

ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ.....	9
ВСТУП.....	10
1 ОСНОВНІ ПОНЯТТЯ КОЛИВАЛЬНИХ ПРОЦЕСІВ В ХІМІЧНІЙ КІНЕТИЦІ	13
1.1 Автохвильові процеси	14
1.2 Основні поняття хімічної кінетики	15
1.3 Послідовність математичного опису реальних систем.....	18
1.4 Математична модель проточного реактора з мішалкою.....	20
1.5 Про чутливість оптимальних режимів хімічних процесів.....	21
1.6 Аналіз параметричної чутливості стаціонарних режимів хімічних реакторів.....	23
1.7 Постановка задачі.....	25
2 КІНЕТИКА РЕАКЦІЇ БІЛОУСОВА-ЖАБОТИНСЬКОГО	27
2.1 Схема реакції Білоусова Жаботинського, яка каталізується фероїном.....	27
2.2 Кінетична модель процесу	32
2.3 Розрахунок математичної моделі процесу Білоусова-Жаботинського	33
2.4 Висновки за розділом	34
3 МОДЕЛЮВАННЯ ЧУТЛИВОСТІ СКЛАДНИХ ХІМІЧНИХ СИСТЕМ	35
3.1 Методи розрахунку чутливості та їх використання при дослідженні кінетики хімічних процесів.....	35
3.2 Аналітичний метод розрахунку чутливості	36
3.3 Числові методи розрахунку чутливості	37
3.4 Моделювання чутливості періоду автоколивальної реакції Білоусова- Жаботинського до зміни значень констант швидкостей	39
3.5 Висновки за розділом	40
6 РОЗРОБКА ПРОГРАМНОГО ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ	41
6.1 Алгоритм розрахунку	41
6.2 Структура програмного забезпечення	42
6.3 Інструкція користувачу програмного забезпечення.....	44
6.5 Висновки за розділом	46
7 РОЗРОБКА СТАРТАП ПРОЕКТУ	47

7.1 Аналіз зовнішнього та внутрішнього середовища стартапу	49
7.2 Аналіз потенційних споживачів	50
7.3 Паспорт споживача	51
7.4 Аналіз джерел фінансування стартапу	51
7.5 Розрахунок ціни інноваційної пропозиції на ринку	52
7.6 Стратегія конкурентної поведінки на ринку	55
7.7 Вибір бізнес-моделі стартапу.....	56
7.8 Карта бізнес-процесів виконання стартап-проекту	58
7.9 Системний аналіз бізнес-процесів стартап-проекту	59
7.10 Оцінка ризиків і страхування розробки	60
7.11 Господарські ризики та страхування розробки	60
7.12 Висновки до розділу	61
ВИСНОВКИ.....	62
ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ	64
Додаток А.....	67
Додаток Б.....	68
Додаток В	89

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ

T – абсолютна температура, К;

R – універсальна газова стала, Дж/(моль·К);

E – енергія активації, Дж;

k_A - передекспоненційний множник, який характеризує частоту зіткнень молекул, $M^{-1} \cdot c^{-1}$;

v_i – швидкість i -ї стадії реакції, моль/($m^3 \cdot c$);

ω_i – швидкість реакції по i -й речовині, моль/($m^3 \cdot c$);

t – час, с;

C_i – концентрація по i -му компоненту, моль/ m^3 ;

$C_{i_{вх}}$ – концентрація i -го компоненту у вхідному потоці, моль/ m^3 ;

k_i – константа швидкості реакції, $M^{-1} \cdot c^{-1}$;

τ_k – час оновлення реактора, с;

k_0 – швидкість подачі реагентів в реактор, c^{-1} ;

ПРПП – проточний реактор постійного перемішування;

РІП – реактор ідеального перемішування;

МА – маленова кислота (Malonic Acid);

МА \cdot – радикал маленової кислоти;

BrMA – броммаленова кислота;

BrMA \cdot – радикал броммаленової кислоти;

ТТА – 2-гідроксималенова кислота (Tartronic Acid);

BrТТА – 2-бром-2-гідроксималенова кислота;

МОА – 2-оксималенова кислота (Mesoxalic Acid);

Fe $^{2+}$ – три (1,10-фенантролинат заліза (II)), Fe(Phen) $_3^{2+}$;

Fe $^{3+}$ – три (1,10-фенантролинат заліза (III)), Fe(Phen) $_3^{3+}$;

$T(k_j)$ – період регулярних коливань системи, с;

B2C – модель Business To Client;

ПЗ – програмне забезпечення;

C – собівартість, грн.;

Ц – ціна, грн.;

П – прибуток, грн.

ВСТУП

У другій половині ХХ ст. у всіх індустріально розвинених країнах світу спостерігається бурхливий розвиток хімічної промисловості. Роль хімічної науки і промисловості в сфері матеріального виробництва зростає з кожним роком. Наукову основу хімічної промисловості складає хімічна технологія.

В даний час під хімічною технологією ми розуміємо найважливішу галузь знань у практичній діяльності, яка охоплює питання управління процесами хімічної переробки сировини в цільові продукти, обраними на підставі фундаментальних фізико-хімічних закономірностей з урахуванням економічних і соціальних факторів, ресурсозабезпечення і необхідної безпеки.

Найважливішим фактором, що сприяє прискоренню технічного прогресу, є скорочення термінів впровадження досягнень науки у виробництво. Останнє, зокрема, визначається наявністю методів, на підставі яких можна прогнозувати перебіг фізико-хімічних процесів в апаратах будь-яких конструкцій і розмірів. Основним апаратом хімічного виробництва найчастіше служить реактор. Від його роботи суттєво залежать собівартість і якість одержуваних продуктів, потужність агрегату, продуктивність праці, капітальні витрати.

Використання методів теорії подібності для передбачення процесу в промисловому реакторі на підставі лабораторних експериментальних даних найчастіше неможливо, тому що, як правило, промисловий апарат і лабораторний реактор не подібні. Хімічний реактор являє собою складну систему і складається з багатьох елементів. Детальне вивчення структури внутрішніх зв'язків в реакторі і виявлення головних факторів, що визначають технологічний режим, дають можливість побудувати математичну модель, яка транслює істотні сторони в поведінці реактора. Аналіз математичної моделі реактора дозволяє створити оптимально діючий промисловий контактний апарат і систему автоматичного керування ним, минаючи тривалий і дорогий етап поступової, послідовної розробки, який часто триває 10-15 років [1].

Математичний опис об'єкта хімічної технології найчастіше має вигляд диференціальних рівнянь, практична цінність яких обумовлюється тим, що,

користуючись ними, можна встановити зв'язок між основними змінними процесу. При моделюванні процесів за допомогою диференціальних рівнянь, в інженерній практиці доводиться розглядати два аспекти: по-перше, як скласти диференціальне рівняння, і, по-друге, як його вирішити, тобто як отримати співвідношення між важливими для нас змінними (параметрами). Складання диференціальних рівнянь ідентифікує завдання, для якої в даний час немає загальних методів рішення, і навички в цій області можуть бути набуті лише в результаті конкретних процесів.

На сьогоднішній день відомі загальні принципи побудови та аналізу математичних моделей реакторів, які працюють в стаціонарних режимах. При розробці процесів, що протікають зі змінною в часі швидкістю, пуску і зупинці агрегатів, при роботі в штучно створюваних нестационарних умовах, вирішенні задач синтезу систем автоматичного управління необхідно знати динамічні властивості реактора. І не тільки знати. Треба навчитися створювати контактні апарати з необхідними для практики статичними і динамічними характеристиками. Поставлені завдання вирішуються на основі теоретичних і експериментальних досліджень елементарних процесів в реакторі, з'ясування основних чинників, що визначають стаціонарний і нестационарний процес. На основі цього можна запропонувати методи створення високоефективних апаратів з використанням якісного і кількісного аналізу математичних описів процесів в реакторах [2].

При дослідженні хіміко-технологічних процесів і хіміко-технологічних систем як об'єктів управління необхідно:

- Уявити систему у вигляді окремих елементів, або підсистем, які відповідають або окремим апаратам, або групам апаратів, об'єднаних функціональними зв'язками;
- Сформулювати задачу управління системою
- Виявити вхідні впливи, вихідні змінні, підбурюючі та управляючі впливи і керовані змінні як для кожної з підсистем, так і для системи в цілому;

- Отримати математичний опис динаміки окремих підсистем і хіміко-технологічної системи в цілому;
- Провести аналіз характеристичних властивостей системи, основними з яких є: чутливість, керованість, працездатність, перешкодозахищеність, стійкість.

Аналіз чутливості – істотна частина програми забезпечення надійності процесів. В останні роки проблема забезпечення надійності хіміко-технологічних систем все більш виходить на перший план. Сьогодні завдання забезпечення надійності розглядається як найважливіший аспект проектування систем. Це обумовлюється, з одного боку, складністю структури подібних систем, що складаються, як правило, з багатьох елементів, і, з іншого боку, тим можливим збитком, який буде завдано в разі відмови такої системи. Сьогодні технічний прогрес допускає реалізацію все нових і нових видів хіміко-технологічних систем успішне застосування яких, однак, можливо лише при виконанні цілком певних вимог по надійності.

Під чутливістю системи розуміють її властивість змінювати характеристики свого функціонування під впливом змін своїх властивостей системи і зовнішніх збурюючих впливів. Необхідність дослідження чутливості обумовлена потребою виявити параметри системи, які потребують найбільш точного виміру, а також можливість вибору керуючих впливів, що забезпечують найбільшу чутливість вихідних керованих змінних систем. Крім того, дослідження чутливості - важливий етап створення таких хіміко-технологічних систем, які малочутливі або нечутливі як в статичних, так і в динамічних режимах функціонування [2].

Моделювання чутливості складних хімічних систем до зовнішніх впливів при розрахунках хімічних реакторів є метою даної магістерської роботи.

1 ОСНОВНІ ПОНЯТТЯ КОЛИВАЛЬНИХ ПРОЦЕСІВ В ХІМІЧНІЙ КІНЕТИЦІ

Експериментальні дослідження хімічних реакцій - це дослідження поведінки характеру протікання реакцій, вихідних та проміжних речовин, продуктів, та їх концентрації. Вибір характеру протікання реакцій багато в чому визначає успіх такого дослідження. У цьому контексті основний інтерес представляють рівноважні стани, які за допомогою деякого математичного формалізму можуть бути описані як стійкі стани даної системи [3].

Хімічну реакцію можна виразити відповідною математичною моделлю, вирішення якої повинні узгоджуватися з експериментально спостережуваною поведінкою даної хімічної системи. Крім того, якщо деякі рішення будуть описувати поведінку системи, що не спостерігалися досі, необхідно поставити експеримент так, щоб отримати передбачувану моделлю поведінку системи і тим самим підтвердити правильність математичної моделі реакції. Динамічні системи, такі, як хімічні реакції, моделюються диференціальними рівняннями. Стан хімічної рівноваги являють собою стійкі особливі точки, що моделюють реакцію. Рішення моделей можуть змінюватись як завгодно залежно від виду диференціальних рівнянь. Крім рішень, відповідним стійким станам, можуть бути і рішення періодичні. Хоча в реакції спостерігаються різні види коливальної поведінки, ці періодичні рішення відповідають тільки деяким із спостережуваних коливань.

Постановка лабораторного експерименту або комп'ютерного відтворення хімічної реакції можлива тільки для певного фіксованого набору умов, тобто область досліджень заздалегідь обмежена. Теоретичні моделі, що описують явища, які спостерігаються в процесі дослідження, також пояснюють тільки ту поведінку реакції, яка характерна для даних умов. Теоретичний аналіз може бути застосований для опису спостережуваних явищ, і для пояснення навіть невеликих відхилень в даній системі.

При дослідженні хімічних реакцій зазвичай прагнуть до досягнення стану рівноваги, тобто стійкого стаціонарного стану. Проте з недавніх пір вважається,

що всі рішення відповідних моделей, як стійкі, так і періодичні, представляють інтерес і коштують праці, витраченої на їх отримання.

Стійкість цих рішень залежить від динаміки хімічної кінетики, покладеної в основу моделі, отже, і самі рішення, і їх стійкість ми повинні відносити до динаміки і характеристичним рішенням [4].

1.1 Автохвильові процеси

Існують так звані автохвильові явища, які мають місце в коливальних хімічних і біохімічних реакціях (реакція Білоусова - Жаботинського), нервових і м'язових волокнах при поширенні імпульсу збудження, в процесах горіння, при морфогенезі, фотосинтезі, реакції гліколізу і т.д.

Автохвилі явища – самопідтримувальні нелінійні хвилі, що з'являються в активних середовищах, і мають стійкі до кінцевої зміни початкових умов, і граничних умов параметри (наприклад, швидкість поширення, амплітуда, форма імпульсу). Термін «автохвилі» з'явився за аналогією з раніше запропонованими А.А. Андроновим терміном «автоколивання» [4].

Вивчення автохвильових процесів тісно пов'язане з дослідженням автоколивальних систем. У ряді випадків автохвилі можуть бути розглянуті як просторове узагальнення автоколивань в зосереджених системах [5].

Хімічна реакція, що відбувається в реакторі ідеального перемішування може бути типовим прикладом реальної системи, описуваної системою нелінійних диференціальних рівнянь. Здавалося б, що будь-яка хімічна реакція, що проводиться в реакторі ідеального перемішування, може супроводжуватися нелінійними ефектами, але як це не парадоксально, прийнято вважати, що хімічні системи переходять тільки в стаціонарні стани, а винятків з цього правила небагато.

Винятком з даного правила є коливальна реакція, відкрита в 1958 році Білоусовим і досліджена Жаботинським і багатьма іншими [3]. У цій реакції органічна речовина, наприклад, малонова кислота окислюється іонами бромату в присутності каталітичної пари, наприклад, Fe^{2+}/Fe^{3+} в реакційній системі виникають самопідтримувальні коливання і множинні стаціонарні стани в РІП.

Ці факти свідчать про сильний вплив нелінійних членів в рівнянні, тому реакція Білоусова-Жаботинського представляється зручним об'єктом для вивчення нелінійних ефектів в хімічній динаміці і дослідженні чутливості різних режимів протікання процесу.

1.2 Основні поняття хімічної кінетики

Математичні моделі хімічних реакторів будуються на основі блочного принципу з використанням відомих гідродинамічних моделей, що враховують характер розподілу часу перебування частинок потоку реагуючої суміші в даному реакторі. Основу моделювання хімічних реакторів складає опис блоку кінетичної моделі або рівняння хімічної кінетики.

Кінетика хімічних реакцій в значній мірі визначає хімічний процес і грає важливу роль в хімічній технології. Вона відкриває можливості свідомого управління промисловими процесами, дозволяє ставити і вирішувати питання інтенсифікації. У зв'язку з цим встановлення кінетичних закономірностей є необхідною умовою при розробці того чи іншого технологічного процесу і управління ним [1]. Особливо це важливо при проектуванні хімічних реакторів методом математичного моделювання, що впливає з схеми складання математичної моделі.

Для розв'язання прямої задачі хімічної кінетики служить кінетична схема протікання реакції, що відображає передбачуваний механізм хімічного перетворення. Під механізмом у формальній кінетиці розуміють певну сукупність елементарних стадій (елементарних реакцій), через які здійснюється перетворення вихідних речовин у кінцеві продукти реакції.

Вважається, що в елементарній реакції перетворення вихідних реагентів в продукти є єдиним актом, що не включає в себе будь-які проміжні стадії. Далі на основі постульованої схеми складається математична модель багатостадійного процесу. Це перший етап рішення прямої задачі. З самого визначення швидкості елементарної реакції як похідної концентрації реагуючої речовини в часі слідує, що для учасників багатостадійної реакції її

математичною моделлю буде система з диференціальних рівнянь, що описують швидкість витрачання або накопичення кожного учасника реакції [6].

При складанні математичної моделі виходять з основного постулату хімічної кінетики, згідно з яким швидкість елементарної реакції пропорційна концентраціям реагуючих речовин, взятих у ступенях, рівних їх стехіометричним коефіцієнтам. Коефіцієнтом пропорційності при цьому є параметр, що не залежить від концентрації і називається константою швидкості k . Як слідує із закону діючих мас, константа швидкості k показує, з якою швидкістю протікає хімічний процес при концентраціях реагуючих речовин, які рівні одиниці. Залежність константи швидкості реакції k від температури найчастіше виражають у вигляді рівняння Арреніуса (1.1):

(1.1)

де T – абсолютна температура; R – універсальна газова стала; E – енергія активації; k_A - передекспоненційний множник, який характеризує частоту зіткнень молекул.

Другий постулат кінетики, який необхідно враховувати при складанні кінетичної моделі, є принцип незалежності протікання реакцій. Згідно з цим принципом, якщо одна і та ж речовина бере участь в декількох стадіях процесу, то швидкість зміни концентрації цієї речовини дорівнює алгебраїчній сумі швидкостей кожної з стадій. При цьому швидкість окремої стадії множиться на стехіометричний коефіцієнт цієї речовини в цій стадії, причому, якщо речовина витрачається на даній стадії, то стехіометричному коефіцієнту приписують знак мінус.

Особливий інтерес викликає моделювання кінетики так званих коливальних реакцій. У таких реакціях деякі стадії є автокаталітичними, внаслідок чого в системі можуть спостерігатися періодичні зміни концентрацій проміжних речовин. Деякі кінетичні схеми таких реакцій добре відомі: модель OREGONATOR (модель Філда-Нойеса-Переш), запропонована для пояснення виникнення концентраційних коливань певної коливальної реакції Білоусова-

Жаботинського, модель BRUSSELATOR, теоретично обґрунтована І. Пригожиним, та ін. [7].

Важливою в хімічній кінетиці є величина - швидкість хімічної реакції - визначається зміною в часі кількості будь-якого з вихідних речовин або продуктів реакції в результаті хімічного перетворення.

Хімічні реакції можуть протікати гомогенно, тобто в обсязі однієї фази, або гетерогенно. Тобто на поверхні розподілу фаз, швидкість гомогенної реакції приймається чисельно рівною кількості речовини, що вступає в реакцію або утворюється в результаті реакції в одиниці об'єму за одиницю часу. Для реакцій, що протікають в системах постійного об'єму, швидкість реакції визначається за формулою (1.2):

(1.2)

де ω_i – швидкість реакції по i -й речовині, моль/(м³·с); t – час, с; C_i – концентрація i -ої речовини, яка вимірюється кількістю його молей в одиниці об'єму реагуючої суміші, моль/м³ [8].

Хімічні реакції можна розділити на прості і складні. Проста реакція протікає в одному напрямленні і в один етап. До складних належать оборотні реакції, послідовні реакції, паралельні реакції. Швидкість простої реакції підкоряється закону діючих мас (1.3):

(1.3)

де k – константа швидкості реакції, яка чисельно дорівнює її швидкості при одиничних концентраціях.

Застосовувати закон діючих мас для підрахунку швидкостей складних реакцій можна, якщо складна реакція протікає за схемою зворотної реакції. Швидкість такої реакції складається з двох складових (1.4):

(1.4)

де ω_+ - швидкість реакції в прямому напрямку; ω_- - те ж, в зворотному.

По закону діючих мас (1.5):

(1.5)

де k_+ - константа швидкості прямої реакції; k_- - те ж, зворотної.

У загальних випадку для опису складної хімічної реакції потрібно не одне, а кілька стехіометричних рівнянь.

Тим не менш, і для складної реакції можна, ґрунтуючись на результатах експериментів, написати рівняння, аналогічне закону діючих мас і що зв'язує швидкість реакції з концентраціями вихідних речовин (1.6):

$$(1.6)$$

Таким чином, рівняння, що відображає зміну концентрації певної речовини в часі в ході хімічного перетворення, називається кінетичним рівнянням, а крива, що відповідає цьому рівнянню, - кінетичною кривою [9].

1.3 Послідовність математичного опису реальних систем

Для аналізу реальних систем потрібно, перш за все, побудувати модель. Щоб описати реальну систему, оволодіти нею і мати можливість за певних умов видозмінювати її, створюють (або використовувати) модель системи, яка в залежності від поставленої цілі, може виглядати абсолютно у різному вигляді [10]. Питання про характер ідеалізації, тобто питання про те, які з властивостей реальної системи повинні бути враховані при побудові математичної моделі і в якому наближенні, грає дуже істотну роль. Будемо обмежуватися виключно динамічними моделями реальних коливальних систем, тобто будемо нехтувати в них флуктуаціями і всіма іншими статистичними явищами [5].

Відповідно, будемо вважати, що залежні змінні, що входять в рівняння динамічної моделі, мають фізичний сенс кількісних характеристик (достовірних, непевних) станів системи та тих чи інших процесів, що відбуваються в ній. Якщо говорити про ідеалізації реальних систем у вигляді динамічних моделей, то, по-перше, ці ідеалізації пов'язані з числом величин, що визначають стан системи, і, по-друге, з вибором законів, що зв'язують ці стани або швидкості зміни станів і встановлюючих залежностей між ними. В ці залежності, які в більшості випадків можна виразити у вигляді тих чи інших диференціальних рівнянь, зазвичай входить деяка кількість постійних параметрів, що характеризують систему. Зв'язок між величинами, що

характеризують стан системи, визначається деяким диференціальним рівнянням, у яке постійні параметри або їх комбінації входять як коефіцієнти.

Подальша робота дослідника йде вже на рівні цієї абстрактної моделі. Для кількісного (тобто математичного) обдумування моделі системи її описують за допомогою, наприклад, рівнянь або нерівностей. В цьому випадку мова буде йти про застосування моделі не тільки в деякій заданій конкретній області. Суттєвою частиною процесу абстрагування (по суті побудови математичної моделі), яка йде по дорозі від моделі системи (у області використання об'єкта) до математичної моделі, є «визволення моделі від особливостей об'єкта». Часто можна встановити, що моделі, взяті з абсолютно різних областей (використання об'єктів), приводять до однакових математичних моделей. При використанні підходящого алгоритму обчислень та відповідних допоміжних засобів, математична модель дозволяє отримати кількісні результати, які відображають і прогнозують поведінку реальної системи з урахуванням розглянутого аспекту [11].

Послідовність проведення аналізу реальної системи з вищезгаданим грубим поділом на етапи (створення моделі об'єкту, створення математичної моделі, розрахунку) визнається до тих пір, поки отримані кількісні результати досить точно описують поведінку реальної системи в різних ситуаціях. Розрахункові дані застосовуються також для прогнозування поведінки реальної системи в фактично ще невикористаних ситуаціях. Критерієм придатності застосованих моделей є порівняння поведінки реальної системи з результатами спостереження; ці результати отримують, використовуючи відповідні методи виміру та відповідні вимірювальні прилади. Все вирішує порівняння між даними розрахунків та вимірювань: якщо збіг задовільний, то застосовані методи аналізу практично придатні.

Якщо порівняння не дає достатнього збігу, то необхідна корекція. Для теоретики зрозуміліше всього, якщо наявне розходження можна пояснити помилкою в алгоритмі виміру або в проведенні самого виміру. Однак у більшості випадків різниця визначається недоліками, допущеними при

складанні об'єкта моделі, при абстрагуванні математичної моделі або при розрахунку. Після проведення відповідної корекції необхідно знову повторювати всі етапи роботи, поки не буде досягнуто достатньо гарного збігу між даними розрахунку та спостереження (тобто ті результати, які були практичною метою проведення аналізу).

1.4 Математична модель проточного реактора з мішалкою

Все різноманіття взаємодіючих дифузійних і теплових потоків з урахуванням розподілу за часом перебування можна формалізувати у вигляді типових математичних моделей: ідеального перемішування, ідеального витіснення, дифузійної, коміркової, циркуляційної і комбінованої [12].

Перераховані типові моделі відповідають наступним вимогам:

- Відображають основні фізичні закономірності реального потоку в розглянутих умовах;
- Є досить простими;
- Дозволяють експериментально або теоретично визначити параметри моделі;
- Дають можливість їх використовувати для розрахунку конкретних процесів.

Математична модель хімічного реактора ідеального перемішування може з достатнім наближенням описувати процеси в реальних проточних реакторах з пристроями, що здійснюють інтенсивне перемішування, при невеликих витратах і малих відношеннях довжини реактора до його діаметру.

Рівняння такої моделі має сенс записати у вигляді математичного виразу [2], що характеризує зміну концентрації в реакційному середовищі в часі, яке обумовлюється, по-перше, рухом потоку (гідродинамічний фактор), по-друге, хімічним перетворенням (кінетичний фактор). Тому зазначену модель слід будувати на основі типової моделі ідеального перемішування з урахуванням швидкості хімічної реакції, тобто записати зміну концентрації як алгебраїчну суму:

$$(1.7)$$

Ці формули дозволяють знайти основні параметри, що характеризують роботу і економічність хімічних реакторів даного типу, тобто дають можливість встановити:

- зміна концентрації вихідних речовин в часі $C_i = f(\tau)$;
- концентрації цільових і побічних продуктів;
- час поновлення реактора τ_k і швидкість подачі реагентів в реактор k_0 ;

а також проводити подальші дослідження чутливості, надійності, стійкості, працездатності реакторів [10].

1.5 Про чутливість оптимальних режимів хімічних процесів

Створені в останні роки аналітичні методи розрахунку оптимальних режимів хімічних процесів дозволяють поставити і вирішити ряд цікавих завдань, пов'язаних з оцінкою поведінки процесу в межах оптимального режиму [9]. В даний час все більш актуальними стають такі завдання:

- 1) визначення чутливості оптимального режиму процесу до неточності відтворення кінетичних залежностей;
- 2) визначення чутливості оптимального режиму до флуктуацій вихідного складу;
- 3) визначення чутливості оптимального режиму до зміни економічних факторів;
- 4) розрахунок оптимального режиму при зміні активності каталізатора або інших кінетичних параметрів;
- 5) оцінка залежності оптимального режиму від малих параметрів, які не враховані при розрахунку;
- 6) визначення чутливості функції критерію до неточності здійснення оптимального режиму.

Важливість розгляду всіх перерахованих завдань залежить від того, що розрахунок оптимального режиму, який сам по собі може бути проведений як завгодно точно, здійснюється на основі, кінетичних і економічних даних, схильних до помилки досвіду і часто не залишаються незмінними в часі, а сам

розрахований режим реалізується; не з абсолютною точністю. Чутливість оптимального режиму до різних збурюючих факторів визначає дійсну точність розрахунку. Якщо при цьому з'ясується, що довірчі межі параметрів оптимального режиму занадто широкі, то це говорить про необхідність підвищити точність дослідження кінетики процесу [10].

Далі, при малій зміні кінетичних параметрів процесу або, що особливо важливо, економічних чинників, ми можемо з достатнім ступенем точності скорегувати оптимальний режим, не повторюючи заново всі розрахунки. Нарешті, чутливість функції критерію процесу до відхилень режиму від оптимального визначає вимоги до точності здійснення і якості регулювання обраного режиму. Якщо деяке відхилення від оптимального режиму призводить лише до малих втрат, але зате зручно з технологічної точки зору, то така зміна режиму може бути виправдана.

Математичний апарат рішення всіх перерахованих вище завдань, крім останньої, фактично один і той же. Будь-який параметр оптимального режиму u_k (наприклад, оптимальна температура в будь-якій точці) є функцією різних кінетичних характеристик процесу (порядків реакцій, енергій активації, предекспонент, тощо), економічних факторів (цін на продукти, вартості "часу контакту", тощо), вихідного складу потоку і, можливо, ще яких-небудь величин, загальною властивістю яких є те, що вони задані заздалегідь і не залежать від нашого вибору [10].

Оптимальний режим процесу визначається при значеннях цих "незалежних параметрів" μ_q , що фіксуються на деяких рівнях $\bar{\mu}_q$. При малих відхиленнях величин μ_q від рівнянь $\bar{\mu}_q$ функціональна залежність $u_k(\mu)$ апроксимується лінійною залежністю:

$$(1.8)$$

де μ і $\bar{\mu}$ – вектори з компонентами відповідно μ_q і $\bar{\mu}_q$, а частинна похідна $\frac{\partial u_k}{\partial \mu_q}$ під знаком суми обраховується при $\mu = \bar{\mu}$. Якщо похідна відома, то за

допомогою формули (1.8) можна оцінити зміни величини y_k при малому відхиленні параметра μ_q від його вихідного рівня $\bar{\mu}_q$ [9].

Таким чином, для оцінки залежності оптимального режиму y_k від будь-якого "незалежного параметра" μ_q а околиці точки оптимуму достатньо вирахувати похідну $\frac{\partial y_k}{\partial \mu_q}$ при $\mu = \bar{\mu}$. Цю похідну прийнято називати чутливістю функції y_k до параметру μ_q .

Параметр μ_q може також позначати вихідну концентрацію якої-небудь речовини або в загальному деяку функцію вихідного складу $\mu(c_0)$ або концентрації цільових і побічних продуктів; кінетичні константи швидкостей, час оновлення реактора τ_k і швидкість подачі реагентів в реактор k_0 . Параметр може бути по своїй природі як кінетичним так и економічним фактором: останній випадок практично являється найбільш важливим, так як деякі економічні характеристики часто бувають невідомі на початковому етапі проектування [8].

1.6 Аналіз параметричної чутливості стаціонарних режимів хімічних реакторів

Під хімічною системою розуміється сукупність фізико-хімічних процесів, що відбуваються в системі, і засобів для їх реалізації. Таким чином, хімічна система включає: власне хімічний процес, апарат, в якому він проводиться, засоби для контролю і управління процесів і зв'язку між ними.

Система взаємодіє з зовнішнім середовищем і може бути кількісно оцінена через свої входи і виходи (рис.1.1). Входами можуть бути сировина, її кількість, склад, температура. Виходами можуть бути кількість готового продукту, його якість, температура [7].

Зазвичай система схильна до збурень, для їх компенсації, тобто для того щоб система працювала в заданому напрямку, використовують керуючі впливи, які також виражають кількісно.

Рисунок 1.1 – Найпростіша структурна схема хімічної системи

При вирішенні завдань оптимального проектування, а також при управлінні діючим реактором представляє інтерес аналіз впливу змін вхідних \bar{X} , керуючих \bar{U} змінних і параметрів математичного опису \bar{P} на вихідні змінні \bar{Y} в статиці. Властивість хімічного реактора змінювати характеристики функціонування \bar{Y} під впливом зміни змінних \bar{X} , \bar{U} , \bar{P} називається чутливістю [10].

Для кількісної оцінки впливу змінних \bar{X} , \bar{U} , \bar{P} на вихідні змінні в статиці прийняті частинні похідні виду:

$$(1.9)$$

які отримали назву коефіцієнтів параметричної чутливості.

Якщо величина η по якому-небудь каналу велика, то зміна вхідної змінної може призвести до істотного відхилення від початкового (базового) стаціонарного режиму.

Аналіз параметричної чутливості режимів роботи реактора дозволяє знайти змінні, які мають найбільший вплив на його функціонування, вибрати вхідні змінні, що підлягають контролю і стабілізації, сформулювати вимоги до системи автоматичного регулювання реактора, і, нарешті, вказати напрямлення спрощення або ускладнення математичної моделі реактора.

Зокрема, модель на підставі інформації про параметричну чутливість спрощується таким чином: з неї виключаються або визначаються з меншою точністю ті змінні (параметри), до зміни яких реактор мало чутливий. І навпаки, змінні, за якими виявляється висока чутливість, повинні бути розраховані (визначено експериментально) з високою точністю [7].

Існують дві групи методів розрахунку параметричної чутливості [13]: аналітичні та чисельні.

Аналітичні методи передбачають, що рівняння математичної моделі реактора можуть бути записані відносно вихідних змінних в явному вигляді. Подальша аналітична диференціація рівнянь дозволяє знайти вирази для

коефіцієнтів чутливості. Як правило, аналітичні методи застосовуються для реакторів з сконцентрованими параметрами, математичний опис статички яких має вид системи алгебраїчних рівнянь.

Численні методи аналізу параметричної чутливості засновані на заміні частинної похідної η відношенням скінченних різниць:

$$(1.10)$$

Кожен метод використовується у різного типу задач, так вони мають свої певні переваги та недоліки у використанні [13]. Більш детально дані методи розглянуті в розділі 3.

1.7 Постановка задачі

У магістерській дисертації вирішується завдання розробки програмного забезпечення, що моделює чутливість складних хімічних систем до зовнішніх впливів при розрахунку хімічних реакторів на прикладі складної коливальної реакції Білоусова-Жаботинського, що протікає в проточному реакторі постійного перемішування. Рішення поставленого завдання включає наступні етапи:

- Вивчення механізму реакції Білоусова-Жаботинського, кінетичної схеми реакції Білоусова-Жаботинського, яка каталізується фероїном.
- Розробка математичної моделі реакції Білоусова-Жаботинського, що протікає в проточному реакторі постійного перемішування;
- Ознайомлення із загальною характеристикою методів розрахунку чутливості складних хімічних систем;
- Розробка програмного забезпечення для розрахунку математичної моделі і чутливості характеристик реакції (періоду, концентрацій реагентів) до змін значень констант швидкостей;
- Розрахунок математичної моделі і значень чутливості періоду автоколивального процесу і концентраційної чутливості реакції Білоусова-Жаботинського;

- Розробка Стартап проекту.

2 КІНЕТИКА РЕАКЦІЇ БІЛОУСОВА-ЖАБОТИНСЬКОГО

2.1 Схема реакції Білоусова Жаботинського, яка каталізується фероїном

Аналіз чутливості складних хімічних систем показує яким чином зміни біфуркаційних параметрів впливають на статичні і динамічні властивості цих систем. В якості досліджуваної була обрана хімічно точна кінетична система Білоусова-Жаботинського, що каталізується фероїном [6].

У літературі описані різні автоколивальні хімічні реакції, в ході яких спостерігаються періодичні, аперіодичні або хаотичні зміни в часі концентрацій реагентів [17]. Серед них реакція Білоусова-Жаботинського – окислення органічних субстратів бромат-іонами, що каталізується координаційними з'єднаннями іонів металів є найбільш вивченою. Реакція Білоусова-Жаботинського, що каталізується іонами церію, детально вивчена як в проточному реакторі постійного перемішування (ПРПП) так і в закритому реакторі інтенсивного перемішування.

Для неї розроблена кінетична схема, що складається з 80 елементарних стадій для 26 сполук [18], яка описує в експерименті різні автоколивальні режими. В реакції Білоусова-Жаботинського, що каталізується фероїном, в ЗРІП також спостерігаються різні перехідні складноперіодичні і хаотичні режими [1]. Однак в даний час не існує кінетичної схеми, яка б їх описувала, незважаючи на те, що в літературі докладно вивчені окремі стадії реакції Білоусова-Жаботинського за участю фероїна. Запропоновані раніше кінетичні схеми реакції Білоусова-Жаботинського, що каталізуються ферроїном, описують тільки регулярні автоколивання в цій системі [14].

Великий інтерес представляє собою реакція, що протікає на фероїновому каталізаторі. Цей інтерес обумовлений тим, що електродний потенціал пари $\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}$ дорівнює 1.06 В, і він значно нижче, ніж стандартний електронний потенціал пари $\text{Ce}^{4+}/\text{Ce}^{3+}$, який дорівнює 1.44В. Це призводить до того, що фероїн, на відміну від Ce^{3+} , може безпосередньо бути окисленим з'єднаннями

бromу, такими як BrO_3^- , HBrO_2 , HOBr , Br_2 . Крім того, відома реакція фероїна з радикалом BrO_2^\cdot [15].

У зв'язку з цим у кінетичну схему вводяться кілька реакцій, аналога яким у схемі реакції Білоусова-Жаботинського, що каталізується церієм немає. У даній роботі пропонується механізм реакції, що каталізується фероїном, складений на основі детального механізму реакції Білоусова-Жаботинського, що каталізується церієм, представлений в [3] і механізмі фероїн – бромат – бромід – сірчаноокислої взаємодії в проточному реакторі постійного перемішування, представлений в [17].

Кінетичну схему реакції Білоусова-Жаботинського, яка приведена в таблиці, можна умовно розбити на три частини: А - реакція між сполуками, які містять бром, В - реакції з участю малонової кислоти і її похідних, С - реакція з участю каталізатора. Наведені в таблиці реакції процесів А і В і відповідні константи швидкості взяті з робіт [15], в яких наведена детальна кінетична схема реакції Білоусова-Жаботинського, що каталізується іонами церію. Реакція за участі фероїна (процес С) і відповідні константи швидкості взяті з робіт [19].

Кінетичні рівняння реакцій (1)-(21) і (27)-(29) записуються у відповідності з законом діючих мас як для елементарних процесів. Реакції (22)-(26) є складними і швидкості їх протікання наведені в примітках до таблиці 2.1. Реакції (27)-(29) є маловивченими і в літературі відсутні відповідні константи швидкості. Наведені в таблиці значення констант швидкості були оцінені на основі аналізу літературних даних [15].

Як впливає з даних, наведених у таблиці 2.1, автоколивальна реакція ініціюється процесом взаємодії бромат-іона з бромід-іоном (реакція 1). Результатом реакції процесу А є витрата бромат- і бромід-іонів і накопичення Br_2 і HBrO_2 . Взаємодія HBrO_2 з бромат-іоном призводить до утворення бромоксильного радикала. У таблиці наведена сумарна реакція без врахування утворення Br_2O_4 . З усіх реакцій процесів А і В тільки константи швидкості реакцій (9) і (10) взяті з роботи [14]. Процес А сповільнюється по

мірі витрати бромід-іонів – ключового реагенту реакції, концентрація якого керує відносними швидкостями процесів А і С.

Таблиця 2.1 – Кінетична схема реакції Білоусова-Жаботинського

Продовження таблиці 2.1

Позначення:

МА – маленова кислота (Malonic Acid);

МА[•] – радикал маленової кислоти;

BrMA – броммаленова кислота;

BrMA[•] – радикал броммаленової кислоти;

ТТА – 2-гідроксималенова кислота (Tartronic Acid);

BrТТА – 2-бром-2-гідроксималенова кислота;

МОА – 2-оксималенова кислота (Mesoxalic Acid);

Fe²⁺ – три (1,10-фенантролинат заліза (II)), Fe(Phen)₃²⁺;

Fe³⁺ – три (1,10-фенантролинат заліза (III)), Fe(Phen)₃³⁺;

Примітки:

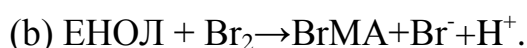
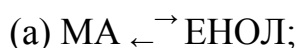
(а) Концентрації [H⁺]=0.5 М і [H₂O] = 55.56 М включені в константи швидкості;

(б) Швидкості реакцій 21-25 і 27-29 дорівнюють: $v_i = k_i \cdot [\text{Fe}^{2+}] \cdot [\text{сполуки, які містять бром}]$;

(в) Швидкість реакції 26 дорівнює: $v_{26} = (k_{26} + k_{s26} \cdot [\text{Br}^-]) \cdot [\text{Fe}^{3+}] \cdot [\text{Br}^-]$,

де $k_{26} = 4 \cdot 10^{-4} \text{ М}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$, $k_{s26} = 1.8 \cdot 10^{-2} \text{ М}^{-1} \cdot \text{с}^{-1}$.

В процесі В окрім сполук, що беруть участь у процесі А, приймають участь маленова кислота та її похідні – броммаленова кислота (BrMA), 2-бром-2-гідроксималенова кислота, радикали маленової (МА[•]) і броммаленової (BrMA[•]) кислот. Бромовання маленової кислоти у відповідності до реакції (11) протікає в дві стадії:



де ЕНОЛ – $(\text{HOOC})\text{CH}=\text{C}(\text{OH})_2$ – енольна форма маленової кислоти. Константи швидкості цих стадій наведені в роботі [3]: $k_a = 3 \cdot 10^{-3} \text{ c}^{-1}$, $k_{-a} = 200 \text{ c}^{-1}$; $k_b = 1.9 \cdot 10^6 \text{ M}^{-1} \cdot \text{c}^{-1}$ [19].

Наведена в таблиці константа швидкості сумарного процесу (11) $k_{11} = 28.65 \text{ M}^{-1} \cdot \text{c}^{-1}$ отримана за допомогою використання умови квазістаціонарності для концентрації енольної форми маленової кислоти. Слід зазначити, що це значення константи швидкості незначно відрізняється від наведеного в літературі $k_{11} = 40 \text{ M}^{-1} \cdot \text{c}^{-1}$ [19].

В результаті реакцій процесу В відбувається утворення броморганічних з'єднань і накопичення бромід-іонів. Особливо слід підкреслити роль ВгТТА в запропонованій кінетичній схемі, витрата якої відповідно до реакцією (19) збільшує концентрацію бромід-іонів в системі, що сприяє переключенню між процесами А і С. Так, якщо в запропонованій кінетичній схемі не враховувати реакцію (19), то при чисельному моделюванні автоколивання не спостерігаються.

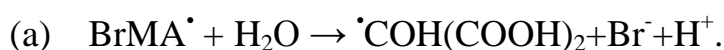
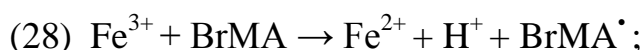
У реакціях процесу С беруть участь відновлена і окислена форми каталізатора. Швидкості реакцій (22)-(25) записуються у відповідності до закону діючих мас як для реакцій першого порядку по концентрації фероїна і сполук, які містять бром, в той час як швидкість реакції (26) записується в інший спосіб (див. прим. (в) в таблиці 2.1).

Процес С замикає повторювальний цикл перетворень сполук, які містять бром. Так, в результаті реакції (9) і реакції (21) відбувається автокаталітичне накопичення HBrO_2 , а в результаті реакцій (2), (3), (7) і (23) – її витрачання. Швидкість реакцій процесу С сповільнюється в результаті накопичення бромід-іонів в реакціях (11), (19), (24), (25) і витрачання відновленої форми каталізатора [19].

Константи швидкості реакцій (27) - (29) були оцінені в наступний спосіб. З аналізу літературних даних випливає, що фероїн взаємодіє з маленовою кислотою (27) повільніше, ніж іонами церію (IV) [7]. Константи

швидкості реакції взаємодії церію (IV) з МА приймає значення $0.23 \text{ M}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$ [3], що є верхньою оцінкою для k_{27} . На основі моделювання відповідно до запропонованої кінетичної схеми було вибрано мінімально можливе значення $k_{27}=0.01\text{M}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$, яке забезпечує існування автоколивань. Запропоноване значення константи швидкості відповідає обговорюваному в літературі [19] значенню k_{27} .

Константи швидкості реакцій (28)-(29) були оцінені на основі аналізу кінетичних даних для наступного процесу:



В роботі [15] показано, що ефективна константа швидкості сумарного процесу оцінюється як $K = k_a \cdot k_{28} / k_{29} \approx 2 \cdot 10^{-5} \text{ M}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$, а константа швидкості реакції (a) приймає значення $k_a = 2000 \text{ s}^{-1}$. Значення k_{29} можна оцінити як $2 \cdot 10^{+9} \text{ M}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$, оскільки швидкість реакції (29) являється лімітуючою дифузійною [18]. Виходячи із цих оцінок значення константи швидкості реакції (28) визначається як $k_{28} = K \cdot k_{29} / k_a = 20 \text{ M}^{-1}\cdot\text{s}^{-1}$. Знайдені значення узгоджуються з наведеними в літературі [15] обмеженнями на значення констант швидкостей k_a , k_{28} і k_{29} .

Далі було проведено дослідження та числове моделювання даної схеми реакції Білоусова-Жаботинського.

2.2 Кінетична модель процесу

Для виявлення характеру зміни концентрацій вихідних і проміжних речовин в часі була складена кінетична модель системи. При цьому першим кроком побудови кінетичної моделі було визначення виразів для швидкостей реакцій на кожній стадії. Всі швидкості реакцій були визначені відповідно до стехіометричних рівнянь. Вирази для швидкостей реакцій і значення констант швидкостей наведені в таблиці 2.2.

Наступним кроком було складання звичайних диференціальних рівнянь для розрахунку значень концентрацій компонентів в часі. Запропонований механізм містить тринадцять компонентів, п'ять з яких подаються на вхід в реактор (Br^- , BrO_3^- , MA, Fe^{2+} , Fe^{3+}) і мають свої початкові значення концентрацій, які будуть представлені нижче. Решта компонентів є проміжними речовинами і їх початкові концентрації дорівнюють нулю [4].

Таблиця 2.2 – Вирази для швидкостей стадій і константи швидкостей реакцій

Продовження таблиці 2.2

Нижче представлені кінетичні рівняння, які складені із використанням даних, представлених в таблицях 2.1 і 2.2:

$$\begin{aligned}
 d[\text{Br}^-]/dt &= -v_1 + v_2 - v_3 + v_4 - v_5 + v_6 + v_{11} + v_{19} + v_{24} + 2 \cdot v_{25} - 2 \cdot v_{26}; \\
 d[\text{Br}_2]/dt &= v_5 - v_6 - v_{11} - v_{25} - v_{26}; \\
 d[\text{HOBr}]/dt &= v_1 - v_2 + 2 \cdot v_3 - 2 \cdot v_4 - v_5 + v_6 + v_7 - v_8 - v_{12} - v_{13} + v_{23} - v_{24}; \\
 d[\text{HBrO}_2]/dt &= v_1 - v_2 - v_3 + v_4 - 2 \cdot v_7 + 2 \cdot v_8 - v_9 + v_{10} + v_{15} + v_{21} + v_{22} - v_{23}; \\
 d[\text{BrO}_2^\cdot]/dt &= 2 \cdot v_9 - 2 \cdot v_{10} - v_{15} - v_{17} + v_{18} + v_{20} - v_{21}; \\
 d[\text{BrO}_3^-]/dt &= -v_1 + v_2 + v_7 - v_8 - v_9 + v_{10} - v_{18} - v_{20} - v_{22}; \\
 d[\text{BrTTA}]/dt &= v_{14} + v_{15} + v_{16} - v_{19} + v_{20}; \\
 d[\text{MA}]/dt &= -v_{11} - v_{12} + v_{16} - v_{27}; \\
 d[\text{MA}^\cdot]/dt &= -v_{16} - v_{17} - v_{18} + v_{27}; \\
 d[\text{BrMA}]/dt &= v_{11} + v_{12} - v_{13} + v_{14} - v_{28} + v_{29}; \\
 d[\text{BrMA}^\cdot]/dt &= -2 \cdot v_{14} - v_{15} - v_{16} - v_{20} + v_{28} - v_{29};
 \end{aligned}
 \tag{2.1}$$

$$d[\text{Fe}^{2+}]/dt = -v_{21} + v_{27} + v_{28} - v_{29} - 2 \cdot (v_{22} + v_{23} + v_{24} + v_{25} - v_{26}).$$

Для дослідження хімічної системи в проточному реакторі постійного перемішування в даній математичній моделі необхідно врахувати проток [20].

Тоді система диференціальних рівнянь матиме вигляд:

(2.2)

де $C_{i_{\text{вх}}}$ – концентрація речовини у вхідному потоці;

τ_k – час перебування речовини в реакторі, с;

t – час, с;

ω_{ri} – швидкість хімічної реакції [21].

Вибір даної математичної моделі було зроблено з наступних міркувань:

- По-перше, це проста математична модель хімічного реактора, яка досить точно описує досліджуваний процес в ізотермічних умовах [6];
- По-друге, в даній математичній моделі є можливість змінювати час перебування реагентів в реакторі при їх незмінній концентрації;
- По-третє, важливим є аналіз чутливості впливу часу перебування речовин в реакторі на якісну зміну характеру коливань системи [22].

2.3 Розрахунок математичної моделі процесу Білоусова-Жаботинського

У попередніх розділах була запропонована кінетична модель реакції Білоусова-Жаботинського, і на основі складених кінетичних рівнянь, що описують зміну концентрацій компонентів в часі. Інтегруючи ці рівняння при певних початкових умовах, тобто задаючись початковими концентраціями вхідних компонентів, можна отримати вихідні криві залежності зміни концентрацій компонентів від часу.

При інтегруванні даної системи диференціальних рівнянь були прийняті наступні ненульові початкові умови:

$$[\text{Br}^-]_0 = 1 \cdot 10^{-7} \text{ M};$$

$$[\text{BrO}_3^-]_0 = 0.15 \text{ M}; \tag{2.2}$$

$$[\text{MA}]_0 = 0.22 \text{ M};$$

$$[\text{Fe}^{2+}]_0 + [\text{Fe}^{3+}]_0 = 0.0017\text{M}$$

Початкова концентрація інших компонентів приймалась рівною нулю.

Раніше були досліджені різні стани даної системи в залежності від біфуркаційного параметра τ_k (час перебування речовини в реакторі, с). При вище вказаних початкових умовах і певних значеннях спостерігається різна поведінку досліджуваної системи.

Рисунок 2.1 – Регулярні коливання
концентрацій Br^-

Рисунок 2.2 – Регулярні коливання
концентрацій BrTТА

Рисунок 2.3 – Регулярні коливання
концентрацій BrМА

Рисунок 2.4 – Регулярні коливання
концентрацій Fe^{3+}

При $\tau_k = 10^3$ с – регулярні коливання; $\tau_k = 10^1$ с і $\tau_k = 10^5$ с спостерігається стаціонарний стан системи, тобто концентрації реагентів не змінюються в часі. Як видно із рисунків 2.1 - 2.4, найбільш цікавим являється поведінка концентрації Br^- , BrTТА , BrМА , Fe^{3+} .

2.4 Висновки за розділом

В даному розділі було отримано систему диференціальних рівнянь, при інтегруванні якої було отримано вихідні криві зміни концентрації компонентів в часі. Для наочності представлених даних, також було побудовано графіки залежності концентрацій Br^- , BrTТА , BrМА , Fe^{3+} від часу.

На основі розрахованих даних, далі можна проводити аналіз чутливості запропонованої моделі.

3 МОДЕЛЮВАННЯ ЧУТЛИВОСТІ СКЛАДНИХ ХІМІЧНИХ СИСТЕМ

3.1 Методи розрахунку чутливості та їх використання при дослідженні кінетики хімічних процесів

У найзагальнішому випадку кінетика хімічного процесу без урахування просторових ефектів (при ідеальному перемішуванні розчину реакційної суміші) описується системою звичайних диференціальних рівнянь:

(3.1)

де \mathbf{c} – n -вектор концентрацій реагентів; \mathbf{k} – m -вектор параметрів системи, наприклад, константи швидкостей, температура, тиск і ін. Рішення системи звичайних диференціальних рівнянь будуть криві залежності концентрацій від часу [14].

Аналіз чутливості можна класифікувати на основі досліджуваних кінетичних моделей як функцію параметрів. Система, взаємодіючи з зовнішнім середовищем і може бути кількісно оцінена через свої входи і виходи. Входами можуть бути сировина, її кількість, склад, температура. Виходами можуть бути кількість готового продукту, його якість, температура.

Якщо система схильна до збурень, то для їх компенсації, тобто для того щоб система працювала в заданому напрямку, використовуються керуючі впливи, які також виражають кількісно [19].

Вплив зміни параметра на рішення можна розкласти в ряд Тейлора:

(3.2)

У цьому рівнянні, частинні похідні $\partial c_i / \partial k_j$ називаються коефіцієнтами локальної концентраційної чутливості першого порядку, а $\partial^2 c_i / (\partial k_i * \partial k_j)$ – коефіцієнтами локальної концентрації другого порядку. Зазвичай, тільки коефіцієнти чутливості першого порядку (або лінійні) розраховуються і вивчаються [15].

Ці коефіцієнти складають матрицю чутливості \mathbf{S} , яка представляє залежності лінійної апроксимації рішень від змін параметра.

Різниця між дійсним \mathbf{c} і збуреним \mathbf{c}' рішеннями даної системи, приблизно дорівнює матриці чутливості:

(3.3)

Це рівняння показує, що матриця чутливості має подвійну тимчасову залежність: $\mathbf{S}(t_2, t_1) = \partial \mathbf{c}(t_2) / \partial \mathbf{k}(t_1)$. Матриця може бути отримана прямим диференціюванням, якщо аналітичне рішення системи звичайних диференціальних рівнянь відомо [15]. Проте, на жаль, в хімічній кінетиці такі прості системи зустрічаються досить рідко.

3.2 Аналітичний метод розрахунку чутливості

Більшість робіт з аналізу чутливості присвячено саме розрахунку так званих коефіцієнтів чутливості 1-го порядку.

Елементи матриці коефіцієнтів чутливості першого порядку визначаються наступним чином:

(3.4)

Коли розглядається зміна y_i в залежності від k_j , всі інші параметри k_l при $l \neq j$ фіксуються. Величина β_{ij} називається коефіцієнтом впливу.

Для рівнянь хімічної або біологічної кінетики коефіцієнтами чутливості 1-го порядку будуть часткові похідні від концентрацій компонент по константам швидкості реакції [10].

Аналітичні методи передбачають наступне аналітичне диференціювання рівнянь математичної моделі з потрібними дослідними параметрами і дозволяють знайти вираження для коефіцієнтів чутливості.

Диференціювання рівняння (3.1) за параметрами k_j дасть наступне диференціальне рівняння:

(3.5)

яке називається рівнянням чутливості.

Подальша аналітична диференціація рівнянь дозволяє знайти вирази для коефіцієнтів чутливості $\partial c_i / \partial k_j$ [15].

Однак цей метод містить один досить вагомий недолік. У зв'язку з тим, що коефіцієнти чутливості 1-го порядку являють собою похідні, дана задача не завжди матиме розв'язок.

Зазвичай дані функції не можуть бути продиференційовані по змінним k_j , так як ці функції нам не відомі. А відомі нам лише їх апроксимаційні значення, отримані за допомогою дослідної техніки, або комп'ютерної програми, що реалізує деякий числовий метод.

Як правило, аналітичні методи застосовуються для реакторів з сконцентрованими параметрами, математичний опис статички яких має вид системи алгебраїчних рівнянь. Але в хімічній кінетиці такі прості системи зустрічаються досить рідко і тоді застосовуються чисельні методи розрахунку чутливості [16].

3.3 Числові методи розрахунку чутливості

Досвід показує, що в складних завданнях, які реально виникають на практиці, аналіз таких важливих властивостей систем, як коректність чи некоректність (стійкість або нестійкість) рішення, часто надзвичайно важкий, і зазвичай через складність досліджуваних систем, набагато простіше вирішується числовими методами аналізу.

Абсолютні коефіцієнти чутливості 1-го порядку можуть бути дуже корисні при вирішенні задачі ідентифікації параметрів рівняння за експериментальними даними. Дійсно, для малих величин Δy_i і Δk_j має виконуватися наближена рівність:

$$\Delta k_i \approx \Delta y_i / \beta_{ij} \quad (3.6)$$

Якщо надати величинам Δy_i і Δk_j сенс похибок (Δy_i - абсолютна похибка даних в експерименті по визначенню параметра k_j , Δk_j - похибка параметра k_j , визначеного шляхом цього експерименту), то ми побачимо, що в залежності від

величини β_{ij} точність визначення k_j може бути як дуже високою, так і дуже низькою [8].

Найпростішим методом обчислення часткових похідних компонентів рішення системи звичайних диференціальних рівнянь за параметрами є почергова зміна кожного з параметрів на деяку величину (h) і чисельне інтегрування системи звичайних диференціальних рівнянь.

Таким чином, для розрахунку скінченних різниць апроксимації матриці β необхідно чисельно проінтегрувати систему звичайних диференціальних рівнянь $m + 1$ раз, де m - розмірність вектора параметрів k [8].

Чисельні методи аналізу параметричної чутливості засновані на заміні частинної похідної відношенням $\mathbf{S}(t_2, t_1) = \partial \mathbf{c}(t_2) / \partial \mathbf{k}(t_1)$ кінцевих збільшень (кінцевих різниць):

(3.7)

Такий спосіб обчислення значень часткових похідних має два недоліки:

➤ Для обчислення N похідних (коефіцієнтів чутливості) необхідно $N+1$ раз провести розрахунки по математичній моделі реактора, що при великому N потребує значних витрат машинного часу [16].

➤ Непростий підбір збільшень Δk_j незалежних змінних і пов'язані з цим неточності обчислення похідних. Велике збільшення призводять до похибки у зв'язку з нелінійністю математичної моделі, при малих значення виникають похибки округлення, пов'язані з кінцевою довжиною розрядної сітки використовуваної ЕОМ (позначаються похибки округлення і дискретного представлення результатів чисельного рішення моделі) [16].

Проте на відміну від аналітичного методу, більш універсальним буде числовий підхід – він дозволить отримувати коефіцієнти чутливості для моделей будь-якої складності.

Також, перевагою числового методу є в тому, що коли кількість параметрів, чутливість яких треба визначити, більша, ніж залежних змінних,

цей метод більш є більш ефективним, ніж пряме рішення диференціальних рівнянь [12].

3.4 Моделювання чутливості періоду автоколивальної реакції Білоусова-Жаботинського до зміни значень констант швидкостей

З появою нових уявлень про коливальні процеси наприклад таких як періодичні, аперіодичні, хаотичні коливання, амплітуда і період коливань являються чи не єдиним джерелом інформації, слугують його кількісною і якісною характеристикою одночасно. Постає питання, як змінюється значення періоду від зміни значень констант швидкостей, тобто як впливають зовнішні збурення на характер коливань [23].

Коефіцієнти чутливості розраховувалися описаним раніше числовим методом. Таким чином розрахунок складається із наступного алгоритму:

- Визначення значення періоду регулярних коливань при дійсних значеннях констант швидкостей:
- Розрахунок значення періоду при зміні значень констант швидкостей на $\pm 1\%$, $\pm 5\%$, $\pm 10\%$, $\pm 20\%$:
- Для кількісної оцінки впливу досліджуваних констант швидкостей, тобто аналізу чутливості, замінюємо часткові похідні (коефіцієнти чутливості) відношенням скінченних різниць:

(3.10)

За даними числового експерименту при вказаних раніше початкових умовах і дійсних значеннях констант швидкостей, визначили значення періоду, яке рівне $T(k_j) = 43,24$ сек. (рис. 2.1).

Далі змінюється значення констант у відповідності до формули (3.9), і розраховується по формулі (3.10) коефіцієнти чутливості і відповідні значення періоду. Для рішення даної задачі, попередньо було розраховано значення періоду та чутливості періоду до зміни значень констант швидкостей.

Рисунок 3.1 – Графіки залежності періоду регулярних коливань від зміни констант швидкостей k_1, k_7

Рисунок 3.2 – Графіки залежності періоду регулярних коливань до зміни констант швидкостей k_9, k_{11}

З розрахованих даних, що наведені в таблиці в додатку А, видно, що деякі коефіцієнти чутливості не дорівнюють нулю, тобто зміна їх значення впливає на зміну значення періоду коливань системи (рис. 3.1, 3.2).

З графіків видно, що з ростом значень констант по k_1, k_7, k_9 , значення періоду зменшується, а для k_{11} – значення періоду коливань зростає зі збільшенням константи швидкості.

3.5 Висновки за розділом

В даному розділі було розглянуто методи розрахунку чутливості системи на дію зовнішніх чинників, а саме числовий та аналітичний методи.

Розглянувши дані методи для розрахунку було обрано числовий метод аналізу чутливості через складність досліджуваних автохвильових систем.

За отриманими раніше розрахованими даними кривих залежностей зміни концентрацій компонентів від часу, було проведено аналіз чутливості системи Білоусова-Жаботинського, а саме зміну періоду коливань системи при зміні констант швидкості реакції.

В результаті розрахунків, було побудовано графіки залежності періоду регулярних коливань від зміни констант швидкостей.

4 РОЗРОБКА ПРОГРАМНОГО ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ

Для розрахунку моделі автоколивального процесу Білоусова-Жаботинського, та для моделювання чутливості системи, було створено програму, яка розроблялася в середовищі MS Visual Studio на мові C# з використанням технологій .NET Framework v4.7.

Для початку розберемо схему розрахунку, яка використовується в розробленому програмному продукті.

4.1 Алгоритм розрахунку

Для рішення задачі в даній програмі для розрахунку використовується математична модель хімічного реактора ідеального перемішування, так як вона може з достатнім наближенням описувати процеси в реальних проточних реакторах.

(4.1)

Замінивши похідні скінченними різницями, та перенісши значення концентрації речовини C_i в ліву сторону, отримаємо формулу для розрахунку значення концентрації:

(4.2)

Для розрахунку математичної моделі, було взято кінетичну схему реакції Білоусова-Жаботинського, що каталізується фероїном (таблиця 4.1).

Записавши швидкість для кожної стадії реакції (таблиця 4.2), було записано швидкість утворення кожної речовини:

(4.3)

Далі, використовуючи модель 4.2 та формули 4.3, було розраховано математичну модель, та знайдено значення концентрацій кожної речовини в часі.

Після цього потрібно змоделювати та дослідити чутливість системи. Для цього було використано наступний алгоритм:

- Визначення значення періоду регулярних коливань при дійсних значеннях констант швидкостей шляхом знаходження часу між піками двох сусідніх хвиль коливань концентрації B_{r^-} :

(4.4)

- Розрахунок значення періоду регулярних коливань при зміні значень констант швидкостей на $\pm 1\%$, $\pm 5\%$, $\pm 10\%$, $\pm 20\%$:

(4.5)

- Для кількісної оцінки впливу досліджуваних констант швидкостей, тобто аналізу чутливості, було замінено часткові похідні (коефіцієнти чутливості) відношенням скінченних різниць:

(4.6)

Отже, для рішення даної задачі було розроблено алгоритм, який складається з наступних пунктів:

1. Розрахунок концентрацій речовин за заданою математичною моделлю;
2. Визначення періоду коливань системи;
3. Розрахунок значення періоду при зміні значень констант швидкостей;
4. Розрахунок чутливості системи при зміні значень констант швидкостей;

4.2 Структура програмного забезпечення

В розроблене програмне забезпечення входять наступні компоненти:

- Файли форм: Form1.cs, Form2.cs;
- Файли проекту: Program.cs, Model.cs (DAL), BllModel.cs (BLL).

Структура програми представлена на рисунку 7.1.

Рисунок 4.1 – Схема взаємодії між файлами та формами програмного модуля

Призначення основних елементів модуля наведено в таблицях 4.1, та 4.2.

Таблиця 4.1 – Основні елементи обчислювального модуля в «Form1»

Продовження таблиці 4.1

Продовження таблиці 4.1

Таблиця 4.2 – Основні елементи обчислювального модуля в «Form2»

Розроблене програмне забезпечення складається з наступних процедур обробки подій, що наведені в таблицях 4.3 – 4.5.

Таблиця 4.3 – Процедури обчислювального модуля в файлі «Form1.cs»

Продовження таблиці 4.3

Продовження таблиці 4.3

Таблиця 4.4 – Процедури обчислювального модуля в файлі «BLL.cs»

Таблиця 4.5 – Процедури обчислювального модуля в файлі «DAL.cs»

Продовження таблиця 4.5

Даний програмний модуль можна використовувати для дослідження автоколивальних систем, а саме, для дослідження чутливості (впливу зовнішніх збурень на систему) реакції Білоусова-Жаботинського.

Код розробленого програмного модуля наведений в Додатку Б.

4.3 Інструкція користувачу програмного забезпечення

Дане програмне забезпечення призначене для розрахунку математичної моделі та дослідження процесу Білоусова-Жаботинського.

Для роботи програми потрібні наступні дані:

- Початковий час реакції, с;
- Час закінчення реакції, с;
- Крок зміни часу, с;
- Коефіцієнт швидкості подачі реагентів в реактор, с^{-1} ;
- Початкова концентрація реагентів, моль/л.

Графічний інтерфейс користувача, який відкривається при завантаженні програми наведено на рисунку 4.2.

Рисунок 4.2 – Головне вікно програми

При запуску програми, відкривається форма, на якій відображено стандартні початкові дані: час початку і закінчення реакції, крок зміни часу, швидкість подачі реагентів в реактор, початкові концентрації речовин, що беруть участь в реакції, та константи швидкості кожної стадії реакції.

За бажанням, користувач може змінити початкові концентрації всіх речовин, що беруть участь в реакції, а також константи швидкості кожної стадії реакцій, натиснувши на відповідні прапорці в головній формі на вкладці «Початкові умови» (рисунок 4.2).

Після натиснення кнопки «Розрахувати модель», програма запустить розрахунок моделі, виведе результати розрахунків в таблицю, що розташована на вкладці «Розрахунок моделі» (рисунок 4.3), та побудує графік залежності концентрації речовин від часу проведення реакції (рисунок 4.4).

Після цього, натиснувши клавішу «Розрахувати чутливість моделі», програма запустить моделювання та розрахунок чутливості системи на зміну констант швидкості системи (дію зовнішніх впливів на систему), та виведе результати розрахунків у вигляді табличних даних (рисунок 4.5) та у вигляді графічної залежності зміни періоду коливань від зміни константи швидкості реакції (рисунок 4.6).

Рисунок 4.3 – Результати розрахунків, представлені в табличному вигляді

Рисунок 4.4 – Графік залежності концентрації речовини від часу проведення реакції, що побудовано за результатами розрахунків

Рисунок 4.5 – Результати розрахунку чутливості моделі, представлені в табличному вигляді

Рисунок 4.6 – Графік залежності зміни періоду коливань від зміни константи швидкості реакції

Для виходу з програми, потрібно натиснути кнопку «Вихід», що знаходиться в нижньому меню програми, або в головному меню програми, що знаходиться зверху (рисунок 4.2).

Для виклику довідки (рисунок 4.7), потрібно натиснути клавішу «Про програму», що знаходиться в верхньому меню програми (рисунок 4.2).

Рисунок 4.7 – Довідка програми

Рисунок 4.8 – Вигляд головного меню програми

В верхньому меню також знаходиться клавiша «Файл», натиснувши на яку, з'явиться випадаючий список з продубльованими функціями програми, а також з клавiшею «Задати початкові умови», яка введе стандартні початкові умови в відповідні текстові поля для розрахунку моделі (рисунок 4.8).

4.5 Висновки за розділом

Отже, за результатами розробленого програмного модуля було розраховано математичну модель і чутливість характеристик реакції, а саме періоду та концентрацій речовин, до зміни значень констант швидкостей.

Проаналізувавши отримані дані, можна сказати, що дане програмне забезпечення дозволить виявити стадії, що мають найбільший або найменший вплив на процес, а також дозволить більш жорсткіше контролювати концентрації тих речовин і тих стадій, в яких виявлена найбільша чутливість, тобто перейти до задачі управління складним процесом і в кінцевому підсумку дозволить забезпечити надійність протікання процесу в реакторі.

5 РОЗРОБКА СТАРТАП ПРОЕКТУ

Робота є розробкою стартап-проекту зі створення програмного забезпечення для розрахунку математичної моделі ПРПП, чутливості періоду, концентрацій реагентів до зміни значень констант швидкостей реакції Білоусова-Жаботинського.

Бізнес-ідея: створення програмного забезпечення

Мета Стартапу: створення програмного забезпечення для полегшення дослідження реакції Білоусова-Жаботинського.

Місце у ланцюжку цінностей інноваційного процесу:

1. виробництво програмного забезпечення;
2. впровадження програмного забезпечення на ринку

Модель Стартапу: B2C

Назва продукту: Program for calculating sensitivity CTS (Chemical technological schemes)

Суб'єкти замовлення: Власна ідея на основі потреби ринку

Об'єкт дослідження: Інститути та медичні центри, які займаються дослідженнями реакції Білоусова-Жаботинського.

Продукт: програмне забезпечення для дослідження коливальних процесів на прикладі реакції Білоусова-Жаботинського.

Технологія впровадження:

1. Розробка плану створення програмного продукту
2. Затвердження макету та технологій створення ПЗ
3. Патент на авторське право ідеї ПЗ
4. Підписання договору оренди приміщення та обладнання
5. Підписання договорів з постачальниками
6. Найм працівників в штат

Джерела сировини:

Таблиця 5.1 - Джерела сировини

Таблиця 5.2 – Розрахунок амортизаційних відрахувань.

Заробітна плата працівникам 5000 грн/місяць. Всього в компанії працюватимуть 4 програміста. ЗП всім робітникам за місяць становить: $5000 * 4 = 20000$ грн/місяць

Фонд оплати праці становить: $20000 * 1,22 = 24400$ грн/місяць

Таблиця 5.3 – Обігові кошти

Собівартість одиниці продукції становить:

Кваліфікація персоналу

За етапом роботи над проектом та відповідною кваліфікацією персонал поділяється на групи:

Таблиця 5.4 – Кваліфікація персоналу

Споживач

Продукт орієнтований на:

1. Медичні центри;
2. Науково-дослідні інститути

Ринок збуту

У перший рік існування стартап орієнтується на місто Київ та регіональних (Київська область) споживачів, після чого планується вихід ідеї за кордон України (здебільшого країни ближнього зарубіжжя).

Конкурентні переваги

Таблиця 5.5 – Показники, за якими продукт виграє на ринку

Таблиця 5.6 – Показники, що не витримують конкуренції:

Техніко-економічні показники:

- Капіталовкладення: 530 800 грн;

- Ринкова вартість одиниці продукції: 6 500 грн;
- Собівартість одиниці продукції: 3745 грн;
- Прибуток з одиниці продукції: 2755 грн.

Запланований випуск продукції на перший рік існування стартапу: 120 одиниць в рік.

Таблиця 5.7 – Запланований випуск продукції

Рентабельність: 73.6%.

Час повернення капіталовкладень: 1 рік і 7 місяців.

5.1 Аналіз зовнішнього та внутрішнього середовища стартапу

Невід’ємною частиною проектування стартапу є аналіз зовнішнього та внутрішнього середовища.

Внутрішнє ж середовище являє собою сукупність чинників, що створюються і контролюються фірмою/підприємством/компанією. Складові внутрішнього середовища фірми безпосередньо впливають на її ефективність: стратегії, цілі, завдання, структура, технологія, персонал, організаційна культура.

Зовнішнє та внутрішнє середовище фірми тісно взаємопов'язані: з одного боку, фірма створює внутрішнє середовище під впливом та на базі врахування факторів зовнішнього середовища, з другого – фірма адаптується до зовнішнього середовища за допомогою чинників внутрішнього середовища.

У своїй роботі я звернулась до такого методу аналізу, як **SWOT-аналіз**.

Метод полягає у виявленні позитивних та негативних компонентів, чинників, ситуацій зовнішнього середовища, та розташування їх у сітковій таблиці у відповідності до імовірності виникнення та сили впливу на досліджуваний об’єкт, підприємство чи організацію. Таким чином, можна виявити напрям фокусу для підтримання функціонування та розвитку проекту.

Таблиця 5.8 – Таблиця можливостей зовнішнього середовища

Порівняння за методом Шонфінга

Для більш наглядної оцінки рівня пропонованих товарів та послуг, а також для об'єктивної оцінки успіху проекту порівнюємо наш проект з конкуруючим методом Шонфінга.

Таблиця 5.9 – Таблиця факторів конкурентоспроможності

Рисунок 5.1 – Діаграма Шонфінга

Порівняння показало, що рівень програмного забезпечення «Program for calculating sensitivity CTS», не тільки не поступається аналогічному «MatLab» в даному спектрі задач, але і перевершує його майже за усіма показниками.

5.2 Аналіз потенційних споживачів

Клієнти

Основною метою даного розділу сформуванню уявлення про споживача, як ціле та на основі цих даних сформуванню основні потреби.

Таблиця 5.10 – Класифікація потенційних споживачів

Продовження таблиці 5.10

Додаткова інформація

Для визначення деяких показників враховують коефіцієнти гальмування придбання.

Таблиця 5.11 – Коефіцієнт гальмування K_i (супротиву) дій потенційних споживачів за окремими показниками.

На цей коефіцієнт зменшується очікуваний обсяг продажу.

Таблиця 5.12 – Клієнт і його потреби

5.3 Паспорт споживача

Орієнтований споживач кінцевого продукту – медичні кардіологічні центри та науково-дослідні хімічні та біологічні інститути, які вивчають коливальні системи.

За способом життя орієнтуємося на науковців, які використовують в своїх дослідженнях сучасні інформаційні технології.

Тип особистості може бути довільним. За ставленням до товару, обґрунтована мотивація до придбання, повна і ґрунтовна інформація про товар та пошук вигоди.

Сімейні цінності вносять низьку кореляцію у ставленні особи до товару. За співвідношенням бажання придбати і цінової межі є збалансованим, так як співвідношення «місячне фінансування центру» – «вартість одиниці товару»: $30\,000/6\,000 = 5$, тобто відносно не велика частина доходу.

За інтенсивністю споживання багаторазове придбання плюс обслуговування та сервіс. Інформування споживачів планується здійснювати за допомогою медіа реклами у спеціалізованих мережах, інфо-партнерство з іншими центрами/спонсорами.

5.4 Аналіз джерел фінансування стартапу

На етапі створення або розширення бізнесу одним з ключових питань є отримання фінансування. Кошти можуть бути необхідні для закупівлі обладнання, оренди офісу, найму кваліфікованих фахівців або в якості оборотних коштів. Якщо власник бізнесу або автор бізнес-ідеї не розташовує власними фінансовими ресурсами, він звертається до зовнішніх джерел запозичення. Основна проблема зовнішнього фінансування стартапів полягає в тому, що існує великий ризик неповернення засобів, що вкладаються в новий бізнес.

У таблиці представлено передбачення місця моделей у фінансуванні нашого стартапу.

На початкових етапах наша команда розробників є основним ресурсом, і буде здійснювати пошук грантових організацій для отримання стартового

капіталу. Однак на наступних етапах виробництва необхідне залучення коштів інвесторів, меценатів. Тому вже під час першого етапу команда займається пошуком інвесторів та представленням свого проекту, піаром. Це і розмови телефонні, зустрічі з імовірними інвесторами, так і розміщення стартапу на сайтах, як Startup.Network, BYITSMART.

Таблиця 5.13 – Джерела фінансування стартапу

Прогнозовані інвестори: Центр дитячої кардіології і кардіохірургії, Інститут фізичної хімії ім.Писаржевського, SMART, OMG Energy. Ці установи компанії мають величезний інтерес до нашого стартапу, бо він використовуватиме у своїй діяльності програмний продукт для дослідження коливальних процесів.

5.5 Розрахунок ціни інноваційної пропозиції на ринку

Витратні методи

Дані методи хороші тим, що дозволяє оцінити ефективність витрачання грошових коштів командою стартапу, і зручний інвестору при торзі зі стартаперів своєю заниженою оцінкою.

Негативна сторона цього методу полягає в тому, що він не враховує вартість інтелектуальної власності, оцінку особистої ініціативи стартапера та інших нематеріальних цінностей.

Витратний метод

В даному методі ціна розраховується як сума собівартості ($C = 3745$ грн.) та планового прибутку ($\Pi = 2755$ грн.) від реалізації продукту:

Агрегатний метод

Сума витрат на реалізацію окремих складових (агрегатів) проекту (продукту) – це сума реалізації програмного забезпечення ($\Pi_1 = 3745$ грн.), фізичного носія (флеш-накопичувача) ($\Pi_2 = 300$ грн.), послуг встановлення ПЗ ($\Pi_3 = 600$ грн.), та підтримки та консультації в роботі з програмою ($\Pi_4 = 2000$ грн.):

Параметричні методи ціноутворення

Параметричний ряд - це група однорідної за конструкцією та технологією виготовлення продукції, яка має однакове або схоже функціональне призначення, але відзначається кількісним рівнем споживчих характеристик.

Параметричні методи ціноутворення передбачають визначення залежностей між ціною або витратами на виробництво і реалізацію продукції та параметрами, що належать до параметричного ряду. Також відомі залежність між ціною (витратами) та параметрами аналогічних виробів, що вже випускаються, які й беруться за основу для розрахунку нової ціни. Визначена таким чином ціна порівнюється з ринковими цінами. На відміну від наведених вище методів, орієнтованих на витрати, ці методи враховують не тільки витрати, а й якісні параметри виробів і є коректнішими з погляду ринкового ціноутворення.

Метод питомих показників ціни ґрунтується на тому, що ціна виробу складається з ціни потужності, продуктивності, маси чи якогось іншого параметра, який є головним для цього товару. Одержана ціна одиниці головного параметра (питома ціна) може бути використана для розрахунку цін аналогічних виробів за іншими важливими параметрами. Необхідно мати на увазі, що питома ціна знижується в міру зростання параметра.

Таблиця 5.14 – Параметричний метод розрахунку

Метод аналізу беззбитковості та забезпечення цільового прибутку

Під точкою беззбитковості розуміють такі обсяг продажів і обсяг виробництва, які забезпечують продавцю компенсацію витрат і нульовий прибуток чи беззбитковість (рис. 5.2).

Першим етапом розрахунку суми покриття є правильний розподіл усіх витрат підприємства (чи витрат на виробництво певного виду продукції) на постійні та змінні.

До умовно змінних належать витрати, абсолютна величина яких зростає зі збільшенням обсягу випуску продукції і зменшується з його зниженням. До умовно змінних витрат належать витрати на сировину та матеріали, комплектуючі вироби, напівфабрикати, паливо та енергію, оплату праці працівникам, зайнятим у виробництві продукції, та ряд інших витрат.

Рисунок 5.2 - Розрахунок точки беззбитковості

Умовно постійні — це витрати, абсолютна величина яких зі збільшенням (зменшенням) випуску продукції істотно не змінюється. До умовно постійних належать витрати, пов'язані з обслуговуванням й управлінням виробничою діяльністю виробничих підрозділів, а також витрати на забезпечення господарських потреб виробництва. Розподіл витрат на постійні та змінні наведено в табл.

До змінних загальновиробничих витрат належать витрати на обслуговування й управління виробництвом (цехів, дільниць), що змінюються прямо (або майже прямо) пропорційно до зміни обсягу діяльності. Змінні загальновиробничі витрати розподіляються на кожен об'єкт витрат з використанням обраної бази розподілу (годин праці, заробітної плати, обсягу діяльності, прямих витрат тощо), виходячи з фактичного обсягу виробництва (потужності) звітного (чи планового) періоду.

До постійних загальновиробничих витрат належать витрати на обслуговування й управління виробництвом, що залишаються незмінними (або майже незмінними) при зміні обсягу діяльності. Постійні загальновиробничі витрати розподіляються на кожен об'єкт витрат з використанням бази розподілу при нормальній потужності. Нерозподілені постійні загальновиробничі витрати включаються до складу собівартості реалізованої продукції (робіт, послуг) у періоді їх виникнення. Загальна сума розподілених

та нерозподілених постійних загальновиробничих витрат не може перевищувати їх фактичну величину.

Таблиця 5.15 – Витрати

Точка беззбитковості:

Отже, точка беззбитковості – 6 од продукту в місяць.

Таблиця 5.16 – Порівняння ціноутворення за різними методами

5.6 Стратегія конкурентної поведінки на ринку

Інноваційна стратегія реалізується в рамках стратегічного планування. З вибором стратегії пов'язана розробка планів, проведення досліджень, здійснення інших форм інноваційної діяльності. Основа розробки інноваційної стратегії ґрунтується на теорії життєвого циклу продукту, ринковій позиції фірми та її науково-технічній політиці.

На сьогоднішній день існує об'єктивна потреба у забезпеченні конкурентоспроможності підприємств України шляхом інтенсифікації інноваційних процесів, тому ми використовуємо наступальну стратегію та стратегію спеціалізації

Наступальна стратегія характерна для фірм, які базують свою діяльність на принципах підприємницької конкуренції. Вона пов'язана з прагненням фірм досягти технічного й ринкового лідерства шляхом створення та впровадження нових продуктів. Така стратегія передбачає постійну орієнтацію фірми на світові досягнення науки й технології, наявність наукових розробок, що фінансуються та здійснюються самою фірмою, швидке реагування та пристосування до нових технологічних можливостей. Особливістю наступальної інноваційної стратегії є активна участь співробітників фірми у створенні та впровадженні інновацій.

Після проходження початкових етапів, виявлення недоліків, створення бази клієнтів та роботи перших декількох тижнів – якість надання послуг

покращуватиметься. Наступальна стратегія припускає активну інноваційну політику компанії. Вона постійно атакує власні ж досягнення, збільшуючи розрив між собою і основними конкурентами. Постійні техніко- економічні вдосконалення, використання event- маркетингу – типові складові арсеналу фірм-лідерів.

Стратегія спеціалізації передбачає концентрацію на потребах одного цільового сегменту, без прагнення охопити увесь ринок. Мета тут полягає в задоволенні потреб вибраного цільового сегменту краще, ніж конкуренти. Така стратегія може спиратися як на диференціацію, так і на лідерство по витратах, або і на те, і на інше, але тільки у рамках цільового сегменту.

Якщо перейти до відсоткового співвідношення, то на ринку основними конкурентами є математичні програмні пакети MatLab та MathCad, з яким ми ведемо порівняння за різними параметрами, як ціна, простота у використанні, та відгуки клієнтів. Наші стратегії розвитку передбачають наступне витіснення конкурентів з даного сегменту ринку внаслідок покращення якості надання послуг.

Конкурентами мого підприємства є наступні програмні пакети(у % вказано їх частка ринку, яку може витіснити наше підприємство): MatLab (США) – 35%, MathCad (США) – 23%, ChemCad (США) – 8%, Nysis (США) – 12%, та інші математичні пакети – 22%.

5.7 Вибір бізнес-моделі стартапу

З усіх можливих моделей бізнес-процесів найбільше підходить В2С.

В2С дозволяє вести прямий продаж з мінімальною кількістю посередників. Вилучення посередників дає можливість встановлювати конкурентні ціни на місцях і навіть збільшувати їх (виключаючи винагороду посередників) , що веде до росту прибутку. В2С - це концепція побудови бізнес-процесів підприємства та центру інтернет-технологій та інструментів, що забезпечують підвищення прозорості підприємства та покращення його взаємодії з клієнтами. Один з найпопулярніших інструментів В2С - Інтернет-магазин.

B2C (бізнес-споживач) - термін, що позначає комерційні взаємини між організацією (бізнес) та приватним, так званий, "кінцевим" споживачем

При аналізі бізнес-моделей для стартапу обираємо модель B2C, тому що користувачі здійснюють покупки для особистого користування.

5.8 Карта бізнес-процесів виконання стартап-проекту

Таблиця 5.15 – Карта бізнес-процесів виконання стартап-проекту

Продовження таблиці 5.15

5.9 Системний аналіз бізнес-процесів стартап-проекту

Таблиця 5.16 – Системний аналіз бізнес – процесів стартап-проекту

5.10 Оцінка ризиків і страхування розробки

На сьогоднішній день не існує такого бізнес-плану у якому не було б прихованих труднощів, які можуть загрожувати його існуванню. Передбачити подібні труднощі та шляхи їх подолання являється дуже важливою задачею для будь-якого підприємства. Тому насамперед потрібно виявити та оцінити можливі проблеми, з якими може зіткнутися підприємство.

У цьому розділі необхідно виявити основні типи ризиків у діяльності підприємства, передбачити моменти їх можливого виникнення, розробити заходи щодо їх зменшення - мінімізації. Необхідно оцінити реальність проекту нової діяльності підприємства та визначити можливі витрати підприємства у разі непередбачуваних ситуацій.

5.11 Господарські ризики та страхування розробки

Підприємницький ризик в сучасних умовах – це можливість неповернення коштів, витрачених на виробництво та реалізацію продукції, яка залежить від видів людської діяльності та природних явищ. Таке поняття дає змогу: характеризувати ризик не лише з точки зору якісної оцінки, але й з кількісної; застосовувати конкретні методи та прийоми щодо його запобігання; ідентифікації його з ризиками, притаманними іншим сферам діяльності підприємств.

Результати впливу ризиків та методи страхування наведені в таблиці 5.17 (Додаток В). Для визначення ймовірності впливу ризиків використовувались наступні показники:

- 0 - ризик розглядається як неістотний;
- 25 - ризик, швидше за все, не реалізується;
- 50 - про настання події нічого напевно сказати не можна;
- 75 - ризик, швидше за все, виявиться;
- 100 - ризик напевно реалізується.

5.12 Висновки до розділу

У даному розділі було розраховано стартап проект «Program for calculating sensitivity CTS». Наведені розрахунки показують можливість запуску стартапу у виробництво, продукт має досить високий показник рентабельності – 73.6%. Було обрано шляхи розвитку на початковому та наступних етапах запуску проекту, методики ринкового впровадження, стратегії розвитку, бізнес-модель стартапу B2C, наведено договір про перші поставки продукції, проаналізовано цільових споживачів, конкурентів та ризики.

ВИСНОВКИ

В результаті виконання магістерської дисертації:

- Розглянуто методикау складання математичних моделей реакторів, проаналізовані різні методи і підходи аналізу чутливості складних систем;
- Вивчено механізм реакції, запропонованої кінетичної схеми реакції Білоусова-Жаботинського, що каталізується фероїном і описує перехідні складноперіодичні режими;
- Складено кінетичну модель досліджуваної реакції;
- Розроблено математичну модель реакції Білоусова-Жаботинського, що протікає в проточному реакторі постійного перемішування;
- Створено програмне забезпечення для розрахунку математичної моделі проточного реактора постійного перемішування, чутливості періоду, концентрацій реагентів до зміни значень констант швидкостей реакції Білоусова-Жаботинського;
- Розраховані та проаналізовані результати розрахунку математичної моделі і значення чутливості характеристик реакції Білоусова-Жаботинського;
- Розроблено StartUp.

Крім цього, розроблена методологія аналізу чутливості досліджена перш за все для кінетики автоколивальної хімічної реакції Білоусова-Жаботинського, може використовуватися в інших областях (екології, біології та ін.), де застосовуються динамічні моделі, описані диференціальними рівняннями.

Також за результатами досліджень, були опубліковані тези та прийнято участь у конференції:

- Кулик Є.О. Simulation of the sensitivity of complex chemical systems to external influences in calculations of chemical reactors // II Всеукраїнська студентська науково-практична конференція: збірник наукових статей. – Київ: КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2018. – 324 с.

- Кулик Є.О., Безносик Ю.О., О. О. Моделювання чутливості складних хімічних систем до зовнішнього впливу при розрахунках хімічних реакторів // VII Міжнародна конференція студентів, аспірантів та молодих вчених з хімії та хімічної технології: збірник наукових статей. – Київ: КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2018. – 250 с.
- Кулик Є.О., Безносик Ю.О., Унрод В.І. Аналіз чутливості складних хімічних систем до зовнішнього впливу при розрахунках хімічних реакторів // Шоста міжнародна науково-практичної конференція на тему: «Комп'ютерне моделювання в хімії та технологіях і системах сталого розвитку»: збірник наукових статей. – Київ: КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2018. – 340 с.

ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

1. Еремін Е.М. Основы химической кинетики. – Москва: Высшая школа, 1976. – 375 с.
2. Кафаров В.В. Методы кибернетики в химии и химической технологии.- Москва: Химия, 1985. – 448 с.
3. Филд Р., Бургер М. Колебания и бегущие волны в химических системах: науковий посібник. – Москва: Мир, 1988. – 720 с.
4. Гарел Д., Гарел О. Колебательные химические реакции. – Москва: Мир, 1986. – 148 с.
5. Андронов А.А., Витт А.А., Хайкин С.Э. Теория колебаний. – Москва: Мир, 1959. – 912 с.
6. Стрижак П.Е., Хаврус В.А. Кинетическая схема реакции Белоусова-Жаботинского, катализируемой ферроином, описывающая переходные сложнопериодические режимы. // Теоретическая и экспериментальная химия: науковий посібник. – Київ, 1998. – 153-159 с.
7. Edelson, Valerie M. Thomas. Sensitivity analysis of oscillating reaction. // J. Phys. Chem. – США, 1981. – 1555-1558 с
8. H. Rabitz, M. Kramer, D. Dacol. Sensitivity analysis in chemical kinetics. // Ann. Rev. Phys. Chem. – США, 1983. – 419-461 с.
9. Бальцер Д., Вайс В. и др. Химико-технологические системы. – Львів: Хімія, 1986. – 424 с.
10. Райншке К. Модели надежности и чувствительности систем. – Москва: Мир, 1979. – 452 с.
11. Бондарь А.Г. Математическое моделирование в химической технологии.- Київ: Вища школа, 1973. – 276 с.
12. Кафаров В.В., Глебов М.Б. Математическое моделирование моделирование основных процессов химических производств. – Москва: Высшая школа, 1991. – 400 с.

13. Tamas Turanyi. Sensitivity analysis of complex kinetic systems. Tools and applications. // *J. Math. Chem.* – США, 1990. – 203-248 с.
14. Keki S., Magyar I., Beck M.T., Gaspar V. Modeling the oscillatory bromate oxidation of ferroin in open systems // *J. Phys. Chem.* – США, 1992. – 1725 с.
15. Rovinsky A.B., Zhabotinsky A.M. Mechanism and mathematical model of the oscillating bromate-ferroin-bromomalonic acid reaction // *J. Phys. Chem.* – США, 1984. – 6081-6084 с.
16. Островский А.М. Решение уравнений и систем уравнений. – Москва: Издательство иностранной литературы, 1963. – 208 с.
17. Стрижак П.Е., Иващенко Т.С. Бифуркации нерегулярных колебательных режимов в реакции Белоусова-Жаботинского в стационарном реакторе // Теоретическая и экспериментальная химия: науковий посібник. – Київ, 1992. – 478 с.
18. Gyorgyi L., Turanyi T., Field R.J. Mechanistic details of the Oscillatory Belousov-Zhabotinskii reaction // *J. Phys. Chem.* – USA, 1990. – 762-770 с.
19. Laslo Gyorgyi, Richard J. Field. Simple Models of Deterministic Chaos in the Belousov-Zhabotinsky Reaction. // *J. Phys. Chem.* – США, 1991. – 549-602 с.
20. Вольтер Б.В., Сальников И.Е. Устойчивость режимов работы химических реакторов. – Москва: Химия, 1981. – 200 с.
21. Кулик Є.О. Simulation of the sensitivity of complex chemical systems to external influences in calculations of chemical reactors // II Всеукраїнська студентська науково-практична конференція: збірник наукових статей. – Київ: КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2018. – 324 с.
22. Кулик Є.О. Безносик Ю.О. О. Моделювання чутливості складних хімічних систем до зовнішнього впливу при розрахунках хімічних реакторів // VII Міжнародна конференція студентів, аспірантів та молодих вчених з хімії та хімічної технології: збірник наукових статей. – Київ: КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2018. – 250 с.

23. Кулик Є.О., Безносик Ю.О., Унрод В.І. Аналіз чутливості складних хімічних систем до зовнішнього впливу при розрахунках хімічних реакторів // Шоста міжнародна науково-практичної конференція на тему: «Комп'ютерне моделювання в хімії та технологіях і системах сталого розвитку»: збірник наукових статей. – Київ: КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2018. – 340 с.

