

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 66.011

«До захисту допущено»

в/о завідувача кафедри

Толстопалова Н.М. Толстопалова Н.М.

«14» 12 2019 р

МАГІСТЕРСЬКА ДИСЕРТАЦІЯ

зі спеціальності 161 Хімічні технології та інженерія
спеціалізації Хімічні технології неорганічних речовин та водоочищення
на тему: Дослідження кінетики складних хімічних процесів у штучній
нейронній мережі

Виконав студент групи ХН – 81мп Корольчук Андрій Вікторович

(шифр групи)

(прізвище, ім'я, по батько)

(підпис)

Науковий керівник к.т.н., доц. Концевой С. А.

(посада, науковий ступінь, вчене звання, прізвище та ініціали)

Концевой
(підпис)

Консультанти:

з економіко-організаційних рішень доц., к.т.н. Підлісна О.А.

(назва розділу МД)

(посада, науковий ступінь, вчене звання, прізвище та ініціали)

(підпис)

з охорони праці

(назва розділу МД)

доц., к.т.н. Полукаров Ю.О.

(посада, науковий ступінь, вчене звання, прізвище та ініціали)

(підпис)

Рецензент доц. каф. ХХТ, к.т.н., проф. Шахобсаєв А.М.

(посада, науковий ступінь, вчене звання, прізвище та ініціали)

(підпис)

Засвідчую, що у цій магістерській дисертації немає запозичень з праць інших авторів без відповідних посилань.

Студент

Корольчук
(підпис)

Київ – 2019

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

Факультет хіміко-технологічний


Кафедра технології неорганічних речовин, водоочищення та загальної
хімічної технології

Рівень вищої освіти – другий (магістерський) за освітньо-професійною
програмою

Спеціальність (спеціалізація) 161 Хімічні технології та інженерія (Хімічні
технології неорганічних речовин та водоочищення) _____

ЗАТВЕРДЖУЮ

В.о. Завідувача кафедри ТНР, В та ЗХТ

 Толстопалова Н.М.

(підпис)

(ініціали, прізвище)

«28» 10 2019 р.

ЗАВДАННЯ

на магістерську дисертацію студенту

Корольчуку Андрію Вікторовичу

(прізвище, ім'я, по батькові)

1. Тема дисертації Дослідження кінетики складних хімічних процесів у
штучній нейронній мережі

науковий керівник дисертації Концевой Сергій Андрійович к.т.н., доц.

(прізвище, ім'я, по батькові, науковий ступінь, вчене звання)

затверджені наказом по університету від «11» листопада 2019 р. № 3871-с

2. Строк подання студентом дисертації «10» 12 2019 р.

3. Об'єкт дослідження – складні хімічні процеси..

4. Предмет дослідження – методи оптимального пошуку констант
швидкостей хімічних реакцій.

5. Перелік питань, які потрібно розробити: розробка технічного завдання для програми, підбір архітектури та технологій, алгоритмів для машинного навчання, розробка основного порядку роботи програми, тестування на різних об'ємах даних.

6. Перелік ілюстративного матеріалу: презентація, що містить: предмет і об'єкт дослідження, основні методики експерименту, результати експерименту та їх математична обробка, фрагменти програмного коду, метрики виконання програми, приклади даних для роботи з програмою, висновки.

7. Консультанти розділів дисертації

Розділ	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		Завдання видав	Завдання прийняв
Економічний	Підлісна О.А.	10.10.19	16.12.19
Охорона праці	Полукаров Ю.О.		

9. Дата видачі завдання «28» 10 2019 р.

Календарний план

№ з/п	Назва етапів виконання магістерської дисертації	Строк виконання етапів роботи	Примітка
1.	Огляд літературних даних щодо методів знаходження констант хімічних реакцій складних хімічних процесів	01.06.19 – 30.08.19	Викон.
2.	Проектування архітектури програми	01.09.19 – 30.09.19	Викон.
3.	Пошук і впровадження технологій	01.10.19 – 20.10.19	Викон.
4.	Розробка програми	21.10.19 – 20.11.19	Викон.
5.	Оформлення результатів	20.11.19 – 15.12.19	Викон.

Студент

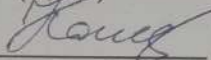


Корольчук А. В.

(підпис)

(ініціали, прізвище)

Науковий керівник роботи



Концевой С. А.

(підпис)

(ініціали, прізвище)

РЕФЕРАТ

Пояснювальна записка: 90 стор., 26 рис., 18 табл., 1 додаток, 11 посилань.

Об'єкт дослідження – складні хімічні процеси.

Предмет дослідження – розрахунок констант швидкостей складних хімічних процесів, алгоритми машинного «навчання», генерація даних для «навчання» нейронних мереж.

Метою роботи є розробка комп'ютерної програми для розрахунку параметрів кінетичних рівнянь складних хімічних систем.

Був розроблений програмний продукт, що дає змогу ґрунтуючись на експериментальних даних щодо зміни концентрацій реагентів протягом хімічного процесу та ряду додаткових даних, системі хімічних рівнянь досліджуваного процесу, припущенні щодо діапазонів, в яких лежать константи отримати значення констант швидкостей хімічних реакцій. Програма архітектуру модель – вид – контролер, що дозволяє використовувати її на будь-якому персональному комп'ютері без попередньої установки. Продукт виконаний з використанням алгоритмів машинного навчання для обробки експериментальних даних, та провідних технологій розробки додатків.

Пропозиції щодо напрямку подальших досліджень – залучення нових алогоритмів, поліпшення користувацького інтерфейсу, пришвидшення роботи та систематизація отриманих даних.

КОНСТАНТИ ШВИДКОСТЕЙ ХІМІЧНИХ РЕАКЦІЙ, СКЛАДНІ ХІМІЧНІ
ПРОЦЕСИ, МАШИННЕ НАВЧАННЯ, ПІТОН, ОХОРОНА ПРАЦІ, СТАРТАП-
ПРОЕКТ

ABSTRACT

Explanatory note: 90 page, 26 figures, 18 tables, 1 supplement, 11 references.

The object of research - complex chemical processes.

The subject of the study is the calculation of the rate constants of complex chemical processes, machine learning algorithms, data generation for the learning of neural networks.

The purpose of this work is to develop a computer program to calculate the kinetic equation parameters of complex chemical systems.

A software product was developed that allows, based on the experimental data on the change of concentrations of reagents during the chemical process and a number of additional data, the system of chemical equations of the studied process, assuming the ranges in which the constants lie to obtain the values of the rate constants of chemical reactions. Model Architecture is a view-controller that lets you use it on any PC without pre-installation. The product is made using machine learning algorithms for processing experimental data and leading application development technologies.

Suggestions for the direction of further research - attraction of new algorithms, improvement of the user interface, acceleration of work and systematization of the received data.

CONSTANTS OF SPEED CHEMICAL REACTIONS, COMPLEX CHEMICAL
PROCESSES, MACHINE LAERNING, PYTHON, LABOR SAFETY,
STARTUP-PROJECT

1. Моделирование и оптимизация химико-технологических процессов в отрасли / А. П. Кравчук, Е. Е. Трусова, 2015 – 149 с
2. Комп'ютерні технології у науковій та інженерній діяльності в технології неорганічних речовин/ Концевой С. А., 2015 – 378 с
3. Artificial Neural Networks as Models of Neural Information Processing | Frontiers Research Topic/ Marcel van Gerven, Sander Bohte, 2018 – 220 с
4. Are connectionist models neurally plausible? A critical appraisal/ M. Papadatou-pastou, 2011 – 12 с
5. Neural-gas network for vector quantization and its application to time-series prediction /Martinetz T. M., Berkovich S. G., Schulten K. J., IEEE Trans. on Neural Networks, 1993, No. 4. — P. 558—569.
6. Логически прозрачные нейронные сети и производство явных знаний из данных / А. Н. Горбань, В. Л. Дунин-Барковский, А. Н. Кирдин и др. — Новосибирск: Наука. Сибирское предприятие РАН, Нейроинформатика, 1998. — 296 с.
7. Numpy and Scipy Documentation. URL: <https://docs.scipy.org/doc/> (дата звернення: 10.03.2019).
8. 10 reasons to learn Python in 2019. URL: <https://dzone.com/articles/why-every-programmer-should-learn-python> (дата звернення: 30.03.2019)
9. Підготовка даних для навчання штучної нейронної мережі визначенню кінетичних параметрів реакцій/ Бацион Є. А., Концевой С. А., 2019 – 433 с
10. Random Multiclass Classification: Generalizing Random Forests to Random MNL and Random NB/Prinzie A, Poel D, 2007. 349 с