Минобрнауки России

федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение

высшего образования

«Санкт-Петербургский государственный технологический институт

(технический университет)»

Направление подготовки 09.03.01 Информатика и вычислительная

техника

Направленность Автоматизированные системы

образовательной программы обработки информации и управления

УДК 004.942:621.564

Факультет информационных технологий и управления

Кафедра систем автоматизированного проектирования и управления

**ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА**

**БАКАЛАВРА**

**Тема Информационная система выбора оборудования для производства озонобезопасных хладонов**

Обучающийся О. Е. Бездудная

Санкт-Петербург

2024

Заведующий кафедрой Т. Б. Чистякова

Руководитель,

доц. И. В. Новожилова

Консультант

по защите информации

доц. Г. В. Кузнецова

Нормоконтролер,

ст. преп. Л. Ф. Макарова

Минобрнауки России

федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение

высшего образования

«Санкт-Петербургский государственный технологический институт

(технический университет)»

ЗАДАНИЕ

НА ВЫПУСКНУЮ КВАЛИФИКАЦИОННУЮ РАБОТУ

БАКАЛАВРА

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Направление подготовки | 09.03.01 | Информатика и вычислительная техника |
| Направленность  образовательной программы |  | Автоматизированные системы обработки информации и управления |
| Факультет |  | Информационных технологий и управления |
| Кафедра |  | Систем автоматизированного  проектирования и управления |

Обучающийся Бездудная Ольга Евгеньевна

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Тема | Информационная система выбора оборудования для производства озонобезопасных хладонов | |
| Утверждена приказом по институту от 22.03.2024 № 448-02-18  Срок сдачи работы 24.06.2024 | | |
| Цель работы | | повышение эффективности проектирования процессов синтеза озонобезопасных хладонов широкой номенклатуры за счет разработки информационной системы (ИС), позволяющей на основе настраиваемой базы данных (БД) характеристик хладонов, технологических схем, оборудования, сырья, кинетических параметров и библиотеки математических моделей (ММ) осуществлять выбор оборудования химического процесса синтеза хладонов и выполнять вычислительные эксперименты по анализу влияния температуры процесса и времени контакта на выходные концентрации целевых и побочных продуктов при различных составах реакционной смеси. |

Исходные данные:

1. Норенков, И. П. Автоматизированные информационные системы : учебное пособие для вузов / И. П. Норенков – Москва : Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2011. – 342 с. – ISBN 978-5-7038-3446-6.
2. Советов, Б. Я. Методы и средства проектирования информационных систем и технологий : учебник для вузов / Б. Я. Советов, В. А. Дубенецкий, В. В. Цехановский. – Москва : Академия, 2018. – 348 с. – ISBN 978-5-4468-4009-0.
3. Советов, Б. Я. Базы данных: теория и практика : учебник для вузов / Б. Я. Советов, В. В. Цехановский, В. Д. Чертовской. – 2-е изд. – Москва : Юрайт, 2013. – 462 с. – ISBN 5-44684-009-7.
4. Гартман, Т. Н. Основы компьютерного моделирования химико-технологических про-цессов : учебное пособие для вузов / Т. Н. Гартман, Д. В. Клушин. – Москва : Академкни-га, 2006. – 416 с. – ISBN 5-94628-268-9.
5. Гумеров, А. М. Математическое моделирование химико-технологических процессов : учебное пособие для вузов / А. М. Гумеров. – 2-е изд., перераб. – Санкт-Петербург [и др.] : Лань, 2021. – 176 с. – ISBN 978-5-8114-1533-5.
6. Тарасик, В. П. Математическое моделирование технических систем : учебник / В. П. Тарасик. – Минск : Новое знание ; Москва : ИНФРА-М, 2024. – 592 с. – ISBN 978-5-16-011996-0.
7. Синтез озонобезопасных хладонов и пути усовершенствования отечественных промышленных катализаторов для их производства / И. Г. Трукшин, В. Г. Барабанов, В. Н. Новгородов [и др.] // Катализ в промышленности. – 2010. – № 4. – С. 26-33.
8. Трукшин, И. Г. Каталитические ресурсосберегающие технологии производства озонобезопасных фторалканов : автореферат дис. ... доктора химических наук : 05.17.04 / Трукшин Игорь Георгиевич; [РНЦ «Прикладная химия»]. – Санкт-Петербург, 2013. – 45 с.
9. Тюкачев, Н. А. C#. Основы программирования : учебное пособие / Н. А. Тюкачев, В. Г. Хлебостроев. – 4-е изд. – Санкт-Петербург [и др.] : Лань, 2021. – 272 с. – ISBN 978 5 8114-7266-6.
10. АО «РНЦ «Прикладная химия (ГИПХ)». – URL: https://giph.su/ (дата обращения: 20.05.2024).

Основные задачи ВКР бакалавра:

1. Анализ технологии производства озонобезопасных хладонов (тетрафторэтана (хладона 134а), пентафторэтана (хладона 125), гептафторпропана (хладона 227еа), трифторметана (хладона 23), дифторметана (хладона 32) из галогенсодержащих алканов и олефинов.
2. Сравнительная характеристика существующих компьютерных систем-аналогов по исследованию кинетики химических реакций (ChemKinOptima, ChimKinetic, KinetLab).
3. Обзор и обоснование выбора инструментальных средств разработки ИС выбора оборудования для производства озонобезопасных хладонов.
4. Составление формализованного описания процесса синтеза озонобезопасных хладонов как объекта проектирования. Постановка задачи выбора оборудования химического процесса синтеза хладонов и выполнения вычислительных экспериментов по анализу влияния температуры процесса и времени контакта на выходные концентрации целевых и побочных продуктов при различных составах реакционной смеси.
5. Разработка функциональной структуры ИС, включающей БД характеристик озонобезопасных хладонов широкой номенклатуры, технологических схем, оборудования, сырья, кинетических параметров; БД учетных записей пользователей; библиотеку ММ процессов синтеза хладонов; модуль выбора оборудования в соответствии с требованиями технического задания; модуль поверочного расчета процессов синтеза хладонов; модуль визуализации результатов исследования в виде таблиц значений и графических зависимостей; интерфейс проектировщика-исследователя, интерфейс администратора.
6. Создание структуры информационного обеспечения системы (БД характеристик озонобезопасных хладонов широкой номенклатуры, технологических схем, оборудования, сырья, кинетических параметров; БД учетных записей пользователей).
7. Обоснование структуры уравнений и параметров ММ кинетики химических реакций, протекающих при синтезе 1,1,1,2-тетрафторэтана из трихлорэтилена в реакторе периодического действия.
8. Построение алгоритма выбора оборудования химического процесса синтеза хладонов и выполнения вычислительных экспериментов по анализу влияния температуры процесса и времени контакта на выходные концентрации целевых и побочных продуктов при различных составах реакционной смеси.
9. Разработка структуры интерфейсов проектировщика-исследователя и администратора.
10. Программная реализация и тестирование работы проблемно-ориентированного программного обеспечения ИС на примере процесса синтеза 1,1,1,2-тетрафторэтана (хладона 134а) из трихлорэтилена при различных составах реакционной смеси.
11. Оформление документации (отчета о работе, программного документа «Описание применения» в соответствии с ЕСПД) и презентации по ВКР.

Перечень графического материала:

1. Формализованное описание процесса синтеза озонобезопасных хладонов как объекта проектирования. Постановка задачи выбора оборудования химического процесса синтеза хладонов и выполнения вычислительных экспериментов по анализу влияния температуры процесса и времени контакта на выходные концентрации целевых и побочных продуктов при различных составах реакционной смеси.
2. Функциональная структура ИС.
3. Инфологическая и даталогическая модели описания данных.
4. Структура кинетической модели синтеза 1,1,1,2-тетрафторэтана из трихлорэтилена.
5. Блок-схема алгоритма выбора оборудования процесса синтеза хладонов и выполнения вычислительных экспериментов по анализу влияния температуры процесса и времени контакта на выходные концентрации целевых и побочных продуктов при различных составах реакционной смеси.
6. UML-диаграммы вариантов использования для проектировщика-исследователя и администратора.
7. Трехуровневая структура программного обеспечения ИС.
8. Обоснование информационной безопасности системы.
9. Результаты тестирования системы на примере процесса синтеза 1,1,1,2-тетрафторэтана (хладона 134а) из трихлорэтилена при различных составах реакционной смеси.
10. Характеристика программного и аппаратного обеспечений.

Характеристики аппаратного и программного обеспечения: ноутбук на базе процессора AMD Ryzen 5 3500U (2,1 ГГц), ОЗУ 8 ГБ, НЖМД 512 ГБ, экран ЖК (14,1″). Программное обеспечение: операционная система Windows 10, СУБД SQLite 3, среда разработки Visual Studio 2022 (язык программирования C#), текстовый редактор Office Word 2021, графический редактор Office Visio 2021, презентационная программа Office PowerPoint 2021.

Заведующий кафедрой Т. Б. Чистякова

Руководитель, доцент И. В. Новожилова

Задание принял к выполнению О. Е. Бездудная

**РЕФЕРАТ**

Работа над темой выполнялась в соответствии с заданием на выпускную квалификационную работу (ВКР), утвержденным приказом от 22.03.2024 № 448-02-18. Отчет к ВКР содержит ? страниц, ? рисунка, ? таблиц, ? источников, 3 приложения.

ИНФОРМАЦИОННАЯ СИСТЕМА; ОЗОНОБЕЗОПАСНЫЙ ХЛАДОН; ВЫБОР ОБОРУДОВАНИЯ;

В отчете произведен анализ технологий производства озонобезопасных хладонов широкой номенклатуры, обзор существующих компьютерных систем-аналогов по исследованию кинетики химических реакций, обзор и обоснование выбора инструментальных средств разработки информационной системы выбора оборудования для производства озонобезопасных хладонов, составлены цель и задачи работы. Основная часть отчета содержит технологию разработки информационной системы, включающую функциональную структуру системы, характеристики и структуры информационного обеспечения и интерфейсов, алгоритм выбора оборудования химического процесса синтеза хладонов, алгоритм выполнения вычислительных экспериментов по анализу влияния температуры процесса и времени контакта на выходные концентрации целевых и побочных продуктов, результаты тестирования. В заключении сделаны выводы и предложения по работе.

Для обеспечения работоспособности комплекса создан программный документ «Описание применения».

**СОДЕРЖАНИЕ**

[ВВЕДЕНИЕ 7](#_Toc167994718)

[1 Аналитический обзор 8](#_Toc167994719)

[1.1 Анализ технологии производства озонобезопасных хладонов из галогенсодержащих алканов и олефинов 8](#_Toc167994720)

[1.2 Сравнительная характеристика существующих компьютерных систем-аналогов по исследованию кинетики химических реакций 17](#_Toc167994721)

[1.3 Обзор и обоснование выбора инструментальных средств разработки ИС выбора оборудования для производства озонобезопасных хладонов 20](#_Toc167994722)

[2 Цель и задачи работы 23](#_Toc167994723)

[3 Основная часть. Технология разработки информационной системы 24](#_Toc167994724)

[3.1 Составление формализованного описания процесса синтеза озонобезопасных хладонов как объекта проектирования. Постановка задачи 24](#_Toc167994725)

[3.2 Разработка функциональной структуры информационной системы 26](#_Toc167994726)

[3.3 Создание структуры информационного обеспечения системы 28](#_Toc167994727)

[3.4 Обоснование структуры уравнений и параметров математической модели процесса синтеза хладона 134а 29](#_Toc167994728)

[3.5 Построение алгоритма выбора оборудования химического процесса синтеза хладонов и выполнения вычислительных экспериментов 36](#_Toc167994729)

[3.6 Разработка структуры интерфейсов проектировщика-исследователя и администратора 38](#_Toc167994730)

[3.7 Тестирование информационной системы 40](#_Toc167994731)

[ВЫВОДЫ ПО РАБОТЕ 41](#_Toc167994732)

[СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ 43](#_Toc167994733)

[ПРИЛОЖЕНИЕ А Характеристика программного и аппаратного обеспечения 46](#_Toc167994734)

[ПРИЛОЖЕНИЕ Б Защита информации 48](#_Toc167994735)

[ПРИЛОЖЕНИЕ В Описание применения 59](#_Toc167994736)

# ВВЕДЕНИЕ

Одной из важнейших экологических проблем настоящего времени является проблема сохранения озонового слоя Земли. Из-за потенциального вреда озоновому слою, причиняющие озоноразрушающие вещества, в настоящее время развертываются производства полностью озонобезопасных и переходных соединений – фторуглеводородов и хлорфторуглеводородов.

Среди методов синтеза новых озонобезопасных соединений для получения высокофторированных веществ, перспективным представляется метод газофазного каталитического гидрофторирования полностью или частично галоидированных соединений. Однако, данный метод отличается сложностью механизмов и множеством (более 20) химических реакций, протекающих через ряд стадий с образованием различных промежуточных комплексов и веществ (более 20 единиц оборудования в одном процессе). А объем производства хладонов в России составляет более 14 тысяч тонн в год. При этом наиболее актуальным является разработка технологических схем производства, обеспечивающих возможность получения фторуглеводородов с использованием различных видов сырья, при соответствующей корректировке режимов работы отдельных узлов технологического процесса. Следует отметить, что отработавшие срок эксплуатации гидрофторалканы для уменьшения загрязнения окружающей среды и сокращения затрат на их промышленное производство целесообразно подвергать регенерации, которая может быть выполнена на установках, имеющих такую же структуру, как и установки для регенерации озоноопасных хладонов [[1, 2]](#_СПИСОК_ИСПОЛЬЗОВАННЫХ_ИСТОЧНИКОВ).

Таким образом, разработка информационной системы выбора оборудования для ресурсосберегающего производства и регенерации озонобезопасных хладонов является актуальной и экологически значимой задачей.

# 1 Аналитический обзор

## 1.1 Анализ технологии производства озонобезопасных хладонов из галогенсодержащих алканов и олефинов

**1) Хладон 134а**

Хладон 134а (1,1,1,2-тетрафторэтан) – бесцветный, прозрачный газ, который сжижается под давлением. Имеет слегка эфирный запах. Относится к группе хладонов, содержащих атомы фтора, хлора и водорода. Озоноразрушающий потенциал равен 0 [[3]](#_СПИСОК_ИСПОЛЬЗОВАННЫХ_ИСТОЧНИКОВ).

Основные характеристики:

* способен обеспечивать температуру до -15°C;
* не содержит бром, хлор и другие соединения, опасные для озонового слоя;
* нетоксичный;
* низкая воспламеняемость, но при воздействии открытого огня может распадаться на токсичные вещества;
* удобен и прост для дозаправки системы в случае утечки;
* физические свойства повышают эффективность холодильной техники;
* соответствует требованиям российских и международных стандартов [[4]](#_СПИСОК_ИСПОЛЬЗОВАННЫХ_ИСТОЧНИКОВ).

Принципиальная технологическая схема производства 1,1,1,2-тетрафторэтана (хладона 134а) из трихлорэтилена (рисунок 1), дополнительно включает:

* выделение хлористого водорода и получение соляной кислоты,
* очистку 1,1,1,2-тетрафторэтана от 1,1-дифторхлорэтилена (методом газофазного гидрофторирования на хроммагнийфторидном катализаторе),
* нейтрализацию продуктов синтеза,
* выделение побочных продуктов синтеза: 1,1,1-трифторэтана
* (хладона 143а) и пентафторэтана (хладона 125), для их дальнейшего использования в качестве озонобезопасных хладоагентов,
* получение товарного хладона 134а.

Очистка целевого продукта от непредельных соединений при температуре 200÷300°С является удобным и эффективным способом, позволяющим в присутствии хроммагнийфторидного катализатора добиться практически полного превращения нежелательного 1,1-дифторхлорэтилена в 1,1,1-трифторхлорэтан, поэтому применение такой очистки является более предпочтительным по сравнению с возвратом азеотропной смеси 1,1,1,2-тетрафторэтана и 1,1-дифторхлорэтилена на узел синтеза [[1, 5]](#_СПИСОК_ИСПОЛЬЗОВАННЫХ_ИСТОЧНИКОВ_2).

Изображение выглядит как диаграмма, зарисовка, Технический чертеж, скелет

Автоматически созданное описание

Рисунок 1 – Технологическая схема производства хладона 134а

Из расходных емкостей *Е*2 и *Е*1 исходные вещества (трихлорэтилен и фтористый водород, соответственно) через испаритель *Т*3 и электроподогреватель *Т*4 поступают в реактор *Р*5, заполненный хроммагнийфторидным катализатором, где при температуре 170÷400°С и давлении 0,6÷0,8 МПа происходит синтез 1,1,1-трифторхлорэтана (хладона 133а).

Реакционная смесь из реактора *P*5 через холодильник *Т*6 направляется в ректификационную колонну *K*10, предназначенную для выделения высококипящих веществ и работающую под давлением 0,5÷0,7 МПа.

Высококипящие продукты и непрореагировавшие фтористый водород и трихлорэтилен из кипятильника *Т*12 сливаются в расслаиватель *Е*13; после расслаивания трихлорэтилен через расходную емкость *Е*2 возвращается реактор *P*5, а смесь хладона 133а и фтористого водорода через электроподогреватель *Т*7 подается в реактор *Р*8, и, частично, в реактор *P*5 (для поддержания теплового режима).

В реакторе *P*8 при температуре 300÷400°С и давлении 0,6÷0,8 МПа происходит синтез хладона 134а (повышенное давление необходимо для упрощения отделения хлористого водорода на стадиях очистки 1,1,1,2-тетрафторэтана). Продукты синтеза через холодильник *Т*9 поступают в ректификационную колонну *К*10.

Из дефлегматора *Т*11 колонны *К*10 низкокипящие продукты синтеза поступают в ректификационную колонну *К*14 для выделения хлористого водорода.

Хлористый водород из дефлегматора *Т*15 направляется на получение соляной кислоты. Кубовый продукт колонны *K*15, содержащий преимущественно хладон 134a, из кипятильника *T*16 через электроподогреватель *Т*17 подается в реактор *P*18, где при температуре 200÷300°С и давлении 0,2÷0,3 МПа происходит каталитическая очистка продуктов синтеза от непредельных соединений.

Очищенный газ через холодильник *Т*19 поступает в абсорбер *Т*20, где происходит очистка реакционной смеси водой от остаточного фтористого водорода с получением 40%-ной плавиковой кислоты.

Продукты синтеза нейтрализуются в насадочной колонне *К*21, орошаемой раствором едкого натра, проходят осушитель *К*22, заполненный цеолитом, и компрессором *М*23 подаются в ректификационную колонну *К*24, где при давлении 1,5 МПа происходит отдувка низкокипящих примесей, которые из дефлегматора *Т*25 направляются на термическое уничтожение.

Кубовый продукт колонны *К*24 из кипятильника *Т*26 поступает в ректификационную колонну *К*27, работающую при давлении 1,0 МПа, где из дефлегматора *Т*28 отбирается смесь хладонов 125 и 143а.

Кубовый продукт колонны *К*27 из кипятильника *Т*29 передается в колонну *К*30, работающую при давлении 0,8 МПа, где из дефлегматора *Т*31 отбирается азеотропная смесь хладона 134а и 1,1-дифторхлорэтилена, которая поступает на стадию очистки от непредельных соединений в реактор *Р*18.

Кубовый продукт колонны *К*30 из кипятильника *Т*32 направляется в колонну *К*33, работающую при давлении 0,6 МПа, где из дефлегматора *Т*34 отбирается товарный продукт – хладон 134а.

Кубовый продукт колонны *К*33 из кипятильника *Т*35 через электроподогреватель *Т*4 поступает в реактор синтеза *P*5.

**2) Хладон 125**

Хладон 125 (пентафторэтан) – газ не имеет запаха, не горит, дешев в изготовлении и легок в применении. Отсутствует дополнительный цвет, поэтому внешне незаметен.

Огнетушащая концентрация немного превышает безопасную для человека. Допускается кратковременный контакт человека в помещении с Хладоном 125, но не более 5 минут, при нормативных огнетушащих концентрациях. Газовое пожаротушение хладоном 125 отличается самой большой термической и химической стабильностью (900 С). Озоноразрушающий потенциал – 0 [[6]](#_СПИСОК_ИСПОЛЬЗОВАННЫХ_ИСТОЧНИКОВ).

Основные характеристики:

* продолжительность выпуска до достижения огнетушащей концентрации осуществляется в течение 10 секунд;
* после распыления огнетушащей концентрации Хладона 125, количество кислорода снижается до 18-19%, что позволяет нормально дышать;
* температурный диапазон уверенно эффективного срабатывания составляет от -40 до +50 °С;
* не оказывает вредного воздействия на озоновый слой, безопасен для окружающей среды;
* на каждый баллон с газом установлен манометр для контроля за уровнем давления;
* хладон 125 характеризуется максимальной термостабильностью среди газообразных огнетушащих веществ, в связи с чем рекомендован для применения на объектах, предусматривающих размещение большого количества тлеющих материалов;
* не вступает в химические реакции, которые способны нанести материальный ущерб находящимся в помещении ценностям и оборудованию, включая силовые установки и электронику [[7]](#_СПИСОК_ИСПОЛЬЗОВАННЫХ_ИСТОЧНИКОВ).

Принципиальная технологическая схема производства пентафторэтана представлена на рисунке 2.

Изображение выглядит как текст, диаграмма, чек

Автоматически созданное описание

Рисунок 2 – Технологическая схема производства хладона 125

Давление на стадии синтеза 0,3 МПа, температура 370÷450°С, (более низкая для синтеза хладона 125 из перхлорэтилена, более высокая для синтеза хладона 125 из хладонов 124, 123а). Продукты синтеза проходят узел конденсации, где выделяются высококипящие органические продукты и фтористый водород, поступающие далее на расслаивание и на синтез (возвратные органические продукты и 167 возвратный фтористый водород). Несконденсировавшиеся газы (*НС1*, хладон 125, хладон 124 и другие) проходят стадию водной промывки (получения смеси соляной и плавиковой кислот с примесью *HF*), нейтрализации, сушки, компримирования и конденсации сырца для выделения хладона 125. После отдувки инертов и низкокипящих примесей (хладон 23, хладон 13, *N*2 и др.) проводят выделение смеси хладона 125 и 15, разделение которой осуществляется методом водной абсорбции. Десорбируемый из воды хладон 125 компримируется, сушится, дополнительно очищается адсорбцией на активированном угле от высококипящих примесей (в том числе от непредельных соединений) и поступает на узел розлива. [[1, 5]](#_СПИСОК_ИСПОЛЬЗОВАННЫХ_ИСТОЧНИКОВ_2).

**3) Хладон 227еа**

Хладон 227еа (1,1,1,2,2,3,3-гептафторпропан) – бесцветный газ. Является озонобезопасным, с потенциалом истощения озонового слоя, равным 0 [[8]](#_СПИСОК_ИСПОЛЬЗОВАННЫХ_ИСТОЧНИКОВ).

Основные характеристики:

* эффективен для объемного пожаротушения;
* не проводит электричество, имея относительную диэлектрическую проницаемость 2,0;
* не вызывает коррозии металлов и деструкции органических соединений, что позволяет относить его к "чистым газам";
* время пребывания в атмосфере около 36,5 лет;
* химически инертен;
* время выпуска 10 секунд;
* для транспортировки по трубам требуется газ-вытеснитель;
* контроль давления в модуле осуществляется по манометру;
* обладает высоким показателем соотношения качество/цена [[9]](#_СПИСОК_ИСПОЛЬЗОВАННЫХ_ИСТОЧНИКОВ).

Промышленный процесс получения хладона 227еа состоит из следующих основных стадий:

* подготовка и загрузка сырья;
* синтез хладона 227еа,
* выделение возвратного фтористого водорода,
* получение плавиковой кислоты,
* нейтрализация газов синтеза,
* осушка газов синтеза,
* компримирование и конденсация,
* ректификация газов синтеза с получением товарного продукта,
* розлив хладона 227еа,
* активация катализатора,
* регенерация катализатора,
* переработка сдувок и вентвыбросов.

На рисунке 3 представлена принципиальная технологическая схема производства хладона 227еа.

**Изображение выглядит как зарисовка, диаграмма, План, Технический чертеж

Автоматически созданное описание**

Рисунок 3 – Технологическая схема производства хладона 227еа

Синтез хладона 227еа на хроммагнийфторидном катализаторе в реакторе происходит при температуре 300-430°С и давлении 0,35-0,45 МПа. Выделение возвратного фтористого водорода происходит в колонне (позиция 7). Фтористый водород из куба колонны (позиция 7) направляется на синтез. Реакционный газ поступает из узла приготовления плавиковой кислоты (позиция 9), далее нейтрализуется в колонне (позиция 10), через узел осушки (позиция 11) и поступает на стадию компримирования (позиция 12) и конденсацию (позиция 13).

Сконденсированный продукт из емкостей (позиция 13) поступает на ректификацию:

* отделение низкокипящих примесей в колонне (позиция 14),
* выделение непрореагировавшего гексафторпропилана (позиция 15),
* выделение товарного продукта (позиция 16).

Кубовый продукт из колонны (позиция 16) направляется на термическое уничтожение [[1, 5]](#_СПИСОК_ИСПОЛЬЗОВАННЫХ_ИСТОЧНИКОВ_2).

**4) Хладон 23 и хладон 32**

Хладон 23 (трифторметан) – бесцветный газ, без запаха.

Основные характеристики:

* безопасен для людей, поскольку остаточная концентрация кислорода в помещении обеспечивает нормальное дыхание человека, с запасом безопасности 35,4%;
* не проводит электричество и безопасен для озонового слоя;
* является легким газом, способным за нормативное время создавать огнетушащую концентрацию даже в помещениях, удаленных от баллонов более чем на 100 м;
* имеет низкую температуру кипения, что позволяет хранить и применять его при температурах до минус 40°С;
* стабилен и не требует периодической регенерации [[10]](#_СПИСОК_ИСПОЛЬЗОВАННЫХ_ИСТОЧНИКОВ).

Хладон 32 (дифторметан) – бесцветный, горючий, нетоксичный газ. Не агрессивен к металлам и полимерным материалам, однако при контакте с пламенем и горячими поверхностями разлагается с образованием высокотоксичных продуктов.

Основные характеристики:

* простота дозаправки, независимо от оставшегося количества хладона в контуре;
* модернизация на хладон 32 не требует серьезных изменений в холодильных системах;
* несложная процедура дозаправки после возможных утечек;
* хорошие показатели холодильной эффективности и давления паров;
* сохраняет свои свойства при многократных перезаправках;
* экологичен, безопасен и удобен в эксплуатации;
* имеет низкие эксплуатационные расходы [[11]](#_СПИСОК_ИСПОЛЬЗОВАННЫХ_ИСТОЧНИКОВ).

Установка для получения хладона 23 может быть применена и для получения хладона 32, который находит применение в микроэлектронной промышленности, в холодильной технике, в качестве сырья для получения других фторсодержащих соединений. Для этого на установке получения хладона 23 с некоторыми дополнениями и корректировкой режимов можно осуществить процесс фторирования дихлорметана. С этой целью в технологическую схему (рисунок 4) необходимо внести следующие изменения:

* для подачи дихлорметана установить дозировочные насосы,
* подачу испаренных реагентов следует осуществлять после их смешения, непосредственно в реактор, минуя подогреватель,
* изменить режимы работы ректификационных колонн [[1, 5]](#_СПИСОК_ИСПОЛЬЗОВАННЫХ_ИСТОЧНИКОВ_2).

Изображение выглядит как диаграмма, зарисовка, Технический чертеж, План

Автоматически созданное описание

Рисунок 4 – Технологическая схема производства хладона 23 и хладона 32

Подача фтористого водорода осуществляется из расходных емкостей давлением азота (или насосом). Подача хлордифторметана – из расходныхемкостей давлением собственных паров. Оба реагента испаряются в соответствующих испарителях (*И*1, *И*2) типа «труба в трубе», обогреваемых паром. Далее они смешиваются и поступают в электроподогреватель (*П*3), который обеспечивает температуру на входе в реактор 140-160°С. Реактор (*Р*4) снабжен пылеулавливающим устройством в нижней части и электрообогревом. В реактор загружается катализатор. Режим работы реактора – адиабатический. Электрообогрев служит для разогрева реактора перед пуском и проведении стадии активации катализатора.

После активации катализатора производится подача реагентов. Из-за положительного теплового эффекта химической реакции температура в реакторе повышается с 140-160°С на входе, до 480-500°С на выходе. При этих условиях конверсия реагентов составляет 95-98%.

Реакционный газ поступает в холодильник (*Х*5), охлаждаемый водой, где его температура снижается до 50-60°С. Затем продукты реакции, содержащие в основном трифторметан и хлористый водород, а также непрореагировавшие исходные вещества, направляются на поглощение хлористого водорода в абсорбер (*А*6), где происходит получение 30-32% соляной кислоты.

Для устранения остаточной кислотности газ поступает в нейтрализационную колонну (*Н*7), орошаемую периодически обновляемым 10%-ым раствором едкого натра. Колонна футерована фторопластом и заполнена фторопластовыми кольцами Рашига.

Нейтральные, влажные продукты синтеза освобождаются от значительного количества воды вымораживанием при температуре около 0°С (*К*8). Окончательная осушка хладона производится в адсорбере-осушителе (*А*9), заполненном активной окисью алюминия, которая по мере насыщения влагой подвергается регенерации.

Осушенные газообразные продукты собираются в ресивере (*Р*10), откуда компрессорами (*К*11) с давлением 12 атм подаются на конденсацию (*К*12).

Конденсация ведется при температуре минус 30°С. Конденсат собирается в сборник (*С*13), откуда, после наполнения, термокомпрессией подается на ректификацию.

В первой ректификационной колонне (*К*14) производится отделение инертных и низкокипящих примесей. Давление в колонне 19-20 атм. Температура верха колонны минус 18-20°С, температура куба минус 5-10°С. После отделения низкокипящих примесей кубовая жидкость подается на колонну выделения хладона-23 (*К*15). Давление в колонне 14-16 кгс/см2. Температура верха колонны – минус 14-18°С, температура куба – 40-50°С.

В таблице 1 представлена общая характеристика хладонов.

Таблица 1 – Общая характеристика хладонов

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Наименование хладона | Марка | Трехмерная структура | Краткая характеристика | Область применения |
| 1,1,1,2-тетрафторэтан | Хладон 134а | Изображение молекулярной модели | Бесцветный, прозрачный газ, сжиженный под давлением; запах – слегка эфирный; относится к переходной группе хладонов, содержащих атомы фтора, хлора, а также один или несколько атомов водорода | Системы кондиционирования воздуха, холодильные системы со средними температурами испарения, бытовые холодильники, автомобильные и транспортные системы кондиционирования воздуха |
| Пентафторэтан | Хладон 125 | upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/thumb/1/10/... | Газ не имеет запаха, не горит, дешев в изготовлении и легок в применении; бесцветен; высокий процент применения; хорошая термическая стабильность | Хладагенты, пропелленты в аэрозольных баллонах, растворители, вспениватели, рабочие вещества в системах тушения |

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Продолжение таблицы 1 | | | | |
| Наименование хладона | Марка | Трехмерная структура | Краткая характеристика | Область применения |
| 1,1,1,2,3,3,3-гептафторпропан | Хладон 227еа |  | Бесцветный газ; озонобезопасен;  негорючий, невзрывоопасный, малотоксичный газ | Компонент смесевых хладагентов, газовых диэлектриков, пропеллентов и огнегасителей (пенообразующий и охлаждающий агент) |
| Трифторметан | Хладон 23 | Афес Хладон 23 (трифторметан) Огнетушащее вещество | DELC Воронеж | | Бесцветный газ, без запаха; безвреден для человека; наименьшая огнетушащая масса среди хладонов; постоянный контроль массы | Хладагент, сырье для органического синтеза, реагент для сухого травления при изготовлении сверхбольших интегральных схем, огнегасители. |
| Дифторметан | Хладон 32 | Модель заполнения пространства дифторметаном | Бесцветный горючий нетоксичный газ, неагрессивен к металлам и полимерным металлам; при соприкосновении с пламенем и раскалёнными поверхностями разлагается с образованием токсичных продуктов | Низкотемпературные системы охлаждения, системы кондиционирования воздуха, тепловые насосы |

## 1.2 Сравнительная характеристика существующих компьютерных систем-аналогов по исследованию кинетики химических реакций

**1) «ChemKinOptima» для комплексного математического моделирования и оптимизации кинетики многостадийных химических процессов**

Программа предназначена для автоматизации математического исследования кинетики сложных химических реакций. Она охватывает весь цикл, начиная от подготовки механизмов, математического моделирования и заканчивая оптимизацией условий проведения химических процессов для увеличения выхода продуктов. Графический интерфейс программы позволяет формировать различные схемы механизмов с автоматическим преобразованием их в систему, вводить экспериментальные данные, настраивать параметры расчетов, а также создавать и экспортировать графики и отчеты. Программа ориентирована на использование в организациях физико-химической направленности, лабораториях физической и математической химии. Основные вычислительные возможности программы включают: решение прямой и обратной задач химической кинетики; определение энергий активации различными методами; оптимизацию условий проведения химических реакций; выбор методов для интеграции жестких систем дифференциальных уравнений; комплексную обработку экспериментов, проведенных при разных температурах; выбор функционалов для сравнения экспериментальных и расчетных данных; поддержку параллельных вычислений и глобальной оптимизации; учет дополнительных ограничений при решении обратных задач; анализ чувствительности и неопределенности кинетических моделей; поддержку локальной и сетевой баз данных. [[12]](#_СПИСОК_ИСПОЛЬЗОВАННЫХ_ИСТОЧНИКОВ).

Тип реализующей ЭВМ: IBM PC – совмест. ПК;

ОС: Windows, Linux;

Язык программирования: QT, С++, Mpich2;

Объем программы для ЭВМ: 4,69 МБ.

**2) Программа формирования кинетики химических реакций ChimKinetic**

Программа предназначена для формирования кинетического механизма сложных многоступенчатых химических реакций. Она определяет промежуточные продукты элементарных химических реакций и необходимые параметры для расчета констант скоростей протекания этих реакций по закону Аррениуса. Для этого программа обрабатывает базу термодинамических данных и кинетических параметров элементарных реакций. Результаты работы программы необходимы для проведения газодинамических и тепловых расчетов газовых и двухфазных потоков с учетом неравновесных физических и химических процессов. [[13]](#_СПИСОК_ИСПОЛЬЗОВАННЫХ_ИСТОЧНИКОВ).

Тип ЭВМ: IBM PC – совмест. ПК на базе процессора с архитектурой х64;

ОС: Windows 10;

Язык программирования: MATLAB 9.x;

Объем программы для ЭВМ: 44,4 КБ.

**3) Кинетика 2012 – программа для расчёта кинетических параметров химических и биохимических процессов, версия 2.0**

Программа для ЭВМ предназначена для расчёта кинетических параметров химических процессов. В качестве основы для расчёта используется решение дифференциальных уравнений методом Гира. Основные функциональные возможности программы: позволяет решать как прямые, так и обратные (в ручном режиме) кинетические задачи; не требует от пользователя навыков программирования. Созданные в программе схемы химических реакций автоматически преобразуются в дифференциальные уравнения, которые затем решаются без участия пользователя. Результаты решения можно вывести в виде графиков или таблиц, которые можно передать в любую Windows-совместимую программу. Область использования программы – моделирование гомогенных химических и биохимических процессов. [[14]](#_СПИСОК_ИСПОЛЬЗОВАННЫХ_ИСТОЧНИКОВ).

ОС: Windows 7/8/10;

Язык программирования: С++ Ver. 9, С#;

Объем программы для ЭВМ: 21 МБ.

В таблице 2 представлена сравнительная характеристика компьютерных систем-аналогов по исследованию кинетики химических реакций.

Таблица 2 – Сравнительная характеристика компьютерных систем-аналогов по исследованию кинетики химических реакций

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Параметр | Кинетика 2012 | ChemKin  Optima | ChimKinetic | KinetLab |
| Формирование моделей кинетики | + | + | + | + |
| Решение системы жестких дифференциальных уравнений | + | + | - | - |
| Учет влияния температуры | - | + | + | + |
| Визуализация графиков и таблиц | + | + | - | + |
| Операционная система | Windows | Windows, Linux | Windows | Windows |
| Правообладатель | Ярославский государствен-ный университет им. П.Г. Демидова | Сахибгареева Маргарита Владимировна | Балтийский государствен-ный технический университет «ВОЕНМЕХ» им. Д.Ф. Устинова | СПбГТИ(ТУ), Чистякова Т. Б. |

## 1.3 Обзор и обоснование выбора инструментальных средств разработки ИС выбора оборудования для производства озонобезопасных хладонов

Для разработки информационной системы выбора оборудования для производства озонобезопасных хладонов необходим интерфейс, следовательно следует выбрать язык программирования, на котором можно создать графический интерфейс пользователя. Такие функции присутствуют в таких языках как: Java, C#, C++.

В таблице 3 представлено сравнение языков программирования [[15, 16]](#_СПИСОК_ИСПОЛЬЗОВАННЫХ_ИСТОЧНИКОВ).

Таблица 3 – Сравнение языков Java, C#, C++

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Критерии | Java | C# | C++ |
| Явная типизация | +  (статическая типизация) | +  (динамическая типизация) | +  (динамическая типизация) |
| Неявное приведение типов | – | + | + |
| Сборка мусора | + | + | – |
| Шаблоны для создания приложений с интерфейсом | – | + | – |
| Объектно-ориентированное программирование | + | + | + |
| Перегрузка функций | + | + | + |
| Модули подключения для работы с базой данных | + | + | + |

Исходя из сравнения, приведенного в таблице 3, наиболее подходящим языком программирования для реализации проекта является C#, так как обладает меньшим количеством недостатков по сравнению с C++ и Java.

Необходимо сравнить среды разработки программирования для языка C# такие как Visual Studio, Rider и Visual Studio Code.

Visual Studio – это комплексное средство разработки, которое позволяет выполнять весь цикл разработки программного обеспечения в одном месте. Это интегрированная среда разработки (IDE), предоставляющая инструменты для написания, редактирования, отладки и сборки кода, а также для последующего развёртывания приложения. Помимо функций редактирования и отладки кода, Visual Studio включает в себя компиляторы, средства автоматического дополнения кода, системы контроля версий, расширения и множество других инструментов, призванных оптимизировать и улучшить каждый этап процесса разработки программного обеспечения [[17]](#_СПИСОК_ИСПОЛЬЗОВАННЫХ_ИСТОЧНИКОВ).

Rider – это высокопроизводительная кросс-платформенная интегрированная среда разработки (IDE) для .NET-разработки. Она основана на технологиях IntelliJ Platform и ReSharper. В Rider интегрированы инструменты для веб-разработки и поддержка работы с базами данных. Таким образом, в этой IDE собраны все необходимые средства для создания как классических приложений ASP.NET, так и приложений на базе платформы ASP.NET Core. Rider позволяет разрабатывать .NET-приложения на различных операционных системах, поддерживая кросс-платформенность. При этом она предоставляет высокую производительность и передовые возможности редактирования кода, отладки и управления проектами, унаследованные от IntelliJ Platform и ReSharper. [[18]](#_СПИСОК_ИСПОЛЬЗОВАННЫХ_ИСТОЧНИКОВ).

Visual Studio Code – это текстовый редактор, разработанный компанией Microsoft для использования на операционных системах Windows, Linux и macOS. Помимо базовых функций редактирования текста, Visual Studio Code включает в себя: встроенный отладчик; инструменты для интеграции с системой контроля версий Git; подсветку синтаксиса различных языков программирования; интеллектуальные функции автодополнения кода (IntelliSense); средства для рефакторинга кода [[19]](#_СПИСОК_ИСПОЛЬЗОВАННЫХ_ИСТОЧНИКОВ).

В таблице 4 представлено сравнение сред разработки [[20-22]](#_СПИСОК_ИСПОЛЬЗОВАННЫХ_ИСТОЧНИКОВ).

Таблица 4 – Сравнение сред Visual Studio, Rider и Visual Studio Code

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Критерии | Visual Studio | Rider | Visual Studio Code |
| Поддержка нескольких языков программирования | + | + | + |
| Мультиязычность интерфейса | + | + | + |
| Разработка GUI | + | +/-  (нет конструктора для интерфейса) | +/-  (нет конструктора для интерфейса) |
| Лицензия | Бесплатная | Платная | Бесплатная |
| Шаблоны для проектов | + | - | - |
| Создание модульных тестов | + | - | + |

Исходя из сравнения, приведенного в таблице 4, наиболее подходящей средой программирования для реализации проекта является Visual Studio, так как обладает меньшим количеством недостатков по сравнению с Rider и Visual Studio Code.

Для выбора систем управления базами данных (СУБД) приведены самые известные и встраиваемые: SQLite, Microsoft Access и MySQL.

Microsoft Access работает в операционной среде Windows, может использоваться как на автономном ПК, так и в локальной компьютерной сети. С помощью Access создаются и эксплуатируются личные базы данных, а также БД организаций с относительно небольшим объёмом данных. Для создания крупных промышленных информационных систем MS Access не годится. Общий размер базы данных – 2 ГБ [[23]](#_СПИСОК_ИСПОЛЬЗОВАННЫХ_ИСТОЧНИКОВ).

SQLite – встраиваемая в приложения база данных. Так как эта система базируется на файлах, то она предоставляет довольно широкий набор инструментов для работы с ней, по сравнению с сетевыми СУБД. При работе с этой СУБД обращения происходят напрямую к файлам, вместо портов и сокетов в сетевых СУБД. Именно поэтому SQLite очень быстрая. Так как база данных состоит из одного файла, ее легко переносить на другие машины. SQLite использует стандарты языка SQL. Максимальный размер файла базы данных составляет около 140 ТБ [[24]](#_СПИСОК_ИСПОЛЬЗОВАННЫХ_ИСТОЧНИКОВ).

MySQL – свободная реляционная система управления базами данных. Гибкость СУБД MySQL обеспечивается поддержкой большого количества типов таблиц. MySQL используется в качестве сервера, к которому обращаются локальные или удалённые клиенты, однако в дистрибутив входит библиотека внутреннего сервера, позволяющая включать MySQL в автономные программы. Как и многим другим программным продуктам с открытым кодом, MySQL не достает некоторого технического совершенства, что порой сказывается на эффективности процессов разработки [[25]](#_СПИСОК_ИСПОЛЬЗОВАННЫХ_ИСТОЧНИКОВ).

В таблице 5 приведено сравнение СУБД по критериям.

Таблица 5 – Сравнение СУБД

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| СУБД | Максимальный объем БД | Дополнительное ПО | Защита данных внутренними средствами | Стоимость, руб. | Встроенный интерфейс |
| Microsoft Access | 2 Гб | Требуется | Присутствует | Стоимость годовой лицензии  9 984 | Присутствует |
| SQLite | 140 ТБ | Не требуется | Присутствует | Бесплатно | Возможна установка дополнительной программы |
| MySQL | нет ограничений | Требуется | Присутствует | Платная поддержка 163 000 | Возможна установка дополнительной программы |

Исходя из сравнения, приведенного в таблице 5, наиболее подходящей системой управления базами данных для реализации проекта является SQLite, так как не требует дополнительного программного обеспечения.

## 1.4 Выводы по аналитическому обзору

По результатам аналитического обзора проанализированы технологии производства озонобезопасных хладонов широкой номенклатуры (1,1,1,2-тетрафторэтана (хладона 134а), пентафторэтана (хладона 125), 1,1,1,2,2,3,3-гептафторпропана (хладона 227еа), трифторметана (хладона 23), дифторметана (хладона 32)) из галогенсодержащих алканов и олефинов.

Проведена сравнительная характеристика существующих компьютерных систем-аналогов по исследованию кинетики химических реакций ChemKinOptima, ChimKinetic, KinetLab, которая показала, что….

Проведены обзор и обоснование выбора среды программирования для разработки информационной системы, в ходе которого в качестве среды разработки была выбрана среда Visual Studio 2022, в качестве языка программирования – C#, а в качестве системы управления базами данных – SQLite.

# 2 Цель и задачи работы

Целью выпускной квалификационной работы является повышение эффективности проектирования процессов синтеза озонобезопасных хладонов широкой номенклатуры за счет разработки информационной системы (ИС), позволяющей на основе настраиваемой базы данных (БД) характеристик хладонов, технологических схем, оборудования, сырья, кинетических параметров и библиотеки математических моделей (ММ) осуществлять выбор оборудования химического процесса синтеза хладонов и выполнять вычислительные эксперименты по анализу влияния температуры процесса и времени контакта на выходные концентрации целевых и побочных продуктов при различных составах реакционной смеси.

Для достижения цели поставлены задачи:

* провести анализ технологии производства озонобезопасных хладонов;
* провести сравнительную характеристику существующих компьютерных систем-аналогов по исследованию кинетики химических реакций;
* провести обзор инструментальных средств разработки ИС;
* составить формализованное описание процесса синтеза озонобезопасных хладонов как объекта проектирования. Поставить задачи выбора оборудования химического процесса синтеза хладонов и выполнения вычислительных экспериментов по анализу влияния температуры процесса и времени контакта на выходные концентрации целевых и побочных продуктов при различных составах реакционной смеси;
* разработать функциональную структуру ИС;
* создать структуры информационного обеспечения системы;
* обосновать структуры уравнений и параметров ММ кинетики химических реакций, протекающих при синтезе 1,1,1,2-тетрафторэтана из трихлорэтилена в реакторе периодического действия;
* построить алгоритм выбора оборудования химического процесса синтеза хладонов и выполнения вычислительных экспериментов по анализу влияния температуры процесса и времени контакта на выходные концентрации целевых и побочных продуктов при различных составах реакционной смеси;
* разработать структуры интерфейсов проектировщика-исследователя и администратора;
* провести тестирование работы проблемно-ориентированного программного обеспечения ИС на примере процесса синтеза 1,1,1,2-тетрафторэтана (хладона 134а) из трихлорэтилена при различных составах реакционной смеси.

# 3 Основная часть. Технология разработки информационной системы

## 3.1 Составление формализованного описания процесса синтеза озонобезопасных хладонов как объекта проектирования. Постановка задачи

На рисунке 5 представлено формализованное описание процесса синтеза озонобезопасных хладонов как объекта проектирования.

Изображение выглядит как текст, линия, диаграмма, Шрифт

Автоматически созданное описание

Рисунок 5 – Формализованное описание процесса синтеза озонобезопасных хладонов как объекта проектирования

Формализованное описание процесса синтеза озонобезопасных хладонов как объекта проектирования представлено в виде совокупности векторов:

***X* = {*FP*, *MP, DP,* *QP, RP,* *FS*, *PF, Q*ТЗ, *E*ТЗ, *C*ЦП ТЗ, *C*ПП ТЗ*j*}** – вектор входных переменных,

где *FP* – наименование хладона;

*MP* – марка хладона;

*DP*– целевое назначение хладона;

*QP* = {*QP*1, … , *QPqp*} – требования по качеству продукции – эксплуатационные, физико-химические свойства;

*RP* {*RP*, …, *RPp*} – рецептуры для производства хладонов;

*FS* = {*FS*1, …, *FSfs*} – исходное сырье;

*PF* = {*PF*1, …, *PFpf*}– физико-химические свойства исходных соединений;

*Q*ТЗ – производительность оборудования в соответствии с техническим заданием;

*E*ТЗ – энергопотребление в соответствии с техническим заданием;

*C*ЦП ТЗ – суммарный выход целевого компонента в соответствии с техническим заданием;

*C*ПП ТЗ*j* – суммарный выход побочных компонентов в соответствии с техническим заданием (*j* – принадлежность к стадии производства).

***U* = {*Vj*, *τej*, *Ujmin*, *Ujmax*}** – вектор варьируемых переменных,

где *Vj* – рабочий объем реакторов;

*τej* – время контакта реакционной смеси;

[*Ujmin*; *Ujmax*] – диапазоны изменения технологических режимов оборудования.

***Y* = {*TL, TS*, *EQ,* *IP*, *Q*, *E*, *C*ЦП, *C*ПП*j*}** – вектор выходных переменных,

где *TL* = {*TL*1, …, *TLtl*} – технологические схемы синтеза хладонов;

*TS* = {*TS*1, …, *TSts*} – стадии синтеза хладонов;

*EQ* = {*EQ*1, …, *EQeq*} – технологическое оборудование;

*IP* = {*IP*1, …, *IPip*} – физико-химические свойства промежуточных продуктов;

*Q* – расчетное значение производительности оборудования;

*E* – расчетное значение энергопотребления;

*C*ЦП– расчетное значение суммарного выхода целевого продукта;

*C*ПП*j* – расчетное значение суммарного выхода целевого продукта;

***U*ДОП= {}** – допустимые диапазоны режимов функционирования [] оборудования на каждой стадии производства для достижения заданной производительности *Q ≥ Q*ТЗ, заданного энергопотребления*Е* ≤ *Е*ТЗ и заданного суммарного выхода целевого продукта *С*ЦП *≥ С*ЦП ТЗ при соблюдении ограничений на образование побочных компонентов *С*ПП*j* ≤ *С*ПП ТЗ*j*.

Задача выбора оборудования химического процесса синтеза хладонов: для выпуска определенной марки хладонов *MP*, заданной составом сырья *FS*, рецептурой *RР*, требованиями к физико-химическим и эксплуатационным свойствам хладонов *QP*, временем контакта реакционной смеси *τej* необходимо сформировать последовательность технологических стадий *TS*, оборудования *EQ* и выбрать рабочие объемы реакторов *Vj* в соответствии с требованиями технического задания (ТЗ) (производительность оборудования, не ниже заданной *Q≥Q*ТЗ, энергопотребление, не выше заданного *Е*≤*Е*ТЗ, суммарный выход целевого компонента, не ниже заданного *С*ЦП*≥С*ЦП ТЗ, при соблюдении ограничений на образование побочных компонентов *С*ПП*j*≤*С*ПП ТЗ*j*, *j* – принадлежность к стадии производства)

На рисунке 6 представлено формализованное описание процесса синтеза озонобезопасных хладонов как объекта математического моделирования.

Изображение выглядит как текст, Шрифт, линия, рукописный текст

Автоматически созданное описание

Рисунок 6 – Формализованное описание процесса синтеза озонобезопасных хладонов как объекта математического моделирования

Формализованное описание процесса синтеза озонобезопасных хладонов как объекта математического моделирования представлено в виде совокупности векторов:

***X* = {}** – вектор входных переменных,

где – начальные концентрации веществ, участвующих в химической реакции, моль/л;

*i* – номер компонента.

***U* = {*T*, *τe*}** – вектор варьируемых переменных,

где *T* – температура процесса, °С;

*τe* – конечное время контакта, с.

***A* = {, }** – вектор переменных математической модели,

где – предэкспоненциальные множители, л*n*-1/ (моль*n*-1  с), *n* – порядок реакции;

– энергии активации, Дж/моль;

*j* – номер реакции.

***Y* = {}** – вектор выходных переменных,

где – выходные концентрации компонентов, моль/л.

Задача исследования процесса синтеза озонобезопасных хладонов: для выбранной конструкции реакционного узла, заданной рабочими объемами реакторов и диапазонами температур, необходимо провести поверочный расчет оборудования процесса синтеза хладона *МР*, включающего вычисление допустимых значений температуры процесса и времени контакта *U =* {*T, τe*}, обеспечивающих необходимые концентрации целевых и побочных компонентов *Y =* {*Ci*}, *N* – число компонентов, участвующих в реакции) при различных исходных составах реакционной смеси *X =* {*Ci0*}.

## 3.2 Разработка функциональной структуры информационной системы

Для решения сформулированной задачи технологического проектирования процессов синтеза хладонов предложена архитектура информационной системы, представленная на рисунке 7. Архитектура информационной системы включает информационное обеспечение, математическое обеспечение, модуль формирования технологической схемы производства, модуль выполнения поверочного расчета оборудования, модуль формирования результатов проектирования, а также интерфейсы пользователей: проектировщика и администратора. Интерфейс проектировщика позволяет вводить данные технического задания на проектирование схемы синтеза хладона, осуществлять выбор оборудования, просматривать последовательность стадий и результаты поверочных расчетов. Интерфейс администратора позволяет редактировать информационное обеспечение, включающее базу данных характеристик озонобезопасных хладонов, технологических схем, оборудования – реакторов различного типа (трубчатых, со стационарным и псевдоожиженным слоем катализатора, адиабатических, изотермических) со значениями объемов, диапазонами рабочих температур, времени пребывания реакционной смеси, а также базу данных учетных записей пользователей.

Изображение выглядит как текст, Шрифт, черно-белый, Параллельный

Автоматически созданное описание

Рисунок 7 – Функциональная структура информационной системы

## 3.3 Создание структуры информационного обеспечения системы

Информационное обеспечение включает базу данных, состоящую из 15 таблиц: готовый продукт, сырье, свойство, значение свойств сырья, кинетический параметр, значение кинетического параметра, требование к качеству, рецепт, стадия, химическая формула, оборудование, оборудование для стадии, параметр оборудования, значение параметра оборудования, единица измерения. Инфологическая и даталогическая модели описания данных представлены на рисунках 8 и 9 [[30-31]](#_СПИСОК_ИСПОЛЬЗОВАННЫХ_ИСТОЧНИКОВ).

Изображение выглядит как диаграмма, зарисовка, белый, шаблон

Автоматически созданное описание

Рисунок 8 – Инфологическая модель описания данных

Изображение выглядит как текст, снимок экрана, диаграмма

Автоматически созданное описание

Рисунок 9 – Даталогическая модель описания данных

## 3.4 Обоснование структуры уравнений и параметров математической модели процесса синтеза хладона 134а

Для получения кинетической модели процесса синтеза 1,1,1,2-тетрафторэтана из трихлорэтилена в реакторе периодического действия составлена последовательность элементарных стадий с допущениями, представленная в таблице 6 [[32]](#_СПИСОК_ИСПОЛЬЗОВАННЫХ_ИСТОЧНИКОВ).

Допущения:

1 активность катализатора является постоянной во времени;

2 частные порядки реакций принимаются в соответствии со стехиометрическими коэффициентами соответствующих веществ в уравнениях реакций;

3 скорость реакции подчиняется закону действующих масс;

4 процесс протекает в изотермическом режиме.

Таблица 6 – Последовательность элементарных стадий

|  |  |
| --- | --- |
| Номер стадии | Элементарная стадия |
| 1 | CCl2=CClH + HF + CrF3 → [CCl2=CClH HF CrF3] |
| 2 | [CCl2=CClH HF CrF3] → CFCl2-CClH2 + CrF3 |
| 3 | CFCl2-CClH2 + CrF3 → [CFCl2-CClH2 CrF3] |
| 4 | [CFCl2-CClH2 CrF3] → CFCl=CClH + HCl + CrF3 |
| 5 | CFCl=CClH + HF + CrF3 → [CFCl=CClH HF CrF3] |
| 6 | [CFCl=CClH HF CrF3] → CF2Cl-CClH2 + CrF3 |
| 7 | CFCl2-CClH2 + CrF3 → CF2Cl-CClH2 + CrF2Cl |
| 8 | HF + CrF2Cl → HCl + CrF3 |
| 9 | CFCl2-CClH2 + CrF2Cl → CCl3-CClH2 + CrF3 |
| 10 | CCl3-CClH2 + CrF3 → [CCl3-CClH2 CrF3] |
| 11 | [CCl3-CClH2 CrF3] → CCl2=CClH + HCl + CrF3 |
| 12 | CF2Cl-CClH2 + CrF3 → [CF2Cl-CClH2 CrF3] |
| 13 | [CF2Cl-CClH2 CrF3] → CF2=CClH + HCl + CrF3 |
| 14 | CF2=CClH + HF + CrF3 → [CF2=CClH HF CrF3] |
| 15 | [CF2=CClH HF CrF3] → CF3-CClH2 + CrF3 |
| 16 | CF2Cl-CClH2 + CrF3 → CF3-CClH2 + CrF2Cl |
| 17 | CF3-CClH2 + CrF3 → **CF3-CFH2** + CrF2Cl |
| 18 | 2CF3-CClH2 + CrF3 → [2CF3-CClH2 CrF3] |
| 19 | [2CF3-CClH2 CrF3] → CF3-CH3 + CF3-CCl2H + CrF3 |
| 20 | CF3-CCl2H + CrF3 → CF3-CFClH + CrF2Cl |
| 21 | CF3-CFClH + CrF3 → CF3-CF2H + CrF2Cl |

Для обозначения веществ введены следующие обозначения:

A – CCl2=CClH;

B – HF;

C – CrF3;

D – [CCl2=CClH HF CrF3];

E – CFCl2-CClH2;

F – CFCl=CClH;

G – HCl;

H – [CFCl2-CClH2 CrF3];

I – [CFCl=CClH HF CrF3];

J – CF2Cl-CClH2;

K – CrF2Cl;

L – CCl3-CClH2;

M – [CCl3-CClH2 CrF3];

N – [CF2Cl-CClH2 CrF3];

O – CF2=CClH;

P – [CF2=CClH HF CrF3];

Q – CF3-CClH2;

R – CF3-CFH2;

S – [2CF3-CClH2 CrF3];

T – CF3-CH3;

U – CF3-CCl2H;

V – CF3-CFClH;

W – CF3-CF2H.

В таблице 7 представлена последовательность элементарных стадий в соответствии с предложенными обозначениями.

Таблица 7 – Последовательность элементарных стадий в соответствии с обозначениями

|  |  |
| --- | --- |
| Номер стадии | Элементарная стадия |
| 1 | A + B + C → D |
| 2 | D → E + C |
| 3 | E + C → H |
| 4 | H → F + G + C |
| 5 | F + B + C → I |
| 6 | I → J + C |
| 7 | E + C → J + K |
| 8 | B + K → G + C |
| 9 | E + K → L + C |
| 10 | L + C → M |
| 11 | M → A + G + C |
| 12 | J + C → N |
| 13 | N → O + G + C |
| 14 | O + B + C → P |
| 15 | P → Q + C |
| 16 | J + C → Q + K |
| 17 | Q + C → **R** + K |
| 18 | 2Q + C → S |
| 19 | S → T + U + C |
| 20 | U + C → V + K |
| 21 | V + C → W + K |

По результатам анализа химических реакций построены матрицы стехиометрических коэффициентов (таблица 8) и частных порядков (таблица 9).

Таблица 8 – Матрица стехиометрических коэффициентов

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| № | A | B | C | D | E | F | G | H | I | J | K | L | M | N | O | P | Q | R | S | T | U | V | W |
| 1 | -1 | -1 | -1 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 2 | 0 | 0 | 1 | -1 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 3 | 0 | 0 | -1 | 0 | -1 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 4 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 1 | 1 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 5 | 0 | -1 | -1 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 6 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 7 | 0 | 0 | -1 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 8 | 0 | -1 | 1 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 9 | 0 | 0 | 1 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 10 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 11 | 1 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 12 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 13 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 14 | 0 | -1 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 15 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 16 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 17 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 18 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -2 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 19 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 1 | 1 | 0 | 0 |
| 20 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 1 | 0 |
| 21 | 0 | 0 | -1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | -1 | 1 |

Таблица 9 – Матрица частных порядков

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| № | A | B | C | D | E | F | G | H | I | J | K | L | M | N | O | P | Q | R | S | T | U | V | W |
| 1 | 1 | 1 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 2 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 3 | 0 | 0 | 1 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 4 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 5 | 0 | 1 | 1 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 6 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 7 | 0 | 0 | 1 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 8 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 9 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 10 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 11 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 12 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 13 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 14 | 0 | 1 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 15 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 16 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 17 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 18 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 2 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 19 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 20 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 |
| 21 | 0 | 0 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 |

По полученным матрицам выведены уравнения для скоростей реакции (1).

|  |  |
| --- | --- |
|  | (1) |

Тогда дифференциальные уравнения представляет собой систему (2).

Выбор метода решения системы дифференциальных уравнений зависит от жесткости системы. Если система нежесткая, то для решения уравнений модели используется явный метод Рунге-Кутты 4-го порядка, если система жесткая, то метод Гира.

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
|  | (2) |
|  |  |

**Метод Гира:**

Для построения алгоритмов неявных линейных многошаговых методов используется общая формула (3):

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3) |

где

*V* – вектор искомых выходных параметров;

*h* – шаг интегрирования.

Коэффициенты *аj* и *bj* этой формулы выбираются исходя из требований точности аппроксимации и устойчивости вычислительного процесса. Кроме того, в формулах неявных методов *b*0 ≠ 0.

Для метода Гира примем *b0* = 1; *bj* = 0; *j* = . Тогда формулу (3) можно записать в виде (4):

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4) |

Здесь принято во внимание, что в слагаемом формулы (3) индекс *j* равен нулю, а коэффициент при этом слагаемом *a*0= -1. С учетом этого можно составить условие, которому должны отвечать коэффициенты формулы (4). Получаем формулу (5).

|  |  |
| --- | --- |
|  | (5) |

Формулу (4) аппроксимации производных фазовых переменных системы дифференциальных уравнений предложил К. Гир. Согласно этой формуле, аппроксимация производных в точке *tk+1* производится с использованием значений фазовых переменных, относящихся к данному и предыдущим моментам времени. Поэтому формулу (4) называют формулой дифференцирования назад. Эта формула используется для построения алгоритмов неявных методов Гира различных порядков точности. Методы Гира обеспечивают высокую устойчивость вычислительного процесса и позволяют значительно увеличить шаг интегрирования. При *р* ≤ 2 алгоритмы неявных методов Гира обладают абсолютной устойчивостью, а шаг интегрирования выбирают исходя из обеспечения требуемой точности вычислений [[26, 27]](#_СПИСОК_ИСПОЛЬЗОВАННЫХ_ИСТОЧНИКОВ).

Конечно-разностная формула Гира первого порядка имеет следующий вид (6):

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6) |

где

– правая часть дифференциального уравнения.

**Метод Рунге-Кутты 4-го порядка:**

Существует несколько способов построения алгоритмов численных одношаговых методов интегрирования. Наиболее широко применяется способ, предложенный Рунге и усовершенствованный Кутты. Суть его заключается в том, что вектор-функцию правых частей системы обыкновенных дифференциальных уравнений определяют не только в узлах сетки, но и в промежуточных точках интервала [*tk, tk + h*] на каждом шаге интегрирования. Это позволяет учесть изменение производной на интервале шага, что приводит к повышению порядка точности алгоритма метода интегрирования.

Наибольшее применение в практике вычислений получил метод Рунге-Кутты четвертого порядка. Формулы этого метода имеют вид (7):

|  |  |
| --- | --- |
|  | (7) |

где

Для получения решения на каждом шаге производится четырехкратное вычисление функции правых частей системы обыкновенных дифференциальных уравнений. Однако высокая точность метода позволяет увеличить шаг интегрирования по сравнению с методом Эйлера в 10...15 раз и обеспечить высокую его эффективность [[27-29]](#_СПИСОК_ИСПОЛЬЗОВАННЫХ_ИСТОЧНИКОВ).

## 3.5 Построение алгоритма выбора оборудования химического процесса синтеза хладонов и выполнения вычислительных экспериментов

Блок-схема алгоритма выбора оборудования для производства озонобезопасных хладонов представлена на рисунке 10.

Изображение выглядит как текст, диаграмма, чек, зарисовка

Автоматически созданное описание

Рисунок 10 – Блок-схема алгоритма выбора оборудования для производства озонобезопасных хладонов

На рисунке 11 представлена блок-схема алгоритма выполнения вычислительных экспериментов по анализу влияния температуры процесса и времени контакта на выходные концентрации целевых и побочных продуктов при различных составах реакционной смеси.

Изображение выглядит как текст, диаграмма, План, Технический чертеж

Автоматически созданное описание

Рисунок 11 – Блок-схема алгоритма выполнения вычислительных экспериментов

## 3.6 Разработка структуры интерфейсов проектировщика-исследователя и администратора

Информационная система разработана для двух типов пользователей: проектировщик-исследователь и администратор. Работа пользователей с информационной системой осуществляется при помощи графического интерфейса. Для реализации информационной системы разработана структура, включающая интерфейсы пользователей. Диаграммы вариантов использования представлены на рисунках 12 и 13.

Изображение выглядит как рисунок, зарисовка, диаграмма, текст

Автоматически созданное описание

Рисунок 12 – Диаграмма вариантов использования для проектировщика-исследователя

Изображение выглядит как текст, диаграмма, линия, зарисовка

Автоматически созданное описание

Рисунок 13 – Диаграмма вариантов использования для администратора

## 3.7 Тестирование информационной системы

Тестирование информационной системы выбора оборудования для производства озонобезопасных хладонов проводится на примере синтеза 1,1,1,2-тетрафторэтана (хладона 134а) из трихлорэтилена при различных составах реакционной смеси.

В таблицах 10 и 11 представлены исходные данные – значения кинетических параметров и начальные параметры, необходимые для тестирования программного обеспечения.

Таблица 10 – Значения кинетических параметров

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| kj | lnk0j | Eaj, кДж/моль | Значение kj, лn-1/ (мольn-1∙ с) |
| k1 | 17,0 | 83,7 | 7,64 |
| k2 | 33,8 | 125,2 | 9,05104 |
| k3 | 58,7 | 146,1 | **1,41014** |
| k4 | 16,0 | 66,5 | 60,91 |
| k5 | 58,7 | 207,7 | 2,31109 |
| k6 | 46,7 | 162,4 | 4,68107 |
| k7 | 15,6 | 51,1 | 640,96 |
| k8 | 29,5 | 188,4 | **1,5210-2** |
| k9 | 30,0 | 115,0 | 1,25104 |
| k10 | 8,5 | 20,9 | 1,17102 |
| k11 | 17,0 | 97,0 | 0,71 |
| k12 | 43,0 | 209,3 | 2,63102 |
| k13 | 16,5 | 70,0 | 53,71 |
| k14 | 12,2 | 41,9 | 1,11102 |
| k15 | 23,7 | 83,7 | 6,21103 |
| k16 | 23,0 | 126,0 | 1,6 |
| k17 | 19,5 | 85,0 | 73,8 |
| k18 | 26,2 | 148,5 | 0,7 |
| k19 | 11,7 | 76,6 | 0,13 |
| k20 | 33,0 | 74,6 | 3,45108 |
| k21 | 26,5 | 103,0 | 3,24103 |

Таблица 11 – Начальные параметры для тестирования

|  |  |
| --- | --- |
| Параметр | Значение |
| Концентрация CCl2=CClH, моль/л | 0,00035 |
| Концентрация HF, моль/л | 0,01493 |
| Концентрация CrF3, моль/л | 0,00076 |
| Концентрация [CCl2=CClH HF CrF3], моль/л | 0 |
| Концентрация CFCl2-CClH2, моль/л | 0 |
| Концентрация CFCl=CClH, моль/л | 0 |
| Концентрация HCl, моль/л | 0,000007 |
| Концентрация [CFCl2-CClH2 CrF3], моль/л | 0 |
| Концентрация [CFCl=CClH HF CrF3], моль/л | 0 |
| Концентрация CF2Cl-CClH2, моль/л | 0 |
| Концентрация CrF2Cl, моль/л | 0 |
| Концентрация CCl3-CClH2, моль/л | 0 |
| Концентрация [CCl3-CClH2 CrF3], моль/л | 0 |
| Концентрация [CF2Cl-CClH2 CrF3], моль/л | 0 |
| Концентрация CF2=CClH, моль/л | 0,00001 |
| Концентрация [CF2=CClH HF CrF3], моль/л | 0 |
| Концентрация CF3-CClH2, моль/л | 0,003733 |
| Концентрация CF3-CFH2, моль/л | 0 |
| Концентрация [2CF3-CClH2 CrF3], моль/л | 0 |
| Концентрация CF3-CH3, моль/л | 0,00003 |
| Концентрация CF3-CCl2H, моль/л | 0 |
| Концентрация CF3-CFClH, моль/л | 0 |
| Концентрация CF3-CF2H, моль/л | 0,0000053 |
| Температура протекания реакции, °С | 400 |
| Время контакта, с | 10 |

Для начала

# ВЫВОДЫ ПО РАБОТЕ

В ходе выполнения выпускной квалификационной работы решены следующие задачи:

* проведен анализ технологии производства озонобезопасных хладонов широкой номенклатуры (1,1,1,2-тетрафторэтана (хладона 134а), пентафторэтана (хладона 125), 1,1,1,2,2,3,3-гептафторпропана (хладона 227еа), трифторметана (хладона 23), дифторметана (хладона 32)) из галогенсодержащих алканов и олефинов;
* проведена сравнительная характеристика существующих компьютерных систем-аналогов по исследованию кинетики химических реакций ChemKinOptima, ChimKinetic, KinetLab, которая показала, что….;
* проведены обзор и обоснование выбора среды программирования для разработки информационной системы, в ходе которого в качестве среды разработки была выбрана среда Visual Studio, в качестве языка программирования – C#, а в качестве системы управления базами данных – SQLite;
* составлено формализованное описание процесса синтеза озонобезопасных хладонов как объекта проектирования. Поставлены задачи выбора оборудования химического процесса синтеза хладонов и выполнения вычислительных экспериментов по анализу влияния температуры процесса и времени контакта на выходные концентрации целевых и побочных продуктов при различных составах реакционной смеси;
* разработана функциональная структура информационной системы, включающей БД характеристик озонобезопасных хладонов широкой номенклатуры, технологических схем, оборудования, сырья, кинетических параметров; БД учетных записей пользователей; библиотеку ММ процессов синтеза хладонов; модуль выбора оборудования в соответствии с требованиями технического задания; модуль поверочного расчета процессов синтеза хладонов; модуль визуализации результатов исследования в виде таблиц значений и графических зависимостей; интерфейс проектировщика-исследователя, интерфейс администратора;
* созданы структуры информационного обеспечения системы, включающие 15 таблиц, 48 полей, 14 отношений и 400 записей;
* обоснованы структуры уравнений и параметров математической модели кинетики химических реакций, протекающих при синтезе 1,1,1,2-тетрафторэтана из трихлорэтилена в реакторе периодического действия;
* построен алгоритм выбора оборудования химического процесса синтеза хладонов и выполнения вычислительных экспериментов по анализу влияния температуры процесса и времени контакта на выходные концентрации целевых и побочных продуктов при различных составах реакционной смеси;
* разработаны структуры интерфейсов проектировщика-исследователя и администратора;
* выполнена программная реализация вычислительного алгоритма и интерфейсов информационной системы на основе технологии объектно-ориентированного программирования с использованием выбранных инструментальных средств;
* произведено тестирование работы проблемно-ориентированного программного обеспечения на примере синтеза 1,1,1,2-тетрафторэтана (хладона 134а) из трихлорэтилена при различных составах реакционной смеси. Результаты тестирования подтвердили его работоспособность и возможность использования для исследования процессов синтеза озонобезопасных хладонов широкой номенклатуры.

# СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1 Синтез озонобезопасных хладонов и пути усовершенствования отечественных промышленных катализаторов для их производства / И. Г. Трукшин, В. Г. Барабанов, В. Н. Новгородов [и др.] // Катализ в промышленности. – 2010. – № 4. – С. 26-33.

2 Trukshin, I. G. Technologies for production of chladons by a method of gas phase catalytic hydrofluorination // Fluorine Notes. – 2009. – No. 5(66). – P. 1-2.

3 Политрейд : Хладон 134 : сайт. – Москва, 2020 – . – URL : <http://www.poly-trade.ru/catalog/hladon/hladon134a/#:~:text> (дата обращения : 25.05.2024). Текст: электронный.

4 Русхимпром : Хладон R134a: применение и особенности : сайт. – Москва, 2020 – . – URL : <https://www.rushimprom.com/articles/hladon-r134a/> (дата обращения : 25.05.2024). Текст: электронный.

5 Трукшин, И. Г. Каталитические ресурсосберегающие технологии производства озонобезопасных фторалканов : автореферат дис. ... доктора химических наук : 05.17.04 / Трукшин Игорь Георгиевич; [Место защиты: Рос. науч. центр «Прикладная химия»]. – Санкт-Петербург, 2013. – 45 с.

6 Afespro : Хладон 125 (пентафторэтан) : сайт. – Санкт-Петербург, 2019 – . – URL : <https://afes.pro/hladon-125> (дата обращения : 25.05.2024). Текст: электронный.

7 ИСТА Техника : ХЛАДОН 125 : сайт. – Москва, 2023 – . – URL : <https://ista-01.ru/catalog/el/gazovoe-pozharotushenie-hladon-125.htm> (дата обращения : 25.05.2024). Текст: электронный.

8 Политрейд : Хладон 227 еа : сайт. – Москва, 2020 – . – URL : <http://www.poly-trade.ru/catalog/hladon/hladon227ea/> (дата обращения : 25.05.2024). Текст: электронный.

9 Пожтехника : Хладон 227ea и Хладон 125ХП : сайт. – Москва, 2023 – . – URL : <https://firepro.ru/solutions/gazovoe-pozharotushenie-novec/xladon-227ea-i-xladon-125xp/> (дата обращения : 25.05.2024). Текст: электронный.

10 Терехин, С. Н. Газовое пожаротушение в ЦОДе. Успешный опыт применения хладона 23 / С. Н. Терехин, Д. В. Николаев, А. П. Павлов // Журн. "ИНФОРМКУРЬЕР-СВЯЗЬ". – 2011. – № 5. – С. 74-75.

11 dszh-climate : Фреон 32 / Хладон 32 : сайт. – Котельники, 2023 – . – URL : <https://dszh-climate.ru/product/r32/> (дата обращения : 25.05.2024). Текст: электронный.

12 Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2015662060 Российская Федерация. "ChemKinOptima" для комплексного математического моделирования и оптимизации кинетики многостадийных химических процессов : № 2015618638 : заявл. 21.09.2015 : опубл. 16.11.2015 / М. В. Сахибгареева, С. И. Спивак, И. М. Губайдуллин.

13 Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2020617580 Российская Федерация. Программа формирования кинетики химических реакций ChimKinetic : № 2020616415 : заявл. 17.06.2020 : опубл. 08.07.2020 / Н. А. Брыков, А. В. Ефремов, И. В. Тетерина ; заявитель Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования Балтийский государственный технический университет «ВОЕНМЕХ» им. Д.Ф. Устинова (БГТУ «ВОЕНМЕХ»).

14 Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2021665836 Российская Федерация. Кинетика 2012 - программа для расчёта кинетических параметров химических и биохимических процессов, версия 2.0 : № 2021662366 : заявл. 04.08.2021 : опубл. 04.10.2021 / Е. М. Плисс, А. В. Соколов, Д. В. Лошадкин, С. В. Попов ; заявитель Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Ярославский государственный университет им. П.Г. Демидова».

15 Забудский, Е. И. Сравнение ОО языков C#, Java и C++ : учебное пособие / Е. И. Забудский ; Минобрнауки России, национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», Кафедра архитектуры программный систем. – Москва : НИУ ВШЭ, 2008. – 40 с.

16 Копырин, А. С. Программирование на С# в Visual Studio 2013 : учебное пособие / А. С. Копырин, Т. Л. Салова. – Москва : ФЛИНТА, 2021. – 54 с. – ISBN 978-5-9765-4754-4.

17 Microsoft.com : Что такое Visual Studio? : сайт. – США, 2023 – . – URL : https://learn.microsoft.com/ru-ru/visualstudio/get-started/visual-studio-ide?view= vs-2022 (дата обращения : 25.05.2024). Текст: электронный.

18 Jetbrains.com : Rider для full-stack веб-разработки : сайт. – Чехия, 2022 – . – URL : https://www.jetbrains.com/ru-ru/lp/rider-web/ (дата обращения : 25.05.2024). Текст: электронный.

19 Code.VisualStudio.com : Working with C# : сайт. – США, 2023 – . – URL : https://code.visualstudio.com/docs/languages/csharp (дата обращения : 25.05.2024). Текст: электронный.

20 GeekBrains.ru : Лучшие IDE для разработки на C# : сайт. – Москва, 2018 – . – URL : https://gb.ru/geek\_university/developer?from=blog\_vrezka\_finish (дата обращения : 25.05.2024). Текст: электронный.

21 Calabonga SOFT : JetBrains Rider и Visual Studio : сайт. – Москва, 2020 – . – URL : https://www.calabonga.net/blog/post/jetbrains-rider-vs-visual-studio (дата обращения : 25.05.2024). Текст: электронный.

22 Alekseev74.ru : Visual Studio Code или Visual Studio? Что выбрать, в чем отличия : сайт. – Москва, 2020 – . – URL : https://alekseev74.ru/lessons/show/visual-studio/code-vs-ide (дата обращения : 25.05.2024). Текст: электронный.

23 Работа в Microsoft Access XP : учебное пособие. – 2-е изд. — Москва : ИНТУИТ, 2016. – 127 с. – Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. – URL : https://e.lanbook.com/book/100430 (дата обращения : 25.05.2024). – Режим доступа: для авториз. пользователей.

24 Миронов, В. В. СУБД: создание и ведение баз данных (SQL и NoSQL) : учебное пособие / В. В. Миронов, А. С. Гусаренко, Р. А. Ярцев. – Уфа: РИК УГАТУ, 2018. – 325 с. – ISBN 978-5-4221-1078-0.

25 Введение в СУБД MySQL : учебное пособие. – 2-е изд. — Москва : ИНТУИТ, 2016. – 228 с. – Текст : электронный // Лань : электронно-библиотечная система. – URL : https://e.lanbook.com/book/100713 (дата обращения : 25.05.2024). – Режим доступа: для авториз. пользователей. Текст: электронный.

26 Галанин, М. П. Разработка и тестирование методов решения жестких обыкновенных дифференциальных уравнений / М. П. Галанин, С. Р. Ходжаева // Математическое моделирование и численные методы. 2014. № 4(4). С. 95-119.

27 Тарасик, В. П. Математическое моделирование технических систем : учебник / В.П. Тарасик. – Минск : Новое знание ; Москва : ИНФРА-М, 2024. – 592 с. – ISBN 978-5-16-011996-0.

28 Пименов, В. Г. Численные методы в 2 ч. Ч. 2 : учебное пособие для вузов / В. Г. Пименов, А. Б. Ложников. – Москва : Издательство Юрайт, 2023. – 107 с. – (Высшее образование). – ISBN 978-5-534-10891-0.

29 Волков, Е. А. Численные методы : учебное пособие / Е. А. Волков. – 5-е изд., стер. – Санкт-Петербург [и др.] : Лань, 2008. – 248 с. – ISBN 978-5-8114-0538-1.

30 Егорова, А. В. Информационная система выбора оборудования для производства и регенерации озонобезопасных хладонов / А. В. Егорова, Д. В. Докторов, О. Е. Бездудная // Материалы III Школы молодых ученых «Инновационные направления научно-практических разработок для переработки промышленных отходов», проводимой в рамках XIV научной конференции «Традиции и Инновации», посвященной 195-й годовщине образования СПбГТИ(ТУ), 15-16 ноября 2023 года. – Санкт-Петербург : Изд-во СПбГТИ(ТУ). – 2023. – С. 379.

31 Егорова, А.В. База данных программного комплекса выбора оборудования для производства и регенерации озонобезопасных хладонов / А. В. Егорова, О. Е. Бездудная, Д. В. Докторов // Материалы XIV научно-технической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых имени профессора, Лауреата Государственной премии СССР А.С. Дудырева «НЕДЕЛЯ НАУКИ-2024. Творчество молодежи – будущему России» (с международным участием), 22-24 апреля 2024 года. – Санкт-Петербург : Изд-во СПбГТИ(ТУ). – 2024. – С. 279.

32 Бездудная, О. Е. Математическое обеспечение программного комплекса для исследования процессов синтеза гидрофторалканов методом газофазного каталитического гидрофторирования / О. Е. Бездудная, Д. В. Докторов, О. Ю. Озерова // Материалы III Школы молодых ученых «Инновационные направления научно-практических разработок для переработки промышленных отходов», проводимой в рамках XIV научной конференции «Традиции и Инновации», посвященной 195-й годовщине образования СПбГТИ(ТУ), 15-16 ноября 2023 года. – Санкт-Петербург : Изд-во СПбГТИ(ТУ). – 2023. – С. 375.

*Нормативные документы*

33 СТО СПбГТИ(ТУ) 026-2011 КС УКДВ. Порядок подготовки бакалавров. Общие требования.

34 ГОСТ 7.90-2007 СИБИД. Универсальная десятичная классификация. Структура, правила ведения и индексирования.

35 ГОСТ 7.32-2017 СИБИД. Отчет о научно-исследовательской работе. Структура и правила оформления.

36 ГОСТ 7.9-95 СИБИД. Реферат и аннотация. Общие требования.

37 ГОСТ Р 7.0.100-2018 Библиографическая запись. Библиографическое описание. Общие требования и правила составления.

38 ГОСТ 8.417-2002 ГСИ. Единицы величин.

39 ГОСТ 19.701-90 ЕСПД. Схемы алгоритмов, программ, данных и систем. Условные обозначения и правила выполнения.

40 ГОСТ 19.101-77 ЕСПД. Виды программ и программных документов.

41 ГОСТ 19.103-77 ЕСПД. Обозначение программ и программных документов.

42 ГОСТ 19.104-78 ЕСПД. Основные надписи.

43 ГОСТ 19.105-78 ЕСПД. Общие требования к программным документам.

44 ГОСТ 19.106-78 ЕСПД. Требования к программным документам, выполненным печатным способом.

45 ГОСТ 19.502-78 ЕСПД. Описание применения. Требования к содержанию и оформлению.

# ПРИЛОЖЕНИЕ А

(обязательное)

**ХАРАКТЕРИСТИКА ПРОГРММНОГО И АППАРАТНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ**

На рисунке А.1 показана трехуровневая структура информационной системы. Верхний уровень – операционная система Windows 10. Средний уровень – СУБД SQLite, Visual Studio 2022, C# и Python. Нижний уровень – информационная система выбора оборудования для производства озонобезопасных хладонов.

Изображение выглядит как текст, снимок экрана, Шрифт, число

Автоматически созданное описание

Рисунок А.1 – Структура программного обеспечения

Характеристика программного обеспечения представлена в таблице А.1.

Таблица А.1 – Характеристика программного обеспечения

|  |  |
| --- | --- |
| Показатель | Значение |
| Среда разработки | Visual Studio 2022 |
| Технология программирования | Объектно-ориентированное программирование |
| Язык программирования | C#, Python |
| Количество входных переменных | 25 |
| Продолжение таблицы А.1 | |
| Показатель | Значение |
| Количество внутренних переменных | 42 |
| Количество выходных переменных | 23 |
| Размерность детерминированной кинетической модели | 24 уравнения |
| Количество классов, структур | 19 |
| Количество функций | 45 (170) |
| Модель описания данных | Реляционная |
| СУБД | SQLite |
| Количество таблиц в базе данных | 15 |
| Количество полей в базе данных | 48 |
| Тип данных в базе данных | integer, varchar, float |
| Тип связей между таблицами в базе данных | Один-ко-многим |
| Количество записей в базе данных | 382 |
| Размер исполняемого файла, МБ | 142 |
| Время расчета и визуализации результатов для одного набора входных данных, мс | 10000 |

В таблице А.2 представлены минимальные системные требования для работы с информационной системой.

Таблица А.2 – Минимальные системные требования

|  |  |
| --- | --- |
| Показатель | Значение |
| Тип ЭВМ | Персональный компьютер |
| Тип и тактовая частота процессора, ГГц | AMD Ryzen 5 3500U, 2,1 |
| Объем оперативной памяти, ГБ | 4 |
| Объем внешней памяти, ГБ | 64 |
| Состав и характеристика периферийных устройств ЭВМ | Экран IPS (видеоадаптер AMD Ryzen, 14,1", 1920´1080 пикселей);  клавиатура; мышь |
| Операционная система | Windows 10 |
| Прикладное программное обеспечение, необходимое для функционирования программного комплекса | .NET 8.0 |

# ПРИЛОЖЕНИЕ Б

(обязательное)

**ЗАЩИТА ИНФОРМАЦИИ**

**Б.1 Программно-технические аспекты**

Информационная система выбора оборудования для производства озонобезопасных хладонов содержит базу данных характеристик озонобезопасных хладонов широкой номенклатуры, технологических схем, оборудования, сырья, кинетических параметров и базу данных учетных записей пользователей. Защита данных пользователей производится при помощи хэширования паролей.

В информационной системе реализована ролевая политика безопасности. Функционал информационной системы разделен на две роли: проектировщик-исследователь и администратор. В таблице Б.1 приведена ролевая политика безопасности.

Таблица Б.1 – Ролевая политика безопасности

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
|  | Проектировщик-исследователь | Администратор |
| Авторизация | + | + |
| Редактирование записей в базе данных | – | + |
| Расчет концентраций целевого и побочных продуктов | + | – |
| Просмотр информации о хладонах | + | – |
| Просмотр технологических схем и оборудования | + | – |
| Доступ к интерфейсу администратора | – | + |
| Доступ к интерфейсу исследователя-проектировщика | + | – |

Примечание – «+» – имеет возможность, «–» – не имеет возможности.

При реализации предусмотрено разграничение прав доступа к функциям и способам взаимодействия с информационной системой. Ниже представлена таблица Б.2, отображающая модель безопасности.

Таблица Б.2 – Модель безопасности информационной системы

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Таблица в базе данных | Проектировщик-исследователь | Администратор |
| Готовый продукт | Чтение | Чтение, удаление, запись, обновление |
| Сырье | Чтение | Чтение, удаление, запись, обновление |
| Свойство | Чтение | Чтение, удаление, запись, обновление |
| Значение свойств сырья | Чтение | Чтение, удаление, запись, обновление |
| Кинетический параметр | Чтение | Чтение, удаление, запись, обновление |
| Значение кинетического параметра | Чтение | Чтение, удаление, запись, обновление |
| Требование к качеству | Чтение | Чтение, удаление, запись, обновление |
| Рецепт | Чтение | Чтение, удаление, запись, обновление |
| Стадия | Чтение | Чтение, удаление, запись, обновление |
| Химическая формула | Чтение | Чтение, удаление, запись, обновление |
| Оборудование | Чтение | Чтение, удаление, запись, обновление |
| Оборудование для стадии | Чтение | Чтение, удаление, запись, обновление |
| Параметр оборудования | Чтение | Чтение, удаление, запись, обновление |
| Значение параметра оборудования | Чтение | Чтение, удаление, запись, обновление |
| Единица измерения | Чтение | Чтение, удаление, запись, обновление |
| Пользователь | Нет доступа | Чтение, удаление, запись, обновление |

**Б.2 Защита интеллектуальной собственности**

Охрана результатов интеллектуальной собственности (РИД) в РФ осуществляется в соответствии с 4 частью Гражданского кодекса.

Объектами интеллектуальной собственности являются:

* произведения науки, литературы и искусства;
* программы для электронных вычислительных машин (программы для ЭВМ) и базы данных (БД);
* технические решения в любой области, относящиеся к продукту (устройству, веществу, штамму микроорганизма) или способу (процессу, технологии) – как изобретения или полезные модели;
* промышленные образцы;
* селекционные достижения;
* топологии интегральных микросхем;
* секреты производства (ноу-хау);
* средства индивидуализации товаров и услуг в виде фирменных наименований; товарных знаков; наименования мест происхождения товаров; и т.д.
* комплексные объекты в виде «единых технологий».

Автором результата интеллектуальной деятельности признается гражданин, творческим трудом которого создан такой результат.

Программой для ЭВМ является представленная в объективной форме совокупность данных и команд, предназначенных для функционирования ЭВМ и других компьютерных устройств в целях получения определенного результата, включая подготовительные материалы, полученные в ходе разработки программы для ЭВМ, и порождаемые ею аудиовизуальные отображения.

Авторские права на все виды программ для ЭВМ (в том числе на операционные системы и программные комплексы), которые могут быть выражены на любом языке и в любой форме, включая исходный текст и объектный код, охраняются так же, как авторские права на произведения литературы.

Автором произведения науки, литературы или искусства признается гражданин, творческим трудом которого оно создано. Лицо, указанное в качестве автора на оригинале или экземпляре произведения либо иным образом в соответствии с пунктом 1 статьи 1300 Гражданского Кодекса, считается его автором, если не доказано иное.

Исключительное право на результат интеллектуальной деятельности, созданный творческим трудом, первоначально возникает у его автора. Это право может быть передано автором другому лицу по договору, а также может перейти к другим лицам по иным основаниям, установленным законом, в частности, сюда относятся выполнение работ в рамках функциональных обязанностей (служебные произведения) или работы, выполненные по заказу или договору. В таком случае, правообладателем, чаще всего, является работодатель или заказчик произведения.

Правообладатель в течение срока действия исключительного права на программу для ЭВМ или на базу данных может по своему желанию зарегистрировать такую программу или такую базу данных в федеральном органе исполнительной власти по интеллектуальной собственности. Регистрация позволяет подтвердить приоритет разработки, право собственности на нее, является научным трудом и необходима при любом открытом, особенно коммерческом, использовании продукта.

Программы и программные комплексы, выполненные в рамках учебных, научных и исследовательских работ в Технологическом институте являются служебными произведениями, правообладателем которых является институт, если иное не прописано в договоре.

Таким образом, защита прав на программный продукт подтверждается его официальной регистрацией в Роспатенте.

Для регистрации необходимо представить следующие документы:

Заявление на регистрацию, заявление авторов о разрешении на обработку их персональных данных, идентифицирующие материалы защищаемого продукта и реферат, который публикуется в официальных бюллетенях Роспатента для информирования и подтверждения приоритетов разработок.

**РЕФЕРАТ**

*Программа*

**Информационная система выбора оборудования для производства озонобезопасных хладонов**

*Аннотация*

Программа позволяет на основе настраиваемой базы данных характеристик озонобезопасных хладонов и библиотеки математических моделей осуществлять выбор и поверочный расчет оборудования процессов синтеза хладонов широкой номенклатуры в соответствии с требованиями технического задания, а также проводить анализ влияния температуры процесса и времени контакта на выходные концентрации целевых и побочных продуктов при различных составах реакционной смеси. Информационная система состоит из модуля выбора оборудования в соответствии с требованиями технического задания; модуля поверочного расчета процессов синтеза хладонов; модуля визуализации результатов исследования в виде таблиц значений и графических зависимостей; интерфейса проектировщика-исследователя, интерфейса администратора. Результатом работы информационной системы является формирование проектного решения в виде технологической схемы производства, включающей описание последовательности стадий синтеза хладона, допустимых значений температуры процесса и времени контакта, обеспечивающих необходимые концентрации целевых и побочных компонентов, а также выполнение требований по производительности и ограничений по энергопотреблению. Использование информационной системы позволяет повысить эффективность проектирования процессов синтеза хладонов за счет сокращения временных затрат на выбор аппаратурного оформления процессов, обеспечивающих высокую конверсию сырья и необходимую селективность процессов по целевому компоненту.

*Язык программирования:* С#, Python

*Объем программы:*142 МБ

**Федеральное государственное бюджетное образовательное**

**учреждение высшего образования**

**«Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет)»**

**(СПбГТИ(ТУ))**

**Наименование программы для ЭВМ**

**Информационная система выбора оборудования для производства озонобезопасных хладонов**

**идентифицирующие материалы программы**

**Листов - 3**

**Автор:**

Бездудная О.Е.

©СПбГТИ(ТУ), 2024

**Санкт-Петербург, 2024 г.**

**Листинг программы**

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| **ВХОДЯЩИЙ НОМЕР ВК**  **\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_**  **Дата поступления: \_\_\_\_\_. \_\_\_\_\_\_. 20\_\_\_\_\_\_** | **РЕГИСТРАЦИОННЫЙ номер ПРОГРАММЫ ДЛЯ эвм или Базы Данных в РЕЕСТРЕ**  **\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_**  **Дата регистрации: \_\_\_\_\_. \_\_\_\_\_. 20\_\_\_\_\_\_** | | **РЕГИСТРАЦИОННЫЙ номер заявки**  \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_  **Дата поступления: \_\_\_\_\_. \_\_\_\_\_. 20\_\_\_\_\_\_** | |
| **В Федеральную службу по интеллектуальной собственности**  **Бережковская наб., д. 30, корп.1, г. Москва, Г-59, ГСП-3, 125993**  **З А Я В Л Е Н И Е**  **о государственной регистрации (отметить[X]):**  **Программы для ЭВМ**  **Базы данных, государственная регистрация которой осуществляется в соответствии с пунктом 4 статьи 1259 Кодекса**  **Базы данных, государственная регистрация которой осуществляется в соответствии с пунктом 3 статьи 1334 Кодекса** | | **АДРЕС ДЛЯ ПЕРЕПИСКИ** *(Почтовый индекс, адрес на терри-тории Российской Федерации; имя или наименование адресата)* | | |
| **Тел.:** | | **Факс:** |
| **Адрес электронной почты:** | | |
| **Представляя указанные ниже документы, заявитель подтверждает отсутствие в представленном на регистрацию объекте сведений, составляющих государственную тайну, и предоставляет Роспатенту право на воспроизведение материалов, идентифицирующих регистрируемый объект, на бумажном носителе и путем записи на электронном носителе, в том числе записи в память ЭВМ, в целях, необходимых для предоставления государственной услуги** | | | | |
| **1. Название представленной на регистрацию ПРОГРАММы ДЛЯ ЭВМ ИЛИ БАЗЫ ДАННЫХ**  **Информационная система выбора оборудования для производства озонобезопасных хладонов** | | | | |
| **2. ПРАВООБЛАДАТЕЛЬ (ЗАЯВИТЕЛЬ(И)) ОГРН: 1027810258761**  **ИНН: \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_**  **Серия и номер документа, удостоверяющего личность** **СНИЛС: \_**  **Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет)» (СПбГТИ(ТУ))**  **190013 Россия, Санкт-Петербург, Московский проспект, дом 26**  *(указываются фамилия, имя, отчество (последнее – при наличии) и место жительства (для физического лица) или наименование юридического лица (согласно учредительным документам) и место нахождения (для юридического лица), включая название страны. Данные о месте жительства автора(ов)-заявителя(ей) приводятся в графе 7А)*  **регистрируемый объект создан за счет средств федерального бюджета**  **Указанное лицо является:**  **государственным заказчиком**  **муниципальным заказчиком**  **исполнитель работ:**  **исполнителем работ по**  **государственному контракту**  **муниципальному контракту**  **заказчик работ:**  **Контракт от: 20 № Всего правообладателей 1 \_**  *(заполняется только в случае создания программы для ЭВМ или базы данных по государственному или муниципальному контракту)* | | | | |
| **2А. ОСНОВАНИЯ ВОЗНИКНОВЕНИЯ ПРАВА НА РЕГИСТРИРУЕМУЮ ПРОГРАММУ ДЛЯ ЭВМ ИЛИ БАЗУ ДАННЫХ:** *(отметить* [Х]*) (заполняется, если заявитель является юридическим лицом, или состав заявителей не соответствует составу авторов)*  **заявитель является работодателем автора  передача прав автором или его правопреемником заявителю**  **передача прав работодателем заявителю  в порядке универсального правопреемства (наследование, реорганизация)**  **заявитель является изготовителем базы данных  заявитель является автором  \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_**  *Для БД, охраняемой смежными правами Иное - указать* | | | | |
| **3. РЕГИСТРИРУЕМЫЙ ОБЪЕКТ**  **Не содержит персональные данные**  **Содержит персональные данные Регистрационный номер в Реестре операторов, осуществляющих обработку персональных данных** | | | | |
| **4. ГОД СОЗДАНИЯ РЕГИСТРИРУЕМОЙ ПРОГРАММЫ ДЛЯ ЭВМ ИЛИ БАЗЫ ДАННЫХ 2024 \_** | | | | |
| **5. СТРАНА И ГОД ОБНАРОДОВАНИЯ (ПЕРВОГО ОПУБЛИКОВАНИЯ) РЕГИСТРИРУЕМОЙ ПРОГРАММЫ ДЛЯ ЭВМ ИЛИ БАЗЫ ДАННЫХ:**  **Страна: -------------------------------RU------------------------------------- Год: 2024 \_** | | | | |
| **5А. ГОД ОБНОВЛЕНИЯ РЕГИСТРИРУЕМОЙ БАЗЫ ДАННЫХ, государственная регистрация которой осуществляется в соответствии с пунктом 3 статьи 1334 Кодекса \_нет** | | | | |
| **6. Представленная на регистрацию база данных зарегистрирована в Реестре баз данных как:**  **База данных, государственная регистрация которой осуществляется в соответствии с пунктом 4  статьи 1259 Кодекса. Рег. № от \_**  **База данных, государственная регистрация которой осуществляется в соответствии с пунктом 3  статьи 1334 Кодекса. Рег. № от  нет** | | | | |

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **7. АВТОРЫ Всего авторов: \_\_\_1\_\_  авторы отказались быть упомянутыми в качестве таковых** | | |
| **7А. СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ:**  **Фамилия имя отчество: Бездудная Ольга Евгеньевна**  **Дата рождения: число: 06 месяц: 06 год: 2002 Гражданство: РФ**  **Автор согласен с обработкой указанных персональных данных в объеме действий, предусмотренных предоставляемой государственной услугой, и в течение срока действия исключительного права на регистрируемый объект** | | |
| **Место жительства, включая указание страны:**  **198013 Россия, г. Санкт-Петербург, ул. Ивановская , д. 33, кв. 28** | | |
| **Краткое описание творческого вклада автора при создании регистрируемой программы для ЭВМ или базы данных:**  **разработка и программирование программного комплекса** | | |
| **При публикации сведений о государственной регистрации программы для ЭВМ или базы данных автор просит: (отметить [X])**  **упоминать его под своим именем  не упоминать его (анонимно)**  **упоминать его под псевдонимом: \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_** | | |
| **8.СВЕДЕНИЯ О ПЛАТЕЛЬЩИКЕ (указываются полное имя физического лица или наименование юридического лица)**  **нет** | | |
| **Для физического лица**  Серия и номер документа, удостоверяющего личность: | | **для юридического лица**  **ИНН:**  **КПП:**  **КИО:** |
| **ИНН:** | **СНИЛС:** |
| **9. СВЕДЕНИЯ О СОДЕРЖАЩИХСЯ В ЗАЯВКЕ ДОКУМЕНТАХ (отметить [X])**  **идентифицирующие программу для ЭВМ материалы в форме распечатки исходного текста на хх л. в 1 экз.**  **идентифицирующие программу для ЭВМ материалы в иной форме на л. в 1 экз.**  **материалы аудиовизуальных отображений, порождаемых программой для ЭВМ на л. в 1 экз.**  **материалы, идентифицирующие базу данных на л. в 1 экз.**  **документы, подтверждающие существенные затраты на создание базы данных на л. в 1 экз.**  **реферат на 1 л. в 2 экз.**  **иные материалы: на л. в 1 экз.**  **дополнение к заявлению на 1 л. в 1 экз.**  **доверенность(и) на 1 л.**  **документ(ы) об уплате государственной пошлины** *(представляется по инициативе заявителя* **) на 1 л. в 1 экз.**  **документ, подтверждающий наличие оснований для освобождения от уплаты**  **государственной пошлины либо для уменьшения ее размера, либо для отсрочки ее уплаты на л. в 1 экз.**  **ходатайство(а) на л. в 1 экз.**  **иные документы (приложение 2 и 3 ) на 2 л. в 1 экз.** | | |
| **10. КОНТАКТНЫЕ РЕКВИЗИТЫ ДЛЯ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ТРЕТЬИМ ЛИЦАМ (тел., адрес электронной почты и др.):** | | |
| **11**. **Заявителю известно, что в соответствии с подпунктом 4 пункта 1 статьи 6 Федерального закона от 27 июля 2006 г. № 152-ФЗ**  **«О персональных данных» Федеральная служба по интеллектуальной собственности осуществляет обработку персональных данных субъектов персональных данных, указанных в заявлении, в целях и объеме, необходимых для предоставления государственной услуги.**  **Заявитель настоящим подтверждает, что имеет согласия субъектов персональных данных, указанных в заявлении (за исключением представителя), на обработку их персональных данных, приведенных в настоящем заявлении, в Федеральной службе по интеллектуальной собственности в связи с предоставлением государственной услуги. Согласия оформлены в соответствии со статьей 9 Федерального закона от 27 июля 2006 г. № 152-ФЗ «О персональных данных».** | | |
| **12. ПОДПИСЬ(И) ЗАЯВИТЕЛЯ(ЕЙ) (ПРАВООБЛАДАТЕЛЯ(ЕЙ) ИЛИ ЕГО (ИХ) ПРЕДСТАВИТЕЛЯ(ЕЙ)**  **\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_**  **\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_**  **\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_10.06.2024\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_**  **\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_**  *(от имени юридического лица заявление подписывается руководителем организации или иным лицом, уполномоченным на это в установленном законодательством Российской Федерации порядке, с указанием его должности и скрепляется печатью юридического лица при наличии печати*  *Подпись любого лица должна быть расшифрована с указанием фамилии и инициалов и указана дата подписания заявления.*  *Правообладатели – физические лица подтверждают согласие с обработкой указанных в данном заявлении персональных данных в целях и объе-ме, необходимых для предоставления государственной услуги, и в течение срока действия исключительного права на регистрируемый объект)* | | |

|  |  |
| --- | --- |
| Дата поступления  *(заполняется Федеральной службой по интеллектуальной собственности)* | **В Федеральную службу**  **по интеллектуальной собственности**  Бережковская наб., д. 30, корп. 1,  г. Москва, Г-59, ГСП-3, 125993,  Российская Федерация |
| **Согласие на указание сведений об авторе в заявлении на государственную регистрацию программы для ЭВМ или базы данных** | |
| Заявка № \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_  *(указывается при наличии регистрационного номера заявки)*  на государственную регистрацию:  **Программы для ЭВМ  Базы данных, государственная регистрация которой осуществляется в соответствии с пунктом 4 статьи 1259 Кодекса  Базы данных, государственная регистрация которой осуществляется в соответствии с пунктом 3 статьи 1334 Кодекса** *(Отметить знаком «Х» вид результата интеллектуальной деятельности)*  Название: **Информационная система выбора оборудования для производства озонобезопасных хладонов**  *(указывается в соответствии с графой 1 заявления о государственной регистрации программы для ЭВМ или базы данных)* | |
| Правообладатель (и) (Заявитель)(и) *(указываются фамилия, имя, отчество (последнее – при наличии), место жительства физического лица, наименование, место нахождения, основной государственный регистрационный номер (ОГРН) и идентификационный номер налогоплательщика (ИНН) юридического лица)*  **Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет)» (СПбГТИ(ТУ))**  ***Подтверждаю согласие на указание обо мне, как авторе, следующих сведений в графе 7А заявления на государственную регистрацию данной программы для ЭВМ или базы данных.***  *7А. СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРЕ:*  *Фамилия имя отчество:* **Бездудная Ольга Евгеньевна**  *Дата рождения: число:* **\_06\_\_\_** *месяц:* **\_\_06\_\_\_** *год:* **\_\_2002\_\_** *Гражданство:* **\_\_\_РФ\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_**  **Автор согласен с обработкой указанных персональных данных, необходимой для исполнения полномочий федеральных органов исполнительной власти, участвующих в предоставлении государственных услуг, предусмотренных Федеральным законом от 27 июля 2010 года № 210-ФЗ «Об организации предоставления государственных и муниципальных услуг», включая регистрацию субъекта персональных данных на едином портале государственных и муниципальных услуг и (или) региональных порталах государственных и муниципальных услуг и в течение срока действия исключительного права на регистрируемый объект.**  *Место постоянного жительства, включая указание страны:*  **198013 Санкт-Петербург, ул.**  *Краткое описание творческого вклада автора при создании регистрируемой программы для ЭВМ или базы данных:*  **Разработка функциональной структуры программного комплекса и принципов организации интерфейсов пользователей**  *При публикации сведений о государственной регистрации программы для ЭВМ или базы данных автор просит: (отметить [X])*  **упоминать его под своим именем  не упоминать его (анонимно)**  **упоминать его под псевдонимом: \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_** | |
| Подпись автора: **Бездудная О.Е.**  *(подпись должна быть расшифрована)* | |
| Подпись(и) правообладателя(ей) или его (их) представителя(ей)  **\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_**  **\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_**  **\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_10.06.2024\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_**  *(от имени юридического лица заявление подписывается руководителем организации или иным лицом, уполномоченным на это в установленном законодательством Российской Федерации порядке, с указанием его должности, подпись удостоверяется печатью юридического лица при наличии печати. Подпись любого лица должна быть расшифрована с указанием фамилии и инициалов и даты подписания заявления)* | |

В Федеральную службу

по интеллектуальной собственности

Бережковская наб., д. 30, корп. 1,

г. Москва, Г-59, ГСП-3, 125993,

Российская Федерация

Название программы для ЭВМ или базы данных **\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_**

**Информационная система выбора оборудования для производства озонобезопасных хладонов**

№ заявки **\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_**

*(указывается при наличии регистрационного номера заявки)*

**Согласие на обработку персональных данных**

Ф. И. О. субъекта персональных данных **\_\_\_ Бездудная Ольга Евгеньевна**

Адрес места жительства  **198013 Санкт-Петербург, ул. Ивановская , д. 33, кв. 28**

Документ, удостоверяющий личность субъекта персональных данных, дата его выдачи и выдавший орган

**Паспорт\_\_\_**  **выданный**

Подтверждаю согласие на обработку моих персональных данных, предусмотренную частью 3 статьи 3 Федерального закона от 27 июля 2006г.   
№ 152-ФЗ «О персональных данных», в целях предоставления Федеральной службой по интеллектуальной собственности государственной услуги в соответствии с Федеральным законом от 27 июля 2010 г. № 210-ФЗ «Об организации предоставления государственных и муниципальных услуг».

Мне известно, что в случае отзыва согласия на обработку персональных данных Федеральная служба по интеллектуальной собственности вправе продолжить обработку персональных данных без моего согласия в соответствии с частью 2 статьи 9, пунктом 4 части 1 статьи 6 Федерального закона от 27 июля 2006 г. № 152-ФЗ «О персональных данных».

Подпись / Бездудная О.Е.

*(Ф. И. О. субъекта* *персональных данных)*

Дата 10.06.2022

# ПРИЛОЖЕНИЕ В

(обязательное)

**ОПИСАНИЕ ПРИМЕНЕНИЯ**

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации**

федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение

высшего образования

«Санкт-Петербургский государственный технологический институт

(технический университет)»

УТВЕРЖДАЮ

Зав. кафедрой САПРиУ

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_Т. Б.Чистякова

(подпись)

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

(дата)

**Информационная система выбора оборудования для производства**

**озонобезопасных хладонов**

Описание применения

ЛИСТ УТВЕРЖДЕНИЯ

RU.02068479.00001-01 31 01-ЛУ

Руководитель ВКР, доц.

И.В. Новожилова

Исполнитель

О.Е. Бездудная

Нормоконтролер

Л.Ф. Макарова

2024

2017

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации**

федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение

высшего образования

«Санкт-Петербургский государственный технологический институт

(технический университет)»

УТВЕРЖДЕН

RU.02068479.00001-01 31 01-ЛУ

**Информационная система выбора оборудования для производства**

**озонобезопасных хладонов**

Описание применения

RU.02068479.00001-01 31 01

Листов 7

2024

**АННОТАЦИЯ**

В данном программном документе приведено описание применения информационной системы выбора оборудования для производства озонобезопасных хладонов. Информационная система предназначена для исследователей и позволяет на основе настраиваемой базы данных и библиотеки математических моделей осуществлять выбор оборудования химического процесса синтеза хладонов и выполнять вычислительные эксперименты по анализу влияния температуры процесса и времени контакта на выходные концентрации целевых и побочных продуктов при различных составах реакционной смеси

В разделе «Назначение программы» приведено описание назначения программы и ее возможностей. В разделе «Условия применения» указаны условия, необходимые для выполнения программы. В разделе «Описание задачи» указаны определения задачи и методы ее решения. В разделе «Входные и выходные данные» указаны сведения о входных и выходных данных.

Программный документ «Описание применения» оформлен в соответствии с требованиями стандартов ЕСПД (ГОСТ 19.101-77, ГОСТ 19.103-77, ГОСТ 19.104-78, ГОСТ 19.105-78, ГОСТ 19.106-78, ГОСТ 19.502-78, ГОСТ 19.604-78).

**СОДЕРЖАНИЕ**

В.1 Назначение программы ..............................................................................................4

В.2 Условия применения....................................................................................................5

В.3 Описание задачи ..........................................................................................................6

В.4 Входные и выходные данные .....................................................................................7

**В.1 Назначение программы**

Информационная система предназначена для исследователей и позволяет осуществлять выбора оборудования химического процесса синтеза хладонов широкой номенклатуры и выполнять вычислительные эксперименты по анализу влияния температуры процесса и времени контакта на выходные концентрации целевых продуктов при различных составах реакционной смеси.

Информационная система включает интерфейсы пользователей двух категорий:

– интерфейс проектировщика-исследователя;

– интерфейс администратора.

**В.2 Условия применения**

Программа предназначена для работы под управлением операционной системы Windows 10 или старше. Для стабильной работы программного комплекса на компьютере конечного пользователя (проектировщика-исследователя) рекомендуется:

– персональный компьютер с процессором с частотой 2 ГГц,

– оперативная память 4 ГБ,

– объем внешней памяти 400 МБ,

– прикладное программное обеспечение Microsoft .NET 8.

**В.3 Описание задачи**

Информационная система решает ряд задач – осуществление выбора оборудования химического процесса синтеза хладонов и выполнение вычислительных экспериментов по анализу влияния температуры процесса и времени контакта на выходные концентрации целевых и побочных продуктов при различных составах реакционной смеси.

Для решения этой задачи разработанная информационная система включает базу данных характеристик озонобезопасных хладонов широкой номенклатуры, технологических схем, оборудования, сырья, кинетических параметров; базу данных учетных записей пользователей; библиотеку математических моделей процессов синтеза хладонов; модуль выбора оборудования в соответствии с требованиями технического задания; модуль поверочного расчета процессов синтеза хладонов; модуль визуализации результатов исследования в виде таблиц значений и графических зависимостей; интерфейс проектировщика-исследователя, интерфейс администратора.

**В.4 Входные и выходные данные**

Структура входных данных для информационной системы представлена в таблице.

Входные данные для программного комплекса

|  |  |
| --- | --- |
| Название параметра | Единица измерения параметра |
| Марка хладона | – |
| Концентрация *i*-го компонента | моль/л |
| Температура протекания реакции | °С |
| Время контакта | с |
| Энергия активации *j*-ой реакции | Дж/моль |
| Логарифм предэкспоненциального множителя *j*-ой реакции | – |

Выходными данными являются технологическая схема, оборудование, 2D графики зависимостей концентраций компонентов от времени контакта и значения концентрации целевого продукта.

**Результаты нормоконтроля отчета о ВКР студентки Бездудной О.Е.**

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| **Требования** | **Нормативные**  **документы** | **Замечания** |
| 1 Оформление титульного листа и задания на ВКР | СТО СПбГТИ(ТУ) 026-2016 КС УКДВ. Положение о бакалавриате.  ГОСТ 7.90-2007 СИБИД. Универсальная десятичная классификация. Структура, правила ведения и индексирования. |  |
| 2 Структура отчета к ВКР |  |
| 3 Оформление реферата | ГОСТ 7.9-95 СИБИД. Реферат и  аннотация. Общие требования. |  |
| 4 Соблюдение общих правил оформления (поля, размер шриф-та, абзацные отступы, нумерация страниц) | ГОСТ 7.32-2017 СИБИД. Отчет о  научно-исследовательской работе. Структура и правила оформления. |  |
| 5 Структура текста (нумерация  разделов, подразделов, пунктов; заголовки) |  |
| 6 Оформление иллюстраций |  |
| 7 Оформление таблиц |  |
| 8 Оформление формул и  уравнений |  |
| 9 Оформление перечислений и примечаний |  |
| 10 Оформление ссылок на  использованные источники |  |
| 11 Оформление приложений |  |
| 12 Наименование, обозначение  величин и единиц | ГОСТ 8.417-2002 ГСИ. Единицы  величин.  СТП 2.055.005-79 КС УКДВ.  Единицы физических величин. |  |
| 13 Оформление структурного  элемента отчета “Список  использованных источников” | ГОСТ Р 7.0.100-2018 СИБИД. Библиографическая запись. Библиографическое описание. Общие требования и правила составления.  ГОСТ Р 7.0.12-2011 СИБИД. Библиографическая запись. Сокращение слов на русском языке. Общие требования и правила. |  |
| 14 Оформление программного  документа «Описание применения» | ГОСТ 19.502-78 ЕСПД. Описание  применения. Требования к содержанию  и оформлению. |  |

Оценка \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Нормоконтролер Л.Ф. Макарова

Минобрнауки России

федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение

высшего образования

«Санкт-Петербургский государственный технологический институт

(технический университет)

СПРАВКА

о результатах проверки выпускной квалификационной работы

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_бакалвара\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_Бездудной Ольги Евгеньевны\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

на тему: информационная система выбора оборудования для

производства озонобезопасных хладонов

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
| Направление подготовки | 09.03.01 Информатика и вычислительная техника |
| Факультет | Информационных технологий и управления |
| Кафедра | Систем автоматизированного  проектирования и управления |
| Группа | 404 |
| Дата проверки: |  |

Выпускная квалификационная работа проверена с помощью программы «eTXT Антиплагиат».

Уникальность авторского текста составляет \_\_\_\_\_\_%.

Неправомочных заимствований в тексте работы не выявлено.

Текст выпускной квалификационной работы передан в Фундаментальную библиотеку СПбГТИ(ТУ) для размещения в электронно-библиотечной системе с учётом изъятия сведений любого характера (производственных, технических, экономических, организационных и других), в том числе о результатах интеллектуальной деятельности в научно-технической сфере, о способах осуществления профессиональной деятельности, которые имеют действительную или потенциальную коммерческую ценность в силу неизвестности их третьим лицам, в соответствии с решением правообладателя.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Нормоконтролёр |  | Л. Ф. Макарова |
|  |  |  |
| Руководитель работы |  | И. В. Новожилова |
|  |  |  |
| Заведующий кафедрой |  | Т. Б. Чистякова |