

УДК 536.46

РАЗРАБОТКА ПРОГРАММЫ КОНВЕРТОРА ДЛЯ АВТОМАТИЗИРОВАННОГО ПЕРЕВОДА ДАННЫХ ИЗ ФОРМАТА ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА CHEMKIN В ФОРМАТ ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА PRIME МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ ГОРЕНИЯ**Айтмұқаш Д. Б., Урмашев Б.А., Макашев Е.П.**

КазНУ им. аль-Фараби

Email: daniyar.aytmukash@mail.ru, baidaulet.urmashev@kaznu.kz

Аннотация

В данной работе была разработана программа для автоматизированного перевода данных из формата программного комплекса (ПК) Chemkin в формат ПК PrIme (Process Informatics Models) моделирования процессов горения. Одним из важных проблем моделирования химической кинетики процессов горения является проверка механизма на корректность описания исследуемого процесса. При решении таких проблем ПК PrIme может предложить удобные инструменты для анализа. В связи с этим возникла необходимость создания конвертора форматов данных между программными комплексами. Эта программа поможет автоматически распознать данные из входного файла в формате ПК Chemkin и перевести, в считанные секунды, в формат ПК PrIme. В создании локальной базы данных программы использовался сайт ПК PrIme. Для хранения данных о свойствах реагентов и реакции в MS SQL Server созданы две таблицы, и эти таблицы заполнены данными, взятыми из сайта. Разработан алгоритм для автоматизированного чтения и распознавания данных из входного файла. С помощью разработанного алгоритма автоматизировано чтение и конвертирование данных из входного файла (в формате ПК Chemkin) на выходной файл (в формате ПК PrIme). После разработки программы конвертора проводились работы тестирования, конвертируя разные механизмы в формат ПК PrIme.

Ключевые слова: Программный комплекс, моделирование процессов горения, химическая кинетика, ПК Chemkin, ПК PrIme, конвертирование данных, механизмы горения.

Введение

В наши дни во многих областях науки и техники очень важны механизмы, которые смогут предварительно описывать химические процессы превращения. На сегодняшний день на земле 90% потребляемой энергии берется за счет процессов горения. Это обстоятельство и определяет важность и актуальность исследования процессов горения. В области моделирования существования механизмов для предварительного описывания химических процессов реальных топлив играет очень важную роль. Составление этих полных механизмов очень тесно связано с созданием и совершенствованием экологически чистой и выгодной современной энергетической установки, без лишних затрат к экспериментальным исследованиям [1]. В связи с этими проблемами, для проведения вычислительных работ были разработаны многочисленные программные обеспечения. Среди них очень широко используются Fluent, CFX, FlowVision, Flow-3D,

Chemkin. Эти программы предназначены для моделирования исследуемого химического процесса, и дают возможность понимания природных свойств данного процесса. Но многофакторная зависимость описываемого процесса приводит к усложнению задачи моделирования. На сегодняшний день самые трудные вычислительные задачи с помощью суперкомпьютеров решаются несколько часов, даже - несколько дней. В процессе решения таких задач ПК PrIme является очень эффективным средством, т.е. для проверки входных данных и механизма изначально выбранной модели [2].

Актуальным направлениям в исследовании процессов горения является химическая кинетика. В химической кинетике рассматриваются скорости и механизмы протекания химических реакций.

Химическая кинетика решает две основные задачи:

- 1) определение механизма реакции;
- 2) количественное описание химической реакции.

Механизм реакций состоит из совокупности последовательных элементарных стадий, через которые проходит химическая реакция от исходных веществ до конечных про-

дуктов. Обычное уравнение реакции содержит информацию только о составе и количестве исходных веществ и продуктов, но не отображает реальных процессов, происходящих в действительности, т.е. не описывает элементарных стадий. Эти промежуточные единичные процессы протекают по времени на протяжении химической реакции и включают столкновение реагирующих частиц, разрыв связей в исходных веществах, образование промежуточных продуктов и взаимодействие между ними, возникновение новых связей и получение конечных продуктов. Включение в состав механизма всевозможных элементарных стадий предоставляет возможность полноценного понимания процессов горения. С помощью механизма реакций исследуются изменение скорости реакции и концентрации веществ по времени и времена воспламенения пламени и т.д. По этим же характеристикам определяются оптимальные концентрации горящих смесей по определенным целям использования.

В химической кинетике проверка достоверности механизма является одним из важным фактором исследования. Кроме того, составленный механизм не всегда может быть определен для широких диапазонов начальных условий и при изменении каких-либо параметров системы трудно сказать, что данный механизм является достоверным и для этого процесса. Поэтому, составление механизма процесса предоставляет трудности для исследователей. При проверке механизма ПК PrIme является удобным инструментом анализа.

PrIme (Process Informatics Models) – система для предварительного прогнозирования химической реакций, опирающиеся к научным парадигмам. Основной целью PrIme является сбор информации в единую базу данных, проверка корректности этих данных и численная оценка ранее неизвестных данных. С помощью ПК PrIme можно оптимизировать выбранный механизм с потребностями пользователя и сравнивать данные этого механизма с другими похожими данными, и определить механизм для предварительного описывания химического процесса [2].

Программные комплексы Chemkin и PrIme

ПК Chemkin была разработана в 80-х годах прошлого века. Это программное обеспечение предназначено для специалистов,

имеющих знание в области химической кинетики, и имеющих представление об идущих процессах. Для пользователей, не имеющих навыков работы с данной программой и не понимающих об происходящих в них химических процессах, работа с программой представляет некоторые трудности. С появлением этого программного комплекса уже прошло более 35 лет и в этот период была собрана обширная база химических механизмов, и результаты вычисления ПК Chemkin вполне совпадали с результатами экспериментальных данных. Все это доказало надежность и достоверность используемого программного комплекса и завоевало доверие своих потребителей. На сегодняшний день этот программный комплекс развивается при поддержке компании Reaction Design. Последняя версия этого ПК Chemkin, называемая Chemkin Pro имеет вполне понятный интерфейс для пользователей [3].

Структура ПК PrIme такова: PrIme Data WareHouse - является складом данных, относящихся к области химии горения и для разработки прогнозирующих моделей горения. Собранные здесь данные включают в себе термодинамические, транспортные свойства реагентов и реакции, коэффициентов скоростей реакции, а также результаты экспериментальных измерений. Данные, сохраненные в этих коллекциях являются открытыми и собирают данные из всего мира для добавления в эту коллекцию. Целью сбора этих данных является не только создание огромных параллельных коллекций, но и непрерывное изменение старых данных, добавляя и сравнивая с новыми данными, и объяснение с научной точки зрения при изменении этих данных [2]. Этот программный комплекс разрабатывается в университете Беркли (США, штат Калифорния) под руководством профессора Майкла Френклаха, и с каждым годом совершенствуется. С помощью данного программного комплекса пользователь, не имея достаточное знание в области химической кинетики, сможет провести анализ механизмов химических процессов горения.

В базе данных ПК PrIme для каждой реакции и участвующих в них веществ, назначается уникальный идентификатор. Используя эти идентификаторы пользователь сможет получить из базы термодинамические, транспортные и другие свойства искомого вещества или реакции. Хранение данных в таком виде

позволяет сохранить целостность и единство свойств химических веществ и реакций. Система может сделать анализ собранных механизмов в базе данных ПК и исключить механизмы, которые не удовлетворяют определенным требованиям (например, погрешность результатов вычисления по сравнению с экспериментальными данными). Принцип работы этого программного комплекса основан на веб-службах. Пользователь, использующий эту систему для решения своих проблем, должен зарегистрироваться на сайте. Для решения своих задач пользователь сначала задает значение входных параметров и только после нескольких простых шагов начинается вычисление на сервере. После окончания расчетов результаты возвращаются к пользователю в виде визуальных таблиц и диаграмм. По этим результатам можно сделать анализ по определенным целям.

Текущие и будущие возможности ПК PrIme и удобства использования при анализе больших механизмов показали необходимость перевода накопленных данных механизмов из формата ПК Chemkin в формат ПК PrIme. До создания такого конвертора перевод данных между двумя программными комплексами

проводился вручную пользователем, проверяя данные для каждого элемента и реакций из базы данных PrIme. А сделать такую работу было очень трудоемким и занимала до нескольких месяцев.

Для решения вышесказанных проблем была разработана «программа-конвертор», которая может за несколько простых шагов автоматически переводить данные между программными комплексами. Эта программа написана с использованием языка C# и с легкостью сможет переводить объемные механизмы из формата ПК Chemkin в формат ПК PriMe.

Механизмы ПК Chemkin сохраняются в файле по определенным правилам с расширением *.inp (Рисунок 1). Между ключевыми словами ELEMENTS и END записываются все химические элементы и изотопы, состоящие из одного или двух символов, разделенные между собой пробелами. Имя элемента или изотопа в списке должна встречаться только один раз, если не так, то она игнорируется при чтении данных из файла, за исключением первого значения. Названия элементов и изотопов может записываться в нескольких строках, но они должны находиться между ключевыми словами ELEMENTS и END.

```

File name: chem.inp

ELEMENTS
H O C N AR HE
END

SPECIES
H2 CH4 C2H2
END

REACTIONS
CH3+H = H2+CH2 5.30E+12 0.40 6137.00
! 2
CH4+O2 = CH3+HO2 8.00E+13 0.00 28631.22 ! modified 30.05.2011
! 3
CH4+H => CH3+H2 6.60E+08 1.60 5420.00
END

```

Рис. 1 – Пример входного файла в формате ПК Chemkin

После этого, между ключевыми словами SPECIES и END записываются названия всех реагентов, встречающихся на выбранном механизме разделенными одним или более пробелами. Названия реагентов не должны начинаться цифрами и символами '+', '='. Если

реагент является ионом, то в конце названия реагента записывается знак '+' или '-'. Иногда, в конце названия реагента может встречаться в скобках символ или буква, показывающая химическое состояние реагента.

AR	0	136.500	3.330	0.000	0.000	0.000	
C	0	71.400	3.298	0.000	0.000	0.000	! *
C2	1	97.530	3.621	0.000	1.760	4.000	! *
C2O	1	232.400	3.828	0.000	0.000	1.000	! *
CN2	1	232.400	3.828	0.000	0.000	1.000	! OIS
C2H	1	209.000	4.100	0.000	0.000	2.500	
C2H2	1	209.000	4.100	0.000	0.000	2.500	
C2H2OH	2	224.700	4.162	0.000	0.000	1.000	! *
C2H3	2	209.000	4.100	0.000	0.000	1.000	! *

↑ Название элементов
 ↑ Индекс, показыв. геом. структуру
 0 - одна атомная мол.
 1 - линей. струк. мол.
 2 - не линейно струк. мол.
 ↑ Глубина потенциальной ямы (К)
 ↑ Диаметр столкновения (ангстрем)
 ↑ Дипольный момент (дебай)
 ↑ Поляризация (ангстрем³)
 ↑ Число столкновений при темп. 298 К за счет релаксации вращения

Рис. 2 – Структура файла транспортных свойств реагентов Tran.dat

В файле механизма между словами REACTIONS и END записываются все возможные реакции в механизме, после каждой реакции в трех столбцах, разделенных пробелами, записаны значения параметров коэффициента Аррениуса, для вычисления скорости данной реакции. Символ «!» обозначает начало комментария в данной строке, все записан-

ные данные после этого символа в этой строке игнорируются.

В ПК Chemkin при расчетах используются несколько файлов. Ими являются файлы Tran.dat, Therm.dat и Chem.inp. В файле Tran.dat находится информация о транспортных свойствах всех реагентов в механизме (Рисунок 2).

$$\begin{aligned}
 \frac{C_{pk}^o}{R} &= \sum_{m=1}^M a_{mk} T_k^{(m-1)} \quad \Rightarrow \quad \frac{C_{pk}^o}{R} = a_{1k} + a_{2k} T_k + a_{3k} T_k^2 + a_{4k} T_k^3 + a_{5k} T_k^4 \\
 H_k^o &= \int_0^{T_k} C_{pk}^o dT + H_k^o(0) \quad \Rightarrow \quad \frac{H_k^o}{RT_k} = a_{1k} + \frac{a_{2k}}{2} T_k + \frac{a_{3k}}{3} T_k^2 + \frac{a_{4k}}{4} T_k^3 + \frac{a_{5k}}{5} T_k^4 + \frac{a_{6k}}{T_k} \\
 S_k^o &= \int_{298}^{T_k} \frac{C_{pk}^o}{T} dT + S_k^o(0) \quad \Rightarrow \quad \frac{S_k^o}{R} = a_{1k} \ln T_k + a_{2k} T_k + \frac{a_{3k}}{2} T_k^2 + \frac{a_{4k}}{3} T_k^3 + \frac{a_{5k}}{4} T_k^4 + a_{7k}
 \end{aligned}$$

$K_{pi} = \exp\left(\frac{\Delta S_i^o}{R} - \frac{\Delta H_i^o}{RT}\right)$

C2H5O2	C	2H	5O	2O	00	300.00	5000.00	1000.00	1
0.78275410E+01	0.15347066E-01	0.58108700E-05	0.10465070E-08	0.71520540E-13					2
-0.45527190E+04	-0.12726800E+02	0.39390180E+01	0.13991490E-01	0.21720800E-04					3
-0.36137480E-07	0.14824910E-10	-0.28469040E+04	0.10394470E+02						4
C2H5O	T11/820	1C	2H	5	OG	300.000	5000.0	1000.0	1
0.60114346E+01	0.12165219E-01	-0.40449604E-05	0.59076588E-09	0.30969595E-13					2
-0.49366992E+04	-0.67901798E+01	0.17302504E+01	0.16908489E-01	0.39996221E-05					3
-0.13711180E-07	0.57643603E-11	-0.32922483E+04	0.17336115E+02	-0.20138288E+04					4
C2H5OH	L 8/88C	2H	6O	1	OG	200.000	6000.00	1000.0	1
0.65624365E+01	0.15204222E-01	-0.53896795E-05	0.86225011E-09	0.51289787E-13					2
-0.31525621E+05	-0.94730202E+01	0.48586957E+01	-0.37401726E-02	0.69555378E-04					3
-0.88654796E-07	0.35168835E-10	-0.29996132E+05	0.48018545E+01	-0.28257829E+05					4

Рис.3 – Структура файла термодинамических свойств реагентов Therm.dat

Внутри файла Therm.dat находятся термодинамические свойства всех реагентов в механизме (Рисунок 3). Эти данные используются при вычислении термодинамических па-

раметров (теплоемкость, энтальпия, энтропия и т.д.) реагента.

Для работы с ПК Prime реакционный механизм должен записываться с определенной иерархической структурой в файле с рас-

ширением *.xml. Одним из преимуществ этой системы от ПК Chemkin является то, что в реакционном механизме записываются реагенты и реакции с определенными идентификаторами. Для каждого реагента и реакции назначаются некоторые идентификаторы, взятые из базы данных ПК PrIme (Рисунок 4). С помощью этих идентификаторов из базы ПК PrIme берутся соответствующие термодинамические и транспортные свойства этих веществ и реакций. Это значит, что нет необходимости в использовании нескольких файлов вместе с файлом механизма (Рисунок 2, 3), и ПК PrIme

предоставляя свои данные, может обеспечивать целостность и единство данных. В базе данных данного программного комплекса хранятся данные почти тысячи химических элементов и несколько десятков тысяч химических реакций, взятых в результате детального изучения и оценки множества экспериментальных и расчетных данных. Поэтому, для конвертирования файлов между программными комплексами нам достаточно использовать файл механизма с расширением *.inp.

```
- <speciesLink primeID="s00002559" preferredKey="CH2CHO">
  <thermodynamicDataLink primeID="thp00000001" preferredKey="SAND86"/>
  <transportDataLink primeID="tr00000001" preferredKey="GRI-Mech 3.0"/>
</speciesLink>
- <speciesLink primeID="s00002656" preferredKey="CH3CHO">
  <thermodynamicDataLink primeID="thp00000001" preferredKey="L 8/88"/>
  <transportDataLink primeID="tr00000001" preferredKey="GRI-Mech 3.0"/>
</speciesLink>
</speciesSet>
- <reactionSet>
  - <reactionLink primeID="r00013869" preferredKey="2O+M=O2+M" reversible="True">
    <reactionRateLink primeID="rk000000026" preferredKey="2O+M=O2+M"/>
  </reactionLink>
  - <reactionLink primeID="r00012023" preferredKey="O+H+M=OH+M" reversible="True">
    <reactionRateLink primeID="rk000000011" preferredKey="O+H+M=OH+M"/>
  </reactionLink>
  - <reactionLink primeID="r00012186" preferredKey="O+H2=H+OH" reversible="True">
    <reactionRateLink primeID="rk000000005" preferredKey="O+H2=H+OH"/>
  </reactionLink>
</reactionSet>
```

Рис. 4 – Пример файла механизма ПК PrIme

Интерфейс программы-конвертора

Интерфейс программы-конвертора, конвертирующий данные из формата ПК Chemkin в формат ПК PrIme, показан на рисунке 5. Интерфейс программы организован простым и понятным для пользователей. Для перевода данных из формата Chemkin в формат PrIme нужно выбрать пункт меню **File** → **Open File** и открыть целевой файл для конвертирования. Расширение входного файла может быть *.dat, *.inp или *.txt.

После выбора нужного файла для конвертирования все данные из входного файла копируются в левую часть интерфейса (Рисунок - 6). Для конвертирования в формат ПК PrIme нужно нажать на пункт меню **Convert** → **ChemkinToPrIme**. После нажатия пункта

ChemkinToPrIme запускается процесс конвертирования форматов данных. В ходе конвертирования файла идет чтение данных из входного файла, если найдутся какие-то ошибки, то эти ошибки выводятся на всплывающем окне в виде сообщений. После окончания конвертирования информация о ненайденных элементах или реакциях из базы данных программы выводятся на всплывающем окне в виде сообщений (Рисунок - 7).

В ходе конвертирования программа читает данные из входного файла и распознает каждый элемент и реакцию, и сопоставляет к ним соответствующие идентификаторы из базы данных программы. База данных программы заполнена данными, взятыми из базы данных сайта [2]. В базе данных программы созданы две таблицы.

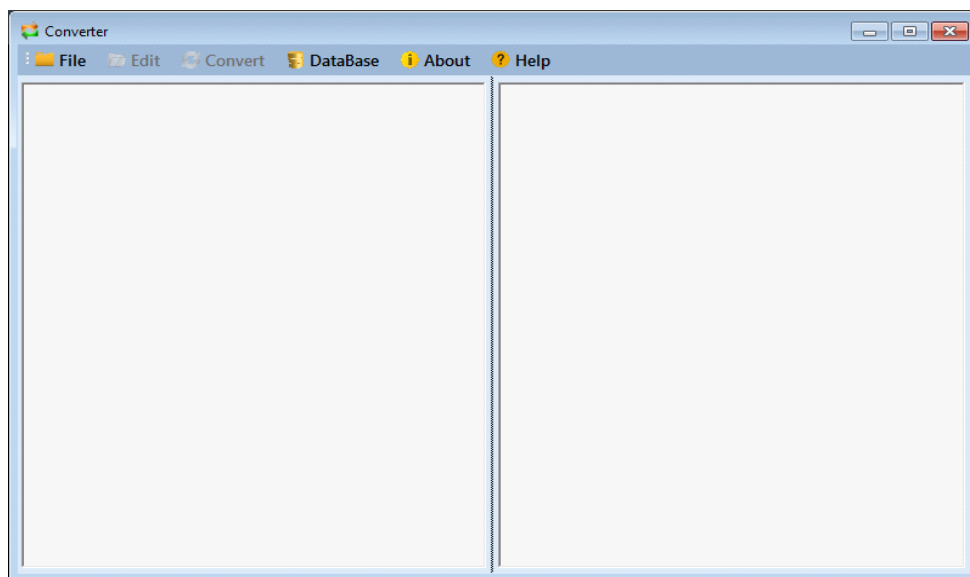


Рис. 5 – Главный интерфейс программы Converter Chemkin to PrIME

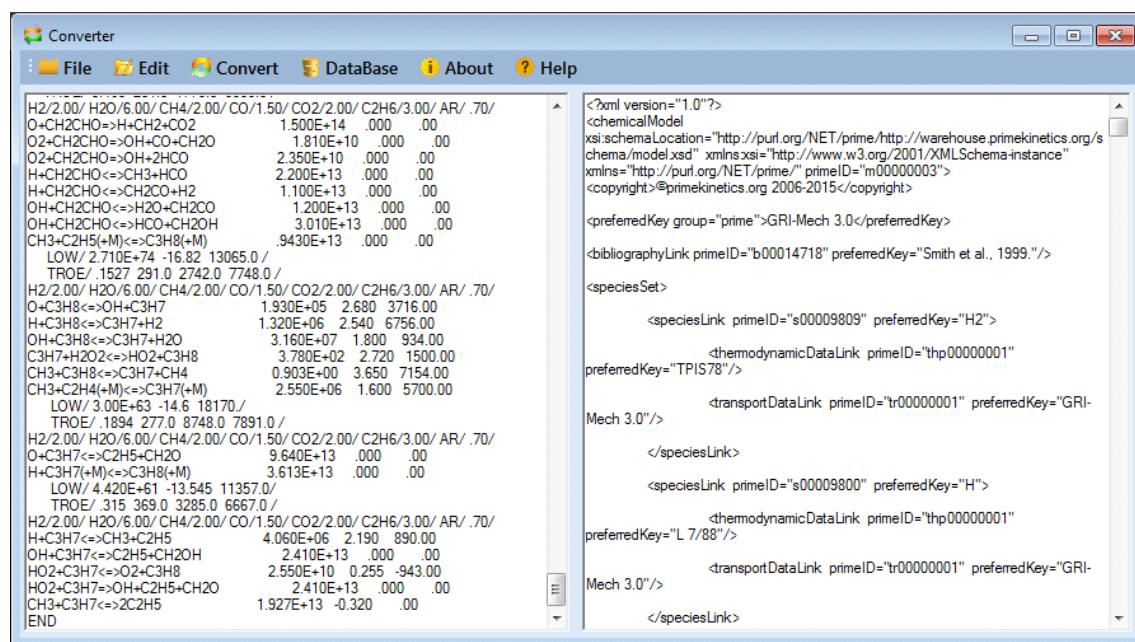


Рис. 6 – Интерфейс программы после окончания работы конвертирования: входной файл (левая часть) и результат конвертирования (правая часть)

В одной из них хранятся данные об идентификаторах веществ из базы данных PrIME и на другой - о реакциях. Для просмотра этих данных нужно выбирать пункт меню **Database** → **Species** и **Database** → **Reactions**. И еще, в этих окнах просмотра можно добавлять, удалять или изменять информации о веществах или реакциях.

Результат конвертирования выводится в правой части интерфейса программы в виде

структурированной xml разметки. При необходимости вы можете изменять эти данные прямо из интерфейса программы. Данные о веществах в механизме ПК PrIME записывается между тегами **<speciesSet>** и **</speciesSet>**. Информация о каждом элементе в механизме пишется между тегами **<speciesLink>** и **</speciesLink>**.

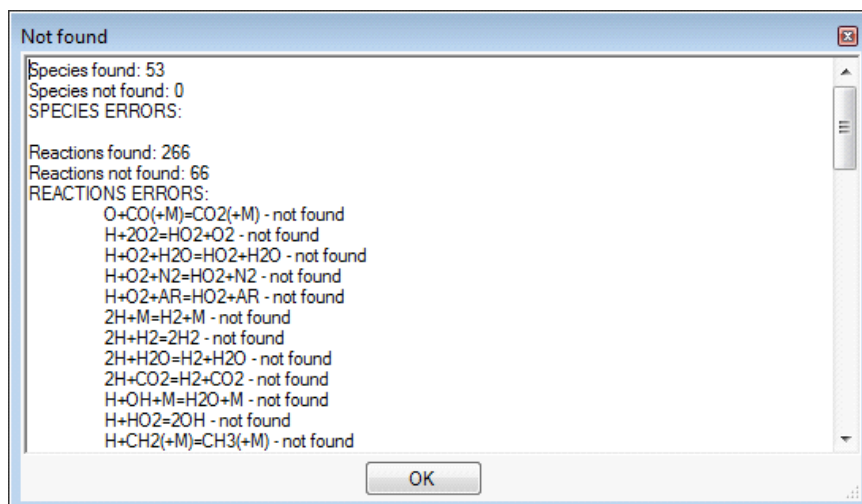


Рис.7 – Окно сообщения о не найденных веществах и реакциях из базы данных программы

Для каждого элемента определяется 6 видов свойств. Эти свойства:

- *speciesLink primeID* – является идентификатором каждого элемента в базе данных ПК PrIME и название этого свойства начинается с буквы «s»;

- *speciesLink preferredKey* – химическая формула элемента, используется как предпочтительный ключ поиска;

- *thermodynamicDataLink primeID* – является идентификатором термодинамических свойств элемента в базе данных ПК PrIME и название этого свойства начинается с «thp»;

- *thermodynamicDataLink preferredKey* – предпочтительный ключ термодинамических свойств данного вещества, показывает из какого источника были взяты эти данные;

- *transportDataLink primeID* – идентификатор транспортных свойств данного вещества из базы данных ПК PrIME и название этого свойства начинается с «tr»;

- *transportDataLink preferredKey* – свойство, показывающее из какого механизма или источника были взяты данные о транспортных свойствах вещества;

Данные реакций механизма находятся между тегами `<reactionSet>` и `</reactionSet>`. Информация о каждой реакции механизма пишется между тегами `<reactionLink>` и `</reactionLink>`. Для каждой реакции механизма определяются 5 видов свойств. Эти свойства:

- *reactionLink primeID* – идентификатор каждой реакции в базе данных ПК PrIME и название этого свойства начинается с буквы «r»;

- *reactionLink preferredKey* – химическая формула данной реакции, используется как предпочтительный ключ поиска;

- *reactionLink reversible* – свойство реакции, показывающее двойную направленность реакции, значение «true» - реакция проходит в двухстороннем направлении, «false» - реакция проходит только в одном направлении;

- *reactionRateLink primeID* – идентификатор файла параметров скоростей реакций в базе данных;

- *reactionRateLink preferredKey* – свойство, показывающее для каких реакций требуются эти данные.

После конвертирования выходной результат можно сохранить в отдельный файл с расширением *.xml с помощью пункта меню **File** → **Save File** → **PrIME File**. Этот результирующий файл можно вводить в базу данных ПК PrIME.

Дополнительные возможности программы конвертора:

- Используя пункт меню **Edit** → **Clear All** → **Input File** (или **Edit** → **Clear All** → **Output File**) можно очистить все данные из левой (правой) области интерфейса программы;

- Используя пункт меню **Edit** → **Print** → **Input File** (или **Edit** → **Print** → **Output File**) можно отправить на печать все данные из левой (правой) области интерфейса программы;

- Программа конвертер выполняет поиск данных в левом или в правом окне с помощью «горячих» клавиш «**Ctrl + F**».

Заклучение

В результате была разработана программа конвертор для пользователей с удобным интерфейсом и автоматизированным переводом данных из формата ПК Chemkin в формат ПК PrIme (Process Informatics Models) моделирования процессов горения. Программа корректно читает и распознает данные из входного файла ПК Chemkin и производит поиск по базе данных по распознанным объектам. При положительном результате поиска на выходной файл записываются конвертированные данные искомого объекта (свойства реакции или реагента) с найденными свойствами. Автоматизация всех этих работ дает возможность пользователю сэкономить время и не допустить ошибок при конвертировании данных. Первоначально, программа конвертор разработана для сотрудников института технологий горения Немецкого Аэрокосмического Центра и Штутгартского университета Германии с помощью предоставленного доступа к ПК

PrIme Майклом Френкляхом, профессора департамента инжиниринга механики Калифорнийского университета в Беркли США.

В будущем планируется соединение к базе данных работающий с протоколом WebDav на формате данных HDF5 (Hierarchical Data Format) и внедрение в эту систему, как одну из модулей данного программного комплекса.

Литература

1. Ю. Варнатц, У. Маас, Р. Диббл «Горение, физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ», Москва, ФизМатЛит, -2003 г.

2. <http://primekinetics.org/>

3. <http://reactiondesign.com/products/chemkin/chemkin-2/>

4. [https://ru.wikipedia.org/wiki/Hierarchical Data Format](https://ru.wikipedia.org/wiki/Hierarchical_Data_Format)

СHEMKIN БАҒДАРЛАМАЛЫҚ КЕШЕНІНІҢ ФОРМАТЫНАН ЖАНУ ПРОЦЕСТЕРІН МОДЕЛЬДЕЙТІН PRIME БАҒДАРЛАМАЛЫҚ КЕШЕНІНІҢ ФОРМАТЫНА МӘЛІМЕТТЕРДІ АВТОМАТТЫ ТҮРДЕ АУЫСТЫРАТЫН КОНВЕРТОР БАҒДАРЛАМАСЫ

Айтмұқаш Д. Б., Урмашев Б.А., Макашев Е.П.

Түйіндеме

Жұмыс барысында Chemkin бағдарламалық кешенінің (БК) форматындағы мәліметтерді және PrIme (Process Informatics Models) БК форматына автоматтандырылған түрде ауыстыратын бағдарлама жасалынды. Жану процестерінің химиялық кинетика саласының негізгі мәселелері біріне механизмнің дұрыстылығын сараптау жұмыстары жатады. Оларды шешуде PrIme БК ыңғайлы құралдар жиынын ұсына алады. Осыған байланысты бағдарламалық комплекстер арасындағы мәліметтер форматтарын ауыстыратын конвертер жасау қажеттілігі туындады. Жасалынған бағдарлама Chemkin БК форматындағы кіріс құжаттың ішіндегі мәліметті автоматты түрде танып және санаулы секундтар ішінде PrIme БК форматына аударуға көмектеседі. Бағдарламаның локальді мәліметтер қорын құру үшін PrIme БК сайты қолданылды. MS SQL Server – де реагенттер мен реакциялардың қасиеттері жайлы ақпараттарды сақтау үшін екі кесте құрылған және осы кестелер сайтынан алынған ақпараттармен толтырылған. Кіріс файлдағы мәліметтерді автоматты түрде оқып, тануға арналған алгоритм құрастырылды. Құрастырылған алгоритм көмегімен кіріс файлдағы (Chemkin БК форматындағы) мәліметтерді оқу мен оны шығыс файлға (PrIme БК форматындағы) конверттеу жұмыстары автоматтандырылды. Конвертор бағдарламасы жасалғаннан кейін, әртүрлі механизмдерді PrIme БК форматына ауыстыру арқылы бағдарламаны тестілеу жұмыстары жүргізілді.

Түйінді сөздер: Бағдарламалық кешен, жану процестерін модельдеу, химиялық кинетика, Chemkin БК, PrIme БК, мәліметтерді аудару, жану механизмдері.

DEVELOPMENT OF THE PROGRAM CONVERTER FOR THE AUTOMATED TRANSLATION FROM THE DATA FORMAT SOFTWARE PACKAGE CHEMKIN TO THE DATA FORMAT SOFTWARE PACKAGE PRIME OF THE MODELING OF COMBUSTION PROCESSES

Aitmukash D.B., Urmashev B.A., Makashev E.P.

Abstract

In this work developed a program for the automated translation the data format of software package (SP) Chemkin to the data format of SP PrIME (Process Informatics Models) of the modeling of combustion processes. One of important problems of a chemical kinetics of combustion processes is verify this mechanism to correctness for describe of the studied process. When solving these problems SP PrIME can offer useful tools for analysis. Therefore, there was needs to creation data format convertor between software packages. This program helps to automatically recognize data from the input file in format SP Chemkin and transfer this data, in a few seconds, to the SP PrIME format. In the creation a local database of this program used website of SP PRIME. For storage data about properties of reagents and reaction in the MS SQL Server created two tables, and this tables filled with data taken by from the site. Developed an algorithm for automatically reading and recognizing data from the input file. By using this algorithm automated reading and converting of data from input file (in the format SP Chemkin) to the output file (in the format SP PrIME). After development of the converter program conducted test works by converting different mechanisms to the PrIME SP format.

Keywords: software package, modeling of combustion processes, chemical kinetics, SP Chemkin, SP PrIME, data conversion, combustion mechanisms.