ' time interval:' + '\n')
    print('accuracy per value:' + str(accuracyBreakBy))
    print('accuracy average:' + str(avarage))
    networks.append(regr_multirf)
```

Рисунок 3.9 – Частина коду програми, в якій реалізується «навчання» нейронних мереж

3.1.8 Отримання шуканих констант

На завершальній фазі використовуються вже «навчена» нейронна мережа, експериментальні дані також діляться на фрагменти, і сформується завершальний модуль програми - для знаходження констант.

```
def getPredictionsArray(networks,inputs):
    """
    Predicts based on input and network and returns an array of predicted values.
    Arguments should have the same array size
    """
    predictions = []
    for i in range(0,len(networks)):
        input_2d = [np.asarray(inputs[i]).ravel()]
        predictions.append(networks[i].predict(input_2d))

    print('neutral network predictions:' + str(np.array(predictions).tolist()))

    return predictions
```

Рисунок 3.10 –Функція, що показує результати на основі навченої нейронної мережі та початкових даних.

3.1.9 Розрахунок відносної похибки у результатах

Для оцінки достовірності результатів застосовувався підхід, який полягає у поділі отриманих та експериментальних даних на часові інтервали. Отримані інтервали дають можливість порівнювати дані між собою, оскільки константи швидкості реакцій постійні під час процесу, тому отримані дані повинні збігатися.

На Рисунку 3.11 зображено програмний код, що проводить оцінку достовірності отриманих результатів

```
def getRelativeError(answersArray):
    avarageValues = []
    # make 2d array
    for i in range(0, len(answersArray)):
        answersArray[i] = answersArray[i].reshape(-1)

    for i in range(0, len(answersArray[0])):
        sum = 0
        for answerSet in answersArray:
            sum += answerSet[i]
        avarageValues.append(sum/len(answersArray))

    for a in range(0, len(answersArray)):
        for i in range(0, len(answersArray[a])):
            value = (abs(answersArray[a][i]-avarageValues[i])/avarageValues[i])*100
            answersArray[a][i] = round(value,3)

    print('relative error per answer in percent:' + str(np.array(answersArray).tolist()))
```

Рисунок 3.11 –Програмний код, що визначає відносну похибку обчислень

Результати розрахунків наводять наступним чином:

- Період, за який нейронна мережа пройшла навчання (1)
- Точність для кожної константи (2)
- Точність середня (3)
- Значення констант (4)
- Відносна похибка (5)
- Час виконання роботи (6)

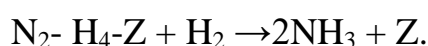
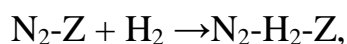
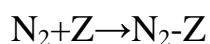
```
see machine learning insights
neural network for 0 5 time interval: (1)
accuracy per value:
[0.99986011 0.9173464 0.99840601] (2)
accuracy avarage: (3)
0.9718708397539499
neural network for 5 10 time interval: (1)
accuracy per value:
[0.99986543 0.92325449 0.99794242] (2)
accuracy avarage
0.9736874475731407 (3)
neural network predictions:
[[[3.0, 36.1, 110.4]], [[3.0, 36.24, 110.25]]] (4)
relative error per answer in percent
[[0.0, 0.194, 0.068], [0.0, 0.194, 0.068]] (5)
Time of execution: 19.5 seconds (6)
```

Рисунок 3.12 –Приклад виведення програмою результатів розрахунків

4 РЕЗУЛЬТАТИ ЕКСПЕРИМЕНТУ

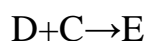
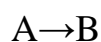
Визначення константи швидкості реакції синтезу NH_3 на залізному каталізаторі

В ході роботи досліджено запропонований механізм:



Переведемо назви речовин у символічні значення для подальшого введення в програму: N_2 – A, N_2Z – B, H_2 – C, $\text{N}_2\text{-H}_2\text{-Z}$ – D, $\text{N}_2\text{-H}_4\text{-Z}$ – E, NH_3 – F

Рівняння реакції має наступний вигляд:



Сформована система диференціальних рівнянь:

$$dC_A/dt = -k_1 C_A$$

$$dC_B/dt = k_1 C_A - k_2 C_B C_C$$

$$dC_C/dt = -k_2 C_B C_C - k_3 C_D C_C - k_4 C_E C_C$$

$$dC_D/dt = k_2 C_B C_C - k_3 C_D C_C$$

$$dC_E/dt = k_3 C_D C_C - k_4 C_E C_C$$

$$(dC_F/dt)^2 = k_4 C_E C_C$$

Результат роботи програми виглядає наступним чином:

see machine learning insights
neural network for 0 5 time interval:
accuracy per value:

[0.99986011 0.9173464 0.99840601 0.97461612]
 accuracy avarage:
 0.9718708397539499
 neural network for 5 10 time interval:
 accuracy per value:
 [0.99986543 0.92325449 0.99794242 0.96475143]
 accuracy avarage:
 0.9736874475731407
 neutral network predictions:
 [[[2.003, 2.564, 3.254, 8.008]], [[2.012, 2.583, 3.279, 8.002]]]
 relative error per answer in percent
 [[0.005, 0.001, 0.001, 0.000], [0.004, 0.001, 0.001, 0.000]]
 Time of execution: 7835 seconds

Можемо зробити висновок, про прийнятність похибки ($<0.2\%$) і тому результат можна вважати правдивим.

4.1 Можливі варіанти удосконалення продукту

Програма може бути вдосконалена в наступних напрямках:

- Розробка користувацького інтерфейсу;
- Можливість введення хімічних рівнянь в звичайному вигляді
- Виведення результатів роботи на кожному етапі.

5 ОЦІНКА РИНКОВИХ ПЕРСПЕКТИВ РЕАЛІЗАЦІЇ РОЗРОБКИ

5.1 Загальна характеристика розробки

Загальна характеристика розробки та основні техніко-економічні показники наведено в таблиці 5.1.

Таблиця 5.1 – Резюме стартап-проекту

Показник	Характеристика
1	2
Сутність ідеї	Розроблення програми для дослідження механізмів хімічних реакцій у середовищі Python
Наявність аналогів або прототипів ідеї	Прототипами ідеї є програми для розрахунку параметрів хімічних та хіміко-технологічних процесів.
Основна потреба, яку задовольнить реалізований стартап	Стартап задовольняє потребу виробництв хімічної промисловості в оптимізації процесу виробництва, оскільки полегшує підбір оптимальних параметрів.
Ступінь розробленості технології реалізації	Розроблено програмний код для обрахунку кінетичних параметрів процесу синтезу аміаку за запропонованим механізмом.
Класифікація продукту за міжнародною класифікацією товарів та послуг	Клас 42 (Наукові і технологічні послуги та досліджування і розробки, що їх стосуються; послуги з промислового аналізування, промислового досліджування та промислового дизайну; контролювання якості та послуги з аутентифікації; проєктування та

	розробляння комп'ютерного апаратного і програмного забезпечення) Базовий номер: 420220 (програмне забезпечення як послуга)
КВЕД, до якого може належати дане виробництво	Секція J (Інформація та телекомунікації), Клас 62.01 Комп'ютерне програмування
Очікувана потужність	Мале підприємство
За масштабом виробництва	Одиничне
За рівнем спеціалізації	Вузькопрофільне
За ресурсами, що споживатимуться	Інформаційномістке
За чисельністю персоналу	Мале
Органи управління при реалізації стартапу	Національні
Бажане географічне розташування	місто Київ
Місце ідеї у ланцюжку цінностей інноваційного процесу	Впровадження розробки
Гранична корисність ідеї стартапу	Споживач за 15000 грн отримує ліцензійне програмне забезпечення, що дозволяє оцінити ефективність вже існуючого методу виробництва або підібрати оптимальні параметри процесу виробництва при його впровадженні.

Бізнес-модель стартапу	B2B, бо клієнтами виступають інші підприємства – виробники в галузі хімічної промисловості
Конкуренти вітчизняні	В Україні основними конкурентами є підприємства, що надають послуги з аналізу та оцінки ефективності роботи підприємств у хімічній галузі.
Конкуренти іноземні	Іноземні IT-компанії, що займають аналізом даних та розробкою програмного забезпечення.
Ключові фактори успіху стартапу	<p>Продукт:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Не має аналогів • Дозволяє проводити вузькопрофільні розрахунки, що відповідні до певних процесів • Дозволяє підібрати оптимальні параметри процесів, таким чином полегшуючи організацію виробництва • Використовує методи, що дозволяють зменшити похибку в отриманих результатах та підвищити їх достовірність
Споживачі (на етапі впровадження)	Виробництва хімічної промисловості
Планова кількість продукту розробки для першого етапу реалізації	500 завантажень на рік

Споживачі на етапі розвитку	Збільшення на 45% кількості виробництв хімічної галузі, співпраця з підприємствами легкої промисловості
Споживачі на етапі зрілості	Виробники хімічної та легкої промисловості, вітчизняні та іноземні, високої потужності
Конкурентна ціна на продукт стартапу	4500 грн/рік
Плановий рівень рентабельності	44,82 %
Капіталовкладення в проект	2 055 480 грн
Період повернення капіталовкладень у проект	3,4 років
Джерела фінансування	Вітчизняні виробництва хімічної промисловості, зокрема ПрАТ «Рівнеазот», ПАТ «Сумихімпром»; Отримання кредитів у вітчизняних банках
Основні компоненти продукції стартапу	Програмне забезпечення
Потенційні постачальники складових компонентів розробки	Основним компонентом розробки є наявність теоретичної бази в області досліджень хімічних та хіміко-технологічних процесів. Тому основним постачальниками є науково-дослідні інститути України, зокрема НТУУ КПІ імені Ігоря Сікорського, Інститут фізично\ хімії імені Л.В. Писаржевського та інші.

Планове місце реалізації результату розробки	Через інтернет мережу
Наявність посередників при реалізації	Посередниками можуть виступати компанії, що проводять консультації під час впровадження або вдосконалення виробництв
Методи просування результатів розробки на ринок	Особистий продаж, реклама за допомогою підприємств, що займаються продажем хімічного обладнання та сировини, участь в наукових конференціях та ярмарках

На сьогодні, немає комп'ютерних програм, що містять в собі вузькоспеціалізовані функції для хіміків-технологів. При цьому розвиток хімічної промисловості потребує пошуку оптимальних варіантів організації виробництва.

Розроблена програма має вигляд додатку, що передбачає встановлення її на будь-який персональний комп'ютер.

Тема: Дослідження механізмів хімічних реакцій у програмному середовищі Python.

Метою стартапу є розробка програмного забезпечення, яке дозволяє підібрати параметри процесу шляхом аналізу механізмів, за якими даний процес перебігає.

Суб'єктом замовлення є кафедра технологій неорганічних речовин, водоочищення та загальної хімічної технології НТУУ КПІ імені Ігоря Сікорського.

Об'єктом дослідження є механізми хімічних реакцій.

Цінність даної розробки полягає в тому, що програмний продукт дозволяє оптимізувати параметри виробництва, зменшити витрати на

впровадження виробництва, отримати аналіз процесу з високою достовірністю.

Перевагою даного продукту є те, що аналіз хімічного процесу проходить без необхідності проведення експериментів, а лише за допомогою вже наявної теоретичної бази.

Для реалізації даного проекту було: розроблено програмний код для аналізу механізмів хімічних процесів.

Для реалізації даного проекту необхідно на основі створеного програмного коду створити програмне забезпечення.

5.2 Аналіз зовнішнього та внутрішнього середовища стартапу

Зовнішнє середовище безпосередньо не впливає на підприємство, але формує загрози і можливості цього підприємства. До зовнішнього середовища даного стартапу входять: науково-технічний прогрес, суб'єкти економічного середовища, суб'єкти демографії, політика. Їх наведено у таблиці 5.2.

Таблиця 5.2 – Аналіз загроз та можливостей зовнішнього середовища

Фактор	Можливості	Загрози
Науково-технічний прогрес	Удосконалення існуючих методів обробки даних призведе до покращення програмного продукту; поява можливостей для розширення функціоналу програми та використання її для	Старіння технології, що призведе до зниження попиту; поява аналогів та більш вдосконалених продуктів; необхідність підвищення кваліфікації персоналу

	виробництв інших галузей промисловості	
Економіка	<p>Стабільність економіки, низька інфляція, отримання грантів на розробку нових методів обробки інформації підвищують імовірність успішної реалізації програмного забезпечення.</p> <p>Сприятлива економічна ситуація призведе до появи нових підприємств, що спонукає збільшенню попиту</p>	<p>Нестабільність економіки знижують платіжну спроможність споживачів, що ускладнить реалізацію продукту</p>
Демографія	Збільшення частки кваліфікованого населення призведе до полегшення в розробці та удосконаленні продукту	Зменшення частки кваліфікованого населення ускладнить процес розробки програмного продукту
Політика	Захист авторських прав, отримання патентів, сприяння новим розробкам програмного забезпечення шляхом	Складний процес в отриманні патенту, що може призвести до появи копій, нестабільність політичної ситуацій

	вдосконалення законодавства в галузі інформаційних технологій.	призведе до ускладнення виходу на більш широкий ринок споживачів
--	----------------------------------------------------------------	------------------------------------------------------------------

Аналіз факторів зовнішнього оперативного середовища, до яких відносяться конкуренти, постачальники, споживачі, наведено у таблиці 5.3.

Таблиця 5.3 - Аналіз факторів зовнішнього оперативного середовища

Фактор	Переваги	Недоліки
Постачальники	Розширення теоретичної бази, шляхом проведення нових досліджень у хімічній галузі, дозволить розширити функціонал програмного забезпечення	Можливість зниження якості теоретичної бази, через недосконало проведені дослідження процесів, що знизить достовірність отриманих результатів аналізу
Споживачі	Зацікавленість виробників в удосконаленні технологій виробництва	Більшість вітчизняних виробників працюють за відпрацьованими схемами та не бачать потреби в оптимізації процесів виробництва
Конкуренти	Підвищення попиту шляхом порівняння з менш досконалим	Розробка конкурентами більш якісного та широко спеціалізованого програмного забезпечення

	програмним забезпеченням	
--	-----------------------------	--

В таблиці 5.4 наведено аналіз зацікавлених сторін, на базі того, , які загрози і можливості створює зовнішнє середовище та з урахуванням переваг і недоліків зовнішнього оперативного середовища.

Таблиця 5.4 – Аналіз зацікавлених сторін

Зацікавлена сторона	Вплив її на реалізацію	Цікавість її до проекту	Загальний коефіцієнт впливу на проект
1	2	3	4
Суб'єкти зовнішнього оперативного середовища			
Постачальники	10	6	0,6
Споживачі	8	8	0,64
Конкуренти	6	8	0,48
Суб'єкти зовнішнього середовища			
Політичні структури	7	2	0,14
Суб'єкти економічного середовища	8	8	0,64
Суб'єкти науково- технічного прогресу	10	9	0,9

Суб'єкти демографічного середовища	5	1	0,05
------------------------------------------	---	---	------

В таблиці 5.5 наведені переваги та недоліки внутрішнього середовища.

Таблиця 5.5 – Переваги та недоліки внутрішнього середовища підприємства

Складові внутрішнього середовища	Переваги	Недоліки
Організація управління	Раціональна організація структури підприємства	Недосконале знання переваг організаційно-правових форм організації бізнесу. Регулярні зміни в системі управління
Маркетинг	Реклама в компаніях, що реалізують хімічну сировину та обладнання	Підвищені витрати на початкових стадіях реалізації
Фінанси	Достатня кількість фінансових ресурсів, від зацікавлених сторін	Інфляція, потреба у кредитуванні, відсотки на виплати
Виробництво	Унікальність продукту	Необхідність оновлення та удосконалення програмного забезпечення
Персонал	Невелика кількість персоналу	Необхідність в кадрах з високою кваліфікацією

5.3 Визначення ключових факторів успіху проекту

Основними конкурентами є програми для розрахунку хіміко-технологічного обладнання, моделювання хімічних експериментів: ChemLab, AcidBaseLab, ACD/NMR Predictors.

В таблиці 5.6 проведено визначення ключових факторів успіху проекту методом Шонфільда.

Таблиця 5.6 – Оцінка характеристики за методом Шонфільда

Показник	Коефіцієнт значущості	Оцінка за п'ятибальною шкалою			
		Продукт	ChemLab	AcidBaseLab	ACD/NMR Predictors
Ціна	0,1	5	5	3	3
Вузька спеціалізація	0,25	5	2	1	4
Об'єм аналізованої інформації	0,25	5	3	1	5
Швидкість видачі результатів	0,2	4	5	5	4
Вимоги до потужності ПК	0,1	3	5	4	4
Інтерфейс	0,1	5	1	5	3

У таблиці 5.7 було визначено бальну оцінку з урахуванням коефіцієнтів вагомості характеристик.

Таблиця 5.7 – Бальна оцінка характеристик продукції

Показник	Бальна оцінка характеристики			
	Продукт	ChemLab	AcidBaseLab	ACD/NMR Predictors
Ціна	$0,1 \cdot 5 = 0,5$	$0,1 \cdot 5 = 0,5$	$0,1 \cdot 3 = 0,3$	$0,1 \cdot 3 = 0,3$
Вузька спеціалізація	$0,25 \cdot 5 = 1,25$	$0,25 \cdot 2 = 0,5$	$0,25 \cdot 1 = 0,25$	$0,25 \cdot 4 = 1$
Об'єм аналізованої інформації	$0,25 \cdot 5 = 1,25$	$0,25 \cdot 3 = 0,75$	$0,25 \cdot 1 = 0,25$	$0,25 \cdot 5 = 1,25$
Швидкість видачі результатів	$0,2 \cdot 4 = 0,8$	$0,2 \cdot 5 = 1$	$0,2 \cdot 5 = 1$	$0,2 \cdot 4 = 0,8$
Вимоги до потужності ПК	$0,1 \cdot 3 = 0,3$	$0,1 \cdot 5 = 0,5$	$0,1 \cdot 4 = 0,4$	$0,1 \cdot 4 = 0,4$
Інтерфейс	$0,1 \cdot 5 = 0,5$	$0,1 \cdot 1 = 0,1$	$0,1 \cdot 5 = 0,5$	$0,1 \cdot 3 = 0,3$

На підставі отриманих бальних оцінок будуємо графік порівняння конкурентних переваг нашого підприємства з конкурентами (рисунок 5.1).

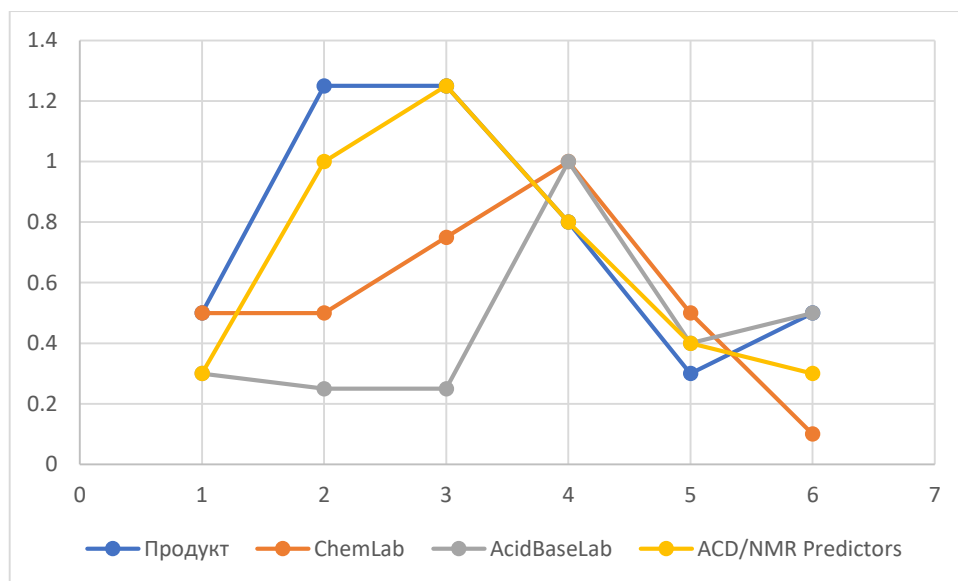


Рисунок 5.1 – Порівняння конкурентних переваг продукту та конкурентів.

Проаналізувавши отримані результати, можна зробити висновок, що ключовим фактором успіху є вузька спеціалізація даного продукту

Для розвитку проекту необхідно провести оптимізацію програмного забезпечення для зниження потреб в програмному забезпеченні ПК.

5.4 Розрахунок ціни інноваційної пропозиції на ринку

Таблиця 5.8 – Першочергові вкладення на запуск проекту

Назва	Сума, грн
Приміщення	250 000
Персональні комп'ютери	100 000
Нематеріальні активи	25 000
ЗП персоналу на 1 рік:	
Директор (1)	300 000
Програміст (2)	456 000
Хімік-технолог (1)	180 000
Теоретична база (витрати на 1 рік)	65 000

Реклама	30 000
Електроенергія та інші витрати	100 000
Разом	1506000

Фонд оплати праці (ФОП) становить, грн/рік:

$$\text{ФОП} = \text{ЗП} \cdot (1 + 0,22), \quad (5.1)$$

де ЗП - заробітна плата, грн/рік:

$$\text{ФОП} = 936\,000 \cdot 1,22 = 1\,141\,920 \text{ грн/рік.}$$

Амортизаційні відрахування розраховуються за формулою, грн/рік:

$$A = \frac{V_{\text{обл}}}{T_{\text{експ}}} + \frac{V_{\text{нем.акт.}}}{T_{\text{експ}}} + \frac{V_{\text{спор}}}{T_{\text{експ}}}, \quad (5.2)$$

де $V_{\text{обл}}$, $V_{\text{інв}}$, $V_{\text{нем.акт.}}$, $V_{\text{спор}}$ – вартість обладнання, інвентарю, нематеріальних активів, споруд і будівель відповідно, грн;

$T_{\text{експ}}$ – термін експлуатації основних фондів, рік.

$$A = \frac{100\,000}{5} + \frac{25\,000}{12} + \frac{250\,000}{15} = 38\,750 \frac{\text{грн}}{\text{рік}}.$$

У таблиці 5.9 наведено калькуляцію продукції.

Таблиця 5.9 – Калькуляція

Затрати	Витрати		% від собівартості
	На рік, грн/рік	На од. продукції, грн/пр	
Амортизація	38 750	77,5	2,82
Оборотні фонди	195 000	390	14,17
ФОП	1 141 920	2283,84	83,01

Собівартість	1 375 670	2751,34	
--------------	-----------	---------	--

Кількість випущеної продукції за рік становить 300 завантажень (передплата на 1 рік).

Метод повних витрат. Ціна розраховується, виходячи із суми постійних і змінних витрат на одиницю продукції й запланованого прибутку з урахуванням нижнього порогу ціни.

$$\text{Ц} = \text{С} + \text{П}, \quad (5.3)$$

де Ц – ціна одиниці товару, грн;

С – собівартість одиниці товару, грн;

П – величина прибутку, яку бажає отримати підприємство від реалізації одиниці товару, грн.

$$\text{Ц} = 2751,34 + 1\,000 = 3751,34 \text{ грн.}$$

Метод точки беззбитковості. При розрахунку даним методом, підприємець прагне встановити таку ціну, яка забезпечить йому бажану величину чистого прибутку.

$$\text{П} = \text{Ц} - \text{С} = 0. \quad (5.4)$$

Знайдемо ціну, за якою необхідно продавати продукцію, щоб вийти на точку беззбитковості.

$$\text{Ц} = \text{С}. \quad (5.5)$$

$$\text{Ц} = 2752,34 \text{ грн}$$

Досить обмежено використовують агрегатний метод. Його суть полягає в підсумовуванні цін окремих конструктивних частин виробів (деталей, вузлів, комплектуючих), що входять до параметричного ряду, а

також додаванні нормативному прибутку. Для даного проекту такий метод не підходить, оскільки програмне забезпечення не є сумою комплектуючих.

Для встановлення ціни за параметричним методом, що враховує вагомість якісних параметрів товару і оцінку цих параметрів споживачем, використаємо бальну оцінку, яка розрахована раніше в методі Шонфільда.

$$Ц_1 = Ц_2 \cdot (Б_1 / Б_2), \quad (5.6)$$

де $Ц_1$ – ціна продукту, грн/завантаження;

$Ц_2$ – ціна відомого ПЗ ACD/NMR Predictors, грн;

$Б_1$ – балова оцінка продукту;

$Б_2$ – балова оцінка ПЗ ACD/NMR Predictors.

$$Ц_1 = 5\,200 \cdot (4,6/4,05) = 5\,906,2 \text{ грн.}$$

Отже, виходячи з розрахунків усіх методів формування ціни на ринку, можемо зробити висновок, що ціна 5000 грн є доступною.

Далі наведено розрахунок техніко-економічних показників.

Річна собівартість продукції, грн/рік:

$$C_p = \text{ОбФ} + A + \text{ФОП}. \quad (5.7)$$

$$C_p = 195\,000 + 38\,750 + 114\,1920 = 1\,375\,670 \text{ грн/рік.}$$

Вартість випущеної продукції за рік, грн/рік:

$$Ц_p = Ц_{\text{од}} \cdot V_{\text{рік}}. \quad (5.8)$$

$$Ц_p = 5000 \cdot 500 = 2\,500\,000 \text{ грн/рік.}$$

Собівартість одиничної продукції, грн:

$$C = C_p / V_{\text{рік}}. \quad (5.9)$$

$$C = 1\,375\,670 / 500 = 2751,34 \text{ грн.}$$

Прибуток, грн/рік:

$$\Pi = \Pi_p - C_p. \quad (5.10)$$

$$\Pi = 2\,500\,000 - 1\,375\,670 = 1\,124\,330 \text{ грн/рік.}$$

Капіталовкладення, грн:

$$K = O\Phi + O\Omega. \quad (5.11)$$

$$K = 375\,000 + 1\,336\,920 = 1\,711\,920 \text{ грн.}$$

Рентабельність виробництва, %:

$$P = (\Pi / C_p) \cdot 100\%. \quad (5.12)$$

$$P = (1\,124\,330 / 1\,375\,670) \cdot 100\% = 81,7 \, \%.$$

Період повернення капіталовкладень, рік:

$$T_{\text{пов}} = K / \Pi. \quad (5.13)$$

$$T_{\text{пов}} = 1\,711\,920 / 1\,124\,330 = 1,5 \text{ роки.}$$

Ефективність підприємства:

$$E = \Pi / K. \quad (5.14)$$

$$E = 1\,124\,330 / 1\,711\,920 = 0,66.$$

Фондовіддача, грн/грн:

$$\Phi B_{O\Phi} = \Pi_p / O\Phi. \quad (5.15)$$

$$\Phi B_{O\Phi} = 2\,500\,000 / 375\,000 = 6,67 \text{ грн/грн.}$$

$$\Phi B_{O\Omega} = \Pi_p / O\Omega. \quad (5.16)$$

$$\Phi B_{O\Omega} = 2\,500\,000 / 1\,336\,920 = 1,87 \text{ грн/грн.}$$

Фондоємність, грн/грн:

$$\Phi E_{O\Phi} = 1 / \Phi B_{O\Phi}. \quad (5.17)$$

$$\Phi E_{O\Phi} = 1 / 6,67 = 0,15 \text{ грн/грн.}$$

$$\Phi E_{063} = 1 / \Phi B_{063}. \quad (5.18)$$

$$\Phi E_{063} = 1 / 1,87 = 0,54 \text{ грн/грн.}$$

Отже, прибуток становитиме 1 124 330 грн/рік при капіталовкладенні 1711920 грн. При цьому рентабельність складає 81,7 %, а коефіцієнт економічної ефективності – 0,66. Термін повернення капіталовкладень для даного стартапу складає 1,5 роки.

5.5 Оцінка ризику впровадження нової технології

На кожній стадії життєвого циклу стартапу можна виділити ризики, що впливають на подальший розвиток проекту. Ступінь впливу таких ризиків індивідуальний для кожного проекту. У таблиці 5.10 наведено джерела виникнення ризиків на стадіях життєвого циклу проекту.

Таблиця 5.10 – Ризики інноваційної діяльності за стадіями реалізації стартап проекту

Стадія проекту	Характеристика ризику
Розробка ідеї стартапу	
Проведення пошукових досліджень	Невірний напрямок пошукових досліджень, помилки в постановці завдань, помилки в розрахунках і т.д.
Встановлення функціоналу програми	Неправильний вибір функціоналу програмного забезпечення, що не відповідає поставленим задачам
Реалізація ідеї	
Отримання патенту	Невідповідність вимогам для отримання патент, аналоги.
Інвестування	Недостатнє фінансування інвесторами

Підбір кадрів	Недостатня кваліфікація працівників, відсутність персоналу високої кваліфікації на ринку праці
Оформлення документів	Невчасне, помилкове оформлення документів
Впровадження у виробництво	
Розробка програмного забезпечення	Виявлення помилок в роботі програми, низький рівень точності отриманих результатів
Платоспроможність фірми	Ризик настання неплатоспроможності фірми, відсутність коштів оплати постачальникам, виплат за позиками
Підвищення витрат на заробітну плату	Виявлення необхідності в додаткових трудових ресурсах
Масова реалізація	
Поява аналогів	Поява на ринку конкурентів з кращим функціоналом або нижчою вартістю
Рівень інфляції	Високий рівень інфляції. Зниження купівельної спроможності споживачів через зменшення їх доходу

У таблиці 5.11 наведено ризики інноваційної діяльності, ймовірність їх настання та вплив на очікуваний результат.

Таблиця 5.11 – Ризики інноваційної розробки та ймовірність їх настання

Види ризиків	Назва ризику	Ймовірність настання	Вплив на очікуваний результат

Зовнішні ризики			
1. Загально економічні	1. Економічна ситуація	3	2
	2. Рівень державного регулювання	1	2
	3. Рівень доходів підприємств	2	2
2. Конкурентні	1. Ймовірність технологічного відставання від інших підприємств	2	2
3. Правові	1. Ступінь розвитку законодавчої бази	1	1
	2. Ліцензійна політика, патентна захищеність	3	3
4. Форсмажорні	1. Ризик природних та техногенних катастроф	1	1
	2. Ризик різких соціальних змін	1	1
5. Інші	1. Політичні	2	1
Внутрішні ризики			
6. Технологічні	1. Низький рівень розвитку технологій	2	2
	2. Ризик конфлікту програмного забезпечення	1	3
7. Управлінські	1. Неправильний вибір пріоритетів інноваційної політики	2	3
	2. Неефективна організаційна структура	1	3
8. Фінансові	1. Затримка фінансування, помилки в прогнозуванні затрат	2	3

9. Кадрові	1 Відтік кваліфікованого персоналу	3	3
------------	------------------------------------	---	---

У таблиці 5.12 запропоновано план заходів для подолання та мінімізації ризиків, що відіграють найбільший негативний вплив на очікуваний результат.

Таблиця 5.12 - Перелік заходів щодо подолання та мінімізації ризиків

Ризики	Заходи по подолання та мінімізації ризиків
Економічні	Прогнозування та ефективне планування
Конкурентні	Постійний моніторинг роботи конкурентів, дослідження ринку
Технологічні	Вдосконалення методів та методик, програмного забезпечення відповідно до розвитку науково-технічного прогресу
Управлінські	Ретельний підхід до організації виробництва. Ефективний підбір відповідних стратегій пропагування та впровадження інновацій
Фінансові	Створення резервів в грошовій формі. Укладання взаємовигідних договорів з інвесторами. Чітко прописані умови укладання кредитного договору. Страхування майна
Кадрові	Залучення високо кваліфікованих кадрів за рахунок матеріальної та нематеріальної мотивації.

6 ОХОРОНА ПРАЦІ ТА БЕЗПЕКА В НАДЗВИЧАЙНИХ СИТУАЦІЯХ

Відповідно до основної частини даної роботи було проведено аналіз шкідливих та небезпечних виробничих факторів. У процесі роботи використовувалась електрична енергія.

Робота була виконана з урахуванням вимог охорони праці та пожежної безпеки. На основі аналізу шкідливих і небезпечних факторів в даному розділі було розроблено заходи щодо покращення умов праці на робочому місці, пожежної безпеки та безпеки у надзвичайних ситуаціях.

6.1 Охорона праці

6.1.1 Виявлення та аналіз шкідливих та небезпечних виробничих факторів на об'єкті

6.1.1.1 Повітря робочої зони

Роботи, що виконувались під час написання роботи, відповідно до ДСН 3.3.6.037–99 [26], відносяться до категорії Ia; робоче місце — постійне. У таблицях 6.1 та 6.2 оптимальні та допустимі величини параметрів мікроклімату при даних умовах. Таблиця 6.3 містить санітарну характеристику робочого приміщення.

Таблиця 6.1 — Оптимальні величини температури, відносної вологості та швидкості руху повітря в робочій зоні

Період року	Температура повітря, °С		Відносна вологість, %		Швидкість руху повітряних мас, м/с	
	Оптимальна	Реальна	Оптимальна	Реальна	Оптимальна	Реальна
Холодний	22-24	22	40-60	50	0,1	<0,1
Теплий	23-25	27	40-60	60	0,1	<0,1

Для нормалізації повітря передбачено кондиціонування та аерацію.

З метою ефективної ліквідації пилу щоденно проводиться вологе прибирання.

Таблиця 6.2 — Допустимі величини температури, відносної вологості та швидкості руху повітряних мас в робочій зоні

Період року	Температура повітря, °C	Відносна вологість, %	Швидкість руху повітряних мас, м/с
Холодний	21-25	75	Менше 0,1
Теплий	22-28	55 при 28°C	0,1-0,2

Таблиця 6.3 — Коротка санітарна характеристика робочого приміщення

Назва приміщення	Кімната
Назва шкідливої речовини	Аміак
Група шкідливої речовини	Подразнююча
Клас небезпечності шкідливої речовини	IV
ГДК шкідливої речовини у повітрі, мг/м ³	20
Агрегатний стан	Газ
Засоби індивідуального захисту	Фільтруючий промисловий протигаз марки А
Засоби долікарської допомоги	Свіже повітря

Параметри мікроклімату вимірювалися наступними приладами: термометром, психрометром та анемометром

6.1.1.2 Виробниче освітлення

Проводжувані роботи, згідно з ДБН В.2.5-28-2006 [27], можна віднести до II розряду зорових робіт середньої точності. Санітарні норми освітлення за таких умов зведені до таблиці 6.4.

Таблиця 6.4 — Санітарні норми освітлення робочої зони

Штучне освітлення		Освітленість на робочій поверхні від системи загального освітлення, лк	100
		Циліндрична освітленість, лк	Не нормується
		Показник дискомфорту, М	60
		Коефіцієнт пульсації освітленості Кп, %	20
Природне освітлення	КПО, %	верхнє або верхнє і бокове	2,0
		бокове	0,5

Для забезпечення даних норм у кімнаті передбачені наступні системи освітлення: природне бокове, загальне штучне, штучне місцеве та суміщене; встановлені три нормальні люмінесцентні лампи загального освітлення та одна — місцевого, потужністю 20 та 15 Вт відповідно, які забезпечують питому встановлену потужність близько 3 Вт/м², що не перевищує максимально допустимої за будь-якого індексу приміщення за умови освітленості на робочій поверхні від системи загального освітлення 100 лк.

Раз на рік передбачено контроль освітлення люксометром 10-116.

6.1.1.3 Виробничий шум і вібрація

Згідно з ДСН 3.3.6.037–99 [28], допустимий рівень шуму на робочому місці складає 50 дБА (таблиця 6.5), як для робіт творчої діяльності.

Таблиця 6.5 — Допустимі рівні звукового тиску та шуму

Вид трудової діяльності, робоче місце	Рівні звукового тиску в дБ в октавних смугах з середньо-геометричними частотами, Гц								Рівень шуму, дБА
	31,5	125	250	500	1000	2000	4000	8000	
Творча діяльність; робоче місце типу кабінет	86	61	54	49	45	42	40	38	50

Головними джерелами шуму в нашому випадку були витяжні шафи та мішалки.

Фактичне значення рівня звуку складало 35 дБА, що задовольняє вимогам. Отже, розробляти додаткові заходи боротьби з шумом немає потреби.

6.1.1.4 Електробезпека

Більшість часу робота проходила за персональним комп'ютером. Він живиться постійним струмом силою 3,25 А та напруги 20 В (згідно з характеристиками, вказаними на блоці живлення) від трифазної мережі змінного струму промислової частоти 50 Гц та напруги 220 В з глухозаземленою нейтраллю.

При експлуатації електрообладнання можливі змішані електричні травми у результаті порушення ізоляції.

Для змінного струму із частотою 50 Гц гранично допустимі значення напруги дотику й струму, що проходить через тіло людини, при аварійному режимі: $U_{\text{дот}} = 36 \text{ В}$, $I_{\text{л}} = 6 \text{ мА}$; при нормальному режимі роботи електричного обладнання: $U_{\text{дот}} = 2 \text{ В}$, $I_{\text{л}} = 0,3 \text{ мА}$. Струм, який проходить через тіло людини, розраховується за формулою, мА:

$$I_{\text{л}} = \frac{U_{\text{ф}} \cdot 10^3}{R_{\text{л}} + R_0}$$

де $U_{\text{ф}}$ — фазова напруга, В; $R_{\text{л}}$ — опір тіла людини, Ом; $R_{\text{л}} = 2...4 \text{ кОм}$; R_0 — опір нейтралі заземлення, Ом; $R_0 = 4 \text{ Ом}$.

$$I_{\text{л}} = \frac{220 \cdot 10^3}{4000 + 4} = 0,055 \text{ А.}$$

Напруга дотику:

$$U_{\text{д}} = I_{\text{л}} \cdot R_{\text{л}} = 0,055 \cdot 4000 = 220 \text{ В.}$$

Порівнюючи розрахункові значення з нормативними, бачимо, що при порушенні вимог ПУЕ можуть мати місце електричні травми з важким наслідками.

Безпека експлуатації при нормальному режимі електроустановок дотримуватиметься наступними чинниками: ізоляцією струмоведучих частин (опір ізоляції не менш 0,5 МОм) та їх недоступністю. В аварійному режимі роботи електрообладнання як захід електробезпеки передбачено заземлення.

6.2 Безпека в надзвичайних ситуаціях

6.2.1 Атестація робочого місця

Карта умов праці на робочому місці

№	Фактори виробничого середовища	Норматив ГДР, ГДК	Фактичне значення	Ступінь шкідливості фактора X	Тривалість за зміну, Т	Шкідливість фактична, (Xфакт), балів
1	Шкідливі хім. речовини, мг/м ³ I клас небезпечності II III–IV	- - 20	- - 2	-	1	-
2	Пил, мг/м ³	0,1	0,2	2	1	2
3	Температура робочої зони, °C	22-28	28	-	1	-
4	Шум, дБА	50	50	-	1	-
5	Швидкість повітря, м/с	0,1-0,2	0,1	-	1	-
6	Напруженість праці: Увага, % Напруженість аналізаторних функцій	<div style="text-align: center;"> <p>>75</p> <p>Робота високої точності</p> </div>				

Сума значень факторів виробничого середовища, ($\Sigma X_{\text{факт}}$) балів: 2.

Розмір доплати за умови праці: 4 %.

Відповідальний за заповнення карти: Осьмук М. П.

Дата заповнення: 01.12.2020 р.

6.2.2 Безпека експериментальної частини

До самостійної роботи в лабораторії допускаються особи, що досягли 18 років та пройшли відповідні інструкції.

До робочого обладнання можна віднести переважно ПК, взаємодія з яким при недотриманні норм роботи з електричним обладнанням може призвести до пожежі та навіть вибуху відносно невеликої сили.

Головними засобами запобігання вище названої ситуації є суворе дотримання правил експлуатації обладнання. Усі електричні прилади підлягають заземленню. Для надання першої допомоги передбачена аптечка з необхідним набором медикаментів.

6.2.3 Пожежна безпека

У робочому приміщенні можливими джерелами пожежі є перенавантаження електрообладнання, іскри електрообладнання, електрозамикання, накопичення статичної електрики, руйнування кабелю, проводки, прямий удар блискавки в споруду, пожежа у сусідньому приміщенні (кухні). Заходи з пожежної профілактики поділяються на організаційні, технічні, режимні, експлуатаційні.

Організаційні заходи передбачають правильну експлуатацію устаткування, своєчасний інструктаж працюючих, проведення занять з пожежно-технічного мінімуму, створення добровільних пожежних дружин, перевірку їх готовності до пожежогасіння, тренування, створення пожежно-технічних комісій.

До технічних заходів відноситься дотримання протипожежних норм і правил при конструюванні та проектуванні будівель, обладнання,

утримання в справному стані обладнання, суворий контроль за дотриманням правил експлуатації та дотримання правил та інструкцій з протипожежної безпеки.

До заходів пожежної профілактики при проектуванні і будівництві належать: підвищення вогнестійкості будівель та споруд; зонування території (планування з урахуванням ознак пожежної небезпеки); протипожежні розриви; протипожежні перешкоди.

Заходи режимного характеру регулюють режим і правила роботи. Куріння допускається тільки у спеціально відведених місцях, обладнаних урнами і ємностями з водою. У цих місцях повинні бути вивішені написи «Місце для куріння».

Експлуатаційними заходами є своєчасні ремонти, огляд, випробування обладнання.

У таблиці 6.6 наведені показники пожежо- і вибухонебезпечності речовин і матеріалів і класифікація приміщення за пожежо- і вибухонебезпечністю. Для гасіння джерел пожежі поряд з робочими місцями обладнуються протипожежні щити з набором засобів пожежегасіння: вогнегасники вуглекислотні ВВ-2, ВВ-5, ВВ-8, пінні вогнегасники і ящики з піском.

Таблиця 6.6 — Показники пожежо- і вибухонебезпечності речовин та матеріалів. Класифікація виробництва щодо пожежо- і вибухонебезпечності та влаштування блискавкозахисту

Назва ділянки	Лабораторія	
	Папір	Електроізоляція
Речовини, що використовуються у виробництві	Твердий	Твердий
Агрегатний стан	Твердий	Твердий
Горючість, займистість	Горючий	Горючий
Температура спалаху	223	220
Швидкість загорання	432	152
Вогнегасні засоби	Вогнегасник ВХП	Вогнегасник ВХП
Категорія приміщення за ОНТП 24-86	В	
Клас приміщення згідно з ПУЕ	2	

Категорія об'єкта і тип зони захисту щодо влаштуванню блискавкозахисту за СН 305-77В	II A
--------------------------------------------------------------------------------------	------

Для запобігання прямого удару блискавки будівля захищена стрижньовими блискавковідводами.

6.2.4 Аналіз небезпеки об'єкта, який проектується

Даний об'єкт, згідно з положенням «Про план ліквідації аварійних ситуацій», відноситься до категорії А. Постадійний аналіз умов виникнення та розвитку аварій зведено до таблиці 6.7.

Таблиця 6.7 — Аналіз умов виникнення та розвитку аварійних ситуацій

Найменування стадії розвитку аварійної ситуації	Основні принципи аналізу умов виникнення (переходу на іншу стадію) аварійної ситуації (аварії) та її наслідків	Способи попередження та засоби локалізації аварії
Виникнення пожежі	Порушення цілісності ізоляційного матеріалу; недотримання вимог техніки безпеки та правил користування обладнанням	Дотримання вимог техніки безпеки та правил користування обладнанням; використання засобів пожежогасіння
Перекидання полум'я на інші об'єкти	Наявність поруч з джерелом пожежі горючих предметів	Локалізація потенційних джерел займання
Викид	Знос обладнання, порушення правил експлуатації	Блокування аварійної апаратури, обмеження; виведення людей з небезпечної зони
Природні катаклізми	Стихія	Організаційні засоби: вивчення правил поведінки при стихійних лихах

Основною аварійною ситуацією може бути виникнення пожежі. Для її ліквідації в лабораторії передбачені вогнегасники, а також ящики з піском. При виникненні пожежі в лабораторії знаходяться два запасних

виходи (розмір дверей $L = 0,8$ м), ширина коридору — 1,1 м, наявні площадки (1,2 м²) та є план евакуації при пожежі.

Визначення можливих втрат людей в осередку ураження площею $0,5 \times 0,5$ км².

Враховуючи, що забезпеченість людей протигазами становить 80%, маємо наступні втрати:

а) у разі перебування людей у будівлях і простіших укриттях:

$$B = 100 \cdot 0,14 = 14 \text{ осіб};$$

б) у разі перебування людей на відкритій місцевості:

$$B = 100 \cdot 0,25 = 25 \text{ осіб}.$$

Встановлюємо структуру втрат:

— легкого ступеня: $25 \cdot 0,25 = 6$ осіб;

— середньої тяжкості: $25 \cdot 0,4 = 10$ осіб;

— смертельне ураження: $25 \cdot 0,35 = 9$ осіб.

ВИСНОВКИ

В даний дипломній роботі проведено дослідження запропонованого механізму гетерогенних хімічних реакцій за допомогою програмного продукту, створеного на базі кафедри. Програмний продукт розраховує значення констант швидкості на основі введених експериментальних даних користувачем, а саме : запропонованої системи рівнянь, припущення діапазону констант швидкості, зміни концентрацій реагентів та продуктів реакції. Розраховано константи швидкості реакцій окислення двоокису сірки та синтезу аміаку.

В ході роботи виявлено, що програма має додаткові обмеження по кількості реагентів та продуктів реакції в результаті чого диференціальні рівняння розраховуються не вірно. Максимальна кількість молекул реагентів або продуктів реакції має бути не більшою 4 одиниць.

Середня похибка в розрахунку констант склала 2,7%. Залежно від кількості спостережень час навчання нейронної мережі може змінюватись від 16 до 120 секунд для п'яти диференціальних рівнянь.

В межах дипломної роботи було створено алгоритм прогнозування констант швидкості хіміко технологічної схеми та проведено навчання нейронної мережі. Значення похибок свідчать про те, що прогнозування було проведено з високою точністю. Створений алгоритм послугує в подальшому для дослідження процесів, які недостатньо вивчені. Результатом дослідження є підсумковий вигляд експерименту, який може використовуватись для інших розрахунків.

Наступна статистика отримана в результаті роботи алгоритму:

- Середнє арифметичне відхилення - 0,000076 ,
- Середньоквадратичне відхилення - 0,000137 ,
- Відносне арифметичне відхилення – 0,
- Відносне середньоквадратичне відхилення – 0,
- Коефіцієнт змішаної кореляції - 1.

ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

1. Воробьев Н.И. - технология связанного азота и азотных удобрений / Н.И. Воробьев – Л: Химия, Минск 2011. - 216 с.
2. Кожухар В.Я. Технологія зв'язаного азоту: навчальний посібник / В.Я. Кожухар, Л.М. Ерайзер, В.В. Брем, Ю.М. Спутатов та ін. – Одеса: ОНПУ, 2013. - 280 с. – ISBN 978-966-2601-01-5.
3. Черненко Я. М. Каталізатори та сорбенти / Я. М. Черненко М. Д. Волошин Л. П. Ларичева - Дніпровський державний технічний університет (ДДТУ) 2017. – 306с.
4. Artificial Neural Networks as Models of Neural Information Processing | Frontiers Research Topic/ Marcel van Gerven, Sander Bohte, 2018. – 220 с.
5. Are connectionist models neurally plausible? A critical appraisal/ М. Papadatou-pastou, 2011. – 12 с.
6. Перерва А. С. Застосування генетичного алгоритму для визначення ефективної конфігурації штучних нейронних мереж / Перерва А. С. , Ковалюк Т. В. // ЖУРНАЛ НАУКОВИЙ ОГЛЯД № 4(47), – Київ: НТУУ «КПІ», 2018. – 149 с.
7. Azure Machine Learning Studio [Електронний ресурс]: URL: <https://studio.azureml.net>.
8. Developing Big Data Solutions with Azure Machine Learning [Електронний ресурс]: URL: <https://www.edx.org/course/developing-big-data-solutions-with-azure-machine-learning-4>
9. Random Multiclass Classification: Generalizing Random Forests to Random MNL and Random NB/Prinzie A, Poel D, 2007. 349 с
- 10.Classification and interaction in random forests/Denisko D, Hoffman MM 2018.: 1690–1692.

- 11.Методичні рекомендації до виконання магістерської дисертації для студентів спеціальності 8.05130101 «Хімічні технології неорганічних речовин» хіміко-технологічного факультету. /Укладачі: проф. Астрелін І.М., доц. Концевой А.Л. – НТУУ «КПІ», 2019. – 38 с
- 12.Кудрявцев С.О. ПРОЦЕС ОКИСНЕННЯ SO₂ ДО SO₃ ЗА ТЕХНОЛОГІЄЮ АЕРОЗОЛЬНОГО НАНОКАТАЛІЗУ/Семьонов І.Ю., Сердюкова М.Г., Кудрявцев С.О. - Східноукраїнський національний університет ім. В. Даля Технологічний інститут, с 27-29.
- 13.Боресков Г.К. - Катализ в производстве серной кислоты/ Боресков Г.К. - Государственное научно техническое издательство химической литературы, Москва 1954. - 350с.
- 14.ДСН 3.3.6.037–99. Санітарні норми виробничого шуму, ультразвуку та інфразвуку [Текст]. – Чинний від 01.12.1999. – Міністерство охорони здоров'я України, 1999. – 15 с.
15. ДБН В.2.5.-28-2006 Природне і штучне освітлення [Текст]. – Чинний від 15.05.2006. – Державні будівельні норми України, 2006. – 96 с.
- 16.ДСН 3.3.6.037–99. Санітарні норми виробничого шуму, ультразвуку та інфразвуку [Текст]. Чинний від 01.12.1999. – Міністерство охорони здоров'я України, 1999. – 15 с.