

**РОЗРОБКА ІНФОРМАЦІЙНОГО ТА ПРОГРАМНОГО
ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ ВИЗНАЧЕННЯ НЕВІДОМИХ КІНЕТИЧНОГО
РІВНЯННЯ КОНВЕРСІЇ ОКСИДУ ВУГЛЕЦЮ (II)**

Терехов О.В., Пилипчук О.І., Гужва В.О., Слабун І.О.

Національний технічний університет

«Харківський політехнічний інститут», м. Харків

Для забезпечення орних земель України азотними добривами їй необхідно виробляти щонайменше 6,0 млн.т. аміаку (NH_3) на рік. На даний момент потужність працюючих агрегатів аміаку дозволяє виробляти необхідну кількість добрив, але існує проблема енерговитрат. Сировиною для виробництва аміаку у агрегатах є природний газ.

Теоретична витрата метану (у перерахунку на стандартні умови) при його 100% - му перетворенні у кінцевий продукт (аміак) складає 658,8 м³ на 1 т. NH_3 . З урахуванням теплотворної здатності природного газу це відповідає енергоспоживанню на 1 т. NH_3 близько 5,3 Гкал. Основні витрати енергії припадають на стадії парових конверсій метану та оксиду вуглецю. Для технологічного розрахунку та оптимізації стадії конверсії оксиду вуглецю (II) у нашому університеті була розроблена структура кінетичного рівняння другого ступеня конверсії CO на мідь-цинк-алюмінієвому каталізаторі марки К-СО. Мета роботи – розробка інформаційного та програмного забезпечення визначення констант кінетичного рівняння за даною його структурою, що має сім невідомих з певними обмеженнями. Для формалізації та зберігання початкових експериментальних даних і результатів розрахунків була створена база даних (БД). Моделювання даних відбувалося за методологією IDEF1X, основою якої є створення і опис сутностей та зв'язків між ними. Для розробки структури БД використано ERwin, який поєднує графічний інтерфейс Windows, інструменти для побудови ER-діаграм, редактори для створення логічного та фізичного опису моделі даних і прозору підтримку провідних реляційних систем керування БД (СКБД). В нашій роботі у якості СКБД було обрано Microsoft Access. У ній передбачені усі необхідні засоби для визначення та обробки даних.

Програмне забезпечення (призначене для зберігання, перегляду, редагування даних та розрахунку невідомих кінетичного рівняння) розроблене у високопродуктивному середовищі Microsoft Visual Studio .NET Professional 2003. Проектування програмного забезпечення (ПЗ) відбувалося засобами уніфікованої мови моделювання UML у вигляді діаграми варіантів використання та діаграми класів. Діаграма варіантів використання необхідна для оцінки функціональності ПЗ, а діаграма класів описує структуру ПЗ. За співпрацею з вченими-хіміками була створена детальна інструкція користувальницького інтерфейсу.