УДК 004:66.011

РАЗРАБОТКА ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА РАСЧЕТА КОНСТАНТЫ СКОРОСТИ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ

Пучкова Л.Н., Быковский Н.А., Халитова А.И., Фанакова Н.Н.

ФГБОУ ВО «Уфимский государственный нефтяной технический университет», филиал, Стерлитамак, e-mail: nbikovsky@list.ru

В статье представлено описание программного комплекса, позволяющего рассчитывать константы скорости химических реакций и исследовать адекватность применяемой модели. Прежде чем приступить к реализации, был проведен анализ о необходимости проекта и составлен список требований к программному продукту. Данный программный комплекс был разработан с помощью языка программирования C#. Язык C# является одним из востребованных средств разработки в рамках объектно-ориентированного подхода. Для нахождения констант уравнений в программу был заложен метод наименьших квадратов. Оценка адекватности модели произведена по критерию Фишера. В результате работы программы мы получаем не только числовые данные (порядок реакции, константы скорости химических реакций, критерий Фишера, коэффициент корреляции), но и графические. Программа позволяет найти решение для любого кинетического уравнения, заданного в явном или неявном виде. Проведен тест финальной версии программного комплекса на соответствие поставленным задачам. В результате был разработан программный комплекс, позволяющий рассчитать константы скорости химической реакции и провести исследование адекватности применяемой модели, в результате чего происходит экономия затрачиваемого времени и ресурсов для принятия решения.

Ключевые слова: программный комплекс, константы скорости химической реакции, адекватность модели

DEVELOPMENT OF A SOFTWARE COMPLEX FOR CALCULATION OF THE RATE CONSTANTS OF THE CHEMICAL REACTION

Puchkova L.N., Bykovskiy N.A., Khalitova A.I., Fanakova N.N.

Federal State-Funded Educational Institution of Higher Education «Ufa State Petroleum Technological University», branch, Sterlitamak, e-mail: nbikovsky@list.ru

The article describes a software complex that allows the calculation of the rate constants of chemical reactions, to investigate the adequacy of the model. Before starting the implementation, an analysis was conducted on the need for the project and a list of requirements for the software product was compiled. This software package was developed using the C# programming language. The C# language is one of the most common development tools within the object-oriented approach. To find the constants of the equations, the least squares method was incorporated into the program. The adequacy of the model was evaluated by Fisher's criterion. As a result of the program, we get not only numerical data (reaction order, rate constants of chemical reactions, Fisher criterion, correlation coefficient), but also graphical. The program allows you to find a solution for any kinetic equation, given explicitly or implicitly. The test of the final version of the software package has been carried out to ensure compliance with the tasks set. As a result, a software package was developed that allows to significantly speed up the process of calculating the rate constant of the chemical reaction and study the adequacy of the applied model, which undoubtedly has a positive effect on saving time and resources for decision-making.

Keywords: software complex, the rate constants of the chemical reaction, the adequacy of the model

Каждая технологическая схема химического производства подразумевает под собой комплекс упорядоченных действий (этапов), включающих тепло-, массообменную и реакционную аппаратуру, из которых особенно необходимым является этап химического взаимодействия, которое имеет неотъемлемое воздействие на расходные коэффициенты.

У экспертов, занимающихся конструированием химического производства, часто возникают определенные сложности, поскольку для создания проекта необходимы знания различных дисциплин химического профиля.

В некоторых источниках приведены таблицы стандартных термодинамических функций отдельных веществ. Для любых органических соединений, число которых слишком большое, невозможно найти такую информацию. К тому же реальный химический процесс в основном проходит в условиях, далеких от стандартных, поэтому в данной ситуации необходимо принимать к сведению переход от стандартных к реальным условиям. Данный случай требует расчетов с применением приближенных методов или экспериментальных формул.

Для решения уравнений, полученных при изучении структуры основных характеристик экономической эффективности химико-технологического процесса, необходимо численное представление зависимости выхода целевого продукта от степени превращения основного элемента. Так как в химической кинетике указанная зависимость обычно представлена в неявном виде, возникает потребность систематиза-

ции и вывода уравнений, группирующих избирательность и выход со степенью превращения.

Основными при расчетах являются материальный и тепловой балансы, на которые опираются все остальные расчеты: подбор и расчет оборудования, определение расходных коэффициентов, расчет себестоимости продукции и т.д. На самом деле, после составления материального баланса и нахождения всех материальных потоков возможны конструктивные расчеты оборудования [1, 2].

Исходя из вышеперечисленных причин, разработка программного комплекса по подборке константы скорости химических реакций и исследованию адекватности применяемой модели является актуальной задачей.

Требования к программному комплексу

Назначение разрабатываемого комплекса – подборка константы скорости химических реакций и исследование адекватности применяемой модели. Область применения – химическое производство.

Входные данные программы:

– количество параметров, среднее отклонение концентрации, количество опытов, данные, полученные в результате серии опытов – вводятся пользователем;

– порядок реакции – выбирается пользователем или программа считает автоматически.

Программный комплекс должен рассчитывать следующие параметры:

– константы скорости химических реакций;

– критерий Фишера;

– порядок реакции;

– коэффициент корреляции [3].

Все вышеописанные значения выводятся на экран в удобном упорядоченном виде.

Описание и структура программы

Для создания программного комплекса в наше время используется огромное количество языков программирования. Для реализации нашего проекта был выбран C#. Язык программирования C# – это один из распространенных средств разработки в рамках объектно-ориентированного подхода. Данный язык был создан в 1998–2001 гг. командой из инженеров под руководством Андерса Хейлсберга в компании Microsoft как основной язык создания приложений для платформы Microsoft NET Framework [4].

Самыми важными структурными компонентами программы являются модули, в которых находится программный код, и связанные с ними экранные формы. Модуль осуществляет обработку команд пользователя, поступающих с соответствующей формы. Программный код модуля состоит из взаимосвязанных подпрограмм (процедур), каждая из которых выполняет какую-либо конкретную задачу [5].

Программа состоит из следующих форм:

1. Форма Constants (*окно расчета константы скорости химических реакций и исследование адекватности применяемой модели)*. Это основное окно, с которым будет работать пользователь. Здесь происходит ввод исходных данных, расчет всех параметров и вывод конечных результатов на экран.

2. Форма Кинетика. Позволяет увидеть кинетику химических реакций.

Интерфейс программы (рис. 1) представляет собой несколько областей, а его реализация является достаточно простой и интуитивно ясной для пользователей.

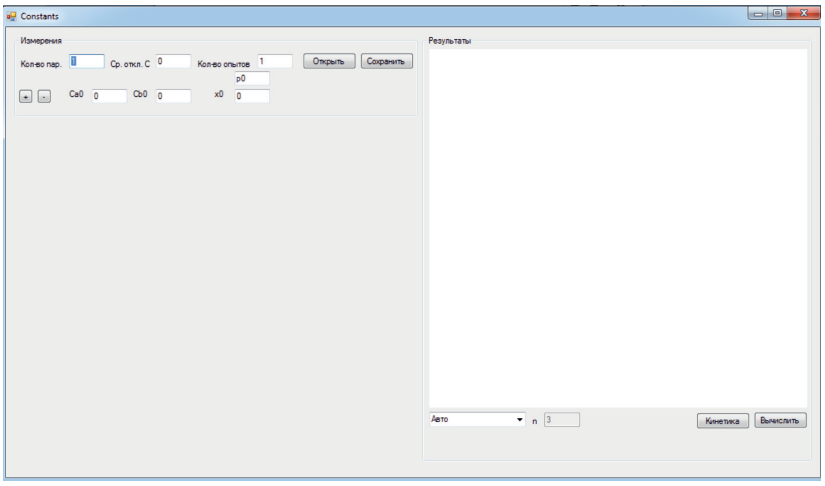

Рис. 1. Окно расчета константы скорости химических реакций и исследование адекватности применяемой модели

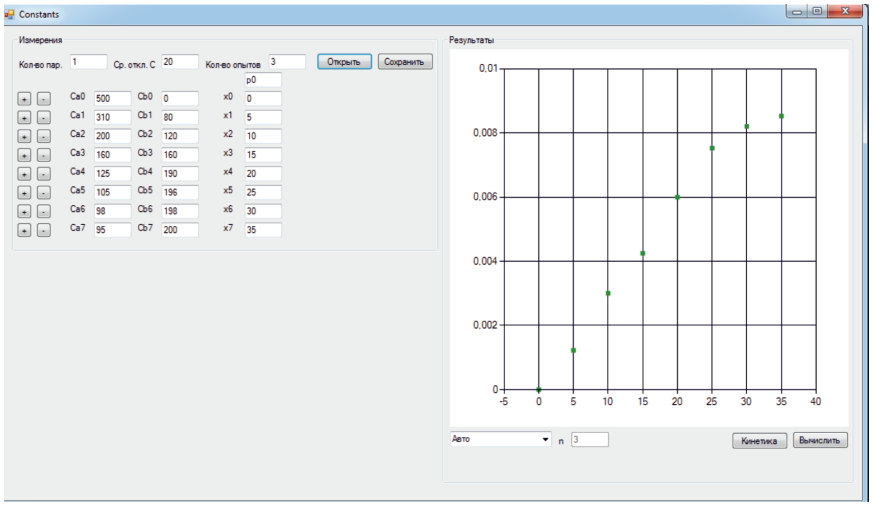

Рис. 2. Окно расчета константы скорости химических реакций и исследование адекватности применяемой модели. Ввод исходных данных

Основная часть программы разделена на две области – «Измерения» и «Результаты» (рис. 2). В области «Измерения» вводятся данные реакций, количество параметров, среднее отклонение концентрации, количество опытов. В зависимости от количества данных можно добавить / удалить строчки с помощью знака «+» / «–».

При вводе данных можно заметить в области «Результаты» автоматическое появление точек на координатной плоскости с соответствующими координатами, которые мы вводим. После нажатия кнопки «Вычислить» на экране появится график.

В области «Результаты» под графиком есть возможность выбора уравнения скорости реакции. Выбор уравнения скорости реакции можно осуществить, нажав на выпадающий список. Первое уравнения демонстрирует уравнение реакции первого порядка; второе и третье уравнение – второго порядка, два разных случая; четвёртое уравнение – уравнение реакции порядка n, где n не равно 1, n вводится рядом (рис. 3). При $n = 2$ получается то же самое уравнение, что и втором случае из списка. Если уравнение скорости реакции выбрано неправильно, тогда на экране появится красный крест, который сообщает о некорректности введённых данных для данного порядка. Если возникают такие затруднения, то можно воспользоваться возможностью нахождения порядка автоматически самой программой.

При проведении химической реакции получены кинетические кривые для компонентов. Данные кривые можно посмотреть в области «Результаты», нажав на кнопку Кинетика. На экране появится дополнительное окно с кинетическими кривыми (рис. 4).

В результате работы данного программного комплекса на экран выводятся следующие данные (рис. 5):

– график;
– константы скорости химических реакций;
– критерий Фишера;
– порядок реакции;
– коэффициент корреляции.

Адекватность модели оценивали по критерию Фишера. Сравнивали опытное значение критерия Фишера с табличным. Для нахождения констант уравнений в программу был заложен метод наименьших квадратов.

На рис. 6 изображено графическое представление алгоритма программы, описанной с помощью функциональных блоков данной схемы. Каждый блок соответствует выполнению одного либо нескольких действий.

Для вычисления математической основы использовали данные из источников [3, 6].

Заключение

На основе проведенных химиками-технологами различных экспериментов, выдвигаемых гипотез о механизме реакций и построении кинетических моделей возникает потребность исследования, состоящая в обработке экспериментальных данных в следующей последовательности:

1) находим численные значения констант скоростей химических реакций;

2) проводим проверку адекватности полученных уравнений эксперименту;

3) проверяем другие гипотезы о механизме реакций и выведенных из них моделей, производим дискриминацию других гипотез;

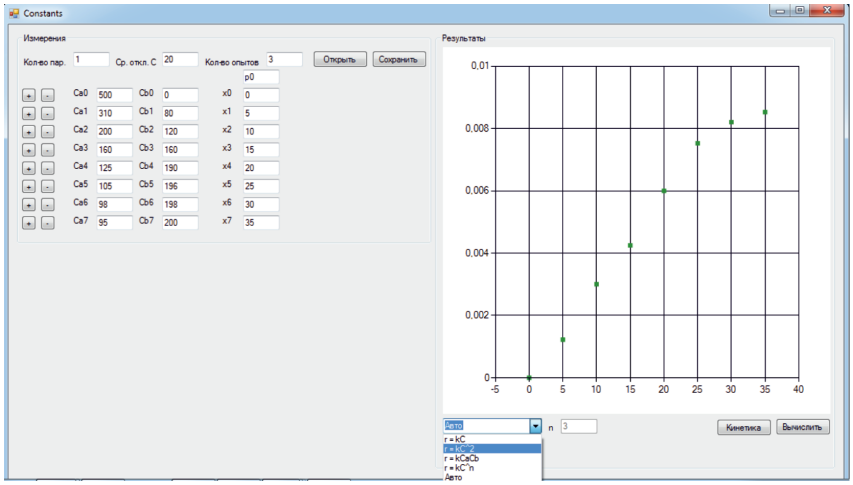

Рис. 3. Окно расчета константы скорости химических реакций и исследование адекватности применяемой модели. Определение порядка реакции

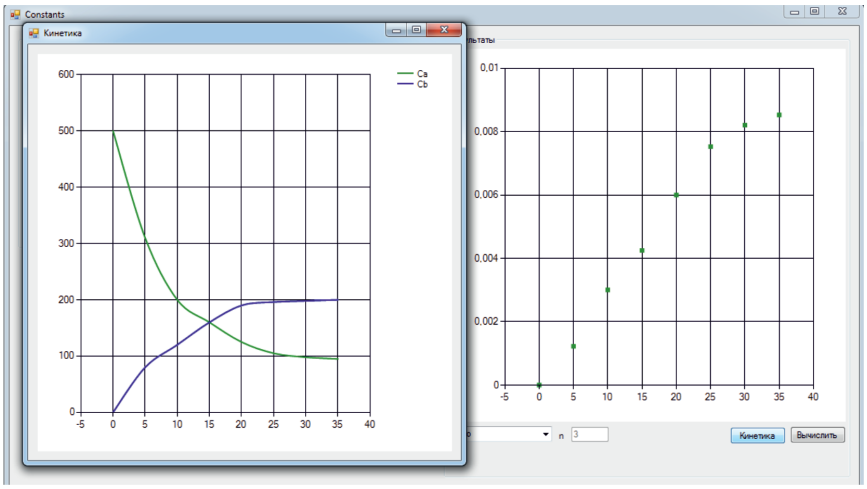

Рис. 4. Окно расчета константы скорости химических реакций и исследование адекватности применяемой модели и дополнительное окно с кинетическими кривыми

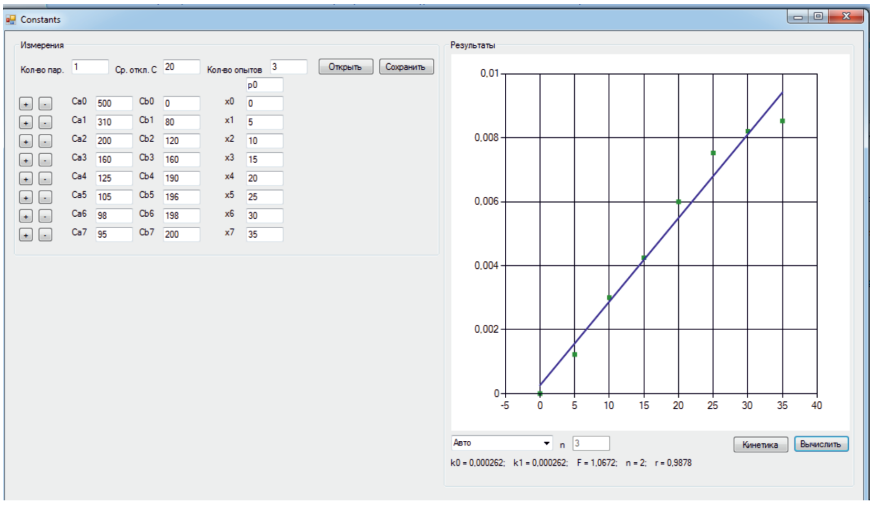

Рис. 5. Окно расчета константы скорости химических реакций и исследование адекватности применяемой модели с окончательными результатами

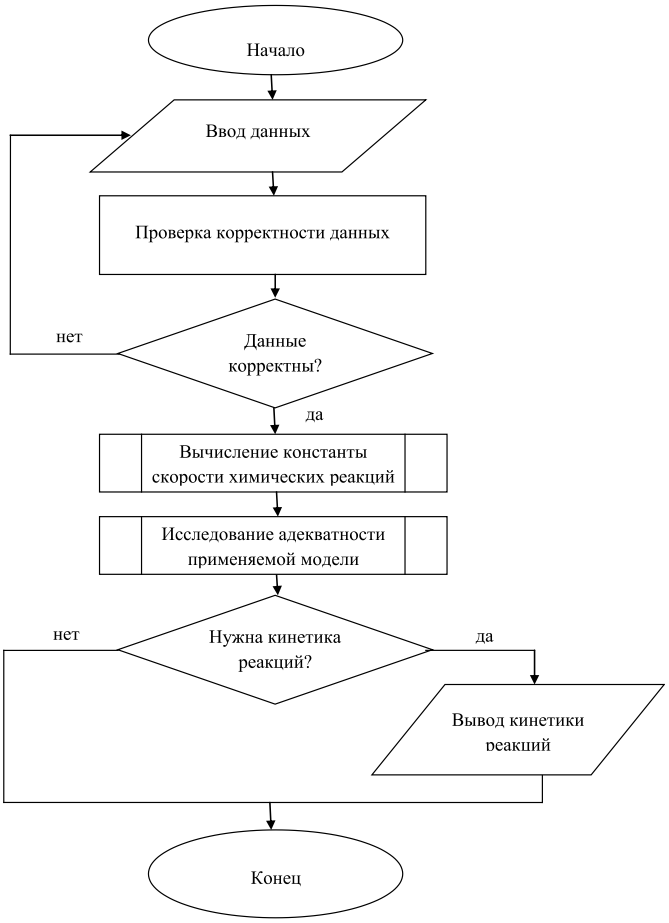

Рис. 6. Блок-схема работы программы

4) находим доверительные интервалы найденных параметров (констант) уравнений, адекватных эксперименту.

Для поиска констант уравнений используем метод наименьших квадратов (МНК). При обработке опытов по МНК требуется большая вычислительная работа. После нахождения оптимальных значений констант необходимо убедиться в адекватности описания эксперимента полученным кинетическим уравнениям (моделям). Для решения этих задач разработали программный комплекс для расчета константы скорости химической реакции и исследования адекватности применяемой модели.

Разработанный программный комплекс позволяет быстро и точно установить порядок реакции, произвести расчет константы скорости химических реакций и исследовать адекватность применяемой модели. Оценка адекватности модели произведена по критерию Фишера, сравнивая опытное значение с табличным.

Данный программный комплекс упростит работу специалистов при проектировании химического производства. За счет этого у сотрудников химического производства появляется больше времени для изучения и анализа возможных вариантов конструкции технологического аппарата.

Список литературы

1. Общая и неорганическая химия: учеб. пособие / Под ред. В.В. Денисова. Ростов н /Д.: Феникс, 2013. 573 с.

2. Евдокимов А.Н., Курзин А.В. Основы химико-технологических расчетов процессов производства органических веществ: учеб. пособие. СПб.: СПбГТУРП, 2014. 105 с.

3. Лебедев Н.Н., Мананов М.Н., Швец В.Ф. Теория химических процессов основного органического и нефтехимического синтеза. М.: Химия, 1984. 376 с.

4. Прата С. Язык программирования С (С11). Лекции и упражнения, 6-е изд. = C Primer Plus, 6th Edition. М.: Вильямс, 2015. 928 с.

5. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2012610496 Программа для расчета ректификационной колонны / Жулаев С.В., Быковский Н.А., Даминев Р.Р., Ильина Т.Ф., Пучкова Л.Н. № 2011618616, заявл. 15.11.2011, зарегистрировано 10.01.2012.

6. Письменко В.Т., Калюкова Е.Н. Кинетика химических реакций. Определение константы скорости и энергии активации реакций: Методические указания к лабораторной работе по физической химии. Ульяновск: УлГТУ, 2002. 20 с.